

Numerische Untersuchungen zur Verteilung von Feldgrößen
in piezoelektrischen Fasern und inhomogenen Dielektrika

Christoph Pientschke

Numerische Untersuchungen zur Verteilung von Feldgrößen in piezoelektrischen Fasern und inhomogenen Dielektrika

Dissertation

zur Erlangung des
Doktorgrades der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat)

der

Naturwissenschaftlichen Fakultät II
Chemie, Physik und Mathematik

der Martin-Luther-Universität
Halle-Wittenberg,

vorgelegt

von Herrn CHRISTOPH PIENTSCHKE
geb. am 12. März 1977 in Halle (Saale)

Gutachter:

-
- 1 Prof. Dr. Horst Beige
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

 - 2 Prof. Dr. Steffen Trimper
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

 - 3 Prof. Dr. Marc Kamlah
Karlsruher Institut für Technologie
-

eingereicht am 16. November 2012
Verteidigung am 22. April 2013

*Meinen Eltern
für alles.*

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| Verzeichnis der Symbole und Abkürzungen | ix |
| 1 Einführung | 1 |
| 2 Grundlagen | 7 |
| 2.1 Elektrostatische Eigenschaften | 7 |
| 2.1.1 Dielektrische Polarisierung | 7 |
| 2.1.2 Maxwellsche Gleichungen und Schlußfolgerungen | 8 |
| 2.2 Piezo- und Ferroelektrika | 10 |
| 2.2.1 Piezoelektrizität | 10 |
| 2.2.2 Ferroelektrizität | 10 |
| 2.2.3 Entstehung der Ferroelektrizität am Beispiel des Bariumtitantes | 11 |
| 2.2.4 Domänen und nichtlineares Verhalten | 12 |
| 2.3 Phänomenologische Theorie | 13 |
| 3 Verwendete Methoden | 17 |
| 3.1 Die Finite-Elemente-Methode (FEM) | 17 |
| 3.1.1 Grundideen der FEM | 17 |
| 3.1.2 Schwache Formulierung | 18 |
| 3.1.3 Dielektrisches Kontinuum | 21 |
| 3.1.4 Piezoelektrisches Kontinuum | 21 |
| 3.1.5 Vorgehen bei der Modellierung | 22 |
| 3.2 Feldstärkestatistik aus dem FEM-Modell | 23 |
| 3.2.1 Histogramme und Ableitung von Verteilungsparametern | 23 |
| 3.2.2 Einfluß der Klassenbreite | 25 |
| 3.2.3 Einfluß der Elementzahl | 26 |
| 3.2.4 Schlußfolgerungen | 30 |
| 4 Modellierung der Einzelfasermessung des longitudinalen Piezoeffizienten | 31 |
| 4.1 Einzelfasermessung | 31 |
| 4.2 Problemstellung | 33 |
| 4.3 Vorgehen bei der Modellierung | 33 |
| 4.3.1 Geometrie und ihre Parametrisierung | 34 |
| 4.3.2 Randbedingungen | 35 |
| 4.3.3 Konstitutive Gleichungen | 37 |
| 4.3.4 Auswertung der Lösung des FEM-Modells | 38 |
| 4.4 Ergebnisse | 40 |
| 4.4.1 Longitudinaler Piezoeffizient und Feldstärke im Faserzentrum | 40 |
| 4.4.2 Einfluß anderer Materialparameter auf die Messung | 43 |
| 4.4.3 Einfluß der Abmessungen auf die Messung | 45 |
| 4.4.4 Verteilung der elektrischen Feldstärke | 48 |
| 4.4.5 Analyse der resultierenden Verrückung | 54 |

| | |
|---|------------|
| 5 Modellierung dielektrischer Eigenschaften von 0-3-Kompositen | 61 |
| 5.1 Grundlegende Überlegungen | 61 |
| 5.1.1 Analytische Näherungsmethoden für die effektive Permittivität | 61 |
| 5.1.2 Näherungsformeln für die effektive Permittivität | 62 |
| 5.1.3 Grenzformeln für die effektive Permittivität | 64 |
| 5.1.4 Elektrische Feldstärkeverteilung | 65 |
| 5.1.5 Modellierung mit der Finite-Elemente-Methode | 65 |
| 5.2 Ergebnisse | 67 |
| 5.2.1 Referenzlösung: Kugeln im kubischen Gitter | 67 |
| 5.2.2 Effektive Permittivität bei kubischen Einschlüssen | 69 |
| 5.2.3 Analyse der Feldstärkeverteilung bei eingebetteten Zylindern | 71 |
| 5.2.4 Analyse der Feldstärkeverteilung bei eingebetteten Kugeln | 74 |
| 5.2.5 Elementarzellen mit zwei Kugeln | 80 |
| 5.2.6 Analyse der Feldstärkeverteilung bei kubischen Einschlüssen | 90 |
| 5.2.7 Feldstärke-Extrema eingebetteter Kugeln | 93 |
| 5.2.8 Energiedichteverteilung | 96 |
| 6 Zusammenfassung und Ausblick | 99 |
| A Materialdatensätze | 101 |
| Literaturverzeichnis | 103 |
| Danksagung | 109 |

Verzeichnis der Symbole und Abkürzungen

Symbole

Lateinische Buchstaben

| | |
|---------------|---|
| a | Abstand der Ringelektroden |
| A | Fläche der Kondensatorplatte |
| A, B, C | Differentialoperatoren (Kap. 3.1.2) |
| D, \dots | Mittelpunktsabstand der Kugeln in der Elementarzelle |
| c | Mittelpunktsabstand der Kugeln in der Elementarzelle |
| c_{ij}^E | elastische Steifigkeiten |
| d | Faserdurchmesser |
| d_{mj} | Piezokoeffizienten=Piezomoduln |
| d_{33} | longitudinaler Piezokoeffizient |
| d_{33}^m | gemessener longitudinaler Piezokoeffizient der Einzelfaser |
| D_m | dielektrische Verschiebung (Voigt-Notation) |
| D | dielektrische Verschiebung |
| e | finites Element |
| e_{mj} | piezoelektrische Koeffizienten |
| $E^{(i)}$ | Feldstärkeklasse |
| E_0 | homogene Feldstärke $E_0 = V_0/t$ |
| E_3^i | longitudinale Feldstärkekomponente im Faserzentrum |
| E_3^n | nomielle Feldstärke $E_3^n = V_0/a$ |
| E_m | elektrische Feldstärke (Voigt-Notation) |
| E | elektrische Feldstärke |
| \mathcal{G} | GIBBSsche Enthalpie |
| h | Faserlänge |
| $h(E)$ | Feldstärkedichtefunktion |
| $h(w)$ | Verteilungsdichtefunktion der Energiedichte |
| $H(E)$ | Verteilungsfunktion der elektrischen Feldstärke |
| $[k_{I1 I2}]$ | Steifigkeitsmatrizen, zu den Indizes I1 und I2 siehe Kap. 3.1.4 |
| l | Höhe der Elementarzelle |
| m | Seitenteiler für die Vernetzung mittels <i>mapped meshing</i> |
| n | Normalenvektor |

| | |
|-------------------------------|--|
| N_a | Formfunktionen = Basisfunktionen |
| P | dielektrische Polarisierung |
| Q | Ladung |
| q | Flächenladungsdichte |
| r | Radius der Einzelfaser (Kap. 4) oder der eingebetteten Kugeln (Kap. 5) |
| s_{ij}^E | elastische Nachgiebigkeiten |
| S | Entropie |
| S_3 | longitudinale Dehnung |
| S_i | Dehnungstensor (Voigt-Notation) |
| S | Dehnungstensor |
| t | Abstand der Kondensatorplatten |
| T_i | Spannungstensor (Voigt-Notation) |
| T | Spannungstensor |
| u_3 | mechanische Verrückung der Faser in Längsrichtung |
| U | elektrische Spannung |
| \mathcal{U} | innere Energie |
| V | Volumen der Elementarzelle |
| V_0 | anliegende elektrische Spannung |
| w | volumetrische Energiedichte |
| w_0 | Energiedichte w mit $\epsilon_r = 1$ |
| W | elektrostatische Energie |
| Griechische Buchstaben | |
| α | Elektrodenabstandsverhältnis |
| β | Elektrodenanteil |
| ΔE | Klassenbreite |
| ϵ | Permittivität |
| ϵ_{eff} | effektive Permittivität des Komposits |
| ϵ_r | relative Permittivität |
| ϵ_0 | elektrische Feldkonstante |
| ϵ_{mn}^S | Permittivitäten bei konstanter Dehnung (Voigt-Notation) |
| ϵ_{mn}^T | Permittivitäten bei konstanter mechanischer Spannung (Voigt-Notation) |
| Γ | Rand des Gebietes Ω (FEM) |
| κ | Radienverhältnis der eingebetteten Kugeln |
| ν | Volumenanteil der Partikel |
| Ω | Gebiet (FEM) |
| Φ | elektrisches Potential |

Griechische Buchstaben (Fortsetzung)

| | |
|----------------------|---|
| ρ_{frei} | Ladungsdichte der ungebundenen Ladungsträger |
| ρ_{geb} | Ladungsdichte der strukturell gebundenen Ladung |
| σ_p | Flächenladungsdichte, die von der gebundenen Ladung verursacht wird |
| θ | relativer Kugelabstand |
| ϑ | Temperatur |
| ζ_{x_i} | Sensitivität bezüglich des Materialparameters x_i , definiert in (4.11) |

Sonderzeichen

| | |
|----------------|--|
| [·] | Matrix (FEM) |
| ■ ^t | Transponierte Matrix ■ |
| {·} | Vektor (FEM) |
| ∇ | Nabla-Operator, $\nabla \cdot \equiv \text{div}$, $\nabla \times \equiv \text{rot}$ |
| Δ | Laplace-Operator $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ |

Abkürzungen

| | |
|------|---|
| AFC | Active Fibre Composite |
| APDL | Skriptsprache von ANSYS® (Ansys Parametric Design Language) |
| bcc | kubisch raumzentriertes Gitter |
| BT | Bariumtitanat BaTiO ₃ |
| DK | Dielektrizitätszahl (\equiv relative Permittivität ϵ_r) |
| DMA | Dynamischer Mechanischer Analyser |
| fcc | kubisch flächenzentriertes Gitter |
| FEM | Finite-Elemente-Methode |
| PFC | Piezoelectric Fibre Composite |
| PVDF | Polyvinylidenfluorid |
| PZT | Blei-Zirkonat-Titanat Pb(Ti,Zr)O ₃ |
| sc | einfach-kubisches Gitter |

Tensorschreibweise

Über die verwendete Tensorschreibweise in Voigt-Notation unterrichtet Anhang A auf Seite 101.

Kapitel 1

Einführung

Gerichtete Neugier ist die Grundlage jeder Wissenschaft. In der Physik gibt es viele Objekte dieser Neugier: vom Kleinsten zum Größten, vom Allgemeinen zum Besonderen, vom Handgreiflichen zum Abstrakten. Die vorliegende Arbeit folgt der Neugier nicht in die extremen Gefilde, sondern in die auf den ersten Blick naheliegenden Ebenen, die vielleicht deswegen bisher nur wenige Forschende angezogen haben.

Thema und Konzept In der vorliegenden Arbeit werden zwei Systeme hinsichtlich der Verteilung von Feldgrößen theoretisch untersucht. Es handelt sich zum einen um zylindrische piezoelektrische Fasern mit Ringelektroden und zum anderen um dielektrische 0-3-Komposite. Die Modellierung der piezoelektrischen Fasern zielte auf Genauigkeitsaussagen für die Messung ihres longitudinalen Piezokoeffizienten. Die Ergebnisse wurden unter anderem anhand der Verteilung der elektrischen Feldstärke näher analysiert. Besondere Aufmerksamkeit wurde dieser Verteilung bei der Untersuchung der 0-3-Komposite gewidmet. Außerdem wurde die effektive Permittivität dieser Verbundwerkstoffe betrachtet.

Beide Systeme sind zu kompliziert geformt, um praktikablen analytischen Beschreibungen zugänglich zu sein. Deswegen wurden numerische Berechnungen durchgeführt. Wegen ihrer Flexibilität im Hinblick auf Form und Randbedingungen der modellierten Systeme wurde hierzu die Finite-Elemente-Methode (FEM) eingesetzt. Die damit verbundene kontinuumstheoretische Beschreibung ist für die untersuchten Fragestellungen angemessen. Für die Berechnungen wurde das kommerzielle Programm ANSYS[®] verwendet, welches die notwendigen Multiphysics-Fähigkeiten zur Berechnung gekoppelter Felder aufweist und die Ansteuerung durch Makros ermöglicht. Die Materialgesetze wurden dabei nicht modifiziert, so daß den Berechnungen lineares piezoelektrisches beziehungsweise dielektrisches Verhalten zugrunde lag.

Aussagen zur Verteilung von Feldgrößen werden mit der FEM und anderen numerischen Methoden vergleichsweise selten erhoben. Mit *Verteilung* ist hierbei eine statistische Aussage über die Häufigkeit gemeint. Oft wird die FEM unmittelbar anwendungsbetont eingesetzt. Spezielle Konfigurationen werden dabei meist nur nach unmittelbar relevanten Zielgrößen ausgewertet, wie sie zum Beispiel maximal zulässige mechanische Hauptspannungen oder nicht zu überschreitende Temperaturgrenzen darstellen. Für eine Optimierung hinsichtlich der Zielgrößen ist dies auch sicherlich ausreichend. In der vorliegenden Arbeit werden jedoch Wege verfolgt, die auch quantitative Aussagen ermöglichen, so zum Beispiel über Mittelwerte physikalischer Größen oder ihre vollständigen Verteilungsdichtefunktionen.

Charakteristisch für die durchgeführten Modellierungsarbeiten ist der hohe Grad der Parametrisierung bezüglich der geometrischen Parameter. Auch wenn numerische Modellierungen naturgemäß nur die punktweise Auswertung im Parameterraum erlauben, konnten so in weiten Parameterbereichen Zusammenhänge zwischen Geometrie und Eigenschaften ermittelt werden.

Die beiden untersuchten Systeme werden nachfolgend genauer vorgestellt und die behandelten Fragestellungen motiviert.

Piezoelektrische Einzelfasermessung Piezoelektrika sind weit verbreitete Funktionswerkstoffe für vielfältige aktuatorische und sensorische Anwendungen. Seit etwa zwei Jahrzehnten bekommen funktionelle Faserverbundwerkstoffe eine zunehmende Bedeutung. Hierbei sind piezoelektrischen Fasern in ein piezopassives Epoxydharz eingebettet. Je nach Anordnung können verschiedene Kompositdesigns unterschieden werden.

Die Struktur in Abb. 1.1a wird als 1-3-Komposit bezeichnet. Der Begriff nimmt Bezug auf die sogenannte Konnektivität, welche von NEWNHAM als Beschreibung eingeführt wurde. Sie gibt an, in wieviel Raumdimensionen die jeweiligen Konstituenten des Komposits mit sich selbst verbunden sind.^[1] 1-3-Komposite finden aufgrund ihrer hohen elektromechanischen Kopplung und der über den Volumenanteil in weiten Bereichen anpassbaren akustischen Impedanz Anwendung in Ultraschallwandlern, nicht zuletzt bei bildgebenden Verfahren.^[2,3] In anderen Strukturen sind in einer Schicht piezoelektrische Stäbchen in ein Polymer eingebettet. BENT folgend, können solche Strukturen in verschiedene Typen unterschieden werden.^[4] Bei den in Abb. 1.1b abgebildeten *Piezoelectric Fibre Composites* (PFCs) sind die Fasern in einer Schicht unidirektional in einen Matrixblock eingebettet und der ganze Block mit Deckelektroden versehen. Dadurch wird der transversale Piezoeffekt zur planaren aktuatorischen Anwendung genutzt. Zu den Vorteilen gegenüber volumenhaften Piezoelektrika zählen die Robustheit und die Integrationsfähigkeit in verschieden geformte Strukturen. Durch geeignete Laminatstrukturen können beispielsweise Verdrehungen auf isotropen Trägerstrukturen erreicht werden.^[5] Bei den *Active Fibre Composites* (AFC) – vergleiche Abb. 1.1c – ist die Kontaktierung über Interdigitalelektroden verwirklicht, wodurch im Wesentlichen der longitudinale Piezoeffekt der Fasern aktuatorisch nutzbar wird.^[6] Das fingerförmige Elektrodendesign ermöglicht auch für vergleichsweise kleine anliegende Spannungen eine große mechanische Verrückung. Es gibt auch die Idee, die Elektroden über ein die Fasern zylindrisch umschließendes leitfähiges Polymer zu realisieren.^[7] In den beiden vorgenannten Komposittypen werden Fasern mit kreisförmigen Querschnitten eingebettet. Solche Komposite sollen in den folgenden Betrachtungen auch im Mittelpunkt des Interesses stehen.

Als besonders vorteilhaft erweist sich die Flexibilität der AFCs, wodurch sie sich sehr gut auch auf gekrümmten Oberflächen anbringen lassen. Dadurch erschließen sich in zunehmendem Maße neue Anwendungsfelder. Beim *energy harvesting* wird erneuerbare Energie aus der Umgebung gewonnen, um eine autarke Versorgung von elektronischen Geräten und Sensoren zu ermöglichen. Eine Energiequelle dafür stellen Vibrationen dar, welche z. B. durch Piezowandler in elektrische Energie umgesetzt werden können. Die diskutierten Wandlerkonzepte sind vielfältig.^[9,10] Mit dem *structural health monitoring*, verfolgt man das Ziel, Bauteile auch im laufenden

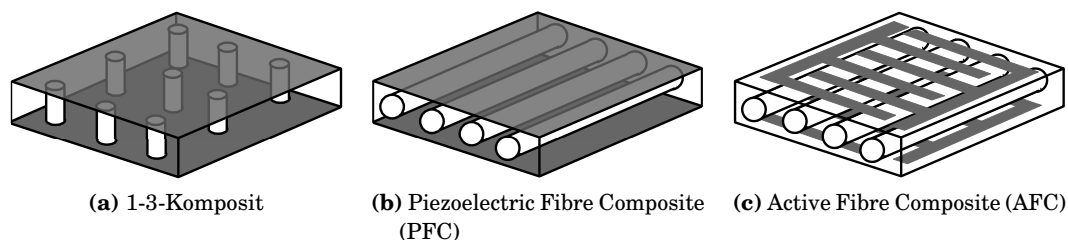


Abb. 1.1: Unterschiedliche Kompositstrukturen, die aus kreiszylindrischen Fasern bestehen, welche in eine Polymermatrix eingebettet sind. In den schematischen Bildern sind die Elektroden grau dargestellt. (AFC nach Abb. 2 in^[8])

Betrieb auf ihre strukturelle Integrität testen zu können. Eine Möglichkeit dafür besteht in der Auswertung des Schwingungsverhaltens des Bauteiles, welches mit dem des unbeschädigten Zustandes verglichen wird. Das erlaubt Rückschlüsse nicht nur auf die Existenz von Beschädigungen, sondern auch auf deren Position und Schwere.^[11,12] Beispiele für die Anwendung von AFC-Strukturen in diesem Bereich werden von BRUNNER ET AL. gegeben.^[13] Ein weiteres Anwendungsfeld ist die Schwingungsdämpfung. Mit in Laminatschichten integrierten AFCs ist GHASEMI-NEJHAD ET AL. die aktive Schwingungsdämpfung gelungen.^[8] Bei der passiven Schwingungsdämpfung werden die von den Wandlern erzeugten Ströme durch ein elektrisches Netzwerk – im einfachsten Fall durch einen ohmschen Widerstand – geleitet (*shunt damping*). Ein Beispiel zur Anwendung von AFCs wird von BELLOLI ET AL. gegeben.^[14]

Die Entwicklung solcher spezialisierter Anwendungen bringt einen Bedarf an der piezoelektrischen Charakterisierung nicht nur der Verbundwerkstoffe, sondern auch ihrer Bestandteile mit sich. Für den Faserhersteller ist es schon im Stadium der zielgerichteten Materialentwicklung wichtig, die Fasern elektromechanisch charakterisieren zu können. Der Ansatz, die in den Abmessungen oft unhandlichen und spröden Fasern zu 1-3-Kompositen zu verarbeiten, führt zu Proben, die sich zersägt in Scheiben gut charakterisieren lassen. Bei bekannten Polymereigenschaften kann aus den effektiven Eigenschaften des Komposits auf die Fasereigenschaften zurückgerechnet werden.^[15] Allerdings erfordert dieses Verfahren größere Fasermengen und einen aufwendigen Herstellungsprozeß. Dieser Aufwand ist gerade in der Phase der Entwicklung und Optimierung der Faserherstellung störend hoch. Dementsprechend sind Methoden zur Bestimmung der piezoelektrischen Eigenschaften *einzelner* piezoelektrischer Fasern für ihre Hersteller sehr wünschenswert. Zudem werden dadurch definierte Aussagen über Schwankungen innerhalb einer Fasercharge möglich, die bei der Bestimmung *effektiver* Eigenschaften durch den Mittelungsprozeß verloren gehen. Doch auch vom Standpunkt der Forschung selbst sind Messungen der piezoelektrischen Dehnung an *einzelnen* Fasern von Bedeutung. Piezoelektrische Fasern können aufgrund der Herstellungsprozesse und ihres wegen den Abmessungen größeren Oberflächenanteils durchaus qualitativ andere Großsignaldehnungen als Volumenmaterialien aufweisen.^[16,17] Eingebettet in Kompositen können sie aber nicht mehr direkt charakterisiert werden, wodurch die temperaturabhängigen mechanischen Einflüsse des Einbettungsmaterials oder die Wechselwirkung zwischen Fasern und Matrix sich mit den spezifischen Effekten der Fasern überlagern.

Für dünne Fasern (Durchmesser in der Größenordnung von 500 μm und darunter) können allerdings keine Standardverfahren mehr angewandt werden. Die Messung des longitudinalen Piezokoeffizienten ist aufgrund der schwierigen Handhabbarkeit der Fasern und der dennoch zu gewährenden Präzisionsmessung anspruchsvoll. In der Literatur dokumentierte Ansätze beschränkten sich bisher auf die Messung der Großsignaldehnung S_3 . Ein Beispiel für ein solches Verfahren ist die von HEIBER und BELLOLI angegebene Methode.^[18,19] Dabei wird eine piezoelektrische Faser in einem geeigneten Probenhalter in einen Dynamischen Mechanischer Analysator (DMA) eingespannt. Die durch Anlegen einer Spannung an der Faser auftretende mechanische Verrückung in Längsrichtung wird durch eine Verrückung der DMA-Einspannung kompensiert. Dies geschieht in quasistatischen Zyklen der Probenspannung und erlaubt somit die Aufnahme von Dehnungs-Hysteresen. Eine von BENT angegebene Methode beruht ebenfalls auf der Großsignalverrückung, die bei ihm laserinterferometrisch aufgenommen wird.^[4] Beide Methoden arbeiten im quasistatischen Frequenzbereich.

Ein neues Verfahren, einzelne Fasern solcher Abmessungen zu charakterisieren, wurde deshalb an der Martin-Luther-Universität entwickelt. Im Rahmen der vorliegen-

den Arbeit wird ein Aspekt der Messung näher untersucht: Die Einzelfasern sind mit Ringelektroden versehen. Dadurch bildet sich im Inneren der Fasern eine inhomogene elektrische Feldstärkeverteilung aus. Ihr Einfluß auf den *gemessenen* Piezoeffizienten wurde mittels numerischen Rechnungen für einen weiten Abmessungsbereich untersucht. Zur Charakterisierung der inneren Feldstärke wurde hierbei eine Methode entwickelt, welche auch bei der Untersuchung dielektrischer Verbundwerkstoffe Verwendung fand.

Permittivität und Feldstärkeverteilung in 0-3-Kompositen Schon die Urform des Kondensators – die Ende des 18. Jahrhunderts erfundene *Leidener Flasche* ^[20] – wurde als elektrischer Energiespeicher genutzt. Damals war nicht abzusehen, in welchem Ausmaß die Elektrizität das Leben der Menschen später prägen würde. Kondensatoren haben seither vielfältige Anwendungen gefunden. Getrieben durch die enorme Kapazität spezieller Bauformen wurden sie in den vergangenen Jahren auch als Energiespeicher wieder interessant. ^[21] Grund dafür sind unter anderem ihr geringer zyklischer Verschleiß beim wiederholten Laden und Entladen, ihr vergleichsweise hoher Wirkungsgrad und ihre hohe elektrische *Leistungsdichte*. Damit kann elektrische Energie innerhalb kurzer Zeiten gespeichert und bereitgestellt werden.

Namentlich Doppelschichtkondensatoren versprechen derzeit, die rein elektrochemisch wirkenden wiederaufladbaren Energiespeicher (Akkumulatoren) in einigen Anwendungsfeldern ersetzen zu können. Doppelschichtkondensatoren bestehen aus zwei Elektroden, zwischen denen sich ein Elektrolyt befindet. ^[22] Die Oberflächenladungen der Elektroden werden durch die sich ausprägende entgegengesetzt geladene Helmholtz-Schicht kompensiert, die sich aus Ionen des Elektrolytes bildet. Somit entstehen an jeder der Elektroden Kondensatoren, die durch den Elektrolyten in Reihe geschaltet sind. Die Dicke der Kondensatoren ist durch den mittleren Abstand von Elektrode und Helmholtz-Schicht gegeben, was nur wenigen Moleküldurchmessern entspricht. Zudem bestehen die Elektroden aus Aktivkohle mit zum Teil spezieller Ausformung, welche durch ihre Porosität eine sehr hohe Oberfläche besitzt. Durch diese beiden Besonderheiten kann die Kapazität eines Doppelschichtkondensators bis zu einigen tausend Farad betragen ^[23] – eine Größenordnung, die den verbreiteten Namen *Super-* oder *Ultrakondensatoren* motiviert. Auch elektrochemische Vorgänge spielen eine Rolle bei der Generierung dieser Kapazität. ^[24]

In jüngster Zeit gelangte ein anderer Ansatz zur Herstellung von Kondensatoren mit hoher Permittivität in das Blickfeld der Wissenschaft. Die Idee besteht darin, als Dielektrikum Komposite zu verwenden. In diesen Kompositen werden in eine Matrix niedriger Permittivität Partikel hoher Permittivität eingebracht. ^[25,26] Eine vielfach untersuchte Ausgestaltung solcher Materialverbünde kann als 0-3-Komposit aufgefaßt werden, wie er schematisch in Abb. 1.2 dargestellt ist. Durch die »0« in der Konnektivität wird zum Ausdruck gebracht, daß die Partikel nicht durchgehend miteinander verbunden sind. Wenn die Partikel hinreichend zufällig angeordnet und orientiert sind, dann ist ihre Form von untergeordneter Bedeutung.

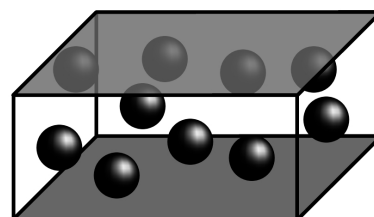


Abb. 1.2: Prinzipieller Aufbau eines 0-3-Komposits. In eine Matrix sind Partikel mit höherer Permittivität (schwarz) eingebracht. Der Verbundwerkstoff wird als Dielektrikum in einem Kondensator verwendet (Elektroden grau).

Als Matrix fungieren durchschlagsfeste Materialien wie Gläser^[27] oder Polymere. Durch die Materialkombination sollen die hohen Durchbruchfeldstärken der Matrizen mit den hohen Permittivitäten der Einschlüsse kombiniert werden. Die höheren Durchschlagsfestigkeiten ermöglichen höhere Energiedichten, sofern die Permittivität bei höheren Feldstärken hinreichend groß bleibt. Wird ein Polymer verwendet, so kann als weiterer Vorteil der entstehende Materialverbund flexibel geformt und bei niedrigen Temperaturen verarbeitet werden. Ein Beispiel dafür ist die Herstellung von eingebetteten Kondensatoren zur Verwendung in integrierten Schaltkreisen hoher Packungsdichte, wobei als Substrat auch organische Materialien in Frage kommen.^[28]

Als Einschlüsse bieten sich wegen ihrer hohen Permittivität besonders Ferroelektrika an. Unter anderem wurden Versuche mit Blei-Zirkonat-Titanat (PZT)^[29] und Bariumtitanat (BT)^[30] beschrieben. Von KIM ET AL. wurden beispielsweise etwa 50 nm große Barium-Titanat-Partikel mit einem Volumenanteil von 50 % in PVDF beziehungsweise Polycarbonat eingebracht. Um homogene Komposite zu gewährleisten, muß die Agglomeration der Partikel verhindert werden, was durch Modifikation der Partikeloberfläche erreicht wurde.^[31] Es wurden auch Versuche durchgeführt, Bariumtitanat in eine ferroelektrische Polymermatrix einzubringen.^[32] Als Partikel besonders hoher Permittivität können leitfähige Einschlüsse dienen, welche eine unendliche Permittivität besitzen. Solange sich keine leitfähigen Pfade bilden, haben die entstehenden Verbundwerkstoffe eine endliche Permittivität. Beispielsweise haben PECHARROMÁN ET AL. Komposite aus BT und Nickel und PANTENY ET AL. Komposite mit eingebetteten Silberpartikeln in einer Bariumtitanatmatrix untersucht.^[33,34] Letztgenannte haben gemessen, daß bei steigendem Volumengehalt der eingebetteten Partikel die Leitfähigkeit zunimmt. Ob dieser Komposittyp zur Energiespeicherung geeignet ist, darf bezweifelt werden.^[35] Versuche von LI ET AL. haben gezeigt, daß die Energiedichte des Materialverbundes auch steigen kann, wenn in eine ferroelektrische Polymermatrix Titandioxid-Partikel etwa gleicher Permittivität eingebracht werden.^[36] Dies kann allerdings nicht mehr vor dem Hintergrund der in der vorliegenden Arbeit verfolgten Kontinuumstheoretischen Betrachtungen verstanden werden. Vielmehr wird durch die Partikel die Kristallitgröße der Polymere beeinflusst, so daß die Polarisierbarkeit bei großen Feldstärken steigt.

Die genannten Beispiele haben gezeigt, daß 0-3-Komposite derzeit intensiv untersucht werden. Ausgangspunkt für das Verständnis des dielektrischen Verhaltens ist eine Kontinuumstheoretische Beschreibung. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit soll diese Ebene auch nicht verlassen werden. Im Mittelpunkt der Betrachtungen steht nicht die Energiedichte der 0-3-Komposite, sondern ihre relative Permittivität und die Feldstärkeverteilung. Beide beeinflussen die Energiedichte, verdienen aber auch losgelöst davon Beachtung.

Die Frage nach der effektiven Permittivität inhomogener Dielektrika beschäftigt seit Mitte des 19. Jahrhunderts die Forscher. Schon in MAXWELLS bahnbrechendem Werk »A Treatise On Electricity and Magnetism« werden dazu Überlegungen angestellt.^[37,38] Aufgrund der Universalität des zugrundeliegenden mathematischen Problems sind bis in die Gegenwart eine Vielzahl von Näherungsformeln entwickelt worden. In jüngster Zeit werden die Forschungen auf diesem Gebiet wieder intensiviert. Die Entwicklung bei der Modellierung dielektrischer Heterostrukturen wird von BROSSÉAU historisch von den Anfängen bis in die Gegenwart nachgezeichnet.^[39]

Während die effektive Permittivität von Verbundwerkstoffen schon länger Gegenstand von Untersuchungen ist, ist die Feldstärkeverteilung in solchen Materialien jedoch eine selten näher untersuchte Eigenschaft, obwohl die Feldstärkeverteilung ein Baustein zum Verständnis des Durchbruchverhaltens ist (der Schlüssel dazu ist freilich in den Leitfähigkeitsmechanismen zu sehen). Die spärliche Behandlung

der Feldstärkeverteilung in der Literatur motiviert ihre nähere Untersuchung in der vorliegenden Arbeit. Das Ziel ist hierbei ein grundlegender Einblick, nicht jedoch das volle Verständnis konkreter Systeme. Deswegen wurden verschiedene einfache Elementarzellen mit der FEM hinsichtlich der Feldstärkeverteilung und der Permittivität untersucht. Den Rechnungen lag die Annahme eines linearen Dielektrikums zugrunde. Es wurden die Auswirkungen der Geometrie und des Permittivitäts-Kontrastes zwischen eingebetteten Partikeln und der Matrix betrachtet. Hierbei wurden zumeist eingebettete dielektrische Kugeln betrachtet, deren Volumenanteile unterhalb des einfach-kubischen Perkollationslimits gehalten wurden. Als Beispiel für eine weitere Partikelform wurden eingebettete dielektrische Würfel untersucht.

Gliederung der Arbeit In Kap. 2 (ab Seite 7) werden die Grundlagen der Elektrostatik und der Piezoelektrika dargestellt und die linearen konstitutiven Gleichungen zur Materialbeschreibung angegeben. Die in der zu modellierenden Einzelfasermessung untersuchten Materialien sind ferroelektrische Keramiken. Der Zusammenhang mit den Ferroelektrika wird hergestellt.

Die in der Arbeit verwendeten Methoden werden in Kap. 3 (ab Seite 17) vorgestellt. Die Grundlagen der Modellierung sind insbesondere durch die piezoelektrischen und elektrostatischen Grundgleichungen gegeben. Für die Diskretisierung im Rahmen einer FEM-Modellierung müssen diese in der sogenannten *schwachen Formulierung* ausgedrückt werden. Zudem wird auf die Auswertung der numerischen Ergebnisse hinsichtlich der Feldstärkestatistik eingegangen.

Der FEM-Modellierung eines Aufbaus zur Messung des Piezoeffizienten d_{33} an einzelnen piezoelektrischen Fasern ist Kap. 4 (ab Seite 31) gewidmet. Die Parametrisierung der Fasern hinsichtlich der Abmessungen und der Randbedingungen wird vorgestellt. Die numerischen Ergebnisse zeigen die Einflüsse der Parameter auf den gemessenen Piezoeffizienten. Außerdem wird abgeschätzt, wie empfindlich die Messung von den anderen Materialparametern abhängt. Die Ergebnisse werden anhand der Verteilung der elektrischen Feldstärke und der mechanischen Felder innerhalb der Faser diskutiert.

Die Modellierung der Feldstärkeverteilung in 0-3-Kompositen steht im Mittelpunkt von Kap. 5 (ab Seite 61). Daneben wird auch auf die effektive Permittivität von 0-3-Kompositen eingegangen. Eine Auswahl wichtiger analytischer Näherungsformeln wird vorgestellt und mit Ergebnissen der FEM-Modellierung verglichen. Da es für die Verteilung der elektrischen Feldstärke in 0-3-Kompositen demgegenüber kaum Arbeiten in der Literatur gibt, wird diese für verschiedene Konfigurationen diskutiert.

Abschließend wird in Kap. 6 (ab Seite 99) ein Überblick über die wichtigsten Ergebnisse gegeben und auf die sich daraus ableitenden neuen Fragestellungen eingegangen.

Kapitel 2

Grundlagen

In der vorliegenden Arbeit werden ferroelektrische Keramiken in besonderen Ausformungen (Fasern) oder in 0-3-Kompositen betrachtet. Bei den Untersuchungen stehen die Fragen nach den Auswirkungen der besonderen Geometrie auf makroskopische Größen im Mittelpunkt. Für deren Beantwortung genügen in der angestrebten Näherungsstufe *lineare* konstitutive Gleichungen zur Beschreibung, auch wenn die den Untersuchungen zugrunde liegenden Materialien ein komplexes nichtlineares Verhalten aufweisen.

2.1 Elektrostatische Eigenschaften

Die Elektrodynamik der Kontinua wird in Standardlehrbüchern behandelt.^[40–42] In der Kontinuumstheorie wird von der atomistischen Struktur der Materie abstrahiert. Mit Hilfe makroskopischer Felder werden die physikalischen Größen als örtliche Mittelwerte behandelt.

2.1.1 Dielektrische Polarisation

Die Mittelung über die von der mikroskopischen Struktur verursachten Dipolmomente liefert die makroskopische Feldgröße der dielektrischen Polarisation \mathbf{P} . Sie gibt die Anzahl elektrischer Dipole pro Volumeneinheit in einem Dielektrikum an. Für die Oberfläche des Dielektrikums kennzeichnet sie damit eine Polarisationsladung. Die Dipoldichte setzt sich dabei aus permanenten und induzierten Anteilen zusammen. Die Ausrichtung der permanenten Dipole führt zur Orientierungspolarisation. Bei der induzierten Polarisation können zwei Arten unterschieden werden: Die Ionenpolarisation entsteht durch die Verschiebung der positiven und negativen Ladungsschwerpunkte in heteropolaren Festkörpern. Die Elektronenpolarisation tritt bei der Verschiebung der Elektronenhülle gegen den Atomkern auf.

Der Zusammenhang der Größe \mathbf{P} zur Struktur wird klassisch hergestellt, indem das äußere Feld in Beziehung zu den lokalen inneren Feldern gesetzt wird. Dabei wird die Struktur in Form einer Mittelung über *lokalisierte* Punktladungen und -dipole berücksichtigt. Das führt in den einfachsten Fällen (keine permanenten Dipole, kubisches Gitter) auf die Clausius-Mossetti-Gleichung (vgl. z. B.^[43]).

Allerdings wird von RESTA und VANDERBILT darauf hingewiesen, daß das Bild lokalisierter Dipolmomente keine eindeutige und sinnvolle Definition der Polarisation zuläßt^[44]. Sie schlagen stattdessen vor, die Polarisationsänderung über die adiabatische Betrachtung von Verschiebungsströmen der Elementarzelle zu definieren. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit bleiben solche Vorbehalte jedoch außen vor, da eine *makroskopische* Beschreibung angestrebt wird, die vollkommen innerhalb des Rahmens der phänomenologischen Beschreibung durch die Elektrodynamik der Kontinua bleibt.

2.1.2 Maxwellsche Gleichungen und Schlußfolgerungen

Die dielektrische Verschiebung ist durch

$$\mathbf{D} := \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}(\mathbf{E}) \quad (2.1)$$

definiert. Die konstitutive Gleichung

$$\mathbf{D} = \underbrace{\epsilon_0 \epsilon_r}_{\epsilon} \mathbf{E} \quad (2.2)$$

drückt den Zusammenhang zwischen der dielektrischen Verschiebung und der elektrischen Feldstärke für ein *lineares* isotropes Dielektrikum aus. Die Permittivität $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$ ist eine ortsabhängige Größe:

$$\mathbf{D} = \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}. \quad (2.3)$$

Für nicht-isotrope und nichtlineare Dielektrika ist sie eine tensorielle Größe, die zudem von der Feldstärke abhängig ist. Im Falle isotroper und linearer Dielektrika ist die Permittivität bei quasistatischer Betrachtung eine Konstante. Die relative Permittivität wird für diesen Fall nachfolgend auch als Dielektrizitätszahl (DK) bezeichnet.

Die allgemeinen elektromagnetischen Feldgleichungen sind durch die Maxwellgleichungen^[40]

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad , \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}} \quad , \quad \nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{\text{frei}} \quad \text{und} \quad \nabla \times \mathbf{H} - \dot{\mathbf{D}} = \mathbf{J} \quad (2.4)$$

gegeben. Die in dieser Arbeit interessierenden Fragestellungen sind elektrostatischer Natur. Dadurch können elektromagnetische Kopplungen ebenso vernachlässigt werden wie die zeitlichen Ableitungen. Dadurch reduzieren sich die Maxwell'schen Gleichungen auf die elektrostatischen Gleichungen

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad \text{und} \quad \nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{\text{frei}}. \quad (2.5)$$

Für Bereiche, in denen keine Überschußladungen vorhanden sind, folgen daraus die Feldgleichungen

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad \text{und} \quad (2.6a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0. \quad (2.6b)$$

Aus (2.6a) folgt, daß sich die Feldstärke als Gradient eines elektrischen Potentials Φ ausdrücken läßt

$$\mathbf{E} = -\nabla \Phi, \quad (2.7)$$

was zusammen mit (2.6b) auf die Laplace-Gleichung

$$\Delta \Phi = 0 \quad (2.8)$$

führt. In verschiedenen Bereichen der Physik stellt diese Gleichung (bei einer anderen Bedeutung von Φ) die Grundgleichung dar. Damit können die Lösungsmethoden und Schlußfolgerungen auf eine breite Klasse von Problemen identisch übertragen werden. Für die Herleitung von Näherungsformeln zur Berechnung der effektiven Permittivität von Kompositen ist (2.8) der Ausgangspunkt, wie es in Kap. 5 angesprochen wird. Falls die rechte Seite dieser Gleichung nicht verschwindet, liegt die ähnlich universelle Poisson-Gleichung vor.

Als Quelle des elektrischen Feldes fungieren auch Polarisationsladungen

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{\epsilon_0} (\rho_{\text{frei}} + \rho_{\text{geb}}), \tag{2.9}$$

was für die Lösung bedeutsam ist, auch wenn keine Überschußladungen vorliegen. Wird dann die elektrische Feldstärke als Reihe angesetzt, so kann dies nur innerhalb von Bereichen homogener Permittivität geschehen. ^[45]

An der Oberfläche und in inhomogenen Körpern unterliegen \mathbf{E} und \mathbf{D} Bedingungen an den jeweiligen Grenzflächen. Von Bedeutung für spätere Überlegungen sind Grenzflächen zwischen homogenen Schichten. Für diese läßt sich aus den statischen Maxwell'schen Gleichungen (2.5) mit dem Gaußschen bzw. Stokesschem Satz schlußfolgern, daß für die Felder in den Schichten ⁽¹⁾ und ⁽²⁾ die Ausdrücke

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}^{(2)} - \mathbf{D}^{(1)}) = D_{\perp}^{(2)} - D_{\perp}^{(1)} = \sigma_{\text{frei}} \quad \text{und} \quad E_{\parallel}^{(1)} = E_{\parallel}^{(2)} \tag{2.10}$$

gelten. Für eine ungeladene Grenzfläche folgt demnach die wichtige Beziehung

$$D_{\perp}^{(1)} = D_{\perp}^{(2)}, \tag{2.11}$$

welche aussagt, daß die Normalkomponente der dielektrischen Verschiebung stetig durch die Grenzfläche geht. Der Zusammenhang zwischen der Polarisation und der strukturellen, gebundenen Ladungsdichte

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho_{\text{geb}} \tag{2.12}$$

führt für die Betrachtung von Grenzschichten mit Hilfe des Gaußschen Satzes darauf, daß die Relation

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{P}^{(2)} - \mathbf{P}^{(1)}) = P_{\perp}^{(2)} - P_{\perp}^{(1)} = -\sigma_p \tag{2.13}$$

gilt. Polarisationsunterschiede zwischen homogenen Bereichen inhomogen strukturierter Dielektrika sind demnach mit elektrischen Ladungen an den Grenzschichten verbunden. In Abb. 2.1 wird das verdeutlicht.

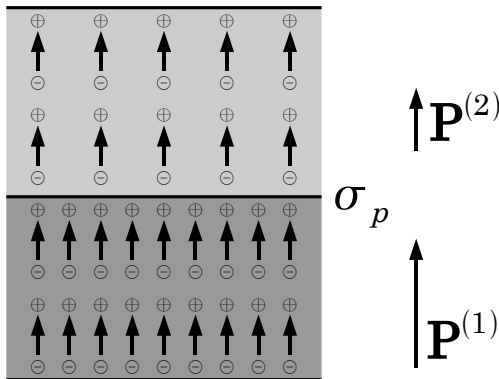


Abb. 2.1: Die Grenzschicht zwischen Bereichen unterschiedlicher Polarisation ist elektrisch geladen. Diese Aussage gilt auch an den Oberflächen der dargestellten Zweischichtstruktur.

Die elektrostatische Energie ist in Dielektrika aus dem Integral

$$W = \int_V \left(\int \mathbf{E} \cdot d\mathbf{D} \right) dV \tag{2.14}$$

zu berechnen ^[40], woraus mit (2.3) für lineare und isotrope Medien die volumetrische Energiedichte

$$w = \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_r E^2 \tag{2.15}$$

folgt.

2.2 Piezo- und Ferroelektrika

2.2.1 Piezoelektrizität

Festkörper dehnen sich bei der Einwirkung einer mechanische Spannung. Der direkte Piezoeffekt bewirkt, daß dabei zusätzlich Ladungen auf der Oberfläche auftreten. Der indirekte Piezoeffekt verursacht eine mechanische Dehnung der Materialien bei einem anliegenden elektrischen Feld. Beide Effekte sind linear und die Proportionalitätskonstante für direkten und indirekten Effekt sind gleich groß.

Der direkte piezoelektrische Effekt wurde erstmals von den Brüdern Pierre und Jacques Curie 1880 an verschiedenen Kristallen nachgewiesen und schon 1881 (nach Hinweisen Lippmanns) gelang ihnen auch der Nachweis des indirekten Effektes.^[46,47] Eine umfassende Monographie zu Piezoelektrika liegt mit dem Werk CADYS vor.^[46]

Die Ausprägung der Eigenschaften eines Festkörpers wird von seiner Symmetrie bestimmt. Die Verbindung wird durch die Prinzipien von Neumann und Curie hergestellt. Indem die Punktgruppen hinsichtlich der Symmetrie untersucht werden, erweist sich, daß Piezoelektrizität nur in nicht-zentrosymmetrischen Materialien auftreten kann. Das ist allerdings keine hinreichende Bedingung: unter den zugehörigen Punktgruppen ist diejenige mit 432-Symmetrie nicht piezoelektrisch.^[48] Die ersten bekannten Piezoelektrika waren Kristalle.^[49] Doch schon seit den späten 1940er Jahren wurden die erst kurz zuvor als ferroelektrisch erkannten Bariumtitanatkeramiken als die ersten Piezokeramiken eingesetzt.^[50]

2.2.2 Ferroelektrizität

Von den 20 piezoelektrischen Punktgruppen zeichnen sich 10 dadurch aus, daß sie eine eindeutige polare Achse aufweisen. Diese Pyroelektrika genannten Materialien weisen somit eine spontane Polarisierung auf. Durch elektrische Ströme aus dem Probeninneren oder der Umgebung werden die Oberflächenladungen jedoch gewöhnlich kompensiert, so daß diese nicht meßbar sind. Da die Größe der spontanen Polarisierung jedoch temperaturabhängig ist, tritt ein Ladungsfluß auf, auch wenn die Temperatur der Probe sich gleichförmig ändert (Hingegen können sich wegen thermisch erzeugter mechanischer Spannungen Ladungen auch bei ungleichförmig erwärmten Piezoelektrika bilden).^[50]

Ferroelektrika sind Pyroelektrika, deren spontane Polarisierung ohne elektrisches Feld mehrere mögliche Orientierungen (bei sonst unveränderter Kristallstruktur) hat, die sich durch ein elektrisches Feld ineinander umschalten lassen.^[51] Aus dieser Definition folgt, daß sämtliche Ferroelektrika sowohl pyro- als auch piezoelektrisch sind.

Für die Anwendung der Ferroelektrizität spielen keramische Werkstoffe eine bedeutende Rolle, weil diese sich an die Anforderungen zielgerichtet »maßschneidern« lassen. Dies gilt sowohl für die Zusammensetzung der Keramiken und die daraus resultierenden Stoffeigenschaften als auch für ihre Formgebung. Die Entwicklung ferroelektrischer Keramiken wurde besonders durch ihre piezoelektrischen Eigenschaften vorangetrieben. Als ein Beispiel dafür kann die erste piezoelektrische Keramik überhaupt gelten: Bariumtitanat (BaTiO_3). Es wurde wegen seiner hohen Permittivität von mehreren Gruppen unabhängig voneinander während des Zweiten Weltkrieges entwickelt^[52,53] und schon 1946 als ferroelektrisch^[54] beschrieben. Bald darauf wurden die ersten Patente im Hinblick auf piezoelektrischen Eigenschaften der Bariumtitanatkeramik erteilt. Dazu mußte die Bedeutung des vorhergehenden Polungsprozesses für die Ausprägung der piezoelektrischen Eigenschaften erkannt werden.^[50] Erst

dieser gibt den sonst polykristallinen und deswegen makroskopisch isotropen Keramiken eine Vorzugsrichtung. Eine weitere für Anwendungen wichtige Gruppe von Piezokeramiken stellt Blei-Zirkonat-Titanat (PZT) dar, welches seit Mitte der 1950er Jahre etabliert ist. [50,55]

Wie in Kap. 1 angesprochen, erweisen sich in jüngerer Zeit Fasergeometrien als eine nützliche Ausformung von Piezokeramiken. Entsprechend sind verschiedene Formgebungsverfahren dafür entwickelt worden, von denen als Beispiel das Sol-Gel-Verfahren [56], das ALCERU[®]-Verfahren [57] und die Extrusion [18] genannt seien.

2.2.3 Entstehung der Ferroelektrizität am Beispiel des Bariumtitanates

Am Beispiel der Struktur des Bariumtitanates werden nachfolgend schlaglichtartig einige Vorstellungen über die Ursachen der Ferroelektrizität angesprochen. Einen breiten Überblick über Ferroelektrika bieten die Monographien [50,51,58].

Bariumtitanat ist ein ferroelektrisches Oxid mit Perowskitstruktur (Perowskit ist der mineralogische Name von CaTiO_3). Das Kristallgitter besteht aus TiO_6 -Oktaedern, die jeweils an den Sauerstoffecken miteinander verbunden sind. Die zwischen den Oktaedern gebildeten Hohlräume werden durch Barium-Ionen (Ba^{2+}) gefüllt. Die kubische Elementarzelle ist schematisch in Abb. 2.2a dargestellt. Die Eckpunkte der Elementarzelle werden von den Ba-Ionen gebildet, ihr Zentrum belegt das Ti-Ion. Da das Ti-Ion einen im Vergleich zu den anderen Ionen großen Raum zur Verfügung hat, lässt es sich leichter verschieben. [61] Dies ist für die Ausbildung polarer Phasen von Bedeutung.

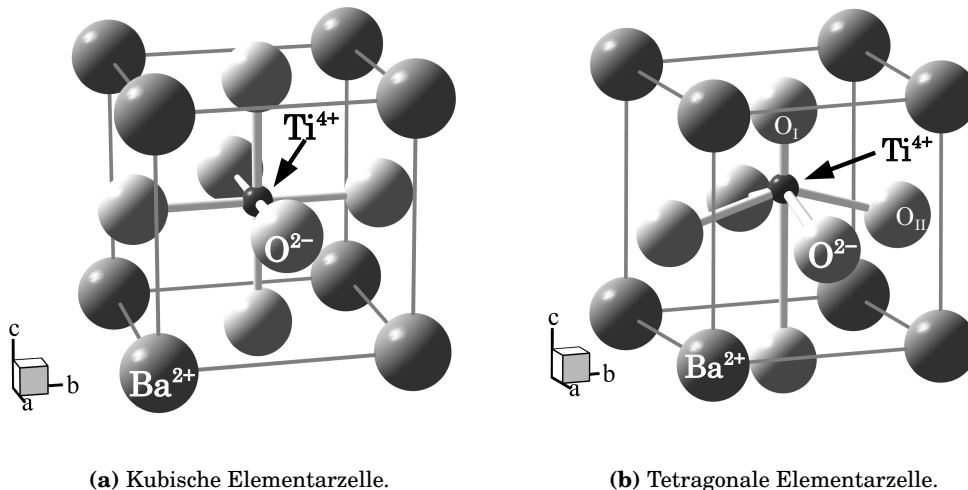


Abb. 2.2: Kubische und tetragonale Elementarzelle von BaTiO_3 . Die Ionendurchmesser sind nicht maßstäblich dargestellt.

Oberhalb der kritischen Temperatur ist BaTiO_3 kubisch (a). Die Phasenumwandlung führt zu einer Verzerrung (b) der kubischen Elementarzelle. Die Verschiebungen in Richtung der c-Achse sind 5-fach überhöht dargestellt. Relativ zu den Ba-Ionen verschiebt sich das Ti-Ion zu +5 pm in c-Richtung. Hinsichtlich der Verschiebung können zwei verschiedene Gruppen der O-Ionen (O_I und O_{II}) unterschieden werden. Die O_I -Ionen verschieben sich um -10 pm, die O_{II} -Ionen an den Seitenflächen nur um -6 pm. Die der Strukturbestimmung zugrundeliegenden Abmessungen der Elementarzelle betragen $a = 3,9945 \text{ \AA}$ und $c = 4,0335 \text{ \AA}$. (Daten: [59], Visualisierung mit Balls & Sticks [60])

Kubisches Bariumtitanat ist nicht ferroelektrisch. Bei der Abkühlung aus der kubischen Phase heraus durchläuft es eine Sequenz mehrerer struktureller Phasenübergänge erster Ordnung.^[62] Jede dieser dabei ausgebildeten Phasen ist ferroelektrisch.

Anhand des Übergangs von der kubischen zur tetragonalen Phase bei etwa 120 °C soll die Ausbildung einer ferroelektrischen Phase beschrieben werden. Unterhalb der Phasenumwandlungstemperatur verschieben sich das Ti-Ion und die O-Ionen in entgegengesetzter Richtung, wie in Beugungsexperimenten an Einkristallen^[59] (visualisiert in Abb. 2.2b auf Seite 11) und Pulvern^[63] nachgewiesen worden ist. Infolgedessen verzerrt sich die Elementarzelle dergestalt, daß sie tetragonal mit einem c/a -Verhältnis von (bei 28 °C) etwa 1 % wird. Dadurch bildet sich ein permanentes elektrisches Dipolmoment aus, welches entlang der polaren c -Achse in [001]-Richtung weist.

Die Ursache der Verschiebung der Gitterbausteine bei der kritischen Temperatur T_c wird durch COCHRAN auf die Gitterdynamik zurückgeführt.^[64,65] Das Gitter wird bei Annäherung an T_c instabil gegen eine bestimmte transversale optische Gitterschwingungsmode, der sogenannten *soft mode*. Die Frequenz einer solchen verschwindet bei der Annäherung an die kritische Temperatur, weil sich die langreichweitigen Coulombkräfte und die kurzreichweitigen Überlappkräfte aufheben. Der Eigenvektor entspricht der Verschiebung in der ferroelektrischen Phase, so daß diese gleichsam durch das Einfrieren einer solche Gitterverschiebung ausgebildet wird.

Diese Beschreibung als rein displazive Phasenumwandlung steht im Widerspruch zu einigen experimentellen Befunden, beispielsweise dem der diffusen Röntgenstreuung. Somit ist ein teilweiser Unordnungscharakter der polaren und unpolaren Phase anzunehmen.^[66] Eine Weiterverfolgung dieser Überlegung von CHAVEZ ET AL. führte auf die Vorstellung, daß die Titan-Ionen in der paraelektrischen Phase zwischen acht exzentrischen Punkten auf den Raumdiagonalen der Elementarzelle tunneln. In der tetragonalen Phase tunnelt das Ti-Ion jedoch nur noch in der x - y -Ebene, die durch die vier (bezüglich der Vorzugsrichtung) oberen Punkte verläuft.^[67] ZALAR ET AL. belegten in ihren Kernspinresonanzmessungen (NMR), daß die exzentrischen Positionen in der kubischen Phase auftreten, fanden allerdings deutliche Hinweise auf einen daneben ablaufenden displaziven Übergang, der auch in der kubischen Struktur eine tetragonale Verzerrung der Elementarzelle (zu einem bestimmten Zeitpunkt) bewirkt.^[68] *Ab-initio*-Rechnungen auf Grundlage von ersten Prinzipien^[69] unterstützen dies. So haben MARQUÉS ET AL. eine vereinheitlichte Deutung der konträren experimentellen Befunde vorgeschlagen.^[70,71] Demnach besitzt das Gesamtpotential zu einem bestimmten Zeitpunkt exzentrische Minima in der unpolaren und in der ferroelektrischen Phase, ähnlich wie es von Chaves et al. vorgeschlagen wurde. Über eine längere Zeit gemittelt erfährt das Ti-Ion jedoch ein solches Potential, daß sich für die kubische Phase ein Minimum in der zentralen Position des Ti-Atoms und in der ferroelektrischen Phase ein exzentrisches Minimum ausbildet. Der Grad der zeitlichen Mittelung des jeweiligen Experiments verursacht somit die unterschiedlichen Charakter der beobachteten Phasenumwandlung.

2.2.4 Domänen und nichtlineares Verhalten

Im Beispiel der tetragonalen Einheitszelle des Bariumtitanats treten sechs gleichberechtigte Richtungen für die spontane Polarisierung auf. In einem Körper ist die spontane Polarisierung jedoch nicht überall gleich ausgerichtet. Vielmehr treten verschiedene Bereiche homogener Polarisierung auf: die Domänen. Sie werden von Domänenwänden begrenzt. Die Domänenstruktur ist gegenüber einem Zustand gleich-

förmiger Polarisierung energetisch bevorzugt. Der aus den Gleichungen (2.1) und (2.4) gewonnenen Zusammenhang

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_{\text{frei}} - \nabla \cdot \mathbf{P}}{\epsilon_0} \quad (2.16)$$

verdeutlicht, daß $\nabla \cdot \mathbf{P}$ eine Quelle des elektrischen Feldes ist. Die in Ferroelektrika ausgebildete spontane Polarisierung kann demnach dort ein depolarisierendes Feld erzeugen, wo ihre Quelldichte nicht verschwindet. Das kann an der Oberfläche der Probe sein oder an Defekten. Ein solches Feld kann durch Ladungen kompensiert werden, sowohl durch innere Leitfähigkeiten als auch an der Oberfläche.^[51] Ein Zustand mit unterschiedlichen Domänen unterschiedlicher Polarisationsrichtungen verringert die elektrostatische Energie des Depolarisierungsfeldes. Demgegenüber steht aber die zur Domänenwandbildung notwendige Energie. Deswegen wird die Domärendynamik unter anderem auch von elastischen und elektromechanischen Energieanteilen bestimmt.^[58]

Die Dynamik der Domänen und der Domänenwände verursacht die ferroelektrische und elektromechanische Hysterese in Ferroelektrika. Bisher wird diese Dynamik noch nicht vollständig mikroskopisch, d. h. mittels *ab-initio*-Rechnungen, verstanden. Dennoch lassen sich detaillierte Vorstellungen zu den Mechanismen der Domänenwandverschiebung und des Umklappens auch anhand einfacherer Modelle entwickeln.^[72] Die qualitative Beschreibung der Hysteresekurven erreicht die Landau-Theorie.^[58] Eine phänomenologische Modellierung konkreter Hysteresekurven ist durch das nach PREISACH benannte universale Hysteresemodell^[73,74] möglich. Anwendungen auf Ferroelektrika sind beispielsweise von TURIK^[75,76] und BARTIC ET AL. vorgenommen worden.^[77] Mit geeigneten konstitutiven Ansätzen kann das komplexe Kopplungsverhalten in Ferroelektrika beschrieben werden.^[78,79] Werden geeignete Umklapp-Kriterien herangezogen, können mikromechanische Ansätze die Domändynamik auf einer kontinuumsmechanischen Ebene beschreiben, was die Modellierung dielektrischer und elektromechanischer Hysterese erlaubt.^[80]

2.3 Phänomenologische Theorie

Für die Herleitung der konstitutiven Gleichungen des ferroelektrischen Kontinuums wird im folgenden auf die phänomenologische Theorie zurückgegriffen.^[51] Eine vollständige thermodynamische Beschreibung gelingt durch die Berücksichtigung elektrischer Zustandsgrößen (Feldstärke und Verschiebung) sowie solcher mechanischer (Spannung und Dehnung) und thermischer (Temperatur und Entropie) Natur. Diese Parameter sind Tensoren¹. Die dargestellte Theorie beschränkt sich hier auf die *linearen* Gleichungen.

Der Gleichgewichtszustand des homogenen Kontinuums wird durch ein thermodynamisches Potential beschrieben, welches die Zustandsgrößen miteinander verknüpft. Ausgehend vom ersten Hauptsatz der Wärmelehre ist die innere Energie $\mathcal{U}(S, \mathbf{S}, \mathbf{D})$ ein geeigneter Ausgangspunkt für weitere Betrachtungen. Ihre unabhängigen Variablen werden auch als natürliche Variablen bezeichnet. Für Ferroelektrika ergibt sich die Änderung der inneren Energie aus Beiträgen der reversiblen Wärme sowie der mechanischen und elektrischen Arbeit. Damit ist das totale Differential der inneren Energie durch²

$$d\mathcal{U}(S, \mathbf{S}, \mathbf{D}) = \partial dS + T_i dS_i + E_m dD_m \quad (2.17)$$

¹Die hier benutzten Tensorschreibweise wird in Anhang A auf Seite 101 erläutert.

²Nachfolgend gilt die Einsteinsche Summenkonvention.

gegeben. Die Ableitungen des thermodynamischen Potentials nach den natürlichen Variablen führen auf die Zustandsgrößen. Durch eine Legendre-Transformation lassen sich aus \mathcal{U} sieben weitere thermodynamische Potentiale gewinnen, die von einem anderen Satz natürlichen Zustandsvariablen abhängen, wobei jeweils eine mechanische, elektrische und thermische Größe als unabhängig betrachtet wird. Am Beispiel der GIBBSschen Enthalpie (in der englischsprachigen Literatur *Gibbs free energy*) \mathcal{G} soll dieses Vorgehen und die sich daraus ergebenden Schlußfolgerungen demonstriert werden. Über die Transformation

$$\mathcal{G}(\vartheta, \mathbf{T}, \mathbf{E}) = \mathcal{U} - \vartheta S - T_i S_i - E_m D_m \quad (2.18)$$

geht die GIBBSsche Enthalpie aus der inneren Energie hervor. Ihr totales Differential ist somit

$$d\mathcal{G}(\vartheta, \mathbf{T}, \mathbf{E}) = -S d\vartheta - S_i dT_i - D_m dE_m. \quad (2.19)$$

Die Zustandsgrößen ergeben sich aus der partiellen Ableitung des thermodynamischen Potentials nach den natürlichen Variablen

$$S_i = -\left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial T_i}\right)_{\mathbf{E}, \vartheta} \quad D_m = -\left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial E_m}\right)_{\mathbf{T}, \vartheta} \quad S = -\left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \vartheta}\right)_{\mathbf{T}, \mathbf{E}}. \quad (2.20)$$

Verschiedene Stoffgrößen werden als Ableitungen nach den natürlichen Variablen definiert, nämlich die elastische Nachgiebigkeit

$$s_{ij}^E = \left(\frac{\partial S_i}{\partial T_j}\right)_{\mathbf{E}, \vartheta}, \quad (2.21)$$

die Piezokoeffizienten (oder Piezomoduln)

$$d_{mj} = \left(\frac{\partial D_m}{\partial T_j}\right)_{\vartheta} \quad \text{und} \quad d_{jm} = \left(\frac{\partial S_j}{\partial E_m}\right)_{\vartheta}, \quad (2.22)$$

sowie die Permittivitäten

$$\epsilon_{mn}^T = \left(\frac{\partial D_m}{\partial E_n}\right)_{\mathbf{T}, \vartheta}. \quad (2.23)$$

Diese Stoffgrößen sind isotherm definiert. Sie stellen Tensoren dar. Die Stoffgrößen folgen aus den zweiten Ableitungen des thermodynamischen Potentials. Die Vertauschbarkeit der partiellen Ableitungen führt zu einigen Symmetrieaussagen. Die maximale Anzahl der unabhängigen elastischen Nachgiebigkeiten reduziert sich wegen

$$s_{ij}^E = \left(-\frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial T_i \partial T_j}\right)_{\mathbf{E}, \vartheta} = s_{ji}^E, \quad (2.24)$$

wobei zu berücksichtigen ist, daß in der Voigtschen Schreibweise implizit bereits Symmetrien berücksichtigt sind. Die Piezomoduln für den direkten und den indirekten Piezoeffekt

$$d_{mj} = \left(-\frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial E_m \partial T_j}\right)_{\vartheta} = d_{jm} \quad (2.25)$$

sind gleich groß und der Tensor der Permittivitäten

$$\epsilon_{mn}^T = \left(-\frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial E_m \partial E_n}\right)_{\mathbf{T}, \vartheta} = \epsilon_{nm}^T \quad (2.26)$$

ist symmetrisch. Das thermodynamische Potential \mathcal{G} wird für *isotherme* Verhältnisse bezüglich einer Ausgangstemperatur in eine Taylorreihe um ihren Gleichgewichtspunkt bei verschwindender elektrischer Feldstärke und mechanischer Spannung entwickelt. Mit (2.21), (2.22) und (2.23) gelangt man zu

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_0 \underbrace{- S_i^0 T_i - D_m^0 E_m}_{\text{erste Ordnung}} - \frac{1}{2} s_{ij}^E T_i T_j - \frac{1}{2} \epsilon_{mn}^T E_m E_n - d_{mj} E_m T_j + \text{höhere Ordnungen}. \quad (2.27)$$

Die Größen der ersten Ordnung S_i^0 und D_m^0 werden Null gesetzt, da das thermodynamische Potential im Gleichgewicht ein Minimum annimmt. Das totale Differential von (2.27) führt dann nach Vergleich mit (2.19) zu den linearen elektromechanischen Zustandsgleichungen

$$D_m = d_{mj} T_j + \epsilon_{mn}^T E_n \quad (2.28a)$$

$$S_i = s_{ij}^E T_j + d_{ni}^t E_n \quad (2.28b)$$

wobei (2.28a) den direkten Piezoeffekt beschreibt und (2.28b) den indirekten Piezoeffekt.

Nichtlineares Materialverhalten macht sich in funktionalen Abhängigkeiten der Stoffgrößen bemerkbar (die damit keine Konstanten mehr sind) und könnte durch die zusätzliche Berücksichtigung höherer Ordnungen der Reihenentwicklung behandelt werden. Bei nicht isothermen Bedingungen würden im Rahmen der linearen Näherung auch die thermische Ausdehnung, die pyroelektrische Polarisation und der elektrokalarische Effekt berücksichtigt werden.

Neben der Form (2.28) der elektromechanischen Zustandsgleichungen sind auch alternative Formen gebräuchlich, die aus den anderen thermodynamischen Potentialen durch vergleichbare Überlegungen abgeleitet werden können. Diese Zustandsgleichungen unterscheiden sich in der Kombination der vier Feldgrößen \mathbf{E} und \mathbf{D} sowie \mathbf{S} und \mathbf{T} , wodurch jeweils andere Materialtensoren definiert werden.^[81] Die Stoffgrößen unterscheiden sich dann teilweise auch in ihren Randbedingungen. Beispielsweise sind die »freie« Permittivität ϵ^T (bei konstanter Spannung) von der »geklemmten« Permittivität ϵ^S (bei konstanter Dehnung) zu unterscheiden. Diese Unterscheidung spielt eine Rolle bei der Modellierung mit der Finite-Elemente-Methode. Für die zu modellierenden Experimente wird das Gleichungssystem (2.28) herangezogen. Im für die Rechnungen verwendeten FEM-Programm ANSYS[®] wird hingegen die Form

$$D_m = e_{mj} S_j + \epsilon_{mn}^S E_n \quad (2.29a)$$

$$T_i = c_{ij}^E S_j - e_{ni}^t E_n \quad (2.29b)$$

verwendet. ANSYS[®] rechnet zwar die piezoelektrischen und mechanischen Materialtensoren bei Bedarf um, jedoch wird stets die »geklemmte« Permittivität ϵ_{mn}^S verwendet. Für die Umrechnung der Materialtensoren wird auf^[81] verwiesen.

Die Materialtensoren s_{ij}^E (oder c_{ij}^E), d_{mj} (oder e_{mj}) und ϵ_{mn}^S (oder ϵ_{mn}^T) beinhalten höchstens 21, 18 beziehungsweise 6 unabhängige Komponenten. Dem Neumannschen Prinzip folgend, verringert die Symmetrie der Materialien die Anzahl der unabhängigen Komponenten der Materialtensoren.^[48] Für gepolte Piezokeramiken ergeben sich so insgesamt 10 unabhängige Materialkoeffizienten, die für eine Modellierung mit der FEM bekannt sein müssen. Die Struktur der Materialtensoren wird in Anhang A angegeben.

In den verwendeten Grundgleichungen (2.28) beziehungsweise (2.29) werden die Materialkoeffizienten als konstant angesehen, so daß die Materialgleichungen *linear* sind. Es wird also von gepolten Keramiken ausgegangen. Die Bedeutung dieser Einschränkung für die Modellierung der Einzelfasermessung wird in Kap. 4 diskutiert.

Aufbauend auf thermodynamischen Überlegungen läßt sich auch eine phänomenologische Theorie der Ferroelektrika für homogene (also insbesondere eindomänige) Kontinua entwickeln: die Landau-Devonshire-Theorie.^[58,82,83] Grundlegende Idee der Landau-Devonshire-Theorie der Ferroelektrizität ist es, das thermodynamische Potential \mathcal{G} in eine Reihe bezüglich des Ordnungsparameters (der auch ein Vektor sein kann) zu entwickeln. Die Entwicklungsparameter müssen dabei teilweise temperaturabhängig gehalten werden. Durch *ab-initio*-Rechnungen konnten ÍÑIGUEZ ET AL. tatsächlich das Potential *für alle Phasen* des Bariumtitanates in einer solchen Entwicklung angeben, wobei alle Entwicklungskoeffizienten nichtlinear temperaturabhängig waren.^[84]

Kapitel 3

Verwendete Methoden

3.1 Die Finite-Elemente-Methode (FEM)

3.1.1 Grundideen der FEM

Viele physikalische Fragestellungen lassen sich durch partielle Differentialgleichungen in der mathematischen Form von Randwertproblemen fassen. Deren geschlossene Lösung ist jedoch nur für wenige einfache Spezialfälle möglich, so daß es einen dringenden Bedarf an numerischen Lösungsverfahren gibt. Eine Klasse solcher Verfahren stellt die Finite-Elemente-Methode dar. Sie ist nahezu universell einsetzbar und wird seit ungefähr 60 Jahren angewendet und fortwährend weiterentwickelt. Ihre Bedeutung ist kontinuierlich gewachsen.

Die Geschichte der FEM^[85] kann grob auf zwei ursprünglich getrennt verlaufende Entwicklungslinien zurückgeführt werden, welche sich schließlich wechselseitig derart beeinflusst hatten, daß sie in einem ausgereiften numerischen Verfahren mündeten. Vorangetrieben wurde dieser Prozeß vorwiegend von den Ingenieurwissenschaften, welche naturgemäß einen nachdrücklichen Bedarf nach einem numerischen Verfahren besitzen, das mit beliebigen Geometrien, Materialkombinationen, verschiedenen Materialgesetzen und komplexen Randbedingungen umgehen kann. Schon Mitte des 19. Jahrhunderts wurden zur Berechnung diskreter mechanischer Systeme sogenannte Steifigkeits-Methoden entwickelt. Hierbei wurde die Verrückung diskreter mechanischer Strukturen aus Balken und Federn mit Hilfe von linearen Materialgesetzen und Gleichgewichtsbetrachtungen berechnet. Die Beschreibung kontinuumsmechanischer Probleme mit Hilfe geeigneter diskreter Ersatzsysteme in den folgenden Jahrzehnten war durchaus erfolgreich. Aufgrund der aufwendigen Berechnungen konnten die größten praktischen Fortschritte erst geschehen, nachdem die Rechentechnik weit genug entwickelt war, also ab den frühen 1950er Jahren. Arbeiten von TURNER ET AL. in der Boeing Airplane Company mündeten in einer Publikation aus dem Jahr 1956, welche den Durchbruch der FEM (auch wenn der Name erst einige Jahre später geprägt wurde) zur Lösung strukturmechanischer Probleme markiert.^[86]

Diese ingenieurwissenschaftliche Entwicklungslinie verband sich in den folgenden Jahren mit einer mathematisch geprägten, welche gleichsam nachträglich ein Fundament für die Methode legte, indem eine strenge Herleitung aus höheren Prinzipien gelang, Konvergenzbeweise möglich wurden und Verallgemeinerungen der Methode erfolgten. Außerdem stellte die numerische Mathematik effektive Algorithmen zur Lösung der auftretenden Gleichungssysteme bereit.

Auf die zugrundeliegenden mathematischen Überlegungen soll im folgenden etwas näher eingegangen werden. Aus der Fülle der Literatur sei auf das erste und seit 1967 prägende und kontinuierlich neu aufgelegte und aktualisierte Lehrbuch^[87] sowie auch auf^[88] verwiesen.

In der Physik stellen Variationsprinzipien ein tragfähiges Konzept zur verallgemeinerten Beschreibung dar. Grundlage für diese ist ein skalares Variationsfunktional Π . Dieses beinhaltet Volumen- und Oberflächenintegrale von Differentialausdrücken der

unbekannten Funktion \mathbf{u} und deren Ableitungen. Aus der Schar möglicher Funktionen wird die Lösungsfunktion aus der Bedingung der Stationarität $\delta\Pi = 0$ gewonnen. Aus solchen Prinzipien lassen sich jeweils den Randwertproblemen äquivalente Variationsformulierungen finden. Diese bieten neben konzeptionellen Vorzügen für die numerische Lösung den Vorteil, daß bestimmte Randbedingungen – die sogenannten natürlichen – implizit darin enthalten sind. Gibt es kein Variationsprinzip, so kann dennoch aus dem Randwertproblem eine Variationsformulierung abgeleitet werden.

Näherungsweise Lösungsmethoden für Variationsformulierungen sind zum Beispiel von Ritz entwickelt worden. Dort wird die Lösung aus einer Reihe aus *globalen* Ansatzfunktionen ermittelt, indem deren Parameter aus der Stationaritätsbedingung für das Funktional abgeleitet werden. Geeignete globale Ansatzfunktionen zu finden, stellt dabei eine Herausforderung dar. Ein wesentlicher Vorteil der schwachen Formulierung ist aber, daß auch *stückweise* Funktionen verwendet werden können. Auf COURANT geht die Idee zurück, dieses Verfahren *elementweise* zu benutzen, indem das Untersuchungsgebiet trianguliert wird, was er auch an einem Beispiel vorführt^[89].

Einige Schlaglichter zur weiteren Entwicklung der FEM, nachdem diese beiden Entwicklungen zusammengedacht und sich wechselseitig bereichert haben, werden in^[90] nachgezeichnet. Mittlerweile ist die Entwicklung der FEM so weit gediehen, daß sie ein Standardwerkzeug für eine Vielfalt von Fragestellungen darstellt. Dazu trägt auch ein breites Angebot an Berechnungssoftware bei.

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen wurde das kommerzielle Programm ANSYS[®] verwendet. Neben rein strukturmechanischen Elementen werden dort auch Multiphysics-Elemente zur Betrachtung von gekoppelten Feldern bereitgestellt.

3.1.2 Schwache Formulierung

Für eine detaillierte Herleitung des für die FEM notwendigen mathematischen Apparates und dabei benötigter numerischer Methoden wird auf die Monographien^[87,88,91] verwiesen. ZIENKIEWICZ ET AL. folgend^[87], soll hier das Vorgehen skizziert werden, welches aus der differentiellen Formulierung zur schwachen Formulierung führt, welche die Grundlage der FEM bildet.

Gesucht wird die Lösung \mathbf{u} des Randwertproblems, welches zum einen durch das Differentialgleichungssystem

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad (3.1a)$$

in einem Gebiet Ω gegeben sei, wobei auf dessen Rand Γ die Randbedingungen

$$\mathbf{B}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad (3.1b)$$

erfüllt sein sollen (Abb. 3.1).

Äquivalent dazu ist für beliebige Funktionen $\bar{\mathbf{v}}$ und \mathbf{v} aus einem geeigneten Funktionenraum der Ausdruck

$$\int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{A}(\mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{\mathbf{v}}^T \mathbf{B}(\mathbf{u}) d\Gamma = 0, \quad (3.2)$$

weil die Gleichungen (3.1) im gesamten Ω beziehungsweise Γ identisch Null sind.

Für die mathematische Fundierung des Verfahrens (beispielsweise Konvergenzbeweise) bewährt sich der sogenannte Sobolev-Raum, weil in ihm verallgemeinerte Ableitungen möglich sind, mit denen sich auch stückweise differenzierbare Funktionen

behandeln lassen.^[91] Wenn sich (3.2) partiell integrieren läßt, kann diese Gleichung auf die sogenannte *schwache Form*

$$\int_{\Omega} \mathbf{C}(\mathbf{v})^t \mathbf{D}(\mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{E}(\bar{\mathbf{v}})^t \mathbf{F}(\mathbf{u}) d\Gamma = 0 \quad (3.3)$$

gebracht werden. Durch die partielle Integration wird die Ordnung der Ableitungen in den Operatoren \mathbf{D} und \mathbf{F} geringer als die von \mathbf{A} und \mathbf{B} in der differentiellen Form (3.1). Damit werden die Anforderungen an die Funktion \mathbf{u} hinsichtlich ihrer Stetigkeit geringer, als das in der differentiellen Form der Fall ist.

Das Gebiet Ω kann lückenlos in endliche Untergebiete Ω^e zerlegt werden. Entsprechend ergibt sich die Lösung \mathbf{u} aus der Gesamtheit der elementweisen Lösungen \mathbf{u}^e . Diese kann näherungsweise mittels der Formfunktionen (oder auch Basisfunktionen) \mathbf{N}_a^e als

$$\mathbf{u}^e \approx \hat{\mathbf{u}}^e = \sum_{a=1}^n \mathbf{N}_a^e \hat{\mathbf{u}}_a^e = \mathbf{N}^e \hat{\mathbf{u}}^e \quad (3.4)$$

ausgedrückt werden. Hierin wird die Diskretisierung für jedes finite Element e verwirklicht. Die unbekannt Lösung \mathbf{u}^e (zum Beispiel eine mechanische Verrückung) ist kontinuierlich. Gesucht sind die jeweils n Knotenwerte jedes Elementes $\hat{\mathbf{u}}_a^e$. Die Formfunktionen \mathbf{N}_a^e erlauben es, für alle Punkte des Elementes Werte für $\hat{\mathbf{u}}$ zu interpolieren. Die Formfunktionen müssen für die verschiedenen Elementformen und -typen je nach Anforderungsgrad an die Interpolation ermittelt werden. Durch ihre Wahl wird ein elementweiser *Ansatz* für den Verlauf der Lösung getroffen. Jedes der endlichen Gebiete e mit der zugehörigen Ansatzfunktion wird als *finite Element* bezeichnet. Die Näherungsfunktion $\hat{\mathbf{u}}$ muß an den Elementgrenzen jeweils stetig sein (unter Umständen auch ihre Ableitung). Die elementweisen Ausdrücke (3.4) können auch zu einem Ausdruck

$$\mathbf{N}_a = \sum_e \mathbf{N}_a^e \quad (3.5)$$

zusammengefaßt werden. Hierbei bezeichnet a jetzt *alle* Knoten des Gebietes, weil \mathbf{N}_a außerhalb des jeweiligen Elementes identisch $\mathbf{0}$ gesetzt wird. Eine Integralform der Gestalt

$$\int_{\Omega} \mathbf{G}_b(\hat{\mathbf{u}}) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{g}_b(\hat{\mathbf{u}}) d\Gamma = \mathbf{0} \quad \text{für } b = 1, \dots, n \quad (3.6)$$

kann nach der vollständigen Zerlegung des Gebietes und des Randes zu

$$\sum_{e=1}^m \left[\int_{\Omega_e} \mathbf{G}_b(\hat{\mathbf{u}}^e) d\Omega + \int_{\Gamma_e} \mathbf{g}_b(\hat{\mathbf{u}}^e) d\Gamma \right] = \mathbf{0} \quad \text{für } b = 1, \dots, n \quad (3.7)$$

diskretisiert werden. Nachfolgend wird diese Aufteilung nicht noch einmal explizit aufgeschrieben. Vereinfachend wird deswegen der Index e in (3.4) in den weiteren Betrachtungen weggelassen und die Zusammenfassung der Form (3.5) genutzt.

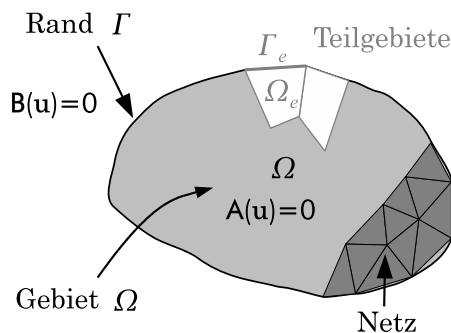


Abb. 3.1: Bezeichnungen zur Herleitung der schwachen Formulierung in einem zweidimensionalen Schema (nach Abb. 3.1 in [87], ergänzt). Für die beiden Gebiete Ω_e ist eine Berandung aus Geradenstücken dargestellt. Weitergehende Überlegungen zeigen aber, daß auch krummrandig begrenzte Gebiete behandelt werden können. Eine mögliche Zerlegung in Teilgebiete (die Vernetzung) ist für diesen Fall angedeutet worden.

Da (3.2) für beliebige Funktionen gilt, kann auch ein Satz Näherungsfunktionen

$$\mathbf{v} \approx \sum_{b=1}^n \mathbf{w}_b \delta \tilde{\mathbf{u}}_b \quad \text{und} \quad \tilde{\mathbf{v}} \approx \sum_{b=1}^n \bar{\mathbf{w}}_b \delta \tilde{\mathbf{u}}_b \quad (3.8)$$

für \mathbf{v} und $\tilde{\mathbf{v}}$ eingesetzt werden. Dabei stellen die $\delta \tilde{\mathbf{u}}_b$ frei wählbare Parameter dar. Das führt auf

$$\delta \tilde{\mathbf{u}}_b^t \left[\int_{\Omega} \mathbf{w}_b^t \mathbf{A}(\mathbf{N}\tilde{\mathbf{u}}) d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{\mathbf{w}}_b^t \mathbf{B}(\mathbf{N}\tilde{\mathbf{u}}) d\Gamma \right] = 0 \quad \text{für } b = 1, \dots, n \quad (3.9)$$

und wegen der beliebigen Parameter $\delta \tilde{\mathbf{u}}_b$ auf die n Gleichungen

$$\int_{\Omega} \mathbf{w}_b^t \underbrace{\mathbf{A}(\mathbf{N}\tilde{\mathbf{u}})}_{\text{Residuum}} d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{\mathbf{w}}_b^t \underbrace{\mathbf{B}(\mathbf{N}\tilde{\mathbf{u}})}_{\text{Residuum}} d\Gamma = \mathbf{0} \quad \text{für } b = 1, \dots, n. \quad (3.10)$$

Die hervorgehobenen Terme lassen sich als Fehler durch die Ersetzung der genauen unbekanntenen Funktion \mathbf{u} durch ihre Approximation $\tilde{\mathbf{u}}$ auffassen: die sogenannten Residuen. Sie werden durch \mathbf{w}_b und $\bar{\mathbf{w}}_b$ gewichtet. Als Grundgleichung für die Methode der gewichteten Residuen folgt

$$\int_{\Omega} \mathbf{C}^t(\mathbf{w}_b) \mathbf{D}(\mathbf{N}\tilde{\mathbf{u}}) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{E}^t(\bar{\mathbf{w}}_b) \mathbf{F}(\mathbf{N}\tilde{\mathbf{u}}) d\Gamma = \mathbf{0} \quad \text{für } b = 1, \dots, n \quad (3.11)$$

entsprechend dem Schritt zu (3.3). Wegen der Willkürlichkeit von \mathbf{v} und $\tilde{\mathbf{v}}$ ist auch $\mathbf{w}_b = \bar{\mathbf{w}}_b$ denkbar. Werden dann $\mathbf{w}_b = \mathbf{N}_b$ gesetzt, das heißt die Basisfunktionen als Gewicht verwendet, so heißt diese spezielle Methode Galerkin-Methode. Aber auch andere Wichtungen sind verbreitet.

Gleichung (3.11) kann entsprechend (3.7) auch elementweise ausgedrückt werden. Die dort vorkommenden Knotenwerte $\tilde{\mathbf{u}}^e$ stellen die unbekanntenen Größen dar. Alle anderen Größen wurden aus dem Differentialgleichungssystem, den Randbedingungen und der Art der Vernetzung abgeleitet. Einige wichtige Fragestellungen führen im Ergebnis auf lineare Gleichungssysteme der Struktur

$$\mathbf{K}_{ab} \tilde{\mathbf{u}}_b + \mathbf{f}_a = \mathbf{0}, \quad (3.12)$$

zum Beispiel die lineare Elastizitätstheorie. Hierbei sind in der Koeffizientenmatrix \mathbf{K}_{ab} (der Steifigkeitsmatrix) und dem Summanden \mathbf{f}_a (dem Lastvektor) die elementweisen Größen entsprechend dem Vorgehen von (3.5) zusammengefaßt. Sie enthalten Volumen- und Oberflächenintegrale bekannter Größen, die üblicherweise numerisch berechnet werden, bevor die n Knotenwerte berechnet werden können. Damit stellt (3.11) ein Verfahren bereit, ein System partieller Differentialgleichungen näherungsweise in Form eines diskreten *algebraischen* Gleichungssystems zu lösen. In diesem Fall ist es linear.

Die Konvergenz des Verfahrens läßt sich bei entsprechenden Anforderungen an den Funktionenraum und die Zerlegung des Gebietes Ω beweisen.^[87,88,91] So wie dargestellt, wurden bisher die Ränder Γ als nur aus Ebenen (oder zweidimensional: Linien) zusammengesetzt betrachtet. In Abb. 3.1 auf Seite 19 sind diese für zwei Elemente Ω_e angedeutet. Der allgemeine Fall sind jedoch krummrandig begrenzte Gebiete. In der dort erfolgenden Vernetzung wird

$$\bigcup_e \Omega_e \neq \Omega \quad (3.13)$$

sein. Dadurch kann die Konvergenzordnung sinken, was beispielsweise durch die Verwendung isoparametrischer Elemente vermieden werden kann.^[91] Im Falle der

Elastizitätstheorie können sie definiert werden, indem die Interpolation der Elementkoordinaten und -verrückungen mit denselben Formfunktionen (im natürlichen Koordinatensystem) erfolgt.^[88] Dadurch können gekrümmte Elementränder und eine variable Knotenzahl realisiert werden.

3.1.3 Dielektrisches Kontinuum

In Kap. 2.1.2 wurde bereits auf die Universalität der Laplace- und Poisson-Gleichung hingewiesen. Beispielsweise entsprechen sich die Gleichungen der Elektrostatik und der Wärmeleitung mathematisch. Deswegen kann die schwache Form oder das zugehörige Variationsprinzip direkt von dem der Wärmeleitungsaufgaben übernommen werden. Die Schwache Form des Wärmeleitungsproblems wird von ZIENKIEWICZ ET AL. direkt aus der partiellen Differentialgleichung

$$-\nabla^t([k]\nabla\phi) + Q = 0 \quad (3.14a)$$

mit den Randbedingungen

$$\phi = \bar{\phi} \text{ auf } \Gamma_\phi \quad \text{und} \quad (3.14b)$$

$$\bar{q} + \mathbf{n}^t(\mathbf{k}\nabla\phi) + H(\phi - \phi_0) = 0 \text{ auf } \Gamma_q \quad (3.14c)$$

gewonnen.^[87] Hierbei sind zwei Typen von Randbedingungen berücksichtigt. Zum einen ist das die Dirichlet-Randbedingung (3.14b), bei der das Potential auf dem Randteil Γ_ϕ vorgegeben wird. Zum anderen ist das die Neumann-Randbedingung (3.14c), bei der die Normalkomponenten des Flusses auf dem Randbereich Γ_q als

$$q_n = \bar{q} - H(\phi - \phi_0) \quad (3.15)$$

vorgegeben wird. Es wird also sowohl ein bestimmter Wert \bar{q} vorgegeben als auch in einem weiteren Term ein zur Potentialdifferenz $\phi - \phi_0$ proportionaler (mit dem Proportionalitätsfaktor H) Fluß. Ausgehend vom Randwertproblem (3.14) gelangt man mittels partieller Integration zur schwachen Formulierung

$$\int_{\Omega} [(\nabla v)^t(\mathbf{k}\nabla\phi) + vQ] d\Omega + \int_{\Gamma_q} v(\bar{q} + H(\phi - \phi_0)) d\Gamma + \int_{\Gamma_\phi} vq_n \delta\Gamma = 0. \quad (3.16)$$

3.1.4 Piezoelektrisches Kontinuum

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden statische Berechnungen durchgeführt. In Matrixform lauten die konstitutiven Gleichungen der FEM^[92]

$$\{\mathbf{T}\} = [\mathbf{c}^E] \{\mathbf{S}\} - [\mathbf{e}] \{\mathbf{E}\} \quad (3.17)$$

$$\{\mathbf{D}\} = [\mathbf{e}]^T \{\mathbf{S}\} + [\mathbf{e}^S] \{\mathbf{E}\}. \quad (3.18)$$

Für die Anwendung ist wichtig, auf die Anordnung der Materialkoeffizienten in den jeweiligen Matrizen zu achten, insbesondere bei zweidimensionalen Rechnungen.

Von SEIFERT ET AL. wird eine Herleitung des Variationsprinzips aus der Lagrange-Funktion des piezoelektrischen Kontinuums angegeben.^[93] ALLIK ET AL. leiten das Variationsprinzip für Piezoelektrika aus dem Prinzip der virtuellen Arbeit

$$\delta W = \{\delta\mathbf{u}\}^t \{\mathbf{F}\} - \delta\phi\sigma \quad (3.19)$$

her.^[94] Hierzu verwenden sie eine Analogie zwischen den mechanischen und elektrischen Größen, welche eine einfache Möglichkeit eröffnet, das Variationsprinzip direkt aufzuschreiben als

$$0 = \int_{\Omega} \{ \delta \mathbf{S} \}^t [\mathbf{c}] \{ \mathbf{S} \} - \{ \delta \mathbf{S} \}^t [\mathbf{e}] \{ \mathbf{E} \} - \{ \delta \mathbf{E} \}^t [\mathbf{e}] \{ \mathbf{S} \} - \{ \delta \mathbf{E} \}^t [\boldsymbol{\epsilon}] \{ \mathbf{E} \} - \{ \delta \mathbf{u} \}^t \{ \bar{\mathbf{F}} \} + \delta \phi \bar{\sigma} \} dV - \int_{\Gamma_1} \{ \delta \mathbf{u} \}^t \{ \bar{\mathbf{T}} \} d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \delta \phi \bar{\sigma} d\Gamma - \{ \delta \mathbf{u} \} \{ \mathbf{P} \} + \delta \phi \mathbf{Q}. \quad (3.20)$$

Im Gegensatz zur Originalveröffentlichung wurden hier nur die Terme *ohne* zeitlichen Ableitungen von \mathbf{u} angegeben, da nur statische Aufgabenstellungen interessieren. Unter den angreifenden Kräften wird dabei zwischen den im Volumen ($\{ \bar{\mathbf{F}} \}$), auf der Oberfläche ($\{ \bar{\mathbf{T}} \}$) und in Punkten ($\{ \mathbf{P} \}$) wirkenden unterschieden. \mathbf{Q} steht für Punktladungen, $\bar{\sigma}$ für Oberflächenladungen. Die kontinuierlichen Größen werden knotenweise mit Interpolationsfunktionen diskretisiert, so daß schließlich die Matrixgleichungen

$$[\mathbf{k}_{uu}] \{ \mathbf{u}_i \} + [\mathbf{k}_{u\phi}] \{ \phi_i \} = \{ \mathbf{F}_B \} + \{ \mathbf{F}_S \} + \{ \mathbf{F}_P \} \quad (3.21a)$$

$$[\mathbf{k}_{\phi u}] \{ \mathbf{u}_i \} + [\mathbf{k}_{\phi\phi}] \{ \phi_i \} = \{ \mathbf{Q}_B \} + \{ \mathbf{Q}_S \} + \{ \mathbf{Q}_P \} \quad (3.21b)$$

folgen. Auf der rechten Seite stehen die Kraftvektoren F_{Index} beziehungsweise Ladungsvektoren Q_{Index} , wobei die Randbedingungen am ganzen Körper (Index B), der Oberfläche (Index S) oder punktwise (Index P) wirken. Diese Vektoren sind Integralausdrücke über die am Rand existenten Kräfte oder Ladungen. Die Größen $[\mathbf{k}_{\text{Index1 Index2}}]$ in (3.21) stellen die sogenannten Steifigkeitsmatrizen dar, welche gemäß

$$\begin{aligned} [\mathbf{k}_{uu}] &= \int_V [\mathbf{B}_u]^t [\mathbf{c}] [\mathbf{B}_u] dV & [\mathbf{k}_{u\phi}] &= \int_V [\mathbf{B}_u]^t [\mathbf{e}] [\mathbf{B}_\phi] dV \\ [\mathbf{k}_{\phi u}] &= \int_V [\mathbf{B}_\phi]^t [\mathbf{e}]^t [\mathbf{B}_u] dV & [\mathbf{k}_{\phi\phi}] &= \int_V [\mathbf{B}_\phi]^t [\boldsymbol{\epsilon}]^t [\mathbf{B}_\phi] dV \end{aligned} \quad (3.22)$$

definiert sind. Die hierin vorkommenden Größen B_{Index} verknüpfen die Dehnung und elektrische Feldstärke mit den knotenweisen Verrückungen beziehungsweise Potentialen, wobei sie den Gleichungen

$$\{ \mathbf{S} \} = [\mathbf{B}_u] \{ \mathbf{u}_i \} \quad \text{und} \quad \{ \mathbf{E} \} = - [\mathbf{B}_\phi] \{ \phi_i \} \quad (3.23)$$

genügen.

3.1.5 Vorgehen bei der Modellierung

Das Vorgehen bei der Modellierung mit dem benutzen FEM-Programm ANSYS[®] gliedert sich in mehrere Phasen. Im *Preprocessing* wird ein Geometriemodell erstellt. Hierfür ist in ANSYS[®] – neben anderen Möglichkeiten – die Skriptsprache APDL (Ansys Parametric Design Language) verfügbar. Diese erlaubt es, die Geometrie in Abhängigkeit von Variablen zu parametrisieren. Damit kann die Geometrie systematisch in einem größeren Bereich verändert werden. Dieses Vorgehen ist typisch für die hier vorgestellten Aufgaben. Es werden so Skriptdateien zur automatischen Abarbeitung erzeugt. Hierbei werden auch Makrostrukturen unterstützt, das heißt von Variablen abhängige Eingabedateien. Damit läßt sich die Abarbeitung umfangreicher Parameterstudien komfortabel gestalten.

Während des Preprocessing werden außerdem die Materialdaten vorgegeben, was in Form *vollständiger* Materialdatensätze geschehen muß. Im Zuge der Vernetzung wird die Finite-Elemente-Formulierung des physikalischen Problems umgesetzt. Hierbei werden die physikalischen Eigenschaften festgelegt, was die Gesetze und die

Stoffeigenschaften umfaßt. Mit der Wahl der Elemente wird außerdem der Grad der numerischen Näherung festgelegt, zum Beispiel zwei- oder dreidimensionale Berechnungen oder Elemente höherer Interpolationsordnung. Die Feinheit der Vernetzung kann mit verschiedenen Mechanismen beeinflußt werden. Die Randbedingungen werden im vernetzten Modell aufgebracht, wozu in APDL diverse Auswahlbefehle zur Verfügung stehen.

In dieser Arbeit werden ausschließlich statische Lösungen diskutiert. Grundsätzlich sind auch verschiedene zeitabhängige Lösungsverfahren verfügbar, um beispielsweise Schwingungsmoden oder die harmonische Antwort zu berechnen.

Nach der Lösung können die Ergebnisgrößen im Zuge des *Postprocessing* graphisch dargestellt und abgeleitete Größen berechnet werden. Daneben ist die Speicherung dieser Daten möglich. So wurden ausgewählte physikalische Größen auch elementweise gespeichert, um sie mit anderen Programmen auswerten zu können.

3.2 Feldstärkestatistik aus dem FEM-Modell

Oft sind in der Literatur die Ergebnisse von FEM-Modellierungen lediglich in einer Konturplot-Darstellung wiedergegeben. Um quantifizierte Aussagen zu den aus dem FEM-Modell erhaltenen Feldgrößen zu ermöglichen, wurde eine andere Auswertemethode entwickelt und umgesetzt. In der vorliegenden Arbeit waren für die beiden untersuchten Systeme Fragen bezüglich der Verteilung der elektrischen Feldstärke interessant, weshalb die Methodik an diesem Beispiel vorgestellt wird. Freilich kann diese Methode auch für andere Feldgrößen Verwendung finden. So wurde in der vorliegenden Arbeit auch die elektrostatische Energiedichte auf diese Weise analysiert.

Die Auswertung findet dabei elementweise statt. In der Regel sind die Volumina der einzelnen finiten Elemente jedoch *nicht* gleich groß. Insbesondere bei zweidimensionalen rotationssymmetrischen Rechnungen gilt es dies zu beachten, da dort selbst bei gleichgroßer Teilung des Netzes die zugehörigen Volumina (wegen der radialen Abhängigkeit) verschieden groß sind. Deswegen muß die Auswertung bezüglich der Volumenanteile geschehen. Dieser Einfluß muß im Falle unterschiedlich großer Elementvolumina auch für die Berechnung von Mittelwerten und Standardabweichungen Berücksichtigung finden, indem diese bezüglich der Volumenanteile gewichtet ermittelt werden.

3.2.1 Histogramme und Ableitung von Verteilungsparametern

Um die Verteilung von physikalischen Größen hinsichtlich ihrer Häufigkeit zu quantifizieren, sind Histogramme geeignet, die auch die Ermittlung von abgeleiteten Kennzahlen und Funktionen ermöglichen. Um solche Histogramme aus der Lösung des FEM-Modells zu gewinnen, muß wegen der in der Regel unterschiedlichen Elementgröße eine Auswertung bezüglich des Volumenanteils der finiten Elemente erfolgen. Gesucht wird also eine Dichtefunktion $h(E)$ bezüglich der Feldstärke, welche über

$$\frac{dV(E)}{V} = h(E)dE \quad (3.24)$$

den jeweiligen Volumenanteil im Körper liefert. Mit anderen Worten: die Fläche im Histogramm $h(E)$ entspricht dem Volumenanteil mit dem jeweiligen Feldstärkebereich. Um die Dichtefunktion näherungsweise zu ermitteln, wurden aus dem gelösten FEM-Modell die Volumina $v^{(l)}$ und die Feldstärken E^l der finiten Elemente ermittelt. Dies ist über die sogenannten Element-Tabellen möglich. In diesen kann für jedes Element ein Wert gespeichert werden, im Falle des Volumens $v^{(l)}$ ist das der exakte Wert, für die

Feldstärken E^l ist das der über die Elementknoten gemittelte Wert. Die gewonnenen Wertepaare wurden danach bezüglich ihrer Feldstärke mit der Klassenbreite ΔE klassiert.

Damit konnte die diskrete Dichtefunktion $h(E^{(i)})$ für die jeweilige Feldstärkeklasse $E^{(i)}$ als

$$h(\tilde{E}^{(i)}) = \frac{1}{\Delta E \sum_l v^{(l)}} \sum_{\substack{l \text{ mit} \\ E^l \in \tilde{E}^{(i)}}} v^{(l)} \quad (3.25)$$

ermittelt werden. Die Feldstärkeklasse $\tilde{E}^{(i)}$ gibt dabei das Intervall $[E^{(i)}, E^{(i)} + \Delta E[$ an. Ausgehend von der Dichtefunktion können die Erwartungswerte einer Funktion $f(x)$ näherungsweise durch

$$\langle f(E) \rangle \approx \sum_i f\left(E^{(i)} + \frac{\Delta E}{2}\right) h(E^{(i)}) \Delta E \quad (3.26)$$

ermittelt werden. Die Summen entsprechen der Integration der Dichtefunktion, wobei die diskreten Funktionswerte von E jeweils in der Klassenmitte genommen wurden. Mit (3.26) wird der Mittelwert der Feldstärke somit als Erwartungswert $\langle E \rangle$ berechnet und die Standardabweichung $\sigma(E)$ aus dem zweiten zentralen Moment (der Varianz) der Dichtefunktion gemäß

$$\sigma(E) = \left\langle (E - \langle E \rangle)^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}}. \quad (3.27)$$

Entsprechend können auch höhere Momente $\langle E^n \rangle$ oder die zentrierten Momente

$$\langle (E - \langle E \rangle)^n \rangle \quad (3.28)$$

der Dichtefunktion berechnet werden. CHENG ET AL. ziehen beispielsweise die Größe

$$\langle E^n \rangle^{\frac{1}{n}} \quad (3.29)$$

zur Charakterisierung der Feldstärkeverteilung heran.^[95] Dabei geben sie Werte bis $n = 50$ an (und für $n = \infty$, was dem Maximum entspricht).

Die Dichtefunktion ist entsprechend ihrer Definition unabhängig von der Klassenbreite. Deswegen ist sie gut zum Vergleich verschiedener Konfigurationen geeignet. Allerdings sind die den Feldstärken zugeordneten Volumenanteile nurmehr mittelbar (über die Fläche) zugänglich. Deswegen wird zur Auswertung auch die Verteilungsfunktion $H(E)$ herangezogen, welche die jeweiligen Feldstärken mit den (kumulierten) Volumenanteilen darstellt. Wegen der zugrundeliegenden Integration ist sie zudem gegenüber der Dichtefunktion geglättet. Die Verteilungsfunktion ist die Stammfunktion der Dichtefunktion. Aus der diskret vorliegenden Dichtefunktion geht sie aus

$$H(E^{(i)} + \Delta E) = \sum_{\substack{i \text{ mit} \\ E^i \in \tilde{E}^{(i)}}} h(\tilde{E}^{(i)}) \Delta E \quad (3.30)$$

hervor. Die Zuordnung des diskreten Funktionswertes zur Feldstärke $E^{(i)} + \Delta E$ folgt daher, daß die Fläche jedes Intervallstreifens laut Definition gleich dem Volumenanteil ist. Folglich stimmt die diskret bestimmte Verteilungsfunktion am rechten Intervallrand mit der kontinuierlichen überein. Die Verteilungsfunktion wird im folgenden stets durch Linienzüge dargestellt. Abb. 3.2 gibt dafür ein Beispiel, in dem auch der Zusammenhang zwischen Dichtefunktion und Verteilungsfunktion verdeutlicht wird.

Die dargestellte Methode wurde mit dem Computer algebra-Programm Mathematica umgesetzt.^[96] Die dafür aus der FEM gewonnenen Urdaten bestehen aus Datensätzen, die die Mittelpunktskoordinaten der jeweiligen finiten Elemente, deren Volumen

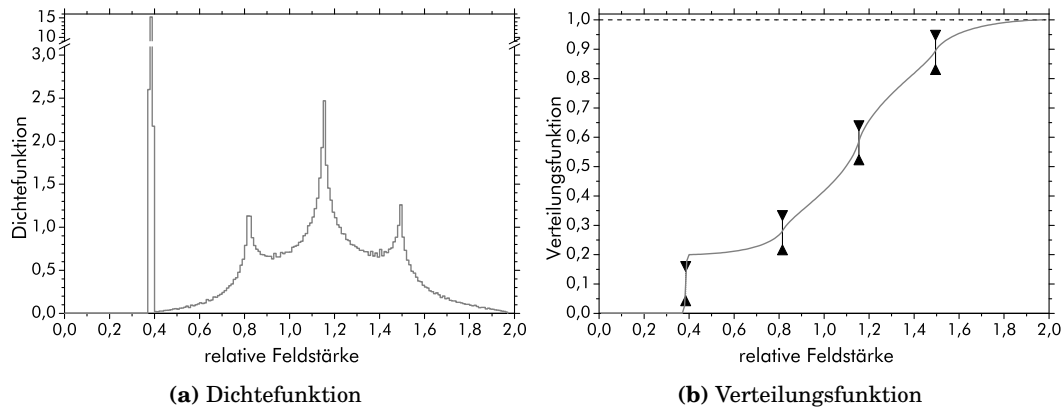


Abb. 3.2: Zusammenhang zwischen Dichtefunktion und Verteilungsfunktion am Beispiel des eingebetteten dielektrischen Zylinders (mehr zum physikalischen Hintergrund in Kap. 5.2.3). Die Feldstärken, bei denen die Dichtefunktion ein Maximum hat, sind in der Verteilungsfunktion markiert. Deutlich ist zu erkennen, daß diese dort Wendepunkte darstellen. Das Feldstärkemaximum mit der kleinsten Feldstärke läßt sich dem Inneren des Zylinders zuordnen und stellt idealerweise (ohne Gitterkonfiguration) eine δ -Funktion dar. In der Verteilungsfunktion erscheint bei dieser Feldstärke deswegen eine Stufe.

und die Feldstärke(komponente) beinhalten. Die Koordinaten werden für einige Darstellungen herangezogen. Mit Mathematica werden die Feldstärken entsprechend der Volumina klassiert und die Dichte- und Verteilungsfunktionen punktweise in einer Datei gespeichert.

3.2.2 Einfluß der Klassenbreite

Mit dem beschriebenen Vorgehen sind numerische Näherungen verbunden, welche über die Approximation durch die FEM-Lösung selbst hinausgehen. Zum einen wird die berechnete Feldstärke nur als Mittelwert über ein finites Element berücksichtigt. Zum anderen ist die Einteilung in diskrete Feldstärke-Klassen (Klassierung) mit Unsicherheiten verbunden.

Wie die Klassenbreite optimal zu wählen ist, kann von vornherein nicht ausgesagt werden, da sie von der unbekanntem Verteilung abhängt. Auch Genauigkeitsaussagen über die aus den Histogrammen abgeleiteten Größen lassen sich deswegen nicht ableiten. Zudem ist ΔE von der Anzahl der zu klassierenden Werte abhängig. Es gibt dafür verschiedene als »Faustformeln« einzuschätzende Ansätze. Als Beispiel sei derjenige von SCOTT erwähnt

$$\Delta E = 3,49 \cdot sn^{-1/3}, \quad (3.31)$$

bei dem die Standardabweichung s und die Anzahl der Datenpunkte n eingehen.^[97] Der Ansatz basiert auf der Minimierung der quadratischen Abweichungen der geschätzten von der tatsächlichen Dichtefunktion und setzt dabei eine Normalverteilung voraus. Die angegebenen Korrekturen für andere Verteilungen deuten an, daß diese Schätzung die optimale Klassenbreite meist überschätzt.

Um den Einfluß der Klassierung auf die ermittelten Mittelwerte und Varianzen einzuschätzen, wurde ein normalverteilter Beispieldatensatz verwendet, der mit einem Pseudozufallszahlengenerator^[96] gewonnen wurde. Die unterschiedlich großen Volumina wurden durch gleichverteilte Pseudo-Zufallszahlen abgebildet. So wurden Stichproben zu der Verteilung erzeugt, bei der der *Volumenanteil* die Rolle der Wahrscheinlichkeit übernimmt.

Mit einer Stichprobe wurden für verschieden feine Klassierungen Werte für den Erwartungswert, Varianz und Standardabweichung aus den Histogrammen gewonnen. Schon für Klassenbreiten ΔE welche mehr als dreimal so groß wie die Grenze (3.31) waren, konnten Schätzwerte für Mittelwert und Varianz aus den Histogrammen ermittelt werden, die innerhalb der Konfidenzintervalle (Konfidenzniveau 95 %) der zugrundeliegenden normalverteilten Zufallszahlen lagen. Die Abweichung von den der Verteilung zugrundeliegenden Parametern betrug für den Erwartungswert unter 0,2 %, für die Varianz unter 2 % und für die Standardabweichung unter 1 %. Weil in die Berechnung der Varianz als zentralem Moment der errechnete Erwartungswert eingeht, ist sie ungenauer und erfordert eine feinere Klassierung als die Berechnung des Erwartungswertes. Für eine Klassierung mit einem Fünftel der Klassenbreite wird die Varianz genauer als 0,5 % ermittelt. Es kann also erwartet werden, daß aus den Histogrammen mit vertretbarem Aufwand gute Schätzwerte für den Mittelwert und die Standardabweichung gewonnen werden können.

Ob dies auch für die in (3.29) definierte Größe gilt, wurde anhand einer asymmetrischen Verteilung untersucht, indem drei große wie oben beschrieben generierte Stichproben mit den exakten Werten der zugrundeliegenden Weibull-Verteilung verglichen wurden. Bis zur Ordnung $n = 25$ kann eine Genauigkeit erreicht werden, die besser als 5 % ist. Die Momente selbst konnten nur bis $n = 10$ mit dieser Genauigkeit berechnet werden, die zentrierten Momente für noch geringere Ordnungen n . Die Genauigkeit bei den höheren Ordnungen wird durch eine feinere Klassierung teilweise schlechter, offenbar weil die zu schmalen Klassen dann den jeweiligen Feldstärkebereich wegen der zufälligen Schwankungen nicht mehr ausreichend genau repräsentieren. Die höheren Ordnungen betonen die Schwankungen in den Daten, weswegen die Abweichungen zu einem nicht unerheblichen Anteil von den Stichprobenschwankungen herrühren dürften. Dennoch ist zu erwarten, daß auch die im FEM-Modell auftretenden (durch die Methode vorgegebenen) Unsicherheiten in gleicher Weise eine Abweichung von den tatsächlichen Momenten verursachen. Somit scheint eine Charakterisierung anhand der numerisch ermittelten Momente ungeeignet zu sein. Insbesondere gilt das für die hohen Ordnungen, die in [95] Verwendung finden.

Die numerischen Untersuchungen an den Testdatensätzen zeigten, daß die Verteilungsfunktion recht genau aus den Histogrammen gewonnen werden kann. Für die genannten drei Stichproben ist die durchschnittliche absolute Abweichung pro Histogrammklasse (bei allen untersuchten Klassierungen) kleiner als 0,0011. Dabei ist die maximale absolute Abweichung an den Punkten $H(E^{(i)} + \Delta E)$ durchweg kleiner als 0,5 % Volumenanteil.

3.2.3 Einfluß der Elementzahl

Bekanntlich hängt die Konvergenz der FEM-Lösung von der Güte der Vernetzung ab. Die Abweichung der Näherungslösung von der exakten Lösung verringert sich für kleinere Elemente. Die Konvergenzordnung hängt dabei nicht notwendig von dem Polynomgrad der Ansatzfunktion ab.^[91] Die Konvergenzrate wird unter anderem durch die Elementform und eine geeignete Abstufung der Elementgröße im Netz beeinflusst.^[88]

Um den Einfluß der Elementgröße im FEM-Modell auf die ermittelten Feldstärkeextrema und die Mittelwerte und Varianzen abzuschätzen, wurden Referenzrechnungen mit verschiedenen Elementzahlen vorgenommen. Dazu wurde ein zweidimensionales *nicht* rotationssymmetrisches Beispiel gewählt. Die Ergebnisse zum dielektrischen unendlichen Zylinder in einer Matrix auf einem Gitter werden in Kap. 5.2.3 genauer

dargestellt. Für die Referenzrechnungen wurde eine quadratische Elementarzelle gewählt, die den Querschnitt des Verbundsystems repräsentiert. Der Zylinder wurde somit in der zweidimensionalen Rechnung durch einen Kreis dargestellt. Sein Volumenanteil betrug 25 %. Die relative Permittivität der Matrix wurde auf $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$ und die des Zylinders auf $\epsilon_{\text{Zylinder}} = 100$ festgelegt. In Abb. 3.3b wird die Feldstärkeverteilung anhand eines Kontur-Plots dargestellt. Die angegebenen Feldstärken sind als relativ aufzufassen und beziehen sich auf die Feldstärke in der homogenen Matrix ohne Zylinder.

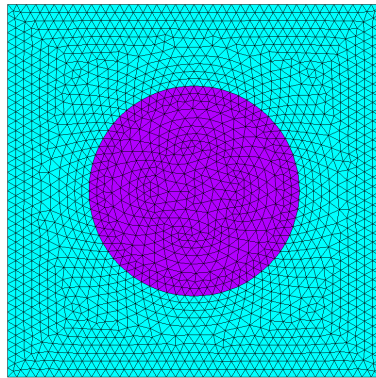
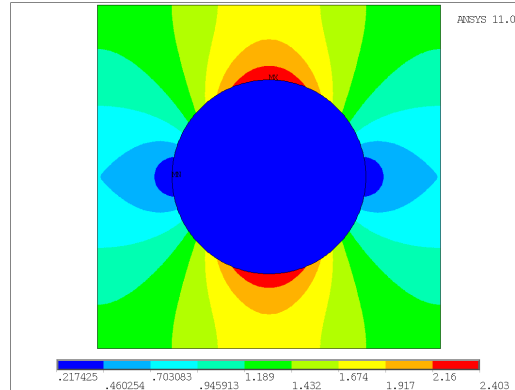
(a) Netz mit Teilung $m = 40$ (b) Feldstärkeverteilung mit dem feinstem Netz ($m = 250$)

Abb. 3.3: FEM-Modell für die Referenzrechnung am unendlich langen eingebetteten Zylinder auf einem Gitter. Der für das *mapped meshing* verwendete Seitenteiler m ist angegeben.

Die Vernetzung geschah mit Hilfe des *mapped meshing*, wobei alle Linien gleichabständig in m Teile geteilt wurden und das Netz von dort ausgehend von ANSYS® erstellt wurde. Die Anzahl der dann generierten Elemente ist – wie zu erwarten – etwa proportional zum Quadrat des Seitenteilers m . Ein Beispiel für ein so generiertes Netz gibt Abb. 3.3a. Das entstandene Netz weist eine geringe Varianz der gebildeten Volumina auf. Dadurch können hier die Mittelwerte und Varianzen auch ohne Mittelwertbildung in erwartbar guter Näherung ermittelt werden. In Tab. 3.1 werden für einige der untersuchten Netze die auf beide Arten ermittelten Mittelwerte und Varianzen zusammengestellt. Der Vergleich der mit unterschiedlichen Netzen aus den Histogrammen ermittelten Erwartungswerte und Varianzen zeigt, daß diese sich

Tab. 3.1: Aus dem zweidimensionalen FEM-Modell des unendlich ausgedehnten Zylinders in einer Matrix ermittelte Mittelwerte und Varianzen der Feldstärke für unterschiedlich feine Netze. Die volumenabhängigen Werte wurden aus Histogrammen mit der Klassierung $\Delta E = 0,05$ gewonnen. Für die volumenunabhängigen Werte wurden die Feldstärken selbst ausgewertet. Die Werte sind als relativ zur angelegten Feldstärke zu verstehen. Die Anzahl der Elemente genügt $2,47 \cdot m^{1,98}$.

| Teilung mit m | Elementzahl | volumenabhängig | | volumenunabhängig | |
|-----------------|-------------|-----------------|---------|-------------------|---------|
| | | Mittelwert | Varianz | Mittelwert | Varianz |
| 10 | 228 | 1,02432 | 0,34302 | 0,99326 | 0,34241 |
| 20 | 872 | 1,02319 | 0,34418 | 1,02327 | 0,34122 |
| 40 | 3504 | 1,02559 | 0,34670 | 1,01774 | 0,34656 |
| 80 | 14388 | 1,02499 | 0,34620 | 1,01755 | 0,34698 |
| 160 | 57042 | 1,02493 | 0,34612 | 1,01991 | 0,34467 |
| 250 | 139558 | 1,02501 | 0,34609 | 1,02117 | 0,34405 |

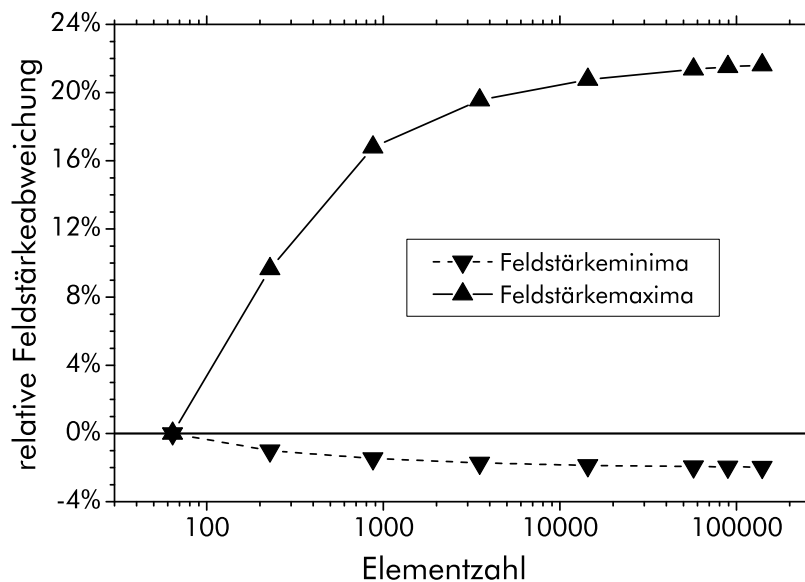


Abb. 3.4: Abhängigkeit der größten und kleinsten über ein finites Element gemittelten Feldstärke von der Elementzahl. Als Beispielsystem wurde der unendliche lange in eine Matrix eingebettete dielektrische Zylinder zweidimensional berechnet.

durch eine wachsende Elementzahl nicht wesentlich ändern: der Unterschied zwischen dem größten und feinsten Netz ist für die Mittelwerte 0,07 %, für die Varianzen 0,9 %. Die ohne Volumenmittelung gewonnenen Mittelwerte zeigen mit 2,8 % Unterschied zwischen feinstem und größtem Netz einen deutlichen Einfluß der Netzfeinheit. Die Standardabweichungen zeigen jedoch nur eine schwache Abhängigkeit von der Netzfeinheit. Für ein hinreichend feines Netz ist zu erwarten, daß die beiden Mittelwerte übereinstimmen. Der Unterschied beträgt tatsächlich (für das feinste Netz) nur noch weniger als 0,4 % und für die Varianzen weniger als 0,6 %.

Da die Feldstärke elementweise ausgewertet wird, ist hierbei ein Mittelungseffekt festzustellen. Dieser sollte dazu führen, daß sich die Minima der Feldstärke mit abnehmender Elementgröße verringern und die Maxima entsprechend zunehmen. Die Testrechnung zeigte – wie Abb. 3.4 belegt – daß die maximale festgestellte Feldstärke für feinere Netze deutlich stärker steigt, als die minimale Feldstärke sinkt. Das ist ein Effekt der Vernetzung, welche die einzelnen Konstituenten getrennt vernetzt und danach diese Bereiche zusammenfügt. Da die extremalen Feldstärken an der Grenzfläche auftreten (Abb. 3.3b), ist der Kontrast zwischen der niedrigen nur leicht variierenden Feldstärke des eingebetteten Zylinders und der maximalen Feldstärke sehr hoch. Die Mittelung führt deswegen für große finite Elemente zu einer bedeutenden Abweichung. Das absolute Feldstärkeminimum entspricht hingegen größenordnungsmäßig der Feldstärke innerhalb des eingebetteten Zylinders und ist deswegen von der Mittelung weniger stark betroffen. Mit wachsender Elementzahl wird deren Einfluß auf die extremalen Feldstärken immer kleiner: es deutet sich an, daß die Extrema einem Grenzwert zustreben. Allerdings ist zu erwarten, daß eine fortgesetzte Verkleinerung der finiten Elemente die Genauigkeit der ermittelten Extremwerte nicht beliebig steigert, weil die Feldstärke aus einer Ableitung des elektrischen Potentials im Element ermittelt wird und dadurch wachsende numerische Unsicherheiten verursacht werden. Für die vorgenommenen Rechnungen spielt dies aber offenkundig noch keine Rolle.

Eine ausreichend große Elementzahl ist auch wichtig, wenn die gesamte numerisch ermittelte Feldstärkeverteilung zur Charakterisierung herangezogen werden soll. Der Einfluß der Netzfeinheit wurde an dem FEM-Modell des unendlich langen eingebette-

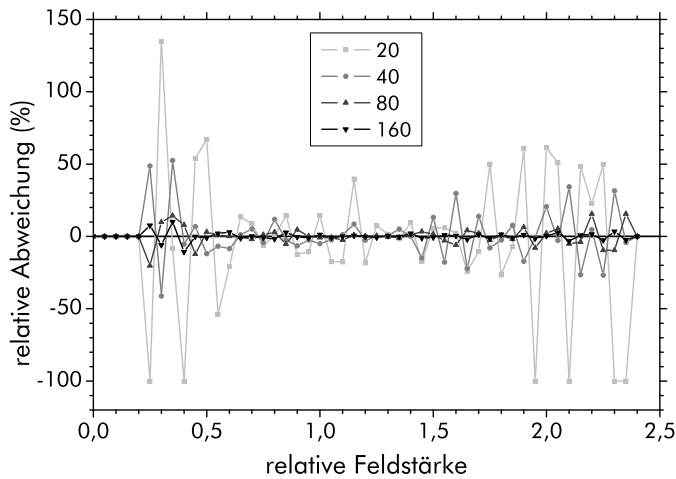
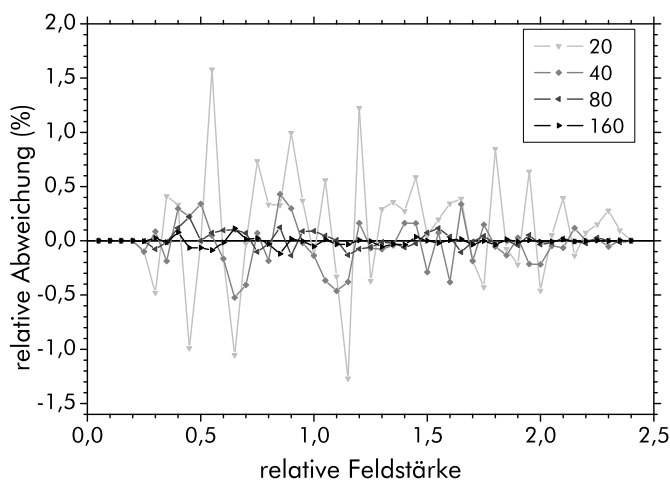
(a) Dichtefunktion $h(E)$ (b) Verteilungsfunktion $H(E)$

Abb. 3.5: Relative Abweichungen der Dichtefunktion und der Verteilungsfunktion des eingebetteten dielektrischen Zylinders für verschiedene Elementzahlen (in der Legende ist der Seitenteiler m aus Tab. 3.1 auf Seite 27 angegeben). Die Abweichung bezieht sich auf das feinste gerechnete Netz. Die Klassierung ist mit $\Delta E = 0,05$ vorgenommen worden.

ten Zylinders untersucht. Die Elementzahl wurde entsprechend den in Tab. 3.1 auf Seite 27 gegebenen Netzteilern m variiert. Die Abweichungen der Dichtefunktion und die Verteilungsfunktion wurden dabei jeweils auf das feinste gerechnete Netz bezogen ($m = 250$) und für eine jeweils gleich große Klassierung ermittelt. Abb. 3.5 zeigt, daß die Abweichungen der Funktionen mit feineren Netzen kleiner werden, was deutlich darauf hinweist, daß sie genauer ermittelt werden können.

In Abb. 3.6 auf Seite 30 ist ein Beispiel für verschieden klassierte numerisch ermittelte Dichtefunktionen zu finden. Im Histogramm repräsentiert die *Fläche* die Häufigkeiten. Bereiche mit homogener Feldstärke werden in der kontinuierlichen Dichtefunktion durch eine δ -Funktion wiedergegeben. In der numerischen Näherung entsteht hingegen eine Spitze, die um so höher ist, je kleiner die Klassenbreite ist. Das gesamte Erscheinungsbild der numerischen Dichtefunktion ist wesentlich von der Klassenbreite beeinflusst. Die optimale Klassenbreite ist dabei in Konkurrenz zu zwei Einflüssen zu wählen. Einerseits ist für eine detailgetreue Abbildung eine feine Klassierung wünschenswert. Wird diese allerdings zu fein, so werden zu wenige Elemente pro Klasse herangezogen und das Histogramm wirkt verrauscht. Es muß mit feinen Netzen gerechnet werden, um eine möglichst hohe Feldstärkeauflösung zu erreichen, obwohl diese auf die Ermittlung der Verteilungsparameter wie gezeigt keinen großen Einfluß haben. Daß die Dichtefunktionen genau berechnet werden, konnte auch durch eine Referenzrechnung (vgl. Kap. 5.2.3) belegt werden.

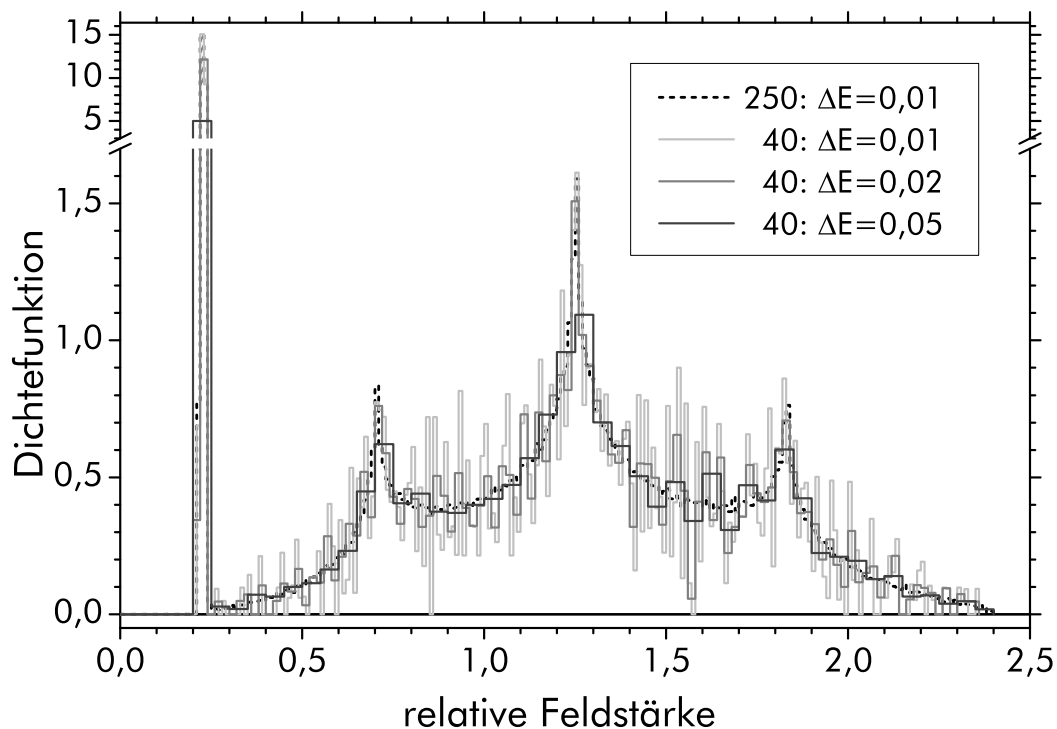


Abb. 3.6: Einfluß der Klassenbreite ΔE auf die Näherung für die Dichtefunktion, welche für die mit der FEM ermittelte Feldstärkeverteilung des eingebetteten dielektrischen Zylinders ermittelt wurde. Das feinste gerechnete Netz wird mit einem größeren Netz verglichen (in der Legende wird der Seitenteiler m aus Tab. 3.1 auf Seite 27 angegeben). Bei zu feiner Klassierung wirkt das Histogramm verrauscht.

3.2.4 Schlußfolgerungen

Auch wenn die Genauigkeit der benutzten Methode nur anhand von Beispielen überprüft wurde, so konnten doch wichtige Hinweise für ihre Anwendung gewonnen werden. Die volumengewichtete Mittelwertbildung erlaubt eine gute Bestimmung der Verteilungsparameter *Mittelwert* und *Varianz*. Allerdings zeigt sich, daß höhere Momente der Verteilung deutlich ungenauer ermittelt werden können. Die Kenngröße (3.29) ist nicht in allen von CHENG ET AL. benutzten Ordnungen n mit ausreichender Genauigkeit aus den numerischen Ergebnissen ermittelbar. Die Minima und Maxima der Feldstärke können numerisch offenbar gut bestimmt werden, allerdings scheint die Berechnung mit einer hohen Genauigkeit numerisch sehr aufwendig zu sein.

Die Dichtefunktion $h(E)$ ist deutlich von der Netzfeinheit und der Klassierung abhängig. Hingegen ist die Verteilungsfunktion $H(E)$ durch die Integration mit deutlich geringerem Aufwand mit guter Genauigkeit zu bestimmen. Deswegen erscheint sie – neben den Verteilungsparametern – gut geeignet zu sein, die Feldstärkeverteilung zu charakterisieren. Mittelwert und Varianz können ebenso wie die Verteilungsfunktion $H(E)$ offenbar schon mit geringem Aufwand recht genau ermittelt werden. Aus diesem Grund werden auch die genannten Größen vorrangig zur Beschreibung der Feldstärkeverteilung herangezogen.

Kapitel 4

Modellierung der Einzelfasermessung des longitudinalen Piezokoeffizienten

4.1 Einzelfasermessung

Die Messung des longitudinalen Piezokoeffizienten d_{33} oder auch der Großsignaldehnung S_3 einzelner Keramikfasern ist technologisch von Bedeutung, weil piezoaktive Fasern die funktionelle Grundlage verbreteter Verbundwerkstoffe sind, wie in Kap. 1 dargelegt wurde.

Unlängst wurde von KERN und STEINHAUSEN ein Verfahren entwickelt, mit welchem nicht nur die Großsignaldehnung S_3 ermittelt werden kann, sondern auch der Piezokoeffizient d_{33} von einzelnen Keramikfasern mit Durchmessern im Bereich von 100–750 μm .^[98] Dieses Verfahren beruht in seiner Grundidee auf einem von SCHMIDT und Nachfolgern kontinuierlich fortentwickelten Mikrodehnungsmessplatz^[99–101]. Hierbei wird die mechanische Verrückung der Probe kapazitiv gegenüber einer feststehenden Kondensatorplatte detektiert. Die andere Kondensatorplatte hingegen kann durch das mechanisch in Reihe geschaltete kollineare System von Probe und Vergleichsprobe bewegt werden. Die gesamte Dickenänderung der Probe und der Vergleichsprobe – einem Quarzkristall – bewirkt in gleichem Maße eine Änderung des Plattenabstandes des Meßkondensators. An die piezoelektrische Probe wird eine niederfrequente Wechselspannung angelegt, wodurch sich der Plattenabstand des Meßkondensators periodisch verändert. Dieser ist Bestandteil eines Hochfrequenzschwingkreises, dessen Resonanzfrequenz sich dadurch auch periodisch ändert. Diese Frequenzänderung wird mit einem Modulationsanalysator in eine Spannungsänderung umgesetzt, welche mit Lock-In-Technik frequenzselektiv verstärkt wird. Dabei ist es möglich, aus der Kapazitätsänderung durch Kalibrierung mit der Vergleichsprobe auf die Verrückung zu schließen. Für die Ermittlung des Kleinsignal- d_{33} wird jedoch eine Methode benutzt, bei der die Verrückung von Vergleichsprobe und Probe durch gegenphasige Ansteuerung kompensiert werden, wobei das Spannungsverhältnis von Vergleichsprobe und Probe die Bestimmung des Piezokoeffizienten erlaubt.

KERN hat unter Beibehaltung des grundlegenden Meßprinzips und seiner Umsetzung mit elektronischer Regel- und Meßtechnik eine Apparatur und spezielle Präparationstechniken entwickelt, um auch Einzelfasern elektromechanisch charakterisieren zu können.^[102] Der von ihr entwickelte Versuchsaufbau ist in Abb. 4.1 auf Seite 32 abgebildet und soll im folgenden erläutert werden. Wegen der geringen Faserdurchmesser im Bereich von typisch 250–750 μm ist es notwendig, eine Elektrodenplatte deutlich größeren Durchmessers auf einem Faserende festzukleben, um die kapazitive Abstandsdetektion vornehmen zu können. Die Faserlänge beträgt dabei etwa 3 mm.

Die Kontaktierung von Fasern gelingt bei den verwendeten Abmessungen nurmehr mit Ringelektroden. Ihr Elektrodenabstand a (vgl. Abb. 4.3a auf Seite 34) wurde dabei lichtmikroskopisch vermessen. Kern hat die Ringelektroden durch Tauchen (*dip-coating*) in Lackleitsilber aufgebracht (Abb. 4.2a auf Seite 32). Die-

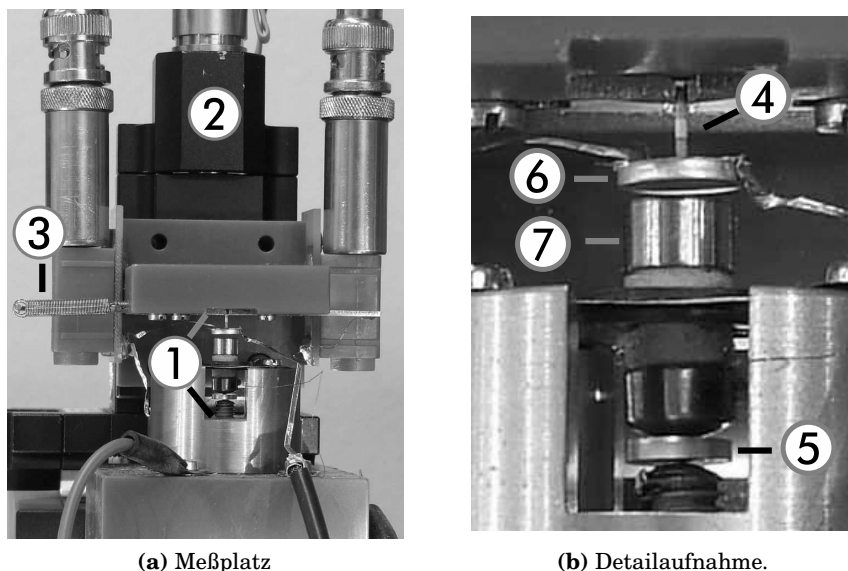
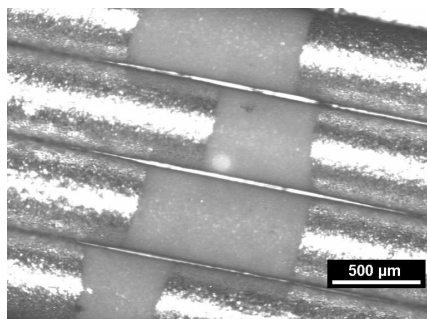


Abb. 4.1: Einzelfasermessplatz, wie er von STEINHAUSEN und KERN entwickelt wurde.

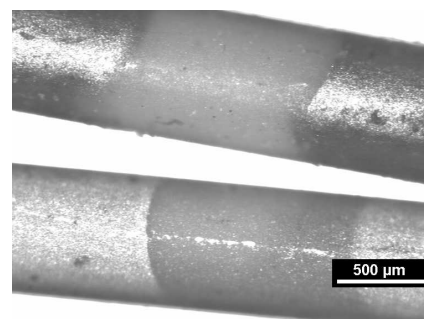
- ① Meßanordnung, vergrößert in (b).
- ② Mikropositioniereinrichtung zur Plazierung der Faser.
- ③ Einspannungsvorrichtung.
- ④ Kontaktierte Faser.
- ⑤ Quarzkristall.
- ⑥ An die Faser geklebte Elektrodenplatte (obere Kondensatorplatte).
- ⑦ Mit dem Quarz mechanisch verbundene Elektrode (untere Kondensatorplatte).

se Ringelektroden zeichneten sich durch gute Anhaftung und hohe Leitfähigkeit aus. Allerdings ist durch die bisherige Methode kein fester Elektrodenabstand von vornherein erreichbar und die Elektrodenkanten sind nicht unbedingt streng parallel. Deswegen wurden von Kern auch Versuche durchgeführt, die Ringelektroden durch Aufdampfen aufzubringen, vergleiche Abb. 4.2b. Hierbei ist es möglich, durch eine Maske einen Elektrodenabstand vorzugeben, wobei die Anhaftung des Elektrodenmaterials ebenfalls günstig ist. Allerdings erwies sich eine gleichmäßige Bedeckung mit dem Elektrodenmaterial als schwierig zu erreichen.

In Abb. 4.1 wird als Vergleichsprobe ein Quarzkristall verwendet. Wegen der dadurch größeren möglichen Verrückung (bei der begrenzten verfügbaren elektrischen Spannung) bewährte sich zur Kalibrierung bei Großsignalmessungen auch eine PZT-Keramik, die vorher mit dem Mikrodehnungsmeßplatz piezoelektrisch charakterisiert worden war.



(a) Getauchten Ringelektroden aus Lackleitsilber



(b) Aufgedampfte Ringelektroden aus Aluminium (oben) und Gold (unten)

Abb. 4.2: Keramische PZT-Fasern mit Ringelektroden. (Photos mit freundlicher Genehmigung von Sabine Kern, MLU Halle-Wittenberg.)

4.2 Problemstellung

Die Kontaktierung der zu charakterisierenden Fasern mit Ringelektroden führt offenkundig dazu, daß sich in ihrem Inneren ein inhomogenes elektrisches Feld aufbaut. Den gemessenen Piezokoeffizienten d_{33}^m für eine Elektrodiierung mit Ringelektroden zu modellieren, ist selbst bei einer Idealisierung der Geometrie mit einigen Herausforderungen verbunden. Für das piezoelektrische Problem von Zylindern mit Ringelektroden sind keine geschlossenen analytischen Lösungen in der Literatur dokumentiert. Selbst die rein elektrostatische Behandlung zur Ermittlung der Feldverteilung führt zu einer aufwendigen Rechnung. Bekanntlich ergibt diese bei zylindersymmetrischen Elektrodenanordnungen bei der Verwendung eines Separationsansatzes für die Laplacegleichung eine Reihe, welche trigonometrische Funktionen sowie die Bessel- und Neumannfunktionen 0-ter Ordnung umfaßt, wobei die Randbedingungen über die Entwicklung in diese orthogonalen Funktionssysteme erfüllt werden.^[103] Die Ringelektroden sind hinsichtlich der Randbedingungen mit einer Anordnung von Zylinderelektroden vergleichbar, wie sie bestimmte Elektronenlinsen darstellen. Aber auch für dieses relevante elektrostatische Problem, sind in der Literatur nur Näherungsansätze oder numerische Berechnungen dokumentiert.^[104]

Umso anspruchsvoller erscheint die Aufgabe, für piezoelektrische Körper mit Oberflächelektroden die elektroelastischen Feldgrößen zu berechnen. Für verschiedene andere Spezialfälle der Elektrodiierung geben PARTON ET AL. hierfür Lösungen an, die auf Reihenentwicklungen beruhen.^[105] Den Fall von Ringelektroden an Kreiszyklindern behandeln sie allerdings nicht. RAJAPAKSE ET AL. gelingt es zwar, für einen piezokeramischen Kreiszyklinder unter der Randbedingung einer ringförmigen elektrischen Oberflächenladung eine analytische Lösung abzuleiten.^[106] Jedoch führt diese schließlich auf Integrale, die nur numerisch behandelt werden können. Dadurch sind auch mit diesem Verfahren nicht auf einfache Weise parametrische Aussagen zu gewinnen, die sonst einen spezifischen Vorteil geschlossener Lösungen darstellen, zumal das Problem von echten Ringelektroden mathematisch noch anspruchsvoller sein dürfte. Es liegt deshalb nahe, das Problem von piezoelektrischen Zylindern mit Oberflächelektroden von vornherein mit einer numerischen Näherungsmethode zu bearbeiten, wie sie die verwendete FEM darstellt.

4.3 Vorgehen bei der Modellierung

Die numerische Untersuchung verfolgt den Ansatz, anhand eines parametrisierten geometrischen Modells der Faser für einen bekannten Materialdatensatz die Meßgröße des Experimentes zu berechnen und damit die Auswirkungen der veränderten Geometrie zu studieren. Hierzu fand das kommerzielle FEM-Programm ANSYS® (Release 11.0) Verwendung.^[107] Um einen möglichst weiten Parameterbereich zu untersuchen, wurde die Modellerstellung über die dort verfügbare Makrosprache APDL vorgenommen. Die parametrisierte Modellerstellung und die Lösung wurden dabei in einem Makro zusammengefaßt, welches von einer weiteren Routine aufgerufen wurde. Durch diese wurden die Parameter schrittweise variiert und die Routinen zur Gewinnung der Ergebnisse und ihrer Speicherung in Dateien aufgerufen. Dieses Vorgehen modularisierte die Aufgaben weitgehend, was die flexible Anpassung an die jeweiligen Fragestellungen ermöglichte. Die axialsymmetrische Modellierung hielt den Rechenaufwand für ein einzelnes Geometriemodell gering. Allerdings erforderten die umfangreichen Parameterstudien ein hinreichend fein aufgelöstes Abtasten des Parameterraums, wodurch der zeitliche Rechenaufwand für einige Diagramme in

Kap. 4.4.3 durchaus mehrere Tage betrug, weil die verfügbare ANSYS®-Version keine ausreichenden Möglichkeiten zur Parallelisierung zuläßt.

4.3.1 Geometrie und ihre Parametrisierung

Die Fasern können als gerade Kreiszylinder angesehen werden. Die Kanten der Ringelektroden sind senkrecht zur Längsachse angeordnet. Das stellt eine Idealisierung dar, wie der Vergleich mit Abb. 4.2 verdeutlicht. Allerdings wurden in den Experimenten gezielt solche Fasern ausgewählt, die dieser Idealisierung nahe kommen, weil sonst die gemessenen Dehnungskurven asymmetrisch werden^[102].

Somit ist das Problem zylindersymmetrisch (Abb. 4.3a). Deswegen genügt eine zweidimensionale rotationssymmetrische Rechnung mit der radialen Koordinate x und der longitudinalen Koordinate z zur vollständigen Beschreibung des Problems (Abb. 4.3b). Dieses hat auch bei einer sehr guten Vernetzung den Vorzug kurzer Rechenzeiten, wodurch weitergehende Auswertungen möglich werden. Dementsprechend wurden Elemente vom Typ PLANE13 eingesetzt, wobei die piezoelektrische und axialsymmetrische Option aktiviert wurden.^[92] Das Koordinatensystem wurde für die Modellierung so gewählt, daß die longitudinale z -Richtung von der Einspannung bis zur Elektrodenplatte gerichtet ist.

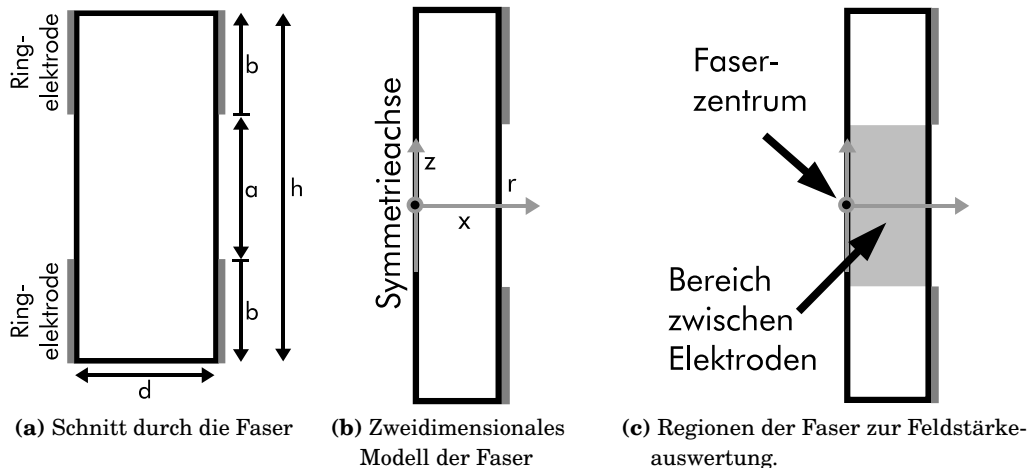


Abb. 4.3: Modellierung der Einzelfasern: Geometrie und Bezeichnungen.

Ausgehend von den experimentellen Gegebenheiten ist der Faserdurchmesser ein vorgegebener Parameter, da er durch den Herstellungsprozeß grundsätzlich festgelegt ist. Die Faserlänge kann für die Charakterisierung in gewissen Grenzen verändert werden, ebenso wie über Bedampfungsmasken auch die Elektrodenierungsparameter variabel sind. Um die Abhängigkeit von der Geometrie zu untersuchen, wurden mehrere Parameter eingeführt: die Faserlänge h , der Durchmesser d , der Elektrodenabstand a und der Elektrodenanteil

$$\beta = \frac{2b}{h-a}. \quad (4.1)$$

Dabei bedeutet $\beta = 100\%$ die im Experiment realisierte vollständige Elektrodenierung. Es kann vermutet werden, daß das Verhältnis

$$\alpha = \frac{a}{d} \quad (4.2)$$

einen großen Einfluß auf d_{33}^m hat. Große Werte für α bedeuten dabei vergleichsweise dünnere Fasern. Der experimentell weniger relevante Fall $\alpha < 1$, der auf

scheibenförmige Gebiete zwischen den Elektroden verweist, wurde untersucht, um die Ergebnis-Trends klarer herauszuarbeiten.

4.3.2 Randbedingungen

Mechanische Randbedingungen Um im Modell die Gegebenheiten des experimentellen Aufbaus (vgl. Abb. 4.1 auf Seite 32) zu berücksichtigen, wurden entsprechende Randbedingungen eingeführt. Die Einspannung wurde derart modelliert, daß die Unterseite der Faser mechanisch bezüglich der Verrückung u_3 fixiert war. Dies stellt eine Idealisierung dar, da die Faser in Wirklichkeit über den Rand hin eingeklemmt ist. Diese Randbedingung ist schwierig zu parametrisieren, da die wirkenden Kräfte nicht bekannt sind. Allerdings kann aus dem *Prinzip von Saint-Venant* [108] geschlußfolgert werden, daß für ausreichend lange Fasern die Spannungsfelder der Einspannung schnell genug abklingen, um im freien Faservolumen vernachlässigbar zu sein.

Im Experiment wird die Längenänderung kapazitiv über eine auf einer Deckfläche der Faser aufgeklebten scheibenförmigen Elektrode wesentlich größeren Durchmessers ermittelt, die als Kondensatorplatte fungiert. Ihr Gewicht kann vernachlässigt werden. Bei der Klebeverbindung können verschiedene Grenzfälle untersucht werden, die sich über die Randbedingungen abbilden lassen. In Abb. 4.4 sind diese Grenzfälle symbolisch dargestellt. Es sei daran erinnert, daß im Experiment die Kondensatorplatte an der Faser hängt.

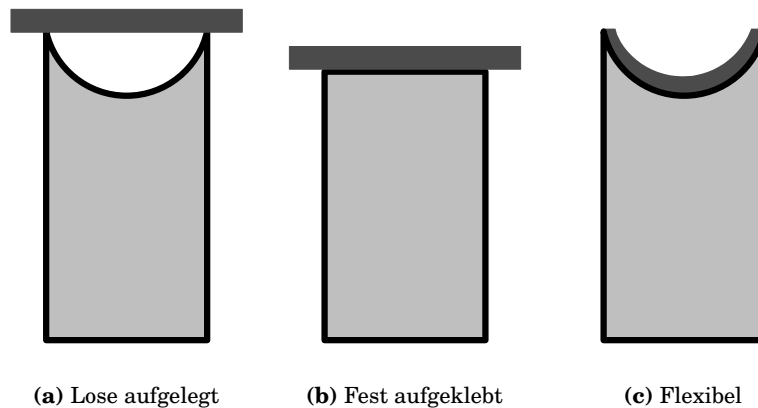


Abb. 4.4: Zur Deutung der mechanischen Randbedingungen an der Deckfläche im FEM-Modell. Sie geben verschiedene Grenzfälle der Befestigung der Elektrodenplatte vor.

Der Fall einer lose aufgelegten Kondensatorplatte (Abb. 4.4a) bedeutet, daß die starre Elektrodenplatte nur soweit an der Faser fixiert ist, daß sie von der jeweils größten Verrückung der Deckfläche mitgenommen wird. Im Falle reiner Ringelektroden tritt diese am Rand der Faser auf. Somit kann die Randbedingung im FEM-Modell dadurch realisiert werden, daß die Deckfläche frei beweglich gehalten wird und die Verrückung $u_3(x=r)$ zur Berechnung der d_{33}^m herangezogen wird. Der Fall einer fest aufgeklebten Kondensatorplatte (Abb. 4.4b) setzt voraus, daß die Elektrodenplatte vollkommen starr gegenüber Verbiegungen ist. Dann verschiebt sie sich als Ganzes nur in longitudinaler z -Richtung. Im Modell wird das durch eine Kopplung der Freiheitsgrade u_3 der Deckelektrode erreicht. Diese Randbedingungen wurden für die meisten Rechnungen verwendet, weil sie gleichzeitig eine Mittelung der Verrückung über die Faserdeckfläche verwirklichen. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, daß

die dadurch verursachte Klemmung eine zusätzliche mechanische Spannung im Faservolumen verursacht. Diese hat aber nur für den geometrischen Grenzfall von Scheiben (d. h. bei typischen Höhen mit $\alpha \ll 1$) einen wesentlicher Einfluß. Eine vollkommen starre Klebeverbindung müßte auch die radiale Bewegung an der Klebestelle komplett unterdrücken. Allerdings zeigten die Rechnungen, daß die resultierenden Unterschiede auch für sehr kleine α unerheblich sind, da auch bei lediglich geklemmtem u_3 -Freiheitsgrad die radialen Verrückungen nahezu an der Deckfläche verschwinden.

Daß der über die Kopplung der Verrückungen u_3 auf der Oberfläche ermittelte Mittelwert tatsächlich als der auf die Kreisfläche bezogene Mittelwert

$$\langle u_3 \rangle = \frac{2\pi \int_0^r u_3(x) x dx}{\pi r^2} \quad (4.3)$$

aufgefaßt werden kann (x ist dabei die radiale Koordinate), wurde an einem Beispiel überprüft. Diese Randbedingung kann als Faser mit ideal flexibler Kondensatorplatte (Abb. 4.4c) aufgefaßt werden. Da die Elektrodenplatte aber in Wirklichkeit den Faserdurchmesser überragt, ist diese Situation im Experiment so nicht umgesetzt. Allerdings kann vermutet werden, daß über die kapazitive Abstandsmessung in der Tat ein flächen-gemittelter Abstand bestimmt wird.

Die kapazitive Abstandsmessung selbst wird im Modell nicht abgebildet, da der Fokus der Untersuchungen auf dem Meßprinzip der Kleinsignalmessung liegt. Weil diese über die Kompensation einer kapazitiv detektierten Verrückung arbeitet, spielt der *absolute* Wert der Meßkapazität hierbei keine Rolle. Anders ist das im Falle der Großsignalmessung, welche mit einem nachfolgenden definierten Hub die vorherige piezoelektrische Längenänderung kapazitiv bestimmt. Dann könnten auch Effekte wie schiefstehende Kondensatorplatten und Streufelder des Kondensators (dessen Platten zudem nicht ideal übereinander sind) die Messung beeinflussen. In der Literatur gibt es vereinzelte Ansätze dazu. So behandeln CARLSON ET AL. die Änderung der Kapazität durch Streufelder^[109] und TAY ET AL. den Einfluß schiefstehender (wenn auch rechteckiger) Kondensatorplatten^[110]. Allerdings sind diese Effekte von nachgeordneter Bedeutung gegenüber den Einschränkungen des konstitutiven Modells (Kap. 4.3.3) und werden deswegen nicht weiter betrachtet.

Elektrische Randbedingungen Weil die aufgebrachten Ringelektroden im Vergleich zum Faserdurchmesser dünn sind, kann ihr mechanischer Einfluß vernachlässigt werden. Ihre Leitfähigkeit drückt sich im Modell darin aus, daß sie jeweils Äquipotentialflächen sind, also gleiche elektrische Spannung aufweisen. Die elektrischen Randbedingungen ergeben sich wie im Experiment aus der elektrischen Potentialdifferenz V_0 zwischen den Ringelektroden. Daneben wird implizit durch die Methode vorgegeben, daß die Normalenableitung des Potentials auf der Oberfläche verschwindet. Das ist für die Symmetrielinie $x = 0$ exakt und für die anderen Ränder in sehr guter Näherung gültig, weil die Piezokeramik eine wesentlich größere relative Permittivität als die Luft besitzt. Das wurde auch über eine Modellrechnung nachgewiesen, bei der das hier beschriebene Fasermodell rundum (außer an der Symmetrielinie $x = 0$) von einer zusätzlichen Schicht der Permittivität $\epsilon/\epsilon_0 = 1$ umgeben war.

In den Modellierungen wurden verschiedene Elektrodendesigns untersucht, die in Abb. 4.5 schematisch verdeutlicht sind. Wie die Ergebnisse zeigen werden, sind die Effekte für reine Ringelektroden (Abb. 4.5a) am größten. Motiviert durch die Tatsache, daß solche Rechnungen bisher noch nicht durchgeführt worden sind, wurde diese Konfiguration umfassend untersucht. Ausgehend von den konkreten experimentellen

Gegebenheiten, sind aber auch Konfigurationen mit Deckelektroden von Interesse. So wird das Elektrodenplättchen zur Abstandsdetektion (Abb. 4.1–© auf Seite 32) mit Lackleitsilber auf die Faserenden geklebt, wodurch eine Deckfläche der Faser zusätzlich elektrodiert ist (Abb. 4.5b). Bei der Tauchmethode werden prinzipbedingt auch beide Faserenden mit elektrodiert, wodurch die Elektrodenkonfiguration in Abb. 4.5c verwirklicht wird.

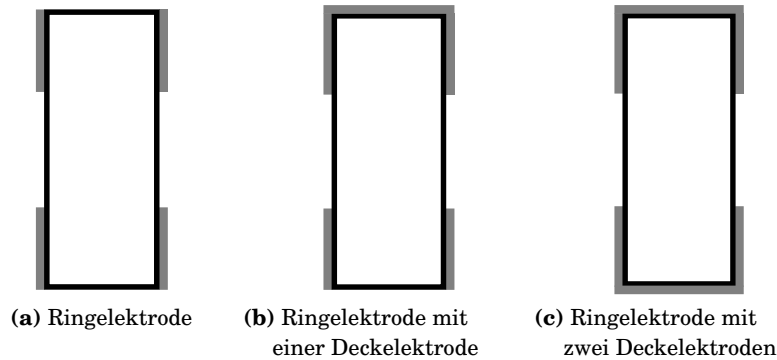


Abb. 4.5: Verschiedene modellierte Elektrodendesigns.

4.3.3 Konstitutive Gleichungen

Die wichtigste Annahme des Modells betrifft die konstitutiven Gleichungen. Diese wurden sowohl dielektrisch als auch piezoelektrisch als *linear* angenommen, so daß (2.29) gilt. Dadurch kann die kommerzielle FEM-Software ANSYS[®] zur Berechnung eingesetzt werden. Es wird angenommen, daß die Fasern ideal longitudinal gepolt sind. Gepolte Piezokeramiken gehören der Symmetriegruppe ∞m an (die Materialtensoren entsprechen denen der Symmetriegruppe $6mm$ ^[48]). Als Polungsachse wird grundsätzlich die 3-Achse verstanden. Für die untersuchten Piezokeramiken ist der transversale Piezoeffizient d_{31} negativ, jedoch gibt es wegen des verschwindenden d_{13} keine Kopplung zwischen der Feldstärkekomponente E_1 und der Dehnung S_3 (vgl. Anhang A).

Da die Verrückung u_3 aus der mechanischen Dehnung S_3 aus

$$u_3 = \int_0^h S_3(z) dz \quad (4.4)$$

hervorgeht, kann im Falle des puren Piezoeffekts ohne Berücksichtigung der mechanischen Kopplung

$$u_3(z) = \int_0^h d_{33}(z) E_3(z) dz \quad (4.5)$$

geschrieben werden. Im Falle eines homogenen Piezoeffizienten d_{33} folgt damit

$$u_3 = V_0 d_{33} . \quad (4.6)$$

Somit kann der gemessene Piezoeffizient d_{33}^m definiert werden als

$$d_{33}^m = \frac{u_3}{V_0} . \quad (4.7)$$

Dieser Definition unterliegt auch das Experiment. Hier wird bei der kapazitiven Abstandsbestimmung mit der Kompensationsmethode die Verrückung u_3 kompensiert, wobei eine Spannung der Amplitude V_0 anliegt. Der Unterschied in der Modellierung liegt in der statischen Berechnung.

Die so vorgenommene Definition impliziert einige starke Voraussetzungen, welche Einschränkungen für das Modell bilden. Zunächst ist der Piezoeffizient d_{33} der Fasern mit Sicherheit nicht homogen verteilt, weil die Ringelektroden eine inhomogene Feldstärkeverteilung beim Polarisieren verursachen. Dadurch wird einerseits eine vollständige Ausprägung der Piezoeffizienten verhindert, weil die Feldstärken in einzelnen Regionen kleiner als die Koerzitivfeldstärke sind. Zudem werden die Materialtensoren lokal unterschiedlich orientiert und insbesondere nicht parallel zur z -Richtung ausgerichtet sein. Eine homogen polarisierte Faser mit parallel zur z -Richtung ausgerichteter Vorzugsrichtung ist für diese Situation eine deutliche Vereinfachung. Außerdem wird der angegebene Polungszustand als fest angenommen, woraus rein lineare piezoelektrische Dehnungen resultieren. Diese Einschränkungen sollen hier aber hingenommen werden, um das Problem erstmals zu bearbeiten. Es darf in diesem Zusammenhang darauf hingewiesen werden, daß diese Limitierungen auch für die oben erwähnten analytischen Lösungen bestehen.

Für die experimentelle Bestimmung des d_{33} wird nicht auf die anderen Materialparameter zurückgegriffen. Es ist hierbei wichtig, daß die Meßmethode spezifisch ist. Auf diesen Gedanken wird in Kap. 4.4.2 eingegangen. Wird die konstitutive Gleichung in Zylinderkoordinaten verwendet, wie sie in ^[105] angegeben wird, so ergibt sich die longitudinale Dehnung für die Piezokeramik zu

$$S_3 = \underbrace{d_{33}E_3}_{\text{piezoelektrisch}} + \underbrace{s_{13}(T_{rr} + T_{\phi\phi}) + s_{33}T_{zz}}_{\text{mechanisch}}. \quad (4.8)$$

Offensichtlich gibt es also neben dem in der Definition des d_{33}^m berücksichtigten piezoelektrischen Anteil noch einen rein mechanischen Anteil der Dehnung, der vom inneren mechanischen Spannungsfeld abhängig ist. In der Definition des gemessenen Piezoeffizienten (4.7) wird nur der piezoelektrische Anteil berücksichtigt. Die FEM-Lösung bietet einen Zugang, um die Auswirkung dieser Definition zu studieren.

Die Modellierungen wurden vorwiegend mit den Materialkoeffizienten von gepolter PIC151-Keramik vorgenommen, jedoch für einzelne Rechnungen auch mit denen von Bariumtitanat. Die verwendeten Koeffizienten können Anhang A entnommen werden.

4.3.4 Auswertung der Lösung des FEM-Modells

Alle Rechnungen erfolgten statisch, weil die Messung quasistatisch weit unterhalb der Resonanzfrequenz erfolgt.

Feldstärke Um die Verrückungen im Experiment einer Feldstärke zuordnen zu können, wurde eine nominelle Feldstärke gemäß

$$E_3^n = \frac{V_0}{a} \quad (4.9)$$

definiert. Diese ist meßtechnisch leicht zugänglich, da sie nur auf der angelegten Spannung V_0 und dem gemessenen Elektrodenabstand a beruht. Allerdings spiegelt sie die reale inhomogene Feldstärkeverteilung nicht wider. Deswegen wurde der Verteilung der elektrischen Feldstärke in der Auswertung der FEM-Lösung eine besondere Aufmerksamkeit gewidmet. Aus (4.8) ist ersichtlich, daß nur E_3 , die Feldstärkekomponente in Polungsrichtung, über den indirekten Piezoeffekt mit der Dehnung gekoppelt

ist. Eine erste Aussage über diese Feldstärkekomponente liefert E_3^i , die longitudinale Feldstärkekomponente im Mittelpunkt ($x = 0, z = 0$) der Faser.

Um die experimentell motivierte Definition einer nominellen Feldstärke zu überprüfen, wurde für den Bereich zwischen den Elektroden (vgl. Abb. 4.3c auf Seite 34) die Feldstärkekomponente E_3 detaillierter untersucht. Dabei wurde nach dem in Kap. 3.2 beschriebenen Vorgehen verfahren. In der FEM-Lösung lagen typischerweise 3000 Elemente vor, die statistisch ausgewertet wurden. Auch wenn im zweidimensionalen Netz die finiten Elemente gleich groß sind, ist eine volumenabhängige Statistik vonnöten, denn wegen der radialsymmetrischen Rechnung ist das durch diese jeweils repräsentierte Volumen proportional zum radialen Abstand von der Symmetrieachse.

Dementsprechend wurden aus dem gelösten FEM-Modell im Bereich zwischen den Ringelektroden elementweise die Feldstärken E_3 und die zugehörigen (dreidimensionalen) Volumina zur Auswertung herangezogen. Wegen des rein linearen Ansatzes hängen sowohl der Mittelwert als auch die Standardabweichung linear von der im Modell angelegten Spannung ab. Wird E_3^n zu 1 gewählt, können die Feldstärken und abgeleiteten statistischen Kenngrößen demnach als relativ dazu angesehen werden.

Piezokoeffizient Um die Abweichung des gemessenen longitudinalen Piezokoeffizienten d_{33}^m vom tatsächlichen d_{33} einschätzen zu können, fand die relative Abweichung $(d_{33}^m - d_{33})/d_{33}$ Verwendung. Um eine breite Übersicht über die Abhängigkeiten von den geometrischen Parametern h und d zu gewinnen, wurden punktweise FEM-Rechnungen vorgenommen und dort Linien gleicher relativer Abweichung in Abhängigkeit dieser Parameter (als Kontur-Plots) dargestellt.

Für die Charakterisierung ist es eine wichtige Frage, wie spezifisch der gemessene Piezokoeffizient d_{33}^m den d_{33} der Fasern widerspiegelt, d. h. in welchem Ausmaß die anderen Materialkoeffizienten die Meßgröße beeinflussen. Die gewöhnliche Fehlerrechnung liefert hierzu einen geeigneten Zugang. Wird die Abhängigkeit vom Materialkoeffizienten x_i betrachtet, so liefert

$$\frac{\Delta d_{33}^m}{d_{33}} = \sum_i \frac{\frac{\partial d_{33}^m}{\partial x_i} x_i}{d_{33}} \cdot \frac{\Delta x_i}{x_i} = \sum_i \zeta_{x_i} \cdot \frac{\Delta x_i}{x_i} \quad (4.10)$$

mit der Größe ζ_{x_i} eine dimensionslose Kennzahl, die als Maß für die Sensitivität angesehen werden kann. Die Sensitivität

$$\zeta_{x_i} \stackrel{!}{=} \frac{\frac{\partial d_{33}^m}{\partial x_i} x_i}{d_{33}} \quad (4.11)$$

verknüpft somit die relativen Abweichungen der Materialparameter mit der relativen Abweichung des gemessenen Piezokoeffizienten. Sie kann auch negativ sein. Für eine vollkommen spezifische Messung des d_{33} sollte die Sensitivität des longitudinalen Piezokoeffizienten 1 und die der anderen Materialkoeffizienten 0 sein. Um die Sensitivität aus dem FEM-Modell zu ermitteln, ist eine Schätzung der partiellen Ableitung in (4.11) notwendig, welche durch die wohlbekannte Approximation zweiter Ordnung

$$\frac{\partial d_{33}^m}{\partial x_i} \approx \frac{d_{33}^m(x_i + \Delta x_i) - d_{33}^m(x_i - \Delta x_i)}{2\Delta x_i} \quad (4.12)$$

vorgenommen wurde, wobei $d_{33}^m(x_i \pm \Delta x_i)$ durch jeweils eine FEM-Rechnung mit variiertem Materialparameter x_i ermittelt wird.

4.4 Ergebnisse

4.4.1 Longitudinaler Piezokoeffizient und Feldstärke im Faserzentrum

In Abb. 4.6 wird ein erster Überblick über die Abweichungen des gemessenen longitudinalen Piezokoeffizienten vom Faserwert und der Feldstärkekomponente E_3^i im Zentrum der Faser von der nominellen Feldstärke gegeben. Dazu sind diese Größen in Abhängigkeit vom Elektrodenabstandsverhältnis für verschiedene Elektrodenanteile aufgetragen. Hierfür wurde eine Faser mit dem Elektrodenabstand 1 mm und der Länge 3 mm modelliert, was den typischen Abmessungen im Experiment entspricht. Außerdem wurden reine Ringelektroden angenommen (Abb. 4.5a auf Seite 37). Diese Bedingungen werden im folgenden als Referenz angesehen, relativ zu denen Änderungen vorgenommen werden, um deren Auswirkungen zu identifizieren.

Zunächst ist zu erkennen, daß die gemessenen Piezokoeffizienten d_{33}^m nur für Elektrodenabstandsverhältnissen ≤ 2.0 deutlich von denen der Faser abweichen. Das gilt auch für Elektrodenanteile von 25 %. Dünne Fasern sind bei sonst gleichen Bedingungen offenbar günstiger für die genaue Messung des longitudinalen Piezokoeffizienten. Diese Aussage bleibt auch gültig, wenn die Fasern nicht mehr vollständig elektrodiert sind. Offenbar sind die gemessenen Piezokoeffizienten grundsätzlich kleiner als die der Faser. Das erscheint plausibel, da die tatsächliche zur piezoelektrischen Dehnung beitragende Feldstärkekomponente darin kleiner als die nominelle sein sollte. Diese Vermutung wurde durch die Rechnungen anhand der Feldstärkekomponente im Zentrum der Faser bestätigt. Diese ist grundsätzlich kleiner als die nominelle Feldstärke E_3^n .

Auf den ersten Blick unerwartet – da das Materialgesetz diese Größen linear verknüpft – ist der Befund, daß die Abweichung der Feldstärken grundsätzlich größer ist als die des longitudinalen Piezokoeffizienten. Dem wird in der Diskussion in Kap. 4.4.5 nachgegangen.

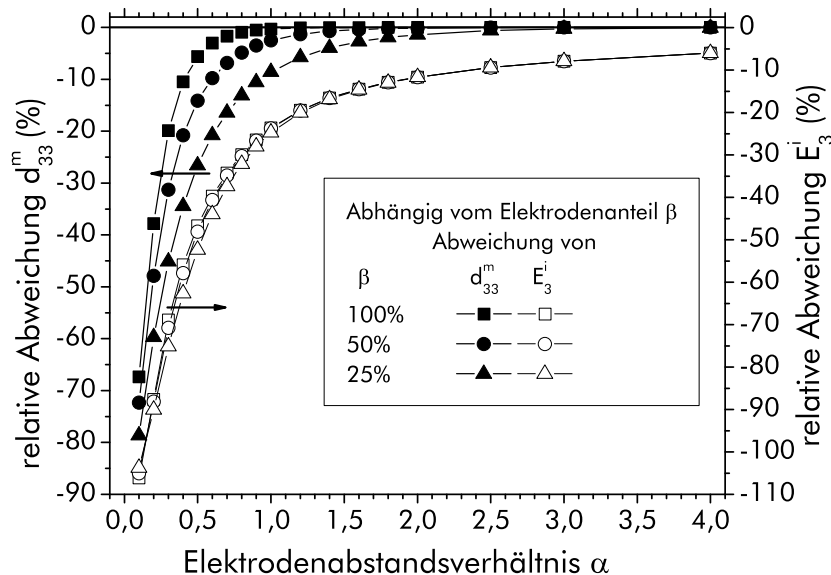


Abb. 4.6: Relative Abweichungen des gemessenen Piezokoeffizienten und der inneren Feldstärke in Abhängigkeit vom Elektrodenabstandsverhältnis $\alpha = a/d$. Dabei wird d_{33}^m mit dem Faserwert d_{33} und E_3^i mit E_3^n verglichen. (Feste Geometrieparameter der Faser: $a = 1$ mm und $h = 3$ mm.)

Die Verringerung des Elektrodenanteils vergrößert die Abweichung des gemessenen Piezoeffizienten von dem Faserwert. Allerdings ist selbst für Elektrodenanteile von lediglich 25 % die Abweichung nur für dicke Fasern ($\alpha < 2$) signifikant. Hingegen wird die Feldstärke im Inneren der Faser von den Elektrodenanteilen nur wenig beeinflusst. Unterhalb der Elektroden klingt die Feldstärke zunehmend ab, da sie Äquipotentialflächen darstellen. In hinreichender Entfernung vom Spalt zwischen den Elektroden kann die Elektrodenfläche also keine Auswirkung auf die Feldverteilung mehr haben.

In Abb. 4.7 sind die Auswirkungen der drei in Kap. 4.3.2 diskutierten Randbedingungen für die Deckfläche exemplarisch für eine 3 mm lange Faser dargestellt. Offenbar treten Unterschiede nur für kleine Elektrodenabstandsverhältnisse α auf. Der Randbedingung einer lose aufgeklebten Elektrodenplatte entspricht die am Faserrand ($x = r$) ermittelte Verrückung u_3 . Der in diesem Fall gemessenen Piezoeffizient weicht nur für kleine α merklich von dem über die Kopplung der Freiheitsgrade ermittelten Wert ab, welcher der fest aufgeklebten Elektrodenplatte entspricht. Augenscheinlich weichen die flächengemittelten Werte des d_{33}^m davon für alle untersuchten α nur wenig ab, was in Abb. 4.8 auf Seite 42 für die Verrückungen u_3 deutlich belegt wird.

Für die experimentell realisierten Fälle mit $\alpha > 1$ sind die untersuchten drei Randbedingungen für die Elektrodenplatte im Ergebnis der d_{33}^m -Messung äquivalent. Da die lose aufgelegte und die starr geklebte Elektrodenplatte als Grenzfälle der Klebeverbindung aufgefaßt werden können, wird das Experiment von ihr vermutlich nicht beeinflusst, wobei eine ideale Zentrierung der Kondensatorplatten vorausgesetzt wird. Kippeffekte, die auf die Kapazität der Abstandsdetektion wirken, werden ausdrücklich nicht im Modell untersucht. Zudem kann der Grenzfall der starr geklebten Elektrodenplatte als Mittelung der Verrückung u_3 über die Faserfläche angesehen

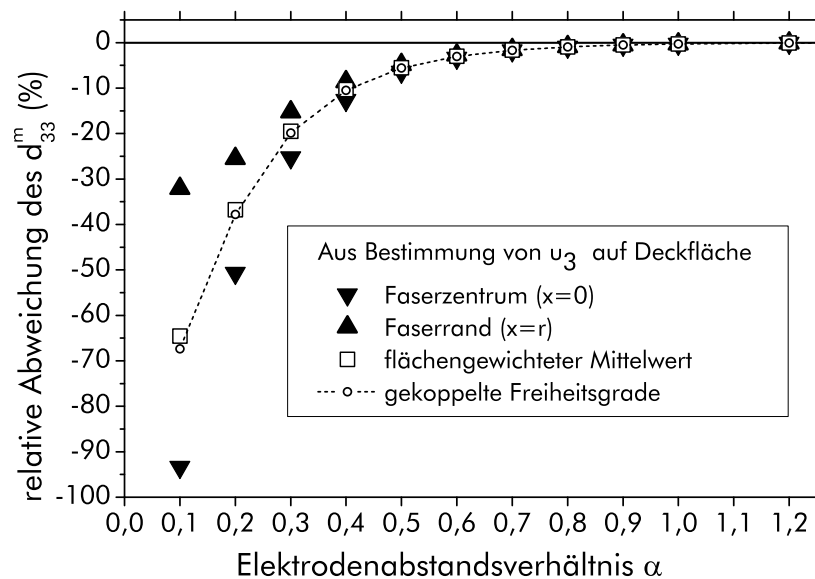


Abb. 4.7: Gegenüberstellung der für verschiedene Bedingungen ermittelten relativen Abweichungen des gemessenen Piezoeffizienten d_{33}^m in Abhängigkeit vom Elektrodenabstandsverhältnis $\alpha = a/d$. (Feste Geometrieparameter der Faser: $a = 1$ mm, $h = 3$ mm, $\beta = 100\%$.) Der Unterschied liegt dabei in den mechanischen Randbedingungen der Deckfläche. Die Verrückungen u_3 wurden für die freie Deckfläche innen oder außen ermittelt. Außerdem wurden die resultierende Verrückung für gekoppelte Freiheitsgrade u_3 der Deckfläche sowie der flächengewichtete Mittelwert von u_3 für eine freie Deckfläche berechnet.

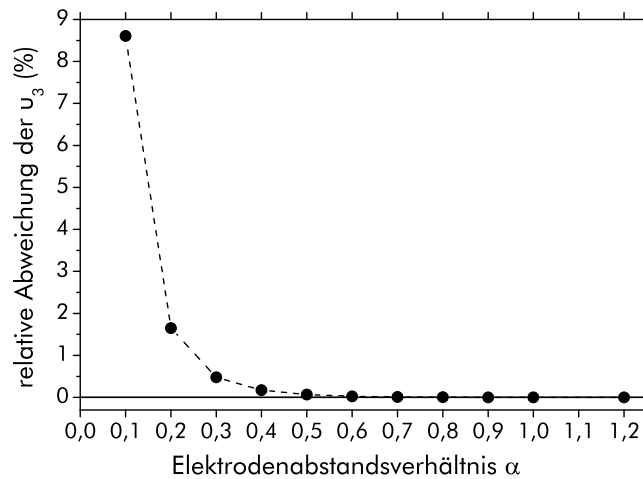


Abb. 4.8: Vergleich zweier Arten, die Verrückung u_3 der Deckfläche zu ermitteln. Dargestellt ist die Abweichung des nach (4.3) flächengewichteten Mittelwertes von dem aus Kopplung der u_3 -Freiheitsgrade ermittelten Wert in Abhängigkeit vom Elektrodenabstandsverhältnis. Für $\alpha > 0,5$ stimmen beide Arten, die Verrückung u_3 zu ermitteln, sehr gut überein. (Feste Geometrieparameter der Faser: $a = 1 \text{ mm}$ und $h = 3 \text{ mm}$.)

werden. Für $\alpha \geq 0,2$ ist die Abweichung schon kleiner als 2%. Das rechtfertigt die durchgehende Behandlung mit der gekoppelten Randbedingung.

Es wurde bereits in Kap. 4.3.2 darauf hingewiesen, daß im Falle der mechanischen Randbedingung der fest aufklebten Elektrodenplatte lediglich der longitudinale u_3 -Freiheitsgrad der Deckfläche gekoppelt wurde. Bei einer vollkommen starren Verbindung müßte aber auch der radiale Freiheitsgrad gekoppelt und mithin die radiale Verrückung komplett unterdrückt werden. Wird für ein sehr kleines Elektrodenabstandsverhältnis von $\alpha = 0,1$ ($h = 3 \text{ mm}$, $a = 1 \text{ mm}$, $\beta = 100\%$) eine solche Rechnung durchgeführt, so unterscheiden sich die so gewonnenen d_{33}^m lediglich um unter 0,2%. Für höhere α wird dieser Unterschied noch geringer. Dies rechtfertigt die Behandlung der geklebten Elektrodenplatte in der durchgeführten Weise.

In Abb. 4.6 auf Seite 40 fällt auf, daß in einer ausgeprägt scheibenförmigen Faser ($\alpha = 0,1$) eine negative Feldstärke E_3^i im Faserzentrum auftritt. Diese ist eine Folge der gekoppelten u_3 -Freiheitsgrade der Faseroberseite, wie der Vergleich mit freier Oberfläche in Abb. 4.9 lehrt. Die auftretende negative longitudinale Feldstärkekomponente kann auf den mechanischen Spannungszustand zurückgeführt werden. Über den direkten Piezoeffekt sorgt dieser für die Ausbildung von Ladungen an den Deckflächen, die ein elektrisches Feld entgegengesetzt zu dem nominell anliegenden verursachen. Die Feldstärke ist somit auf recht komplexe Weise abhängig vom Elektrodenabstandsverhältnis α . Hierzu trägt auch die von den Abmessungen der Faser und Ringelektroden bestimmte inhomogene Ausbildung des elektrostatischen Feldes bei.

Auf Pfaden entlang der Deckfläche läßt sich verfolgen, daß dort die longitudinale Feldstärkekomponente E_3 zum Beispiel für $\alpha = 0,2$ entlang der gesamten Deckfläche negativ ist, während für $\alpha = 0,5$ im Faserinneren positive, nach außen hin aber negative Feldstärken E_3 überwiegen. In diesen Fällen ist die Geometrie jedoch scheibenförmig. Für experimentell relevante faserförmige Geometrien mit $\alpha > 1$ wird für wachsende Elektrodenabstandsverhältnisse die Feldstärke auf der Oberfläche aber immer kleiner, weil sowohl die Normalspannungen kleiner werden als auch die durch die Ringelektroden eingebrachte Feldstärke zu den Faserenden hin verschwindet.

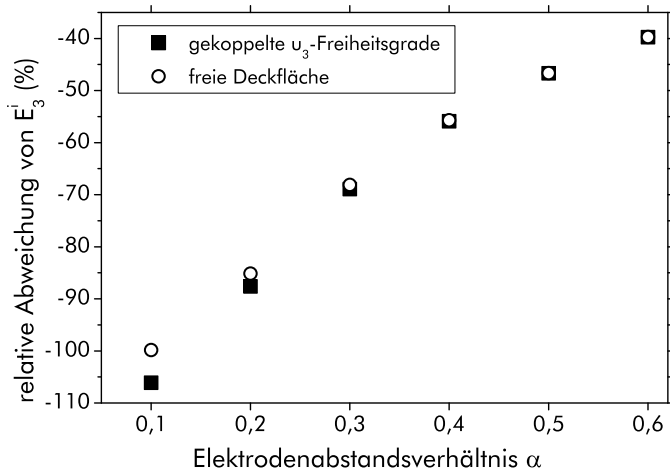


Abb. 4.9: Relative Abweichung der Feldstärke E_3^i im Faserzentrum von der nominellen Feldstärke E_3^n für verschiedene Elektrodenabstandsverhältnisse α . Gegenübergestellt wurden zwei Randbedingungen der Deckfläche: gekoppelte u_3 -Freiheitsgrade und eine mechanische freie Oberfläche. (Feste Parameter: $h = 3$ mm, $\beta = 100\%$, $\alpha = 1$ mm.)

4.4.2 Einfluß anderer Materialparameter auf die Messung

Mit der in (4.11) eingeführten Sensitivität wurde für einige Fasergeometrien der Frage nachgegangen, wie spezifisch die Messung des d_{33}^m den Faserwert d_{33} ermittelt. Weil sich bereits erwiesen hat, daß eine vollständige Elektrodierung $\beta = 100\%$ die kleinsten Abweichungen von d_{33} verursacht, wurde nur dieser Fall untersucht. Die Ergebnisse sind in Tab. 4.1 auf Seite 44 zusammengefaßt. Selbstverständlich hängen die Sensitivitäten von der Art der variierten Materialparameter ab. Um diese zu zeigen, wurden in der Tabelle ein vollständiger Parametersatz mit elastischen Nachgiebigkeiten s_{ij}^E und eine Auswahl für die mechanischen Steifigkeiten berücksichtigt (wobei auch hierbei die Piezokoeffizienten d_{mi} Verwendung fanden).

Ein wichtiger Trend wird deutlich: je höher die Elektrodenabstandsverhältnisse werden, um so spezifischer bestimmt der Faser- d_{33} den gemessenen Piezokoeffizienten. Es muß betont werden, daß die in der Tabelle aufgeführten Elektrodenabstandsverhältnisse ungewöhnlich niedrig sind, um die Trends klarer herauszuarbeiten. Experimentell realisierte Fälle sind für $\alpha > 1$ gegeben. Für den Grenzfall $\alpha = 1$ wird für die typischen Abmessungen 3 mm langer Fasern mit Elektrodenabstand $\alpha = 1$ mm die Sensitivität für den Piezokoeffizienten $\zeta_{d_{33}}$ von 0,991 ermittelt. Bezogen auf die Summe aller Sensitivitäten ist das ein Anteil von 99,4%. Schon für diesen Grenzfall zeigt sich also, daß die Messung sehr spezifisch ist, also praktisch nur noch vom Piezokoeffizienten d_{33} der Fasern abhängt. Dem Trend folgend kann das erst recht

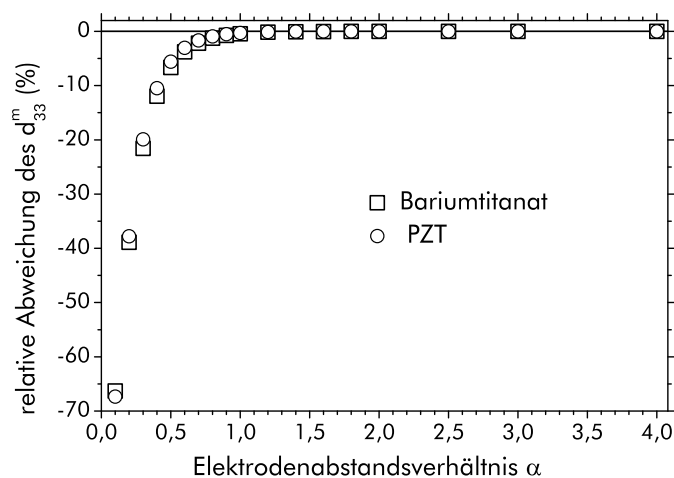


Abb. 4.10: Vergleich der prozentualen Abweichungen des gemessenen Piezokoeffizienten d_{33}^m in Abhängigkeit vom Elektrodenabstandsverhältnis für PZT- und Bariumtitanatkeramik. Die verwendeten Materialkoeffizienten sind in Tab. A.2 auf Seite 102 aufgeführt. (Fasergeometrie: $h = 3$ mm, $\alpha = 1$ mm, $\beta = 100\%$)

Tab. 4.1: Sensitivitäten ζ gemäß (4.11) sowie auf die Summe bezogene Sensitivitäten ζ_r für verschiedene Abmessungen der Faser. (Alle Rechnungen für $\alpha = 1$ mm und $\beta = 100$ %.) Die Materialparameter sind nach den größten Beträgen der Sensitivität der ersten Faserabmessungen sortiert. Für die anderen beiden Abmessungen weicht diese Reihenfolge ab.

| Parameter x_i | für die Abmessungen der Faser | | | | | |
|-------------------|-------------------------------|---------------|--------------------------|---------------|--------------------------|---------------|
| | $\alpha = 0,2, h = 3$ mm | | $\alpha = 0,2, h = 6$ mm | | $\alpha = 0,5, h = 3$ mm | |
| | ζ_{x_i} | $\zeta_r(\%)$ | ζ_{x_i} | $\zeta_r(\%)$ | ζ_{x_i} | $\zeta_r(\%)$ |
| d_{33} | 0,414 | 66,6 | 0,814 | 89,4 | 0,878 | 93,0 |
| d_{15} | 0,197 | 31,6 | 0,101 | 11,1 | 0,0689 | 7,30 |
| ϵ_{11}^S | 0,144 | 23,1 | 0,0796 | 8,736 | 0,0553 | 5,855 |
| s_{44}^E | -0,106 | -17,1 | -0,0594 | -6,52 | -0,0410 | -4,34 |
| d_{31} | -0,0938 | -15,1 | -0,0494 | -5,42 | -0,0341 | -3,61 |
| ϵ_{33}^S | -0,0912 | -14,7 | -0,0570 | -6,26 | -0,0399 | -4,22 |
| s_{33}^E | 0,0795 | 12,8 | 0,0356 | 3,90 | 0,0241 | 2,56 |
| s_{13}^E | 0,0522 | 8,40 | 0,0302 | 3,13 | 0,0209 | 2,21 |
| s_{11}^E | 0,0408 | 6,56 | 0,0246 | 2,70 | 0,0173 | 1,83 |
| s_{12}^E | -0,0136 | -2,18 | -0,0084 | -0,93 | -0,0059 | -0,62 |
| Summe: | 0,622 | 100 | 0,911 | 100 | 0,944 | 100 |
| d_{33} | 0,414 | 80,1 | 0,814 | 94,1 | 0,878 | 96,2 |
| c_{13}^E | 0,341 | 66,0 | 0,180 | 20,8 | 0,124 | 13,6 |
| c_{33}^E | -0,276 | -53,4 | -0,141 | -16,3 | -0,0965 | -10,6 |
| d_{15} | 0,197 | 38,0 | 0,101 | 11,7 | 0,0689 | 7,55 |
| ϵ_{11}^S | 0,144 | 27,8 | 0,0796 | 9,2 | 0,0553 | 6,05 |
| (...) | (...) | (...) | (...) | (...) | (...) | (...) |
| Summe: | 0,517 | 100 | 0,866 | 100 | 0,913 | 100 |

für dünnere Fasern erwartet werden. Eine Erhöhung der Faserlänge führt ebenfalls dazu, daß die Messung des longitudinalen Piezokoeffizienten spezifischer ist.

Die Sensitivitäten deuten darauf hin, daß für hinreichend dünne Fasern der Einfluß der Materialparameter auf den gemessenen longitudinalen Piezokoeffizienten – mit Ausnahme des Faser- d_{33} – sehr gering ist. Dadurch sollten die gewonnenen Ergebnisse für günstige Geometrien und die Abweichungen auch auf andere Piezokeramiken übertragbar sein. Um diese Vermutung zu überprüfen, wurden die Abweichungen des gemessenen Piezokoeffizienten für typische Bariumtitanatkeramik berechnet und dem bisher betrachteten PZT-Datensatz in Abb. 4.10 auf Seite 43 gegenübergestellt.

Die Vermutung konnte damit bestätigt werden. Für sehr kleine α treten zwar nennenswerte Unterschiede in der prozentualen Abweichung auf, aber schon ab Elektrodenverhältnissen von $\alpha = 1$ ist die Abweichung bei beiden Materialien vernachlässigbar. Deswegen sollen die folgenden Untersuchungen auf die Einflüsse der Abmessungen und Elektrodenparameter konzentriert werden, wobei durchweg der PZT-Datensatz Verwendung findet.

Bezieht man sich in der nach (4.11) definierten Sensitivität statt auf d_{33} auf d_{33}^m , entsprechend

$$\zeta'_{x_i} \stackrel{!}{=} \frac{\partial d_{33}^m}{\partial x_i} x_i}{d_{33}^m}, \quad (4.13)$$

so ergibt ζ_{x_i}/ζ'_{x_i} immer einen konstanten Faktor. Die Summe der so definierten modifizierten Sensitivitäten ist für alle untersuchten Geometrien

$$\sum_i \zeta'_{x_i} = 1. \quad (4.14)$$

Dies ist dann der Fall, wenn

$$d_{33}^m = f_{d_{33}}(h,d,\beta,a)d_{33} + f_{d_{31}}(h,d,\beta,a)d_{31} + \dots + f_{s_{44}^E}(h,d,\beta,a)s_{44}^E, \quad (4.15)$$

wobei f_{x_i} beliebige (auch nichtlineare) Funktionen der Geometrieparameter sind. Mit anderen Worten: der gemessene Piezokoeffizient hängt *linear* von den benutzten Materialparametern ab. Das ist nicht selbstverständlich. Werden zum Beispiel anstelle der elastischen Nachgiebigkeiten s_{ij}^E die Steifigkeiten c_{ij}^E verwendet, so gilt (4.14) nicht.

4.4.3 Einfluß der Abmessungen auf die Messung

Nachdem bisher verschiedene Trends herausgearbeitet wurden, soll nun der Einfluß der Faserabmessungen auf die Abweichung des gemessenen longitudinalen Piezokoeffizienten in einem größeren für die Experimente zugänglichen Parameterbereich betrachtet werden. In Abb. 4.11 sind hierzu Kurven gleicher relativer Abweichung in Abhängigkeit von Faserdurchmesser und -höhe für verschiedene Elektrodenabstände aufgetragen worden.

Offenbar ist der gemessene Piezokoeffizient stets kleiner als der Faserwert, allerdings wird für hinreichend dünne und lange Fasern die Abweichung sehr klein. Vom Standpunkt des Experimentes aus ist ermutigend, daß für die dort verwendeten

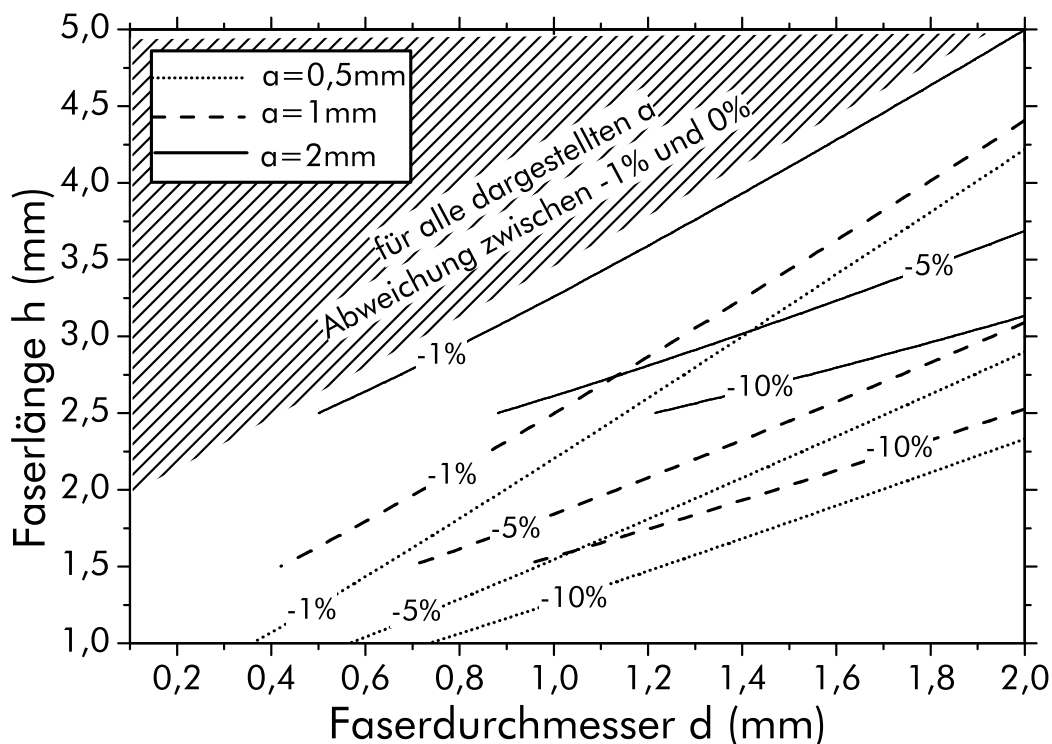


Abb. 4.11: Prozentuale Abweichung des gemessenen Piezokoeffizienten d_{33}^m in Abhängigkeit von der Fasergeometrie. Linien gleicher Abweichung sind in Abhängigkeit vom Faserdurchmesser und der Faserlänge für verschiedene Elektrodenabstände dargestellt. Das schraffierte Gebiet deutet den Trend an, dem alle Fasern folgen. (Alle Rechnungen für $\beta = 100\%$.)

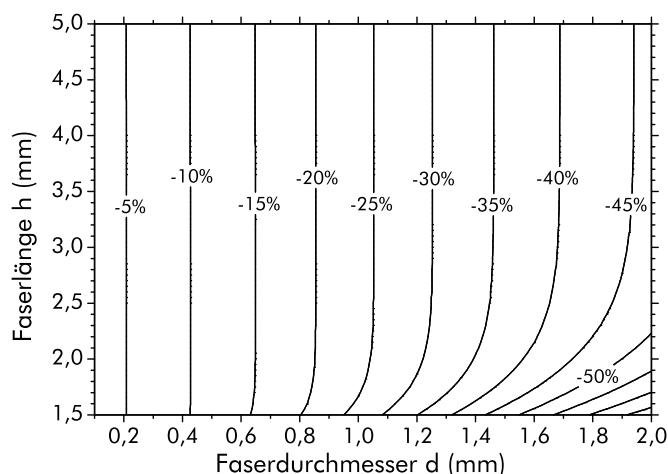


Abb. 4.12: Prozentuale Abweichung der Feldstärke E_3^i im Zentrum der Faser von der nominellen Feldstärke E_3^n in Abhängigkeit von Faserdurchmesser und -länge. Geometrieparameter: $a = 1$ mm und $\beta = 100\%$.

Fasern von typischerweise 3 mm Länge und dem Elektrodenabstand 1 mm die Abweichungen im Durchmesserbereich von 200 μ m bis etwa 1,2 mm betragsmäßig kleiner als 1 % sind. Sollten die getroffenen Voraussetzungen das Problem gut genug widerspiegeln, könnte dieser Einfluß gegenüber der Meßunsicherheit der Apparatur und den Fertigungsschwankungen der Fasern vernachlässigt werden. Offenbar läßt sich der Bereich geeigneter Fasergeometrien vergrößern, wenn die Elektrodenabstände kleiner gewählt werden. Die Ursache dafür darf in der Verteilung der elektrischen Feldstärke vermutet werden und wird näher in Kap. 4.4.4 diskutiert.

In der gewählten Darstellung sind die Kurven des gleichen Faseraspektverhältnisses h/d Geraden. Die ermittelten Kurven gleicher Abweichungen sind lediglich *leicht* gebogenen Kurven. Das läßt auf einen deutlichen Einfluß des Faseraspektverhältnisses auf die Abweichung des gemessenen Piezoeffizienten schließen. Das Aspektverhältnis der Fasern sollte vorwiegend die Ausprägung des mechanischen Spannungsfeldes beeinflussen. Neben den Befunden der Sensitivität ist das ein weiterer Grund, dieses genauer zu analysieren, wie es in Kap. 4.4.5 geschieht.

Ein Vergleich ist aufschlußreich, in welchem die Abweichungen der Feldstärke im Zentrum E_3^i von der nominellen Feldstärke E_3^n in einem analogen Diagramm dargestellt werden. In Abb. 4.12 geschieht das beispielhaft für dieselbe Geometrie der Fasern wie soeben (Abb. 4.11) und einen Elektrodenabstand von $a = 1$ mm.

Deutlich zeigt sich, daß die Feldstärke im Zentrum für den untersuchten Parameterbereich praktisch ausschließlich vom Faserdurchmesser abhängt, solange die Faserlänge größer als etwa 3 mm ist. Nur für kürzere Fasern gibt es hiervon Abweichungen, wenn sie deutlich dicker als 1 mm sind. Es bleibt festzuhalten, daß das Faseraspektverhältnis auf die Feldstärke im Zentrum der Faser offenbar keinen Einfluß hat. Vielmehr ist es so, daß die Feldverteilung offenbar vorwiegend vom Faserdurchmesser bestimmt wird.

Um in einer Übersicht die Abhängigkeit von allen geometrischen Parametern zu geben, wurden die Kurven mit -5% Abweichung des d_{33}^m in ein h - d -Diagramm eingetragen (siehe Abb. 4.13). Es wurden dabei jeweils Kurvenscharen mit verschiedenen Elektrodenanteilen und auch Elektrodenabständen eingetragen.

Die gewonnene Übersicht bestätigt die schon an einzelnen Beispielen gewonnenen Trends für einen größeren Parameterbereich. Dünnere und längere Fasern führen zu kleineren Abweichungen, wobei sich kleine Elektrodenabstände und vollständige Elektrodenabstände positiv auf die Genauigkeit auswirken. In gewissem Umfang können ungünstige Parameter durch geeignete Wahl der anderen ausgeglichen werden. Beispielsweise können auch bei dicken Fasern gute Ergebnisse erzielt werden, wenn sie

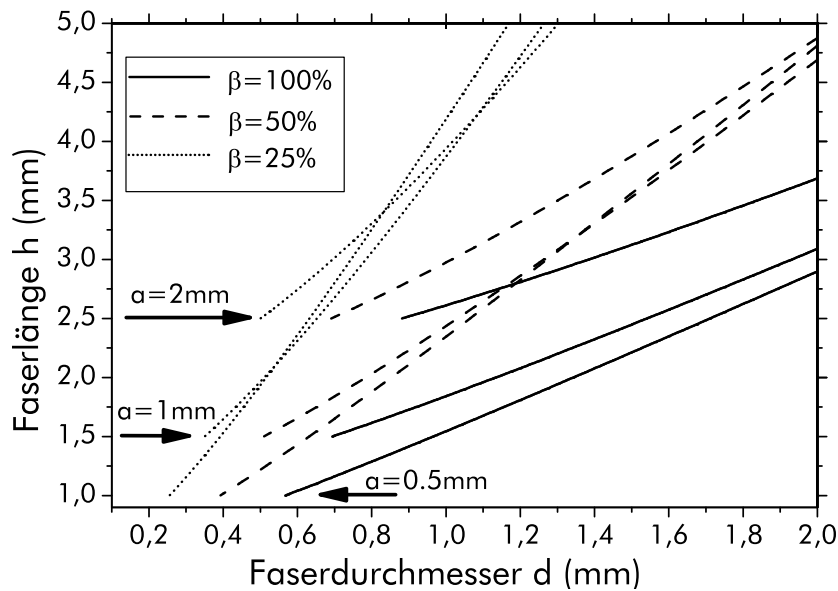


Abb. 4.13: Kurven gleicher prozentualer Abweichung von -5% zwischen dem gemessenen Piezokoeffizienten d_{33}^m und dem Faserwert in Abhängigkeit von Faserdurchmesser und -länge. Dargestellt sind die Kurven für verschiedene Elektrodenabstände a und verschiedene Elektrodenanteile β . Durch die Elektrodenabstände ist die Gesamtfaserlänge nach unten begrenzt.

lang genug gewählt werden. Bei kurzen relativ dicken Fasern kann ein hinreichend kleiner Elektrodenabstand eine ausreichend genaue Messung gewährleisten. Eine vollständige Elektrodierung ist aber ratsam. Bei kleineren Elektrodenanteilen verlaufen die Linien gleicher Abweichung steiler, das heißt ein zu großer Durchmesser ist mit größeren Faserlängen zu kompensieren.

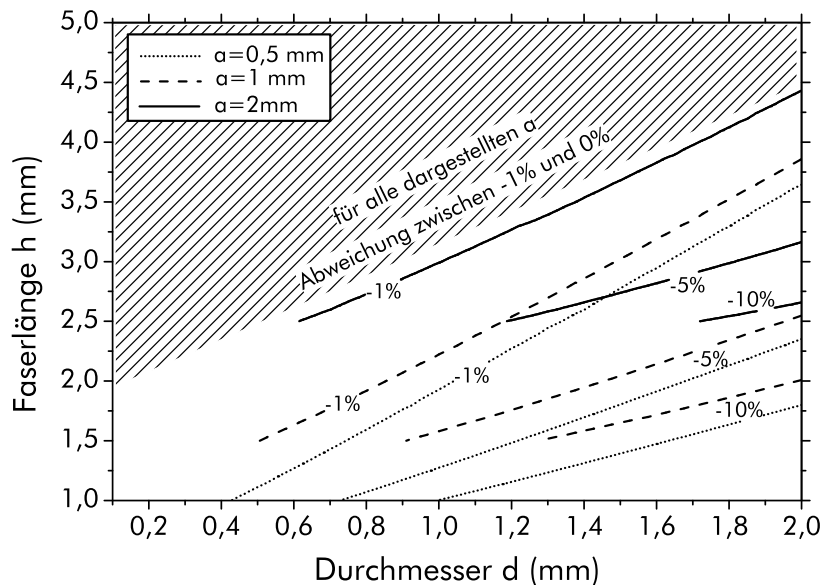


Abb. 4.14: Prozentuale Abweichung des gemessenen Piezokoeffizienten d_{33}^m in Abhängigkeit von der Fasergeometrie für eine Einzelfaser mit Ringelektrode und einer Deckelektrode. Linien gleicher Abweichung sind in Abhängigkeit vom Faserdurchmesser und der Faserlänge für verschiedene Elektrodenabstände dargestellt. Das schraffierte Gebiet deutet den Trend an, dem alle Fasern folgen. (Alle Rechnungen für $\beta = 100\%$).

In Kap. 4.4.1 wurde deutlich, daß unabhängig von α Deckelektroden auf der Ober- und Unterseite der Faser zu einer verschwindenden systematische Abweichung des gemessenen longitudinalen Piezoeffizienten vom tatsächlichen führen. Aus diesem Grund genügt es, einen parametrischen Überblick dieser systematischen Abweichung lediglich für Einzelfasern mit Ringelektroden und *einer* Deckelektrode zu berechnen. In Abb. 4.14 sind die Ergebnisse dargestellt, welche dem parametrischen Zusammenhang der Fasern mit Ringelektroden (vgl. Abb. 4.11 auf Seite 45) grundsätzlich ähneln: für lange dünne Fasern ist die Abweichung kleiner als für dicke und kurze Fasern. Ein kleinerer Elektrodenabstand α ermöglicht eine genauere Messung des longitudinalen Piezoeffizienten. Im Vergleich wird deutlich, daß der Parameterbereich für eine genaue Messung für Einzelfasern mit einer Deckelektrode größer ist. Das äußert sich darin, daß sich die Konturlinien zu höheren Durchmessern und niedrigeren Faserlängen verschoben haben, wobei ihr mittlerer Anstieg etwas kleiner geworden ist.

4.4.4 Verteilung der elektrischen Feldstärke

4.4.4.1 Überblick

Für einen ersten Überblick über den Einfluß der Elektrodenkonfiguration auf die Feldstärkeverteilung wird in Abb. 4.15 die Abweichung der longitudinalen Feldstärkekomponente E_3^i im Faserzentrum von der nominellen Feldstärke E_3^n herangezogen. Für hohe α – bei festen anderen Geometrien also für dünne Fasern – hat die Gestaltung der Elektroden keinen Einfluß auf die Feldstärkekomponente im Faserzentrum. E_3^i ist in jedem Fall geringer als die nominelle Feldstärke E_3^n , wobei die Abweichung mit steigendem α geringer wird.

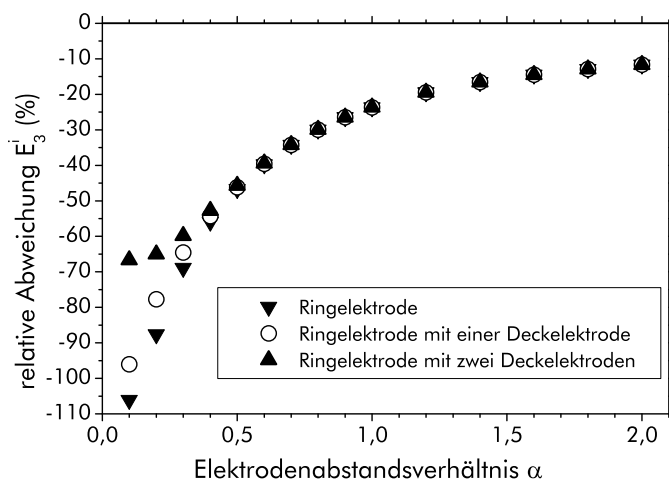


Abb. 4.15: Abweichung der Feldstärke im Faserzentrum E_3^i von der nominellen Feldstärke E_3^n bei unterschiedlichen Elektrodenkonfigurationen. Die pure Ringelektrode (Abb. 4.5a auf Seite 37) sowie diese mit zusätzlicher Deckelektrode (Abb. 4.5b) und mit zwei Deckelektroden (Abb. 4.5c) wurden betrachtet. Feste Geometrieparameter: $a = 1 \text{ mm}$, $h = 3 \text{ mm}$, $\beta = 100\%$.

Fasern mit zwei Deckelektroden weisen ein deutliches Grenzwertverhalten für kleine Elektrodenabstandsverhältnisse $\alpha \rightarrow 0$ auf. Durch die beiden Deckelektroden wird in diese ausgeprägt scheibenförmigen Fasern die Feldstärke im Faserzentrum nicht wesentlich von den Ringelektroden beeinflusst und im Grenzfall überhaupt nicht. Zur Berechnung dieser longitudinalen Feldstärke ist die anliegende Spannung demnach – anders als für die Definition der nominellen Feldstärke E_3^n – auf die Gesamtfaserlänge h zu beziehen, so daß die longitudinale Feldstärkekomponente mit $E_3^n a/h$ angegeben werden kann. Für die Faserabmessungen in Abb. 4.15 gelangt man so zu einer longitudinalen Feldstärkekomponente von $E_3^n/3$, d. h. die Abweichung von E_3^n beträgt $-66,67\%$. Für $\alpha = 0,1$ liefert die Modellierung den Wert $-66,64\%$, der nur wenig größer als der zu erwartende Grenzwert für $\alpha \rightarrow 0$ ist. Für die Kontaktierung

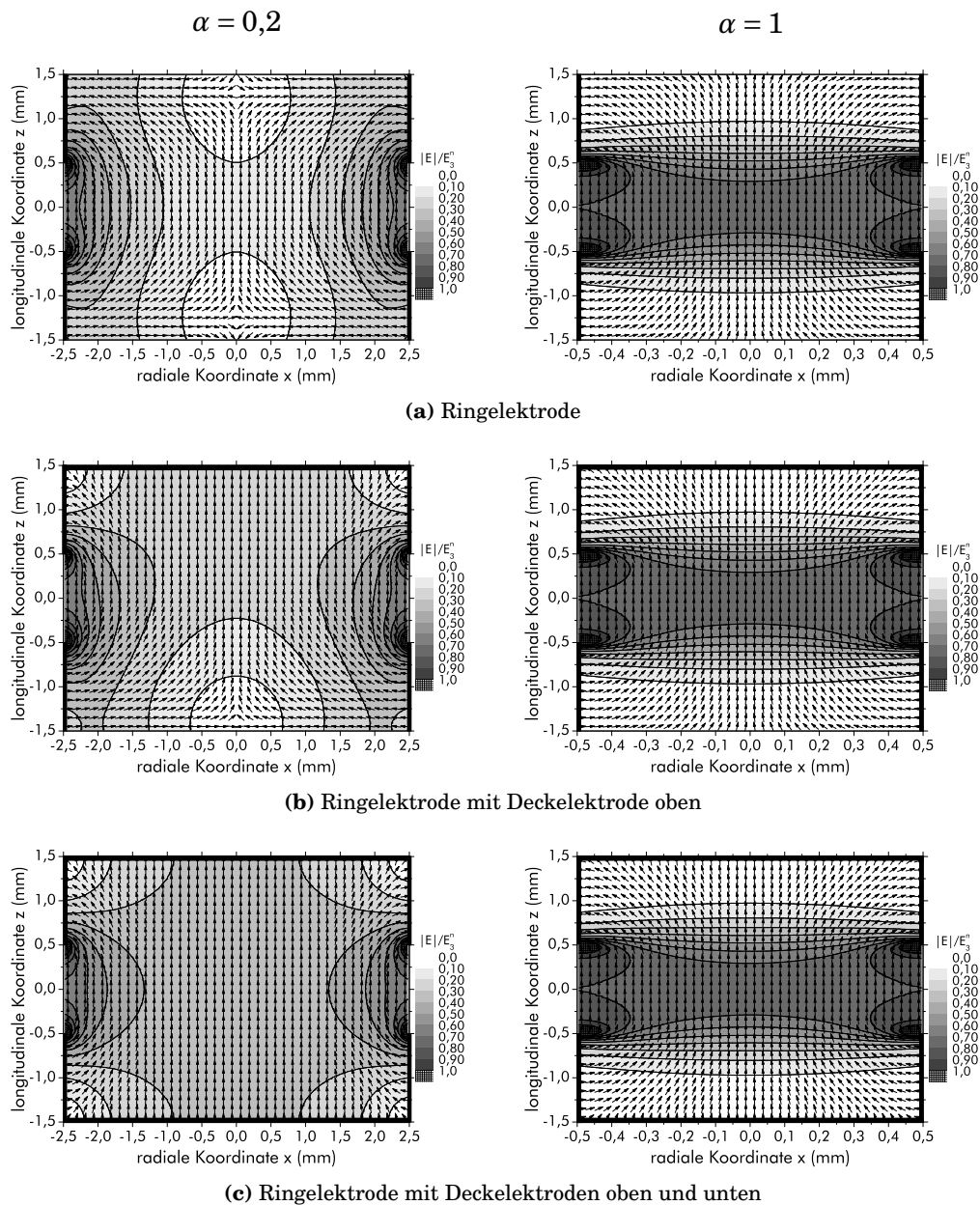


Abb. 4.16: Verteilung der elektrischen Feldstärke bei unterschiedlichen Elektrodenabstandsverhältnissen α und Elektrodenkonfigurationen, die am Rand angedeutet sind. Der Betrag der elektrischen Feldstärke bezogen auf die Feldstärke E_3^n ist farblich codiert dargestellt und die Richtung der Feldstärke durch gleichlange Pfeile markiert.

nur mit Ringelektroden oder mit zusätzlich *einer* Deckelektrode tritt das beschriebene Grenzwertverhalten nicht auf, da hierbei die Feldverteilung auch für kleine α stärker von den Ringelektroden bestimmt wird.

Um die gesamten elektrischen Feldstärkeverteilungen für die verschiedenen betrachteten Elektrodenkonfigurationen zu illustrieren, sind diese in Abb. 4.16 dargestellt. Weil die Fasern in jedem Fall mit Ringelektroden versehen sind, ist das resultierende elektrische Feld inhomogen. Für Fasern mit größerem Elektrodenabstandsverhältnis α (Abb. 4.16 rechts) sind hingegen kaum Unterschiede bei der Größe des elektrischen Feldes festzustellen. Offenkundig sind dort die Ringelektroden lang genug, daß sich in Nähe der Deckelektroden schon ein Bereich sehr geringer Feldstärke ausgebildet hat. Dadurch können die zusätzlichen Äquipotentialflächen der

Deckelektroden die Ausprägung des elektrischen Feldes kaum mehr beeinflussen. Nur noch anhand der Richtung des elektrischen Feldes läßt sich ein Einfluß der Elektrodengestaltung feststellen.

Bei Fasern mit kleinem Elektrodenabstandsverhältnis α (Abb. 4.16 links) ist die Feldverteilung augenscheinlich deutlich von der Art der Elektroddierung abhängig. Zur Faserachse ($x = 0$) hin wird die Feldstärke kleiner. Ohne Deckelektroden gibt es zudem einen Bereich sehr kleiner Feldstärken unterhalb der Ringelektroden. Durch eine zusätzliche Deckelektrode wird die Feldstärke im Bereich darunter deutlich größer und bei Deckelektroden auf der Ober- und Unterseite ist die Feldstärke entlang der Faserachse weitgehend homogen, von deutlicher Größe sowie longitudinal ausgerichtet. Auch unterhalb der Ringelektroden tritt eine nennenswerte elektrische Feldstärke auf, wobei dieser Einfluß bei den dickeren Fasern ($\alpha = 0,2$) deutlich stärker ausgeprägt ist.

Auch unter der starken Annahme ideal longitudinal polarisierter Fasern hat das wichtige Konsequenzen für die resultierende mechanische Verrückung u_3 . Aus (4.8) ist ersichtlich, daß bei den untersuchten Piezokeramiken nur die Feldstärkekomponente in longitudinaler Richtung E_3 zur longitudinalen Dehnung beiträgt und damit zum gemessenen Piezokoeffizienten d_{33}^m . Deswegen steht diese Feldstärkekomponente im Zentrum des Interesses.

Für deren Größe ist auch die Orientierung der elektrischen Feldstärke bedeutsam, weswegen diese ergänzend zu Abb. 4.16 für Fasern mit Ringelektroden in Abb. 4.17 quantifiziert als Konturplot dargestellt wird. Im Vergleich mit der dickeren Faser ($\alpha = 1$) weist die dünnere ($\alpha = 0,2$) eine deutlich ausgeprägtere Orientierung in Längsrichtung auf. Im Bereich zwischen den Elektroden ist sie weitgehend in Längsrichtung ausgerichtet. Im Bereich unterhalb der Elektroden nimmt die Abweichung von der Längsrichtung radial nach außen hin zu. Auf der Äquipotentialfläche der Ringelektroden steht die Feldstärke senkrecht. Im Gegensatz dazu ist die Orientierung in Längsrichtung bei der dickeren Faser deutlich schwächer ausgeprägt und die Abnahme der longitudinalen Orientierung geschieht eher in longitudinaler als in radialer Richtung. Auch im Bereich zwischen den Elektroden ist sie in einem deutlich kleineren Gebiet, als dem durch den Elektrodenabstand α gegebenen, longitudinal ausgerichtet.

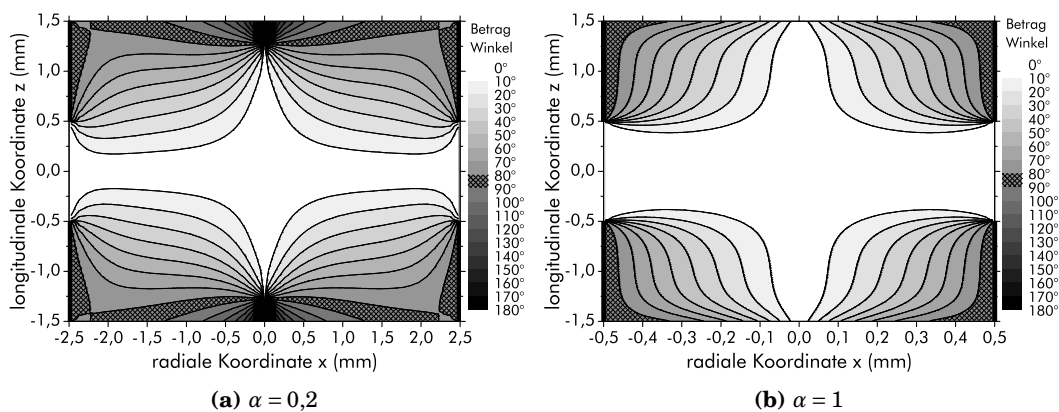


Abb. 4.17: Orientierung der elektrischen Feldstärke in einer $h = 3$ mm langen Faser für unterschiedliche Elektrodenabstandsverhältnisse α (Feste Geometrieparameter: $a = 1$ mm, $\beta = 100\%$). Angegeben sind die Beträge der Winkel gegenüber der z -Achse, die in Uhrzeigerrichtung (\odot) gezählt werden. Die Vorzeichen entsprechen dem Schema $\frac{-}{+} \frac{+}{-}$. Die Ringelektroden sind angedeutet. Die Aspektverhältnisse der Abbildungen weichen von denen der Fasern ab.

Zusammenfassend aus den Betrachtungen zu Betrag und Orientierung kann ausgesagt werden, daß die elektrische Feldstärke in den dünneren Fasern homogener verteilt ist.

Eine Verlängerung der Faser kann sich nur dann auf die Feldstärkeverteilung auswirken, wenn in den kurzen Fasern unterhalb der Ringelektroden noch eine nennenswerte Feldstärke auftritt. Anhand einer $h = 6\text{ mm}$ langen Faser – und damit doppelt so lang wie die bisher betrachteten – wird diese Vermutung in Abb. 4.18 überprüft. In der Tat ist der Betrag der elektrischen Feldstärke in der dünneren Faser ($\alpha = 1$, siehe Abb. 4.18a) sehr ähnlich der für die 3 mm langen Faser berechneten. Die Orientierung der Feldstärke (Abb. 4.18b) ist hingegen ausgeprägter radial gestaffelt als in der kürzeren Faser gleichen Durchmessers.

Als deutlich größer stellen sich die Unterschiede zwischen den längeren und kürzeren Fasern jedoch bei sehr großem Durchmesser dar (entsprechend $\alpha = 0,2$). Der Betrag der Feldstärke der längeren Faser – siehe Abb. 4.18c – nimmt nicht mehr nur in radialer Richtung zum Faserzentrum hin zu. Vielmehr ist im Faserinneren ein deutlicherer Gradient in Längsrichtung festzustellen als bei der kürzeren Faser. Die dabei im Faserinneren erreichte Feldstärke ist außerdem größer als dort. Die Elektrode ist nun lang genug, damit zu den Deckflächen hin die Feldstärke abklingen kann. Weiterhin ist die Längsausrichtung bei den längeren Fasern (Abb. 4.18d) nicht mehr so longitudinal geprägt. Stattdessen ist die radiale Staffelung bedeutsamer geworden, auch wenn sie deutlich schwächer ausgeprägt ist als in der dünneren Faser.

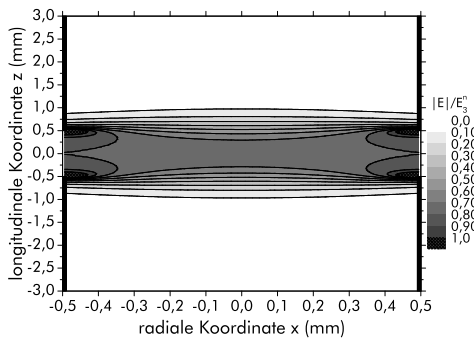
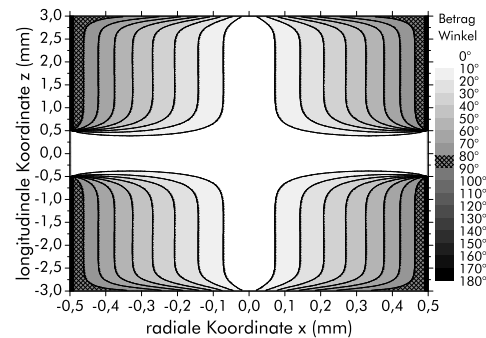
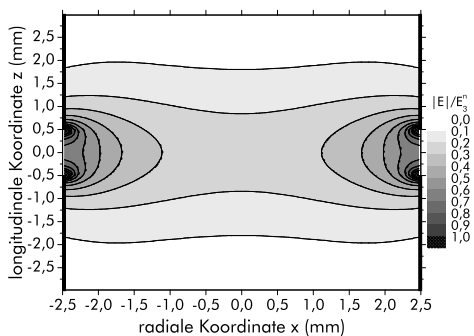
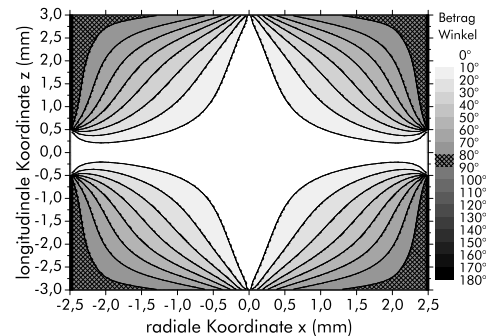
(a) Betrag der Feldstärke für $\alpha = 1$ (b) Orientierung der Feldstärke für $\alpha = 1$ (c) Betrag der Feldstärke für $\alpha = 0,2$ (d) Orientierung der Feldstärke für $\alpha = 0,2$

Abb. 4.18: Betrag und Orientierung der elektrischen Feldstärke für 6 mm lange Fasern mit unterschiedlichen Elektrodenabstandsverhältnissen α (Geometrieparameter: $a = 1\text{ mm}$, $\beta = 100\%$). Die Ringelektroden sind angedeutet; die Aspektverhältnisse der Abbildungen sind nicht maßstäblich. Die Feldstärkebeträge beziehen sich auf E_3^n . Die Orientierung ist entsprechend Abb. 4.17 dargestellt worden.

Die Feldverteilung in der langen dicken Faser läßt vermuten, daß sich die Größe der Feldstärke im Faserzentrum nicht mehr wesentlich durch eine weitere Verlängerung der Faser erhöhen läßt, da das Feld schon in der vorliegenden Konfiguration unterhalb der Ringelektroden weitgehend abgeklungen ist. Diese Situation ist vergleichbar mit derjenigen der dünneren Faser ($\alpha = 1$), bei der die Verlängerung ebenfalls nur zu einer marginalen Änderung geführt hat.

Die Voraussetzung der idealen longitudinalen Polung führt dazu, daß das lineare Materialgesetz (4.8) in der gesamten Faser in dieser Form gilt. Demnach ist die Feldstärkekomponente E_3 wesentlich für die Verrückung u_3 und damit den gemessenen Piezokoeffizienten. Deswegen wird im folgenden die Feldstärkekomponente E_3 quantitativ über einen größeren Parameterbereich analysiert.

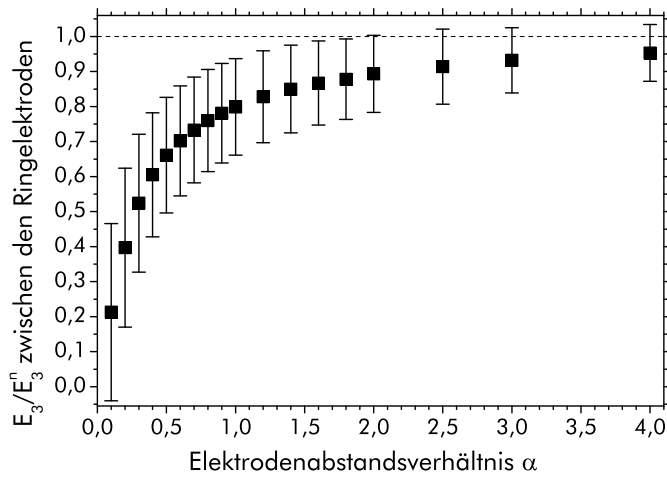
4.4.4.2 Analyse der Feldstärke zwischen den Ringelektroden

Die Feldstärkekomponente E_3 wird sowohl vom Betrag als auch der Orientierung der elektrischen Feldstärke bestimmt. Wie die präsentierten Ergebnisse zeigten, treten die größten Abweichungen von der longitudinalen Orientierung im Bereich unter den Ringelektroden auf, wo allerdings der Betrag der elektrischen Feldstärke für hinreichend dünne und lange Fasern nur noch gering ist. Darüberhinaus wird gemäß der experimentell motivierten Definition (4.9) die nominelle Feldstärke über den Elektrodenabstand a definiert. Deswegen wird zur quantitativen Auswertung der Feldstärkekomponente E_3 der Bereich *zwischen* den Ringelektroden herangezogen, der in Abb. 4.3c auf Seite 34 hervorgehoben ist.

Um die Trends zu verdeutlichen, wurde zunächst eine voll elektrodierte aber nur 3 mm lange Faser mit einem Elektrodenabstand von 1 mm betrachtet. In Abb. 4.19a werden für eine nur mit Ringelektroden versehene Faser die Feldstärkekomponente E_3 und deren Standardabweichung dargestellt. Der aus der qualitativen Diskussion zu vermutende Trend kann bestätigt werden: für dünnere Fasern (höhere α) steigt der Mittelwert der Feldstärkekomponente E_3 zwischen den Elektroden an. Allerdings ist auch für dünne Fasern von 250 μm Durchmesser (das entspricht $\alpha = 4$) eine deutliche Abweichung von der nominellen Feldstärke festzustellen. Mit abnehmender Dicke der Fasern wird auch die Standardabweichung kleiner. Das ist ein deutlicher Beleg dafür, daß die Feldstärkeverteilung homogener wird, je dünner die Fasern sind. Ein homogenes elektrisches Feld kann also bei geeigneter Geometrie auch mit Ringelektroden erzielt werden.

Tab. 4.2: Mittelwert und Standardabweichung der elektrischen Feldstärkekomponente E_3 zwischen den Ringelektroden für eine 3 mm und eine 6 mm lange Faser. Werte für unterschiedliche Elektrodenanteile β und Elektrodenabstandsverhältnisse α wurden zusammengestellt. ($a = 1\text{ mm}$, Ringelektroden vgl. Abb. 4.5a auf Seite 37)

| Faserlänge | α | für Elektrodenabstandsverhältnisse β | | | |
|-------------------|----------|--|-------------------|-------------------|-------------------|
| | | 100 % | 50 % | 25 % | 12.5 % |
| | | E_3/E_0^n und Standardabweichung zwischen den Elektroden | | | |
| $h = 3\text{ mm}$ | 0,5 | 0,658 \pm 0,160 | 0,649 \pm 0,166 | 0,618 \pm 0,182 | 0,571 \pm 0,201 |
| | 1 | 0,795 \pm 0,133 | 0,794 \pm 0,133 | 0,786 \pm 0,139 | 0,763 \pm 0,155 |
| | 4 | 0,946 \pm 0,081 | 0,946 \pm 0,081 | 0,946 \pm 0,081 | 0,936 \pm 0,081 |
| $h = 6\text{ mm}$ | 0,5 | 0,631 \pm 0,177 | — | — | 0,661 \pm 0,160 |
| | 1 | 0,791 \pm 0,139 | — | — | 0,796 \pm 0,136 |
| | 4 | 0,948 \pm 0,084 | — | — | 0,948 \pm 0,084 |



(a) Ringelektroden

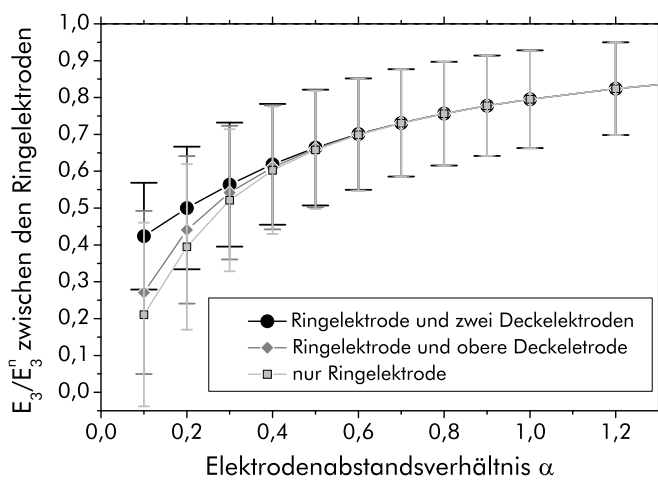
(b) Ringelektroden und Deckelektroden (für $\alpha > 1,2$ entspricht der Verlauf dem in (a) gezeigten)

Abb. 4.19: Mittelwert und Standardabweichung der Feldstärkekomponente E_3 im Bereich zwischen den Ringelektroden. Diese Größen sind für verschiedene Elektrodenkonfigurationen in Abhängigkeit vom Elektrodenabstandsverhältnis α dargestellt. (Geometrieparameter: $h = 3$ mm, $a = 1$ mm, $\beta = 100$ %.)

Der Frage, in welchem Umfang der Elektrodenanteil dieses Ergebnis beeinflusst, ist Tab. 4.2 gewidmet. Offensichtlich hat der Elektrodenanteil nur bei dicken Fasern einen Einfluß auf die Feldstärkeverteilung. Kleinere β führen zu kleineren mittleren Feldstärken E_3 und zu einer erhöhten Standardabweichung. Allerdings wird dieser Einfluß für hinreichend dünne Fasern sehr klein und auch für lange Fasern verschwindet er. Auch der Einfluß der Faserlänge auf die Feldstärkeverteilung zwischen den Elektroden scheint bei vollständig elektrodierten Fasern recht klein zu sein. Die Unterschiede liegen für die dünnen Fasern (ab $\alpha = 1$) im Bereich der numerischen Unsicherheit der Ergebnisse. Die Ausprägung des elektrischen Feldes zwischen den Elektroden kann für dünne Fasern kaum mehr über die Abmessungen der Ringelektrode beeinflusst werden.

Die Übersicht in Abb. 4.16 auf Seite 49 zeigte bereits, daß die Feldstärke zwischen den Ringelektroden vorrangig für kleine Elektrodenabstandsverhältnisse α von der Elektrodenkonfiguration abhängt. Für die Feldstärkekomponente E_3 bestätigt sich diese Aussage auch quantitativ wie Abb. 4.19b belegt. In der Tat zeigen sich solche Unterschiede für Elektrodenabstandsverhältnisse $\alpha < 0,6$, welche geometrisch dem Sonderfall einer Scheibe zuzuordnen sind. In Abb. 4.16 wird augenfällig, daß in scheibenförmigen Fasern die Feldstärke für Konfigurationen mit zwei Deckelektroden homogener verteilt ist als in solchen mit nur einer oder gar nur noch mit

Ringelektroden. Auch ist dann eine bessere longitudinale Ausrichtung der Feldstärke zu erwarten. Die quantitative Auswertung in Abb. 4.19b für E_3 bestätigt deutlich diesen Trend. Die Mittelwerte der Feldstärkekomponente E_3 sind für Elektrodenkonfigurationen mit zwei Deckelektroden höher als mit einer und erst recht ohne eine solche. Die Standardabweichungen folgen einem gegenläufigen Trend: sie sind für Konfigurationen nur mit Ringelektroden höher als in solchen mit einer oder zwei Deckelektroden.

Für die experimentell verwendeten langgestreckten Fasern bestätigt sich hingegen auch quantitativ die aus der graphischen Darstellung 4.16 zu gewinnende Vermutung: die Feldstärkeverteilung zwischen den Ringelektroden hängt nicht davon ab, ob Deckelektroden vorhanden sind, sondern wird nur noch vom Elektrodenabstandsverhältnis α bestimmt.

Vom Standpunkt des Experiments her ist die Frage wichtig, bei welcher Feldstärke der Piezoeffizient gemessen wird. Die Betrachtung des Großsignalverhaltens liegt außerhalb der hier betrachteten Fragestellungen. Dennoch kann ausgehend von dem hier betrachteten Modell ausgesagt werden, daß die nominelle Feldstärke E_3^n nur einen Anhaltspunkt für diese Feldstärke geben kann. Im vorliegenden Modell ist diese grundsätzlich höher als die tatsächlich wirksame. Außerdem ist sie – zumindest bei dicken Fasern ($\alpha \gtrsim 1$) – nicht nur zwischen den Ringelektroden von Null verschieden sondern auch in Bereichen unterhalb davon; ein Umstand der sich auch durch Deckelektroden nicht beeinflussen läßt. Bei dünneren Fasern ($\alpha > 1$) werden diese Einflüsse aber immer kleiner.

Die gewonnene Feldstärkeverteilung läßt somit vermuten, daß die gemessenen Koerzitivfeldstärken im Großsignal genauere Analysen zu ihrer Deutung erfordern. Allerdings läßt sich dazu nicht das vorliegende Modell heranziehen.

4.4.5 Analyse der resultierenden Verrückung

Auch unter den starken Voraussetzungen des Modells bleibt die Frage bestehen, warum der gemessene Piezoeffizient für den experimentell relevanten Abmessungsbereich derart gut mit dem der Fasern übereinstimmt. Es ist zu klären, woher die Verrückung u_3 stammt, welche in die Messung einfließt. Hierbei können mehrere Bereiche der Faser unterschieden werden:

- Zwischen den Elektroden liegt ein nennenswertes elektrisches Feld vor, welches hauptsächlich über den indirekten piezoelektrischen Effekt zur Verrückung beiträgt.
- Im Bereich unterhalb der Elektroden klingt das elektrische Feld ab, verschwindet aber zumindest in der Nähe des Elektrodenrandes nicht vollständig. Es kann demnach erwartet werden, daß hierdurch Beiträge zur Verrückung auftreten.
- Durch die piezoelektrische Dehnung und die Randbedingungen wird ein mechanischer Spannungszustand generiert, der die Verrückung beeinflusst. Wegen der Querkontraktion sind dabei sowohl Stauchung als auch Dehnung in Längsrichtung vorstellbar.

Aus (4.8) ist ersichtlich, daß über die Querkontraktion auch die lateralen Spannungen T_{rr} und $T_{\phi\phi}$ zu positiven Dehnungen in Längsrichtung führen. In den vorangegangenen Abschnitten wurde bereits auf die Anzeichen hingewiesen, die zumindestens für dicke Fasern einen solchen Einfluß nahelegen. Dieser kann anhand des mit der FEM-Lösung berechneten mechanischen Spannungszustandes analysiert werden. Beispiele für den Spannungszustand einer dünnen und einer dicken Faser

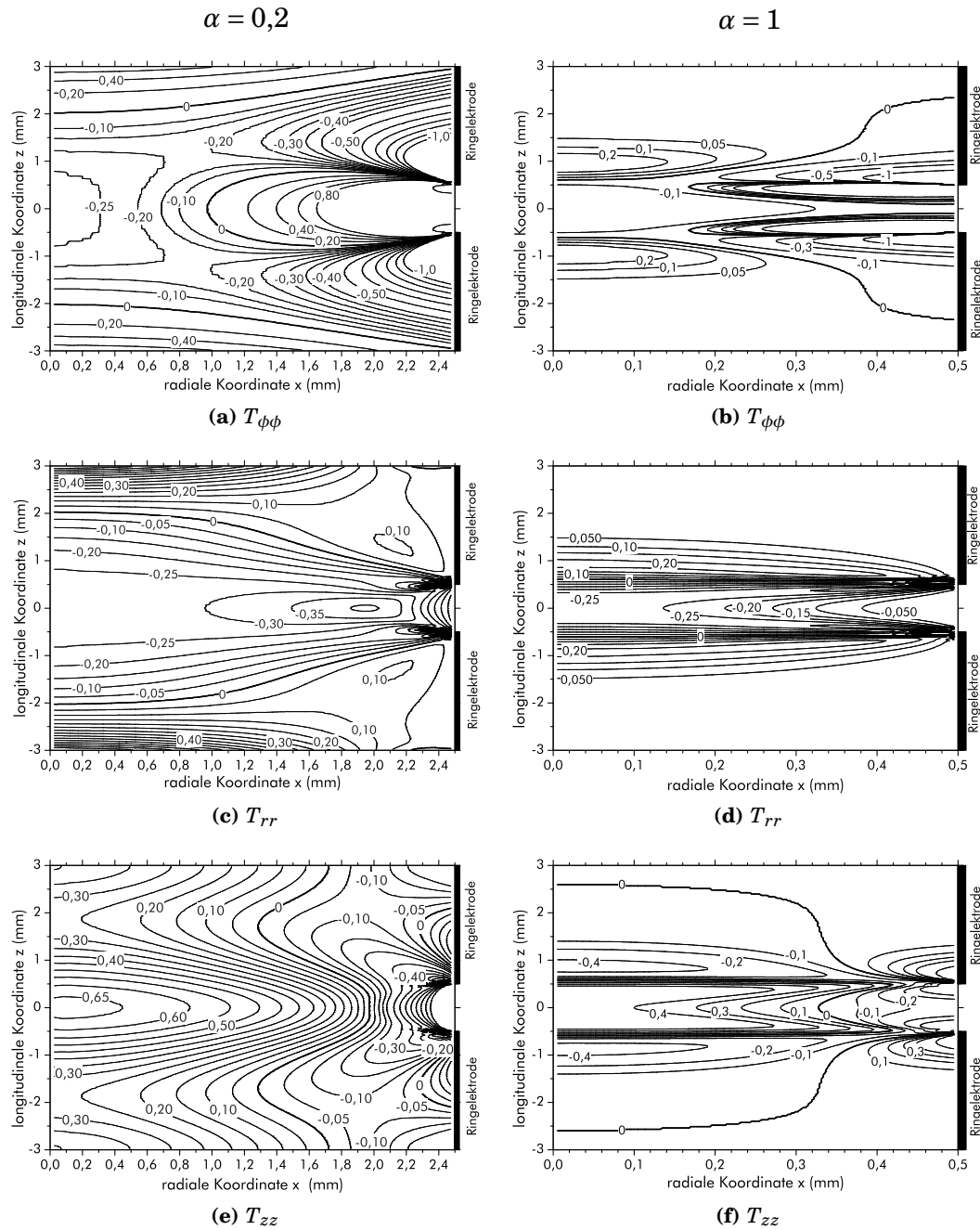


Abb. 4.20: Verteilung der mechanischen Spannung in einer dicken (links: $\alpha = 0,2$) und dünnen (rechts: $\alpha = 1$) Faser. Die mechanischen Spannungen sind in MPa angegeben. Es gibt Bereiche mit positiven Zug- und negativen Druckspannungen, die durch dick ausgezeichnete Linien mit verschwindender mechanischer Spannung getrennt werden. Die Abbildungen haben ein anderes Aspektverhältnis als die Fasern.

sind in Abb. 4.20 gegeben. Für die dicke Faser (Abb. 4.20a,c,e) treten für die beiden lateralen Spannungskomponenten im Bereich zwischen den Elektroden negative mechanische Spannungen auf. Diese liefern einen positiven Beitrag zur Dehnung S_3 . Inwiefern sie zur Verrückung beitragen, kann durch eine numerische Integration gemäß (4.4) festgestellt werden. Dazu wurde eine voll elektrodierte ($\beta = 100\%$) 6 mm lange Faser mit dem Elektrodenabstand $\alpha = 1$ mm näher untersucht. Am Längspfad durch das Faserzentrum (entlang der z -Achse in Abb. 4.3a auf Seite 34) von $z = -3$ mm bis $z = +3$ mm wurden elementweise die mechanischen Spannungen und Feldstärke-

komponenten E_3 gewonnen. Mittels (4.8) kann durch entsprechende Integrationen der mechanische und der piezoelektrische Anteil der gesamten Verrückung berechnet werden.

In Abb. 4.21 ist das Ergebnis dieser Analyse für verschiedene Elektrodenabstandsverhältnisse dargestellt. Die Gesamtverrückung rührt umso mehr aus dem Bereich zwischen den Ringelektroden her, je dünner die Fasern sind. Dabei stammt der piezoelektrische Anteil nicht ausschließlich aus den Bereichen zwischen den Ringelektroden. Vielmehr tragen auch die Bereiche unterhalb der Elektroden piezoelektrisch zur Gesamtverrückung bei: je dicker die Fasern sind, in umso stärkerem Maße. Das war aus den Beispielen zur elektrischen Feldstärkeverteilung so zu erwarten (vgl. Abb. 4.16 auf Seite 49).

Für kleine α , die scheibenförmigen Fasern entsprechen, verdient auch der mechanische Beitrag zur Gesamtverrückung Beachtung. Er trägt bei $\alpha = 0,2$ mit einem Anteil von 12,9 % zur Verrückung am Faserende bei. Der zunächst überraschende Befund, daß die *relative* Abweichung der gemessenen Piezokoeffizienten d_{33}^m für dicke Fasern deutlich kleiner ist als diejenige der Feldstärken im Faserzentrum E_3^i , konnte damit auf einen mechanischen Einfluß zurückgeführt werden.

Es ist hierbei zu beachten, daß diese Aussagen für einen Längspfad durch das Faserzentrum gewonnen wurden. Zum Vergleich wurden für eine besonders dicke Faser Längspfade durchs Zentrum und entlang des Faserrandes in Abb. 4.22 dargestellt. Am Faserende ($z = +3$ mm) sind die resultierenden Gesamtverrückungen wegen der Kopplung der Freiheitsgrade gleich groß. Für den Pfad entlang des Faserrandes führt der piezoelektrische Anteil allein zu der ideal zu erwartenden Verrückung $d_{33} \cdot V_0$. Wegen der auf dem Faserrand vorgegebenen elektrischen Spannungen entspricht das

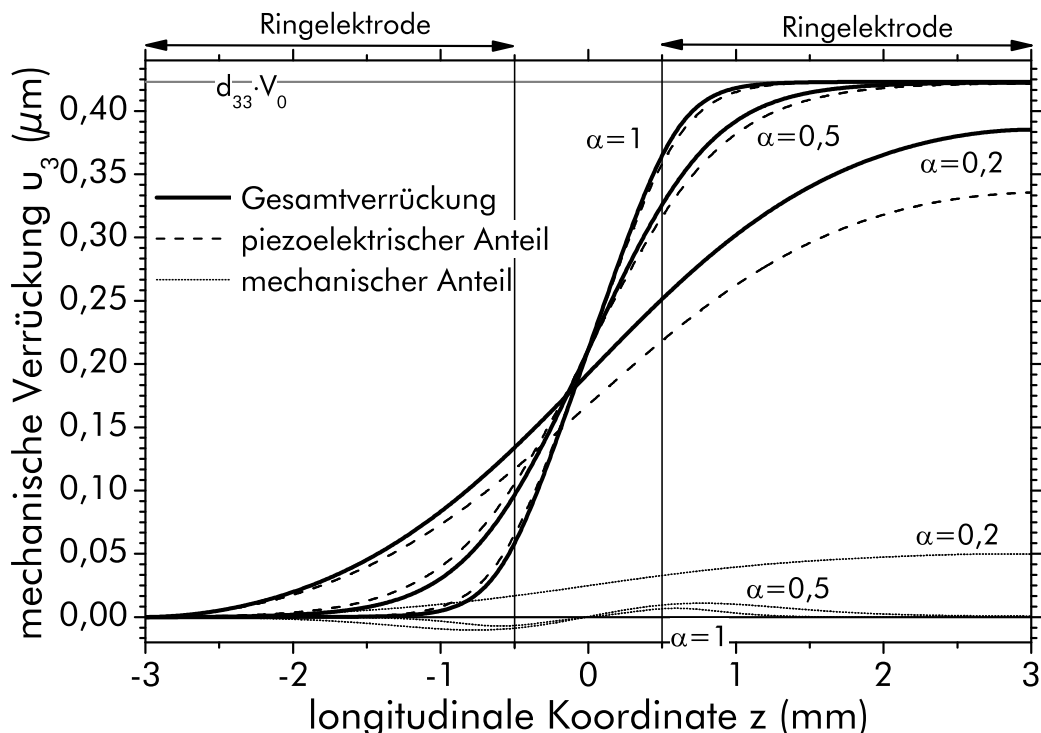


Abb. 4.21: Analyse der mechanischen Verrückung u_3 entlang eines Längspfades durch den Mittelpunkt der Faser für verschiedene Elektrodenabstandsverhältnisse α . Die Gesamtverrückung setzt sich jeweils zusammen aus einem piezoelektrischen und einem mechanischen Anteil. (Geometrieparameter: $h = 6$ mm, $a = 1$ mm, $\beta = 100$ %.)

den Erwartungen. Da das elektrische Feld aber nicht homogen in die Faser eindringt, wird die elektrische Feldstärkekomponente E_3 zum Faserzentrum hin kleiner, wie das im zum Vergleich angegebenen Pfad gesehen werden kann. Durch die Kopplung der u_3 -Freiheitsgrade kommt es aber zusätzlich noch zu mechanischen Spannungen, die sich je nach Abstand vom Faserzentrum unterschiedlich auswirken. Wie bereits diskutiert, wirken sie im Faserzentrum insgesamt dehnend. Am Faserrand, wo die piezoelektrische Verrückung maximal ist, wirken sie jedoch stauchend.

Für den Pfad entlang des Außenrandes der Faser sind die piezoelektrischen Anteile für $z \geq 0,5$ mm größer als $d_{33} \cdot V_0$. Das kann auf die Unstetigkeit der elektrischen Spannung am Faserrand zurückgeführt werden, wie sie durch die Randbedingung der Ringelektrode vorgegeben wird. Bei feinerer Vernetzung wird diese Abweichung kleiner und der piezoelektrischen Anteil nähert sich dem erwarteten an.

In Abb. 4.23a auf Seite 58 ist diese Analyse für eine $h = 3$ mm lange Faser abgebildet. Wie bereits diskutiert, wird durch die geringere Länge der gemessene Piezoeffizient deutlich verringert. Der mechanische Einfluß trägt hier deutlich stärker zur Gesamtverrückung bei, da durch die geringere Faserlänge der Effekt der Einspannung zu ausgeprägteren mechanischen Spannungen führt.

Wird die Randbedingung freier Deckflächen für eine 6 mm lange Faser betrachtet, so stellt sich die Analyse der Verrückungen wie in Abb. 4.24 auf Seite 59 dar. Die Auswertung geschah dabei für einen Längspfad entlang der Faseraußenseite (Abb. 4.24a) und einen durch das Faserzentrum (Abb. 4.24b). Es ist zu beachten, daß hier wiederum das numerische Artefakt wie in Abb. 4.22 auftritt.

Die Unterschiede zu den Ergebnissen mit gekoppelten u_3 -Freiheitsgraden sind gering. Ein Vergleich der mechanischen Anteile der Verrückung am Faserende ($z = 3$ mm)

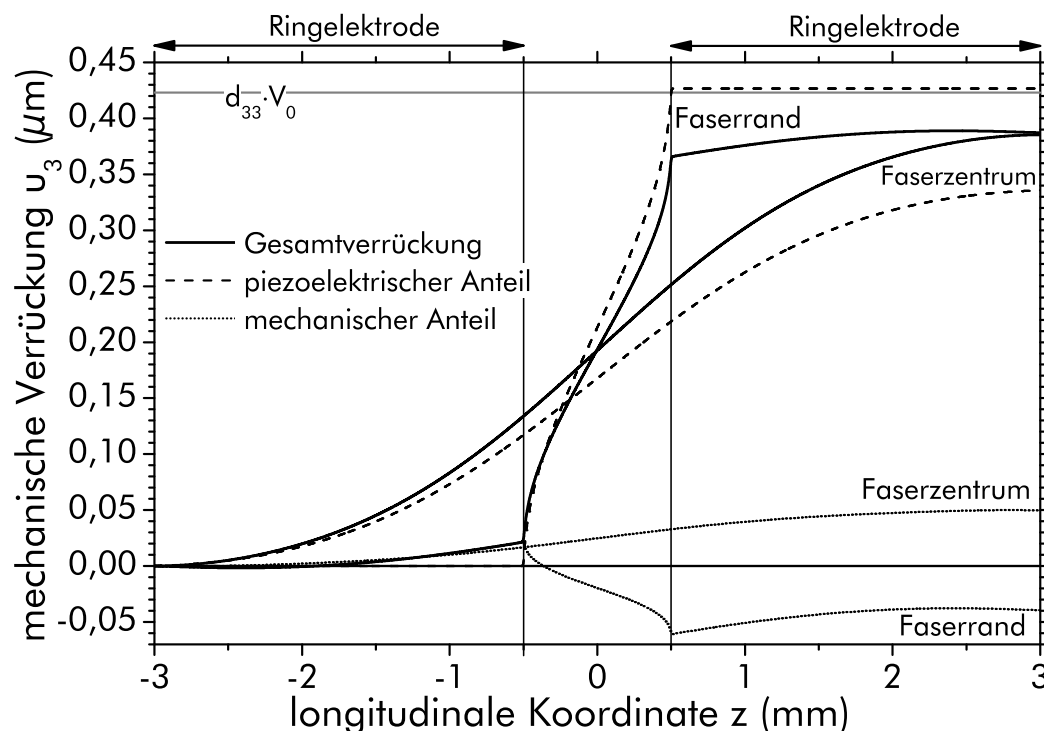
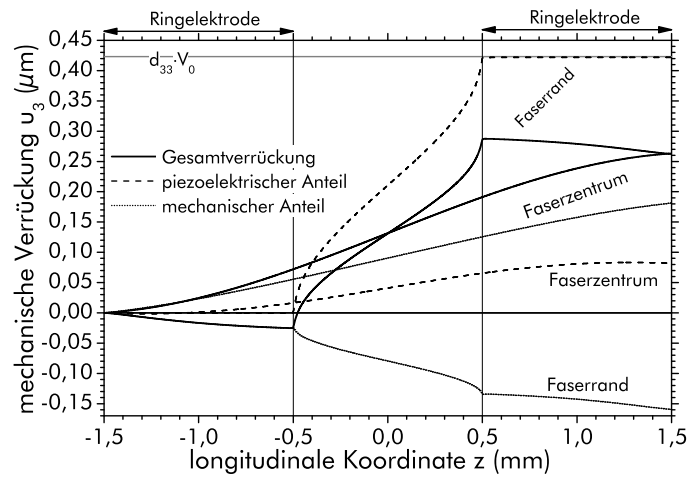
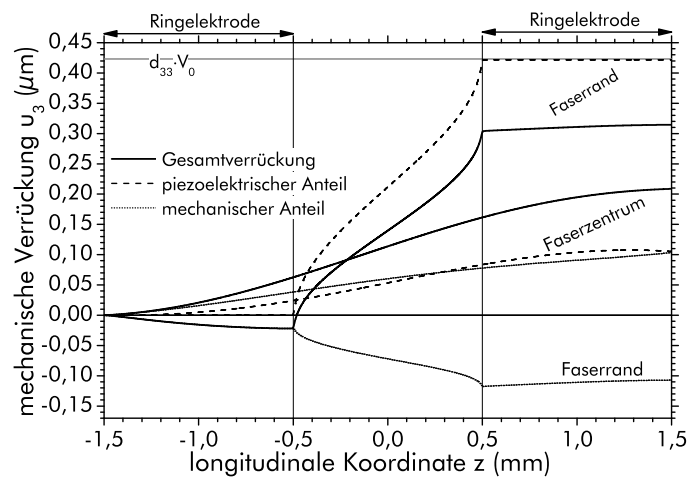


Abb. 4.22: Analyse der mechanischen Verrückung u_3 entlang eines Längspfades durch den Mittelpunkt und entlang des Randes einer 6 mm langen Faser für das Elektrodenabstandsverhältnis $\alpha = 0,2$. Die Gesamtverrückung setzt sich jeweils aus einem piezoelektrischen und einem mechanischen Anteil zusammen.



(a) Gekoppelte u_3 -Freiheitsgrade der Deckfläche

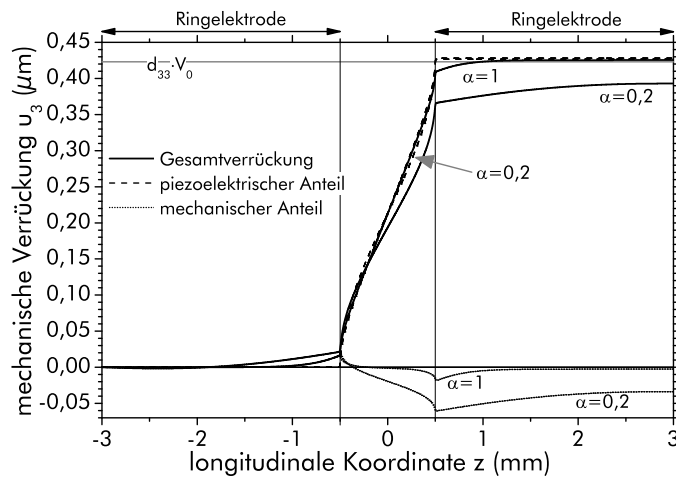


(b) Freie Deckfläche

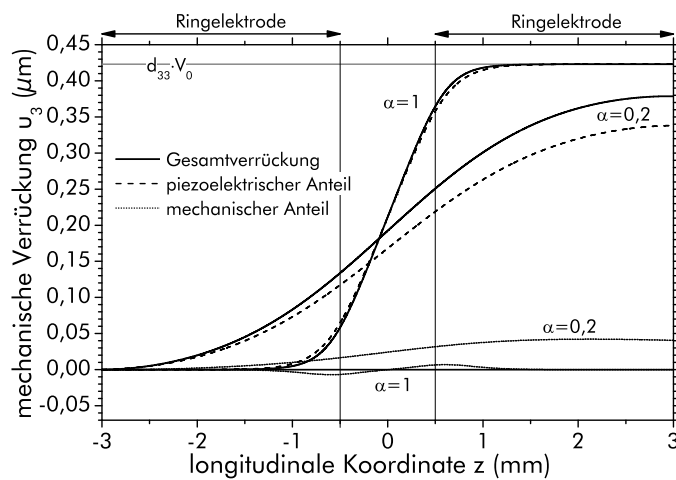
Abb. 4.23: Analyse der mechanischen Verrückung u_3 entlang eines Längspfades durch den Mittelpunkt und entlang des Randes einer 3 mm langen Faser für verschiedene Randbedingungen. (Geometrieparameter: $\alpha = 0,2$, $a = 1\text{ mm}$, $\beta = 100\%$.)

zeigt, daß sie bei ungekoppelter Deckfläche für ein Elektrodenabstandsverhältnis $\alpha = 0,2$ für den Faserrand etwas höher und für die Fasermitte etwas geringer sind. Hierin zeigt sich der Effekt der Mittelung bei der Kopplung der Freiheitsgrade. Für diese Faserlänge ist der mechanische Einfluß dieser Mittelung gering.

Für kürzere Fasern ist er deutlich stärker ausgeprägt, wie im Vergleich der beiden Randbedingungen in Abb. 4.23 am Beispiel einer 3 mm langen Faser gezeigt wird. Obwohl die Unterschiede zwischen den Randbedingungen (gekoppelte u_3 -Freiheitsgrade der Deckfläche und freie Deckfläche) das mechanische Spannungsfeld offensichtlich deutlich beeinflussen, spielen diese Unterschiede für den gemessenen Piezoeffizienten kaum eine Rolle, wie bereits in Abb. 4.7 auf Seite 41 gezeigt wurde. Der mechanische Anteil der Verrückung hat bei den gekoppelten Freiheitsgraden einen größeren Anteil an der Gesamtverrückung. Bei kurzen Fasern und sehr kleinen Elektrodenabstandsverhältnissen verursacht diese Randbedingung zusammen mit der Einspannung der Faser demnach eine signifikante Klemmung. Für Fasern mit im Experiment verwendetem Elektrodenabstand ($\alpha \geq 1$) wird aber selbst für die 3 mm langen Fasern dieser Einfluß irrelevant. Die mechanischen Anteile der Verrückung sind dort für beide Randbedingungen praktisch identisch.



(a) Längspfad entlang der Außenseite



(b) Längspfad durch die Fasermitt

Abb. 4.24: Analyse der mechanischen Verrückung u_3 für die Randbedingung einer freien Oberfläche entsprechend einer lose aufliegenden Elektrodenplatte. (Geometrieparameter: $h = 6 \text{ mm}$, $a = 1 \text{ mm}$, $\beta = 100 \%$.)

Für mit Ring- und zwei Deckelektroden (vgl. Abb. 4.5c auf Seite 37) versehenen Fasern wird der longitudinale Piezokoeffizient entsprechend der Modellierungen exakt gemessen. Mit der Pfadanalyse soll diesem Befund nachgegangen werden. Hierfür wurden gekoppelte u_3 -Freiheitsgrade an der Topelektrode angenommen. Für eine 3 mm lange Faser zeigt sich das Ergebnis in Abb. 4.25 auf Seite 60.

Am oberen Faserende wird die vollständige Verrückung erreicht, die für ein homogenes Feld E_3^n zu erwarten wäre. Für den Längspfad durch das Faserzentrum ist die Verrückung vollständig piezoelektrischen Ursprunges. Wesentliche Anteile stammen aus der Region unterhalb der Ringelektroden. Der Verlauf ist beinahe linear, entsprechend einer fast homogen auf der Längsachse verteilten Feldstärke E_3 . Abb. 4.16c–links auf Seite 49 bestätigt dies, indem die Feldstärke im Faserzentrum homogen und ideal longitudinal ausgerichtet ist, obgleich ihr Betrag deutlich kleiner als die nominelle Feldstärke E_3^n ist. Im Falle homogener Feldverteilung reproduziert aber die Definition (4.7) für den gemessenen exakt den longitudinalen Piezokoeffizienten, unabhängig von der Größe der Feldstärke.

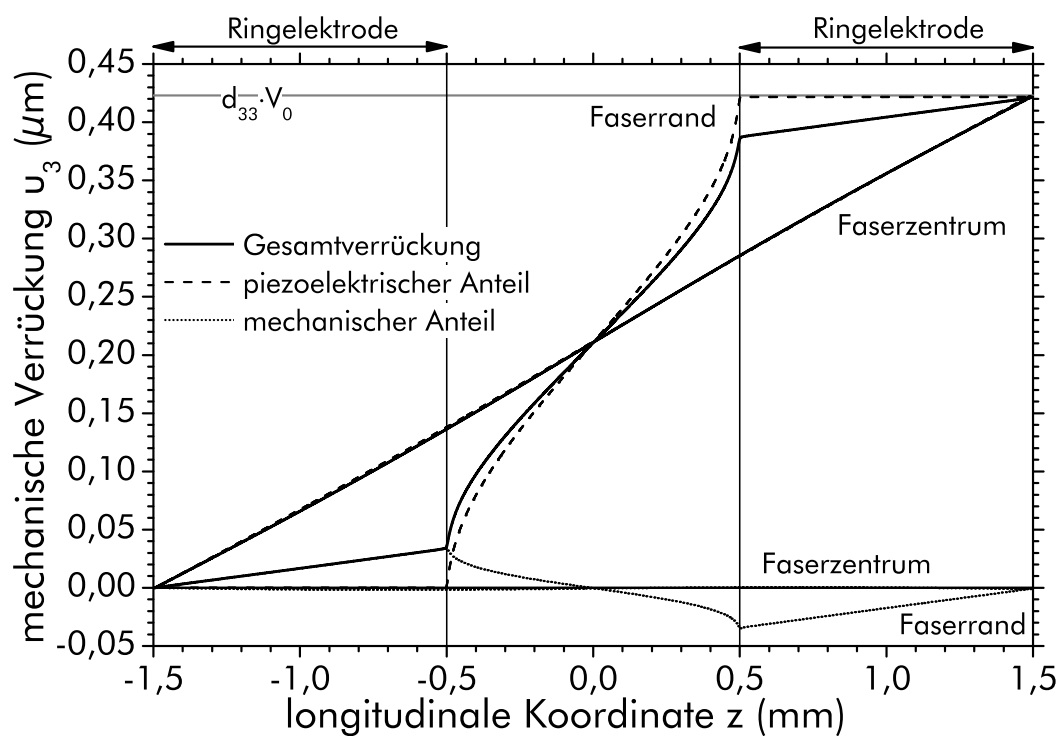


Abb. 4.25: Analyse der mechanischen Verrückung u_3 für Längspfade durch das Faserzentrum und entlang der Außenseite einer 3 mm langen Faser mit dem Elektrodenabstandsverhältnis $\alpha = 0,2$. Die Elektroddierung geschah mit Ringelektroden ($\alpha = 1$ mm, $\beta = 100\%$) und zwei Deckelektroden.

Diese Analyse führt deutlich die Limitierungen des benutzten Modells vor Augen. Die Voraussetzung einer ideal longitudinal gepolten Faser bewirkt, daß unabhängig von der Größe der elektrischen Feldstärke in der Faser sich der volle Piezoeffizient d_{33} ausgebildet hat, der für homogene Verteilung der elektrischen Feldstärkekomponente E_3 im Inneren auch tatsächlich als d_{33}^m gemessen wird.

Kapitel 5

Modellierung dielektrischer Eigenschaften von 0-3-Kompositen

5.1 Grundlegende Überlegungen

5.1.1 Analytische Näherungsmethoden für die effektive Permittivität

Wie in Kap. 2.1.2 ausgeführt wurde, ist für elektrostatische Probleme im ladungsfreien Raum die Verteilung des elektrischen Potentials durch die Laplace-Gleichung

$$\Delta \Phi = 0 \quad (5.1)$$

gegeben. Daneben ist die Laplacegleichung sinngemäß auch auf die Behandlung von effektiven Stoffgrößen wie beispielsweise der ohmschen Leitfähigkeit, der magnetischen Permeabilität oder der Wärmeleitfähigkeit anwendbar (vgl. zum Beispiel ^[111]). Wegen dieser Bedeutung sind in verschiedenen Fachgebieten Näherungsformeln für die Behandlung inhomogener Strukturen entwickelt und in Experimenten an verschiedenen physikalischen Systemen überprüft worden. Um die numerischen Ergebnisse der hier verwendeten FEM zu testen, stehen somit umfangreiche Referenzsysteme zur Verfügung, die hier allerdings nur in einer engen Auswahl angesprochen werden sollen.

Die Feldstärke einer in eine Matrix eingebetteten dielektrischen Kugel im ursprünglich homogenen elektrischen Feld kann analytisch berechnet werden, indem auf die bekannte Struktur der Lösung für die Laplace-Gleichung in Kugelkoordinaten zurückgegriffen wird.^[45] Die Feldstärke innerhalb der Kugel ist demnach

$$\mathbf{E}_{\text{Kugel}} = \frac{3\epsilon_{\text{Matrix}}}{2\epsilon_{\text{Matrix}} + \epsilon_{\text{Kugel}}} \mathbf{E}_0. \quad (5.2)$$

Auch für den verallgemeinerten Fall eingebetteter Ellipsoide sind geschlossene Lösungen bekannt, wobei deren Geometrieparameter in Form nurmehr numerisch zu ermittelnder Integrale in die Lösung eingehen.^[45] Wird ein solcher Materialverbund in ein ursprünglich homogenes elektrisches Feld eingebracht, so ist die Polarisierung im Inneren der dielektrischen Ellipsoide ebenfalls homogen.^[41]

Für die Feldstärke im Inneren eines in eine Matrix eingebrachten unendlich langen Zylinders kann ebenfalls eine geschlossene Lösung angegeben werden. Wird das am Komposit anliegende ursprünglich homogene elektrische Feld als senkrecht zur Zylinderachse angenommen, dann ist die Feldstärke im Zylinderinneren konstant^[41]

$$\mathbf{E}_{\text{Zylinder}} = \frac{2\epsilon_{\text{Matrix}}}{\epsilon_{\text{Matrix}} + \epsilon_{\text{Zylinder}}} \mathbf{E}_0. \quad (5.3)$$

Die Feldverteilung bei mehreren eingebetteten Partikeln ist nur für wenige Spezialfälle analytisch behandelt worden. Ein interessantes Beispiel sind zwei eingebettete leitfähige – oder äquivalent dazu dielektrische – Kugeln, die STOY gelöst hat. Dabei

hat er zwei Konfigurationen betrachtet, in denen die Verbindungslinie ihrer Mittelpunkte parallel oder senkrecht zum anliegenden Feld orientiert ist.^[112,113]

Weitere Betrachtungen beziehen sich auf den wichtigen Fall von dielektrischen Partikeln auf Gittern. Kugeln auf einem kubischen Gitter wurden bereits von RAYLEIGH mit einer Multipolentwicklung behandelt.^[114] Diese führte er bis zur zweiten Ordnung aus.^[115] GÜNTHER ET AL. gelang mit Hilfe einer Multipolentwicklung höherer Ordnung, die numerisch ausgewertet wurde, effektive Materialeigenschaften für kugelförmige Einschlüsse auf verschiedenen kubischen Gittern (sc, fcc, bcc) zu berechnen.^[111] Daneben konnten sie unter Annahmen zur Verteilungsfunktion die resultierenden effektiven Eigenschaften zufällig verteilter Kugeln berechnen. Der Vergleich mit experimentellen Ergebnissen aus verschiedenen Bereichen (elektrische Leitfähigkeit, Permittivität) zeigte dabei eine gute Übereinstimmung. Allerdings wird das Perkolationsverhalten in den betrachteten Ordnungen der Reihenentwicklung nicht gut widerspiegelt. Die Reihenentwicklung von MCKENZIE und MCPHEDRAN für verschiedene kubische Gitter (sc, fcc, bcc) behebt diesen Mangel.^[116,117]

5.1.2 Näherungsformeln für die effektive Permittivität

In der Literatur wird eine Vielzahl von Näherungsformeln für die effektive Permittivität diskutiert, bei welchen die meist kugelförmig angenommenen Partikel zufällig verteilt vorausgesetzt werden.

Ein oft verwendetes Beispiel stellt die MAXWELL-GARNETT-Formel dar.^[118] Sie kann unter der Voraussetzung hinreichend weit entfernter Partikel und schnell genug räumlich abklingender Wechselwirkungen hergeleitet werden. Dazu kann die volumetrische Mittelwertbildung herangezogen werden, wenn mit dem Volumenanteil v der eingebetteten Kugeln sowohl die dielektrische Verschiebung als auch das elektrische Feld gemittelt werden.^[119] Dabei wird auf das Ergebnis (5.2) zurückgegriffen. Das führt schließlich auf

$$\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_{\text{Matrix}} \frac{3 + 2 \left(\frac{\epsilon_{\text{Matrix}}}{\epsilon_{\text{Kugel}}} - 1 \right) (1 - v)}{3 + \left(\frac{\epsilon_{\text{Matrix}}}{\epsilon_{\text{Kugel}}} - 1 \right) (2 + v)}. \quad (5.4)$$

Der gleiche (umgeformte) Zusammenhang wird in der Literatur auch nach KERNER benannt, der einen entsprechenden Ausdruck für leitfähige Komposite hergeleitet hat.^[120]

In der Literatur dokumentierte Experimente belegen, daß diese Formel nur für kleine Volumenanteile eine angemessene Beschreibung der effektiven Eigenschaften liefert. Bei höheren Volumenanteilen sind die Wechselwirkungen der eingebetteten Partikel nicht mehr zu vernachlässigen und bessere Näherungen sind vonnöten.

In einer Reihe von ausführlichen Artikeln hat BRUGGEMANN Formeln zur Bestimmung verschiedener effektiver physikalischen Eigenschaften für unterschiedliche Typen inhomogener Aggregate hergeleitet.^[121–124] Seine Herleitungen begründeten die Effektive-Medien-Theorie, nach der ein jeweils repräsentativer Teil des Komposits umhüllt von einer Matrix mit der effektiven Permittivität gedacht wird. Auch für die effektiven Permittivitäten verschiedener Strukturen gibt er so Zusammenhänge an.^[121] Für eine von ihm »ungeordnetes Kugelaggregat« genannte Struktur gelangt er auf

$$v_1 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_{\text{eff}}}{\epsilon_1 + 2\epsilon_{\text{eff}}} + v_2 \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{\text{eff}}}{\epsilon_2 + 2\epsilon_{\text{eff}}} = 0, \quad (5.5)$$

einen Zusammenhang, der in einer Arbeit LANDAUERS für den Fall leitfähiger Komposite mit kugelförmigen Einschlüssen hergeleitet wird und von manchen anderen

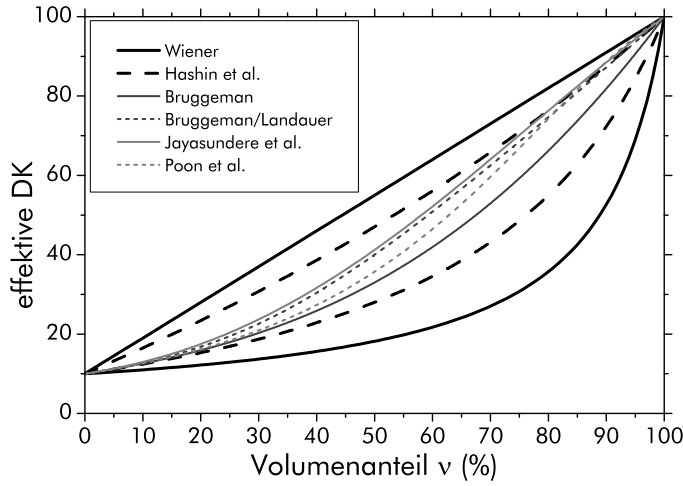
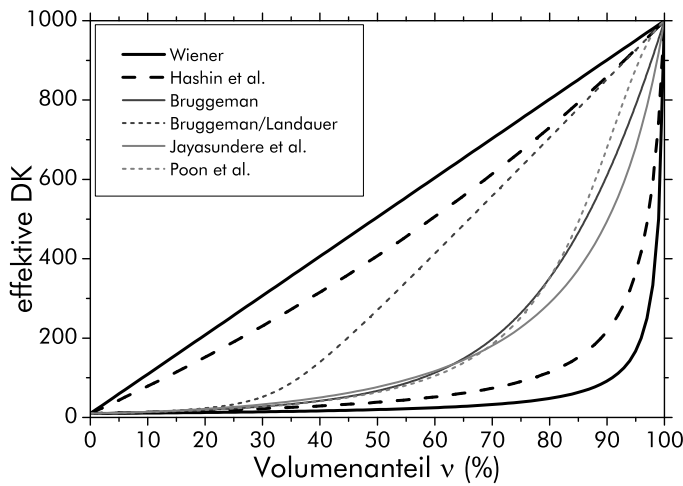
(a) $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$ und $\epsilon_{\text{Einschluß}} = 100$ (b) $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$ und $\epsilon_{\text{Einschluß}} = 1000$

Abb. 5.1: Effektive relative Permittivität gemäß einiger Näherungsformeln für verschiedene DK-Kontraste zwischen Einschlüssen und Matrix. Dargestellt sind die Formeln: nach Bruggeman/Landauer (5.6), die Bruggeman-Formel für »porphyrische Aggregate« (5.7), die Formel nach Jayasundere et al. (5.8) und die nach Poon et al. (5.9). Daneben sind die Grenzformeln nach Wiener (5.10) und die nach Hashin et al. (5.11) angegeben. Die untere Hashin-Grenze entspricht der Näherungsformel nach Maxwell-Garnett (5.4).

Autoren als solcher zitiert wird.^[125] Der Ausdruck (5.5) ist symmetrisch bezüglich der Rolle der Konstituenten und stellt eine quadratische Gleichung für die effektive Permittivität dar. Bedeutsam ist, daß er eine Perkolationschwelle voraussagt.^[126] Aus der Umstellung nach der effektiven Permittivität erhält man die Lösung (die andere ergibt negative Permittivitäten und ist deswegen nicht von Belang)

$$\epsilon_{\text{eff}} = \frac{1}{4} \left(-3v_2\epsilon_1 + 2\epsilon_1 \underbrace{-\epsilon_2 + 3\epsilon_2 v_2}_{\text{}} + \sqrt{8\epsilon_1\epsilon_2 + \left(-3v_2\epsilon_1 + 2\epsilon_1 \underbrace{-\epsilon_2 + 3\epsilon_2 v_2}_{\text{}} \right)^2} \right). \quad (5.6)$$

Bedenkt man, daß wegen der gleichen physikalischen Struktur der Grundgleichungen die Permittivitäten auch mit Leitfähigkeiten identifiziert werden können, so wird die Perkolations-eigenschaft offensichtlich, indem man $\epsilon_1 = 0$ setzt. Dann sind in (5.6) nurmehr die unterklammerten Terme ungleich Null, so daß die effektive Leitfähigkeit für $v_2 \leq 1/3$ identisch Null ist und für höhere Volumenanteile linear bis ϵ_2 zunimmt.

Die Herleitung von (5.6) beinhaltet die Voraussetzung, daß beide Konstituenten kugelförmig im Komposit vorliegen. Für Einsprengsel von Kugeln in einem Medium, das von ihm so genannte »porphyrische Kugelaggregat« gelangt Bruggemann zu

$$1 - v_{\text{Kugel}} = \frac{\epsilon_{\text{Kugel}} - \epsilon_{\text{eff}}}{\epsilon_{\text{Kugel}} - \epsilon_{\text{Matrix}}} \sqrt[3]{\frac{\epsilon_{\text{Matrix}}}{\epsilon_{\text{eff}}}}, \quad (5.7)$$

einer Gleichung dritten Grades für die effektive Permittivität. Ihre geschlossene Lösung ist umfangreich und wird deswegen in der Literatur kaum benutzt, läßt sich aber mit Computeralgebra-Programmen handhaben.

Die elektrostatischen Wechselwirkung zwischen eingebetteten Kugeln wurde von JAYASUNDERE ET AL. teilweise berücksichtigt.^[127] Dies führt sie für die effektive Permittivität auf den Ausdruck

$$\epsilon^{\text{eff}} = \frac{(1 - \nu_{\text{Kugel}})\epsilon_{\text{Matrix}} + \nu_{\text{Kugel}}\epsilon_{\text{Kugel}} \frac{3\epsilon_{\text{Matrix}}}{\epsilon_{\text{Kugel}} + 2\epsilon_{\text{Matrix}}} \left(1 + 3\nu_{\text{Kugel}} \frac{\epsilon_{\text{Kugel}} - \epsilon_{\text{Matrix}}}{\epsilon_{\text{Kugel}} + 2\epsilon_{\text{Matrix}}}\right)}{(1 - \nu_{\text{Kugel}}) + \nu_{\text{Kugel}} \frac{3\epsilon_{\text{Matrix}}}{\epsilon_{\text{Kugel}} + 2\epsilon_{\text{Matrix}}} \left(1 + 3\nu_{\text{Kugel}} \frac{\epsilon_{\text{Kugel}} - \epsilon_{\text{Matrix}}}{\epsilon_{\text{Kugel}} + 2\epsilon_{\text{Matrix}}}\right)}, \quad (5.8)$$

welcher von POON ET AL. weiter zu

$$\frac{\epsilon^{\text{eff}}}{\epsilon_{\text{Matrix}}} = 1 + \frac{\nu_{\text{Kugel}} \left(\frac{\epsilon_{\text{Kugel}}}{\epsilon_{\text{Matrix}}} - 1\right)}{\nu_{\text{Kugel}} + \frac{1}{3}(1 - \nu_{\text{Kugel}}) \left(\frac{\epsilon_{\text{Kugel}}}{\epsilon_{\text{Matrix}}}(1 - \nu_{\text{Kugel}}) + \nu_{\text{Kugel}} + 2\right)} \quad (5.9)$$

verbesserte wurde.^[128] Die Autoren setzen nicht voraus, daß $\epsilon_{\text{Kugel}} > \epsilon_{\text{Matrix}}$ ist. Sie motivieren ihre Verbesserung durch ein von JAYASUNDERE ET AL. falsch angesetztes Grenzwertverhalten der inneren Feldstärke für $\nu \rightarrow 1$. Modellierungen mit der FEM ergaben, daß die Feldstärke im Kugelmittelpunkt tatsächlich von POON ET AL. besser als von letztgenannten angenähert wurde.

Einen Überblick über die hier angesprochenen Näherungsformeln bei verschiedenen DK-Kontrasten gibt Abb. 5.1 auf Seite 63.

5.1.3 Grenzformeln für die effektive Permittivität

Für die Abschätzung der effektiven Permittivität von komplexen Strukturen sind Grenzen hilfreich, die sich aus den Permittivitäten der Konstituenten sowie ihrem Volumenanteil ergeben sollten. Eine Abschätzung ohne Beschränkung auf bestimmte Formen oder Anordnungen der eingebetteten Partikel ist Wiener gelungen.^[121] Sie geht aus der Betrachtung in Reihe oder parallel geschalteter Kondensatoren hervor, woraus

$$\epsilon_{\min} = \frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\nu_2 \epsilon_1 + (1 - \nu_2) \epsilon_2} \quad \text{und} \quad \epsilon_{\max} = (1 - \nu_2) \epsilon_1 + \nu_2 \epsilon_2 \quad (5.10)$$

folgt. Allerdings sind diese Grenzen recht weit. Es sind zusätzliche Annahmen notwendig, um engere Grenzen zu erhalten. So konnten HASHIN ET AL. unter der Voraussetzung makroskopisch isotroper und homogener Verbünde Grenzen ableiten, wobei sie einen Variationsansatz der (dort) magnetostatischen Energie verwendet haben.^[129] Die Grenzen können als

$$\epsilon_{\min}^{\text{H}} = \epsilon_1 \frac{3 + (1 + 2\nu_2) \left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} - 1\right)}{3 + (1 - \nu_2) \left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} - 1\right)} \quad \text{und} \quad \epsilon_{\max}^{\text{H}} = \epsilon_2 \frac{3 + 2\nu_2 \left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} - 1\right)}{3 + (3 - \nu_2) \left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} - 1\right)} \quad (5.11)$$

geschrieben werden, wobei für die Benennung der Grenzen willkürlich $\epsilon_2 > \epsilon_1$ angenommen wurde. Durch wechselseitiges Austauschen von $\epsilon_1 \leftrightarrow \epsilon_2$ und $\nu_2 \leftrightarrow (1 - \nu_2)$ geht die eine Grenze in die andere über. Die untere Grenze entspricht der Mischungsformel (5.4) von Maxwell-Garnett. Das ist plausibel, da diese unter der Annahme wechselwirkungsfreier Partikel hergeleitet wurden. Die Wechselwirkung sollte die effektive Permittivität erhöhen.

Daß sich die verschiedenen Näherungsformeln für die effektive Permittivität gut innerhalb der beiden Wiener- beziehungsweise Hashin-Grenzen einordnen, ist Abb. 5.1 auf Seite 63 zu entnehmen. Offensichtlich sind letztere deutlich enger. Die untere

Hashin-Grenze bleibt (bei endlichen ϵ_1) grundsätzlich beschränkt. Dadurch gelingt eine Abschätzung der effektiven Permittivität für den Spezialfall $\epsilon_2 \rightarrow \infty$, der leitfähigen Einschlüssen entspricht. Die effektive Permittivität eines makroskopisch isotropen Komposits mit Einschlüssen unendlicher Permittivität ist demnach mindestens

$$\epsilon_{\min}^H \Big|_{\epsilon_2 \rightarrow \infty} \longrightarrow \epsilon_1 \cdot \frac{1 + 2\nu_2}{1 - \nu_2}. \quad (5.12)$$

5.1.4 Elektrische Feldstärkeverteilung

Die Durchschlagsfestigkeit ist für die Anwendung von 0-3-Kompositen als Energiespeicher entscheidend, weil sie die erzielbare Energiedichte begrenzt. Wegen des DK-Kontrastes zwischen Matrix und Partikel treten die höchsten Feldstärken in den Randschichten und den benachbarten Polymerbereichen auf. Selbst wenn man vereinfachend annimmt, daß der Durchschlag im Wesentlichen durch die Polyeigenschaften bestimmt ist, sieht man sich einer Vielzahl von Durchbruchmechanismen gegenüber. DISSADO ET AL. geben einen umfassenden Überblick darüber.^[130] Die Durchbruchmechanismen sind mikroskopischer Natur und auf komplexe Weise vom Material und seiner Prozessierung abhängig. Auch wenn die Mechanismen bekannt sind, zeigt sich, daß die Durchbruchfeldstärken oder die Lebensdauern auch in gleichartigen Proben statistisch verteilt sind, so daß für viele Fragestellungen auch eine rein statistische Modellbildung z. B. im Rahmen einer Weibull-Analyse, zielführend sein kann. Dies umso mehr, da das betrachtete Verbundsystem einen nochmals höheren Komplexitätsgrad besitzt, als die reinen Materialsysteme. In einem Kontinuumstheoretischen Modell können nur Teilaspekte abgebildet werden. Ein solcher wichtiger Gesichtspunkt betrifft die Verteilung der inneren Feldstärken und ihre Abhängigkeit von der Strukturierung der Komposite.

Unter *Verteilung* ist hierbei zweierlei gemeint: zum einen die *örtliche* Abhängigkeit, zum anderen die *Häufigkeit* der elektrischen Feldstärke. Als potentielle Schwachstellen des Dielektrikums können Bereiche mit starken Feldstärkeüberhöhungen gegenüber der nominell anliegenden elektrischen Feldstärke gelten. Diese können auch im Rahmen der Kontinuumstheorie identifiziert werden. Die Feldstärkehäufigkeitsverteilung liefert dabei eine quantitative *globale* Aussage, welche den Vergleich verschiedener Kompositkonfigurationen erlaubt.

Das Problem der Feldstärkeverteilung in Kompositen wird in der Literatur deutlich seltener angesprochen als das der effektiven Permittivitäten. Eine analytische Berechnung der Zustandsdichtefunktion gelang CULE ET AL. für den Fall der Hashin-Shtrikman-Konstruktion (vgl. ^[129]).^[131] Hierzu wird der Komposit als eine Packung unterschiedlich großer Kompositzylinder angesehen, die jeweils aus einem zylindrischen Kern mit einer konzentrischen hohlzylindrischen Hülle bestehen. Stattdessen kann aber auch ein einzelner Kompositzylinder betrachtet werden, der in eine Matrix mit seiner effektiven Permittivität eingebettet ist.

Die in der Literatur dokumentierten numerischen Arbeiten zum Thema beschränken sich zumeist auf nicht quantitativ ausgewertete Kontur-Plots der Verteilungen von Feldstärke oder elektrischer Spannung.

5.1.5 Modellierung mit der Finite-Elemente-Methode

Die elektrostatischen Eigenschaften von Elementarzellen wurden mit Hilfe der FEM-Software ANSYS® 11.0 modelliert.^[107] Das Geometriemodell der Komposite wurde zweidimensional oder dreidimensional erstellt. Es fand das dreidimensionale elektrostatische Element Solid122 Verwendung und für zweidimensionale Berechnungen

wurde das Element `Plane121` eingesetzt.^[92] Allen hier vorgestellten Berechnungen liegt eine isotrope Permittivität zugrunde. Dadurch wird ein lineares konstitutives Gesetz verwendet, wie es in (2.3) angegeben ist.

Für die Berechnungen wurde die elektrische Feldkonstante $\epsilon_0 = 1$ gesetzt. Wegen des linearen Materialgesetzes ist das für die ermittelten effektiven Permittivitäten und Feldstärken ohne Bedeutung. Diese sind immer *relativ* zu sehen, bei letzteren zur anliegenden Feldstärke.

Die Randbedingungen zur Berechnung der DK aus dem Modell heraus sind in Abb. 5.2 dargestellt. Die Elektroden werden durch gekoppelte Spannungsfreiheitsgrade als Äquipotentialflächen repräsentiert. Auf der einen Elektrode werden jeweils entgegengesetzt gleichgroße Ladungen Q und $-Q$ aufgebracht, was in Form einer Flächenladungsdichte $q = Q/A$ geschieht. Das elektrische Potential an der einen Elektrode wird willkürlich Null gesetzt, um die elektrische Spannung zwischen beiden Elektroden nach der Berechnung der numerischen Lösung einfacher ermitteln zu können.

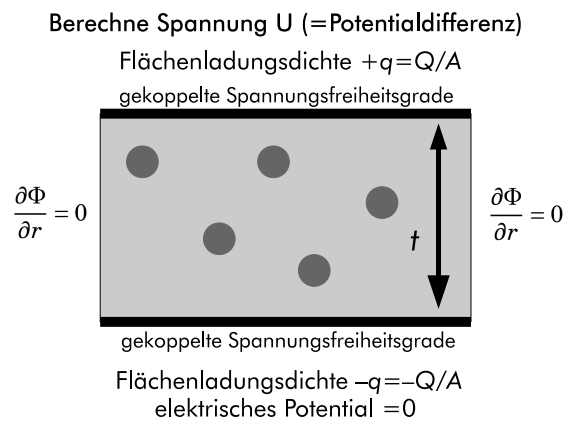


Abb. 5.2: Randbedingungen am FEM-Modell zur Bestimmung der effektiven DK. Aus der Vorgabe der Flächenladungsdichte wird die resultierende Spannung an der modellierten Elementarzelle berechnet.

Jede modellierte Elementarzelle stellt somit einen Plattenkondensator dar. Seine Kapazität kann einerseits aus deren Definition und andererseits aus dem Zusammenhang für den idealen Plattenkondensator ausgedrückt werden

$$C = \frac{Q}{U} = \epsilon_0 \epsilon_r \frac{A}{t}, \tag{5.13}$$

wodurch die relative DK ϵ_r aus Geometrieparametern, Randbedingungen und der aus der Lösung ermittelten Spannung ermittelt werden kann.

Durch die Modellierung ist implizit vorgegeben, daß die Normalenableitung des elektrischen Potentials Φ verschwindet, das heißt

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right|_{\text{Seitenflächen}} = 0. \tag{5.14}$$

Dadurch wirkt jede Seitenfläche mit dieser Bedingung als Symmetrie-Ebene der Elementarzelle. Das rechtfertigt die Voraussetzung des idealen Plattenkondensators in (5.13). Andererseits wird dadurch eine Periodizität in das Modell eingebracht. Das ist bedeutsam für den Vergleich mit analytischen Näherungslösungen aber auch für die Darstellung von Kompositen mit zufällig verteilten Einschlüssen. JYLHÄ hat eine Mittelungsmethode entwickelt, welche die für alle drei kartesischen Achsen der Elementarzelle ermittelten effektiven Permittivitäten einbezieht.^[132,133] Dadurch können auch für Elementarzellen mit wenigen Partikeln gute Näherungen für eine Struktur mit zufällig verteilten Einschlüssen erhalten werden.

Um die (Häufigkeits-) Verteilung der elektrischen Feldstärke und der Energiedichte zu charakterisieren, wurden die Randbedingungen so gewählt, daß an den Elektroden ein elektrisches Potential vorgegeben war. Dem entspricht eine effektive Feldstärke U/t , auf welche diese Größen dann jeweils bezogen sind, da die konstitutiven Gleichungen linear sind.

5.2 Ergebnisse

5.2.1 Referenzlösung: Kugeln im kubischen Gitter

Um die Qualität der FEM-Lösung einzuschätzen, wird eine *exakte* analytische Lösung benötigt. Da die Randbedingungen der FEM automatisch ein Gitter implizieren, liegt es nahe, eine derartige Lösung heranzuziehen. Als Vergleich wurde der Aufsatz ^[116] von MCPHEDRAN ET AL. herangezogen, in welchem die effektive Leitfähigkeit für einen Verbund berechnet wurde, der aus leitfähigen Kugeln auf kubischem Gitter in einer nichtleitenden Matrix besteht.

Das entsprechende elektrostatische Modell wurde näherungsweise in der FEM realisiert, indem für die eingebettete Kugel eine DK von $\epsilon_{\text{Kugel}} = 10^6$ und für die Matrix $\epsilon_{\text{Matrix}} = 1$ angenommen wurde. Um die Position der Kugel in der Elementarzelle nicht notwendig auf den Mittelpunkt festzulegen, wurde eine würfelförmige Elementarzelle mit einer eingebetteten dielektrischen Kugel modelliert.

Der Einfluß der Vernetzung konnte eingeschätzt werden, indem Netze unterschiedlicher Elementzahl generiert wurden, welche Abb. 5.3 zeigt. Dabei wurde allerdings keine Optimierung hinsichtlich variabler Elementgrößen durchgeführt. Aus der exakten Lösung für eine einzelne Kugel im Dielektrikum kann geschlußfolgert werden, daß für nicht zu große Volumenanteile die Feldstärke im Kugellinneren weitgehend konstant sein sollte. Somit könnte im Inneren der Kugel die Elementzahl ohne starke Genauigkeitseinbußen deutlich geringer sein.

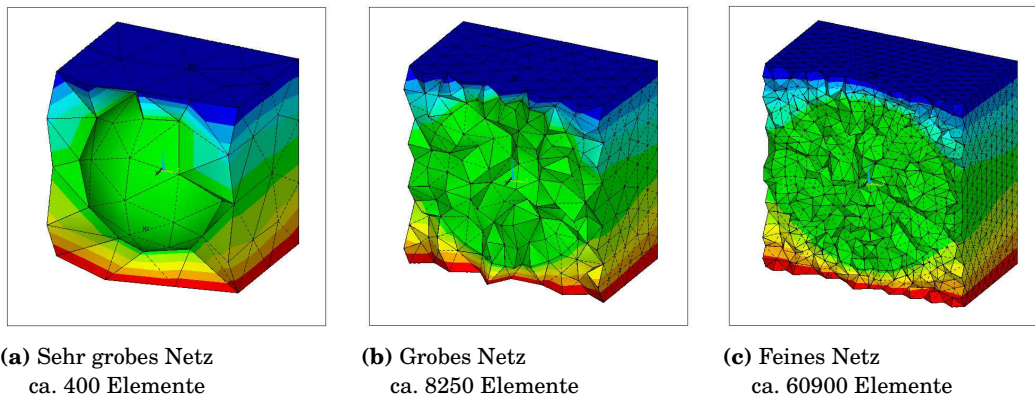


Abb. 5.3: Beispiel einer Elementarzelle unterschiedlich feiner Vernetzung für die Referenzrechnung. Der Volumenanteil der eingebetteten Kugel beträgt 30 %. Farblich codiert ist die Verteilung des elektrischen Potentials dargestellt.

Die Ergebnisse der Referenzrechnungen sind in Abb. 5.4 auf Seite 68 dargestellt und ein Überblick der Abweichungen von der exakten Lösung wird in Tab. 5.1 auf Seite 68 gegeben. Für Volumenanteile bis 30 % liefern alle Netze sehr gute Ergebnisse für die effektive DK und erst für Volumenanteile oberhalb von 50 % wird die numerische Genauigkeit kritisch. Numerisch anspruchsvoll sind offenbar Volumenanteile in der Nähe der Perkolationschwelle, die für das modellierte einfach-kubische Gitter

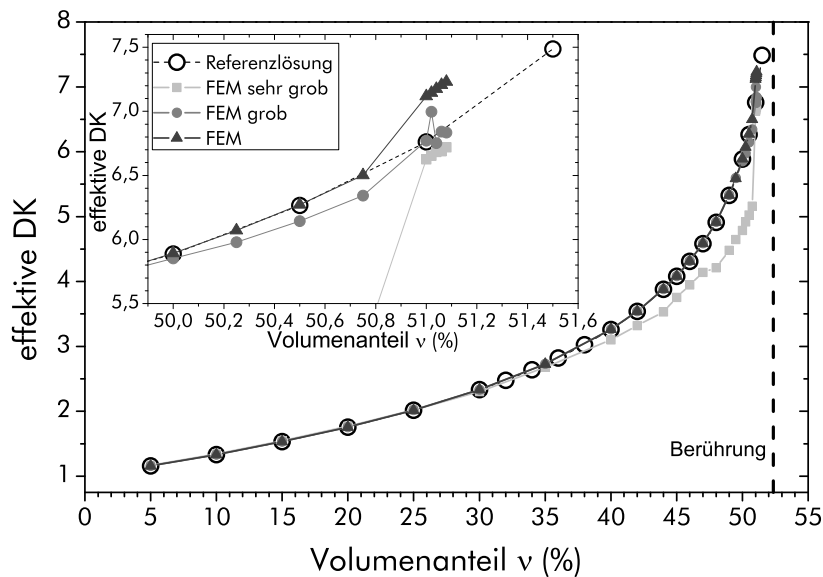


Abb. 5.4: Relative Abweichung der mit der FEM berechneten effektiven relativen Permittivität von der Referenzlösung bei verschiedenen Volumenanteilen v für verschiedene Netzgüten (vgl. Abb. 5.3).

bei $v_{\text{perk}} = \pi/6 \approx 52,4\%$ liegt. Somit können die FEM-Berechnungen als numerisch hinreichend genau eingeschätzt werden, um die effektive Permittivität zu ermitteln. Wenn die Kugeln in der Elementarzelle nicht kurz vor dem Berührungslimit sind, ist dafür offenkundig auch nicht unbedingt ein großer Berechnungsaufwand nötig. Schon relativ grobe Netze erlauben gute Ergebnisse.

Instruktiv ist auch der Vergleich mit verschiedenen analytischen Näherungsformeln für zufällig verteilte Partikel. Der Wert dieses Vergleiches liegt in zwei Richtungen: zum einen bietet er eine weitere Überprüfung der FEM-Rechnungen, nunmehr bei nicht-leitfähigen Einschlüssen, für die keine geschlossenen Lösungen in der Literatur dokumentiert sind. Zum anderen wird dadurch ein indirekter Nachweis für die Anwendbarkeit der Modellierungsergebnisse auf experimentelle Systeme gegeben. Die analytischen Näherungslösungen sind gezielt entwickelt worden, um – allerdings offenbar rare – experimentellen Datensätze von zufällig verteilten kugelförmigen Partikeln in einer Matrix zu beschreiben. Jedoch erfassen die FEM-Lösungen grundsätzlich Gitterstrukturen.

In Abb. 5.5 werden dazu die gewonnenen modellierten Permittivitäten (relative Permittivität der Matrix 10 und der Partikel 100) mit verschiedenen Näherungsformeln verglichen. Deutlich ist zu erkennen, daß für geringe Volumenanteile bis etwa 30 % die Grenzformel nach Hashin et al. (5.11) sehr gut das Verhalten beschreibt.

Tab. 5.1: Relative Abweichung der mit der FEM berechneten effektiven relativen Permittivität von der Referenzlösung bei verschiedenen Volumenanteilen v für verschiedene Netzgüten. Die Netzgüten beziehen sich auf die in Abb. 5.3 dargestellten Elementarzellen.

| v | Netzqualität | | |
|---------|--------------|---------|---------|
| | sehr grob | grob | fein |
| 0–30 % | < 1,3 % | < 0,1 % | |
| 30–40 % | < 4,9 % | < 0,1 % | |
| 50 % | | < 0,6 % | < 0,1 % |
| 51 % | | | < 5,3 % |

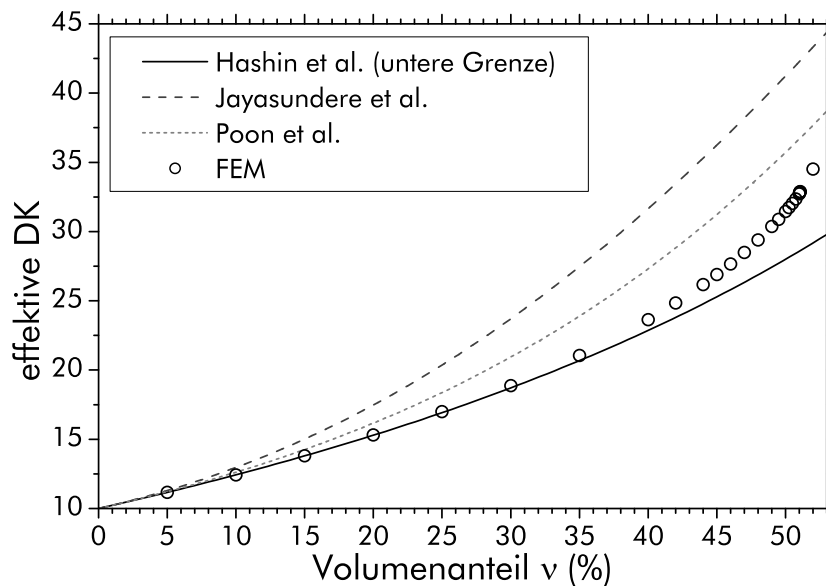


Abb. 5.5: Vergleich der FEM-Lösung mit den analytischen Näherungsformeln nach Jayasundere et al. (5.8), nach Poon et al. (5.9) und der unteren Grenze nach Hashin et al. (5.11).

Erst die stärkere elektrostatische Wechselwirkung der Partikel bei höheren Volumenanteilen führt zu einer demgegenüber erhöhten Permittivität. Diese kann mit den beiden anderen Näherungsformeln, die das näherungsweise berücksichtigen, besser beschrieben werden, auch wenn beide den Einfluß deutlich überschätzen. Bei diesen Volumenanteilen ist die Formel von Poon et al. (5.9) offenkundig besser geeignet, die effektive Permittivität von eingebetteten Kugeln (in einer kubischen Gitterstruktur) zu beschreiben.

Für sehr geringe Volumenanteile stimmen die verschiedenen Ansätze weitgehend überein, weil die elektrostatische Wechselwirkung der Partikel dann vernachlässigbar ist. Bei einer zufälligen Verteilung der Partikel finden auch bei kleinen Volumenanteilen schon vereinzelt Wechselwirkungen zwischen einzelnen dicht benachbarten Partikeln statt. Deswegen ist für die Näherungsformeln von Poon und Jayasundere die effektive DK auch höher als die mit der Näherungsformel nach Hashin et al. (ohne Berücksichtigung der Wechselwirkung) ermittelte.

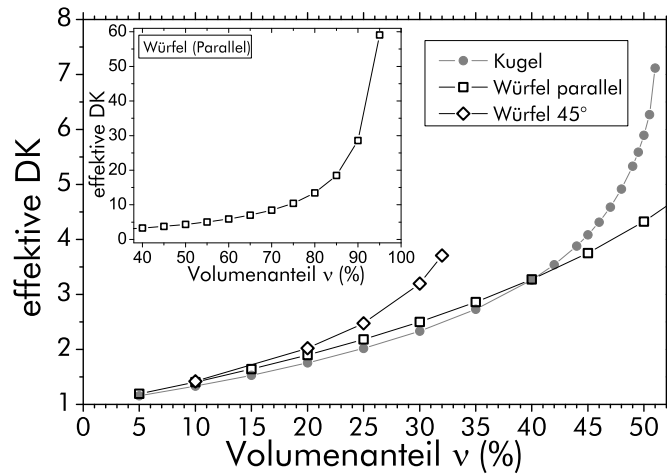
Für die modellierte kubische Struktur beschreibt die Grenzformel nach Hashin et al. somit sehr gut das Verhalten bis hin zu mittleren Volumenanteilen. Vermutlich wird jedoch durch die FEM-Rechnungen die effektive Permittivität realer 0-3-Komposite unterschätzt.

5.2.2 Effektive Permittivität bei kubischen Einschlüssen

Wie bereits angesprochen, sind analytische Näherungsformeln auf ellipsoidförmige Einschlüsse beschränkt, wobei die meisten Ansätze Kugeln betrachten. Es ist möglich, durch geeignete Prozessführung kubisch geformte Nanopartikel herzustellen, zum Beispiel von ferroelektrischem Lithiumniobat.^[134] Würden solche Partikel in eine Matrix eingebracht, so hätte trotz isotroper Materialeigenschaften die Orientierung der Partikel einen Einfluß.

Einen Vergleich zwischen eingebetteten Kugeln und Würfeln unterschiedlicher Orientierung gibt Abb. 5.6 auf Seite 70. Für einen geringen Volumenanteil v ist die effektive Permittivität nahezu vollständig durch ihn bestimmt. Für Volumenanteile größer als 20 % zeigt der um 45° gedrehte Würfel einen deutlich stärkeren Anstieg

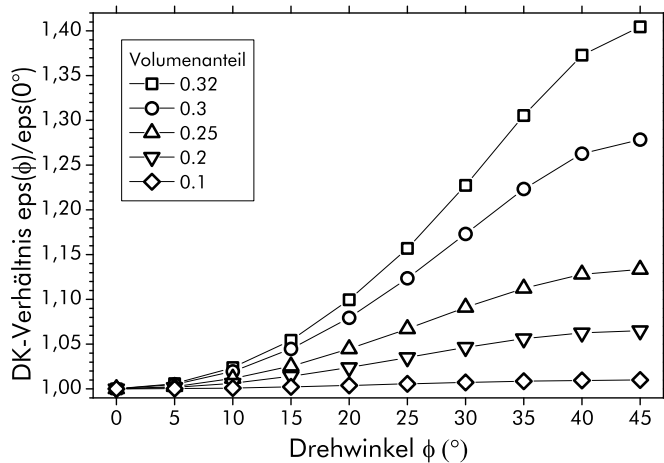
Abb. 5.6: Effektive Permittivität für eine Kugel und einen eingebetteten Würfel. Die relativen Permittivitäten der Matrix ($DK=1$) und der Einschlüsse ($DK=10^6$) wurden wie in der Referenzlösung (Kap. 5.2.1) gewählt. Beim Würfel wurden zwei Grenzfälle der Orientierung betrachtet, die über den in Abb. 5.7b definierten Drehwinkel ϕ vorgegeben wurden.



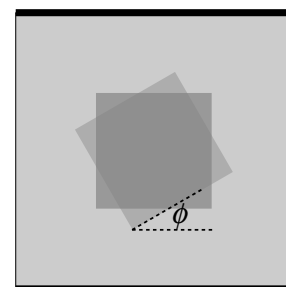
der Permittivität als der undgedrehte Würfel und die Kugel. Das ist Ausdruck der in einem kubischen Gitter mit solcherart gedrehten Würfeln schon bei $v = 3/\sqrt{2} \approx 35,4\%$ auftretenden Berührung. Der undgedrehte Würfel (mit Kanten parallel zu den Kanten der Elementarzelle) weist hingegen oberhalb von etwa 40 % Volumenanteil wesentlich geringere Permittivitäten als die eingebettete Kugel auf, weil er – im Gegensatz zu ihr – keine Perkolationsgrenze aufweist.

Die Ausrichtung ist für anisotrope Partikel ein wesentlicher Parameter, sofern nennenswerte Volumenanteile vorkommen. Am Beispiel des eingebetteten Würfels wird das gezeigt. Der Einfluß der Orientierung des eingebetteten Würfels wurde hierzu – bei den gleichen Permittivitäten wie in Abb. 5.6 – näher betrachtet. Die Geometrie der Einheitszelle verdeutlicht Abb. 5.7b, wo ein Schnitt durch die würfelförmige Elementarzelle dargestellt ist. In Abb. 5.7a sind die Ergebnisse gezeigt.

Bei niedrigen Volumenanteilen der Würfel hat ihre Orientierung keinen großen Einfluß auf die effektive DK. Mit wachsendem Volumenanteil nimmt dieser Einfluß zu. Weil die Elementarzellen ein kubisches Gitter repräsentieren, sind die effekti-



(a) DK in Abhängigkeit vom Drehwinkel bei verschiedenen Volumenanteilen ϕ .



(b) Elementarzelle (Schnitt)

Abb. 5.7: Abhängigkeit der DK eines Komposites mit eingebettetem würfelförmigem Einschuß ($DK=10^6$) in einer Matrix ($DK=1$). Die Elementarzelle (b) ist mit Elektroden auf der Ober- und Unterseite dargestellt. Der Drehwinkel ϕ bezieht sich auf die ebenfalls eingezeichnete Ausgangslage mit parallelen Kanten zur Elementarzelle.

ven DKs um den Drehwinkel ϕ von 45° symmetrisch. Bei diesem Winkel sind die Abstände zwischen den Würfecken benachbarter Elementarzellen minimal. Mithin ist die elektrostatische Wechselwirkung am stärksten und die effektive DK dieser Konfiguration maximal. Bei ungedrehtem Würfel ist die DK hingegen minimal. Der winkelabhängige Verlauf der effektiven DK ähnelt in erster Näherung einer Funktion der Form $\epsilon \propto (\sin\phi)^2$, allerdings weist der Fit systematische Abweichungen auf, die auf einen anderen Funktionsverlauf hindeuten. Die Orientierungsabhängigkeit der Permittivität wird mit sinkendem DK-Kontrast der Konstituenten kleiner, was sich durch ein entsprechend sinkendes Verhältnis der Maximal- zur Minimal-DK äußert. Beispielsweise beträgt bei einem Volumenanteil von 25 % dieses Verhältnis für ein DK-Verhältnis $10^6 : 1$ 1,33; bei einem Verhältnis von 1000:10 nur noch 1,12 und bei 100:10 lediglich 1,05.

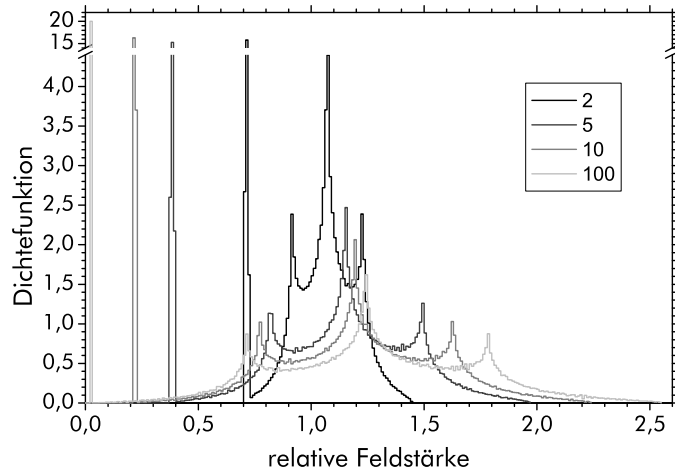
Es sollte beachtet werden, daß auch diese Rechnungen für ein kubisches Gitter vorgenommen wurden. Für die Modellierung von Verbundwerkstoffen mit zufällig orientierten Einschlüssen könnte eine von JYLHÄ entwickelte Methode verwendet werden: Sie hat die effektive DK zufällig orientierter Rhomboeder in einer Matrix ermittelt, indem sie auf spezielle Weise Mittelwerte über verschiedene Orientierungen berechnet hat. ^[132,133]

5.2.3 Analyse der Feldstärkeverteilung bei eingebetteten Zylindern

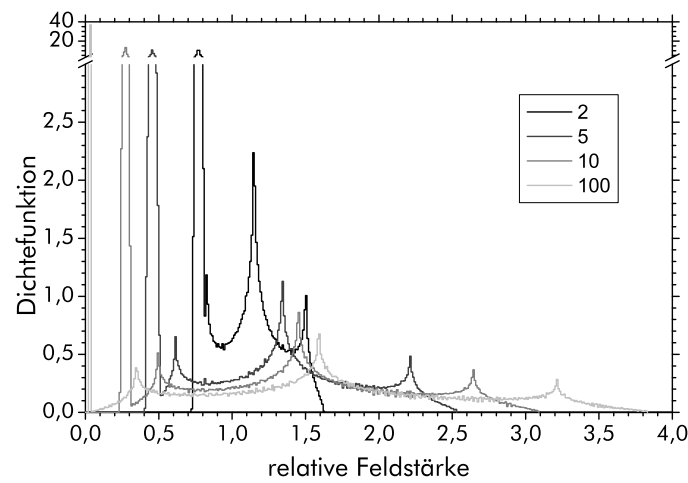
Die Feldstärkeverteilung von dielektrischen Heterostrukturen wird nur selten quantitativ in der Literatur diskutiert. Für den Fall eingebetteter (unendlich langer) Zylinder wird von CULE ET AL. eine numerische Lösung für eine quadratische Anordnung angegeben. ^[131] Für die Referenzrechnungen in Kap. 3.2.3 auf Seite 26 wurde diese Anordnung herangezogen und wird nun näher diskutiert. In Abb. 5.8 auf Seite 72 sind einige Feldstärkeverteilungen für verschiedene DK-Verhältnisse zwischen Zylinder und Matrix bei verschiedenen Volumenanteilen zusammengestellt. Die Parameter wurden wie in der genannten Publikation (Abb. 3 in ^[131]) gewählt. Dort wurde das System mit Hilfe der Finite-Differenzen-Methode auf einem äquidistanten Gitter von 400×400 Punkten berechnet.

Es zeigt sich, daß die beiden Methoden zu vergleichbaren Ergebnissen für die Feldstärkeverteilung führen. Zwar werden bei Cule et al. die zum Zylinderinneren gehörenden Maxima abgeschnitten, die Übereinstimmung der restlichen numerisch ermittelten Verteilungsfunktionen ist jedoch sehr gut. Das betrifft weitgehend den gesamten Verlauf der jeweiligen Funktionen inklusive der größten Feldstärken und der Lage der Extrema. Lediglich bei den Extrema neigen die mit der FEM ermittelten Dichtefunktionen dazu, etwas höhere Verteilungsdichten aufzuweisen und erscheinen weniger verbreitert. Allerdings sind diese Unterschiede klein genug, um sie der unterschiedlichen Klassierung oder anderen unbedeutenden numerischen Einflüssen zuschreiben zu können. Diese Übereinstimmung belegt überzeugend die Leistungsfähigkeit der entwickelten Auswertemethode.

Zusätzlich werden in Abb. 5.9 auf Seite 73 die zugehörigen Verteilungsfunktionen dargestellt. Im Vergleich zu den Histogrammen erlauben diese einige Trends noch klarer abzulesen. Zum Beispiel ist der Volumenanteil der Zylinder anhand der Kanten der Verteilungsfunktion bei kleinen Feldstärken deutlich abzulesen. An den Knickstellen entspricht der Wert der Verteilungsfunktion dem Volumenanteil. Mehrere Tendenzen lassen sich an den Feldstärkeverteilungen des eingebetteten Zylinders beobachten. Durch eine Erhöhung des DK-Kontrastes (die DK des Zylinders ist immer höher als die der Matrix) verschiebt sich das erste, sehr ausgeprägte Maximum der Dichtefunktion zu niedrigeren Feldstärken. Dieses Maximum ist der Feldstärke im Inneren des



(a) Volumenanteil v des Zylinders 20 %



(b) Volumenanteil v des Zylinders 40 %

Abb. 5.8: Verteilungsdichtefunktionen $h(E)$ der relativen Feldstärke für die Elementarzelle mit einem eingebetteten Zylinder. Die DK des Zylinders ist um den in den Legenden angegebenen Faktor größer als die der Matrix.

Zylinders zuzuordnen. Bei wechselwirkungsfreien Zylindern würde dieses Maximum eine δ -Funktion bilden, da sich innerhalb dieser eine homogene Feldstärke einstellt. Das gilt allerdings nur für unendlich lange Zylinder. Diese Feldstärke läßt sich gemäß (5.3) berechnen. Die maximalen Feldstärken nehmen mit wachsendem DK-Kontrast zu. Außerdem spreizt sich dann die Verteilung, d. h. der Feldstärkeunterschied zwischen den Maxima nimmt zu. Diese Trends zeigen sich für beide betrachteten Volumenanteile. Jedoch ist festzustellen, daß für den höheren Volumenanteil die Spreizungen und damit die maximalen Feldstärken deutlich größer sind. Außerdem überlagern sich die zu den inneren Feldstärken der Zylindern gehörenden Maxima teilweise mit dem anschließenden Maximum der Verteilungsfunktion.

An das der inneren Feldstärke des Zylinders zugeordnete Maximum schließen sich drei weitere an. Da in der Veröffentlichung [131] nicht darauf eingegangen wird, sollen im folgenden die Ursprünge dieser Maxima untersucht werden. Dies wird am Beispiel eines Zylinders mit 5-fach höherer DK als der Matrix und mit einem Volumenanteil von 20 % dargestellt. Die Feldstärkeverteilung ist in Abb. 5.10 zu finden. Wegen der impliziten Randbedingung stellt diese Elementarzelle einen Ausschnitt aus einem quadratischen Gitter dar. Der Koordinatenursprung liegt im Zylindermittelpunkt.

Ohne eingebettete Zylinder weist das elektrische Feld in z -Richtung. Mit eingebetteten Zylindern tritt die maximale Feldstärke auf der z -Achse an der Grenzfläche zwischen Zylinder und Matrix auf. Die Minima treten auf den dazu senkrechten Ach-

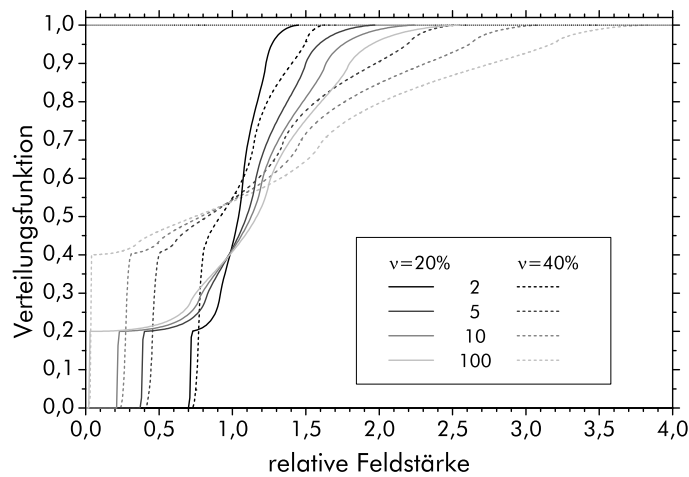


Abb. 5.9: Verteilungsfunktionen $H(E)$ der Feldstärke für die Elementarzelle mit eingebettetem Zylinder. Für zwei Volumenanteile wurden die Verteilungsfunktionen für einige DK-Kontraste zwischen Zylinder und Matrix berechnet. Die DK-Kontraste sind in der Legende angegeben. Die Verteilungsfunktionen gehören zu den Dichtefunktionen in Abb. 5.8.

sen (in der Abbildung ist es die x -Achse) ebenfalls an der Grenzfläche auf. Innerhalb des Zylinders ist die Feldstärke nahezu homogen. In Abb. 5.11 auf Seite 74 werden die drei Extrema der Feldstärkedichtefunktion (d) detailliert im Kontur-Plot der Feldstärkeverteilung gezeigt. Die jeweilige Feldstärke zu einem Maximum der Dichtefunktion wurden dem Histogramm (Abb. 5.11d) entnommen. Zur Verdeutlichung wurde in den Konturliniendarstellungen zwei Feldstärkebereiche (der höhere schraffiert) durch einen mittleren Grauton hervorgehoben. Die zwischen ihnen verlaufende Grenzlinie gehört zu der Maximums-Feldstärke.

Die Extrema der Dichtefunktionen sind Hinweise auf Anomalien, wie sie auch CULE ET AL. in ihrer Publikation durch die exakte Berechnung der Feldverteilung eines Hashin-Shtrikman-Zylinders gefunden haben. Die Autoren haben bei der Berechnung der Feldstärkedichtefunktion Singularitäten festgestellt, die van-Hove-Singularitäten entsprechen und mit Sattel- oder Wendepunkten auf der Oberfläche des Feldes $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|$ verbunden sind.^[131] Die in Abb. 5.11a und Abb. 5.11c dargestellten Kontur-Plots deuten eine Lage der Feldstärken entlang von Linien an, wie sie so ähnlich für diesen Fall von den Autoren berechnet worden ist. Das mittlere Maximum der Dichtefunktion – entsprechend dem Kontur-Plot Abb. 5.11b – tritt im zitierten exakten Ergebnis jedoch nicht auf. Offensichtlich ist es eine Folge der Anordnung auf dem quadratischen Gitter. Die entsprechende Feldstärke tritt allem Anschein nach entlang der Diagonalen der Elementarzelle auf. Wegen der quadratischen Symmetrie sind acht Punkte auf den Elementarzellenkanten ausgezeichnet. Diese halbieren

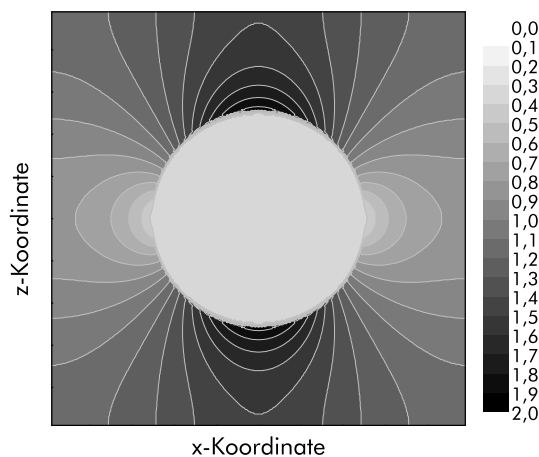


Abb. 5.10: Feldstärkeverteilung eines Verbundes aus einem unendlich langen Zylinder in einer Matrix. Die Elektroden der Elementarzelle befinden sich an den beiden Kanten parallel der x -Achse. Der Volumenanteil des Zylinders beträgt 20%; seine DK ist 5mal höher als die der Matrix.

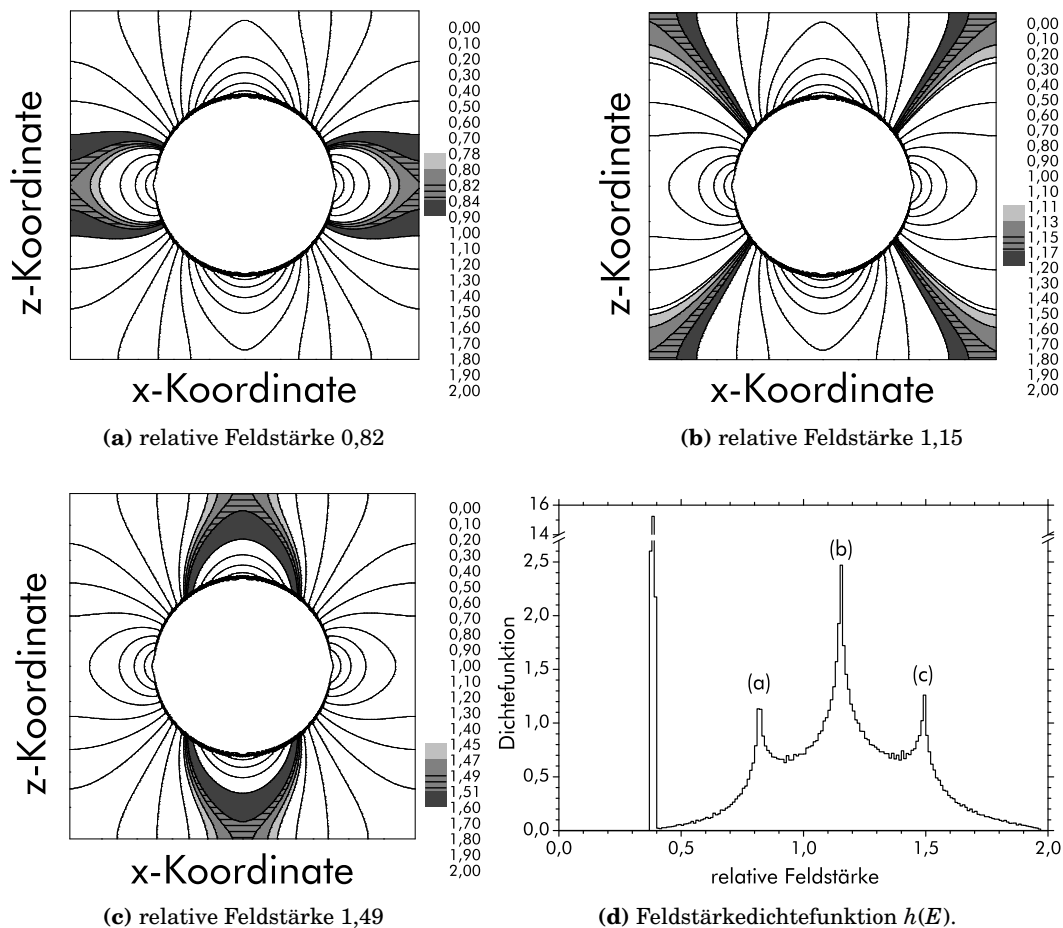


Abb. 5.11: Feldstärkedichtefunktion (d) für einen eingebetteten Zylinder ($v = 20\%$, DK-Kontrast 5). Die Feldstärkeverteilung entspricht Abb. 5.10. Durch eine feinere Auflösung der Konturen sind die in der Dichtefunktion mit (a), (b) und (c) bezeichneten Maxima genauer in der Elementarzelle lokalisiert worden, wie in den entsprechenden Teilabbildungen ersichtlich ist.

die Verbindungslinien zu den nächsten benachbarten Zylindern. Die drei dargestellten Kontur-Plots in Abb. 5.11 zeigen deutlich, daß diese Punkte in der Tat jeweils Sattelpunkte des Betrages der elektrischen Feldstärke darstellen.

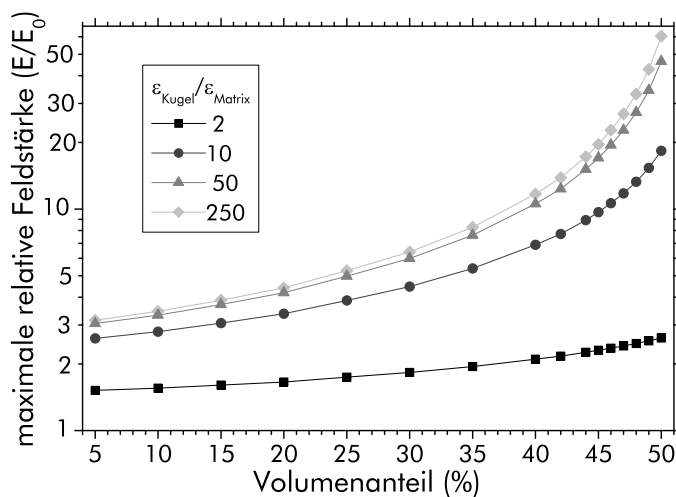
5.2.4 Analyse der Feldstärkeverteilung bei eingebetteten Kugeln

Im vorangegangenen Abschnitt wurde die Methode zur Ermittlung der Feldstärkeverteilung erfolgreich auf ein eher abstraktes Beispiel angewendet. Ein vom Standpunkt der Anwendung her realistischeres Modellsystem für einen 0-3-Komposit ist durch Elementarzellen mit eingebetteten Kugeln gegeben. Die Verteilung der elektrischen Feldstärke in solchen Elementarzellen wird nachfolgend näher charakterisiert, zunächst für den Fall einer *einzelnen* eingebetteten Kugel. Die Rechnungen fanden dafür dreidimensional statt, womit ein im Vergleich zu den zweidimensionalen Rechnungen im vorhergehenden Abschnitt wesentlich höherer Rechenaufwand verbunden ist. Aus diesem Grund kann die Feldstärkeverteilung nicht so fein aufgelöst werden. Die Elementarzelle wurde hier so gestaltet, daß die eingebetteten Partikel vollständig darin enthalten sind. Dadurch werden einfach-kubische Symmetrien betrachtet.

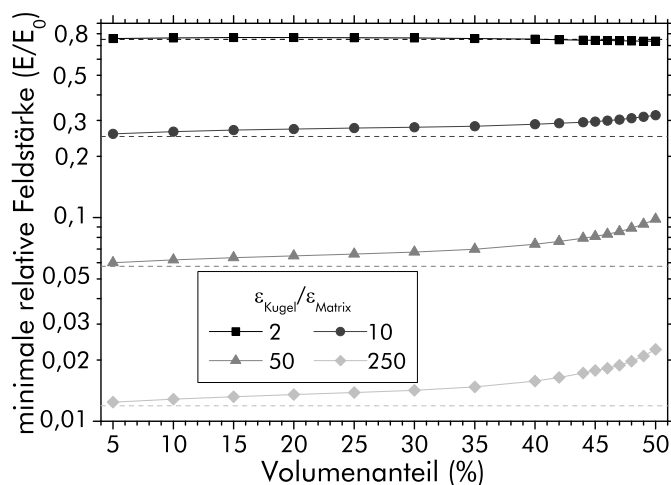
Zuerst soll dem Einfluß des Volumenanteils und unterschiedlicher DK-Kontraste zwischen eingebettetem Partikel und der Matrix anhand der auftretenden maximalen und minimalen Feldstärken in Abb. 5.12 nachgegangen werden. Dabei wurde der typische Fall $\epsilon_{\text{Kugel}} > \epsilon_{\text{Matrix}}$ untersucht.

Die maximale Feldstärke verdient aufgrund ihrer Bedeutung hinsichtlich der Durchschlagsfestigkeit Beachtung. Wie Abb. 5.12a zeigt, nimmt die maximale Feldstärke mit wachsendem Volumenanteil deutlich zu, wobei sie bei Annäherung an das Berührungslimit der Kugeln im einfach-kubischen Gitter (ca. 52,4 %) deutlich stärker ansteigt als für kleine Volumenanteile der Kugeln. Ein steigender DK-Kontrast $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ erhöht die maximalen Feldstärken für jeden Volumenanteil. Dabei ist festzuhalten, daß diese Vergrößerung nicht mit einem konstanten Faktor für alle Volumenanteile geschieht, wie aus der halblogarithmischen Darstellung deutlich hervorgeht.

Weiterhin ist ersichtlich, daß bei Änderung des DK-Kontrastes um den jeweils gleichen Faktor der erhöhende Einfluß auf die maximale Feldstärke für steigende DK-Kontraste immer kleiner wird. Ein Grenzverhalten deutet sich an. Beispielsweise steigt beim Volumenanteil von 50 % die maximale Feldstärke selbst bei einem DK-Kontrast von 10^6 nurmehr um weniger als 8 % gegenüber einem DK-Kontrast von 250 an (weswegen die entsprechenden Werte nicht mehr graphisch dargestellt wurden). Für kleinere Volumenanteile ist der Unterschied noch geringer.



(a) Maximale relative Feldstärken



(b) Minimale relative Feldstärken

Abb. 5.12: Maximale und minimale Feldstärken in Abhängigkeit vom Volumenanteil der eingebetteten Kugel für verschiedene DK-Kontraste $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ in einer halb-logarithmischen Auftragung. Die gestrichelten Linien in (b) geben die homogene Feldstärke an, wie sie in einzelnen eingebetteten Kugeln gemäß (5.2) auftreten würde.

Interessant sind auch die kleinsten Feldstärken in der Elementarzelle, die in Abb. 5.12b abhängig vom Volumenanteil dargestellt sind. Sie werden im Inneren der Einschlüsse erreicht. Durch die Wechselwirkung auf dem Gitter herrscht im Kugellinneren keine homogene Feldstärke vor, wie sie aus der Lösung für eine einzelne eingebettete Kugel folgt. Die für diesen Grenzfall nach (5.2) berechneten Feldstärken sind in Abb. 5.12b als gestrichelte Linien eingezeichnet. Offenkundig werden sie für sehr kleine Volumenanteile nahezu erreicht. Aufgrund der elektrostatischen Wechselwirkung mit den benachbarten Elementarzellen sind die tatsächlichen minimalen Feldstärken jedoch grundsätzlich höher als die in der einzelnen eingebetteten Kugel. Mit wachsendem DK-Kontrast nimmt dieser Unterschied zu.

Zudem wachsen die minimalen Feldstärken mit zunehmendem Volumenanteil der Partikel, was ebenfalls auf die stärkere Wechselwirkung im Gitter zurückzuführen ist. Nur für das kleinste untersuchte Verhältnis $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}} = 2$ nimmt die minimale Feldstärke bei größeren Volumenanteilen wieder leicht ab. Das ist sehr wahrscheinlich numerisch bedingt: Durch die bei steigenden Volumenanteilen zunehmend größeren finiten Elemente innerhalb der modellierten Kugel wird die über das Element gemittelte Feldstärke damit systematisch niedriger berechnet. Entsprechend ist aufgrund des Vernetzungsalgorithmus die Elementgröße an der Randschicht der Kugel für kleinere Volumenanteile kleiner. Mithin werden dort die maximalen Feldstärken weniger unterschätzt, als dies für die höheren Volumenanteile der Fall ist (vgl. Kap. 3.2.3).

Die minimalen Feldstärken werden mit wachsendem DK-Kontrast kleiner. Beim Grenzfall leitfähiger (d. h. unendliche Permittivität aufweisender) und wechselwirkungsfreier Kugeln würde die Feldstärke im Kugellinneren verschwinden. Bei ausreichend hohen DK-Kontrasten wirkt sich ihre Erhöhung um einen Faktor als Verkleinerung der minimalen Feldstärke um einen gewissen Faktor aus. Dies läßt sich

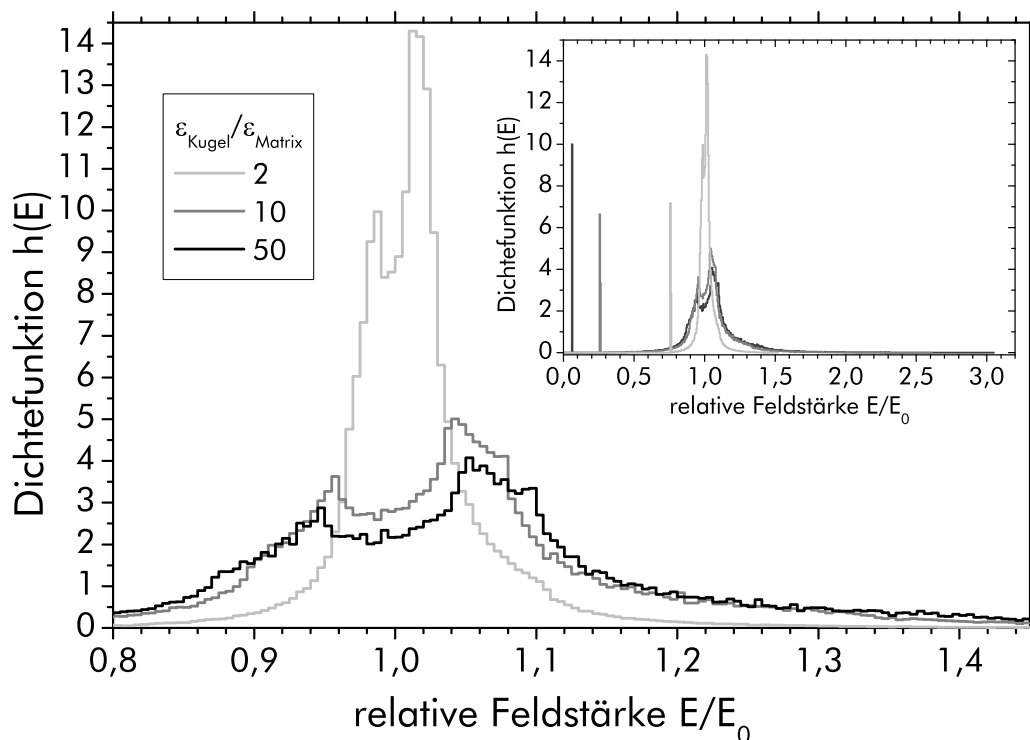


Abb. 5.13: Einfluß des DK-Kontrastes $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ auf die Dichtefunktion der relativen Feldstärke für einen Komposit mit eingebetteter Kugel mit einem Volumenanteil von 5%. Im kleinen Bild ist der gesamte überstrichene Feldstärkebereich zu sehen, im großen Bild ein Ausschnitt daraus.

für wechselwirkungsfreie Kugeln aus (5.2) schließen. Die numerischen Ergebnisse deuten darauf hin, daß dies auch für hohe Volumenanteile gültig bleibt.

Nachdem die Extremwerte der Feldstärkeverteilung ausführlich diskutiert worden sind, sollen jetzt die Verteilungen selbst näher betrachtet werden. In Abb. 5.13 ist die Abhängigkeit der Dichtefunktionen vom DK-Kontrast für eingebettete Kugeln mit 5 % Volumenanteil zu sehen. Deutlich ist zu erkennen, daß ein wachsender DK-Kontrast die Verteilungen aufspreizt. Das betrifft nicht nur die schon diskutierten Feldstärkeextrema, sondern den gesamten Verlauf der Verteilungen mit seinen weiteren zwei auffälligen Maxima und dem dazwischen angesiedelten Minimum. Durch diese Spreizung der Extrema nehmen die Feldstärkedichten $h(E)$ mit wachsendem DK-Kontrast ab. Besonders deutlich wird diese Verbreiterung bei der Betrachtung der Verteilungsfunktion $H(E)$, die in Abb. 5.14 dargestellt ist.

Die Kante bei geringer Feldstärke hat eine Höhe von $H(E) = 0,05$, was dem Volumenanteil der eingebetteten Kugeln entspricht. Die sich darin ausprägende Feldstärke entspricht in erster Näherung der freien Kugel. Der gesamte Bereich oberhalb dieses Wertes wird von den Feldstärken im die Kugel umgebenden Polymer bestimmt. Es zeigt sich deutlich, daß für wachsenden DK-Kontrast die Feldstärkeverteilungen darin ähnlicher werden. Dem Anschein nach streben die Verteilungen gegen eine Grenzverteilung. Das ist in Übereinstimmung mit der Betrachtung der maximalen und minimalen Feldstärken (Abb. 5.12 auf Seite 75), die bei wachsendem DK-Kontrast jeweils einem Grenzwert zustreben. Die genannte Grenzverteilung ist durch einen unendlichen DK-Kontrast gegeben, was einer eingebetteten leitfähigen Kugel in einer nichtleitenden Matrix entspricht.

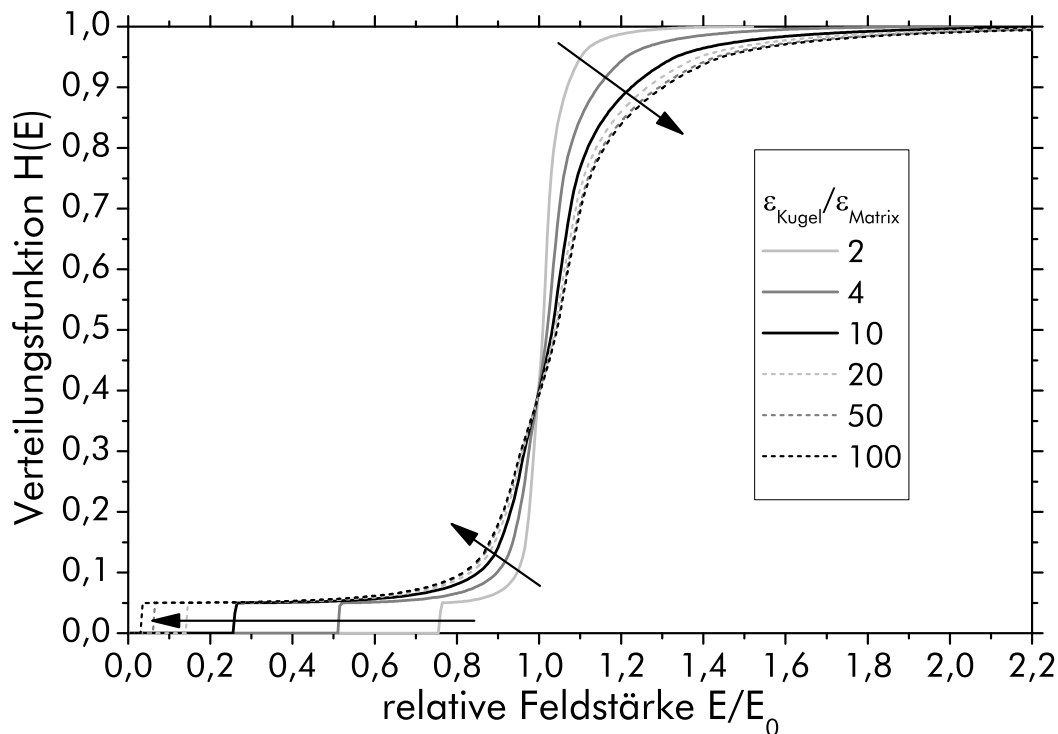
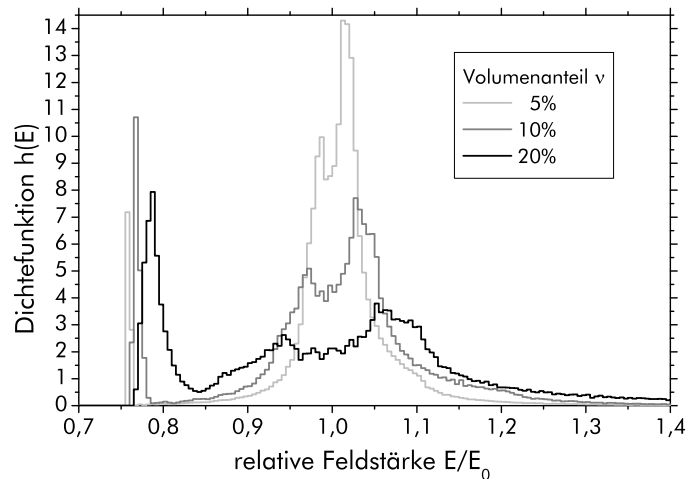


Abb. 5.14: Einfluß des DK-Kontrastes $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ auf die Verteilungsfunktion der relativen Feldstärke für einen Komposit mit eingebetteter Kugel mit einem Volumenanteil von 5 %. Die Pfeile verdeutlichen den Einfluß des wachsenden DK-Kontrastes.

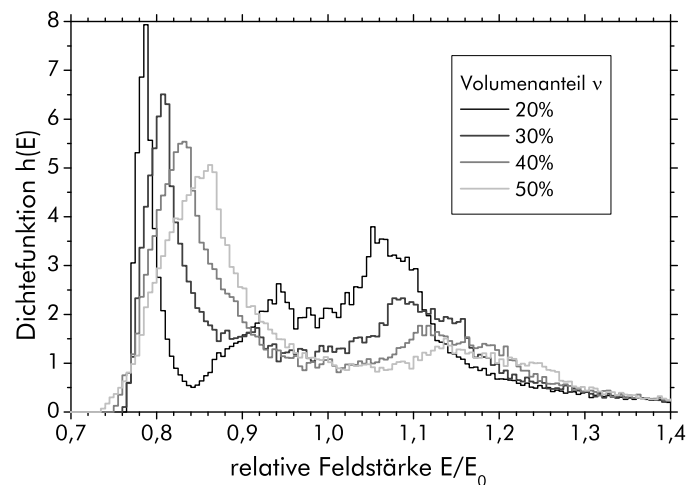
Neben dem DK-Kontrast bestimmt auch der Volumenanteil der eingebetteten Kugeln wesentlich die Feldstärkeverteilung. Für einen DK-Kontrast von 2 ist die Dichtefunktion in Abb. 5.15 dargestellt.

Wachsende Volumenanteile bewirken eine zunehmende Überlagerung der bei den niedrigen Volumenanteilen deutlicher voneinander geschiedenen Maxima. Das äußert sich darin, daß sich diese Maxima verbreitern und ihre Feldstärkedichten abnehmen. Dabei ist festzuhalten, daß sich die Dichteverteilung deutlich von der des eingebetteten Zylinders (vgl. Kap. 5.2.3) unterscheidet. Bei der Kugel treten nicht vier deutlich unterschiedene Spitzen der Häufigkeitsverteilung auf. Vielmehr tritt dort neben dem vergleichsweise ausgeprägtem Maximum bei niedriger Feldstärke – welches zu den inneren Feldstärken der Kugeln gehört – ein breiter Maximumsbereich auf, aus dem heraus sich zwei Maxima abheben. Das Maximum bei geringerer Feldstärke weist dabei eine deutlich geringere Feldstärkedichte auf als jenes höherer Feldstärke. Beide Maxima zeichnen sich bei zunehmendem Volumenanteil immer undeutlicher von der gesamten Dichteverteilung ab. Der Maximumsbereich verbreitert sich dabei.

Diese Unterschiede spiegeln sich auch in den Verteilungsfunktionen wider, welche in Abb. 5.16 dargestellt sind. Augenscheinlich werden die Kanten in den Verteilungsfunktionen immer weicher, je höher der Volumenanteil der Kugeln ist. Das ist Ausdruck der zunehmenden Wechselwirkung der Kugeln, welche die Verteilung der Feldstärke



(a)



(b)

Abb. 5.15: Feldstärkedichtefunktion einer Elementarzelle mit eingebetteter Kugel mit einem DK-Kontrast $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}} = 2$ für verschiedene Volumenanteile. Die Dichtefunktion für höhere Feldstärken wird nicht dargestellt, da sie dort lediglich weiter abfällt. Zur Verdeutlichung ist die Kurve für 20% Volumenanteil in beiden Teilabbildungen dargestellt.

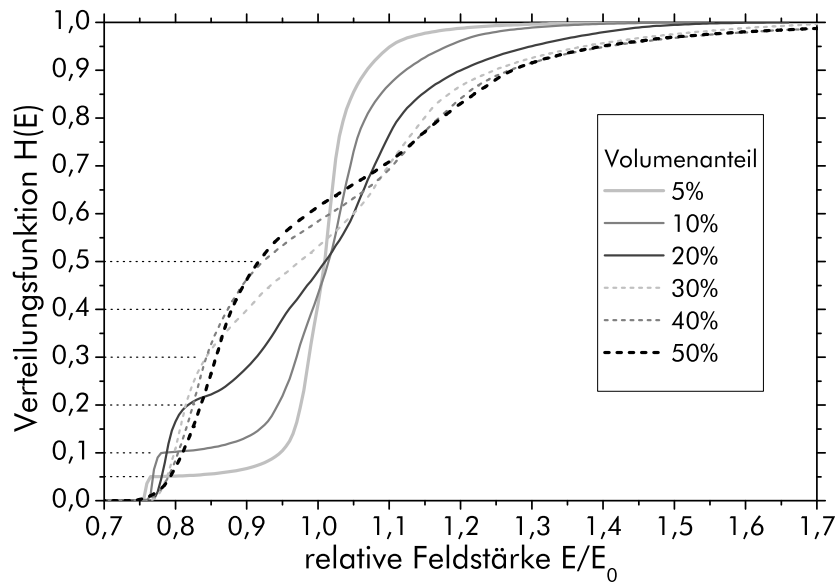


Abb. 5.16: Feldstärkeverteilungsfunktion einer Elementarzelle mit eingebetteter Kugel mit einem DK-Kontrast $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}} = 2$ für verschiedene Volumenanteile. Die Verteilungsfunktion für höhere Feldstärken wird nicht dargestellt, da der Trend der Annäherung an den Volumenanteil $v = 1$ schon hier deutlich wird.

verbreitern. Statt klar abgegrenzter Bereiche unterschiedlicher Feldstärke mit geringer Schwankungsbreite gibt es dort in größeren Volumenbereichen Feldstärken größerer Variabilität.

Wachsende DK-Kontraste und wachsende Volumenanteile verursachen also gleichermaßen eine Verbreiterung der Verteilung hin zu steigenden Feldstärken. Daß diese beiden Einflüsse in unterschiedlichem Ausmaß wirken, wird in Abb. 5.17 deutlich, wo die Verteilungsfunktionen für Volumenanteile von 20 % und 40 % dargestellt sind. Deutlich ersichtlich ist, daß sich die Verteilung zu sehr viel höheren Feldstärken

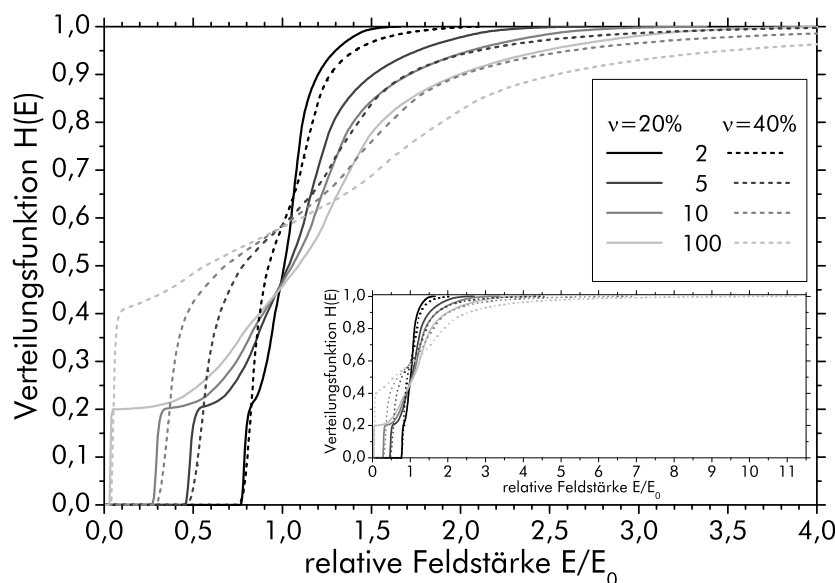


Abb. 5.17: Feldstärkeverteilungsfunktion für eine Elementarzelle mit eingebetteter Kugel mit einem Volumenanteil v von 20 % und 40 % für verschiedene DK-Kontraste $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$, die in der Legende angegeben sind.

erstreckt, wenn die DK-Kontraste und der Volumenanteil höher sind. Für diesen Fall lassen sich in größeren Feldstärkebereichen Bereiche der Verteilungsfunktion finden, die weitgehend linear sind, d. h. nur noch schwach ausgeprägte Wendepunkte aufweisen. Darin zeigt sich eine näherungsweise Gleichverteilung der Feldstärken in nennenswerten Volumenanteilen. Nur in sehr kleinen Bereichen werden hingegen die höchsten Feldstärken erreicht.

5.2.5 Elementarzellen mit zwei Kugeln

Die effektiven Permittivitäten und die Feldstärkeverteilungen wurde bisher an Elementarzellen mit *einer* eingebetteten Kugel ermittelt. Nachfolgend werden Ergebnisse für *zwei* eingebettete Kugeln vorgestellt, deren Abstand zueinander und deren Radien variiert wurden.

5.2.5.1 Konstruktion der Elementarzellen

Die Konstruktion der Elementarzelle geschah anhand von Abb. 5.18a. Die Größe der beiden eingebetteten Kugeln wurde bei gleichem Gesamt-Volumenanteil veränderlich gehalten und ihr relativer Abstand zueinander variiert. Das Volumen V der quaderförmigen Elementarzelle mit der Höhe l und der quadratischen Grundfläche der Seitenlänge $l/2$ blieb dabei unverändert.

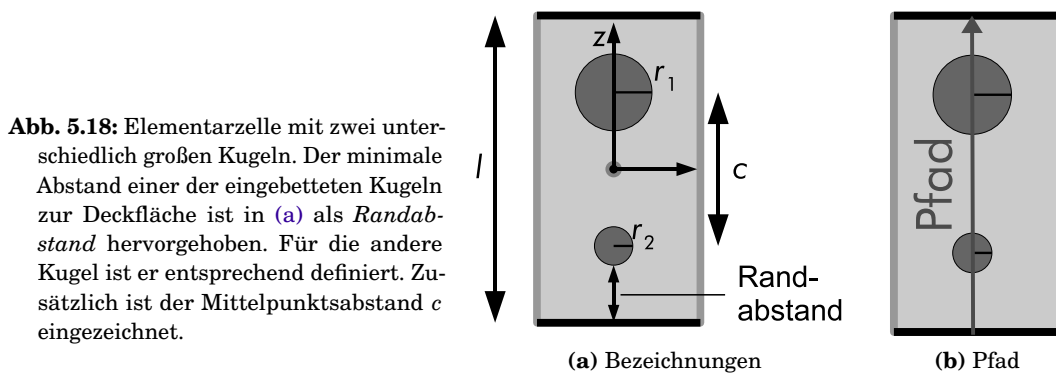


Abb. 5.18: Elementarzelle mit zwei unterschiedlich großen Kugeln. Der minimale Abstand einer der eingebetteten Kugeln zur Deckfläche ist in (a) als *Randabstand* hervorgehoben. Für die andere Kugel ist er entsprechend definiert. Zusätzlich ist der Mittelpunktsabstand c eingezeichnet.

Die beiden Kugelradien r_2 und r_1 stehen im Radienverhältnis κ zueinander. Unter den genannten Bedingungen ergeben sich somit die beiden Radien zu

$$r_1 = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi} \frac{vV}{1 + \kappa^3}} \quad \text{und} \quad r_2 = \kappa r_1. \tag{5.15}$$

Ersichtlich führt (5.15) dazu, daß sich *beide* Radien bei einer Änderung des Radienverhältnisses κ ändern. In Abb. 5.19 wird das für zwei Volumenanteile v demonstriert. Weil die Kugeln vollständig innerhalb der Elementarzelle liegen sollen, kann für höhere Volumenanteile das Radienverhältnis nur noch innerhalb engerer Grenzen verändert werden als bei kleineren.

Die Elementarzelle wurde so konstruiert, daß die Mittelpunkte der Kugeln für jedes κ *symmetrisch* zum Mittelpunkt der Elementarzelle (dem die Koordinate $z = 0$ zugewiesen wurde) liegen. Dadurch sind die Elementarzellen für κ und $1/\kappa$ im Hinblick auf ihr elektrostatisches Verhalten identisch. Bei Radienverhältnissen $\kappa > 1$ vertauschen die oberen und die untere Kugel lediglich die Rollen im Vergleich zu $\kappa < 1$, so daß es genügt, den letztgenannte Fall zu untersuchen.

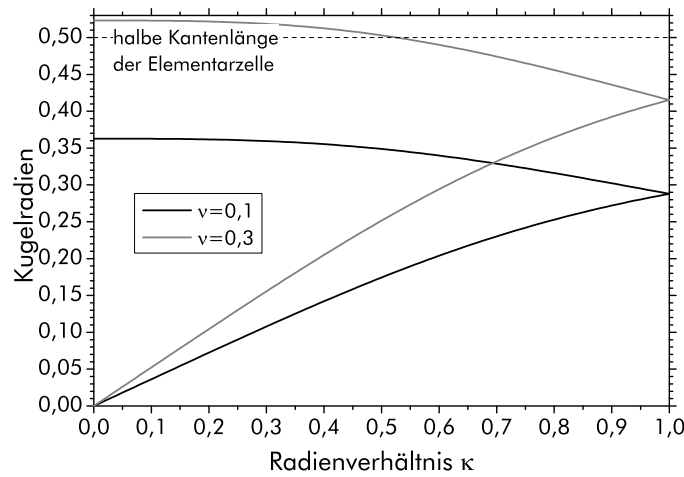


Abb. 5.19: Radien der beiden Kugeln in der Elementarzelle für verschiedene Volumenanteile v in Abhängigkeit vom Radienverhältnis κ . Wegen ihrer festen Abmessungen ($1 \times 1 \times 2$ Einheiten) gibt es bei größeren Volumenverhältnissen nur noch einen kleinen zugänglichen Bereich von κ , weil sonst die Kugeln nicht mehr vollständig innerhalb der quaderförmigen Elementarzelle enthalten wären.

Nur die z -Koordinate der Kugeln wurde variiert. Der Mindestabstand ist dann durch die Berührung der Kugeln und der Höchstabstand durch die Berührung der Deckfläche der Elementarzelle durch die größere Kugel vorgegeben. Wird der größere der beiden Radien mit r_{\max} bezeichnet, so werden diese Grenzen für den Mittelpunktsabstand c durch

$$c_{\max} = l - 2r_{\max} \quad \text{und} \quad c_{\min} = r_1 + r_2 \quad (5.16)$$

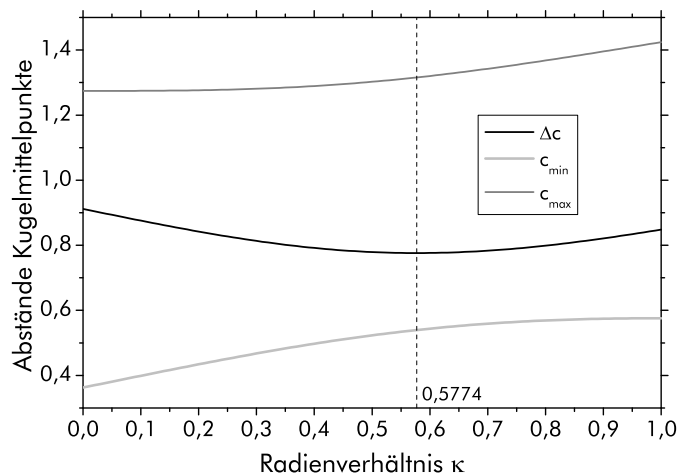
gegeben. Mit dem relativen Abstand θ ($0 \leq \theta \leq 1$) werden so die Mittelpunktspositionen beider Kugeln mit $\Delta c = c_{\max} - c_{\min}$ zu

$$z_{1,2} = \pm \left(\frac{c_{\min}}{2} + \theta \frac{\Delta c}{2} \right) \quad (5.17)$$

festgelegt. Auf diese Weise können über die Parameter v , κ und θ die Elementarzellen so geändert werden, daß Volumenanteil, Radienverhältnis und relativer Abstand beider Kugeln leicht variiert werden können. Es ist sinnvoll, die Auswirkung der Parameter auf die tatsächlichen Abstände und Kugelpositionen zu betrachten. Für einen Volumenanteil von $v = 10\%$ sind die Auswirkungen der Parameteränderungen in Abb. 5.20 auf Seite 82 ersichtlich.

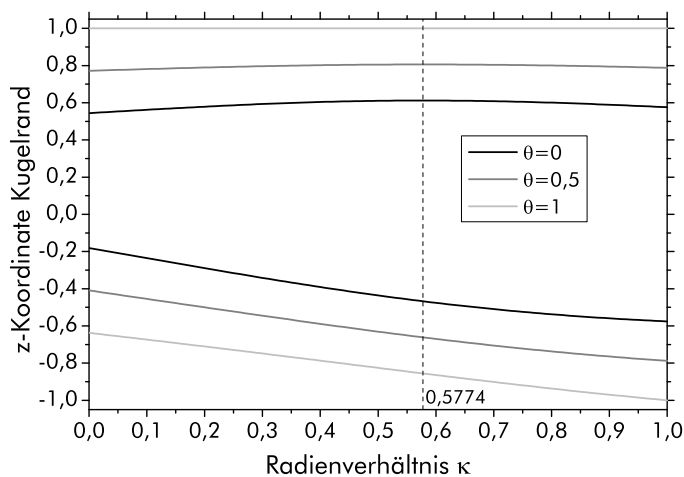
Es läßt sich zeigen, daß Δc für $\kappa = \sqrt{3}$ und $\kappa = 1/\sqrt{3} \approx 0,5774$ ein Minimum annimmt, welches somit *unabhängig* von v und V ist. Der Abstand zur Deckfläche (vergleiche *Randabstand* in Abb. 5.18a) kann für verschiedene κ ermittelt werden. Es zeigt sich, daß der Randabstand der größeren Kugel ebenfalls für dieses Radienverhältnis minimal wird, und zwar unabhängig vom relativen Abstandsverhältnis θ sowie v und V . Die Abb. 5.20b demonstriert, wie sich die Änderung des relativen Kugelabstands θ auf die z -Koordinaten der äußeren Kugelränder auswirkt. Der Kugelabstand der größeren – hier oberen – Kugel ändert sich schwächer mit κ als jener der kleineren Kugel.

Die Deckflächen der Elementarzelle (senkrecht zur z -Achse) sind elektrodiert. Die längere Seite der Elementarzelle wird meist entsprechend Abb. 5.21b auf Seite 83 parallel zur z -Achse gelegt. Für die Abstandsänderung der Kugeln wurde explizit nur die longitudinale Richtung der Elementarzelle herangezogen. Es soll aber darauf hingewiesen werden, daß aus den Randbedingungen auch lateral eine Periodizität des Gitters resultiert. Die lateralen Kugelabstände ändern sich somit auch mit dem



(a) Größte und kleinste Mittelpunktsabstände der Kugeln und resultierender Variationsbereich Δc .

Abb. 5.20: Variation der Elementarzelle mit zwei Kugeln für den Volumenanteil $v = 10\%$. Die Geometrie der quaderförmigen Elementarzelle entspricht Abb. 5.19. Beim markierten Wert ist der über θ ausschöpfbare Kugelabstand Δc minimal. Beim gleichen κ ist auch der Randabstand (vgl. Abb. 5.18a) der größeren (hier der oberen) Kugel minimal.



(b) z-Koordinate der Kugelränder der oberen und unteren Kugel

Radienverhältnis κ , wobei der laterale Abstand der größeren Kugeln sich weniger ändert als derjenige der kleineren Kugeln.

Die Feldstärkeverteilung wurde für einzelne Konfigurationen dieses System auch räumlich charakterisiert, indem die elektrische Feldstärke entlang eines Pfades durch das Zentrum der Elementarzelle ermittelt wurde (vgl. Abb. 5.18b).

5.2.5.2 Permittivität und Feldstärkeverteilung bei gleich großen Kugeln

Es werden zunächst die relativen Permittivitäten von Elementarzellen mit zwei gleich großen Kugeln betrachtet. Dabei bietet es sich an, ihre Verschiebungen in Feldrichtung sowie senkrecht zur Feldrichtung als Grenzfälle zu untersuchen, wie es Abb. 5.21 verdeutlicht. Die Konstruktion der Elementarzelle geschah dabei so, wie im vorangegangenen Abschnitt dargelegt.

Hierbei ist wie schon zuvor zu berücksichtigen, daß die impliziten elektrostatischen Randbedingungen eine periodische Fortsetzung der Elementarzelle bewirken. Dies bedeutet, daß die Wahl der Elementarzelle z. B. wie in Abb. 5.21b aber auch wie in Abb. 5.21c erfolgen kann. Diese Elementarzellen unterscheiden sich im Kugelabstand. Da jedoch die Wahl der Elementarzelle die Eigenschaften des Gitters nicht beeinflusst, kann geschlußfolgert werden, daß die Änderung der effektiven DK symmetrisch

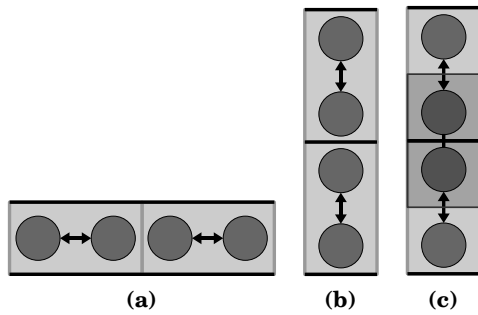


Abb. 5.21: Zwei Elementarzellen mit je zwei eingebetteten Kugeln, deren Abstand variabel ist. Die Elektroden auf der Ober- und Unterseite sind angedeutet. In (a) erfolgt die Änderung des Kugelabstandes senkrecht zur Feldrichtung, in (b) und (c) parallel dazu. In (c) ist eine weitere Möglichkeit eingezeichnet, die Elementarzelle (b) zu definieren. In der hervorgehobenen Elementarzelle (c) ist der Kugelabstand geringer als in (b).

zum größtmöglichen Abstand zwischen den nächstbenachbarten Kugeln erfolgt. In Abb. 5.22 wird diese Symmetrieüberlegung – abgesehen von kleineren auf numerische Einflüsse zurückgehende Abweichungen – bestätigt. Ein relativer Abstand von 0,5 entspricht dem Fall der Elementarzelle mit einer einzelnen Kugel in ihrem Mittelpunkt, was der angegebene Vergleichswert verdeutlicht. Offenkundig wirken sich Abstandsänderungen in Richtung der Feldstärke stärker aus, als senkrecht dazu. Eine Annäherung der Kugeln parallel zur Feldrichtung bewirkt eine Vergrößerung der effektiven DK, während sie senkrecht dazu eine geringe Verringerung dieser Größe verursacht. Dieser Unterschied wurde für ein ähnliches System auch von JAYASUNDERE ET AL. angegeben.^[127]

Die entlang des Pfades ausgewerteten Feldstärken in Abb. 5.23 auf Seite 84 zeigen deutlich den Einfluß der Positionsänderung der eingebetteten Kugeln. Die niedrigsten Feldstärken treten im Inneren der eingebetteten Kugeln auf. Wegen der elektrostatischen Wechselwirkung sind die Feldstärken dort aber entgegen dem Ergebnis für die einzelne eingebettete Kugel nicht konstant, sondern nehmen zum Kugelmittelpunkt hin leicht ab. Sind die Kugeln weiter voneinander entfernt, so ist diese Änderung geringer. Die größten Feldstärken treten am Rand der eingebetteten Kugeln auf. Die Überhöhung gegenüber der nominell anliegenden Feldstärke ist für sehr kleine Abstände deutlich: für relative Abstände von 0,05 (oder 0,95) ist sie etwa 6.

In Abb. 5.24 auf Seite 84 ist die Feldstärkeverteilung für diese Elementarzelle abgebildet. Diese ist für alle Abstände dargestellt, die auch in Abb. 5.23 zu finden

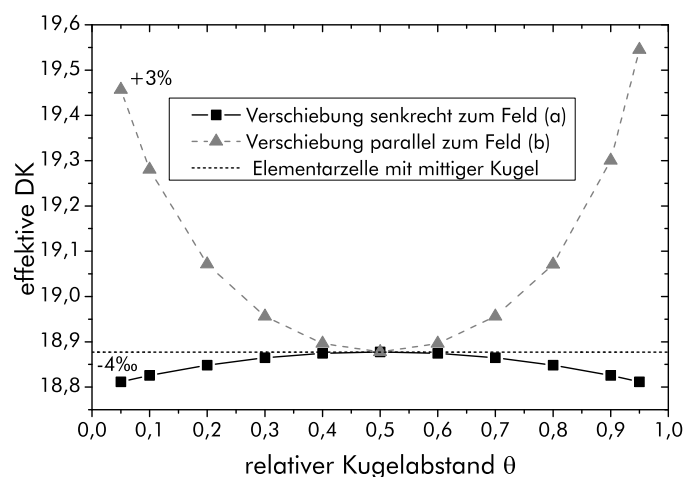


Abb. 5.22: Positionsabhängigkeit der effektiven DK für eine Elementarzelle aus zwei eingebetteten Kugeln, die jeweils *einer* Elementarzelle aus Abb. 5.21a oder Abb. 5.21b entsprechen. Die relativen Abstände beziehen sich auf die Kugelmittelpunkte. Die relativen Permittivitäten von Matrix und Kugeln betragen $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$ und $\epsilon_{\text{Kugel}} = 100$. Der Volumenanteil beträgt $v = 30\%$.

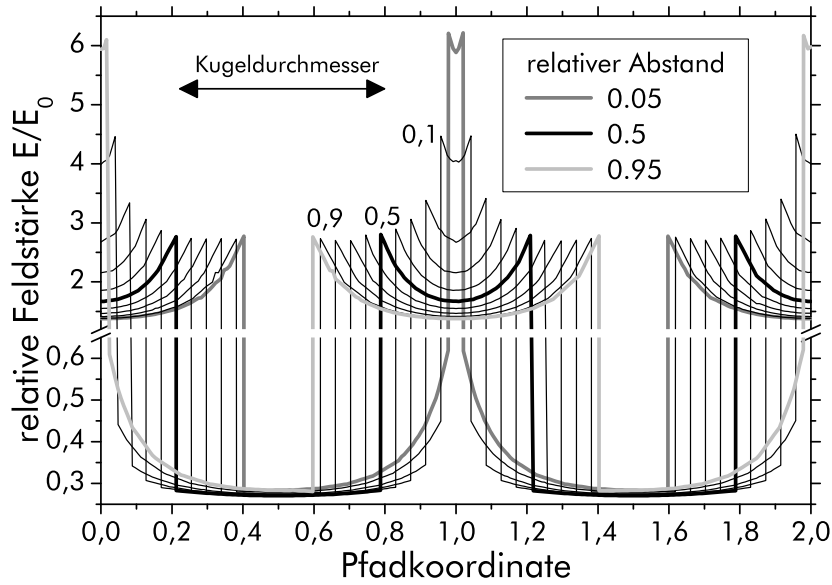


Abb. 5.23: Feldverteilung in einer Elementarzelle mit zwei gleich großen kugelförmigen Einschlüssen entlang eines Pfades durch die Kugelmittelpunkte gemäß Abb. 5.18b auf Seite 80. Der Volumenanteil der Kugeln ($\epsilon_{\text{Kugel}} = 100$) in der Matrix ($\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$) beträgt 10%. Die Grundfläche der Elementarzelle ist quadratisch; die Pfadkoordinate ist relativ zu ihrer Seitenlänge. Entsprechend den Abmessungen der Elementarzelle ($1 \times 1 \times 2$ Einheiten), beträgt der Durchmesser der Kugeln 0,576 Einheiten. Die relativen Abstände wurden abgesehen von den Extremwerten in 0,1-Schritten geändert.

sind. Wegen der Symmetrie auf dem kubischen Gitter sind die Feldstärkeverteilungen identisch für relative Abstände symmetrisch zu 0,5. Die Abweichungen dieser Feldstärkeverteilungen für symmetrische Abstände kann mit $< 1\%$ als geringfügig eingeschätzt werden. Sie rühren von der unterschiedlichen Vernetzung her, die zum Beispiel durch die Übergänge von den Kugeln zu den ebenen Begrenzungsflächen der Elementarzelle hervorgerufen werden.

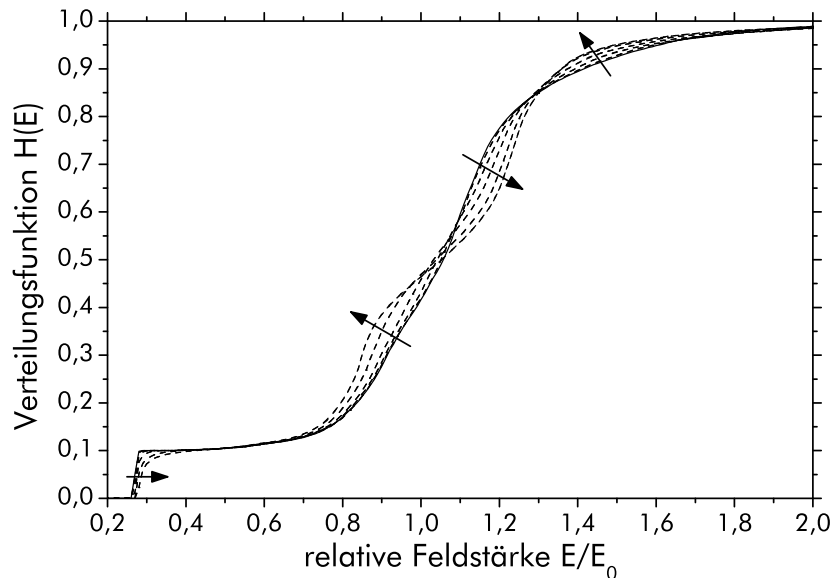


Abb. 5.24: Verteilungsfunktion der Feldstärke (Ausschnitt) für ein Komposit mit eingebetteten Kugeln mit einem Volumenanteil von 10% ($\epsilon_{\text{Kugel}} = 100$, $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$). Die Kurve zum relativen Abstand 0,5 ist durchgezogen. Die Pfeile symbolisieren den Trend zu größeren (gleichbedeutend: kleineren) Abständen, die genauso wie in Abb. 5.23 gewählt worden sind.

Die Verteilung ändert sich mit der Entfernung aus der symmetrischen Position der Kugeln dahingehend, daß in der Verteilungsdichte $h(E)$ dann zwei zunehmend ausgeprägtere Maxima erscheinen, erkennbar an den markanter werdenden Wendepunkten in der Verteilungsfunktion $H(E)$. Diese Maxima treten für kleinere beziehungsweise höhere Feldstärken als die homogene Feldstärke E_0 auf. Zusätzlich dazu kann festgestellt werden, daß sich die maximalen Feldstärken mit wachsender Entfernung aus der symmetrischen Position vergrößern. Das ist darauf zurückzuführen, daß sich dadurch die Abstände der nächstbenachbarten Kugeln verringern.

Bei höheren Volumenanteilen der Kugeln steigen die maximalen Feldstärken an. Dabei ändert sich zwar auch die Strukturierung der Verteilungsfunktion $H(E)$, jedoch in kleinerem Umfang als bei geringeren Volumenanteilen, weil offenbar die Einflüsse der lateral benachbarten Kugeln die Effekte der (geringen) Positionsänderung in Feldrichtung dominieren. In Abb. 5.25 wird das für einen Volumenanteil von 30 % verdeutlicht. Ersichtlich führt der Einfluß der Kugelposition nur zu kleineren Änderungen im dargestellten Feldstärkebereich: das Maximum bei etwa 1,3 Feldstärkeeinheiten verschiebt sich bei Veränderung der Position der Kugeln in der Elementarzelle zu höheren Feldstärken. Bei Feldstärken bis zur homogenen Feldstärke E_0 treten auch Verschiebungen der beiden Maxima auf, die sich aber nicht sehr deutlich abheben.

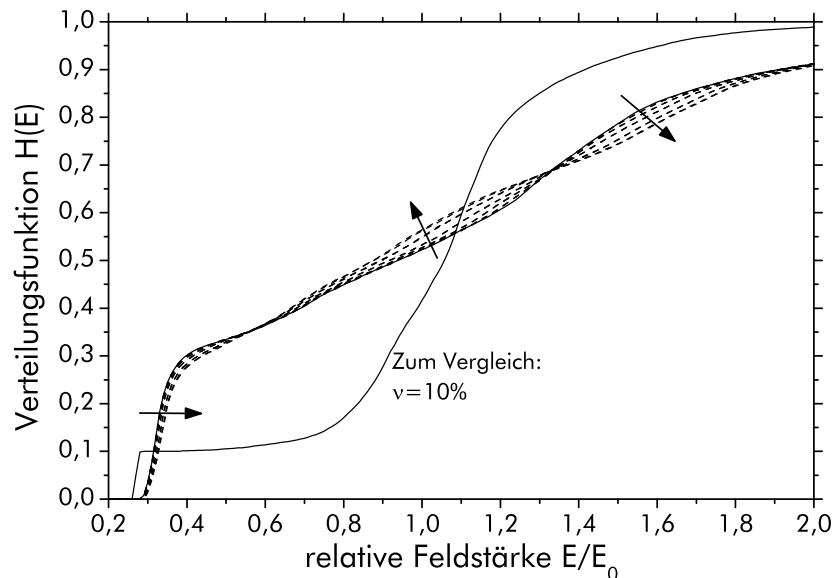


Abb. 5.25: Verteilungsfunktion der Feldstärke (Ausschnitt) für ein Komposit mit eingebetteten Kugeln mit einem Volumenanteil v von 30 % ($\epsilon_{\text{Kugel}} = 100$, $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$). Die Kurve zum relativen Abstand 0,5 ist durchgezogen. Die Pfeile symbolisieren den Trend zu größeren (gleichbedeutend: kleineren) Abständen, die genauso wie in Abb. 5.23 gewählt worden sind. Die Vergleichskurve zeigt $H(E)$ für $v = 10\%$ und einen relativen Abstand von 0,5.

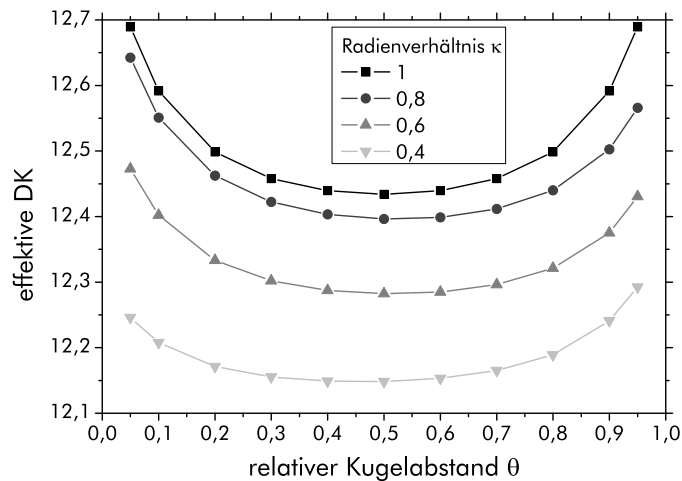
5.2.5.3 Permittivität und Feldstärkeverteilung bei unterschiedlich großen Kugeln

Der Frage, ob unterschiedliche Kugeldurchmesser die effektive DK verändern und wie sie die Feldstärkeverteilung beeinflussen, wird im folgenden anhand einiger Beispiele nachgegangen. Die Elementarzelle wurde dabei wiederum so wie in Abb. 5.18a auf Seite 80 gewählt. Auch hier wurde das Abstandsverhältnis θ bezogen auf die Mittelpunktsabstände der eingebetteten Kugeln verändert.

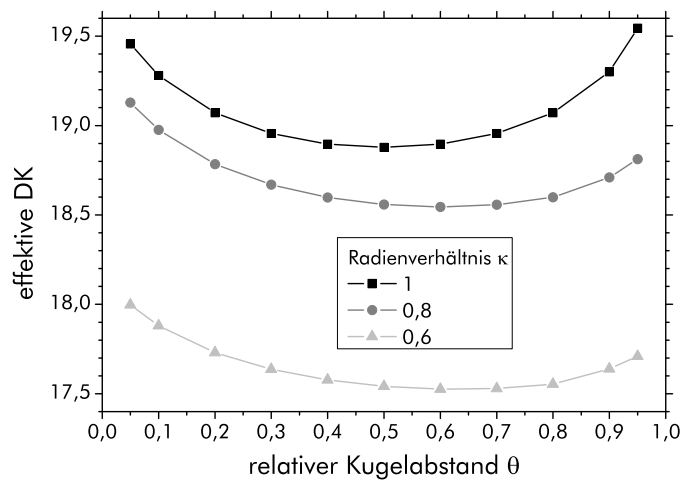
In Abb. 5.26 sind die effektiven relativen Permittivitäten für Komposite mit einem Volumenanteil von 10 % beziehungsweise 30 % dargestellt. Es wurde überprüft, daß die Ergebnisse für die Kugelradienverhältnisse κ und ihrem Reziproken $1/\kappa$ übereinstimmen (nicht abgebildet), wie es aus der Konstruktion der Elementarzelle (Kap. 5.2.5.1) zu erwarten ist.

Gegenüber einer Elementarzelle mit gleich großen kugelförmigen Einschlüssen bewirken die verschiedenen Kugelgrößen eine Senkung der effektiven Permittivität. Diese Abnahme tritt unabhängig von den Kugelpositionen in den Elementarzellen auf. Für ein Kugelradienverhältnis von 0,6 beträgt diese Verringerung beim mittleren relativen Kugelabstand bei einem Volumenanteil von $v = 10\%$ etwa -2% , bei einem höheren Volumenanteil von 30 % hingegen -7% .

Bemerkenswert sind die Werte der effektiven relativen DK. Bei beiden Volumenanteilen fällt auf, daß die von Hashin et al. angegebenen Grenzen (5.11) nicht eingehalten werden: Beispielsweise sollte bei einem Volumenanteil von 30 % eine relative DK des Komposits von 18,7 nicht unterschritten werden. Die modellierte DK ist mit 17,53 (bei einem Radienverhältnis von 0,6 und einem relativen Abstand von 0,6) mehr als 5 % kleiner als dieser Wert, was ein numerisches Artefakt ausschließt. Allerdings wird die untere Wiener-Grenze (5.10), welche eine DK von 13,7 ergibt, nicht verletzt. Der scheinbare Widerspruch zu der unteren Hashin-Grenze löst sich dadurch auf,



(a) Volumenanteil $v = 10\%$



(b) Volumenanteil $v = 30\%$

Abb. 5.26: Effektive relative DK eines Komposites mit einer Elementarzelle mit zwei kugelförmigen Einschlüssen unterschiedlicher Radienverhältnisse. Die Kugelabstände beziehen sich auf die Mittelpunkte. ($\epsilon_{\text{Kugel}} = 100$, $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$)

daß die Bedingungen zu ihrer Anwendung nicht mehr gültig sind. Offenkundig ist in den modellierten Strukturen die Bedingung der Isotropie verletzt.^[135] Dies gilt schon für die kubischen Strukturen mit einheitlich großen eingebetteten Kugeln. Dort ließ sich jedoch die Permittivität in der untersuchten Richtung noch gut mit dieser Grenzformel beschreiben.

Mit zunehmendem Unterschied zwischen den Kugelradien verkleinert sich die effektive DK mehr. Dabei sind bei beiden Volumenanteilen die Absenkungen der DK bei Veränderung des Radienverhältnissen von 1 zu 0,8 kleiner als von 0,8 zu 0,6. Deswegen kann vermutet werden, daß die effektive relative DK von 0-3-Kompositen mit etwa gleich großen kugelförmigen Einschlüssen gegenüber kleinen Radienschwankungen recht unempfindlich sein dürfte.

Die Abb. 5.27 soll eine Vorstellung von der Variabilität der relativen Feldstärke in Abhängigkeit von unterschiedlichen Kugelgrößen bei einem Volumenanteil von $v = 10\%$ geben. Entlang eines Pfades durch die Kugelmittelpunkte wurde die Feldstärke ausgelesen. Die Position der Kugeln ist an den scharf abgegrenzten Bereichen niedriger Feldstärke zu erkennen. Vor dem Hintergrund der Überlegungen zur Konstruktion der Elementarzelle in Kap. 5.2.5.1 läßt sich die Änderung der Kugelpositionen für verschiedene κ nachvollziehen. Für die benutzten Parameter ergibt sich die Sequenz der Radienverhältnisse κ von $1 \rightarrow 0,8 \rightarrow 0,4 \rightarrow 0,6$ für die der Randabstand der größeren Kugel sowie der Mittelpunktsabstand Δc abnimmt (entsprechend dem Minimum bei $\kappa = 1/\sqrt{3}$).

Der Randabstand der kleineren Kugel (mit der kleineren Pfadkoordinate) ist bei einer Änderung des Kugelradienverhältnisses deutlich variabler als der Randabstand für die größere. Wegen der Randbedingungen, welche implizit die Spiegelung an den Randflächen vorgeben, führt das zu einer Asymmetrie der Feldverläufe und die Feldstärken stimmen für $\kappa \neq 1$ an den Rändern nicht überein. Für die Pfadkoordinate 0 nimmt die Feldstärke mit größer werdenden Kugeln zu, entsprechend dem mit steigendem κ abnehmenden Randabstand, während für die Feldstärke am oberen Elementarzellenrand (Pfadkoordinate 2) die Feldstärke sich wesentlich schwächer

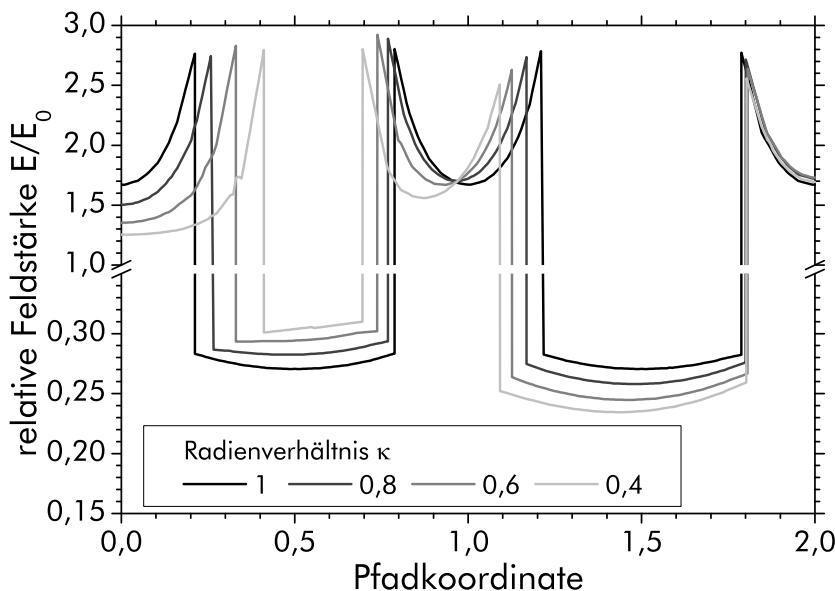


Abb. 5.27: Feldverteilung in einer Elementarzelle mit zwei verschieden großen kugelförmigen Einschlüssen entlang eines Pfades durch die Kugelmittelpunkte gemäß Abb. 5.18b auf Seite 80. Der Volumenanteil der Kugeln ($\epsilon_{\text{Kugel}} = 100$) in der Matrix ($\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$) beträgt 10 % und der relative Abstand $\theta = 0,5$. Die Pfadkoordinate zählt in relativen Einheiten zur Seitenlänge der Grundfläche.

unterscheidet, wobei die Unterschiede nicht ausschließlich mit den Randabständen verbunden sind, denn die Größe der Feldstärke ist nicht mit der κ -Sequenz korreliert.

Die Feldstärke im Inneren der Kugeln variiert wegen der elektrostatischen Wechselwirkung. Mit fallendem Radienverhältnis κ steigt die Feldstärke in der kleineren Kugel, aber sie fällt in der mit größerem Durchmesser. Das kann darauf zurückgeführt werden, daß sich *beide* Kugelradien bei sich verkleinerndem κ gegenläufig ändern: der Radius der unteren Kugel wird verkleinert, der der oberen nimmt aber zu (vgl. Abb. 5.19 auf Seite 81).

Beim dargestellten relativen Kugelabstand $\theta = 0,5$ verursachen unterschiedliche Radienverhältnisse κ keine wesentliche Änderung der maximalen Feldstärke entlang der Schnittlinie. Der Vergleich der unterschiedlichen Maxima weist auf unterschiedliche Einflüsse hin. Die zu verschiedenen κ gehörenden Maxima am Rand der größeren Kugel sind um so höher, je geringer das Radienverhältnis ist und damit um so größer diese Kugel ist. Die Maxima am Rand der kleineren Kugel sind für $\kappa = 0,6$ am höchsten, entsprechen in ihrer Reihenfolge aber nicht der Sequenz der abnehmenden Abstände.

Die Verteilungsfunktionen $H(E)$ derselben Elementarzelle werden in Abb. 5.28 gegeben. Die Kante bei $H(E) = 0,1$ weist auf die Feldstärke im Inneren der Kugeln hin und entspricht dem Volumenanteil der Einschlüsse. Die Feldstärke im Kugelinneren wird von Größenunterschieden der eingebetteten Kugeln beeinflusst. Für steigenden Größenunterschied wird das zugehörige Maximum der Dichtefunktion $h(E)$ breiter, sichtbar am weniger ausgeprägt horizontalen Verlauf bei $H(E) = \nu = 0,1$. Außerdem verschiebt es sich leicht zu kleineren Feldstärken hin. Die innere Struktur ist offenbar nicht ausschließlich von den longitudinalen Abständen bestimmt, weil die Unterschiede sich nicht entlang der κ -Sequenz abnehmender Abstände verändern. Offenbar spielen auch die lateralen Einflüsse eine Rolle.

Dieser Kante entspricht ein Maximum der Dichtefunktion $h(E)$. In der Umgebung von $E = E_0$ kommen bei gleich großen Kugeln zwei weitere vor, eines für $E < E_0$, eines für $E > E_0$. Bei unterschiedlich großen Kugeln sind diese Maxima jedoch nicht mehr klar getrennt, sondern sorgen eher für eine Verbreiterung eines der Maxima.

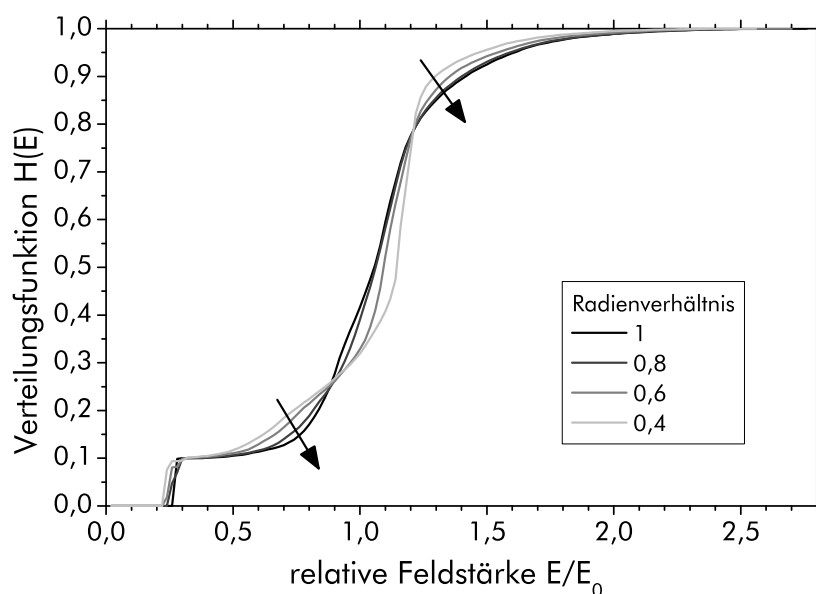


Abb. 5.28: Verteilungsfunktion der Feldstärke in einer Elementarzelle mit zwei verschieden großen kugelförmigen Einschlüssen. Es gelten die gleichen Bedingungen wie unter Abb. 5.27 (Volumenanteil der Kugeln $\nu = 10\%$, relativer Abstand $\theta = 0,5$ sowie $\epsilon_{\text{Kugel}} = 100$ und $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$).

Die höchsten Feldstärken treten für gleich große Kugeln auf. Die Feldstärkemaxima für $\kappa = 0,4$ sind am kleinsten, jene von $\kappa = 0,6$ und $\kappa = 0,8$ lassen sich entsprechend der Auflösung der Klassierung nicht mehr voneinander trennen.

Schon die Auswertung entlang des Pfades zeigte deutlich die Komplexität der Feldstärkeverteilung bei unterschiedlich großen Kugeln auf. Um so mehr ist das für die Feldstärkeverteilung $H(E)$ im gesamten Elementarzellenvolumen der Fall. Um einen Eindruck von der Schwankungsbreite in Abhängigkeit vom Radienverhältnis κ und dem relativen Kugelabstand θ zu geben, ist in Abb. 5.29 für die diskutierte Elementarzelle ein Ausschnitt der Verteilungsfunktion $H(E)$ gegeben.

Den größten Einfluß auf $H(E)$ haben die unterschiedlichen Kugelradienverhältnisse und relativen Abstände für die Feldstärken in der Umgebung von E_0 . Die Dichtefunktion $h(E)$ zeigt dort zwei ausgeprägte Maxima (für $E < E_0$ und für $E > E_0$) bei den relativen Abständen $\theta = 0,05$ und $\theta = 0,95$. Die Maxima für $E < E_0$ sind bei kleineren Radienverhältnissen κ weniger deutlich ausgeprägt. Sie werden kleiner und verschieben sich zu größeren Feldstärken, so daß bei $\kappa = 0,4$ nur noch das Maximum zu $E > E_0$ deutlich ausgeprägt ist.

Die höheren Feldstärken (in der Abbildung nicht dargestellt) werden bei den unterschiedlich großen Kugeln für die Abstände $\theta = 0,95$ erreicht. Auch wenn die kleinsten longitudinalen Abstände der benachbarten Kugelränder für beide θ gleich groß sind, so sind die Situationen dennoch unterschiedlich: bei $\theta = 0,05$ sind diese zwischen der größeren und der kleineren Kugel, bei $\theta = 0,95$ jedoch zwischen den – durch das Gitter – benachbarten größeren Kugeln. Das könnte auf eine laterale Beeinflussung aufgrund der durch das Gitter auch *lateral* dichter benachbarten größeren Kugeln hinweisen.

Es muß aber betont werden, daß die Auswertung bezüglich der maximalen Feldstärke aufgrund der Methode lediglich über das Volumen gemittelte Werte ergibt, die vom Volumen der ausgewerteten Elemente abhängen.

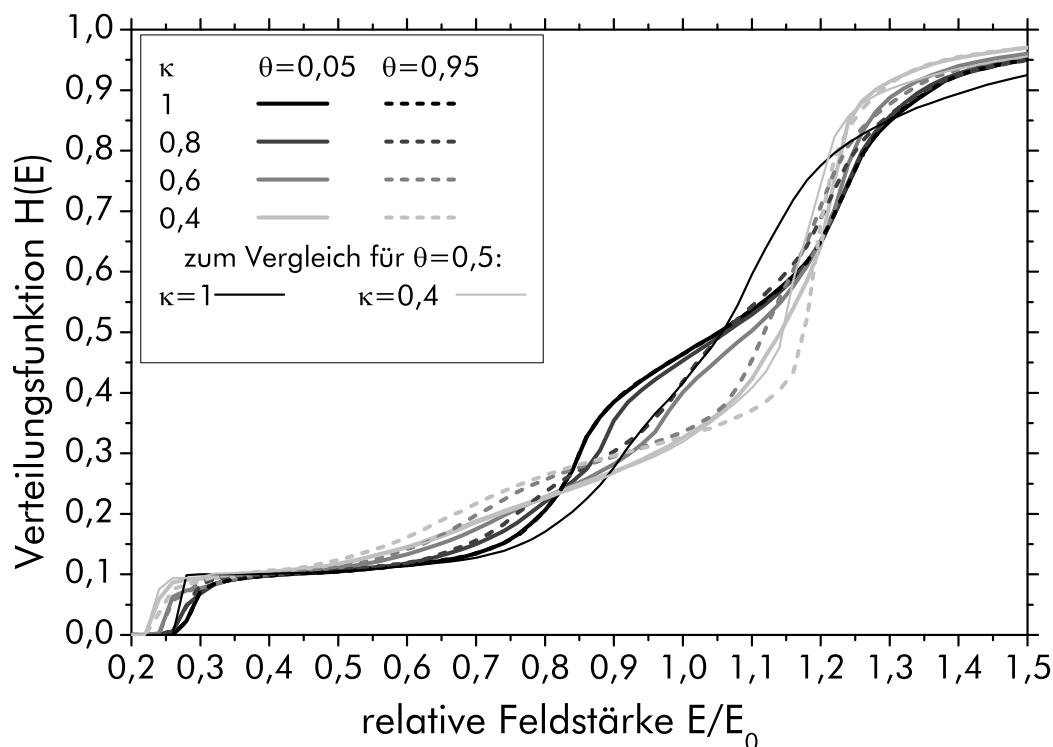


Abb. 5.29: Verteilungsfunktion der Feldstärke (Ausschnitt) für eine Elementarzelle mit zwei verschiedenen großen kugelförmigen Einschlüssen. Der Volumengehalt der Einschlüsse beträgt 10%. (Zu den Parametern und der Elementarzelle siehe Abb. 5.27 und Abb. 5.28.)

5.2.6 Analyse der Feldstärkeverteilung bei kubischen Einschlüssen

In Abb. 5.30 sind die Verteilungsfunktionen $H(E)$ der elektrischen Feldstärke für einen Würfel bei verschiedenen Drehwinkeln im Vergleich zu einer Kugel dargestellt. Offenbar sind sich die Feldstärkeverteilung der eingebetteten Kugel und des eingebetteten Würfels für einen Drehwinkel von 45° recht ähnlich, wenn von den kleinen Feldstärken abgesehen wird. Außerdem zeigen sich je nach Drehwinkel unterschiedliche Maximalfeldstärken.

Bei dem recht geringen Volumenanteil hat die Ausrichtung des eingebetteten Würfels in der Elementarzelle nur einen kleinen Einfluß auf die Feldstärkeverteilung. Die höchsten Feldstärken treten für einen Drehwinkel $\phi = 45^\circ$ auf, entsprechend dem dann dichtesten Abstand der Würfel auf dem kubischen Gitter.

Für den höheren Volumenanteil $v = 30\%$ sind in Abb. 5.31 die Verteilungsfunktionen $H(E)$ angegeben. Die Verteilungsfunktion für den eingebetteten Würfel zeigt deutliche Unterschiede zu der einer Kugel gleichen Volumenanteils. Bei kleinen relativen Feldstärken beginnen die Verteilungsfunktionen $H(E)$ der Elementarzellen mit eingebettetem Würfel *kontinuierlich* im Gegensatz zur Kugel, wo $H(E)$ mit einer scharfen Kante beginnt. Im Vergleich mit dem geringeren Volumenanteil $v = 10\%$ ist der Verlauf in diesem Bereich aber deutlich stärker vom Drehwinkel des eingebetteten Würfels abhängig. Die an diesen Bereich des Einlaufens sich anschließenden Bereiche sind außerdem steiler als beim geringeren Volumenanteil, so daß sie sich dem Verlauf der Kante bei eingebetteter Kugel annähern. Allerdings ist diese größere Ähnlichkeit nur für die kleineren relativen Feldstärken gegeben. Danach unterscheiden sich die Verteilungsfunktionen mit eingebettetem Würfel und Kugel deutlich. Auch bei einem Drehwinkel von 45° ist keine so große Ähnlichkeit festzustellen wie noch bei $v = 10\%$.

Beim höheren Volumenanteil wirken sich die Änderungen des Drehwinkels stärker aus. Besonders auffällig ist ein Wendepunkt der Verteilungsfunktion für einen ungedrehten Würfel bei einer Feldstärke von ungefähr $2,4 \cdot E_0$. Dieser tritt bei anderen Drehwinkeln nicht auf. Die geometrische Situation entspricht einem eingebetteten

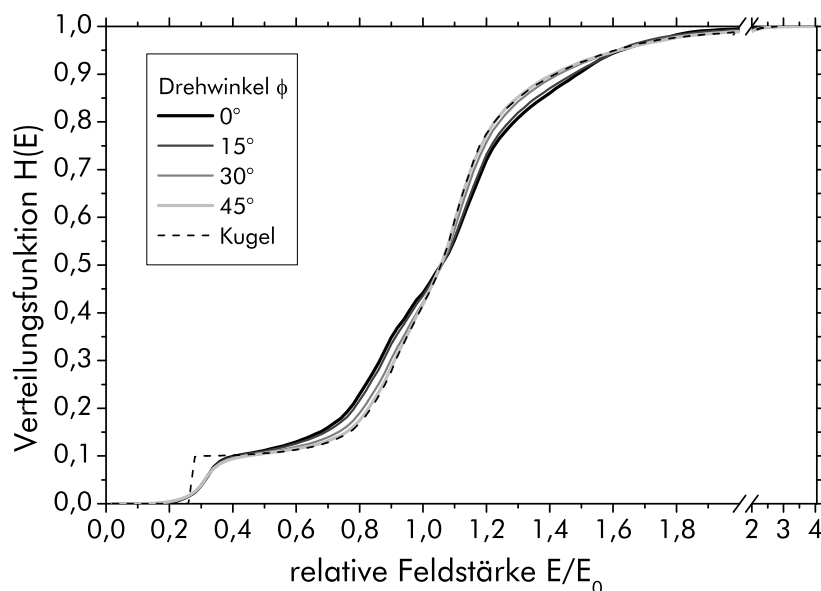


Abb. 5.30: Verteilungsfunktion $H(E)$ der elektrischen Feldstärke für einen eingebetteten Würfel bei verschiedenen Drehwinkeln ϕ (zur Definition von ϕ siehe Abb. 5.7b auf Seite 70). Zum Vergleich ist die Verteilungsfunktion einer Kugel mit ansonsten gleichen Parametern angegeben. Der Volumenanteil v beträgt 10% . Die relativen Permittivitäten betragen $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$ und $\epsilon_{\text{Kugel/Würfel}} = 100$.

Würfel, dessen Kanten parallel zu denen der würfelförmigen Elementarzelle liegen (vgl. Abb. 5.7b auf Seite 70). An den Konturplots der elektrischen Feldstärke kann erkannt werden (nicht abgebildet), daß die genannte Feldstärke in einem Bereich zwischen den oberen und unteren Deckflächen und den Deckelektroden der Elementarzelle auftritt, also in Richtung der Feldstärke ohne Einschuß. Bei größeren Volumenanteilen wird dieser Einfluß dominierender.

Diese Auffälligkeit der ungedrehten eingebetteten Würfel soll anhand der zugehörigen Dichtefunktionen $h(E)$ für verschiedene Volumenanteile anhand von Abb. 5.32 auf Seite 92 weiter diskutiert werden. Die Maxima bei Feldstärken um $2 \cdot E_0$ heben sich deutlich hervor. Für höhere Volumenanteile ν sind diese deutlicher ausgeprägt, das heißt schmaler und höher. Bemerkenswert ist außerdem, daß sich die Maxima zu höheren Feldstärken verschieben. Eine analoge Verschiebung hin zu höheren Feldstärken ist bei steigendem ν für sehr kleine Feldstärken (beim Beginn des ersten Maximums) zu beobachten. Das erste Maximum ist Feldstärken im Inneren der eingebetteten Würfel zuzuordnen.

Im Falle sehr großer Volumenanteile nähert sich die kubische Elementarzelle mit eingebetteten ungedrehten Würfeln der einfachen Parallelschaltung von Plattenkondensatoren mit Dielektrikum an. Für geeignete Schnitte können auch Teile der Elementarzelle mit dieser Überlegung näherungsweise beschrieben werden. Dann ist zu erwarten, daß das Feldstärkeverhältnis innerhalb der Matrix oberhalb des Einschlusses und der Feldstärke im Einschuß im Verhältnis $\epsilon_{\text{Würfel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ steht. Diese Erwartung kann überprüft werden, indem für alle 4 Volumenanteile die Feldstärken der diskutierten Maxima mit denen im Partikelinneren verglichen werden. Werden für letztere die linken Kanten der entsprechenden Maxima herangezogen, so ist das Verhältnis der Feldstärken tatsächlich etwa 10.

Mit steigendem Volumenanteil werden die Histogramme $h(E)$ zwischen den beiden diskutierten Maxima immer unstrukturierter. Ein Doppelmaximum zwischen diesen beiden wird für wachsende ν kleiner. Diese Unterschiede zeigen sich klarer bei der Betrachtung der Verteilungsfunktion, die für die zwei extremen Drehwinkel 0° und 45° in Abb. 5.33 auf Seite 92 dargestellt ist.

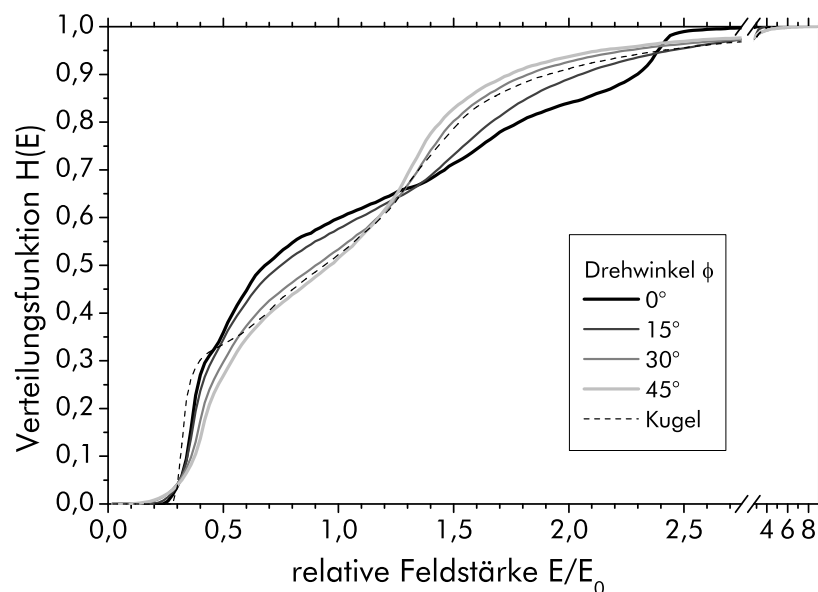


Abb. 5.31: Verteilungsfunktion $H(E)$ der elektrischen Feldstärke für einen eingebetteten Würfel mit einem Volumenanteil von $\nu = 30\%$ bei verschiedenen Drehwinkeln ϕ . Die relativen Permittivitäten betragen $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$ und $\epsilon_{\text{Kugel/Würfel}} = 100$.

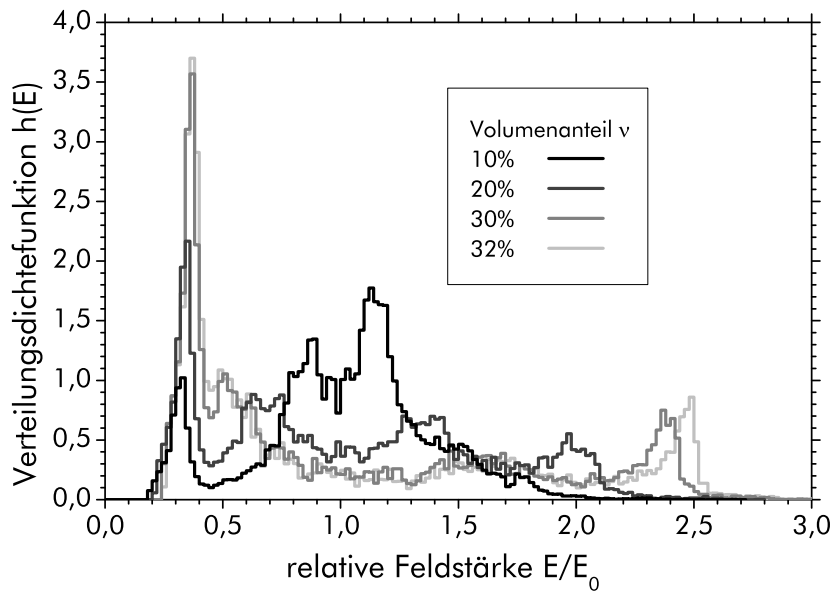


Abb. 5.32: Dichtefunktion $h(E)$ der relativen Feldstärke für eingebettete ungedrehte Würfel ($\phi = 0$) mit unterschiedlichen Volumenanteilen v . Die relativen Permittivitäten betragen $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$ und $\epsilon_{\text{Würfel}} = 100$.

Bei den höheren Volumenanteilen wirkt sich die Veränderung des Drehwinkels stärker auf die Feldstärkeverteilung aus als bei niedrigeren. Wie zu erwarten, treten die größten Feldstärken für den höchsten untersuchten Volumenanteil $v = 32\%$ auf, der schon deutlich in der Nähe der Perkolationsgrenze ($35,4\%$) liegt. Die durch die Volumenanteile bedingten Unterschiede der Verteilungsfunktion $H(E)$ bei gleicher relativer Feldstärke sind bei ungedrehtem Würfel größer als bei Drehwinkeln von 45° . Besonders augenfällig wird das beim Vergleich der Volumenanteile 30% und 32% .

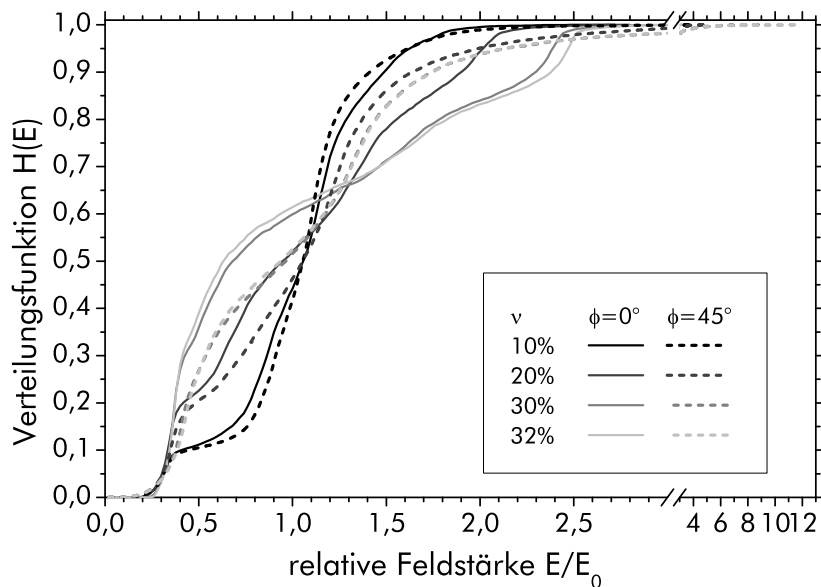


Abb. 5.33: Feldverteilungsfunktion $H(E)$ für eingebettete Würfel mit verschiedenen Volumenanteilen v und bei Drehwinkeln ϕ von 0° und 45° . Die relativen Permittivitäten betragen $\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$ und $\epsilon_{\text{Würfel}} = 100$.

5.2.7 Feldstärke-Extrema eingebetteter Kugeln

In Kompositen mit kleinen Volumenanteilen ν wechselwirken die eingebetteten Kugeln nur schwach miteinander. Aus diesem Grund kann erwartet werden, daß der Grenzfall *einzelner* eingebetteter Kugeln im homogenen elektrischen Feld zur Beschreibung geeignet ist. Die *ortsabhängige* Feldverteilung kann (im Gegensatz zur Häufigkeitsverteilung der elektrischen Feldstärke) direkt aus der Lösung der Laplace-Gleichung in Kugelkoordinaten ermittelt werden.^[45] Das Hauptergebnis läßt sich auch vergleichsweise elementar^[42] ableiten: Die eingebettete Kugel ist homogen polarisiert und die Feldstärke in ihr homogen verteilt. Im Außenraum kommt zum homogenen Feld noch das durch die Polarisationsladungen der Kugel verursachte elektrische Feld hinzu. Dieses entspricht der Feldstärkeverteilung eines im Kugelzentrum befindlichen Dipoles, der parallel der Feldachse des (ohne eingebettete Kugel) homogenen Feldes ausgerichtet ist. Je nachdem, ob die DK der Kugel größer oder kleiner als die der Matrix ist, ist die Polarisation in Richtung des homogenen Feldes oder entgegengesetzt gerichtet. Entsprechend der Überlagerung werden die Feldstärkeextrema auf dem Rand der Kugel angenommen.

Die Feldstärke im Inneren der kugelförmigen Einschlüsse wurde bereits in (5.2) angegeben. Die Achse des homogenen Feldes durch den Mittelpunkt gibt besondere Punkte vor: die Pole auf der Ober- und Unterseite der Kugel sowie die Äquatorlinie. Die Feldstärken an den Polen lassen sich am einfachsten aus der Stetigkeit der Normalkomponenten von \mathbf{D} gewinnen, weil dort die beiden lateralen Feldrichtungen verschwinden. Somit können die Ausdrücke

$$E_{\text{Kugelinneres}} = \frac{3}{2 + \frac{\epsilon_{\text{Kugel}}}{\epsilon_{\text{Matrix}}}} E_0 \quad \text{und} \quad E_{\text{Kugelrand}} = \frac{\epsilon_{\text{Kugel}}}{\epsilon_{\text{Matrix}}} \cdot \frac{3}{2 + \frac{\epsilon_{\text{Kugel}}}{\epsilon_{\text{Matrix}}}} E_0 \quad (5.18)$$

gewonnen werden, welche entsprechend dem DK-Verhältnis $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ die Feldstärkeminima oder -maxima bezeichnen. Eine genauere Analyse der angegebenen Ergebnisse von^[45] erlaubt es, die Positionen der Feldstärkeminima und -maxima auf dem Kugelrand genauer zu lokalisieren. Für $\epsilon_{\text{Kugel}} > \epsilon_{\text{Matrix}}$ treten die Maxima an den Kugelpolen und die Minima auf der Äquatorlinie (und im Inneren der Kugel) auf. Hingegen sind für $\epsilon_{\text{Matrix}} > \epsilon_{\text{Kugel}}$ die Minima an den Polen und die Maxima auf der Äquatorlinie (und im Inneren der Kugel) angesiedelt.

In Abb. 5.34 auf Seite 94 werden die aus FEM-Modellierungen bestimmten Positionen der Feldstärkeextrema anhand der 100 größten und 100 kleinsten über das Elementvolumen gemittelten Feldstärkebeträge dargestellt. Die zu ihnen gehörigen Elementmittelpunkte sind in der Elementarzelle abgebildet. Wie schon erläutert, enthält die Elementarzelle eine zentrierte Kugel. Somit wird durch die impliziten Randbedingungen mit der Elementarzelle ein einfach-kubisches Gitter modelliert (vgl. Kap. 5.1.5 und Kap. 5.2.1). Für andere untersuchte Gittertypen würden abweichende Positionen der Feldstärkeextrema auftreten.

Die Feldstärkemaxima sind wie zu erwarten an den Polen angeordnet. Die Minima treten entlang des Kugeläquators auf. Allerdings fällt hierbei auf, daß eine Vorzugsrichtung hin zu den Seitenflächen der Elementarzelle vorliegt. Im Falle der einzelnen eingebetteten Kugel sollten wegen der Kugelsymmetrie (bezüglich der Feldachse) die Minima keine solchen Vorzugsrichtungen haben. Modelliert wurde jedoch ein einfach-kubisches Gitter. Die Abstände zu den nächsten Nachbarn liegen deswegen auf den Verbindungslinien der jeweiligen Kugelmittelpunkte. Die aus der FEM ermittelten Minima erstrecken sich auf dem Kugeläquator um diese Richtungen. Das zeigt, daß selbst bei geringen Volumenanteilen der Gittereinfluß auf die Feldverteilung gegeben

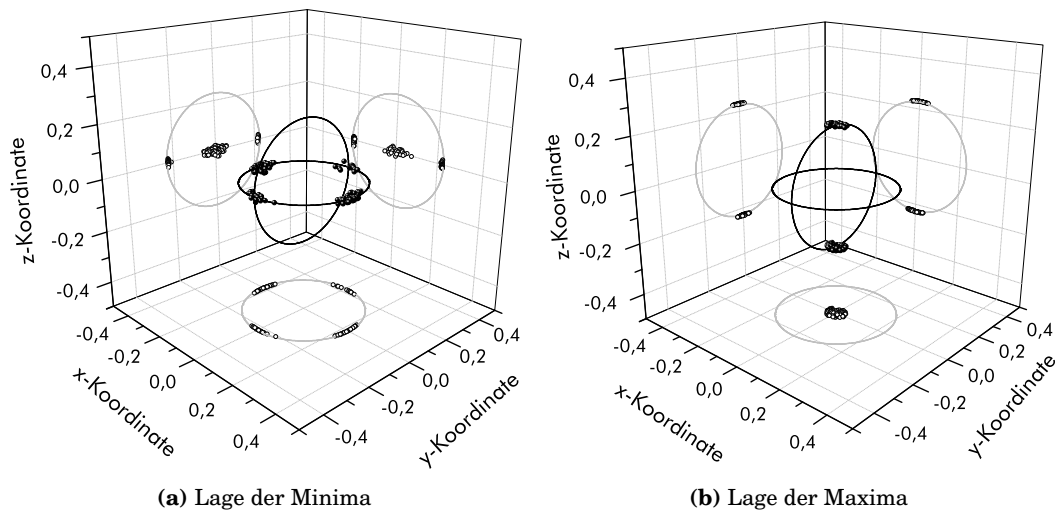


Abb. 5.34: Elementarzelle mit eingebetteter Kugel: Positionen der 100 (a) kleinsten und (b) größten Feldstärkebeträge ($\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}=100$). Die Kantenlänge der würfelförmigen Elementarzelle beträgt 1 Einheit. Die aus dem Volumenanteil $v = 5\%$ folgende Größe der Kugel wurde durch ausgewählte Großkreise verdeutlicht. In den Projektionen zeigt sich, daß die Extrema entlang des Randes angeordnet sind. Die Feldstärke war parallel zur z -Achse gerichtet.

ist, auch wenn auf die DK (vgl. Abb. 5.5 auf Seite 69 mit $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}=10$) kaum ein Einfluß festzustellen ist. Der Gittereinfluß äußert sich auch darin, daß im Inneren der eingebetteten Kugeln keine der 100 kleinsten Minima auftreten. Jedoch sind die relativen Unterschiede des kleinsten und größten dieser Minima kleiner als 0,05 %. Die mit der FEM ermittelten Feldstärken innerhalb der Kugel unterscheiden sich nicht mehr als 3 % voneinander. Die von der isolierten eingebetteten Kugel erwartete homogene Feldstärkeverteilung wird also nur näherungsweise bei der Gitteranordnung erreicht, selbst wenn der Volumenanteil der Kugeln nur 5 % beträgt.

In Abb. 5.35 sind die Extrema der Feldstärke für den Fall des inversen Verhältnisses $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}=0,01$ dargestellt. Die Lage der Minima und Maxima ist im Vergleich vertauscht, demnach sind hier die Feldstärkemaxima in Richtung der nächsten

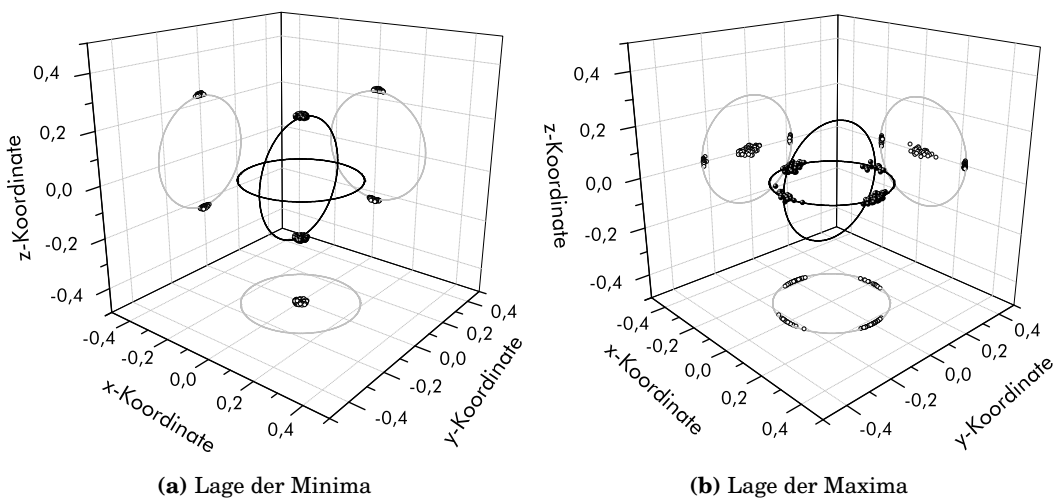


Abb. 5.35: Positionen der 100 (a) kleinsten und (b) größten Feldstärkebeträge in einer Elementarzelle wie in Abb. 5.34 aber mit $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}=0,01$.

Nachbarn auf dem Kugeläquator angeordnet. Auch wenn den Ergebnissen für alle DK-Verhältnisse die gleichen FEM-Netze zugrundeliegen, sind doch kleine Unterschiede in den Lagen der Maxima/Minima beziehungsweise Minima/Maxima im inversen Fall festzustellen. Die für die Unterschiede der Feldstärkebeträge der Maxima genannten Aussagen für das DK-Verhältnis von 100 lassen sich – auch in ihrer Größe – auf das DK-Verhältnis von 0,01 übertragen.

Nun sollen die Beträge der Feldstärken für kleine Volumenanteile ν näher diskutiert werden. Zunächst verdient das asymptotische Verhalten von (5.18) Beachtung. Im Grenzfall $\epsilon_{\text{Kugel}} \ll \epsilon_{\text{Matrix}}$ strebt die Feldstärke im Kugellinneren gegen $1,5 \cdot E_0$, während am Kugelrand die Feldstärke verschwindet. Falls die DK der Kugel größer als die der Matrix ist, so treten im Kugellinneren die geringsten Feldstärken auf, die für $\epsilon_{\text{Kugel}} \gg \epsilon_{\text{Matrix}}$ gegen Null streben. Am Kugelrand tritt im Grenzfall sehr großer DK-Verhältnisse eine Feldstärke von $3 \cdot E_0$ auf.

Die Ausdrücke (5.18) werden in Abb. 5.36 Ergebnissen der FEM für Elementarzellen mit einer eingebetteten Kugel gegenübergestellt. Dabei wurde ein Volumenanteil der Kugeln von $\nu = 5\%$ angenommen. Das DK-Verhältnis $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ wurde in einem Bereich zwischen 0,01 und 100 verändert. Offenkundig stellen die Überlegungen dort eine brauchbare Näherung dar. Dennoch treten deutliche systematische Abweichungen auf, sobald das DK-Verhältnis sich deutlich von 1 (dies entspricht der homogenen Elementarzelle) unterscheidet. Die absolute Abweichung der maximalen Feldstärke ist im Falle $\epsilon_{\text{Kugel}} > \epsilon_{\text{Matrix}}$ besonders groß. Die maximale Feldstärke wird in den FEM-Rechnungen im Vergleich zur Abschätzung deutlich zu groß ermittelt. Die relative Abweichung nimmt dabei mit steigendem DK-Verhältnis zu. Für das DK-Verhältnis 100 beispielsweise beträgt sie fast 5,8%. Die absolute Abweichung der minimalen Feldstärke ist gering, relativ betrachtet beträgt sie aber für dieses DK-Verhältnis 4,2%, wobei auch hier die relative Abweichung mit steigendem DK-Verhältnis zunimmt. Betrachtet man hingegen den Fall $\epsilon_{\text{Kugel}} < \epsilon_{\text{Matrix}}$, so wird die Größe der Feldstärkemaxima im Vergleich zur Abschätzung zu klein ermittelt. Jedoch beträgt

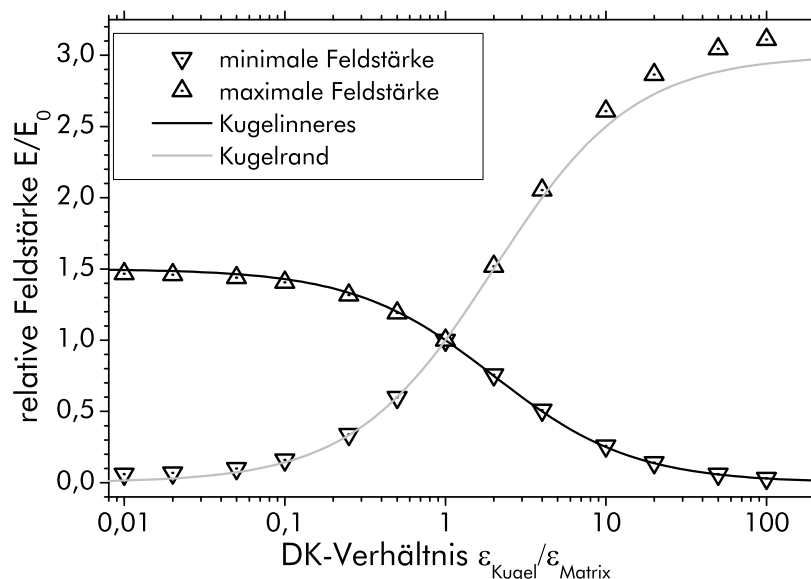


Abb. 5.36: Aus der FEM-Modellierung gewonnene größte und kleinste Feldstärken in einem Komposit mit eingebetteten Kugeln mit einem Volumenanteil von $\nu = 5\%$ für verschiedene DK-Verhältnisse. Die DK-Verhältnisse $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ sind logarithmisch aufgetragen. Die gewonnenen Werte werden verglichen mit den Werten für das Kugellinnere und den Kugelrand (5.18), wie sie für *nicht* wechselwirkende Kugeln erwartet werden können.

der Absolutbetrag der relative Abweichung bei den untersuchten DK-Verhältnissen weniger als 2 %, wobei er mit sinkendem DK-Verhältnis zunimmt. Die Minima werden für kleine DK-Verhältnisse mit der FEM zu groß ermittelt. Auch wenn es sich absolut um kleine Abweichungen handelt, so ist doch die relative Abweichung für das DK-Verhältnis 0,02 mit 300 % äußerst groß.

Wegen des Fehlens geschlossener Lösungen für die Feldstärkeverteilung von kubischen Gittern mit den untersuchten Elementarzellen, ist die Bewertung dieser Ergebnisse mit Unsicherheiten behaftet. Für den in dieser Arbeit verstärkt untersuchten Fall $\epsilon_{\text{Kugel}} > \epsilon_{\text{Matrix}}$ zeigt sich (vgl. Abb. 5.23 auf Seite 84), daß die Feldstärke im Inneren der Kugel nicht homogen verteilt ist, sondern im Allgemeinen gegenüber der mit (5.18) ermittelten auf der Ober- und Unterseite der Kugel größer ist. Das läßt vermuten, daß die Abschätzungen (5.18) in diesem Fall die Feldstärken nach unten abschätzen. Der Perkolationsseffekt bei höheren Volumenanteilen v ist ein weiterer Beleg dafür. Zu einem gewissen Anteil muß aber auch vermutet werden, daß numerische Artefakte zum Tragen kommen. Durch die Diskretisierung wird nicht der Punkt der höchsten Feldstärke erreicht, sondern ein *Bereich*, indem die lateralen Feldkomponenten nicht verschwinden und somit eine Überhöhung der Feldstärke auftreten kann. Das könnte den durchgehenden Trend der Erhöhung der Feldstärke am Kugelrand (Abb. 5.36 auf Seite 95) erklären. Da die Feldstärke zudem eine durch die Ableitung des Potentials ermittelte Größe ist, ist hier auch ein Diskretisierungsfehler zu vermuten.

5.2.8 Energiedichteverteilung

Die Energiedichte läßt sich im Falle isotroper Permittivität und linearer Materialgesetze direkt mit (2.15) aus der Feldstärke und der DK in einem bestimmten Volumenelement berechnen. Eine Klassierung bezüglich der Energiedichte ist für den Gebrauch von Verbundwerkstoffen zur Energiespeicherung grundsätzlich interessant. Nachfolgend wird die Energiedichteverteilung exemplarisch für den Grenzfall kleiner Volumenanteile diskutiert.

In den betrachteten binären Systemen aus zwei *homogenen* Phasen kann der Einfluß der verschiedenen Parameter bereits aus der Feldverteilung $H(E)$ abgeschätzt werden, wobei dies die Häufigkeit und Lokalisierung einschließt. Innerhalb der eingebetteten Kugeln liegt eine weitgehend homogene Feldverteilung vor, deren Feldstärke um so niedriger ist, je ausgeprägter der DK-Kontrast zwischen der Matrix (mit der niedrigeren DK) ist. Das bedeutet, daß die Kugeln selbst nur wenig zur Energiedichte beitragen. Wesentlicher sind hingegen die Bereiche am Übergang von Kugel zu Matrix. Dort treten deutliche Feldstärkeüberhöhungen auf, die durch ihren quadratischen Einfluß auf die Energiedichte wesentlich zu dieser beitragen. Ein wachsender DK-Kontrast erhöht diese Feldstärkeüberhöhung überproportional. Allerdings treten diese Spitzenwerte für die Feldstärken nur in sehr kleinen Volumina des Verbundes auf. Zudem ist die Steigerung der Energiedichte durch höhere Feldstärken durch die Durchschlagsfestigkeit in realen Strukturen begrenzt. Selbst bei der Annahme eines linearen Materialgesetzes für die Permittivität kann somit geschlußfolgert werden, daß der maximal erreichbaren Energiedichte dadurch Grenzen gesetzt werden. ^[135]

Aus den Abschätzungen (5.18) für die extremalen Feldstärken in Kompositen mit eingebetteten Kugeln lassen sich Abschätzungen für die Extrema der Energiedichteverteilung gewinnen. Die Energiedichte ist in der Näherung kleiner Volumenanteile im Innern der Kugeln

$$w_i = \frac{9E_0^2}{2} \epsilon_0 \epsilon_{\text{Matrix}} \cdot \frac{\frac{\epsilon_{\text{Kugel}}}{\epsilon_{\text{Matrix}}}}{\left(2 + \frac{\epsilon_{\text{Kugel}}}{\epsilon_{\text{Matrix}}}\right)^2}, \quad (5.19)$$

wobei die Zusammensetzung des Komposits über die Permittivitäten seiner Konstituenten eingeht. Das DK-Verhältnis $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ verdient hierbei besondere Beachtung. Die Energiedichte im Kugellinneren wird für wachsende DK-Verhältnisse immer kleiner, weil der Einfluß der sinkenden Feldstärke den der steigenden DK überwiegt. Für das Verhältnis $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}} = 2$ ist die Energiedichte der Kugeln maximal.

Für den Kugelrand (welcher der Matrix zugeordnet ist) folgt

$$w_a = w_i \cdot \frac{\epsilon_{\text{Kugel}}}{\epsilon_{\text{Matrix}}}. \quad (5.20)$$

Der Grenzwert für wachsende DK-Verhältnisse $\epsilon_{\text{Kugel}}/\epsilon_{\text{Matrix}}$ ist der endliche Wert

$$w_a^{\text{max}} = \frac{9E_0^2}{2} \epsilon_0 \epsilon_{\text{Matrix}}, \quad (5.21)$$

der neben der Feldstärke E_0 nur die Permittivität der Matrix enthält. Beide Abschätzungen beruhen auf der Annahme nicht miteinander elektrostatisch wechselwirkender eingebetteter Kugeln, d. h. sehr kleiner v .

Verteilungsfunktionen für die Energiedichte können gewonnen werden, indem elementweise (2.15) angewendet wird. Wegen der quadratischen Abhängigkeit von der Feldstärke spreizen sich die Verteilungen, so daß ein großer Energiedichtebereich überschritten wird. Aus den dargelegten Überlegungen heraus kann der Verlauf der Energiedichteverteilung bei kleinen Volumenanteilen auch aus den Feldstärkeverteilungen gut verstanden werden. Deswegen soll hier nur ein Beispiel für eine Energiedichteverteilung für $v = 5\%$ gegeben werden.

In Abb. 5.37 auf Seite 98 sind die aus FEM-Berechnungen ermittelten Verteilungsfunktionen für verschiedene DK-Verhältnisse dargestellt. Für die Darstellung wurde die relative Energiedichte w/w_0 verwendet, wobei

$$w_0 = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_0^2 \quad (5.22)$$

definiert wurde, so daß gemäß (2.15) die relative Energiedichte w/w_0 quadratisch mit der relativen Feldstärke E/E_0 und linear mit der DK ϵ_r größer wird.

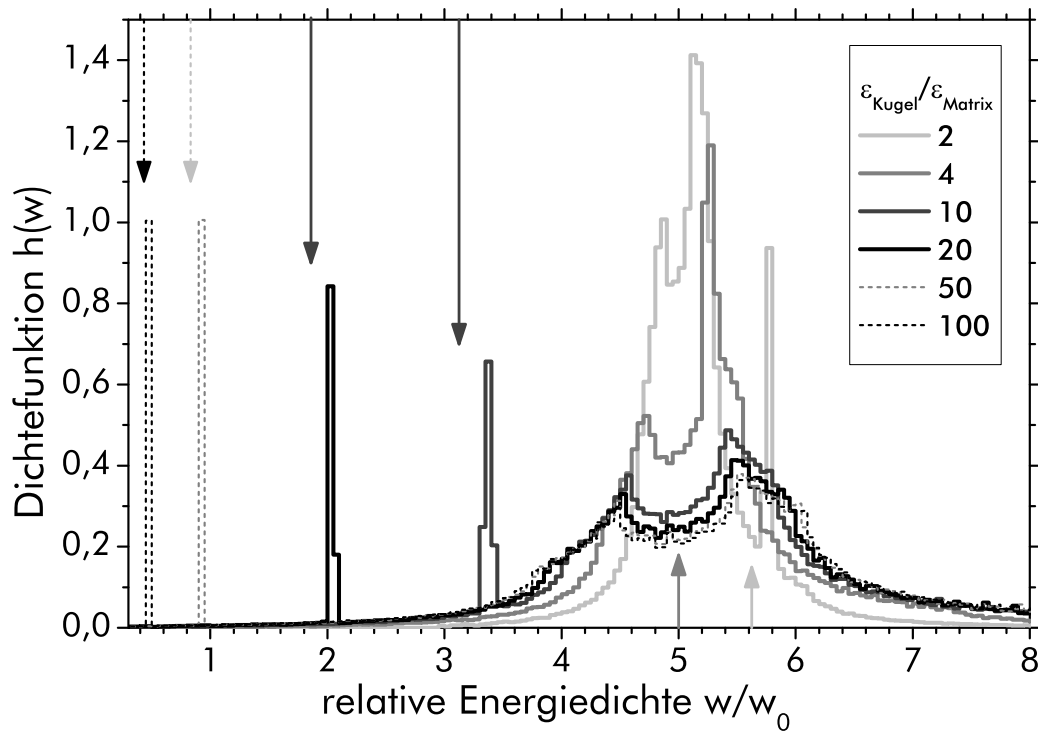


Abb. 5.37: Ausschnitt der Verteilungsdichtefunktion $h(w)$ der relativen Energiedichte w/w_0 für einen Komposit mit eingebetteten Kugeln mit dem Volumenanteil $v = 5\%$. Das DK-Verhältnis wurde variiert ($\epsilon_{\text{Matrix}} = 10$). Die aus (5.19) ermittelten Energiedichten für das Kugellinnere sind als Pfeile eingezeichnet.

Es ist ersichtlich, daß die Positionen der Maxima der Energiedichteverteilung für große DK-Verhältnisse sehr gut mit den w_i aus (5.19) übereinstimmen. Für kleinere DK-Verhältnisse sind die Maxima der Energiedichteverteilung gegenüber den w_i zu höheren Energiedichten verschoben. Ursache dafür ist, daß wegen der Wechselwirkung zwischen den Kugeln in ihrem Inneren höhere Feldstärken auftreten, als bei wechselwirkungsfreien. Entsprechend der mittleren relativen Feldstärke von $E/E_0 = 1$ sind rund um $w/w_0 = 5$ die Energiedichteverteilungen konzentriert. Diese werden mit wachsendem DK-Kontrast breiter. Dieses Verhalten ist Folge der bereits diskutierten Feldstärkedichteverteilung (vgl. Abb. 5.13 auf Seite 76).

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit ist es gelungen, aus kontinuumstheoretischen numerischen Berechnungen ermittelte Feldgrößen quantifiziert auszuwerten. An der Schnittstelle zwischen Theorie und Experiment angesiedelt, wurde somit eine Vielfalt von Geometrien der betrachteten Systeme untersucht. Hieraus konnten im Falle der Modellierung der Einzelfasermessung Aussagen für vielversprechende experimentelle Bedingungen getroffen werden. Für die 0-3-Komposite wurde ein Einblick in die innere Feldstärkeverteilung gewonnen, welcher die bisher bekannten Ergebnisse wesentlich ergänzt. Die numerischen Berechnungen wurden mittels der kommerziellen FEM-Software ANSYS® vorgenommen und mit Hilfe von Makros automatisiert. Dadurch konnte der Einfluß verschiedener Geometrie- oder Materialparameter in einem weiten Bereich untersucht werden.

Einzelfasern Die Modellierung der piezoelektrischen Einzelfasermessung lieferte umfangreiche numerische Ergebnisse für mit Ringelektroden (sowie mit zusätzlichen Deckelektroden) versehene piezoelektrische Zylinder. Durch die numerischen Untersuchungen konnte eine Lücke geschlossen werden, welche in der Forschungsliteratur bisher bestanden hatte. Für die konkrete experimentell motivierte Fragestellung wurden im Rahmen der verwendeten linearen Kontinuumstheorie ermutigende Ergebnisse gefunden:

- Für die verwendeten Fasergeometrien ist der Einfluß der Ringelektroden auf den gemessenen longitudinalen Piezokoeffizienten d_{33} vernachlässigbar. Die Messung des d_{33} ist für die verwendeten Faserabmessungen spezifisch, das heißt sie wird von anderen Materialkoeffizienten nicht beeinflusst.
- Die Feldstärke zwischen den Innenkanten der Ringelektroden ist für die verwendeten Faserabmessungen homogen verteilt.
- Die obigen Aussagen gelten für einen breiten Parameterbereich von Faserdurchmesser, Faserlänge, Elektrodenabstand und Elektrodenlänge. Dieser Bereich umfaßt alle praktisch relevanten Abmessungen. Nur für spezielle Konfigurationen wie Scheiben treten nennenswerte Abweichungen auf. Zusätzliche Deckelektroden vergrößern den günstigen Parameterbereich.

Die zur Quantifizierung der elektrischen Feldstärkeverteilung in den piezoelektrischen Einzelfasern verwendeten Maße *Mittelwert* und *Standardabweichung* wurden aus den durch Klassierung der elementweisen Lösungen ermittelten Verteilungsdichtefunktionen der elektrischen Feldstärke gewonnen. Diese Funktionen können auch direkt zur Charakterisierung herangezogen werden, was am Beispiel der 0-3-Kompositen demonstriert wurde.

0-3-Komposite Die modellierten 0-3-Komposite bestanden zumeist aus Partikeln hoher DK, die in eine Matrix niedriger Permittivität eingebracht waren. Die Permittivität wurde dabei als isotrop angenommen. Neben den erwähnten Verteilungsfunktionen wurden auch die effektiven Permittivitäten der Verbände modelliert. Durch verschiedene Referenzrechnungen wurde das Vorgehen überprüft und im Anschluß daran konnten zahlreiche Resultate gewonnen werden:

- Die Ergebnisse zur effektiven Permittivität ordnen sich gut in die vielfältigen in der Forschungsliteratur diskutierten analytischen Näherungsformeln ein. Jedoch ist hierbei zu berücksichtigen, daß aufgrund der Randbedingungen in dieser Arbeit Abweichungen auftreten, die auf das implizit vorgegebene kubische Gitter zurückzuführen sind.
- Die Verteilungsfunktion der elektrischen Feldstärke zeigt abhängig von Partikelform, Volumenanteil und Permittivitätskontrast zwischen Matrix und Einschlüß deutliche Unterschiede auf. Im Falle unendlich langer zylindrischer Einschlüsse konnten bereits bekannte Ergebnisse reproduziert und vertieft werden.
- Bei eingebetteten kugelförmigen Einschlüssen ist die elektrische Feldstärke innerhalb der Partikel fast homogen verteilt. Für höhere DK-Kontraste verbreitern sich die Verteilungsdichtefunktionen und es treten außerdem höhere elektrische Feldstärken auf.

Gegenüber der Verteilungsdichtefunktion ist die Verteilungsfunktion weniger anfällig gegenüber numerischen Schwankungen. Deswegen ist die Verteilungsfunktion für Vergleichszwecke besser geeignet. Die bisher nur vereinzelt diskutierten Feldstärkeverteilungen wurden systematisch ermittelt und Beispiele vorgestellt.

Ausblick Den hier vorgestellten Ergebnissen liegen einige Voraussetzungen zugrunde, die in zukünftigen Arbeiten weniger eingrenzend gefaßt werden sollten. Bei der Modellierung der Einzelfasermessung betrifft dies vorrangig die als linear angenommenen Materialgesetze. Eine verbesserte Abbildung des Polungszustandes wäre dadurch möglich, daß das nichtlineare elektromechanische Materialverhalten in die Modellierung einbezogen würde. Die präsentierten Ergebnisse für lineares Materialverhalten legen nahe, daß dadurch die modellierten gemessenen Piezokoeffizienten kleiner sein sollten, als im ideal gepolt angenommenen System. Bisher gibt es aber noch keine starken experimentellen Hinweise, daß dieser Einfluß wesentlich ist. ^[136]

Im Falle der 0-3-Komposite waren die Untersuchungen nicht auf eine Modellierung von Verbundwerkstoffen mit eingebetteten ferroelektrischen Partikeln angelegt. Deswegen ist hier die wichtigste Voraussetzung der Untersuchungen in der impliziten Annahme kubischer Gitter zu sehen. Durch das von JYLHÄ entwickelte Verfahren ^[132] ließe sich die effektive Permittivität von zufälligen Verteilungen der Einschlüsse berücksichtigen. Durch das von ihr angegebene Mittelungsverfahren wäre dies mit einem deutlich geringerem numerischen Aufwand möglich, als er durch die Vergrößerung der Elementarzelle gefordert wäre. Diese Methodik zu adaptieren bleibt zukünftigen Arbeiten vorbehalten.

Jede Frage ist die Verheißung einer nur mühsam zu erschließenden Quelle tröpfelnder Antworten. Jede Antwort birgt einen Schwall neuer Fragen in sich. So hinterlassen die gefundenen Antworten vor allem eines: gerichtete Neugier . . .

Anhang A

Materialdatensätze

Tensorschreibweise

Tensoren können in Indexschreibweise mit Voigt-Notation angegeben werden. Dabei werden jeweils zwei den mechanischen Eigenschaften zugeordnete Indizes gemäß Tab. A.1 zusammengefaßt. Es ist zu berücksichtigen, daß in dieser Notation für elastische Koeffizienten und Piezokoeffizienten mit Scher-Anteilen die Größen mit einem Faktor 2 oder 4 versehen werden, damit die konstitutiven Gleichungen mit den in vollständiger Tensornotation geschriebenen Pendanten übereinstimmen.^[48,81] Es gilt dabei die Einsteinsche Summenkonvention, d. h. über gleiche Indizes wird jeweils summiert. Für die Tensorindizes werden verschiedene Laufweiten definiert:

$$i, j = 1, 2, \dots, 6 \quad \text{und} \quad m, n = 1, 2, 3.$$

Dadurch kann auch in der Voigt-Notation aus dem Indexbild die Stufe des Tensors erschlossen werden. So ist x_{ij} ein Tensor vierter Stufe, x_{mi} ein Tensor dritter Stufe, x_{mn} oder x_i ein Tensor zweiter Stufe und x_m ein Vektor.

Tab. A.1: Voigt-Notation von Tensorindizes.

| Indizes in Tensor-Schreibweise | xx | yy | zz | yz | xz | xy |
|--------------------------------|----|----|----|----|----|----|
| Indizes in Voigt-Notation | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |

Materialdaten

In Voigt-Notation stellen sich die Materialtensoren für gepolte Keramik (Symmetriegruppe ∞m) wie folgt dar.^[48]

$$[s_{ij}] = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(s_{11} - s_{12}) \end{bmatrix} \quad (\text{A.1})$$

$$[d_{mi}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

$$[\epsilon_{mn}] = \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Um die konstitutiven Gleichungen (2.28) in dieser Form zu schreiben, werden mechanische Spannung und Dehnung sowie die elektrische Feldstärke als *Spaltenvektoren* geschrieben.

Der Tab. A.2 können die für die FEM-Berechnungen benutzten Materialparameter entnommen werden. Der Datensatz für PZT (PIC151) wird nach STEINHAUSEN verwendet^[15] und der von Bariumtitanat in modifizierter Form aus^[62]. PIC151 (PI Ceramic GmbH, Lederhose) ist ein sogenanntes Weich-PZT – es lässt sich also vergleichsweise leicht polarisieren – und zeichnet sich durch die relativ hohen Werte für Permittivität, Kopplungsfaktor und Piezokoeffizienten aus.^[137]

In ANSYS[®] wird nach Voreinstellung ein konstitutives Modell mit einem anderen Parametersatz verwendet, wobei statt der mechanischen Nachgiebigkeiten die Steifigkeiten und statt der piezoelektrischen d_{mi} -Koeffizienten die e_{mi} -Koeffizienten Verwendung finden. Diese können aus Inversion der jeweils anderen Materialmatrizen auch von ANSYS[®] leicht ineinander umgewandelt werden. Für die Permittivität ϵ^S gilt dies nicht, weswegen diese in der Tabelle angegeben wurde, obwohl zu den anderen Parametern eigentlich ϵ^T gehören würde.

Die elektrische Feldkonstante ϵ_0 hat den Wert $8,854187\dots \cdot 10^{-12}$ F/m.^[138]

Tab. A.2: Materialdatensätze für gepolte PZT- und Bariumtitanatkeramik, wie sie für die Berechnung der Einzelfasern Verwendung fanden.

| Materialparameter (Einheit) | für PZT (PIC151) | für Bariumtitanat |
|--|------------------|-------------------|
| s_{11}^E (10^{-12} m ² /N) | 16,83 | 8,561 |
| s_{12}^E (10^{-12} m ² /N) | -5,641 | -2,625 |
| s_{13}^E (10^{-12} m ² /N) | -7,122 | -2,840 |
| s_{33}^E (10^{-12} m ² /N) | 19,03 | 8,890 |
| s_{44}^E (10^{-12} m ² /N) | 51,02 | 23,31 |
| d_{31} (pm/V) | -214 | -79 |
| d_{33} (pm/V) | 423 | 191 |
| d_{15} (pm/V) | 610 | 270 |
| $\epsilon_{11}^S/\epsilon_0$ | 1110 | 2200 |
| $\epsilon_{33}^S/\epsilon_0$ | 852 | 1560 |

Literaturverzeichnis

- 1 R. E. NEWNHAM. *Composite electroceramics*. Ferroelectrics, 68:1–32, 1986.
- 2 T. R. GURURAJA, WALTER A. SCHULZE, ROBERT E. NEWNHAM, BERTRAM A. AULD und YUZHONG J. WANG. *Piezoelectric Composite Materials for Ultrasonic Transducer Applications. Part I: Resonant Modes of Vibration of PZT Rod-Polymer Composites*. IEEE Transactions on Sonics and Ultrasonics, SU-32(4):481–498, 1985.
- 3 WALLACE ARDEN SMITH. *The Role of Piezocomposites in Ultrasonic Transducers*. In *IEEE Ultrasonics Symposium, Proceedings*, Bd. 2, S. 755–766. 1989.
- 4 AARON ALTON BENT. *Active Fiber Composites for Structural Actuation*. Doktorarbeit, Massachusetts Institute of Technology, Department of Aeronautics and Astronautics, Cambridge, MA, 1997.
- 5 AARON A. BENT, NESBITT W. HAGOOD und JOHN P. RODGERS. *Anisotropic Actuation with Piezoelectric Fiber Composites*. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 6(3):338–349, 1995.
- 6 AARON A. BENT und NESBITT W. HAGOOD. *Piezoelectric Fiber Composites with Interdigitated Electrodes*. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 8(11):903–919, 1997.
- 7 NICCOLÒ PINI. *Development and Processing of Novel Active Fibre Composites*. Doktorarbeit, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 2006.
- 8 MEHRDAD N. GHASEMI-NEJHAD, RICHARD RUSS und SAEID POURJALALI. *Manufacturing and Testing of Active Composite Panels with Embedded Piezoelectric Sensors and Actuators*. J. Intell. Mater. Syst. Struct., 16(4):319–333, 2005.
- 9 SHASHANK PRIYA. *Advances in energy harvesting using low profile piezoelectric transducers*. J. Electroceram., 19(1):167–184, 2007.
- 10 STEVEN R. ANTON und HENRY A. SODANO. *A review of power harvesting using piezoelectric materials (2003–2006)*. Smart Materials and Structures, 16(3):R1–R21, 2007.
- 11 D. MONTALVÃO, N.M.M. MAIA und A.M.R. RIBEIRO. *A Review of Vibration-based Structural Health Monitoring with Special Emphasis on Composite*. The Shock and Vibration Digest, 38(4):295–324, 2006.
- 12 GYUHAEE PARK, HOON SOHN, CHARLES R. FARRAR und DANIEL J. INMAN. *Overview of Piezoelectric Impedance-Based Health Monitoring and Path Forward*. The Shock and Vibration Digest, 35(6):451–463, 2003.
- 13 ANDREAS J. BRUNNER, MARCEL BIRCHMEIER, MARK M. MELNYKOWYCZ und MICHEL BARBEZAT. *Piezoelectric Fiber Composites as Sensor Elements for Structural Health Monitoring and Adaptive Material Systems*. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 20(9):1045–1055, 2009.
- 14 ALBERTO BELLOLI, DOMINIK NIEDERBERGER, STANISLAW PIETRZKO, MANFRED MORARI und PAOLO ERMANNI. *Structural Vibration Control via R-L Shunted Active Fiber Composites*. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 18(3):275–287, 2007.
- 15 RALF STEINHAUSEN. *Charakterisierung und Modellierung piezoelektrischer 1-3-Komposite*. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät, Halle (Saale), 2002.
- 16 C. PIENTSCHKE, A. KUVATOV, R. STEINHAUSEN, H. BEIGE, R. KRÜGER, T. MÜLLER, U. HELBIG, D. SPORN, C. SCHUH, S. DENNELER, T. RICHTER und H. SCHLICH. *Bipolar strain hysteresis of poled composites with Nd-Mn-doped PZT fibres*. Journal of the European Ceramic Society, 29(9):1713–1720, 2009.
- 17 CHRISTOPH PIENTSCHKE, RALF STEINHAUSEN, HORST BEIGE, REINHARD KRÜGER, TOBIAS MÜLLER, DIETER SPORN, CARSTEN SCHUH, STEFAN DENNELER und HUGO SCHLICH. *Poled Composites With Nd-Mn-Doped PZT Fibres Under Bipolar Electrical Load*. IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, 56(9):1806–1812, 2009.
- 18 JULIANE HEIBER. *Einige Möglichkeiten zur Beeinflussung der Struktur und der Eigenschaften von PZT-Keramik-Fasern*. Dissertation, Technische Universität Ilmenau, Fakultät Maschinenbau, 2007.
- 19 ALBERTO BELLOLI, JULIANE HEIBER, FRANK CLEMENS und PAOLO ERMANNI. *Novel Characterization Procedure for Single Piezoelectric Fibers*. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 20(3):355–363, 2009.
- 20 K[ÁROLY] SIMONYI. *Kulturgeschichte der Physik: von den Anfängen bis 1990*. Verlag Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main, 2. Aufl., 1995.
- 21 HÉCTOR D. ABRUÑA, YASUYUKI KIYA und JAY C. HENDERSON. *Batteries and electrochemical capacitors*. Physics Today, 61(12):43–47, 2008.
- 22 PATRICE SIMON und YURY GOGOTSI. *Materials for electrochemical capacitors*. Nature Materials, 7:845–854, 2008.
- 23 ANDREW BURKE. *Ultracapacitors: why, how, and where is the technology*. Journal of Power Sources, 91(1):37–50, 2000.

- 24 B. E. CONWAY. *Electrochemical Supercapacitors: Scientific Fundamentals and Technological Applications*. Kluwer Academic / Plenum Publishers, New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow, 1999.
- 25 PETER BARBER, SHIVA BALASUBRAMANIAN, YOGESH ANGUCHAMY, SHUSHAN GONG, ARIEF WIBOWO, HONGSHENG GAO, HARRY J. PLOEHN und HANS-CONRAD ZUR LOYE. *Polymer Composite and Nanocomposite Dielectric Materials for Pulse Power Energy Storage*. *Materials*, 2(4):1697–1733, 2009.
- 26 QING WANG und LEI ZHU. *Polymer nanocomposites for electrical energy storage*. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 49(20):1421–1429, 2011.
- 27 VENKATA SREENIVAS PULI, ASHOK KUMAR, R.S. KATIIYAR, X. SU, C.M. BUSTA, D.B. CHRISEY und M. TOMOZAWA. *Dielectric breakdown of $BaO-B_2O_3-ZnO-[(BaZr_{0.2}Ti_{0.8})O_3]_{0.85}[(Ba_{0.7}Ca_{0.3})TiO_3]_{0.15}$ glass-ceramic composites*. *Journal of Non-Crystalline Solids*, im Druck: (online seit 1. Juni 2012), 2012.
- 28 YANG RAO, S. OGITANI, PAUL KOHL und C. P. WONG. *Novel polymer-ceramic nanocomposite based on high dielectric constant epoxy formula for embedded capacitor application*. *Journal of Applied Polymer Science*, 83(5):1084–1090, 2002.
- 29 TAKESHI YAMADA, TOSHINOBU UEDA und TOYOKI KITAYAMA. *Piezoelectricity of a high-content lead zirconate titanate/polymer composite*. *Journal of Applied Physics*, 53(6):4328–4332, 1982.
- 30 JUNJUN LI, JASON CLAUDE, LUIS ENRIQUE NORENA-FRANCO, SANG IL SEOK und QING WANG. *Electrical Energy Storage in Ferroelectric Polymer Nanocomposites Containing Surface-Functionalized $BaTiO_3$ Nanoparticles*. *Chemistry of Materials*, 20(20):6304–6306, 2008.
- 31 P. KIM, S. C. JONES, P. J. HOTCHKISS, J. N. HADDOCK, B. KIPPELEN, S. R. MARDER und J. W. PERRY. *Phosphonic Acid-Modified Barium Titanate Polymer Nanocomposites with High Permittivity and Dielectric Strength*. *Advanced Materials*, 19(7):1001–1005, 2007.
- 32 PHILSEOK KIM, NATALIE M. DOSS, JOHN P. TILLOTSON, PETER J. HOTCHKISS, MING-JEN PAN, SETH R. MARDER, JIANGYU LI, JEFFERY P. CALAME und JOSEPH W. PERRY. *High Energy Density Nanocomposites Based on Surface-Modified $BaTiO_3$ and a Ferroelectric Polymer*. *ACS Nano*, 3(9):2581–2592, 2009.
- 33 S. PANTENY, C. R. BOWEN und R. STEVENS. *Characterisation of barium titanate-silver composites, part I: Microstructure and mechanical properties*. *Journal of Materials Science*, 41(12):1573–4803, 2006.
- 34 S. PANTENY, C. R. BOWEN und R. STEVENS. *Characterisation of barium titanate-silver composites part II: Electrical properties*. *Journal of Materials Science*, 41(12):3845–3851, 2006.
- 35 H. LUSTFELD, C. PITHAN und M. REISSEL. *Metallic electrolyte composites in the framework of the brick-layer model*. *Journal of the European Ceramic Society*, 32(4):859–864, 2012.
- 36 JUNJUN LI, SANG IL SEOK, BAOJIN CHU, FATIH DOGAN, QIMING ZHANG und QING WANG. *Nanocomposites of Ferroelectric Polymers with TiO_2 Nanoparticles Exhibiting Significantly Enhanced Electrical Energy Density*. *Advanced Materials*, 21(2):217–221, 2009.
- 37 JAMES CLERK MAXWELL. *A Treatise On Electricity and Magnetism*, Bd. I. Clarendon Press, Oxford, 1873.
- 38 JAMES CLERK MAXWELL. *A Treatise On Electricity and Magnetism*, Bd. II. Clarendon Press, Oxford, 1873.
- 39 CHRISTIAN BROUSSEAU. *Modelling and simulation of dielectric heterostructures: a physical survey from an historical perspective*. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 39(7):1277–1294, 2006.
- 40 JOHN DAVID JACKSON. *Klassische Elektrodynamik*. Walter de Gruyter, Berlin, New York, 4. Aufl., 2006.
- 41 L. D. LANDAU und E. M. LIFSCHITZ. *Elektrodynamik der Kontinua*, Bd. VIII von *Lehrbuch der Theoretischen Physik in zehn Bänden*. Akademie-Verlag, Berlin, 5. Aufl., 1990.
- 42 EDWARD M. PURCELL. *Elektrizität und Magnetismus*, Bd. 2 von *Berkeley Physik Kurs*. Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig/Wiesbaden, 4. Aufl., 1989.
- 43 CHRISTIAN WEISSMANTEL und CLAUS HAMANN. *Grundlagen der Festkörperphysik*. Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg/Leipzig, 4. Aufl., 1995.
- 44 RAFFAELE RESTA und DAVID VANDERBILT. *Physics of Ferroelectrics – A Modern Perspective*, Kap. Theory of Polarization: A Modern Approach, S. 31–68. In Rabe et al. [140], 2007.
- 45 C. J. F. BÖTTCHER. *Theory of Electric Polarization*, Bd. I: Dielectrics in static fields. Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam, London, New York, 1973.
- 46 WALTER GUYTON CADY. *Piezoelectricity – An Introduction to the Theory and Applications of Electromechanical Phenomena in Crystals*. International Series in Pure and Applied Physics. McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, London, 1946.
- 47 PIEZO SYSTEMS, INC. (WOBURN, MA, USA). *History Of Piezoelectricity*. <http://piezo.com/tech4history.html>, —. (abgerufen am 11. August 2011).
- 48 PETER PAUFLER. *Physikalische Kristallographie*. Akademie-Verlag, Berlin, 1986.
- 49 WARREN P. MASON. *Piezoelectric Crystals and Their Application to Ultrasonics*. D. Van Nostrand Company, Inc., New York, Toronto, London, 1950.
- 50 BERNARD JAFFE, WILLIAM R. COOK und HANS JAFFE. *Piezoelectric Ceramics*. Nr. 3 in *Non-Metallic Solids*. Academic Press, London and New York, 1971.
- 51 M.E. LINES und A. M. GLASS. *Principles and applications of ferroelectric and related Materials*. Clarendon Press, Oxford, 1977.

- 52 W. KÄNZIG. *History of ferroelectricity 1938–1955*. *Ferroelectrics*, 74:285–291, 1987.
- 53 C.A. RANDALL, R.E. NEWNHAM und L.E. CROSS. *History of the First Ferroelectric Oxide, BaTiO₃*. http://www.ceramics.org/wp-content/uploads/2009/05/first_ferroelectric_oxide_ba_tio3.pdf, —. (heruntergeladen am 2. August 2012).
- 54 B. WUL. *Barium Titanate: a New Ferro-Electric*. *Nature*, 157:808, 1946.
- 55 GENE H. HAERTLING. *Ferroelectric Ceramics: History and Technology*. *Journal of the American Ceramic Society*, 82(4):797–818, 1999.
- 56 J HELBIG, W GLAUBITT, H SPANIOL, P VIERHAUS, U LANGE, R HANSCH, W WATZKA und D SPORN. *Development and technology of doped sol-gel derived lead zirconate titanate fibers*. *Smart Materials and Structures*, 12(6):987–992, 2003.
- 57 F. MEISTER, D. VORBACH, F. NIEMZ und T. SCHULZE. *High-Tech-Cellulose-Funktionspolymere nach dem ALCERU®-Verfahren*. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, 34(3):262–266, 2003.
- 58 A. S. SONIN und B. A. STRUKOV. *Einführung in die Ferroelektrizität*. Nr. 140 in WTB. Akademie-Verlag, Berlin, 1974.
- 59 J. HARADA, T. PEDERSEN und Z. BARNEA. *X-ray and neutron diffraction study of tetragonal barium titanate*. *Acta Crystallographica Section A*, 26(3):336–344, 1970.
- 60 TADASHI C. OZAWA und SUNG J. KANG. *Balls & Sticks: easy-to-use structure visualization and animation program*. *Journal of Applied Crystallography*, 37(4):679, 2004.
- 61 HANS-JOACHIM MARTIN. *Die Ferroelektrika*. Nr. 15 in *Technisch-Physikalische Monographien*. Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig, 1964.
- 62 T. MITSUI und S. NOMURA ET AL. (Hg.). *Ferroelectrics and related substances – Oxides*, Bd. III/16a (Crystal and solid state physics/Ferroelectrics and related substances – Oxides) von *Landolt-Börnstein Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology: New Series*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1981.
- 63 C. N. W. DARLINGTON, W. I. F. DAVID und K. S. KNIGHT. *Structural study of barium titanate between 150 and 425 K*. *Phase Transitions*, 48(4):217–236, 1994.
- 64 W. COCHRAN. *Crystal stability and the theory of ferroelectricity*. *Advances in Physics*, 9(36):387–423, 1960.
- 65 W. COCHRAN. *Crystal stability and the theory of ferroelectricity part II. Piezoelectric crystals*. *Advances in Physics*, 10(40):401–420, 1961.
- 66 R. COMES, M. LAMBERT und A. GUINIER. *The chain structure of BaTiO₃ and KNbO₃*. *Solid State Communications*, 6(10):715–719, 1968.
- 67 A. S. CHAVES, F. C. S. BARRETO und R. A. NOGUEIRA B. ZÊKS. *Thermodynamics of an eight-site order-disorder model for ferroelectrics*. *Physical Review B (condensed matter and materials physics)*, 13(1):207–212, 1976.
- 68 BOŠTJAN ZALAR, VALENTIN V. LAGUTA und ROBERT BLINC. *NMR Evidence for the Coexistence of Order-Disorder and Displacive Components in Barium Titanate*. *Physical Review Letters*, 90(3):037601, 2003.
- 69 RAFFAELE RESTA. *Ab initio simulation of the properties of ferroelectric materials*. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 11(4):R69–R96, 2003.
- 70 MANUEL I. MARQUÉS und JULIO A. GONZALO. *Behavior of the Local Mode's Potential in BaTiO₃ Studied by Effective Hamiltonian Numerical Simulations*. *Ferroelectrics*, 337:51–57, 2006.
- 71 MANUEL I. MARQUÉS. *First-principles study of instantaneous and averaged local potential in BaTiO₃*. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 71(17):174116, 2005.
- 72 DRAGAN DAMJANOVIC. *The Science of Hysteresis*, Kap. 4: Hysteresis in Piezoelectric and Ferroelectric Materials, S. 337–465. Bd. III: Hysteresis in Materials von Bertotti und Mayergoyz^[139], 2006.
- 73 F. PREISACH. *Über die magnetische Nachwirkung*. *Zeitschrift für Physik*, 94(5–6):277–302, 1935.
- 74 I.D. MAYERGOYZ. *Mathematical Models of Hysteresis*. Springer-Verlag, New York, 1991.
- 75 A. V. TURIK. *Theory of Polarization and Hysteresis of Ferroelectrics*. *Soviet Physics – Solid State*, 5(4):885–886, 1964.
- 76 A. V. TURIK. *A Statistical Method for the Investigation of Repolarization Processes in Ferroelectric Ceramics*. *Soviet Physics – Solid State*, 5(9):1751–1753, 1964.
- 77 ANDREI T. BARTIC, JÜRGEN T. RICKES, DIRK J. WOUTERS, RAINER M. WASER und HERMAN E. MAES. *Implementation of a ferroelectric capacitor model using the preisach hysteresis theory*. *Integrated Ferroelectrics*, 32(1):295–302, 2001.
- 78 MARC KAMLAH. *Zur Modellierung von nichtlinearen elektromechanischen Koppelphänomenen in Piezokeramiken*. *Habilitationsschrift*, Universität Gesamthochschule Kassel, Institut für Mechanik, 2000.
- 79 M[ARC] KAMLAH. *Ferroelectric and ferroelastic piezoceramics – modeling of electromechanical hysteresis phenomena*. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 13(4):219–268, 2001.
- 80 STEFANIE ANTEBOTH. *Simulation des elektromechanischen Verhaltens von PZT mit realer Domänenstruktur*. *Doktorarbeit*, Universität Kassel, Fachbereich für Maschinenbau, 2006.
- 81 *IEEE Standard on Piezoelectricity (ANSI/IEEE Std 176)*, 1987.
- 82 A. F. DEVONSHIRE. *Theory of ferroelectrics*. *Advances in Physics*, 3(10):85–130, 1954.

- 83 BORIS A. STRUKOV und ARKADI P. LEVANYUK. *Ferroelectric Phenomena in Crystals – Physical Foundations*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1998.
- 84 JORGE ÍÑIGUEZ, S. IVANTCHEV, J. M. PEREZ-MATO und ALBERTO GARCÍA. *Devonshire-Landau free energy of BaTiO₃ from first principles*. Physical Review B (condensed matter and materials physics), 63(14):144103, 2001.
- 85 O. C. ZIENKIEWICZ. *The birth of the finite element method and of computational mechanics*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 60(1):3–10, 2004.
- 86 M. J. TURNER, R. W. CLOUGH, H. C. MARTIN und L. J. TOPP. *Stiffness and Deflection Analysis of Complex Structures*. Journal of the Aeronautical Sciences, 23(9):805–823, 1956.
- 87 O. C. ZIENKIEWICZ, R. L. TAYLOR und J. Z. ZHU. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. Elsevier Butterworth-Heinemann, Oxford, 6. Aufl., 2005.
- 88 KLAUS-JÜRGEN BATHE. *Finite-Elemente-Methoden*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, Barcelona, Hongkong, London, Mailand, Paris, Tokio, 2. Aufl., 2002.
- 89 R. COURANT. *Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations*. Bulletin of the American Mathematical Society, 49:1–23, 1943.
- 90 O. C. ZIENKIEWICZ. *Origins, Milestones and Directions of the Finite Element Method – A Personal View*. Archives of Computational Methods in Engineering, 2:1–48, 1995.
- 91 HERBERT GOERING, HANS-GÖRG ROOS und LUTZ TOBISKA. *Die Finite-Elemente-Methode für Anfänger*. Wiley-VCH, Weinheim, 4. Aufl., 2010.
- 92 ANSYS® Academic Research, Release 11.0, Help System: Theory Reference for ANSYS and ANSYS Workbench, ANSYS, Inc., 2007.
- 93 WOLFGANG SEIFERT und RALF BRAUNE. *Zur Behandlung piezoelektrischer Kontinua mit der Methode der finiten Elemente*. Wissenschaftliche Zeitschrift der Universität Halle-Wittenberg, Mathematisch-naturwissenschaftliche Reihe XXXX(2):45–54, 1991.
- 94 HENNO ALLIK und THOMAS J. R. HUGHES. *Finite element method for piezoelectric vibration*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2(2):151–157, 1970.
- 95 H. CHENG und S. TORQUATO. *Electric-field fluctuations in random dielectric composites*. Physical Review B (condensed matter and materials physics), 56(13):8060–8068, 1997.
- 96 Wolfram Research. *Mathematica 5.1*.
- 97 DAVID W. SCOTT. *On optimal and data-based histograms*. Biometrika, 66(3):605–610, 1979.
- 98 R. STEINHAUSEN, S. KERN, C. PIENTSCHKE, H. BEIGE, F. CLEMENS und J. HEIBER. *A new measurement method of piezoelectric properties of single ceramic fibres*. Journal of the European Ceramic Society, 30(2):205–209, 2010.
- 99 G. SCHMIDT. *Quasistatische Messung piezoelektrischer und elektrostriktiver Deformationen*. Experimentelle Technik der Physik, 6(6):250–258, 1958.
- 100 GÜNTHER SCHMIDT. *Die Piezoelektrizität und Elektrostriktion des Seignettesalzes*. Zeitschrift für Physik, 161(5):579–603, 1961.
- 101 G. SORGE, T. HAUKE und M. KLEE. *Electromechanical properties of thin ferroelectric Pb(Zr_{0,53}Ti_{0,47})O₃-layers*. Ferroelectrics, 163:77–88, 1995.
- 102 SABINE KERN. *Charakterisierung der elektromechanischen Groß- und Kleinsignaleigenschaften von keramischen Pb(Zr,Ti)O₃-Einzelfasern*. Diplomarbeit, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Naturwissenschaftliche Fakultät II, Institut für Physik, 2010.
- 103 K[ÁROLY] SIMONYI. *Theoretische Elektrotechnik*. Nr. 20 in Hochschulbücher für Physik. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1973.
- 104 P. W. HAWKES und E. KASPER. *Principles of electron optics*, Bd. 2: Applied Geometrical Optics. Academic Press, London, San Diego, 1989.
- 105 V. Z. PARTON und B. A. KUDRYAVTSEV. *Electromagnetoelasticity: Piezoelectrics and Electrically Conductive Solids*. Gordon and Breach Science Publishers, New York, London, Paris, Montreux, Tokyo, Melbourne, 1988.
- 106 R. K. N. D. RAJAPAKSE und Y. ZHOU. *Stress analysis of piezoceramic cylinders*. Smart Materials and Structures, 6(2):169–177, 1997.
- 107 ANSYS® Academic Teaching Advanced, Release 11.0.
- 108 HERBERT MANG und GÜNTER HOFSTETTER. *Festigkeitslehre*. Springer-Verlag, Wien, New York, 3. Aufl., 2008.
- 109 G. T. CARLSON und B. L. ILLMAN. *The circular disk parallel plate capacitor*. American Journal of Physics, 62(12):1099–1105, 1994.
- 110 F E H TAY, XU JUN, Y C LIANG, V J LOGEESWARAN und YAO YUFENG. *The effects of non-parallel plates in a differential capacitive microaccelerometer*. Journal of Micromechanics and Microengineering, 9(4):283–293, 1999.
- 111 K. GÜNTHER und D. HEINRICH. *Dielektrizitätskonstante, Permeabilität, elektrische Leitfähigkeit, Wärmeleitfähigkeit und Diffusionskonstante von Gemischen mit kugelförmigen Teilchen (gitterförmige und statistische Anordnung)*. Zeitschrift für Physik, 185(4):345–374, 1965.
- 112 RICHARD D. STOY. *Solution procedure for the Laplace equation in bispherical coordinates for two spheres in a uniform external field: Parallel orientation*. Journal of Applied Physics, 65(7):2611–2615, 1989.
- 113 RICHARD D. STOY. *Solution procedure for the Laplace equation in bispherical coordinates for two spheres in a uniform external field: Perpendicular orientation*. Journal of Applied Physics, 66(10):5093–5095, 1989.

- 114 LORD RAYLEIGH. *On the Influence of Obstacles arranged in Rectangular Order upon the Properties of a Medium*. The London and Edinburgh Philosophical Magazine and Journal of Science, 34:481–502, 1892.
- 115 D. R. MCKENZIE und R. C. MCPHEDRAN. *Exact modelling of cubic lattice permittivity and conductivity*. Nature, 265:128–129, 1977.
- 116 R. C. MCPHEDRAN und D. R. MCKENZIE. *The Conductivity of Lattices of Spheres. I. The Simple Cubic Lattice*. Proceedings of The Royal Society A (Mathematical, Physical & Engineering Sciences), 359(1696):45–63, 1978.
- 117 D. R. MCKENZIE, R. C. MCPHEDRAN und G. H. DERRICK. *The Conductivity of Lattices of Spheres. II. The Body Centred and Face Centred Cubic Lattices*. Proceedings of The Royal Society A (Mathematical, Physical & Engineering Sciences), 362(1709):211–232, 1978.
- 118 J. C. MAXWELL GARNETT. *Colours in Metal Glasses and in Metallic Films*. Philosophical transactions of the Royal society of London. Series A, Mathematical and physical sciences, 203:385–420, 1904.
- 119 A. SIHVOLA. *Two Main Avenues Leading To the Maxwell Garnett Mixing Rule*. Journal of Electromagnetic Waves and Applications, 15(6):715–725, 2001.
- 120 E. H. KERNER. *The Electrical Conductivity of Composite Media*. Proceedings of the Physical Society. Section B, 69(8):802–807, 1956.
- 121 D. A. G. BRUGGEMAN. *Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen*. Annalen der Physik, 416(7):636–664, 1935.
- 122 D. A. G. BRUGGEMAN. *Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen (Schluß)*. Annalen der Physik, 416(8):665 – 679, 1935.
- 123 D. A. G. BRUGGEMAN. *Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. II. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten von Vielkristallen der nichtregulären Systeme*. Annalen der Physik, 417(7):645 – 672, 1936.
- 124 D. A. G. BRUGGEMAN. *Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. III. Die elastischen Konstanten der quasiisotropen Mischkörper aus isotropen Substanzen*. Annalen der Physik, 421(2):160 – 178, 1937.
- 125 ROLF LANDAUER. *The Electrical Resistance of Binary Metallic Mixtures*. Journal of Applied Physics, 23(7):779–784, 1952.
- 126 MILTON. *Approximations and asymptotic formulas*, Kap. 10, S. 185–220. In *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*^[141], 2002. Zugriff elektronisch über ULB.
- 127 N. JAYASUNDERE und B. V. SMITH. *Dielectric constant for binary piezoelectric 0-3 composites*. Journal of Applied Physics, 73(5):2462–2466, 1993.
- 128 Y. M. POON und F. G. SHIN. *A simple explicit formula for the effective dielectric constant of binary 0-3 composites*. Journal of Materials Science, 39(4):1277–1281, 2004.
- 129 Z. HASHIN und S. SHTRIKMAN. *A Variational Approach to the Theory of the Effective Magnetic Permeability of Multiphase Materials*. Journal of Applied Physics, 33(10):3125–3131, 1962.
- 130 L. A. DISSADO und J.C. FOTHERGILL. *Electrical Degradation and Breakdown in Polymers*. Nr. 9 in IEE Materials and Devices. Peter Peregrinus Ltd., London, United Kingdom, 1992.
- 131 D. CULE und S. TORQUATO. *Electric-field distribution in composite media*. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 58(18):R11829–R11832, 1998.
- 132 LIISI JYLHÄ. *Modeling of Electrical Properties of Composites*. Doktorarbeit, Helsinki University of Technology (Faculty of Electronics, Communications and Automation: Department of Radio Science and Engineering), 2008.
- 133 LIISI JYLHÄ, JOHANNA HONKAMO, HELI JANTUNEN und ARI SIHVOLA. *Microstructure-based numerical modeling method for effective permittivity of ceramic/polymer composites*. Journal of Applied Physics, 97(10):104104, 2005.
- 134 DEBASISH MOHANTY, GIRIJA S. CHAUBEY, AMIN YOURDKHANI, SHIVA ADIREDDY, GABRIEL CARUNTU und JOHN B. WILEY. *Synthesis and piezoelectric response of cubic and spherical LiNbO₃ nanocrystals*. RSC Advances, 2(5):1913–1916, 2012.
- 135 MARTIN DUBS. *»Physical limits on storage capacity in ferroelectric materials« und Diskussionen*. Persönliche Mitteilung, 2010.
- 136 CHRISTOPH PIENTSCHKE, SABINE KERN und HARTMUT S. LEIPNER. *Zweiter Sachbericht zum Zwischennachweis (Milestonebericht) zum Verbundprojekt »Entwicklung von neuen Faserkompositmaterialien für den Einsatz bei Ultraschallsensoren«*. Bericht an die Investitionsbank Sachsen-Anhalt, 2012.
- 137 PHYSIK INSTRUMENTE (PI) GMBH & CO KG. *Piezokeramische Materialien und Bauelemente – Grundlagen, Eigenschaften und Anwendungen*. http://www.piceramic.de/pdf/Katalog_Piezo_Technologie_Piezo_Technik_Piezo_Mechanik_Piezo_Bauelemente.pdf, 2011 (heruntergeladen am 11. Oktober 2012).
- 138 HORST STÖCKER (Hg.). *Taschenbuch der Physik: Formeln, Tabellen Übersichten*. Wissenschaftlicher Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 5. Aufl., 2004.
- 139 GIORGIO BERTOTTI und ISAAK D. MAYERGOYZ (Hg.). *The Science of Hysteresis*, Bd. III: Hysteresis in Materials. Elsevier Academic Press Amsterdam, 2006.
- 140 KARIN M. RABE, CHARLES H. AHN und JEAN-MARC TRISCONI (Hg.). *Physics of Ferroelectrics – A Modern Perspective*. Nr. 105 in Topics in Applied Physics. Springer, Berlin, New York, 2007.
- 141 GRAEME W[ALTER] MILTON. *The Theory of Composites*. Nr. 6 in Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge (UK), 2002. Zugriff elektronisch über ULB.

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wäre ohne die fachliche und menschliche Unterstützung vieler Personen nicht möglich gewesen, die mich wohlwollend ein mehr oder weniger langes Stück entlang eines ausgedehnten Lebensabschnittes begleiteten. Ihnen möchte ich an dieser Stelle herzlich danken und die wichtigsten nachfolgend hervorheben.

Mein erster Dank gebührt Herrn Prof. Horst Beige für die Überlassung des Themas und seine kontinuierliche Förderung, die mir unter anderem mehrere Konferenz- und Workshopeteilnahmen ermöglichte. Hervorheben möchte ich außerdem sein stetes Bemühen, meine Anstellung als wissenschaftlicher Mitarbeiter zu sichern.

Besonders danke ich Herrn Ralf Steinhausen für die vielen guten Ratschläge und Anregungen, seine stets vorhandene Diskussionsbereitschaft, seine freundliche Motivation und nicht zuletzt für das Korrekturlesen der vorliegenden Arbeit.

Frau Sabine Kern danke ich für ihre experimentelle Sichtweise auf die Einzelfasermessung und die damit verbundenen Anregungen zur Modellierung.

Herrn Wolfgang Seifert möchte ich für die fundierte Begleitung bei der Nutzung der FEM seit meinem Forschungsbeleg und für die kritische Durchsicht der vorliegenden Arbeit danken.

Weiterhin bedanke ich mich bei Herrn Martin Dubs für die hilfreichen Diskussionen zu dielektrischen Verbundwerkstoffen.

Mein Dank gilt den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Uni-Rechenzentrum für die Unterstützung bei der Bereitstellung und Nutzung der Rechentechnik beziehungsweise Software.

Meinen Kolleginnen und Kollegen von der Fachgruppe *Physik Ferroischer Materialien* danke ich für die gute Arbeitsatmosphäre, die fachlichen Diskussionen und die gemütlichen Frühstücksrunden. Für die Unterstützung in der Übergangsphase nach Prof. Beiges Eintreten in den Rentenstand möchte ich Frau Prof. Kathrin Dörr von der Fachgruppe *Funktionale Oxidische Grenzflächen* und Herrn PD Hartmut S. Leipner vom *Interdisziplinären Zentrum für Materialwissenschaften* danken.

Für die gute Zusammenarbeit danke ich meinen Kolleginnen und Kollegen in den Projekten *EPIEFA* (stellvertretend sei Herr Reinhard Krüger genannt), *SuperKon* und *Faserkomposite*.

Für die finanzielle Unterstützung eines Teiles meines Promotionsvorhabens bin ich der Graduiertenförderung des Landes Sachsen-Anhalt zu Dank verpflichtet. Eingeschlossen in diesen Dank ist Frau Inge Wünsch für ihre Hilfe bei einigen Formalien.

Den drei patenten Herren Christian Roßner, Klaus Röck und Tobias Otto verdanke ich wertvolle Erkenntnisse und manchen erbaulichen StuSS.

Herrn Bernd Bretschneider danke ich herzlich für sein beruhigendes Da-Sein und sein ermunterndes So-Sein. Außerdem bedanke ich mich bei ihm für das findige Schlußlektorat der vorliegenden Arbeit.

Meinen Eltern danke ich für ihre liebevolle Begleitung meines ganzen Lebens.

Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, daß ich die vorliegende Arbeit »Numerische Untersuchungen zur Verteilung von Feldgrößen in piezoelektrischen Fasern und inhomogenen Dielektrika« selbständig und ohne fremde Hilfe verfaßt, keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt und die den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe. Außerdem erkläre ich, diese wissenschaftliche Arbeit an keiner anderen wissenschaftlichen Einrichtung zur Erlangung eines akademischen Grades eingereicht zu haben.

Halle (Saale),

_____ Datum

_____ Christoph Pientschke

Lebenslauf

Angaben zur Person

Name: Christoph Pientschke
geboren am: 12. März 1977 in Halle (Saale)
Geschlecht: männlich
Staatsangehörigkeit: Bundesrepublik Deutschland
akademischer Grad: Diplom-Physiker
Familienstand: ledig
Anschrift: Anhalter Straße 2 · 06108 Halle

Ausbildung

9/1983 – 7/1991 17. POS Karl-Liebknecht in Halle-Neustadt
9/1991 – 6/1995 Elisabeth-Gymnasium in Halle (Saale), Abschluß mit Abitur
8/1996 – 8/1997 Zivildienst in der Jugendherberge Kühlungsborn
9/1997 – 1/2003 Physikstudium an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg,
Abschluß als Diplom-Physiker
Diplomarbeit »Dynamische Modellierung piezoaktiver Faser-
komposite und Biegeschwinger mit der Finite-Elemente-Methode«
(ausgezeichnet mit dem CAD-FEM-Preis für Diplomarbeiten 2003)
4/2003 – 3/2005 Graduiertenförderung des Landes Sachsen-Anhalt

beruflicher Werdegang

seit 4/2005 wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Martin-Luther-Universität
Halle-Wittenberg
Arbeit an verschiedenen Projekten:

- Projekt EPIEFA (»Einkristalline Piezoaktive Fasern«), gefördert vom BMBF
- Projekt SuperKon (»Neue Super-Kondensatoren als Energiespeicher«), gefördert vom BMBF
- Projekt Faserkomposite, gefördert von der Investitionsbank Sachsen-Anhalt

Halle (Saale),

_____ Datum

_____ Christoph Pientschke

Veröffentlichungen und Konferenzbeiträge

Publikationen

- 1 R. STEINHAUSEN, A. KOUVATOV, C. PIENTSCHKE, H. T. LANGHAMMER, W. SEIFERT, H. BEIGE und H. ABICHT. *AC-Poling of Functionally Graded Piezoelectric Bending Devices*. *Integrated Ferroelectrics*, 63(1):15–20, 2004.
- 2 R. STEINHAUSEN, C. PIENTSCHKE, W. SEIFERT und H. BEIGE. *Finite element analysis of the thickness mode resonance of piezoelectric 1-3 fibre composites*. In *Ultrasonics Symposium, 2004 IEEE*, Bd. 3, S. 1678–1681. 2004.
- 3 R. STEINHAUSEN, H. TH. LANGHAMMER, A. Z. KOUVATOV, C. PIENTSCHKE, HORST BEIGE und H.-P. ABICHT. *Bending Actuators Based on Monolithic Barium Titanate-Stannate Ceramics as Functional Gradient Materials*. *Materials Science Forum*, 494:167–174, 2005.
- 4 C. PIENTSCHKE, A. KOUVATOV, R. STEINHAUSEN, W. SEIFERT und H. BEIGE. *Polarisation kinetics of electrically connected electroconductive ferroelectric multilayer structures*. *Journal of the European Ceramic Society*, 25(12):2547–2551, 2005.
- 5 C. PIENTSCHKE, R. STEINHAUSEN, A. KOUVATOV, H. T. LANGHAMMER und H. BEIGE. *Equivalent Circuit Modelling of the Time-Dependent Poling Behaviour of Ferroelectric Multilayer Structures*. *Ferroelectrics*, 319:181–190, 2005.
- 6 TH. RICHTER, M. LAURENT, C. SCHUH, D. SPORN, R. KRÜGER, G. LISSATSCHENKO, H. SCHLICH, H. BEIGE und CH. PIENTSCHKE. *Templated grain growth of PZT*. In *Tagungsband zum Symposiums Hochleistungskeramik der Deutschen Keramischen Gesellschaft in Selb vom 12.10. bis 13.10.2005*. 2005.
- 7 R. STEINHAUSEN, C. PIENTSCHKE, A. Z. KOUVATOV, H. T. LANGHAMMER, H. BEIGE, A. A. MOVCHIKOVA und O. V. MALYSHKINA. *Modelling and characterization of piezoelectric and polarization gradients*. *Journal of Electroceramics*, 20(1):47–52, 2008.
- 8 ALENA MOVCHIKOVA, OLGA MALYSHKINA, GUNNAR SUCHANECK, GERALD GERLACH, RALF STEINHAUSEN, HANS THEO LANGHAMMER, CHRISTOPH PIENTSCHKE und HORST BEIGE. *Study of the pyroelectric behavior of $BaTi_{1-x}Sn_xO_3$ piezo-ceramics*. *Journal of Electroceramics*, 20(1):43–46, 2008.
- 9 C. PIENTSCHKE, R. STEINHAUSEN, H. BEIGE, R. KRÜGER, T. MÜLLER, D. SPORN, C. SCHUH, S. DENNELER und H. SCHLICH. *Poled composites with Nd-Mn-doped PZT fibres under bipolar electrical load*. In *Electroceramics XI, Manchester 2008, Abstract and CD proceedings*. 2008.
- 10 C. PIENTSCHKE, A. KOUVATOV, R. STEINHAUSEN, H. BEIGE, R. KRÜGER, T. MÜLLER, U. HELBIG, D. SPORN, C. SCHUH, S. DENNELER, T. RICHTER und H. SCHLICH. *Bipolar strain hysteresis of poled composites with Nd-Mn-doped PZT fibres*. *Journal of the European Ceramic Society*, 29(9):1713–1720, 2009.
- 11 CHRISTOPH PIENTSCHKE, RALF STEINHAUSEN, HORST BEIGE, REINHARD KRÜGER, TOBIAS MÜLLER, DIETER SPORN, CARSTEN SCHUH, STEFAN DENNELER und HUGO SCHLICH. *Poled Composites With Nd-Mn-Doped PZT Fibres Under Bipolar Electrical Load*. *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, And Frequency Control*, 56(9):1806–1812, 2009.
- 12 R. STEINHAUSEN, S. KERN, C. PIENTSCHKE, H. BEIGE, F. CLEMENS und J. HEIBER. *A new measurement method of piezoelectric properties of single ceramic fibres*. *Journal of the European Ceramic Society*, 30(2):205–209, 2010.
- 13 CHRISTOPH PIENTSCHKE, RALF STEINHAUSEN, SABINE KERN und HORST BEIGE. *Modelling of the measured longitudinal piezoelectric coefficient of single ceramic fibres with annular electrodes*. *Smart Materials and Structures*, 20(5):055015, 2011.
- 14 ALEXANDRA BUCHSTEINER, MANDY ZENKNER, THOMAS GROSSMANN, CLAUDIA EHRHARDT, MARTIN DIESTELHORST, SEBASTIAN LEMM, WOLFRAM MÜNCHGESANG, CHRISTOPH PIENTSCHKE, JENS GLENNEBERG, HORST BEIGE, STEFAN G. EBBINGHAUS und HARTMUT S. LEIPNER. *Investigation of 0-3 composites for novel capacitors and energy storage*. In ELIZABETH A. DOBISZ und LOUAY A. ELDADA (Hg.), *Proceedings of SPIE*, Bd. 8102, S. 81021A. SPIE, 2011.

Konferenzbeiträge

Nachfolgend werden nur diejenigen Beiträge angegeben, bei denen der Verfasser der Hauptautor war.

Vorträge

| Datum | Konferenz/Workshop | Beitrag |
|----------|---|--|
| 9/2003 | WE-Heraeus-Ferienkurs »Ferroelektrika – Intelligente Materialien für Aktoren, Sensoren und Speicher«, Halle (Saale) | Computerübung zur Modellierung von piezoelektrischen Verbundwerkstoffen mit FEM |
| 9/2004 | 7th European Conference on Applications of Polar Dielectrics (ECAPD 7), Liberec | Equivalent Circuit Modelling of the Time-Dependent Poling Behaviour of Ferroelectric Multilayer Structures |
| 1/2010 | Innovationsworkshop »Energiespeicherung und deren zukünftige Applikationen«, Halle (Saale) | Dielektrische Modellierung von Verbundwerkstoffen mit eingebetteten Partikeln |
| 6,7/2011 | 12th European Meeting on Ferroelectricity, Bordeaux | Influence of the Annular Electrode Geometry on the Measured d_{33} of Single Ceramic Fibres |

Poster

| Datum | Konferenz | Beitrag |
|----------|---|---|
| 5,6/2004 | Electroceramics IX, Cherbourg | Modelling of the Time-Dependent Poling Behaviour of Ferroelectric Multilayer Structures |
| 8,9/2008 | Electroceramics XI, Manchester | Bipolar strain hysteresis of poled composites with Nd-Mn-doped PZT fibres |
| 8/2009 | 12th International Meeting on Ferroelectricity and 18th IEEE International Symposium on Applications of Ferroelectrics, Xi'an (China) | Bipolar strain hysteresis of poled composites with Nd-Mn-doped PZT fibres |
| 8/2010 | 19th International Symposium on the Applications of Ferroelectrics (ISAF) und 10th European Conference on the Application of Polar Dielectrics (ECAPD), Edinburgh | Modelling of the Measured Longitudinal Piezoelectric Coefficient of Single Ceramic Fibres with Annular Electrodes |
| 3/2012 | Expertentreff »Neue Materialien«, Halle (Saale) | Entwicklung von Faserkompositmaterialien für den Einsatz bei Ultraschallsensoren |