

**Felix Sutter**

**MATERIELL NICHTLINEARE  
KONTINUUMSMODELLIERUNG  
FERROELEKTRISCHER FUNKTIONSKERAMIKEN  
MIT PIEZOELEKTRISCHEN UND  
FLEXOELEKTRISCHEN EIGENSCHAFTEN**

SCHRIFTENREIHE DES INSTITUTS  
FÜR ANGEWANDTE MATERIALIEN

BAND 116



Scientific  
Publishing



Felix Sutter

**Materiell nichtlineare Kontinuumsmodellierung  
ferroelektrischer Funktionskeramiken mit  
piezoelektrischen und flexoelektrischen Eigenschaften**

**Schriftenreihe  
des Instituts für Angewandte Materialien  
*Band 116***

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
Institut für Angewandte Materialien (IAM)

Eine Übersicht aller bisher in dieser Schriftenreihe erschienenen Bände  
finden Sie am Ende des Buches.

# **Materiell nichtlineare Kontinuumsmodellierung ferroelektrischer Funktionskeramiken mit piezoelektrischen und flexoelektrischen Eigenschaften**

von  
Felix Sutter

Karlsruher Institut für Technologie  
Institut für Angewandte Materialien

Materiell nichtlineare Kontinuumsmodellierung  
ferroelektrischer Funktionskeramiken mit piezoelektrischen  
und flexoelektrischen Eigenschaften

Zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieur-  
wissenschaften (Dr.-Ing.) von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des  
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) genehmigte Dissertation

von Felix Sutter, M.Sc.

Tag der mündlichen Prüfung: 7. Dezember 2023

Referent: Prof. Dr.-Ing. habil. Marc Kamlah

Korreferenten: Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Menzel

Prof. Dr.-Ing. habil. Alexander Fidlin

#### Impressum



Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
KIT Scientific Publishing  
Straße am Forum 2  
D-76131 Karlsruhe

KIT Scientific Publishing is a registered trademark  
of Karlsruhe Institute of Technology.  
Reprint using the book cover is not allowed.

[www.ksp.kit.edu](http://www.ksp.kit.edu)



*This document – excluding parts marked otherwise, the cover, pictures and graphs –  
is licensed under a Creative Commons Attribution-Share Alike 4.0 International License  
(CC BY-SA 4.0): <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.en>*



*The cover page is licensed under a Creative Commons  
Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-ND 4.0):  
<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0/deed.en>*

Print on Demand 2024 – Gedruckt auf FSC-zertifiziertem Papier

ISSN 2192-9963

ISBN 978-3-7315-1337-7

DOI 10.5445/KSP/1000167121







# Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Angewandte Materialien – Werkstoff- und Grenzflächenmechanik (IAM-MMI) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT).

Mein außerordentlicher Dank gilt meinem Doktorvater und Hauptreferenten, Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Marc Kamlah, für sein vom ersten Tag an entgegengebrachtes Vertrauen und seine Bereitschaft, mir mit seiner langjährigen Erfahrung jederzeit mit Rat und Tat zur Seite zu stehen. Das großzügige Gewähren von Freiräumen und die Unterstützung bei der Erprobung von neuen Ideen wirkten sich äußerst positiv auf das Gelingen der Arbeit aus.

Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Menzel sowie Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Alexander Fidlin möchte ich mich aufrichtig für die bereitwillige Übernahme der Korreferate und das entgegengebrachte Interesse an meiner Arbeit bedanken.

Allen aktuellen und ehemaligen Mitarbeitenden des IAM-MMI möchte ich ein großes Dankeschön für die tolle gemeinsame Zeit sowie die vielen fachlichen und persönlichen Diskussionen aussprechen. So danke ich insbesondere Herrn Prof. Dr. mont. Christoph Kirchlechner, unserem Institutsleiter, für die Schaffung einer äußerst angenehmen und kollegialen Arbeitsatmosphäre.

Von Herzen bedanke ich mich bei meiner Familie und allen Freunden, die mich in den letzten Jahren unterstützt haben. Ein ganz besonderer Dank gebührt meiner Frau Ivona, die während der gesamten Promotionszeit, auch in schweren Momenten, liebevoll und geduldig an meiner Seite stand.

Karlsruhe, im Dezember 2023

*Felix Sutter*



# Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung eines makroskopischen Kontinuumsmodells zur Untersuchung des Einflusses des flexoelektrischen Effekts auf mikrostrukturelle Domänenumklappprozesse in ferroelektrischen Funktionskeramiken.

Durch die zunehmende Miniaturisierung moderner mikroelektromechanischer Systeme (MEMS) spielt die Berücksichtigung von größenabhängigen Effekten wie der Flexoelektrizität bei der computergestützten Modellierung ihres Materialverhaltens eine immer größere Rolle. Die häufig eingesetzte Materialklasse der ferroelektrischen Funktionskeramiken zeigt zudem bei hinreichend großer elektrischer oder mechanischer Beanspruchung ein stark nichtlineares Materialverhalten aufgrund irreversibler Umklappvorgänge ihrer Domänenstruktur.

Für die Entwicklung eines Modells, das die genannten Effekte vereint, wird zunächst eine elektro-mechanische Kontinuumstheorie höherer Ordnung in einer variationellen Struktur eingeführt. Zur Berücksichtigung der dissipativen Domänenumklappprozesse wird ein mikroskopisch motiviertes phänomenologisches Materialmodell in den zuvor bereitgestellten makroskopischen Modellierungsrahmen integriert. Im Zuge der numerischen Lösung der elektro-mechanisch gekoppelten Randwertprobleme werden geeignete Variationsformulierungen eingeführt und diskutiert sowie zugehörige Finite-Elemente-Formulierungen vorgestellt.

Die Leistungsfähigkeit des entwickelten Modells zur Abbildung des charakteristischen nichtlinearen Materialverhaltens von Ferroelektrika und der Wechselwirkung mit dem flexoelektrischen Effekt wird anhand von numerischen Beispielen demonstriert. Im Mittelpunkt der numerischen Untersuchungen steht zudem, so-

weit möglich, der Vergleich mit experimentellen Ergebnissen. Darüber hinaus wird die Möglichkeit untersucht, in Piezokeramiken einen Polungsvorgang allein durch den flexoelektrischen Effekt zu induzieren.

# Abstract

The present work deals with the development of a macroscopic continuum model to investigate the influence of the flexoelectric effect on microstructural domain switching processes in ferroelectric ceramics.

Due to the increasing miniaturization of modern microelectromechanical systems (MEMS), the consideration of size-dependent effects such as flexoelectricity plays an increasingly important role in the computational modeling of their material behavior. The frequently used material class of ferroelectric ceramics also exhibits strongly non-linear material behavior due to irreversible switching processes of their domain structure when subjected to sufficiently large electrical or mechanical stress.

For the development of a model that unifies the aforementioned effects, a higher-order electro-mechanical continuum theory is introduced in a variational framework. To account for the dissipative domain switching processes, a microscopically motivated phenomenological material model is integrated into the previously provided macroscopic modeling framework. In the context of a numerical solution of the electro-mechanically coupled boundary value problems, suitable variational formulations are introduced and discussed, and associated finite element formulations are presented.

The performance of the developed model for the representation of the characteristic non-linear material behavior of ferroelectrics and the interaction with the flexoelectric effect is demonstrated by numerical examples. The numerical investigations also focus, as far as possible, on comparison with experimental results. Furthermore, the possibility of inducing a poling process in piezoceramics by the flexoelectric effect alone is investigated.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Vorwort</b> . . . . .	<b>i</b>
<b>Kurzfassung</b> . . . . .	<b>iii</b>
<b>Abstract</b> . . . . .	<b>v</b>
<b>1 Einleitung</b> . . . . .	<b>1</b>
1.1 Motivation . . . . .	1
1.2 Stand der Forschung . . . . .	4
1.2.1 Makroskopische ferroelektrische Materialmodelle . . . . .	4
1.2.2 Kontinuumsmodellierung der Flexoelektrizität . . . . .	8
1.3 Ziele und Gliederung der Arbeit . . . . .	11
<b>2 Grundgleichungen des elektro-mechanischen Kontinuums</b> . . . . .	<b>15</b>
2.1 Vorbemerkungen zu Kontinuumstheorien . . . . .	15
2.2 Grundlagen der Elastostatik höherer Ordnung . . . . .	16
2.2.1 Kinematik . . . . .	16
2.2.2 Das Konzept von Spannungen und deren Bilanzen . . . . .	23
2.2.3 Das Prinzip der virtuellen Arbeit . . . . .	25
2.3 Grundlagen der Elektrostatik . . . . .	31
2.3.1 Elektrische Ladung und Felder . . . . .	31
2.3.2 Polarisierung in Dielektrika . . . . .	34
2.3.3 Dielektrische Verschiebung . . . . .	37
2.3.4 Elektrostatische Feldtheorie . . . . .	39
2.4 Phänomenologische Stoffgesetze . . . . .	40
2.4.1 Elastizität . . . . .	41

2.4.2	Elastizität höherer Ordnung . . . . .	43
2.4.3	Dielektrizität . . . . .	45
2.4.4	Piezoelektrizität . . . . .	46
2.4.5	Flexoelektrizität . . . . .	48
2.5	Thermodynamik des elektro-mechanischen Kontinuums . . . . .	49
2.5.1	Energieformen . . . . .	50
2.5.2	Energiebilanz . . . . .	51
2.5.3	Entropiebilanz . . . . .	52
2.5.4	Thermodynamische Potentialfunktionen . . . . .	53
2.5.5	Thermodynamik der klassischen Piezoelektrizität . . . . .	57
2.5.6	Thermodynamik der Flexoelektrizität . . . . .	59
<b>3</b>	<b>Variationelle Modellierung von dissipativem Materialverhalten . .</b>	<b>63</b>
3.1	Abbildung dissipativer Prozesse durch innere Zustandsvariablen .	64
3.2	Formulierung eines lokalen Raten-Potentials . . . . .	66
3.3	Dissipationspotentiale für ratenunabhängiges Materialverhalten .	68
3.4	Inkrementelles Variationsprinzip der lokalen Materialantwort . .	70
<b>4</b>	<b>Ferroelektrische Funktionskeramiken . . . . .</b>	<b>75</b>
4.1	Eigenschaften der Einheitszelle . . . . .	76
4.1.1	Kristallstruktur . . . . .	76
4.1.2	Piezoelektrizität der Einheitszelle . . . . .	78
4.1.3	Flexoelektrizität der Einheitszelle . . . . .	80
4.1.4	Ferroelektrizität der Einheitszelle . . . . .	82
4.2	Eigenschaften des Polykristalls . . . . .	84
4.2.1	Korn- und Domänenstruktur . . . . .	84
4.2.2	Makroskopisches Großsignalverhalten . . . . .	86
4.2.3	Makroskopisches Kleinsignalverhalten . . . . .	96
4.2.4	Makroskopische Erscheinung der Flexoelektrizität . . . . .	97



---

<b>5</b>	<b>Modellierung von Domänenumklappprozessen in Ferroelektrika</b>	<b>105</b>
5.1	Vorüberlegungen zum Materialmodell	105
5.2	Mikroskopisch motiviertes Materialmodell	106
5.2.1	Einführung innerer Zustandsvariablen	107
5.2.2	Verbindung zur makroskopischen Skala	113
5.2.3	Form der freien Helmholtz-Energie	114
5.2.4	Umklappkriterium	117
5.2.5	Verfestigungs- und Sättigungsverhalten	119
5.3	Numerische Umsetzung des Materialmodells	124
5.3.1	Inkrementelles variationelles Update der inneren Zustandsvariablen	125
5.3.2	Inkrementelles variationelles Update der Konstitutivgleichungen	129
5.3.3	Algorithmisch konsistente Materialtangente	130
<b>6</b>	<b>Elektro-mechanische Randwertprobleme und deren numerische Behandlung</b>	<b>133</b>
6.1	Elektro-mechanisches Randwertproblem der Piezoelektrizität	134
6.2	Variationsformulierungen der Piezoelektrizität	136
6.2.1	Kanonische energiebasierte Variationformulierung	136
6.2.2	Erweiterte Drei-Feld-Formulierung	138
6.2.3	Reduzierte Zwei-Feld-Formulierung	140
6.2.4	Erweiterte Fünf-Feld-Formulierung	142
6.3	Gemischte piezoelektrische FE-Formulierung	145
6.4	Elektro-mechanisches Randwertproblem der Flexoelektrizität	152
6.5	Variationsformulierungen der Flexoelektrizität	153
6.5.1	Zwei-Feld-Formulierung	154
6.5.2	Vier-Feld-Lagrange-Multiplikator-Formulierung	156
6.5.3	Fünf-Feld-Lagrange-Multiplikator-Formulierung	158
6.6	Gemischte flexoelektrische FE-Formulierung	160

<b>7 Nichtlineare Modellierung ferroelektrischer Materialien mit piezoelektrischen Eigenschaften</b>	<b>167</b>
7.1 PZT-Probe unter zyklischer uniaxialer elektro-mechanischer Belastung	168
7.1.1 Charakteristisches Hystereseverhalten ferroelektrischer Materialien	172
7.1.2 Ferroelektrisches Verhalten mit überlagerter uniaxialer Druckspannung	177
7.1.3 Mechanisches Depolarisationsverhalten mit überlagertem elektrisches Feld	180
7.2 Polarisations-Rotationstest	183
7.3 PZT-Wafer	194
<b>8 Nichtlineare Modellierung ferroelektrischer Materialien mit flexoelektrischen Eigenschaften</b>	<b>205</b>
8.1 Kreisscheibe mit Loch	205
8.2 4-Punkt-Biegeversuch	209
8.3 Scheibe mit elliptischer Kerbe	220
8.4 PZT-Wafer mit flexoelektrischem Effekt	231
<b>9 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>237</b>
9.1 Zusammenfassung	237
9.2 Ausblick	239
<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>241</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>247</b>
<b>A Mathematische Grundlagen</b>	<b>275</b>
A.1 Notation	275
A.2 Elemente der Tensoranalysis	276
A.2.1 Rechenregeln	276
A.2.2 Zerlegung des Gradienten und der Divergenz	277
A.2.3 Integralsätze	277

<b>B</b>	<b>Komponenten des Verzerrungsgradiententensors</b>	<b>279</b>
<b>C</b>	<b>Konstitutivgleichungen in Indexnotation</b>	<b>283</b>
	C.1 Konstitutivgleichungen der Piezoelektrizität	283
	C.1.1 Freie Gibbs-Energie Form	283
	C.1.2 Elektrische Gibbs-Energie Form	283
	C.1.3 Freie Helmholtz-Energie Form	283
	C.2 Konstitutivgleichungen der Flexoelektrizität	284
	C.2.1 Elektrische Gibbs-Energie Form	284
	C.2.2 Freie Helmholtz-Energie Form	284
<b>D</b>	<b>Ableitungen für Materialmodell</b>	<b>287</b>
	D.1 Ableitungen der freien Helmholtz-Energie der Piezoelektrizität	287
	D.1.1 Ableitungen erster Ordnung	287
	D.1.2 Ableitungen zweiter Ordnung	288
	D.2 Ableitungen der freien Helmholtz-Energie der Flexoelektrizität	289
	D.2.1 Ableitungen erster Ordnung	289
	D.2.2 Ableitungen zweiter Ordnung	289
	D.3 Ableitungen der Materialtensoren	290
	D.3.1 Ableitungen piezoelektrischer d-Tensor	290
	D.3.2 Ableitungen des Impermittivitätstensor bei konstanter Dehnung	291
	D.3.3 Ableitungen des piezoelektrischen h-Tensor	291
	D.3.4 Ableitungen des Elastizitätstensor bei konstanter dielektrischer Verschiebung	292
	D.3.5 Ableitungen des flexoelektrischen Kopplungstensors	292
	D.3.6 Ableitungen des Verzerrungskopplungstensor	292
	D.3.7 Ableitungen des Elastizitätstensor höherer Ordnung bei konstanter dielektrischer Verschiebung	292
	D.4 Ableitungen des Umklappkriteriums	293
	D.5 Ableitungen des irreversiblen Anteil der freien Helmholtz-Energie	293

<b>E FE-Implementierung</b> . . . . .	<b>295</b>
E.1 Diskretisierung der Felder . . . . .	295
E.2 Matrizen der Ansatzfunktionen (3D) . . . . .	296

# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation

In vielen technischen Bereichen kommen heutzutage sogenannte 'smart materials' zum Einsatz. Zu nennen sind hierbei insbesondere sensorische und aktorische Anwendungen von mikroelektromechanischen Systemen (MEMS), die z. B. zur hochpräzisen Positionierung verwendet werden. Die Ausnutzung der piezoelektrischen Eigenschaften bestimmter Materialien spielt in diesem Zusammenhang eine entscheidende Rolle. Der *direkte piezoelektrische Effekt* beschreibt eine durch mechanischen Druck erzeugte Polarisation im Material und eignet sich dadurch für einen Gebrauch in der Sensorik. In der Aktorik kommt der *indirekte piezoelektrische Effekt* zum Einsatz, der durch die Formänderung eines Bauteils infolge eines angelegten elektrischen Feldes repräsentiert wird. Die in diesen Technologiefeldern am häufigsten verwendete Materialklasse ist die der ferroelektrischen Keramiken, wie z. B. Bleizirkonattitanat (PZT) oder Bariumtitanat ( $\text{BaTiO}_3$ ). Diese eignen sich besonders gut, da sie über stark ausgeprägte piezoelektrische Eigenschaften verfügen. Für die Entwicklung von technischen Systemen auf der Basis von Ferroelektrika ist eine genaue Kenntnis des Materialverhaltens erforderlich. Von besonderem Interesse ist das nichtlineare Materialverhalten, das unter dem Einfluss hoher elektrischer Felder oder mechanischer Spannungen auftritt. Aufgrund der auftretenden mikrostrukturellen Veränderungen infolge von Umklappprozessen der Domänenstruktur im Material spielen dabei auch dissipative Effekte eine entscheidende Rolle. Diese sind auf makroskopischer Skala durch ein hysteretisches Werkstoffverhalten gekennzeichnet.

Der Trend zu immer kleineren und damit auch platzsparenden elektronischen Systemen führt zu einem abnehmenden Größenunterschied zwischen den Bauteilabmessungen und den mikrostrukturellen Materialbestandteilen wie Körnern und Domänen. Dies hat zur Folge, dass größenabhängige Materialeigenschaften die Systemantwort des Bauteils stärker beeinflussen und daher näher untersucht werden müssen. Eine solche Materialeigenschaft ist die Flexoelektrizität, deren Einfluss mit abnehmender Bauteildimension zunimmt. Diese beschreibt im Falle des *direkten flexoelektrischen Effekts* die Erzeugung einer Polarisation infolge von Verzerrungsgradienten, wie sie vor allem bei biegedominierten Deformationszuständen auftreten. Der *indirekte flexoelektrische Effekt* hingegen repräsentiert das Auftreten einer homogenen mechanischen Verformung durch die Wirkung eines elektrischen Feldgradienten. Der technisch nutzbare Anwendungsbereich der Flexoelektrizität beschränkt sich jedoch aufgrund des angesprochenen Größeneffekts auf die mikroskopische und nanoskopische Skala. Darüber hinaus werden Systeme benötigt, in denen stark ausgeprägte Verzerrungsgradienten oder Gradienten des elektrischen Feldes im Material erzeugt werden können. Diese Rahmenbedingungen erschweren die Erforschung und damit auch den Aufbau eines fundierten Verständnisses des flexoelektrischen Effekts. Aus diesen Gründen gibt es bis heute, abgesehen von vereinzelt zu Forschungszwecken entwickelten Systemen wie z. B. durch QI et al. [1], noch keine tatsächliche technische Anwendung. Im Gegensatz dazu vermag es die Natur sich den Effekt erfolgreich zu Nutze zu machen. So konnte zum Beispiel nachgewiesen werden, dass die Flexoelektrizität eine treibende Kraft bei der Heilung von Mikrorissen in menschlichen Knochen ist, vgl. z. B. VASQUEZ-SANCHO et al. [2] oder WITT et al. [3].

Das große Potential für eine technische Nutzung des flexoelektrischen Effekts in ferroelektrischen Funktionskeramiken ergibt sich u. a. aus der Tatsache, dass dieser unabhängig von der Phase des Materials und damit auch unabhängig von der Temperatur auftritt. So kann er auch oberhalb der CURIE-Temperatur in einer kubischen Phase mit symmetrischer Gitterstruktur nachgewiesen werden, was einen Vorteil gegenüber dem piezoelektrischen Effekt darstellt. Darauf beruht auch die Motivation, die spezifischen Eigenschaften der einzelnen Kopplungseffekte maßgeschneidert einsetzen zu können und damit leistungsfähigere Sensor-

und Aktuatorssysteme zu entwickeln. Die Idee, den Verlust der piezoelektrischen Eigenschaften oberhalb der CURIE-Temperatur durch gezieltes Ausnutzen des flexoelektrischen Effekts zu kompensieren, lässt die Hoffnung auf nahezu temperaturunabhängig arbeitende und damit ausfallsichere Aktuatoren keimen. Von dieser Idealvorstellung trennt die Wissenschaft jedoch noch ein steiniger Weg, der von einer Vielzahl von Unwägbarkeiten gesäumt ist.

Beim Aufbau eines fundierten Verständnisses der Wirkungsweise des flexoelektrischen Effekts leisten neben Experimenten auch computergestützte Modelle einen entscheidenden Beitrag. Diese können Einblicke ins Bauteilinnere gewähren und sind daher für den wissenschaftlichen Fortschritt auf diesem noch so wenig verstandenen Gebiet unverzichtbar. So werden im Speziellen leistungsfähige Modelle benötigt, um die Wechselwirkung des flexoelektrischen Effekts mit den Domänenumklappprozessen in Ferroelektrika zu untersuchen. Dabei kann die Flexoelektrizität als treibende Kraft verstanden werden und damit auch die Orientierung der Polarisation im Material steuern, vgl. z. B. BURSIAAN et al. [4], GRUVERMAN et al. [5] und LU et al. [6]. Durch die damit verbundene strukturbedingte Beeinflussung der Gradientenfelder ist wiederum mit einer Veränderung der flexoelektrischen Wirkung im Material zu rechnen. Dies lässt ein komplexes Zusammenspiel dieser beiden Effekte vermuten. Bereits entwickelte Computermodelle, welche eine Untersuchung dieser Wechselwirkung ermöglichen, basieren meist auf Phasenfeldmethoden und beschränken sich in der Regel auf ein Betrachtungsgebiet weniger Domänen in einem Einkristall, siehe z. B. LIU et al. [7]. Für Simulationen auf der Größenskala eines polykristallinen technischen Bauteils eignen sich vielmehr weniger rechenintensive makroskopische Kontinuumsmodelle. Diese ermöglichen es, die wesentlichen mikrostrukturellen Effekte im Mittel zu erfassen sowie deren Einfluss auf das makroskopische Systemverhalten skalenübergreifend zu übertragen. Die Entwicklung eines solchen makroskopischen Modells, das die Wechselwirkung der Flexoelektrizität mit Domänenumklappprozessen im Material berücksichtigt, ist für die weitere Erforschung des flexoelektrischen Effekts in Ferroelektrika notwendig. Hierin liegt auch die wesentliche Motivation für die Anfertigung der vorliegenden Arbeit.

## 1.2 Stand der Forschung

Im folgenden Abschnitt wird ein grober Überblick der relevanten Literatur gegeben, auf der die wesentlichen methodischen Weiterentwicklungen in dieser Arbeit aufbauen. Dabei behandelt der erste Teil eine Auflistung von bestehenden makroskopischen ferroelektrischen Materialmodellen und eine Bewertung ihrer Eigenschaften in Bezug auf rechnerische Stabilität und Anwendbarkeit auf reale Problemstellungen. Im zweiten Teil wird der aktuelle Forschungsstand zur Kontinuumsmodellierung der Flexoelektrizität skizziert. Dabei werden die Modellannahmen und die berücksichtigten Effekte beleuchtet.

### 1.2.1 Makroskopische ferroelektrische Materialmodelle

Die Diskussion der Literatur beschränkt sich auf makroskopische Kontinuumsmodelle, in denen von einer homogenen, ‚verschmierten‘ Darstellung des Materials mit gemittelten Eigenschaften in der Umgebung eines Materialpunktes ausgegangen wird. Diese Modelle können in zwei Kategorien eingeteilt werden. Das Ziel von **makroskopischen phänomenologischen Modellen** ist es, das experimentell beobachtete Materialverhalten für einen ferroelektrischen Polykristall zu reproduzieren. Die Modellannahmen orientieren sich häufig an denen der klassischen Plastizitätstheorie. Um dissipative Effekte und die damit verbundene Pfadabhängigkeit abzubilden, wird in der Regel eine begrenzte Anzahl innerer Zustandsvariablen eingeführt. Eine physikalische Motivation auf Basis der zugrundeliegenden Mechanismen im Material ist bei der Modellbildung im Allgemeinen jedoch nicht gegeben. Multiaxiale phänomenologische ferroelektrische Materialmodelle wurden z. B. von McMEEKING und LANDIS [8], LANDIS [9], KAMLAH und BÖHLE [10], SCHWAAB et al. [11], KLINKEL [12], LINNEMANN et al. [13], SCHRÖDER und ROMANOWSKI [14], MIEHE und ROSATO [15], ELHADROUZ et al. [16, 17], ZOUARI et al. [18] sowie MANIPRAKASH et al. [19–21] vorgestellt.



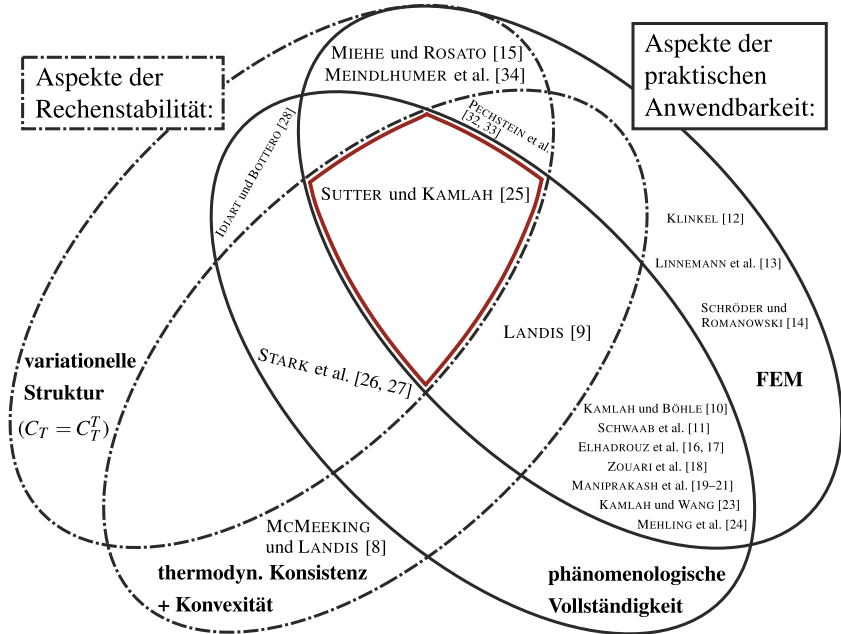
Die zweite Kategorie phänomenologischer makroskopischer Modelle sind solche, die zusätzliche Informationen aus mikroskopischen Mechanismen im Material in ihre Ansätze einbeziehen. Ein solches **mikroskopisch motiviertes Modell** wurde erstmals in uniaxialer Form von KAMLAH und JIANG [22] vorgestellt. In diesem Modell werden innere Zustandsvariablen eingeführt, die Informationen über den gemittelten Domänenzustand auf der mikroskopischen Skala enthalten. Die makroskopischen Größen *remanente Polarisation* und *remanente Dehnung* können dann aus den mikroskopisch motivierten inneren Variablen abgeleitet werden. Eine multiaxiale Verallgemeinerung wurde später von KAMLAH und WANG [23] durchgeführt. Auf der Grundlage dieser Arbeiten stellten MEHLING et al. [24] eine modifizierte Version dieses Modells mit einer alternativen Wahl der mikroskopisch motivierten inneren Variablen vor. Zuletzt wurden von SUTTER und KAMLAH [25] einige Modifikationen der Modellversion von MEHLING et al. [24] vorgenommen. Diese Modifikationen sind auch ein wesentlicher Bestandteil der Inhalte der vorliegenden Arbeit. Ihre Hintergründe werden nachfolgend näher erläutert. Weitere Modelle für ferroelektrische Materialien, die ähnliche mikroskopisch motivierte Ansätze in einem makroskopischen Rahmen behandeln, wurden von STARK et al. [26, 27] und IDIART und BOTTERO [28] vorgestellt.

Im Folgenden werden ausgewählte, aus Sicht des Autors essenzielle Aspekte der nichtlinearen Modellierung ferroelektrischer Materialien im Hinblick auf rechnerische Stabilität und Anwendbarkeit auf reale Probleme diskutiert. In diesem Zusammenhang wird versucht, die in der Literatur verfügbaren Modelle hinsichtlich der verschiedenen Aspekte einzuordnen, vgl. auch Abb. 1.1.

So kann es von Vorteil sein ein konstitutives Materialmodell in einer **variationellen Struktur** zu formulieren. Diese kann durch eine Einbettung in den variationellen Rahmen der Generalisierten Standardmaterialien (GSM) erzielt werden, vgl. z. B. HALPHEN und NGUYEN [29]. Die Übertragung dieses Rahmens auf elektro-mechanische Problemstellungen bei Ferroelektrika durch Formulierung spezifischer inkrementeller variationeller Prinzipien wurde von MIEHE et al. [30] sowie MIELKE und TIMOFTE [31] durchgeführt. Der große Vorteil dieser variationellen Form der Modelle liegt im Potentialcharakter des lokalen Problems und

der damit verbundenen symmetrischen Materialtangente per Konstruktion. Dies ermöglicht bei der Anwendung im Rahmen der Finite-Elemente-Methode (FEM) einen wesentlich effizienteren und robusteren Lösungsprozess in der globalen NEWTON-Iteration. Die Einbettung ferroelektrischer Materialmodelle in einen variationellen Rahmen wurde u. a. von MIEHE und ROSATO [15], PECHSTEIN et al. [32, 33], MEINDLHUMER et al. [34] sowie IDIART und BOTTERO [28] realisiert.

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die **thermodynamische Konsistenz**, sowie die zugrunde liegende **Form des thermodynamischen Potentials** eines ferroelektrischen Materialmodells. Eine Vielzahl der in der Literatur verfügbaren Modelle basieren auf der konvex-konkaven elektrischen GIBBS-Energie, deren Energielandschaft eine Sattelpunktstruktur aufweist. Dem Nachteil der damit verbundenen nicht-positiv definiten Materialtangente steht als Vorteil dieser Energieform die sehr einfach zu realisierende Einbindung in die FEM gegenüber. Thermodynamisch konsistent formulierte Modelle auf Basis der elektrischen GIBBS-Energie finden sich z. B. in MEHLING et al. [24], KLINKEL [12], LINNEMANN et al. [13], SCHRÖDER und ROMANOWSKI [14], MIEHE und ROSATO [15] sowie MANIPRAKASH et al. [19–21]. Ein alternatives Potential, das sich für die Betrachtung am isolierten Materialpunkt eignet, ist die konkave freie GIBBS-Energie. Die Integration von Modellen, die auf dieser Energieform basieren, in die FEM ist jedoch nicht trivial, da gemischte Elementformulierungen erforderlich sind. Entsprechende Materialmodelle sind in KAMLAH und WANG [23], MEINDLHUMER et al. [34] sowie IDIART und BOTTERO [28] gegeben. Das aus thermodynamischer Sicht zu bevorzugende Potential für die Formulierung eines ferroelektrischen Materialmodells ist die freie HELMHOLTZ-Energie. Der Vorteil liegt in der konvexen Energieform und der damit verbundenen positiv definiten linearen Materialtangente der Modelle. Diese Eigenschaft hat den großen Vorteil einer eindeutigen Lösung und damit einer stabilen konstitutiven Materialantwort. Diese positiven Eigenschaften besitzen z. B. die ferroelektrischen Materialmodelle in McMEEKING und LANDIS [8], LANDIS [9], STARK et al. [26, 27] und PECHSTEIN et al. [32, 33].



**Abbildung 1.1:** Klassifizierung von aus der Literatur ausgewählten multi-axialen makroskopischen ferroelektrischen Kontinuumsmodellen hinsichtlich der numerischer Stabilität und der Anwendbarkeit auf reale technische Probleme. Die Darstellung erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit, sondern soll lediglich einen repräsentativen Trend aufzeigen, vgl. auch SUTTER und KAMLAH [25].

Die praktische Anwendbarkeit eines Modells kann u. a. anhand seiner **phänomenologischen Vollständigkeit** beurteilt werden. Dies bezieht sich auf die Fähigkeit eines multi-axialen Modells, die für ferroelektrische Materialien charakteristischen Eigenschaften abzubilden. Dazu gehören die dielektrische, die Schmetterlings- und die ferroelastische Hysterese sowie das mechanische Depolarisationsverhalten. Darüber hinaus sollte das Modell in der Lage sein, eine Rotation der Polarisationsrichtung abzubilden. In dieser Diskussion soll jedoch eine Ratenabhängigkeit dieser Effekte (wie z. B. in [15, 20]) sowie deren Temperaturabhängigkeit (z. B. in [21]) unberücksichtigt bleiben. Modelle, die in der Lage sind, das gesamte Spektrum des hier angesprochenen phänomenologischen Materialverhaltens abzu-

bilden, finden sich z. B. in LANDIS [9], KAMLAH und BÖHLE [10], SCHWAAB et al. [11], KAMLAH und WANG [23], MEHLING et al. [24], STARK et al. [26, 27] sowie MANIPRAKASH et al. [19–21].

Ein letzter wichtiger Aspekt für die mögliche Anwendbarkeit eines Materialmodells zur Lösung ingenieurtechnischer Probleme ist eine einfache **Einbindung in die Finite-Elemente-Methode**. Hierbei ist anzumerken, dass bei weitem nicht für alle in der Literatur vorhandenen Modelle gezeigt werden konnte, ob eine Implementierung in einen FE-Code praktikabel oder überhaupt möglich ist, da sie dafür möglicherweise zu komplex sind. Darüber hinaus ist bei einigen Modellen keine analytische Materialtangente angegeben, so dass im Zweifelsfall eine aufwändig berechnete numerische Tangente verwendet werden muss. Eine Übersicht, für welche Modelle bereits eine FE-Implementierung erfolgt ist, sowie die Einordnung aller genannten Materialmodelle in den Kontext der übrigen diskutierten Aspekte ist in Abb. 1.1 gegeben.

Aus dem kurzem Umriss der ferroelektrischen Materialmodelle aus der Literatur und dem illustrativen Vergleich in Abb. 1.1 wird deutlich, dass lediglich die Modellvariante aus SUTTER und KAMLAH [25] alle hier diskutierten Aspekte erfüllt. Diese Publikation bildet die Grundlage für die vorliegende monographische Arbeit und diente auch als Ausgangspunkt für die hier vorgestellten Weiterentwicklungen.

### 1.2.2 Kontinuumsmodellierung der Flexoelektrizität

Die Flexoelektrizität wurde erstmals Ende der 50er Jahre von MASHKEVICH und TOLPYGO [35, 36] beobachtet und dokumentiert. Erste phänomenologische Theorien in Form von konstitutiven Beziehungen zur mathematischen Beschreibung des Effekts entwickelten KOGAN [37] und INDENBOM et al. [38]. Letztere prägten maßgeblich den Begriff der Flexoelektrizität, der sich aus dem lateinischen Wort *flexus* (deutsch: ‚Biegung‘) [39] ableitet und unter dem das Phänomen auch heute noch bekannt ist. Die Grundlage für eine Erfassung der Flexoelektrizität in einem kontinuumsmechanischen Rahmen schuf im Wesentlichen MINDLIN. Dessen Verzerrungsgradiententheorie in [40] dient als Basis zur Beschreibung des

direkten flexoelektrischen Effekts, seine Polarisationsgradiententheorie in [41] ermöglicht die Berücksichtigung des indirekten flexoelektrischen Effekts. Beide Theorien entstanden jedoch unabhängig voneinander. Eine Kopplung im Rahmen einer vereinheitlichten Kontinuumstheorie unter Einbeziehung des direkten und des indirekten Effekts wurde später von SAHIN und DOST [42] realisiert. Ähnliche Darstellungen flexoelektrischer Theorien finden sich z. B. auch in MARANGANTI et al. [43] oder SHARMA et al. [44].

In der Literatur finden sich jedoch auch alternative Theorien, die nicht auf dem gradientenbasierten Ansatz von MINDLIN beruhen. So verfolgen HADJESFANDIARI et al. [45, 46], POYA et al. [47] und THAI et al. [48] zur Beschreibung der Flexoelektrizität einen Ansatz, der auf einer 'couple-stress'-Theorie basiert. Anstelle der Verzerrungsgradienten werden in diesem Fall Rotationen, aus denen sich die Krümmungen ableiten lassen, als kinematische Größen höherer Ordnung berücksichtigt. Eine mikromorphe Beschreibung, mit einer entkoppelten Betrachtung der mikrostrukturellen Gradienten und der makroskopischen Feldgrößen, wird in MCBRIDE et al. [49] und ORTIGOSA et al. [50] vorgeschlagen.

Wie bereits im vorhergehenden Abschnitt im Zusammenhang mit ferroelektrischen Materialmodellen diskutiert, spielt die Wahl der zugrundeliegenden Energieform bei der Modellierung elektro-mechanischer Probleme stets eine wichtige Rolle. Deren spezifischen Eigenschaften mit ihren Vor- und Nachteilen lassen sich sinngemäß auch auf eine erweiterte Theorie unter Einbeziehung der Flexoelektrizität übertragen. In ZHUANG et al. [51] und CODONY et al. [52, 53] werden Kontinuumstheorien der Flexoelektrizität sowohl auf Basis der elektrischen GIBBS-Energie als auch der freien HELMHOLTZ-Energie hergeleitet und miteinander verglichen. Ein interessanter Aspekt bei der Formulierung einer flexoelektrischen Theorie bietet das Eliminieren bzw. Austauschen der Gradientenabhängigkeit des flexoelektrischen Energieausdrucks unter Ausnutzung sogenannter 'null Lagrangians', vgl. z. B. CODONY et al. [52, 53]. Dieser kann entweder als Funktion des Verzerrungsgradienten oder des elektrischen Feld- bzw. Polarisationsgradienten formuliert werden. Alternativ ist auch eine kombinierte Darstellung der direkten und indirekten flexoelektrischen Effekte in Abhängigkeit sowohl von mechani-

schen und als auch elektrischen Gradientenfeldern möglich. Damit kann neben einer *direkten* und einer *indirekten* Energieform auch eine LIFSHITZ-*invariante* Energieform abgeleitet werden. Insbesondere im Hinblick auf eine numerische Umsetzung ergibt sich damit eine Stellschraube in der Kontinuumsmodellierung der Flexoelektrizität, die aus Sicht des Autors in der Literatur bisher nur wenig ‚justiert‘ wurde.

Eine große Herausforderung bei der numerischen Behandlung der flexoelektrischen Kontinuumstheorie stellen die gekoppelten partiellen Differentialgleichungen vierter Ordnung dar, welche die zugehörigen Randwertprobleme beschreiben. Aufgrund der damit verbundenen höheren Kontinuitätsanforderungen an die Ansatzfunktionen der FEM können herkömmliche LAGRANGE-Polynome nicht verwendet werden. Die ersten numerischen Umsetzungen erfolgten deshalb zunächst mit anderen Lösungstechniken. ABDOLLAHI et al. [54] nutzten erstmalig netzfreie Methoden zur Erfüllung der höheren Kontinuität der Feldgrößen, vgl. auch ZHUANG et al. [55]. Entwicklungen auf dem Gebiet der klassischen Finite-Elemente-Methoden wurden später im Rahmen von gemischten Elementformulierungen in DENG et al. [56–59] und MAO et al. [60] realisiert. Gemischte Kollokations-FE-Formulierungen wurden von TIAN et al. [61] und TANNHÄUSER et al. [62] sowie C0-Interior-Penalty-FE-Formulierungen von VENTURA et al. [63] und BALCELLS-QUINTANA et al. [64] entwickelt. Der in der Literatur wohl am häufigsten verwendete Ansatz basiert auf der Isogeometrischen Analysemethode (IGA), wie z. B. in GHASEMI et al. [65], THAI et al. [66] und NGUYEN et al. [67, 68]. Aber auch Lösungstechniken mit Anwendung der Randelementmethoden sind u. a. in CODONY et al. [69] zu finden.

Bisher existieren nur wenige Arbeiten im Rahmen der numerischen Kontinuumsmodellierung der Flexoelektrizität, die sich mit nichtlinearem Materialverhalten befassen. Die meisten berücksichtigen ein hyperelastisches Materialverhalten in weichen Dielektrika im Rahmen einer Theorie großer Verzerrungen, wie z. B. in YVONNET und LIU [70], THAI et al. [66], NGUYEN et al. [68], CODONY et al. [71] DENG et al. [58]. In SLADEK et al. [72] wurden zeitabhängige Effekte in Form eines viskoelastischen Materialverhaltens abgebildet, um Simulationen von

Kriechvorgängen durchführen zu können. Mit dem flexoelektrischen Modell zur Simulation von Heilungsprozessen von Mikrorissen in menschlichen Knochen wurden von WITT et al. [3] erstmals dissipative Effekte im Zuge einer Kopplung mit Diffusionsproblemen berücksichtigt.

Die bisherigen numerischen Untersuchungen zur Flexoelektrizität in Ferroelektrika beschränken sich jedoch auf ein rein lineares Materialverhalten, wie z. B. in ABDOLLAHI et al. [54] und NGUYEN et al. [67]. In SHARMA et al. [73] werden Bereiche in einem funktional gradierten Material identifiziert, in denen die durch Flexoelektrizität erzeugten elektrischen Felder die Koerzitivfeldstärke des Materials erreichen und somit untersucht ob eine mechanisch induzierte Polung des Materials möglich ist. Die tatsächliche Polarisationsentwicklung wird jedoch nicht abgebildet. Nach bestem Wissen des Autors existiert kein makroskopisches flexoelektrisches Kontinuumsmodell, das in der Lage ist, das hysteretische Materialverhalten infolge von Domänenumklappprozessen in Ferroelektrika darzustellen. Da diese dissipativen Effekte einen erheblichen Einfluss auf das makroskopische Verhalten eines Polykristalls haben, ist es von großem Interesse, diese Lücke zu schließen und damit die Forschung auf dem Gebiet der Flexoelektrizität einen Schritt voranzubringen.

## **1.3 Ziele und Gliederung der Arbeit**

Das Ziel der vorliegenden Dissertation ist die Entwicklung eines makroskopischen flexoelektrischen Kontinuumsmodells, mit dem das dissipative Materialverhalten in Ferroelektrika bei quasistatischen Prozessen abgebildet werden kann. Damit wird eine bestehende Forschungslücke geschlossen und eine Verbindung zwischen den in der vorangegangenen Literaturrecherche behandelten Themenbereichen hergestellt. Die Vorgehensweise steht dabei in engem Zusammenhang mit dem bereits veröffentlichten Artikel in SUTTER und KAMLAH [25]. Für die Ausgestaltung der übergeordneten Zielsetzung können folgende Etappen stichpunktartig definiert werden:

- Formulierung einer elektro-mechanischen Kontinuumstheorie, die neben der Piezoelektrizität auch Effekte höherer Ordnung aus der Flexoelektrizität einbezieht. Die Einbettung dieser Theorie in den thermodynamisch konsistenten variationellen Rahmen der Generalisierten Standardmaterialien (GSM) ermöglicht darüber hinaus eine Berücksichtigung dissipativen Materialverhaltens.
- In den zuvor geschaffenen Rahmen der flexoelektrischen Kontinuumstheorie wird ein angepasstes makroskopisches ferroelektrisches Materialmodell integriert, das alle relevanten nichtlinearen Effekte enthält. Durch die so geschaffene variationelle Struktur des Modells mit Potentialcharakter wird per Konstruktion eine symmetrische Materialtangente sicherstellt.
- Basierend auf den Randwertproblemen sowohl für rein piezoelektrische Anwendungen als auch für solche, die auch die Flexoelektrizität berücksichtigen, werden entsprechende Variationsformulierungen abgeleitet. Darauf aufbauend können maßgeschneiderte FE-Formulierungen konstruiert werden, die für die Simulation komplexer Systeme geeignet sind.
- Mithilfe der geschaffenen Simulationswerkzeuge soll ein Verständnis für das Zusammenwirken des flexoelektrischen Effekts und der Domänenumklappprozesse in Ferroelektrika geschaffen werden. Die wesentlichen Fragenstellungen können hierbei wie folgt definiert werden:
  1. Kann allein durch das Auftreten von Verzerrungsgradienten mittels direkten flexoelektrischen Effekts ein Domänenumklappen im Material und damit ein Polarisationsprozess hervorgerufen werden?
  2. Lässt sich mit stark ausgeprägten elektrischen Feldgradienten das globale Deformationsmuster von mikro-elektromechanischen Bauteilen durch den indirekten flexoelektrischen Effekt signifikant beeinflussen?

Die dokumentierte Bearbeitung der gesetzten Ziele gliedert sich kapitelweise wie folgt:



## **Kapitel 2**

Zu Beginn der Arbeit werden die Grundgleichungen einer elektro-mechanischen Kontinuumstheorie höherer Ordnung eingeführt. Diese umfassen sowohl die kinematischen und kinetischen Zusammenhänge einer Verzerrungsgradiententheorie als auch die Bilanzgleichungen der Elektrostatik. Die durch phänomenologische Beobachtungen motivierte Kopplung dieser beiden Teilprobleme in Form von thermodynamisch konsistent hergeleiteter Konstitutivgleichungen schließt das Kapitel ab.

## **Kapitel 3**

Basierend auf der in der Literatur etablierten Modellklasse der Generalisierten Standardmaterialien wird ein variationeller Modellierungsrahmen für elektro-mechanische Kontinua mit einem dissipativem Materialverhalten vorgestellt. Das daraus resultierende inkrementelle Lösungsverfahren eignet sich optimal für eine Einbindung in FE-Berechnungen und bietet darüber hinaus den Vorteil, dass eine symmetrische Materialtangente hieraus analytisch hergeleitet werden kann.

## **Kapitel 4**

Dieses Kapitel führt in die materialwissenschaftlichen Grundlagen ferroelektrischer Funktionskeramiken ein. Zunächst wird anhand einer Einheitszelle deren Gitterstruktur und die daraus resultierende Phänomenologie der Piezo- und Flexoelektrizität sowie der Ferroelektrizität erläutert. Mit der Diskussion des am Polykristall unter hinreichend hoher elektrischer oder mechanischer Belastung messbaren nichtlinearen Großsignalverhaltens sowie der makroskopischen Erscheinung der Flexoelektrizität wird ein Grundverständnis für das durch Modelle zu reproduzierende Materialverhalten geschaffen.

## **Kapitel 5**

Zur Beschreibung der durch äußere elektrische oder mechanische Einwirkungen hervorgerufenen Domänenumklappprozesse, die maßgeblich für das Großsignalverhalten von Ferroelektrika verantwortlich sind, wird ein makroskopisches Materialmodell vorgestellt. Die darin enthaltenen mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen enthalten die Information über den Materialzustand für

jeden Materialpunkt, der repräsentativ für ein Volumen mit einer ausreichenden Anzahl von Körnern und Domänen ist. Die Einbettung des Modells in den in Kapitel 2 vorgestellten variationellen Rahmen ermöglicht eine effiziente numerische Umsetzung.

## **Kapitel 6**

Die elektro-mechanischen Randwertprobleme der Piezoelektrizität und der Flexoelektrizität werden eingeführt, sowie deren unterschiedliche Variationsformulierungen vorgestellt. Die Vor- und Nachteile der verschiedenen Formulierungen werden diskutiert und ihre Eignung für eine Finite-Elemente-Umsetzung bewertet. Schließlich werden für beide Randwertprobleme passende gemischte FE-Formulierungen konstruiert und die zugehörigen Elementmatrizen und Elementvektoren hergeleitet.

## **Kapitel 7**

Numerische Beispiele werden präsentiert, um die Fähigkeit des in Kapitel 5 eingeführten Modells zu demonstrieren, das makroskopische nichtlineare Großsignalverhalten ferroelektrischer Materialien zu beschreiben. In diesem Kapitel werden jedoch zunächst die Effekte höherer Ordnung aus der Flexoelektrizität vernachlässigt. Ein Vergleich der Berechnungsergebnisse mit dem experimentell beobachteten Materialverhalten ermöglicht eine objektive Beurteilung der Leistungsfähigkeit des Modells.

## **Kapitel 8**

In diesem Kapitel liegt der Fokus auf dem Einfluss der Flexoelektrizität auf das makroskopische nichtlineare Großsignalverhalten in ferroelektrischen Materialien. In den diskutierten numerischen Beispielen wird u. a. ein Experiment aus der Literatur simulativ nachgestellt und die berechnete Modellantwort mit der realen Erscheinungscharakteristik der Flexoelektrizität verglichen. Darüber hinaus werden aber auch synthetisch definierte Randwertprobleme mit einer gezielten Anregung der Flexoelektrizität berechnet.

## 2 Grundgleichungen des elektro-mechanischen Kontinuums

In diesem Kapitel werden die Grundgleichungen einer elektro-mechanisch gekoppelten Feldtheorie für Kontinua zusammengefasst. Die hier präsentierten Zusammenhänge bilden das Fundament, auf dem die darauffolgenden Kapitel aufbauen. Die in dieser Arbeit verwendete mathematische Notation ist im Anhang A.1 beschrieben.

### 2.1 Vorbemerkungen zu Kontinuumstheorien

Das Konzept einer Kontinuumstheorie folgt der Annahme, dass ein zu betrachtender Körper  $\mathcal{B}$  zusammenhängend und homogen ist. Ferner sind alle ihm zugeordneten makroskopischen Materialeigenschaften als gemittelte Eigenschaften seiner auf mikroskopischer Skala vorhandenen Einzelkomponenten zu verstehen. Alle in diesem Kapitel eingeführten makroskopischen Feldgrößen sind somit auch als Werte zu verstehen, welche über ein repräsentatives Volumen des zu betrachtenden Materials gemittelt wurden. Werden zusätzlich die örtlichen Gradienten dieser makroskopischen Felder betrachtet, lässt sich nicht nur eine Aussage über den Zustand am Ort eines Materialpunktes treffen, sondern auch die Änderung des Zustandes in einer endlichen Umgebung erfassen. Theorien, in denen solche nicht-lokalen Effekte ihre Berücksichtigung finden, werden im Allgemeinen als *Gradiententheorien* oder auch als *Theorien höherer Ordnung* bezeichnet. Die Motivation für diese liegt in der Erfassung der häufig in Experimenten beobachteten

Veränderung von Materialeigenschaften bei Variation der Probenabmessung, was im Allgemeinen als Größeneffekt (engl. *'size effect'*) bezeichnet wird.

## 2.2 Grundlagen der Elastostatik höherer Ordnung

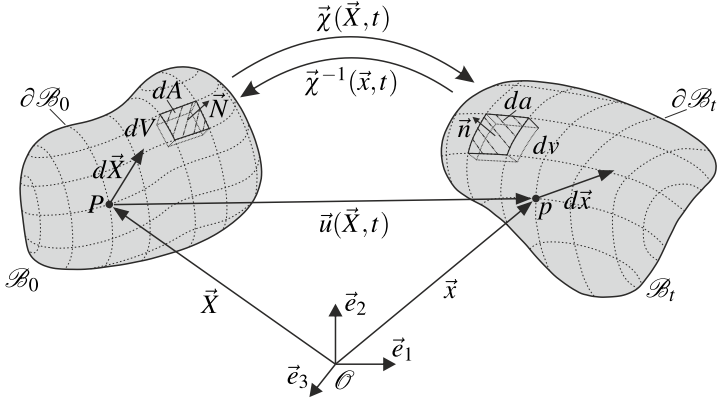
Im folgenden Abschnitt werden die grundlegenden Annahmen und Zusammenhänge der Kontinuumsmechanik von Festkörpern diskutiert. Für eine ausführliche Recherche zu klassischen Theorien erster Ordnung sei an dieser Stelle auf Standardwerke, wie z. B. [74–78], verwiesen. Im Rahmen dieser Arbeit wird zudem auf die Grundlagen der Verzerrungsgradiententheorie (engl. *'strain gradient theory (SGT)'*) zurückgegriffen, welche häufig auch als Elastizitätstheorie höherer Ordnung bezeichnet wird. Fundamentale Zusammenhänge dieser Theorie können u. a. aus [40, 79–84] entnommen werden. Eine allgemeine Übersicht zu Kontinuumstheorien höherer Ordnung findet sich z. B. in [85, 86].

### 2.2.1 Kinematik

Als Kinematik wird die Lehre der Bewegung von Punkten und Körpern im Raum in Abhängigkeit von der Zeit verstanden. Man betrachte einen Körper  $\mathcal{B}$  als eine zusammenhängende Menge von materiellen Punkten, welcher zu jedem Zeitpunkt  $t$  eine beliebige Konfiguration im dreidimensionalen euklidischen Raum  $\mathbb{E}^3$  einnimmt. Durch Einführen eines kartesischen Koordinatensystems mit Basisvektoren  $\vec{e}_i$  am Ursprung  $\mathcal{O}$ , lassen sich beliebige materielle Punkte  $P$  des Körpers  $\mathcal{B}$  durch den Ortsvektor  $\vec{X}$  auf dessen Referenzkonfiguration  $\mathcal{B}_0$  zum Startzeitpunkt  $t_0$  abbilden, vgl. Abb. 2.1. Des Weiteren wird die Position  $p$  desselben Punktes mit dem Ortsvektor  $\vec{x}$  zum Zeitpunkt  $t > t_0$  auf der Momentankonfiguration des Körpers  $\mathcal{B}_t$  dargestellt. Ein funktionaler Zusammenhang zwischen der materiellen und räumlichen Koordinate eines Punktes lässt sich durch

$$\vec{x} = \vec{\chi}(\vec{X}, t) \quad \text{und} \quad \vec{X} = \vec{\chi}^{-1}(\vec{x}, t) \quad (2.1)$$

über eine ausreichend oft stetig differenzierbare und umkehrbare Abbildung einführen, wobei  $\vec{\chi}(\vec{X}, t_0) = \vec{X}$ . Hierbei beschreibt die Funktion  $\vec{\chi}$  die Bewegung des jeweiligen Punktes durch den Raum.



**Abbildung 2.1:** Abbildung eines beliebigen kontinuierlichen Körpers  $\mathcal{B}$  in der Referenzkonfiguration  $\mathcal{B}_0$  und dessen Bewegung  $\vec{\chi}$  in seine Momentankonfiguration  $\mathcal{B}_t$ .

Die Verschiebung des Punktes  $P$ , ausgewertet für beliebige Zeitpunkte  $t$ , lässt sich dann definieren zu

$$\vec{u}(\vec{X}, t) := \vec{\chi}(\vec{X}, t) - \vec{X}, \quad (2.2)$$

wobei diese in der LAGRANGE'schen (materiellen) Betrachtungsweise bezüglich der Referenzkonfiguration eingeführt wurde<sup>1</sup>. Um ein Maß für die Deformation des Körpers zu erhalten, müssen zusätzlich die lokalen Änderungen der Bewegung in der unmittelbaren Umgebung  $d\vec{X}$  eines Punktes  $\vec{X}$  betrachtet werden. Diese Bewegungsänderungen lassen sich durch die TAYLOR-Reihenentwicklung

$$\vec{\chi}(\vec{X} + d\vec{X}, t) = \vec{\chi}(\vec{X}, t) + \frac{\partial \vec{\chi}(\vec{X}, t)}{\partial \vec{X}} \cdot d\vec{X} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \vec{\chi}(\vec{X}, t)}{\partial \vec{X}^2} : (d\vec{X} \otimes d\vec{X}) + \dots \quad (2.3)$$

<sup>1</sup> Werden kinematische Grundgrößen bezüglich der Momentankonfiguration definiert, spricht man von einer EULER'schen (räumlichen) Beschreibung.

approximativ darstellen. In der klassischen Kontinuumstheorie erster Ordnung geht man davon aus, dass die Bewegung des Punktes  $\vec{X}$  nur durch seine unmittelbare Nachbarschaft infinitesimalen Charakters beeinflusst wird und daher ein Abbruch nach dem linearen Glied in der Approximation der Bewegung in (2.3) gerechtfertigt ist. Die Tangente an die Abbildung  $\vec{\chi}(\vec{X}, t)$  im linearen Term in (2.3) wird im Allgemeinen als materieller Deformationsgradient

$$\mathbf{F} := \frac{\partial \vec{\chi}(\vec{X}, t)}{\partial \vec{X}} = \vec{\chi}(\vec{X}, t) \otimes \vec{\nabla}_X \quad \text{mit} \quad \mathbf{F} \neq \mathbf{F}^T \quad (2.4)$$

bezeichnet. Diese Größe hat sich als ein fundamentales Maß zur Beschreibung finiter Deformationen in der Kontinuumsmechanik etabliert. Durch Einsetzen der Beziehung  $\vec{\chi}(\vec{X} + d\vec{X}, t) = \vec{x} + d\vec{x}$  in (2.3) und der Vernachlässigung aller Terme höherer Ordnung ab einschließlich des Quadratischen kann gezeigt werden, dass mithilfe des Deformationsgradienten die Abbildung

$$d\vec{x} = \mathbf{F} \cdot d\vec{X} \quad (2.5)$$

von differentiellen Linienelementen  $d\vec{X}$  in der Referenzkonfiguration auf differentielle Linienelemente  $d\vec{x}$  in der Momentankonfiguration erfolgt. Durch Einführen von Normalenvektoren  $\vec{N}$  und  $\vec{n}$  auf infinitesimalen Flächenelementen  $dA$  und  $da$ , in der Referenz- bzw. der Momentankonfiguration (vgl. Abb. 2.1), lassen sich die Transformationsbeziehungen

$$\vec{n} da = \det \mathbf{F} \mathbf{F}^{-T} \cdot \vec{N} dA \quad \text{und} \quad dv = \det \mathbf{F} dV \quad (2.6)$$

für selbige Flächenelemente, sowie für infinitesimale Volumenelemente, angeben. Da der zuvor eingeführte Deformationsgradient  $\mathbf{F}$  zusätzlich zu den lokalen Verzerrungen auch Starrkörperrotationen enthält, stellt dieser kein geeignetes Maß zur Beschreibung von Formänderungen eines Körpers dar. Aus diesem Grund wird an dieser Stelle der GREEN-LAGRANGE'sche Verzerrungstensor

$$\mathbf{E} := \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} - \mathbf{I}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}^T \quad (2.7)$$

eingeführt, welcher relative Längen- und Winkeländerungen bezogen auf materielle Linienelemente der Referenzkonfiguration beschreibt. Durch Bilden des materiellen Gradienten von (2.2) kann der Zusammenhang

$$\vec{u} \otimes \vec{\nabla}_X = \nabla \vec{u} = \frac{\partial \vec{\chi}(\vec{X}, t)}{\partial \vec{X}} - \frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{X}} = \mathbf{F} - \mathbf{I} =: \mathbf{H} \quad (2.8)$$

zwischen dem Verschiebungsvektor und dem Deformationsgradienten aufgezeigt werden, woraus sich der Verschiebungsgradient  $\mathbf{H}$  ergibt<sup>2</sup>. Der GREEN-LAGRANGE Verzerrungstensor lässt sich mit der Beziehung in (2.8) dann alternativ mit

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{H}^T + \mathbf{H} + \mathbf{H}^T \cdot \mathbf{H}) \quad (2.9)$$

darstellen.

Nun soll noch einmal die Beschreibung der Bewegung benachbarter materieller Punkte von Punkt  $\vec{X}$  mithilfe von (2.3) genauer betrachtet werden. Dieses Mal wird angenommen, dass eine bestimmte Wechselwirkung von Punkten aus einer größeren endlichen Umgebung mit dem Entwicklungspunkt  $\vec{X}$  nicht vernachlässigt werden kann. Das Berücksichtigen einer solchen Wechselwirkung motiviert das quadratische Glied in (2.3) mit in die Beschreibung der Kinematik einzubeziehen, in Form des örtlichen Gradienten des Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} \otimes \vec{\nabla}_X := \frac{\partial^2 \vec{\chi}(\vec{X}, t)}{\partial \vec{X}^2} = \vec{\chi}(\vec{X}, t) \otimes \vec{\nabla}_X \otimes \vec{\nabla}_X. \quad (2.10)$$

Als ein Verzerrungsmaß höherer Ordnung, bezogen auf die Referenzkonfiguration, kann dann der Krümmungstensor<sup>3</sup> (engl. 'curvature tensor')

$$\mathbf{K} := \mathbf{F}^{-1} \cdot (\mathbf{F} \otimes \nabla_X) \quad (2.11)$$

eingeführt werden, welcher sowohl invariant bzgl. eines Beobachterwechsels als

<sup>2</sup> Um die eher ‚sperrig‘ anmutende Erscheinung des dyadischen Produktes wenn möglich zu vermeiden, wird die Darstellung  $\nabla(\dots) := (\dots) \otimes \vec{\nabla}_X$  im weiteren Verlauf häufig verwendet.

<sup>3</sup> Häufig auch als Konfigurationstensor (engl. 'configuration tensor') bezeichnet.

auch gegenüber Starrkörperrotationen ist (vgl. [81]). Durch die Berücksichtigung des quadratischen Gliedes aus (2.3) in der Form des Krümmungstensors (2.11) mit nicht-lokalem Charakter sind auch Informationen über das Bewegungsfeld einer größeren als der unmittelbaren Umgebung eines materiellen Punktes enthalten.

Da im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich Materialien betrachtet werden, bei denen nur sehr kleine Dehnungen (i. d. R.  $< 1\%$ ) zu erwarten sind, wird an dieser Stelle vereinfachend von einer Theorie infinitesimal kleiner Deformationen ausgegangen ( $\|\mathbf{H}\| \ll 1$ ), woraus sich aus (2.9) der linearisierte *infinitesimale Verzerrungstensor*

$$\boldsymbol{\varepsilon} := \frac{1}{2}(\mathbf{H}^T + \mathbf{H}) = \mathbf{H}^{sym} = \frac{1}{2}((\nabla\vec{u})^T + \nabla\vec{u}) = \nabla^{sym}\vec{u} \quad (2.12)$$

als der symmetrische Anteil<sup>4</sup> des Verschiebungsgradienten ergibt. Durch diese geometrische Linearisierung fallen die Referenz- und Momentankonfiguration des betrachteten Körpers näherungsweise zusammen ( $\partial \dots / \partial \vec{X} \approx \partial \dots / \partial \vec{x}$ ), wodurch auf eine Unterscheidung im weiteren Verlauf dieser Arbeit verzichtet werden kann<sup>5</sup>.

Als eine linearisierte Form des Verzerrungsmaßes höherer Ordnung (2.11), soll im Weiteren der *Gradient des infinitesimalen Verzerrungstensors* in (2.12)

$$\boldsymbol{\eta} := \boldsymbol{\varepsilon} \otimes \vec{\nabla} = \nabla \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla(\nabla\vec{u})^T + \nabla\nabla\vec{u}) = \nabla\nabla^{sym}\vec{u} \quad (2.13)$$

verwendet werden<sup>6</sup>. Dieser dreistufige Tensor mit im Allgemeinen 27 Komponenten lässt sich aufgrund der Symmetrie des Verzerrungstensors (2.12) auf eine Darstellung mit 18 unabhängigen Komponenten reduzieren.

---

<sup>4</sup> Der schiefsymmetrische Anteil beschreibt eine reine Starrkörperdrehung, welche keine Formänderung hervorruft.

<sup>5</sup> Deshalb wird im Folgenden auch vereinfacht  $\vec{\nabla}_X := \vec{\nabla}$  geschrieben.

<sup>6</sup> Dies entspricht einer Typ II Verzerrungsgradiententheorie nach MINDLIN und ESHEL [40].



In einer im Folgenden häufig verwendeten kartesischen Indexnotation<sup>7</sup>  $x_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ), lassen sich die Komponenten der in diesem Abschnitt eingeführten infinitesimalen Verzerrungsmaße zusammenfassend schreiben zu

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{j,i} + u_{i,j}) \quad \text{bzw.} \quad \eta_{ijk} = \varepsilon_{ij,k} = \frac{1}{2}(u_{j,ik} + u_{i,jk}). \quad (2.14)$$

In der Darstellung in (2.14) wird für den Verzerrungsgradienten die linke Sub-Symmetrie<sup>8</sup>  $\varepsilon_{ij,k} = \varepsilon_{ji,k}$  bzw.  $\eta_{ijk} = \eta_{jik}$  erkennbar.

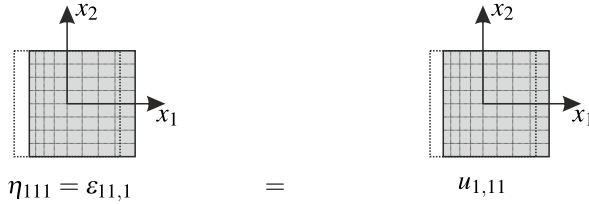
Aufgrund der eher abstrakten Vorstellung einer Berücksichtigung von kinematischen Feldern höherer Ordnung soll nun durch eine bildliche Darstellung einzelner Komponenten des Verzerrungsgradiententensors ein besseres Verständnis geschaffen werden. Hierzu wird ein willkürliches würfelförmiges Einheitsvolumen<sup>9</sup> eines Festkörpers betrachtet. Für dieses Volumen wird ein homogener Verzerrungsgradientenzustand angenommen, bei dem jeweils nur eine der 18 unabhängigen Komponenten des Tensors  $\eta_{ijk}$  von Null verschieden ist. Ein dazu passendes Verschiebungsfeld für das Volumenelement kann durch zweifache Integration der beteiligten Komponenten des Verschiebungsgradienten zweiten Grades bestimmt werden. In Abb. 2.2 und Abb. 2.3 sind beispielhaft die resultierenden Verschiebungsfelder zu den Komponenten  $\eta_{111} = \varepsilon_{11,1}$  und  $\eta_{112} = \varepsilon_{11,2}$  dargestellt. Es sei angemerkt, dass es sich hierbei um Gradienten von Normalverzerrungskomponenten handelt. Als Beispiele für Gradienten von Scherverzerrungskomponenten, sowie deren Konstruktion aus zwei unterschiedlichen Einträgen des Verschiebungsgradienten zweiten Grades sind die Komponenten  $\eta_{121} = \varepsilon_{12,1}$  ( $= \eta_{211} = \varepsilon_{21,1}$ ) und  $\eta_{123} = \varepsilon_{12,3}$  ( $= \eta_{213} = \varepsilon_{21,3}$ ) in Abb. 2.4 und Abb. 2.5 illustriert. Versucht man die einzelnen Komponenten des Verzerrungsgradiententensors nach Kriterien einer klassischen Kontinuumstheorie erster Ordnung einzuordnen, könnte man das Deformationsmuster in Abb. 2.2 als longitudinal-, das in Abb. 2.3 als querschub-

<sup>7</sup> Hierbei gilt es die EINSTEIN'sche Summenkonvention zu beachten.

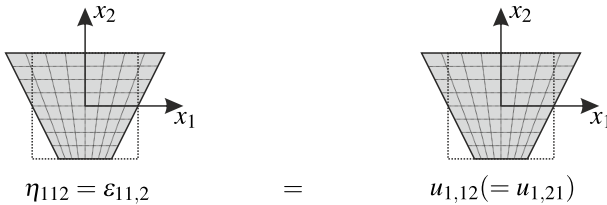
<sup>8</sup> Bei Wahl des zweiten Gradienten des Verschiebungsvektors als zusätzliches Verzerrungsmaß höherer Ordnung, ergibt sich eine rechte Sub-Symmetrie  $u_{i,jk} = u_{i,kj}$  (vgl. Typ I Theorie nach MINDLIN und ESHEL [40]).

<sup>9</sup> Hierbei handelt es sich nicht um ein infinitesimales Volumenelement  $dV$ .

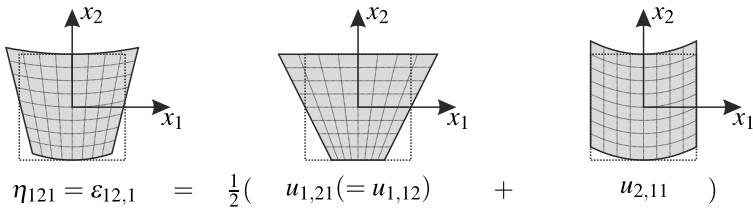
und das in 2.4 als biegeartige Verformung charakterisieren. Das komplexe dreidimensionale Muster in Abb. 2.5 erscheint als eine eher torsionsartige Deformation.



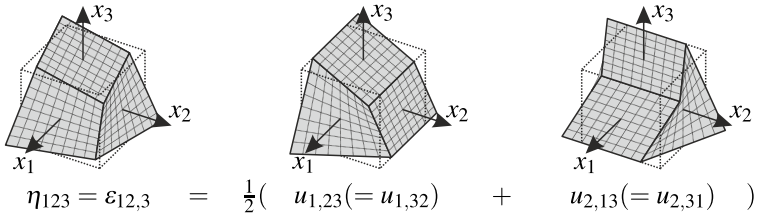
**Abbildung 2.2:** Verschiebungsfeld eines homogenen Verzerrungsgradientenzustandes mit einzig von Null verschiedener Komponente  $\eta_{111}$ , wobei  $u_1(x_1) = \frac{1}{2} u_{1,11} x_1^2$  ( $u_{1,11} = \text{const.}$ ).



**Abbildung 2.3:** Verschiebungsfeld eines homogenen Verzerrungsgradientenzustandes mit einzig von Null verschiedener Komponente  $\eta_{112}$ , wobei  $u_1(x_1, x_2) = u_{1,12} x_1 x_2$  ( $u_{1,12} = \text{const.}$ ).



**Abbildung 2.4:** Verschiebungsfeld eines homogenen Verzerrungsgradientenzustandes mit einzig von Null verschiedener Komponente  $\eta_{121} = \eta_{211}$ , wobei  $u_1(x_1, x_2) = u_{1,21} x_1 x_2$  ( $u_{1,21} = \text{const.}$ ) und  $u_2(x_1) = \frac{1}{2} u_{2,11} x_1^2$  ( $u_{2,11} = \text{const.}$ ).



**Abbildung 2.5:** Verschiebungsfeld eines homogenen Verzerrungsgradientenzustandes mit einzig von Null verschiedener Komponente  $\eta_{123} = \eta_{213}$ , wobei  $u_1(x_2, x_3) = u_{1,23}x_2x_3$  ( $u_{1,23} = \text{const.}$ ) und  $u_2(x_1, x_3) = u_{2,13}x_1x_3$  ( $u_{2,13} = \text{const.}$ ).

Die bildlichen Darstellungen aller 18 unabhängigen Komponenten des Verzerrungsgradiententensors  $\eta_{ijk}$  sind in Anhang B aufgeführt. Ähnliche Illustrationen der Kinematik der Komponenten des Verzerrungsgradiententensors werden auch von POLIZZOTTO [84, 87] gegeben.

## 2.2.2 Das Konzept von Spannungen und deren Bilanzen

Um die allgemeine Begrifflichkeit von *Spannungen* in Festkörpern einzuführen, soll in diesem Abschnitt von einem klassischen Kontinuum ohne Berücksichtigung von zusätzlichen Gradienten der Verzerrungen ausgegangen werden.

Das in der Mechanik etablierte Schnittprinzip besagt, dass an Schnittflächen eines gedanklich freigeschnittenen Teilkörpers innere Kraftgrößen freigelegt werden und diese mit den äußerlich auf den Teilkörper einwirkenden Kräften jederzeit im Gleichgewicht stehen. In Abb. 2.6 ist die Anwendung dieses Prinzips auf einen Körper  $\mathcal{B}$  dargestellt. Bei Betrachtung eines finiten Flächenelementes  $\Delta A$  mit resultierendem Kraftvektor  $\Delta \vec{F}$  im Schnitt und der Bildung des Grenzwertes

$$\lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{F}}{\Delta A} = \frac{d\vec{F}}{dA} =: \vec{t}, \quad (2.15)$$

wird ein Ausdruck für die Oberflächenkraftdichte innerhalb dieses Schnittes gefunden. Dieser ist als *Spannungsvektor*  $\vec{t}$  definiert. Dessen Gestalt hängt nicht

nur vom Ort  $\vec{x}$  sondern auch von der Orientierung  $\vec{n}$  der Oberfläche ab. Auf CAUCHY geht des Theorem zurück, dass diese Abhängigkeit linear ist und die zugehörige Abbildung

$$\vec{t}(\vec{x}, \vec{n}) = \vec{n}(\vec{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\vec{x}) \quad (2.16)$$

mit einem Tensor zweiter Stufe beschrieben werden kann. Durch diesen CAUCHY-Spannungstensor  $\boldsymbol{\sigma}$  ist für jeden Punkt  $\vec{x}$  der Spannungszustand für alle Schnittorientierungen eindeutig beschrieben.

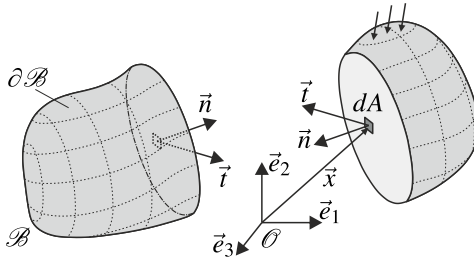


Abbildung 2.6: Schnittprinzip für einen Körper  $\mathcal{B}$  mit den in der Schnittfläche freigelegten inneren Kräften.

Eine Bilanz aller auf den Körper  $\mathcal{B}$  einwirkenden Kräfte kann unter Annahme von quasi-statischen Bedingungen geschrieben werden zu

$$\int_{\mathcal{B}} \vec{b} dV + \int_{\partial \mathcal{B}} \vec{t} dA = \vec{0}, \quad (2.17)$$

worin  $\vec{b}$  die volumenbezogenen äußeren Einwirkungen<sup>10</sup> symbolisiert. Mit der Beziehung in (2.16) und durch Anwenden des Divergenztheorems (A.10) ergibt sich für jeden Punkt innerhalb des Kontinuums eine lokale Form

$$\vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \vec{b} = \vec{0} \quad \text{in } \mathcal{B} \quad (2.18)$$

der Impulsbilanz.

<sup>10</sup> z. B. durch Gravitation

Alle im und am Körper  $\mathcal{B}$  enthaltenen Drehmomente bezüglich eines raumfesten Referenzpunktes  $\vec{x}_o$  können bilanziert werden mit

$$\int_{\mathcal{B}} \vec{x}_o \times \vec{b} dV + \int_{\partial\mathcal{B}} \vec{x}_o \times \vec{t} dA = \vec{0}. \quad (2.19)$$

Aus dem in (2.19) eingeforderten Momentengleichgewicht ergibt sich nach Umformen die Symmetrie

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \quad \text{in } \mathcal{B} \quad (2.20)$$

des CAUCHY-Spannungstensors, welche an dieser Stelle ohne weiteren Beweis als gültig angenommen werden soll. In weiteren Verlauf dieser Arbeit wird zudem die Massenerhaltung jederzeit als erfüllt vorausgesetzt.

### 2.2.3 Das Prinzip der virtuellen Arbeit

Die gewonnenen Erkenntnisse aus der physikalischen Interpretation von Spannungen sollen nun auf eine Theorie mit zusätzlich berücksichtigten kinematischen Variablen höherer Ordnung (vgl. Abschn. 2.2.1) übertragen werden. Hierzu sollen auch geeignete kinetische Grundgrößen und deren zugehörigen Bilanzgleichungen eingeführt werden. Über die zu wählende Herangehensweise im Rahmen einer Verzerrungsgradiententheorie wird z. B. von BERTRAM [88] eine ausführliche Diskussion geführt. In der vorliegenden Arbeit wird der dort als am plausibelsten eingestufte Weg über eine energetische Betrachtung beschritten. Ausgehend von den zuvor eingeführten kinematischen Grundgrößen des Verzerrungstensors  $\boldsymbol{\epsilon}$  und des Verzerrungsgradiententensors  $\boldsymbol{\eta}$  wird die Existenz von jeweils dazu arbeitskonjugierten Spannungsgrößen postuliert<sup>11</sup>. Das Integral der Elementarleistung arbeitskonformer Paarungen von Spannungs- und Verzerrungstensenoren kann dann als

$$\mathcal{P} = \int_{\mathcal{B}} (\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\eta}}) dV \quad (2.21)$$

<sup>11</sup> GURTIN [89] zeigt, dass durch die Vernachlässigung von zusätzlichen Spannungsgrößen, die arbeitskonform zu den höheren kinematischen Variablen sind, Grundprinzipien der Thermodynamik verletzt werden.

definiert werden, worin der zweistufige Spannungstensor  $\boldsymbol{\sigma}$  und der dreistufige Spannungstensor höherer Ordnung<sup>12</sup>  $\boldsymbol{\tau}$  eingeführt wurde. Für diese können dieselben Symmetriebedingungen wie für die arbeitskonformen kinematischen Größen, nämlich  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  und  $\tau_{ijk} = \tau_{jik}$ , angenommen werden. An dieser Stelle sei angemerkt, dass bei Vernachlässigung der Effekte höherer Ordnung in (2.21) der Spannungstensor erster Ordnung  $\boldsymbol{\sigma}$  dem CAUCHY-Spannungstensor einer lokalen Theorie aus Abschn. 2.2.2 entspricht. Der Einfachheit halber wird in dieser Arbeit für beide Tensoren dasselbe Symbol verwendet.

Ferner soll von rein quasi-statischen Prozessen und der Vernachlässigbarkeit jeglicher kinetischen Effekte aus Massenträgheiten ausgegangen werden. Das *Prinzip der virtuellen Arbeit* (P.d.v.A.)<sup>13</sup>

$$\delta\Pi(\delta\vec{u}) = \int_{\mathcal{B}} (\boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau} \cdot \delta\boldsymbol{\eta}) dV - \delta\Pi^{ext}(\delta\vec{u}) = 0 \quad (2.22)$$

kann mit den Verzerrungsgrößen  $\delta\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^{sym} \delta\vec{u}$  und  $\delta\boldsymbol{\eta} = \nabla\nabla^{sym} \delta\vec{u}$  infolge des virtuellen Verschiebungsfeldes  $\delta\vec{u}$  formuliert werden. Der externe Anteil der virtuellen Arbeit  $\delta\Pi^{ext}$  wird im weiteren Verlauf noch genauer bestimmt. Der zweite Summand im Integral in (2.22) kann mit (A.3) und (A.11) zu

$$\int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\tau} \cdot \delta\boldsymbol{\eta} dA = - \int_{\mathcal{B}} (\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{\nabla}) : \nabla^{sym} \delta\vec{u} dV + \int_{\partial\mathcal{B}} (\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n}) : \nabla^{sym} \delta\vec{u} dA \quad (2.23)$$

umgeformt werden. Zusammen mit dem ersten Term in (2.22) ergibt sich dann für das P.d.v.A.

$$\int_{\mathcal{B}} \mathbf{T} : \nabla^{sym} \delta\vec{u} dV + \int_{\partial\mathcal{B}} \boldsymbol{\Sigma} : \nabla^{sym} \delta\vec{u} dA - \delta\Pi^{ext}(\delta\vec{u}) = 0 \quad (2.24)$$

<sup>12</sup> Im Angelsächsischen auch häufig als 'hyper stresses' oder 'double stresses' bezeichnet, wobei  $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^{sym} = 1/2(\tau_{ijk} + \tau_{jik})$ . Der Unterschied zu den 'couple stresses'  $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\tau}^{skw} = 1/2(\tau_{ijk} - \tau_{jik})$  in gleichnamigen Theorien sollte beachtet werden, vgl. [90].

<sup>13</sup> In den Herleitungen von MINDLIN und ESHEL [40] sowie BERTRAM [81] wird jeweils vom HAMILTON'sche Prinzip bzw. vom Prinzip der virtuellen Leistung ausgegangen. Da im Rahmen dieser Arbeit nur zeitunabhängige Prozesse mit vernachlässigbarer kinetischer Energie in einer Theorie kleiner Deformationen betrachtet werden, soll der Einfachheit halber die Herleitung über das P.d.v.A. erfolgen.

mit dem symmetrischen *totalen Spannungstensor*<sup>14</sup>  $\mathbf{T}$  und dem *Oberflächenspannungstensor*  $\mathbf{\Sigma}$  (vgl. [83]), wobei

$$\mathbf{T} := \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{\nabla} \quad T_{ij} = \sigma_{ij} - \tau_{ijk,k} \quad \text{in } \mathcal{B} \quad (2.25)$$

$$\text{und } \mathbf{\Sigma} := \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n} \quad \Sigma_{ij} = \tau_{ijk} n_k \quad \text{auf } \partial\mathcal{B}. \quad (2.26)$$

Der erste Term in (2.24) kann hier als volumenbezogene innere Arbeit und der zweite Term als oberflächenbezogene innere Arbeit interpretiert werden. Bemerkenswerterweise ist die Existenz eines solchen rein oberflächenbezogenen Anteils der inneren Energie in der klassischen Kontinuumstheorie für Festkörper nicht vorgesehen. Durch Umformen mithilfe von (A.2) und durch Anwenden des Divergenztheorems (A.10) ergibt sich für den volumenbezogene Anteil in (2.24)

$$\int_{\mathcal{B}} \mathbf{T} : \nabla^{\text{sym}} \delta \vec{u} dV = - \int_{\mathcal{B}} \vec{\nabla} \cdot \mathbf{T} \cdot \delta \vec{u} dV + \int_{\partial\mathcal{B}} \vec{n} \cdot \mathbf{T} \cdot \delta \vec{u} dA. \quad (2.27)$$

Der oberflächenbezogene Anteil in (2.24)

$$\int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{\Sigma} : \nabla^{\text{sym}} \delta \vec{u} dA = \int_{\partial\mathcal{B}} \vec{n} \cdot \mathbf{\Sigma} \cdot D_n \delta \vec{u} dA + \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{\Sigma} : (\vec{\nabla}_t \otimes \delta \vec{u}) dA \quad (2.28)$$

kann in einen normalen und einen tangentialen Anteil aufgeteilt werden, wobei der Gradient wie in (A.4) beschrieben zerlegt wird. Hierbei stellt  $D_n \delta \vec{u} = (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) \delta \vec{u}$  den Gradienten der Verschiebungskomponente in Normalenrichtung der Oberfläche dar<sup>15</sup>. Der Tangentialanteil in (2.28) lässt sich mit (A.2) weiter umformen, woraus sich

$$\int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{\Sigma} : (\vec{\nabla}_t \otimes \delta \vec{u}) dA = \int_{\partial\mathcal{B}} \vec{\nabla}_t \cdot (\mathbf{\Sigma} \cdot \delta \vec{u}) dA - \int_{\partial\mathcal{B}} (\vec{\nabla}_t \cdot \mathbf{\Sigma}) \cdot \delta \vec{u} dA \quad (2.29)$$

ergibt.

<sup>14</sup> Häufig auch als *physikalischer Spannungstensor* bezeichnet. Die Symmetrie dieses Tensors ist für eine Verschiebungsgradiententheorie zweiter Ordnung (vgl. Typ I Theorie von MINDLIN und ESHEL [40]) nicht gegeben [84].

<sup>15</sup> Man könnte auch von einer Verdrehung der Oberfläche sprechen.

Durch Anwenden des Divergenztheorems für Oberflächen (A.7), kann der zweiten Term in (2.29) als

$$\int_{\partial\mathcal{B}} \vec{\nabla}_t \cdot (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \delta \vec{u}) dA = \int_{\partial\mathcal{B}} (\vec{\nabla}_t \cdot \vec{n}) \vec{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \delta \vec{u} + \oint_{\partial\partial\mathcal{B}} \vec{m} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \delta \vec{u} dS \quad (2.30)$$

geschrieben werden. Dabei wird angenommen, dass die Oberfläche  $\partial\mathcal{B}$  in eine endliche Anzahl von glatten Teilflächen aufgeteilt werden kann, die voneinander abgegrenzt sind durch die Gesamtheit der Kanten  $\partial\partial\mathcal{B}$ . Die Normalen  $\vec{m}$ , stehen dabei in jedem Punkt senkrecht zu den Oberflächennormalen  $\vec{n}$  und bilden zusammen mit den Tangenten der Kanten  $\partial\partial\mathcal{B}$  eine Orthonormalbasis, siehe auch Anhang A.2.3.1.

Zusammenfassend lässt sich das P.d.v.A. in (2.24) zu

$$\begin{aligned} \delta\Pi(\delta\vec{u}) = & - \int_{\mathcal{B}} \vec{\nabla} \cdot \mathbf{T} \cdot \delta\vec{u} dV + \int_{\partial\mathcal{B}} (\vec{n} \cdot \mathbf{T} - \vec{\nabla}_t \cdot \boldsymbol{\Sigma} + (\vec{\nabla}_t \cdot \vec{n}) \vec{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) \cdot \delta\vec{u} dA \\ & + \int_{\partial\mathcal{B}} \vec{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot D_n \delta\vec{u} dA + \oint_{\partial\partial\mathcal{B}} \vec{m} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \delta\vec{u} dS - \delta\Pi^{ext}(\delta\vec{u}) = 0 \end{aligned} \quad (2.31)$$

schreiben. Der externe Anteil der virtuellen Arbeit in (2.31) soll nun mit

$$\begin{aligned} \delta\Pi^{ext}(\delta\vec{u}) = & \int_{\mathcal{B}} \vec{b}_{ext} \cdot \delta\vec{u} dV + \int_{\partial\mathcal{B}_t} \vec{r}_{ext} \cdot \delta\vec{u} dA \\ & + \int_{\partial\mathcal{B}_t} \vec{r}_{ext} \cdot D_n \delta\vec{u} dA + \oint_{\partial\partial\mathcal{B}_t} \vec{c}_{ext} \cdot \delta\vec{u} dS \end{aligned} \quad (2.32)$$

definiert werden, wobei die Vektoren  $\vec{b}_{ext}$  und  $\vec{r}_{ext}$  die volumen- bzw. die oberflächenbezogenen äußeren Einwirkungen darstellen. Der Vektor  $\vec{r}_{ext}$  charakterisiert die Oberflächenmomentenspannungen und  $\vec{c}_{ext}$  beschreibt spezifische Linienlasten an Kanten des zu betrachtenden Körpers. Die Annahme, dass die Momentenspannungen  $\vec{r}_{ext}$  nur Arbeit auf dem Gradienten der Verschiebung in Normalenrichtung verrichtet erscheint nach der Herleitung von (2.31) trivial, ist aber alles andere als offensichtlich. Von TOUPIN [79] wird gezeigt, dass der zum Gradienten der



Verschiebung in Tangentialrichtung arbeitkonforme Normalenanteil der Momentenspannungen verschwinden muss<sup>16</sup>.

Zusammenfassend können mit dem hergeleiteten Ausdruck der virtuellen Arbeit in (2.31) mit (2.32) die notwendigen und hinreichenden Bedingungen

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{T} + \vec{b}_{ext} = 0 \quad \text{in } \mathcal{B} \quad \text{mit } \mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{\nabla} \quad (2.33)$$

$$\vec{n} \cdot \mathbf{T} - \vec{\nabla}_t \cdot \boldsymbol{\Sigma} + (\vec{\nabla}_t \cdot \vec{n}) \vec{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} = \vec{t}_{ext} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_t \quad \text{mit } \boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n} \quad (2.34)$$

$$\vec{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} = \vec{r}_{ext} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_t \quad (2.35)$$

$$[[\vec{m} \cdot \boldsymbol{\Sigma}]] = \vec{c}_{ext} \quad \text{auf } \partial \partial \mathcal{B}_t \quad (2.36)$$

zur punktwweisen Erfüllung von Gleichung (2.22) für beliebige  $\delta \vec{u}$  gewonnen werden. In diesen Bedingungen können die Bilanzgleichung (2.33), sowie die NEUMANN-Randbedingungen (2.34)-(2.36) identifiziert werden. Es zeigen sich die Unterschiede zu den für ein klassisches Kontinuum erster Ordnung angegebenen Relationen in (2.16) und (2.18), welche durch die Berücksichtigung des Terms höherer Ordnung in (2.21) entstanden sind. Der Ausdruck  $[[\dots]]$  in (2.36) stellt einen Sprung der ausgewerteten Größe über eine Kante dar. Durch eine aufgebrachte Kantenlast  $\vec{c}_{ext}$  wird somit eine Differenz in den betreffenden Spannungskomponenten, jeweils ausgewertet an den beiden angrenzenden Teilflächen, verursacht. Die DIRICHLET-Randbedingungen in Form von vorgegebenen Werten  $(\dots)'$  für das Verschiebungsfeld können mit

$$\vec{u} = \vec{u}' \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_u \quad (2.37)$$

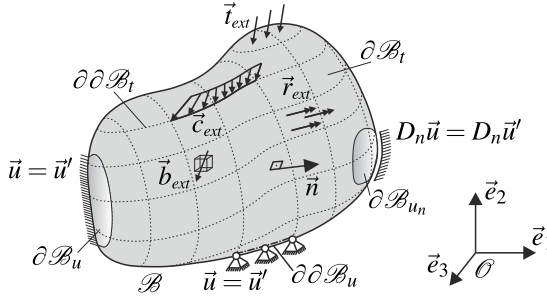
$$D_n \vec{u} = D_n \vec{u}' \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_{u_n} \quad (2.38)$$

$$\vec{u} = \vec{u}' \quad \text{auf } \partial \partial \mathcal{B}_u \quad (2.39)$$

angegeben werden. Der Ausdruck in (2.38) wertet punktwweise den Gradienten der Verschiebungskomponente in Richtung der Normalen der Oberfläche des Körpers  $\mathcal{B}$  aus. Mit den gewonnenen Gleichungen (2.33) bis (2.39) konnte ein

<sup>16</sup> Diese Annahme der Unzulässigkeit einer ‚schraubenzieherartigen‘ Torsionsbelastung der Oberfläche wird z. B. auch in der Schalentheorie getroffen.

Teil des elastostatischen Randwertproblems<sup>17</sup> für ein Kontinuum zweiter Ordnung hergeleitet werden. In Abb. 2.7 ist dieses Randwertproblem noch einmal bildlich zusammengefasst.



**Abbildung 2.7:** Randwertproblem eines Körpers  $\mathcal{B}$  mit allen angreifenden äußeren Einwirkungen und den Verschiebungsrandbedingungen.

Die Berandung des Körpers lässt sich, wie bereits in (2.34) bis (2.35) und (2.37) bis (2.38) angedeutet, in einen Spannungsrand  $\partial\mathcal{B}_t$  und eine Verschiebungsrand  $\partial\mathcal{B}_u$  aufteilen, wobei  $\partial\mathcal{B}_t \cap \partial\mathcal{B}_u = \partial\mathcal{B}$  und  $\partial\mathcal{B}_t \cup \partial\mathcal{B}_u = \emptyset$  gilt. Selbiges soll auch für die Kanten  $\partial\partial\mathcal{B}_t$  und  $\partial\partial\mathcal{B}_u$  des Körpers gelten. Aufgrund der integralen Erfüllung der Bilanzgleichung (2.33) im Ausdruck des P.d.v.A in (2.31) wird dieses auch häufig als *schwache Form* des Gleichgewichtes bezeichnet. Eine genauere Betrachtung einer *starken Form* des Gleichgewichtes im Stile von Abschn. 2.2.2 kann aus einer Modellvorstellung gewonnen werden, welche u. a. in [80, 83, 87, 91, 92] diskutiert wird, dass die Oberfläche eines Festkörpers im Rahmen einer Gradiententheorie von einer dünnen Schale umschlossen ist. In dieser Schale wirken Oberflächenspannungen (vgl. (2.26)), welche zusätzlichen Bilanzrelation genügen müssen und im inneren des Festkörpers schnell abklingen. Nach POLIZZOTTO [83, 87] lassen sich deshalb sämtliche Bilanzen an beiden Teilsystemen separat führen. Die Impulsbilanz für den volumenbezogenen Festkörper ergibt sich dann zu der bereits in (2.33) gewonnen Beziehung. Bildet man das

<sup>17</sup> Bisher wurden nur die materialunabhängigen Gleichungen eingeführt.

Gleichgewicht an einem infinitesimalen Element der Außenschale kann gezeigt werden, dass (2.34) als eine Bilanzgleichung der Oberfläche interpretiert werden kann. Dabei sei angemerkt, dass die Komponenten des Oberflächenspannungstensors stark von der Krümmung der Oberfläche abhängig sind.

## 2.3 Grundlagen der Elektrostatik

In diesem Abschnitt werden physikalische Phänomene und deren mathematische Beschreibung der Elektrostatik zusammengefasst. Hierbei wird stets von quasi-statischen und zeitunabhängigen Zuständen ausgegangen, sodass sich die Elektrostatik als ein spezifischer Sonderfall der allgemeinen Elektrodynamik ergibt. Des Weiteren werden im Rahmen dieser Arbeit jegliche Effekte aus Magnetismus vernachlässigt. Als Grundlage für diesen Abschnitt dienen Standardwerke über die allgemeine Elektrodynamik wie z. B. [93–97].

### 2.3.1 Elektrische Ladung und Felder

Die *elektrische Ladung*  $q$  von Elementarteilchen in einer Materie bestimmt im Wesentlichen deren elektromechanisches Verhalten. Diese Ladungen können positiv oder negativ sein. Des Weiteren wird angenommen, dass sie in den folgenden Betrachtungen stets in Ruhe verharren. Die Ladungserhaltung besagt zudem, dass die Summe der Ladungen in einem abgeschlossenen System sich nicht ändert. Gemäß dem COULOMB'schen Gesetz wird auf eine ruhende Ladung  $q_1$ , infolge einer zweiten Ladung  $q_2$ , die Kraft

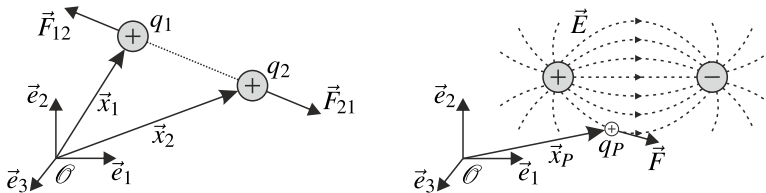
$$\vec{F}_{12} = -\vec{F}_{21} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{x}_1 - \vec{x}_2}{\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\|^3} \quad (2.40)$$

ausgeübt (vgl. Abb. 2.8 links), wobei  $\epsilon_0 = 8.8542 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{Nm}^2)$  die *elektrische Feldkonstante im Vakuum* symbolisiert. Umgekehrt wirkt auf Ladung  $q_2$  entlang der direkten Verbindungslinie eine entgegengesetzte Kraft. Aus Gleichung (2.40) folgt, dass die Kraft zwischen zwei Ladungen im Vakuum

chung (2.40) ergibt sich, dass zwischen gleichnamigen Ladungen abstoßende und zwischen ungleichnamigen anziehende Kräfte wirken. Auf FARADAY ist die Beobachtung zurückzuführen, dass in den leeren Räumen zwischen Punktladungen ein *elektrisches Feld* wirkt. Dieses Feld stellt ein Maß für die Kräfte dar, welche auf Ladungen an einem bestimmten Ort einwirken. Prinzipiell lässt sich das elektrische Feld

$$\vec{E}(\vec{x}_P) = \frac{\vec{F}(\vec{x}_P)}{q_P} \quad (2.41)$$

durch räumliches Abtasten mittels einer Probeladung<sup>18</sup>  $q_P$  und der an jedem Ort  $\vec{x}_P$  gemessenen COULOMB'schen Kraft punktweise ermitteln. Eine sehr anschauliche Analogie lässt sich für das elektrische Feld zu Stromlinien in einer inkompressiblen Flüssigkeit motivieren. In Abb. 2.8 (rechts) wird die Orientierung des elektrischen Feldvektors  $\vec{E}$  durch die Richtung der Feldlinien, sowie die Intensität der Feldstärke durch die Flächendichte der Linien symbolisiert. Dabei beginnen die Feldlinien an positiven und enden an negativen Ladungen, sodass positive Ladungen als Quellen und negative Ladungen als Senken des elektrischen Feldes interpretiert werden können.



**Abbildung 2.8:** Links: Wirkungweise der COULOMB'schen Kräfte bei zwei gleichnamigen ruhenden Punktladungen. Rechts: Elektrisches Feld zwischen zwei ungleichnamigen Punktladungen, sowie dessen Erfassung mittels einer Probeladung.

<sup>18</sup> Um das zu ermittelnde elektrische Feld nur im geringen Maße zu beeinflussen, sollte die gewählte Probeladung im Vergleich zu den feldaufspannenden Ladungen sehr klein sein.

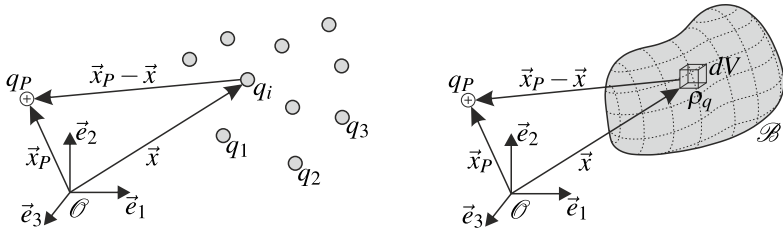
In Analogie zur mechanischen Gravitationstheorie ist die COULOMB'sche Kraft ebenfalls aus einem Potential herleitbar. Dieser Gedanke motiviert die auf Ladung  $q_1$  aus Abb. 2.8 (links) wirkende Kraft

$$\vec{F}_{12} = -q_1 \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} \phi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \quad \text{mit} \quad \phi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \frac{q_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\|} \quad (2.42)$$

zu schreiben, wobei  $\phi$  das *skalare elektrostatische Potential* symbolisiert. Die Einführung dieses Potentials im Rahmen einer elektrostatischen Feldtheorie erweist sich in der Regel als sehr nützlich, wie später noch gezeigt werden wird. In technischen Anwendungen ist häufig die Potentialdifferenz zwischen zwei Punkten  $\vec{x}_1$  und  $\vec{x}_2$  von Interesse. Diese ergibt sich zu

$$\Delta\phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \int_{\vec{x}_1}^{\vec{x}_2} \vec{E} \cdot d\vec{x} \quad (2.43)$$

und wird im Allgemeinen als *elektrische Spannung* bezeichnet und wird in der Einheit *Volt* gemessen.



**Abbildung 2.9:** Links: Superpositionsprinzip bei der Ermittlung des elektrischen Feldes am Ort einer Probeladung infolge einer willkürlichen Ladungsverteilung. Rechts: Kontinuums-theoretische Betrachtung von Ladungen in einem Körper in Form einer Ladungsdichte  $\rho_q$  pro Einheitsvolumen und dem erzeugten elektrischen Feld am Ort einer Probeladung.

In realer Materie treten Teilchen unterschiedlicher Ladungen in der Regel in einer großen Anzahl auf, wobei jedes einzelne die Form des elektrischen Feldes beeinflusst, vgl. Abb. 2.9 (links). Soll für einen solchen Fall das elektrische Feld an der Position  $\vec{x}_P$  einer Probeladung  $q_P$  bestimmt werden, kann dieses und das

zugehörige elektrische Potential nach dem Superpositionsprinzip mit

$$\vec{E}(\vec{x}_P) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \frac{q_i(\vec{x}_P - \vec{x}_i)}{\|\vec{x}_P - \vec{x}_i\|^3} \quad \text{und} \quad \phi(\vec{x}_P) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \frac{q_i}{\|\vec{x}_P - \vec{x}_i\|} \quad (2.44)$$

ermittelt werden. Für eine makroskopische Betrachtung der elektrischen Felder in und um einen Körper bietet sich eine Betrachtung im Rahmen einer Kontinuumsstheorie an (vgl. Abschn. 2.1). Hierbei wird angenommen, dass alle Ladungen innerhalb des Körpers  $\mathcal{B}$  kontinuierlich verteilt sind. Für diesen Fall gehen die beiden Gleichungen in (2.44) in eine Integralform über und können zu

$$\vec{E}(\vec{x}_P) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathcal{B}} \frac{\rho_q(\vec{x})(\vec{x}_P - \vec{x})}{\|\vec{x}_P - \vec{x}\|^3} dV \quad (2.45)$$

$$\text{und} \quad \phi(\vec{x}_P) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\mathcal{B}} \frac{\rho_q(\vec{x})}{\|\vec{x}_P - \vec{x}\|} dV \quad (2.46)$$

geschrieben werden. Hierbei repräsentiert  $\rho_q(\vec{x}) = dq/dV$  die Ladungsdichte pro infinitesimalem Einheitsvolumen des zu betrachtenden Mediums.

### 2.3.2 Polarisation in Dielektrika

Im Folgenden sollen nun die Phänomene der Elektrostatik in einer Form betrachtet werden, wie sie in sogenannten *dielektrischen* Materialien zu beobachten sind. Als ein *Dielektrikum* wird ein Material bezeichnet, das eine verschwindend geringe Leitfähigkeit besitzt und damit als Isolator idealisiert werden kann. In Isolatoren gilt die Annahme, dass Ladungen nicht frei bewegliche sind, sondern nur in einer im Material gebundenen Form vorkommen. Dies macht das Fließen eines elektrischen Stroms unmöglich.

Eine Situation, wie sie z. B. in Abb. 2.8 (rechts) dargestellt ist, mit zwei in einem Abstand  $\vec{d}$  gegenüberstehenden Ladungen  $q^+$  und  $q^-$  wird im Allgemeinen als elektrischer Dipol bezeichnet. Diese Dipole verharren in einem Dielektrikum an Ort und Stelle. Es kann aber davon ausgegangen werden, dass deren Ladungen

sich ein wenig gegeneinander verschieben können. Als eine charakteristische Größe für einen elektrischen Dipol kann das *Dipolmoment*<sup>19</sup>

$$\vec{p} = q\vec{d} \quad (2.47)$$

aus dem Produkt der Ladung  $q$  und dem Abstand  $\vec{d}$  gebildet werden. Der Vektor des Dipolmoments zeigt dabei immer von der negativen Ladung zur positiven Ladung. Wirkt ein homogenes elektrisches Feld koaxial auf einen Dipol, verursacht dieses nach dem COULOMB'schen Gesetz (2.40) eine entgegengesetzte Kraft auf die beiden Ladungen entlang der Feldlinien, was zu einer Veränderung des Abstandes  $\vec{d}$  hinwirkt, vgl. Abb. 2.10 (links). Dies führt nach Gl. (2.47) zwangsläufig zu einer Veränderung des Dipolmoments. Ist die Ausrichtung der Ladungen nicht vollständig koaxial mit einem einwirkenden homogenen elektrischen Feld, wird auf einen elektrischen Dipol das Drehmoment<sup>20</sup>

$$\vec{m}^{DP} = \vec{d} \times \vec{F} = \vec{p} \times \vec{E} \quad (2.48)$$

ausgeübt, vgl. Abb. 2.10 (rechts). Dieses bewirkt, dass sich Dipole entlang elektrischer Feldlinien ausrichten.

Wie schon beim elektrischen Feld und dem elektrischen Potential in (2.45) soll für das mikroskopische Dipolmoment der Übergang zu einer kontinuierlichen makroskopischen Beschreibung geschaffen werden. Als eine über ein Einheitsvolumen gemittelte Dipoldichte kann die makroskopische *elektrische Polarisation*

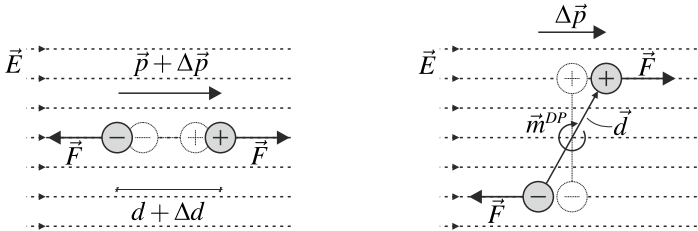
$$\vec{P} := \left\langle \sum_i \vec{p}_i \right\rangle = \frac{d\vec{p}}{dV} \quad (2.49)$$

eingeführt werden. Diese vektorielle Größe beschreibt den Zustand der gebun-

<sup>19</sup> Diese Bezeichnung erscheint unter Umständen etwas irreführend, da diese Größe nichts mit einem Drehmoment im mechanischen Sinne zu tun hat.

<sup>20</sup> Die Wirkung dieses Drehmomentes könnte man auch auf die makroskopische Skala übertragen wodurch es z. B. auch in der globalen Momentenbilanz berücksichtigt werden müsste. Ein einfaches Zahlenbeispiel von KAMLAH [98, 99] zeigt allerdings, dass dessen Einfluss im Fall der hier betrachteten PZT-Keramiken vernachlässigbar ist.

denen elektrischen Ladungen, repräsentativ für ein hinreichend groß gewähltes Volumen des betrachteten Materials.



**Abbildung 2.10:** Links: Änderung des Zustands eines Dipols infolge eines koaxial einwirkenden homogenen elektrischen Feldes. Rechts: An einem Dipol zusätzlich verursachtes Drehmoment unter der Wirkung eines nicht koaxial ausgerichteten homogenen elektrischen Feldes.

Die in diesem Abschnitt diskutierte Interaktion der Dipole mit einem elektrischen Feld auf mikroskopischer Ebene führt zwangsläufig auch zu Änderungen in der makroskopischen elektrischen Polarisation. Diese Wechselwirkung hat wiederum auch einen direkten Einfluss auf die Form des wirkenden elektrischen Feldes. Ein linearer isotroper Zusammenhang zwischen diesen beiden Größen, kann in einer makroskopischen Betrachtungsweise mit

$$\vec{P} = \kappa \vec{E} \quad (2.50)$$

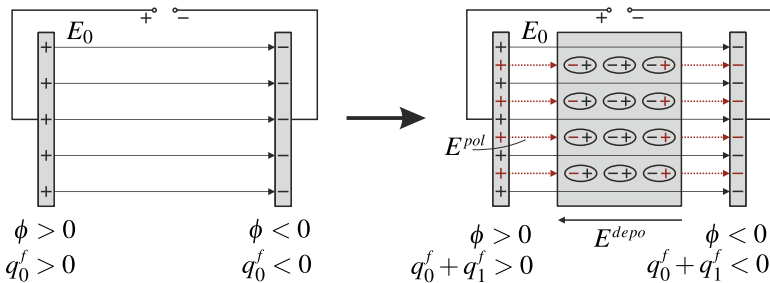
beschrieben werden. Die darin enthaltene materialspezifische Konstante  $\kappa$  wird im Allgemeinen als *dielektrische Suszeptibilität* bezeichnet. Durch sie wird die ‚Polarisierbarkeit‘ eines Materials charakterisiert und damit die Fähigkeit den makroskopischen Polarisationszustand durch das Anlegen eines elektrischen Feldes zu verändern.



### 2.3.3 Dielektrische Verschiebung

Es soll nun das Verhalten eines Dielektrikums unter dem Einfluss eines extern beaufschlagten elektrischen Feldes auf makroskopischer Skala genauer diskutiert werden.

Hierzu wird zunächst die linke Situation in Abb. 2.11 eines geladenen Plattenkondensators betrachtet. Dabei wird von einer eindimensionalen Idealisierung des Kondensators ausgegangen. Die von der Spannungsquelle zur Verfügung gestellten freie Ladungen  $q_0^f$  sind in den als Leiter angenommenen Kondensatorplatten konstant verteilt, sodass sich ein homogenes elektrisches Feld  $E_0 = q_0^f / (\epsilon_0 A)$ , innerhalb des Kondensators einstellt. Dabei entspricht  $A$  der Fläche der Platten.



**Abbildung 2.11:** Links: Homogenes elektrisches Feld in einem geladenen Plattenkondensator. Rechts: Beeinflussung des elektrischen Feldes und der Ladungsverteilungen infolge eines eingeschobenen Dielektrikums.

Im nächsten Schritt wird ein Dielektrikum in den Zwischenraum der Kondensatorplatten eingeschoben, vgl. Abb. 2.11 (rechts). Gemäß der im vorangegangenen Abschnitt diskutierten Zusammenhänge, richten sich die Dipole des Dielektrikums in die Wirkungsrichtung des anliegenden elektrischen Feldes  $E_0$  aus. Dadurch entsteht nach (2.50) eine Polarisation  $P = \kappa E_0$  im Material.

Wie aus Abb. 2.11 ersichtlich wird, kompensieren sich die gebundenen Ladungen der Dipole innerhalb des Materials gegenseitig, während an den seitlichen Grenzflächen gebundene Oberflächenladungen

$$q^b = PA \quad (2.51)$$

resultieren. Zur Kompensation dieser überschüssigen Oberflächenladungen entsteht im Dielektrikum ein dem externen Feld entgegengerichtetes elektrisches Feld  $E^{depo}$ , welches häufig auch als *Depolarisationsfeld* bezeichnet wird. Das effektiv wirkende elektrische Feld innerhalb des Dielektrikums reduziert sich damit um den Betrag des Depolarisationsfeldes. Ferner ist zu beobachten, dass sich ein zusätzliches elektrisches Feld  $E^{pol} = q^b / (\epsilon_0 A)$  in den Zwischenräumen des Dielektrikums und den Kondensatorplatten erstreckt. Dieses Feld wirkt zwischen den gebundenen Oberflächenladungen des Dielektrikums  $q^b$  und betragsmäßig gleichen, zusätzlich von der Spannungsquelle zugeführten, Ladungen an den Kondensatorplatten  $q_1^f = \pm q^b$ . Das anliegende Potential  $\phi$  an den Platten bleibt dabei jederzeit konstant.

Durch die demonstrierte Wechselwirkung von elektrischen Feldern mit dielektrischen Materialien infolge deren spezieller Ladungszustände gestaltet es sich offenbar als schwierig, die Zustände innerhalb des Materials im Allgemeinen zu beschreiben. Ein Ansatz ist, über die verursachten freien Oberflächenladungen an den Kondensatorplatten zu einer globalen Aussage über die elektrischen Ladungszustände innerhalb des Kondensators zu gelangen. Hierzu soll der elektrische ‚Fluss‘ über die Kondensatorplatten genauer betrachtet werden. Dieser Fluss kann zu

$$\Phi_E = \int_A E \, dA = \frac{q_0^f}{\epsilon_0} + \frac{q_1^f}{\epsilon_0} = E_0 A + \frac{P}{\epsilon_0} A \quad (2.52)$$

geschrieben werden. Woraus sich nach weiterem Umformen

$$\frac{\epsilon_0 \Phi_E}{A} = \epsilon_0 E_0 + P \quad \implies \quad D := \epsilon_0 E_0 + P \quad (2.53)$$

die Feldgröße  $D$  zur Beschreibung des Ladungsflusses pro Flächeneinheit ergibt. Diese Größe wird gewöhnlich als *dielektrische Verschiebung* bezeichnet.

Eine Allgemeine dreidimensionale Form ihrer Bestimmungsgleichung in (2.53) kann mit

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (2.54)$$

dargestellt werden. Wie in diesem Abschnitt gezeigt wurde, ist die dielektrische Verschiebung die entscheidende Größe zur Beschreibung von Änderungen des Ladungszustandes infolge elektrischer Felder in Dielektrika und deren Umgebung.

### 2.3.4 Elektrostatische Feldtheorie

Die allgemeinen Gesetze der Elektrodynamik sind in den sogenannten *MAXWELL-Gleichungen* zusammengefasst. Durch diese wird neben der Elektrizität auch der Magnetismus, sowie deren Wechselwirkung in einem mathematischen Rahmen beschrieben. Die darin berücksichtigten Grundgrößen werden als Felder innerhalb eines bestimmten Gebietes, sowie auf dessen Berandung, betrachtet. Die *MAXWELL-Gleichungen* umfassen in ihrer gesamten Form vier gekoppelte lineare partielle Differentialgleichungen erster Ordnung. Durch die in dieser Arbeit getroffenen Vereinfachungen einer elektrostatischen Theorie mit Vernachlässigung von magnetischen Effekten, reduzieren sich die *MAXWELL-Gleichungen* auf zwei Gleichungen in der Form

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho^f \quad \text{und} \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = \vec{0} \quad \text{in } \mathcal{B}, \quad (2.55)$$

zur Beschreibung von elektrischen Feldern und Ladungen innerhalb eines beliebigen Gebietes, vgl. auch [93]. Die erste Gleichung in (2.55) wird als *GAUSS'sches Gesetz* bezeichnet. Deren physikalische Aussage ist, dass elektrische Fremdladungen  $\rho^f$  Quellen der dielektrischen Verschiebung darstellen. Die zweite Gleichung in (2.55) ist als *FARADAY'sches Gesetz* bekannt und beinhaltet die Gesetzmäßigkeit der Wirbelfreiheit eines elektrischen Feldes. Im Zusammenhang mit dieser reduzierten Form der *MAXWELL-Gleichungen* wird häufig auch von einer *MAXWELL-FARADAY Theorie der Elektrostatik* gesprochen.

Die Forderung, dass das elektrische Feld frei von Rotationen sein soll, lässt sich durch dessen Darstellung

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi \quad (2.56)$$

als der negative Gradient des elektrischen Skalarpotentials (vgl. (2.42)) per Konstruktion erfüllen. Um basierend auf den Gleichungen (2.55)<sub>1</sub> und (2.56) ein elektrostatisches Randwertproblem zu formulieren, werden noch geeignete Randbedingungen benötigt. Als eine DIRICHLET-Randbedingung kann der Wert des elektrischen Potentials mit

$$\phi = \phi' \quad \text{auf} \quad \partial\mathcal{B}_\phi \quad (2.57)$$

direkt vorgegeben werden. Die zugehörigen NEUMANN-Randbedingungen ergeben sich zu einer Vorgabe von extern beaufschlagten elektrischen Ladungen  $q_{ext}$  an der Oberfläche. Über die lineare Abbildung

$$-q_{ext} = \vec{n} \cdot \vec{D} \quad \text{auf} \quad \partial\mathcal{B}_q \quad (2.58)$$

in Abhängigkeit der Oberflächennormale  $\vec{n}$ , lässt sich ein direkter Bezug zum dielektrischen Verschiebungsvektor herstellen.

## 2.4 Phänomenologische Stoffgesetze

In diesem Abschnitt werden konstitutive Gleichungen vorgestellt, welche die zuvor eingeführten mechanischen und elektrischen Grundgrößen verbinden. Diese Gleichungen erfüllen dabei den Zweck einer phänomenologischen Beschreibung von Effekten, wie sie in realen Materialien zu beobachten sind. Bei den hier gewählten Formen dieser Materialgesetze soll stets ein Bezug zu Experimenten und den daraus ermittelbaren Materialkennwerten hergestellt werden. Die physikalischen Ursachen der diskutierten Kopplungseffekte sind allerdings nicht Gegenstand dieses Kapitels. Zudem werden die hier eingeführten Gleichungen auch in einer reduzierten Vektor-Matrix-Notation von Tensoren dargestellt.

### 2.4.1 Elastizität

Als *Elastizität* wird im Allgemeinen die Art des Zusammenhangs zwischen mechanischer Spannung und den Verzerrungen bezeichnet. Dabei ist charakteristisch für ein elastisches Materialverhalten, dass die im Material gespeicherte potentielle Energie nach einem Spannungsrückgang wieder vollständig zurückgewonnen wird. Ist der benannte Zusammenhang linear spricht man im eindimensionalen Fall von einem HOOKE'schen Gesetz. In einer Allgemeinen multiaxialen Darstellung lässt sich dieses schreiben zu

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \text{bzw.} \quad \sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}. \quad (2.59)$$

Darin enthalten ist der *Elastizitätstensor* vierter Stufe

$$\mathbb{C} = \Lambda \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + 2\mu \mathbb{I} \quad \text{bzw.} \quad C_{ijkl} = \Lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (2.60)$$

in Abhängigkeit von den beiden LAMÉ-Konstanten  $\Lambda$  und  $\mu$  zur Beschreibung eines isotropen Materialverhaltens. Des Weiteren finden sich in (2.60) die symmetrischen Einheitstensoren zweiter Stufe  $\mathbf{I} = \delta_{ij}$ , sowie vierter Stufe  $\mathbb{I} = I_{ijkl} = 1/2(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$ . Die LAMÉ-Konstanten

$$\Lambda = \frac{Y\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)} \quad \text{und} \quad \mu = \frac{Y}{2(1+\nu)} \quad (2.61)$$

lassen sich in Abhängigkeit des *Elastizitätsmoduls*<sup>21</sup>  $Y$  und der *Querkontraktionszahl*  $\nu$  darstellen. Diese Kennwerte und der Schubmodul  $\mu$  können experimentell aus Materialversuchen bestimmt werden.

<sup>21</sup> Das hier gewählte Formelzeichen  $Y$  ist eher im angelsächsischen Raum gebräuchlich und steht für 'YOUNG's modul'. Die gewohnte Darstellung mit  $E$  wurde hier vermieden, damit keine Verwechslungsgefahr mit dem elektrischen Feld besteht.

Unter Ausnutzung der in Abschn. 2.2 diskutierten Symmetrien des Spannungs- und Verzerrungstensors, lässt sich das Elastizitätsgesetz in (2.59) in einer reduzierten Vektor-Matrix-Notation kompakt schreiben zu

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}$$

mit  $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_{11} \ \sigma_{22} \ \sigma_{33} \ \sigma_{12} \ \sigma_{23} \ \sigma_{13}]^T$  (2.62)

und  $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_{11} \ \varepsilon_{22} \ \varepsilon_{33} \ 2\varepsilon_{12} \ 2\varepsilon_{23} \ 2\varepsilon_{13}]^T$ .

Die darin enthaltene Elastizitätsmatrix

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \Lambda + 2\mu & \Lambda & \Lambda & 0 & 0 & 0 \\ \Lambda & \Lambda + 2\mu & \Lambda & 0 & 0 & 0 \\ \Lambda & \Lambda & \Lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \quad (2.63)$$

kann dann in Abhängigkeit der LAMÉ-Konstanten dargestellt werden. Eine sehr kompakte Darstellung in Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls und der Querkontraktionszahl ergibt sich in der reduzierten Notation für die Inverse

$$\mathbf{C}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{Y} & -\frac{\nu}{Y} & -\frac{\nu}{Y} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{Y} & \frac{1}{Y} & -\frac{\nu}{Y} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{Y} & -\frac{\nu}{Y} & \frac{1}{Y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{Y} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{Y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{Y} \end{bmatrix} \quad (2.64)$$

der Elastizitätsmatrix, welche häufig auch als Nachgiebigkeitsmatrix bezeichnet wird.

## 2.4.2 Elastizität höherer Ordnung

Ähnlich zur bereits diskutierten linearen Elastizität erster Ordnung, wird auch bei der *Elastizität höherer Ordnung* von einem linearen Zusammenhang zwischen den Spannungen höherer Ordnung und den Verzerrungsgradienten ausgegangen. Sinngemäß kann dann ein Elastizitätsgesetz zu

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbb{G} \cdot \cdot \boldsymbol{\eta} \quad \text{bzw.} \quad \tau_{ijk} = G_{ijklmn} \eta_{lmn} \quad (2.65)$$

formuliert werden. Der darin enthaltene sechsstufige *Elastizitätstensor höherer Ordnung* wird unter Annahme isotropen Materialverhaltens im allgemeinsten Fall durch 15 unabhängige Parameter  $a_1$  bis  $a_{15}$  beschrieben. Um die Anzahl der Materialparameter zu reduzieren können gewisse Symmetriebedingungen ausgenutzt werden. Durch Annahme eines Potentialcharakters<sup>22</sup> des Stoffgesetzes in (2.65) kann von der Symmetrie  $G_{ijklmn} = G_{lmnij k}$  ausgegangen werden. Des Weiteren kann durch die Symmetrieeigenschaften des Verzerrungsgradiententensors  $G_{ijklmn} = G_{ijkmln}$  angenommen werden. Die Anzahl der unabhängigen Materialparameter lässt sich dann auf fünf reduzieren und die Komponenten des Elastizitätstensors können mit

$$\begin{aligned} G_{ijklmn} = & a_1 (\delta_{ij} \delta_{kl} \delta_{mn} + \delta_{in} \delta_{jk} \delta_{lm} + \delta_{ij} \delta_{km} \delta_{ln} + \delta_{ik} \delta_{jn} \delta_{lm}) \\ & + a_3 \delta_{ij} \delta_{kn} \delta_{lm} \\ & + a_4 (\delta_{ik} \delta_{jl} \delta_{mn} + \delta_{im} \delta_{jk} \delta_{ln} + \delta_{ik} \delta_{jm} \delta_{ln} + \delta_{il} \delta_{jk} \delta_{mn}) \\ & + a_8 (\delta_{il} \delta_{jm} \delta_{kn} + \delta_{im} \delta_{jl} \delta_{kn}) \\ & + a_9 (\delta_{il} \delta_{jn} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{jn} \delta_{kl} + \delta_{in} \delta_{jl} \delta_{km} + \delta_{in} \delta_{jm} \delta_{kl}) \end{aligned} \quad (2.66)$$

angegeben werden, vgl. [40, 100, 101].

<sup>22</sup> Häufig auch als *Hyperelastizität* bezeichnet.

Ein weiter vereinfachtes Elastizitätsgesetz für eine Verzerrungsgradiententheorie wird von ALTAN und AIFANTIS [102, 103] vorgeschlagen. Darin werden die Materialparameter  $a_1 = a_4 = a_9 = 0$  gesetzt und es resultiert der reduzierte Ausdruck

$$G_{ijklmn} = a_3 \delta_{ij} \delta_{kn} \delta_{lm} + a_8 (\delta_{il} \delta_{jm} \delta_{kn} + \delta_{im} \delta_{jl} \delta_{kn}) \quad (2.67)$$

der Komponenten des sechsstufigen Materialtensor in (2.66), wobei die einzig verbliebenen Materialparameter zu  $a_3 = \Lambda l_e^2$  und  $a_8 = \mu l_e^2$  angenommen werden<sup>23</sup>. In deren Ausdrücke werden die LAMÉ-Konstanten der klassischen Elastizitätstheorie durch das Quadrat eines *internen Längenparameters*  $l_e$  gewichtet. Durch diesen Längenparameter kann der Größeneffekt, welcher in der Verzerrungsgradiententheorie beinhaltet ist, gesteuert werden. Für  $l_e \rightarrow 0$  wird dieser Größeneffekt verschwindend klein und der Übergang zur gewöhnlichen Elastizitätstheorie erster Ordnung ist hergestellt. Je größer der Längenparameter gewählt wird, desto stärker macht sich der Größeneffekt durch eine zusätzliche Versteifung bemerkbar. Eine experimentelle Bestimmung dieses Materialparameters gestaltet sich als äußerst schwierig. Eine pragmatische Herangehensweise ist, einen Versuch mehrfach mit unterschiedlichen Probenabmessungen durchzuführen und den Längenparameter des Modells an die gewonnenen experimentellen Daten anzupassen. Experimentelle Untersuchungen zu Größeneffekten in der Elastizitätstheorie werden u. a. von LAM et al. [105] sowie LIEBOLD und MÜLLER [106] durchgeführt.

In einer reduzierten Vektor-Matrix-Notation kann das Elastizitätsgesetz in (2.65) zu

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{G} \boldsymbol{\eta}$$

$$\text{mit } \boldsymbol{\tau} = [\tau_{111} \ \tau_{221} \ \tau_{331} \ \tau_{122} \ \tau_{133} \ | \ \tau_{222} \ \tau_{112} \ \tau_{332} \ \tau_{121} \ \tau_{233} \ | \ \tau_{333} \ \tau_{113} \ \tau_{223} \ \tau_{131} \ \tau_{232} \ | \ \tau_{231} \ \tau_{132} \ \tau_{123}]^T \quad (2.68)$$

$$\text{und } \boldsymbol{\eta} = [\eta_{111} \ \eta_{221} \ \eta_{331} \ 2\eta_{122} \ 2\eta_{133} \ | \ \eta_{222} \ \eta_{112} \ \eta_{332} \ 2\eta_{121} \ 2\eta_{233} \ | \ \eta_{333} \ \eta_{113} \ \eta_{223} \ 2\eta_{131} \ 2\eta_{232} \ | \ 2\eta_{231} \ 2\eta_{132} \ 2\eta_{123}]^T$$

---

<sup>23</sup> Von REIHER et al. [104] wird ein Modell vorgeschlagen, in dem die Komponenten des Materialtensors nur durch einen Materialparameter beschrieben werden.



geschrieben werden. Die Gradientenelastizitätsmatrix

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{0}_{5 \times 5} & \mathbf{0}_{5 \times 5} & \mathbf{0}_{5 \times 3} \\ \mathbf{0}_{5 \times 5} & \mathbf{a}_1 & \mathbf{0}_{5 \times 5} & \mathbf{0}_{5 \times 3} \\ \mathbf{0}_{5 \times 5} & \mathbf{0}_{5 \times 5} & \mathbf{a}_1 & \mathbf{0}_{5 \times 3} \\ \mathbf{0}_{3 \times 5} & \mathbf{0}_{3 \times 5} & \mathbf{0}_{3 \times 5} & \mathbf{a}_2 \end{bmatrix} \quad (2.69)$$

in (2.68) mit den darin enthaltenen Teilmatrizen

$$\mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} 4a_1+a_3+4a_4+2a_8+4a_9 & 2a_1+a_3 & 2a_1+a_3 & a_1+2a_4 & a_1+2a_4 \\ 2a_1+a_3 & a_3+2a_8 & a_3 & a_1+2a_9 & a_1 \\ 2a_1+a_3 & a_3 & a_3+2a_8 & a_1 & a_1+2a_9 \\ a_1+2a_4 & a_1+2a_9 & a_1 & a_4+a_8+a_9 & a_4 \\ a_1+2a_4 & a_1 & a_1+2a_9 & a_4 & a_4+a_8+a_9 \end{bmatrix} \quad (2.70)$$

$$\text{und } \mathbf{a}_2 = \begin{bmatrix} a_8 & a_9 & a_9 \\ a_9 & a_8 & a_9 \\ a_9 & a_9 & a_8 \end{bmatrix} \quad (2.71)$$

ist dabei gültig für beide Komponentendarstellungen in (2.66) und (2.67).

### 2.4.3 Dielektrizität

Als *Dielektrizität* oder auch dielektrische Leitfähigkeit wird die Polarisationsfähigkeit eines Materials infolge der Wirkung elektrischer Felder bezeichnet. In Abschn. 2.3.2 in Gleichung (2.50) wurde bereits der lineare isotrope Zusammenhang der elektrischen Polarisation und der elektrischen Feldstärke eingeführt. In einer allgemeinen anisotropen Darstellung kann diese Beziehung mit

$$\vec{P} = \boldsymbol{\kappa} \cdot \vec{E} \quad (2.72)$$

angegeben werden, wobei die Konstitution hier über den zweistufigen Suszeptibilitätstensor  $\boldsymbol{\kappa}$  beschrieben wird. Dessen Komponenten lassen sich sehr einfach experimentell bestimmen. Wie in Abschn. 2.3.3 gezeigt wurde, beschränkt sich die Gültigkeit von (2.72) auf Bereiche, welche von einem linear-dielektrischen Material eingenommen werden. Für eine allgemeinere Beschreibung im Rahmen der in Abschn. 2.3.4 eingeführten elektrostatischen Feldtheorie, welche sowohl dielektrische Materialien als auch deren Umgebung betrachtet, wird ein Stoffgesetz in Abhängigkeit von der dielektrischen Verschiebung benötigt. Durch Einsetzen der Beziehung in (2.72) in die Definition der dielektrischen Verschiebung in (2.54), ergibt sich

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \vec{E} = (\epsilon_0 \mathbf{I} + \boldsymbol{\kappa}) \cdot \vec{E}, \quad (2.73)$$

woraus das Dielektrizitätsgesetz

$$\vec{D} = \boldsymbol{\epsilon} \cdot \vec{E} \quad \text{bzw.} \quad D_i = \epsilon_{ij} E_j \quad (2.74)$$

in einer allgemeinen Darstellung formuliert werden kann. Darin enthalten ist der *Permittivitätstensor*

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_0 + \kappa & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_0 + \kappa & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_0 + \kappa \end{bmatrix} \quad (2.75)$$

gültig für isotrope Materialeigenschaften.

## 2.4.4 Piezoelektrizität

Als erstes elektro-mechanisches Koppelphänomen soll nun der *piezoelektrische Effekt* eingeführt werden. Diesem wird die phänomenologische Beobachtung einer Änderung des Polarisationszustandes in einem Material infolge einer aufgetragenen mechanischen Spannung zugeschrieben. Eine mathematische Beschreibung

des *direkten* piezoelektrischen Effektes im Rahmen einer linearen Theorie ist mit

$$\vec{D} = \mathfrak{d} : \boldsymbol{\sigma} \quad \text{bzw.} \quad D_k = d_{kij} \sigma_{ij}. \quad (2.76)$$

gegeben. Der Zusammenhang des dielektrischen Verschiebungsvektors und des Spannungstensors wird durch den dreistufigen *Piezoelektrizitätstensor*  $\mathfrak{d}$  beschrieben. Durch denselben Tensor kann auch der sogenannte *indirekte* piezoelektrische Effekt dargestellt werden, welcher die lineare Kopplung

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathfrak{d}^T \cdot \vec{E} \quad \text{bzw.} \quad \varepsilon_{ij} = d_{kij} E_k \quad (2.77)$$

des Verzerrungstensors mit dem elektrischen Feldvektor repräsentiert. Die Beschreibung beider Kopplungen mit demselben Materialtensor motiviert sich aus der experimentellen Beobachtung, dass in der Regel bei Materialien mit piezoelektrischen Eigenschaften immer sowohl der direkte als auch der indirekte Effekt auftritt.

Eine Darstellung der beiden Effekte in Vektor-Matrix-Notation

$$\mathbf{D} = \mathbf{d} \boldsymbol{\sigma} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{d}^T \mathbf{E}, \quad (2.78)$$

lässt sich mithilfe des Piezotensor

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} d_{111} & d_{122} & d_{133} & 2d_{112} & 2d_{123} & 2d_{113} \\ d_{211} & d_{122} & d_{233} & 2d_{212} & 2d_{223} & 2d_{213} \\ d_{311} & d_{322} & d_{333} & 2d_{312} & 2d_{323} & 2d_{313} \end{bmatrix} \quad (2.79)$$

in einer allgemeinen Form angeben. Die häufig auftretenden anisotropen Eigenschaften dieses Tensors werden im weiteren Verlauf dieser Arbeit noch näher betrachtet.

### 2.4.5 Flexoelektrizität

Ein weiterer elektro-mechanischer Kopplungseffekt, welcher in dieser Arbeit betrachtet wird, stellt der sogenannte *flexoelektrische Effekt* dar. Hierbei handelt es sich neben der Gradientenelastizität in Abschn. 2.4.2 um einen weiteren Effekt höherer Ordnung, bei dem gradientenbehaftete Feldgrößen und damit Größeneffekte eine Rolle spielen. Der *direkte* flexoelektrische Effekt lässt sich als eine lineare Kopplung

$$\vec{D} = \mathfrak{m} : \boldsymbol{\eta} \quad \text{bzw.} \quad D_l = m_{lijk} \eta_{ijk} \quad (2.80)$$

des dielektrischen Verschiebungsvektors mit dem Verzerrungsgradiententensor beschreiben, wobei  $\mathfrak{m}$  der vierstufige *flexoelektrische Tensor* darstellt. Ähnlich zum piezoelektrischen Tensor, kann mit dem flexoelektrischen Tensor ein weiterer Kopplungseffekt abgebildet werden. Das als *indirekter* flexoelektrischer Effekt bezeichnete Phänomen kann im Rahmen der in dieser Arbeit gewählten Notation als eine Kopplung

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{\nabla} = \mathfrak{m}^T : \nabla \vec{E} \quad \text{bzw.} \quad T_{ij} = \tau_{ijk,k} = m_{lijk} E_{l,k} \quad (2.81)$$

des totalen Spannungstensors mit dem Gradienten des elektrischen Feldes dargestellt werden. Mit den bekannten Zusammenhängen aus Abschn. 2.2.3 kann dieser auch alternativ mit

$$\boldsymbol{\tau} = \mathfrak{m}^T \cdot \vec{E} \quad \text{bzw.} \quad \tau_{ijk} = m_{lijk} E_l \quad (2.82)$$

in Abhängigkeit vom Spannungstensor höherer Ordnung und dem elektrischen Feldvektor beschrieben werden. Die Komponenten des flexoelektrischen Tensors

$$m_{lijk} = \mu_{12} \delta_{lk} \delta_{ij} + \mu_{44} (\delta_{li} \delta_{jk} + \delta_{lj} \delta_{ik}) \quad (2.83)$$

werden im Fall einer isotropen Erscheinung des Effektes in Abhängigkeit von den zwei Materialparametern  $\mu_{12}$  und  $\mu_{44}$  in kompakter Art und Weise eingeführt.

Wie bei allen anderen Stoffgesetzen soll auch im Falle der Flexoelektrizität eine reduzierte Vektor-Matrix-Notation angegeben werden. Die in dieser Arbeit verwendete Notation

$$\mathbf{D} = \mathbf{m} \boldsymbol{\eta} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\tau} = \mathbf{m}^T \mathbf{E} \quad (2.84)$$

beinhaltet die Darstellung des flexoelektrischen Tensors

$$\mathbf{m} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu} & \mathbf{0}_{1 \times 5} & \mathbf{0}_{1 \times 5} & \mathbf{0}_{1 \times 3} \\ \mathbf{0}_{1 \times 5} & \boldsymbol{\mu} & \mathbf{0}_{1 \times 5} & \mathbf{0}_{1 \times 3} \\ \mathbf{0}_{1 \times 5} & \mathbf{0}_{1 \times 5} & \boldsymbol{\mu} & \mathbf{0}_{1 \times 3} \end{bmatrix} \quad (2.85)$$

mit den darin aufgeführten Vektoren

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_{12} + 2\mu_{44} & \mu_{12} & \mu_{12} & \mu_{44} & \mu_{44} \end{bmatrix}, \quad (2.86)$$

wobei die Anteile  $\mu_{12} + 2\mu_{44}$  dem Longitudinaleffekt,  $\mu_{12}$  dem Transversaleffekt und  $\mu_{44}$  dem Schubeffekt zugeordnet werden können.

## 2.5 Thermodynamik des elektro-mechanischen Kontinuums

In diesem Abschnitt sollen thermodynamische Gesichtspunkte mit in die hier vorgestellten Modellierungsansätze einfließen. Aus den Bilanzsätzen der Thermodynamik ergibt sich ein geeigneter Rahmen, um die in ihrer phänomenologischen Beschreibung zuvor eingeführten Materialgesetze in eine vereinheitlichte Theorie zusammenzuführen. Das Ziel dabei ist, vollumfängliche Konstitutivgleichungen einer gekoppelten nicht-lokalen elektro-mechanischen Theorie zu gewinnen. Grundlagen zur Thermodynamik können aus [78, 107, 108] entnommen werden. Ein thermodynamischer Rahmen für Verzerrungsgradiententheorien wird von POLIZZOTTO [109] präsentiert.

## 2.5.1 Energieformen

Zunächst soll der Begriff der Energie im Rahmen der hier behandelten elektro-mechanischen Problemstellungen diskutiert werden. Nach FALK und RUPPEL [108] ist jede Energieform einem Paar bestehend aus einer *extensiven*  $X$  und einer *intensiven* Zustandsgröße  $\xi$  in der Form

$$dE = \xi dX \tag{2.87}$$

zugeordnet<sup>24</sup>. Ein solches Paar wird als Arbeits- bzw. Energiekonjugiert bezeichnet. Aus (2.87) wird ersichtlich, dass die Änderung der Energie  $dE$  durch die Änderung der extensiven Größe  $dX$  bestimmt wird. Extensive Größen werden häufig als *mengenartige* Größen bezeichnet, was sich in deren Eigenschaft begründet, dass sie sich mit einer Änderung der Größe des durch sie beschriebenen physikalischen Systems auch ändern. Systemeigene intensive Größen bleiben hingegen in ihrem Wert dabei unverändert. Ein anschauliches Beispiel bilden die extensive Größe des Volumens  $V$  und die intensive Größe des Druckes  $p$ : Vereintigt man zwei Volumen  $V$  mit dem Druck  $p$ , besitzt danach das Gesamtvolumen den Wert  $2V$  und den unveränderten Druck  $p$ . Im Fall der elektrischen Energie funktioniert diese Anschauung identisch: Zwei Ladungen  $q$  mit dem Potential  $\phi$  besitzen zusammen die Ladung  $2q$ , aber weiterhin das Potential  $\phi$ . Im Fall der mechanischen Verschiebungsenergie ist die Situation nicht derartig intuitiv. Das Paar der extensiven Verschiebung  $\vec{u}$  und der intensiven Kraft  $\vec{F}$ , wurde indirekt bereits in selbiger Charakteristik in der Elementarleistung in (2.21) eingeführt, wobei die Verschiebung keine Mengenartigkeit zugesprochen werden kann. Die Motivation deren extensiven Charakters zeigt sich nur unter Einbeziehung eines Gravitationsfeldes in dem bei einer Verschiebung einer Masse Energie aufgewendet werden muss.

---

<sup>24</sup> Nach FALK und RUPPEL [108] existiert kein Beweis für die Allgemeingültigkeit von (2.87), vielmehr liegt sie darin begründet, dass diese Annahme auf unzählige Einzelprobleme bisher ausnahmslos zutraf.

Für ein vereinfachtes elektro-mechanisches Punktmodell kann eine Änderung des Energiezustandes durch

$$dE = \vec{F} \cdot d\vec{u} + \phi dq \quad (2.88)$$

beschrieben werden<sup>25</sup>. Überträgt man diese Eigenschaften sinngemäß auf das in dieser Arbeit betrachtete kontinuierliche System mit nicht-lokalen Eigenschaften, ergibt sich eine Änderung der inneren elektro-mechanischen spezifischen Energiedichte zu

$$de^{em} = \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\epsilon} + \boldsymbol{\tau} \cdot d\boldsymbol{\eta} + \vec{E} \cdot d\vec{D}, \quad (2.89)$$

wobei von dieser Form der mechanischen Anteile bereits in der Elementarleistung in (2.21) ausgegangen wurde. An dieser Stelle sei erwähnt, dass die innere Energie eines Systems in einem Gleichgewichtszustand immer sein Minimum einnimmt. Daraus lässt sich ableiten, dass die innere Energie eines thermodynamischen Systems eine konvexe Struktur besitzt.

## 2.5.2 Energiebilanz

Die häufig als *erster Hauptsatz der Thermodynamik* bezeichnete Energiebilanz besagt, dass in einem abgeschlossenen System die Gesamtenergie erhalten bleibt. Unter quasi-statischen Bedingungen lässt sich die Gesamtenergie mit der inneren Energiedichte  $e$  beschreiben, welche sich aus der zu- bzw. abgeführten Wärme und der am System verrichteten Arbeit (vgl. (2.89)) ergibt. Aus der Forderung der Energieerhaltung ergibt sich die Energiebilanz in lokaler Form

$$\rho \dot{e} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}} + \vec{E} \cdot \dot{\vec{D}} - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + \rho r \quad (2.90)$$

mit der Materialdichte  $\rho$ , der Dichte der Wärmezufuhr  $r$  und dem Wärmefluss  $\vec{q}$ .

<sup>25</sup> Die Summe verschiedener Energieformen wird auch GIBBS'sche Fundamentalform des Systems genannt [108].

### 2.5.3 Entropiebilanz

Die thermodynamische Zustandsgröße Entropie  $s$  ist ein qualitatives Maß für die Zunahme an Unordnung und damit die Zunahme möglicher Mikrozustände in einem makroskopischen physikalischen System während eines Prozesses. Der *zweite Hauptsatz der Thermodynamik* besagt, dass die zeitliche Änderung der Entropie innerhalb eines betrachteten Volumens nicht kleiner als die Geschwindigkeit der Entropiezufuhr sein kann. Mathematisch präziser ausgedrückt ergibt sich hierfür die Ungleichung

$$\rho \dot{s} \geq \rho \frac{r}{\theta} - \vec{\nabla} \cdot \left( \frac{\vec{q}}{\theta} \right), \quad (2.91)$$

wobei  $\theta$  die absolute Temperatur symbolisiert. Im nächsten Schritt wird die Energiebilanz in (2.90) nach  $\rho r$  umgeformt und in (2.91) eingesetzt. Durch Verwendung der Identität  $\theta \vec{\nabla} \cdot \left( \frac{\vec{q}}{\theta} \right) = \vec{\nabla} \cdot \vec{q} - \frac{\vec{q}}{\theta} \cdot \nabla \theta$  ergibt sich die Entropiebilanz zu

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\eta}} + \vec{E} \cdot \dot{\vec{D}} - \rho(\dot{e} - s\dot{\theta}) - \frac{\vec{q}}{\theta} \cdot \nabla \theta \geq 0. \quad (2.92)$$

Durch eine LEGENDRE-Transformation der inneren Energiedichte  $e(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, s)$  bezüglich der Entropie  $s$ , resultiert die Form

$$\psi = e - s\theta \quad \text{und} \quad \dot{\psi} = \dot{e} - s\dot{\theta} - \dot{s}\theta \quad (2.93)$$

der *freien HELMHOLTZ-Energiedichte*  $\psi(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, \theta)$ , sowie deren zeitliche Ableitung. Wird der Ausdruck in (2.93)<sub>2</sub> in die Ungleichung in (2.92) eingesetzt, erhält man mit

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\eta}} + \vec{E} \cdot \dot{\vec{D}} - \rho(\dot{\psi} + s\dot{\theta}) - \frac{\vec{q}}{\theta} \cdot \nabla \theta \geq 0 \quad (2.94)$$

die lokale Form der sogenannten CLAUSIUS-DUHEM-Ungleichung (*CDU*). Die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit beschränken sich auf Problemstellungen in denen von isothermen Prozesse ( $\dot{\theta} = 0$ ) und von uniformen Temperaturverteilungen innerhalb der betrachteten Festkörper ( $\nabla \theta = 0$ ) ausgegangen werden



kann. Dadurch reduziert sich (2.94) auf die Form

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\eta}} + \vec{E} \cdot \dot{\vec{D}} - \dot{\Psi} \geq 0, \quad (2.95)$$

wobei mit  $\Psi = \rho \psi$  die *volumenspezifische* freie HELMHOLTZ-Energie dargestellt wird. Bei der Wahl von geeigneten konstitutiven Gleichungen stellt die Erfüllung der CLAUSIUS-DUHEM-Ungleichung in der Materialmodellierung eine fundamentale Anforderung zur Erfüllung des ersten und zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik<sup>26</sup> dar.

## 2.5.4 Thermodynamische Potentialfunktionen

In diesem Abschnitt wird für eine elektro-mechanische Feldtheorie die Form geeigneter konstitutiver Gleichungen ermittelt, welche der CLAUSIUS-DUHEM-Ungleichung in (2.95) genügen. Im Zuge dessen, werden duale thermodynamische Potentialfunktionen eingeführt, woraus sich alternative physikalisch äquivalente Darstellungen der Konstitutivgleichungen ergeben. Eine Diskussion über die Form der zugehörigen Energielandschaften der einzelnen Potentiale bildet zudem eine Grundlage für eine Bewertung der mathematischen Struktur zugrundeliegender Randwertprobleme im Rahmen dieser Arbeit. Eine ausführliche Darstellung thermodynamischer Potentialfunktionen im Rahmen einer elektro-mechanischen Theorie findet sich in [110–112].

### 2.5.4.1 Freie Helmholtz-Energie

Die in (2.95) bereits eingeführte freie HELMHOLTZ-Energie  $\Psi(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D})$  ist eine Funktion in Abhängigkeit der Verzerrung, des Verzerrungsgradienten und der dielektrischen Verschiebung. Diese Größen stellen somit in dieser Energieform

<sup>26</sup> Mit Erfüllung der Hauptsätze wird allerdings nur ein Mindestmaß an physikalischer Plausibilität sichergestellt.

den Satz an unabhängigen Variablen dar. Deren zeitliche Ableitung lässt sich somit schreiben als

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta}} \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{D}} \cdot \dot{\vec{D}}. \quad (2.96)$$

Durch Einsetzen von (2.96) in die *CDU* in (2.95) ergibt sich die Darstellung

$$\left( \boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \left( \boldsymbol{\tau} - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta}} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}} + \left( \vec{E} - \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{D}} \right) \cdot \dot{\vec{D}} \geq 0, \quad (2.97)$$

woraus sich als hinreichenden Bedingungen zur Erfüllung der *CDU* die Beziehungen

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad \boldsymbol{\tau} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta}} \quad \text{und} \quad \vec{E} = \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{D}} \quad (2.98)$$

ableiten lassen. Die Relationen in (2.98) stellen die Konstitutivgleichungen zur Beschreibung der abhängigen Variablen der mechanischen Spannungen erster, sowie zweiter Ordnung und des elektrischen Feldes in einer freien HELMHOLTZ-Energieform dar. Diese zeichnet sich dadurch aus, dass die extensiven Zustandsgrößen als unabhängige und die intensiven Zustandsgrößen als abhängige Variablen erscheinen. Aufgrund dieser Eigenschaft wird die Darstellung der konstitutiven Gleichungen in (2.98) häufig auch als *kanonische Form* bezeichnet [30]. Durch die Vernachlässigung der thermischen Effekte, besitzt die freie HELMHOLTZ-Energie dieselbe konvexe Struktur wie die innere Energie in Abschn. 2.5.2 und nimmt somit in einem Gleichgewichtszustand ein Minimum bzgl. all ihrer unabhängigen Variablen ein.

#### 2.5.4.2 Elektrische Gibbs-Energie

Durch einen Variablentausch der elektrischen Feldgrößen mittels der partiellen LEGENDRE-Transformation

$$G_2(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{E}) = \Psi - \vec{E} \cdot \vec{D} \quad (2.99)$$

motiviert sich die Form der sogenannten *elektrischen GIBBS-Energie*. Die zeitliche Ableitung der freien HELMHOLTZ-Energie lässt sich damit schreiben zu

$$\begin{aligned} \dot{\Psi} &= \dot{G}_2 + \vec{E} \cdot \dot{\vec{D}} + \dot{\vec{E}} \cdot \vec{D} \\ \text{mit} \quad \dot{G}_2 &= \frac{\partial G_2}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial G_2}{\partial \boldsymbol{\eta}} \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}} + \frac{\partial G_2}{\partial \vec{E}} \cdot \dot{\vec{E}}. \end{aligned} \quad (2.100)$$

Wird dieser Ausdruck in die *CDU* in (2.95) eingesetzt, resultiert die Form

$$\left( \boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial G_2}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \left( \boldsymbol{\tau} - \frac{\partial G_2}{\partial \boldsymbol{\eta}} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}} + \left( -\vec{D} - \frac{\partial G_2}{\partial \vec{E}} \right) \cdot \dot{\vec{E}} \geq 0, \quad (2.101)$$

woraus die konstitutiven Gleichungen

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial G_2}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad \boldsymbol{\tau} = \frac{\partial G_2}{\partial \boldsymbol{\eta}} \quad \text{und} \quad \vec{D} = -\frac{\partial G_2}{\partial \vec{E}} \quad (2.102)$$

in einer elektrischen GIBBS-Energie Form gewonnen werden können. Die Verwendung der Darstellung in (2.102) erweist sich bei einem Blick in die Literatur als sehr populär, was sicherlich durch die vorhandene mathematische Kompaktheit des resultierenden Randwertproblems begründet ist. Unter Beachtung der zuvor in diesem Kapitel diskutierten Zusammenhänge zeigt sich, dass in (2.102) die unabhängigen Zustandsvariablen den Gradientenfeldern (vgl. (2.12), (2.13) und (2.56)) und die abhängigen Zustandsvariablen den zu bilanzierenden Feldgrößen (vgl. (2.33) und (2.55)) entsprechen. Nachteilige Eigenschaften der elektrischen GIBBS-Energie zeigen sich allerdings bei der Betrachtung der Form der zugehörigen Energielandschaft. Durch den Variablentausch der elektrischen Größen im Vergleich zur freien HELMHOLTZ-Energie (vgl. (2.99)) verliert die Potentialfunktion die konvexen Eigenschaften bzgl. dieser Variablen und bildet insgesamt eine Sattelpunktstruktur aus. In einem Gleichgewichtszustand nimmt die elektrische GIBBS-Energie somit ein Minimum bzgl. der mechanischen Variablen  $\boldsymbol{\varepsilon}$  und  $\boldsymbol{\eta}$ , und ein Maximum bzgl. des elektrischen Feldes  $\vec{E}$  ein.

### 2.5.4.3 Freie Gibbs-Energie

Ausgehend von der zuvor eingeführten elektrischen GIBBS-Energie, lässt sich mit zusätzlichen Variablenvertauschungen in den mechanischen Feldgrößen mittels LEGENDRE-Transformation die *freie* GIBBS-Energie

$$G(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}, \vec{E}) = G_2 - \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\eta} = \Psi - \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\eta} - \vec{E} \cdot \vec{D} \quad (2.103)$$

herleiten. Mit der daraus resultierenden Darstellung der zeitlichen Ableitung

$$\begin{aligned} \dot{\Psi} &= \dot{G} + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\eta}} + \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\eta} + \vec{E} \cdot \dot{\vec{D}} + \vec{E} \cdot \vec{D} \\ \text{mit} \quad \dot{G} &= \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\tau}} : \dot{\boldsymbol{\tau}} + \frac{\partial G}{\partial \vec{E}} \cdot \dot{\vec{E}} \end{aligned} \quad (2.104)$$

und wiederum dem Einsetzen in die CDU in (2.95)

$$\left(-\boldsymbol{\varepsilon} - \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\sigma}}\right) : \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \left(-\boldsymbol{\eta} - \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\tau}}\right) : \dot{\boldsymbol{\tau}} + \left(-\vec{D} - \frac{\partial G}{\partial \vec{E}}\right) \cdot \dot{\vec{E}} \geq 0 \quad (2.105)$$

ergibt sich die Form der konstitutiven Gleichungen zu

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -\frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\sigma}}, \quad \boldsymbol{\eta} = -\frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\tau}} \quad \text{und} \quad \vec{D} = -\frac{\partial G}{\partial \vec{E}}. \quad (2.106)$$

Diese Darstellung auf der Basis der freien GIBBS-Energie mit den intensiven Zustandsgrößen als unabhängigen Variablen und den extensiven Zustandsgrößen als abhängigen Variablen erweist sich insbesondere für einen Vergleich mit experimentellen Beobachtungen als vorteilhaft. Die als Wirkung interpretierbaren Änderungen in den den extensiven Größen  $\boldsymbol{\varepsilon}$ ,  $\boldsymbol{\eta}$  und  $\vec{D}$  lassen sich hierbei anschaulich in verschiedene Anteile aufteilen, jeweils verursacht durch die thermodynamischen Kraftgrößen  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\boldsymbol{\tau}$  und  $\vec{E}$ . Durch den vollständigen Variablentausch im Vergleich zur freien HELMHOLTZ-Energie in (2.103) wird die ursprüngliche rein konvexe Struktur zu einer rein konkaven Energielandschaft, wodurch sich ein Gleichgewichtszustand zu einem Maximum der freien GIBBS-Energie ergibt.

## 2.5.5 Thermodynamik der klassischen Piezoelektrizität

Um die phänomenologischen Materialgesetze aus Abschn. 2.4 in den eingeführten thermodynamischen Rahmen einbetten zu können, müssen Annahmen über die Konstruktion der zuvor eingeführten Potentialfunktionen getroffen werden. Hierbei soll sich aber zunächst auf eine Materialklasse beschränkt werden, bei der jegliche nicht-lokale Effekte höherer Ordnung unberücksichtigt bleiben. Im Rahmen dieser Arbeit, ist dann immer von der *klassischen Piezoelektrizität* die Rede. Ausgangspunkt für eine fallspezifische Bestimmung der konstitutiven Gleichungen soll die freie GIBBS-Energie sein, welche in der quadratischen Form

$$G(\boldsymbol{\sigma}, \vec{E}) = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\mathbb{C}^E)^{-1} : \boldsymbol{\sigma} - \vec{E} \cdot \mathfrak{d} : \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^\sigma \cdot \vec{E} \quad (2.107)$$

angegeben werden kann<sup>27</sup>. Hierin stellt der erste Term den elastischen, der zweite Term den piezoelektrischen und der dritte Term den dielektrischen Energieanteil dar. Die Materialtensoren  $\mathbb{C}^E$  und  $\boldsymbol{\epsilon}^\sigma$  entsprechen dem Elastizitätstensor bei konstantem elektrischen Feld und dem Permittivitätstensor bei konstanter mechanischer Spannung, wobei  $\mathbb{C}^E = \mathbb{C}$  aus (2.60) und  $\boldsymbol{\epsilon}^\sigma = \boldsymbol{\epsilon}$  aus (2.75) gilt. Die Konstitutivgleichungen für die Verzerrungen und die dielektrische Verschiebung ergeben sich dann nach (2.106) zu

$$-\boldsymbol{\epsilon} = \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = -(\mathbb{C}^E)^{-1} : \boldsymbol{\sigma} - \mathfrak{d}^T \cdot \vec{E} \quad \text{und} \quad -\vec{D} = \frac{\partial G}{\partial \vec{E}} = -\mathfrak{d} : \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\epsilon}^\sigma \cdot \vec{E}. \quad (2.108)$$

Durch Bilden der zweiten Ableitungen von (2.107) bezüglich der unabhängigen Variablen

$$\frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\sigma} \partial \boldsymbol{\sigma}} = -(\mathbb{C}^E)^{-1}, \quad \frac{\partial^2 G}{\partial \vec{E} \partial \boldsymbol{\sigma}} = -\mathfrak{d} \quad \text{und} \quad \frac{\partial^2 G}{\partial \vec{E} \partial \vec{E}} = -\boldsymbol{\epsilon}^\sigma \quad (2.109)$$

<sup>27</sup> Diese Energieform bietet sich insofern als Ausgangspunkt an, da die zugehörigen Parameter der Materialtensoren in (2.107) sich in Experimenten mit jeweils isolierten Belastungsszenarien der thermodynamischen Kraftgrößen  $\boldsymbol{\sigma}$  und  $\vec{E}$  bestimmen lassen.

zeigt sich, dass die freie GIBBS-Energie bei nicht-negativ definiten Materialtensoren eine konkave Struktur besitzt.

Die Herleitung der anderen zuvor eingeführten Energieformen soll im Weiteren durch Umformen der konstitutiven Gleichungen in (2.108) erfolgen.

Wird (2.108)<sub>1</sub> zum Einen nach der Spannung umgestellt und zudem in die zweite Gleichung eingesetzt, so lassen sich die Relationen

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbb{C}^E : \mathbb{d}^T \cdot \vec{E} = \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbb{e}^T \cdot \vec{E} = \frac{\partial G_2}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{und} \quad (2.110)$$

$$-\vec{D} = -\mathbb{d} : \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon} - (\boldsymbol{\varepsilon}^\sigma - \mathbb{d} : \mathbb{e}^T) \cdot \vec{E} = -\mathbb{e} : \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^\varepsilon \cdot \vec{E} = \frac{\partial G_2}{\partial \vec{E}} \quad (2.111)$$

in der Form von (2.102) mit dem piezoelektrischen e-Tensor  $\mathbb{e} = \mathbb{d} : \mathbb{C}^E$  und dem Permittivitätstensor bei konstanter Verzerrung  $\boldsymbol{\varepsilon}^\varepsilon = \boldsymbol{\varepsilon}^\sigma - \mathbb{d} : \mathbb{e}^T$  ermitteln. Daraus lässt sich die quadratische Form

$$G_2(\boldsymbol{\varepsilon}, \vec{E}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon} - \vec{E} \cdot \mathbb{e} : \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^\varepsilon \cdot \vec{E} \quad (2.112)$$

der elektrischen GIBBS-Energie bestimmen. Deren zweite Ableitungen ergeben sich dann zu

$$\frac{\partial^2 G_2}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{C}^E, \quad \frac{\partial^2 G_2}{\partial \vec{E} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} = -\mathbb{e} \quad \text{und} \quad \frac{\partial^2 G_2}{\partial \vec{E} \partial \vec{E}} = -\boldsymbol{\varepsilon}^\varepsilon, \quad (2.113)$$

woraus sich bei geeigneten Definitionseigenschaften die Konvexität bezüglich der Verzerrung  $\boldsymbol{\varepsilon}$  und die Konkavität bezüglich des elektrischen Feldes  $\vec{E}$  für die elektrische GIBBS-Energie bemerkbar macht.

Des Weiteren können durch Auflösen von (2.111) nach dem elektrischen Feld und Einsetzen dieser Beziehung in (2.110) die konstitutiven Gleichungen

$$\boldsymbol{\sigma} = (\mathbb{C}^E + \mathbb{e}^T \cdot \mathbb{h}) : \boldsymbol{\varepsilon} - (\mathbb{e}^T \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon) \cdot \vec{D} = \mathbb{C}^D : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbb{h}^T \cdot \vec{D} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \quad (2.114)$$

$$\text{und } \vec{E} = -(\epsilon^\varepsilon)^{-1} \cdot \mathfrak{e} : \boldsymbol{\varepsilon} + (\epsilon^\varepsilon)^{-1} \cdot \vec{D} = -\mathfrak{h} : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \vec{D} = \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{D}} \quad (2.115)$$

in der Form von (2.98) gewonnen werden. Hierbei lassen sich der Elastizitätstensor bei konstanter dielektrischer Verschiebung  $\mathbb{C}^D = \mathbb{C}^E + \mathfrak{e}^T \cdot \mathfrak{h}$ , der Impermittivitätstensor bei konstanter Verzerrung  $\boldsymbol{\beta}^\varepsilon = (\epsilon^\varepsilon)^{-1}$  und der piezoelektrische h-Tensor  $\mathfrak{h} = \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \mathfrak{e}$  identifizieren. Die freie HELMHOLTZ-Energie für ein klassisches piezoelektrisches Materialverhalten kann dann in der Form

$$\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \vec{D}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}^D : \boldsymbol{\varepsilon} - \vec{D} \cdot \mathfrak{h} : \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} \vec{D} \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \vec{D} \quad (2.116)$$

dargestellt werden. Die Berechnung der zweiten Ableitungen

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{C}^D, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \vec{D} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} = -\mathfrak{h} \quad \text{und} \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \vec{D} \partial \vec{D}} = \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \quad (2.117)$$

zeigt bei geeigneten Definitionseigenschaften die Konvexität der freien HELMHOLTZ-Energie. Für eine Auflistung der Beziehungen der in diesem Abschnitt eingeführten Materialtensoren wird an dieser Stelle auf IKEDA [110] verwiesen.

## 2.5.6 Thermodynamik der Flexoelektrizität

Im Weiteren sollen nun auch die nicht-lokalen Effekte aus Elastizität höherer Ordnung und Flexoelektrizität mit in die thermodynamisch konsistente Theorie eingebunden werden. Dabei findet auch der piezoelektrische Effekt weiter seine Berücksichtigung. Als Ausgangspunkt hierfür dient die Form der elektrischen GIBBS-Energie, wie sie aus der rein piezoelektrischen Theorie hervorgegangen ist<sup>28</sup>. Eine auf nicht-lokale Effekte erweiterte Form kann dann als

$$G_2(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{E}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbb{G}^E \cdot \boldsymbol{\eta} - \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^\varepsilon \cdot \vec{E} - \vec{E} \cdot \mathfrak{e} : \boldsymbol{\varepsilon} - \vec{E} \cdot \mathfrak{m} \cdot \boldsymbol{\eta} \quad (2.118)$$

<sup>28</sup> Diese Wahl ist sinnvoll, weil die Stoffgesetze des flexoelektrischen Effektes basierend auf phänomenologischer Beobachtung in (2.80) und (2.81) in das Schema dieser Energieform passt.

eingeführt werden mit  $\mathbb{G}^E = \mathbb{G}$  aus (2.67). Die daraus resultierenden konstitutiven Gleichungen zur Bestimmung der Spannungen erster und zweiter Ordnung sowie der dielektrischen Verschiebung ergeben sich dann aus den Ableitungen

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial G_2}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{e}^T \cdot \vec{E} \quad (2.119)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\partial G_2}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \mathbb{G}^E : \boldsymbol{\eta} - \mathbf{m}^T \cdot \vec{E} \quad (2.120)$$

$$\vec{D} = -\frac{\partial G_2}{\partial \vec{E}} = \mathbf{e} : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{m} : \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\epsilon}^\varepsilon \cdot \vec{E}, \quad (2.121)$$

wobei diese in einer kompakte matrizielle Darstellung mit

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\tau} \\ -\vec{D} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{C}^E & \mathbf{0} & -\mathbf{e}^T \\ \mathbf{0} & \mathbb{G}^E & -\mathbf{m}^T \\ -\mathbf{e} & -\mathbf{m} & -\boldsymbol{\epsilon}^\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon} \\ \boldsymbol{\eta} \\ \vec{E} \end{bmatrix} \quad (2.122)$$

angegeben werden können. Aus phänomenologischen Gesichtspunkten motiviert sich die Darstellung der Gleichungen (2.119) und (2.120) als eine Konstitutivgleichung

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{\nabla} = \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbb{G}^E : \boldsymbol{\eta} - \mathbf{e}^T \cdot \vec{E} + \mathbf{m}^T : \nabla \vec{E} \quad (2.123)$$

zur Bestimmung des totalen Spannungstensors.

Ähnlich zur Vorgehensweise im vorangegangenen Abschnitt, soll nun eine alternative Darstellung der konstitutiven Gleichungen (2.119)-(2.121) hergeleitet werden. Durch Umstellen von (2.121) nach dem elektrischen Feld und anschließendes Einsetzen in (2.119) und (2.120) ergeben sich die Konstitutivgleichungen

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= (\mathbb{C}^E + \mathbf{e}^T \cdot \mathbf{h}) : \boldsymbol{\varepsilon} + (\mathbf{e}^T \cdot \mathbf{f}) : \boldsymbol{\eta} - (\mathbf{e}^T \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon) \cdot \vec{D} \\ &= \mathbb{C}^D : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{b}^T : \boldsymbol{\eta} - \mathbf{h}^T \cdot \vec{D} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \end{aligned} \quad (2.124)$$



$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\tau} &= (\mathfrak{m}^T \cdot \mathfrak{h}) : \boldsymbol{\varepsilon} + (\mathbb{G}^E + \mathfrak{m}^T \cdot \mathfrak{f}) \cdot \boldsymbol{\eta} - (\mathfrak{m}^T \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon) \cdot \vec{D} \\
 &= \mathfrak{b} : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbb{G}^D \cdot \boldsymbol{\eta} - \mathfrak{f}^T \cdot \vec{D} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta}}
 \end{aligned} \tag{2.125}$$

$$\begin{aligned}
 \vec{E} &= -(\boldsymbol{\varepsilon}^\varepsilon)^{-1} \cdot \mathfrak{e} : \boldsymbol{\varepsilon} - (\boldsymbol{\varepsilon}^\varepsilon)^{-1} \cdot \mathfrak{m} \cdot \boldsymbol{\eta} + (\boldsymbol{\varepsilon}^\varepsilon)^{-1} \cdot \vec{D} \\
 &= -\mathfrak{h} : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathfrak{f} \cdot \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \vec{D} = \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{D}}
 \end{aligned} \tag{2.126}$$

in einer freien HELMHOLTZ-Energieform mit dem flexoelektrischen Kopplungstensor  $\mathfrak{f} = \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \mathfrak{m}$  und dem Elastizitätstensor höherer Ordnung bei konstanter dielektrischer Verschiebung  $\mathbb{G}^D = \mathbb{G}^E + \mathfrak{m}^T \cdot \mathfrak{f}$ . Bemerkenswerterweise entsteht durch die Transformation der konstitutiven Gleichungen ein zusätzlicher Kopplungsanteil zwischen den mechanischen Feldern erster und zweiter Ordnung, beschrieben durch den neu eingeführten Kopplungstensor fünfter Stufe

$$\mathfrak{b} = \mathfrak{m}^T \cdot \mathfrak{h} = \mathfrak{m}^T \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \mathfrak{e} = (\mathfrak{e}^T \cdot \mathfrak{f})^T = (\mathfrak{b}^T)^T. \tag{2.127}$$

In einer übersichtlicheren und kompakteren Schreibweise lassen sich die konstitutiven Gleichungen aus (2.124)-(2.126) darstellen mit

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\tau} \\ \vec{E} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{C}^D & \mathfrak{b}^T & -\mathfrak{h}^T \\ \mathfrak{b} & \mathbb{G}^D & -\mathfrak{f}^T \\ -\mathfrak{h} & -\mathfrak{f} & \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon} \\ \boldsymbol{\eta} \\ \vec{D} \end{bmatrix}. \tag{2.128}$$

Abschließend kann die Form der freien HELMHOLTZ-Energie unter Berücksichtigung der nicht-lokalen Effekten aus Flexoelektrizität durch

$$\begin{aligned}
 \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}) &= \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}^D : \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbb{G}^D \cdot \boldsymbol{\eta} + \frac{1}{2} \vec{D} \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \vec{D} \\
 &\quad + \boldsymbol{\eta} \cdot \mathfrak{b} : \boldsymbol{\varepsilon} - \vec{D} \cdot \mathfrak{h} : \boldsymbol{\varepsilon} - \vec{D} \cdot \mathfrak{f} \cdot \boldsymbol{\eta}
 \end{aligned} \tag{2.129}$$

ausgedrückt werden. Eine Zusammenstellung der in den Abschnitten 2.5.5 und 2.5.6 hergeleiteten Konstitutivgleichungen in Indexnotation für piezoelektrisches und flexoelektrisches Materialverhalten findet sich in Anhang C.2.



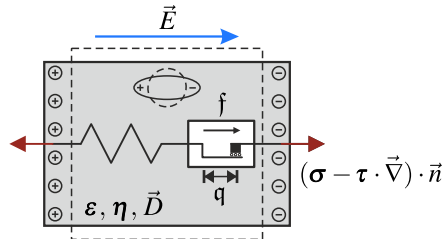
### **3      Variationelle Modellierung von dissipativem Materialverhalten**

Die in Kapitel 2 eingeführten Modellierungsgrundlagen für elektro-mechanische Festkörper werden in diesem Kapitel um eine Berücksichtigung von dissipativem Materialverhalten erweitert. Einen geeigneten Ansatz bietet hierfür der Modellierungsrahmen der *Generalisierten Standardmaterialien (GSM)* [29]. Dieser in einer variationellen Struktur aufgebaute Rahmen bietet den Vorteil, dass das zugrundeliegende Problem auf die Lösung eines nichtlinearen Optimierungsproblems reduziert werden kann. Dieses lässt sich dann mit etablierten numerischen Methoden sehr effizient lösen. Da bei diesem Zugang ein Materialmodell immer auf einem Potential basiert, ist eine symmetrische Materialtangente jederzeit gewährleistet. Dies führt in der Regel zu einem sehr effizienten und stabilen numerischen Lösungsprozess.

Der hier vorgestellte thermodynamische Rahmen basiert auf einer Darstellung in Abhängigkeit der konvexen freien HELMHOLTZ-Energie. Der Vorteil der Wahl dieser Energieform liegt darin begründet, dass formulierte Variationsprinzipien sich zu reinen Minimierungsproblemen ergeben. Als Grundlage für diese Kapitel dienen die Ausführungen in [25, 30, 31, 113].

### 3.1 Abbildung dissipativer Prozesse durch innere Zustandsvariablen

Im Folgenden wird ein materielles Punktelement eines elektro-mechanisch gekoppelten Kontinuums höherer Ordnung betrachtet, welches einer dreidimensionalen Verallgemeinerung der vereinfachten Version in Abb. 3.1 entspricht. Der am Materialpunkt wirkende äußere Belastungszustand kann durch die intensiven Größen der mechanischen Spannungstensenoren erster und zweiter Ordnung  $\sigma$  und  $\tau$ , sowie dem dielektrischen Feldvektor  $\vec{E}$  beschrieben werden. Aus thermodynamischer Sicht stellen diese Feldgrößen die äußeren Triebkräfte dar. Sie verändern den thermodynamischen Zustand des betrachteten Systems. Dies macht sich durch eine Änderung der extensiven Größen, nämlich dem infinitesimalen Verzerrungstensor  $\epsilon$ , dem Verzerrungsgradiententensor  $\eta$  und dem elektrischen Verschiebungsvektor  $\vec{D}$ , bemerkbar. Ein geeigneter thermodynamischer Rahmen zur Materialmodellierung wurde bereits in Abschn. 2.5 vorgestellt. Als Ergebnis resultierte die Erfüllung der CLAUSIUS-DUHEM-Ungleichung als Restriktion für beliebige Prozesse innerhalb eines Materials.



**Abbildung 3.1:** Vereinfachte eindimensionale Darstellung eines lokalen Materialpunktes in einem elektro-mechanischen Kontinuum höherer Ordnung.

Als nächstes sollen diejenigen Prozesse berücksichtigt werden, bei denen die aus der Umgebung zugeführte Energie nicht vollständig und reversibel im Material gespeichert werden kann. Für solche dissipativen Prozesse, in Abb. 3.1 durch das

Reibungselement symbolisiert, liefert die *CDU* die Einschränkung, dass die Energiedissipationsrate

$$\dot{\mathcal{D}} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\eta}} + \vec{E} \cdot \dot{\vec{D}} - \dot{\Psi} \geq 0 \quad (3.1)$$

für beliebige Prozesse nicht negativ werden darf. Die Erfüllung dieser Aussage gewährleistet ein möglichst realistisches Materialverhalten mit einer nicht-negativen Entropieproduktion.

Nach einem häufig angewendeten Konzept, welches z. B. von COLEMAN und GURTIN [114] sowie LUBLINER [115] skizziert wird, können dissipative Effekte im Material durch einen Satz von (zu diesem Zeitpunkt unbekannt) inneren Zustandsvariablen  $q$  dargestellt werden. Dadurch wird der Materialpunkt sozusagen mit einem Gedächtnis für die bereits verstrichene Belastungsgeschichte ausgestattet. Um diese dissipativen Effekte in den skizzierten Rahmen zu integrieren, wird die volumenbezogene freie HELMHOLTZ-Energie  $\Psi(\boldsymbol{\epsilon}, \vec{D}, q)$  nun zusätzlich als eine Funktion der inneren Zustandsvariablen angenommen. Durch Berechnung der zeitlichen Ableitung äquivalent zu (2.96) und durch Einsetzen in (3.1) ergibt sich

$$\dot{\mathcal{D}} = \left( \boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \right) : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \left( \boldsymbol{\tau} - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta}} \right) : \dot{\boldsymbol{\eta}} + \left( \vec{E} - \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{D}} \right) \cdot \dot{\vec{D}} - \frac{\partial \Psi}{\partial q} \cdot \dot{q} \geq 0. \quad (3.2)$$

Unter der Annahme, dass die in Abschn. 2.5.4 bestimmten konstitutiven Gleichungen in (3.2) uneingeschränkt erfüllt werden, lässt sich die *CDU* reduzieren zu

$$\dot{\mathcal{D}} = - \frac{\partial \Psi}{\partial q} \cdot \dot{q} \geq 0, \quad (3.3)$$

wobei der Ausdruck  $\partial_q \Psi$  im Folgenden als die energetischen inneren Triebkräfte bezeichnet wird. Offensichtlich wirken diese Kräfte hier als arbeitskonjugierte Größen zu den inneren Variablen  $q$ . Eine stets herausfordernde Aufgabe bei der Modellierung von dissipativem Materialverhalten ist es, eine geeignete Beschreibung für die Form und den Prozess einer Entwicklung der inneren Zustandsvariablen zu definieren. Ein solches Evolutionsgesetz muss die physikalische

Restriktion einer nicht-negativen Dissipationsrate in (3.3) für beliebige Prozesse erfüllen.

## 3.2 Formulierung eines lokalen Raten-Potentials

Um eine geeignete Beschreibung für die Entwicklung der inneren Zustandsvariablen  $\mathfrak{q}$  abzuleiten und den zuvor vorgestellten thermodynamischen Rahmen in eine variationelle Struktur einzubetten, wird sich im Folgenden der Theorie der Generalisierten Standardmaterialien (GSM) bedient. Im Zuge dessen, wird von der Existenz eines lokalen Raten-Potentials (vgl. [116, 117]) vom Typ

$$\pi(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{\vec{D}}, \dot{\mathfrak{q}}) := \dot{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, \mathfrak{q}) + \Phi(\dot{\mathfrak{q}}) - \mathcal{P}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{\vec{D}}). \quad (3.4)$$

ausgegangen, wobei  $\mathcal{P} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\tau} : \dot{\boldsymbol{\eta}} + \vec{E} \cdot \dot{\vec{D}}$  der äußeren Elementarleistung eines Materialpunktes entspricht. Die dissipativen Beiträge in (3.4) werden durch ein Dissipationspotential  $\Phi(\dot{\mathfrak{q}})$  repräsentiert, welches von der Rate der inneren Zustandsvariablen abhängig ist. Die Bedingung einer nicht-negativen Dissipationsrate in (3.3) wird a priori durch ein konvexes, normiertes und nicht-negatives Dissipationspotential mit den Eigenschaften

$$\Phi(0) = 0 \quad \text{und} \quad \Phi(\dot{\mathfrak{q}}) \geq 0 \quad (3.5)$$

erfüllt (vgl. [113]). Wie bereits erwähnt, besitzt die freie HELMHOLTZ-Energie ebenfalls eine konvexe Struktur. Somit kann ein konstitutives Variationsprinzip mithilfe des durch (3.4) gegebenen Raten-Potentials für ein dissipatives elektromechanisches Materialverhalten mit nicht-lokalen Effekten durch das reine Minimierungsproblem (vgl. [30])

$$\{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{\vec{D}}, \dot{\mathfrak{q}}\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}} \inf_{\dot{\boldsymbol{\eta}}} \inf_{\dot{\vec{D}}} \inf_{\dot{\mathfrak{q}}} \pi(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{\vec{D}}, \dot{\mathfrak{q}}) \right\} \quad (3.6)$$

formuliert werden.

Durch Bilden der Variationen bezüglich der unabhängigen Variablen erfolgt die Auswertung der Stationaritätsbedingungen des Variationsproblems in (3.6). Die zugrundeliegenden EULER-LAGRANGE-Gleichungen ergeben sich zu

$$\delta_{\boldsymbol{\epsilon}}\pi(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{D}, \dot{q}) = 0 \quad \longrightarrow \quad \boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial\Psi}{\partial\boldsymbol{\epsilon}} \quad (3.7)$$

$$\delta_{\boldsymbol{\eta}}\pi(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{D}, \dot{q}) = 0 \quad \longrightarrow \quad \boldsymbol{\tau} = \frac{\partial\Psi}{\partial\boldsymbol{\eta}} \quad (3.8)$$

$$\delta_{\dot{D}}\pi(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{D}, \dot{q}) = 0 \quad \longrightarrow \quad \vec{E} = \frac{\partial\Psi}{\partial\dot{D}} \quad (3.9)$$

$$\delta_{\dot{q}}\pi(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{D}, \dot{q}) = 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial\Psi}{\partial\dot{q}} + \frac{\partial\Phi}{\partial\dot{q}} = 0. \quad (3.10)$$

Die Gleichungen (3.7)-(3.9) können hier direkt als die bereits gewonnenen konstitutiven Beziehungen in (2.98) identifiziert werden. Eine Geschichtsabhängigkeit der intensiven Größen  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\boldsymbol{\tau}$  und  $\vec{E}$  wird an dieser Stelle durch ihre Abhängigkeit von den inneren Zustandsvariablen  $q$  offensichtlich. Die verbleibende Bedingung (3.10) fordert für beliebige Prozesse ein Gleichgewicht ein, welches zwischen den energetischen inneren Triebkräften in (3.3) und den durch das Dissipationpotential bestimmten dissipativen inneren Triebkräften  $\partial_{\dot{q}}\Phi$  gebildet wird. Diese Beziehung tritt als eine zusätzliche konstitutive Differentialgleichung in Erscheinung, welche die Entwicklung der inneren Zustandsgrößen bestimmt [113]. Sie wird gemeinhin als *BIOT-Gleichung* bezeichnet [118]. Die physikalische Bedeutung der beiden Beiträge in (3.10) kann durch die Interpretation motiviert werden, dass die energetischen inneren Triebkräfte  $\partial_{\dot{q}}\Psi$  aus einem von außen eingebrachten Energieüberschuss entstehen, der nicht reversibel im Material gespeichert werden kann und daher durch dissipative Prozesse abgebaut werden muss. Andererseits sind die dissipativen inneren Triebkräfte  $\partial_{\dot{q}}\Phi$  ein Maß für die tatsächlich verbrauchte Energie und damit der geleisteten Arbeit während des Evolutionsprozesses der inneren Zustandsgrößen  $q$ . Das durch (3.10) eingeforderte Gleichgewicht dieser beiden Größen muss daher insbesondere bei der Konstruktion des Dissipationspotentials in (3.4) seine Berücksichtigung finden.

### 3.3 Dissipationspotentiale für ratenunabhängiges Materialverhalten

Im Raten-Potential in (3.4) wurde die Existenz eines Dissipationspotentials  $\Phi(\dot{q})$  postuliert, welches die dissipativen Prozesse im betrachteten Material vollständig repräsentiert. Nun soll der Fokus auf eine geeignete Konstruktion dieser Funktion gerichtet werden, um ein möglichst physikalisch realistisches dissipatives Verhalten ferroelektrischer Funktionskeramiken reproduzieren zu können. Gemäß einer gängigen Annahme in Modellen dieser Materialklasse wird von einem ratenunabhängigen dissipativen Materialverhalten ausgegangen. Die Grundannahmen dieser Modelle basieren in der Regel auf der klassischen Plastizitätstheorie. Darin ist das sogenannte *Prinzip der maximalen Dissipation* ein etablierter Ausgangspunkt, um die Entwicklung der inneren Zustandsvariablen zu beschreiben [119, 120]. Nach diesem Postulat ist im Falle einer Evolution der physikalisch sinnvollste Zustand gefunden, wenn die zu leistende Arbeit der dissipativen inneren Triebkräfte  $\partial_{\dot{q}}\Phi$  für eine konstant gehaltene Rate der inneren Zustandsvariablen  $q$  maximal ist. Ein Dissipationspotential, das diese Bedingung erfüllt, kann unter Berücksichtigung von (3.3) und (3.10) als Maximierungsproblem

$$\Phi(\dot{q}) := \hat{\mathcal{D}}_{max}(\dot{q}) = \sup_{f^q \in \mathbb{E}} f^q \cdot \dot{q} \quad (3.11)$$

geschrieben werden [30], wobei  $f^q = \partial_{\dot{q}}\Phi$  als zusätzliche unabhängige Variable eingeführt wird, die gemäß der Optimalitätsbedingung von (3.11) bestimmt werden muss. Eine allgemeine Diskussion über den Modellierungsrahmen mit Dissipationspotentialen sowie deren Beziehung zum Prinzip der maximalen Dissipation wird von HACKL und FISCHER [121] geführt.

In etablierten Theorien für dissipatives ratenunabhängiges Materialverhalten (z. B. Plastizität in Metallen) wird üblicherweise angenommen, dass der Beginn der irreversiblen (und damit dissipativen) Effekte durch einen Schwellenwert der wirkenden Triebkräfte gekennzeichnet ist. Um ein solches Verhalten abbilden zu können, muss der Funktionsraum der dissipativen inneren Triebkräfte  $f^q$  auf einen



reversiblen Bereich  $\mathbb{E} := \{f^q \mid f(f^q) \leq f_c\}$  eingeschränkt werden. Dieser Bereich wird durch eine konvexe und normalisierte Schwellenfunktion  $f(f^q)$  beschrieben und durch einen kritischen Wert  $f_c$  begrenzt. Um eine solche Bedingung in das Dissipationspotential (3.11) einzuarbeiten, wird die Methode der LAGRANGE-Multiplikatoren verwendet. Dadurch lässt sich das Optimierungsproblem (3.11) zu

$$\Phi(\dot{q}) = \sup_{f^q, \lambda \geq 0} \{f^q \cdot \dot{q} - \lambda(f(f^q) - f_c)\} =: \sup_{f^q, \lambda \geq 0} \mathcal{L}^q(\dot{q}, f^q, \lambda) \quad (3.12)$$

umformulieren. Durch Auswertung der KARUSH-KUHN-TUCKER-Optimalitätsbedingungen der LAGRANGE-Funktion  $\mathcal{L}^q$  in (3.12) kann die gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung

$$\delta_{f^q} \mathcal{L}^q(\dot{q}, f^q, \lambda) = 0 \quad \longrightarrow \quad \dot{q} = \lambda \frac{\partial f}{\partial f^q} \quad (3.13)$$

zur Beschreibung der Entwicklung der inneren Variablen, zusammen mit den zugehörigen Be- und Entlastungsbedingungen

$$\lambda \geq 0, \quad f(f^q) \leq f_c, \quad \lambda(f(f^q) - f_c) = 0 \quad (3.14)$$

abgeleitet werden.

Für ratenunabhängiges Verhalten wird klassischerweise angenommen, dass das Dissipationspotential  $\Phi(\dot{q})$  positiv homogen vom Grad eins in der Rate der inneren Variablen ist<sup>1</sup>. Wie in [30, 113] diskutiert, gilt in diesem Fall das EULER'sche Lemma  $f^q \cdot \partial_{f^q} f(f^q) = f(f^q)$  für die Schwellenfunktion. Daher kann die Dissipationsrate für einen Belastungsfall mit Evolution der inneren Zustandsvariablen ( $f = f_c, \lambda > 0$ ) durch Einsetzen von (3.13) in (3.12) ausgedrückt werden mit

$$\dot{\mathcal{D}} := \Phi(\dot{q}) = f^q \cdot \lambda \frac{\partial f}{\partial f^q} = f \lambda = f_c \lambda \geq 0, \quad (3.15)$$

<sup>1</sup> An dieser Stelle sei angemerkt, dass für ratenunabhängiges Verhalten das Dissipationspotential  $\Phi(\dot{q})$  eine nicht-glatte Funktion ist. Formal müssen dann die Ableitungen wie z. B. in (3.10) durch stückweise definierte Differentiale ersetzt werden [113].

unter der Annahme eines gefundenen optimalen Zustands des Problems in (3.12). Mit dem in (3.12) konstruierten Dissipationspotential erhält man, ausgehend von (3.4), den Ausdruck für das lokale Raten-Potential

$$\begin{aligned} \pi(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{\vec{D}}, \dot{q}, \dot{f}^q, \lambda) := & \dot{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, q) + \sup_{\dot{f}^q, \lambda \geq 0} \{ \dot{f}^q \cdot \dot{q} - \lambda (f(\dot{f}^q) - f_c) \} \\ & - \mathcal{P}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{\vec{D}}) \end{aligned} \quad (3.16)$$

für den Fall von ratenunabhängigem Materialverhalten.

### 3.4 Inkrementelles Variationsprinzip der lokalen Materialantwort

Um ein inkrementelles Lösungsverfahren für das eingeführte allgemeine Raten-Potential  $\pi(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \dot{\boldsymbol{\eta}}, \dot{\vec{D}}, \dot{q})$  in (3.4) zu realisieren, wird eine algorithmische Zeitintegration über ein endliches Zeitinkrement  $\Delta t := t_{n+1} - t_n$  durchgeführt. Dieses Vorgehen wandelt das zeit-kontinuierliche Problem in eine Folge von inkrementellen Problemen um, die jeweils durch ein Minimalprinzip gekennzeichnet sind [117]. Um die Notation so einfach wie möglich zu halten, wird der Index  $n + 1$  für die zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  ausgewerteten Größen im Folgenden weggelassen. Der Materialzustand zum Zeitpunkt  $t_n$  wird als vollständig bekannt vorausgesetzt. Eine algorithmische Darstellung des Raten-Potentials (3.4) kann durch

$$\hat{\pi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, q) := \hat{\pi}^{int}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, q) - \hat{\pi}^{ext}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}) \quad (3.17)$$

mit  $\hat{\pi}^{int}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, q) = \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, q) - \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}_n, \boldsymbol{\eta}_n, \vec{D}_n, q_n) + \Delta t \Phi\left(\frac{1}{\Delta t}(q - q_n)\right)$

und  $\hat{\pi}^{ext}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}) = \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_n) + \boldsymbol{\tau} : (\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_n) + \vec{E} \cdot (\vec{D} - \vec{D}_n)$

angegeben werden, vgl. [30, 122]. In diesem Ausdruck werden die Raten durch eine approximative Darstellung mittels Differenzenquotient  $\dot{x} \approx (x - x_n)/\Delta t$  ersetzt, wobei  $\hat{\pi} = \Delta t \pi$ . Alternative Methoden für die zeitliche Diskretisierung des Raten-Potentials finden sich in [123]. Man beachte, dass in der algorithmischen

Darstellung in (3.17) eine konstante Rate der inneren Zustandsvariablen innerhalb des Intervalls  $\Delta t$  angenommen wird und die externen Belastungen  $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}, \vec{E})$  zur Zeit  $t_{n+1}$  vorgegeben werden [30]. Ähnlich dem in (3.6) definierten zeitkontinuierlichen Problem, lässt sich ein zeit-diskretes Variationsprinzip als reines Minimierungsproblem

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, q\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\boldsymbol{\varepsilon}} \inf_{\boldsymbol{\eta}} \inf_{\vec{D}} \inf_q \hat{\pi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, q) \right\} \quad (3.18)$$

für die Auswertung des Materialzustands zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  formulieren.

Da nur der interne Anteil  $\hat{\pi}^{int}$  des inkrementellen Potentials in (3.17) von den inneren Zustandsvariablen  $q$  abhängt, kann deren Auswertung unabhängig vom externen Anteil  $\hat{\pi}^{ext}$  erfolgen. Daher lässt sich der Lösungsprozess in zwei Schritten realisieren. Ein erstes Variations-Teilproblem, welches die inneren Zustandsvariablen aktualisiert, wird dann zu

$$q = \text{Arg} \left\{ \inf_q \hat{\pi}^{int}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, q) \right\} \quad (3.19)$$

geschrieben, vgl. [30]. Man kann diese Beziehung so interpretieren, dass die inneren Zustandsgrößen  $q$  während des Zeitinkrements  $\Delta t$  einem optimalen Pfad im Sinne eines Minimierungsproblems folgen. Aus dieser algorithmischen Darstellung des lokalen Materialverhaltens ergeben sich gewisse Vorteile. Durch die Auswertung des Materialmodells zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$ , wird das ursprünglich zeitkontinuierliche Problem zu einem einfachen zeitdiskreten Optimierungsproblem. Dieses kann mithilfe von effizienten iterativen Optimierungsalgorithmen gelöst werden. Durch Auswertung der Stationaritätsbedingung  $\delta_q \hat{\pi}^{int}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, q) = 0$  des Arguments in (3.19), ergibt sich die algorithmische Darstellung

$$\frac{\partial \Psi}{\partial q} + \Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial q} = 0 \quad (3.20)$$

der BIOT-Gleichung in (3.10). Aufgrund des lokalen Charakters der inneren Zustandsvariablen  $q$  kann die Auswertung ihrer Evolutionsgleichungen in (3.20) an jedem materiellen Punkt im Kontinuum unabhängig erfolgen.

Für die Optimierung des inkrementellen Potentials (3.17) in Abhängigkeit von der Verzerrung  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , des Verzerrungsgradienten  $\boldsymbol{\eta}$  und der dielektrischen Verschiebung  $\vec{D}$  wird das reduzierte inkrementelle interne Arbeitspotential pro Volumeneinheit

$$W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}) = \inf_{\mathbf{q}} \left\{ \hat{\pi}^{int}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, \mathbf{q}) \right\} \quad (3.21)$$

eingeführt (vgl. [30]). Mit dieser Definition kann der verbliebene Teil der Lösung des ursprünglich eingeführten Optimierungsproblems (3.18) in algorithmischer Weise als das konstitutive Variationsprinzip

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}} \left\{ W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}) - \hat{\pi}^{ext}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}) \right\} \right\} \quad (3.22)$$

geschrieben werden. Durch Auswerten der Stationaritätsbedingungen des Optimierungsproblems (3.22) kann eine algorithmische Darstellung des aktuellen Zustands der Spannung erster und zweiter Ordnung sowie des elektrischen Feldes in der Form

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad \boldsymbol{\tau} = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\eta}} \quad \text{und} \quad \vec{E} = \frac{\partial W}{\partial \vec{D}} \quad (3.23)$$

abgeleitet werden. Dabei ist zu beachten, dass im Gegensatz zur freien HELMHOLTZ-Energie  $\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, \mathbf{q})$  in (3.7)-(3.9) das reduzierte inkrementelle interne Arbeitspotential  $W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D})$  keine Funktion der inneren Zustandsvariablen  $\mathbf{q}$  ist, da diese im Rahmen des Lösungsprozesses zuvor durch (3.19) bereits in Abhängigkeit von  $\boldsymbol{\varepsilon}$ ,  $\boldsymbol{\eta}$  und  $\vec{D}$  bestimmt wurden. Damit resultiert die Bestimmung der konstitutiven Gleichungen in (3.23) zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  formal zu einer quasi-hyperelastischen Funktionsauswertung [113].

Die eingeführte inkrementelle variationelle Struktur ermöglicht die Berechnung der symmetrischen und konsistenten algorithmischen Materialtangente zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  durch Bilden der JACOBI-Matrix

$$\mathbb{C}_T := \begin{bmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \bar{D}} \\ \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial \bar{D}} \\ \frac{\partial \bar{E}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial \bar{E}}{\partial \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial \bar{E}}{\partial \bar{D}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \bar{D}} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \bar{D}} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial \bar{D} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \bar{D} \partial \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \bar{D} \partial \bar{D}} \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

des zugrundeliegenden Funktionals im Variationsproblems (3.22). Eine Bedingung für ein stabiles elektro-mechanisches Materialverhalten ist durch eine nicht-negative algorithmische Darstellung des Arbeitsausdrucks zweiter Ordnung

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon} + \Delta \boldsymbol{\tau} : \Delta \boldsymbol{\eta} + \Delta \bar{E} \cdot \Delta \bar{D} = \begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{\varepsilon} \\ \Delta \boldsymbol{\eta} \\ \Delta \bar{D} \end{bmatrix} \cdot \mathbb{C}_T \cdot \begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{\varepsilon} \\ \Delta \boldsymbol{\eta} \\ \Delta \bar{D} \end{bmatrix} \geq 0 \quad (3.25)$$

für alle  $\begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{\varepsilon} & \Delta \boldsymbol{\eta} & \Delta \bar{D} \end{bmatrix}^T \neq \mathbf{0}$

gegeben (vgl. [30]) und ist somit für eine positiv-definite Materialtangente in (3.24) erfüllt. Aufgrund der Definition des Raten-Potentials (3.4) in Abhängigkeit von der konvexen freien HELMHOLTZ-Energiefunktion  $\Psi$  und des konvexen Dissipationspotentials  $\Phi$  hat auch das reduzierte inkrementelle innere Arbeitspotential  $W$  eine bifurkations- und häufungspunktfreie konvexe Struktur<sup>2</sup>. Diese Eigenschaft stellt die Grundvoraussetzung für die positive Definitheit von  $\mathbb{C}_T$  sicher und garantiert die Eindeutigkeit der in (3.23) abgeleiteten konstitutiven Beziehungen für beliebige Belastungsprozesse [30, 125].

<sup>2</sup> Wie bereits erwähnt, basiert eine häufig gewählte Formulierung ferroelektrischer Materialmodelle auf der konvex-konkaven Sattelpunktfunktion der elektrischen GIBBS-Energie  $G_2(\boldsymbol{\varepsilon}, \bar{E}) = \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \bar{D}) - \bar{E} \cdot \bar{D}$  (vgl. [110]), um die Energiespeicherung des Systems zu beschreiben. Eine solche Formulierung führt zu nicht-positiv definitiven Materialtangente[n] [30, 124].

Der Potentialcharakter des reduzierten inkrementellen internen Arbeitspotentials  $W$  wurde durch eine konsistente Variationsformulierung des Materialverhaltens unter Verwendung des Rahmens der Generalisierten Standardmaterialien erreicht. Darauf aufbauend wird die Konstruktion von Funktionalen mit Potentialcharakter für den gesamten betrachteten elektro-mechanischen Körper möglich und bildet somit die Basis für eine Beschreibung des globalen Randwertproblems in einer variationellen Struktur.

## 4 Ferroelektrische Funktionskeramiken

Für die Entwicklung passgenauer Materialmodelle, welche sich in den zuvor eingeführten Modellierungsrahmen integrieren lassen, sind weitreichende Kenntnisse über die Eigenschaften und das Verhalten des zu betrachtenden Materials vonnöten. Deshalb werden im folgenden materialwissenschaftlich motivierten Kapitel die mikrostrukturellen Eigenschaften sowie das makroskopische phänomenologische Materialverhalten ferroelektrischer Funktionskeramiken vorgestellt. Hierbei beschränkt sich die Diskussion im Wesentlichen auf die für diese Arbeit relevanten Zusammenhänge, welche in einem ausführlicheren Kontext aus [126–129] und [39, 130, 131] entnommen werden können.

Als Beispiele für ferroelektrische Funktionskeramiken sind *Barium-Titanat* ( $BaTiO_3$ ), *Barium-Strontium-Titanat* (*BST*) und *Blei-Zirkonat-Titanat* (*PZT*) zu nennen<sup>1</sup>. Aufgrund der verhältnismäßig hohen elektro-mechanischen Kopplungseigenschaften ist insbesondere PZT von großer technischer Relevanz, weshalb die in diesem Kapitel behandelten Eigenschaften ferroelektrischer Funktionskeramiken meist im Kontext dieses Materials diskutiert werden. Um ein Verständnis für die phänomenologischen Eigenschaften und Mechanismen von Ferroelektrika zu erlangen, ist es von Vorteil diese auf unterschiedlichen Skalen zu betrachten. Aus diesem Grund erfolgt zunächst eine Erläuterung der Materialeigenschaften anhand der Betrachtung einer Einheitszelle des Kristallgitters. Im zweiten Schritt

---

<sup>1</sup> Aufgrund der Bleihaltigkeit von PZT und der damit verbundenen Umweltbelastung ist damit zu rechnen, dass dieses Material in den nächsten Jahren vollständig durch bleifreie Piezomaterialien ersetzt wird.

werden die gewonnenen Erkenntnisse auf polykristalline Strukturen übertragen und ausgeweitet.

## 4.1 Eigenschaften der Einheitszelle

Bei den hier betrachteten Funktionskeramiken handelt es sich um kristalline Materialien, deren Kristallgitter sich aus periodisch angeordneten Einheitszellen zusammensetzt. Um ein grundlegendes Verständnis für das Materialverhalten einer polykristallinen Keramik zu schaffen, müssen zunächst die Eigenschaften erläutert werden, die sich aus der Betrachtung einer Einheitszelle ableiten lassen.

### 4.1.1 Kristallstruktur

Die chemische Zusammensetzung von Ferroelektrika ist durch ionische Bindungen geprägt. Eine Einheitszelle dieser Materialien baut sich aus einer Anordnung von positiv und negativ geladenen Ionen auf. Durch die häufig vorkommende Perowskit-Struktur des Kristallgitters ergibt sich eine Temperaturabhängigkeit der Konfiguration einer Einheitszelle. Oberhalb der sogenannten CURIE-Temperatur<sup>2</sup>  $\theta_C$  nimmt die Einheitszelle eine *kubische* Struktur ein. Unterhalb der CURIE-Temperatur ergeben sich im Fall von PZT zwei technisch relevante Konfigurationen mit jeweils verzerrten Kristallgittern. In Abhängigkeit des prozentualen Titan-Anteils im Material ergibt sich entweder eine *rhomboedrische* oder eine *tetragonale* Form der Einheitszelle. Im schematischen Phasendiagramm für PZT in Abb. 4.1 ist zudem zu erkennen, dass diese beiden Konfigurationen durch eine *morphotrope Phasengrenze (MPG)* voneinander abgegrenzt werden<sup>3</sup>. In realen Piezokeramiken liegen meist tetragonale und rhomboedrische Phasen nebeneinan-

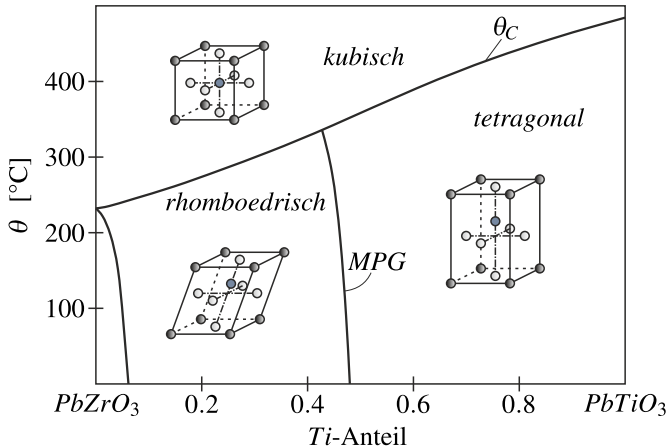
---

<sup>2</sup> Benannt nach den Brüdern Pierre und Jacques CURIE. Durch deren Beobachtungen aus dem Jahr 1880 wird ihnen die Entdeckung der Piezoelektrizität zugesprochen [126].

<sup>3</sup> Eine Materialzusammensetzung nah an der morphotropen Phasengrenze ist von besonderem technischen Interesse, da dort eine optimale elektro-mechanische Kopplung mit verhältnismäßig großen Dehnungen erreicht werden kann [126].



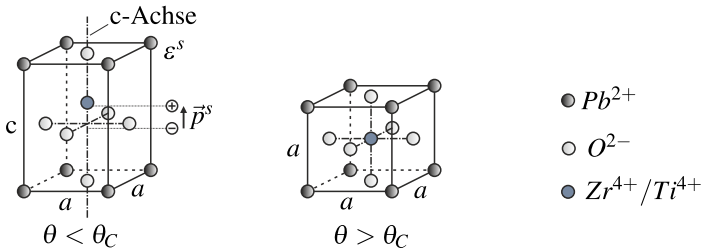
der vor. Zur Beschreibung der charakteristischen Materialeigenschaften sowie zur Motivation geeigneter Modellierungsansätze wird jedoch häufig auf die Betrachtung der tetragonalen Einheitszelle zurückgegriffen. Aufgrund der anschaulicheren Diskussion wird diese auch in den weiteren Ausführungen näher betrachtet.



**Abbildung 4.1:** Schematisches Phasendiagramm für PZT (vgl. z.B. [126]).

In Abb. 4.2 sind die Einheitszellen der kubischen Konfiguration mit der Gitterkonstante  $a$  und der tetragonalen Konfiguration mit den Gitterkonstanten  $c$  und  $a < c$  dargestellt. Die Verzerrung der tetragonalen Phase im Vergleich zur kubischen wird auch als *spontane Dehnung* bezeichnet und nimmt i. d. R. eine Größenordnung von  $\varepsilon^s = (c - a)/a \approx 1\%$  ein. Aus den unterschiedlichen Konfigurationen der Einheitszellen ergeben sich unterschiedliche Ladungsverteilungen, für welche sich jeweils sowohl ein positiver als auch ein negativer Ladungsschwerpunkt einstellt. Während bei der kubischen Phase die Schwerpunkte übereinstimmen und diese somit einen elektrisch neutralen Zustand einnimmt, lässt sich bei der tetragonalen Einheitszelle aufgrund der Gitterverzerrung einen Versatz zwischen dem positiven und dem negativen Ladungsschwerpunkt beobachten. Gemäß den in Abschn. 2.3.2 diskutierten Zusammenhänge stellt sich somit ein Dipol in jeder Einheitszelle des Einkristalls ein. Das zugehörige Dipolmoment  $\vec{p}^s$  wird häufig als

*spontane Polarisation* bezeichnet. Die Wirkungslinie des mikroskopischen Dipols einer Einheitszelle wird aufgrund der zugehörigen Gitterkonstante als c-Achse bezeichnet. Diese Begrifflichkeit wird im Rahmen eines Modellierungsansatzes im weiteren Verlauf der Arbeit noch eine wichtige Rolle spielen. Aufgrund der diskutierten Unterschiede bzgl. des Ladungszustandes und der damit verbundenen elektrischen Aktivität wird die kubische Konfiguration als *paraelektrische* – und die tetragonale als *ferroelektrische* Phase bezeichnet.



**Abbildung 4.2:** Links: Ferroelektrische Phase mit tetragonal verzerrter Einheitszelle von PZT unterhalb der CURIE-Temperatur. Rechts: Paraelektrische Phase mit kubischer Einheitszelle von PZT oberhalb der CURIE-Temperatur.

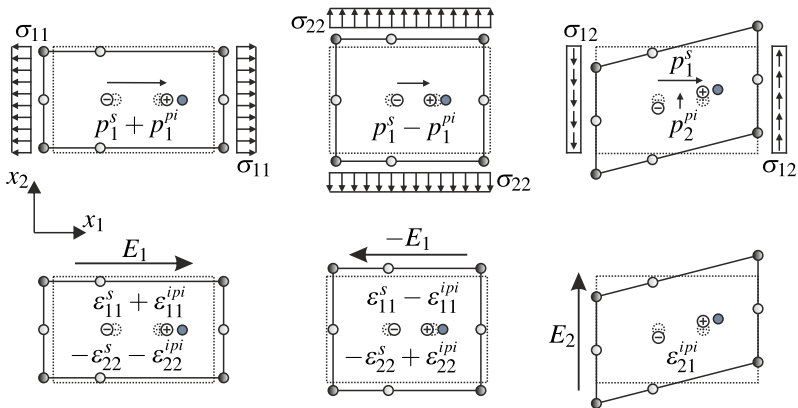
Die Herstellung von ferroelektrischen Keramiken erfolgt meist in einem Sintervorgang mit Prozesstemperaturen oberhalb der CURIE-Temperatur. Während des Abkühlens erfolgt ein Übergang von der paraelektrischen in die ferroelektrische Phase. Bei diesem Phasenübergang kommt es zu einer Verschiebung des zentralen Ions in eine durch die Kristallographie vorgegebene Raumrichtung und damit zur Ausbildung des Dipols. Aufgrund der tetragonalen Struktur des Kristallgitters besitzt dieses anisotrope Materialeigenschaften, deren Vorzugsrichtung durch die Orientierung des spontanen Polarisationsvektors bestimmt ist.

### 4.1.2 Piezoelektrizität der Einheitszelle

Der Begriff der Piezoelektrizität wurde bereits in Abschn. 2.4.4 in rein mathematischer Form im Fall des direkten Effektes als lineare Kopplung des Polarisationszu-

stands und der mechanischen Spannung eingeführt. Der indirekte Effekt beschreibt wiederum die Kopplung zwischen den Verzerrungen und dem elektrischen Feld. Nun soll dieses Phänomen im Rahmen einer mikroskopischen Betrachtung einer Einheitszelle diskutiert werden. Dabei sei angemerkt, dass sich Ferroelektrika auf mikroskopischer Skala immer piezoelektrisch verhalten, was makroskopisch nicht zwangsläufig der Fall sein muss.

Bei einer Belastung der tetragonalen Einheitszelle mit einer mechanischen Spannung verursacht diese eine Deformation. Die positiven und negativen Ladungsschwerpunkte erfahren dadurch eine zusätzliche Relativverschiebung, wodurch sich das Dipolmoment in der Einheitszelle und damit der Polarisationszustand im Material ändert, vgl. auch Gl. (2.47). Die Wirkung des direkten piezoelektrischen Effektes auf eine Einheitszelle für verschiedene mechanische Belastungszustände ist in Abb. 4.3 veranschaulicht.



**Abbildung 4.3:** Oben: Wirkungsweise des direkten piezoelektrischen Effekts für unterschiedliche mechanische Normal- und Schubspannungsbelastungen einer tetragonalen Einheitszelle von PZT. Unten: Wirkungsweise des indirekten piezoelektrischen Effekts für unterschiedlich ausgerichtete elektrische Felder an einer tetragonalen Einheitszelle von PZT.

Im Fall des indirekten Effekts führt ein äußeres elektrisches Feld zu der Einwirkung von COULOMB'schen Kräften auf die Ionen der Einheitszelle. Dadurch kommt es zu geringfügigen entgegengesetzten Verschiebungen der positiv und negativ geladenen Ionen, wodurch die gesamte Einheitszelle einer Deformation unterzogen wird. In Abb. 4.3 sind für verschiedene Wirkungsrichtungen des elektrischen Feldes die verursachten Verzerrungsänderungen dargestellt.

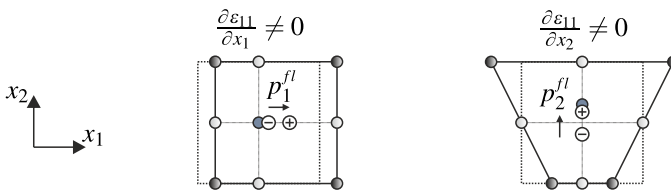
Bei Temperaturen oberhalb der CURIE-Temperatur erfolgt bei ferroelektrischen Keramiken der Übergang in die paraelektrische Phase. Aufgrund der dipolfreien kubischen Einheitszelle nach dem Phasenübergang gehen dadurch jegliche piezoelektrischen Eigenschaften des Materials verloren.

### 4.1.3 Flexoelektrizität der Einheitszelle

Der direkte flexoelektrische Effekt beschreibt die Änderung des Polarisationszustandes infolge von Verzerrungsgradienten, vgl. auch Abschn. 2.4.5. Im Gegensatz zur Piezoelektrizität tritt das Phänomen der Flexoelektrizität unabhängig von der Phase eines kristallinen Materials und damit unabhängig von der Temperatur auf. Die physikalische Begründung des Effektes ist allerdings wesentlich komplizierter und weniger intuitiv als bei der Piezoelektrizität. Infolge von aufgeprägten Verzerrungsgradienten und der damit verbundenen Inhomogenität des Belastungszustandes innerhalb einer Einheitszelle ist es nicht ohne Weiteres möglich auf die verursachten Änderungen des Ladungszustandes zu schließen. Mehrere Effekte ionischer und elektronischer Natur beeinflussen den durch einen Verzerrungsgradienten verursachten Polarisationszustand [39, 130, 131]. Für eine mikroskopische Bestimmung der Größenordnung des flexoelektrischen Effektes finden sich in der Literatur zahlreiche Berechnungsmethoden aus der Festkörperphysik, wie z. B. *First-Principle-Simulationen* [132–134] und *Lattice-Dynamics-Simulationen* [135, 136]. Bemerkenswerterweise zeigen die theoretischen Berechnungsergebnisse, dass sich das Vorzeichen und damit die Wirkungsrichtung der Polarisierung in keinsten Weise aus Anschauung ableiten lässt. Für gleiche Verzerrungsgradientenzustände können bei unterschiedlichen Materialien somit verschieden

ausgerichtete Polarisationszustände entstehen. Die mikroskopischen Ursachen des flexoelektrischen Effektes in Ferroelektrika sind bis zu diesem Zeitpunkt abschließend noch nicht voll umfänglich geklärt und gehören zum Gegenstand der aktuellen Forschung.

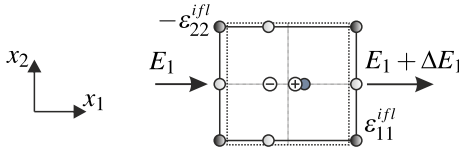
Eine Modellvorstellung der Wirkung des direkten flexoelektrischen Effekts auf eine kubische Einheitszelle, isoliert von den Effekten eines Dipols in der tetragonalen Phase, kann wie folgt zusammengefasst werden: Ausgehend von einer symmetrischen Einheitszelle in der paraelektrischen Phase kommt es getrieben durch die Wirkung von Verzerrungsgradienten zu einer Umverteilung der vorhandenen Ladungen innerhalb der Zelle wodurch deren Symmetrie gebrochen wird. Die Separation der Ladungsschwerpunkte sorgt für eine Polarisation der Zelle, deren Wirkungsrichtung durch Experimente für verschiedene Verzerrungsgradientenkomponenten und Materialien separat ermittelt werden muss. In Abb. 4.4 wird diese Modellvorstellung auf den longitudinalen und transversalen direkten flexoelektrischen Effekt bildlich übertragen.



**Abbildung 4.4:** Modellvorstellung der Wirkungsweise des direkten flexoelektrischen Longitudinal- (links) und Transversaleffekts (rechts) an einer kubischen Einheitszelle von PZT.

Die Wirkungsweise des indirekten flexoelektrischen Effektes motiviert sich aus einem Zusammenhang, welcher in Abb. 4.5 illustriert ist. Nach einer Modellvorstellung steht die Einheitszelle durch das über  $x_1$  anwachsende elektrische Feld in einem elektrischen Ungleichgewicht. Um einen Gleichgewichtszustand zu erreichen baut sich in der Einheitszelle ein dem Zuwachs  $\Delta E_1$  entgegenwirkendes elektrisches Feld auf, welches aus einer durch Ladungsverschiebung erzeugten Dipol entsteht. Diese ionischen Ladungsverschiebungen brechen zum einen die Symmetrie des ursprünglich kubischen Gitters und führen zum ändern zu einer

homogenen Deformation der Einheitszelle. Eine ähnliche Interpretation des indirekten flexoelektrischen Effekts auf mikroskopischer Skala findet sich auch in [137, 138].



**Abbildung 4.5:** Modellvorstellung der Wirkungsweise des indirekten flexoelektrischen Effekts an einer kubischen Einheitszelle von PZT.

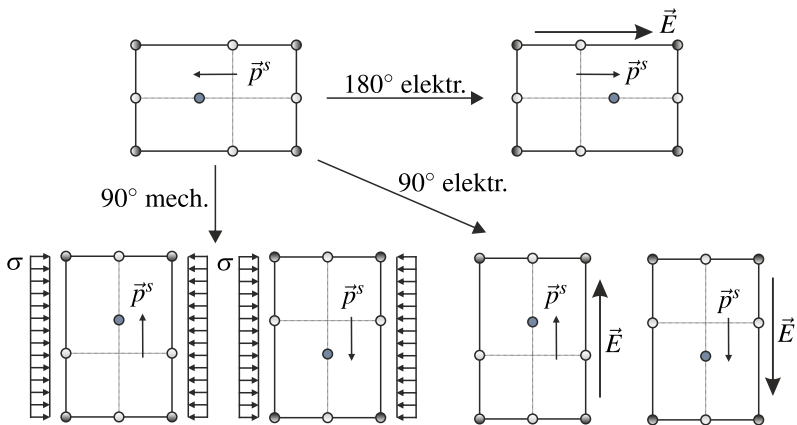
Im Rahmen dieser Arbeit wird vereinfachend davon ausgegangen, dass sowohl der direkte als auch der indirekte flexoelektrische Effekt sich in der paraelektrischen und der ferroelektrischen Phase gleich verhält<sup>4</sup>. Bei der Überlagerung der aus Piezoelektrizität und Flexoelektrizität resultierenden Polarisations- und Verzerungsanteile wird deshalb vereinfacht die Gültigkeit des Superpositionsprinzips postuliert.

#### 4.1.4 Ferroelektrizität der Einheitszelle

Die Materialeigenschaft, welche eine technische Nutzung des piezoelektrischen Effektes in Funktionskeramiken erst ermöglicht, ist die Ferroelektrizität. Durch diese ist die Möglichkeit der Umorientierung der mikroskopischen Dipole in einem piezoelektrischen Material in seiner ferroelektrischen Phase spezifiziert. Beim Abkühlprozess nach dem herstellungsbedingten Sintervorgang verschiebt sich beim Übergang aus der kubischen in die tetragonale Phase das zentrale Titanion in eine der sechs möglichen Raumrichtungen. Dieser Zustand ist durch ein energetisches Minimum und damit ein metastabiles thermodynamisches Gleichgewicht gekennzeichnet. Bei einer hinreichend großen Energieaufwendung durch

<sup>4</sup> Dies ist sicherlich eine starke Vereinfachung, da experimentelle Beobachtungen eine signifikante Temperaturabhängigkeit der flexoelektrischen Eigenschaften aufzeigen, vgl. [139].

äußere elektro-mechanische Einwirkungen ist es möglich, diese mikroskopischen Dipole in eine der fünf anderen Raumrichtungen auf irreversible Art und Weise umzuorientieren. Mit dieser Rotation des spontanen Polarisationsvektors der Einheitszellen geht ein Umklappen des gesamten Raumgitters einher, sodass sich dessen anisotrope Vorzugsrichtung ändert. Dabei muss zwischen elektrisch und mechanisch induziertem Umklappen differenziert werden. Bei Umklappprozessen, welche durch ein elektrisches Feld verursacht werden kann infolge der auf die Ionen einwirkenden COULOMB'schen Kräfte die Orientierung des mikroskopischen Dipols eindeutig getriggert werden. Dadurch ist in diesem Fall sowohl  $90^\circ$ - als auch  $180^\circ$ -Umklappen und damit eine Kristallorientierung in alle sechs Raumrichtung möglich, vgl. Abb. 4.6.



**Abbildung 4.6:** Elektrisch getriggertes  $180^\circ$ - und  $90^\circ$ -Umklappen, sowie mechanisch induziertes  $90^\circ$ -Umklappen der spontanen Polarisation einer Einheitszelle von PZT.

Im Gegensatz dazu besteht bei mechanisch induziertem Umklappen kein vollständiger Einfluss auf die Orientierung der spontanen Polarisation. Bei koaxial zur Polarisation einwirkenden mechanischen Druckspannungen in einer hinreichend hohe Intensität erfolgt ausschließlich ein  $90^\circ$ -Umklappen des Dipols in eine zufällige der vier möglichen Raumrichtungen senkrecht zur Belastungsrichtung. Zugbeanspruchungen können lediglich ein  $90^\circ$ -Umklappen verursachen, wenn die

mechanische Spannung senkrecht zur Polarisationsrichtung wirkt. Auch in diesem Fall ist die Umklapprichtung in eine der beiden Richtungen in der Belastungsachse möglich.

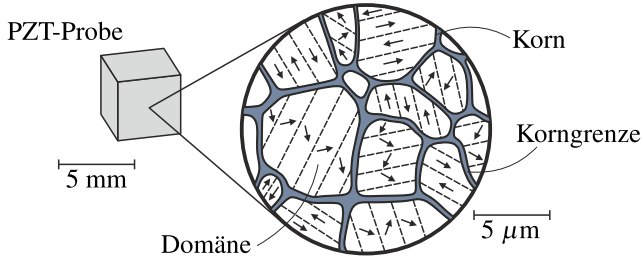
## 4.2 Eigenschaften des Polykristalls

Für technische Anwendungen sind ferroelektrische Funktionskeramiken in Form von Polykristallen relevant, deren Eigenschaften sich von denen der Einheitszelle unterscheiden. Für das Verständnis des komplexen Materialverhaltens von Polykristallen ist jedoch, wie bereits erwähnt, das zuvor erworbene Wissen über die Phänomenologie der Einheitszelle notwendig.

### 4.2.1 Korn- und Domänenstruktur

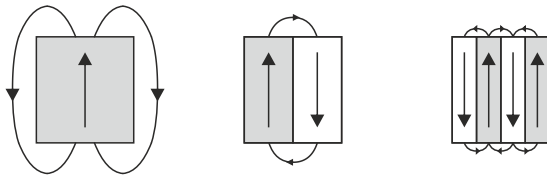
In einem Polykristall unterteilt sich das Material in einzelne Körner, welche jeweils aus einem Kristallgitter mit konstanter Orientierung bestehen. Je nach chemischer Zusammensetzung und eingestellten Prozessparametern im Sintervorgang stellen sich in PZT-Materialien Korngröße im Bereich von 1 – 10  $\mu\text{m}$  ein, vgl. z. B. [140]. Eine Besonderheit ferroelektrischer Keramiken ist, dass sich die Körner in weitere Substrukturen unterteilen lassen. Diese Strukturen werden i. A. als *Domänen* bezeichnet und stellen Bereiche dar, in welchen alle Einheitszellen die gleiche Orientierung der spontanen Polarisierung aufweisen, vgl. Abb. 4.7. Die Größe der Domänen wird ebenfalls durch die Materialzusammensetzung und den Herstellungsprozess bestimmt. Für ein ‚jungfräuliches‘ Ferroelektrikum, welches durch Abkühlen nach dem Sinterprozess den Übergang von der kubischen in die tetragonale Phase durchlaufen hat, ergibt sich eine regellose Verteilung der Orientierung des Kristallgitters einzelner Körner. Dadurch verhält sich das Material in diesem *thermisch depolarisierten* Zustand auf makroskopischer Ebene isotrop, die einzelnen Domänen jedoch weisen die Anisotropieeigenschaften der Einheitszellen auf. Demzufolge besitzt das Material dann auf makroskopischer Skala auch keine piezoelektrischen Eigenschaften.





**Abbildung 4.7:** Polykristalline Mikrostruktur einer ferroelektrischen PZT-Keramik.

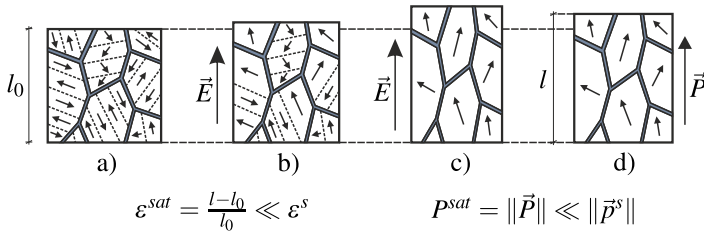
Es lässt sich zudem beobachten, dass bei benachbarten Domänen stets entweder ein  $90^\circ$  oder ein  $180^\circ$  Winkel zwischen deren Orientierungen auftritt. Die Formierung dieser Domänenwände begründet sich im Bestreben des Materials einen möglichst stabilen Zustand mit einem energetischen Minimum einzunehmen. Die Wirkungsweise bei der Ausbildung von  $180^\circ$ -Domänenwände ist in Abb. 4.8 illustriert. An einem idealen Einkristall würde es aufgrund der auftretenden Oberflächenladungen infolge der spontanen Polarisation zur Erzeugung von hohen Depolarisationsfeldern kommen. Das Ausbilden von  $180^\circ$ -Domänenwänden sorgt für einen signifikanten Abbau dieser elektrischen Felder, was zu einer Reduzierung der zu speichernden elektrischen Energie führt.



**Abbildung 4.8:** Ausbildung einer für PZT-Keramiken charakteristischen Domänenstruktur zur Minimierung der elektrischen Depolarisationsfelder, vgl. [141].

### 4.2.2 Makroskopisches Großsignalverhalten

Wie im vorangegangenen Abschnitt erläutert, weisen ferroelektrische Funktionskeramiken nach dem Sinterprozess keine makroskopischen piezoelektrischen Eigenschaften auf. Um die elektro-mechanischen Koppelphänomene der Materialien für technische Anwendungen nutzbar zu machen, muss deshalb zunächst ein initialer Polungsprozess durchgeführt werden. Durch Anlegen eines hinreichend hohen elektrischen Feldes in gewünschter Vorzugsrichtung wird dafür gesorgt, dass die spontanen Polarisationsvektoren der Domänen sich so nah in dessen Wirkungsrichtung ausrichten, wie es die Orientierung der Kristallachsen erlaubt. Dieses makroskopische ferroelektrische Verhalten begründet sich in dem Phänomen, dass sich die Einheitszellen einer Domäne durch die Einwirkung des elektrischen Feldes auf deren Dipole in ihrer Gesamtheit umklappen lassen. Der Schwellenwert, welcher die Initiierung der Umklappprozesse charakterisiert, wird als *Koerzitivfeldstärke*  $E^c$  bezeichnet.



**Abbildung 4.9:** Initialer Polungsprozess einer ferroelektrischen Piezokeramik: a) Thermisch depolarisierter isotroper Ausgangszustand. b) Umklappen einzelner Domänen und Bewegung von Domänenwänden für  $\|\vec{E}\| > E^c$ . c) Vollständig gepolter Zustand für  $\|\vec{E}\| \gg E^c$ . d) Remanenter Polarisations- und Dehnungszustand nach Entlastung.

In Abb. 4.9 ist das sukzessive Ausrichten der Domänen in Feldrichtung und die damit verbundene Ausbildung einer makroskopischen Polarisation, sowie einer makroskopischen Dehnung, dargestellt. Nachdem das elektrische Feld vollständig zurückgefahren ist, verbleibt ein Großteil der Domänen irreversibel in ihrer umgeklappten Position, sodass das Material annähernd im entstandenen

makroskopischen Polarisations- und Dehnungszustand verharrt. Diese *irreversiblen* oder *remanenten* Zustände werden *Sättigungspolarisation*  $P^{sat}$  und *Sättigungsdehnung*  $\epsilon^{sat}$  bezeichnet. Aufgrund der unausweichlichen Interaktion der einzelnen Domänen in einem Polykristall beeinflussen sich diese gegenseitig in ihrem Umklappverhalten. Infolge dessen können Blockaden entstehen, welche den Polungsprozess zum Teil behindern. Es ist somit unmöglich die Domänen vollständig in die Richtung des elektrischen Feldes auszurichten. Aus diesem Grund sind die makroskopisch messbaren Sättigungswerte der Polarisation und der Dehnung wesentlich geringer als die Werte der spontanen Polarisation und Dehnung einer Einheitszelle.

Im Weiteren soll das makroskopische Materialverhalten von ferroelektrischen Piezokeramiken unter zyklischer einachsiger Belastung diskutiert werden. Das durch elektrische, mechanische, sowie elektro-mechanisch gekoppelte Einwirkungen zu beobachtende hysteretische Verhalten ist charakteristisch für diese Materialklasse. In experimentellen Untersuchungen gängige Probenabmessungen, welche als makroskopisch repräsentativ angesehen werden können und somit eine hinreichende Anzahl an Körnern beinhalten, haben i. d. R. Dimensionen von einigen Millimetern, vgl. [142] oder Abb. 4.7. Die hysteretischen Koppelphänomene sollen an dieser Stelle am Beispiel der kommerziell verfügbaren Piezokeramik PIC 151 der Firma PI Ceramic GmbH aus Lederhose (Deutschland) [143] genauer betrachtet werden. Die zugehörigen Versuche wurden von ZHOU [142, 144] am Forschungszentrum Karlsruhe<sup>5</sup> in den frühen 00-Jahren durchgeführt. Die hier angegebenen Hysteresen wurden bei einer Belastungsgeschwindigkeit von 0.08 kV/mm pro Sekunde (entspricht 0.01 Hz) aufgezeichnet, was als eine annähernd quasi-statische Belastung eingestuft werden kann<sup>6</sup>.

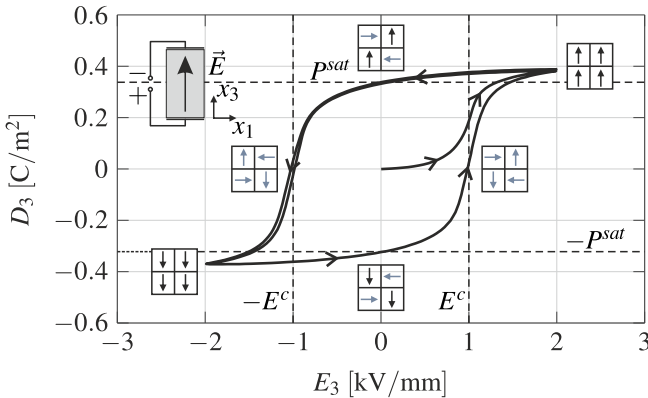
---

<sup>5</sup> Inzwischen eingegliedert in das Karlsruher Institut für Technologie (KIT).

<sup>6</sup> Bei höheren Belastungsgeschwindigkeiten lässt sich eine ausgeprägte Ratenabhängigkeit des Hystereseverhaltens von Piezo-Keramiken beobachten, vgl. [145].

### 4.2.2.1 Dielektrische Hysterese

Bei einachsiger zyklischer Belastung einer polykristallinen PZT-Probe mit einem elektrischen Feld mit hinreichend großer Amplitude lässt sich durch Messen der dadurch induzierten dielektrischen Verschiebung die sogenannte *dielektrische Hysterese* in Abb. 4.10 aufzeichnen. Das elektrische Feld lässt sich im Experiment durch auf zwei gegenüberliegenden Seiten angebrachte Elektroden und der Steuerung der elektrischen Spannung direkt vorgeben. Ein Mittelwert der dielektrischen Verschiebung und damit des makroskopischen Polarisationszustandes in der Probe, kann durch Ermittlung der Oberflächenladungsdichte an den Elektroden gewonnen werden. Der Verlauf der dielektrischen Hysterese kann wie folgt kurz umrissen werden: Ausgehend von einem thermisch depolarisierten Zustand setzt beim Überschreiten der Koerzitivfeldstärke<sup>7</sup>  $E^c$  das Umklappen der Domänen ein, was sich durch einen steilen Anstieg in der Polarisationsantwort widerspiegelt.



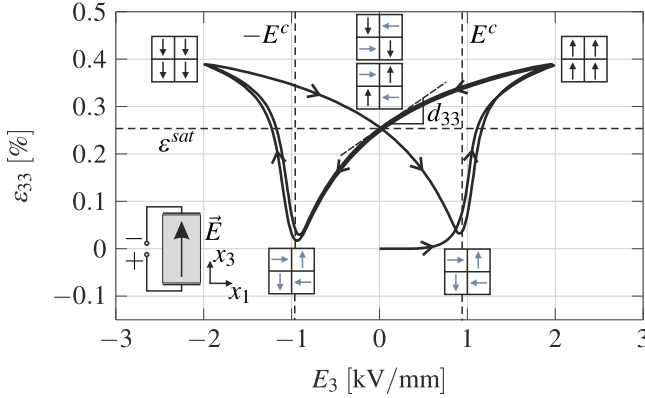
**Abbildung 4.10:** Experimentell von ZHOU [144] aufgezeichnete quasi-statische (0,01 Hz) makroskopische dielektrische Hysterese der PZT-Keramik PIC 151 unter Einwirkung eines zyklischen elektrischen Feldes in  $x_3$ -Richtung. Die Domänenzustände sind an diskreten Stellen mit Piktogrammen symbolisiert.

<sup>7</sup> Experimentell wird dieser Materialparameter i. d. R. über die Schnittpunkte der dielektrischen Hysterese mit der Ursprungsachse der dielektrischen Verschiebung charakterisiert, vgl. Abb. 4.10.

Wenn das Reservoir an mobilen umorientierbaren Domänen erschöpft ist, lässt sich ein Sättigungsverhalten in der dielektrischen Verschiebung beobachten. Das Material befindet sich dann in einem vollständig gepolten Zustand. Beim sukzessiven Zurückfahren des elektrischen Feldes klappen vereinzelte Domänen reversibel in ihren ursprünglichen Zustand zurück, wodurch sich die messbare Polarisation im Material geringfügig reduziert. Der durch die irreversibel umgeklappten Domänen verursachte und im Material verbleibende Polarisationszustand entspricht der makroskopischen Sättigungspolarisation  $P^{sat}$ . Bei entgegengesetzt wirkendem elektrischen Feld in Größenordnung der Koerzitivfeldstärke setzen erneut Umklappprozesse ein. Nach einem zunächst durchlaufenen depolarisierten Zwischenzustand kommt es zu einer vollständigen Umorientierung des Polarisationszustands. Nach einem weiteren Entlastungs- und Wiederbelastungsvorgang ergibt sich eine geschlossene Hysterese.

#### 4.2.2.2 Schmetterlingshysterese

Gleichzeitig zur dielektrischen Hysterese kann aufgrund der durch Domänenumklappen verursachten Formänderungen auch immer ein hysteretisches Dehnungsverhalten an einer PZT-Probe beobachtet werden. Wird in einem Diagramm die Änderung des einachsigen Dehnungszustandes über dem zyklischen elektrischen Feld aufgetragen, lässt sich ein Belastungspfad aufzeichnen, welcher aufgrund seines markanten Verlaufs als *Schmetterlingshysterese* bezeichnet wird, siehe 4.11. Ausgangspunkt dabei ist erneut ein Zustand mit regelloser Orientierung der Domänen, welcher als makroskopisch dehnungslos definiert wird. Mit zunehmendem elektrischen Feld und zunehmender Ausrichtung der Domänen, kann eine Verlängerung der Probe in Belastungsrichtung und eine Kontraktion in lateraler Richtung beobachtet werden. Dies begründet sich in der Ausrichtung der Einheitszellen mit ihren c-Achsen in Belastungsrichtung. Nach Entlastung macht sich ein geringfügiger reversibler Rückgang dieser Dehnungen bemerkbar. Im vollständig unbelasteten Zustand kann dann in Belastungsrichtung die makroskopische Sättigungsdehnung  $\epsilon^{sat}$  an der Probe gemessen werden.



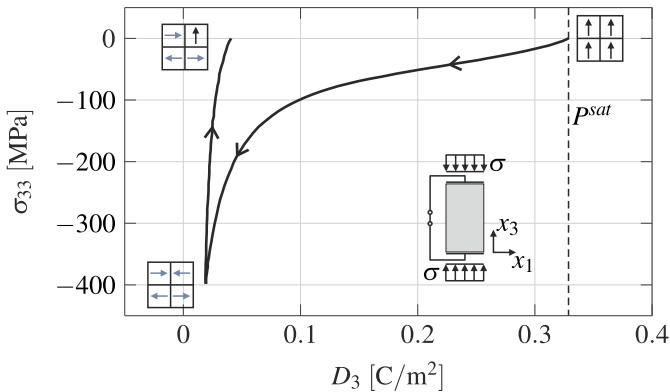
**Abbildung 4.11:** Experimentell von ZHOU [144] aufgezeichnete quasi-statische (0.01 Hz) makroskopische Schmetterlingshysterese der PZT-Keramik PIC 151 unter Einwirkung eines zyklischen elektrischen Feldes in  $x_3$ -Richtung. Die Domänenzustände sind an diskreten Stellen mit Piktogrammen symbolisiert.

Bei elektrischer Belastungsumkehr nimmt zunächst die Dehnung weiter ab, da sich wieder eine regellose Orientierung der Domänen und damit auch der  $c$ -Achsen einstellt. Bei Erreichen der negativen Koerzitivfeldstärke setzt wiederum das Umklappen in entgegengesetzter Richtung ein, was dann zu einer erneuten Verlängerung der Probe bis hin zum voll ausgerichteten Zustand führt. Eine erneute Lastumkehr vollendet einen kompletten Zyklus der Hysterese, welche für zahlreiche ferroelektrische Funktionskeramiken die Form eines Schmetterlings einnimmt.

#### 4.2.2.3 Mechanische Depolarisation

Nun soll eine PZT-Probe betrachtet werden, welche zunächst einen initialen Polungsprozess durchlaufen hat und somit einen einachsigen Polarisationszustand in der Größenordnung der Sättigungspolarisation aufweist. Ähnlich zum Verhalten einer Einheitszelle, kann durch Aufbringen einer hinreichend hohen Druckspannung in Polungsrichtung der Polarisationszustand in einem Polykristall reduziert

werden. Dieser Vorgang wird als *mechanische Depolarisation* bezeichnet. Das dabei zu beobachtende nichtlineare Materialverhalten ist in Abb. 4.12 am Beispiel von PIC 151 bei einer Belastungsgeschwindigkeit von 5 MPa pro Sekunde dargestellt, vgl. [142]. Nach überschreiten einer bestimmten Druckspannung, welche im Allgemeinen als *Koerzitivspannung*  $\sigma^c$  bezeichnet wird, setzt ein Umklappen einzelner Domänen in Richtung einer Ebene senkrecht zur Belastungsrichtung ein. Infolge der mechanischen Einwirkung besteht allerdings kein Einfluss auf die Ausrichtung der Dipole, sodass die c-Achsen der zugehörigen Einheitszellen in dieser Ebene eine regellose Orientierung aufweisen. Bei kontinuierlicher Erhöhung der Druckspannung wird ein Zustand erreicht, bei dem das Reservoir an mobilen Domänen erschöpft ist und der Polarisationszustand nicht mehr weiter reduziert werden kann. Es ist jedoch häufig zu beobachten, dass selbst bei sehr hohen Druckspannungen ( $> 200$  MPa) die Domänen nicht in Gänze umklappbar sind und eine geringfügige Polarisation im Material verbleibt.



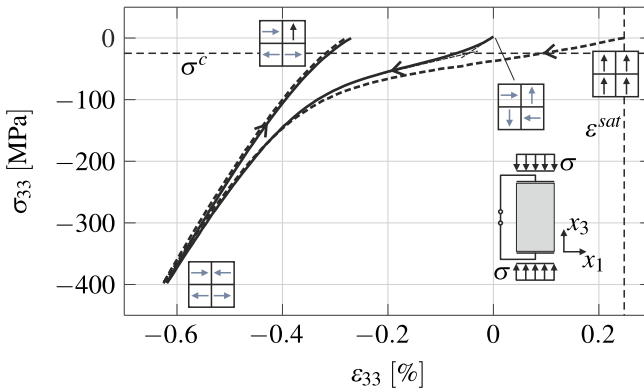
**Abbildung 4.12:** Experimentell von ZHOU [142] aufgezeichneter makroskopischer mechanischer Depolarisationsprozess der PZT-Keramik PIC 151 mit einer Belastungsgeschwindigkeit von 5 MPa pro Sekunde. Die Domänenzustände sind an diskreten Stellen mit Piktogrammen symbolisiert.

Nach vollständiger Wegnahme der mechanischen Belastung wird die Irreversibilität des mechanischen Depolarisationsprozesses deutlich. Die umgeklappten

Domänen verbleiben zum großen Teil in ihrer Lage, sodass der initiale makroskopische Polarisationszustand auf irreversible Art und Weise verloren gegangen ist. Vereinzelt Domänen können jedoch reversible in ihre ursprüngliche Orientierung zurückspringen, sodass unweigerlich ein minimaler Anstieg der Polarisation während des Entlastungsprozesses zu beobachten ist.

#### 4.2.2.4 Ferroelastische Hysterese

Das bei rein mechanischen Untersuchungen zu beobachtende nichtlineare Großsignalverhalten bei Ferroelektrika wird über die *ferroelastische Hysterese* charakterisiert. Wie bereits im vorangegangenen Abschnitt über das mechanische Depolarisationsverhalten gezeigt wurde, können infolge mechanischer Druckspannungen Domänenumklappprozesse initiiert werden. Damit gehen unweigerlich Formänderungen der PZT-Probe einher. In Abb. 4.13 ist das ferroelastische Verhalten sowohl für eine ‚jungfräuliche‘ als auch für eine gepolte Probe aus PIC 151 für eine Belastungsgeschwindigkeit von 5 MPa pro Sekunde illustriert.



**Abbildung 4.13:** Experimentell von ZHOU [142] aufgezeichnete makroskopische ferroelastische Hysteresen von gepolten und ungepolten PZT-Proben aus PIC 151 mit einer Belastungsgeschwindigkeit von 5 MPa pro Sekunde. Die Domänenzustände sind an diskreten Stellen mit Piktogrammen symbolisiert.

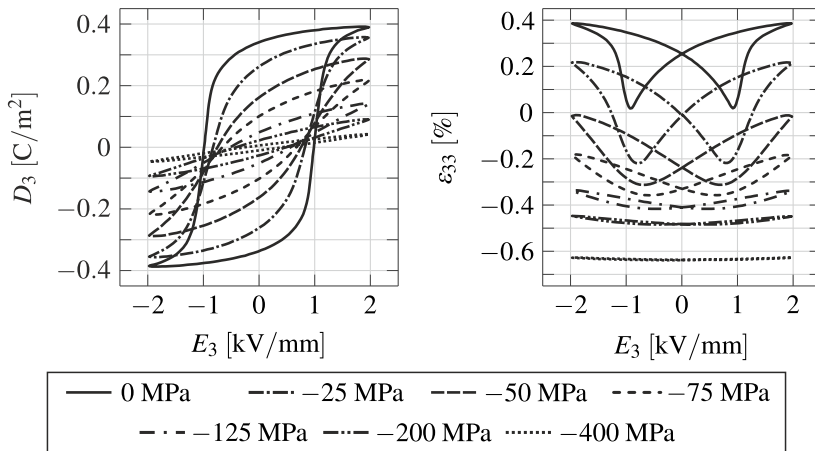


Das gezeigte Spannungs-Dehnungs-Verhalten der gepolten Probe kann parallel zum Depolarisationsprozess aus Abb. 4.12 aufgezeichnet werden. In beiden Fällen sorgt das Umklappen der Domänen und der damit verbundenen Ausrichtung der c-Achsen in die Ebene senkrecht zur Belastungsrichtung zu einer Verkürzung der Probe. Dies geht mit einer Ausdehnung in den lateralen Richtungen einher. Der größere Stauchungsweg bei der gepolten Probe lässt sich durch die Tatsache erklären, dass in diesem Fall die Anzahl der umklappbaren Domänen deutlich größer ist im Vergleich zur thermisch depolarisierten Probe mit regelloser Orientierungsverteilung der Domänen. Im Sättigungsbereich der Dehnung stimmen die Kurven beider Ausgangssituationen nahezu überein, da der vollständig depolarisierte Zustand für beide Proben identisch ist. Experimentelle Beobachtungen ergeben, dass die aus Umklappprozessen entstammende remanente Dehnungsänderungen als volumentreu angenommen werden können [146]. Das Spannungsniveau bei dem das Einsetzen von Umklappvorgängen im Material vonstattengeht, lässt sich aufgrund der kontinuierlichen Änderung in der Steigung der ferroelastischen Hysterese oft nicht eindeutig identifizieren. Ein pragmatischer Ansatz zur Charakterisierung des materialspezifischen Parameters der Koerzitivspannung  $\sigma^c$ , welcher auch in Abb. 4.13 verfolgt wurde, besteht darin, den Schnittpunkt der Tangente an die anfänglich linear elastische Steigung mit der Tangente am Wendepunkt der Kurve zu bestimmen. Eine Untersuchung zum Einfluss des Polarisationszustandes und des Belastungsniveaus auf den Elastizitätsmodul von PZT-Keramiken wird z. B. von FETT et al. [147] durchgeführt. Eine experimentelle Untersuchung des Materialverhaltens von ferroelektrischen Funktionskeramiken im Zugbereich ist aufgrund der niedrigen Zugfestigkeit des spröden Materials kaum realisierbar.

#### 4.2.2.5 Elektro-mechanisch kombinierte Belastungszustände

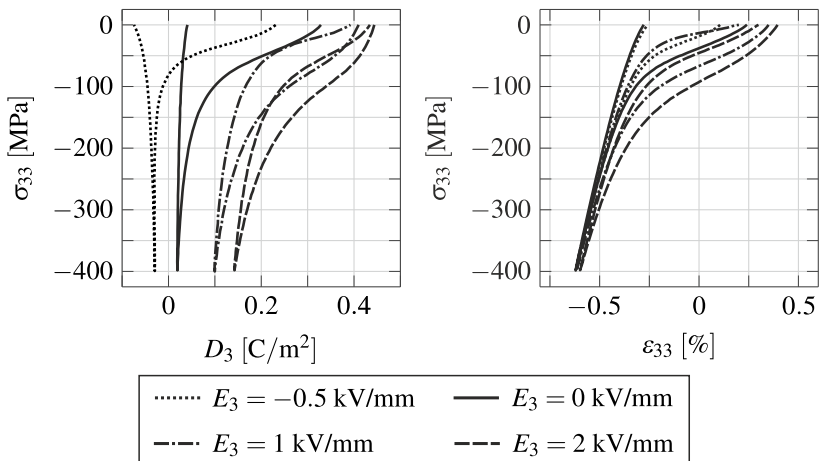
Im Weiteren sollen nun auch kombinierte Belastungszustände bei gleichzeitiger einachsiger Einwirkung von elektrischen Feldern und mechanischen Druckspannungen betrachtet werden. Von ZHOU et al. [148] wird das ferroelektrische Materialverhalten von PIC 151 unter dem Einfluss einer mechanischen Druckvorspannung mit unterschiedlichen Lastniveaus untersucht. In Abb. 4.14 sind die

aufgezeichneten dielektrischen Hysteresen und Schmetterlingshysteresen dargestellt. Es wird deutlich, dass eine überlagerte Druckspannung zu einer Behinderung der Domänenumklappprozesse führt. Die senkrecht zur Wirkungslinie des elektrischen Feldes ausgerichteten Domänen werden dadurch in ihrer Lage stabilisiert und es bedarf deutlich höhere Felder, um eine vollständige Polung durchzuführen. Zudem wird ersichtlich, dass bei hinreichend hohen Druckspannungen die dielektrische Hysterese sich annähernd vollständig zusammenstauchen lässt und somit das Umklappen komplett verhindert wird. Das Material verhält sich dann in erster Näherung linear dielektrisch. Bemerkenswert am Dehnungsverhalten ist, dass für niedrigen Druckvorspannungen ( $-25$  MPa) zunächst eine vertikale Aufweitung der Schmetterlingshysterese und damit eine Steigerung des Aktuationspotentials zu beobachten ist. Für höhere Druckspannungen überwiegt dann wieder die überlagerte remanente Stauchung und die komprimierten Hysteresen werden weit in den negativen Dehnungsbereich verschoben.



**Abbildung 4.14:** Einfluss von mechanischen Druckspannungen mit unterschiedlichen Belastungsniveaus auf den Verlauf der dielektrischen Hysterese und der Schmetterlingshysterese. Die experimentellen Ergebnisse für die Piezokeramik PIC 151 sind aus ZHOU et al. [148] entnommen.

Als weiteres Beispiel zur Demonstration des komplexen gekoppelten elektro-mechanischen Materialverhaltens ferroelektrischer Funktionskeramiken sollen die Ergebnisse einer weiteren Versuchsreihe von ZHOU et al. [142] in Abb. 4.15 diskutiert werden. Hierbei wurde das mechanische Depolarisationsverhalten bei konstant überlagerten elektrischen Feldern untersucht. Positive Werte stehen für zum Polarisationszustand gleichgerichtete elektrische Felder, welche zu einer Stabilisierung der ausgerichteten Domänenkonfiguration führen. Negative Felder wirken wiederum entgegengerichtet und destabilisieren somit den Polarisationszustand. Für hohe stabilisierend wirkende elektrische Felder zeigt sich, dass der Grad der möglichen Depolarisation sich deutlich verringert, wobei hingegen destabilisierende Felder zu einer Umpolung der Probe führen können. Es wird zudem deutlich, dass während des mechanischen Entlastungsprozesses hinreichend große positive Felder für eine Rückgewinnung der ursprünglichen Polarisationszustände sorgen. Im ferroelastischen Verhalten zeigt sich, dass die aufzubringende Koerzitivspannung zur Initiierung von Umklappprozessen sich durch stabilisierend wirkende elektrische Felder zum Teil deutlich erhöht.



**Abbildung 4.15:** Einfluss von überlagerten elektrischen Felder mit unterschiedlichen Belastungsniveaus auf den Verlauf des mechanischen Depolarisationsverhaltens und der ferroelastischen Hysterese. Die experimentellen Ergebnisse für die Piezokeramik PIC 151 sind aus ZHOU et al. [142] entnommen.

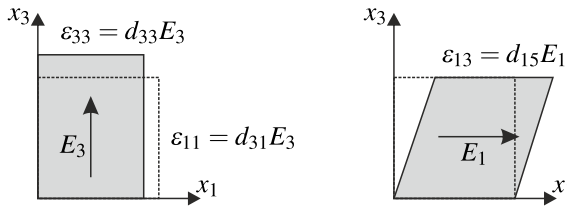
### 4.2.3 Makroskopisches Kleinsignalverhalten

Das zuvor behandelte Großsignalverhalten bei hohen Amplituden des elektrischen Feldes und der mechanischen Spannung ist nach der Durchführung eines initialen Polungsprozesses in der Regel von untergeordneter technischer Relevanz. Vielmehr spielt das Kleinsignalverhalten bei deutlich geringerer Ansteuerung eine wichtige Rolle in Ingenieursanwendungen. Für Sensor- und Aktorsysteme ist es sogar wichtig, elektrische und mechanische Einwirkungen oberhalb der Koerzitivwerte zu verhindern, um die Mikrostruktur und damit die Funktionalität des Materials durch irreversible Domänenumklappprozesse nicht zu beeinträchtigen. Der technisch nutzbare Bereich der indirekten Piezoelektrizität in ferroelektrischen Keramiken liegt in der Regel bei weniger als 100 V/mm um den Arbeitspunkt, welcher nach dem Entlastungsvorgang infolge des initialen Polungsprozesses eingenommen wird. In diesem Bereich verhält sich das Material annähernd *linear piezoelektrisch*, vgl. Abb. 4.11. Die lineare Materialantwort in Form von Polarisationsänderungen begründet sich zum einen durch geringfügige Verschiebungen der mikroskopischen Dipole der Einheitszellen. Ein nicht vernachlässigbarer Anteil wird aber auch durch reversibles Umklappen von Domänen verursacht, welche nach Entlastung wieder zurück in ihre ursprüngliche Lage zurückspringen, vgl. [126]. Aufgrund der durch die Polungsrichtung vorgegebene Anisotropie im Material verhält sich die Piezoelektrizität auf makroskopischer Skala eines Polykristalls bei variierenden Belastungsrichtungen unterschiedlich. Diese Materialeigenschaft wird im Allgemeinen als *transversale Isotropie* bezeichnet, wobei deren Vorzugsrichtung durch den makroskopisch gemittelten Polarisationsvektor gegeben ist. Die Komponenten des in Abschn. 2.4.4 eingeführten piezoelektrischen Kopplungstensors in (2.79) können dann auf drei unabhängige reduziert werden, welche im Fall des indirekten Effektes den in technischen Anwendungen häufig genutzten longitudinalen, transversalen und schubartigen Deformationsmoden entsprechen.

Der piezoelektrische Kopplungstensor (2.79) für ein in  $x_3$ -Richtung gepoltes Material kann in Vektor-Matrix-Notation dann zu

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

geschrieben werden. Die darin enthaltenen Materialparameter  $d_{33}$  und  $d_{31}$  entsprechen der longitudinalen und transversalen piezoelektrischen Konstanten, der Parameter  $d_{15} = 2d_{113} = 2d_{223}$  charakterisiert den piezoelektrischen Schubeffekt. Die zugehörigen durch den indirekten Effekt verursachten Deformationsmoden sind in Abb. 4.16 dargestellt.



**Abbildung 4.16:** Durch den indirekten piezoelektrischen Effekt hervorgerufen Deformationsmoden bei einer in  $x_3$ -Richtung gepolten Probe.

## 4.2.4 Makroskopische Erscheinung der Flexoelektrizität

Die Erscheinung des flexoelektrischen Effektes auf makroskopischer Skala soll im Folgenden anhand von experimentellen Beobachtungen diskutiert werden. Eine genaue Quantifizierung der flexoelektrischen Eigenschaften eines Material ist sehr schwierig, da eine durch äußere Einwirkung hervorgerufene Materialantwort immer durch weitere Effekte, wie z. B. Piezoelektrizität, Ferroelektrizität

oder Elektrostriktion<sup>8</sup>, überlagert wird. Eine Isolierung vom meist dominanten piezoelektrischen Effekt ist zum Beispiel durch eine Versuchsdurchführung oberhalb der CURIE-Temperatur möglich, siehe [151]. Diese Herangehensweise ist allerdings aufgrund der starken Temperaturabhängigkeit der flexoelektrischen Kopplungskoeffizienten mit Nachteilen verbunden [130]. Eine Möglichkeit für eine Untersuchung bei Raumtemperatur besteht in der Betrachtung ungepolter Proben in einem thermisch depolarisierten Zustand. Hierbei ist aber nur bei äußeren elektrischen oder mechanischen Einwirkungen unterhalb der Koerzitivwerte mit einem linearen flexoelektrischen Verhalten zu rechnen. Durch hervorgerufene Umklappprozesse im Material wird die Systemantwort durch ferroelektrische und piezoelektrische Anteile stark beeinflusst.

Von MA und CROSS [152] wird der direkte flexoelektrische Effekt im Rahmen eines 4-Punkt-Biegeversuchs untersucht. Die ungepolte polykristalline Probe mit den Dimensionen 60 mm × 7 mm × 3 mm besteht aus dem kommerziellen Material PZT-5H der Firma TRS Ceramics Company, State College, Pennsylvania (USA). Der Vorteil eines 4-Punkt-Biegeversuchs ist, dass aufgrund des konstanten Momentenverlaufs im Feld zwischen den Lasteinleitungspunkten ohne Querkräfte die hervorgerufenen homogenen Spannungs- und Dehnungszustände unter Annahme einer Balkentheorie sehr einfach abgeschätzt werden können. Danach ergibt sich ein linearer Verlauf der axialen Dehnung  $\varepsilon_{11}$  über die Balkenhöhe und somit ein konstanter Dehnungsgradient  $\partial\varepsilon_{11}/\partial x_3$ . Nach dieser Annahme verursacht der lineare flexoelektrische Transversaleffekt eine über die Probenhöhe konstante quasistatische Polarisierung in Dickenrichtung. Dieser Zusammenhang kann als

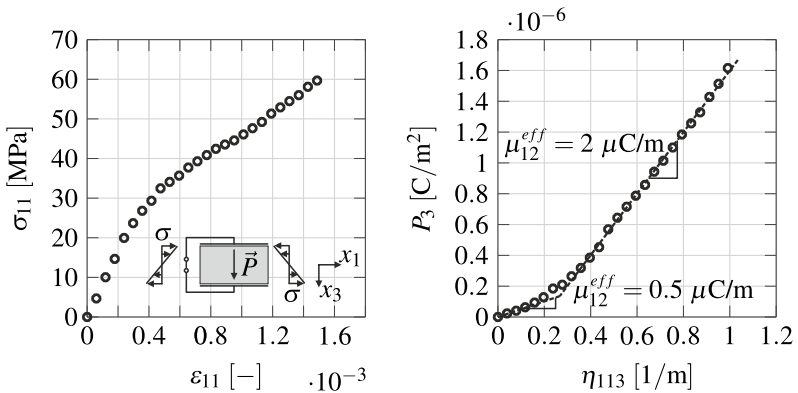
$$P_3 = \mu_{12}^{eff} \frac{\partial\varepsilon_{11}}{\partial x_3} \quad (4.2)$$

geschrieben werden, wobei  $\mu_{12}^{eff}$  dem effektiven flexoelektrischen Transversal-

---

<sup>8</sup> Elektrostriktion beschreibt die in para- und ferroelektrischer Phase auftretende Kopplung der Verzerrungen zum Quadrat des elektrischen Feldes, siehe [149, 150]. Dieser Effekt höherer Ordnung ist im Vergleich zur Piezoelektrizität meist sehr klein und wird daher in technisch relevanten Anwendungen häufig vernachlässigt.

koeffizient entspricht<sup>9</sup>. Die hervorgerufene Polarisation kann über Messung der Oberflächenladungen an den auf Ober- und Unterseite der Probe angebrachten Elektroden ermittelt werden. In Abb. 4.17 ist das von MA und CROSS [152] aufgezeichnete Spannungs-Dehnungs-Verhalten der äußeren Randfasern der Probe, sowie die hervorgerufene Polarisation  $P_3$  infolge des Dehnungsgradienten  $\eta_{113} = \varepsilon_{11,3}$  bei einer wegkontrollierten Belastungsgeschwindigkeit von 2 mm/min dargestellt. Auffällig dabei ist ein Steifigkeitsabfall ab einem Spannungsniveau von ca. 25 MPa, welcher von MA und CROSS [152] durch das Einsetzen von ferroelastischen Umklappprozesse im Material erklärt wird. Die Beobachtung einer verbleibenden Krümmung in der Probe nach Entlastung bestätigt diese Annahme.



**Abbildung 4.17:** Das von MA und CROSS [152] im Rahmen eines 4-Punkt-Biegeversuchs aufgezeichnete Spannungs-Dehnungs-Verhalten der äußeren Randfasern der Probe, sowie die durch den direkten flexoelektrischen Effekt verursachte Entwicklung der makroskopischen Polarisation. Die wegkontrollierte Belastungsgeschwindigkeit beträgt 2 mm/min.

Bei Betrachtung der Entwicklung der durch Flexoelektrizität erzeugten Polarisation in Abb. 4.17 (rechts) wird ebenfalls eine Änderung im Systemverhaltens deutlich. Dabei können zwei Bereiche identifiziert werden: Zunächst eine mo-

<sup>9</sup> Dieser Koeffizient entspricht nicht der Flexotensorkomponente  $\mu_{12}$  in (2.86). Beide Parameter können aber durch sinnvolle Annahmen in Verbindung gesetzt werden, vgl. [153, 154].

derate flexoelektrische Kopplung mit annähernd linearem Materialverhalten bei niedrigen erzeugten Verzerrungsgradienten. Beim Einsetzen der ferroelastischen Umklappvorgänge lässt sich auch einer Veränderung der flexoelektrischen Eigenschaften des Materials beobachten, was sich in einer Vervierfachung des effektiven flexoelektrischen Transversalkopplungsmoduls widerspiegelt. Die beim Versagen der Probe gemessene maximale Polarisation von ca.  $1.6 \mu\text{C}/\text{m}$  ist verhältnismäßig sehr klein. Über die dielektrischen Eigenschaften des Materials lässt sich eine erzeugte äquivalente elektrische Feldstärke zu  $100 \text{ V}/\text{m}$  ermitteln [152]. Dies entspricht lediglich etwa  $0.014 \%$  der Koerzitivfeldstärke dieser Piezokeramik. Somit sind keine elektrisch getriebenen Domänenumklappprozesse infolge des flexoelektrischen Effektes in diesem Experiment zu erwarten. Aufgrund des Größeneffektes der Flexoelektrizität erscheint erst bei deutlich geringeren Probenabmessungen das Erreichen von Feldstärken im Koerzitivbereich und damit das Einsetzen von Polungsprozessen als realistisch.

Ein in experimentellen Untersuchungen beobachteter Effekt, welcher bisher in dieser Arbeit noch nicht behandelt wurde, ist der sogenannte inverse flexoelektrische Effekt<sup>10</sup>. Dabei handelt es sich um eine Umkehr der Wirkungsweise des direkten flexoelektrischen Effektes. Die Phänomenologie beschreibt somit einen durch Polarisation im Material hervorgerufenen Verzerrungsgradienten<sup>11</sup>. Experimentell konnte dieser Effekte z. B. von BURSIAK und ZAIKOVSKII [156] an ungepolten Filmen aus  $\text{BaTiO}_3$  in der ferroelektrischen Phase nachgewiesen werden. Die Probenabmessungen betragen dabei  $5 \text{ mm} \times 2 \text{ mm} \times 2.5 \mu\text{m}$ . Auf der Ober- und Unterseite wurde jeweils eine Elektrodenschicht angebracht, um ein elektrisches Feld in Dickenrichtung erzeugen zu können. Beim Anlegen einer elektrischen Spannung an den Elektroden konnte eine Verbiegung der Proben beobachtet werden. In Abb. 4.18 (links) ist die von BURSIAK und ZAIKOVSKII [156] gemessene Krümmung  $\kappa$  des Filmes in Abhängigkeit des äußeren elektrischen Feldes dargestellt, wobei sich ein nichtlinearer Zusammenhang einstellt. Durch Zyklie-

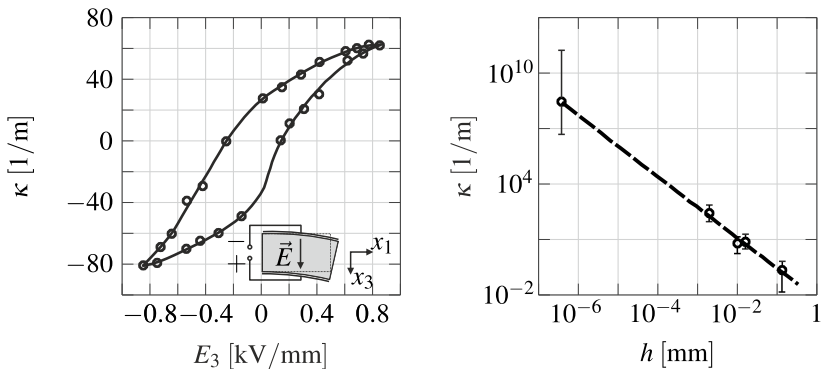
---

<sup>10</sup> Nicht zu verwechseln mit dem indirekten flexoelektrischen Effekt aus den Abschnitten 2.4.5 und 4.1.3.

<sup>11</sup> Von BURSIAK und TRUNOV [155] wird gezeigt, dass dieser Effekt aus thermodynamischen Gesichtspunkten auftreten muss.



ren des elektrischen Feldes ergibt sich ein dissipatives hysteretisches Verhalten, was auf verursachte Domänenumklappprozesse im Material hindeutet. Die aus der Hysterese ableitbare Koerzitivfeldstärke liegt auch in einer mit der Literatur übereinstimmenden Größenordnung, vgl. z. B. [157]. Eine zur dielektrischen Hysterese erkennbare Ähnlichkeit, deutet auf die durch den inversen flexoelektrischen Effekt beschriebene direkte Kopplung der Krümmung zu dem im Material hervorgerufenen Polarisationszustand hin. Untersuchungen bei unterschiedlichen Temperaturen zeigten zudem, dass die gemessenen Krümmungen bei ansteigenden Temperaturen bis zum ferroelektrischen-paraelektrischen Phasenübergang stark ansteigen und danach wieder stark abnehmen. Diese Eigenschaft ist im Einklang mit der Annahme, dass sich die flexoelektrischen Eigenschaften proportional zu der dielektrischen Suszeptibilität mit ähnlicher Temperaturabhängigkeit verhalten [158].



**Abbildung 4.18:** Links: Von BURSIAK und ZAIKOVSKII [156] aufgezeichnetes hysteretisches Verhalten der Filmkrümmung über das angelegte elektrische Feld. Rechts: Beobachteter Größeneffekt in Abhängigkeit der auftretenden Filmkrümmung zur gewählten Probendicke.

Die ausgeprägte Größenabhängigkeit der Flexoelektrizität zeigt sich auch im Fall des inversen Effektes. In Abb. 4.18 (rechts) sind die BURSIAK und ZAIKOVSKII [156] dokumentierten Filmkrümmungen in Abhängigkeit der Probendicke  $h$  aufgetragen. Hieraus verdeutlicht sich die zunehmende Relevanz der flexoelek-

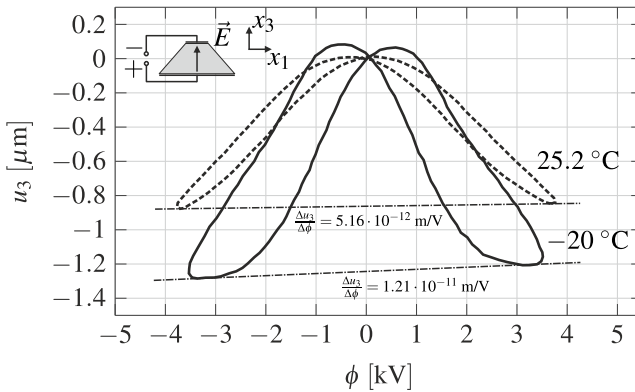
trischen Eigenschaften eines Materials bei abnehmenden Probendimensionen. Ähnliche Untersuchungen zum inversen flexoelektrischen Effekt finden sich auch in [159–162].

Eine experimentelle Untersuchung des indirekten flexoelektrischen Effektes gestaltet sich in der Regel als sehr herausfordernd. Selbst bei Untersuchungen an ungepolten Proben mit verschwindendem Einfluss der Piezoelektrizität wird die mechanische Materialantwort bei elektrischer Anregung stark durch elektrostriktive Dehnungen dominiert, was eine isolierte Betrachtung der flexoelektrischen Eigenschaften erschwert. Zur Erzeugung von elektrischen Feldgradienten sind zudem besondere Probengeometrien vonnöten, in denen sich sehr inhomogene Feldverteilungen einstellen. Dabei können infolge lokaler Feldüberhöhungen Domänenumklappprozesse im Material auftreten, welche die mechanische Antwort zudem beeinflussen. In HANA et al. [163] wird der indirekte flexoelektrische Effekt an ungepolten Proben in Form eines Konus aus Blei-Magnesium-Niobat-Blei-Titanat (PMNT) untersucht. Die mit Silberelektroden bedeckten kreisrunden Ober- und Unterseiten des Konus besitzen einen Durchmesser von 3 mm bzw. 10 mm. Die Probenhöhe beträgt 4 mm. Bei elektrischer Kontaktierung der Elektroden wird infolge der Verjüngung der Probenquerschnittsfläche ein elektrischer Feldgradient über die Probenhöhe erzeugt. Die resultierenden Dehnungen des Materials lassen sich durch Aufzeichnen der Verschiebungen an der Oberseite der Probe erfassen. In Abb. 4.19 ist die über die Oberseite gemittelte Verschiebung in Abhängigkeit der angelegten elektrischen Spannung bei zwei unterschiedlichen Umgebungstemperaturen dargestellt<sup>12</sup>. Die aufgezeichneten Hysteresen werden durch das elektrostriktive Materialverhalten dominiert, es kann aber auch aufgrund der Pfadveränderung bei Be- und Entlastung vereinzelt von dissipativen Umklappprozessen im Material ausgegangen werden. Diese können vor allem in den Bereichen der Elektrodenkanten in der Probe erwartet werden. Die vorhandene Wirkung des indirekten flexoelektrischen Effektes kann anhand einer Asymmetrie der Verschiebungsamplitude manifestiert werden. Ein Wechsel des Vorzeichens in

---

<sup>12</sup> Das Vorzeichen der Verschiebungen, sowie das eingezeichnete Koordinatensystem ist aus [163] direkt übernommen. Aus Sicht des Autors müsste die Verschiebung aber ein positives Vorzeichen haben, da die Elektrostriktion zu einer Verlängerung der Probe führt.

der elektrischen Spannung geht auch mit einem Vorzeichenwechsel des elektrischen Feldgradienten einher. Je nach Wirkungsweise lässt sich eine konstruktive oder destruktive Interaktion der durch indirekte Flexoelektrizität erzeugten Dehnungen mit dem elektrostriktiven Verhalten beobachten. Durch die Differenzen der maximalen Auslenkungen im positiven und negativen Potentialbereich lässt sich die Größenordnung des indirekten flexoelektrischen Effektes abschätzen, vgl. Abb. 4.19. Auffällig in den Versuchsergebnissen von HANA et al. [163] ist, dass sich mit sinkenden Umgebungstemperaturen weit unterhalb der Zimmertemperatur ein starker Anstieg der indirekten flexoelektrischen Kopplungseigenschaften beobachten lässt. Vergleichbare Untersuchungen zur indirekten Flexoelektrizität an konischen oder pyramidenförmigen Proben finden sich z. B. auch in [139, 164]. In [151, 165] werden inhomogene Feldverteilungen durch aufgedruckte Elektrodenlayouts innerhalb dünnwandiger ferroelektrischer Schichten erzeugt. Der Nachweis einer Wirkung des indirekten flexoelektrischen Effektes in solchen Strukturen gestalten sich dabei allerdings als schwierig.



**Abbildung 4.19:** An konischen Proben von HANA et al. [163] aufgezeichnete mittlere Verschiebungsantwort bei zyklischer Änderung der elektrischen Spannung. Die Wirkung des indirekten flexoelektrische Effektes zeigt sich durch eine ausgebildete Asymmetrie der Amplituden im positiven und negativen Spannungsbereich.



# 5 Modellierung von Domänenumklappprozessen in Ferroelektrika

Wie in Kapitel 4 gezeigt spielen die mikrostrukturellen Domänenumklappprozesse eine entscheidende Rolle in der Beschreibung des Materialverhaltens ferroelektrischer Funktionskeramiken. Für belastbare Vorhersagen der Materialantwort bei gegebener elektro-mechanischer Einwirkung beliebiger Größenordnung sind somit ausgefeilte und leistungsstarke Materialmodelle vonnöten. In diesem Kapitel wird ein Materialmodell vorgestellt, das in der Lage ist, alle relevanten Kopplungsphänomene von Ferroelektrika abzubilden und gleichzeitig kompakt genug ist, um effizient in Finite-Elemente-Berechnungen integriert werden zu können.

## 5.1 Vorüberlegungen zum Materialmodell

Ein grundlegendes Merkmal ferroelektrischer Materialien ist die Eigenschaft die Orientierung der  $c$ -Achsen und auch der spontanen Polarisationsvektoren unter der Einwirkung äußerer mechanischer Spannungen oder elektrischer Felder zu verändern. Bei einer Betrachtung auf Einheitszellenebene sind  $180^\circ$ - und  $90^\circ$ -Umklappvorgänge die zwei möglichen Szenarien, vgl. Abb. 5.2 a). Beim  $180^\circ$ -Umklappen ändert sich die Orientierung des spontanen Polarisationsvektors  $\vec{p}^s$ , die Ausrichtung der  $c$ -Achse  $\vec{c}$  bleibt jedoch unangetastet. Im Gegensatz dazu gehen  $90^\circ$ -Umklappprozesse mit einer Rotation der  $c$ -Achse und damit mit einer annähernd volumentreuen Änderung des Zustands der spontanen Dehnung  $\epsilon^s$  der

Einheitszelle einher. Innerhalb einer Einheitszelle ist zudem davon auszugehen, dass die c-Achse  $\vec{c}$  und der Vektor der spontanen Polarisation  $\vec{p}^s$  immer koaxial orientiert sind.

Die Körner des polykristallinen Gefüges ferroelektrischer Materialien sind in Domänen unterteilt, welche eine bestimmte Anzahl von Einheitszellen mit einer spontaner Polarisation gleicher Orientierung enthalten, vgl. Abb. 5.2 b). Bei äußeren mechanischen oder elektrischen Einwirkungen können die Domänen aufgrund ihrer unvermeidlichen Wechselwirkung im Kristall nicht alle in die vorgegebene Belastungsrichtung ausgerichtet werden. Aufgrund dieser natürlichen Imperfektion, muss für die über einen Bereich mit einer ausreichend großen Anzahl von Domänen gemittelten Orientierungen der c-Achsen  $\vec{c}$  und spontanen Polarisationsvektoren  $\vec{p}^s$  die Annahme der Koaxialität fallen gelassen werden. Um die komplexen Einflüsse des mikroskopischen Materialzustands auf die makroskopisch messbaren Kenngrößen in einem phänomenologischen Modellierungsansatz zu berücksichtigen, sind sinnvolle Annahmen zu deren Beschreibung erforderlich.

## 5.2 Mikroskopisch motiviertes Materialmodell

Zur Beschreibung des nichtlinearen hysteretischen elektro-mechanischen Verhaltens ferroelektrischer Funktionskeramiken findet in dieser Arbeit ein Modellierungsansatz seine Anwendung, welcher ursprünglich in einer vereinfachten uniaxialen Formulierung von KAMLAH und JIANG [22] eingeführt wurde. In diesem auf der freien GIBBS-Energie basierenden Ansatz (vgl. Abschn. 2.5.4.3) werden mikroskopisch motivierte innere Zustandsvariablen zur Darstellung von geschichtsabhängigen dissipativen Effekten eingeführt. Eine allgemeinere multiaxiale Formulierung wurde danach von KAMLAH und WANG [23] realisiert. Die Implementierung in eine Finite-Elemente-Umgebung wurde von LASKEWITZ und KAMLAH [166] vorgenommen. Auf ähnliche Art und Weise führten MEHLING et al. [24] ein auf der elektrischen GIBBS-Energie (vgl. Abschn. 2.5.4.2) basierendes Modell mit einer alternativen Form von mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen ein. Der Gegenstand des vorliegenden Abschnitts ist

die Vorstellung einer Modellvariante, die auf den bereits erwähnten bestehenden Ansätzen aufbaut und sich in den auf der freien HELMHOLTZ-Energie basierenden variationellen Rahmen aus Kap. 3 einbetten lässt.

### 5.2.1 Einführung innerer Zustandsvariablen

In Kap. 3 wurde im Rahmen einer makroskopischen Kontinuumstheorie ein Satz an inneren Zustandsvariablen eingeführt, welche die durch mikrostrukturelle Prozesse verursachten dissipativen Effekte repräsentieren. Zu deren Identifizierung sollen die in Abschn. 5.1 getroffenen Vorüberlegungen ihre Berücksichtigung finden. Für eine vollständige Beschreibung des Materialzustands von Ferroelektrika sind sowohl Informationen über mikromechanische Strukturänderungen, verursacht durch Domänenumklappen, als auch über die damit verbundenen Änderungen des remanenten Polarisationszustands erforderlich. Zu diesem Zweck müssen Kenngrößen eingeführt werden, welche diese beiden Eigenschaften im gemittelten Sinne repräsentativ für einen Materialpunkt im Kontinuum darstellen. Jedem Materialpunkt wird dabei ein für das betrachtete Material repräsentatives gedankliches Volumen zugesprochen, welches eine hinreichende Anzahl an Körnern und Domänen enthält.

Um eine Charakterisierung der mikrostrukturellen Formänderungen zu motivieren, wird der ursprünglich von KAMLAH und JIANG [22] vorgestellte Ansatz verfolgt und die Information der  $c$ -Achsen-Orientierung der Einheitszellen genutzt. Die  $c$ -Achse einer Einheitszelle kann durch den Einheitsvektor

$$\vec{c}(\vartheta, \varphi) = \begin{bmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{bmatrix} \quad \text{mit} \quad \|\vec{c}\| = 1 \quad (5.1)$$

in Abhängigkeit der beiden EULER-Winkel  $\vartheta$  und  $\varphi$  beschrieben werden [24]. Jeder dieser Orientierungsvektoren  $\vec{c}$  zeigt vom Ursprung eines kartesischen Koordinatensystems im euklidischen Raum auf die Oberfläche einer Einheitskugel,

welche durch die eingeführten EULER-Winkel parametrisiert wird. Wenn man die Abbildung der Orientierungsvektoren aller c-Achsen eines repräsentativen Materialvolumens auf einer Einheitskugel betrachtet, dann wäre möglicherweise für bestimmte Richtungen in dieser Kugel eine höhere Dichte von c-Achsen erkennbar. Eine solche Verdichtung kann aufgrund einer bevorzugten Ausrichtung von Einheitszellen im betrachteten Materialvolumen verursacht sein. Dieses Gedankenexperiment motiviert die Definition einer Funktion, welche die Verteilung der Orientierungen der c-Achsen im kugelförmigen Raum beschreibt. Zu diesem Zweck wird eine kontinuierliche *Orientierungsverteilungsfunktion*<sup>1</sup> (ODF) (vgl. [24])

$$\hat{F}(\vartheta, \varphi, \mathbf{A}) := k_n^F \vec{c} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{c} \quad (5.2)$$

eingeführt, welche die Wahrscheinlichkeit der Orientierung einer beliebigen c-Achse im repräsentativen Volumen eines Materialpunktes in eine bestimmte Richtung beschreibt. Der positive skalare Wert  $k_n^F$  in dieser ODF ist ein noch zu bestimmender Normierungsfaktor. Die grundlegenden Eigenschaften der ODF in (5.2) sind durch den symmetrischen *Texturtensor* zweiter Stufe  $\mathbf{A}$  gegeben, welcher die Information der räumlichen Orientierungen und Verteilung der c-Achsen für einen betrachteten Materialpunkt beschreibt [24]. Dieser Tensor entspricht der ersten mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariable

$$\mathbf{q}_1 := \mathbf{A} = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_i^A. \quad (5.3)$$

In (5.3) wird der Texturtensor durch eine spektrale Zerlegung in Abhängigkeit seiner Eigenwerte  $\alpha_i$  und Eigenvektoren  $\vec{e}_i^A$  definiert. Physikalisch gesehen kann der erste (dritte) Eigenwert als der Anteil der c-Achsen interpretiert werden, welcher in die am meisten (am wenigsten) bevorzugte Richtung orientiert ist. Diese Richtung ist dann durch den ersten (dritten) Eigenvektor gegeben. Mit diesen Informationen lässt sich die polykristalline Textur des für einen Materialpunkt repräsentativen Volumens näherungsweise charakterisieren, vgl. auch Abb. 5.2 d).

<sup>1</sup> Man beachte den quadratischen trigonometrischen Charakter dieser Form der ODF, siehe (5.1). Die Abkürzung ODF steht für die englische Bezeichnung 'orientation distribution function'.



Durch probabilistisch und physikalisch motivierte Überlegungen ergeben sich einige Einschränkungen, welche durch die Form der ODF in (5.2) zu erfüllen sind [24]. Als Grundlagen einer jeden Wahrscheinlichkeitstheorie eignen sich die Axiome von KOLMOGOROW [167]. Aus einem darin enthaltenen Axiom ergibt sich die Forderung der Nicht-Negativität der Wahrscheinlichkeit und damit im vorliegenden Fall die Nicht-Negativität der ODF. Unter der Annahme der Koaxialität der Orthonormalbasis der  $c$ -Achsen und der Eigenvektoren des Texturtensors, kann (5.2) mit (5.1) geschrieben werden zu

$$\begin{aligned} \hat{F}(\vartheta, \varphi, \mathbf{A}) &= k_n^F (\alpha_1 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi + \alpha_2 \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi + \alpha_3 \cos^2 \vartheta) \geq 0 \\ &\implies \alpha_i \geq 0, \end{aligned} \quad (5.4)$$

woraus sich als notwendige Bedingung für die Erfüllung des Axioms die Nicht-Negativität der Eigenwerte des Texturtensors  $\alpha_i$  ergibt. Ein zweites Axiom zur Sicherstellung einer plausiblen probabilistischen Konstruktion der ODF fordert, dass bei jedem Zufallsexperiment mindestens eines der möglichen Ereignisse eintritt. Diese Eigenschaft wird auch als *Normiertheit* bezeichnet und kann im Falle der ODF in (5.2) mathematisch präzise mit

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \hat{F}(\vartheta, \varphi, \mathbf{A}) \sin \vartheta \, d\varphi \, d\vartheta = 1 &\iff k_n^F \frac{4}{3} \pi (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3) = 1 \\ &\implies \text{tr}(\mathbf{A}) = \text{konst.} \end{aligned} \quad (5.5)$$

formuliert werden, woraus sich die Forderung nach einer konstanten Spur des Texturtensors ableiten lässt. Die letzte Anforderung an die ODF ergibt sich aus eher physikalischen Überlegungen. Diese behandeln die Darstellbarkeit eines ‚jungfräulichen‘ Materialzustandes nach dem Sinterprozess. Für einen solchen thermisch depolarisierten Zustand kann eine gleichmäßige Verteilung der  $c$ -Achsenorientierung angenommen werden. Daher sollte eine brauchbare ODF für diesen Fall eine konstante Wahrscheinlichkeit über die gesamte Einheitskugel beschreiben. Unter Berücksichtigung der beiden anderen Bedingungen in (5.4) und (5.5) muss die notwendige Bedingung

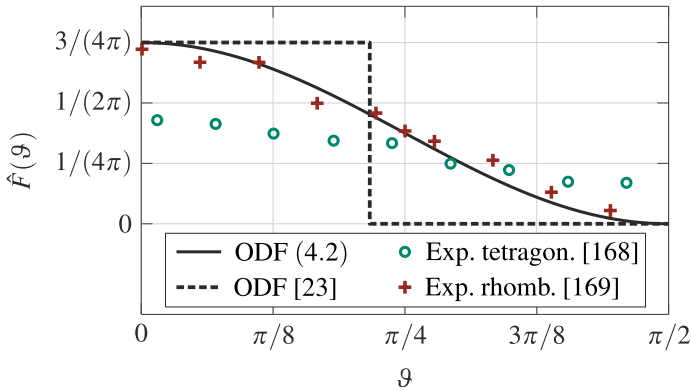
$$\hat{F}(\vartheta, \varphi, \mathbf{A}_0) = \text{konst.} \quad (5.6)$$

durch einen möglichen Ausgangszustand  $A_0$  des Texturtensors erfüllt sein.

Unter Berücksichtigung der diskutierten Restriktionen (5.4) bis (5.6) kann durch die einfachen Wahl

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = 1 \quad \text{und} \quad k_n^F = \frac{3}{4\pi} \quad \implies \quad \mathbf{A}_0 = \frac{1}{3}\mathbf{I} \quad (5.7)$$

der Ausgangszustand des Texturtensors bestimmt werden, vgl. Abb. 5.2 d) (Mitte). In Abb. 5.1 ist die hier verwendete ODF (5.2) eingeführt von MEHLING et al. [24] für einen vollständig ausgerichteten Zustand in einer vereinfachten Darstellung in Abhängigkeit eines EULER-Winkels illustriert. Der Vergleich zu experimentell ermittelten Orientierungsverteilungen für PZT sowohl in der tetragonalen als auch in der rhomboedrischen Phase zeigt eine zufriedenstellende Approximationsgüte der gewählten ODF. Zudem ist die stark vereinfachte Form einer ODF aus dem Modell in KAMLAH und WANG [23] zum Vergleich mit aufgeführt. Hieraus verdeutlicht sich die Weiterentwicklung und Verfeinerung des Modells in [24] im Vergleich zum ursprünglichen Ansatz in [23].



**Abbildung 5.1:** Darstellung der in dieser Arbeit gewählten Form der ODF von MEHLING et al. [24] für einen vollständig ausgerichteten Zustand im Vergleich mit experimentell ermittelten Orientierungsverteilungen in einem PZT-Polykristall in der tetragonalen [168] und rhomboedrischen Phase [169]. Zudem ist ein stark vereinfachter Ansatz einer ODF von KAMLAH und WANG [23] mit dargestellt.

Aufgrund der im Polykristall nicht zwangsläufig vorhandenen Koaxialität der gemittelten Orientierung der c-Achsen und des gemittelten spontanen Polarisationsvektors (vgl. Abschn. 5.1) reichen die im Texturtensor enthaltenen Informationen nicht aus, um den makroskopischen Zustand eines Materialpunktes in einem Ferroelektrikum vollständig zu beschreiben. Dies zeigt sich beispielsweise auch in Fällen, in denen eine Umorientierung des Polarisationszustandes ohne Änderung in der c-Achsenausrichtung erfolgt. Dies ist z. B. bei  $180^\circ$ -Umklappvorgängen der Fall. Daher bedarf es der Einführung einer zweiten mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen, um zusätzliche Informationen der Dipolorientierungen zu erfassen. Durch den relativen Polarisationsvektor

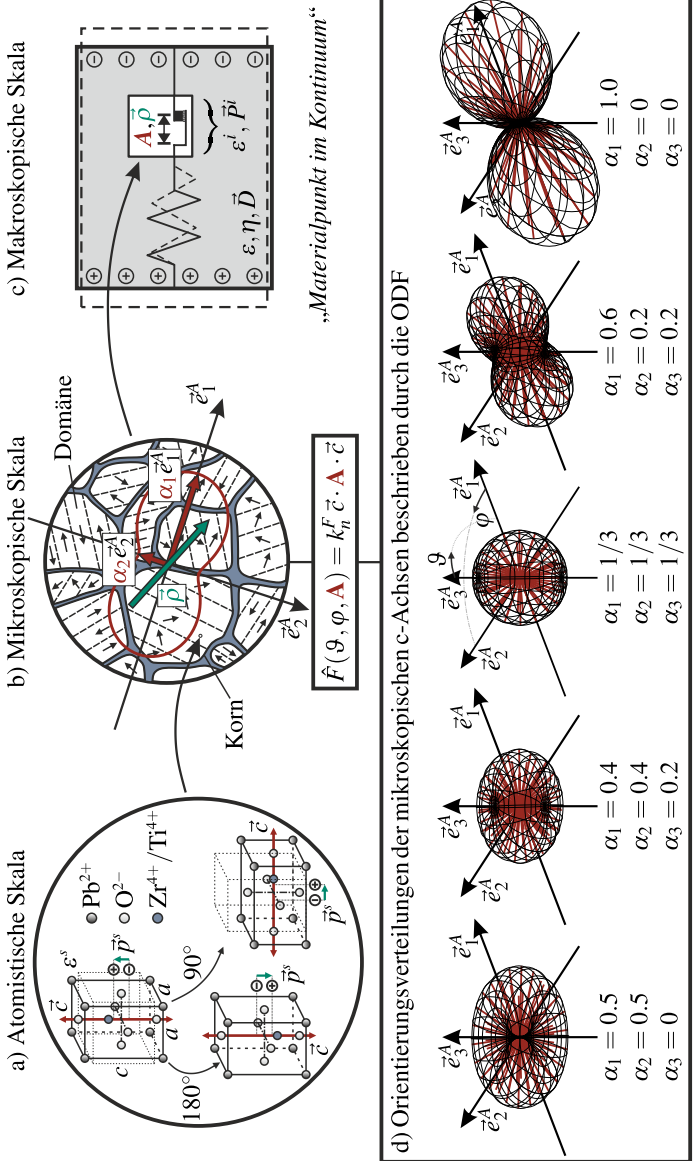
$$q_2 := \vec{\rho} \quad \text{mit} \quad 0 \leq \|\vec{\rho}\| \leq 1 \quad (5.8)$$

ist die im Mittel bevorzugte Ausrichtungen der mikroskopischen Dipole in einem repräsentativen Volumen eines Materialpunktes gegeben. Durch dessen Betrag wird zudem der Anteil der in dieser Richtung gepolten Einheitszellen repräsentiert. Die natürliche Obergrenze des Betrags des relativen Polarisationsvektors in (5.8) stellt eine Konfiguration dar, bei der alle Einheitszellen in dieselbe Richtung gepolt sind. Auf makroskopischer Ebene kann dieser Zustand mit dem Sättigungswert eines über ein Materialpunktvolumen gemittelten Polarisationszustandes in Verbindung gebracht werden.

Schließlich lassen sich die eingeführten mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen, sowie die zugehörigen arbeitskonjungierten dissipativen inneren Triebkräfte wie folgt zusammenfassen (vgl. auch Kap. 3.3):

$$q := \{A, \vec{\rho}\} \quad \text{und} \quad f^q := \{f^A, \vec{f}^p\}. \quad (5.9)$$

Die hier skizzierte Motivation der inneren Zustandsvariablen erinnert unter Umständen auf den ersten Blick an eine sehr einfache mathematische Homogenisierungsmethode, aus der gemittelte Werte von mikroskopischen Größen für makroskopische Berechnungen hervorgehen. Dies ist jedoch keinesfalls zutreffend. Vielmehr soll mithilfe eines Gedankenexperiments eine möglichst physikalisch



**Abbildung 5.2:** a) Einheitszellenkonfigurationen mit c-Achsen-Orientierung  $\vec{c}$  und spontanem Polarisationsvektor  $\vec{p}$ . b) Mikroskopische Betrachtung eines Materialpunktes mit repräsentativer Anzahl an Körnern und Domänen, sowie die Darstellung der mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen  $\mathbf{A}$  und  $\vec{p}$ . c) Vereinfachtes Materialpunktelement auf der makroskopischen Skala. d) Orientierungsverteilungsfunktion (ODF) für verschiedene Kombinationen der Eigenwerte des Texturtenorsors  $\alpha_i$ .

sinnvolle und kompakte Auswahl von inneren Zustandsvariablen getroffen werden, welche eine Darstellung des beobachteten makroskopischen phänomenologischen Materialverhaltens ermöglichen. Rückschlüsse auf mikrostrukturell aufgelöste Veränderungen im Material sind bei einer makroskopischen Betrachtung auf Basis gemittelter Größen nicht möglich.

## 5.2.2 Verbindung zur makroskopischen Skala

Im nächsten Schritt werden die im vorangegangenen Abschnitt eingeführten mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen in eine makroskopische Kontinuumstheorie eingebettet. Ein ursprünglich aus der Plastizitätstheorie entstammender phänomenologischer Rahmen dient hierbei als eine bewährte Grundlage, vgl. z. B. [99, 170]. Danach wird für den dielektrischen Verschiebungsvektor und den infinitesimalen Verzerrungstensor eine additive Zerlegung

$$\vec{D} := \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}^r + \vec{P}^i = \vec{D}^r + \vec{P}^i(\vec{\rho}) \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\epsilon} := \boldsymbol{\epsilon}^r + \boldsymbol{\epsilon}^i(\mathbf{A}) \quad (5.10)$$

in *reversible* und *irreversible* Anteile angenommen. Im Rahmen einer Modellierung von Ferroelektrika wurde dieser zuallererst von BASSIOUNY et al. [171, 172] vorgeschlagen. Mit der in (5.10) eingeführten Abhängigkeit der makroskopischen irreversiblen Anteile zu den mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen wird eine skalenübergreifende Verbindung hergestellt, vgl. Abb. 5.2 c). Die Annahme dieser direkten Beziehungen folgt dem Konzept der Modelle von KAMLAH und JIANG [22], KAMLAH und WANG [23] sowie MEHLING et al. [24]. Der irreversible makroskopische Polarisationsvektor

$$\vec{P}^i(\vec{\rho}) = P^{sat} \vec{\rho} \quad (5.11)$$

wird durch eine direkte lineare Beziehung zum mikroskopischen relativen Polarisationsvektor  $\vec{\rho}$  ausgedrückt, gewichtet durch die für einen Polykristall experimentell messbare makroskopische Sättigungspolarisation  $P^{sat}$ .

In ähnlicher Weise kann der irreversible makroskopische Verzerrungstensor

$$\boldsymbol{\varepsilon}^i(\mathbf{A}) := \frac{3}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^{sat} \mathbf{A}^{Dev} \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}^{Dev} = \underbrace{\left( \mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right)}_{\mathbb{P}^{Dev}} : \mathbf{A}, \quad (5.12)$$

in Abhängigkeit des deviatorischen Anteils des Texturtensors  $\mathbf{A}$  eingeführt werden. Auch in diesem Fall erfolgt eine Skalierung durch die makroskopische Sättigungsdehnung  $\boldsymbol{\varepsilon}^{sat}$ , welche bei vollständiger Orientierung der Domänen am Polykristall zu beobachten ist. Das in (5.12) auftretende Symbol  $\mathbb{P}^{Dev}$  repräsentieren den vierstufigen deviatorischen Projektionstensor. Die Darstellung des irreversiblen Verzerrungstensors in (5.12) ausschließlich in Abhängigkeit vom deviatorischen Anteil des Texturtensors motiviert sich durch die in Experimenten zu beobachtenden volumentreuen irreversiblen Formänderungen bei Domänenumklappprozessen [146, 173–175].

### 5.2.3 Form der freien Helmholtz-Energie

Die in den Abschnitten 2.5.5 und 2.5.6 eingeführten Formen der freien HELMHOLTZ-Energie sollen nun auf eine Darstellung unter Einbeziehung von dissipativen Effekten im Materialverhalten erweitert werden. Hierbei findet die in (5.10) eingeführte Zerlegung der makroskopischen dielektrischen Verschiebung und der Verzerrungen, sowie die skalenübergreifenden Beziehungen aus (5.11) und (5.12) der irreversiblen Größen ihre Berücksichtigung. Unter Vernachlässigung der Effekte höherer Ordnung aus Flexoelektrizität kann die HELMHOLTZ-Energie der klassischen Piezoelektrizität (2.116) in der Form

$$\begin{aligned} \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \vec{D}, \mathbf{A}, \vec{\rho}) &= \Psi^r(\boldsymbol{\varepsilon}, \vec{D}, \mathbf{A}, \vec{\rho}) + \Psi^i(\mathbf{A}, \vec{\rho}) \\ &= \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i) : \mathbb{C}^D : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i) - (\vec{D} - \vec{P}^i) \cdot \mathbb{h} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\vec{D} - \vec{P}^i) \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot (\vec{D} - \vec{P}^i) + \Psi^i(\mathbf{A}, \vec{\rho}) \end{aligned} \quad (5.13)$$

angegeben werden. Hierbei wird eine additive Zerlegung der Energie in einen reversiblen und einen irreversiblen Anteil postuliert, vgl. hierzu [171, 176]. Der irreversible Anteil in (5.13) ist dabei nur von den inneren Zustandsvariablen abhängig und wird im weiteren Verlauf dieses Kapitels noch genauer definiert. Die Abhängigkeit des reversiblen Anteils von den inneren Variablen manifestiert sich zum einen durch die Beziehungen in (5.11) und (5.12), aber auch durch die Berücksichtigung der geschichtsabhängigen Anisotropieeigenschaften des piezoelektrischen Kopplungstensors in (2.76). In einem thermisch depolarisierten Ausgangszustand sollte dieser keine Kopplungseigenschaften aufweisen, was im Modell durch einen Nulltensor realisiert werden kann. Während eines Polungsprozesses kommt es durch das Umklappen der Domänen zu einer Entwicklung von transversalisotropen Materialeigenschaften. Damit einher geht die Ausbildung der piezoelektrischen Kopplungseigenschaften, vgl. Kap. 4. Eine Darstellung des piezoelektrischen d-Tensors, welche dieses geschichtsabhängige Materialverhalten abbildet, ist durch

$$d_{kij} = (d_{33} - d_{31} - d_{15})\rho_k\rho_i\rho_j + d_{31}\rho_k\delta_{ij} + \frac{1}{2}d_{15}(\delta_{ki}\rho_j + \delta_{kj}\rho_i) \quad (5.14)$$

über eine direkte Abhängigkeit vom relativen Polarisationsvektor  $\vec{\rho}$  gegeben. Die Materialparameter  $d_{33}$ ,  $d_{31}$  und  $d_{15}$  in (5.14) sind die klassischen piezoelektrischen Ingenieurkonstanten, deren Charakteristik bereits in Abschn. 4.2.3 erläutert wurde<sup>2</sup>. Die Materialtensoren in (5.13) können dann in Abhängigkeit des piezoelektrischen d-Tensors in (5.14) geschrieben werden. Es resultiert der Elastizitätstensor bei konstanter dielektrischer Verschiebung

$$\mathbb{C}^D(\vec{\rho}) = \mathbb{C}^E + (\mathfrak{d}(\vec{\rho}) : \mathbb{C}^E)^T \cdot \mathfrak{h}(\vec{\rho}), \quad (5.15)$$

der piezoelektrische h-Tensor

$$\mathfrak{h}(\vec{\rho}) = \boldsymbol{\beta}^e(\vec{\rho}) \cdot \mathfrak{d}(\vec{\rho}) : \mathbb{C}^E \quad (5.16)$$

<sup>2</sup> Für einen vollständig in  $x_3$ -Richtung gepolten Materialzustand ergibt sich aus (5.14) der in Vektor-Matrix-Notation aufgeführte Piezotensor in (4.1).

und der Impermitivitätstensor bei konstanter Dehnung

$$\boldsymbol{\beta}^\varepsilon(\vec{\rho}) = (\boldsymbol{\varepsilon}^\sigma - \mathfrak{d}(\vec{\rho}) : \mathbb{C}^E : \mathfrak{d}(\vec{\rho})^T)^{-1} \quad (5.17)$$

mit einer jeweils intrinsischen Abhängigkeit vom Polarisationszustand des Materials<sup>3</sup>. Diese ergibt sich allerdings nur aus der Umrechnung der Energieformen, vgl. Kap. 2.5.5. Eine zusätzliche Geschichtsabhängigkeit der elastischen und dielektrischen Eigenschaften kann durch eine Definition der Materialtensoren  $\mathbb{C}^E$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}^\sigma$  z.B. im Rahmen einer Invariantentheorie erfolgen, siehe [24, 177]. Um das hier vorgestellte Modell so einfach wie möglich zu halten, wurde an dieser Stelle jedoch darauf verzichtet.

Die in (5.13) eingeführte freie HELMHOLTZ-Energie lässt sich ähnlich zu der Darstellung in (2.129) um Effekte höherer Ordnung aus Flexoelektrizität erweitern zu

$$\begin{aligned} \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, \mathbf{A}, \vec{\rho}) &= \Psi^r(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, \mathbf{A}, \vec{\rho}) + \Psi^i(\mathbf{A}, \vec{\rho}) \\ &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i) : \mathbb{C}^D : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbb{G}^D \cdot \boldsymbol{\eta} \\ &\quad + \frac{1}{2}(\vec{D} - \vec{P}^i) \cdot \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot (\vec{D} - \vec{P}^i) + \boldsymbol{\eta} \cdot \mathfrak{b} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i) \\ &\quad - (\vec{D} - \vec{P}^i) \cdot \mathfrak{h} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i) - (\vec{D} - \vec{P}^i) \cdot \mathfrak{f} \cdot \boldsymbol{\eta} \\ &\quad + \Psi^i(\mathbf{A}, \vec{\rho}). \end{aligned} \quad (5.18)$$

Die Abhängigkeit der in (5.18) zusätzlich auftretenden Materialtensoren vom relativen Polarisationsvektor ergibt sich dann für den Elastizitätstensor höherer Ordnung bei konstanter dielektrischer Verschiebung zu

$$\mathbb{G}^D(\vec{\rho}) = \mathbb{G}^E + \mathfrak{m}^T \cdot \mathfrak{f}(\vec{\rho}), \quad (5.19)$$

<sup>3</sup> Die Einführung der Materialtensoren (5.15)-(5.17) als Funktion der Tensoren (5.14), (2.60) und (2.75) mag auf den ersten Blick etwas umständlich erscheinen. Der Hintergrund dafür ist, dass die Konstruktion der Tensoren (5.14), (2.60) und (2.75) auf der Basis von Materialparametern erfolgt, welche sich direkt aus Versuchen bestimmen lassen.



für den Verzerrungskopplungstensor zu

$$\mathbb{b}(\vec{\rho}) = \mathfrak{m}^T \cdot \mathfrak{h}(\vec{\rho}) \quad (5.20)$$

und für den flexoelektrischen Kopplungstensor zu

$$\mathfrak{f}(\vec{\rho}) = \boldsymbol{\beta}^e(\vec{\rho}) \cdot \mathfrak{m}. \quad (5.21)$$

Auffällig in der Energieform in (5.18) ist, dass für den Verzerrungsgradiententensor keine additive Zerlegung in einen reversiblen und einen irreversiblen Anteil berücksichtigt wurde. Somit besteht auch keine Verbindung dieser Größe zu den mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen. Aufgrund fehlender experimenteller Evidenz, welche eine Modellverfeinerung bzgl. dieses Aspekts rechtfertigen würde und der Einfachheit halber wird im Rahmen dieser Arbeit die Form in (5.18) angenommen. Weiterhin ist zu beachten, dass der flexoelektrische Anteil des Energieausdrucks in (5.18) nur durch den reversiblen Anteil der dielektrischen Verschiebung beschrieben wird. Diese Annahme entspringt weniger einer expliziten physikalischen Motivation als vielmehr einer Konsequenz, die sich aus der Form anderer Terme ergibt.

Die Ableitungen der freien HELMHOLTZ-Energieformen in (5.13) und (5.18) sowie die der darin enthaltenen Materialtensoren finden sich in den Anhängen D.1, D.2 und D.3.

## 5.2.4 Umklappkriterium

Wie bereits in Kap. 3 diskutiert, beschränkt sich die vorliegende Arbeit bei der Modellierung von ferroelektrischen Funktionskeramiken auf ein ratenunabhängiges dissipatives Materialverhalten. Es kann also davon ausgegangen werden, dass die mikrostrukturellen Umklappprozesse unabhängig von der Geschwindigkeit der äußeren Einwirkungen vorstattengehen. Bei Verwendung des in Kap. 3 eingeführten Raten-Potentials (3.16) bedarf es der Definition einer geeigneten Schwellenfunktion  $f$  in Abhängigkeit von den dissipativen inneren Triebkräften

$f^q := \{\mathbf{f}^A, \vec{f}^p\}$  und einem zugehörigen kritischen Wert  $f_c$ . Im Folgenden wird  $f$  als Umklappkriterium bezeichnet. Dadurch wird verdeutlicht, dass durch dieses das Belastungsniveau charakterisiert wird, bei dem Domänenumklappvorgänge im Material auftreten und damit eine Evolution der mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen eingeleitet wird. Für den Nebenbedingungsterm in (3.16), welcher durch den LAGRANGE-Multiplikator eingefordert wird, wird die quadratische Darstellung

$$f(f^q) - f_c := \frac{(\mathbf{f}^A)^{Dev} : (\mathbf{f}^A)^{Dev}}{(\mathbf{f}_c^A)^2} + \frac{\vec{f}^p \cdot \vec{f}^p}{(\mathbf{f}_c^p)^2} - 1 \leq 0 \quad (5.22)$$

des bereits von KAMLAH und WANG [23] vorgeschlagenen Umklappkriterium eingeführt<sup>4</sup>. Die kritischen Werte für die dissipativen inneren Triebkräfte in den Nennern von (5.22) können zu  $\mathbf{f}_c^A = \sqrt{3/2} \varepsilon^{sat} \sigma^c$  und  $\mathbf{f}_c^p = P^{sat} E^c$  ermittelt werden [23, 24], mit der Koerzitivspannung  $\sigma^c$  und dem elektrischen Koerzitivfeld  $E^c$ , vgl. Kap. 4. Der kritische Wert für das gesamte Umklappkriterium ergibt sich dann zu  $f_c = 1$ . Durch die Berücksichtigung von ausschließlich deviatorischen Anteilen der Triebkräfte des Texturtensors in (5.22), wird eine spurfreie inkrementelle Änderung dieser inneren Variable sichergestellt. Dadurch wird die Forderung einer konstanten Spur des Texturtensors in (5.5) a priori erfüllt. Im Gegensatz zu dem in [9, 24, 178] vorgeschlagenen Umklappkriterium enthält die Formulierung in (5.22) keinen zusätzlichen gemischten Kopplungsterm in Abhängigkeit der Triebkräfte beider inneren Variablen. An dieser Stelle sei erwähnt, dass die Berücksichtigung eines solchen Kopplungsterms die Symmetrie der Materialtangente in (3.24) – und damit die variationelle Struktur des Materialmodells – zerstören würde. Eine detaillierte Diskussion über den Einfluss der Konstruktion eines Umklappkriteriums auf die Symmetrie der Materialtangente eines ferroelektrischen Materialmodells wird von SEMENOV et al. [179] geführt. Mit der reduzierten Variante in (5.22) geht zwar etwas Flexibilität verloren, um das Modell optimal an experimentelle Ergebnisse anpassen zu können, aber an dieser Stelle war es aus Sicht des Autors wichtiger, die variationelle Struktur des Modells zu erhalten.

<sup>4</sup> Eine quadratische Funktion hat gegenüber einer Wurzelfunktion den Vorteil der stetigen Differenzierbarkeit im Ursprung.

Die Ableitungen des Umklappkriteriums in (5.22) sind im Anhang D.4 zu finden.

### 5.2.5 Verfestigungs- und Sättigungsverhalten

Im vorangegangenen Abschnitt wurde die Initiierung von Domänenumklappprozessen durch das Überschreiten einer kritischen äußeren elektro-mechanischen Einwirkung behandelt. Experimentelle Beobachtungen zeigen, dass ab einem bestimmten Punkt eine zusätzliche Erhöhung des Belastungsniveaus erforderlich wird um weiteres Domänenumklappen im Material zu verursachen. Dies lässt sich durch ein gegenseitiges Blockieren der Domänenbewegungen erklären, welches durch die rein volumentreuen mikrostrukturellen Formänderungen begünstigt wird. Ein solches Verfestigungsverhalten, welches beispielsweise auch bei der Plastizität von Metallen zu beobachten ist, soll auch im behandelten Materialmodell seine Berücksichtigung finden. Ein weiterer, für Ferroelektrika charakteristischer, Effekt stellt das Sättigungsverhalten bei Erschöpfung des Reservoirs an umklappbaren Domänen dar, vgl. Kap. 4. Dieses Verhalten sollte sich auch in einem Modellierungsansatz für die Zustände der makroskopischen Dehnung und der makroskopischen Polarisierung widerspiegeln. Zu diesem Zweck muss der zulässige Bereich der mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen sinnvoll begrenzt werden.

Um die beiden genannten Effekte im Materialmodell zu berücksichtigen, kann der irreversible Anteil der freien HELMHOLTZ-Energien aus (5.13) und (5.18) mit

$$\Psi^i(\mathbf{A}, \vec{\rho}) := \frac{1}{2} c_A \mathbf{A}^{Dev} : \mathbf{A}^{Dev} + \frac{1}{2} c_\rho \vec{\rho} \cdot \vec{\rho} + \Psi^{iA, sat}(\mathbf{A}) + \Psi^{i\rho, sat}(\mathbf{A}, \vec{\rho}) \quad (5.23)$$

eingeführt werden, vgl. [22, 24]. Die ersten beiden Terme in (5.23) beschreiben ein lineares *kinematisches Verfestigungsverhalten*<sup>5</sup> in Abhängigkeit der inneren Zustandsvariablen. Die skalaren Parameter  $c_A$  und  $c_\rho$  müssen dabei so gewählt

<sup>5</sup> In der klassischen Plastizitätstheorie wird als kinematische Verfestigung eine formtreue Verschiebung der Fließfläche (hier: Umklappkriterium) im sechsdimensionalen Spannungsraum bezeichnet. Das dadurch zu beobachtende charakteristische Verfestigungsverhalten wird häufig auch als ‚BAUSCHINGER-Effekt‘ bezeichnet, siehe z. B. [180].

werden, dass sie mit dem experimentell ermittelten phänomenologischen Verfestigungsverhalten des Materials übereinstimmen. Mit den letzten beiden Termen in (5.23) wird das bereits erwähnte Sättigungsverhalten durch die Einführung von Energiebarrieren in das Modell eingearbeitet. Auf die genaue Definition dieser Energiebarrieren wird im Folgenden näher eingegangen.

### 5.2.5.1 Sättigungsverhalten der Verzerrungen

Zur Identifizierung von Situationen, in denen eine Sättigung der irreversiblen Verzerrungen auftreten soll, bedarf es ausschließlich der Betrachtung des Zustands der c-Achsen eines repräsentativen Volumens eines Materialpunktes und damit des zugehörigen Texturtensors. Zunächst soll eine Situation in Betracht gezogen werden, in der alle c-Achsen in die gleiche Richtung orientiert sind. Dies kann zum einen durch die Wirkung eines elektrisches Feldes über 90°- oder 180°-Umkappen oder zum anderen mittels mechanischer Zugspannungen durch 90°-Umkappen verursacht worden sein, vgl. Abb. 5.2 d) (ganz rechts). Dann würde der erste Eigenvektor  $\vec{e}_1^A$  des Texturtensors mit dieser Richtung zusammenfallen und die zugehörigen Eigenwerte müssten in einem vollständig gesättigten Zustand auf  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$  beschränkt werden. Darüber hinaus ist eine zweite Situation von Interesse, bei der alle c-Achsen in einer Ebene senkrecht zu einer Druckspannungsrichtung regellos angeordnet sind, vgl. Abb. 5.2 d) (ganz links). Die Eigenwerte des Texturtensors müssen in diesem Fall die Werte  $\alpha_1 = \alpha_2 = 1/2$ ,  $\alpha_3 = 0$  einnehmen. Eine notwendige Bedingung für die Erfüllung dieser beiden Sättigungszustände ist die Nicht-Negativität der Eigenwerte  $\alpha_i \geq 0$ . Eine geeignete Energiefunktion sollte also für  $\alpha_i \rightarrow 0$  eine gegen Unendlich ansteigende Barriere beschreiben, um den zulässigen Bereich der Eigenwerte zu begrenzen. Äquivalent zum Ansatz von MEHLING et al. [24] wird der irreversiblen Teil der freien HELMHOLTZ-Energie, welcher das Sättigungsverhalten der Entwicklung des Texturtensors beinhaltet, zu

$$\Psi^{iA,sat}(\mathbf{A}) := \frac{\alpha_A}{m_A} \sum_{i=1}^3 \alpha_i^{-m_A} = \frac{\alpha_A}{m_A} \text{tr}(\mathbf{A}^{-m_A}) \quad (5.24)$$

gewählt. Durch die skalaren Parameter  $a_A$  und  $m_A$  lässt sich dabei der Grad der Steigung der Energiebarriere einstellen. Erwähnenswert ist, dass durch die Erfüllung der Bedingung einer konstanten Spur des Texturtensors in (5.5) auf eine obere Energiebarriere  $\alpha_i \rightarrow 1$  verzichtet werden kann.

### 5.2.5.2 Sättigungsverhalten der Polarisation

Beim Sättigungsverhalten der Polarisation stellt sich die Identifikation von Grenzzuständen etwas komplizierter dar. Um den Spielraum für weitere Steigerungen der Komponenten des relativen Polarisationsvektors  $\vec{\rho}$  zu identifizieren, muss zusätzlich auch die Information über die Orientierung der c-Achsen und damit auch die Komponenten des Texturtensors  $\mathbf{A}$  in Betracht gezogen werden. Dies gilt insbesondere in Fällen, in denen eine große Anzahl von c-Achsen mechanisch aus der elektrisch bevorzugten Polungsrichtung herausgeklappt sind und somit sich der maximal erreichbare Sättigungswert der Polarisation in dieser Richtung unweigerlich reduziert. Um diese Informationen in einer sehr kompakten Weise in einem Materialmodell zu erfassen, führten LANDIS [9] und MEHLING et al. [24] eine Distanzvariable  $\eta(\mathbf{A}, \vec{\rho})$  ein. Diese stellt ein Maß für den aktuellen Abstand zur Sättigungsbarriere der Polarisation für einen gegebenen Zustand der inneren Zustandsvariablen dar. In dieser Arbeit wird eine modifizierte quadratische Darstellung der Distanzvariablen aus [24] verwendet, welche zu

$$\eta(\mathbf{A}, \vec{\rho}) := \|(\xi \mathbf{I} + (1 - \xi)\mathbf{A})^{-1} \cdot \vec{\rho}\|^2 \quad (5.25)$$

geschrieben werden kann. Der Vorteil der quadratischen Form in (5.25) gegenüber der in [24] vorgeschlagenen Darstellung der Abstandsvariable ist die kontinuierliche Differenzierbarkeit. In (5.25) ist der in SUTTER und KAMLAH [25] neu eingeführte zusätzliche Parameter  $0 \leq \xi \leq 1$  enthalten. Dieser Parameter steuert den Grad der möglichen Depolarisation bei mechanischer Druckbeanspruchung – oder alternativ ausgedrückt – den Grenzwert der minimal erreichbaren Polarisation in Richtung  $\vec{e}_3^A$  des kleinsten Eigenwertes  $\alpha_3$ . Wie weiter unten gezeigt wird, kompensiert diese Modifikation die verloren gegangene Flexibilität des

Modells aufgrund der vereinfachten Wahl eines Umklappkriteriums in (5.22) im Vergleich zu dem in [24], vgl. Abschn. 5.2.4. Weitere Details zur Konstruktion der Distanzvariablen finden sich in [24] und [181].

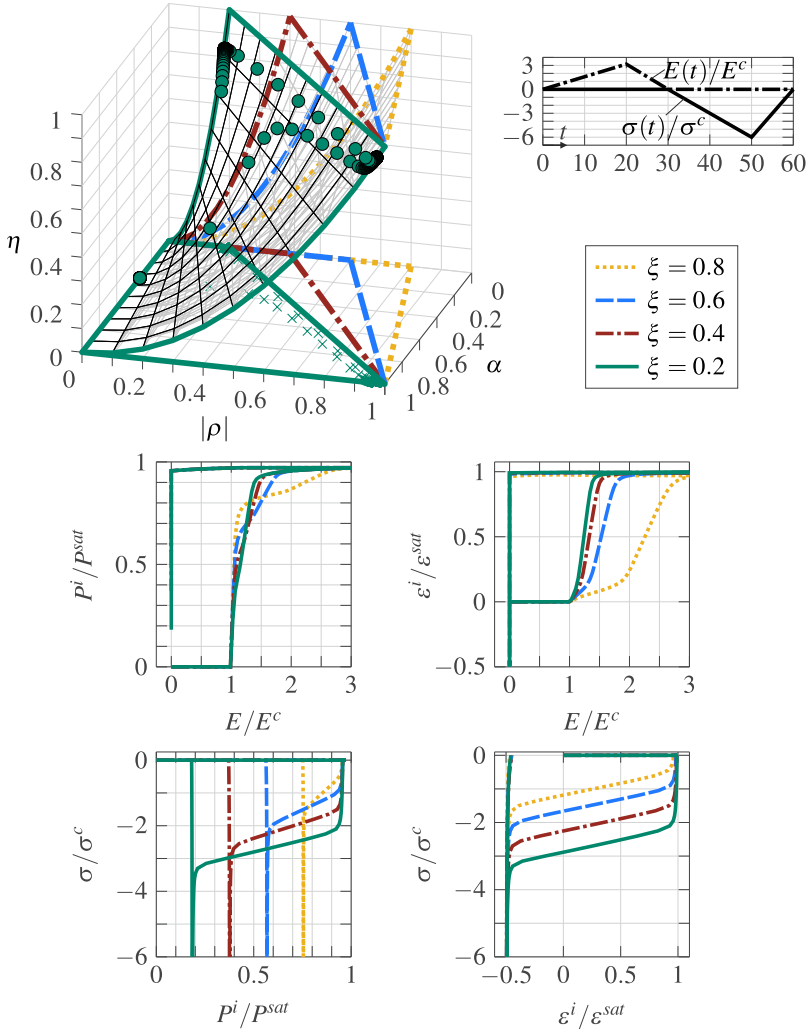
Der Beitrag zur irreversiblen Energiefunktion in (5.23), welcher eine Barriere für die Distanzvariable bei  $\eta \rightarrow 1$  beschreibt, kann mit

$$\Psi^{ip,sat}(\mathbf{A}, \vec{\rho}) := \frac{a_\rho}{m_\rho} (1 - \eta)^{-m_\rho} \quad (5.26)$$

eingeführt werden. Die beiden Parameter  $a_\rho$  und  $m_\rho$  steuern wiederum die Ausprägung der Energiebarriere in (5.26), welche an das experimentell zu beobachtende makroskopische Sättigungsverhalten anzupassen sind.

Im linken oberen Bereich von Abb. 5.3 ist der durch die Energiebarrieren in (5.24) und (5.26) beschriebene zulässige Bereich der inneren Zustandsvariablen in einer vereinfachten eindimensionalen Darstellung aufgetragen. Der Einfluss des Parameters  $\xi$  in (5.25) auf die Form dieses Bereichs wird hierbei durch seine Variation verdeutlicht. Anhand eines mit dem Modell berechneten Lösungspfad für einen initialen Polungs- und einem anschließenden Depolarisationsprozess für  $\xi = 0.2$  wird der Einfluss der Energiebarrieren auf den Evolutionsprozess der inneren Variablen demonstriert. Zudem wird das resultierende charakteristische makroskopische Materialverhalten durch die sich ergebenden dielektrischen, Schmetterlings- und ferroelastischen Hysteresen sowie die mechanischen Depolarisationsantworten für verschiedene Werte von  $\xi$  in Abb. 5.3 angegeben.

Die für eine numerische Umsetzung des Materialmodells benötigten Ableitungen des irreversiblen Anteils der freien HELMHOLTZ-Energie in (5.23) sind in Anhang D.5 angegeben.



**Abbildung 5.3:** Einfluss des Parameters  $\xi$  auf den zulässigen Bereich der mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen in einer vereinfachten eindimensionalen Darstellung, vgl. auch Darstellungen in [182]. Zudem wird das Sättigungsverhalten der makroskopischen irreversiblen Polarisation und Dehnung für eine initialen Polungs- und anschließendem Depolarisationsprozess für verschiedene Werte von  $\xi$  veranschaulicht.

### 5.3 Numerische Umsetzung des Materialmodells

In diesem Abschnitt wird die numerische Umsetzung eines inkrementellen iterativen Lösungsprozesses für das in diesem Kapitel eingeführte Materialmodell vorgestellt. Dabei wird das Modell in die variationelle Struktur des in Kap. 3 behandelten lokalen inkrementellen konstitutiven Problems eingebettet. Dadurch lässt sich ein effizientes Lösungsschema innerhalb eines Zeitschritts<sup>6</sup>  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$  gewinnen. Die hier präsentierten Algorithmen sind an das Lösungsschema einer nichtlinearen Finite-Elemente-Berechnung angepasst, wobei das verwendete Materialmodell in jedem globalen FE-Iterationsschritt an jedem GAUSS-Punkt des Gesamtmodells eine Lösung liefert. Des Weiteren wird ein auf der freien HELMHOLTZ-Energie basierender Rahmen angenommen, in dem ein globaler Finite-Elemente-Iterationsschritt den aktuellen Zustand der Verzerrungen  $\boldsymbol{\epsilon}$ , des Verzerrungsgradienten  $\boldsymbol{\eta}$  und der dielektrischen Verschiebung  $\mathbf{D}$  als Eingangsgrößen in Vektor-Matrix-Notation für das Modell bereitstellt. Der auskonvergierte Zustand der inneren Variablen  $\mathbf{q}_n$  aus dem vorangegangenen globalen Zeitschritt  $t_n$ , vervollständigt den Satz der Eingangsgrößen an jedem Materialpunkt des FE-Modells.

Wie bereits in Abschn. 3.4 diskutiert kann der Lösungsprozess in zwei Schritten durchgeführt werden. Zum einen liefert die Lösung des Variationsproblems in (3.19) einen neuen Zustand der inneren Variablen  $\mathbf{q}$ , zum anderen ergibt sich durch die Auswertung der konstitutiven Gleichungen in (3.23) eine Aktualisierung der Spannungsgrößen  $\boldsymbol{\sigma}$  und  $\boldsymbol{\tau}$  sowie des elektrischen Feldes  $\mathbf{E}$ . Des Weiteren wird für den darauffolgenden globalen FE-Iterationsschritt der aktuelle Zustand der algorithmischen Materialtangente  $\mathbf{C}_T$  benötigt, welcher für jeden Materialpunkt in Abhängigkeit des verwendeten Materialmodells berechnet werden muss.

---

<sup>6</sup> Zu beachten gilt, dass die in Kap. 3 im Zusammenhang mit der Rate der inneren Zustandsvariablen eingeführte Zeit im Kontext eines ratenunabhängigen konstitutiven Modells keine physikalische Bedeutung hat, wenn darüber hinaus Leitfähigkeits- und Trägheitseffekte vernachlässigt werden. Der Ausdruck ‚Zeitschritt‘ sollte in diesem Zusammenhang eher als Lastschritt interpretiert werden.



Die in diesem Abschnitt vorgestellte numerische Umsetzung des Materialmodells ist für den allgemeinen Fall mit einer Berücksichtigung von Effekten höherer Ordnung aus Flexoelektrizität, basierend auf (5.18), ausgelegt. Die präsentierten Algorithmen lassen sich sinngemäß auf Problemstellungen der klassischen Piezoelektrizität basierend auf (5.13) vereinfachen. An dieser Stelle wird auf die Darstellung in SUTTER und KAMLAH [25] verwiesen.

### 5.3.1 Inkrementelles variationelles Update der inneren Zustandsvariablen

Ein numerisch effizienter Lösungsprozess für das Materialmodell, um eine Aktualisierung der inneren Zustandsvariablen durchzuführen, lässt sich durch eine Einbettung in das in Kap. 3 eingeführte inkrementelle variationelle Optimierungsproblem (3.19) realisieren. Danach kann eine Vorschrift für ein Update der inneren Zustandsvariablen zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  zu

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= \text{Arg} \left\{ \inf_{\mathbf{q}} \sup_{\mathbf{f}^q, \gamma} \hat{\pi}^{int}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \mathbf{D}, \mathbf{q}, \mathbf{f}^q, \gamma) \right\} \\ &= \text{Arg} \left\{ \inf_{\mathbf{q}} \left\{ \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \mathbf{D}, \mathbf{q}) - \Psi_n(\boldsymbol{\varepsilon}_n, \boldsymbol{\eta}_n, \mathbf{D}_n, \mathbf{q}_n) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sup_{\mathbf{f}^q, \gamma} \left\{ \mathbf{f}^{qT}(\mathbf{q} - \mathbf{q}_n) - \gamma(f(\mathbf{f}^q) - f_c) \right\} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (5.27)$$

geschrieben werden. Hierbei wurde eine inkrementelle Darstellung des in (3.16) eingeführten Dissipationspotentials für ratenunabhängiges dissipatives Materialverhalten verwendet. Der in (5.27) enthaltene LAGRANGE-Multiplikator nimmt dabei die algorithmische Form  $\gamma = \lambda \Delta t$  ein. Weiterhin wird für alle Größen in (5.27) die bereits in Kap. 2 eingeführte Vektor-Matrix-Notation angenommen. Danach lassen sich die mikroskopisch motivierten inneren Zustandsvariablen, sowie die zugehörigen dissipativen inneren Triebkräfte, mit

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= [A_{11}, A_{22}, A_{33}, 2A_{12}, 2A_{23}, 2A_{13}, \rho_1, \rho_2, \rho_3]^T \\ \text{und} \quad \mathbf{f}^q &= [f_{11}^A, f_{22}^A, f_{33}^A, f_{12}^A, f_{23}^A, f_{13}^A, f_1^p, f_2^p, f_3^p]^T \end{aligned} \quad (5.28)$$

darstellen. Eine Lösung für das Optimierungsproblem in (5.27) soll mithilfe eines im Bereich der Elasto-Plastizität weit verbreiteten Return-Mapping-Algorithmus [183–185] ermittelt werden. Bei diesem Lösungsschema wird an jedem Materialpunkt zunächst ein reversibler Prädiktorschritt unter der Annahme konstanter innerer Zustandsvariablen durchgeführt. Eine Überprüfung des Umklappkriteriums anhand dieses Prädiktorzustands zeigt, ob dieses verletzt wurde ( $f > f_c$ ) und somit eine Evolution der inneren Zustandsvariablen ( $\Delta \mathbf{q} = \mathbf{q} - \mathbf{q}_n \neq \mathbf{0}$ ) erforderlich ist, vgl. Abschn. 5.2.4. Dazu muss ein *Trial-Zustand*<sup>7</sup> des Umklappkriteriums berechnet werden, welcher zu

$$f^{tr} := f(\mathbf{f}^{q,tr}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{f}^{q,tr} = -\partial_{\mathbf{q}} \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \mathbf{D}, \mathbf{q}_n) \quad (5.29)$$

angenommen wird. Die dissipativen inneren Triebkräfte  $\mathbf{f}^q$  werden hierbei zu den negativen energetischen inneren Triebkräfte  $\partial_{\mathbf{q}} \Psi$  gesetzt, welche jeweils für den gegebenen ‚eingefrorenen‘ Zustand der Verzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , der Verzerrungsgradienten  $\boldsymbol{\eta}$ , der dielektrischen Verschiebung  $\mathbf{D}$  und des Zustands der inneren Variablen am Ende des vorherigen Zeitschritts  $\mathbf{q}_n$  ausgewertet werden. Diese Annahme erscheint nicht nur wegen des erforderlichen Gleichgewichts der beiden Kräfte zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  als naheliegend, vgl. (3.20). Auch die physikalische Interpretation der energetischen inneren Triebkräfte als extern eingebrachter energetischer Überschuss, welcher nicht vollständig reversibel im Material gespeichert werden kann, motiviert diese Wahl, vgl. Abschn. 3.2.

Wird durch den Trial-Zustand das Umklappkriterium nicht verletzt ( $f^{tr} \leq f_c$ ), war die Annahme eines vollständig reversiblen Materialverhaltens für den aktuellen Zeitschritt richtig und der Lösungsprozess des Problems (5.27) endet ohne Änderung der inneren Zustandsvariablen. Andernfalls, wenn der Trial-Zustand den kritischen Wert des Umklappkriteriums überschreitet ( $f^{tr} > f_c$ ), wird durch Lösen des Optimierungsproblems (5.27) ein aktualisierter Zustand der inneren Variablen zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  gefunden. Hierbei muss ein zulässiger Zustand der inneren Zustandsvariablen  $\mathbf{q}$  die Stationaritätsbedingungen des durch (5.27) beschriebenen Variationsproblems erfüllen. Zusätzlich zur inkrementellen Form der

---

<sup>7</sup> engl.: ‚trial‘ = Versuch

BIOT-Gleichung (3.20) (vgl. Abschn. 3.4) müssen zwei weitere Gleichungssätze durch eine mögliche Lösung erfüllt werden, welche den Stationaritätsbedingungen des Maximumproblems in (5.27) entsprechen. Durch Berechnung der ersten Variation des Optimierungsproblems in (5.27) lassen sich die zugehörigen Stationaritätsbedingungen mithilfe der Abkürzung  $\mathbf{a} = [\mathbf{q}^T, \mathbf{f}^{qT}, \gamma]^T$  zusammenfassen als

$$\frac{\partial \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{q}} \hat{\pi}^{int} \\ \partial_{\mathbf{f}^q} \hat{\pi}^{int} \\ \partial_{\gamma} \hat{\pi}^{int} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{A}} \Psi + \mathbf{f}^A \\ \partial_{\boldsymbol{\rho}} \Psi + \mathbf{f}^p \\ \mathbf{A} - \mathbf{A}_n - \gamma(\partial_{\mathbf{f}^A} f)^T \\ \boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_n - \gamma(\partial_{\mathbf{f}^p} f)^T \\ -f + f_c \end{bmatrix}_{19 \times 1} =: \mathbf{R} = \mathbf{0}, \quad (5.30)$$

welche zudem die Be- und Entlastungsbedingungen aus (3.14) in der algorithmischer Form

$$\gamma \geq 0, \quad f(\mathbf{f}^q) \leq f_c, \quad \gamma(f(\mathbf{f}^q) - f_c) = 0 \quad (5.31)$$

erfüllen müssen. Die zusätzlichen Stationaritätsbedingungen (5.30)<sub>3-5</sub>, welche sich aus der besonderen Form des Dissipationspotentials in (5.27) ergeben, lassen sich als die Fließregeln der inneren Zustandsvariablen und das negative Umklappkriterium identifizieren. Aufgrund der intrinsischen Nichtlinearität des Gleichungssystems in (5.30) muss eine Lösung iterativ mit dem NEWTON-Verfahren ermittelt werden. Zu diesem Zweck wird (5.30) als der Residualvektor  $\mathbf{R}$  des Lösungsverfahrens definiert. Eine inkrementelle Aktualisierung innerhalb der NEWTON-Iteration ist durch eine TAYLOR-Reihenentwicklung

$$\Delta \mathbf{a} = - \left( \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{a}} \right)^{-1} \mathbf{R} \quad (5.32)$$

von (5.30) gegeben, wobei die Tangentenmatrix in (5.32) als die HESSE-Matrix des Variationsproblems in (5.27) identifiziert werden kann, welche durch

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{a}} &:= \frac{\partial^2 \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{a}^2} = \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^2 \hat{\pi}^{int} & \partial_{\mathbf{q}\mathbf{f}^i}^2 \hat{\pi}^{int} & \partial_{\mathbf{q}\gamma}^2 \hat{\pi}^{int} \\ \partial_{\mathbf{f}^i\mathbf{q}}^2 \hat{\pi}^{int} & \partial_{\mathbf{f}^i\mathbf{f}^j}^2 \hat{\pi}^{int} & \partial_{\mathbf{f}^i\gamma}^2 \hat{\pi}^{int} \\ \partial_{\gamma\mathbf{q}}^2 \hat{\pi}^{int} & \partial_{\gamma\mathbf{f}^i}^2 \hat{\pi}^{int} & \partial_{\gamma\gamma}^2 \hat{\pi}^{int} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{A}\mathbf{A}}^2 \Psi & \partial_{\mathbf{A}\rho}^2 \Psi & \mathbf{1}_{6 \times 6} & \mathbf{0}_{6 \times 3} & \mathbf{0}_{6 \times 1} \\ \partial_{\rho\mathbf{A}}^2 \Psi & \partial_{\rho\rho}^2 \Psi & \mathbf{0}_{3 \times 6} & \mathbf{I}_{3 \times 3} & \mathbf{0}_{3 \times 1} \\ \mathbf{1}_{6 \times 6} & \mathbf{0}_{6 \times 3} & -\gamma \partial_{\mathbf{f}^i\mathbf{f}^j}^2 f & \mathbf{0}_{6 \times 3} & -(\partial_{\mathbf{f}^i} f)^T \\ \mathbf{0}_{3 \times 6} & \mathbf{I}_{3 \times 3} & \mathbf{0}_{3 \times 6} & -\gamma \partial_{\mathbf{f}^i\mathbf{f}^j}^2 f & -(\partial_{\mathbf{f}^i} f)^T \\ \mathbf{0}_{1 \times 6} & \mathbf{0}_{1 \times 3} & -\partial_{\mathbf{f}^i} f & -\partial_{\mathbf{f}^i} f & 0 \end{bmatrix}_{19 \times 19} \quad (5.33)
 \end{aligned}$$

mit  $\mathbf{1}_{6 \times 6} = \text{diag}[1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1]$  gegeben ist. Bemerkenswerterweise ist aufgrund der variationellen Struktur des Optimierungsproblems in (5.27) die Tangentenmatrix (5.33) zwar symmetrisch, aber für den hier betrachteten Fall nicht positiv definit. Dieser Umstand ist eine Eigenschaft der LAGRANGE-Multiplikator-Methode, welche zur Einforderung des Umklappkriteriums in (5.27) verwendet wurde und unweigerlich zu einem Sattelpunktproblem führt<sup>8</sup>. Die NEWTON-Iteration mit den inkrementellen Updates (5.32) kann beendet werden, wenn die Norm des Residualvektors in (5.30) im numerischen Sinne verschwindet, d. h.  $\|\mathbf{R}\| = \|\partial_{\mathbf{a}} \hat{\pi}^{int}\| \leq \text{tol}$ .

Da die zur Begrenzung der inneren Zustandsvariablen in (5.24) und (5.26) verwendeten Energiebarrierefunktionen auch außerhalb des zulässigen Bereichs endliche Werte annehmen, können die Grenzen zulässiger Werte der inneren Variablen für hinreichend große Zeitschritte während der lokalen Iteration mit (5.32) überschritten werden. Dies führt in den meisten Fällen zu einer Divergenz des Lösungsverfahrens. Um dieses Problem zu beheben, kann ein numerisches Dämpfungsverfahren eingesetzt werden, bei dem das aktuelle Lösungsincrement in (5.32) um einen Dämpfungsfaktor  $\beta \in (0, 1)$  reduziert wird. Der erforderliche Dämpfungsfaktor

<sup>8</sup> Alternativ kann das Umklappkriterium auch mit einer Penalty-Methode eingefordert werden, um dieses Problem zu umgehen. Dies würde zu einer ratenabhängigen Formulierung führen, deren Lösung für einen Penalty-Faktor gegen unendlich sich dem ratenunabhängigen Verhalten annähert, siehe z. B. [30]. Ein Vergleich der beiden Methoden findet sich z. B. in [186]. Da mit der gewählten Formulierung im Rahmen dieser Arbeit keine größeren Konvergenzprobleme auftraten, war eine solche Modifikation nicht notwendig.

wird dabei durch dessen kontinuierliche Reduzierung bestimmt, bei dem der gefundene Lösungszustand wieder hinreichend innerhalb des zulässigen Bereichs liegt.

### 5.3.2 Inkrementelles variationelles Update der Konstitutivgleichungen

Wenn eine konvergierte Lösung  $\mathbf{a}^*$  des Optimierungsproblems in (5.27) gefunden wurde, erfolgt in einem zweiten Schritt das Update der Konstitutivgleichungen in (3.23). Hierfür kann zunächst in Übereinstimmung mit (3.21) das reduzierte inkrementelle innere Arbeitspotential zu

$$W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \mathbf{D}) = \hat{\pi}^{int}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \mathbf{D}, \mathbf{a}) \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} \quad (5.34)$$

geschrieben werden, ausgewertet für den aktuellen Zustand des Materials. Um die konstitutiven Gleichungen in (3.23) zu berechnen, müssen die Ableitungen des reduzierten inkrementellen Arbeitspotentials in (5.34) ermittelt werden. Dazu muss die zusätzliche implizite Abhängigkeit von  $\boldsymbol{\varepsilon}$ ,  $\boldsymbol{\eta}$  und  $\mathbf{D}$  vom Lösungsvektor  $\mathbf{a}$  berücksichtigt werden. Unter Verwendung der Abkürzung  $\mathbf{e} = [\boldsymbol{\varepsilon}^T, \boldsymbol{\eta}^T, \mathbf{D}^T]^T$  wird die erste Ableitung des reduzierten inkrementellen Arbeitspotentials mit

$$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{e}} = \left[ \frac{\partial \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{e}} + \underbrace{\frac{\partial \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{a}} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{e}}}_{=\mathbf{R}=0} \right] \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} = \frac{\partial \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{e}} \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} \quad (5.35)$$

berechnet. Im zweite Term in (5.35) können dabei die Stationaritätsbedingungen (5.30) des ursprünglichen Variationsprinzips identifiziert werden, welche für eine gefundene optimale Lösung  $\mathbf{a}^*$  verschwinden. Mit (5.35) sind schließlich die für den ermittelten Zustand  $\mathbf{a}^*$  ausgewerteten konstitutiven Beziehungen (3.23) für die abhängigen Größen der Spannungen, der Spannungen höherer Ordnung und der elektrischen Felder zum aktuellen Zeitpunkt  $t_{n+1}$  durch

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma} &= \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} W = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \hat{\pi}^{int} \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \Psi \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} \\ &= \mathbf{C}_{6 \times 6}^D(\boldsymbol{\rho}^*) (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i(\mathbf{A}^*)) + \mathbf{b}_{18 \times 6}^T(\boldsymbol{\rho}^*) \boldsymbol{\eta} - \mathbf{h}_{3 \times 6}^T(\boldsymbol{\rho}^*) (\mathbf{D} - \mathbf{P}^i(\boldsymbol{\rho}^*))\end{aligned}\quad (5.36)$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau} &= \partial_{\boldsymbol{\eta}} W = \partial_{\boldsymbol{\eta}} \hat{\pi}^{int} \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} = \partial_{\boldsymbol{\eta}} \Psi \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} \\ &= \mathbf{b}_{18 \times 6}(\boldsymbol{\rho}^*) (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i(\mathbf{A}^*)) + \mathbf{G}_{18 \times 18}^D(\boldsymbol{\rho}^*) \boldsymbol{\eta} - \mathbf{f}_{3 \times 18}^T(\boldsymbol{\rho}^*) (\mathbf{D} - \mathbf{P}^i(\boldsymbol{\rho}^*))\end{aligned}\quad (5.37)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= \partial_{\mathbf{D}} W = \partial_{\mathbf{D}} \hat{\pi}^{int} \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} = \partial_{\mathbf{D}} \Psi \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} \\ &= -\mathbf{h}_{3 \times 6}(\boldsymbol{\rho}^*) (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^i(\mathbf{A}^*)) - \mathbf{f}_{3 \times 18}(\boldsymbol{\rho}^*) \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\beta}^E(\boldsymbol{\rho}^*) (\mathbf{D} - \mathbf{P}^i(\boldsymbol{\rho}^*))\end{aligned}\quad (5.38)$$

gegeben, wobei  $\mathbf{C}_{6 \times 6}^D$ ,  $\mathbf{h}_{3 \times 6}$ ,  $\mathbf{G}_{18 \times 18}^D$ ,  $\mathbf{b}_{18 \times 6}$  und  $\mathbf{f}_{3 \times 18}$  die Vektor-Matrix-Darstellungen der Tensoren (5.15), (5.16), (5.19), (5.20) und (5.21) repräsentieren. Die drei Gleichungen (5.36)-(5.38) werden im Rahmen der FEM an jedem GAUSS-Punkt eines Modells ausgewertet. Deren Resultate werden für die Berechnung der Elementvektoren der inneren Kräfte des nächsten globalen Iterationsschritts benötigt.

### 5.3.3 Algorithmisch konsistente Materialtangente

Eine weitere Information, die durch das Materialmodell bereitgestellt werden muss, ist die einer algorithmisch konsistenten Materialtangente. Diese lässt sich aus den zweiten Ableitungen des reduzierten inkrementellen inneren Arbeitspotentials  $W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \mathbf{D})$  gewinnen, siehe (3.24). Mit den ersten Ableitungen in (5.35) und durch  $\partial_{\mathbf{a}} \hat{\pi}^{int} \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} = \mathbf{0}$ , lässt sich zweite Ableitung angeben zu

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{e}^2} = \left[ \frac{\partial^2 \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{e} \partial \mathbf{e}} + \frac{\partial^2 \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{e} \partial \mathbf{a}} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{e}} \right] \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*}, \quad (5.39)$$

wobei der Ausdruck  $\partial_{\mathbf{e}} \mathbf{a} \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*}$  in (5.39) mit dem *Satz der impliziten Funktionen* [187] geschrieben werden kann als

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{e}} \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*} = - \left[ \left( \frac{\partial^2 \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{a} \partial \mathbf{a}} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{a} \partial \mathbf{e}} \right] \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*}. \quad (5.40)$$

Die algorithmisch konsistente Materialtangente lässt sich dann mit dem Ausdruck in (5.40) aufstellen zu

$$\mathbf{C}_T := \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{e}^2} = \left[ \frac{\partial^2 \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{e} \partial \mathbf{e}} - \frac{\partial^2 \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{e} \partial \mathbf{a}} \left( \frac{\partial^2 \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{a} \partial \mathbf{a}} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \hat{\pi}^{int}}{\partial \mathbf{a} \partial \mathbf{e}} \right] \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}^*}, \quad (5.41)$$

ausgewertet für die durch die FEM berechneten Eingangsgrößen am Materialpunkt  $\boldsymbol{\varepsilon}$ ,  $\boldsymbol{\eta}$  und  $\mathbf{D}$  – und die gefundene optimale Lösung  $\mathbf{a}^*$  von (5.27). Eine ausführlichere Darstellung der Materialtangente in (5.41) kann als

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_T = & \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{D}} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\eta} \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\eta} \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\eta} \mathbf{D}} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{D} \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{D} \mathbf{D}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{D}} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta} \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta} \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta} \mathbf{D}} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{D} \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{D} \mathbf{D}} \end{bmatrix} \\ & - \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{q}} & \mathbf{0}_{6 \times 10} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta} \mathbf{q}} & \mathbf{0}_{18 \times 10} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{D} \mathbf{q}} & \mathbf{0}_{3 \times 10} \end{bmatrix} \left( \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{a}} \right)^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{q} \boldsymbol{\varepsilon}} & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{q} \boldsymbol{\eta}} & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{q} \mathbf{D}} \\ \mathbf{0}_{10 \times 6} & \mathbf{0}_{10 \times 18} & \mathbf{0}_{10 \times 3} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.42)$$

geschrieben werden. Dabei ist zu beachten, dass der zweite Term in (5.42) nur aktiv ist, wenn das Umklappkriterium durch (5.29) anfänglich verletzt wurde und eine Evolution der inneren Variablen  $\mathbf{q}$  auftritt. Dieser Anteil sorgt für eine durch Umklappprozesse verursachte ‚Aufweichung‘ der Materialantwort, welche dann durch das Modell beschrieben wird. Die erforderlichen Ableitungen der freien HELMHOLTZ-Energie in (5.42) sind in Anhang D.1 zusammengefasst.

Die sehr einfache und geschlossene Berechnung der symmetrischen Materialtangente (5.41) in analytischer Form stellt einen wesentlichen Vorteil dar, welcher sich aus der Anwendung des Modellierungsrahmens der Generalisierten Standardmaterialien ergibt. Erwähnenswert ist, dass nur bei einer solchen konsistenten Ableitung der algorithmischen Materialtangente unter Berücksichtigung aller Gleichungen des Materialmodells ein quadratisches Konvergenzverhalten der globalen FEM-Iteration gewährleistet ist, siehe [188, 189].





## 6 Elektro-mechanische Randwertprobleme und deren numerische Behandlung

Dieses Kapitel behandelt numerische Lösungsverfahren der in dieser Arbeit relevanten elektro-mechanisch gekoppelten Randwertprobleme. Als Grundlage einer numerischen Behandlung von Randwertproblemen dienen deren zugehörige Variationsformulierungen<sup>1</sup>. Nach einer kurzen Zusammenfassung der gestellten Randwertprobleme werden dafür verschiedene Variationsformulierungen vorgestellt. Dabei spielen zum einen Formulierungen für klassische piezoelektrische Problemstellungen, zum andern aber auch Formulierungen mit berücksichtigten Effekten höherer Ordnung der Flexoelektrizität eine Rolle. Diese Variationsformulierungen bilden dann die Basis für eine Konstruktion geeigneter Finite-Elemente-Formulierungen zur Lösung dieser Randwertprobleme. Um eine Verbindung zu der Betrachtungsweise eines Materialpunktes aus Kap. 3 herzustellen, wird angenommen, dass ein zu beschreibender elektro-mechanischer Körper  $\mathcal{B} \subset \mathcal{R}^3$  auf der globalen makroskopischen Ebene aus einer zusammenhängenden Menge solcher Materialpunkte besteht.

Ein besonderer Fokus liegt in diesem Kapitel auf Variationsformulierungen, welche auf der freien HELMHOLTZ-Energie  $\Psi$  basieren. Solche Formulierungen ermöglichen eine einfache Einbindung des in Abschn. 3 und 5 vorgestellten Modellierungsrahmens in die Methode der finiten Elemente. Die in Kap. 3.4 diskutierten positiven mathematischen Eigenschaften der freien HELMHOLTZ-Energie, wie

---

<sup>1</sup> Diese wird häufig auch als *schwache Form* des Randwertproblems bezeichnet.

z. B. eine positiv definite Materialtangente, untermauern die Verwendung solcher Formulierungen. Bei Berücksichtigung von dissipativen Effekten kann folglich ein geeignetes Variationsprinzip in Abhängigkeit des in (3.21) hergeleiteten reduzierten inkrementellen Arbeitspotentials  $W$  formuliert werden. Des Weiteren sollten die Stationaritätsbedingungen einer gewählten Variationsformulierung alle relevanten Bilanzgleichungen des elektro-mechanischen Randwertproblems im integralen Sinne erfüllen.

Nach einer Zusammenfassung des für rein piezoelektrische Problemstellungen relevanten Randwertproblems werden zunächst verschiedene dazu passende Variationsformulierungen vorgestellt und deren Vor- und Nachteile bzgl. deren mathematischen Struktur und deren praktischen Anwendbarkeit diskutiert. Die Herleitung einer gemischten FE-Formulierung für piezoelektrische Probleme schließt den ersten Teil dieses Kapitels ab. Im zweiten Teil werden ausgehend vom Randwertproblem der Flexoelektrizität Variationsformulierungen eingeführt und eine für dissipatives Materialverhalten geeignete gemischte Elementformulierung präsentiert. Ein weiteres Augenmerk in diesem Kapitel liegt zudem auf der Definition geeigneter Funktionsräume für die FE-Approximation einzelner Feldvariablen der Variationsformulierungen.

## 6.1 Elektro-mechanisches Randwertproblem der Piezoelektrizität

Durch Vernachlässigung der Effekte höherer Ordnung vereinfacht sich das in Abschn. 2.2.3 eingeführte mechanische Randwertproblem zu dem eines klassischen CAUCHY-Kontinuums, vgl. Abschn. 2.2.2. Mit den in Abschn. 2.3.4 diskutierten Zusammenhängen der Elektrostatik ergeben sich die Bilanzgleichungen

$$\vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \vec{b}_{ext} = \vec{0}, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0 \quad \text{und} \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = \vec{0} \quad \text{in } \mathcal{B} \quad (6.1)$$

einer elektro-mechanischen Feldtheorie erster Ordnung, mit der mechanischen Impulsbilanz für den CAUCHY-Spannungstensor und den elektrostatischen MAXWELL-Gleichungen<sup>2</sup>. Die zugehörigen NEUMANN-Randbedingungen lassen sich dann zusammenfassen zu

$$\vec{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \vec{t}_{ext} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_t \quad \text{und} \quad \vec{n} \cdot \vec{D} = -q_{ext} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_q. \quad (6.2)$$

Des Weiteren ergeben sich zur Beschreibung der Verzerrung und des elektrischen Feldes weitere Feldgleichungen mit

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^{sym} \vec{u} \quad \text{und} \quad \vec{E} = -\nabla \phi \quad \text{in } \mathcal{B}, \quad (6.3)$$

wodurch eine Verbindung zu den primären Feldgrößen, den Verschiebungen und dem elektrischen Potential, gegeben ist. Deren zugehörige DIRICHLET-Randbedingungen

$$\vec{u} = \vec{u}' \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_u \quad \text{und} \quad \phi = \phi' \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_\phi \quad (6.4)$$

sind auf den jeweiligen Rändern des Betrachtungsgebietes zu erfüllen. Ferner gelten zudem die konstitutiven Beziehungen in der Form

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{und} \quad \vec{E} = \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{D}}, \quad (6.5)$$

dargestellt in Abhängigkeit der freien HELMHOLTZ-Energie, vgl. auch (2.114) und (2.115).

Werden die Feldgleichungen in (6.3), unter der Annahme der konstitutiven Beziehungen (6.5), in die Bilanzgleichungen (6.1) eingesetzt, ergibt sich ein gekoppeltes partielles Differentialgleichungssystem zweiter Ordnung zur Beschreibung des Randwertproblems der Piezoelektrizität.

<sup>2</sup> Im GAUSS'schen Gesetz in (6.1) wird die Existenz von freien volumenbezogenen Ladungen im Material vernachlässigt. Dies entspricht einer gängigen Annahme für Ferroelektrika.

## 6.2 Variationsformulierungen der Piezoelektrizität

Bei einer Konstruktion von Variationsformulierungen zur Beschreibung des elektro-mechanischen Randwertproblems aus Abschn. 6.1 bedarf es zunächst der Einführung geeigneter Variationspotentiale in Abhängigkeit der zugehörigen Feldgrößen. Das damit formulierte Variationsprinzip ergibt sich dann als ein Optimierungsproblem, wobei der Zustand eines Systems gesucht wird bei dem dessen Potentialfunktional bezüglich seiner Argumente ein Extremum einnimmt. Durch die Berechnung der Variationen des Potentials ergeben sich die Stationaritätsbedingungen, welche für mögliche optimale Zustände des Systems zu erfüllen sind. Diese Bedingungen entsprechen folglich den EULER-LAGRANGE-Gleichungen des Variationsprinzips und beschreiben das zur Variationsformulierung zugehörige Randwertproblem. Eine Übersicht über verschiedene Variationsformulierungen für elektro-mechanische Probleme wird z. B. von VOGEL et al. [190] gegeben.

### 6.2.1 Kanonische energiebasierte Variationformulierung

Ein kanonisches, auf der freien HELMHOLTZ-Energie basierendes Variationspotential kann in der Form

$$\begin{aligned} \Pi(\vec{u}, \vec{D}) &= \int_{\mathcal{B}} \Psi(\boldsymbol{\epsilon}, \vec{D}) dV + \Pi^{ext}(\vec{u}) \\ \text{mit} \quad \Pi^{ext}(\vec{u}) &= - \int_{\mathcal{B}} \vec{b}_{ext} \cdot \vec{u} dV - \int_{\partial \mathcal{B}_t} \vec{t}_{ext} \cdot \vec{u} dA \end{aligned} \quad (6.6)$$

geschrieben werden (vgl. [30, 191]), wobei der erste Term in (6.6) das innere Potential und der zweite Term das Potential der externen Einwirkungen beschreibt. Die kinematische Beziehung in (6.3)<sub>1</sub> wird dabei als gültig vorausgesetzt. Mit dem eingeführten Funktional in (6.6) kann somit das reine Minimierungsproblem

$$\{\vec{u}, \vec{D}\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\vec{u} \in \mathcal{W}_u} \inf_{\vec{D} \in \mathcal{W}_D} \Pi(\vec{u}, \vec{D}) \right\} \quad (6.7)$$

für die Bestimmung der unbekanntenen Verschiebungen  $\vec{u}$  und der dielektrischen Verschiebungen  $\vec{D}$  formuliert werden. Durch Auswertung der Stationaritätsbedingungen des Variationsprinzips in (6.7) erhält man die EULER-LAGRANGE-Gleichungen (vgl. [191])

<i>Impulsbilanz</i>	$\vec{\nabla} \cdot \partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \Psi + \vec{b}_{ext} = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.8a)
FARADAY'sches Gesetz	$\vec{\nabla} \times \partial_D \Psi = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.8b)
CAUCHY-Theorem	$\vec{n} \cdot \partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \Psi - \vec{t}_{ext} = \vec{0}$	auf $\partial \mathcal{B}_t$	(6.8c)
Orthogonalität elektrisches Feld	$\partial_D \Psi \times \vec{n} = \vec{0}$	auf $\partial \mathcal{B}$	(6.8d)

zur Beschreibung des zugrundeliegenden Randwertproblems. Darin werden die in (6.5) aufgeführten konstitutiven Beziehungen für die Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}$  und das elektrische Feld  $\vec{E}$  als gültig vorausgesetzt. Einen geeigneter Funktionsraum für die Darstellung des Verschiebungsfeldes, welcher zudem die zugehörigen Randbedingungen erfüllt, lässt sich mit

$$\vec{u} \in \mathcal{W}_u := \left\{ \vec{u} \in H^1(\mathcal{B}) \mid \vec{u} = \vec{u}' \text{ auf } \partial \mathcal{B}_u \right\} \quad (6.9)$$

angeben, wobei mit  $H^1$  der SOBOLEV-Funktionsraum der quadratisch integrierbaren Funktionen, deren quadratisch integrierbare Ableitungen existieren, bezeichnet wird. Vergleicht man die EULER-LAGRANGE-Gleichungen in (6.8) mit den Gleichungen zur Beschreibung des elektro-mechanischen Randwertproblems in Abschn. 6.1, ist das Fehlen des GAUSS'schen Gesetzes (6.1)<sub>2</sub> und der elektrischen NEUMANN-Randbedingungen (6.2)<sub>2</sub> auffällig. Aufgrund dieser Tatsache muss der Raum der zulässigen Funktionen für die dielektrische Verschiebung für eine Erfüllung dieser beiden Bedingungen eingeschränkt werden gemäß (vgl. [191])

$$\vec{D} \in \mathcal{W}_D := \left\{ \vec{D} \in L^2(\mathcal{B}) \mid \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0 \text{ in } \mathcal{B}, \vec{n} \cdot \vec{D} = -q_{ext} \text{ auf } \partial \mathcal{B}_q \right\}, \quad (6.10)$$

wobei mit  $L^2$  der LEBESGUE-Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen symbolisiert wird. Zur Erfüllung der zusätzlichen Anforderungen an den Funktionsraum in (6.10) sind im Rahmen der Finite-Elemente-Methode besondere Ap-

proximationstechniken notwendig. Dies ist der Grund, warum FE-Formulierungen basierend auf dem Variationsprinzip (6.7) in der Praxis selten ihre Verwendung finden. Von LANDIS [124] wird stattdessen eine Beschreibung der dielektrischen Verschiebung  $\vec{D}$  in Abhängigkeit eines Vektorpotentials vorgeschlagen, wodurch eine Erfüllung des GAUSS'schen Gesetzes a priori erzielt wird und sich eine einfach zu implementierende FE-Formulierung des Minimierungsprinzips (6.7) ergibt. Eine solche Formulierung bringt jedoch gewisse Nachteile mit sich. Die Definition der Randbedingungen für das eingeführte Vektorpotential ist aus physikalischer Sicht alles andere als offensichtlich und im Allgemeinen dreidimensionalen Fall wird eine sogenannte COULOMB-Eichung (engl. 'COULOMB gauge') des Potentials (6.6) benötigt, um eine eindeutige Lösung von (6.7) zu gewährleisten, siehe auch [192] und [193]. Den Vorteilen einer Formulierung basierend auf (6.7), mit einer konvexen Struktur und den damit verbundenen mathematischen Vorzügen, stehen somit gewisse Nachteile gegenüber. Aus diesem Grund erweisen sich FE-Formulierung auf Basis von (6.7) für eine Anwendung auf reale Problemstellungen aus Sicht des Autors als eher unpraktisch, weshalb in dieser Arbeit ein anderer Ansatz verfolgt wird.

## 6.2.2 Erweiterte Drei-Feld-Formulierung

Um zu einer besser handhabbaren Formulierung basierend auf der freien HELMHOLTZ-Energie zu gelangen, wird in diesem Abschnitt ein alternativer Weg zur Konstruktion eines Variationspotentials beschrieben. Hierbei werden die zusätzlichen Anforderungen an den Funktionsraum des dielektrischen Verschiebungsfeldes in (6.10) mithilfe der LAGRANGE-Multiplikator-Methode in die Variationsformulierung eingearbeitet. GIL und ORTIGOSA [125] formulieren ein erweitertes Variationspotential

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}(\vec{u}, \vec{D}, \phi) = & \int_{\mathcal{B}} \Psi(\boldsymbol{\epsilon}, \vec{D}) dV + \Pi^{ext}(\vec{u}) \\ & - \int_{\mathcal{B}} \phi (\vec{\nabla} \cdot \vec{D}) dV + \int_{\partial \mathcal{B}_q} \phi (\vec{n} \cdot \vec{D} + q_{ext}) dA \end{aligned} \quad (6.11)$$

in dem der neu eingeführte LAGRANGE-Multiplikator als das elektrische Skalarpotential  $\phi$  identifiziert wird. Durch Anwenden des Divergenztheorems (A.9) kann das Funktional in (6.11) zu

$$\hat{\Pi}(\vec{u}, \vec{D}, \phi) = \int_{\mathcal{B}} (\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \vec{D}) + \nabla \phi \cdot \vec{D}) dV + \Pi^{ext}(\vec{u}, \phi) \quad (6.12)$$

mit  $\Pi^{ext}(\vec{u}, \phi) = \Pi^{ext}(\vec{u}) + \int_{\partial \mathcal{B}_q} q_{ext} \phi dA$

umgeschrieben werden, wodurch im inneren Potential ein zusätzlicher elektrischer Beitrag auftritt und in das externe Potential die aufgebrachten Oberflächenladungen  $q_{ext}$  mit einbezogen werden. Ein geeigneter Funktionsraum für das elektrische Skalarpotential kann unter Berücksichtigung der Ordnung dessen Ableitungen in (6.12) mit

$$\phi \in \mathcal{W}_\phi := \left\{ \phi \in H^1(\mathcal{B}) \mid \phi = \phi' \text{ auf } \partial \mathcal{B}_\phi \right\} \quad (6.13)$$

definiert werden, wobei die zugehörigen DIRICHLET-Randbedingungen erfüllt werden, vgl. auch (6.4)<sub>2</sub>. Schließlich kann ein erweitertes Drei-Feld-Variationsprinzip

$$\{\vec{u}, \vec{D}, \phi\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\vec{u} \in \mathcal{W}_u} \inf_{\vec{D} \in \mathcal{W}_D} \sup_{\phi \in \mathcal{W}_\phi} \hat{\Pi}(\vec{u}, \vec{D}, \phi) \right\} \quad (6.14)$$

mit einer Sattelpunktstruktur auf Grundlage des Potentials in (6.12) formuliert werden. Die daraus resultierenden EULER-LAGRANGE-Gleichungen des Variationsprinzips (6.14) lassen sich durch

<i>Impulsbilanz</i>	$\vec{\nabla} \cdot \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \Psi + \vec{b}_{ext} = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.15a)
FARADAY'sches Gesetz	$\partial_{\vec{D}} \Psi + \nabla \phi = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.15b)
GAUSS'sches Gesetz	$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0$	in $\mathcal{B}$	(6.15c)
CAUCHY-Theorem	$\vec{n} \cdot \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \Psi - \vec{t}_{ext} = \vec{0}$	auf $\partial \mathcal{B}_t$	(6.15d)
Oberflächenladungen	$\vec{n} \cdot \vec{D} + q_{ext} = 0$	auf $\partial \mathcal{B}_q$	(6.15e)

zusammenfassen. Hierbei tritt zusätzlich zu den beiden über die LAGRANGE-Multiplikator-Methode eingeforderten Gleichungen in (6.11) auch der Zusam-

menhang des elektrischen Feldes mit dem elektrischen Skalarpotential aus (6.3)<sub>2</sub> als Stationaritätsbedingung in (6.15b) auf. Aufgrund der schwach eingeforderten Erfüllung des GAUSS'schen Gesetzes (6.15c) und den elektrischen NEUMANN-Randbedingungen (6.15e) lässt sich im Rahmen dieses Variationsprinzips der hinreichende Funktionsraum für die dielektrische Verschiebungen aus (6.10) zu

$$\mathcal{W}_D := \left\{ \vec{D} \in L^2(\mathcal{B}) \right\} \quad (6.16)$$

vereinfachen. Berechnungen mit Finite-Elemente-Formulierungen basierend auf dem Drei-Feld-Variationsprinzip (6.14) auf Problemstellungen mit dissipativem Materialverhalten werden von GHANDI und HAGOOD [194], SCHWAAB et al. [11, 195], STREICH et al. [196] und KURZHÖFER und SCHRÖDER [197] sowie für elektro-elastodynamische Systeme mit großen Verzerrungen von ORTIGOSA et al. [198] und FRANKE et al. [199] durchgeführt.

### 6.2.3 Reduzierte Zwei-Feld-Formulierung

Die Konstruktion des inneren Potentialbeitrags im Funktional (6.12) motiviert eine Vereinfachung dieses Ausdrucks mittels der partiellen LEGENDRE-Transformation

$$G_2(\boldsymbol{\epsilon}, \vec{E}) = \inf_{\vec{D}} \left\{ \Psi(\boldsymbol{\epsilon}, \vec{D}) - \vec{D} \cdot \vec{E} \right\} \quad \text{mit} \quad \vec{E} = -\nabla\phi \quad (6.17)$$

durchzuführen. Dadurch entsteht eine duale Form des inneren Potentials (vgl. [125, 190]), welche in Abschn. 2.5.4.2 bereits als die elektrische GIBBS-Energie identifiziert wurde. Mit dieser Transformation wird ein Tausch der unabhängigen Variablen zwischen der dielektrischen Verschiebung  $\vec{D}$  und dem elektrischen Feld  $\vec{E}$  vorgenommen. Des Weiteren wird in dieser Formulierung der Zusammenhang zwischen dem elektrischen Potential und dem elektrischen Feld in (6.3)<sub>2</sub> als stark erfüllt angenommen. Durch Einsetzen des Ausdrucks (6.17) in (6.12) erhält man das reduzierte Zwei-Feld-Variationspotential

$$\hat{\Pi}^{red}(\vec{u}, \phi) = \int_{\mathcal{B}} G_2(\boldsymbol{\epsilon}, \vec{E}) dV + \Pi^{ext}(\vec{u}, \phi), \quad (6.18)$$



wobei der externe Beitrag  $\Pi^{ext}$  im Vergleich zu (6.12) unverändert bleibt. Ein Optimierungsproblem zur Bestimmung der verbliebenen Unbekannten im Funktional (6.18), nämlich des Verschiebungsvektors und des elektrische Skalarpotentials, ist durch das Zwei-Feld-Sattelpunkt-Prinzip

$$\{\vec{u}, \phi\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\vec{u} \in \mathcal{W}_u} \sup_{\phi \in \mathcal{W}_\phi} \hat{\Pi}^{red}(\vec{u}, \phi) \right\} \quad (6.19)$$

gegeben. Hierbei bleiben die in (6.9) und (6.13) definierten Funktionsräume weiterhin gültig. Die EULER-LAGRANGE-Gleichungen des Variationsprinzips (6.19) lauten

<i>Impulsbilanz</i>	$\vec{\nabla} \cdot \partial_{\mathbf{E}} G_2 + \vec{b}_{ext} = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.20a)
GAUSS'sches Gesetz	$\vec{\nabla} \cdot (-\partial_{\mathbf{E}} G_2) = 0$	in $\mathcal{B}$	(6.20b)
CAUCHY-Theorem	$\vec{n} \cdot \partial_{\mathbf{E}} G_2 - \vec{t}_{ext} = \vec{0}$	auf $\partial \mathcal{B}_t$	(6.20c)
Oberflächenladungen	$\vec{n} \cdot (-\partial_{\mathbf{E}} G_2) + q_{ext} = 0$	auf $\partial \mathcal{B}_q$ .	(6.20d)

Bemerkenswert ist, dass in dieser Formulierung die konstitutiven Gleichungen nicht mehr denen in (6.5) entsprechen. Durch deren Darstellung in Abhängigkeit der elektrischen GIBBS-Energie gelten für diese Variationsformulierung die Beziehungen in (2.102). Aufgrund der einfachen Struktur des Variationsprinzips (6.19) und der äquivalenten mathematischen Struktur der mechanischen und elektrischen Teilprobleme in (6.20) ist diese Variationsformulierung in der Literatur eine beliebte Wahl für eine Finite-Elemente-Formulierung von elektromechanisch gekoppelten Problemen, siehe z. B. ALLIK und HUGHES [200], GAUDENZI und BATHE [201] oder SCHRÖDER und GROSS [177]. Insbesondere die im Vergleich zu einer Vektorpotentialformulierung (siehe Abschn. 6.2.1) sehr einfache Definition der elektrischen Randbedingungen über das elektrische Skalarpotential begründet die bevorzugte Verwendung dieser Formulierung für die Simulation von realen technischen Problemstellungen. Allerdings tritt bei Materialmodellen, welche auf der elektrischen GIBBS-Energie (6.17) basieren, aufgrund deren Energielandschaft mit einer Sattelpunktstruktur eine nicht-positiv

definite Materialtangente auf. Dieser Umstand führt insbesondere bei materiell nichtlinearen Finite-Elemente-Berechnungen häufig zu Instabilitäten im Lösungsprozess [30, 124, 202]. Aus diesem Grund werden Formulierungen, welche auf der elektrischen GIBBS-Energie basieren, in dieser Arbeit nicht weiterverfolgt.

## 6.2.4 Erweiterte Fünf-Feld-Formulierung

Um ein Variationsprinzip vorzuschlagen, das die Vorteile der beiden Prinzipien (6.7) und (6.19) vereint, soll zunächst noch einmal das Variationspotential (6.12) im Rahmen einer eher praktischen Diskussion herangezogen werden: Im Funktional (6.12) wird das Potential in Abhängigkeit der freien HELMHOLTZ-Energie beschrieben, wodurch sich aufgrund deren Konvexitätseigenschaften eine positiv definite Materialtangente für beliebige Prozesse ergibt (vgl. Abschn. 3.4). Darüber hinaus ist das elektrische Skalarpotential als Freiheitsgrad in diesem Funktional enthalten, was die Möglichkeit bietet, geeignete elektrische Randbedingungen für reale Probleme in technischen Anwendungen zu definieren, wie z. B. Polungsprozesse von piezokeramischen Bauteilen mit komplexen Elektrodenanordnungen. Unter Berücksichtigung dieser Aspekte stellen Finite-Elemente-Formulierungen, die auf dem Variationspotential (6.12) basieren, aus Sicht des Autors einen guten Kompromiss zwischen rechnerischer Stabilität und praktischer Anwendbarkeit dar. Aus diesem Grund wird die im weiteren Verlauf der Arbeit verwendete Finite-Elemente-Formulierung auch auf der Basis von (6.12) eingeführt. Um eine Verbindung zu dem in Kap. 3 eingeführten Modellierungsrahmen herzustellen und die Darstellung der Formulierung an eine Anwendung auf Probleme mit dissipativem Materialverhalten anzupassen, wird in diesem Abschnitt das Variationspotential in Abhängigkeit des reduzierten inkrementellen Arbeitspotentials  $W$  in (3.21) anstatt der freien HELMHOLTZ-Energie  $\Psi$  formuliert.

### 6.2.4.1 Ein elektro-mechanisches Systempotential vom Hu-Washizu-Typ

Um die Genauigkeit und die rechnerische Effizienz zu erhöhen, wird das Variationspotential (6.12) um eine zusätzliche Nebenbedingung bzgl. der mechanischen Feldgrößen erweitert. Im Zuge dessen wird die kinematische Beziehung (6.3)<sub>1</sub> durch einen LAGRANGE-Multiplikator-Ansatz in einer schwachen Form eingefordert, wodurch die Verschiebungen  $\vec{u}$  und die Verzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}$  als voneinander unabhängigen Größen eingeführt werden. Der zugehörige LAGRANGE-Multiplikator kann als der mechanische Spannungstensor  $\boldsymbol{\sigma}$  identifiziert werden. Variationsprinzipien für rein mechanische Probleme, welche diese zusätzliche Nebenbedingung enthalten, werden üblicherweise als HU-WASHIZU-Formulierungen bezeichnet [203, 204]. Die besondere Robustheit von Finite-Elemente-Formulierungen basierend auf einem HU-WASHIZU-Variationsprinzip bezüglich des Netzkonvergenzverhaltens und der Insensitivität bei starker Netzverzerrung wird z. B. von ZIENKIEWICZ et al. [205] aufgezeigt. Für elektro-mechanische FE-Formulierungen werden ähnliche Untersuchungen von SZE und PAN [206] sowie LINNEMANN [207] durchgeführt.

Das in dieser Arbeit verwendete Variationspotential mit insgesamt fünf unabhängigen Feldgrößen kann zu

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \vec{D}, \boldsymbol{\sigma}, \vec{u}, \phi) = & \int_{\mathcal{B}} (W(\boldsymbol{\varepsilon}, \vec{D}) + \nabla \phi \cdot \vec{D} + \boldsymbol{\sigma} : (\nabla^{\text{sym}} \vec{u} - \boldsymbol{\varepsilon})) dV \\ & + \Pi^{\text{ext}}(\vec{u}, \phi) \end{aligned} \quad (6.21)$$

geschrieben werden. Eine ähnliche Formulierung im Rahmen einer elektro-mechanischen Theorie großer Verzerrungen wird von GIL und ORTIGOSA [125] sowie FRANKE et al. [199] vorgestellt. Ein Fünf-Feld-Sattelpunkt-Prinzip in Abhängigkeit zu dem erweiterte Variationspotential (6.21) für die Bestimmung der unbekanntenen Feldgrößen ist durch

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}, \vec{D}, \boldsymbol{\sigma}, \vec{u}, \phi\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\boldsymbol{\varepsilon} \in L^2} \inf_{\vec{D} \in L^2} \sup_{\boldsymbol{\sigma} \in L^2} \inf_{\vec{u} \in \mathcal{W}_u} \sup_{\phi \in \mathcal{W}_\phi} \tilde{\Pi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \vec{D}, \boldsymbol{\sigma}, \vec{u}, \phi) \right\} \quad (6.22)$$

gegeben. Die zulässigen Funktionsräume  $\mathcal{W}_u$  und  $\mathcal{W}_\phi$  wurden bereits in (6.9) und (6.13) definiert.

### 6.2.4.2 Variation und Euler-Lagrange-Gleichungen

Um die Stationaritätsbedingungen des Fünf-Feld-Prinzips in (6.22) zu ermitteln, wird die erste Variation

$$\delta\tilde{\Pi} = \int_{\mathcal{B}} ((\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}}W - \boldsymbol{\sigma}) : \delta\boldsymbol{\varepsilon} + (\partial_{\vec{D}}W + \nabla\phi) \cdot \delta\vec{D} + (\nabla^{\text{sym}}\vec{u} - \boldsymbol{\varepsilon}) : \delta\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} : \nabla^{\text{sym}}\delta\vec{u} + \vec{D} \cdot \nabla\delta\phi) dV + \delta\Pi^{\text{ext}} = 0 \quad (6.23)$$

$$\text{mit } \delta\Pi^{\text{ext}} = - \int_{\mathcal{B}} \vec{b}_{\text{ext}} \cdot \delta\vec{u} dV - \int_{\partial\mathcal{B}_t} \vec{t}_{\text{ext}} \cdot \delta\vec{u} dA + \int_{\partial\mathcal{B}_q} q_{\text{ext}} \delta\phi dA$$

des Potentials in (6.21) bestimmt. Aus der Gleichung (6.23) lassen sich unter Anwendung des Divergenztheorems (siehe Anhang A.2.3.2) die EULER-LAGRANGE-Gleichungen

<i>Konstitutivgleichung</i>	$\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}}W - \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.24a)
<i>FARADAY'sches Gesetz</i>	$\partial_{\vec{D}}W + \nabla\phi = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.24b)
<i>Kinematik</i>	$\nabla^{\text{sym}}\vec{u} - \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.24c)
<i>Impulsbilanz</i>	$\vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \vec{b}_{\text{ext}} = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.24d)
<i>GAUSS'sches Gesetz</i>	$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0$	in $\mathcal{B}$	(6.24e)
<i>CAUCHY-Theorem</i>	$\vec{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \vec{t}_{\text{ext}} = \vec{0}$	auf $\partial\mathcal{B}_t$	(6.24f)
<i>Oberflächenladungen</i>	$\vec{n} \cdot \vec{D} + q_{\text{ext}} = 0$	auf $\partial\mathcal{B}_q$	(6.24g)

des Variationsprinzips in (6.22) ermitteln. Es wird ersichtlich, dass eine Lösung des Variationsprinzips (6.22) alle Gleichungen des in Abschn. 6.1 zusammengefassten elektro-mechanischen Randwertproblems und die konstitutive Beziehung der Spannung in (6.5)<sub>1</sub> in einem schwachen integralen Sinne erfüllt.

### 6.2.4.3 Linearisierung der Variationsformulierung

Aufgrund der angenommenen Nichtlinearität des Optimierungsproblems in (6.22) muss eine Lösung iterativ, z. B. mit dem NEWTON-Verfahren, durchgeführt werden. Daher ist eine Linearisierung der Stationaritätsbedingung (6.23) notwendig. Eine solche Linearisierung kann im Allgemeinen mithilfe der TAYLOR-Reihenentwicklung  $\text{Lin}[\delta\Pi(x)] = \delta\Pi(x) + D_x[\delta\Pi(x)] \cdot \Delta x = \delta\Pi + \delta\Delta\Pi \approx 0$  beschrieben werden, siehe z. B. [208]. Der tangente Anteil in der Linearisierung ergibt sich unter Annahme von ausschließlich konservativ wirkenden äußeren Einwirkungen zu

$$\begin{aligned} \delta\Delta\bar{\Pi} = \int_{\mathcal{B}} & (\delta\boldsymbol{\varepsilon} : (\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}}^2 W : \Delta\boldsymbol{\varepsilon} + \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}\bar{D}}^2 W \cdot \Delta\bar{D} - \Delta\boldsymbol{\sigma}) \\ & + \delta\bar{D} \cdot (\partial_{\bar{D}\boldsymbol{\varepsilon}}^2 W : \Delta\boldsymbol{\varepsilon} + \partial_{\bar{D}\bar{D}}^2 W \cdot \Delta\bar{D} + \nabla\Delta\phi) \\ & + \delta\boldsymbol{\sigma} : (\nabla^{\text{sym}}\Delta\bar{u} - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}) + \nabla^{\text{sym}}\delta\bar{u} : \Delta\boldsymbol{\sigma} + \nabla\delta\phi \cdot \Delta\bar{D}) \, dV, \end{aligned} \quad (6.25)$$

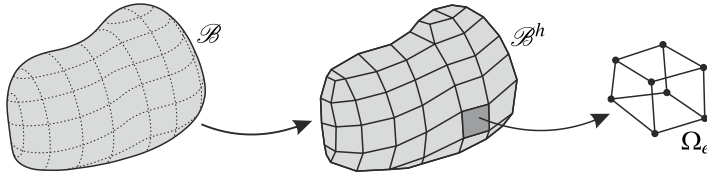
worin die Komponenten der Materialtangente auftreten, welche in (3.24) eingeführt und für das in dieser Arbeit verwendete Materialmodell in (5.42) berechnet wurden.

Mithilfe der Variation in (6.23) und der Linearisierung in (6.25) kann nun eine Finite-Elemente-Diskretisierung des durch das Systempotential in (6.21) beschriebene Randwertproblem durchgeführt werden.

## 6.3 Gemischte piezoelektrische FE-Formulierung

Basierend auf dem Variationsprinzip in (6.22) wird nun eine Finite-Elemente-Formulierung zur Lösung des in Abschn. 6.1 zusammengefassten Randwertproblems vorgestellt. Dazu wird ein zu betrachtender kontinuierlicher Körper in eine endliche Anzahl  $n_{elem}$  an Elementen unterteilt:  $\mathcal{B} \approx \mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_{elem}} \Omega_e$ , vgl. auch Abb. 6.1. Grundlegende Informationen zur Finite-Elemente-Methode können z. B. in ZIENKIEWICZ et al. [205] oder WRIGGERS [208] nachgelesen werden. Die in

dieser Arbeit präsentierte Formulierung ist auf geometrisch lineare Anwendungen beschränkt, beinhaltet jedoch beliebige materielle Nichtlinearitäten.



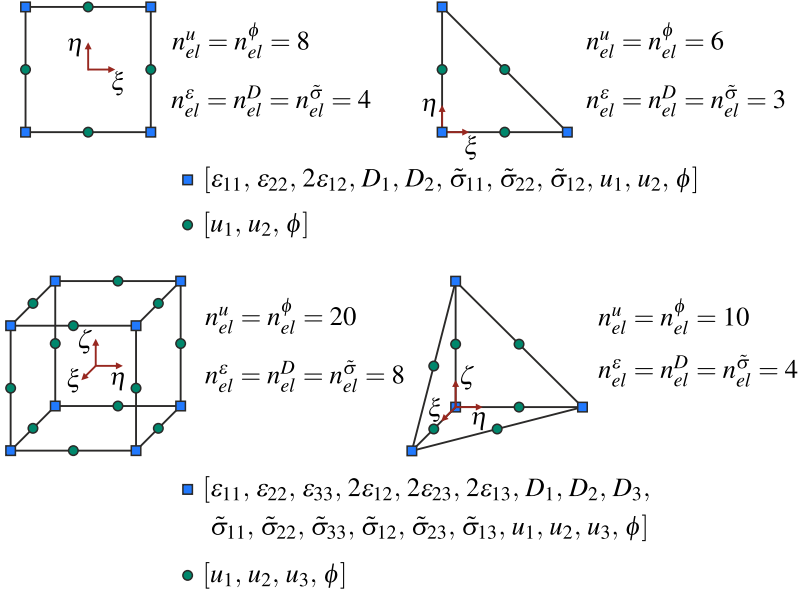
**Abbildung 6.1:** Diskretisierung des kontinuierlichen Körpers  $\mathcal{B}$  in eine endliche Anzahl an finiten Elementen mit dem Volumen  $\Omega_e$ .

Als Ausgangspunkt wird die Variation des Potentials vom HU-WASHIZU-Typ in (6.23) und dessen Linearisierung (6.25) herangezogen. Auf Basis der in Abschn. 6.2 definierten Funktionsräume der verschiedenen Feldgrößen in (6.22) ergibt sich für das Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}$  und das elektrische Skalarpotential  $\phi$  die Notwendigkeit eines  $C^0$ -kontinuierlichen Ansatzes für die Finite-Elemente-Approximation. Für die übrigen Knotenvariablen, nämlich die Verzerrungen  $\boldsymbol{\epsilon}$ , die dielektrische Verschiebung  $\mathbf{D}$  und die Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}$ , ist ein stückweise  $C^{-1}$ -kontinuierlicher Ansatz ausreichend<sup>3</sup>. Daher werden das Verschiebungsfeld und das elektrische Skalarpotential durch kontinuierliche quadratische *Serendipity*-Polynome<sup>4</sup> interpoliert, während für die Verzerrungen, die dielektrische Verschiebung und die Spannungen diskontinuierliche lineare LAGRANGE-Polynome gewählt werden. Die resultierenden Freiheitsgrade pro Knoten  $n_{el}$  von verschiedenen zweidimensionalen und dreidimensionalen isoparametrischen Elementen sind in Abb. 6.2 aufgelistet. Nähere Informationen zur Konstruktion der verwendeten Ansatzfunktionen finden sich z. B. in [205, 208]. Alternative Approximationstechniken der auf-

<sup>3</sup> Der Exponent  $n$  in der Kontinuitätsangabe  $C^n$  gibt die Ordnung der Ableitungen der Ansatzfunktionen an, für welche die Kontinuität an Elementgrenzen gewährleistet sein muss.  $C^0$ : Ansätze kontinuierlich, Ableitungen diskontinuierlich.  $C^{-1}$ : Ansätze diskontinuierlich, Ableitungen diskontinuierlich.

<sup>4</sup> Bei finiten Elementen der *Serendipity*-Familie werden die Ansatzfunktionen nur in Abhängigkeit der Knoten auf den Elementkanten formuliert. Die Mittelknoten werden somit auch nicht mit in die globale Steifigkeitsmatrix assembliert, wodurch im Vergleich zu herkömmlichen quadratischen LAGRANGE-Polynomen Rechenzeit eingespart werden kann, siehe z. B. [205].

tretenden Feldgrößen in elektro-mechanischen Finite-Elemente-Formulierungen werden z. B. von SZE und PAN [206], KLINKEL und WAGNER [209, 210] sowie LINNEMANN [207] präsentiert.



**Abbildung 6.2:** Resultierende Knotenfreiheitsgrade von 2D (oben) und 3D (unten) isoparametrischen finiten Elementen für piezoelektrische Probleme auf der Grundlage des Fünf-Feld-Variationsprinzips (6.22).

Das Einsetzen der Elementmatrizen  $N_e^\square$  und  $B_e^\square$  der gewählten Formfunktionen  $N_I^\square$ , sowie deren kartesischen Ableitungen  $N_{I,x}^\square$  (vgl. Anhang E), zur Interpolation der unterschiedlichen Feldgrößen, liefert die diskretisierte Version der schwachen Form (6.23), deren Komponenten für jedes Element  $e$  des Körpers  $\mathcal{B}^h$  zu

$$\delta_{\mathbf{e}} \tilde{\Pi}_e^h = \delta \boldsymbol{\epsilon}_e^T \mathbf{F}_e^\epsilon \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^\epsilon = \int_{\Omega_e} N_e^{\epsilon T} (\partial_{\mathbf{e}} W - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) dV, \quad (6.26)$$

$$\delta_{\mathbf{D}} \tilde{\Pi}_e^h = \delta \mathbf{D}_e^T \mathbf{F}_e^D \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^D = \int_{\Omega_e} N_e^{DT} (\partial_{\mathbf{D}} W + \nabla \phi) dV, \quad (6.27)$$

$$\delta_{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}\tilde{\Pi}_e^h = \delta\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e^T \mathbf{F}_e^{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}} = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}T} (\nabla^{\text{sym}} \mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}) dV, \quad (6.28)$$

$$\delta_{\mathbf{u}}\tilde{\Pi}_e^h = \delta\mathbf{u}_e^T (\mathbf{F}_e^u - \mathbf{P}_e^u) \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^u = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^{uT} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} dV \quad (6.29)$$

$$\text{und} \quad \mathbf{P}_e^u = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{uT} \mathbf{b}_{\text{ext}} dV + \int_{\partial\Omega_e} \mathbf{N}_e^{uT} \mathbf{t}_{\text{ext}} dA,$$

$$\delta_{\phi}\tilde{\Pi}_e^h = \delta\phi_e^T (\mathbf{F}_e^{\phi} + \mathbf{P}_e^{\phi}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^{\phi} = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^{\phi T} \mathbf{D} dV \quad (6.30)$$

$$\text{und} \quad \mathbf{P}_e^{\phi} = \int_{\partial\Omega_e} \mathbf{N}_e^{\phi T} q_{\text{ext}} dA$$

geschrieben werden können, worin sich die Anteile  $\mathbf{F}_e^{\square}$  und  $\mathbf{P}_e^{\square}$  der Elementvektoren der inneren und äußeren Kräfte identifiziert lassen. Um die Nähe zu einer Implementierung in Finite-Elemente-Codes zu wahren, werden in diesem Abschnitt alle Größen in Vektor-Matrix-Notation dargestellt. Die Komponenten  $\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}}W$  und  $\partial_{\mathbf{D}}W$  in (6.26) und (6.27) müssen im Rahmen der numerischen Auswertung der Integrale durch das Materialmodell an jedem GAUSS-Punkt separat bestimmt werden. Die als unabhängige Variablen eingeführten Knotenspannungen  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$  können sich zunächst frei einstellen und werden innerhalb der globalen FE-Iteration an jedem GAUSS-Punkt mit den Materialspannungen  $\boldsymbol{\sigma} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}}W$  ins Gleichgewicht gebracht, vgl. (6.26). Details über die Diskretisierung der einzelnen Felder in (6.26) bis (6.30) finden sich in Anhang E.

Die Komponenten einer diskretisierten Version der tangentialen Anteile der Linearisierung der schwachen Form des Randwertproblems in (6.25) sind dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \delta_{\boldsymbol{\varepsilon}}\Delta\tilde{\Pi}_e^h &= \delta\boldsymbol{\varepsilon}_e^T (\mathbf{H}_e^{\varepsilon\varepsilon} \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_e + \mathbf{H}_e^{\varepsilon D} \Delta\mathbf{D}_e - \mathbf{L}_e^{\varepsilon\tilde{\boldsymbol{\sigma}}} \Delta\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e) \quad \text{mit} \\ \mathbf{H}_e^{\varepsilon\varepsilon} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{\varepsilon T} \mathbf{C}_T^{\varepsilon\varepsilon} \mathbf{N}_e^{\varepsilon} dV, \quad \mathbf{H}_e^{\varepsilon D} = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{\varepsilon T} \mathbf{C}_T^{\varepsilon D} \mathbf{N}_e^D dV, \\ \text{und} \quad \mathbf{L}_e^{\varepsilon\tilde{\boldsymbol{\sigma}}} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{\varepsilon T} \mathbf{N}_e^{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}} dV, \end{aligned} \quad (6.31)$$



$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{D}}\Delta\tilde{\Pi}_e^h &= \delta\mathbf{D}_e^T (\mathbf{H}_e^{D\varepsilon}\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_e + \mathbf{H}_e^{DD}\Delta\mathbf{D}_e + \mathbf{A}_e^{D\phi}\Delta\boldsymbol{\phi}_e) \quad \text{mit} \\ \mathbf{H}_e^{D\varepsilon} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{DT} \mathbf{C}_T^{D\varepsilon} \mathbf{N}_e^\varepsilon dV, \quad \mathbf{H}_e^{DD} = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{DT} \mathbf{C}_T^{DD} \mathbf{N}_e^D dV, \\ \text{und} \quad \mathbf{A}_e^{D\phi} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{DT} \mathbf{B}_e^\phi dV, \end{aligned} \quad (6.32)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}\Delta\tilde{\Pi}_e^h &= \delta\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e^T (-\mathbf{L}_e^{\tilde{\sigma}\varepsilon}\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_e + \mathbf{G}_e^{\tilde{\sigma}u}\Delta\mathbf{u}_e) \quad \text{mit} \\ \mathbf{L}_e^{\tilde{\sigma}\varepsilon} &= (\mathbf{L}_e^{\varepsilon\tilde{\sigma}})^T \quad \text{und} \quad \mathbf{G}_e^{\tilde{\sigma}u} = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{\tilde{\sigma}T} \mathbf{B}_e^u dV, \end{aligned} \quad (6.33)$$

$$\delta_{\mathbf{u}}\Delta\tilde{\Pi}_e^h = \delta\mathbf{u}_e^T \mathbf{G}_e^{u\tilde{\sigma}} \Delta\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e \quad \text{mit} \quad \mathbf{G}_e^{u\tilde{\sigma}} = (\mathbf{G}_e^{\tilde{\sigma}u})^T, \quad (6.34)$$

$$\delta_{\boldsymbol{\phi}}\Delta\tilde{\Pi}_e^h = \delta\boldsymbol{\phi}_e^T \mathbf{A}_e^{\phi D} \Delta\mathbf{D}_e \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}_e^{\phi D} = (\mathbf{A}_e^{D\phi})^T, \quad (6.35)$$

welche für jedes Element des Körpers  $\mathcal{B}^h$  aufzustellen sind. In kompakter Form kann die diskretisierte Linearisierung der schwachen Form unter Einbeziehung der in (6.26) bis (6.30) und (6.31) bis (6.35) ermittelten Elementvektoren und -matrizen elementweise zu

$$\text{Lin}[\delta\tilde{\Pi}_e^h] = \delta\tilde{\Pi}_e^h + \delta\Delta\tilde{\Pi}_e^h = \delta\mathbf{v}_e^T (\mathbf{F}_e - \mathbf{P}_e + \mathbf{K}_{Te}\Delta\mathbf{v}_e) \quad (6.36)$$

geschrieben werden. Darin enthalten sind die inkrementellen Änderungen

$$\Delta\mathbf{v}_e = \begin{bmatrix} \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_e^T & \Delta\mathbf{D}_e^T & \Delta\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e^T & \Delta\mathbf{u}_e^T & \Delta\boldsymbol{\phi}_e^T \end{bmatrix}^T \quad (6.37)$$

der Elementknotenfreiheitsgrade, die tangentiale Elementsteifigkeitsmatrix

$$\mathbf{K}_{Te} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_e^{\varepsilon\varepsilon} & \mathbf{H}_e^{\varepsilon D} & -\mathbf{L}_e^{\varepsilon\tilde{\sigma}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{H}_e^{D\varepsilon} & \mathbf{H}_e^{DD} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{A}_e^{D\phi} \\ -(\mathbf{L}_e^{\varepsilon\tilde{\sigma}})^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{G}_e^{\sigma u} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & (\mathbf{G}_e^{\tilde{\sigma}u})^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{A}_e^{D\phi})^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (6.38)$$

der Elementvektor der inneren Kräfte

$$\mathbf{F}_e = \left[ (\mathbf{F}_e^\varepsilon)^T \quad (\mathbf{F}_e^D)^T \quad (\mathbf{F}_e^{\tilde{\sigma}})^T \quad (\mathbf{F}_e^u)^T \quad (\mathbf{F}_e^\phi)^T \right]^T \quad (6.39)$$

und der Elementvektor der äußeren Kräfte

$$\mathbf{P}_e = \left[ \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad (\mathbf{P}_e^u)^T \quad -(\mathbf{P}_e^\phi)^T \right]^T. \quad (6.40)$$

Durch Einführen der Abkürzungen  $\Delta\boldsymbol{\alpha}_e := [\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_e^T \Delta\mathbf{D}_e^T]^T$  und  $\Delta\mathbf{v}_e := [\Delta\mathbf{u}_e^T \Delta\phi_e^T]^T$ , lassen sich die Elementvektoren und -matrizen in (6.37) bis (6.40) kompakter darstellen als

$$\mathbf{K}_{Te} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_e & -\mathbf{L}_e & \mathbf{A}_e \\ -\mathbf{L}_e^T & \mathbf{0} & \mathbf{G}_e \\ \mathbf{A}_e^T & \mathbf{G}_e^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \Delta\mathbf{v}_e = \begin{bmatrix} \Delta\boldsymbol{\alpha}_e \\ \Delta\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e \\ \Delta\mathbf{v}_e \end{bmatrix} \mathbf{F}_e = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_e^\alpha \\ \mathbf{F}_e^{\tilde{\sigma}} \\ \mathbf{F}_e^v \end{bmatrix} \mathbf{P}_e = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{P}_e^v \end{bmatrix}. \quad (6.41)$$

Die Tatsache, dass für die Ansatzfunktionen der Felder  $\boldsymbol{\varepsilon}$ ,  $\mathbf{D}$  und  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$  keine Kontinuität über die Elementgrenzen hinweg erforderlich ist, ermöglicht eine statische Kondensation dieser Freiheitsgrade auf Elementebene. Für die zugehörigen Anteile der Linearisierung der schwachen Form in (6.36) gilt  $\text{Lin}_{\boldsymbol{\alpha}}[\delta\tilde{\Pi}]_e^h = 0$  und  $\text{Lin}_{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}[\delta\tilde{\Pi}]_e^h = 0$ , wodurch sich unter Einbeziehung der Elementvektoren und -matrizen in (6.41) für beliebige  $\delta\boldsymbol{\alpha}_e$  und  $\delta\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e$  durch Umstellen die inkrementellen Änderungen

$$\Delta\boldsymbol{\alpha}_e = \mathbf{H}_e^{-1}(\mathbf{L}_e\Delta\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e - \mathbf{A}_e\Delta\mathbf{v}_e - \mathbf{F}_e^\alpha) \quad \text{und} \quad (6.42)$$

$$\Delta\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e = (\mathbf{L}_e^T\mathbf{H}_e^{-1}\mathbf{L}_e)^{-1}((\mathbf{G}_e + \mathbf{L}_e^T\mathbf{H}_e^{-1}\mathbf{A}_e)\Delta\mathbf{v}_e + \mathbf{F}_e^{\tilde{\sigma}} + \mathbf{L}_e^T\mathbf{H}_e^{-1}\mathbf{F}_e^\alpha) \quad (6.43)$$

ergeben. Durch Einsetzen von (6.42) und (6.43) in die für  $\Delta\mathbf{v}_e$  zugehörige Gleichung in (6.36), lässt sich die Linearisierung der schwachen Form auf Elementebene vereinfacht zu

$$\text{Lin}[\delta\tilde{\Pi}]_e^h = \delta\mathbf{v}_e^T (\mathbf{F}_e^{\text{eff}} - \mathbf{P}_e^v + \mathbf{K}_{Te}^{\text{eff}}\Delta\mathbf{v}_e) \quad (6.44)$$

schreiben.

In (6.44) enthalten sind die effektiven tangentialen Elementsteifigkeitsmatrix

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{Te}^{\text{eff}} &= \mathbf{G}_e^T (\mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e)^{-1} \mathbf{G}_e + \mathbf{G}_e^T (\mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e)^{-1} \mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{A}_e \\ &\quad + \mathbf{A}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e (\mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e)^{-1} \mathbf{G}_e \\ &\quad + \mathbf{A}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e (\mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e)^{-1} \mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{A}_e - \mathbf{A}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{A}_e \end{aligned} \quad (6.45)$$

und der effektive Elementvektor der inneren Kräfte

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_e^{\text{eff}} &= \mathbf{F}_e^v + (\mathbf{G}_e^T (\mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e)^{-1} + \mathbf{A}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e (\mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e)^{-1}) \mathbf{F}_e^{\bar{\sigma}} \\ &\quad + (\mathbf{A}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e (\mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e)^{-1} \mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \\ &\quad + \mathbf{G}_e^T (\mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} \mathbf{L}_e)^{-1} \mathbf{L}_e^T \mathbf{H}_e^{-1} - \mathbf{A}_e^T \mathbf{H}_e^{-1}) \mathbf{F}_e^{\alpha}. \end{aligned} \quad (6.46)$$

Eine Assemblierung von (6.44) über alle Elemente des betrachteten Gebiets liefert für beliebige  $\delta \mathbf{v}$  das lineare Gleichungssystem

$$\bigcup_{e=1}^{n_{elem}} \delta \mathbf{v}_e^T (\mathbf{K}_{Te}^{\text{eff}} \Delta \mathbf{v}_e + (\mathbf{F}_e^{\text{eff}} - \mathbf{P}_e^v)) = 0 \quad \implies \quad \mathbf{K}_T^{\text{eff}} \Delta \mathbf{v} = -\mathbf{R}^{\text{eff}} \quad (6.47)$$

für eine inkrementelle Aktualisierung der Knotenverschiebungen  $\Delta \mathbf{u}$  und der Knotenwerte des elektrischen Potentials  $\Delta \phi$  auf der globalen Systemebene. Die Iteration mit Gleichung (6.47) kann beendet werden, wenn der effektive globale Residualvektor im numerischen Sinne verschwindet:  $\|\mathbf{R}^{\text{eff}}\| < \text{tol}$ . Eine Aktualisierung der kondensierten Knotenfreiheitsgrade wird in jedem Iterationsschritt auf Elementebene über (6.42) und (6.43) durchgeführt. Für diese Neuberechnung müssen die in (6.42) und (6.43) enthaltenen Elementvektoren und -matrizen des vorherigen Iterationsschritts abgespeichert werden. In diesem Zusammenhang ist zu erwähnen, dass die Matrizen  $\mathbf{L}_e$ ,  $\mathbf{A}_e$  und  $\mathbf{G}_e$  sich während der globalen Gleichgewichtiteration nicht ändern.

## 6.4 Elektro-mechanisches Randwertproblem der Flexoelektrizität

Im Weiteren ist die numerische Behandlung von Randwertproblemen mit einer Berücksichtigung von Effekten höherer Ordnung aus der Flexoelektrizität Gegenstand der Diskussion. Hierfür muss die in Abschn. 2.2 eingeführte Verzerrungsgradiententheorie mit der elektrostatischen Feldtheorie aus Abschn. 2.3 kombiniert werden. Deren Kopplung über konstitutive Gleichungen wurde bereits in Abschn. 2.5 diskutiert. Das daraus resultierende Randwertproblem für flexoelektrische Problemstellungen soll im Folgenden noch einmal kurz zusammengefasst werden. Die Bilanzgleichungen ergeben sich danach zu

$$\vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{\nabla}) + \vec{b}_{ext} = \vec{0}, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0 \quad \text{und} \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = \vec{0} \quad \text{in } \mathcal{B}, \quad (6.48)$$

wobei lediglich die mechanische Impulsbilanz im Vergleich zu den piezoelektrischen Bilanzgleichung in (6.1) durch die Effekte höherer Ordnung beeinflusst wird. Die zugehörigen NEUMANN-Randbedingungen lassen sich mit

$$\begin{aligned} \vec{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{\nabla}) - \vec{\nabla}_t \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n}) + (\vec{\nabla}_t \cdot \vec{n}) \vec{n} \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n}) &= \vec{t}_{ext} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_t, \\ \vec{n} \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n}) &= \vec{r}_{ext} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_r, \quad \llbracket \vec{m} \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n}) \rrbracket = \vec{c}_{ext} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_c \\ \text{und} \quad \vec{n} \cdot \vec{D} &= -q_{ext} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_q \end{aligned} \quad (6.49)$$

zusammenfassen, worin insbesondere die Struktur der Spannungsrandbedingungen zur Komplexität des Randwertproblems beiträgt. Des Weiteren gelten zudem die Feldgleichungen

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^{sym} \vec{u}, \quad \boldsymbol{\eta} = \nabla \nabla^{sym} \vec{u} \quad \text{und} \quad \vec{E} = -\nabla \phi \quad \text{in } \mathcal{B}, \quad (6.50)$$

wobei sich der Verzerrungsgradient als zweifache Ableitung des Verschiebungsvektors darstellen lässt.

Die in den primären Variablen dargestellten DIRICHLET-Randbedingungen können durch

$$\begin{aligned} \vec{u} = \vec{u}' \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_u, \quad D_n \vec{u} = (D_n \vec{u})' \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_{u_n}, \quad \vec{u} = \vec{u}' \quad \text{auf } \partial \partial \mathcal{B}_u \\ \text{und } \phi = \phi' \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}_\phi \end{aligned} \quad (6.51)$$

ausgedrückt werden, worin im Gegensatz zum piezoelektrischen Randwertproblem zusätzlich Verschiebungsrandbedingungen höherer Ordnung auftreten. Die konstitutiven Gleichungen werden zu

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad \boldsymbol{\tau} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\eta}} \quad \text{und} \quad \vec{E} = \frac{\partial \Psi}{\partial \vec{D}} \quad (6.52)$$

erweitert, wobei wiederum im Vergleich zum piezoelektrischen Materialverhalten in (6.5) ein zusätzlicher Ausdruck zur Beschreibung der Spannungen höherer Ordnung auftritt.

Werden die Feldgleichungen in (6.50), unter der Annahme der konstitutiven Beziehungen (6.52), in die Bilanzgleichungen (6.48) eingesetzt, ergibt sich ein gekoppeltes partielles Differentialgleichungssystem vierter Ordnung zur Beschreibung des Randwertproblems der Flexoelektrizität.

## 6.5 Variationsformulierungen der Flexoelektrizität

Auf Basis des im vorherigen Abschnitt zusammengefassten elektro-mechanischen Randwertproblems mit Effekten aus der Flexoelektrizität werden nun drei unterschiedliche Variationsformulierungen vorgestellt und deren Vor- und Nachteile im Hinblick ihrer numerischen Umsetzbarkeit diskutiert.

### 6.5.1 Zwei-Feld-Formulierung

Der sicherlich einfachste Zugang bei der Konstruktion eines Variationspotentials zur Beschreibung flexoelektrischer Probleme bietet eine Formulierung basierend auf der elektrischen GIBBS-Energie, vgl. Abschn. 2.5.4.2. Die sich daraus ergebenden Vorteile in der einfachen mathematischen Struktur wurden bereits in Abschn. 6.2.3 diskutiert. Ein solches Variationspotential kann zu

$$\begin{aligned} \Pi(\vec{u}, \phi) &= \int_{\mathcal{B}} G_2(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{E}) dV + \Pi^{\text{ext}}(\vec{u}, \phi) \\ \text{mit } \Pi^{\text{ext}}(\vec{u}, \phi) &= - \int_{\mathcal{B}} \vec{b}_{\text{ext}} \cdot \vec{u} dV - \int_{\partial \mathcal{B}_t} \vec{t}_{\text{ext}} \cdot \vec{u} dA - \int_{\partial \mathcal{B}_r} \vec{r}_{\text{ext}} \cdot D_n \vec{u} dA \\ &\quad - \oint_{\partial \partial \mathcal{B}_c} \vec{c}_{\text{ext}} \cdot \vec{u} dS + \int_{\partial \mathcal{B}_q} q_{\text{ext}} \phi dA \end{aligned} \quad (6.53)$$

eingeführt werden, vgl. hierzu auch Abschn. 2.2.3. In dem Funktional in (6.53) ergibt sich eine Mindestanzahl an unabhängigen Variablen, welche den Verschiebungen  $\vec{u}$  und dem elektrischen Potential  $\phi$  entsprechen. Ein zugehöriges Zwei-Feld-Variationsprinzip mit einer Sattelpunktstruktur ist durch

$$\{\vec{u}, \phi\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\vec{u} \in \mathcal{W}_u} \sup_{\phi \in \mathcal{W}_\phi} \Pi(\vec{u}, \phi) \right\} \quad (6.54)$$

gegeben. Ein besonderes Augenmerk muss hierbei auf die Definition geeigneter Funktionsräume der zu optimierenden Variablen in (6.54) gelegt werden. Während für das elektrische Potential weiterhin unverändert die Definition aus (6.13) gültig ist, muss im Fall der Verschiebungen aufgrund der Berücksichtigung von Effekten höherer Ordnung in (6.53) der zulässige Funktionsraum im Vergleich zur Definition in (6.9) angepasst werden. Dieser kann mit

$$\begin{aligned} \vec{u} \in \mathcal{W}_u := \left\{ \vec{u} \in H^2(\mathcal{B}) \mid \vec{u} = \vec{u}' \text{ auf } \partial \mathcal{B}_u \cup \partial \partial \mathcal{B}_u, \right. \\ \left. D_n \vec{u} = D_n \vec{u}' \text{ auf } \partial \mathcal{B}_{u_n} \right\} \end{aligned} \quad (6.55)$$

eingeführt werden. Hierbei ist mit  $H^2$  der SOBOLEV-Raum dargestellt, für dessen

Funktionen schwache Ableitungen existieren und bis zur Ordnung zwei quadratisch integrierbar sind. Diese höheren Anforderungen an einen geeigneten Funktionsraum begründet sich in dem Auftreten von zweiten Ableitungen des Verschiebungsvektors im mechanischen Teil der Variation von (6.53), vgl. (2.22). Dieser Sachverhalt spiegelt sich somit auch in den Kontinuitätsanforderungen an einen Approximationsansatz der Verschiebungen in Rahmen eines numerischen Lösungsverfahrens wider. Im Gegensatz zu den zuvor diskutierten piezoelektrischen Problemen, in denen eine  $C^0$ -Kontinuität der Ansatzfunktionen des Verschiebungsfeldes hinreichend war, werden im Fall der Flexoelektrizität  $C^1$ -kontinuierliche Ansätze benötigt. In diesem Umstand liegt eine große Herausforderung bei der Entwicklung von numerischen Lösungsverfahren für flexoelektrische Randwertprobleme. Im Rahmen der Methode der finiten Elemente ist eine  $C^1$ -kontinuierliche Approximation nur sehr schwierig zu erzielen. Klassische isoparametrische FE-Ansätze mit LAGRANGE-Polynome erfüllen lediglich eine  $C^0$ -Kontinuität. In der Literatur finden sich zahlreiche  $C^1$ -kontinuierliche Elementformulierungen, wie z. B. von ARGYRIS et al. [211], DASGUPTA und SENGUPTA [212] sowie PETERA und PITTMAN [213], im Rahmen von Verzerrungsgradiententheorien von PAPANICOLOPULOS et al. [214] und ZERVOS et al. [215] oder für flexoelektrische Probleme von YVONNET und LIU [70]. Aufgrund der häufig komplizierten Konstruktion der Ansatzfunktionen und einer nur schwierig zu realisierenden Implementierung in bestehende Finite-Elemente-Codes kommen diese nur sehr spärlich zum Einsatz. In der Modellierung von flexoelektrischen Problemstellungen finden sich in der Literatur ebenso eine Vielzahl anderer Diskretisierungsmethoden, wie z. B. netzfreie Methoden in ABDOLLAHI et al. [54] und ZHUANG et al. [55], Isogeometrische Analysemethoden in GHASEMI et al. [65], THAI et al. [66] und NGUYEN et al. [67, 68] oder Randelemente-Methoden in CODONY et al. [69]. Eine ausführliche Übersicht zu den verschiedenen Modellierungsmethoden wird von ZHUANG et al. [51] gegeben. Im Rahmen dieser Arbeit soll allerdings die numerische Behandlung des flexoelektrischen Randwertproblems aufgrund deren Flexibilität und Robustheit mit herkömmlichen Finite-Elemente-Methoden erfolgen. Eine Möglichkeit auf diesem Wege eine Variationsformulierung einzuführen, welche den erhöhten Kontinuitätsanforderungen genüge tut, wird im folgenden Abschnitt behandelt.

## 6.5.2 Vier-Feld-Lagrange-Multiplikator-Formulierung

Eine bewährte Methodik bei der numerischen Behandlung von Randwertproblemen höherer Ordnung stellen gemischte Formulierungen dar, welche z. B. im Rahmen von Verzerrungsgradiententheorien von SHU et al. [216], AMANATIDOU und ARAVAS [217] sowie ZYBELL et al. [218] angewendet werden. Danach kann ein gemischtes Variationspotential zu

$$\begin{aligned} \check{\Pi}(\vec{u}, \mathbf{H}, \phi, \boldsymbol{\lambda}) &= \int_{\mathcal{B}} (G_2(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{E}) + \boldsymbol{\lambda} : (\mathbf{H} - \nabla \vec{u})) \, dV + \Pi^{ext}(\vec{u}, \mathbf{H}, \phi) \\ \text{mit} \quad \Pi^{ext}(\vec{u}, \mathbf{H}, \phi) &= - \int_{\mathcal{B}} \vec{b}_{ext} \cdot \vec{u} \, dV - \int_{\partial \mathcal{B}_t} \vec{t}_{ext} \cdot \vec{u} \, dA \\ &\quad - \int_{\partial \mathcal{B}_r} \vec{r}_{ext} \cdot (\mathbf{H} \cdot \vec{n}) \, dA + \int_{\partial \mathcal{B}_q} q_{ext} \phi \, dA \end{aligned} \quad (6.56)$$

definiert werden, worin der Verschiebungsgradient  $\mathbf{H}$  als eine zusätzliche unabhängige Variable eingeführt wurde. Zur Sicherstellung einer sich einstellenden kinematischen Verträglichkeit dieses Verschiebungsgradientenfeldes  $\mathbf{H}$  zum Verschiebungsfeld  $\vec{u}$  wird in (6.56) ein zusätzlicher Term eingeführt. Darin wird die kinematische Beziehung zwischen den beiden Größen in (2.8) mittels LAGRANGE-Multiplikator-Methode für diese Formulierung eingefordert, wodurch sich die Anzahl der unabhängigen Variablen wiederum um den zugehörigen Multiplikator  $\boldsymbol{\lambda}$  erhöht. Der Verzerrungsgradient in (6.56) lässt sich dann zu  $\boldsymbol{\eta} = \nabla^{sym} \mathbf{H}$  schreiben. Die beiden anderen Feldgleichungen in (6.50) bleiben uneingeschränkt gültig. Des Weiteren werden auch die kinematischen Randbedingungen höherer Ordnung in (6.56) in Abhängigkeit des Verschiebungsgradienten ausgedrückt. Das zugehörige Vier-Feld-Variationsprinzip mit einer Sattelpunktstruktur kann dann zu

$$\{\vec{u}, \mathbf{H}, \phi, \boldsymbol{\lambda}\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\vec{u} \in \mathcal{W}_u} \inf_{\mathbf{H} \in \mathcal{W}_H} \sup_{\phi \in \mathcal{W}_\phi} \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in L^2} \check{\Pi}(\vec{u}, \mathbf{H}, \phi, \boldsymbol{\lambda}) \right\} \quad (6.57)$$

geschrieben werden. Mit einem Blick auf die Anforderungen an die Funktionsräume für die einzelnen unabhängigen Variablen zeigt sich der große Vorteil dieser gemischten Formulierung. Durch das Einführen des Verschiebungsgradienten als zusätzliche unabhängige Variable, treten in der Variation von (6.56) keine Gradi-



enten der Verschiebungen größer als Ordnung eins auf. Somit kann ein geeigneter Funktionsraum für die Verschiebungen wiederum mit (6.9) definiert werden. Der Funktionsraum für den Verschiebungsgradienten kann zu

$$\mathbf{H} \in \mathcal{W}_H := \left\{ \mathbf{H} \in H^1(\mathcal{B}) \mid \mathbf{H} \cdot \vec{n} = (\mathbf{H} \cdot \vec{n})' \text{ auf } \partial \mathcal{B}_H \right\} \quad (6.58)$$

definiert werden. Für das elektrische Potential gilt weiterhin der in (6.13) angegebene Funktionsraum. Dem LAGRANGE-Multiplikator genügt lediglich eine Darstellung im  $L^2$ -Raum. Durch Variation des Potentials in (6.56) lassen sich die im Vier-Feld-Prinzip (6.57) schwach eingeforderten EULER-LAGRANGE-Gleichungen

<i>Impulsbilanz</i>	$\vec{\nabla} \cdot (\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} G_2 - \boldsymbol{\lambda}) + \vec{b}_{ext} = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.59a)
LAGRANGE-Multipl.	$\partial_{\boldsymbol{\eta}} G_2 \cdot \vec{\nabla} - \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.59b)
GAUSS'sches Gesetz	$\vec{\nabla} \cdot (-\partial_{\vec{E}} G_2) = 0$	in $\mathcal{B}$	(6.59c)
Verschiebungsgradient	$\mathbf{H} - \nabla \vec{u} = \mathbf{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.59d)
Randspannungen 1. O.	$(\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} G_2 - \boldsymbol{\lambda}) \cdot \vec{n} - \vec{t}_{ext} = \vec{0}$	auf $\partial \mathcal{B}_t$	(6.59e)
Randspannungen 2. O.	$\partial_{\boldsymbol{\eta}} G_2 \cdot \vec{n} - \vec{n} \otimes \vec{r}_{ext} = \mathbf{0}$	auf $\partial \mathcal{B}_r$	(6.59f)
Oberflächenladungen	$-\partial_{\vec{E}} G_2 \cdot \vec{n} + q_{ext} = 0$	auf $\partial \mathcal{B}_q$	(6.59g)

bestimmen. Dabei lässt sich für den neu eingeführten LAGRANGE-Multiplikator die physikalische Interpretation als Divergenz der Spannungen höherer Ordnung gewinnen. Eine gemischte Finite-Elemente-Formulierung für zweidimensionale flexoelektrische Probleme auf Basis des Variationsprinzips in (6.57) wurde erstmals von DENG et al. [56] vorgestellt. Eine Erweiterung auf dreidimensionale Problemstellungen erfolgte in [57], eine Formulierung in einem Modellierungsrahmen mit großen Verzerrungen in [58] sowie eine mathematische Analyse solcher Formulierungen in [59]. Weitere Anwendungen einer solchen Elementformulierung sind z. B. auch in NANTHAKUMAR et al. [219] und ZHENG et al. [220] zu finden. Aufgrund der bereits mehrfach diskutierten Nachteile von Formulierungen basierend auf der elektrischen GIBBS-Energie, wird im folgenden Abschnitt eine weitere Modifikation der hier behandelten Formulierung durchgeführt.

### 6.5.3 Fünf-Feld-Lagrange-Multiplikator-Formulierung

Wie bereits im Rahmen der Behandlung von piezoelektrischen Randwertproblemen in Abschn. 6.2 soll nun auch der Fokus auf Variationsformulierungen basierend auf der konvexen freien HELMHOLTZ-Energie gelegt werden. Dies kann durch Ersetzen der elektrischen GIBBS-Energie in (6.56) durch deren partielle LEGENDRE-Transformation in Abhängigkeit der freien HELMHOLTZ-Energie im Stile von (6.17) realisiert werden. Um die Formulierung passgenau für eine Behandlung von irreversiblen dissipativen Prozessen nach Kap. 3 einzuführen, wird wie bereits in der piezoelektrischen Formulierung in (6.21) eine auf dem reduzierten inkrementelle Arbeitspotential  $W$  in (3.21) basierende Darstellung gewählt. Ein solches Variationspotential kann dann mit

$$\begin{aligned} \bar{\Pi}(\vec{u}, \mathbf{H}, \vec{D}, \phi, \boldsymbol{\lambda}) &= \int_{\mathcal{B}} (W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}) + \nabla \phi \cdot \vec{D} + \boldsymbol{\lambda} : (\mathbf{H} - \nabla \vec{u})) \, dV \\ &+ \Pi^{ext}(\vec{u}, \mathbf{H}, \phi) \end{aligned} \quad (6.60)$$

aufgestellt werden, wobei sich der externe Anteil des Potentials im Vergleich zu (6.56) nicht ändert. Durch die Anwendung der LEGENDRE-Transformation auf (6.17) ergibt sich für das Variationspotential in (6.60) mit der dielektrischen Verschiebung  $\vec{D}$  eine zusätzliche unabhängige Variable. Das resultierende Fünf-Feld-Variationsprinzip mit Sattelpunktstruktur lässt sich dann zu

$$\{\vec{u}, \mathbf{H}, \vec{D}, \phi, \boldsymbol{\lambda}\} = \text{Arg} \left\{ \inf_{\vec{u} \in \mathcal{W}_u} \inf_{\mathbf{H} \in \mathcal{W}_H} \inf_{\vec{D} \in L^2} \sup_{\phi \in \mathcal{W}_\phi} \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in L^2} \bar{\Pi}(\vec{u}, \mathbf{H}, \vec{D}, \phi, \boldsymbol{\lambda}) \right\} \quad (6.61)$$

schreiben. Die Anforderungen an die Funktionsräume bleiben dabei im Vergleich zum Prinzip in (6.57) unverändert. Für die dielektrische Verschiebung gilt weiterhin, dass zulässige Funktionen dem  $L^2$ -Raum entstammen.

### 6.5.3.1 Variation und Euler-Lagrange-Gleichungen

Die Variation des in (6.60) eingeführten Potentials bezüglich seiner Argumente berechnet sich zu

$$\begin{aligned} \delta \bar{\Pi} = & \int_{\mathcal{B}} (\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} W : \delta \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\lambda} : \nabla \delta \bar{\mathbf{u}} + \partial_{\boldsymbol{\eta}} W : \delta \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\lambda} : \delta \mathbf{H} \\ & + (\partial_{\bar{\mathbf{D}}} W + \nabla \phi) \cdot \delta \bar{\mathbf{D}} + \bar{\mathbf{D}} \cdot \nabla \delta \phi + (\mathbf{H} - \nabla \bar{\mathbf{u}}) : \delta \boldsymbol{\lambda}) dV \\ & + \delta \Pi^{ext} = 0 \end{aligned} \quad (6.62)$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad \delta \Pi^{ext} = & - \int_{\mathcal{B}} \vec{b}_{ext} \cdot \delta \bar{\mathbf{u}} dV - \int_{\partial \mathcal{B}_t} \vec{t}_{ext} \cdot \delta \bar{\mathbf{u}} dA \\ & - \int_{\partial \mathcal{B}_r} \vec{n} \otimes \vec{r}_{ext} : \delta \mathbf{H} dA + \int_{\partial \mathcal{B}_q} q_{ext} \delta \phi dA, \end{aligned}$$

wobei die Variationen der Verzerrungen und der Verzerrungsgradienten sich zu  $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^{sym} \delta \bar{\mathbf{u}}$  und  $\delta \boldsymbol{\eta} = \nabla^{sym} \delta \mathbf{H}$  ergeben. Durch Anwenden des Divergenztheorems (vgl. Anhang A.2.3.2) lassen sich daraus die zum Variationsprinzip zugehörigen EULER-LAGRANGE-Gleichungen

<i>Impulsbilanz</i>	$\vec{\nabla} \cdot (\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} W - \boldsymbol{\lambda}) + \vec{b}_{ext} = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.63a)
<i>LAGRANGE-Multipl.</i>	$\partial_{\boldsymbol{\eta}} W \cdot \vec{\nabla} - \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.63b)
<i>FARADAY'sches Gesetz</i>	$\partial_{\bar{\mathbf{D}}} W + \nabla \phi = \vec{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.63c)
<i>GAUSS'sches Gesetz</i>	$\vec{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{D}} = 0$	in $\mathcal{B}$	(6.63d)
<i>Verschiebungsgradient</i>	$\mathbf{H} - \nabla \bar{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$	in $\mathcal{B}$	(6.63e)
<i>Randspannungen 1. O.</i>	$(\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} W - \boldsymbol{\lambda}) \cdot \vec{n} - \vec{t}_{ext} = \vec{0}$	auf $\partial \mathcal{B}_t$	(6.63f)
<i>Randspannungen 2. O.</i>	$\partial_{\boldsymbol{\eta}} W \cdot \vec{n} - \vec{n} \otimes \vec{r}_{ext} = \mathbf{0}$	auf $\partial \mathcal{B}_r$	(6.63g)
<i>Oberflächenladungen</i>	$\bar{\mathbf{D}} \cdot \vec{n} + q_{ext} = 0$	auf $\partial \mathcal{B}_q$	(6.63h)

ermitteln. Dabei wird der Gleichungssatz im Vergleich zu den EULER-LAGRANGE-Gleichungen der elektrischen GIBBS-Energie basierten Formulierung in (6.59) durch eine schwache Einforderung der Beziehung zwischen dem elektrischen Feld und dem elektrischen Potential in (6.63c) ergänzt.

### 6.5.3.2 Linearisierung der Variationsformulierung

Für eine Lösung des im Allgemeinen nichtlinearen Optimierungsproblems in (6.61) im Rahmen der Finiten-Elemente-Methode wird wiederum eine Linearisierung der schwachen Form des Randwertproblems in (6.62) benötigt, vgl. auch Abschn. 6.2.4.3. Der tangente Anteil dieser Linearisierung unter weiterhin gültiger Annahme von konservativen äußeren Einwirkungen ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned}
 \delta\Delta\bar{\Pi} = & \int_{\mathcal{B}} (\delta\boldsymbol{\varepsilon} : (\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}}^2 W : \Delta\boldsymbol{\varepsilon} + \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\eta}}^2 W : \Delta\boldsymbol{\eta} + \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}\bar{\mathbf{D}}}^2 W \cdot \Delta\bar{\mathbf{D}}) - \nabla\delta\bar{u} : \Delta\boldsymbol{\lambda} \\
 & + \delta\boldsymbol{\eta} : (\partial_{\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{\varepsilon}}^2 W : \Delta\boldsymbol{\varepsilon} + \partial_{\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{\eta}}^2 W : \Delta\boldsymbol{\eta} + \partial_{\boldsymbol{\eta}\bar{\mathbf{D}}}^2 W \cdot \Delta\bar{\mathbf{D}}) + \delta\mathbf{H} : \Delta\boldsymbol{\lambda} \\
 & + \delta\bar{\mathbf{D}} \cdot (\partial_{\bar{\mathbf{D}}\boldsymbol{\varepsilon}}^2 W : \Delta\boldsymbol{\varepsilon} + \partial_{\bar{\mathbf{D}}\boldsymbol{\eta}}^2 W : \Delta\boldsymbol{\eta} + \partial_{\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{D}}}^2 W \cdot \Delta\bar{\mathbf{D}} + \nabla\Delta\phi) \\
 & + \nabla\delta\phi \cdot \Delta\bar{\mathbf{D}} + \delta\boldsymbol{\lambda} : \Delta\mathbf{H} - \delta\boldsymbol{\lambda} : \nabla\Delta\bar{u}) dV.
 \end{aligned} \tag{6.64}$$

In dieser Darstellung findet eine im Materialmodell enthaltene Kopplung zwischen den Verzerrungen und den Verzerrungsgradienten seine Berücksichtigung, welche sich bereits aus den hergeleiteten Konstitutivgleichungen der linearen Flexoelektrizität in (2.124) und (2.125) ergeben hat.

## 6.6 Gemischte flexoelektrische FE-Formulierung

Auf Basis der in Abschn. 6.5.3 vorgestellten Fünf-Feld-Variationsformulierung mit LAGRANGE-Multiplikator-Ansatz wird nun eine gemischte Finite-Elemente-Formulierung für die Behandlung von flexoelektrischen Problemstellungen vorgestellt. Aufgrund des auf der freien HELMHOLTZ-Energie basierenden Rahmens und den damit verbundenen konvexen Eigenschaften eignet sich diese insbesondere für materiell nichtlineare Anwendungen. Eine ähnliche Finite-Elemente-Formulierung wird auch von MAO et al. [60] präsentiert.

Durch Einsetzen der Elementmatrizen  $N_e^\square$ ,  $\mathbf{B}_e^\square$  und  $\mathbf{M}_e^\square$  mit geeigneten Ansatzfunktionen  $N_I^\square$ , bzw. deren kartesischen Ableitungen  $N_{I,x}^\square$  (vgl. Anhang E), in die schwache Form (6.62), ergeben sich die Komponenten

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{u}} \bar{\Pi}_e^h &= \delta \mathbf{u}_e^T (\mathbf{F}_e^u - \mathbf{P}_e^u) \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^u = \int_{\Omega_e} (\mathbf{B}_e^{uT} \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} W - \mathbf{M}_e^{uT} \boldsymbol{\lambda}) dV \\ \text{und} \quad \mathbf{P}_e^u &= \int_{\Omega_e} N_e^{uT} \mathbf{b}_{\text{ext}} dV + \int_{\partial\Omega_e} N_e^{uT} \mathbf{t}_{\text{ext}} dA, \end{aligned} \quad (6.65)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{H}} \bar{\Pi}_e^h &= \delta \mathbf{H}_e^T (\mathbf{F}_e^H - \mathbf{P}_e^H) \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^H = \int_{\Omega_e} (\mathbf{B}_e^{HT} \partial_{\boldsymbol{\eta}} W + N_e^{HT} \boldsymbol{\lambda}) dV \\ \text{und} \quad \mathbf{P}_e^H &= \int_{\partial\Omega_e} N_e^{HT} \mathbf{m}_{\text{ext}} dA, \end{aligned} \quad (6.66)$$

$$\delta_{\mathbf{D}} \bar{\Pi}_e^h = \delta \mathbf{D}_e^T \mathbf{F}_e^D \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^D = \int_{\Omega_e} N_e^{DT} (\partial_{\mathbf{D}} W + \nabla \phi) dV, \quad (6.67)$$

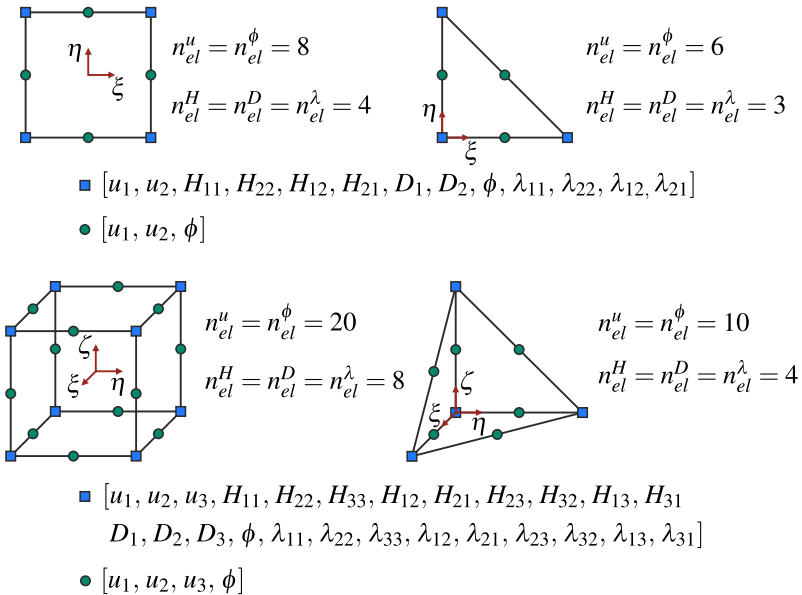
$$\begin{aligned} \delta_{\boldsymbol{\phi}} \bar{\Pi}_e^h &= \delta \boldsymbol{\phi}_e^T (\mathbf{F}_e^\phi + \mathbf{P}_e^\phi) \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^\phi = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^{\phi T} \mathbf{D} dV \\ \text{und} \quad \mathbf{P}_e^\phi &= \int_{\partial\Omega_e} N_e^\phi q_{\text{ext}} dA, \end{aligned} \quad (6.68)$$

$$\delta_{\boldsymbol{\lambda}} \bar{\Pi}_e^h = \delta \boldsymbol{\lambda}_e^T \mathbf{F}_e^\lambda \quad \text{mit} \quad \mathbf{F}_e^\lambda = \int_{\Omega_e} N_e^{\lambda T} (\mathbf{H} - \nabla \mathbf{u}) dV \quad (6.69)$$

ihrer diskretisierten Version für jedes Element  $e$  eines Körpers  $\mathcal{B}^h$ , worin die Komponenten  $\mathbf{F}_e^\square$  und  $\mathbf{P}_e^\square$  der Elementvektoren der inneren Kräfte und der äußeren Kräfte identifiziert werden können. In den Ausdrücken in (6.65) bis (6.69) findet, wie schon in Abschn. 6.3, die in dieser Arbeit gewählte Vektor-Matrix-Notation ihre Verwendung, vgl. auch Anhang E.1. Die Komponenten  $\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} W$ ,  $\partial_{\boldsymbol{\eta}} W$  und  $\partial_{\mathbf{D}} W$  in (6.65) bis (6.67) müssen im Rahmen der numerischen Auswertung der Integrale durch das Materialmodell an jedem GAUSS-Punkt separat bestimmt werden. In (6.66) symbolisiert  $\mathbf{m}_{\text{ext}}$  den in Vektor-Matrix-Notation dargestellten Ausdruck  $\vec{n} \otimes \vec{r}_{\text{ext}}$  zur Beschreibung der Randspannungen höherer Ordnung.

Wie schon bei der zuvor vorgestellten piezoelektrischen FE-Formulierung in Abschn. 6.2 ergibt sich für das Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}$  und das elektrische Skalarpotential  $\phi$  die Notwendigkeit eines  $C^0$ -kontinuierlichen Ansatzes. Die glei-

che Anforderung wird auch an einen Ansatz für den Verschiebungsgradienten  $\mathbf{H}$  gestellt. Für die dielektrische Verschiebung  $\mathbf{D}$  ist weiterhin ein stückweise  $C^{-1}$ -kontinuierlicher Ansatz ausreichend, ebenso wie für den neu eingeführten LAGRANGE-Multiplikator  $\lambda$ . Daher werden das Verschiebungsfeld, das Verschiebungsgradientenfeld und das elektrische Skalarpotential durch kontinuierliche quadratische *Serendipity*-Polynome interpoliert, während für die dielektrische Verschiebung und den LAGRANGE-Multiplikator diskontinuierliche lineare LAGRANGE-Polynome gewählt werden. Die resultierenden Freiheitsgrade pro Knoten von verschiedenen zweidimensionalen und dreidimensionalen isoparametrischen Elementen sind in Abb. 6.3 dargestellt. Wie zuvor wird an dieser Stelle für nähere Informationen zur Konstruktion der verwendeten Ansatzfunktionen auf die Standardliteratur wie z. B. [205, 208] verwiesen.



**Abbildung 6.3:** Knotenfreiheitsgrade von 2D (oben) und 3D (unten) isoparametrischen finite Elementen auf der Grundlage des Fünf-Feld-Variationsprinzips in (6.61).

Die Komponenten einer diskretisierten Version des tangentialen Anteils der Linearisierung der schwachen Form des Randwertproblems in (6.64) auf Elementebene sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{u}} \Delta \bar{\Pi}_e^h &= \delta \mathbf{u}_e^T (\mathbf{K}_e^{uu} \Delta \mathbf{u}_e + \mathbf{K}_e^{uH} \Delta \mathbf{H}_e + \mathbf{K}_e^{uD} \Delta \mathbf{D}_e - \mathbf{K}_e^{u\lambda} \Delta \boldsymbol{\lambda}_e) \quad \text{mit} \\ \mathbf{K}_e^{uu} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^{uT} \mathbf{C}_T^{\varepsilon\varepsilon} \mathbf{B}_e^u dV, \quad \mathbf{K}_e^{uH} = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^{uT} \mathbf{C}_T^{\varepsilon\eta} \mathbf{B}_e^H dV, \\ \mathbf{K}_e^{uD} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^{uT} \mathbf{C}_T^{\varepsilon D} \mathbf{N}_e^D dV \quad \text{und} \quad \mathbf{K}_e^{u\lambda} = \int_{\Omega_e} \mathbf{M}_e^{uT} \mathbf{N}_e^\lambda dV, \end{aligned} \quad (6.70)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{H}} \Delta \bar{\Pi}_e^h &= \delta \mathbf{H}_e^T (\mathbf{K}_e^{Hu} \Delta \mathbf{u}_e + \mathbf{K}_e^{HH} \Delta \mathbf{H}_e + \mathbf{K}_e^{HD} \Delta \mathbf{D}_e + \mathbf{K}_e^{H\lambda} \Delta \boldsymbol{\lambda}_e) \quad \text{mit} \\ \mathbf{K}_e^{Hu} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^{HT} \mathbf{C}_T^{\eta\varepsilon} \mathbf{B}_e^u dV, \quad \mathbf{K}_e^{HH} = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^{HT} \mathbf{C}_T^{\eta\eta} \mathbf{B}_e^H dV, \\ \mathbf{K}_e^{HD} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{B}_e^{HT} \mathbf{C}_T^{\eta D} \mathbf{N}_e^D dV \quad \text{und} \quad \mathbf{K}_e^{H\lambda} = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{HT} \mathbf{N}_e^\lambda dV, \end{aligned} \quad (6.71)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{D}} \Delta \bar{\Pi}_e^h &= \delta \mathbf{D}_e^T (\mathbf{K}_e^{Du} \Delta \mathbf{u}_e + \mathbf{K}_e^{DH} \Delta \mathbf{H}_e + \mathbf{K}_e^{DD} \Delta \mathbf{D}_e + \mathbf{K}_e^{D\phi} \Delta \boldsymbol{\phi}_e) \quad \text{mit} \\ \mathbf{K}_e^{Du} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{DT} \mathbf{C}_T^{D\varepsilon} \mathbf{B}_e^u dV, \quad \mathbf{K}_e^{DH} = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{DT} \mathbf{C}_T^{D\eta} \mathbf{B}_e^H dV, \\ \mathbf{K}_e^{DD} &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{DT} \mathbf{C}_T^{DD} \mathbf{N}_e^D dV \quad \text{und} \quad \mathbf{K}_e^{D\phi} = \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_e^{DT} \mathbf{B}_e^\phi dV, \end{aligned} \quad (6.72)$$

$$\delta_{\boldsymbol{\phi}} \Delta \bar{\Pi}_e^h = \delta \boldsymbol{\phi}_e^T \mathbf{K}_e^{\phi D} \Delta \mathbf{D}_e \quad \text{mit} \quad \mathbf{K}_e^{\phi D} = (\mathbf{K}_e^{D\phi})^T, \quad (6.73)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\boldsymbol{\lambda}} \Delta \bar{\Pi}_e^h &= \delta \boldsymbol{\lambda}_e^T (\mathbf{K}_e^{\lambda H} \Delta \mathbf{H}_e - \mathbf{K}_e^{\lambda u} \Delta \mathbf{u}_e) \quad \text{mit} \quad \mathbf{K}_e^{\lambda H} = (\mathbf{K}_e^{H\lambda})^T \\ &\quad \text{und} \quad \mathbf{K}_e^{\lambda u} = (\mathbf{K}_e^{u\lambda})^T. \end{aligned} \quad (6.74)$$

In gleicher Art und Weise wie bereits in Abschn. 6.3, kann die diskretisierte Linearisierung der schwachen Form

$$\text{Lin}[\delta \bar{\Pi}]_e^h = \delta \bar{\Pi}_e^h + \delta \Delta \bar{\Pi}_e^h = \delta \mathbf{v}_e^T (\mathbf{F}_e - \mathbf{P}_e + \mathbf{K}_{Te} \Delta \mathbf{v}_e) \quad (6.75)$$

unter Einbeziehung der in (6.65) bis (6.69) und (6.70) bis (6.74) ermittelten Elementvektoren und -matrizen in kompakter Form aufgeschrieben werden. Darin

wiederum enthalten sind die inkrementellen Änderungen

$$\Delta \mathbf{v}_e = \left[ \Delta \mathbf{u}_e^T \quad \Delta \mathbf{H}_e^T \quad \Delta \mathbf{D}_e^T \quad \Delta \boldsymbol{\phi}_e^T \quad \Delta \boldsymbol{\lambda}_e^T \right]^T \quad (6.76)$$

der Elementknotenfreiheitsgrade, die tangentielle Elementsteifigkeitsmatrix

$$\mathbf{K}_{Te} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_e^{uu} & \mathbf{K}_e^{uH} & \mathbf{K}_e^{uD} & \mathbf{0} & -\mathbf{K}_e^{u\lambda} \\ \mathbf{K}_e^{Hu} & \mathbf{K}_e^{HH} & \mathbf{K}_e^{HD} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_e^{H\lambda} \\ \mathbf{K}_e^{Du} & \mathbf{K}_e^{DH} & \mathbf{K}_e^{DD} & \mathbf{K}_e^{D\phi} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & (\mathbf{K}_e^{D\phi})^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -(\mathbf{K}_e^{u\lambda})^T & (\mathbf{K}_e^{H\lambda})^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (6.77)$$

der Elementvektor der inneren Kräfte

$$\mathbf{F}_e = \left[ (\mathbf{F}_e^u)^T \quad (\mathbf{F}_e^H)^T \quad (\mathbf{F}_e^D)^T \quad (\mathbf{F}_e^\phi)^T \quad (\mathbf{F}_e^\lambda)^T \right]^T \quad (6.78)$$

und der Elementvektor der äußeren Kräfte

$$\mathbf{P}_e = \left[ (\mathbf{P}_e^u)^T \quad (\mathbf{P}_e^H)^T \quad \mathbf{0} \quad -(\mathbf{P}_e^\phi)^T \quad \mathbf{0} \right]^T. \quad (6.79)$$

Wie bereits für die gemischte piezoelektrische FE-Formulierung in Abschn. 6.3 beschrieben, erlaubt die Stetigkeitsanforderung an die Ansätze für die dielektrische Verschiebung eine statische Kondensation der zugehörigen Knotenwerte auf Elementebene. Für den zugehörigen Anteil in der Linearisierung der schwachen Form in (6.75) gilt somit auf Elementebene  $\text{Lin}_D[\delta \bar{\Pi}]_e^h = 0$ , wodurch unter Einbeziehung der Elementvektoren und -matrizen in (6.76) bis (6.79) für beliebige  $\delta \mathbf{D}_e$  durch Umstellen eine Bestimmungsgleichung

$$\Delta \mathbf{D}_e = -(\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} (\mathbf{K}_e^{Du} \Delta \mathbf{u}_e + \mathbf{K}_e^{DH} \Delta \mathbf{H}_e + \mathbf{K}_e^{D\phi} \Delta \boldsymbol{\phi}_e + \mathbf{F}_e^D) \quad (6.80)$$

für die inkrementellen Änderungen der dielektrischen Verschiebung des jeweiligen Elementes ermitteln werden kann. Durch Einsetzen von (6.80) in die verbliebenen Gleichungen in (6.75), lässt sich die Linearisierung der schwachen Form auf



Elementebene vereinfachen zu

$$\text{Lin}[\delta\bar{\Pi}]_e^h = \delta\mathbf{v}_e^T (\mathbf{F}_e^{\text{eff}} - \mathbf{P}_e^v + \mathbf{K}_{Te}^{\text{eff}} \Delta\mathbf{v}_e). \quad (6.81)$$

In (6.81) lassen sich der Vektor

$$\Delta\mathbf{v}_e = \begin{bmatrix} \Delta\mathbf{u}_e^T & \Delta\mathbf{H}_e^T & \Delta\phi_e^T & \Delta\boldsymbol{\lambda}_e^T \end{bmatrix}^T \quad (6.82)$$

der unbekanntenen inkrementellen Änderungen der verbliebenen Elementfreiheitsgrade, die effektive tangentielle Elementsteifigkeitsmatrix

$$\mathbf{K}_{Te}^{\text{eff}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{K}}_e^{uu} & \tilde{\mathbf{K}}_e^{uH} & \tilde{\mathbf{K}}_e^{u\phi} & -\mathbf{K}_e^{u\lambda} \\ \tilde{\mathbf{K}}_e^{Hu} & \tilde{\mathbf{K}}_e^{HH} & \tilde{\mathbf{K}}_e^{H\phi} & \mathbf{K}_e^{H\lambda} \\ \tilde{\mathbf{K}}_e^{\phi u} & \tilde{\mathbf{K}}_e^{\phi H} & \tilde{\mathbf{K}}_e^{\phi\phi} & \mathbf{0} \\ -(\mathbf{K}_e^{u\lambda})^T & (\mathbf{K}_e^{H\lambda})^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (6.83)$$

der effektive Elementvektor der inneren Kräfte

$$\mathbf{F}_e^{\text{eff}} = \begin{bmatrix} (\tilde{\mathbf{F}}_e^u)^T & (\tilde{\mathbf{F}}_e^H)^T & (\tilde{\mathbf{F}}_e^\phi)^T & (\mathbf{F}_e^\lambda)^T \end{bmatrix}^T \quad (6.84)$$

und der Elementvektor der äußeren Kräfte

$$\mathbf{P}_e^v = \begin{bmatrix} (\mathbf{P}_e^u)^T & (\mathbf{P}_e^H)^T & -(\mathbf{P}_e^\phi)^T & \mathbf{0} \end{bmatrix}^T \quad (6.85)$$

identifizieren. Die in (6.83) und (6.84) enthaltenen effektiven Anteile der tangentialen Elementsteifigkeitsmatrix und des Elementvektors der inneren Kräfte ergeben sich dann zu

$$\tilde{\mathbf{K}}_e^{uu} = \mathbf{K}_e^{uu} - \mathbf{K}_e^{uD} (\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} \mathbf{K}_e^{Du} \quad (6.86)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_e^{uH} = (\tilde{\mathbf{K}}_e^{Hu})^T = \mathbf{K}_e^{uH} - \mathbf{K}_e^{uD} (\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} \mathbf{K}_e^{DH} \quad (6.87)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_e^{u\phi} = (\tilde{\mathbf{K}}_e^{\phi u})^T = -\mathbf{K}_e^{uD} (\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} \mathbf{K}_e^{D\phi} \quad (6.88)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_e^{HH} = \mathbf{K}_e^{HH} - \mathbf{K}_e^{HD} (\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} \mathbf{K}_e^{DH} \quad (6.89)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_e^{H\phi} = (\tilde{\mathbf{K}}_e^{\phi H})^T = -\mathbf{K}_e^{HD} (\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} \mathbf{K}_e^{D\phi} \quad (6.90)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_e^{\phi\phi} = -\mathbf{K}_e^{\phi D} (\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} \mathbf{K}_e^{D\phi} \quad (6.91)$$

$$\tilde{\mathbf{F}}_e^u = \mathbf{F}_e^u - \mathbf{K}_e^{uD} (\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} \mathbf{F}_e^D \quad (6.92)$$

$$\tilde{\mathbf{F}}_e^H = \mathbf{F}_e^H - \mathbf{K}_e^{HD} (\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} \mathbf{F}_e^D \quad (6.93)$$

$$\tilde{\mathbf{F}}_e^\phi = \mathbf{F}_e^\phi - \mathbf{K}_e^{\phi D} (\mathbf{K}_e^{DD})^{-1} \mathbf{F}_e^D. \quad (6.94)$$

Eine Assemblierung von (6.81) über alle Elemente des betrachteten Gebiets liefert das lineare FE-Gleichungssystem

$$\bigcup_{e=1}^{n_{elem}} \delta \mathbf{v}_e^T (\mathbf{K}_{Te}^{\text{eff}} \Delta \mathbf{v}_e + (\mathbf{F}_e^{\text{eff}} - \mathbf{P}_e^v)) = 0 \quad \implies \quad \mathbf{K}_T^{\text{eff}} \Delta \mathbf{v} = -\mathbf{R}^{\text{eff}} \quad (6.95)$$

für eine inkrementelle Aktualisierung der Knotenfreiheitsgrade auf der globalen Systemebene. Die Iteration mit Gleichung (6.95) kann beendet werden, wenn der effektive globale Residualvektor im numerischen Sinne verschwindet:  $\|\mathbf{R}^{\text{eff}}\| < \text{tol}$ . Eine Aktualisierung der kondensierten Knotenwerte der dielektrischen Verschiebung wird in jedem Iterationsschritt auf Elementebene über (6.80) durchgeführt. Für diese Neuberechnung müssen die in (6.80) enthaltenen Elementmatrizen des vorherigen Iterationsschritts abgespeichert werden. In diesem Zusammenhang ist zu erwähnen, dass sich die Matrizen  $\mathbf{K}_e^{D\phi}$ ,  $\mathbf{K}_e^{u\lambda}$  und  $\mathbf{K}_e^{H\lambda}$  während der globalen Gleichgewichtsiteiteration nicht ändern.

# 7 Nichtlineare Modellierung ferroelektrischer Materialien mit piezoelektrischen Eigenschaften<sup>1</sup>

In diesem ersten anwendungsorientierten Kapitel werden numerische Beispiele behandelt, bei denen im Speziellen der Einfluss materieller Nichtlinearitäten in ferroelektrischen Materialien im Fokus steht. Die bei elektrischer oder mechanischer Belastung mit hinreichender Amplitude auftretenden Domänenumklappprozesse beeinflussen hierbei maßgeblich die Systemantwort der hier behandelten Modellbeispiele. Die Untersuchungen in diesem Kapitel beschränken sich allerdings auf ein Materialverhalten, welches als einziges lineares elektro-mechanisches Kopplungsphänomen den piezoelektrischen Effekt beinhaltet. Die zuvor in dieser Arbeit diskutierten Effekte höherer Ordnung der Flexoelektrizität bleiben zunächst unberücksichtigt. Eine solche Annahme ist aufgrund des ausgeprägten Größeneffekts der Flexoelektrizität für die meisten in technischen Anwendungen relevanten Modellsysteme mit Größenordnungen von mehreren Millimetern gerechtfertigt.

Anhand der diskutierten Beispiele soll insbesondere die Leistungsfähigkeit der vorgestellten Modellierungswerkzeuge und numerischen Methoden demonstriert werden. Das in Kap. 5 eingeführte Materialmodell sowie der zugehörige lokale Lösungsprozess reduziert sich im Fall eines rein piezoelektrischen Materialverhaltens zu der in SUTTER und KAMLAH [25] eingeführten Darstellung. Des Weiteren findet die piezoelektrische Finite-Elemente-Formulierung aus Abschn. 6.3 ihre Anwendung. Die Berechnungen der numerischen Beispiele werden mit einem

---

<sup>1</sup> Die in diesem Kapitel behandelten numerischen Beispiele sind größtenteils aus SUTTER und KAMLAH [25] entnommen.

eigens entwickelten Finite-Elemente-Code in MATLAB [221] durchgeführt. Um die Anwendbarkeit der verwendeten Modelle und Algorithmen auf reale Probleme ingenieurtechnischer Anwendungen zu demonstrieren, wird bei den numerischen Beispielen besonderer Wert auf den Vergleich mit experimentellen Ergebnissen aus der Literatur gelegt.

## 7.1 PZT-Probe unter zyklischer uniaxialer elektro-mechanischer Belastung

In einem ersten Beispiel wird die simulierte Materialantwort des in Kap. 5 vorgestellten mikroskopisch motivierten Modells mit dem Verhalten realer ferroelektrischer Funktionskeramiken verglichen. Hierfür werden experimentelle Ergebnisse aus der Literatur verwendet, welche auf makroskopischer Skala an einem ferroelektrischen Polykristall aufgezeichnet wurden. Im Fokus stehen insbesondere die für ferroelektrische Materialien charakteristischen Hysteresekurven (vgl. Kap. 4), welche durch das verwendete Materialmodell zu reproduzieren sind. Als betrachtetes Modellsystem wird in diesem Beispiel ein Einheitswürfel mit einer entsprechend dem verwendeten Einheitensystem gewählten Kantenlänge von 1 mm herangezogen. Diese virtuelle Versuchsprobe besteht aus dem weichen PZT-Material PIC 151 der Firma PI Ceramic GmbH aus Lederhose (Deutschland). Die an dieses Material angepassten Materialparameter des Modells in Kap. 5 sind in Tabelle 7.1 aufgeführt<sup>2</sup>. Bei numerischen Lösungsverfahren von multiphysikalischen Problemstellungen ergibt sich häufig durch stark abweichende Größenordnungen der auftretenden Felder ein schlecht konditioniertes Zahlensystem, welches zu großen

---

<sup>2</sup> Die hier gewählten piezoelektrischen Konstanten stimmen nicht mit den von PI Ceramic [143] angegebenen Parametern überein. Die hier getroffene Wahl ist motiviert durch eine möglichst genaue Abbildung des nichtlinearen quasistatischen Großsignalverhaltens, welches bei Polungsprozessen zu beobachten ist. Die von PI Ceramic angegebenen Parameter entsprechen dem für technische Anwendungen relevanteren linearen piezoelektrischen Verhalten bei hohen Frequenzen und geringen elektrischen Feldamplituden. Ferner wurde für den piezoelektrischen Schubparameter die übliche Abschätzung  $d_{15} = d_{33} - d_{31}$  vorgenommen, da dieser experimentell nur sehr schwer zu bestimmen ist, siehe [222].

Tabelle 7.1: An die weiche PZT-Keramik PIC 151 angepassten Parameter des Materialmodells.

Parameter	Symbol	Wert	Einheit	Rechenwert	Recheneinheit
Elastizitätsmodul	$Y$	45000	MPa	45	kN/mm <sup>2</sup>
Querkontraktionszahl	$\nu$	0.31	–	0.31	–
Piezoelektrische Konstanten	$d_{33}$	$0.7 \cdot 10^{-9}$	m/V	0.70	mm/MV
	$d_{31}$	$-0.29 \cdot 10^{-9}$	m/V	-0.29	mm/MV
Permittivität des Vakuums*	$d_{15}$	$0.99 \cdot 10^{-9}$	m/V	0.99	mm/MV
	$\epsilon_0$	$8.854 \cdot 10^{-12}$	C/(Vm)	$8.854 \cdot 10^{-3}$	kN/MV <sup>2</sup>
Dielektrische Suszeptibilität	$\kappa$	$30 \cdot 10^{-9}$	C/(Vm)	30	kN/MV <sup>2</sup>
Koerzitivfeldstärke	$E^c$	$0.95 \cdot 10^6$	V/m	$0.95 \cdot 10^{-3}$	MV/mm
Koerzitivspannung	$\sigma^c$	25	MPa	$25 \cdot 10^{-3}$	kN/mm <sup>2</sup>
Sättigungspolarisation	$P^{sat}$	0.38	C/m <sup>2</sup>	0.38	kN/(MVmm)
Sättigungsdehnung	$\epsilon^{sat}$	0.0026	–	0.0026	–
Verfestigungsparameter	$c_A$	0.1	MPa	$1 \cdot 10^{-4}$	kN/mm <sup>2</sup>
	$c_p$	0.025	MPa	$2.5 \cdot 10^{-5}$	kN/mm <sup>2</sup>
Energiebarrierenparameter	$a_A$	$1 \cdot 10^{-4}$	MPa	$1 \cdot 10^{-7}$	kN/mm <sup>2</sup>
	$m_A$	0.5	–	0.5	–
Distanzvariablenparameter	$a_p$	0.01	MPa	$1 \cdot 10^{-5}$	kN/mm <sup>2</sup>
	$m_p$	1.0	–	1.0	–
	$\xi$	0.15	–	0.15	–

\*Naturkonstante

Fehlern führen kann. Um dieses Problem zu vermeiden, werden die Berechnungen in dieser Arbeit in einem angepassten Einheitensystem durchgeführt, welches auch von LASKEWITZ und KAMLAH [166] sowie SCHWAAB et al. [11] verwendet wird. Zu Beginn eines jeden numerischen Experiments in diesem Beispiel wird angenommen, dass sich das Material der PZT-Probe in einem thermisch depolarisierten Zustand befindet, d. h.  $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0$ ,  $\vec{p} = [000]^T$  (vgl. Kap. 5). Ein solcher ‚jungfräulicher‘ Zustand wird üblicherweise für PZT nach dem herstellungsbedingten Sinterprozess angenommen. Für die Finite-Elemente-Berechnungen<sup>3</sup> wird der Würfel durch ein Netz diskretisiert, identisch mit dem eines aus der Literatur bekannten Patch-Tests nach MACNEAL und HARDER [223]. In diesem Beispiel werden die in Abschn. 6.3 eingeführten quadratischen finiten Hexaeder-Elemente mit Serendipity-Ansatz verwendet. Durch eine festgehaltene Normalenverschiebung an drei Flächen des Würfels werden die mechanischen Randbedingungen so gewählt, dass eine spannungsfreie Verformung der Struktur infolge elektrisch induzierten Umklappvorgänge im Material zu erwarten ist, vgl. Abb. 7.1 a). An der Unterseite des Würfels wird das elektrische Potential für alle in diesem Beispiel betrachteten Fälle zu Null gesetzt, was einer geerdeten Elektrode entspricht. Je nach der zu betrachtenden Situation wird an der Oberseite ein elektrisches Potential und/oder eine mechanische Spannung in globaler  $x_3$ -Richtung mit einer zeitlich veränderlichen Amplitude vorgegeben. Um einen möglichst repräsentativen Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen zu erzielen, erfolgt die Auswertung der makroskopischen Feldgrößen am numerischen Modell in einer an das Experiment angelehnten Art und Weise. Die Dehnungen werden aus den Differenzen der Knotenverschiebungen der zwei jeweils gegenüberliegenden Flächen geteilt durch die Einheitsdimension des Würfels berechnet. Die dielektrische Verschiebung wird über einen integrierten Wert der auftretenden Oberflächenladungen an den Knoten der Oberseite ausgewertet. Außerdem entsprechen die in den numerischen Ergebnissen angegebenen Werte für die mechanische Spannung und das elektrische

---

<sup>3</sup> Der in diesem Beispiel durchgeführte Abgleich der Modellantwort mit den experimentellen Hysteresen hätte auch anhand von Berechnungen an einem Materialpunktmodell erfolgen können. Der Mehrwert einer Berechnung an einem FE-Modell in Form eines Patch-Tests liegt in der Demonstration des Konvergenzverhaltens der globalen und lokalen NEWTON-Iteration und dem Nachweis der korrekten Implementierung.

Feld den einwirkenden externen Belastungen, welche durch die aufgebrachten Randbedingungen direkt vorgegeben sind.

**Anmerkung:** Die in Tabelle 7.1 aufgeführten Parameter  $Y$ ,  $\nu$ ,  $d_{33}$ ,  $d_{31}$ ,  $d_{15}$  und  $\kappa^\sigma$ , welche das lineare elektro-mechanische Materialverhalten beschreiben, können bei einer Anpassung an experimentelle Daten nicht völlig willkürlich und unabhängig voneinander gewählt werden. Die positive Definitheit der linearen Materialtangente in Vektor-Matrix-Notation

$$\mathbf{C}_{lin} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}^D & -\mathbf{h}^T \\ -\mathbf{h} & \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \end{bmatrix} \quad (7.1)$$

ist nicht jederzeit für beliebige Kombinationen der Materialparameter gewährleistet. Von STARK et. al. [224] werden die Bedingungen

$$\frac{Y}{\kappa} \left[ \frac{2d_{31}^2 + 4\nu d_{31} d_{33} + (1-\nu)d_{33}^2}{(1+\nu)(1-2\nu)} \right] < 1 \quad \text{und} \quad \frac{Y}{\kappa} \left[ \frac{d_{15}^2}{2(1+\nu)} \right] < 1 \quad (7.2)$$

angegeben, die bei der Wahl der Materialparameter erfüllt werden müssen, um die positive Definitheit der linearen Materialmatrix in (7.1) zu gewährleisten. Diese Stabilitätsbedingungen gelten im Übrigen auch für Modellvarianten mit konstitutiven Beziehungen auf der Basis anderer Energieformen als der in (7.1) gewählten Darstellung in der freien HELMHOLTZ-Energie. Nach den Erfahrungen des Autors macht sich eine Verletzung der in (7.2) angegebenen Stabilitätsbedingungen erst bei Anwendungen mit nichtlinearem Materialverhalten und einem polungszustandsabhängigen Piezotensor nach (5.14) in Form des Divergierens der globalen NEWTON-Iteration bemerkbar. In linearen Berechnungen zeigen sich dadurch in der Regel keine Beeinträchtigungen<sup>4</sup>.

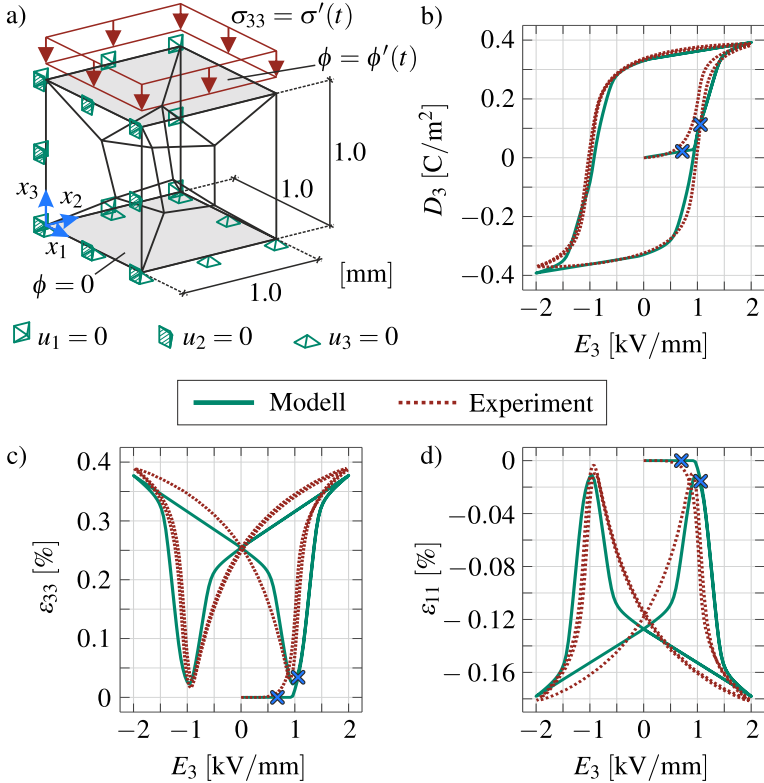
<sup>4</sup> Die Lösbarkeit von linearen Gleichungssysteme mit annähernd singulären Systemmatrizen hängt in der Regel stark vom gewählten Solver ab. In dieser Arbeit wurde ausschließlich mit den von MATLAB automatisch ausgewählten Solvern gearbeitet. Eine genauere Untersuchung zur Solverauswahl für piezoelektrische Anwendungen findet sich in [225].

### 7.1.1 Charakteristisches Hystereseverhalten ferroelektrischer Materialien

Im ersten Fall wird das Materialverhalten der PZT-Probe unter der Einwirkung eines äußeren uniaxialen elektrischen Feldes ohne mechanische Spannungen betrachtet. Dazu wird das vorgegebene elektrische Potential an der Oberseite des Würfels mit einer Amplitude von  $\phi'_{max} = \pm 2$  kV zyklisch variiert. Das resultierende maximale vertikale elektrische Feld  $E_3$ , welches auf den Würfel einwirkt, entspricht dann etwa dem doppelten Wert der Koerzitivfeldstärke  $E^c$  (vgl. Tabelle 7.1). In Abb. 7.1 b) wird die mit dem Materialmodell aus Kap. 5 im Rahmen der FEM numerisch berechnete dielektrische Hysterese mit der von ZHOU [144] experimentell gemessenen verglichen. Es ist offensichtlich, dass das Modell sowohl den Fortschritt der Domänenumklappprozesse als auch das dabei zu beobachtende Sättigungsverhalten im Material sehr gut erfassen kann, sowie in der Lage ist, deren Einfluss auf den makroskopischen Polarisationszustand zu reproduzieren. Der initiale Polungspfad kann allerdings vom Modell nicht exakt wiedergegeben werden. Die Koerzitivfeldstärke des Modells wurde hierbei an die Schnittpunkte der Hysterese mit der x-Achse angepasst, sodass ein im initialen Polungsprozess abweichendes Verhalten durch das Modell nur in erster Näherung erfasst werden kann. Eine Verfeinerung des Materialmodells für eine genauere Erfassung des Anfangspfades ist sicherlich möglich, aber noch nicht erfolgt. Eine solche genauere Erfassung wurde z. B. im Modell von STREICH et al. [196] realisiert.

Der Vergleich der longitudinalen und transversalen Schmetterlingshysteresen in Abb. 7.1 c) und d) mit experimentellen Daten aus ZHOU [144] zeigt, dass auch die Wiedergabe von Änderungen des Verzerrungszustands infolge Domänenumklappprozesse durch das Modell in guter Übereinstimmung ist. In den beiden Diagrammen wird zudem deutlich, dass die im Modell gewählten piezoelektrischen Parameter nicht zum linearen piezoelektrischen Aktuationsverhalten bei kleinen elektrischen Signalen um den Sättigungspunkt passen. Das Großsignalverhalten mit dieser Wahl aber sehr gut erfasst wird. Wie bei der dielektrischen Hysterese treten auch bei der Schmetterlingshysterese kleinere Abweichungen im Verlauf des Initialpfades auf.





**Abbildung 7.1:** Vergleich der makroskopischen Modellantwort mit den von ZHOU [144] gemessenen experimentellen Hysteresen bei zyklischer uniaxialer elektrischer Belastung: a) Finite-Elemente-Modell mit gewählten Randbedingungen, b) dielektrische Hysterese, c) longitudinale Schmetterlingshysterese, d) transversal Schmetterlingshysterese.

Zur Demonstration der numerischen Stabilität und Effizienz der in dieser Arbeit verwendeten Algorithmen zur Behandlung der globalen und lokalen Optimierungsprobleme, wird das Konvergenzverhalten der Lösungsprozesse innerhalb eines relativ großen Lastschrittes diskutiert. Hierfür werden die in (5.30) und (6.47) eingeführten lokalen und globalen Residuen betrachtet. Der gewählte Lastschritt, gekennzeichnet durch die beiden Kreuze in Abb. 7.1 b) bis d), umfasst eine Steigerung des angelegten elektrischen Potentials von  $\phi' = 0.7$  kV auf  $\phi' = 1.05$

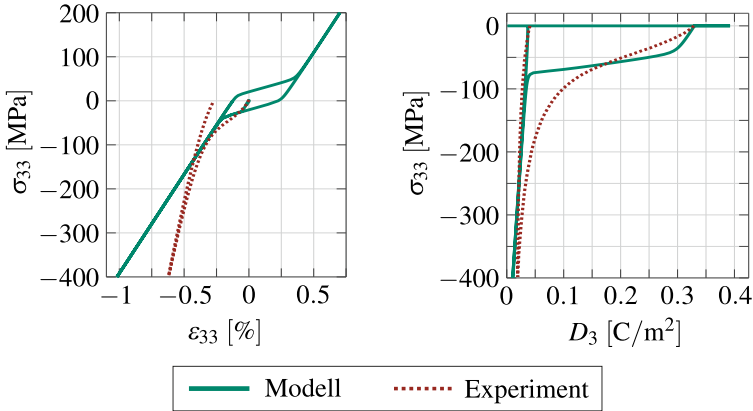
kV zwischen zwei Materialzuständen. In diesem Schritt wird zudem der Übergang von reversiblen zu irreversiblen Materialverhalten durchlaufen. In Tabelle 7.2 ist das entsprechende Konvergenzverhalten angegeben. Es ist deutlich zu erkennen, dass sowohl für die lokalen Iterationen am GAUSS-Punkt als auch für die globale Finite-Elemente-Iteration ein quadratisches Konvergenzverhalten vorliegt. Es zeigt sich auch, dass die Lösungsprozesse einem reinen Abstiegsverhalten mit stetigen Reduktion des Residuums folgen.

In der nächsten betrachteten Situation steht die Materialantwort unter rein mechanischer Einwirkung im Mittelpunkt. Wiederum ausgehend von einem vollständig unpolarisierten Zustand wird die vorgeschriebene mechanische Druckbeanspruchung bis zu  $\sigma'_{Druck,max} = -400$  MPa erhöht. Nach der Entlastung wird eine Zugbeanspruchung bis zum Maximalwert  $\sigma'_{Zug,max} = 200$  MPa aufgebracht. Durch Wiederholung der Druckbelastung mit einer Amplitude von  $\sigma'_{Druck,max} = -400$  MPa wird ein Zyklus vollendet und das aufgezeichnete Spannungs-Dehnungsverhalten spiegelt die ferroelastische Hysterese wieder, vgl. Abb. 7.2 links. Ein Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen von ZHOU [144] zeigt eine gute Übereinstimmung zu Beginn des ersten Belastungspfades bis zu einem Druckspannungsniveau von etwa  $\sigma'_{Druck} = -100$  MPa. Bei höheren Belastungen nimmt die Übereinstimmung der Ergebnisse ab. Der an den ersten Belastungspfad angepasste Elastizitätsmodul und die sich mit zunehmender Druckspannung kontinuierlich ändernde Steifigkeit von PZT (siehe z. B. die Untersuchungen von FETT et al. [147]) ist der Grund für diese Diskrepanz. Mit einer Anpassung des Elastizitätsmoduls im Modell an das ferroelastische Sättigungsverhalten der experimentellen Hysterese in Abb. 7.2 könnte sicherlich eine bessere Übereinstimmung erzielt werden. Jedoch zeigt sich, dass bei einer Wahl eines größeren E-Moduls weniger Flexibilität gegeben ist bei der Anpassung der dielektrischen und piezoelektrischen Materialparameter unter Berücksichtigung der Stabilitätsbedingungen in (7.2). Darüber hinaus verdeutlicht sich in der Modellantwort in Abb. 7.2 eine Abweichung in den remanenten Dehnungszuständen im Druckbereich nach der Entlastung. Diese begründet sich im angenommenen Ausgangszustand des Textur-tensors ( $\alpha_i = 1/3$ ), der zu einem Verhältnis zwischen der remanenten Zug- und

**Tabelle 7.2:** Konvergenzverhalten der globalen FE-NEWTON-Iteration und der lokalen Iterationen an einem GAUSS-Punkt.

Nr. glob. Iter.	1	2	3	4	5	6	7
$\ \mathbf{R}^{\text{eff}}\ $ in (6.47)	$9.7 \cdot 10^{-02}$	$2.3 \cdot 10^{-02}$	$9.0 \cdot 10^{-03}$	$1.1 \cdot 10^{-03}$	$1.4 \cdot 10^{-05}$	$2.1 \cdot 10^{-09}$	$1.5 \cdot 10^{-16}$
Nr. lok. Iter.	$\ \mathbf{R}\ $ in (5.30)						
1	$2.2 \cdot 10^{-01}$	$2.4 \cdot 10^{+01}$	$2.1 \cdot 10^{+01}$	$1.8 \cdot 10^{+01}$	$1.7 \cdot 10^{+01}$	$1.7 \cdot 10^{+01}$	$1.7 \cdot 10^{+01}$
2	$1.0 \cdot 10^{-02}$	$7.1 \cdot 10^{+00}$	$6.1 \cdot 10^{+00}$	$5.1 \cdot 10^{+00}$	$5.0 \cdot 10^{+00}$	$5.0 \cdot 10^{+00}$	$5.0 \cdot 10^{+00}$
3	$3.6 \cdot 10^{-05}$	$3.8 \cdot 10^{+00}$	$3.0 \cdot 10^{+00}$	$2.3 \cdot 10^{+00}$	$2.3 \cdot 10^{+00}$	$2.3 \cdot 10^{+00}$	$2.3 \cdot 10^{+00}$
4	$7.1 \cdot 10^{-09}$	$1.9 \cdot 10^{+00}$	$1.4 \cdot 10^{+00}$	$1.1 \cdot 10^{+00}$	$1.0 \cdot 10^{+00}$	$1.0 \cdot 10^{+00}$	$1.0 \cdot 10^{+00}$
5	$4.8 \cdot 10^{-17}$	$5.9 \cdot 10^{-01}$	$3.9 \cdot 10^{-01}$	$2.6 \cdot 10^{-01}$	$2.5 \cdot 10^{-01}$	$2.5 \cdot 10^{-01}$	$2.5 \cdot 10^{-01}$
6		$1.0 \cdot 10^{-01}$	$5.5 \cdot 10^{-02}$	$3.0 \cdot 10^{-02}$	$2.8 \cdot 10^{-02}$	$2.8 \cdot 10^{-02}$	$2.8 \cdot 10^{-02}$
7		$6.7 \cdot 10^{-03}$	$2.1 \cdot 10^{-03}$	$6.7 \cdot 10^{-04}$	$5.7 \cdot 10^{-04}$	$5.7 \cdot 10^{-04}$	$5.7 \cdot 10^{-04}$
8		$3.4 \cdot 10^{-05}$	$3.6 \cdot 10^{-06}$	$3.9 \cdot 10^{-07}$	$2.9 \cdot 10^{-07}$	$2.9 \cdot 10^{-07}$	$2.9 \cdot 10^{-07}$
9		$7.9 \cdot 10^{-10}$	$9.0 \cdot 10^{-12}$	$1.1 \cdot 10^{-13}$	$6.1 \cdot 10^{-14}$	$6.0 \cdot 10^{-14}$	$6.0 \cdot 10^{-14}$
10		$6.2 \cdot 10^{-17}$	$6.5 \cdot 10^{-17}$	$2.3 \cdot 10^{-16}$			

Druckdehnung von 2:1 führt<sup>5</sup>. Dieses für einen tetragonalen Einkristall gültige Verhältnis ist offensichtlich nicht optimal für eine Beschreibung des remanenten Dehnungszustandes im Druckbereich an einem Polykristall. Eine Verifikation der Modellantwort im Zugbereich ist aufgrund der Sprödigkeit des Materials und des daraus resultierenden Mangels an experimentellen Daten nicht möglich.



**Abbildung 7.2:** Vergleich der makroskopischen Modellantwort mit den von ZHOU [144] gemessenen experimentellen Hysterese bei zyklischer uniaxialer mechanischer Belastung. Links: Ferroelastische Hysterese. Rechts: Mechanisches Depolarisationsverhalten nach initialem Polungsprozess.

Um den Vergleich des charakteristischen hysteretischen Verhaltens ferroelektrischer Materialien zu vervollständigen, wird ein mechanischer Depolarisationsprozess simuliert, vgl. Abb. 7.2 rechts. Im Zuge dessen wird zunächst ein initialer Polungsprozess durchgeführt, indem das elektrische Potential an der Oberseite bis zu  $\phi'_{max} = -2$  kV erhöht wird. Nach der Entlastung verbleibt in der PZT-Probe ein remanenter Polarisationszustand von etwa  $P_3^i = 0.33$  C/m<sup>2</sup>. Die darauffolgende sukzessive Erhöhung der mechanischen Druckspannung in Polungsrichtung bis

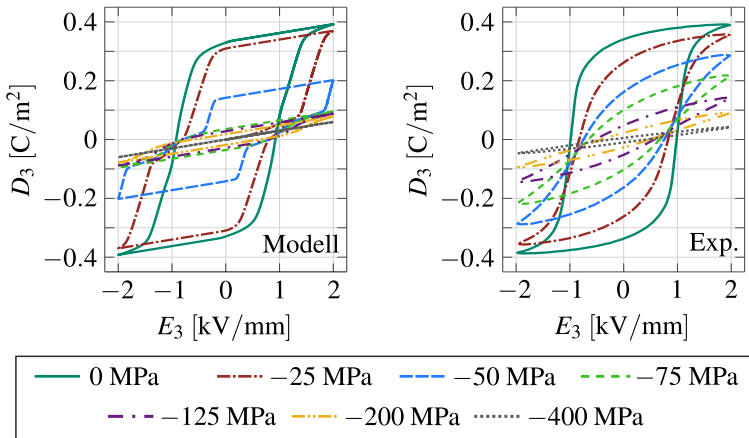
<sup>5</sup> Ein realistisches Verhältnis kann mit mikromechanischen Simulationen an einem Polykristall ermittelt werden. LU et al. [226], FRÖHLICH [227] und LANDIS et al. [228] errechneten für PZT ein Verhältnis von etwa 1.37:1.

zu einem Maximalwert von  $\sigma'_{Druck,max} = -400$  MPa führt zu einer Abnahme des Polarisationszustandes im Material. Der aufgezeichnete Depolarisationspfad des Modells weicht im Vergleich zu den experimentellen Daten etwas ab. Besonders auffällig ist die zu rasche Reduktion des letzten Drittels des Polarisationszustandes und dem damit verbundenen verfrühten Übergang in das lineare Materialverhalten einer mechanisch weitestgehend depolarisierten Probe. Die verbleibende Restpolarisation im Material nach vollständiger Entlastung stimmt wiederum sehr gut mit den experimentellen Beobachtungen von ZHOU [144] überein. Die offensichtlichen Abweichungen im Depolarisationspfad erklärt sich dadurch, dass die Materialparameter des Modells in erster Linie an das dielektrische Verhalten, sowie der Form der Schmetterlingshysteresen angepasst wurde. Das Großsignalverhalten dieser Effekte spielen im Vergleich zum ferroelastischen Verhalten und der Depolarisationscharakteristik i. d. R. eine entscheidendere Rolle für technische Anwendungen.

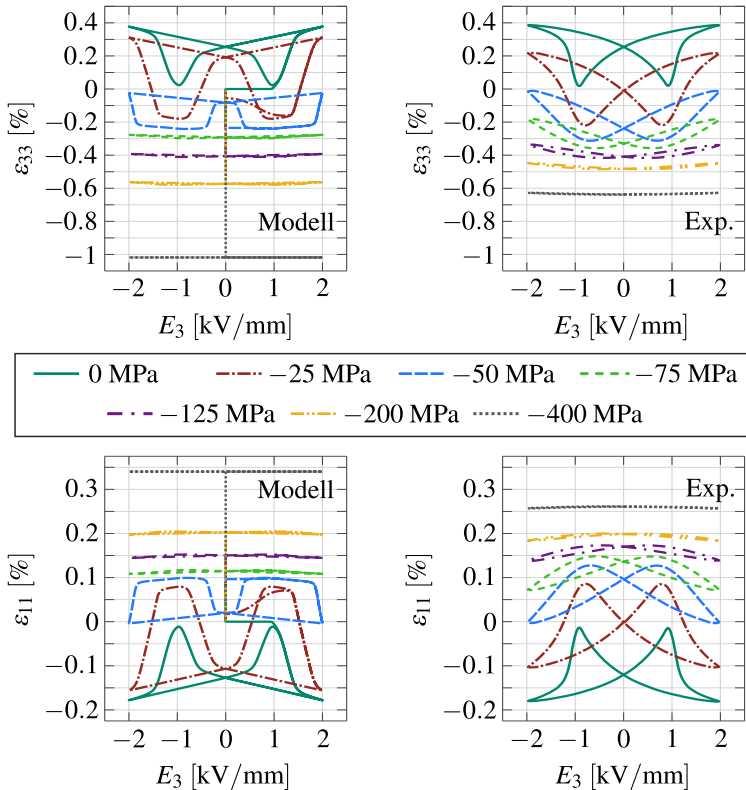
## 7.1.2 Ferroelektrisches Verhalten mit überlagerter uniaxialer Druckspannung

Im nächsten Schritt werden Szenarien mit gleichzeitiger elektrischer und mechanischer Beanspruchung des Materials in Betracht gezogen, vgl. Abschn. 4.2.2.5. Zunächst wird der Einfluss einer mechanischen Druckspannung auf die Form der dielektrischen Hysterese und die der Schmetterlingshysterese untersucht. Hierfür wird in einem ersten Schritt bei kurzgeschlossenen Elektroden ( $\phi' = 0$ ) eine uniaxiale mechanische Druckspannung in globaler  $x_3$ -Richtung auf die Probe aufgebracht. Insgesamt werden sieben numerische Experimente mit unterschiedlichen Druckspannungsniveaus von  $\sigma' = 0$  MPa bis zu einem Maximum von  $\sigma' = -400$  MPa durchgeführt. Nach diesem Vorspannungsprozess wird das elektrische Potential an der Oberseite mit gleicher Amplitude wie bereits in Abschn. 7.1.1 zyklisch variiert, während das Spannungsniveau konstant gehalten wird. Auf der linken Seite von Abb. 7.3 sind die resultierenden dielektrischen Hysteresen aus den numerischen Simulationen für die verschiedenen Druckspannungsniveaus dargestellt. Auch für diese Belastungsszenarien wird ein Vergleich mit experimen-

tellen Ergebnissen von ZHOU et al. [148] (Abb. 7.3, rechts) durchgeführt. Mit Blick auf den Einfluss der mechanischen Druckspannung auf die dielektrische Hysterese kann festgestellt werden, dass das bei einem Polungsprozess maximal erreichbare Polarisationsniveau mit zunehmender überlagerter Druckspannung abnimmt, vgl. auch die Erläuterungen in Abschn. 4.2.2.5. Dieser Effekt wird durch das Materialmodell wiedergegeben, obgleich ab einem bestimmten Spannungsniveau der Grad der ‚Stauchung‘ der Hysterese durch das Modell überschätzt wird. Bei sehr hohen Spannungen kommen die elektrisch getriebenen Umklappprozesse vollständig zum Erliegen, was durch das Modell in Form eines linearen dielektrischen Materialverhaltens korrekt dargestellt wird. Eine weitere Auffälligkeit kann durch den Vergleich der durch die Hysteresen eingeschlossenen Flächen, welche ein Maß für die dissipierte Energie darstellt, festgestellt werden. Während in den experimentellen Hysteresen die eingeschlossenen Flächen mit zunehmender Druckspannung stetig abzunehmen scheint, stellt sich bei den Modell-Hysteresen bei niedrigem Spannungsniveau zunächst eine annähernde Flächenkonstanz ein, siehe z. B.  $\sigma' = -25$  MPa.



**Abbildung 7.3:** Vergleich der mit dem Materialmodell berechneten makroskopischen dielektrischen Hysterese bei unterschiedlichen überlagerten Druckspannungen (links) mit den experimentellen Ergebnissen von ZHOU et al. [148] (rechts).



**Abbildung 7.4:** Vergleich der mit dem Materialmodell berechneten makroskopischen longitudinalen und transversalen Schmetterlingshysteresen bei unterschiedlichen überlagerten Druckspannungen (links) mit den experimentellen Ergebnissen aus ZHOU ET AL. [148] (rechts).

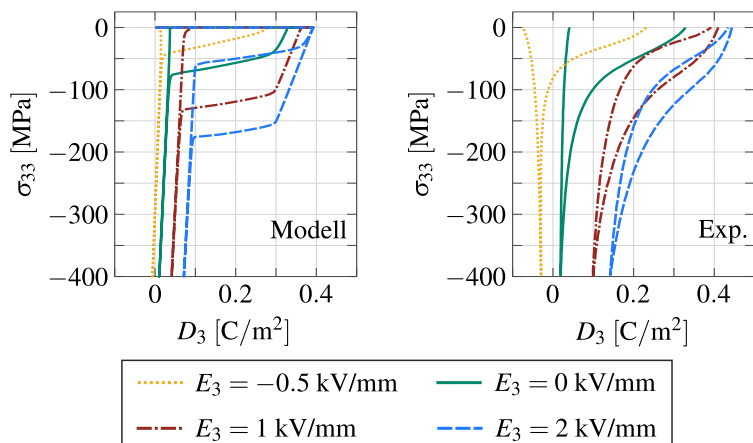
In Abb. 7.4 sind die für dieses numerische Beispiel zugehörigen longitudinalen und transversalen Schmetterlingshysteresen dargestellt. Diese werden ebenfalls mit den im realen Experiment aufgezeichneten Dehnungsantworten von ZHOU et al. [148] verglichen. Es zeigt sich, dass die Verschiebung der Schmetterlingshysterese in den negativen Dehnungsbereich sowie ihre zunehmende Stauchung bei höheren Druckspannungsniveaus vom Modell sehr gut erfasst werden. Auch die

für geringe überlagerte Druckspannungen ( $\sigma' = -25$  MPa) beobachtete vertikale Streckung der Schmetterlingshysterese kann reproduziert werden. Ähnlich zu den Beobachtungen für den Polarisationszustand in Abb. 7.3 sagt das Modell in Übereinstimmung mit den Experimenten eine vollständige Kompression der Hysteresen für sehr hohe Druckspannungen voraus. Die größeren Verschiebungen der zusammengedrückten Hysteresen entlang der Dehnungsachsen in den Ergebnissen des Modells lassen sich durch den vergleichsweise niedrig gewählten Elastizitätsmodul erklären (vgl. Abschn. 7.1.1).

### 7.1.3 Mechanisches Depolarisationsverhalten mit überlagertem elektrisches Feld

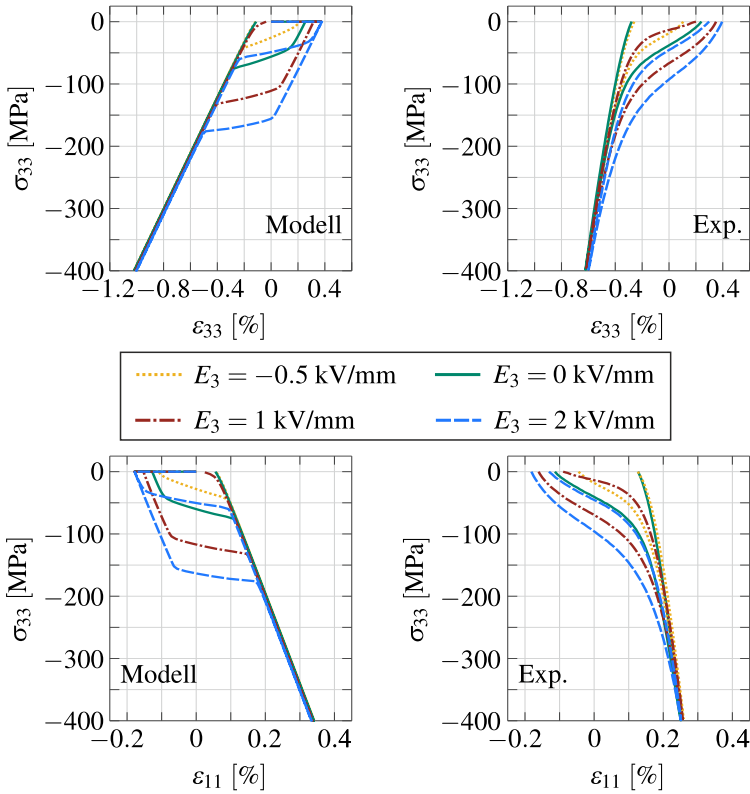
Im Weiteren wird die Fähigkeit des Modells bewertet, den Einfluss eines überlagerten elektrischen Feldes auf das mechanische Depolarisationsverhalten korrekt wiederzugeben. In dem zu diesen Zweck durchgeführten numerischen Beispiel wird an der PZT-Probe zunächst ein initialer Polungsprozess durchgeführt, indem das elektrische Potential an der Oberseite des Würfels sukzessive bis zu  $\phi'_{max} = -2$  kV erhöht wird. Nach diesem Schritt wird zur Einstellung des während des Depolarisationsvorgangs wirkenden elektrischen Feldes das elektrische Potential fallabhängig auf einen bestimmten Wert eingestellt. Insgesamt werden vier verschiedene überlagerte elektrische Feldstärken im Bereich von  $E_3 = -0.5$  kV/mm bis  $E_3 = 2$  kV/mm betrachtet. Die daraus resultierenden anzulegenden elektrischen Potentiale variieren entsprechend von  $\phi' = 0.5$  kV bis  $\phi' = -2$  kV. Ein positives elektrisches Feld wirkt also stabilisierend, ein negatives destabilisierend auf den Polarisationszustand. Sobald das entsprechende elektrische Feld eingestellt ist, wird das elektrische Potential konstant gehalten und zur Einleitung des mechanischen Depolarisationsprozesses eine stetig ansteigende einachsige Druckspannung aufgebracht. Dabei wird der maximale Wert der Druckspannung zu  $\sigma' = -400$  MPa gewählt.





**Abbildung 7.5:** Vergleich des mit dem Materialmodell berechneten makroskopischen mechanischen Depolarisationsverhaltens bei unterschiedlichen überlagerten elektrischen Feldern (links) mit den experimentellen Ergebnissen von ZHOU et al. [142] (rechts).

In Abb. 7.5 (links) ist das mittels numerischer Simulation berechnete Depolarisationsverhalten für die unterschiedlichen überlagerten elektrischen Felder dargestellt. Im Einklang mit dem von ZHOU et al. [142] experimentell beobachteten Verhalten in Abb. 7.5 (rechts) behindert ein überlagertes elektrisches Feld mit stabilisierender Wirkungsrichtung den Depolarisationsprozess. Zudem erhöht dieses den verbleibenden Polarisationszustand bei Erreichen des maximalen Kompressionsniveaus. Ferner ist die Fähigkeit des Materials einer vollständigen Wiederherstellung des Polarisationszustandes während des Entlastungsprozesses bei hohen stabilisierend wirkenden elektrischen Feldern ( $E_3 = 2$  kV/mm) im Modell enthalten. Im Gegensatz dazu begünstigt ein destabilisierendes elektrisches Feld von  $E_3 = -0.5$  kV/mm den Depolarisationsprozess, welcher dadurch bei deutlich geringeren Druckspannungsniveaus vonstattengeht. Jedoch kann in diesem Fall der geringfügige Aufbau einer entgegengesetzt orientierten Polarisation nach vollständiger mechanischer Entlastung vom Modell nicht abgebildet werden. Der Grund dafür ist, dass das dabei einwirkende elektrische Feld deutlich unterhalb der Koerzitivfeldstärke liegt und somit auch keine Entwicklung der inneren Variablen möglich ist.



**Abbildung 7.6:** Vergleich des mit dem Materialmodell berechneten makroskopischen longitudinalen und transversalen ferroelastischen Hystereseverhaltens bei verschiedenen überlagerten elektrischen Feldern (links) mit den experimentellen Ergebnissen von ZHOU et al. [142] (rechts).

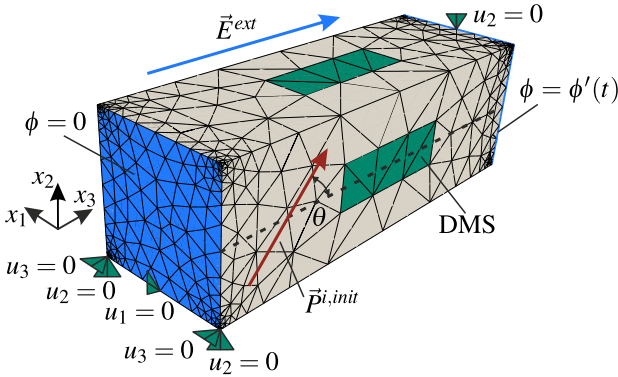
Im nächsten Schritt steht das Spannungs-Dehnungs-Verhalten der PZT-Proben bei den Depolarisationsvorgängen mit verschiedenen überlagerten elektrischen Feldern im Fokus. Hierzu werden die numerisch berechneten Längs- und Querdehnungsantworten mit den experimentellen Ergebnissen von ZHOU et al. [142] in Abb. 7.6 verglichen. Insgesamt zeigen die simulierten Hysteresen eine ähnliche Approximationscharakteristik wie bereits beim Depolarisationsverhalten beobach-

tet. Dies begründet sich dadurch, dass die Änderungen des Polarisationszustandes und die des Verzerrungszustandes im gleichen Maße an das Umklappverhalten der Domänen gekoppelt sind. Im vollständig depolarisierten Zustand, für den das Material sich wieder annähernd linear elastisch verhält, zeigt sich wiederum die offensichtlichen Abweichungen in der mechanischen Steifigkeit. Diese lassen sich wiederum durch die für dieses Beispiel getroffene Wahl des Elastizitätsmoduls erklären. Einzelheiten hierzu wurden bereits in Abschn. 7.1.1 im Rahmen des isolierten ferroelastischen Verhaltens diskutiert.

## 7.2 Polarisations-Rotationstest

Im folgenden numerischen Beispiel wird ein Experiment simuliert, welches von HUBER und FLECK [178] und später auch von ZHOU et al. [229] durchgeführt wurde. Dabei steht das Domänenumklappverhalten in PZT bei der Einwirkung eines nach der Polung rotierten elektrischen Feldes im Fokus. Die dadurch verursachte Rotation der Polarisationsvektoren im Material, welche der Wirkungsrichtung des elektrischen Feldes folgen, soll nun mit dem in dieser Arbeit verwendeten Modell reproduziert werden. Dieses Beispiel eignet sich dabei bestens, um dessen Fähigkeit zur Vorhersage des Materialverhaltens unter komplexen multiaxialen Belastungszuständen zu überprüfen. In dem Experiment von ZHOU et al. [229] werden mehrere Proben mit den Dimensionen  $15 \text{ mm} \times 5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$  bestehend aus PIC 151 (vgl. Abschn. 7.1.1) aus einer großen vorgepolten ( $E_{max} = 2.5 \text{ kV/mm}$ ) Platte mit unterschiedlichen Schnittwinkeln  $\theta$  ( $0^\circ$  bis  $180^\circ$ ) bzgl. der initialen Polungsrichtung ausgeschnitten. Danach werden auf den Stirnflächen der Proben Elektroden angebracht und an den Seitenflächen werden Dehnungsmessstreifen (DMS) aufgeklebt. Weitere Einzelheiten zur Probenvorbereitung können in ZHOU et al. [229] nachgelesen werden. Die angebrachten Elektroden ermöglichen die Erzeugung eines elektrischen Feldes in axialer Probenrichtung, wobei die initiale Ausrichtung der Polarisation je nach Schnittwinkel bei der Probeherstellung variiert. Während eines stetig ansteigenden elektrischen Feldes bis zu einem Maximalwert von  $2 \text{ kV/mm}$  werden im Experiment die Ände-

rungen der makroskopischen Polarisations- und Dehnungszustände beobachtet. Um dieses Experiment virtuell zu reproduzieren, wird eine FE-Simulation dieses Polarisationsrotationsprozesses durchgeführt. Das entsprechende FE-Modell aus quadratischen Tetraeder-Elementen (vgl. Abschn. 6.3) ist in Abb. 7.7 dargestellt. Weiterhin werden auch die vorgegebenen Randbedingungen angegeben. Die mechanischen Randbedingungen sind auf ein notwendiges Minimum beschränkt, sodass bei Deformationen infolge von Polarisationsrotation kein mechanischer Zwang zu erwarten ist. Das elektrische Potential an einer Stirnflächen wird in 40 äquidistanten Belastungsschritten bis auf  $\phi'_{max} = -2$  kV erhöht, wodurch ein äußeres elektrisches Feld  $E_3^{ext}$  in der globalen  $x_3$ -Richtung erzeugt wird. Der anfängliche irreversible Polarisationsvektor  $\vec{P}^{i,init}$  liegt für alle Schnittwinkel  $\theta$  in der  $x_2$ - $x_3$ -Ebene. In diesem numerischen Experiment werden die selben Materialparameter gewählt wie in den Beispielen in Abschn. 7.1 (vgl. Tab. 7.1).



**Abbildung 7.7:** Finite-Elemente-Modell der ausgeschnittenen PZT-Probenscheiben ( $15 \text{ mm} \times 5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ ) des Experiments von ZHOU et al. [229] mit den vorgegebenen elektrischen und mechanischen Randbedingungen. Der initiale Winkel zwischen dem angelegten elektrischen Feld und der Polungsrichtung der Probe  $\theta$  variiert von  $0^\circ$  bis  $180^\circ$ .

Es sei erwähnt, dass die Berücksichtigung eines initialen irreversiblen Polarisationszustandes  $\vec{P}^i(t = 0) = \vec{P}^{i,init}$  und des zugehörigen initialen irreversiblen Verzerrungszustandes  $\boldsymbol{\epsilon}^i(t = 0) = \boldsymbol{\epsilon}^{i,init}$  in einer Finite-Elemente-Berechnung für

die meisten Anwendungen nicht der Regelfall ist. Deshalb wird das gewählte Vorgehen dabei kurz erläutert. In einem ersten Lastschritt der FE-Berechnung würden ‚hart‘ vorgegebene Zustände der irreversible Größen  $\boldsymbol{\varepsilon}^i$  und  $\vec{P}^i$  zu sehr hohen Spannungen und elektrischen Felder bei deren Auswertung an den GAUSS-Punkten führen. Dies ist der Fall, da die Gesamtverzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}$  und die dielektrischen Verschiebungen  $\vec{D}$  sich noch in ihren initialen Null-Zuständen befinden und somit die irreversiblen Größen in den Konstitutivgleichungen nicht ‚kompensieren‘ können, vgl. Gl. (7.3). Die resultierenden hohen Spannungen und elektrischen Felder lassen sich dann innerhalb der globalen NEWTON-Iteration nicht mehr ins elektro-mechanische Gleichgewicht bringen. Um dieses Problem zu Beginn der Berechnung zu verhindern, wird zusätzlich ein eingepprägter Polarisationszustand  $\vec{P}^{impr} = \vec{P}^{i,init}$  und ein eingepprägter Verzerrungszustand  $\boldsymbol{\varepsilon}^{impr} = \boldsymbol{\varepsilon}^{i,init}$  mit in den konstitutiven Gleichungen

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \mathbb{C}^D : (\boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon}^{impr} - \boldsymbol{\varepsilon}^i) - \mathbb{h} \cdot (\vec{D} + \vec{P}^{impr} - \vec{P}^i) \\ \text{und} \quad \vec{E} &= -\mathbb{h} : (\boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon}^{impr} - \boldsymbol{\varepsilon}^i) + \boldsymbol{\beta}^e \cdot (\vec{D} + \vec{P}^{impr} - \vec{P}^i) \end{aligned} \quad (7.3)$$

des in Kap. 5 eingeführten Materialmodells berücksichtigt. Diese eingepprägten Komponenten kompensieren somit die von null verschiedenen Initialzustände der irreversiblen Größen in (7.3) und werden dann über die gesamte Berechnung hinweg konstant gehalten. Die physikalisch korrekten Zustände der dielektrischen Verschiebung und der Verzerrungen können dann über die Gleichungen

$$\vec{D}^{phy} = \vec{P}^{impr} + \Delta\vec{D} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{phy} = \boldsymbol{\varepsilon}^{impr} + \Delta\boldsymbol{\varepsilon} \quad (7.4)$$

berechnet werden. Wobei die Änderungen der Zustände gegenüber den Anfangszuständen hier direkt durch die absolut berechneten Werte erfasst werden, d. h.  $\Delta\vec{D} = \vec{D}$  und  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}$ . Die vorgegebenen irreversiblen Anfangszustände  $\vec{P}^{i,init}$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}^{i,init}$  werden durch eine separate Berechnungen am Materialpunktmodell mit einem vordefinierten externen elektrischen Feldvektor mit  $\|\vec{E}\| = 2.5 \text{ kV/mm}$  und einer Ausrichtung entsprechend dem Schnittwinkel  $\theta$  bestimmt.

In diesem Beispiel muss den elektrischen Randbedingungen an der Ober- und Unterseite eine besondere Aufmerksamkeit geschenkt werden, insbesondere in

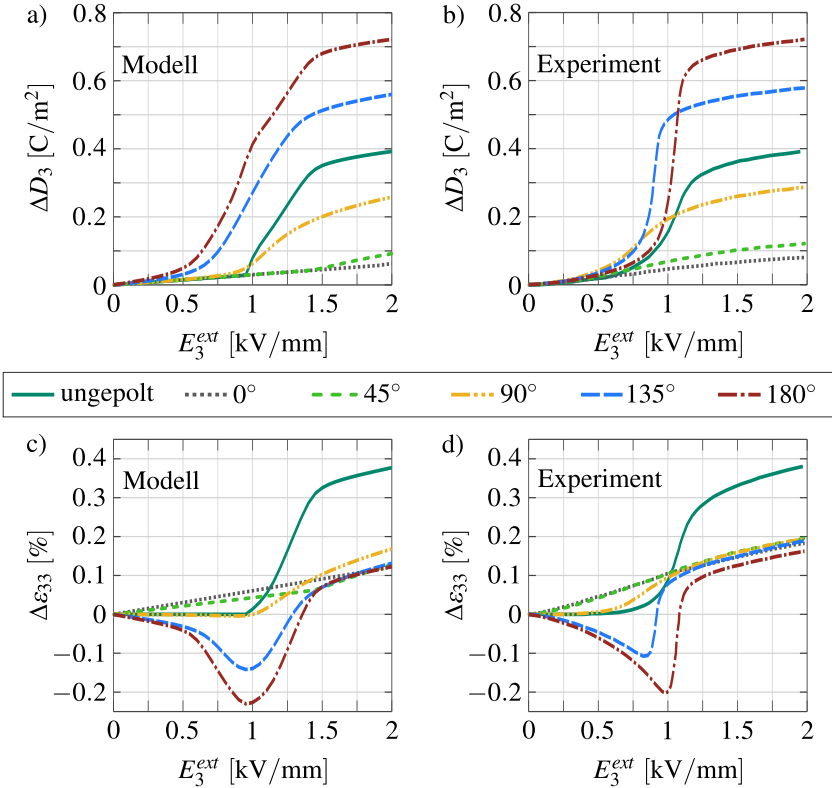
Fällen mit auftretenden anfänglichen Polarisationskomponenten in  $x_2$ -Richtung, vgl. Abb. 7.7. Aufgrund der eingepprägten Polarisationszuständen in den Proben müssen zur Erfüllung des GAUSS'schen Gesetzes an der Ober- und Unterseite der Probe Oberflächenladungen vorhanden sein, um die Polarisation des Materials zu kompensieren. Im Experiment stellt sich die Frage, was mit den Oberflächenladungen passiert, wenn die Polarisationsvektoren im Material in  $x_3$ -Richtung rotieren und somit das Ladungsgleichgewicht gestört wird. Das Verbleiben der Ladungen an Ort und Stelle würde unweigerlich zu einer Erzeugung von hohen elektrischen Depolarisationsfeldern in  $x_2$ -Richtung der Probe führen, um die Ladungen an der Ober- und Unterseite der Probe zu kompensieren. Dieses Feld hätte dann eine starke stabilisierende Wirkung auf den Polarisationszustand, sodass die Rotation deutlich langsamer vonstattengeht. Die zweite Möglichkeit ist, dass die Ladungen in Richtung der Elektroden an den Stirnflächen abfließen. Trotz verschwindend geringer Leitfähigkeit der umgebenden Flüssigkeit der Probe im Experiment kann dieses Szenario nicht ausgeschlossen werden. Ein vollständiges Abfließen der Ladungen würde zu einem verschwindenden elektrischen Feld in  $x_2$ -Richtung führen. Von STARK et al. [27] werden Simulationen mit Randbedingungen jeweils entsprechend der zwei beschriebenen Szenarien an einem Materialpunktmodell durchgeführt. Der Vergleich der erzielten Ergebnisse mit den Experimenten von ZHOU et al. [229] weisen darauf hin, dass in der Realität eine Kombination beider Szenarien auftritt.

Für die Untersuchungen an einem dreidimensionalen FE-Modell wird durch das in dieser Arbeit gewählte Vorgehen bei der Einarbeitung der Initialzustände in Gl. (7.3) indirekt eine konstant gehaltene elektrische Ladung an der Ober- und Unterseite des Modells berücksichtigt. Durch die innerhalb der Simulation konstant gehaltene Komponente in  $x_2$ -Richtung des Vektors der eingepprägten Polarisation  $\vec{P}^{impr}$  ändert sich auch die entsprechende Komponente der physikalischen dielektrischen Verschiebung in (7.4) nicht während des Umpolungsprozesses. Für die technische Vorgabe der Randbedingungen im FE-Modell bedeutet dies im Umkehrschluss, dass die Ober- und Unterseite der Probe als ladungsfrei angenommen werden können, d. h.  $\vec{n} \cdot \vec{D} = 0$ .

Um die Simulationsergebnisse möglichst repräsentativ mit denen der Experimente von ZHOU et al. [229] vergleichen zu können, erfolgt die Auswertung der berechneten makroskopischen Felder in einer an das Experiment angelehnten Art und Weise. So werden die gemittelten Änderungen des Verzerrungszustandes der Proben durch die Differenz der Verschiebungen der Elementknoten auf dem Rand des Bereiches der Dehnungsmessstreifen ausgewertet, vgl. Abb. 7.7. Die in den Ergebnissen angegebenen Werte entsprechen dem Mittelwert der ausgewerteten Dehnungen auf der Oberseite und einer Seitenfläche. Die dielektrischen Verschiebungen werden durch Integration der Oberflächenladungen an den Knoten der kontaktierten Elektrode ausgewertet, während das elektrische Feld direkt durch die vorgeschriebene Potentialdifferenz gegeben ist. Dieser Weg der Auswertungen ‚im integralen Sinne‘ ist aufgrund der auftretenden Inhomogenität in den Verzerrungs- und Polarisationsverteilungen in der Probe insbesondere für den Fall  $\theta = 90^\circ$  notwendig, siehe hierzu auch STARK et al. [27].

Im Folgenden werden die Berechnungsergebnisse eines Polarisationsrotationsprozesses für Proben mit den anfänglichen Polungswinkeln  $\theta = \{0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ, 180^\circ\}$  vorgestellt. Des Weiteren wird auch eine Simulation mit einer initial ungespolten Probe durchgeführt. In Abb. 7.8 sind die Ergebnisse der numerischen Polarisationsrotationstests (links) mit den experimentellen Ergebnissen (rechts) von ZHOU et al. [229] verglichen. In den Diagrammen a) und b) sind die Änderungen in der  $x_3$ -Komponente der dielektrischen Verschiebung über dem extern angelegten elektrischen Feld dargestellt. Beim Vergleich der Modellantwort mit dem realen Materialverhalten fällt die gute Übereinstimmung der Endzustände bei  $E_3^{ext} = 2 \text{ kV/mm}$  ins Auge. Während des Rotationsprozesses werden aber auch gewisse Abweichungen in den aufgezeichneten Pfaden sichtbar. Insbesondere für große anfängliche Polarisationswinkel  $\theta$  werden die Umklappvorgänge in der Simulation schon bei deutlich geringeren elektrischen Feldern initiiert. Offensichtlich ist das im Materialmodell berücksichtigte kinematische Verfestigungsverhalten für diesen bestimmten Fall stärker ausgeprägt als im realen Materialverhalten. Das führt letztlich dazu, dass vom Modell der Widerstand gegen  $180^\circ$ -Umklappen (vgl. Kap. 5) unterschätzt wird. Für einen Vergleich der Ergebnisse für  $\theta = 90^\circ$  ergibt sich wiederum ein umgekehrtes Bild. Hierbei

setzt das Domänenumklappen im simulierten Pfad deutlich früher ein als in dem der experimentellen Daten, wodurch sich eine Überschätzung des Widerstands gegenüber 90°-Domänenumklappens im Modell bemerkbar macht.



**Abbildung 7.8:** Vergleich der numerischen Ergebnisse (links) mit denen der Experimente von ZHOU et al. [229] (rechts) für den Polarisations-Rotationstest für unterschiedliche initiale Polungswinkel  $\theta$ . a), b): Änderungen in der dielektrischen Verschiebungskomponente  $\Delta D_3$  in Abhängigkeit des angelegten externen elektrischen Feldes in  $x_3$ -Richtung. c), d): Änderungen in der Verzerrungskomponente  $\Delta \epsilon_{33}$  in Abhängigkeit des angelegten externen elektrischen Feldes in  $x_3$ -Richtung.



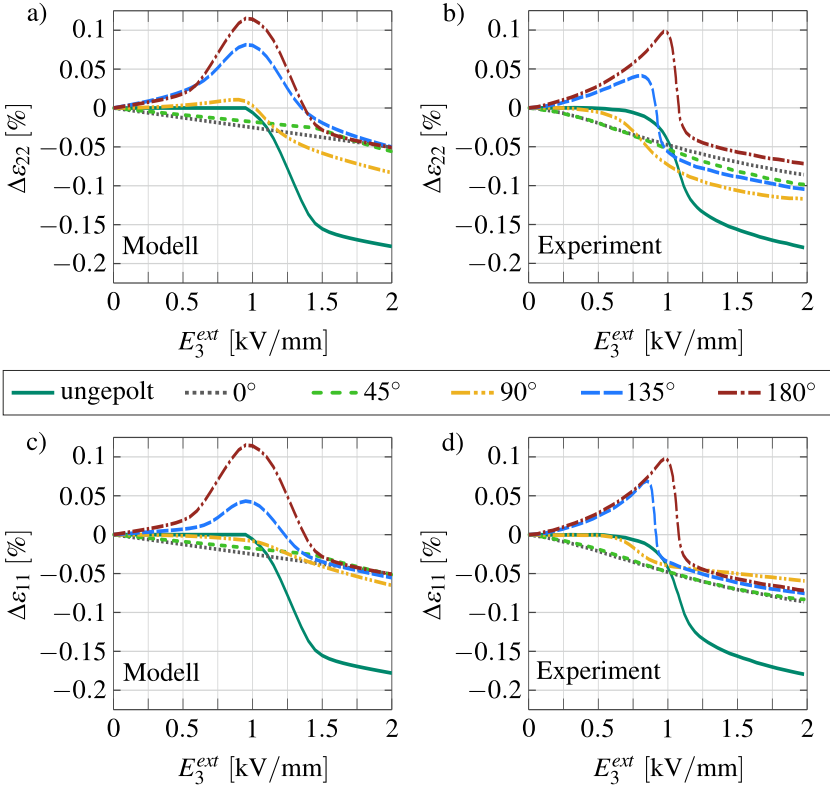
Der Vergleich der Änderungen der axialen Dehnungskomponente  $\Delta\epsilon_{33}$  während des Rotationsprozesses in Abb. 7.8 c) und d) zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten, wenngleich die Dehnungszustände bei erreichter Maximallast geringfügig abweichen. Für die größeren initialen Polungswinkel  $\theta = 135^\circ$  und  $\theta = 180^\circ$  werden die maximalen negativen Dehnungen in einer Zwischenkonfiguration der Probe, in welcher die Domänen in vertikaler  $x_2$ -Richtung ausgerichtet sind, vom Modell etwas überschätzt. In Übereinstimmung mit den Beobachtungen im Zusammenhang mit der Änderungen der dielektrischen Verschiebung findet für den Fall  $\theta = 90^\circ$  der Anstieg der Dehnung in  $x_3$ -Richtung im Experiment bei deutlich geringeren Feldintensitäten statt.

In Abb. 7.9 a) und b) sind die Änderungen in der zweiten Dehnungskomponente innerhalb der Rotationsebene  $\Delta\epsilon_{22}$  illustriert. Hierbei wird ersichtlich, dass die Querkontraktion der Probe infolge der Umklappprozesse im Material im Endzustand ( $E_3^{ext} = 2$  kV/mm) vom Modell in allen Fällen unterschätzt wird. Für den anfänglichen Polungswinkel  $\theta = 90^\circ$  wird in Übereinstimmung mit der experimentellen Beobachtung die stärkste Kontraktion beobachtet. In der gleichen Kurve wird zudem in den simulierten Ergebnissen eine geringfügige zwischenzeitliche Aufweitung der Probe in  $x_2$ -Richtung ersichtlich. Dieser Effekt ist im realen Materialverhalten nicht erkennbar.

Die Ergebnisse der Dehnungskomponente senkrecht zur Rotationsebene  $\Delta\epsilon_{11}$  sind in Abb. 7.9 c) und d) dargestellt. In den meisten Fällen stimmen die experimentell gemessenen Ergebnisse zufriedenstellend mit dem Modell überein. Auffällig sind die Abweichungen für den Winkel  $\theta = 135^\circ$ . Die anfängliche Steigung der Dehnungsänderungen für vergleichsweise niedrige elektrische Feldstärken weicht im Vergleich ebenso geringfügig ab wie die Maximalwerte der zwischenzeitlichen Ausdehnung der Probe. Ähnlich wie bei der Dehnungskomponente  $\Delta\epsilon_{22}$  gibt es kleinere Abweichungen in den endgültigen Dehnungszuständen beim maximalen elektrischen Feld.

Eine Feinabstimmung der Modellparameter auf das in diesem Beispiel diskutierte multiaxiale Materialverhalten wäre sicherlich denkbar, ist aber im Rahmen dieser Untersuchung nicht das primäre Ziel. Die Erkenntnis, das experimentell

aufgezeichnete multiaxiale Verhalten des Materials auf der Basis eines auf ausschließlich uniaxialen Versuchen abgestimmten Materialmodells zufriedenstellend abbilden zu können, ist an dieser Stelle entscheidend.



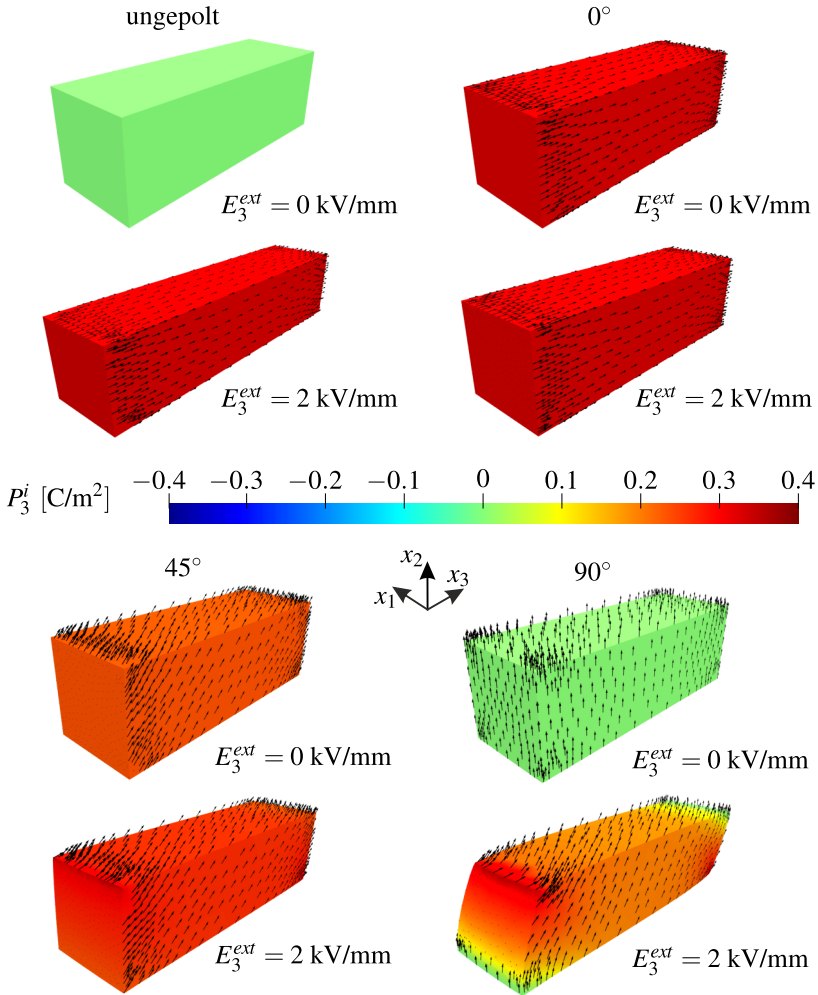
**Abbildung 7.9:** Vergleich der numerischen Ergebnisse (links) mit denen der Experimente von ZHOU et al. [229] (rechts) für den Polarisations-Rotationstest für unterschiedliche initiale Polungswinkel  $\theta$ . a), b): Änderungen in der Verzerrungskomponente  $\Delta\varepsilon_{22}$  transversal zum extern angelegten elektrischen Feld in  $x_3$ -Richtung (in der Rotationsebene). c), d): Änderungen in der Verzerrungskomponente  $\Delta\varepsilon_{11}$  transversal zum extern angelegten elektrischen Feld in  $x_3$ -Richtung (senkrecht zur Rotationsebene).

Als nächstes stehen die örtlich aufgelösten Änderungen der Polarisationsorientierungen sowie deren Magnituden innerhalb der virtuellen PZT-Probe infolge des in diesem Beispiel betrachteten Umpolungsprozesses im Fokus. Ferner werden auch die verursachten Deformationen der Probe infolge der initiierten Nichtlinearitäten im Material betrachtet. Dazu sind in Abb. 7.10 und Abb. 7.11 die Konfigurationen der einzelnen Proben dieses Versuchs für den Anfangszustand ( $\vec{P}^i = \vec{P}^{i,init}$  und  $E_3^{ext} = 0$  kV/mm) und für den Endzustand bei maximalem elektrischen Feld mit  $E_3^{ext} = 2$  kV/mm dargestellt. Die Deformationen der Proben sind dabei überhöht mit einem Skalierungsfaktor von 75 abgebildet. Darüber hinaus stellen die Konturen die Intensität der makroskopischen irreversiblen Polarisationskomponente in der globalen  $x_3$ -Richtung dar, während die schwarzen Pfeile die Richtung der lokalen makroskopischen irreversiblen Polarisationsvektoren angeben. Im Folgenden werden die grundlegenden Charakteristika des Rotationsprozesses für die verschiedenen anfänglichen Polungswinkel kurz zusammengefasst:

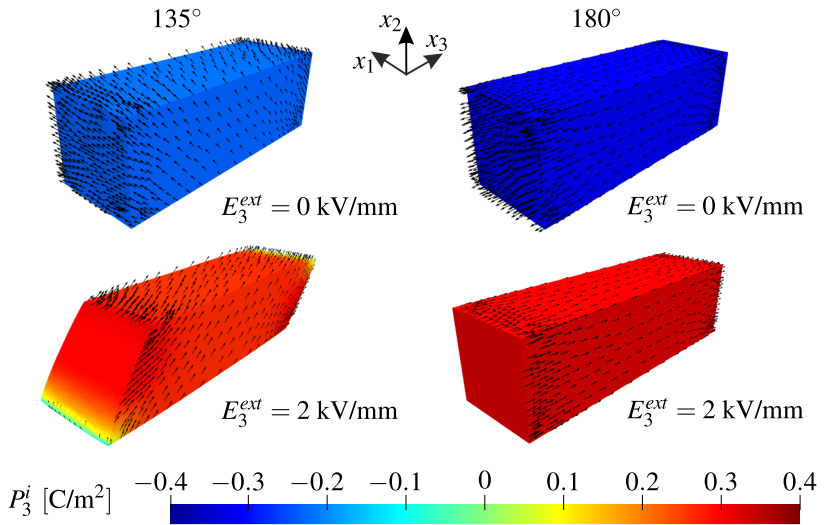
**ungepolt:** Ausgehend von einem thermisch depolarisierten Zustand entwickelt sich die Polarisation gleichmäßig über die gesamte Probe in Richtung des wirkenden elektrischen Feldes und erreicht einen gesättigten Zustand. Infolge dessen kommt es in der Probe zu einer homogenen Ausdehnung in  $x_3$ -Richtung und einer Kontraktion in den Querrichtungen. Für den betrachteten Fall kommt es zu keiner Rotation der Polarisationsrichtung.

$\theta = 0^\circ$ : Aufgrund der vollständigen Ausrichtung der makroskopischen Polarisationsvektoren in Wirkungsrichtung des äußeren elektrischen Feldes ist nur eine geringe Erhöhung der axialen Polarisationskomponente um einen linearen dielektrischen Beitrag zu beobachten. Zusätzlich nimmt die axiale Dehnung durch den indirekten piezoelektrischen Effekt geringfügig zu. Eine Polarisationsrotation findet nicht statt.

$\theta = 45^\circ$ : Eine mäßige Drehung der Polarisationsvektoren ist zu beobachten, wenngleich die elektrische Feldstärke offensichtlich nicht ausreicht, um eine vollständige Rotation in Feldrichtung zu bewirken. Die Verformung der Probe wird in diesem Fall nicht wesentlich beeinflusst. Bemerkenswert ist die stärkere Rotation der Polarisation an der vorderen Oberkante und der hinteren Unterkante der Probe



**Abbildung 7.10:** Veränderungen in der Polarisationsverteilung und verursachte Verformungen der Proben infolge des Rotationsversuchs für die verschiedenen Polarisationswinkel. Die Konturen repräsentieren die irreversible Polarisationsintensitäten in Richtung des angelegten elektrischen Feldes. Die schwarzen Pfeile geben die Richtung des lokalen irreversible Polarisationsvektors an. Die Verformungen sind überhöht dargestellt mit einem Skalierungsfaktor von 75.



**Abbildung 7.11:** Veränderungen in der Polarisationsverteilung und verursachte Verformungen der Probe infolge des Rotationsversuchs für die verschiedenen Polarisationswinkel. Die Konturen repräsentieren die irreversiblen Polarisationsintensitäten in Richtung des angelegten elektrischen Feldes. Die schwarzen Pfeile geben die Richtung des lokalen irreversiblen Polarisationsvektors an. Die Verformungen sind überhöht dargestellt mit einem Skalierungsfaktor von 75.

im Vergleich zu den beiden anderen Kanten senkrecht zur  $x_3$ - $x_2$ -Rotationsebene. Dies ist auf die stark inhomogene elektrische Feldverteilung in der Probe zurückzuführen, welche durch die geneigte Polarisationsorientierung verursacht wird.

$\theta = 90^\circ$ : Im Zustand bei maximaler elektrischer Feldstärke  $E_3^{ext}$  ergibt sich eine stark inhomogene Polarisationsverteilung in der Probe. Auch in diesem Fall befinden sich die am stärksten gedrehten Polarisationsvektoren an der vorderen Oberkante und der hinteren Unterkante der Probe, während sie an den beiden anderen Kanten keine Drehung erfahren. In Übereinstimmung mit dieser Beobachtung wird eine starke Verformung der Probe durch die Inhomogenität der Orientierung der Polarisationsvektoren verursacht.

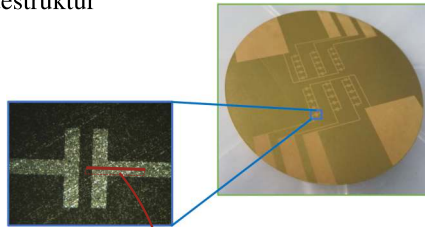
$\theta = 135^\circ$ : Die Modellantwort zeigt eine ähnliche Charakteristik wie für den Fall  $\theta = 90^\circ$ . Allerdings ist eine stärkere Ausrichtung der irreversiblen Polarisationsvektoren in Richtung des äußeren elektrischen Feldes zu beobachten. Außerdem kann ein homogener Polarisationszustand über ein größeres Volumen der Proben beobachtet werden. Die sich einstellenden Deformationen sind sogar noch ausgeprägter als bei dem initialen Polarisationswinkel  $\theta = 90^\circ$ . Aufgrund der bevorzugten diagonalen Ausrichtung der Polarisationsvektoren, ausgehend von der vorderen Unterkante bis hin zur hinteren Oberkante, stellt sich ein parallelogrammartiges Verformungsmuster ein.

$\theta = 180^\circ$ : Ausgehend von einem umgekehrt gepolten Zustand wird über eine depolarisierte Zwischenkonfiguration ein vollständig in Feldrichtung orientierter irreversibler Polarisationszustand unter Maximallast erreicht. Der für diesen Fall erzeugte Verformungszustand ist der gleiche wie für  $\theta = 0^\circ$ , vgl. auch die Diskussion der Modellantwort in Abschn. 7.1.

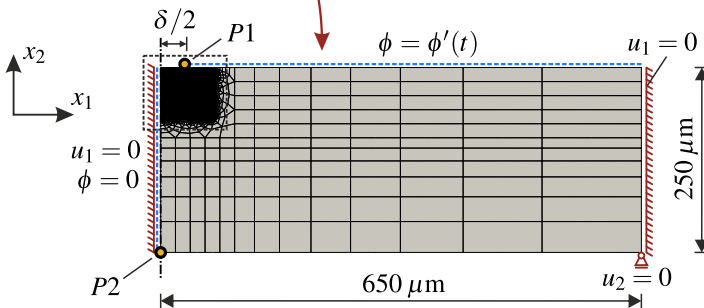
### 7.3 PZT-Wafer

Nachdem in den Abschnitten 7.1 und 7.2 gezeigt wurde, dass das Modell in der Lage ist, sowohl das uniaxiale als auch das multiaxiale Materialverhalten von Ferroelektrika abzubilden, wird nun ein praktischeres Beispiel betrachtet, das auch im Hinblick auf technische Anwendungen relevant ist. Von SEYFERT et al. [151] werden PZT-Wafer, bestehend aus PIC 151, mit unterschiedlichen einseitig aufgedruckten Elektrodenanordnungen untersucht. Solche IDT-Strukturen (IDT: engl. *'interdigitated transducer'*) werden zum Beispiel bei Mikropumpen und -ventilen eingesetzt, vgl. [230]. In diesem Beispiel wird der Fokus auf eine parallele Elektrodenanordnung gerichtet, vgl. Abb. 7.12. Bei einem solchen Elektrodendesign kommt es zu einer sehr inhomogenen Verteilung des elektrischen Feldes mit hohen Feldstärken vor allem an den Rändern der Elektroden, vgl. auch [231]. Dies wirkt sich auch auf die Mikrostruktur des Materials in Form von Domänenumklappprozesse aus und führt zu inhomogenen Polarisations- und Dehnungsverteilungen im PZT-Wafer.

Parallele Elektrodenstruktur  
auf PZT-Wafer:



2D FE-Modell:



**Abbildung 7.12:** Oben: Der von SEYFERT et al. [151] untersuchte PZT-Wafer mit einer Detailansicht der parallelen Elektrodenstruktur. Unten: 2D Finite-Elemente-Modell eines symmetrisierten Querschnitts des PZT-Wafers mit den vorgegebenen Randbedingungen. Die Simulationsergebnisse an den Punkten  $P1$  und  $P2$ , sowie im Bereich des gestrichelten Kastens werden genauer betrachtet.

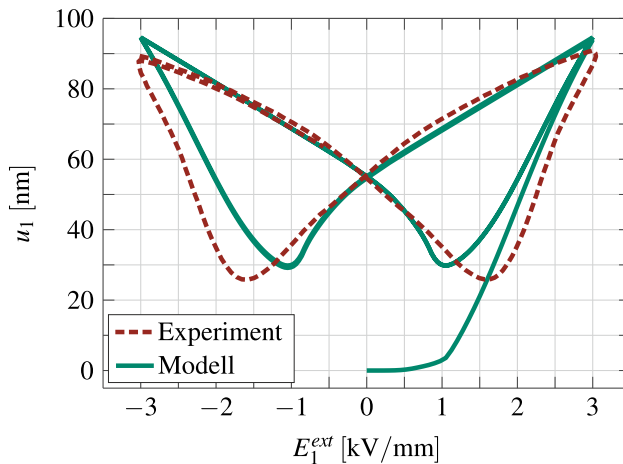
Im Folgenden wird ein vereinfachtes zweidimensionales FE-Modell des Querschnitts eines solchen PZT-Wafers mit einseitig bedrucktem Elektrodenlayout numerisch untersucht. Dabei liegt der Fokus zum einen auf dem Verformungsverhalten und zum anderen auf der Entwicklung der makroskopischen irreversiblen Polarisation unter der Einwirkung eines zyklischen äußeren elektrischen Feldes. Unter Ausnutzung der Symmetriebedingungen in diesem Beispiel ergibt sich das in Abb. 7.12 dargestellte 2D-FE-Modell für den betrachteten Querschnitt unterhalb einer parallelen Elektrodenanordnung. Die Waferdicke ist mit  $250 \mu\text{m}$  gegeben (L. Seyfert, N. Schwesinger, TU München, persönliche Kommunikation, 12. Oktober 2021) und die Modellbreite wird zu  $650 \mu\text{m}$  angenommen. Der Abstand zwischen den beiden parallelen Elektroden  $\delta$  wird in diesem Bei-

spiel als Designparameter betrachtet, da dieser einen großen Einfluss auf das Verhalten des Wafers hat. Der Querschnitt wird unter Annahme eines ebenen Verzerrungszustandes mit zweidimensionalen quadratischen Elementen aus Abschn. 6.3 diskretisiert. Die Vernetzung des Modells wird so gewählt, dass im Bereich mit den größten erwartbaren Gradienten in den zu approximierenden Feldgrößen die feinste Diskretisierung vorherrscht. Als Symmetrierandbedingung auf der linken Seite des Modells werden die Verschiebungen in  $x_1$ -Richtung festgehalten, sowie das elektrische Potential zu null gesetzt. Um den Einfluss des umgebenden Materials auf das Systemverhalten zu berücksichtigen, werden am rechten Ende des Modells ebenfalls die Verschiebungen in  $x_1$ -Richtung blockiert. Des Weiteren wird am rechten unteren Knoten die vertikale Verschiebung festgehalten. Mit Ausnahme des Elektodenzwischenraums mit der Breite  $\delta$  wird am oberen Rand ein elektrisches Potential mit variierender Amplitude vorgegeben. Die Steifigkeit der Elektroden wird bei dieser Simulation vernachlässigt. Für die numerischen Simulationen in diesem Beispiel werden die gleichen Materialparameter wie in den Abschnitten 7.1 und 7.2 verwendet.

In der ersten Untersuchung wird eine Anordnung mit einem Elektrodenabstand von  $\delta = 65 \mu\text{m}$  betrachtet. Bei den Experimenten von SEYFERT et al. [151] wird eine zyklische Belastung mit einem maximalen nominalen externen elektrischen Feld zwischen den Elektroden von  $E_1^{ext} = \pm 3 \text{ kV/mm}$  angelegt. Für die Simulation ergibt sich dann für das Halbmodell der Dreiecks-Belastungspfad des elektrischen Potentials an der oberen Elektrode mit  $\phi'(t) = \{0, -97.5, 0, 97.5, 0, -97.5, 0, 97.5, 0, -97.5\}$  V, unterteilt in insgesamt 360 äquidistante Belastungs- und 40 äquidistante Entlastungsschritte. Von SEYFERT et al. [151] werden die 'in-plane'-Verschiebungen in globaler  $x_1$ -Richtung an den Kanten der Elektroden während des gesamten zyklischen elektrischen Belastungsvorgangs mithilfe eines stroboskopischen Bewegungsmesssystems beobachtet, vgl. [232, 233]. In Abb. 7.13 wird die experimentell gemessene Schmetterlingshysterese für die horizontale Auslenkung  $u_1$  mit der in der FE-Berechnung ermittelten Hysterese am Punkt  $P1$  (vgl. Abb. 7.12) verglichen. Dabei ist zu beachten, dass zur besseren Vergleichbarkeit der Ergebnisse die experimentelle Hysterese in den Ursprung der numerischen Hysterese verschoben wurde. Der Pfad des initialen



Polungsprozesses ist für das reale System nicht bekannt. Für diese betrachtete Verschiebungskomponente lässt sich eine zufriedenstellende Übereinstimmung erzielen, wenngleich die minimalen und maximalen Auslenkungen der stationären Hysteresen leicht voneinander abweichen. Insbesondere im linearen Bereich bei niedrigen elektrischen Feldstärken, welcher für technische Anwendungen besonders relevant ist, ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung. Eine etwas breitere Hysterese lässt sich im Fall der experimentellen Daten erkennen.



**Abbildung 7.13:** Vergleich der von SEYFERT et al. [151] experimentell aufgezeichneten Schmetterlingshysterese der horizontalen Verschiebungen in globaler  $x_1$ -Richtung für  $\delta = 65 \mu\text{m}$  mit den Simulationsergebnissen am Punkt  $P1$  (vgl. Abb. 7.12) im Finite-Elemente-Modell. Zur besseren Vergleichbarkeit wurde der Nulldurchgang der experimentellen Hysterese in den der numerischen Kurve verschoben.

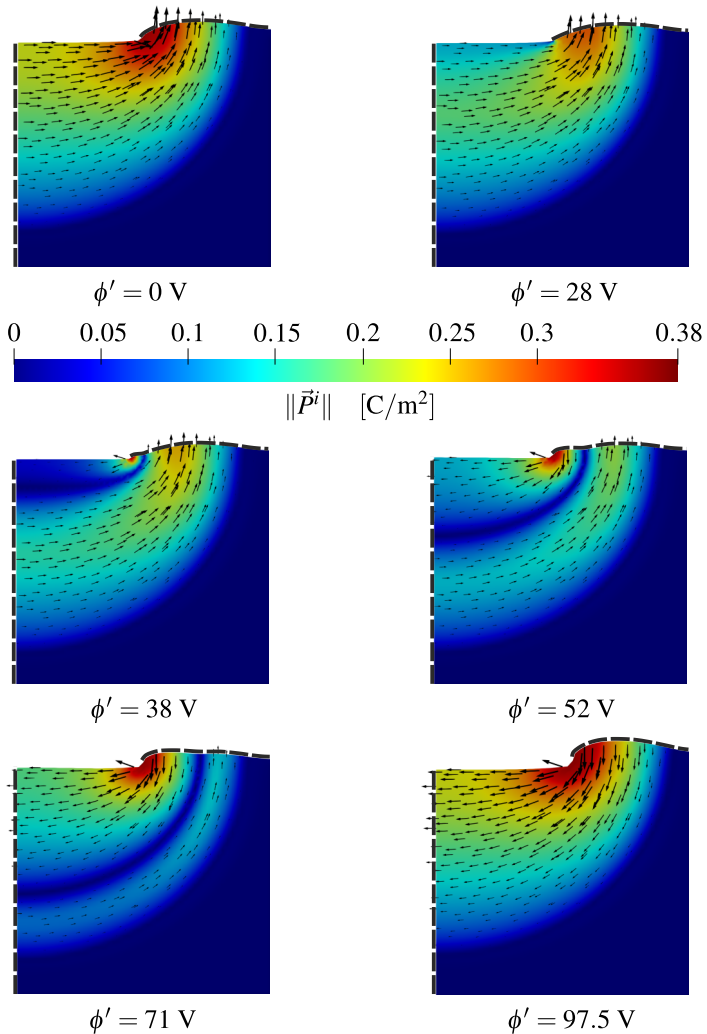
Darüber hinaus sollen im Weiteren die materiellen Nichtlinearitäten während der zyklischen elektrischen Belastung genauer betrachtet werden. Dazu wird eine sukzessive Beobachtung der Änderungen der irreversiblen Polarisationszustände im Bereich der Elektrodenkante (gestrichelter Kasten, Abb. 7.12) während eines umgekehrten elektrischen Belastungsprozesses für die Anordnung mit  $\delta = 65 \text{ mm}$  durchgeführt. In Abb. 7.14 ist ausgehend von einem Materialzustand, welcher einen initialen Polungs- ( $\phi' = -97.5 \text{ V}$ ,  $E_1^{ext} = 3 \text{ kV/mm}$ ) und einen anschließenden

Entlastungsvorgang erfahren hat, der fortlaufende Prozess während der umgekehrten Belastung bis zu einem elektrischen Potential an der oberen Elektrode von  $\phi' = 97.5 \text{ V}$  dargestellt. Dabei repräsentieren die Konturen die Norm des lokalen irreversiblen Polarisationsvektors und damit die Intensität der wirkenden Polarisation im Material an der jeweiligen Stelle im Modell. Durch die schwarzen Pfeile werden die Orientierungen der irreversiblen Polarisationsvektoren angezeigt. In dieser Abbildung sind die Verformungen überhöht mit einem Skalierungsfaktor von 100 dargestellt. Im Folgenden wird der zu beobachtende Prozess während des Umpolungsvorganges kurz zusammengefasst:

**$\phi' = 0 \text{ V}$**  ( $E_1^{ext} = 0 \text{ kV/mm}$ ): Beim initialen Polungsvorgang ist die Evolution der irreversiblen Polarisation aufgrund der hohen elektrischen Feldstärken um die Elektrodenkante herum am weitesten in den gesättigten Zustand fortgeschritten. Die bevorzugte Orientierung der Polarisation ergibt sich entlang der Feldlinien zwischen den beiden Elektroden. Dies führt dazu, dass die Vektoren entlang des linken Randes in horizontaler Richtung ausgerichtet sind, während sie unterhalb der oberen kontaktierten Elektrode in vertikaler Richtung ausgerichtet sind. Aufgrund dieser Konfiguration erfährt das Material im linken Bereich eine Ausdehnung in horizontaler Richtung und eine Kontraktion in vertikaler Richtung. Im Gegensatz dazu dehnt sich das Material im Bereich unterhalb der oberen Elektrode in vertikaler Richtung aus und verkürzt sich gleichzeitig in horizontaler Richtung.

**$\phi' = 28 \text{ V}$**  ( $E_1^{ext} = -0.86 \text{ kV/mm}$ ): Durch die Erhöhung des positiven elektrischen Potentials an der oberen Elektrode wirkt ein elektrisches Feld in die entgegengesetzte Richtung der initialen Polarisationsausrichtung. Dies führt im Allgemeinen zu einer Verringerung der Polarisation. Am stärksten macht sich dies linksseitig der Elektrodenkante bemerkbar. Damit einher geht eine Reduzierung der Verformungen der Struktur. Bereiche im Material, welche weit von der Elektrodenkante entfernt liegen, werden zunächst nicht beeinflusst.

**$\phi' = 38 \text{ V}$**  ( $E_1^{ext} = -1.17 \text{ kV/mm}$ ): Mit einer weiteren Erhöhung des elektrischen Potentials wird der Bereich linksseitig der Elektrodenkante weitgehend depolarisiert, während sich unmittelbar an der Kante eine entgegengesetzt ausgerichtete



**Abbildung 7.14:** Darstellung der Norm der irreversiblen Polarisation während eines Umpolungsprozesses für einen Elektrodenabstand  $\delta = 65 \mu\text{m}$ . Die schwarzen Pfeile repräsentieren die Ausrichtung der Polarisationsvektoren. Die Verformungen sind überhöht mit einem Skalierungsfaktor 100 dargestellt.

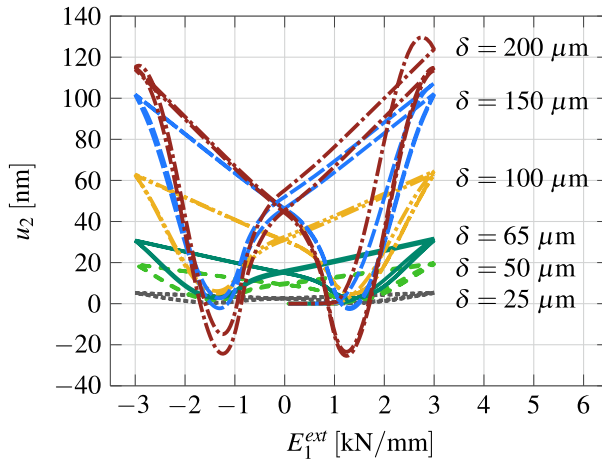
Polarisation auszubilden beginnt. Unterhalb der oberen Elektrode nimmt der Polarisationszustand weiter ab. Die anderen Bereiche scheinen weiterhin nur geringfügig betroffen zu sein. Erwähnenswert ist, dass in diesem Zustand die horizontalen Dehnungen im betrachteten Bereich nahezu minimiert sind.

$\phi' = 52 \text{ V}$  ( $E_1^{ext} = -1.6 \text{ kV/mm}$ ): Ausgehend von der Kante der Elektrode wird zunächst im linken oberen Bereich des Materials eine entgegengesetzt wirkende Polarisation aufgebaut. In einem großen Bereich, welcher von der unteren Region des linken Randes ausgehend sich kurvenförmig bis zur rechtsseitigen Region der Kante der oberen Elektrode erstreckt, verbleiben die Polarisationsvektoren noch in ihrer ursprünglichen Ausrichtung. Dazwischen bildet sich ein depolarisierter Grenzbereich aus, welcher vom oberen Rand der Struktur aus durch das Material wandert. Dessen Einfluss auf das Verformungsmuster der Oberfläche des Wafers ist deutlich erkennbar.

$\phi' = 71 \text{ V}$  ( $E_1^{ext} = -2.18 \text{ kV/mm}$ ): Der depolarisierte Grenzbereich bewegt sich weiter wellenartig durch den polarisierten Bereich des PZT-Wafers. In der Region links oben erreicht der Umpolungsprozess bereits allmählich den gesättigten Zustand, während weit entfernte Regionen des betrachteten Gebietes noch keinerlei Änderung des Polarisationszustandes erfahren haben.

$\phi' = 97.5 \text{ V}$  ( $E_1^{ext} = -3 \text{ kV/mm}$ ): Bei Erreichen des maximal angelegten elektrischen Potentials durchlief der depolarisierte Grenzbereich die gesamte polarisierte Region in der Struktur und der initiale Polarisationszustand wurde überall umgekehrt. In diesem maximal belasteten Zustand sind die Verformungen der Struktur maximiert. Sie entsprechen mit Ausnahme eines zusätzlichen linearen piezoelektrischen Beitrags, denen eines Zustandes bei  $\phi' = 0 \text{ V}$ .

Nachdem eingehende Erkenntnisse über das lokale Verformungsverhalten im Bereich zwischen den Elektroden gewonnen wurden, ist im Weiteren das globale Verformungsverhalten des Wafers Gegenstand der Diskussion. Dazu werden verschiedene Wafer mit unterschiedlichen Elektrodenabständen untersucht. Die Modellabmessungen bleiben dabei konstant. Um ein repräsentatives und vergleichbares Maß für die Verformung des Wafers zu erhalten, soll im Folgenden

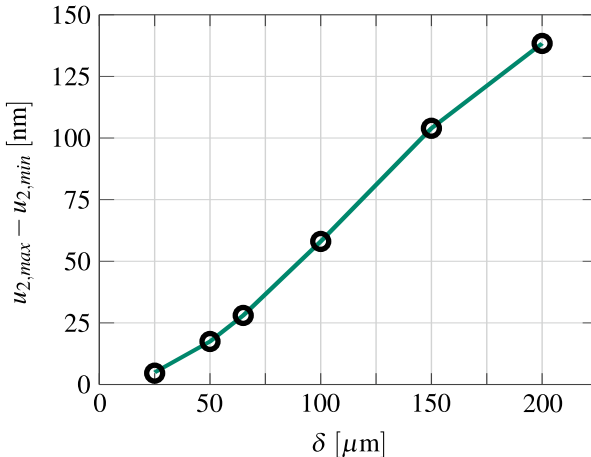


**Abbildung 7.15:** Vergleich der berechneten Schmetterlingshysteresen der vertikalen Verschiebungskomponente  $u_2$  am Punkt  $P2$  (vgl. Abb. 7.12) für verschiedene Elektrodenabstände  $\delta$ .

die vertikale Auslenkung  $u_2$  des Punktes  $P2$  (vgl. Abb. 7.12) am unteren Ende der Symmetrieachse des Modells betrachtet werden. Diese vertikale Auslenkung und der damit umgesetzte Hub repräsentiert das Aktuationspotential für mögliche technische Anwendungen des Wafersystems. In Abb. 7.15 sind die berechneten Schmetterlingshysteresen für sechs verschiedene Modellsysteme mit den Elektrodenabständen von  $\delta = 25 \mu\text{m}$  bis  $\delta = 200 \mu\text{m}$  dargestellt<sup>6</sup>. Es ist deutlich zu erkennen, dass mit größer werdendem Elektrodenabstand die maximale Auslenkung zunimmt. Diese positive Auslenkung wird durch die horizontale Ausrichtung der Polarisationsvektoren im oberen Bereich zwischen den Elektroden während des elektrischen Belastungsvorgangs verursacht. Diese Ausrichtung führt zu einer Ausdehnung in horizontaler Richtung der oberen Schichten der Struktur. Eine interessante Beobachtung ist, dass der anfängliche Polungspfad mit zunehmendem Abstand zwischen den Elektroden immer mehr von der stationären Hysterese abzuweichen scheint. Besonders auffällig ist dieser Effekt bei einem Abstand

<sup>6</sup> Die Variation des Elektrodenabstandes erfordert eine Anpassung der vorgegebenen Potentialamplitude, um die gleiche Amplitude des nominellen elektrischen Feldes zu erhalten.

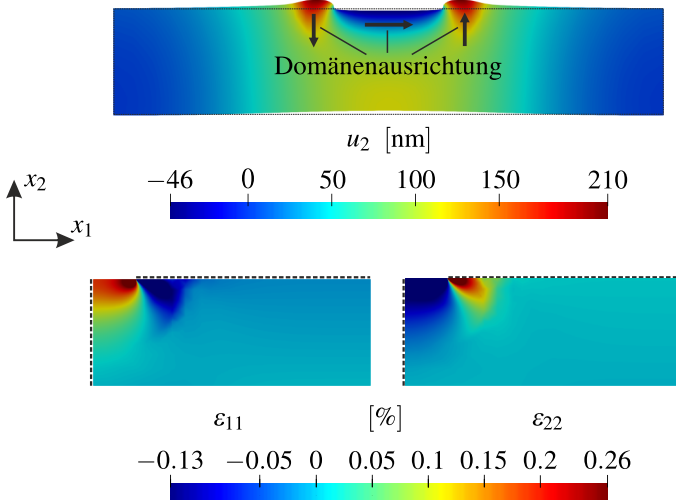
von  $\delta = 200 \mu\text{m}$ . Der Grund dafür ist, dass mit zunehmendem Elektrodenabstand der Bereich, in dem nach der Entlastung eine remanente Polarisation verbleibt, größer wird. Ein entlasteter Zustand nach dem initialen Polen weicht somit umso stärker vom thermisch depolarisierten Ausgangszustand ab je größer der Elektrodenabstand ist, vgl. hierzu auch Abb. 7.14:  $\phi' = 0 \text{ V}$ . In der gleichen Kurve in Abb. 7.15 fällt auch auf, dass ein Bereich mit negativen Verschiebungen durchlaufen wird, was einer zwischenzeitlichen Auslenkung nach unten während des Umpolungsprozesses entspricht. Diese vorübergehende negative Auslenkung tritt in Zuständen auf, in denen sich im oberen Teil der Struktur ein großer depolarisierter Bereich ausbildet und der horizontal gepolte – und somit gedehnte – Bereich im Material weit in die untere Hälfte des Wafers hineinreicht (vgl. z. B. die schematische Verteilung in Abb. 7.14:  $\phi' = 38 \text{ V}$ ). Solche Zustände treten nur bei großen Elektrodenabständen auf, wo ein großer Teil des Querschnitts von materiellen Nichtlinearitäten betroffen ist.



**Abbildung 7.16:** Abhängigkeit des Aktuationsvermögens der PZT-Wafer vom gewählten Elektrodenabstand  $\delta$ . Das Vermögen wird hierbei durch die Differenz zwischen dem Maximalwert der vertikalen Auslenkung  $u_{2,max}$  und dem entsprechenden Minimalwert  $u_{2,min}$  charakterisiert, welche für die stationären Hysteresen ermittelt wurden.

In Abb. 7.16 ist für eine Analyse des Aktuationsvermögens die Differenz zwischen der maximalen und der minimalen vertikalen Auslenkung am Punkt  $P2$  über die in diesem Beispiel betrachteten Elektrodenabstände aufgetragen. Einem Bereich mit nichtlinear ansteigenden Auslenkungen für kleine Abstände folgt in Abb. 7.16 ein linearer Zusammenhang zwischen den beiden betrachteten Freiheitsgraden. Dieser weitere Anstieg der Verformung kann durch das mit zunehmendem Elektrodenabstand größer werdende Volumen erklärt werden, das von Polungsvorgängen betroffen ist. Für den größten Abstand von  $\delta = 200 \mu\text{m}$  ist eine Abflachung der Kurve sichtbar. Dies kann jedoch auf den zunehmenden Einfluss der festgehaltenen Modellränder zurückgeführt werden. Für eine genauere Untersuchung dieser Effekte müsste die Modellabmessungen vergrößert werden, was aber an dieser Stelle nicht weiter untersucht wurde.

Um das global Verformungsverhalten der betrachteten Wafersysteme näher zu beleuchten, ist in Abb. 7.17 (oben) das resultierende Verformungsmuster eines projizierten vollständigen Modells für den Fall  $\delta = 200 \mu\text{m}$  im maximal belasteten Zustand ( $E_1^{ext} = 3 \text{ kV/mm}$ ) dargestellt. Die vertikale Ausrichtung der irreversiblen Polarisationsvektoren in den Regionen unterhalb der oberen Elektrode führt zu lokalen Hügeln an der Oberfläche des Wafers. Den stärksten Einfluss auf die globale Verformung hat jedoch, wie bereits erwähnt, die horizontale Ausrichtung der Polarisationsvektoren zwischen den Elektroden. Die entsprechende axiale Dehnung im oberen Bereich des Wafers führt zu einer Durchbiegung der gesamten Struktur nach oben. In Abb. 7.17 (unten) sind zudem die zugehörigen Verteilungen der beiden Normaldehnungskomponenten dargestellt, skaliert auf den Sättigungswert  $\epsilon^{sat}$  des Materials. Entsprechend der diskutierten Orientierung der makroskopischen Polarisation und damit der schematischen Domänenausrichtung im realen Material ergibt sich für die Verteilung der Komponente  $\epsilon_{11}$  eine Ausdehnung des Materials zwischen den Elektroden und eine Kontraktion unterhalb der Elektroden. Im Gegensatz dazu, zeigt sich für die Komponente  $\epsilon_{22}$  eine Kontraktion des Materials im Bereich zwischen den Elektroden und eine Ausdehnung unterhalb der Elektroden.



**Abbildung 7.17:** Oben: Deformationsmuster des projizierten Gesamtmodells für  $\delta = 200 \mu\text{m}$  bei einwirkendem externen elektrischen Feld  $E_1^{ext} = 3 \text{ kV/mm}$  skaliert um den Faktor 100, wobei die Konturen die Magnitude der vertikalen Verschiebungskomponente  $u_2$  angeben. Unten: Zugehörige Dehnungsverteilungen der Komponenten  $\epsilon_{11}$  und  $\epsilon_{22}$  am halben Modell, skaliert auf den Sättigungsdehnungswert  $\epsilon^{sat}$ .



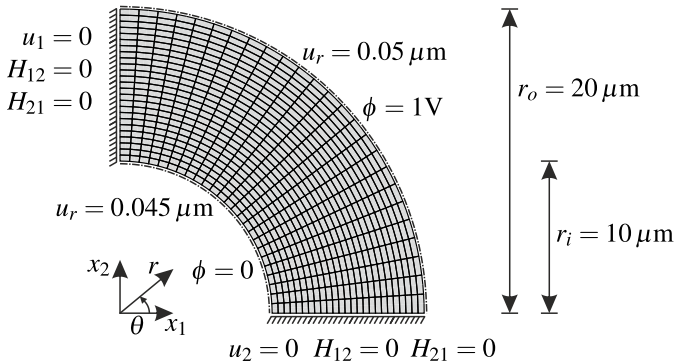
# **8 Nichtlineare Modellierung ferroelektrischer Materialien mit flexoelektrischen Eigenschaften**

Im vorangegangenen Kapitel wurde der Einfluss der Flexoelektrizität auf das nichtlineare Materialverhalten ferroelektrischer Materialien zunächst vernachlässigt. In diesem Kapitel steht nun genau dieser Einfluss im Fokus. Dabei werden neben der Flexoelektrizität weiterhin die Piezoelektrizität und zusätzlich die Effekte der Elastizität höherer Ordnung berücksichtigt. Im Mittelpunkt der behandelten numerischen Beispiele steht der Einfluss des flexoelektrischen Effekts auf die Domänenumklappprozesse, welcher mithilfe des in Kap. 5 vorgestellten nichtlinearen Materialmodells untersucht wird. Ein weiterer Schwerpunkt ist die Lösung elektro-mechanisch gekoppelter Randwertprobleme mit der in Abschn. 6.6 beschriebenen gemischten flexoelektrischen FE-Formulierung. Soweit möglich, werden die erhaltenen Ergebnisse mit experimentellen Daten oder analytischen Lösungen verglichen.

## **8.1 Kreisscheibe mit Loch**

Das erste Beispiel behandelt ein flexoelektrisches Randwertproblem, für das eine analytische Lösung existiert und das daher für einen Vergleich mit den Ergebnissen der in Abschn. 6.6 eingeführten gemischten FE-Formulierung herangezogen werden kann. Dazu wird ein unendlich ausgedehnter Zylinder betrachtet, dessen Querschnitt sich zu einer Kreisscheibe mit Loch ergibt. Dieses Beispiel ist aus

DENG et al. [56] und ZHUANG et al. [51] entnommen, wo auch eine analytische Lösung des Randwertproblems dokumentiert ist. Voraussetzung für die analytische Lösbarkeit ist die Annahme eines linearen Materialverhaltens und eines ebenen Verzerrungszustands. Weiterhin wird der piezoelektrische Effekt vernachlässigt, so dass die Flexoelektrizität der einzige berücksichtigte elektro-mechanische Kopplungseffekt in diesem Beispiel ist.



**Abbildung 8.1:** Das mit  $25 \times 25$  finiten Elementen diskretisierte Viertelmodell der Kreisscheibe mit den gegebenen Randbedingungen.

Aufgrund der Rotationssymmetrie kann die FE-Berechnung an einem Viertel der Kreisscheibe durchgeführt werden. Das verwendete FE-Modell, sowie die gewählten Randbedingungen sind in Abb. 8.1 dargestellt. Die Modelleingabe und die Berechnungen erfolgen in kartesischen Koordinaten. Für die Auswertung der Ergebnisse werden zusätzlich Polarkoordinaten eingeführt. Der Innenradius der Scheibe beträgt  $r_i = 10 \mu\text{m}$  und der Außenradius ist  $r_o = 20 \mu\text{m}$ . An den Symmetrierändern werden jeweils die Verschiebungskomponenten in Umfangsrichtung festgehalten. Des Weiteren wird an denselben Rändern aufgrund der behinderten Verdrehungen für den Verschiebungsgradienten  $H_{12} = H_{21} = 0$  gesetzt. Auf der Innenseite des Zylinders ist die radiale Verschiebung mit  $u_r = 0.045 \mu\text{m}$  vorgegeben und das elektrische Potential zu  $\phi = 0$  gesetzt. An der Außenseite beträgt die vorgegebene Verschiebung  $u_r = 0.05 \mu\text{m}$ , während das elektrische

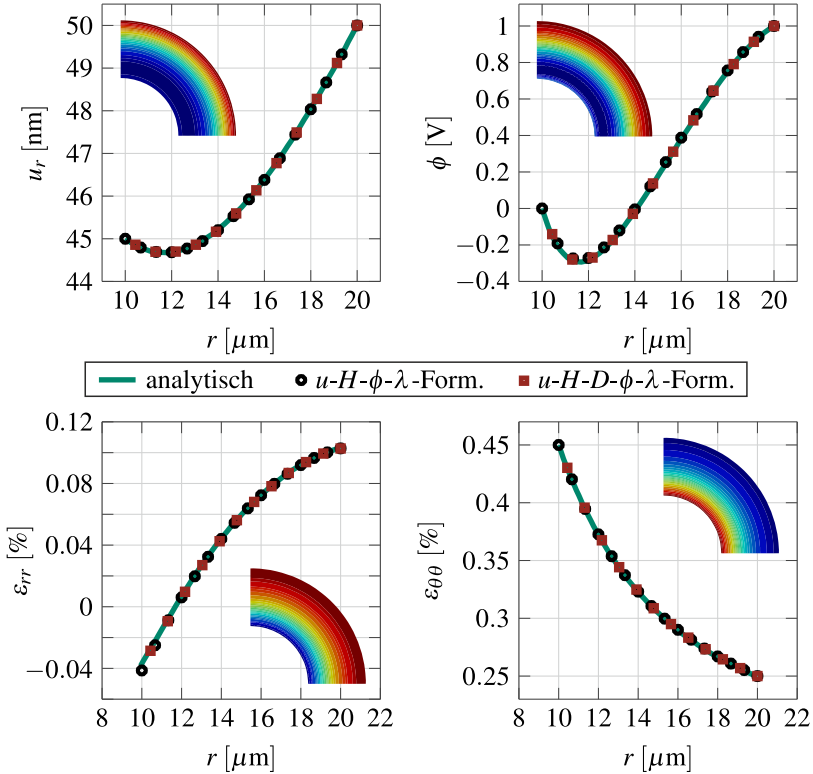
Potential  $\phi = 1$  V beträgt. In diesem Beispiel treten geometrisch bedingt radiale Gradienten in den Verzerrungen und elektrischen Feldern auf, so dass auch ein nicht zu vernachlässigender Einfluss der Flexoelektrizität zu erwarten ist.

In Tab. 8.1 sind die für das Material der Kreisscheibe angenommenen Materialparameter aufgelistet. In diesem Beispiel wird neben den flexoelektrischen Konstanten  $\mu_{12}$  und  $\mu_{44}$  (vgl. Gl. (2.86)) erstmals in dieser Arbeit der interne Längenparameter  $l_e$  (vgl. Gl. (2.67)) zur Kontrolle des Einflusses der Elastizität höherer Ordnung verwendet. Wie bereits in Tab. 7.1 werden die Materialparameter zusätzlich in einem Einheitensystem angegeben, welches sich für die numerische Berechnung eignet.

**Tabelle 8.1:** Materialparameter der Kreisscheibe mit Loch.

Parameter	Wert	Rechenwert
$Y$	139000 MPa	139 kN/mm <sup>2</sup>
$\nu$	0.3	0.3
$l_e$	$2 \cdot 10^{-6}$ m	$2 \cdot 10^{-3}$ mm
$\mu_{12}$	$1 \cdot 10^{-6}$ C/m	$1 \cdot 10^{-3}$ kN/MV
$\mu_{44}$	$1 \cdot 10^{-6}$ C/m	$1 \cdot 10^{-3}$ kN/MV
$\epsilon_0 + \kappa$	$1 \cdot 10^{-9}$ C/(Vm)	1 kN/MV <sup>2</sup>

Anhand des verhältnismäßig einfachen Randwertproblems in diesem Beispiel, für das eine analytische Lösung existiert, sollen die Berechnungsergebnisse von zwei unterschiedlichen flexoelektrischen FE-Formulierungen verglichen werden. Hierfür werden zum einen die Ergebnisse einer gemischten FE-Formulierung auf Basis des Variationsprinzips aus Abschn. 6.5.2 in Abhängigkeit der elektrischen GIBBS-Energie betrachtet, vgl. [56]. Diese Formulierung wird im Weiteren entsprechend ihrer resultierenden Freiheitsgrade als  $u$ - $H$ - $\phi$ - $\lambda$ -Formulierung bezeichnet. Zum anderen werden für den Vergleich auch die erzielten Ergebnisse der auf der freien HELMHOLTZ-Energie basierenden gemischten FE-Formulierung aus Abschn. 6.6 einbezogen. Diese wird im Folgenden als  $u$ - $H$ - $D$ - $\phi$ - $\lambda$ -Formulierung bezeichnet.



**Abbildung 8.2:** Vergleich der Berechnungsergebnisse von zwei verschiedenen flexoelektrischen FE-Formulierungen mit den analytischen Ergebnissen aus ZHUANG et al. [51] für das Randwertproblem einer Kreisscheibe mit Loch.

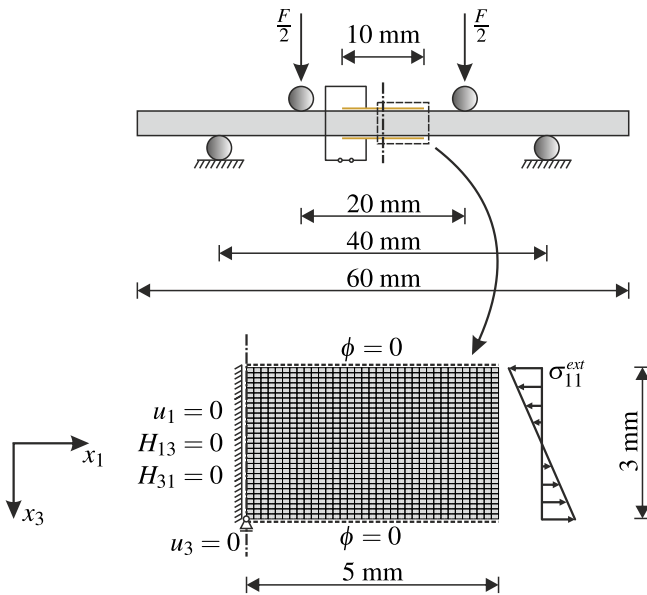
In Abb. 8.2 sind die Ergebnisse der beiden FE-Formulierungen mit den analytischen Lösungen dieses Problems aus ZHUANG et al. [51] gegenübergestellt. Dabei werden die Verläufe der radialen Verschiebungskomponente  $u_r$  und des elektrischen Potentials  $\phi$ , sowie die der Verzerrungskomponenten in Radial- und Umfangsrichtung  $\epsilon_{rr}$  und  $\epsilon_{\theta\theta}$  betrachtet. Es wird deutlich, dass die Ergebnisse der beiden verwendeten FE-Formulierungen mit den analytischen Lösungen des Randwertproblems übereinstimmen.

An dieser Stelle sei angemerkt, dass die Übereinstimmung der Ergebnisse der beiden betrachteten FE-Formulierungen für eine lineare Anwendung keinesfalls verwunderlich ist. Wie bei deren Herleitungen in Kap. 6.1 bereits gezeigt, lässt sich die  $u$ - $H$ - $D$ - $\phi$ - $\lambda$ -Formulierung aus der  $u$ - $H$ - $\phi$ - $\lambda$ -Formulierung mittels LEGENDRE-Transformation gewinnen und basiert somit auch auf derselben Potentialfunktion. Die Formulierungen unterscheiden sich jedoch neben der unterschiedlichen Anzahl der Freiheitsgrade, auch in den zu verwendenden linearen konstitutiven Materialgleichungen. Während die  $u$ - $H$ - $\phi$ - $\lambda$ -Formulierung auf der elektrischen GIBBS-Energie basierten Form in (2.122) zurückgreift, ist im Falle der  $u$ - $H$ - $D$ - $\phi$ - $\lambda$ -Formulierung die auf der freien HELMHOLTZ-Energie basierende Form der Konstitutivgleichungen in (2.128) zu verwenden. Für materiell lineare Probleme liefern beide Formen die gleiche Lösung. Aufgrund der nicht gegebenen positiven Definitheit der Materialmatrix der elektrischen GIBBS-Energie-Form in (2.122) kann es insbesondere in Fällen mit materieller Nichtlinearität, wie z. B. den in dieser Arbeit betrachteten Domänenumklappprozessen, zu nicht eindeutigen Lösungszuständen kommen. Aus diesem Grund findet in den nachfolgenden materiell nichtlinearen Problemstellungen ausschließlich die auf der freien HELMHOLTZ-Energie basierende  $u$ - $H$ - $D$ - $\phi$ - $\lambda$ -Formulierung mit der konstitutiven Form in (2.128) ihre Anwendung.

## 8.2 4-Punkt-Biegeversuch

Als erstes Beispiel in diesem Kapitel mit einer Berücksichtigung von materialbedingten nichtlinearen Effekten aus Domänenumklappprozessen in Ferroelektrika wird der bereits in Abschn. 4.2.4 diskutierte 4-Punkt-Biegeversuch von MA und CROSS [152] behandelt. Der zugehörige Versuchsaufbau ist in Abb. 8.3 dargestellt. Aufgrund des konstanten Momentenverlaufs ohne Einfluss von Querkräften im Bereich zwischen den Lasteinleitungspunkten kann ein vereinfachtes Simulationsmodell gewählt werden, in dem dennoch alle wesentlichen Effekte des Gesamtsystems aus dem Versuch enthalten sind. In diesem Fall genügt es, nur den 10 mm breiten Bereich des Balkens zu betrachten, an dessen Ober- und Unterseite

die Elektroden angebracht sind. Es wird vereinfachend eine zweidimensionale Betrachtung im ebenen Verzerrungszustand angenommen, so dass das gewählte Modell einem gedanklich aus der Mitte des Balkens herausgeschnittenen Streifen entspricht. Der in diesem Bereich der Probe wirkende homogene Biegezustand kann durch eine linear verteilte Spannungsrandbedingung an den Seitenrändern realisiert werden.



**Abbildung 8.3:** Oben: Aufbau des 4-Punkt-Biegeversuchs von MA und CROSS [152]. Unten: Mit  $35 \times 30 = 1050$  Elementen diskretisiertes Halbmodell des Mittelteils des Balkens mit den vorgegebenen Randbedingungen.

Aufgrund der Symmetrie des Systems und der Belastung kann die FE-Berechnung für eine Hälfte des betrachteten Bereichs durchgeführt werden. Die Breite des Modells wird so gewählt, dass der rechte Rand mit der Spannungsrandbedingung ausreichend weit von der Symmetrieachse entfernt ist, in der die Ergebnisauswertung erfolgt. Dadurch wird gewährleistet, dass etwaige inhomogene Feldverteilungen in-

folge lokaler Lasteinleitung<sup>1</sup> abklingen und dadurch ein homogener Biegezustand an der Symmetrieachse des Modells sichergestellt ist. Der mit  $35 \times 30 = 1050$  Elementen diskretisierte halbe Mittelbereich des Balkens ist samt den gewählten Randbedingungen in Abb. 8.3 dargestellt. Konsistente Symmetrierandbedingungen werden durch das Festhalten der horizontalen Verschiebungskomponenten  $u_1$ , sowie den Komponenten des Verschiebungsgradienten  $H_{13}$  und  $H_{31}$  realisiert. Als zusätzliche mathematisch notwendige mechanische Randbedingung wird die vertikale Verschiebung am untersten Knoten der Symmetrieachse festgehalten. Entsprechend den in diesem Versuchsaufbau kurzgeschlossenen Elektroden an der Ober- und Unterseite wird das elektrische Potential an diesen Rändern zu null gesetzt.

Die Auswahl der verwendeten Materialparameter für das in Kap. 5 eingeführte Modell zur Abbildung des Großsignalverhaltens der kommerziellen Piezokeramik PZT-5H der Firma TRS Ceramics Inc., State College, Pennsylvania (USA) erfolgt in einem iterativen Prozess. Dabei wird versucht, die Modellantwort zum einen bestmöglich an das experimentell ermittelte hysteretische Materialverhalten eines repräsentativen Materialvolumens aus CHAPLYA und CARMAN [234] und zum anderen an das gemessene Systemverhalten des 4-Punkt-Biegeversuchs von MA und CROSS [152] anzupassen. Die daraus resultierenden Materialparameter sind in Tab. 8.2 aufgelistet. Materialparameter entsprechend dem linearen Kleinsignalverhalten von PZT-5H werden zudem auch in [235] angegeben. Der Einfluss der Elastizität höherer Ordnung wurde durch die Wahl eines relativ kleinen internen Längenparameters  $l_e$  stark reduziert<sup>2</sup>. Der Vergleich der am Materialpunkt berechneten dielektrischen Hysterese, der Schmetterlingshysterese und des ferroelastischen Verhaltens während eines Depolarisationsprozesses mit den experimentellen Daten aus CHAPLYA und CARMAN [234] ist in Abb. 8.4 dargestellt. Zur besseren Ver-

<sup>1</sup> Bei rein mechanischen Problemen spricht man von einem ST. VENANT-Bereich.

<sup>2</sup> An dieser Stelle sei angemerkt, dass eine Wahl des internen Längenparameters zu  $l_e = 0$  eine nicht positiv definiten Materialmatrix in (2.128) ergibt und zu oszillierenden Verläufen der einzelnen Feldgrößen führen kann. Bei nichtlinearen Berechnungen führt dies zudem zu einem instabilen Lösungsprozess und kann zur Divergenz der globalen NEWTON-Iteration führen. Damit wird der Charakter der Elastizität höherer Ordnung als stabilisierender Effekt bei der Modellierung der Flexoelektrizität deutlich.

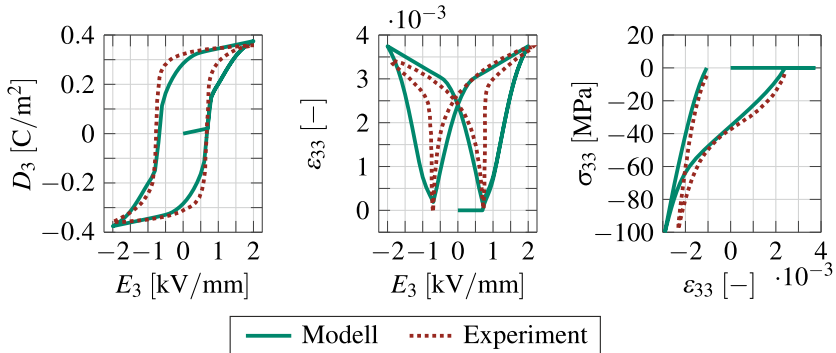
**Tabelle 8.2:** An das Großsignalverhalten der kommerzielle Piezokeramik PZT-5H angepassten Parameter des in Kap. 5 eingeführten Materialmodells für den 4-Punkt-Biegeversuch von MA und CROSS [152].

Parameter	Wert	Rechenwert
$Y$	70000 MPa	70 kN/mm <sup>2</sup>
$\nu$	0.31	0.31
$l_e$	$1 \cdot 10^{-9}$ m	$1 \cdot 10^{-6}$ mm
$d_{33}$	$0.59 \cdot 10^{-9}$ m/V	0.59 mm/MV
$d_{31}$	$-0.27 \cdot 10^{-9}$ m/V	-0.27 mm/MV
$d_{15}$	$0.74 \cdot 10^{-9}$ m/V	0.74 mm/MV
$\kappa$	$30 \cdot 10^{-9}$ C/(Vm)	30 kN/MV <sup>2</sup>
$\mu_{12}$	$5 \cdot 10^{-8}$ C/m	$5 \cdot 10^{-5}$ kN/MV
$\mu_{44}$	$-1.1 \cdot 10^{-6}$ C/m	$-1.1 \cdot 10^{-3}$ kN/MV
$E^c$	$0.7 \cdot 10^6$ V/m	$0.7 \cdot 10^{-3}$ MV/mm
$\sigma^c$	25 MPa	$25 \cdot 10^{-3}$ kN/mm <sup>2</sup>
$P^{sat}$	$0.37$ C/m <sup>2</sup>	0.37 kN/(MVmm)
$\varepsilon^{sat}$	0.0035	0.0035
$c_A$	0.25 MPa	$2.5 \cdot 10^{-4}$ kN/mm <sup>2</sup>
$c_\rho$	$1 \cdot 10^{-3}$ MPa	$1 \cdot 10^{-6}$ kN/mm <sup>2</sup>
$a_A$	$1 \cdot 10^{-3}$ MPa	$1 \cdot 10^{-6}$ kN/mm <sup>2</sup>
$m_A$	0.8	0.8
$a_\rho$	$5 \cdot 10^{-3}$ MPa	$5 \cdot 10^{-6}$ kN/mm <sup>2</sup>
$m_A$	0.6	0.6
$\xi$	0.2	0.2

gleichbarkeit wurde der Ursprung der experimentellen Kurven auf den Ursprung der simulierten Hysteresen verschoben. In der Berechnung am in Abb. 8.3 dargestellten FE-Modell wird die aufgebrauchte Biegespannung in zehn äquidistanten Be- und fünf Entlastungsschritten mit maximaler Amplitude von  $\sigma_{11}^{ext,max} = 60$  MPa aufgebracht. Dabei ergibt sich ein ähnliches Konvergenzverhalten wie bei den Berechnungen mit der rein piezoelektrischen Modellvariante in Kap. 7. Zu Beginn

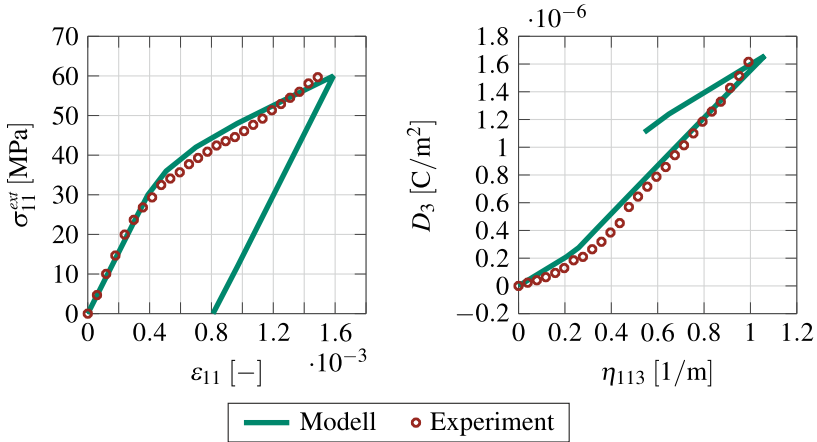


der Simulation wird immer von einem thermisch depolarisierten Materialzustand in der Probe ausgegangen.



**Abbildung 8.4:** Vergleich der mit dem angepassten Materialmodell berechneten dielektrischen Hysterese und Schmetterlingshysterese sowie des ferroelastischen Verhaltens während eines Depolarisationsprozesses mit dem von CHAPLYA und CARMAN [234] experimentell aufgezeichneten Materialverhalten.

In Abb. 8.5 werden die im Experiment von MA und CROSS [152] aufgezeichneten Systemantworten mit den Ergebnissen der FE-Berechnung verglichen. Auf der linken Seite ist die durch die Randbedingungen aufgebrachte Biegespannung über der an der untersten Randfaser des Balkens ausgewerteten axialen Dehnung aufgetragen. Die verschiebungsgesteuerte Belastung im Versuch erfolgte dabei mit einer Geschwindigkeit von 2 mm/min, sodass die Annahme eines quasi-statischen Belastungsprozesses gerechtfertigt ist. Es ist deutlich zu erkennen, dass infolge mechanischer Einwirkung im Querschnitt ferroelastische Domänenenumklappprozesse verursacht werden. Diese setzen bei einer Biegespannung von etwa 30 MPa ein und sorgen dann für eine deutliche Abnahme der Biegesteifigkeit des Balkens. In der Modellkurve ist zudem der Entlastungspfad mit angegeben. Bei Lastumkehr verhält sich das Material wieder linear-elastisch und nach vollständiger Entlastung verbleibt eine axiale Dehnung der Randfasern von etwa 0.08 % in der Probe. Dies steht im Einklang mit den Beobachtungen von MA und CROSS [152], die von einer bleibenden remanenten Krümmung der Probe nach Entlastung berichten.



**Abbildung 8.5:** Vergleich der Ergebnisse der FE-Berechnung mit dem experimentell ermittelten quasi-statischen Systemverhalten des 4-Punkt-Biegeversuchs bei einer weggesteuerten Belastungsgeschwindigkeit von 2 mm/min.

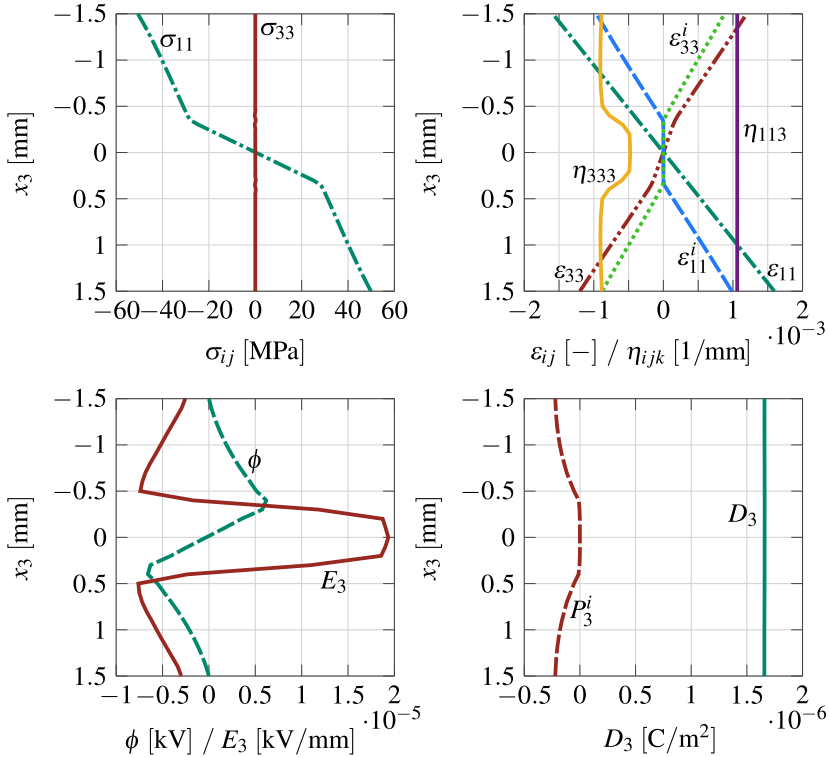
Auf der linken Seite in Abb. 8.5 ist zur Quantifizierung des direkten flexoelektrischen Effektes die dielektrische Verschiebung in vertikaler Richtung über der Verzerrungsgradientenkomponente  $\eta_{113}$  aufgetragen. Im Hinblick auf die Auswertung sei zu erwähnen, dass beide Größen einen konstanten Wert über die Querschnittshöhe einnehmen, vgl. auch Abb. 8.6. Während sich der konstante Verlauf der dielektrischen Verschiebung direkt aus dem GAUSS'schen Gesetz (2.55) in Verbindung mit den 'closed circuit'-Randbedingungen ergibt, resultiert selbiges für  $\eta_{113}$  durch die sich einstellende lineare axiale Dehnungsverteilung in der Probe infolge reiner Momentenbeanspruchung. Das im Experiment beobachtete flexoelektrische Verhalten kann durch das Modell sehr gut wiedergegeben werden, wobei die gewählten flexoelektrischen Konstanten  $\mu_{12}$  und  $\mu_{44}$  in Tab. 8.2 an das experimentelle Verhalten angepasst wurden. Eine Orientierung an gemessenen Materialparametern aus der Literatur erfolgte dabei nicht. Jedoch sei erwähnt, dass die sich ergebende Größenordnungen und Vorzeichen keinesfalls als unrealistisch einzustufen sind, vgl. z. B. [130]. Bei der Anpassung zeigte sich, dass durch Variation der Größenordnung und des Vorzeichens der flexoelektrischen

Konstanten sich ein deutlich abweichendes Verhalten im Vergleich zu dem in Abb. 8.5 (rechts) ergeben kann. Der bereits in Abschn. 4.2.4 im Rahmen dieses Experiments diskutierte effektive flexoelektrische Transversalkoeffizient lässt sich mithilfe der Umrechnung in ZUBKO et al. [153] aus den Flexotensorkomponenten in Tab. 8.2 zu

$$\mu_{12}^{eff} = \mu_{12} - \frac{v}{1-v}(\mu_{12} + 2\mu_{44}) = 1.02 \mu\text{C/m} \quad (8.1)$$

ermitteln, welcher zwischen den von MA und CROSS [152] grafisch ermittelten abschnittswisen Koeffizienten 0.5 und 2  $\mu\text{C/m}$  liegt und somit als durchaus realistisch eingestuft werden kann. Auffällig an den Ergebnissen der simulierten flexoelektrischen Systemantwort in Abb. 8.5 ist der Verlauf des Entlastungspfades. Nach vollständigem Lastrückgang verbleibt in der Probe aufgrund der remanenten Verzerrungen infolge des ferroelastischen Domänenumklappens ein Verzerrungsgradient und damit auch eine remanente dielektrische Verschiebung. Ob dieser Effekt dem tatsächlichen Materialverhalten entspricht, kann beim derzeitigen Stand der Forschung nicht geklärt werden. Hierzu sind weitere Versuche mit einer Aufzeichnung der Entlastungspfade erforderlich.

Die erfolgreiche Anpassung an das experimentell ermittelte Systemverhalten erlaubt es nun, mithilfe des Modells in das ‚Innere‘ des Biegebalkens zu schauen und so Einblicke in das Verhalten der einzelnen Felder zu gewinnen. Im Folgenden werden daher die Verläufe der einzelnen Feldgrößen entlang der Symmetrieachse des Modells näher betrachtet. Hierfür sind in Abb. 8.6 die relevanten Spannungs- und Verzerrungsgrößen, sowie die relevanten elektrischen Feldgrößen über die  $x_3$ -Koordinate in Dickenrichtung des Balkens zum Zeitpunkt der Maximallast  $\sigma_{11}^{ext,max} = 60 \text{ MPa}$  dargestellt. Infolge der linear verteilten äußeren Biegespannung  $\sigma_{11}^{ext}$  stellt sich ein linearer Verlauf der axialen Dehnungen  $\varepsilon_{11}$  ein. Zu diesem Zeitpunkt der Maximallast stellen sich ferroelastische Domänenumklappprozesse bereits über mehr als zweidrittel der gesamten Querschnittshöhe ein. Dies wird zum einen durch die Verläufe der Komponenten der irreversiblen Verzerrung  $\varepsilon_{11}^i$  und  $\varepsilon_{33}^i$  und zum anderen durch den abgeflachten Verlauf der axialen Spannung  $\sigma_{11}$  deutlich. Dieser stellt sich durch die Spannungsbegrenzung zur Erfüllung des



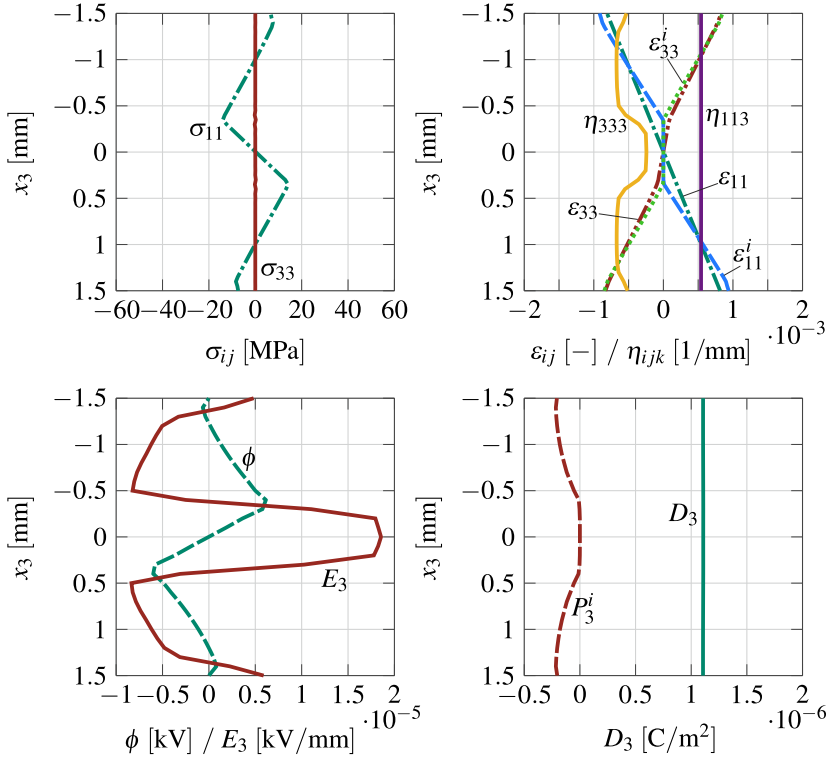
**Abbildung 8.6:** Verläufe der einzelnen Feldgrößen in Dickenrichtung des Balkens entlang der Symmetrieachse des Modells zum Zeitpunkt der maximalen Biegespannung  $\sigma_{11}^{ext,max} = 60$  MPa.

Umklappkriteriums (5.22) ein und somit entspricht die maximale Spannung an den äußeren Randfasern auch nicht der äußeren Biegespannung  $\sigma_{11}^{ext,max}$ . Entsprechend des linearen axialen Dehnungsverlaufs stellt sich über die Querschnittshöhe ein konstanter Verlauf der Verzerrungsgradientenkomponente  $\eta_{113}$  ein. Der abschnittsweise lineare Verlauf der Dehnungen in Dickenrichtung  $\varepsilon_{33}$  weist durch die Dominanz ihrer irreversiblen Anteile  $\varepsilon_{33}^i$  Knicke auf. Dadurch ergibt sich für die zugehörige Verzerrungsgradientenkomponente  $\eta_{333}$  ein abschnittsweise konstanter Verlauf mit nichtlinearen Übergangsbereichen, die in den Regionen

liegen, in denen der Übergang von reversiblen zu irreversiblen Materialverhalten stattfindet.

Gemäß dem flexoelektrischen Transversaleffekt stellt sich eine nach unten gerichtete dielektrische Verschiebung  $D_3$  in Dickenrichtung des Balkens ein. Deren konstanter Verlauf ergibt sich aus dem durch die mechanischen Randbedingungen vorgegebenen konstanten Verlauf der Verzerrungsgradientenkomponente  $\eta_{113}$  und steht zudem im Einklang mit dem GAUSS'sche Gesetz. In Verbindung mit den elektrischen Randbedingungen mit der Annahme von ladungsfreien Modellseitenflächen kann hierüber auch eine axiale Komponente der dielektrischen Verschiebung  $D_1$  im Balken ausgeschlossen werden. Unter Zuhilfenahme der konstitutiven Gleichung in (2.121) als gedanklich Stütze können Erklärungen für die sich einstellenden Verläufe der übrigen Felder abgeleitet werden: Aufgrund der teilweise nichtlinearen Verläufe der Verzerrungsgrößen infolge der mechanischen Einwirkung und der dadurch hervorgerufenen Umklappvorgänge ist zur Einhaltung eines konstanten Verlaufs der dielektrischen Verschiebung offensichtlich die Ausbildung eines elektrischen Feldes mit einem in vertikaler Richtung stark inhomogenen Verlauf erforderlich. Entsprechend diesem elektrischen Feld stellt sich der Verlauf des elektrischen Potentials ein, welches an den Rändern durch den Kurzschluss der Elektroden verschwinden muss. Die maximal erreichte elektrische Feldstärke im Querschnitt beträgt nur wenige Promille der Koerzitivfeldstärke. Umso bemerkenswerter ist das Auftreten einer irreversiblen Polarisation in den äußeren Bereichen des Querschnitts. Maßgeblich verantwortlich für die Entstehung der irreversiblen Polarisation ist die lokale Erhöhung der Verzerrungsgradientenkomponente  $\eta_{333}$ , die sich während des Belastungsvorgangs beidseitig von außen nach innen bewegt und dabei aufgrund des flexoelektrischen Effekts als elektrische Triebkraft wirkt.

In Abb. 8.7 sind die Verläufe der zuvor betrachteten Feldgrößen nach der vollständigen Entlastung der Probe dargestellt. Durch die in der Probe auftretenden Umklappvorgänge kann sich die axiale Spannung  $\sigma_{11}$  nicht vollständig abbauen und es verbleibt ein Eigenspannungszustand im Querschnitt. Die Verzerrungskomponenten  $\varepsilon_{11}$  und  $\varepsilon_{33}$  reduzieren ihre Amplitude und entsprechen nach Entlastung annähernd ihren irreversiblen Pendanten. Auch die Komponenten des Verzerrungs-



**Abbildung 8.7:** Verläufe der einzelnen Feldgrößen in Dickenrichtung des Balkens entlang der Symmetrieachse des Modells nach vollständiger Entlastung.

gradienten nehmen in gleicher Weise ab, wobei in der Komponente  $\eta_{333}$  zusätzlich eine Abnahme in den äußeren Randfasern des Querschnitts zu beobachten ist. Dieser Effekt hat auch einen direkten Einfluss auf die Verläufe des elektrischen Feldes und der irreversiblen Polarisation, bei denen ebenfalls Amplitudenreduktionen in diesen Bereichen zu beobachten sind. Wie bereits in Abb. 8.5 zu sehen ist, führt die Entlastung nur zu einer geringfügigen Verringerung der dielektrischen Verschiebung im Balken. In Zukunft sollte, soweit möglich, durch weitere experimentelle Untersuchungen die physikalische Plausibilität dieser Beobachtung überprüft werden.

Die gewonnenen Erkenntnisse und Schlussfolgerungen aus den Untersuchungen dieses Beispiels lassen sich aus Sicht des Verfassers stichpunktartig wie folgt zusammenfassen:

- Die im Experiment beobachtete globale Systemantwort wird in hohem Maße durch mechanisch initiierte ferroelastische Domänenumklappprozesse dominiert.
- Die nach der Entlastung in der Probe verbleibende Polarisation in Form der dielektrischen Verschiebung wird maßgeblich durch den flexoelektrischen Effekt infolge der verbleibenden Verzerrungsgradienten aus irreversiblen Dehnungen bestimmt.
- Das Auftreten der irreversiblen Polarisation in diesem Beispiel ist nach dem derzeitigen Stand der Untersuchungen zunächst als modellbedingt einzustufen und müsste daher im Experiment widerlegt oder bestätigt werden.
- Aufgrund des bisher nur unzureichenden Verständnisses des Zusammenspiels von Domänenumklappprozessen und dem flexoelektrischen Effekt sind sicherlich weitergehende Untersuchungen notwendig. Die hier vorgestellten Ergebnisse sind daher eher als Ausgangspunkt für solche Untersuchungen zu verstehen und erheben nicht den Anspruch, ein vollständiges Verständnis der Wirkungsweise der Flexoelektrizität zu liefern.

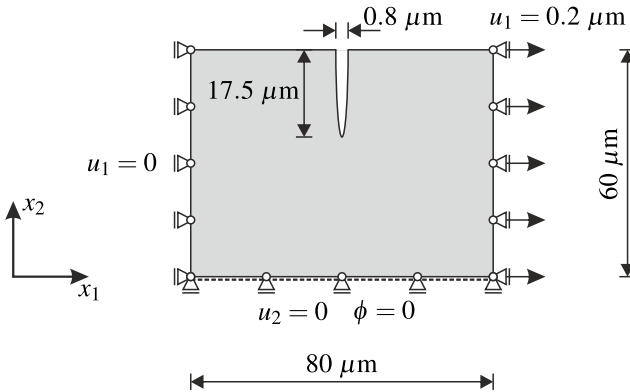
Offene Fragen, die sich aus diesen Erkenntnissen ergeben und in weiteren experimentellen und numerischen Untersuchungen zu klären sind, können wie folgt formuliert werden:

- In welcher Größenordnung lässt sich nach Entlastung eine remanente Polarisation als Wirkung der Flexoelektrizität infolge der gradientenbehafteten remanenten Dehnungen der Probe nachweisen?
- Müssen Modellanpassungen vorgenommen werden, z. B. durch Einführung eines irreversiblen Verzerrungsgradienten, um den nach Entlastung sehr stark ausgeprägten remanenten Effekt der Flexoelektrizität zu reduzieren?

- Ist die Modellannahme eines ebenen Verzerrungszustandes gerechtfertigt oder muss die Simulation in einem dreidimensionalen Modell durchgeführt werden, um mögliche Randeffekte abbilden zu können?

### 8.3 Scheibe mit elliptischer Kerbe

Im Gegensatz zur vorangegangenen Simulation eines realen Experiments handelt es sich beim vorliegenden Beispiel eher um eine Problemstellung mit akademischem Charakter. Die Motivation besteht darin, die Geometrie eines fiktiven Bauteils so zu wählen, dass der direkte flexoelektrische Effekt durch stark ausgeprägte Verzerrungsgradienten gezielt angesprochen wird. Gegenstand dieser Untersuchung ist die Scheibe mit elliptischer Kerbe aus Abb. 8.8. Die Geometrie dieses Modellproblems ist aus WITT et al. [3] entnommen, wobei alle Abmessungen um den Faktor  $10^{-1}$  verkleinert werden. Durch die Annahme eines ebenen Verzerrungszustands und eines freien Randes an der Oberseite entspricht dieses Modell z. B. einem gedanklich aus dem Material herausgeschnittenen Querschnitt entlang eines Oberflächenrisses. In diesem Fall handelt es sich jedoch nicht um einen idealen Riss.



**Abbildung 8.8:** Modellproblem einer Scheibe mit elliptischer Kerbe und den zugehörigen Randbedingungen. Die Kerbe ist nicht maßstabsgetreu dargestellt.



Die Scheibe besteht aus der Piezokeramik PZT-5H im thermisch depolarisierten Zustand, die bereits in Abschn. 8.2 im Rahmen des 4-Punkt-Biegeversuchs untersucht wurde. Die Berücksichtigung sowohl der flexoelektrischen als auch der piezoelektrischen und ferroelektrischen Eigenschaften dieses Materials wird in diesem Beispiel beibehalten. Für die Berechnungen werden somit auch die Materialparameter aus Tab. 8.2 angenommen, mit Ausnahme des internen Längenparameters  $l_e$ . Bei den Untersuchungen zu diesem Beispiel zeigte sich eine ausgeprägte Empfindlichkeit der numerischen Rechenstabilität gegenüber diesem Parameter, so dass dieser auf  $l_e = 2 \cdot 10^{-4}$  mm erhöht werden musste. Auf diesen Umstand und seine physikalische Interpretation wird am Ende dieses Beispiels noch einmal eingegangen.

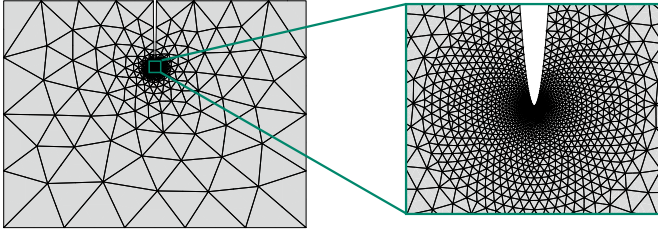
An den Modellrändern auf der linken Seite und der Unterseite wird jeweils eine mechanische Lagerung in Normalenrichtung angenommen. Darüber hinaus ist die Unterseite elektrisch geerdet, was einem Nullpotential entspricht. Die in diesem Beispiel rein mechanische Belastung wird über eine Verschiebungsrandbedingung am rechten Rand schrittweise bis zu einem Maximalwert von  $u_1^{max} = 0.2 \mu\text{m}$  aufgebracht. Die nominelle axiale Dehnung der Probe bei Maximallast beträgt somit 0.25 %, was in etwa dem Sättigungswert der Dehnung in der stationären Schmetterlingshysterese in Abb. 8.4 entspricht.

In diesem Beispiel sind Verzerrungsgradienten mit starker Ausprägung in unmittelbarer Umgebung des Kerbgrunds zu erwarten<sup>3</sup>. Somit ist auch dort mit einer Wirkung des direkten flexoelektrischen Effekts zu rechnen. Je nach Intensität der dabei auftretenden elektrischen Felder kann es neben mechanisch induzierten Umklappprozessen auch zu einer elektrisch getriebenen Ausrichtung der Domänen in diesem Bereich kommen. Ziel dieses numerischen Beispiels ist es, das Auftreten und die Wirkungsweise des flexoelektrischen Effekts mit einem an ein Experiment angepassten und damit nach bestem Wissen realistischen Materialparametersatz zu untersuchen. Dabei steht insbesondere die Möglichkeit im Vordergrund, durch

---

<sup>3</sup> Die unterschiedlichen Vorzeichen der Verzerrungsgradienten rechts und links des Kerbgrunds und die daraus resultierende schwer abschätzbare Wirkungsweise der Flexoelektrizität waren im Übrigen ausschlaggebend dafür, auf eine Symmetrisierung des Modells zu verzichten.

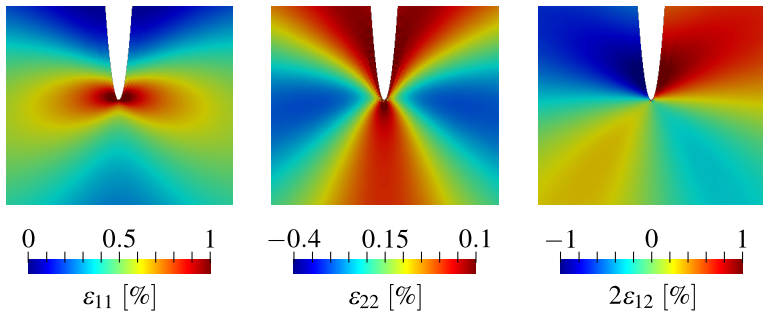
gezielte Erzeugung eines Verzerrungsgradienten den Aufbau einer remanenten Polarisation im Material zu bewirken.



**Abbildung 8.9:** Gewähltes FE-Netz aus quadratischen Dreieckselementen. Im Bereich des Kerbgrundes erfolgt eine sehr starke Netzverfeinerung.

Die Berechnungen werden an einem mit 3613 Dreieckselementen diskretisierten FE-Modell mit starker Netzverfeinerung im Bereich des Kerbgrundes durchgeführt, vgl. Abb. 8.9. Die zugrundeliegende FE-Formulierung entspricht wiederum der aus Abschn. 6.6. Die Wahl von Dreieckselementen<sup>4</sup> bietet sich in diesem Fall an, da die verwendeten Vernetzungsalgorithmen aus ABAQUS [236] mit Dreiecken hinsichtlich der Elementanzahl wesentlich sparsamere Übergänge von fein zu grob vernetzten Bereichen erzielen konnten. Insgesamt wurde eine wesentlich effizientere Vernetzung erreicht, als mit Viereckselementen möglich gewesen wäre. Die vorgegebene Verschiebung des rechten Randes wird innerhalb der FE-Berechnung in 80 äquidistanten Lastschritten aufgebracht. Die anschließende Entlastung erfolgt ebenfalls in 80 Schritten. Diese relativ kleinen Be- und Entlastungsschritte sind aufgrund des frühzeitig auftretenden stark nichtlinearen Materialverhaltens am Kerbgrund erforderlich. Auch in der Entlastungsphase treten in diesem Bereich nichtlineare Vorgänge auf.

<sup>4</sup> Das bei Dreieckselementen bekannte Phänomen des 'Lockings', weshalb diese Elemente verpönt sind, kann durch einen quadratischen Ansatz der Verschiebung ausgeschlossen werden [208], vgl. auch Abb. 6.3.

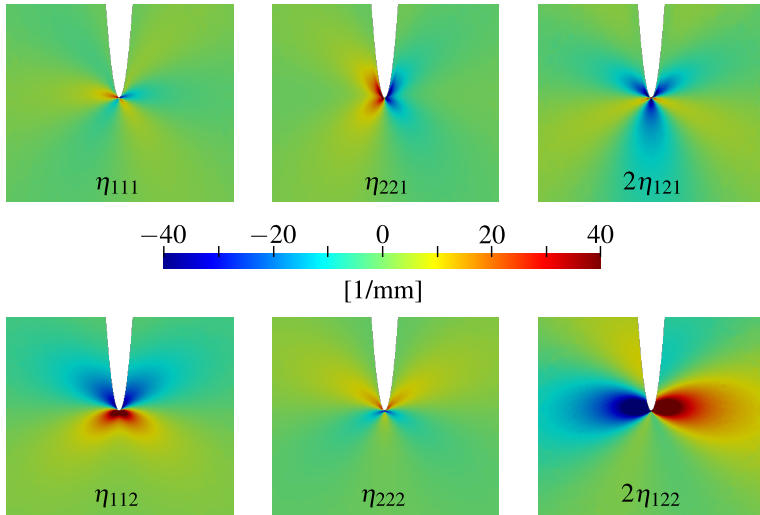


**Abbildung 8.10:** Verläufe der einzelnen Verzerrungskomponenten bei Maximallast in unmittelbarer Umgebung des Kerbgrunds. Der betrachtete Bereich entspricht der Detailansicht in Abb. 8.9.

Infolge der aufgetragenen axialen Verschiebung des rechten Randes stellt sich über weite Bereiche der Scheibe ein homogener Verzerrungszustand ein, der im Bereich der Kerbe stark an Intensität zunimmt. In Abb. 8.10 sind die Verläufe der einzelnen Verzerrungskomponenten bei maximaler Belastung in unmittelbarer Umgebung des Kerbgrunds dargestellt. Das gewählte Betrachtungsgebiet entspricht dabei dem vergrößert dargestellten Bereich in Abb. 8.9, dessen Dimension etwa  $3 \times 3 \mu\text{m}^2$  entspricht. Der Wertebereich der Farbskalen in Abb. 8.10 wurde auf sinnvolle Maximal- bzw. Minimalwerte begrenzt, um eine möglichst aussagekräftige Darstellung der tatsächlichen Verläufe zu erhalten<sup>5</sup>. Die Ursache für eine Aktivierung des flexoelektrischen Effekts sind die Komponenten des Verzerrungsgradiententensors. Deren Verläufe bei maximaler Belastung im Bereich des Kerbgrunds sind in Abb. 8.11 angegeben. Für alle dargestellten Komponenten wurde die gleiche Farbskala eingestellt, um sie vergleichen zu können. Auffällig sind die hohen Intensitäten der Schubkomponenten  $2\eta_{121}$  und  $2\eta_{122}$  des Verzerrungsgradiententensors. Da die Anpassung der flexoelektrischen Konstanten an das Experiment aus Abschn. 8.2 einen betragsmäßig relativ hohen Wert für den

<sup>5</sup> Zugdehnungen von mehr als 1 % ohne Schädigungserscheinungen im Material sind in einer realen Piezokeramik aufgrund ihrer spröden Eigenschaften nicht zu erwarten. Aufgrund des akademischen Charakters dieses Beispiels wird dieser Umstand hier vernachlässigt.

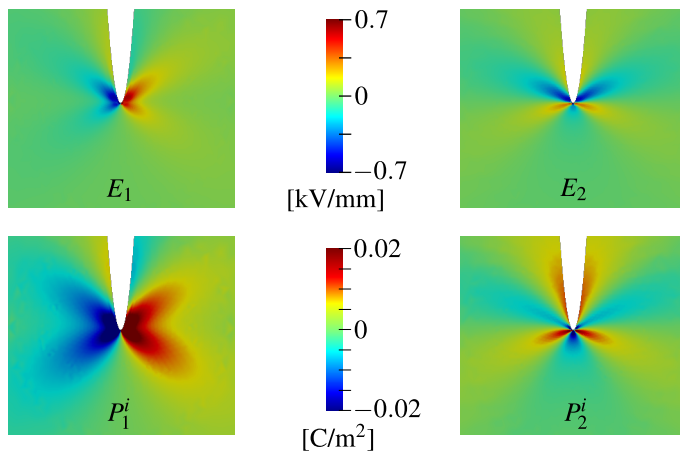
Schubparameter  $\mu_{44}$  ergab, können die dargestellten Feldverteilungen in Abb. 8.11 als optimale Bedingungen für eine Aktivierung des direkten flexoelektrischen Effekts angesehen werden.



**Abbildung 8.11:** Verläufe der einzelnen Komponenten des Verzerrungsgradiententensors bei Maximallast in unmittelbarer Umgebung des Kerbgrunds. Der betrachtete Bereich entspricht der Detailansicht in Abb. 8.9.

Die bei Maximallast durch den direkten flexoelektrischen Effekt erzeugten elektrischen Felder sind in ihrer Verteilung und Stärke in Abb. 8.12 dargestellt. Die Extremwerte der gewählten Farbskala wurden auf die Koerzitivfeldstärke begrenzt. Es wird deutlich, dass dieser Koerzitivwert nur in unmittelbarer Nähe des Kerbgrunds durch die induzierten elektrischen Felder erreicht wird. Betrachtet man jedoch in der gleichen Abbildung die Verteilung der irreversiblen Polarisationskomponenten, so zeigt sich, dass in einem deutlich größeren Bereich mit Domänenumklappprozessen und damit einer Polung des Materials zu rechnen ist. Auch die örtliche Verteilung der irreversiblen Polarisationskomponenten kann nur

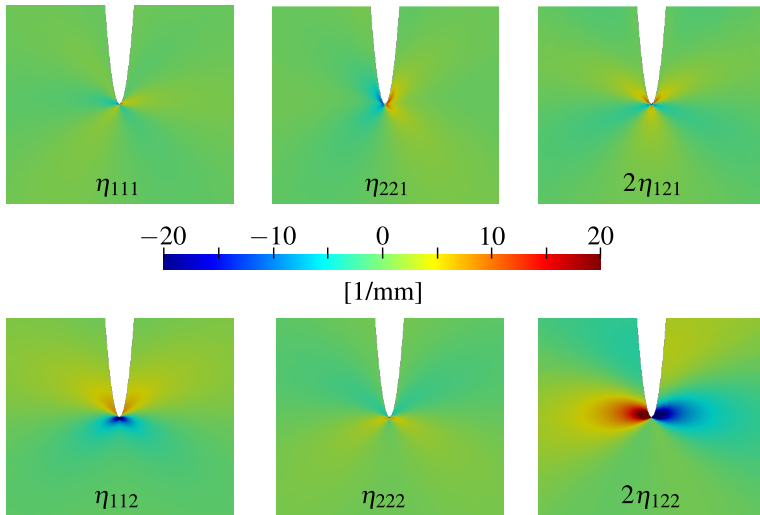
teilweise durch die auftretende Form der elektrischen Feldkomponenten erklärt werden. Dies deutet darauf hin, dass in der hier diskutierten Modellantwort das elektrische Feld nicht allein für die Entwicklung der irreversiblen Polarisation verantwortlich ist. Offensichtlich scheinen die Komponenten des Verzerrungsgradiententensors durch den direkten flexoelektrischen Effekt die Rolle einer direkten inneren Triebkraft bei der Entwicklung der irreversiblen Polarisation zu spielen. Die Magnituden der Polarisationskomponenten erreichen jedoch bei weitem nicht den Wert der makroskopischen Sättigungspolarisation, welcher sich aus der dielektrischen Hysterese ergibt, vgl. Abb. 8.4. Selbst am Kerbgrund erreicht die irreversible Polarisation nur etwa zwei Drittel dieses Wertes, was in der Darstellung in Abb. 8.12 nicht ersichtlich ist, da auch hier aus Gründen der Übersichtlichkeit die Extremwerte begrenzt wurden.



**Abbildung 8.12:** Verläufe der einzelnen Komponenten des elektrischen Feldes und der irreversiblen Polarisation bei Maximallast in unmittelbarer Umgebung des Kerbgrunds. Der betrachtete Bereich entspricht der Detailansicht in Abb. 8.9.

Im Weiteren liegt der Fokus auf den Änderungen der Feldverteilungen der Scheibe nach vollständiger Rückführung der Randverschiebung. Die im Material verblei-

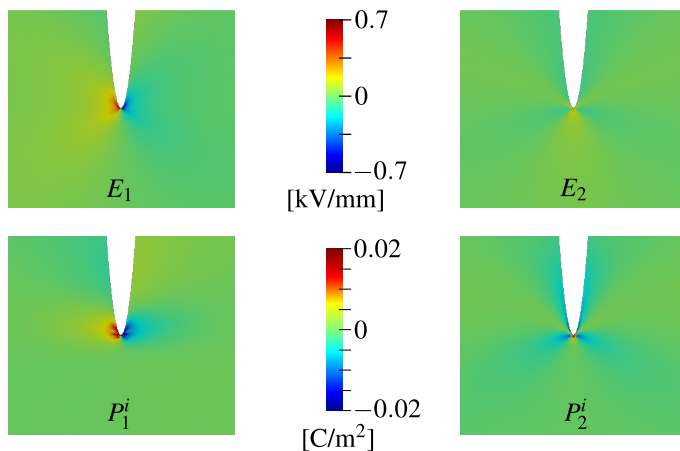
benden und damit remanenten Komponenten des Verzerrungsgradiententensors sind in Abb. 8.13 dargestellt. Deren Magnituden fallen deutlich geringer aus als bei Maximallast, weshalb die Grenzen der Farbskala halbiert wurden. Die Verteilung der Verzerrungsgradienten erscheint auf den ersten Blick ähnlich wie bei maximaler Belastung. Auffällig ist jedoch ein Vorzeichenwechsel in den Feldern, der bei allen Komponenten zu beobachten ist. Dies führt auch zu einem Vorzeichenwechsel in den induzierten elektrischen Felder sowie der irreversiblen Polarisation, wie aus Abb. 8.14 ersichtlich wird.



**Abbildung 8.13:** Verläufe der einzelnen Komponenten des Verzerrungsgradiententensors nach Verschiebungsrückführung in unmittelbarer Umgebung des Kerbgrunds. Der betrachtete Bereich entspricht der Detailansicht in Abb. 8.9.

Gemäß den reduzierten Verzerrungsgradienten ergeben sich nach der Rückführung der Randverschiebung auch verringerte Magnituden der durch direkte Flexoelektrizität hervorgerufenen elektrischen Feldgrößen. So wird die Koerzitivfeldstärke nur noch direkt am Kerbgrund erreicht. Die Modellantwort sagt eine verbleibende

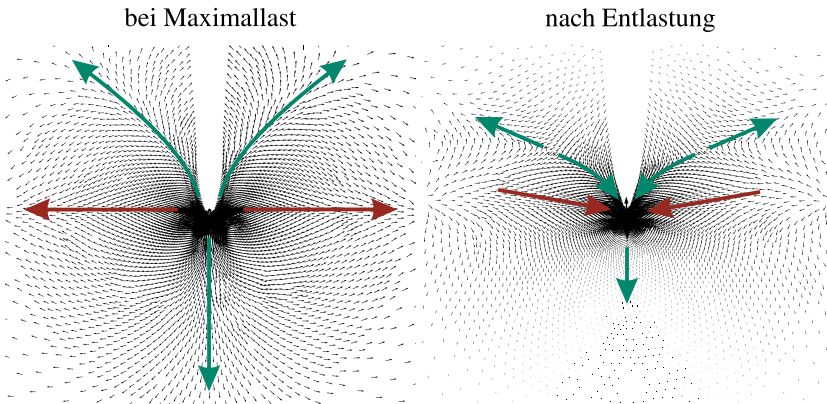
irreversible Polarisation im Material voraus, wenn auch nur in einem sehr kleinen Bereich in der Nähe des Kerbgrunds. Diese wurde allein durch die Wirkung des direkten flexoelektrischen Effekts ohne weitere äußere elektrische Einwirkung verursacht. Die Berechnungen wurden mit einem Parametersatz durchgeführt, der als durchaus realistisch anzusehen ist. Dies gibt auch hier zumindest einen Hinweis darauf, dass solche flexoelektrisch getriebene Polungsvorgänge auch in der Realität auftreten können.



**Abbildung 8.14:** Verläufe der einzelnen Komponenten des elektrischen Feldes und der irreversiblen Polarisation nach Verschiebungsrückführung in unmittelbarer Umgebung des Kerbgrunds. Der betrachtete Bereich entspricht der Detailansicht in Abb. 8.9.

Der Einfluss der Verzerrungsgradientenkomponenten auf die Orientierung der irreversiblen Polarisation und damit auf die Orientierung der Domänen im Ferroelektrikum soll im Folgenden anhand von Abb. 8.15 näher betrachtet werden. Dabei wird der Zustand bei Maximallast mit dem Zustand nach vollständiger Rückführung der Randverschiebung verglichen. In den beiden Bildern ist an jedem Elementknoten des Modells der Vektor der irreversiblen Polarisation abgebildet. Allerdings ist hier nur die Orientierung des Vektors korrekt dargestellt,

die Länge repräsentiert in diesem Fall nicht die Intensität. Betrachtet man die Orientierungen der Vektoren, so lassen sich einige Haupttrajektorien identifizieren, entlang derer sich die Polarisationsvektoren auszurichten scheinen. Diese sind in Abb. 8.15 durch die Pfeile gekennzeichnet. Vergleicht man nun ihren Verlauf mit der Darstellung der Komponenten des Verzerrungsgradiententensors in Abb. 8.11 und Abb. 8.13, so wird deutlich, dass die identifizierten ‚Haupttrajektorien‘ entlang der betragsmäßigen Maximalwerte der beiden Schubkomponenten verlaufen. Die grünen Pfeile in Abb. 8.15 korrelieren dabei mit der Komponente  $2\eta_{121}$ , die roten Pfeile mit der Komponente  $2\eta_{122}$ . Da die flexoelektrische Schubkonstante  $\mu_{44}$  betragsmäßig deutlich größer ist als die Transversalkomponente  $\mu_{12}$ , ist dies – wie bereits diskutiert – nicht überraschend. Der zuvor diskutierte Vorzeichenwechsel infolge des Rückführungsprozesses spiegelt sich in der Orientierung der irreversiblen Polarisationsvektoren wider.



**Abbildung 8.15:** Orientierung der irreversiblen Polarisationsvektoren bei Maximallast und nach Verschiebungsrückführung in unmittelbarer Umgebung des Kerbgrunds. Die Länge der Vektoren korreliert nicht mit der Polarisationsintensität. Die großen Pfeile entsprechen den identifizierten Haupttrajektorien. Der betrachtete Bereich entspricht der Detailansicht in Abb. 8.9.

Zum Ende dieses Beispiels soll die Problematik bei der Wahl des internen Längenparameters noch einmal aufgegriffen werden. Die Wirkung der Elastizität



höherer Ordnung führt im Allgemeinen zu einer Abschwächung der Intensität in den Spannungs- und Verzerrungsfeldern und damit auch zu einer Verringerung ihrer Gradienten. Im vorliegenden Beispiel führt dies zu einer Verteilung der zu speichernden Verzerrungsenergie auf einen größeren Radius um den Kerbgrund. Dieser Effekt ist umso ausgeprägter, je größer der Wert des internen Längenparameters gewählt wird und damit je näher dieser an den Bauteilabmessungen liegt. Ist man primär am Effekt der Flexoelektrizität interessiert, so wird man den Längenparameter zunächst möglichst klein wählen wollen, um eine isolierte Betrachtung der Flexoelektrizität zu ermöglichen<sup>6</sup>. Die sich daraus ergebende Problematik ist, dass sich aufgrund der näherungsweise singular werdenden Verzerrungsverläufe am Kerbgrund auch extrem hohe Verzerrungsgradienten einstellen. Die durch Flexoelektrizität erzeugte hohe elektrische Feldstärke an den GAUSS-Punkten in den Elementen unmittelbar am Kerbgrund führt dazu, dass die lokale Iteration an den Materialpunkten divergiert und unphysikalische Ergebnisse liefert. Dies führt schlussendlich auch zu Konvergenzproblemen der globalen FE-Iteration. Mit feiner werdender Vernetzung sind somit auch immer kleinere Lastschrittweiten erforderlich, da dadurch der an Intensität zunehmende Verlauf des elektrischen Feldes umso genauer abgebildet wird und daher auch stärker ansteigt. Ein stärkerer Einfluss der Elastizität höherer Ordnung hätte zur Folge, dass diese hohen Feldintensitäten abgeschwächt werden. Diese Maßnahme wirkt sich somit sowohl auf die Sensitivität der Vernetzung als auch auf die Rechenstabilität positiv aus. Eine physikalische Rechtfertigung dieser numerischen ‚Regularisierung‘ der flexoelektrischen Theorie mittels der Wirkung der Elastizität höherer Ordnung kann jedoch aus Sicht des Autors zum derzeitigen Stand der Forschung nicht geliefert werden. Dazu wäre eine eingehende experimentelle Untersuchung des größenabhängigen elastischen Verhaltens ferroelektrischer Keramiken erforderlich.

Die diskutierte Problematik kann im Übrigen bei Kontinuumsmodellen auf der Basis Isogeometrischer Analysemethoden umgangen werden. Hier kann die Elastizität höherer Ordnung bei der Modellierung der Flexoelektrizität ohne mathematische Einschränkungen vernachlässigt werden. Der Hintergrund liegt in der

---

<sup>6</sup> Ein Wahl von  $l_c = 0$  ist keine Option, vgl. Fußnote <sup>2</sup>.

höheren Kontinuität dieser Methoden begründet. Da keine gemischte Formulierung verwendet werden muss, entfallen auch die verschwindend kleinen Hauptdiagonaleinträge in der Steifigkeitsmatrix bzgl. des Verschiebungsgradienten, die in Kombination mit den Nulleinträgen des LAGRANGE-Multiplikators zu einem singulären Gleichungssystem und damit zu den numerischen Schwierigkeiten führen.

Abschließend lassen sich die Erkenntnisse aus diesem numerischen Beispiel kompakt zusammenfassen:

- Auf Basis des hier entwickelten Modells kann rechnerisch mit einem realistischen Parametersatz in der Simulation gezeigt werden, dass durch Verzerrungsgradienten flexoelektrisch getriebene Domänenumklappvorgänge hervorgerufen werden können. Dies bietet die Möglichkeit des gezielten Einsatzes von 'strain engineering', d. h. durch Steuerung der Geometrie und der Randbedingungen Verzerrungszustände vorzugeben, um damit Polungsvorgänge des Materials durchzuführen.
- Die Bedeutung des irreversiblen Polarisationsvektors in der eingeführten Modellvariante mit Flexoelektrizität muss noch genauer untersucht werden. Dessen Komponenten sind im Wesentlichen interne Variablen, die sich modellbedingt in einer Art und Weise einstellt, um die elektrischen und mechanischen Bilanzgleichungen zu erfüllen. Inwieweit die Entwicklung des irreversiblen Polarisationsvektors mit den realen Domänenumklappprozessen auf mikrostruktureller Ebene im Material in Verbindung gebracht werden kann, ist nicht geklärt und muss durch zukünftige experimentelle und numerische Untersuchungen auf verschiedenen Skalen erforscht werden.
- Die Wahl des internen Längenparameters  $l_e$  der Elastizität höherer Ordnung erfordert eine gewisse Erfahrung des Anwenders hinsichtlich der zugrundeliegenden Problemstellung und der verwendeten Materialparameter.

## 8.4 PZT-Wafer mit flexoelektrischem Effekt

Zur Untersuchung der Wirkungsweise des indirekten flexoelektrischen Effekts wird erneut das Beispiel aus Abschn. 7.3 betrachtet. Der dort behandelte PZT-Wafer mit paralleler Elektrodenanordnung ist hierfür aufgrund der ausgeprägten elektrischen Feldüberhöhungen und damit hohen Feldgradienten an den Elektrodenkanten besonders gut geeignet. Gemäß der Phänomenologie der indirekten Flexoelektrizität ist genau in diesen Bereichen mit zusätzlichen Dehnungen im Material zu rechnen. Deren Einfluss auf das lokale und globale Verformungsverhalten des Wafers soll in diesem numerischen Beispiel näher untersucht werden.

Um die Simulation des Materialverhaltens möglichst realitätsnah durchführen zu können, werden die an ein Experiment angepassten flexoelektrischen Konstanten  $\mu_{12} = 5 \cdot 10^{-5}$  kN/MV und  $\mu_{44} = -1.1 \cdot 10^{-3}$  kN/MV aus Abschn. 8.2 verwendet. Diese wurden allerdings an das Verhalten einer anderen PZT-Keramik (PZT-5H) als die des Wafers (PIC 151) angepasst, so dass aufgrund der unterschiedlichen Materialzusammensetzung mit leicht abweichenden realen flexoelektrischen Eigenschaften zu rechnen ist. Es kann jedoch davon ausgegangen werden, dass das flexoelektrische Verhalten von PIC 151 zu Materialparametern in der gleichen Größenordnung führt. Zusätzlich wird in diesem Beispiel ein zweiter Parametersatz der flexoelektrischen Materialkonstanten betrachtet. Dabei wird der Transversaleffekt stärker gewichtet und die Konstanten zu  $\mu_{12} = 1 \cdot 10^{-3}$  kN/MV und  $\mu_{44} = -1 \cdot 10^{-3}$  kN/MV gewählt. Der interne Längenparameter wird äquivalent zu dem in Abschn. 8.3 zu  $l_e = 2 \cdot 10^{-4}$  mm angenommen. Die übrigen Parameter des makroskopischen Materialmodells für PIC 151 werden unverändert aus Kap. 7 gemäß Tab. 7.1 übernommen.

An den beiden Elektrodenkanten des Wafers ergeben sich geometriebedingt elektrische Feldgradienten mit unterschiedlichen Vorzeichen und damit entgegengesetzte Wirkungen des indirekten flexoelektrischen Effekts. Aus diesem Grund werden die Berechnungen in diesem Beispiel nicht wie zuvor in Abschn. 7.3 an einem halben Modell durchgeführt. Das vollständige FE-Modell im Bereich eines Elektrodenpaares des Wafers ist in Abb. 8.16 dargestellt. Für die flexoelektrischen

Untersuchungen in diesem Beispiel wird der Elektrodenabstand zu  $\delta = 65 \mu\text{m}$  gesetzt. Die Randbedingungen werden entsprechend der vorangegangenen Untersuchung auf das Gesamtmodell übertragen. Dabei wird für die linke Elektrode ein Nullpotential angenommen und an der rechten Elektrode das Potential zyklisch variiert. Das dabei gewählte Lastprofil muss aufgrund des nun doppelten Elektrodenabstandes mit dem Faktor zwei multipliziert werden und ergibt sich somit zu  $\phi'(t) = \{0, -195, 0, 195, 0, -195, 0, 195, 0, -195\} \text{V}$ . Das erzeugte nominelle elektrische Feld beträgt dann wieder  $E_1^{ext} = 3 \text{ kV/mm}$ . Die Lastinkrementierung bleibt unverändert. Die Diskretisierung des Wafersystems wird mit insgesamt 1610 Dreieckselementen durchgeführt. Wie bereits in Abschn. 8.3 diskutiert, können mit Dreiecken effizientere Übergänge zwischen fein- und grobvernetzten Bereichen erreicht werden.

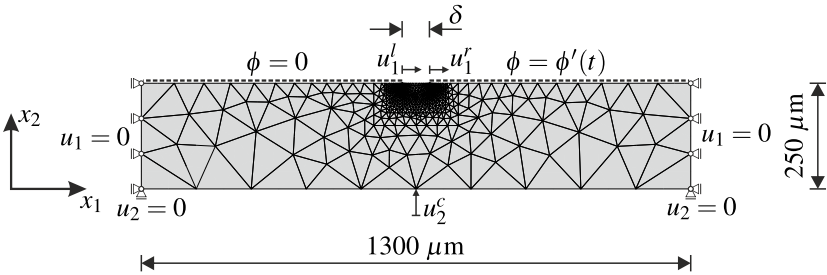
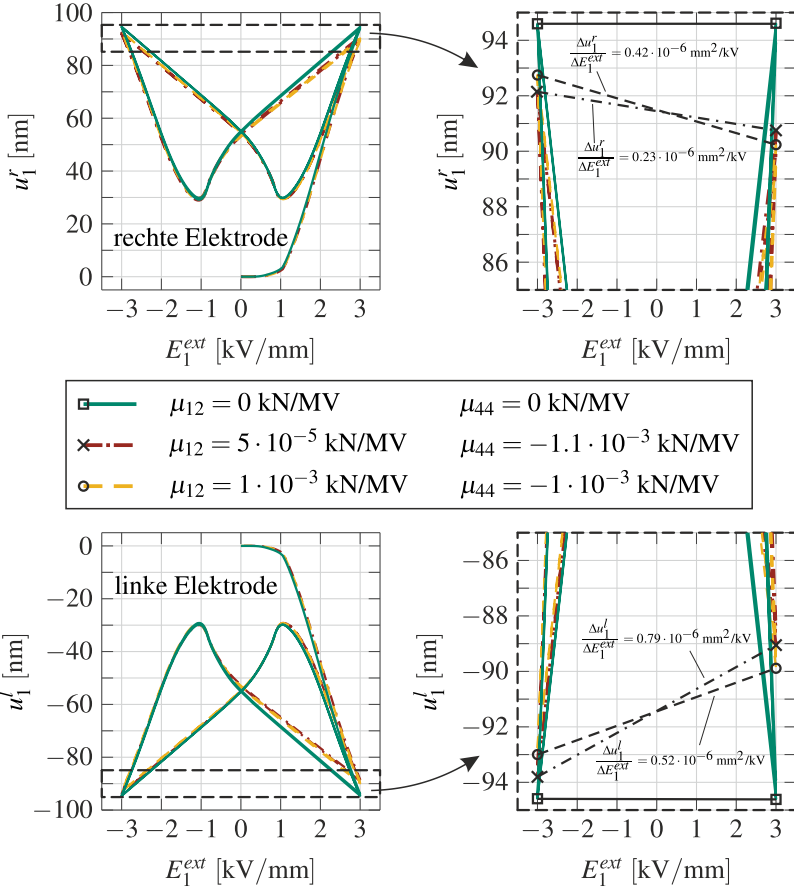


Abbildung 8.16: Gesamtmodell des PZT-Wafers aus Abschn. 7.3 mit den zugehörigen Randbedingungen.

Bei der orts aufgelösten Betrachtung der Polungsvorgänge des Wafers unter Berücksichtigung der Flexoelektrizität ergaben sich keine signifikanten Unterschiede zu dem in Abb. 7.14 beobachteten Verhalten. Die Diskussion der erhaltenen Berechnungsergebnisse konzentriert sich daher auf das an diskreten Positionen aufgezeichnete Deformationsverhalten des Wafers. Hierbei werden zunächst die horizontalen Verschiebungen der Elektrodenkanten infolge der zyklischen elektrischen Belastung analysiert. In Abb. 8.17 sind die sich zu einer Schmetterlingshysterese ergebende zyklische Modellantworten an der rechten ( $u_1^r$ ) und linken ( $u_1^l$ ) Kante dargestellt. Die Ergebnisse für die unterschiedlichen flexoelektrischen

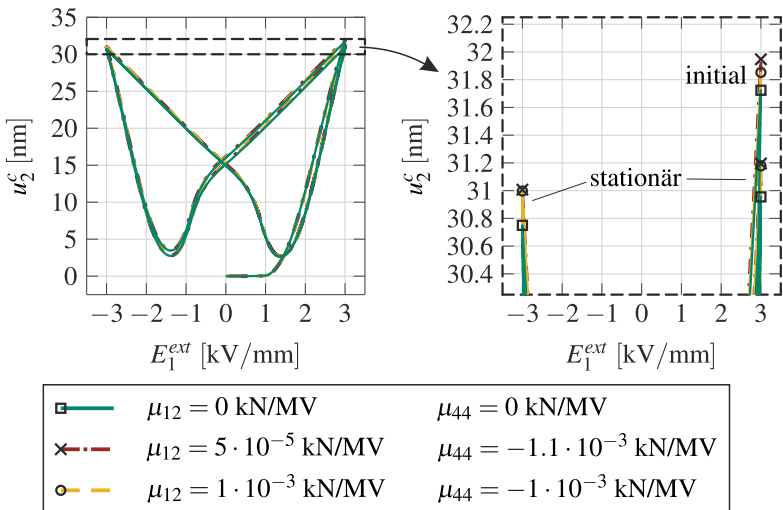
Konstanten werden miteinander verglichen, wobei diejenigen mit  $\mu_{ij} = 0$  den Kurven der rein piezo- und ferroelektrischen Modellantwort aus Abschn. 7.3 entsprechen. Der Einfluss des indirekten flexoelektrischen Effekts auf das horizontale Verformungsverhalten spiegelt sich an beiden Kanten in einer asymmetrischen Schmetterlingshysterese wider. Auffällig ist, dass die jeweils kleineren Amplituden beider Kantenverschiebungen bei einem positiven elektrischen Feld auftreten. Die insgesamt kleineren Verschiebungen bei Berücksichtigung der Flexoelektrizität können durch den Einfluss der Elastizität höherer Ordnung erklärt werden, die zu einer steiferen Modellantwort führt. Die Wirkung des indirekten flexoelektrischen Effekts kann über die Ausprägung der Asymmetrie der Hysterese charakterisiert werden. Als Maß hierfür wird das Verhältnis  $\Delta u_1 / \Delta E_1^{ext}$  eingeführt, welches bei Maximallast ausgewertet wird, vgl. auch Abb. 4.19. Je nach Wirkungsweise lässt sich ein konstruktiver oder destruktiver Einfluss der durch indirekte Flexoelektrizität erzeugten Verschiebungen auf die durch piezoelektrische und ferroelektrische Anteile dominierte Auslenkung beobachten. Beim Vergleich der beiden Hysteresen für die unterschiedlichen flexoelektrischen Parametersätze ergibt sich eine bemerkenswerte Beobachtung. Der Parametersatz mit der kleineren Transversalkonstante liefert eine größere flexoelektrische Antwort am linken Rand, während der Parametersatz mit der größeren Transversalkonstante eine größere flexoelektrische Antwort am rechten Rand ergibt. Die wahrscheinlichste Erklärung ist, dass dieses Verhalten von der ursprünglichen Polungsrichtung abhängt. Von diesem Vorgang bleiben bestimmte Effekte im ‚Materialgedächtnis‘ zurück, die unter Umständen erst nach einer Vielzahl von Polungsvorgängen abgebaut werden oder für immer bestehen bleiben. Bei der Auswertung der Ergebnisse in Abb. 8.17 wird auf einen Vergleich mit der experimentell ermittelten Schmetterlingshysterese von SEYFERT et al. [151] verzichtet, vgl. auch Abb. 7.13. Aufgrund des geringen Einflusses der Flexoelektrizität in diesem Beispiel könnte man versucht sein, zu viel in eine mögliche geringfügige Asymmetrie der experimentellen Kurve hineinzuinterpretieren. Diese könnte ebenso gut auf Messunsicherheiten zurückzuführen sein.



**Abbildung 8.17:** Horizontale Verschiebungen der rechten (oben) und linken (unten) Elektrodenkante infolge der zyklischen elektrischen Belastung des PZT-Wafers. Auf der rechten Seite ist jeweils der Bereich der maximalen Amplituden im Detail dargestellt.

Um den Einfluss der Flexoelektrizität auf das globale Verformungsverhalten des Wafers zu untersuchen, sind in Abb. 8.18 die vertikalen Verschiebungen der Unterseite dargestellt. Beim Vergleich der Schmetterlingshysteresen mit und ohne Wirkung der Flexoelektrizität sind keine signifikanten Unterschiede zu verzeich-

nen. Somit ergibt sich auch keine erkennbare Steigerung des Aktuationsvermögens des Wafers. Bei Betrachtung der Detailansicht im Bereich der maximalen Amplituden fallen jedoch die größeren erreichten Maximalwerte sowohl der initialen als auch der stationären Hysteresen mit flexoelektrischem Effekt auf. Dieser Umstand ist umso bemerkenswerter, da die Systemsteifigkeit in diesen Berechnungen durch den Einfluss der Elastizität höherer Ordnung etwas höher ist als bei der rein piezoelektrischen Betrachtung. Dies lässt auf eine mögliche Verstärkung der Verformungsantwort solcher Aktuatorssysteme durch den indirekten flexoelektrischen Effekt hoffen. Eine signifikante Steigerung ist jedoch nur bei wesentlich kleineren Bauteilabmessungen als realistisch anzusehen. Die zu beobachtende Asymmetrie der maximalen Amplituden scheint wiederum mit der initialen Polungsrichtung zusammenzuhängen, da diese auch bei der rein piezoelektrischen Modellantwort auftritt.



**Abbildung 8.18:** Vertikale Verschiebung der Unterseite des PZT-Wafers infolge der zyklischen elektrischen Belastung. Auf der rechten Seite ist der Bereich der maximalen Amplituden im Detail dargestellt.

Die Erkenntnisse aus den numerischen Untersuchungen in diesem Beispiel lassen sich kurz zusammenfassen:

- Der Einfluss des indirekten flexoelektrischen Effekts manifestiert sich in einer Asymmetrie der Schmetterlingshysterese der horizontalen Verschiebungen, die an den Elektrodenkanten aufgezeichnet werden.
- Das globale Verformungsverhalten und damit das Aktuationsvermögen des Wafers wird in den betrachteten Bauteildimensionen durch die Wirkung der Flexoelektrizität nicht signifikant gesteigert. Eine stärkere Beeinflussung bei kleineren Systemen erscheint im Bereich des Möglichen und sollte im Rahmen zukünftiger Studien weiter untersucht werden.
- Eine noch nicht ausreichend erklärbare Abhängigkeit der flexoelektrischen Modellantwort von der Richtung des elektrischen Feldes kann derzeit nur durch einen Einfluss der initialen Polungsrichtung erklärt werden. Weitere Untersuchungen mit gedrehter initialer Polungsrichtung könnte hierzu mehr Aufschluss liefern.



# 9 Zusammenfassung und Ausblick

## 9.1 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird erstmals ein makroskopisches Kontinuumsmodell vorgestellt, das neben dem für ferroelektrische Materialien charakteristischen nichtlinearen Materialverhalten auch den Effekt höherer Ordnung der Flexoelektrizität berücksichtigt. Die wesentlichen Inhalte der Arbeit, die sowohl die theoretischen Grundlagen als auch die Implementierung und praktische Anwendung dieses Modells umfassen, lassen sich wie folgt zusammenfassen: Für die Einarbeitung des flexoelektrischen Effekts in eine elektro-mechanische Kontinuumsbeschreibung auf Basis der klassischen Piezoelektrizität wird diese als Feldtheorie höherer Ordnung formuliert. Ein konvexer Energieausdruck dieser Theorie enthält neben den Verzerrungen und der dielektrischen Verschiebung auch den Verzerrungsgradiententensor als zusätzliche unabhängige Größe. Darauf aufbauend wird mit Hilfe des Konzepts der Generalisierten Standardmaterialien ein thermodynamisch konsistenter makroskopischer Modellierungsrahmen geschaffen, der zudem eine variationelle Struktur aufweist. Dieser erlaubt auch die Berücksichtigung dissipativen Materialverhaltens. Zur Beschreibung mikrostrukturell bedingter Domänenumklappvorgänge in Ferroelektrika wird ein mikroskopisch motiviertes Materialmodell präsentiert und in den zuvor eingeführten variationellen Rahmen eingebettet. Dieses ist in der Lage, die gesamte relevante Bandbreite des quasi-statischen hysteretischen Materialverhaltens ferroelektrischer Materialien abzubilden. Dazu gehören die dielektrische Hysterese, die Schmetterlingshysterese, die ferroelastische Hysterese und das mechanische Depolarisationsverhalten. Aufgrund der Einhaltung des variationellen Rahmens ergibt sich für das lokale Problem eines Materialpunktes eine Potentialstruktur und damit auch eine für

beliebige Prozesse symmetrische konsistente Materialtangente des nichtlinearen Konstitutivmodells. Um die Simulation des Materialverhaltens ganzer Bauteile zu ermöglichen, werden problemspezifische Finite-Elemente-Formulierungen präsentiert. Neben Formulierungen, die sich auf rein piezoelektrische Randwertprobleme ohne Effekte höherer Ordnung beschränken, wird auch eine gemischte flexoelektrische Elementformulierung vorgestellt. Diese ermöglicht eine passgenaue Einbindung des lokalen Problems des nichtlinearen konstitutiven Modells, welches als Minimierungsproblem auf der Basis der freien HELMHOLTZ-Energie formuliert ist.

In den behandelten numerischen Beispielen wird zunächst anhand einer reduzierten Modellversion ohne flexoelektrische Effekte gezeigt, dass alle charakteristischen Hysteresephänomene ferroelektrischer Materialien sowie das Materialverhalten in einem Polarisations-Rotationstest korrekt abgebildet werden können. Anhand eines anwendungsbezogenen Beispiel eines PZT-Wafers wird neben der Reproduzierbarkeit des experimentell erfassten globalen Verformungsverhaltens auch die Fähigkeit des Modells gezeigt, tiefe Einblicke in das Umpolverhalten solcher Modellsysteme zu gewähren. Im Zuge der numerischen Untersuchungen unter Berücksichtigung des flexoelektrischen Effekts werden zunächst die Parameter des nichtlinearen Materialmodells an das gemessene direkte flexoelektrische Verhalten der Piezokeramik PZT-5H in einem 4-Punkt-Biegeversuch angepasst. Mit diesem angepassten Parametersatz wird dann eine gekerbte Scheibe unter Zugbelastung berechnet. Aufgrund der stark ausgeprägten Verzerrungsgradienten im Bereich des Kerbgrundes können in der Modellantwort Domänenumklappprozesse und damit eine Polung des Materials beobachtet werden. Dies ist auf die Wirkung des direkten flexoelektrischen Effekts zurückzuführen. Um die Wirkungsweise des indirekten flexoelektrischen Effekts zu untersuchen, wird erneut das zyklische Polarisationsverhalten des zuvor untersuchten PZT-Wafers betrachtet. Infolge der Flexoelektrizität ist ein signifikanter Einfluss auf das lokale Verformungsverhalten der Oberfläche zwischen den Elektroden zu beobachten. Eine technische Nutzung der teilweise verstärkenden Wirkung der Flexoelektrizität auf das globale Deformationsverhalten und damit das Aktuationspotential des Wafers erscheint zumindest für kleinere Bauteildimensionen möglich.

## 9.2 Ausblick

Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Modellierungswerkzeug bietet viele Möglichkeiten und Chancen, tiefere Einblicke in das flexoelektrisch beeinflusste Verhalten ferroelektrischer Keramiken zu gewinnen. Nach den ersten ‚Gehversuchen‘ mit dem Modell ergeben sich jedoch bereits einige offene Fragen. Deren vollständige Beantwortung durch eine vertiefte Analyse der Modellantworten und einen Vergleich mit noch nicht vorliegenden experimentellen Ergebnissen ist jedoch Aufgabe zukünftiger Forschungsaktivitäten. Im Folgenden sollen mögliche Fragestellungen und damit Ansatzpunkte für weitere Untersuchungen aufgezeigt werden:

- Die Rolle der makroskopischen irreversiblen Polarisierung, die sich direkt aus der inneren Variablen des relativen Polarisationsvektors ergibt, ist in der vorgestellten Modellvariante nicht ganz klar. Im vollständig entlasteten Zustand kann infolge permanenter Verzerrungsgradienten die Wirkung eines permanenten flexoelektrischen Effekts zusätzlich einen wesentlichen Beitrag zur remanent im Material gespeicherten Polarisierung leisten. Eine mögliche physikalisch motivierte Zuordnung dieser Anteile könnte wie folgt aussehen: Der irreversible Polarisationsvektor stellt die resultierende Polarisierung des Materials infolge von Domänenumklappprozesse dar. Dem überlagert sich ein Polarisationsanteil aus flexoelektrischer Wirkung infolge eines dem Kristallgitter aufgeprägten remanenten Verzerrungsgradienten. Die Gültigkeit dieser Interpretation muss durch weitere Untersuchungen in der Zukunft überprüft werden.
- Bei der Modellierung der Flexoelektrizität ist der Einfluss der Elastizität höherer Ordnung näher zu untersuchen. Dieser Effekt, der hier eher aus numerischen Gründen berücksichtigt wurde, kann einen erheblichen Einfluss auf die flexoelektrische Modellantwort haben. Der interne Längenparameter kann daher auch eine unter Umständen hilfreiche Stellschraube des Modells sein, um den zunehmenden Einfluss der Flexoelektrizität mit abnehmender Dimension des betrachteten Bauteils zu berücksichtigen. Seine Rolle bei

der Kontinuumsmodellierung der Flexoelektrizität muss durch eingehende experimentelle Untersuchungen an verschiedenen Bauteilabmessungen geklärt werden.

Neben den angesprochenen Themen gibt es eine Vielzahl alternativer Möglichkeiten zur Weiterentwicklung des Modells. So wäre z. B. bei der Behandlung des globalen Randwertproblems eine Abkehr von der klassischen Finite-Elemente-Methode denkbar. Die Einbindung des nichtlinearen Konstitutivmodells in ein alternatives Diskretisierungsverfahren, das a priori die höheren Stetigkeitsanforderungen erfüllt, wäre ohne weiteren Aufwand möglich. Hierfür bietet sich die Isogeometrische Analyseverfahren aufgrund des mit der FEM identischen algorithmischen Berechnungsablaufs an. Im Zuge dessen wäre auch eine einfachere Isolierung der Effekte von Flexoelektrizität und Elastizität höherer Ordnung möglich. Bei besserer experimenteller Datenlage könnten dies für die Suche nach einer maßgeschneiderten Modellvariante genutzt werden.

Abschließend bleibt festzuhalten, dass ohne breit angelegte experimentelle Untersuchungen zum Einfluss der Flexoelektrizität auf das nichtlineare Materialverhalten ferroelektrischer Keramiken Modellansätze zwar Vorhersagen liefern, diese aber nicht validiert werden können. Daher wird es die Aufgabe der Wissenschaft in den nächsten Jahren sein, im wechselseitigen Zusammenspiel von Experiment und Simulation zu einem tieferen Verständnis des komplexen Phänomens der Flexoelektrizität zu gelangen. Dabei kann z. B. auch das rasant wachsende Feld der Materialmodellierung mit künstlichen neuronalen Netzen eine entscheidende Rolle spielen, siehe z. B. [237, 238]. Der Weg hin zu einer technischen Nutzung des flexoelektrischen Effekts, wie z. B. die Konstruktion von temperaturunabhängig arbeitenden Aktuatoren, erscheint noch sehr weit. Mit dieser Arbeit wird jedoch ein weiterer Anstoß gegeben, Anstrengungen in dieses zukunftsorientierte Forschungsthema zu investieren. Das große Potential wird durch einige innovative Ideen aus der Literatur, wie z. B. die eines flexoelektrischen Motors von BASKARAN et al. [239], deutlich. Ob diese in die Praxis umgesetzt werden können, wird die Zukunft zeigen.

# Symbolverzeichnis

Symbole: Tensornotation, Indexnotation, ggfs. Vektor-Matrix-Notation

## Tensoren 6. Stufe

Symbol	Bezeichnung	eingeführt in Gl.
$\mathbb{G}, G_{ijklmn}, \mathbf{G}$	Elastizitätstensor höherer Ordnung	(2.65)
$\mathbb{G}^D, G_{ijklmn}^D, \mathbf{G}^D$	Elast.-Tensor h. Ord. bei konst. dielekt. Versch.	(2.125)
$\mathbb{G}^E, G_{ijklmn}^E, \mathbf{G}^E$	Elast.-Tensor h. Ord. bei konst. elektr. Feld	(2.118)

## Tensoren 5. Stufe

Symbol	Bezeichnung	eingeführt in Gl.
$\mathbb{b}, b_{ijklm}, \mathbf{b}$	Verzerrungskopplungstensor	(2.124)

## Tensoren 4. Stufe

Symbol	Bezeichnung	eingeführt in Gl.
$\mathbb{C}, C_{ijkl}, \mathbf{C}$	Elastizitätstensor	(2.59)
$\mathbb{C}^D, C_{ijkl}^D, \mathbf{C}^D$	Elastizitätstensor bei konst. dielekt. Verschiebung	(2.114)
$\mathbb{C}^E, C_{ijkl}^E, \mathbf{C}^E$	Elastizitätstensor bei konst. elektr. Feld	(2.107)
$\mathbb{f}, f_{lijk}, \mathbf{f}$	flexoelektrischer Kopplungstensor	(2.124)
$\mathbb{I}, I_{ijkl}$	symmetrischer Einheitstensor 4. Stufe	(2.60)
$\mathbb{m}, m_{lijk}, \mathbf{m}$	flexoelektrischer Tensor	(2.80)

$\mathbb{P}^{Dev}, P_{ijkl}^{Dev}$  deviatorischer Projektionstensor 4. Stufe (5.12)

### Tensoren 3. Stufe

<b>Symbol</b>	<b>Bezeichnung</b>	<b>eingeführt in Gl.</b>
$d, d_{kij}, \mathbf{d}$	piezoelektrischer d-Tensor	(2.76)
$e, e_{kij}, \mathbf{e}$	piezoelektrischer e-Tensor	(2.110)
$h, h_{kij}, \mathbf{h}$	piezoelektrischer h-Tensor	(2.114)
$\boldsymbol{\eta}, \eta_{ijk}, \boldsymbol{\eta}$	infinitesimaler Verzerrungsgradiententensor	(2.13)
$\boldsymbol{\tau}, \tau_{ijk}, \boldsymbol{\tau}$	Spannungstensor höherer Ordnung	(2.21)

### Tensoren 2. Stufe

<b>Symbol</b>	<b>Bezeichnung</b>	<b>eingeführt in Gl.</b>
$A, H_{ij}, \mathbf{A}$	Texturtensor	(5.2)
$\boldsymbol{\beta}^e, \beta_{ij}^e, \boldsymbol{\beta}^e$	Impermitivitätstensor bei konst. Verzerrung	(2.114)
$E, E_{ij}$	GREEN-LAGRANGE'scher Verzerrungstensor	(2.7)
$\boldsymbol{\varepsilon}, \varepsilon_{ij}, \boldsymbol{\varepsilon}$	infinitesimaler Verzerrungstensor	(2.12)
$\boldsymbol{\varepsilon}^i, \varepsilon_{ij}^i, \boldsymbol{\varepsilon}^i$	irreversibler Verzerrungstensor	(5.10)
$\boldsymbol{\varepsilon}, \varepsilon_{ij}, \boldsymbol{\varepsilon}$	Permitivitätstensor	(2.74)
$\boldsymbol{\varepsilon}^e, \varepsilon_{ij}^e, \boldsymbol{\varepsilon}^e$	Permitivitätstensor bei konst. Verzerrung	(2.111)
$\boldsymbol{\varepsilon}^\sigma, \varepsilon_{ij}^\sigma, \boldsymbol{\varepsilon}^\sigma$	Permitivitätstensor bei konst. mech. Spannung	(2.107)
$F, F_{ij}$	Deformationsgradiententensor	(2.4)
$\mathbf{f}^A, f_{ij}^A, \mathbf{f}^A$	dissipative innere Triebkraft bzgl. Texturtensor	(5.9)
$H, H_{ij}, \mathbf{H}$	Verschiebungsgradiententensor	(2.8)
$I, \delta_{ij}$	Einheitstensor 2. Stufe	(2.7)
$K, K_{ij}$	Krümmungstensor	(2.11)
$\boldsymbol{\kappa}, \kappa_{ij}, \boldsymbol{\kappa}$	Suszeptibilitätstensor	(2.72)
$\boldsymbol{\sigma}, \sigma_{ij}, \boldsymbol{\sigma}$	CAUCHY-Spannungst. / Spannungst. erster Ord.	(2.16)/(2.21)

$\Sigma, \Sigma_{ij}$	Oberflächenspannungstensor	(2.24)
$T, T_{ij}$	totaler Spannungstensor	(2.24)

## Vektoren

Symbol	Bezeichnung	eingeführt in Gl.
$\vec{b}_{ext}, \mathbf{b}_{ext}$	externer volumenbezogener Kraftvektor	(2.17)
$\vec{c}$	c-Achsenvektor	(5.1)
$\vec{c}_{ext}$	externer spezifischer Linienlastvektor an Kanten	(2.32)
$\vec{D}, \mathbf{D}$	dielektrischer Verschiebungsvektor	(2.54)
$\vec{d}$	Abstandsvektor	(2.47)
$\vec{E}, \mathbf{E}$	elektrischer Feldvektor	(2.41)
$\vec{e}_i^A$	i-ter Eigenvektor des Texturtensors	(5.3)
$\vec{F}$	Kraftvektor	(2.15)
$\vec{f}^p, \mathbf{f}^p$	dissipative innere Triebkraft bzgl. rel. Polarisationsvektor	(5.9)
$\vec{m}^{DP}$	Drehmoment auf einen Dipol	(2.48)
$\vec{N} / \vec{n}$	Oberflächennormale in Referenz- bzw. Momentankonf.	(2.6)
$\vec{\nabla}$	Nabla-Operator	(2.4)
$\vec{p}$	Dipolmoment	(2.47)
$\vec{P}$	Polarisationsvektor	(2.49)
$\vec{P}^i, \mathbf{P}^i$	irreversibler Polarisationsvektor	(5.10)
$\vec{q}$	Wärmeflussvektor	(2.90)
$\vec{r}_{ext}$	externer Oberflächenmomentenspannungsvektor	(2.32)
$\vec{\rho}, \boldsymbol{\rho}$	relativer Polarisationsvektor	(5.8)
$\vec{t}_{ext}, \mathbf{t}_{ext}$	externer Spannungsvektor	(2.15)
$\vec{u}, \mathbf{u}$	Verschiebungsvektor	(2.2)
$\vec{X} / \vec{x}$	materielle / räumliche Koordinate eines Punktes	(2.1)
$\vec{\chi}$	Bewegung eines Punktes	(2.1)

**Skalare**

<b>Symbol</b>	<b>Bezeichnung</b>	<b>eingeführt in Gl.</b>
$A$	Fläche	(2.6)
$\alpha_i$	i-ter Eigenwert des Texturtensors	(5.3)
$a_A, m_A$	Energiebarrierenparameter des Texturtensors	(5.24)
$a_\rho, m_\rho$	Energiebarrierenparameter d. rel. Polarisationsvektors	(5.26)
$c_A, c_\rho$	kinematische Verfestigungsparameter	(5.23)
$d_{33}, d_{31}, d_{15}$	piezoelektrische Materialkonstanten	(4.1)
$\mathcal{D}$	Dissipation	(3.1)
$e$	spezifische innere Energiedichte	(2.89)
$\epsilon_0$	elektrische Feldkonstante im Vakuum	(2.40)
$\epsilon^{sat}$	makroskop. Sättigungsdehnung	(5.12)
$E^c$	elektrisches Koerzitivfeld	(5.22)
$\hat{F}$	Orientierungsverteilungsfunktion (ODF)	(5.2)
$f$	Umklappkriterium	(3.12)
$f_c$	kritischer Wert des Umklappkriteriums	(3.12)
$f_c^A, f_c^P$	kritische Werte der dissipativen inneren Triebkräfte	(5.22)
$G_2$	elektrische GIBBS-Energie	(2.99)
$G$	freie GIBBS-Energie	(2.103)
$\gamma$	algorithmische Form des LAGRANGE-Multiplikator	(5.27)
$\eta$	Distanzvariable	(5.25)
$\theta$	absolute Temperatur	(2.91)
$\vartheta, \varphi$	EULER-Winkel	(5.1)
$k_n^F$	Normierungsfaktor ODF	(5.2)
$\kappa$	dielektrische Suszeptibilität	(2.50)
$l_e$	interner Längenparameter	(2.67)
$\lambda$	LAGRANGE-Multiplikator	(3.12)



$\Lambda, \mu$	LAMÉ-Konstanten	(2.60)
$\mu_{12}, \mu_{44}$	flexoelektrische Materialkonstanten	(2.83)
$\nu$	Querkontraktionszahl	(2.61)
$\xi$	Distanzvariablenparameter	(5.25)
$P^{sat}$	makroskop. Sättigungspolarisation	(5.11)
$\mathcal{P}$	Leistung	(2.21)
$\Pi / \pi$	Potential	(2.22)
$r$	Wärmezufuhr	(2.90)
$\rho$	Materialdichte	(2.90)
$\rho^f$	elektrische Fremdladungen	(2.55)
$s$	Entropie	(2.91)
$S$	Kante	(2.30)
$\sigma^c$	Koerzitivspannung	(5.22)
$t$	Zeit	(2.1)
$\phi$	elektrostatische Potential	(2.42)
$\Phi$	Dissipationspotential	(3.4)
$q$	elektrische Ladung	(2.40)
$V$	Volumen	(2.6)
$W$	reduziertes inkrementelles internes Arbeitspotential	(3.21)
$Y$	Elastizitätsmodul	(2.61)
$\psi$	freie HELMHOLTZ-Energiedichte	(2.93)
$\Psi$	freie HELMHOLTZ-Energie	(2.95)

### Sonstige Symbole

Symbol	Bezeichnung	eingeführt in Gl.
$\mathbb{C}_T, \mathbf{C}_T$	Materialtangenten	(3.24)/(5.41)
$\mathbf{f}^d, \mathbf{f}^l$	Gesamtheit der dissipativen inneren Triebkräfte	(3.11)/(5.28)

$H^1, H^2$	SOBOLEV-Funktionsräume	(6.9)
$L^2$	LEBESGUE-Funktionsraum	(6.10)
$\mathfrak{q}, \mathbf{q}$	Gesamtheit der inneren Zustandsvariablen	(3.2)/(5.28)

# Literaturverzeichnis

- [1] QI, Y. ; JAFFERIS, N. T. ; LYONS JR, K. ; LEE, C. M. ; AHMAD, H. ; MCALPINE, M. C.: Piezoelectric ribbons printed onto rubber for flexible energy conversion. In: *Nano Letters* 10 (2010), Nr. 2, S. 524–528
- [2] VASQUEZ-SANCHO, F. ; ABDOLLAHI, A. ; DAMJANOVIC, D. ; CATALAN, G.: Flexoelectricity in bones. In: *Advanced Materials* 30 (2018), Nr. 9, S. 1705316–1–5
- [3] WITT, C. ; KAISER, T. ; MENZEL, A.: Modelling and numerical simulation of remodelling processes in cortical bone: An IGA approach to flexoelectricity-induced osteocyte apoptosis and subsequent bone cell diffusion. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 173 (2023), S. 105194–1–33
- [4] BURSIAAN, E. V. ; ZAIKOVSKII, O. I. ; MAKAROV, K. V.: Ferroelectric plate polarization by bending. In: *Izvestiya Akademii Nauk SSSR Seriya Fizicheskaya* 33 (1969), Nr. 7, S. 1098–102
- [5] GRUVERMAN, A. ; RODRIGUEZ, B. J. ; KINGON, A. I. ; NEMANICH, R. J. ; TAGANTSEV, A. K. ; CROSS, J. S. ; TSUKADA, M.: Mechanical stress effect on imprint behavior of integrated ferroelectric capacitors. In: *Applied Physics Letters* 83 (2003), Nr. 4, S. 728–730
- [6] LU, H. ; BARK, C. W. ; ESQUE DE LOS OJOS, D. ; ALCALA, J. ; EOM, C. B. ; CATALAN, G. ; GRUVERMAN, A.: Mechanical writing of ferroelectric polarization. In: *Science* 336 (2012), Nr. 6077, S. 59–61
- [7] LIU, C. ; WANG, J. ; XU, G. ; KAMLAH, M. ; ZHANG, T. Y.: An

- isogeometric approach to flexoelectric effect in ferroelectric materials. In: *International Journal of Solids and Structures* 162 (2019), S. 198–210
- [8] MCMEEKING, R. M. ; LANDIS, C. M.: A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycrystalline ferroelectric ceramics. In: *International Journal of Engineering Science* 40 (2002), Nr. 14, S. 1553–1577
- [9] LANDIS, C. M.: Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50 (2002), Nr. 1, S. 127–152
- [10] KAMLAH, M. ; BÖHLE, U.: Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior. In: *International Journal of Solids and Structures* 38 (2001), Nr. 4, S. 605–633
- [11] SCHWAAB, H. ; GRÜNBICHLER, H. ; SUPANCIC, P. ; KAMLAH, M.: Macroscopical non-linear material model for ferroelectric materials inside a hybrid finite element formulation. In: *International Journal of Solids and Structures* 49 (2012), Nr. 3-4, S. 457–469
- [12] KLINKEL, S.: A phenomenological constitutive model for ferroelastic and ferroelectric hysteresis effects in ferroelectric ceramics. In: *International Journal of Solids and Structures* 43 (2006), Nr. 22-23, S. 7197–7222
- [13] LINNEMANN, K. ; KLINKEL, S. ; WAGNER, W.: A constitutive model for magnetostrictive and piezoelectric materials. In: *International Journal of Solids and Structures* 46 (2009), Nr. 5, S. 1149–1166
- [14] SCHRÖDER, J. ; ROMANOWSKI, H.: A thermodynamically consistent mesoscopic model for transversely isotropic ferroelectric ceramics in a coordinate-invariant setting. In: *Archive of Applied Mechanics* 74 (2005), S. 863–877
- [15] MIEHE, C. ; ROSATO, D.: A rate-dependent incremental variational formulation of ferroelectricity. In: *International Journal of Engineering Science* 49 (2011), Nr. 6, S. 466–496

- [16] ELHADROUZ, M. ; ZINEB, T. B. ; PATOOR, E.: Constitutive law for ferroelastic and ferroelectric piezoceramics. In: *Journal of Intelligent Material Systems and Structures* 16 (2005), Nr. 3, S. 221–236
- [17] ELHADROUZ, M. ; ZINEB, T. B. ; PATOOR, E.: Finite element analysis of a multilayer piezoelectric actuator taking into account the ferroelectric and ferroelastic behaviors. In: *International Journal of Engineering Science* 44 (2006), Nr. 15-16, S. 996–1006
- [18] ZOUARI, W. ; ZINEB, T. B. ; BENJEDDOU, A.: A ferroelectric and ferroelastic 3D hexahedral curvilinear finite element. In: *International Journal of Solids and Structures* 48 (2011), Nr. 1, S. 87–109
- [19] MANIPRAKASH, S. ; AROCKIARAJAN, A. ; MENZEL, A.: A multi-surface model for ferroelectric ceramics-application to cyclic electric loading with changing maximum amplitude. In: *Philosophical Magazine* 96 (2016), Nr. 13, S. 1263–1284
- [20] MANIPRAKASH, S. ; JAYENDIRAN, R. ; MENZEL, A. ; AROCKIARAJAN, A.: Experimental investigation, modelling and simulation of rate-dependent response of 1-3 ferroelectric composites. In: *Mechanics of Materials* 94 (2016), S. 91–105
- [21] SUBRAMANIAN, M.: *Phenomenological modelling and simulation of ferroelectric ceramics*. TU Dortmund : Dissertation, 2016
- [22] KAMLAH, M. ; JIANG, Q.: A constitutive model for ferroelectric PZT ceramics under uniaxial loading. In: *Smart Materials and Structures* 8 (1999), Nr. 4, S. 441–459
- [23] KAMLAH, M. ; WANG, Z.: A thermodynamically and microscopically motivated constitutive model for piezoceramics. In: *Computational Materials Science* 28 (2003), Nr. 3-4, S. 409–418
- [24] MEHLING, V. ; TSAKMAKIS, C. ; GROSS, D.: Phenomenological model for the macroscopical material behavior of ferroelectric ceramics. In:

- Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 55 (2007), Nr. 10, S. 2106–2141
- [25] SUTTER, F. ; KAMLAH, M.: Variational free energy based macroscopical modeling of ferroelectroelasticity. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 178 (2023), S. 105341–1–34
- [26] STARK, S. ; NEUMEISTER, P. ; BALKE, H.: A hybrid phenomenological model for ferroelectroelastic ceramics. Part I: Single phased materials. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 95 (2016), S. 774–804
- [27] STARK, S. ; NEUMEISTER, P. ; BALKE, H.: A hybrid phenomenological model for ferroelectroelastic ceramics. Part II: Morphotropic PZT ceramics. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 95 (2016), S. 805–826
- [28] IDIART, M. I. ; BOTTERO, C. J.: A phenomenological constitutive theory for polycrystalline ferroelectric ceramics based on orientation distribution functions. In: *European Journal of Mechanics - A/Solids* 82 (2020), S. 103982–1–14
- [29] HALPHEN, B. ; NGUYEN, Q. S.: Sur les Matériaux Standards Généralisés. In: *Journal de Mécanique* 14 (1975), Nr. 1, S. 39–63
- [30] MIEHE, C. ; ROSATO, D. ; KIEFER, B.: Variational principles in dissipative electro-magneto-mechanics: A framework for the macro-modeling of functional materials. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 86 (2011), Nr. 10, S. 1225–1276
- [31] MIELKE, A. ; TIMOFTE, A. M.: An energetic material model for time-dependent ferroelectric behaviour: Existence and uniqueness. In: *Mathematical Methods in the Applied Sciences* 29 (2006), Nr. 12, S. 1393–1410
- [32] PECHSTEIN, A. S. ; MEINDLHUMER, M. ; HUMER, A.: The polarization process of ferroelectric materials in the framework of variational inequalities. In: *ZAMM – Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 100 (2020), Nr. 6, S. e201900329–1–18

- [33] PECHSTEIN, A. S. ; MEINDLHUMER, M. ; HUMER, A.: High-order mixed finite elements for an energy-based model of the polarization process in ferroelectric materials. In: *Journal of Intelligent Material Systems and Structures* 32 (2021), Nr. 3, S. 355–368
- [34] MEINDLHUMER, M. ; PECHSTEIN, A. ; HUMER, A.: Variational inequalities for ferroelectric constitutive modeling. In: *Journal of Intelligent Material Systems and Structures* 32 (2021), Nr. 3, S. 317–330
- [35] MASHKEVICH, V. S. ; TOLPYGO, K. B.: Electrical, optical and elastic properties of diamond type crystals. In: *Soviet Physics – JETP* 5 (1957), Nr. 3, S. 435–439
- [36] TOLPYGO, K. B.: Long wavelength oscillations of diamond-type crystals including long range forces. In: *Soviet Physics – Solid State* 4 (1963), Nr. 7, S. 1297–1305
- [37] KOGAN, S. M.: Piezoelectric effect during inhomogeneous deformation and acoustic scattering of carriers in crystals. In: *Soviet Physics – Solid state* 5 (1964), Nr. 10, S. 2069–2070
- [38] INDENBOM, V. L. ; LOGINOV, E. B. ; OSIPOV, M. A.: Flexoelectric effect and crystal-structure. In: *Kristallografiya* 26 (1981), Nr. 6, S. 1157–1162
- [39] YUDIN, P. V. ; TAGANTSEV, A. K.: Fundamentals of flexoelectricity in solids. In: *Nanotechnology* 24 (2013), Nr. 43, S. 1–36
- [40] MINDLIN, R. D. ; ESHEL, N. N.: On first strain-gradient theories in linear elasticity. In: *International Journal of Solids and Structures* 4 (1968), Nr. 1, S. 109–124
- [41] MINDLIN, R. D.: Polarization gradient in elastic dielectrics. In: *International Journal of Solids and Structures* 4 (1968), Nr. 6, S. 637–642
- [42] SAHIN, E. ; DOST, S.: A strain-gradients theory of elastic dielectrics with spatial dispersion. In: *International Journal of Engineering Science* 26 (1988), Nr. 12, S. 1231–1245

- [43] MARANGANTI, R. ; SHARMA, N. D. ; SHARMA, P.: Electromechanical coupling in nonpiezoelectric materials due to nanoscale nonlocal size effects: Green's function solutions and embedded inclusions. In: *Physical Review B* 74 (2006), Nr. 1, S. 014110–1–14
- [44] SHARMA, N. D. ; LANDIS, C. M. ; SHARMA, P.: Piezoelectric thin-film superlattices without using piezoelectric materials. In: *Journal of Applied Physics* 108 (2010), Nr. 2, S. 024304–1–9
- [45] HADJESFANDIARI, A. R.: Size-dependent piezoelectricity. In: *International Journal of Solids and Structures* 50 (2013), Nr. 18, S. 2781–2791
- [46] DARRALL, B. T. ; HADJESFANDIARI, A. R. ; DARGUSH, G. F.: Size-dependent piezoelectricity: A 2D finite element formulation for electric field-mean curvature coupling in dielectrics. In: *European Journal of Mechanics - A/Solids* 49 (2015), S. 308–320
- [47] POYA, R. ; GIL, A. J. ; ORTIGOSA, R. ; PALMA, R.: On a family of numerical models for couple stress based flexoelectricity for continua and beams. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 125 (2019), S. 613–652
- [48] THAI, T. Q. ; ZHUANG, X. ; RABCZUK, T.: An electro-mechanical dynamic model for flexoelectric energy harvesters. In: *Nonlinear Dynamics* 111 (2023), Nr. 3, S. 2183–2202
- [49] MCBRIDE, A. T. ; DAVYDOV, D. ; STEINMANN, P.: Modelling the flexoelectric effect in solids: A micromorphic approach. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 371 (2020), S. 113320–1–19
- [50] ORTIGOSA, R. ; MARTÍNEZ-FRUTOS, J. ; GIL, A. J.: A computational framework for topology optimisation of flexoelectricity at finite strains considering a multi-field micromorphic approach. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 401 (2022), S. 115604–1–34



- [51] ZHUANG, X. ; NGUYEN, B. H. ; NANTHAKUMAR, S. S. ; TRAN, T. Q. ; ALAJLAN, N. ; RABCZUK, T.: Computational Modeling of Flexoelectricity – A Review. In: *Energies* 13 (2020), Nr. 6, S. 1326–1–30
- [52] CODONY, D. ; MOCCI, A. ; BARCELÓ-MERCADER, J. ; ARIAS, I.: Mathematical and computational modeling of flexoelectricity. In: *Journal of Applied Physics* 130 (2013), S. 231102–1–30
- [53] CODONY, D.: *Mathematical and computational modeling of flexoelectricity at mesoscopic and atomistic scales*. Universitat Politècnica de Catalunya : Doctoral Thesis, 2021
- [54] ABDOLLAHI, A. ; PECO, C. ; MILLAN, D. ; ARROYO, M. ; ARIAS, I.: Computational evaluation of the flexoelectric effect in dielectric solids. In: *Journal of Applied Physics* 116 (2014), Nr. 9, S. 093502–1–10
- [55] ZHUANG, X. ; NANTHAKUMAR, S. S. ; RABCZUK, T.: A meshfree formulation for large deformation analysis of flexoelectric structures accounting for the surface effects. In: *Engineering Analysis with Boundary Elements* 120 (2020), S. 153–165
- [56] DENG, F. ; DENG, Q. ; YU, W. ; SHEN, S.: Mixed finite elements for flexoelectric solids. In: *Journal of Applied Mechanics* 84 (2017), Nr. 8, S. 081004–1–12
- [57] DENG, F. ; DENG, Q. ; SHEN, S.: A three-dimensional mixed finite element for flexoelectricity. In: *Journal of Applied Mechanics* 85 (2017), Nr. 3, S. 031009–1–10
- [58] DENG, F. ; YU, W. ; LIANG, X. ; SHEN, S.: A mixed finite element method for large deformation of flexoelectric materials. In: *Applied Mathematical Modelling* 118 (2023), S. 303–321
- [59] DENG, F. ; YU, W. ; LIANG, X. ; SHEN, S.: The existence and uniqueness theorem for linear flexoelectricity and application to the Galerkin approximation. In: *Mathematics and Mechanics of Solids* 10812865231164330 (2023)

- [60] MAO, S. ; PUROHIT, P. K. ; ARAVAS, N.: Mixed finite-element formulations in piezoelectricity and flexoelectricity. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 472 (2016), Nr. 2190, S. 20150879–1–19
- [61] TIAN, X. ; SLADEK, J. ; SLADEK, V. ; DENG, Q. ; LI, Q.: A collocation mixed finite element method for the analysis of flexoelectric solids. In: *International Journal of Solids and Structures* 217-218 (2021), S. 27–39
- [62] TANNHÄUSER, K. ; SERRAO, P. H. ; KOZINOV, S.: Second-Order Collocation-Based Mixed FEM for Flexoelectric Solids. In: *Solids* 4 (2023), S. 39–70
- [63] VENTURA, J. ; CODONY, D. ; FERNÁNDEZ-MÉNDEZ, S.: A C0 interior penalty finite element method for flexoelectricity. In: *Journal of Scientific Computing* 88 (2021), Nr. 88, S. 1–24
- [64] BALCELLS-QUINTANA, O. ; CODONY, D. ; FERNÁNDEZ-MÉNDEZ, S.: C0-IPM with generalised periodicity and application to flexoelectricity-based 2D metamaterials. In: *Journal of Scientific Computing* 92 (2022), Nr. 5, S. 1–29
- [65] GHASEMI, H. ; PARK, H. S. ; RABCZUK, T.: A level-set based IGA formulation for topology optimization of flexoelectric materials. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 313 (2017), S. 239–258
- [66] THAI, T. Q. ; RABCZUK, T. ; ZHUANG, X.: A large deformation isogeometric approach for flexoelectricity and soft materials. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 341 (2018), S. 718–739
- [67] NGUYEN, B. H. ; ZHUANG, X. ; RABCZUK, T.: Numerical model for the characterization of Maxwell-Wagner relaxation in piezoelectric and flexoelectric composite material. In: *Computers & Structures* 208 (2018), S. 75–91

- [68] NGUYEN, B. H. ; ZHUANG, X. ; RABCZUK, T.: NURBS-based formulation for nonlinear electro-gradient elasticity in semiconductors. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 346 (2019), S. 1074–1095
- [69] CODONY, D. ; MARCO, O. ; FERNÁNDEZ-MÉNDEZ, S. ; ARIAS, I.: An immersed boundary hierarchical B-spline method for flexoelectricity. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 354 (2019), S. 750–782
- [70] YVONNET, J. ; LIU, L. P.: A numerical framework for modeling flexoelectricity and Maxwell stress in soft dielectrics at finite strains. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 313 (2017), S. 450–482
- [71] CODONY, D. ; GUPTA, P. ; MARCO, O. ; ARIAS, I.: Modeling flexoelectricity in soft dielectrics at finite deformation. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 146 (2021), Nr. 104182
- [72] SLADEK, J. ; SLADEK, V. ; TIAN, X. ; DENG, Q.: Mixed FEM for flexoelectric effect analyses in a viscoelastic material. In: *International Journal of Solids and Structures* 234-235 (2022), S. 111269–1–13
- [73] SHARMA, S. ; KUMAR, R. ; TALHA, M. ; VAISH, R.: Flexoelectric poling of functionally graded ferroelectric materials. In: *Advanced Theory and Simulations* 4 (2021), S. 2000158–1–12
- [74] HOLZAPFEL, G. A.: *Nonlinear Solid Mechanics: A Continuum Approach for Engineering*. Chichester [u. a.] : John Wiley & Sons, Ltd., 2000
- [75] STEIN, E. ; BARTHOLD, F.-J.: *Elastizitätstheorie, In: G. Mehlhorn (Hrsg.): Der Ingenieurbau, Grundwissen: Werkstoffe*. Berlin : Ernst & Sohn, 1996. – 165–428 S.
- [76] ALTENBACH, H.: *Kontinuumsmechanik*. 2. Berlin [u. a.] : Springer, 2012

- [77] PARISCH, H.: *Festkörper-Kontinuumsmechanik*. Wiesbaden : Vieweg+Teubner Verlag, 2003
- [78] TRUESDELL, C. ; NOLL, W.: *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. 3. Berlin [u. a.] : Springer, 2004
- [79] TOUPIN, R. A.: Elastic materials with couple-stresses. In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 11 (1962), Nr. 1, S. 385–414
- [80] MINDLIN, R. D.: Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity. In: *International Journal of Solids and Structures* 1 (1965), S. 417–438
- [81] BERTRAM, A.: *Compendium on Gradient Materials*. Cham : Springer Nature, 2023
- [82] BERTRAM, A. ; FOREST, S.: (Hrsg.): *Mechanics of Strain Gradient Materials, CISM Courses and Lectures Bd. 600*. Cham : Springer Nature, 2020
- [83] POLIZZOTTO, C.: A gradient elasticity theory for second-grade materials and higher order inertia. In: *International Journal of Solids and Structures* 49 (2012), S. 2121–2137
- [84] POLIZZOTTO, C.: A note on the higher order strain and stress tensors within deformation gradient elasticity theories: Physical interpretations and comparisons. In: *International Journal of Solids and Structures* 90 (2016), S. 116–121
- [85] TOUPIN, R. A.: Theories of elasticity with couple-stress. In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 17 (1964), Nr. 2, S. 85–112
- [86] MAUGIN, G. A. ; METRIKINE, A. V.: (Hrsg.): *Mechanics of Generalized Continua*. New York [u. a.] : Advances in Mechanics and Mathematics Bd. 21, Springer, 2010

- [87] POLIZZOTTO, C.: A second strain gradient elasticity theory with second velocity gradient inertia–Part I: Constitutive equations and quasi-static behavior. In: *International Journal of Solids and Structures* 50 (2013), S. 3749–3765
- [88] BERTRAM, A.: *Balance laws for gradient materials*, In: A. Bertram und S. Forest (Hrsg.): *Mechanics of Strain Gradient Materials, CISM Courses and Lectures Bd. 600*, S. 19–35. Cham : Springer Nature, 2020
- [89] GURTIN, M. E.: Thermodynamics and the possibility of spatial interaction in elastic materials. In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 19 (1965), S. 339–352
- [90] MINDLIN, R. D.: Micro-structure in linear elasticity. In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 16 (1964), Nr. 1, S. 52–78
- [91] JAVILI, A. ; DELL’ISOLA, F. ; STEINMANN, P.: Geometrically nonlinear higher-gradient elasticity with energetic boundaries. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 61 (2013), Nr. 12, S. 2381–2401
- [92] KRAWIETZ, A.: Surface phenomena of gradient materials. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 33 (2021), Nr. 5, S. 2203–2212
- [93] MAUGIN, G. A.: *Continuum mechanics of electromagnetic solids*. Amsterdam : North-Holland, 1988
- [94] JACKSON, J. D.: *Klassische Elektrodynamik*. Berlin [u. a.] : Walter de Gruyter, 2006
- [95] HEINTZE, J.: *Lehrbuch zur Experimentalphysik Band 3: Elektrizität und Magnetismus*. Berlin [u. a.] : Springer-Verlag, 2016
- [96] PETRASCHEK, D. ; SCHWABL, F.: *Elektrodynamik*. Berlin [u. a.] : Springer-Verlag, 2016
- [97] WOLSCHIN, G.: *Elektrodynamik*. Berlin [u. a.] : Springer-Verlag, 2016

- [98] KAMLAH, M.: *Zur Modellierung von nichtlinearen elektromechanischen Koppelphänomenen in Piezokeramiken*. Universität Gesamthochschule Kassel : Habilitationsschrift, Institut für Mechanik, 2000
- [99] KAMLAH, M.: Ferroelectric and ferroelastic piezoceramics – modeling of electromechanical hysteresis phenomena. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 4 (2001), Nr. 13, S. 219–268
- [100] GUSEV, A. A. ; LURIE, S. A.: Symmetry conditions in strain gradient elasticity. In: *Mathematics and Mechanics of Solids* 22 (2017), Nr. 4, S. 683–691
- [101] POLIZZOTTO, C.: A hierarchy of simplified constitutive models within isotropic strain gradient elasticity. In: *European Journal of Mechanics - A/Solids* 61 (2017), S. 92–109
- [102] ALTAN, S. B. ; AIFANTIS, E. C.: On the structure of the mode III crack-tip in gradient elasticity. In: *Scripta Metallurgica et Materialia* 2 (1992), S. 319–324
- [103] ALTAN, S. B. ; AIFANTIS, E. C.: On some aspects in the special theory of gradient elasticity. In: *Journal of the Mechanical Behavior of Materials* 8 (1997), Nr. 3, S. 231–282
- [104] REIHER, J. C. ; GIORGIO, I. ; BERTRAM, A.: Finite-element analysis of polyhedra under point and line forces in second-strain gradient elasticity. In: *Journal of Engineering Mechanics* 143 (2017), Nr. 2, S. 04016112–1–13
- [105] LAM, D. C. C. ; YANG, F. ; CHONG, A. C. M. ; WANG, J. ; TONG, P.: Experiments and theory in strain gradient elasticity. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 51 (2003), Nr. 8, S. 1477–1508
- [106] LIEBOLD, C. ; MÜLLER, W. H.: Comparison of gradient elasticity models for the bending of micromaterials. In: *Computational Materials Science* 116 (2016), S. 52–61

- 
- [107] TRUESDELL, C.: *Rational Thermodynamics*. New York : Springer-Verlag, 1984
- [108] FALK, G. ; RUPPEL, W.: *Energie und Entropie: Die Physik des Naturwissenschaftlers. Eine Einführung in die Thermodynamik*. Berlin [u. a.] : Springer-Verlag, 2013
- [109] POLIZZOTTO, C.: Unified thermodynamic framework for nonlocal/gradient continuum theories. In: *European Journal of Mechanics - A/Solids* 22 (2003), Nr. 5, S. 651–668
- [110] IKEDA, T.: *Fundamentals of Piezoelectricity*. Oxford : Oxford University Press, 1996
- [111] SMITH, R. C.: *Smart Material Systems: Model Development*. Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005
- [112] SCHRÖDER, J. ; LUPASCU, D. C.: (Hrsg.): *Ferroc Functional Materials*. CISM Courses and Lectures Bd. 581, Springer, 2018
- [113] MIEHE, C.: Strain-driven homogenization of inelastic microstructures and composites based on an incremental variational formulation. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 55 (2002), Nr. 11, S. 1285–1322
- [114] COLEMAN, B. D. ; GURTIN, M. E.: Thermodynamics with internal state variables. In: *Journal of Chemical Physics* 47 (1967), Nr. 2, S. 597–613
- [115] LUBLINER, J.: On the thermodynamic foundations of non-linear solid mechanics. In: *International Journal of Non-Linear Mechanics* 7 (1972), Nr. 3, S. 237–254
- [116] SIMO, J. C. ; HONEIN, T.: Variational formulation, discrete conservation laws, and path-domain independent integrals for elasto-viscoplasticity. In: *Journal of Applied Mechanics* 57 (1990), Nr. 3, S. 488–497

- [117] ORTIZ, M. ; STAINIER, L.: The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 171 (1999), Nr. 3-4, S. 419–444
- [118] BIOT, M. A.: *Mechanics of Incremental Deformations*. New York : John Wiley & Sons, 1965
- [119] HILL, R.: *The Mathematical Theory of Plasticity*. Oxford : Clarendon Press, 1950
- [120] LUBLINER, J.: A maximum-dissipation principle in generalized plasticity. In: *Acta Mechanica* 52 (1984), Nr. 3, S. 225–237
- [121] HACKL, K. ; FISCHER, F. D.: On the relation between the principle of maximum dissipation and inelastic evolution given by dissipation potentials. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 464 (2008), Nr. 2089, S. 117–132
- [122] RADOVITZKY, R. ; ORTIZ, M.: Error estimation and adaptive meshing in strongly nonlinear dynamic problems. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 172 (1999), Nr. 1-4, S. 203–240
- [123] STARK, S.: On a certain class of one step temporal integration methods for standard dissipative continua. In: *Computational Mechanics* 67 (2021), Nr. 1, S. 265–287
- [124] LANDIS, C. M.: A new finite-element formulation for electromechanical boundary value problems. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 55 (2002), Nr. 5, S. 613–628
- [125] GIL, A. J. ; ORTIGOSA, R.: A new framework for large strain electromechanics based on convex multi-variable strain energies: Variational formulation and material characterisation. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 302 (2016), S. 293–328
- [126] JAFFE, B. ; COOK, W. R. ; JAFFE, H.: *Piezoelectric Ceramics*. London [u. a.] : Academic Press, 1971



- [127] MOULSON, A. J. ; HERBERT, J. M.: *Electroceramics: Materials, Properties, Applications*. Chichester : John Wiley & Sons, 2003
- [128] LINES, M. E. ; GLASS, A. M.: *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials*. Oxford : Oxford University Press, 2001
- [129] FATUZZO, E. ; MERZ, W. J.: *Ferroelectricity*. Amsterdam : North-Holland Publishing Company, 1967
- [130] ZUBKO, P. ; CATALAN, G. ; TAGANTSEV, A. K.: Flexoelectric effect in solids. In: *Annual Review of Materials Research* 43 (2013), S. 387–421
- [131] WANG, B. ; GU, Y. ; ZHANG, S. ; CHEN, L. Q.: Flexoelectricity in solids: Progress, challenges, and perspectives. In: *Progress in Materials Science* 106 (2019), Nr. 100570, S. 1–52
- [132] RESTA, R.: Towards a bulk theory of flexoelectricity. In: *Physical Review Letters* 105 (2010), Nr. 12, S. 127601–1–4
- [133] HONG, J. ; VANDERBILT, D.: First-principles theory of frozen-ion flexoelectricity. In: *Physical Review B* 84 (2011), Nr. 18, S. 180101–1–5
- [134] STENGEL, M.: Flexoelectricity from density-functional perturbation theory. In: *Physical Review B* 88 (2013), Nr. 17, S. 174106–1–24
- [135] ASKAR, A. ; LEE, P. C. Y. ; CAKMAK, A. S.: Lattice-dynamics approach to the theory of elastic dielectrics with polarization gradient. In: *Physical Review B* 1 (1970), Nr. 8, S. 3525–3537
- [136] MARANGANTI, R. ; SHARMA, P.: Atomistic determination of flexoelectric properties of crystalline dielectrics. In: *Physical Review B* 80 (2009), Nr. 5, S. 054109–1–10
- [137] ZHANG, S. ; LIU, K. ; WEN, X. ; WU, T. ; XU, M. ; SHEN, S.: Converse flexoelectricity with relative permittivity gradient. In: *Applied Physics Letters* 114 (2019), Nr. 5, S. 052903–1–5

- [138] ZHANG, S. ; LIU, K. ; WU, T. ; SHEN, S.: An electro-mechanical behavior enhancement method: geometric design with flexoelectricity. In: *Smart Materials and Structures* 28 (2019), Nr. 2, S. 025024–1–8
- [139] CROSS, L. E.: Flexoelectric effects: Charge separation in insulating solids subjected to elastic strain gradients. In: *Journal of Materials Science* 41 (2006), S. 53–63
- [140] RANDALL, C. A. ; KIM, N. ; KUCERA, J. P. ; CAO, W. ; SHROUT, T. R.: Intrinsic and extrinsic size effects in fine-grained morphotropic-phase-boundary lead zirconate titanate ceramics. In: *Journal of the American Ceramic Society* 81 (1998), Nr. 3, S. 677–688
- [141] BOTTGER, U. ; TIEDKE, S. ; WASER, R.: (*Hrsg.*): *Polar Oxides: Properties, Characterization, and Imaging*. Weinheim : Wiley-VCH, 2005
- [142] ZHOU, D. ; KAMLAH, M. ; MUNZ, D.: Effects of Bias Electric Fields on the Non-linear Ferroelastic Behavior of Soft Lead Zirconate Titanate Piezoceramics. In: *Journal of the American Ceramic Society* 88 (2005), Nr. 4, S. 867–874
- [143] PI CERAMIC GMBH: *Piezoelectric Ceramic Products: Fundamentals, characteristics and applications*. Lederhose, Deutschland, 2016
- [144] ZHOU, D.: *Experimental investigation of non-linear constitutive behavior of PZT piezoceramics*. Forschungszentrum Karlsruhe : Wissenschaftliche Berichte FZKA 6869, 2003
- [145] ZHOU, D. ; KAMLAH, M.: Rate dependence of soft PZT ceramics under electric field loading. In: *Proc. SPIE 4333, Smart Structures and Materials 2001: Active Materials: Behavior and Mechanics* (2001), S. 64–70
- [146] CAO, H. ; EVANS, A. G.: Nonlinear deformation of ferroelectric ceramics. In: *Journal of the American Ceramic Society* 76 (1993), Nr. 4, S. 890–896
- [147] FETT, T. ; MUNZ, D. ; THUN, G.: Young’s modulus of soft PZT from partial unloading tests. In: *Ferroelectrics* 274 (2002), Nr. 1, S. 67–81

- [148] ZHOU, D. ; KAMLAH, M. ; MUNZ, D.: Effects of uniaxial prestress on the ferroelectric hysteretic response of soft PZT. In: *Journal of the European Ceramic Society* 25 (2005), Nr. 4, S. 425–432
- [149] KAY, H. F.: Electrostriction. In: *Reports on Progress in Physics* 18 (1955), Nr. 1, S. 230–250
- [150] SUNDAR, V. ; NEWNHAM, R. E.: Electrostriction and polarization. In: *Ferroelectrics* 135 (1992), Nr. 1, S. 431–446
- [151] SEYFERT, L. ; VOSS, A. ; HEMMERT, W. ; SCHWESINGER, N.: Contribution of converse flexoelectric effect in PZT ceramics in presence of strong electrical fields. In: *In: Proc. of SPIE Vol. 12043, Active and Passive Smart Structures and Integrated Systems XVI* (2022), S. 120430L–1–13
- [152] MA, W. ; CROSS, L. E.: Strain-gradient-induced electric polarization in lead zirconate titanate ceramics. In: *Applied Physics Letters* 82 (2003), Nr. 19, S. 3293–3295
- [153] ZUBKO, P. ; CATALAN, G. ; BUCKLEY, A. ; WELCHE, P. R. L. ; SCOTT, J. F.: Strain-gradient-induced polarization in SrTiO<sub>3</sub> single crystals. In: *Physical Review Letters* 99 (2007), Nr. 16, S. 167601–1–4
- [154] ZUBKO, P. ; CATALAN, G. ; BUCKLEY, A. ; WELCHE, P. R. L. ; SCOTT, J. F.: Erratum: Strain-gradient-induced polarization in SrTiO<sub>3</sub> single crystals [Phys. Rev. Lett. 99, 167601 (2007)]. In: *Physical Review Letters* 100 (2008), Nr. 19, S. 199906–1–2
- [155] BURSIAK, E. V. ; TRUNOV, N. N.: Nonlocal piezoelectric effect. In: *Soviet Physics – Solid state* 16 (1974), Nr. 4, S. 760–762
- [156] BURSIAK, E. V. ; ZAIKOVSKII, O. I.: Changes in curvature of a ferroelectric film due to polarization. In: *Soviet Physics – Solid state* 10 (1968), Nr. 5, S. 1121–1124

- [157] SHIEH, J. ; YEH, J. H. ; SHU, Y. C. ; YEN, J. H.: Hysteresis behaviors of barium titanate single crystals based on the operation of multiple 90° switching systems. In: *Materials Science and Engineering: B* 161 (2009), Nr. 1-3, S. 50–54
- [158] MA, W. ; CROSS, L. E.: Flexoelectric effect in ceramic lead zirconate titanate. In: *Applied Physics Letters* 68 (2005), Nr. 7, S. 072905–1–3
- [159] ZALESSKII, V. G. ; RUMYANTSEVA, E. D.: Converse flexoelectric effect in the SrTiO<sub>3</sub> single crystal. In: *Physics of the Solid State* 56 (2014), Nr. 7, S. 1352–1354
- [160] OBOZOVA, E. ; ZALESSKII, V. G.: Inhomogeneous deformation of a SrTiO<sub>3</sub> single crystal owing to the converse flexoelectric effect. In: *JETP Letters* 103 (2016), Nr. 11, S. 699–701
- [161] RUMYANTSEVA, E. D. ; ZALESSKII, V. G.: Strain of a BaTiO<sub>3</sub> single crystal caused by the converse flexoelectric effect. In: *Physics of the Solid State* 58 (2016), Nr. 4, S. 689–694
- [162] ZALESSKII, V. G. ; OBOZOVA, E. D. ; POLUSHINA, A. D.: A scanning interferometric method for studying the converse flexoelectric effect in thin plates of ferroelectrics and related materials. In: *Instruments and Experimental Techniques* 62 (2019), Nr. 5, S. 830–837
- [163] HANA, P. ; MARVAN, M. ; BURIANOVA, L. ; ZHANG, S. J. ; FURMAN, E. ; SHROUT, T. R.: Study of the inverse flexoelectric phenomena in ceramic lead magnesium niobate-lead titanate. In: *Ferroelectrics* 336 (2006), S. 137–144
- [164] FU, J. Y. ; ZHU, W. ; LI, N. ; CROSS, L. E.: Experimental studies of the converse flexoelectric effect induced by inhomogeneous electric field in a barium strontium titanate composition. In: *Journal of Applied Physics* 100 (2006), S. 024112–1–6
- [165] SHEN, Z. ; CHEN, W.: Converse flexoelectric effect in comb electrode

- piezoelectric microbeam. In: *Physics Letters A* 376 (2012), Nr. 19, S. 1661–1663
- [166] LASKEWITZ, B. ; KAMLAH, M.: Finite element implementation of nonlinear constitutive models for piezoceramic materials. In: *Journal of Mechanics of Materials and Structures* 5 (2010), Nr. 1, S. 19–45
- [167] KOLMOGOROFF, A.: *Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung*. Berlin [u. a.] : Springer, 1933
- [168] MARSILIUS, M. ; GRANZOW, T. ; JONES, J. L.: Effect of electrical and mechanical poling history on domain orientation and piezoelectric properties of soft and hard PZT ceramics. In: *Science and Technology of Advanced Materials* 12 (2011), S. 015002–1–8
- [169] HALL, D. A. ; STEUWER, A. ; CHERDHIRUNKORN, B. ; MORI, T. ; WITHERS, P. J.: Analysis of elastic strain and crystallographic texture in poled rhombohedral PZT ceramics. In: *Acta Materialia* 54 (2006), Nr. 11, S. 3075–3083
- [170] LANDIS, C. M.: Non-linear constitutive modeling of ferroelectrics. In: *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 8 (2004), Nr. 1, S. 59–69
- [171] BASSIOUNY, E. ; GHALEB, A. F. ; MAUGIN, G. A.: Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects–I. Basic equations. In: *International Journal of Engineering Science* 26 (1988), Nr. 12, S. 1279–1295
- [172] BASSIOUNY, E. ; MAUGIN, G. A.: Thermodynamical formulation for coupled electromechanical hysteresis effects–IV. Combined electromechanical loading. In: *International Journal of Engineering Science* 27 (1989), Nr. 8, S. 989–1000
- [173] LYNCH, Ch. S.: The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response of 8/65/35 PLZT. In: *Acta Materialia* 44 (1996), Nr. 10, S. 4137–4148

- [174] ZHOU, D. ; KAMLAH, M. ; GAN, Y. ; LASKEWITZ, B.: Time-dependent nonlinear ferroelastic behaviour of soft lead zirconate titanate piezoceramics. In: *Advances in Science and Technology* 45 (2006), S. 2464–2471
- [175] ZHOU, D. ; WANG, R. ; KAMLAH, M.: Determination of reversible and irreversible contributions to the polarization and strain response of soft PZT using the partial unloading method. In: *Journal of the European Ceramic Society* 30 (2010), Nr. 12, S. 2603–2615
- [176] COCKS, A. C. F. ; McMEEKING, R. M.: A phenomenological constitutive law for the behaviour of ferroelectric ceramics. In: *Ferroelectrics* 228 (1999), Nr. 1, S. 219–228
- [177] SCHRÖDER, J. ; GROSS, D.: Invariant formulation of the electromechanical enthalpy function of transversely isotropic piezoelectric materials. In: *Archive of Applied Mechanics* 73 (2004), S. 533–552
- [178] HUBER, J. E. ; FLECK, N. A.: Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: theory versus experiment. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 49 (2001), Nr. 4, S. 785–811
- [179] SEMENOV, A. S. ; LISKOWSKY, A. C. ; BALKE, H.: Return mapping algorithms and consistent tangent operators in ferroelectroelasticity. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 81 (2010), Nr. 10, S. 1298–1340
- [180] LEMAITRE, J. ; CHABOCHE, J. L.: *Mechanics of solid materials*. Cambridge : Cambridge University Press, 1994
- [181] MEHLING, V.: *Phenomenological modeling of ferroelectric material behavior*. Technischen Universität Darmstadt : Dissertation, Institut für Mechanik, 2007
- [182] KAMLAH, M. ; WANG, Z.: *A thermodynamically and microscopically motivated constitutive model for piezoceramics*. Forschungszentrum Karlsruhe : Wissenschaftliche Berichte FZKA 6880, 2003

- [183] WILKINS, M. L.: *Calculation of elastic plastic flow*, In: B. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg (Hrsg.): *Methods in Computational Physics*. New York : Academic Press, S. 271–277, 1964
- [184] ORTIZ, M. ; SIMO, J. C.: An analysis of a new class of integration algorithms for elastoplastic constitutive relations. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 23 (1986), Nr. 3, S. 353–366
- [185] SIMO, J. C. ; HUGHES, T. J. R.: *Computational Inelasticity*. New York [u. a.] : Springer-Verlag, 1998
- [186] FASSIN, M. ; EGGERSMANN, R. ; WULFINGHOFF, S. ; REESE, S.: A numerically robust anisotropic damage model. In: *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics* 18 (2018), Nr. e201800118, S. 1–2
- [187] OLIVEIRA, O. de: The implicit and the inverse function theorems: easy proofs. In: *Real Analysis Exchange* 39 (2014), Nr. 1, S. 207–218
- [188] SIMO, J. C. ; TAYLOR, R. L.: Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 48 (1985), Nr. 1, S. 101–118
- [189] GRUTTMANN, F. ; STEIN, E.: Tangentiale Steifigkeitsmatrizen bei Anwendung von Projektionsverfahren in der Elastoplastizitätstheorie. In: *Ingenieur-Archiv* 58 (1988), Nr. 1, S. 15–24
- [190] VOGEL, F. ; BUSTAMANTE, R. ; STEINMANN, P.: On some mixed variational principles in electro-elastostatics. In: *International Journal of Non-Linear Mechanics* 47 (2012), Nr. 2, S. 341–354
- [191] MIEHE, C. ; VALLICOTTI, D. ; ZÄH, D.: Computational structural and material stability analysis in finite electro-elasto-statics of electro-active materials. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 102 (2015), Nr. 47, S. 1605–1637
- [192] SEMENOV, A. S. ; KESSLER, H. ; LISKOWSKY, A. ; BALKE, H.: On a vector potential formulation for 3D electromechanical finite element

- analysis. In: *Communications in Numerical Methods in Engineering* 22 (2006), Nr. 5, S. 357–375
- [193] STARK, S. ; SEMENOV, A. S. ; BALKE, H.: On the boundary conditions for the vector potential formulation in electrostatics. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 102 (2015), Nr. 11, S. 1704–1732
- [194] GHANDI, K. ; HAGOOD, N. W.: Hybrid finite element model for phase transitions in nonlinear electromechanically coupled material. In: *In: Smart Structures and Materials 1997: Mathematics and Control in Smart Structures* 3039 (1997), S. 97–112
- [195] SCHWAAB, H. ; DELUCA, M. ; SUPANCIC, P. ; KAMLAH, M.: Effect of the electric conductivity on the modeling of the poling process of ferroelectric components. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 61 (2013), Nr. 2, S. 504–516
- [196] STREICH, F. A. ; MARTIN, A. ; WEBBER, K. G. ; KAMLAH, M.: Macroscopic constitutive model for ergodic and non-ergodic lead-free relaxors. In: *Journal of Intelligent Material Systems and Structures* 33 (2022), Nr. 8, S. 1002–1017
- [197] KURZHÖFER, I. ; SCHRÖDER, J.: A hybrid element formulation for electromechanical problems. In: *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics* 6 (2006), S. 451–452
- [198] ORTIGOSA, R. ; FRANKE, M. ; JANZ, A. ; GIL, A. J. ; BETSCH, P.: An energy-momentum time integration scheme based on a convex multi-variable framework for non-linear electro-elastodynamics. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 339 (2018), S. 1–35
- [199] FRANKE, M. ; ORTIGOSA, R. ; JANZ, A. ; GIL, A. J. ; BETSCH, P.: A mixed variational framework for the design of energy-momentum integration schemes based on convex multi-variable



- electro-elastodynamics. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 351 (2019), S. 109–152
- [200] ALLIK, H. ; HUGHES, T. J. R.: Finite element method for piezoelectric vibration. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2 (1970), Nr. 2, S. 151–157
- [201] GAUDENZI, P. ; BATHE, K. J.: An iterative finite element procedure for the analysis of piezoelectric continua. In: *Journal of Intelligent Material Systems and Structures* 6 (1995), Nr. 2, S. 266–273
- [202] STARK, S. ; ROTH, S. ; NEUMEISTER, P. ; BALKE, H.: Modifications of the Newton-Raphson method for finite element simulations in ferroelectroelasticity. In: *International Journal of Solids and Structures* 50 (2013), Nr. 5, S. 773–780
- [203] HU, H. C.: On some variational principles in the theory of elasticity and plasticity. In: *Scientia Sinica* 4 (1955), S. 33–54
- [204] WASHIZU, K.: *On the variational principles of elasticity and plasticity*. Cambridge : In: Aeroelastic and Structures Research Laboratory, Technical Report 25-18, MIT, 1955
- [205] ZIENKIEWICZ, O. C. ; TAYLOR, R. L. ; ZHU, J. Z.: *The finite element method: Its basis and fundamentals*. Oxford : Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005
- [206] SZE, K. Y. ; PAN, Y. S.: Hybrid finite element models for piezoelectric materials. In: *Journal of Sound and Vibration* 226 (1999), Nr. 3, S. 519–547
- [207] LINNEMANN, K.: *Magnetostruktive und piezoelektrische Materialien: Konstitutive Modellierung und Finite-Element-Formulierung*. Universität Karlsruhe (TH) : Dissertation, Institut für Baustatik, 2008
- [208] WRIGGERS, P.: *Nonlinear finite element methods*. Berlin [u. a.] : Springer-Verlag, 2008

- [209] KLINKEL, S. ; WAGNER, W.: A geometrically non-linear piezoelectric solid shell element based on a mixed multi-field variational formulation. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 65 (2006), Nr. 3, S. 349–382
- [210] KLINKEL, S. ; WAGNER, W.: A piezoelectric solid shell element based on a mixed variational formulation for geometrically linear and nonlinear applications. In: *Computers & Structures* 86 (2008), Nr. 1-2, S. 38–46
- [211] ARGYRIS, J. H. ; FRIED, I. ; SCHARPF, D. W.: The TUBA family of plate elements for the matrix displacement method. In: *The Aeronautical Journal* 72 (1968), Nr. 692, S. 701–709
- [212] DASGUPTA, S. ; SENGUPTA, D.: A higher-order triangular plate bending element revisited. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 30 (1990), Nr. 3, S. 419–430
- [213] PETERA, J. ; PITTMAN, J. F. T.: Isoparametric hermite elements. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 37 (1994), Nr. 20, S. 3489–3519
- [214] PAPANICOLOPULOS, S. A. ; ZERVOS, A. ; VARDOULAKIS, I.: A three-dimensional  $C^1$  finite element for gradient elasticity. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 77 (2009), Nr. 10, S. 1396–1415
- [215] ZERVOS, A. ; PAPANICOLOPULOS, S. A. ; VARDOULAKIS, I.: Two finite-element discretizations for gradient elasticity. In: *Journal of Engineering Mechanics* 135 (2009), Nr. 3, S. 203–213
- [216] SHU, J. Y. ; KING, W. E. ; FLECK, N. A.: Finite elements for materials with strain gradient effects. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 44 (1999), Nr. 3, S. 373–391
- [217] AMANATIDOU, E. ; ARAVAS, N.: Mixed finite element formulations of strain-gradient elasticity problems. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 191 (2002), Nr. 15-16, S. 1723–1751

- [218] ZYBELL, L. ; MÜHLICH, U. ; KUNA, M. ; ZHANG, Z. L.: A three-dimensional finite element for gradient elasticity based on a mixed-type formulation. In: *Computational Materials Science* 52 (2012), Nr. 1, S. 268–273
- [219] NANTHAKUMAR, S. S. ; ZHUANG, X. ; PARK, H. S. ; RABCZUK, T.: Topology optimization of flexoelectric structures. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 105 (2017), S. 217–234
- [220] ZHENG, Y. ; CHU, L. ; DUI, G. ; ZHU, X.: Modeling and simulation of functionally graded flexoelectric micro-cylinders based on the mixed finite element method. In: *Applied Physics A* 127 (2021), Nr. 153, S. 1–16
- [221] MATLAB: *Version 9.12.0.1884302 (R2022a)*. Natick, Massachusetts, USA : The MathWorks Inc., 2022
- [222] BERLINCOURT, D. ; JAFFE, H.: Elastic and piezoelectric coefficients of single-crystal barium titanate. In: *Physical Review* 111 (1958), Nr. 1, S. 143–148
- [223] MACNEAL, R. H. ; HARDER, R. L.: A proposed standard set of problems to test finite element accuracy. In: *Finite elements in analysis and design* 1 (1985), S. 3–20
- [224] STARK, S. ; NEUMEISTER, P. ; BALKE, H.: Some aspects of macroscopic phenomenological material models for ferroelectroelastic ceramics. In: *International Journal of Solids and Structures* 80 (2016), S. 359–367
- [225] SCHWAAB, H.: *Nichtlineare Modellierung von Ferroelektrika unter Berücksichtigung der elektrischen Leitfähigkeit*. Karlsruher Institut für Technologie : KIT Scientific Publishing, Schriftreihe des Instituts für Angewandte Materialien Band 5, 2012
- [226] LU, W. ; FANG, D. N. ; LI, C. Q. ; HWANG, K. C.: Nonlinear electric-mechanical behavior and micromechanics modelling of ferroelectric domain evolution. In: *Acta Materialia* 47 (1999), Nr. 10, S. 2913–2926

- [227] FRÖHLICH, A.: *Mikromechanisches Modell zur Ermittlung effektiver Materialeigenschaften von piezoelektrischen Polykristallen*. Forschungszentrum Karlsruhe : Wissenschaftliche Berichte FZKA 6828, 2001
- [228] LANDIS, C. M. ; WANG, J. ; SHENG, J.: Micro-electromechanical determination of the possible remanent strain and polarization states in polycrystalline ferroelectrics and the implications for phenomenological constitutive theories. In: *Journal of Intelligent Material Systems and Structures* 15 (2004), Nr. 7, S. 513–525
- [229] ZHOU, D. ; KAMLAH, M. ; LASKEWITZ, B.: Multi-axial non-proportional polarization rotation tests of soft PZT piezoceramics under electric field loading. In: *Proc. SPIE 6170, Smart Structures and Materials 2006: Active Materials: Behavior and Mechanics* (2006), S. 49–57
- [230] ZÄHRINGER, S. ; MENACHER, M. ; KIRCHNER, P. ; SCHWESINGER, N.: Normally closed piezoelectric micro valve. In: *In: 2010 Symposium on Design Test Integration and Packaging of MEMS/MOEMS (DTIP)* (2010), S. 105–109
- [231] ZÄHRINGER, S. ; PURR, J. ; SCHWESINGER, N.: Manipulation of IDT-actuated piezoelectric membrane actuators by silicon clamping. In: *Applied Mechanics and Materials* 518 (2014), S. 215–219
- [232] VOSS, A. ; SEYFERT, L. ; HEMMERT, W.: Stroboscopic video microscopy for in-plane motion measurements up to 2 MHz with picometer resolution. In: *In: 2021 IEEE 34th International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)* (2021), S. 1040–1043
- [233] VOSS, A. ; SEYFERT, L. ; SCHWESINGER, N. ; HEMMERT, W.: Stroboscopic video microscopy with sub-nanometer accuracy for characterizing and monitoring MEMS. In: *In: Proc. of SPIE Vol. 12047, Nondestructive Characterization and Monitoring of Advanced Materials, Aerospace, Civil Infrastructure, and Transportation XVI* (2022), S. 1204712–1–5

- [234] CHAPLYA, P. M. ; CARMAN, G. P.: Dielectric and piezoelectric response of lead zirconate-lead titanate at high electric and mechanical loads in terms of non-180 domain wall motion. In: *Journal of Applied Physics* 90 (2001), Nr. 10, S. 5278–5286
- [235] BERLINCOURT, D. ; KRUEGER, H. A. ; NEAR, C.: Properties of Morgan electro ceramic ceramics. In: *Technical Publication TP-226, Morgan Electro Ceramics* (2000)
- [236] ABAQUS/CAE: *Version 2023*. Johnston, RI, USA : Dassault Systèmes Simulia Corp., 2022
- [237] WEBER, P. ; GEIGER, J. ; WAGNER, W.: Constrained neural network training and its application to hyperelastic material modeling. In: *Computational Mechanics* 68 (2021), S. 1179–1204
- [238] WEBER, P. ; WAGNER, W. ; FREITAG, S.: Physically enhanced training for modeling rate-independent plasticity with feedforward neural networks. In: *Computational Mechanics* (2023), S. 1–31
- [239] BASKARAN, S. ; THIRUVANNAMALAI, S. ; HEO, H. ; LEE, H. J. ; FRANCIS, S. M. ; RAMACHANDRAN, N. ; FU, J. Y.: Converse piezoelectric responses in nonpiezoelectric materials implemented via asymmetric configurations of electrodes. In: *Journal of Applied Physics* 108 (2023), S. 064116–1–4
- [240] BRAND, L.: *Vector and tensor analysis*. Mineola, New York : Courier Dover Publications, 2020
- [241] CHARALAMBOPOULOS, A. ; TSINOPOULOS, S. V. ; POLYZOS, D.: Plane strain gradient elastic rectangle in bending. In: *Archive of Applied Mechanics* 90 (2020), S. 967–986
- [242] SELBY, S. M.: *Standard of Mathematical Tables*. Cleveland : The Chemical Rubber Co., 1964



# A Mathematische Grundlagen

## A.1 Notation

In diesem Abschnitt wird die in dieser Arbeit verwendete mathematische Notation kurz erläutert. Skalare Felder werden durch normal geschriebene Buchstaben symbolisiert, wie z. B.  $a$  oder  $\phi$ . In weiten Teilen der Arbeit wird für tensorielle Größen eine koordinatenfreie symbolische Notation gewählt. Dabei werden Tensoren erster Stufe (Vektoren) durch einen Pfeil über dem Buchstaben gekennzeichnet, wie z. B. bei  $\vec{u}$  oder  $\vec{\rho}$ . Dagegen sind Tensoren zweiter Stufe durch fettgedruckte Buchstaben wie  $A$  oder  $\boldsymbol{\varepsilon}$  dargestellt. Bei den Tensoren dritter Stufe wird zwischen Feldgrößen und Materialtensoren unterschieden. Die Feldgrößen, wie z. B. der Verzerrungsgradient oder die Spannung höherer Ordnung, werden durch fettgedruckte Buchstaben wie  $\boldsymbol{\eta}$  oder  $\boldsymbol{\tau}$  repräsentiert. Die Materialtensoren wiederum sind durch Buchstaben mit Doppelstrich wie z. B.  $\mathbb{d}$  oder  $\mathbb{h}$  gekennzeichnet. Ab der vierten bis zu einer beliebig hohen Tensorstufe erfolgt die Darstellung wie bei  $\mathbb{C}$  oder  $\mathbb{G}$  ausschließlich durch Buchstaben mit Doppelstrich.

Wenn immer es nützlich ist, wird zusätzlich eine Darstellung in einer Indexnotation  $x_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) mit angegeben, wobei sich die zugehörigen Komponenten auf ein festes kartesisches Koordinatensystem beziehen. Hierbei gilt es die EINSTEIN'sche Summenkonvention zu beachten, nach der über alle in einem Ausdruck doppelt vorkommenden Indizes von 1 bis 3 summiert wird.

In Folgenden werden in der Arbeit häufig auftretende mathematische Operationen definiert: Ein Punkt zwischen zwei Tensoren beliebiger Stufe zeigt eine Kontraktion relativ zu einem Index an, z. B. das innere Produkt von Vektoren:  $\vec{a} \cdot \vec{b} = a_i b_i$ ,

die lineare Abbildung eines Vektors durch einen Tensor:  $\mathbf{A} \cdot \vec{a} = A_{ij}a_j$ , die Hintereinanderschaltung zweier Tensoren:  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$ , das innerer Produkt von Tensoren zweiter Stufe:  $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij}B_{ij}$  oder das innerer Produkt von Tensoren dritter Stufe:  $\mathbb{A} \cdot \cdot \mathbb{B} = A_{ijk}B_{ijk}$ . Die Operation zweier Vektoren  $\vec{a} \otimes \vec{b}$  symbolisiert ein dyadisches Produkt, welche einen Tensor zweiter Stufe mit den Komponenten  $a_i b_j$  liefert. Ein Kreuzprodukt zweier Vektoren wird zu  $\vec{a} \times \vec{b}$  geschrieben. Eine partielle Ableitung nach einer Koordinate wird durch einen mit einem Komma abgesetzten Index  $(\cdot)_{,i} = \partial(\cdot)/\partial x_i$  gekennzeichnet. Weitere mathematische Operationen und Bezeichnungen werden in der Arbeit an Ort und Stelle erläutert.

Wenn in dieser Arbeit Gleichungen in einer algorithmischen Form dargestellt werden, die für eine direkte numerische Umsetzung in einen Computercode geeignet ist, wird eine reduzierte Vektor-Matrix-Notation verwendet. Diese zeichnet sich dadurch aus, dass alle Rechenschritte durch effiziente Matrixoperationen durchgeführt werden können. Hierbei werden alle Größen ausschließlich durch fettgedruckte Buchstaben wie z. B.  $\mathbf{C}$  oder  $\mathbf{d}$  dargestellt. Details zur Vektor-Matrix-Notation im Rahmen einer FE-Implementierung werden in Anhang E gegeben.

## A.2 Elemente der Tensoranalysis

Im Folgenden werden einige Elemente der Tensoranalysis, auf welche im Rahmen dieser Arbeit zurückgegriffen wird, kurz zusammengefasst. Dabei werden Skalarfelder mit  $\varphi$ , Vektorfelder mit  $\vec{v}$ , Tensorfelder 2. Stufe mit  $\mathbf{A}$  und Tensorfelder 3. Stufe mit  $\mathbb{b}$  symbolisiert. Die Rechenregeln werden jeweils in den Tensorstufen dargestellt, in denen sie in dieser Arbeit ihre Anwendung finden.

### A.2.1 Rechenregeln

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \otimes \varphi = \vec{\nabla} \cdot (\vec{v}\varphi) - (\vec{\nabla} \cdot \vec{v})\varphi \quad (\text{A.1})$$

$$\mathbf{A} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v} = \vec{\nabla} \cdot (\mathbf{A} \cdot \vec{v}) - (\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}) \cdot \vec{v} \quad (\text{A.2})$$



$$\mathbb{b} \cdot \vec{\nabla} \otimes \mathbf{A} = \vec{\nabla} \cdot (\mathbb{b} : \mathbf{A}) - (\vec{\nabla} \cdot \mathbb{b}) : \mathbf{A} \quad (\text{A.3})$$

## A.2.2 Zerlegung des Gradienten und der Divergenz

$$\vec{\nabla} \otimes \vec{v} = \vec{\nabla}_n \otimes \vec{v} + \vec{\nabla}_t \otimes \vec{v} \quad (\text{A.4})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \vec{\nabla}_n \cdot \vec{v} + \vec{\nabla}_t \cdot \vec{v} \quad (\text{A.5})$$

$$\text{mit } \vec{\nabla}_n := \vec{\nabla} \cdot \vec{n} \otimes \vec{n} \quad \text{und} \quad \vec{\nabla}_t := \vec{\nabla} \cdot (\mathbf{I} - \vec{n} \otimes \vec{n}) \quad (\text{A.6})$$

## A.2.3 Integralsätze

### A.2.3.1 Divergenztheorem für Oberflächen

Wir betrachten einen Körper  $\mathcal{B}$ , dessen Oberfläche  $\partial\mathcal{B}$  aus einer endlichen Anzahl an Einzelflächen  $\partial\mathcal{B}_i$  besteht. Diese Flächen werden durch Kanten voneinander abgegrenzt, deren Gesamtheit mit  $\partial\partial\mathcal{B}$  bezeichnet wird, vgl. Abb. A.1. Mit  $\oint_{\partial\partial\mathcal{B}} dS$  wird ein Linienintegral über alle Kanten  $\partial\partial\mathcal{B}_i$  aller Teilflächen  $\partial\mathcal{B}_i$  des Körpers  $\mathcal{B}$  gebildet. Dabei tritt jede Kante  $\partial\partial\mathcal{B}_i$  bei einer Auswertung des Integrals zweimal auf, da diese immer zu zwei unterschiedlichen Teilflächen  $\partial\mathcal{B}_i$  gehört.

Das Divergenztheorem für Oberflächen kann nach [240] mit

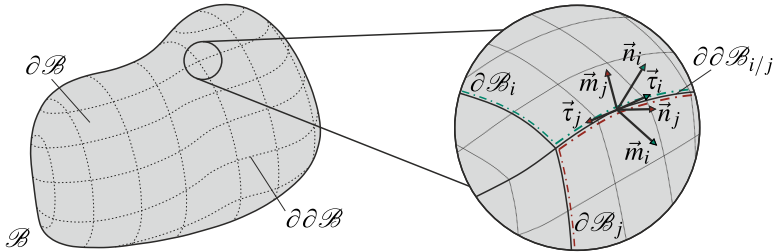
$$\int_{\partial\mathcal{B}} \vec{\nabla}_t \cdot (\mathbf{A} \cdot \vec{v}) dA = \int_{\partial\mathcal{B}} (\vec{\nabla}_t \cdot \vec{n}) \vec{n} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{v} dA + \oint_{\partial\partial\mathcal{B}} \vec{m} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{v} dS \quad (\text{A.7})$$

gebildet werden, wobei die Normalenvektoren für beliebige Punkte auf den Kanten  $\partial\partial\mathcal{B}$  im dritten Term von (A.7) über

$$\vec{m} := \vec{\tau} \times \vec{n} \quad (\text{A.8})$$

bestimmt werden. Hierin bezeichnet  $\vec{n}$  die Oberflächennormalen und  $\vec{\tau}$  die Tan-

gentialvektoren an den Kanten. Diese bilden zusammen mit den Vektoren  $\vec{m}$  eine Orthonormalbasis.



**Abbildung A.1:** Körper  $\mathcal{B}$  mit der Oberfläche  $\partial\mathcal{B}$  und den Kanten  $\partial\partial\mathcal{B}$ . Auf jedem Punkt einer Kante lässt sich für jede angrenzende Teilfläche  $\partial\mathcal{B}_i$  eine Orthonormalbasis bilden.

### A.2.3.2 Divergenztheorem für Volumen

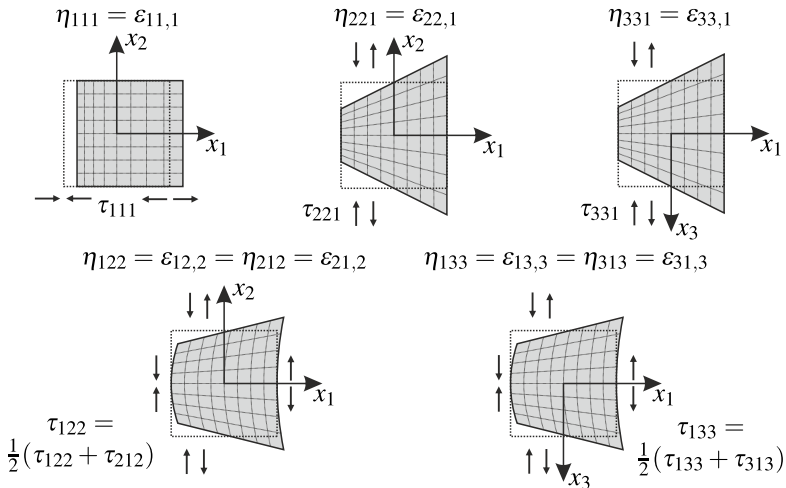
$$\int_{\mathcal{B}} \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \varphi) dV = \int_{\partial\mathcal{B}} \vec{n} \cdot \vec{v} \varphi dA \quad (\text{A.9})$$

$$\int_{\mathcal{B}} \vec{\nabla} \cdot (\mathbf{A} \cdot \vec{v}) dV = \int_{\partial\mathcal{B}} \vec{n} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{v} dA \quad (\text{A.10})$$

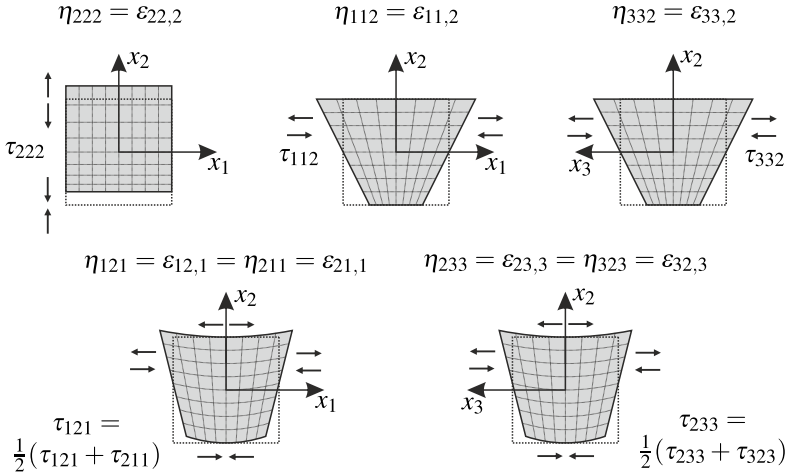
$$\int_{\mathcal{B}} \vec{\nabla} \cdot (\mathbb{b} : \mathbf{A}) dV = \int_{\partial\mathcal{B}} \vec{n} \cdot \mathbb{b} : \mathbf{A} dA \quad (\text{A.11})$$

## B Komponenten des Verzerrungsgradiententensors

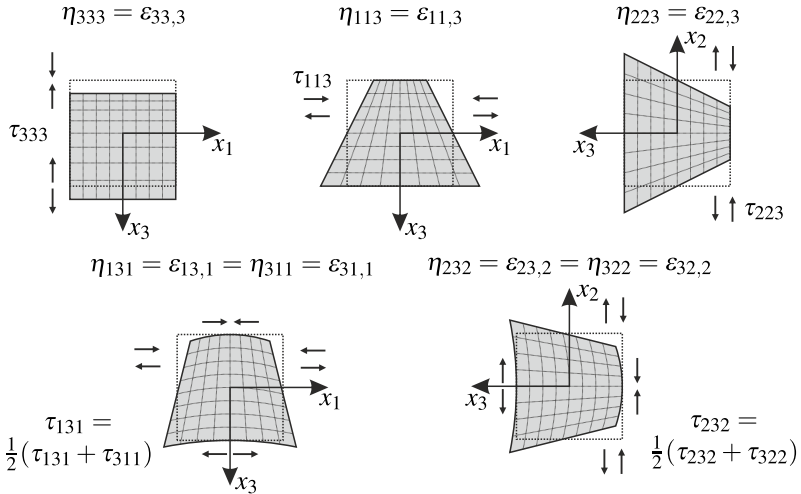
In den folgenden Abbildungen sind die einzelnen Komponenten des Verzerrungsgradiententensors  $\eta_{ijk}$  sowie deren arbeitskonforme Komponenten des Spannungstensors höherer Ordnung  $\tau_{ijk}$  dargestellt. Die Darstellung basiert auf der Interpretation in [90] und [241], dass die Spannungskomponenten als Kräftepaare auftreten, die in sich stets im Kräfte- und Momentengleichgewicht stehen.



**Abbildung B.1:** Deformationsmoden für homogene Verzerrungsgradientenzustände mit jeweils einzig von Null verschiedenen Komponenten  $[\eta_{111}, \eta_{221}, \eta_{331}, \eta_{122}, \eta_{133}, \dots]$ , sowie deren zugehörigen Komponenten des Spannungstensors höherer Ordnung.

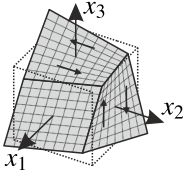


**Abbildung B.2:** Deformationsmoden für homogene Verzerrungsgradientenzustände mit jeweils einzig von Null verschiedenen Komponenten [...,  $\eta_{222}$ ,  $\eta_{112}$ ,  $\eta_{332}$ ,  $\eta_{121}$ ,  $\eta_{233}$ , ...], sowie deren zugehörigen Komponenten des Spannungstensors höherer Ordnung.



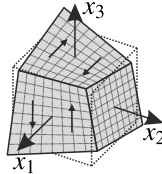
**Abbildung B.3:** Deformationsmoden für homogene Verzerrungsgradientenzustände mit jeweils einzig von Null verschiedenen Komponenten [...,  $\eta_{333}$ ,  $\eta_{113}$ ,  $\eta_{223}$ ,  $\eta_{131}$ ,  $\eta_{232}$ , ...], sowie deren zugehörigen Komponenten des Spannungstensors höherer Ordnung.

$$\begin{aligned} \eta_{231} &= \varepsilon_{23,1} \\ &= \eta_{321} = \varepsilon_{32,1} \end{aligned}$$



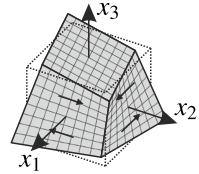
$$\begin{aligned} \tau_{231} &= \\ \frac{1}{2}(\tau_{231} + \tau_{321}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta_{132} &= \varepsilon_{13,2} \\ &= \eta_{312} = \varepsilon_{31,2} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \tau_{132} &= \\ \frac{1}{2}(\tau_{132} + \tau_{312}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta_{123} &= \varepsilon_{12,3} \\ &= \eta_{213} = \varepsilon_{21,3} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \tau_{123} &= \\ \frac{1}{2}(\tau_{123} + \tau_{213}) \end{aligned}$$

**Abbildung B.4:** Deformationsmoden für homogene Verzerrungsgradientenzustände mit jeweils einzig von Null verschiedenen Komponenten [...,  $\eta_{231}$ ,  $\eta_{132}$ ,  $\eta_{123}$ ], sowie deren zugehörigen Komponenten des Spannungstensors höherer Ordnung.



# C Konstitutivgleichungen in Indexnotation

## C.1 Konstitutivgleichungen der Piezoelektrizität

### C.1.1 Freie Gibbs-Energie Form

$$G = \frac{1}{2} \sigma_{ij} (C_{ijkl}^E)^{-1} \sigma_{kl} - E_m d_{mij} \sigma_{ij} - \frac{1}{2} E_m \epsilon_{mn}^\sigma E_n \quad (C.1)$$

$$-\varepsilon_{ij} = \frac{\partial G}{\partial \sigma_{ij}} = -(C_{ijkl}^E)^{-1} \sigma_{kl} - d_{mij} E_m \quad -D_m = \frac{\partial G}{\partial E_m} = -d_{mij} \sigma_{ij} - \epsilon_{mn}^\sigma E_n \quad (C.2)$$

### C.1.2 Elektrische Gibbs-Energie Form

$$G_2 = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} C_{ijkl}^E \varepsilon_{kl} - E_m e_{mij} \varepsilon_{ij} - \frac{1}{2} E_m \epsilon_{mn}^\varepsilon E_n \quad (C.3)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial G_2}{\partial \varepsilon_{ij}} = C_{ijkl}^E \varepsilon_{kl} - e_{mij} E_m \quad -D_m = \frac{\partial G_2}{\partial E_m} = -e_{mij} \varepsilon_{ij} - \epsilon_{mn}^\varepsilon E_n \quad (C.4)$$

$$\text{mit} \quad e_{mij} = d_{mkl} C_{kl ij}^E \quad \text{und} \quad \epsilon_{mn}^\varepsilon = \epsilon_{mn}^\sigma - d_{mij} e_{nij}$$

### C.1.3 Freie Helmholtz-Energie Form

$$\Psi = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} C_{ijkl}^D \varepsilon_{kl} - D_m h_{mij} \varepsilon_{ij} + \frac{1}{2} D_m \beta_{mn}^\varepsilon D_n \quad (C.5)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{ij}} = C_{ijkl}^D \varepsilon_{kl} - h_{mij} D_m \quad E_m = \frac{\partial \Psi}{\partial D_m} = -h_{mij} \varepsilon_{ij} + \beta_{mn}^\varepsilon D_n \quad (\text{C.6})$$

$$\text{mit } \beta_{mn}^\varepsilon = (\varepsilon_{mn}^\varepsilon)^{-1}, \quad h_{mij} = \beta_{mn}^\varepsilon e_{nij} \quad \text{und} \quad C_{ijkl}^D = C_{ijkl}^E + e_{nij} h_{nkl}$$

## C.2 Konstitutivgleichungen der Flexoelektrizität

### C.2.1 Elektrische Gibbs-Energie Form

$$G_2 = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} C_{ijkl}^E \varepsilon_{kl} + \frac{1}{2} \eta_{ijk} G_{ijklmn}^E \eta_{lmn} - \frac{1}{2} E_m \varepsilon_{mn}^\varepsilon E_n - E_m e_{mij} \varepsilon_{ij} - E_m m_{mijk} \eta_{ijk} \quad (\text{C.7})$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial G_2}{\partial \varepsilon_{ij}} = C_{ijkl}^E \varepsilon_{kl} - e_{mij} E_m \quad (\text{C.8})$$

$$\tau_{ijk} = \frac{\partial G_2}{\partial \eta_{ijk}} = G_{ijklmn}^E \eta_{lmn} - m_{mijk} E_m \quad (\text{C.9})$$

$$-D_m = \frac{\partial G_2}{\partial E_m} = -e_{mij} \varepsilon_{ij} - m_{mijk} \eta_{ijk} - \varepsilon_{mn}^\varepsilon E_n \quad (\text{C.10})$$

$$T_{ij} = \sigma_{ij} - \tau_{ijk,k} = C_{ijkl}^E \varepsilon_{kl} - G_{ijklmn}^E \eta_{lmn,k} - e_{mij} E_m + m_{mijk} E_{m,k} \quad (\text{C.11})$$

### C.2.2 Freie Helmholtz-Energie Form

$$\Psi = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} C_{ijkl}^D \varepsilon_{kl} + \frac{1}{2} \eta_{ijk} G_{ijklmn}^D \eta_{lmn} + \frac{1}{2} D_m \beta_{mn}^\varepsilon D_n + \eta_{ijk} b_{ijklm} \varepsilon_{lm} - D_m h_{mij} \varepsilon_{ij} - D_m f_{mijk} \eta_{ijk} \quad (\text{C.12})$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{ij}} = C_{ijkl}^D \varepsilon_{kl} + b_{lmij} \eta_{lmn} - h_{mij} D_m \quad (\text{C.13})$$

$$\tau_{ijk} = \frac{\partial \Psi}{\partial \eta_{ijk}} = b_{ijklm} \varepsilon_{lm} + G_{ijklmn}^D \eta_{lmn} - f_{mijk} D_m \quad (\text{C.14})$$



$$E_m = \frac{\partial \Psi}{\partial D_m} = -h_{mij}\varepsilon_{ij} - f_{mijk}\eta_{ijk} + \beta_{mn}^\varepsilon D_n \quad (\text{C.15})$$

mit  $f_{mijk} = \beta_{mn}^\varepsilon m_{nij}$ ,  $G_{ijklmn}^D = G_{ijklmn}^E + m_{oijk}f_{olmn}$   
 und  $b_{ijklm} = m_{oijk}h_{olm} = m_{oijk}\beta_{op}^\varepsilon e_{plm} = f_{oijk}e_{olm}$



## D Ableitungen für Materialmodell

### D.1 Ableitungen der freien Helmholtz-Energie der Piezoelektrizität

$$\begin{aligned}\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \bar{D}, A, \bar{\rho}) &= \Psi^r(\boldsymbol{\varepsilon}, \bar{D}, A, \bar{\rho}) + \Psi^i(A, \bar{\rho}) \\ &= \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) C_{ijkl}^D (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^i) - (D_k - P_k^i) h_{kij} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) \\ &\quad + \frac{1}{2} (D_k - P_k^i) \beta_{kl}^\varepsilon (D_l - P_l^i) + \Psi^i\end{aligned}\quad (\text{D.1})$$

#### D.1.1 Ableitungen erster Ordnung

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{mn}} = C_{mnkl}^D (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^i) - h_{kmn} (D_k - P_k^i) \quad (\text{D.2})$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial D_m} = -h_{mij} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) + \beta_{ml}^\varepsilon (D_l - P_l^i) \quad (\text{D.3})$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial A_{mn}} = -\frac{3}{2} \varepsilon^{sat} (C_{ijkl}^D (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^i) - h_{kij} (D_k - P_k^i)) P_{ijmn}^{Dev} + \frac{\partial \Psi^i}{\partial A_{mn}} \quad (\text{D.4})$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi}{\partial \rho_m} &= \frac{1}{2} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) \frac{\partial C_{ijkl}^D}{\partial \rho_m} (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^i) - (D_k - P_k^i) \frac{\partial h_{kij}}{\partial \rho_m} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) \\ &\quad + \frac{1}{2} (D_k - P_k^i) \frac{\partial \beta_{kl}^\varepsilon}{\partial \rho_m} (D_l - P_l^i) \\ &\quad - P^{sat} (-h_{mij} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) + \beta_{ml}^\varepsilon (D_l - P_l^i)) + \frac{\partial \Psi^i}{\partial \rho_m}\end{aligned}\quad (\text{D.5})$$

## D.1.2 Ableitungen zweiter Ordnung

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varepsilon_{mn} \partial \varepsilon_{op}} = C_{mnop}^D \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varepsilon_{mn} \partial D_o} = -h_{omn} \quad (\text{D.6})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial D_m \partial \varepsilon_{no}} = -h_{mno} \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial D_m \partial D_n} = \beta_{mn}^\varepsilon \quad (\text{D.7})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varepsilon_{mn} \partial A_{op}} = -\frac{3}{2} \varepsilon^{sat} C_{mnkl}^D P_{klop}^{Dev} \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial D_m \partial A_{no}} = \frac{3}{2} \varepsilon^{sat} h_{mij} P_{ijno}^{Dev} \quad (\text{D.8})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varepsilon_{mn} \partial \rho_o} = \frac{\partial C_{mnkl}^D}{\partial \rho_o} (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^i) - \frac{\partial h_{kmn}}{\partial \rho_o} (D_k - P_k^i) + P^{sat} h_{omn} \quad (\text{D.9})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial D_m \partial \rho_n} = -\frac{\partial h_{mij}}{\partial \rho_n} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) + \frac{\partial \beta_{ml}^\varepsilon}{\partial \rho_n} (D_l - P_l^i) - P^{sat} \beta_{mn}^\varepsilon \quad (\text{D.10})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial A_{mn} \partial A_{op}} = \frac{9}{4} (\varepsilon^{sat})^2 P_{ijmn}^{Dev} C_{ijkl}^D P_{klop}^{Dev} + \frac{\partial^2 \Psi^i}{\partial A_{mn} \partial A_{op}} \quad (\text{D.11})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial A_{mn} \partial \rho_o} &= -\frac{3}{2} \varepsilon^{sat} \left( \frac{\partial C_{ijkl}^D}{\partial \rho_o} (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^i) - \frac{\partial h_{kij}}{\partial \rho_o} (D_k - P_k^i) + P^{sat} h_{oij} \right) P_{ijmn}^{Dev} \\ &\quad + \frac{\partial^2 \Psi^i}{\partial A_{mn} \partial \rho_o} \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_m \partial \rho_n} &= \frac{1}{2} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) \frac{\partial^2 C_{ijkl}^D}{\partial \rho_m \partial \rho_n} (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^i) \\ &\quad - (D_k - P_k^i) \frac{\partial^2 h_{kij}}{\partial \rho_m \partial \rho_n} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) + \frac{1}{2} (D_k - P_k^i) \frac{\partial^2 \beta_{kl}^\varepsilon}{\partial \rho_m \partial \rho_n} (D_l - P_l^i) \\ &\quad - P^{sat} \left( -\frac{\partial h_{mij}}{\partial \rho_n} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) - \frac{\partial h_{nij}}{\partial \rho_m} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) + \frac{\partial \beta_{ml}^\varepsilon}{\partial \rho_n} (D_l - P_l^i) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \beta_{nl}^\varepsilon}{\partial \rho_m} (D_l - P_l^i) \right) + (P^{sat})^2 \beta_{mn}^\varepsilon + \frac{\partial^2 \Psi^i}{\partial \rho_m \partial \rho_n} \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

## D.2 Ableitungen der freien Helmholtz-Energie der Flexoelektrizität

$$\begin{aligned}
 \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, A, \vec{\rho}) &= \Psi^r(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\eta}, \vec{D}, A, \vec{\rho}) + \Psi^i(A, \vec{\rho}) \\
 &= \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) C_{ijkl}^D (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^i) + \frac{1}{2} \eta_{ijk} G_{ijklmn}^D \eta_{lmn} \\
 &\quad - \frac{1}{2} (D_m - P_m^i) \beta_{mn}^\varepsilon (D_n - P_n^i) + \eta_{ijk} b_{ijklm} (\varepsilon_{lm} - \varepsilon_{lm}^i) \quad (\text{D.14}) \\
 &\quad - (D_m - P_m^i) h_{mij} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^i) - (D_m - P_m^i) f_{mijk} \eta_{ijk} \\
 &\quad + \Psi^i
 \end{aligned}$$

### D.2.1 Ableitungen erster Ordnung

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{mn}} = \quad (\text{D.2}) \quad + b_{ijkmn} \eta_{ijk} \quad \frac{\partial \Psi}{\partial D_m} = \quad (\text{D.3}) \quad - f_{mijk} \eta_{ijk} \quad (\text{D.15})$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \eta_{ijk}} = G_{ijklmn}^D \eta_{lmn} + b_{ijklm} (\varepsilon_{lm} - \varepsilon_{lm}^i) - f_{mijk} (D_m - P_m^i) \quad (\text{D.16})$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial A_{op}} = \quad (\text{D.4}) \quad - \frac{3}{2} \varepsilon^{sat} b_{ijklm} \eta_{ijk} P_{lmop}^{Dev} \quad (\text{D.17})$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_o} = \quad (\text{D.5}) \quad &+ \frac{1}{2} \eta_{ijk} \frac{\partial G_{ijklmn}^D}{\partial \rho_o} \eta_{lmn} + \eta_{ijk} \frac{\partial b_{ijklm}}{\partial \rho_o} (\varepsilon_{lm} - \varepsilon_{lm}^i) \\
 &- (D_m - P_m^i) \frac{\partial f_{mijk}}{\partial \rho_o} \eta_{ijk} + P^{sat} f_{oijk} \eta_{ijk} \quad (\text{D.18})
 \end{aligned}$$

### D.2.2 Ableitungen zweiter Ordnung

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \eta_{ijk} \partial \eta_{lmn}} = G_{ijklmn}^D \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varepsilon_{mn} \partial \eta_{ijk}} = b_{ijkmn} \quad (\text{D.19})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial D_m \partial \eta_{ijk}} = -f_{mijk} \quad (\text{D.20})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \eta_{ijk} \partial A_{op}} = -\frac{3}{2} \varepsilon^{sat} b_{ijklmn} P_{mno}^{Dev} \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varepsilon_{mn} \partial p_o} = (\text{D.9}) + \frac{\partial b_{ijklmn}}{\partial p_o} \eta_{ijk} \quad (\text{D.21})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \eta_{ijk} \partial p_o} = \frac{\partial G_{ijklmn}^D}{\partial p_o} \eta_{lmn} + \frac{\partial b_{ijklmn}}{\partial p_o} (\varepsilon_{mn} - \varepsilon_{mn}^i) - \frac{\partial f_{mijk}}{\partial p_o} (D_m - P_m^i) + P^{sat} f_{oijk} \quad (\text{D.22})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial D_m \partial \rho_n} = (\text{D.10}) - \frac{\partial f_{mijk}}{\partial \rho_n} \eta_{ijk} \quad (\text{D.23})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial A_{op} \partial \rho_q} = (\text{D.12}) - \frac{3}{2} \varepsilon^{sat} \frac{\partial b_{ijklm}}{\partial \rho_q} \eta_{ijk} P_{lmo}^{Dev} \quad (\text{D.24})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_o \partial \rho_p} = & (\text{D.13}) + \frac{1}{2} \eta_{ijk} \frac{\partial^2 G_{ijklmn}^D}{\partial \rho_o \partial \rho_p} \eta_{lmn} + \eta_{ijk} \frac{\partial^2 b_{ijklm}}{\partial \rho_o \partial \rho_p} (\varepsilon_{lm} - \varepsilon_{lm}^i) \\ & - (D_m - P_m^i) \frac{\partial^2 f_{mijk}}{\partial \rho_o \partial \rho_p} \eta_{ijk} + P^{sat} \left( \frac{\partial f_{pijk}}{\partial \rho_o} \eta_{ijk} + \frac{\partial f_{oijk}}{\partial \rho_p} \eta_{ijk} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

## D.3 Ableitungen der Materialtensoren

### D.3.1 Ableitungen piezoelektrischer d-Tensor

$$d_{kij} = (d_{33} - d_{31} - d_{15}) \rho_k \rho_i \rho_j + d_{31} \rho_k \delta_{ij} + \frac{1}{2} d_{15} (\delta_{ki} \rho_j + \delta_{kj} \rho_i) \quad (\text{D.26})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial d_{kij}}{\partial \rho_l} = & (d_{33} - d_{31} - d_{15}) (\delta_{kl} \rho_i \rho_j + \rho_k \delta_{il} \rho_j + \rho_k \rho_i \delta_{jl}) \\ & + d_{31} \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{1}{2} d_{15} (\delta_{ki} \delta_{jl} + \delta_{kj} \delta_{il}) \end{aligned} \quad (\text{D.27})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 d_{kij}}{\partial \rho_i \partial \rho_m} &= (d_{33} - d_{31} - d_{15})(\delta_{kl} \delta_{im} \rho_j + \delta_{kl} \rho_i \delta_{jm} + \delta_{km} \delta_{il} \rho_j) \\ &\quad + \rho_k \delta_{il} \delta_{jm} + \delta_{km} \rho_i \delta_{jl} + \rho_k \delta_{im} \delta_{jl} \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

### D.3.2 Ableitungen des Impermittivitätstensor bei konstanter Dehnung

$$\beta_{ij}^\varepsilon = (\epsilon_{ij}^\sigma - d_{ikl} C_{klmn}^E d_{jmn})^{-1} = (\epsilon_{ij}^\varepsilon)^{-1} \quad (\text{D.29})$$

$$\frac{\partial \beta_{ij}^\varepsilon}{\partial \rho_o} = -\beta_{ip}^\varepsilon \frac{\partial \epsilon_{pq}^\varepsilon}{\partial \rho_o} \beta_{qj}^\varepsilon \quad \text{siehe z.B. [242]}, \quad (\text{D.30})$$

$$\text{mit} \quad \frac{\partial \epsilon_{ij}^\varepsilon}{\partial \rho_o} = -\left( \frac{\partial d_{ikl}}{\partial \rho_o} d_{jmn} + d_{ikl} \frac{\partial d_{jmn}}{\partial \rho_o} \right) C_{klmn}^E$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \beta_{ij}^\varepsilon}{\partial \rho_o \partial \rho_r} &= -\frac{\partial \beta_{ip}^\varepsilon}{\partial \rho_r} \frac{\partial \epsilon_{pq}^\varepsilon}{\partial \rho_o} \beta_{qj}^\varepsilon - \beta_{ip}^\varepsilon \frac{\partial^2 \epsilon_{pq}^\varepsilon}{\partial \rho_o \partial \rho_r} \beta_{qj}^\varepsilon - \beta_{ip}^\varepsilon \frac{\partial \epsilon_{pq}^\varepsilon}{\partial \rho_o} \frac{\partial \beta_{qj}^\varepsilon}{\partial \rho_r} \quad \text{mit} \\ \frac{\partial^2 \epsilon_{ij}^\varepsilon}{\partial \rho_o \partial \rho_p} &= -\left( \frac{\partial^2 d_{ikl}}{\partial \rho_o \partial \rho_p} d_{jmn} + \frac{\partial d_{ikl}}{\partial \rho_o} \frac{\partial d_{jmn}}{\partial \rho_p} + \frac{\partial d_{ikl}}{\partial \rho_p} \frac{\partial d_{jmn}}{\partial \rho_o} + d_{ikl} \frac{\partial^2 d_{jmn}}{\partial \rho_o \partial \rho_p} \right) C_{klmn}^E \end{aligned} \quad (\text{D.31})$$

### D.3.3 Ableitungen des piezoelektrischen h-Tensor

$$h_{kij} = \beta_{kl}^\varepsilon d_{lmn} C_{mni}^E \quad (\text{D.32})$$

$$\frac{\partial h_{kij}}{\partial \rho_o} = \left( \frac{\partial \beta_{kl}^\varepsilon}{\partial \rho_o} d_{lmn} + \beta_{kl}^\varepsilon \frac{\partial d_{lmn}}{\partial \rho_o} \right) C_{mni}^E \quad (\text{D.33})$$

$$\frac{\partial^2 h_{kij}}{\partial \rho_o \partial \rho_p} = \left( \frac{\partial^2 \beta_{kl}^\varepsilon}{\partial \rho_o \partial \rho_p} d_{lmn} + \frac{\partial \beta_{kl}^\varepsilon}{\partial \rho_o} \frac{\partial d_{lmn}}{\partial \rho_p} + \frac{\partial \beta_{kl}^\varepsilon}{\partial \rho_p} \frac{\partial d_{lmn}}{\partial \rho_o} + \beta_{kl}^\varepsilon \frac{\partial^2 d_{lmn}}{\partial \rho_o \partial \rho_p} \right) C_{mni}^E \quad (\text{D.34})$$

### D.3.4 Ableitungen des Elastizitätstensor bei konstanter dielektrischer Verschiebung

$$C_{ijkl}^D = C_{ijkl}^E + d_{mno} C_{noij}^E h_{mkl} \quad (D.35)$$

$$\frac{\partial C_{ijkl}^D}{\partial \rho_p} = \left( \frac{\partial d_{mno}}{\partial \rho_p} h_{mkl} + d_{mno} \frac{\partial h_{mkl}}{\partial \rho_p} \right) C_{noij}^E \quad (D.36)$$

$$\frac{\partial^2 C_{ijkl}^D}{\partial \rho_p \partial \rho_q} = \left( \frac{\partial^2 d_{mno}}{\partial \rho_p \partial \rho_q} h_{mkl} + \frac{\partial d_{mno}}{\partial \rho_p} \frac{\partial h_{mkl}}{\partial \rho_q} + \frac{\partial d_{mno}}{\partial \rho_q} \frac{\partial h_{mkl}}{\partial \rho_p} + d_{mno} \frac{\partial^2 h_{mkl}}{\partial \rho_p \partial \rho_q} \right) C_{noij}^E \quad (D.37)$$

### D.3.5 Ableitungen des flexoelektrischen Kopplungstensors

$$f_{mijk} = \beta_{mn}^\varepsilon m_{nij} \quad (D.38)$$

$$\frac{\partial f_{mijk}}{\partial \rho_o} = \frac{\partial \beta_{mn}^\varepsilon}{\partial \rho_o} m_{nij} \quad \frac{\partial^2 f_{mijk}}{\partial \rho_o \partial \rho_p} = \frac{\partial^2 \beta_{mn}^\varepsilon}{\partial \rho_o \partial \rho_p} m_{nij} \quad (D.39)$$

### D.3.6 Ableitungen des Verzerrungskopplungstensor

$$b_{ijklm} = m_{oijk} h_{olm} \quad (D.40)$$

$$\frac{\partial b_{ijklm}}{\partial \rho_p} = m_{oijk} \frac{\partial h_{olm}}{\partial \rho_p} \quad \frac{\partial^2 b_{ijklm}}{\partial \rho_p \partial \rho_q} = m_{oijk} \frac{\partial^2 h_{olm}}{\partial \rho_p \partial \rho_q} \quad (D.41)$$

### D.3.7 Ableitungen des Elastizitätstensor höherer Ordnung bei konstanter dielektrischer Verschiebung

$$G_{ijklmn}^D = G_{ijklmn}^E + m_{oijk} f_{olmn} \quad (D.42)$$

$$\frac{\partial G_{ijklmn}^D}{\partial \rho_p} = m_{oijk} \frac{\partial f_{olmn}}{\partial \rho_p} \quad \frac{\partial^2 G_{ijklmn}^D}{\partial \rho_p \partial \rho_q} = m_{oijk} \frac{\partial^2 f_{olmn}}{\partial \rho_p \partial \rho_q} \quad (D.43)$$



## D.4 Ableitungen des Umklappkriteriums

$$f - f_c = \frac{(\mathbf{f}^A)^{Dev} : (\mathbf{f}^A)^{Dev}}{(\mathbf{f}_c^A)^2} + \frac{\vec{\mathbf{f}}^\rho \cdot \vec{\mathbf{f}}^\rho}{(\mathbf{f}_c^\rho)^2} - 1. \quad (\text{D.44})$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{f}^A} = \frac{2}{(\mathbf{f}_c^A)^2} \mathbb{P}^{Dev} : \mathbf{f}^A \quad \frac{\partial f}{\partial \vec{\mathbf{f}}^\rho} = \frac{2}{(\mathbf{f}_c^\rho)^2} \vec{\mathbf{f}}^\rho \quad (\text{D.45})$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{f}^{A^2}} = \frac{2}{(\mathbf{f}_c^A)^2} \mathbb{P}^{Dev} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial \vec{\mathbf{f}}^{\rho 2}} = \frac{2}{(\mathbf{f}_c^\rho)^2} \mathbf{I} \quad (\text{D.46})$$

## D.5 Ableitungen des irreversiblen Anteil der freien Helmholtz-Energie

$$\Psi^i(\mathbf{A}, \vec{\rho}) = \frac{1}{2} c_A \mathbf{A}^{Dev} : \mathbf{A}^{Dev} + \frac{1}{2} c_\rho \vec{\rho} \cdot \vec{\rho} + \Psi^{iA, sat}(\mathbf{A}) + \Psi^{i\rho, sat}(\mathbf{A}, \vec{\rho}) \quad (\text{D.47})$$

$$\text{mit} \quad \Psi^{iA, sat}(\mathbf{A}) = \frac{a_A}{m_A} \sum_{i=1}^3 \alpha_i^{-m_A} = \frac{a_A}{m_A} \text{tr}(\mathbf{A}^{-m_A}) \quad (\text{D.48})$$

$$\text{und} \quad \Psi^{i\rho, sat}(\mathbf{A}, \vec{\rho}) = \frac{a_\rho}{m_\rho} (1 - \eta)^{-m_\rho} \quad (\text{D.49})$$

$$\frac{\partial \Psi^i}{\partial \mathbf{A}} = c_A \mathbb{P}^{Dev} : \mathbf{A} - a_A \mathbf{A}^{-m_A - 1} + a_\rho (1 - \eta)^{-m_\rho - 1} \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{A}} \quad (\text{D.50})$$

$$\frac{\partial \Psi^i}{\partial \vec{\rho}} = c_\rho \vec{\rho} + a_\rho (1 - \eta)^{-m_\rho - 1} \frac{\partial \eta}{\partial \vec{\rho}} \quad (\text{D.51})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi^i}{\partial \mathbf{A}^2} &= c_A \mathbb{P}^{Dev} + \frac{\partial^2 \Psi^{iA, sat}}{\partial \mathbf{A}^2} + a_\rho (m_\rho + 1) (1 - \eta)^{-m_\rho - 2} \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{A}} \otimes \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{A}} \\ &+ a_\rho (1 - \eta)^{-m_\rho - 1} \frac{\partial^2 \eta}{\partial \mathbf{A}^2} \end{aligned} \quad (\text{D.52})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi^{iA, sat}}{\partial A^2} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \begin{cases} a_A(m_A + 1) \alpha_i^{-m_A-2} \vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_i^A & \text{für } i = j \\ \frac{1 - a_A \alpha_j^{-m_A-1} + a_A \alpha_i^{-m_A-1}}{2(\alpha_j - \alpha_i)} (\vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_j^A \otimes \vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_j^A \\ + \vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_j^A \otimes \vec{e}_j^A \otimes \vec{e}_i^A) & \text{für } i \neq j, \alpha_i \neq \alpha_j \\ \frac{1}{2} a_A(m_A + 1) \alpha_i^{-m_A-2} (\vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_j^A \otimes \vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_j^A \\ + \vec{e}_i^A \otimes \vec{e}_j^A \otimes \vec{e}_j^A \otimes \vec{e}_i^A) & \text{für } i \neq j, \alpha_i = \alpha_j \end{cases} \quad (\text{D.53})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi^i}{\partial A \partial \bar{\rho}} = a_\rho(m_\rho + 1)(1 - \eta)^{-m_\rho-2} \frac{\partial \eta}{\partial A} \otimes \frac{\partial \eta}{\partial \bar{\rho}} + a_\rho(1 - \eta)^{-m_\rho-1} \frac{\partial^2 \eta}{\partial A \partial \bar{\rho}} \quad (\text{D.54})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi^i}{\partial \bar{\rho}^2} = c_\rho \mathbf{I} + a_\rho(m_\rho + 1)(1 - \eta)^{-m_\rho-2} \frac{\partial \eta}{\partial \bar{\rho}} \otimes \frac{\partial \eta}{\partial \bar{\rho}} + a_\rho(1 - \eta)^{-m_\rho-1} \frac{\partial^2 \eta}{\partial \bar{\rho}^2} \quad (\text{D.55})$$

wobei

$$\eta = B_{ij} \rho_j B_{ik} \rho_k \quad \text{mit} \quad B_{ij} = (\xi \delta_{ij} + (1 - \xi) A_{ij})^{-1} \quad (\text{D.56})$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial A_{ij}} = -(1 - \xi)(\hat{b}_i b_j + \hat{b}_j b_i) \quad \text{und} \quad \frac{\partial \eta}{\partial \rho_i} = 2\hat{b}_i \quad (\text{D.57})$$

$$\text{mit} \quad b_i = B_{ij} \rho_j \quad \text{und} \quad \hat{b}_i = B_{ij} b_j$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \eta}{\partial A_{ij} \partial A_{kl}} &= \frac{1}{2} (1 - \xi)^2 (\hat{B}_{ik} b_j b_l + \hat{B}_{il} b_j b_k + b_i b_k \hat{B}_{jl} + b_i b_l \hat{B}_{jk} \\ &\quad + \hat{b}_i b_k B_{jl} + \hat{b}_i b_l B_{jk} + b_i \hat{b}_k B_{jl} + b_i \hat{b}_l B_{jk} \end{aligned} \quad (\text{D.58})$$

$$\text{mit} \quad \hat{B}_{ij} = B_{ki} B_{kj}$$

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial \rho_i \partial \rho_j} = 2\hat{B}_{ij} \quad \frac{\partial^2 \eta}{\partial A_{ij} \partial \rho_k} = -(1 - \xi)(B_{ki} \hat{b}_j + B_{kj} \hat{b}_i + \hat{B}_{ki} b_j + \hat{B}_{kj} b_i) \quad (\text{D.59})$$

# E FE-Implementierung

## E.1 Diskretisierung der Felder

In gemischter piezoelektrische Formulierung aus Abschn. 6.3:

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\varepsilon} &= \sum_{I=1}^{n_{el}} \mathbf{N}_I^{\varepsilon} \boldsymbol{\varepsilon}_I = N_e^{\varepsilon} \boldsymbol{\varepsilon}_e \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_I = [\varepsilon_{11} \ \varepsilon_{22} \ \varepsilon_{33} \ 2\varepsilon_{12} \ 2\varepsilon_{23} \ 2\varepsilon_{13}]^T \\
 \mathbf{D} &= \sum_{I=1}^{n_{el}} \mathbf{N}_I^D \mathbf{D}_I = N_e^D \mathbf{D}_e \quad \text{mit} \quad \mathbf{D}_I = [D_1 \ D_2 \ D_3]^T \\
 \tilde{\boldsymbol{\sigma}} &= \sum_{I=1}^{n_{el}} \mathbf{N}_I^{\tilde{\sigma}} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_I = N_e^{\tilde{\sigma}} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_e \quad \text{mit} \quad \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_I = [\tilde{\sigma}_{11} \ \tilde{\sigma}_{22} \ \tilde{\sigma}_{33} \ \tilde{\sigma}_{12} \ \tilde{\sigma}_{23} \ \tilde{\sigma}_{13}]^T \\
 \mathbf{u} &= \sum_{I=1}^{n_{el}} \mathbf{N}_I^u \mathbf{u}_I = N_e^u \mathbf{u}_e \quad \text{mit} \quad \mathbf{u}_I = [u_1 \ u_2 \ u_3]^T \\
 \phi &= \sum_{I=1}^{n_{el}} N_I^{\phi} \phi_I = N_e^{\phi} \phi_e \quad \text{mit} \quad \phi_I = \phi
 \end{aligned} \tag{E.1}$$

In gemischter flexoelektrischen Formulierung aus Abschn. 6.6:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u} &= \sum_{I=1}^{n_{el}} \mathbf{N}_I^u \mathbf{u}_I = N_e^u \mathbf{u}_e \quad \text{mit} \quad \mathbf{u}_I = [u_1 \ u_2 \ u_3]^T \\
 \mathbf{H} &= \sum_{I=1}^{n_{el}} \mathbf{N}_I^H \mathbf{H}_I = N_e^H \mathbf{H}_e \quad \text{mit} \quad \mathbf{H}_I = [H_{11} \ H_{22} \ H_{33} \ H_{12} \ H_{21} \ H_{23} \ H_{32} \ H_{13} \ H_{31}]^T \\
 \mathbf{D} &= \sum_{I=1}^{n_{el}} \mathbf{N}_I^D \mathbf{D}_I = N_e^D \mathbf{D}_e \quad \text{mit} \quad \mathbf{D}_I = [D_1 \ D_2 \ D_3]^T \\
 \phi &= \sum_{I=1}^{n_{el}} N_I^{\phi} \phi_I = N_e^{\phi} \phi_e \quad \text{mit} \quad \phi_I = \phi \\
 \boldsymbol{\lambda} &= \sum_{I=1}^{n_{el}} \mathbf{N}_I^{\lambda} \boldsymbol{\lambda}_I = N_e^{\lambda} \boldsymbol{\lambda}_e \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\lambda}_I = [\lambda_{11} \ \lambda_{22} \ \lambda_{33} \ \lambda_{12} \ \lambda_{21} \ \lambda_{23} \ \lambda_{32} \ \lambda_{13} \ \lambda_{31}]^T
 \end{aligned} \tag{E.2}$$

## E.2 Matrizen der Ansatzfunktionen (3D)

$$\mathbf{N}_I^u = \mathbf{N}_I^D = \text{diag}[N_I \quad N_I \quad N_I]^T \quad (\text{E.3})$$

$$\mathbf{N}_I^\varepsilon = \mathbf{N}_I^\sigma = \text{diag}[N_I \quad N_I \quad N_I \quad N_I \quad N_I \quad N_I]^T \quad (\text{E.4})$$

$$\mathbf{N}_I^H = \mathbf{N}_I^\lambda = \text{diag}[N_I \quad N_I \quad N_I \quad N_I \quad N_I \quad N_I \quad N_I \quad N_I \quad N_I]^T \quad (\text{E.5})$$

$$\mathbf{N}_I^\phi = N_I \quad (\text{E.6})$$

$$\mathbf{B}_I^u = \begin{bmatrix} N_{I,1} & 0 & 0 \\ 0 & N_{I,2} & 0 \\ 0 & 0 & N_{I,3} \\ N_{I,2} & N_{I,1} & 0 \\ 0 & N_{I,3} & N_{I,2} \\ N_{I,3} & 0 & N_{I,1} \end{bmatrix} \quad \mathbf{M}_I^u = \begin{bmatrix} N_{I,1} & 0 & 0 \\ 0 & N_{I,2} & 0 \\ 0 & 0 & N_{I,3} \\ N_{I,2} & 0 & 0 \\ 0 & N_{I,1} & 0 \\ 0 & N_{I,3} & 0 \\ 0 & 0 & N_{I,2} \\ N_{I,3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & N_{I,1} \end{bmatrix} \quad (\text{E.7})$$

$$\mathbf{B}_I^\phi = \begin{bmatrix} N_{I,1} & N_{I,2} & N_{I,3} \end{bmatrix}^T \quad (\text{E.8})$$

$N_{I,i}$ : kartesischen Ableitungen der Ansatzfunktionen

$$\mathbf{B}_I^H = \begin{bmatrix}
 N_{I,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & N_{I,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & N_{I,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & N_{I,2} & N_{I,2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_{I,3} & N_{I,3} \\
 0 & N_{I,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 N_{I,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & N_{I,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & N_{I,1} & N_{I,1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_{I,3} & N_{I,3} & 0 & 0 \\
 0 & 0 & N_{I,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 N_{I,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & N_{I,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_{I,1} & N_{I,1} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_{I,2} & N_{I,2} & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_{I,1} & N_{I,1} & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_{I,2} & N_{I,2} \\
 0 & 0 & 0 & N_{I,3} & N_{I,3} & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{bmatrix} \quad (\text{E.9})$$



## Schriftenreihe des Instituts für Angewandte Materialien

---

ISSN 2192-9963

---

Eine vollständige Übersicht der Bände finden Sie im Verlagsshop

- Band 50 Michael Selzer  
**Mechanische und Strömungsmechanische Topologie-  
optimierung mit der Phasenfeldmethode.**  
ISBN 978-3-7315-0431-3
- Band 51 Michael Mahler  
**Entwicklung einer Auswertemethode für  
bruchmechanische Versuche an kleinen Proben  
auf der Basis eines Kohäsivzonenmodells.**  
ISBN 978-3-7315-0441-2
- Band 52 Christoph Bohnert  
**Numerische Untersuchung des Verformungs- und  
Bruchverhaltens von einkristallinem Wolfram auf  
mikroskopischer Ebene.**  
ISBN 978-3-7315-0444-3
- Band 53 Stefan Guth  
**Schädigung und Lebensdauer von Nickelbasislegierungen  
unter thermisch-mechanischer Ermüdungsbeanspruchung  
bei verschiedenen Phasenlagen.**  
ISBN 978-3-7315-0445-0
- Band 54 Markus Klinsmann  
**The Effects of Internal Stress and Lithium Transport on  
Fracture in Storage Materials in Lithium-Ion Batteries.**  
ISBN 978-3-7315-0455-9
- Band 55 Thomas Straub  
**Experimental Investigation of Crack Initiation in  
Face-Centered Cubic Materials in the High and  
Very High Cycle Fatigue Regime.**  
ISBN 978-3-7315-0471-9

- Band 56 Maren Lepple  
**Kupfer- und Eisenoxide als Konversions-Elektrodenmaterialien für Lithium-Ionen-Batterien: Thermodynamische und Elektrochemische Untersuchungen.**  
ISBN 978-3-7315-0482-5
- Band 57 Stefan Andreas Slaby  
**Charakterisierung und Bewertung der Zug- und Ermüdungseigenschaften von Mikrobauteilen aus 17-4PH Edelstahl. Ein Vergleich von mikropulverspritzgegossenem und konventionell hergestelltem Material.**  
ISBN 978-3-7315-0484-9
- Band 58 Kumar Ankit  
**Phase-field modeling of microstructural pattern formation in alloys and geological veins.**  
ISBN 978-3-7315-0491-7
- Band 59 Kuo Zhang  
**Characterization and Modeling of the Ratcheting Behavior of the Ferritic-Martensitic Steel P91.**  
ISBN 978-3-7315-0503-7
- Band 60 Nicht erschienen
- Band 61 Fabian Lemke  
**Untersuchung des Sinterverhaltens von SrTiO<sub>3</sub> unter Berücksichtigung der Defektchemie.**  
ISBN 978-3-7315-0510-5
- Band 62 Johannes Kümmel  
**Detaillierte Analyse der Aufbauschneidenbildung bei der Trockenzerspannung von Stahl C45E mit Berücksichtigung des Werkzeugverschleißes.**  
ISBN 978-3-7315-0518-1
- Band 63 László Hagymási  
**Modellierung der Stoffübertragung beim Niederdruckcarbonitrieren mit Ammoniak und Acetylen.**  
ISBN 978-3-7315-0568-6
- Band 64 Reza Eslami  
**A novel micro-mechanical model for prediction of multiaxial high cycle fatigue at small scales.**  
ISBN 978-3-7315-0583-9



- Band 65 Sebastian Schulz  
**Phase-field simulations of multi-component solidification and coarsening based on thermodynamic datasets.**  
ISBN 978-3-7315-0618-8
- Band 66 Markus Stricker  
**Die Übertragung von mikrostrukturellen Eigenschaften aus der diskreten Versetzungsdynamik in Kontinuumsbeschreibungen.**  
ISBN 978-3-7315-0658-4
- Band 67 Luis Straßberger  
**Untersuchung und Modellierung des viskoplastischen Verformungsverhaltens oxidpartikelverstärkter Stähle.**  
ISBN 978-3-7315-0674-4
- Band 68 Mark Wobrock  
**Microplasticity of idealized single crystalline Ag cantilevers characterized with methods of high resolution.**  
ISBN 978-3-7315-0682-9
- Band 69 Amritesh Kumar  
**Micromechanical study on the deformation behaviour of directionally solidified NiAl-Cr eutectic composites.**  
ISBN 978-3-7315-0694-2
- Band 70 Johannes Hötzer  
**Massiv-parallele und großskalige Phasenfeldsimulationen zur Untersuchung der Mikrostrukturentwicklung.**  
ISBN 978-3-7315-0693-5
- Band 71 Thomas Hupfer  
**Herstellung von LATP für den Einsatz als Festkörperelektrolyt und dessen Eigenschaften.**  
ISBN 978-3-7315-0702-4
- Band 72 Florentin Pottmeyer  
**Schädigungsverhalten von in CFK-Laminaten eingebetteten Inserts unter bauteilnahen Beanspruchungen.**  
ISBN 978-3-7315-0719-2
- Band 73 Andres Höweling  
**Untersuchung der Hochvoltstabilität und Tiefentladung von dotierten  $\text{LiNi}_{0,5}\text{Mn}_{1,5}\text{O}_4$ -Hochvoltspinellen.**  
ISBN 978-3-7315-0728-4

- Band 74     Tabea Gisela Schwark  
**Deformation and Fracture Properties of the Soft Magnetic Composite Somaloy 700 3P on Different Length Scales.**  
ISBN 978-3-7315-0759-8
- Band 75     Klaudia Lichtenberg  
**Metallmatrixverbunde mit Verstärkungselementen aus metallischem Glas  $\text{Ni}_{60}\text{Nb}_{20}\text{Ta}_{20}$  – Herstellung und Charakterisierung.**  
ISBN 978-3-7315-0782-6
- Band 76     Claudio Findeisen  
**Charakterisierung und Modellierung von instabilen Metamaterialien.**  
ISBN 978-3-7315-0869-4
- Band 77     Nilesha Mishra  
**Influence of strain on the functionality of ink-jet printed thin films and devices on flexible substrates.**  
ISBN 978-3-7315-0853-3
- Band 78     Simon Werner Bonk  
**Plastische Verformungsmechanismen in hochgradig kaltgewalzten, ultrafeinkörnigen Wolframblechen.**  
ISBN 978-3-7315-0878-6
- Band 79     Tim Gräning  
**Herstellung, Charakterisierung und Optimierung von austenitischen ODS Stählen.**  
ISBN 978-3-7315-0732-1
- Band 80     Peter Rupp  
**Herstellung, Prüfung und Modellierung neuartiger hybrider Aluminiumschaum-CFK-Sandwichverbunde.**  
ISBN 978-3-7315-0880-9
- Band 81     Benjamin Sebastian Ehreiser  
**Einfluss mechanischer Lasten auf die Herstellung von Stahl-Glaskeramik-Verbunden.**  
ISBN 978-3-7315-0954-7
- Band 82     Hans Giel  
**Weiterentwicklung experimenteller Methoden zur Ermittlung thermodynamischer Werkstoffdaten von Lithium-Ionen-Batterien.**  
ISBN 978-3-7315-0981-3

- Band 83 Anna Trauth  
**Characterisation and Modelling of Continuous-Discontinuous Sheet Moulding Compound Composites for Structural Applications.**  
ISBN 978-3-7315-0950-9
- Band 84 Jonas Johannes Hüther  
**The Impact of Recycling on the Fibre and the Composite Properties of Carbon Fibre Reinforced Plastics.**  
ISBN 978-3-7315-0983-7
- Band 85 Nicolas A. Mayer  
**Thermodynamik von Kobaltoxid Anodenmaterialien für Lithium-Ionen-Batterien und ihr elektrochemisches Verhalten.**  
ISBN 978-3-7315-0996-7
- Band 86 Ulrich Führer  
**Untersuchung und Modellierung des Haltezeiteinflusses auf die zyklische Entfestigung ferritisch-martensitischer Stähle.**  
ISBN 978-3-7315-0837-3
- Band 87 Ebru Cihan  
**Structure evolution in tribological interfaces studied by multilayer model alloys.**  
ISBN 978-3-7315-0999-8
- Band 88 Markus Sudmanns  
**Entwicklung einer Kontinuumsbeschreibung für die Versetzungsmobilität in Versetzungsnetzwerken.**  
ISBN 978-3-7315-1001-7
- Band 89 Tao Zhang  
**Phase-field Modeling of Phase Changes and Mechanical Stresses in Electrode Particles of Secondary Batteries.**  
ISBN 978-3-7315-1002-4
- Band 90 Markus Ganser  
**On the Electro-Chemo-Mechanical Coupling in Solid State Batteries and its Impact on Morphological Interface Stability.**  
ISBN 978-3-7315-1047-5

- Band 91 Michael Kellner  
**Modellierung mehrkomponentiger Materialsysteme für die Phasenfeldmethode und Analyse der simulierten Mikrostrukturen.**  
ISBN 978-3-7315-1044-4
- Band 92 Felix Schröckert  
**Herstellung dünner Folien aus Lithium-Lanthan-Titanat zur Anwendung als Festkörperelektrolyt.**  
ISBN 978-3-7315-1008-6
- Band 93 Ephraim Schoof  
**Chemomechanische Modellierung der Wärmebehandlung von Stählen mit der Phasenfeldmethode.**  
ISBN 978-3-7315-1050-5
- Band 94 Alexander Valentin Brabänder  
**Registrierende Härtemessung an neutronenbestrahlten Materialien bei hohen Temperaturen.**  
ISBN 978-3-7315-1097-0
- Band 95 Denny Schmidt  
**Einfluss der Kompaktierung auf die Elektrodenmikrostruktur und elektrochemische Performance bei Lithium-Ionen-Zellen.**  
ISBN 978-3-7315-1098-7
- Band 96 Svenja Dittrich  
**Entwicklung von Siebdruckpasten zur Herstellung von Glaslotfugungen für die Festoxidbrennstoffzelle.**  
ISBN 978-3-7315-1085-7
- Band 97 Michael Dippon  
**Bestimmung der Betriebsgrenzen für das Schnellladen von Lithium-Ionen Batterien.**  
ISBN 978-3-7315-1123-6
- Band 98 Patricia Haremski  
**Diffusionseigenschaften von Nickel in einer Festoxid-Brennstoffzelle.**  
ISBN 978-3-7315-1124-3
- Band 99 Florian Wankmüller  
**Mehrskalige Charakterisierung der Hochtemperatur-Brennstoffzelle (SOFC).**  
ISBN 978-3-7315-1142-7

- Band 100 Niklas Russner  
**Modellgestützte Analyse des Stackbetriebs von Festoxidzellen.**  
ISBN 978-3-7315-1144-1
- Band 101 Theo Fett, Karl G. Schell, Ethel C. Bucharsky, Gabriele Rizzi, Pascal Hettich, Susanne Wagner, Michael J. Hoffmann  
**Consequences of hydroxyl generation by the silica/water reaction – Part I: Diffusion and Swelling.**  
ISBN 978-3-7315-1148-9
- Band 102 Theo Fett, Karl G. Schell, Ethel C. Bucharsky, Gabriele Rizzi, Susanne Wagner, Michael J. Hoffmann  
**Consequences of hydroxyl generation by the silica/water reaction – Part II: Global and local Swelling  
Part III: Damage and Young’s Modulus.**  
ISBN 978-3-7315-1159-5
- Band 103 Johannes Dornheim  
**Modellfreies Lernen optimaler zeitdiskreter Regelungsstrategien für Fertigungsprozesse mit endlichem Zeithorizont.**  
ISBN 978-3-7315-1158-8
- Band 104 Markus Muth  
**Grundlagenuntersuchungen an intrinsisch gefertigten lasttragenden FVK/Metall-Hybridträgern.**  
ISBN 978-3-7315-1161-8
- Band 105 Oleg Birkholz  
**Modeling transport properties and electrochemical performance of hierarchically structured lithium-ion battery cathodes using resistor networks and mathematical half-cell models.**  
ISBN 978-3-7315-1172-4
- Band 106 Verena Irene Becker  
**Modellierung der Mechanik und der effektiven Transporteigenschaften von partikulären Kathoden sowie deren Einfluss auf die elektrochemische Performance von Lithium-Ionen-Batterien.**  
ISBN 978-3-7315-1174-8
- Band 107 Nikolai Zimmer  
**Nanoskalige Analytik der Mikrostruktur von hochdosig bestrahltem Beryllium.**  
ISBN 978-3-7315-1178-6

- Band 108 Francesco Mazzocchi  
**Development of NbN based Kinetic Inductance Detectors on sapphire and diamond substrates for fusion plasma polarimetric diagnostics.**  
ISBN 978-3-7315-1181-6
- Band 109 Adrian Schmidt  
**Multiskalige Modellierung von Lithium-Ionen-Batterien.**  
ISBN 978-3-7315-1227-1
- Band 110 Maximilian Röhe  
**Dynamic Model-based Analysis of Oxygen Reduction Reaction in Gas Diffusion Electrodes.**  
ISBN 978-3-7315-1234-9
- Band 111 Michael Späth  
**Phasenfeldmodellierung von Bruchbildungs-, Kristallisations- und Auflösungsvorgängen in hydrothermalen Umgebungen.**  
ISBN 978-3-7315-1242-4
- Band 112 Friedemann Streich  
**Numerische Modellierung und Simulation von bleifreien Relaxor-Ferroelektrikum-Kompositen.**  
ISBN 978-3-7315-1259-2
- Band 113 Paul S. Zielonka  
**Entwicklung und Charakterisierung von Siliziumnitrid-/Siliziumkarbidkompositen für den Einsatz in tribologisch hochbeanspruchten Gleitsystemen.**  
ISBN 978-3-7315-1269-1
- Band 114 Carsten Bonnekoh  
**Der Spröd-duktil-Übergang in ultrafeinkörnigem Wolfram.**  
ISBN 978-3-7315-1264-6
- Band 115 Marcel Heinzmann  
**Analyse und Modellbildung von PEM-Brennstoffzellen mittels elektrochemischer Impedanzspektroskopie.**  
ISBN 978-3-7315-1319-3
- Band 116 Felix Sutter  
**Materiell nichtlineare Kontinuumsmodellierung ferroelektrischer Funktionskeramiken mit piezoelektrischen und flexoelektrischen Eigenschaften.**  
ISBN 978-3-7315-1337-7



KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE (KIT)  
SCHRIFTENREIHE DES INSTITUTS FÜR ANGEWANDTE MATERIALIEN

Bei der Entwicklung moderner mikroelektromechanischer Systeme (MEMS) spielt die computergestützte Modellierung eine immer größere Rolle. Für die häufig eingesetzte Materialklasse der ferroelektrischen Funktionskeramiken ist das nichtlineare Materialverhalten aufgrund von mikrostrukturellen Domänenumklappprozessen oft entscheidend. Darüber hinaus tragen durch die zunehmende Miniaturisierung der Bauteile größenabhängige Effekte wie die Flexoelektrizität immer mehr zum Systemverhalten bei. Für ein besseres Verständnis dieser Effekte wird in der vorliegenden Arbeit ein makroskopisches Kontinuumsmodell entwickelt, das im Rahmen von FE-Simulationen durch eine genauere Berücksichtigung des komplexen Materialverhaltens von Ferroelektrika zur Entwicklung zukünftiger elektromechanischer Systeme beitragen kann. Die Fähigkeit des Modells, das charakteristische hysteretische Materialverhalten und dessen Wechselwirkung mit der Flexoelektrizität abzubilden, wird anhand von numerischen Beispielen demonstriert.

ISSN 2192-9963  
ISBN 978-3-7315-1337-7

