

# Inhaltsverzeichnis

<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>xiii</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation und Ziele der Arbeit . . . . .	1
1.2 Stand der Forschung . . . . .	3
1.3 Gliederung der Arbeit . . . . .	7
<b>I Grundlagen</b>	<b>11</b>
<b>2 Allgemeine Grundlagen</b>	<b>13</b>
2.1 Mathematische Grundlagen . . . . .	13
2.1.1 Integralsätze und Differentialoperatoren . . . . .	14
2.1.2 Transporttheorem . . . . .	17
2.1.3 Gradiententheorem . . . . .	18
2.2 Grundlagen der klassischen Thermodynamik . . . . .	18
2.3 Historische Entwicklung des zweiten Hauptsatzes . . . . .	20
2.4 Grundbegriffe der rationalen Thermodynamik . . . . .	22
2.5 Grundlagen der klassischen Elektrodynamik . . . . .	23
2.5.1 COULOMB-Kraft, elektrisches Feld und Satz von GAUSS . . . . .	23
2.5.2 Bilanz der elektrischen Ladung . . . . .	24
2.5.3 MAXWELL-Gleichungen im Vakuum . . . . .	25
<b>3 Physikalische Grundlagen der Ferroelektrika</b>	<b>27</b>
3.1 Elektrische Phänomene in Dielektrika . . . . .	27
3.1.1 Grundlagen des Aufbaus dielektrischer Festkörper . . . . .	27
3.1.2 Effekte der Mikrostruktur . . . . .	28
3.1.3 Makroskopische Effekte und elektrische Zustandsgrößen . . . . .	32
3.2 Klassifikation der Dielektrika und Zuordnung der Ferroelektrika . . . . .	34
3.3 Charakteristische Eigenschaften perowskitischer Ferroelektrika . . . . .	36
3.3.1 Physikalische Effekte auf der Mikroskala oxidischer Ferroelektrika . . . . .	37
3.3.2 Korn- und Domänenstruktur tetragonaler PZT Keramiken . . . . .	39
3.3.3 Makroskopische Effekte . . . . .	41
<b>4 Grundgleichungen der nichtlinearen thermoelektromechanischen Feldtheorie für Festkörper</b>	<b>43</b>
4.1 Grundlegende Definitionen . . . . .	43
4.2 Kinematische Grundlagen der Kontinuumstheorie . . . . .	46
4.3 Elasto- und elektrodynamische Grundgleichungen des Kontinuums . . . . .	48
4.3.1 Bilanzgleichungen . . . . .	48
4.3.2 MAXWELL-Gleichungen in Materie . . . . .	51

4.4	Grundlagen der Thermodynamik des Mehrfeldkontinuums . . . . .	55
4.4.1	Leistungsbilanz . . . . .	55
4.4.2	Zweiter Hauptsatz der rationalen Thermodynamik . . . . .	57
<b>5</b>	<b>Grundlagen der Materialmodellierung</b>	<b>61</b>
5.1	Materialgleichungen . . . . .	61
5.2	Rheologische Modellierung . . . . .	62
5.3	Materialmodellierung ferroelektrischer Keramiken . . . . .	65
5.3.1	Mehrskalige Betrachtungen . . . . .	67
5.3.2	Mikromechanisches Modell zur Beschreibung ferroelektrischer Materialien	68
<b>II</b>	<b>Mathematisch–physikalische Modellbildung</b>	<b>73</b>
<b>6</b>	<b>Modellierung der visko–ferroelektrischen Dissipation und Eigenerwärmung in Ferroelektrika</b>	<b>75</b>
6.1	Konzept zur Beschreibung der Dissipation und Auswertung der Dissipationsungleichung . . . . .	75
6.1.1	Charakterisierung der Dissipationsleistung . . . . .	76
6.1.2	Ferroelektrische Dissipation ohne Viskoelastizität . . . . .	80
6.1.3	Viskoelastische Dissipation . . . . .	81
6.1.4	Superposition der ferroelektrischen und viskoelastischen Dissipation . . . . .	82
6.2	Anmerkungen zur Herleitung der Dissipation . . . . .	83
6.2.1	Auswirkungen der a priori Definition der unabhängigen Variablen . . . . .	83
6.2.2	Nachweis der Gleichheit der Dissipationsleistungen resultierend aus freier und innerer Energie . . . . .	83
6.3	Hybride Modellierung der gekoppelten visko–ferroelektrischen Dissipation in Ferroelektrika . . . . .	84
6.3.1	Eindimensionales Modell . . . . .	84
6.3.2	Räumliche Verallgemeinerung . . . . .	87
<b>7</b>	<b>Geschlossenes und konsistentes Konzept zur Herleitung thermodynamischer Potentiale auf Basis rheologischer Modelle und Anwendung auf das hybride Modell</b>	<b>89</b>
7.1	Grundlegende Problematiken bei Herleitungen thermodynamisch konsistenter Theorien . . . . .	89
7.2	Konzept zur Herleitung von Potentialen auf Basis rheologischer Modelle . . . . .	90
7.3	Anwendung des Konzepts zur Herleitung von Potentialen auf das hybride Modell . . . . .	94
7.3.1	Potential ohne Berücksichtigung temperaturabhängiger spontaner Größen . . . . .	94
7.3.2	Potential unter Berücksichtigung temperaturabhängiger spontaner Größen . . . . .	97
7.3.3	Analytische Betrachtungen für sinusförmige Beanspruchungen . . . . .	100
7.3.4	Leistungsbilanz und Wärmeleitungsgleichung . . . . .	101
<b>8</b>	<b>Skalenübergang zum makroskopischen RVE und numerische Umsetzung</b>	<b>101</b>
8.1	Grundlagen der Kondensierten Methode . . . . .	102
8.1.1	Evolutionsgesetz der inneren Variablen . . . . .	103
8.1.2	Erweitertes Schaltkriterium . . . . .	105
8.1.3	Realisierung von Skalenübergängen im Rahmen der Kondensierten Methode . . . . .	107

8.2	Erweiterung des Modells der Kondensierten Methode . . . . .	110
8.2.1	Numerische Approximation der Differentialgleichungen . . . . .	111
8.2.2	Hybrides Modell im Sinne der Kondensierten Methode . . . . .	113
8.3	Zusammenfassung bzgl. der Annahmen im Rahmen der Modellierung und der numerischen Umsetzung . . . . .	116
<b>III</b>	<b>Anwendungen, Experimente und Simulationsergebnisse</b>	<b>119</b>
<b>9</b>	<b>Grundlagen des ferroelektrischen energy harvestings</b>	<b>121</b>
9.1	Grundidee des ferroelektrischen energy harvestings . . . . .	122
9.2	Theoretische Grundlagen zur Beschreibung und Beurteilung von ferroelektrischen energy harvesting Kreisprozessen . . . . .	124
9.2.1	Analyse von Kreisprozessen . . . . .	124
9.2.2	Beurteilung von Kreisprozessen . . . . .	127
9.3	Optimierungsprozess . . . . .	127
<b>10</b>	<b>Simulationsergebnisse und experimentelle Befunde: Hystereseverhalten und Selbsterwärmung</b>	<b>129</b>
10.1	Vergleiche zwischen numerisch und experimentell ermittelten Hysteresen ohne Berücksichtigung viskoelastischer Effekte . . . . .	130
10.2	Verifikation des viskoelastischen Materialverhaltens mittels des hybriden Modells anhand von Relaxations- und Kriechprozessen . . . . .	134
10.3	Experimentelle Ergebnisse zur Eigenerwärmung von Ferroelektrika . . . . .	136
10.4	Numerische Ergebnisse und Validierung zur Eigenerwärmung . . . . .	140
10.4.1	Instationäre Temperaturgleichung . . . . .	140
10.4.2	Erwärmung aufgrund ferroelektrischer Dissipation . . . . .	144
10.4.3	Erwärmung aufgrund visko-ferroelektrischer Dissipation unterhalb der Koerzitivfeldstärke . . . . .	147
10.4.4	Erwärmung aufgrund visko-ferroelektrischer Dissipation oberhalb der Koerzitivfeldstärke . . . . .	150
<b>11</b>	<b>Ergebnisse zum ferroelektrischen energy harvesting</b>	<b>155</b>
11.1	Einfluss der Anzahl der Körner in einem $\mathcal{RVE}$ auf Reproduzierbarkeit und Rechenzeit . . . . .	157
11.2	Einfluss der Temperatur auf die optimalen Prozessparameter . . . . .	157
11.3	Einfluss der Kornorientierung auf die optimalen Prozessparameter . . . . .	162
11.4	Einfluss des bias-Feldes . . . . .	164
<b>IV</b>	<b>Abschlussbetrachtungen</b>	<b>167</b>
<b>12</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>169</b>
<b>13</b>	<b>Fazit und Ausblick</b>	<b>173</b>
<b>V</b>	<b>Anhang</b>	<b>175</b>
<b>A</b>	<b>Überblick über die Zugänge zum zweiten Hauptsatz der Thermodynamik</b>	<b>177</b>

<b>B Integrale Bilanzgleichungen der Elektrodynamik als axiomatische Basis</b>	<b>179</b>
<b>C Herleitung der analytischen Lösung des hybriden Modells im 1D Fall</b>	<b>183</b>
<b>D Anwendung des Gâteaux–Differentials</b>	<b>185</b>
<b>E Materialdaten</b>	<b>187</b>
E.1 Temperaturabhängigkeiten ausgewählter Materialeigenschaften . . . . .	188
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>191</b>