

Elektromechanische Funktionskeramiken sind Bestandteil vieler hochmoderner industrieller Anwendungen. Ihre Einsatzmöglichkeiten umspannen die klassischen Ingenieurwissenschaften wie die der Automobiltechnik, in der sie als integraler Teil von Einspritzdüsen kraftstoffsparender Motoren Anwendung finden, genauso wie die der Informationstechnologie, der Elektronik und Sensorik. Neuere Entwicklungen in der Medizintechnologie kündigen auch hier einen vielversprechenden Einsatz an, beispielsweise als elementarer Bestandteil filigraner Hörgeräte. Auch als nichtflüchtige elektronische Speicher „Ferroelectric Random Access Memory“ kommen diese Materialien zum Einsatz. Um das komplexe Materialverhalten dieser Stoffe elektromechanisch zu beschreiben, bedarf es einer erschöpfenden kontinuumsmechanischen Herangehensweise. So forciert der spezielle kristallographische Aufbau der Keramiken eine mikromechanisch motivierte Formulierung der elektromechanischen Feldgleichungen und zudem eine Berücksichtigung der wesentlichen mikromechanischen Effekte, denen im Zuge der Simulation mit einer Mehrskalenumformulierung Rechnung getragen wird.

Aus Liebe zum Detail

Funktionskeramiken unter dem numerischen Mikroskop

Von Jörg Schröder und Marc-André Keip

Bei allen Veränderungen und Entwicklungen der Menschheit, ob auf kultureller, gesellschaftlicher oder wissenschaftlicher Ebene, mit einhergehendem Wechsel der Meinungen beispielsweise über „richtig“ und „falsch“ oder „schön“

und „hässlich“, ist eines allgegenwärtig: Die Bewunderung und die Hochachtung des Menschen vor der Schönheit der Natur. Eine Vielzahl von Naturwissenschaftlern versucht sich daran, die Natur treffend zu beschreiben. Mit welchem Ansatz

auch immer, in einem sind sich alle einig: Die Natur hält sich an Gesetze, die es aufzuspüren und zu formulieren gilt. Wir sprechen in diesem Zusammenhang von den so genannten *Naturgesetzen*. Diese zu begreifen und zu formulieren



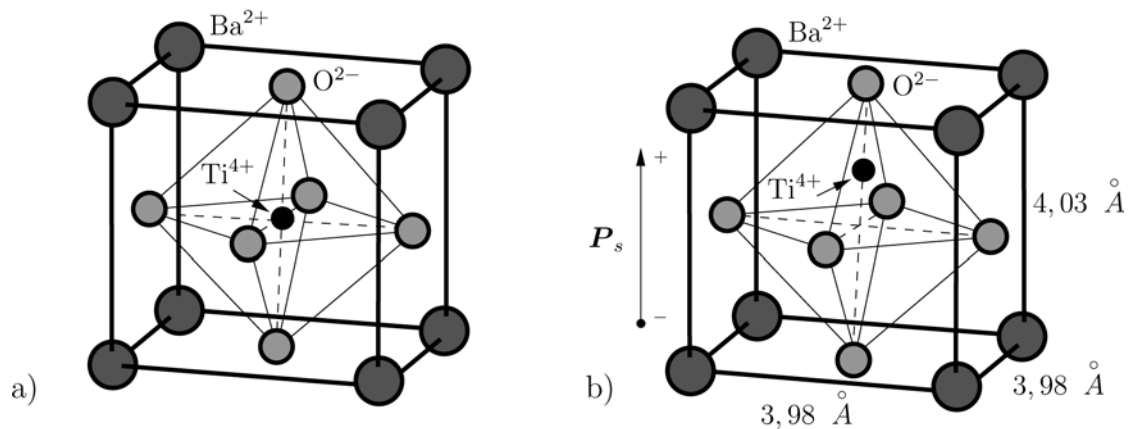
Jörg Schröder. Foto: Max Greve

ist das Ziel vieler Wissenschaftler, ob auf dem Gebiet der Physik, der Chemie, der Biologie oder anderer Fachrichtungen. Doch aus welcher Disziplin auch immer, die Sprache ist stets dieselbe: *die Mathematik*. Denn wann immer es gilt, Naturgesetze wissenschaftlich zu beschreiben, bedient man sich dem Werkzeug der Mathematik.

Berechenbarkeit und Vorhersagbarkeit sind zentrale Punkte für erfolgreiche technische Entwicklungen. So basiert jede technische Neuerung zunächst auf dem Verständnis der natürlichen Gesetz-

es einen wie auch immer gearteten Crashtest nicht besteht. Konstruiert man das gleiche Auto entsprechende Male am Computer und lässt es dort „vor die Wand“ fahren spart dies eine Menge Geld. Auch der umgekehrte Fall ist denkbar: Kommt es an irgendeinem Bauteil zu einem unerwarteten Schaden, der nicht durch bloßes Hinsehen intuitiv zu erklären ist, so besteht auch hier die Möglichkeit, sich der Simulationstechnik zu bedienen. Dies liefert dann detaillierte Aufschlüsse über den Schadensgrund. Natürlich müssen solche Simulationswerkzeuge von Fachleuten entwickelt werden.

Crashtests zugleich eine geeignete mathematische Methode als auch eine zutreffende Beschreibung des verwendeten Materials. Es ist von entscheidender Bedeutung, dass das zugrundeliegende Material korrekt beschrieben wird, da die Aussagekräftigkeit jedweder Simulation von enormem Maße davon abhängt. Die Beschreibung eines etwaigen Materials erfolgt über so genannte Konstitutivgesetze. Dies sind Gesetze, die das Antwortverhalten eines Körpers in Abhängigkeit seiner Einwirkungen beschreiben.

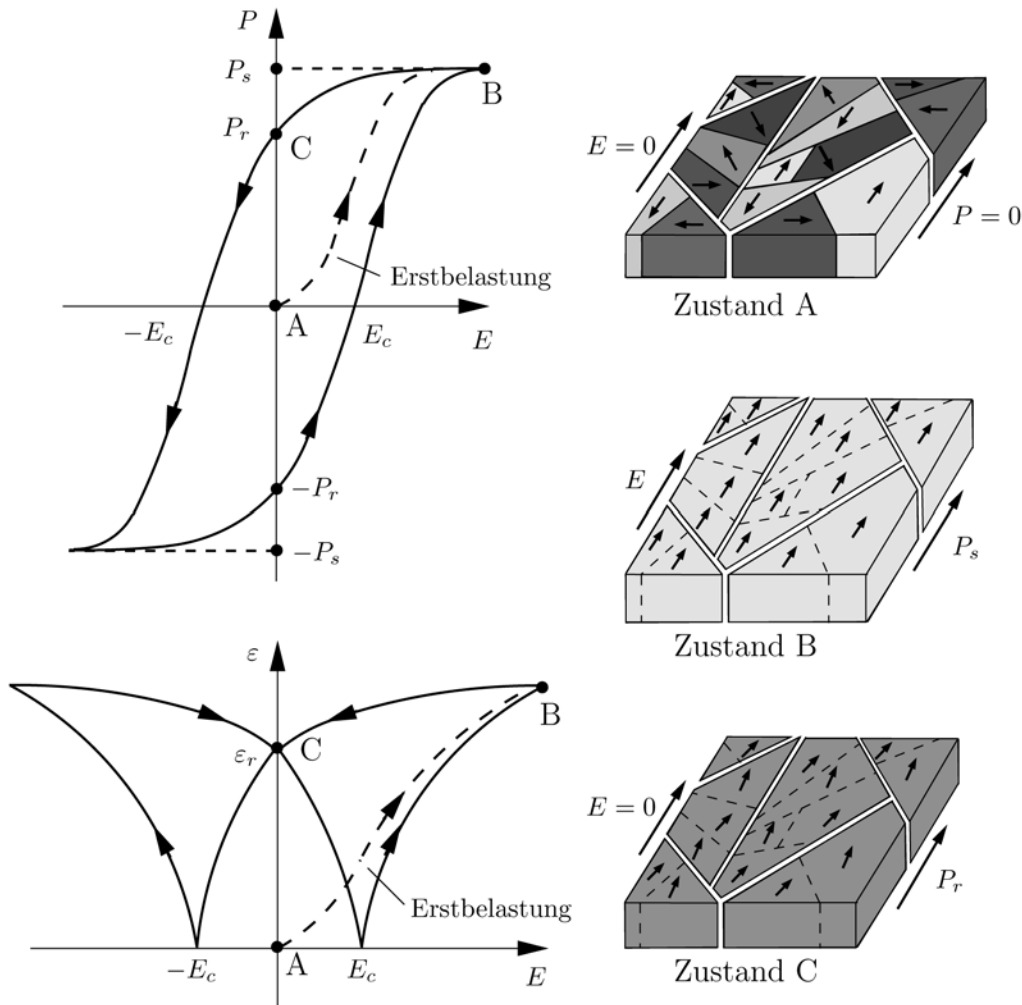


(1) Einheitszelle von Barium-Titanat $BaTiO_3$ im a) kubischen und b) tetragonalen Zustand.

mäßigkeiten und deren Nutzung. Die *Simulationstechnik* übernimmt hier eine Sonderstellung, da sie dem Entwickler gestattet, einen physikalischen Prozess „am Rechner“ im Vorhinein virtuell ablaufen zu lassen, sprich ihn zu simulieren. Diese Möglichkeit offenbart dem Entwickler die außergewöhnliche Möglichkeit, ein Produkt virtuell zu optimieren, bis es dann schließlich in die Realität umgesetzt wird. Dies spart Kosten und eine Menge Zeit – man stelle sich vor, jedes neu entwickelte Auto müsste mit allen Unwägbarkeiten zig-Mal hergestellt werden, um ein ums andere Mal festzustellen, dass

Hier setzt das Arbeitsgebiet des Mathematikers und Mechanikers ein, das zu einem großen Teil daraus besteht, ebensolche Simulationstechniken zu entwickeln und für andere nutzbar zu machen. Diese Arbeit umfasst sowohl die Formulierung oder Umsetzung gewisser Materialgesetze in Kombination mit den Differentialgleichungen der zugrundeliegenden Bilanzgleichungen als auch die Entwicklung oder Weiterentwicklung geeigneter mathematischer Berechnungsmethoden, wie zum Beispiel die Finite-Elemente-Methode. So benötigt man für die Simulation des vorhin erwähnten

Wir sehen also, dass die Simulation technischer Bauteile einen großen wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Nutzen mit sich bringt. Dies ist insbesondere der Fall bei dem Design und der Konstruktion neuer „High-Tech“-Materialien, wie den elektromechanisch gekoppelten Keramiken (Dielektrika, Ferroelektrika, *Multiferroics*, Meta-Materialien). Zunächst wollen wir die Begriffe „Piezo-“ und „Ferroelektrizität“ erläutern. Von piezoelektrischem Materialverhalten spricht man, wenn ein Material auf eine mechanische Einwirkung mit einer elektrischen Antwort reagiert



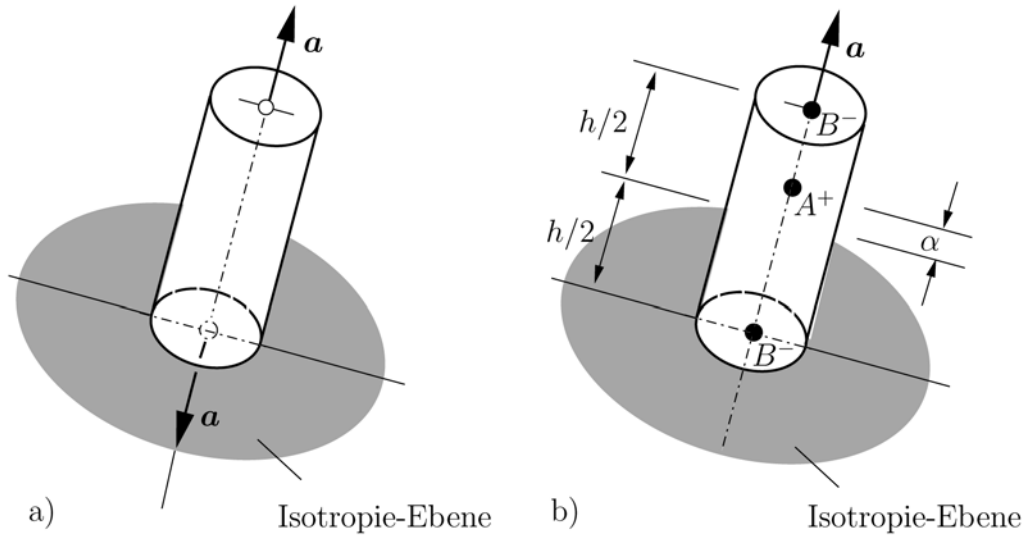
(2) Dielektrische Hysterese und Schmetterlingshysterese und entsprechende mikrostrukturelle Zustände zu verschiedenen Zeitpunkten.

(dies kennzeichnet den direkten piezoelektrischen Effekt) und auf eine elektrische Einwirkung mit einer mechanischen Antwort reagiert (dieses Phänomen wird inverser piezoelektrischer Effekt genannt). Vereinfacht gesagt, stellt sich in einem piezoelektrischen Körper ein elektrisches Feld ein, wenn wir auf ihn drücken oder an ihm ziehen und er verformt sich, wenn wir an ihm ein elektrisches Feld anlegen. Vom direkten piezoelektrischen Effekt leitet sich auch die Namensgebung des Materialverhaltens ab: „Piezo“ ist griechisch und bedeutet „ich drücke, presse“. Entdeckt wurde

dieser Effekt von den Brüdern Jacques und Pierre Curie im Jahr 1880, die als Folge einer mechanischen Belastung von Turmalinsalz eine elektrische Ladungskonzentration an dessen Oberfläche feststellten. Die physikalische Erklärung für diesen Effekt liegt im speziellen Aufbau der Kristallstruktur des Materials. Die Elementarzellen, bestehend aus positiv und negativ geladenen Atomen, Molekülen beziehungsweise Ionen, weisen bei piezoelektrischen Materialien im Allgemeinen kein Symmetriezentrum auf (die Schwerpunkte der positiven und negativen Ladungsträger fallen im Allgemeinen

nicht zusammen). Somit ruft eine mechanische Deformation ein so genanntes Dipolmoment im Werkstoff hervor. Das Dipolmoment innerhalb eines Kristalls ist proportional zur positiven beziehungsweise negativen Gesamtladung und zum Abstand der positiven und negativen Ladungsschwerpunkte zueinander. Folglich liefert eine Relativverschiebung der Ladungsschwerpunkte ein Dipolmoment und exakt dies entspricht dem direkten piezoelektrischen Effekt.

Nun sind allerdings nicht nur natürlich vorkommende Kristalle wie Turmalin oder Quarz von



(3) Erläuterung der Symmetriegruppen: a) Das mechanische Antwortverhalten ist invariant unter der Orientierung $\pm a$ wohingegen b) das elektrische Antwortverhalten von der Orientierung von a abhängt. Hier sei die Polarisation $p = aqa$ (mit der Elementarladung q) und α sei die Relativverschiebung der Schwerpunkte der positiven und negativen Ladungsträger der Einheitszelle. Somit ist hier eine Invarianz bezüglich $+a$ zu fordern.

jenem Effekt gekennzeichnet. Als klar wurde, dass dieser Effekt von großem technischen und wirtschaftlichen Nutzen sein kann, wurde verstärkt über eine industrielle Herstellung piezoelektrischen Materials nachgedacht. Erste Errungenschaften auf diesem Gebiet waren künstlich hergestellte Piezokeramiken für Ultraschallwandler und Schwingquarze. Bis zum heutigen Tage ist die effiziente Herstellung jener Materialien Gegenstand wissenschaftlicher und industrieller Forschung. Als bekannte Piezokeramiken sind wohl die Ionenkristalle mit Perovskitstruktur *Barium-Titanat* ($BaTiO_3$) und *Blei-Zirkonat-Titanat* ($Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$ oder kurz PZT) zu nennen. Jene Materialien fallen unter die Gruppe der so genannten *Ferroelektrika*, die eine Untergruppe der Piezoelektrika darstellen.

Ferroelektrische Materialien zeichnen sich zunächst durch ein temperaturabhängiges Verhalten aus und zwar in dem Sinne, dass ihre Kristallstruktur in großem Maße von der Umgebungstemperatur beein-

flusst wird. Dies hat zur Folge, dass beispielsweise Barium-Titanat oberhalb der so genannten Curie-Temperatur (diese beträgt für Barium-Titanat etwa 130°C) ein kubisches Kristallgitter mit Symmetriezentrum aufweist und bei Unterschreitung der Curie-Temperatur eine Phasenumwandlung in eine tetragonale Kristallstruktur ohne Symmetriezentrum vollzieht (Abb. 1). Der Verlust des Symmetriezentrums zugunsten einer Unsymmetrie liefert die piezoelektrischen Eigenschaften des Barium-Titanats.

Man spricht in diesem Zusammenhang von einer sich einstellenden *spontanen Polarisation*, die mathematisch durch einen Polarisationsvektor repräsentiert wird und auf der kristallinen Ebene mit einem permanenten Dipolmoment verglichen werden kann. Im Unterschied zu rein piezoelektrischen Materialien¹ verfügen Ferroelektrika also über ein natürliches Dipolmoment, das auch ohne äußere Belastung vorhanden ist. Es ist anzumerken, dass die Phasenumwandlung von kubisch zu

tetragonal (auch „Umschalten“ oder „switching“ genannt) sechs Varianten zulässt, das heißt die sich einstellenden spontanen Polarisationsvektoren weisen in eine von sechs zur Verfügung stehenden Richtungen und sind somit zunächst zufällig verteilt (s. Abb. 2, Zustand A). Sind auf kristalliner Ebene die Polarisationsvektoren gleichmäßig (isotrop) verteilt, weist das Bauteil makroskopisch keine Polarisation auf. Ein wesentlicher Vorteil der Ferroelektrika ist, dass sich die eingepprägten spontanen Polarisationsvektoren innerhalb eines jeden Kristalls durch ein von außen angelegtes elektrisches Feld umkehren lassen; das heißt die Richtung der Polarisationsvektoren ist beeinflussbar. Dieser Vorgang, in dem durch ein äußeres elektrisches Feld die spontanen Polarisationsvektoren einheitlich ausgerichtet werden, nennt sich *Polung*.

Wie aus Abbildung (1) erkenntlich, ist eine jede Phasenumwandlung von kubisch zu tetragonal auch mit einer Längenänderung der Einheitszelle verbunden. Wendet

man dies auf den makroskopischen Körper an, so ist leicht vorzustellen, dass durch die Polung auch eine Verlängerung der Struktur erzwungen wird. Diese Verlängerung passiert makroskopisch nicht schlagartig, da das Umschalten der Einkristalle nicht auf einmal, sondern innerhalb eines begrenzten (wenn auch recht kurzen) Zeitraumes stattfindet, in dem alle Kristalle nach und nach umschalten. Die daraus resultierenden makroskopischen Hystereseeffekte sind in Abbildung (2) schematisch abgebildet.

Zu sehen sind die dielektrische Hysteresekurve und die Schmetterlings-Hysteresekurve, die sich aufgrund eines zyklierenden elektrischen Feldes einstellen. Es ist erkennbar, dass nach der Polung sowohl eine Polarisierung als auch eine Dehnung des Materials zurückbleiben.

Die zurückbleibende Dehnung wird als remanente Dehnung bezeichnet und ist neben der remanenten Polarisierung eine der besonderen Charakteristika eines Ferroelektrikums. Des Weiteren ist auf die charakteristischen Erstbelastungspfade hinzuweisen, auf die wir im Folgenden noch gesondert zu sprechen kommen. Es bleibt festzuhalten, dass ein ferroelektrisches Bauteil in seinem Ausgangszustand keineswegs (makroskopische) elektromechanische Kopplungsphänomene aufweist, aber durch eine Polung in Form eines von außen angelegten elektrischen Feldes polarisiert werden kann und somit piezoelektrische Eigenschaften erhält. Was an dieser Stelle deutlich wird, ist, dass bei einem Ferroelektrikum zwischen mikro- beziehungsweise mesoskopischen und den resultierenden makroskopischen Eigenschaften unterschieden werden muss. Die Einheitszellen oder Domänen (dies sind zusammenhängende Bereiche des Kristalls mit gleich ausgerichteter Polarisierung) eines Ferroelektrikums sind unterhalb der Curie-Temperatur immer piezoelektrisch und ändern diese Eigen-

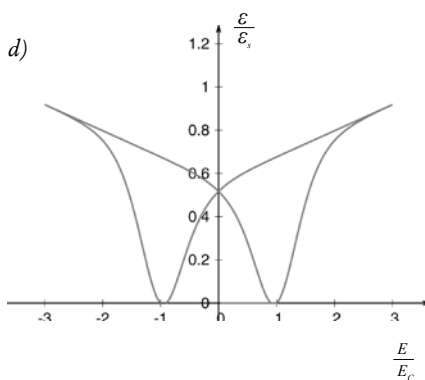
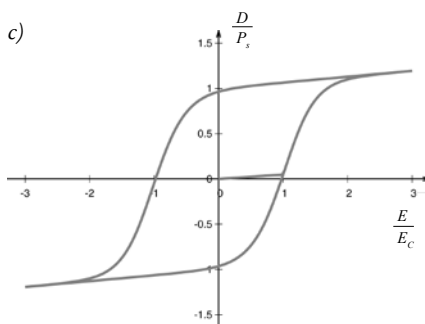
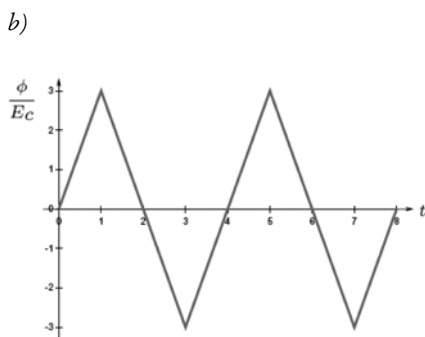
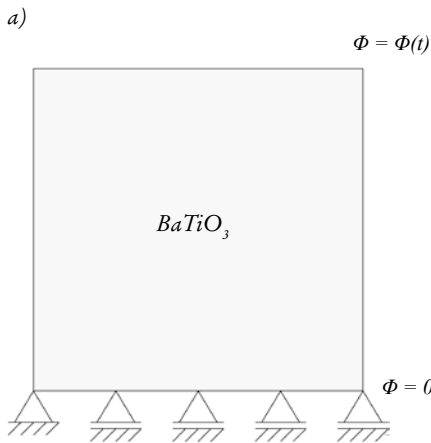
schaft durch den Polungsvorgang auch nicht. Vielmehr wird durch die Polung die Mikro- beziehungsweise Makrostruktur des Materials insofern verändert, dass ein Zusammenwirken der einzelnen spontanen Polarisationsvektoren auf Mikroebene in Form einer einheitlichen Ausrichtung erzwungen wird.

Ein wichtiger und bis zum heutigen Tage weitestgehend ungeklärter Punkt in diesem Zusammenhang ist das Phänomen der Ermüdung ferroelektrischer Keramiken². Diese zeichnet sich dadurch aus, dass die genannten Hystereseerscheinungen im Ferroelektrikum nach längerer zyklischer Belastung an Ausprägung verlieren, sprich, dass die Hysteresekurven flacher werden. Experimentelle Untersuchungen hierzu lieferten bislang keine zufriedenstellenden Aufschlüsse, die das Auftreten dieses Phänomens vollends klären könnten. Es wird vermutet, dass die Ermüdungserscheinungen auf Defektagglomerationen auf der mikroskopischen Skala gründen. Da hierzu die experimentellen Mittel relativ begrenzt, aufwendig und vor allem teuer sind, wird auch in diesem Zusammenhang auf Simula-

tionstechniken zurückgegriffen. Um diese jedoch nutzbar zu machen, sind kontinuumsmechanisch präzise Modelle zu entwerfen, die eine Beurteilung der Struktur bis in die Mikro- beziehungsweise Mesoskala ermöglichen. Entsprechende Modelle sind, verglichen mit einer rein phänomenologischen Beschreibung auf der Makroskala, bisweilen sehr aufwändig und setzen eine Kenntnis der physikalischen Gesetzmäßigkeiten der jeweiligen Skale voraus. Um einen ersten Überblick über die Modellierung ferroelektrischen Materialverhaltens zu geben, wird im Folgenden zunächst auf die numerische Umsetzung der grundlegenden phänomenologischen Eigenschaften eingegangen. Wie zu Anfang erwähnt, benötigt man für die kontinuumsmechanische Modellierung eines Ferroelektrikums, also einer elektromechanisch gekoppelten Problemstellung, die Differentialgleichungen sowohl für den elektrischen als auch für den mechanischen Teil des Problems. Auf der mechanischen Seite existieren die grundlegenden Bilanzgleichungen der Masse, des Impulses, des Dralles und der Energie. Das elektrische Randwert-

Verzerrungen; additive Zerlegung	$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla_{sym} \mathbf{u}; \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^r$
elektrisches Feld	$\mathbf{E} = -\nabla \phi$
freie Enthalpie	$H = H(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^r, \mathbf{E}, \mathbf{P}^r, \mathbf{a})$
mechanische Spannungen	$\boldsymbol{\sigma} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} H$
elektrische Verschiebung; additive Zerlegung	$\mathbf{D} = -\partial_{\mathbf{E}} H; \quad \mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{P}^r$
konjugierte Spannungen	$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = -\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}^r} H$
konjugiertes elektrisches Feld	$\tilde{\mathbf{E}} = -\partial_{\mathbf{P}^r} H$
Dissipations-Ungleichung	$\mathcal{D} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r + \tilde{\mathbf{E}} \cdot \dot{\mathbf{P}}^r \geq 0$
Umschaltbedingung	$\xi = \xi(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, \tilde{\mathbf{E}}, \mathbf{a})$
Fließregel: remanente Verzerrung	$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r = \lambda \partial_{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}} \xi$
remanente Polarisation	$\dot{\mathbf{P}}^r = \lambda \partial_{\tilde{\mathbf{E}}} \xi$
Be-/Entlastungsbedingung	$\lambda \geq 0; \quad \xi \leq 0; \quad \lambda \xi = 0$

(4) Gleichungssatz des elektromechanisch gekoppelten Materialverhaltens.



(5) a) System mit Randbedingungen, b) zeitlich veränderliches elektrisches Potenzial liefert zyklisches elektrisches Feld (normiert bezüglich der Koerzitivfeldstärke E_c), c) dielektrische Hysterese und d) Schmetterlingshysterese.

problem wird durch Differentialgleichungen beschrieben, die auf den schottischen Physiker James Clark Maxwell im Jahr 1860 zurückgehen. Diese heute als *Maxwell'sche Gleichungen* bekannten Axiome umfassen die beiden Gauß'schen Gesetze für das elektrische und magnetische Feld ebenso wie das Faraday'sche und das Ampère'sche Gesetz und dienen der Beschreibung der Dynamik elektrischer und magnetischer Felder. Sie nehmen in der Elektrodynamik eine ähnliche Stellung ein wie die *Newton'schen Axiome* (Impuls- und Drallbilanz) in der Mechanik. Neben den Differentialgleichungen, die die mathematische Grundlage des Modells bilden, sind wie vorhin erwähnt auch Gleichungen für die konstitutiven Beziehungen vonnöten. Diese schließen den vorliegenden Gleichungssatz und liefern eine Beschreibung des konkreten Materials. Die Konstitutivbeziehungen werden aus thermodynamischen Betrachtungen hergeleitet, wobei notwendige Restriktionen im Allgemeinen aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik (*Entropiegleichung*) berücksichtigt werden. Aus der Entropiegleichung resultiert die so genannte Dissipationsungleichung (Clausius-Duhem-Ungleichung), aus der sich die Bestimmungsgleichungen der mechanischen Spannungen σ als Funktion der Verzerrungen ε und der elektrischen Verschiebungen D als Funktion des elektrischen Feldes E ausgehend von einem vorher definierten thermodynamischen Potenzial H ableiten. Das Potenzial ist abhängig von einem Satz Primärvariablen und interner Variablen. Der Begriff *Primärvariablen* bezieht sich hier auf entsprechende Lösungsvariablen, nach denen ein im Zuge eines etwaigen Lösungsverfahrens entstehendes Gleichungssystem gelöst werden kann. Der Begriff *interne Variablen* bezieht sich auf Größen, die als Folge dissipativer Prozesse innerhalb des Materials postuliert werden. Aus praktischen Gesichtspunkten bietet es sich an,

im Rahmen der Ferroelektrizität auf der elektrischen Seite das elektrische Potenzial ϕ und auf der mechanischen Seite die Verschiebung u als Primärvariablen zu wählen. Eine sinnvolle Wahl der internen Variablen stellen für den mechanischen Teil die remanente Dehnung ε^r und für den elektrischen Teil die remanente Polarisation P dar. Die Ableitungen des Potenzials nach den internen Variablen liefert die assoziierten thermodynamischen Kräfte, die zur Formulierung von Evolutionsgleichungen für die internen Variablen benötigt werden.

Im Folgenden beschränken wir uns auf den Fall der transversalen Isotropie. Diese Symmetriegruppe kann durch eine ausgezeichnete Richtung a charakterisiert werden. Mit dem Prinzip der Superposition von Symmetrien, dem *Curie-Symmetrie-Prinzip*, können wir die Symmetriegruppe G_{ii} der elektromechanisch gekoppelten Konstitutivgleichungen festlegen (Abb. 3). Sei G_{ii}^{mech} die Gruppe der Symmetrieelemente der mechanischen Größen Verzerrungen und G_{ii}^{el} die der elektrischen, so folgt

$$G_{ii}^{mech} \cap G_{ii}^{el} =: G_{ii} = \{Q \in O(3), Qa = a\}.$$

Somit ist die Symmetriegruppe des gekoppelten Problems durch orthogonale Rotationen, das heißt $Q \in O(3)$, um die Achse a festgelegt, die a unberührt lassen³. Der Gleichungssatz zur Beschreibung des elektromechanisch gekoppelten Materialverhaltens findet sich in der Tabelle der Abbildung (4). Aufgrund der einfachen Symmetriegruppe bietet sich eine Formulierung im Rahmen der Invariantentheorie an⁴. Werden die so gewonnenen elektromechanischen Bestimmungsgleichungen in ein adäquates Lösungsverfahren, wie hier der Finite-Elemente-Methode, implementiert, so lassen sich elektromechanische Randwertprobleme lösen. Als anschauliches Beispiel ist hier ein homogenes System, bestehend aus einer rechteckförmigen Probe,

gegeben (2D). Es wird an der oberen Kante mit einem elektrischen Potenzial belastet und ist an der unteren Kante vertikal unverschiebbar gelagert. Die aufgrund der Belastung resultierenden Hystereseeffekte sind sowohl qualitativ als auch quantitativ in sehr guter Übereinstimmung mit experimentellen Werten (Abb. 5). Das oben angegebene Beispiel basiert auf einem phänomenologischen Materialmodell, das die klassischen Hystereseeffekte auf der Makroskala wiedergibt – es beschreibt also das auftretende physikalische Phänomen. Es berücksichtigt dabei wohlgermerkt keine morphologischen Gegebenheiten der Mesoskala; dies zumindest nicht direkt. Aus physikalischer Sicht bildet das phänomenologische Materialmodell eine Mittelung über die internen, mikroskopischen Vorgänge im Material und dies ist für eine Vielzahl von Anwendungen ohne Frage ausreichend. Das detaillierte Zusammenwirken der einzelnen Konstituierenden der Mesoskala (diese stellen hier die Einkristalle beziehungsweise Domänen dar) werden von makroskopischen Stoffgesetzen im Allgemeinen nicht berücksichtigt und entziehen sich somit einer entsprechenden, tiefergehenden Beschreibung.

Um diesen für viele Detailuntersuchungen gravierenden Mangel auszuräumen, wird im Folgenden eine Methode präsentiert, die selbständig aus einer mesoskopischen Auflösung der Struktur heraus das makroskopische Antwortverhalten liefert. Dieser Ansatz kann als Mittelung über eine „kleinere“ Skala begriffen werden und wird als *Homogenisierung* bezeichnet. Der enorme Vorteil einer solchen Methode ist, neben der Möglichkeit, die tatsächliche Mikrostruktur exakt zu erfassen, auch, dass die Generierung eines komplexen makroskopischen Stoffgesetzes per Hand nun entfällt. Dies kann von enormem Nutzen sein, da unter Zuhilfenahme dieses Ansatzes eine wirklichkeitsgetreue Simulation „lediglich“ mit Kenntnis der mikrostrukturellen Zusammensetzung

Kopplung zwischen der Makro- und Mikroskala

Makroskala: Elektromechanisch gekoppeltes Randwertproblem

<p>Mechanische Feldgleichungen & RB'n</p> $\bar{\epsilon} = \nabla_{sym} \bar{u}$ $\text{div} \bar{\sigma} + \bar{f} = 0 \quad \text{in } B$ $\bar{u} = \bar{u}_b \quad \text{auf } \partial B_u$ $\bar{t} = \bar{\sigma} \bar{n} \quad \text{auf } \partial B_\sigma$	<p>Elektrische Feldgleichungen & RB'n</p> $\bar{E} = -\nabla \bar{\phi}$ $\text{div} \bar{D} = 0 \quad \text{in } B$ $\bar{\phi} = \bar{\phi}_b \quad \text{auf } \partial B_\phi$ $-\bar{q} = \bar{D} \cdot \bar{n} \quad \text{auf } \partial B_D$
--	--

Definition der makroskopischen Feldvariablen ($v = \text{vol}(\mathcal{RVE})$)

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{v} \int_{\partial \mathcal{RVE}} \mathbf{t} \otimes \mathbf{x} da, \quad \bar{\epsilon} = \frac{1}{v} \int_{\partial \mathcal{RVE}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{n} da, \quad \bar{D} = \frac{1}{v} \int_{\partial \mathcal{RVE}} -q \mathbf{x} da, \quad \bar{\phi} = \frac{1}{v} \int_{\partial \mathcal{RVE}} -\phi nda$$

Mikroskala: Elektromechanisch gekoppeltes Randwertproblem

<p>Mechanische Feldgleichungen</p> $\epsilon = \nabla_{sym} \mathbf{u}$ $\text{div} \sigma = 0 \quad \text{im } \mathcal{RVE}$	<p>Elektrische Feldgleichungen</p> $\mathbf{E} = -\nabla \phi$ $\text{div} \mathbf{D} = 0 \quad \text{im } \mathcal{RVE}$
--	---

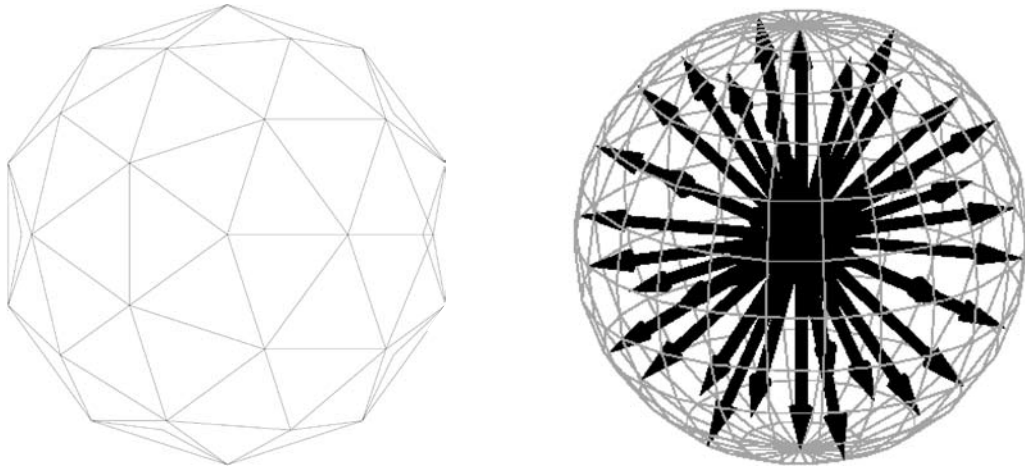
<p>Mechanische RB'n</p> $\mathbf{t} = \bar{\sigma} \mathbf{n}$ $\mathbf{u} = \bar{\epsilon} \mathbf{x}$ $\mathbf{u} = \bar{\epsilon} \mathbf{x} + \tilde{w}$ $\tilde{w}^+ = \tilde{w}^-, \quad \mathbf{t}^+ = -\mathbf{t}^-$	<p>Neumann RB'n</p> $q = -\bar{D} \cdot \mathbf{n}$ <p>Dirichlet RB'n</p> $\phi = -\bar{E} \cdot \mathbf{x}$ <p>periodische RB'n</p> $\left\{ \begin{array}{l} \phi = -\bar{E} \cdot \mathbf{x} - \tilde{w} \\ \tilde{w}^+ = \tilde{w}^-, \quad q^+ = -q^- \end{array} \right.$
--	---

(6) Kontinuums-elektromechanische Grundgleichungen der Homogenisierung.

und eines „einfacheren“ phänomenologischen Modells der Phasen der Mesoskala erfolgen kann. Die hier verwendete direkte Homogenisierungsmethode ist nun konsistent umzusetzen⁵. In Abbildung (6) sind die auftretenden Grundgleichungen neben einigen veranschaulichenden Bildern zusammengefasst.

In Worten lassen sich die angegebenen Formeln wie folgt zusammenfassen. Die numerische Umsetzung der Homogenisierung besteht aus

einer Kombination zweier unterschiedlicher Randwertprobleme: einem auf der Makroskala und einem weiteren auf der Mesoskala, das die tatsächlich vorhandene Kristallbeziehungsweise Domänenstruktur approximiert. Aufgrund der zwei zu diskretisierenden Skalen wird dieser Ansatz auch als Multiskalenansatz bezeichnet. Im Rahmen der Finite-Elemente-Methode ist diese Vorgehensweise auch als FE²-Methode beziehungsweise direkte Homoge-



(7) Potenzielle Polarisationsvektoren auf der Mesoskala auf der Grundlage von Orientierungsverteilungsfunktionen (OVF), abgeleitet von geodätischen Kuppeln.

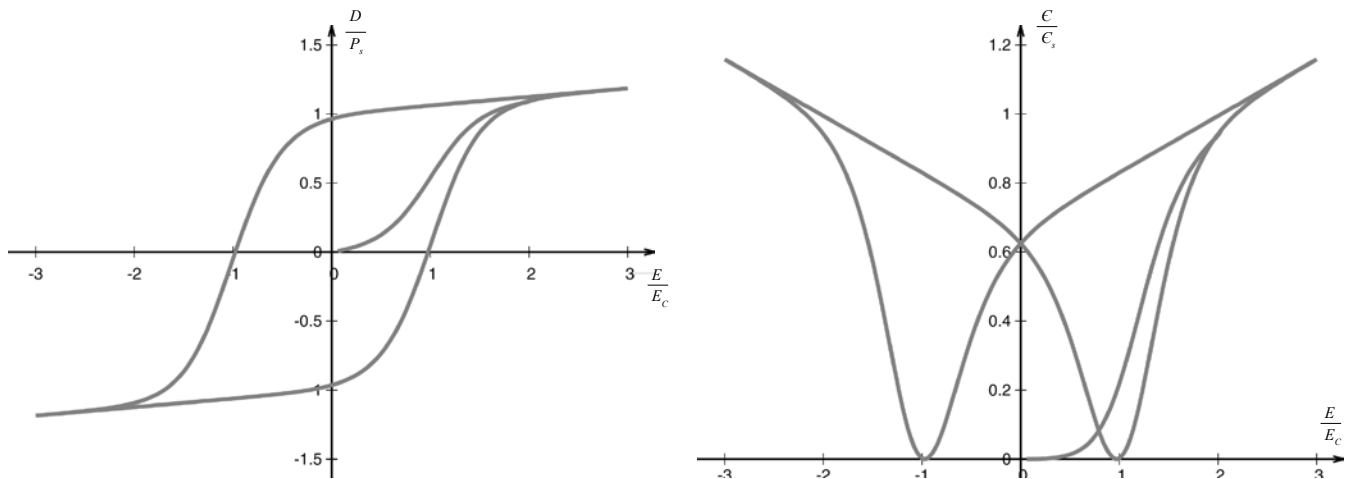
nisierungsmethode⁶ oder als "Multilevel-Finite-Element-Method"⁷ bekannt.

Die auf der Mesoskala berechneten konstitutiven Größen werden über das Volumen der Mesoskala gemittelt und liefern somit das Antwortverhalten des Materials in einem materiellen Punkt der Makroskala. Man könnte nun einwenden, dass man ja direkt eine Diskretisierung des Randwertproblems wählen könnte, die die Mesoskala auflöst, denn somit hätte man die mikroskopische Struktur in das Modell integriert und benötigte keinen Homogenisierungsansatz. Dies ist aus theoretischer Sicht sicherlich korrekt, jedoch würde eine mesoskopische Auflösung der Struktur bis hin zu den Abmessungen der Makroskala eine nicht zu vertretende Vergrößerung des Gleichungssystems, das aus der Finite-Elemente-Diskretisierung resultiert, nach sich ziehen. Betrachten wir beispielsweise eine Probe Barium-Titanats der Abmessungen $1 \times 1 \times 1 \text{ cm}$. Würde man diese Probe bis in den kristallinen Bereich diskretisieren (und angenommen ein Kristall entspräche dabei einem Finiten Element mit acht Knoten), dann würde daraus die unvorstellbare Anzahl von knapp

$3,9 \cdot 10^{28}$ Elementen resultieren. Allein die Erstellung eines solchen Systems, geschweige denn dessen numerische Lösung, ist unsinnig. Daher benötigt man einen effizienten und erschöpfenden Homogenisierungsansatz, der im Vergleich zur „kompletten“ Lösung ausreichend genaue Ergebnisse liefert. Dies geschieht erstens durch Wahl eines *repräsentativen Volumenelementes* und zweitens durch Wahl geeigneter Randbedingungen auf der Mikroskala. Insbesondere der Wahl des repräsentativen Volumenelementes kommt eine besondere Bedeutung zu, da es die Mikrostruktur in ausreichendem Maße reflektieren muss. Als energetisch konsistente Randbedingungen stehen auf der Mikroebene Dirichlet-, Neumann- und periodische Randbedingungen zur Verfügung. Im Folgenden sollen zwei Umsetzungen im Rahmen von Homogenisierungsansätzen vorgestellt werden. Zum einen ist dies eine Formulierung auf der Grundlage von Orientierungsverteilungsfunktionen (OVF) und zum anderen eine Formulierung auf Basis des eben erwähnten FE²-Ansatzes.

Der OVF-Ansatz⁸ ist dadurch gekennzeichnet, dass er die real existierende Mesostruktur in einem

materiellen Punkt mit Hilfe von Orientierungsverteilungsfunktionen annähert. So wird in jedem materiellen Punkt der Makroskala eine Richtungsverteilung potenzieller Polarisationsvektoren (die die Mesoskala repräsentieren) zur Verfügung gestellt und anhand des dort anliegenden elektrischen Feldes ein entsprechender makroskopischer Polarisationsvektor ermittelt, analog gilt dies für die mechanischen Variablen. Die Initialisierung der OVFs geschieht auf Grundlage geodätischer Kuppeln, wie sie beispielsweise in der Architektur Anwendung finden. Eine Verteilung von Polarisationsvektoren auf der Mesoskala ist in Abbildung (7) gegeben. Dies ist zwar zum einen eine starke Vereinfachung der real existierenden Mesostruktur. Zum anderen bietet der Ansatz aber ein relativ hohes Maß an Zeitersparnis bei guter Abdeckung der mesostrukturellen Zusammenhänge. So wird beispielsweise der recht charakteristische Erstbelastungspfad der Ferroelektrika in guter Näherung wiedergegeben. Mit diesem Ansatz berechnete Hysteresekurven sind in Abbildung (8) exemplarisch dargestellt und zeigen typische Verläufe der Erstbelastungspfade sowohl der



(8) Mit OVFs ermittelte Hysterese: a) die dielektrische Hysterese und b) die dazu assoziierte Schmetterlingshysterese.

dielektrischen als auch der elektro-mechanischen Hysterese, (vgl. hierzu auch Abb. 5).

Als Anwendungsbeispiel soll ein Aktuator mit spiralförmigen Elektroden, wie er von Lupascu⁹ entwickelt wurde, diskutiert werden. Die Motivation zu dieser Konstruktionsweise ist der Tatsache zuzuschreiben, dass gewöhnliche Stapelaktoren infolge von Singularitäten eine relativ große Rissanfälligkeit aufweisen. Bei der vorgestellten Bauweise werden Singularitäten durch den spiralförmigen Aufbau vermieden und gewährleistet somit eine höhere Lebensdauer des Bauteils. Ein schematischer Aufbau des Aktuators beziehungsweise dessen numerischen Modells ist in Abbildung (9) gegeben. Zu sehen sind ein aus einer Funktionskeramik bestehender Hohlzylinder sowie zwei spiralförmige Elektroden, die bei Betrieb jeweils gegensätzlich positiv und negativ geladen werden, um die erforderliche Potentialdifferenz innerhalb des Materials zu erzeugen. Der numerischen Simulation liegen folgende Randbedingungen zu Grunde. Die Höhe des diskretisierten Teilstückes des Aktuators (Abb. 9) beträgt 0,5 Millimeter, der Außenradius 0,5 Millimeter und der Innen-

radius 0,25 Millimeter. Es wurde mit 11049 Tetraeder-Elementen vernetzt, wobei in jedem materiellen Punkt 42 potenzielle Polarisationsrichtungen hinterlegt wurden. Die Ganghöhe der Elektroden wurde so eingestellt, dass sich vier komplette Windungen ergeben. Das System ist an der unteren Fläche fest eingespannt, das heißt alle Verschiebungen der unteren Randknoten werden verhindert. Als elektrische Randbedingungen werden die beiden Elektroden jeweils mit einem gegensätzlichen Potenzial beaufschlagt, was zu einer Potentialdifferenz innerhalb der Keramik führt. Das System sowie der elektrische Lastzyklus sind in Abbildung (9) dargestellt.

Das sich einstellende Verhältnis von Polarisation zu Sättigungspolarisation zum Zeitpunkt der Maximalbelastung ($t = 1 \text{ s}$) und zum Zeitpunkt mit verschwindendem elektrischen Feld ($t = 2 \text{ s}$) sind in Abbildung (9) dargestellt. Es ist ersichtlich, dass zum Zeitpunkt $t = 2 \text{ s}$ eine remanente Polarisation und somit auch eine remanente Dehnung im System verbleibt. Des Weiteren ist eine recht homogene Verteilung der Polarisation zu verzeichnen, was für die Erfüllung des Konstruktionsziels (nämlich Singularitätsstellen zu vermeiden) spricht.

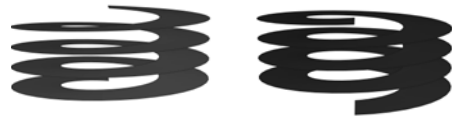
Im Folgenden gehen wir auf die Umsetzung des FE²-Ansatzes ein, die eine diskrete räumliche Auflösung der Domänenstruktur berücksichtigt¹⁰. Hier wird als Mesostruktur ein Netz aus 36 Finiten Elementen diskretisiert und das makroskopische Randwertproblem, bestehend aus einer rechteckförmigen Probe, mit einem alternierenden elektrischen Feld belastet (vgl. Beispiel in Abb. 5). Die Mesostruktur ist in Abbildung (10) dargestellt und wurde so gewählt, dass sie keine resultierende makroskopische Polarisation aufweist.¹¹ Die sich einstellende dielektrische sowie elektromechanische Hysterese weisen im eingeschwungenen Zustand das charakteristische Hystereseverhalten auf. Zu diesem Zeitpunkt ist die Probe vollständig polarisiert, was an einer einheitlichen Ausrichtung der mesoskopischen Polarisationsvektoren zu erkennen ist.

Summary

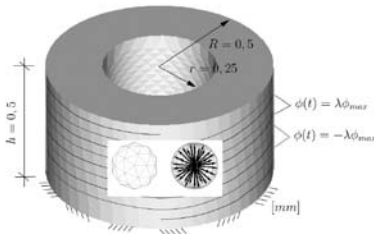
Smart materials, like piezo- and ferroelectric materials, are of high interest for modern engineering



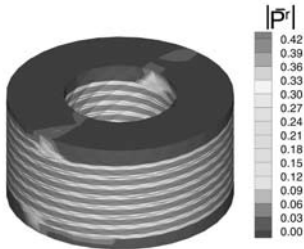
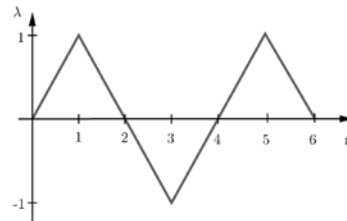
a) Keramischer Hohlzylinder



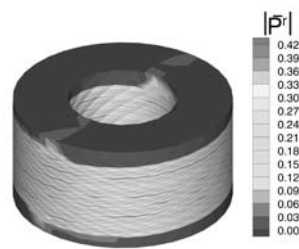
pos. geladene Elektrode neg. geladene Elektrode



b)



c)



(9) a) Bauteile des simulierten Aktuators: keramischer Hohlzylinder und zwei im Betrieb gegensätzlich geladene spiralförmige Elektroden. b) Mechanische und elektrische Randbedingungen und Belastungsverlauf über die Zeit. c) Verlauf des Betrages der relativen remanenten makroskopischen Polarisation $|P|$ (normiert bezüglich der Sättigungspolarisation P_s) zu den Zeitpunkten $t = 1$ s und $t = 2$ s.

solutions in both industry and science. They build an important class of technical devices being part of engineering applications like fuel-efficient motors and many other hightech solutions. Their functionality and reliability make them a key product for sound future developments. However, as every technical device smart materials need a physical and mathematical understanding of the underlying physical processes. For the description of those processes the engineer makes use of differential equations which are able to describe the physical behaviour in a mathematical way. For piezo- and ferroelectrics the fundamental

differential equations are the balance of momentum and the Gauß law. To complete the mathematical model, physical information has to be integrated which is achieved by use of thermodynamic considerations. These yield corresponding material laws that are able to describe the physical processes within the material. In general, phenomenological material models are used to model the physical behaviour of a material. Since such phenomenological models are describing the physical material behaviour only to a certain extent, sometimes a more general approach is necessary. In such cases micromechanical models can be applied

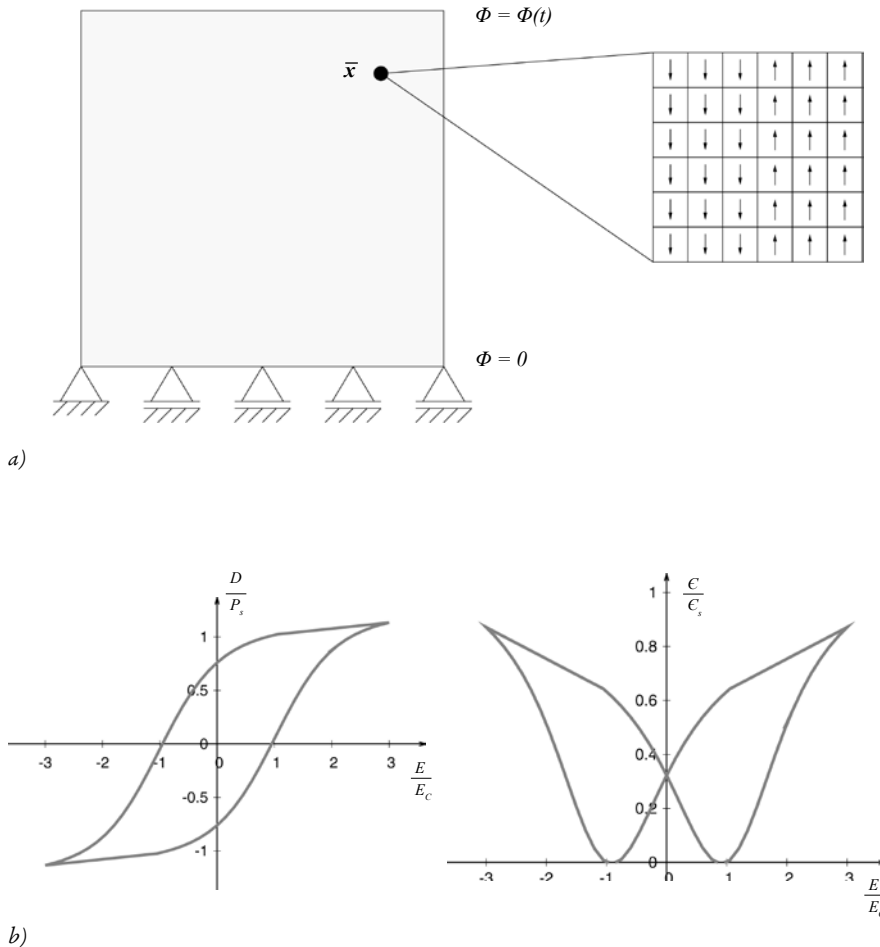
to reflect the real material response. This is done by using a homogenisation ansatz on the basis of a multiscale approach. In this context the real microscopic material structure is discretized and integrated into the macroscopic model through homogenisation.

Anmerkungen

- 1) Unter „rein piezoelektrischen“ Materialien sind hier solche Materialien zu verstehen, die zwar piezoelektrisch, aber nicht pyro- oder ferroelektrisch sind.
- 2) Lupascu 2004, Müller et al. 2008.
- 3) siehe zum Beispiel Liu 1982.
- 4) siehe zum Beispiel Schröder und Gross 2005, Schröder und Romanowski 2005, Romanowski 2006. Weitere Modelle finden sich in Huber et al. 1999, Kamlah 2001, Landis 1999.
- 5) siehe Schröder et al. 2005, 2007, 2008; Kurzhöfer 2006; Keip & Schröder 2008.
- 6) Schröder 1996.
- 7) Smit et al. 1998.
- 8) Kurzhöfer 2006.
- 9) Lupascu 1998.
- 10) Keip Schröder 2008
- 11) Die gewählte Mikrostruktur stellt in diesem speziellen Fall kein realitätsnahes repräsentatives Volumenelement dar, bietet aufgrund ihres überschaubaren Aufbaus aber einen verständlichen Zugang zur Methode.

Literatur

- Huber, J., Fleck, N., Landis, C.M., McMeeking, R.M.: A constitutive model for ferroelectric polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47/8 1999, 1663-1697.
- Kamlah, M.: Ferroelectric and ferroelastic piezoceramics-modeling of electromechanical hysteresis phenomena. *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 13/4 2001, 219-268.
- Keip, M.-A., Schröder, J.: Aspects of a Direct Homogenization Procedure for Electro-Mechanically Coupled Problems. 2008 (submitted to Proceedings of Applied Mathematics and Mechanics).
- Kurzhöfer, I.: Mehrskalmodellierung polykristalliner Ferroelektrika basierend auf diskreten Orientierungsverteilungsfunktionen. Dissertation, Institut für Mechanik, Universität Duisburg-Essen, Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Bauwissenschaften 2006.



(10) a) Aufbau des makroskopischen Systems mit integrierter Mikrostruktur in jedem materiellen Punkt und b) dielektrische Hysterese und Schmetterlingshysterese infolge zyklischer elektrischer Belastung im eingeschwungenen Zustand.

- Landis, C.M.: Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50/1 1999, 127-152.
- Lupascu, D.C.: *Fatigue of ferroelectric ceramics and related issues*. Springer 2004.
- Lupascu, D.C.: Deutsches Patent 198 14 697, Doru Lupascu, Piezoelektrischer Aktor und Verfahren zu seiner Herstellung 1998.
- Lupascu, D.C., Fedosov, S., Verdier, C., Rödel, J., von Seggern, H.: Stretched exponential relaxation in perovskite ferroelectrics after cyclic loading, *Journal of Applied Physics* 95/3 2004, 1386-1390.
- Liu, I.: On Representations of Anisotropic Invariants. *International Journal of Engineering Science*, Vol. 20/1982, 1099-1109.
- Müller, R., Schröder, J., Lupascu, D.C.: Thermodynamic consistent modeling of defects and microstructures in ferroelectrics. *GAMM-Mitteilungen* 2008 (eingereicht zur Veröffentlichung).

- Romanowski, H.: Kontinuumsmechanische Modellierung ferroelektrischer Materialien im Rahmen der Invariantentheorie. Dissertation, Institut für Mechanik, Universität Duisburg-Essen, Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Bauwissenschaften 2006.
- Schröder, J.: Theoretische und algorithmische Konzepte zur phänomenologischen Beschreibung anisotropen Materialverhaltens, Forschungs- und Seminarberichte aus dem Bereich der Mechanik, Report Nr. F 96/3, Universität Hannover, Dissertationschrift 1996.
- Schröder, J., Gross, D.: Invariant formulation of the electromechanical enthalpy function of transversely isotropic piezoelectric materials. *Archive of Applied Mechanics* 73/2004, 533-552.
- Schröder, J., Romanowski, H., Kurzhöfer, I.: Meso-Macro-Modeling of Nonlinear Ferroelectric Ceramics, *Online Proceedings of the 5th International Conference on*

- Computation of Shell and Spatial Structures*, Eds.: E. Ramm, W.A. Wall, K. Bletzinger and M. Bischoff; June 1-4 2005, Salzburg, Austria.
- Schröder, J., Romanowski, H.: A thermodynamically consistent mesoscopic model for transversely isotropic ferroelectric ceramics in a coordinate-invariant setting. *Archive of Applied Mechanics* 74/2005, No. 11-12, 863-877.
- Schröder, J., Romanowski, H., Kurzhöfer, I.: A Computational Meso-Macro Transition Procedure for Electro-Mechanical Coupled Ceramics. In Schröder, J.; Lupascu, D., Balzani, D. (Eds): *Proceedings of the First Seminar on the Mechanics of Multifunctional Materials*, May 7th-10th, Bad Honnef, Bericht Nr. 5 des Instituts für Mechanik, Fakultät Ingenieurwissenschaften, Abteilung Bauwissenschaften, Universität Duisburg-Essen 2007.
- Schröder, J., Kurzhöfer, I., Romanowski, H.: A computational meso-macro transition procedure for electro-mechanical coupled ceramics 2008. In Vorbereitung zur Veröffentlichung in *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*.
- Smit, R.J.M., Brekelmans, W.A.M., Meijer, H.E.H.: Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 155/1998, 181-192.

Die Autoren

Jörg Schröder studierte zunächst Bauingenieurwesen an der Fachhochschule Hildesheim/Holzminde mit dem Schwerpunkt „Konstruktiver Ingenieurbau“, das er 1988 mit der Diplomprüfung abschloss. Anschließend nahm er an der Universität Hannover das Studium des Bauingenieurwesens auf, wo er ab 1989 Stipendiat der Studienstiftung des Deutschen Volkes war. Ende 1992 schloss er sein Studium mit einer Diplomarbeit in der computerorientierten Mechanik ab und wurde Assistent am Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik im Fachbereich Bauingenieurwesen der Universität Hannover. Mit einer Dissertation über die theoretische und algorithmische Beschreibung anisotropen Materialverhaltens wurde er Ende 1995 zum Dr.-Ing. promoviert. Ab 1996 war Jörg Schröder Akademischer Rat am Institut für Mechanik (Bauwesen) am Lehrstuhl I von Christian Miehe an der Universität Stuttgart, wo er 2000 in dem Fach Mechanik mit einem Thema im Bereich der Homogenisierungsmethoden in der nichtlinearen Kontinuumsmechanik habilitierte. Im Frühjahr 2000 erhielt er einen Ruf auf eine Professur für Mechanik an die Technische Universität Darmstadt und einen Ruf auf eine Professur für Baumechanik mit Schwerpunkt Materialtheorie an die Universität Hannover. Die Professur an der TU-Darmstadt trat er im Herbst 2000 an. Bereits im Jahre 2001 folgte ein Ruf auf eine Professur für das Fachgebiet Mechanik der Fakultät Bauwesen an die damalige Uni-

versität-Gesamthochschule Essen, den er zum Herbst 2001 annahm. Die Forschungsschwerpunkte von Jörg Schröder liegen im Bereich der Formulierung und Konstruktion anisotroper Materialgleichungen sowie derer algorithmischer Durchdringung und Umsetzung und der Weiterentwicklung der Finite-Elemente-Methode. Im Rahmen der theoretischen und computerorientierten Materialtheorie werden hierbei die folgenden Themenkomplexe behandelt: Anisotrope Elasto-Plastizität bei finiten Deformationen, anisotrope Hyperelastizität, insbesondere unter Berücksichtigung spezieller mathematischer Anforderungen, mit Anwendungen in der Biomechanik und elektro-thermo-mechanisch gekoppelte Funktionskeramiken unter Berücksichtigung ferroelektrischer Phasenumwandlungen. Als spezielle Zugänge dienen hierbei überwiegend Elemente der Invariantentheorie und geeignete Tensor-Repräsentations-Theoreme. Im Rahmen der Finite-Elemente-Methode werden aktuell spezielle Formulierungen zur Beschreibung von diskreten Rissausbreitungen in spröden und duktilen Materialien entwickelt.

Marc-André Keip studierte Bauingenieurwesen an der Universität Duisburg-Essen mit den Schwerpunkten Statik und Baumechanik sowie Massivbau und schloss es 2004 mit einer Diplomarbeit am Institut für Mechanik ab. Fortan arbeitete er zunächst als Bauingenieur bei der Firma Itasca Consultants GmbH im Bereich computergestützter Berechnungsverfahren auf dem Gebiet der Diskrete-Elemente-Methode. Dort beschäftigte er sich intensiv mit der numerischen Modellierung im Rahmen von Partikelmethode und der Materialmodellierung in den Bereichen Kriechen und Plastizität. Seit Herbst 2007 ist er wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Mechanik von Jörg Schröder und beschäftigt sich im Zuge seiner Promotion mit der numerischen Modellierung ferroelektrischer Funktionskeramiken.



Marc-André Keip - Foto: Max Greve

DuEPublico

Duisburg-Essen Publications online

UNIVERSITÄT
DUISBURG
ESSEN

Offen im Denken

ub | universitäts
bibliothek

Dieser Text wird über DuEPublico, dem Dokumenten- und Publikationsserver der Universität Duisburg-Essen, zur Verfügung gestellt. Die hier veröffentlichte Version der E-Publikation kann von einer eventuell ebenfalls veröffentlichten Verlagsversion abweichen.

DOI: 10.17185/duepublico/73813

URN: urn:nbn:de:hbz:464-20210204-161834-4

Alle Rechte vorbehalten.