

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis xiii

1 Einleitung	1
1.1 Motivation und Ziele der Arbeit	1
1.2 Stand der Forschung	3
1.3 Gliederung der Arbeit	7

I Grundlagen 11

2 Allgemeine Grundlagen	13
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
3 Physikalische Grundlagen der Ferroelektrika	27
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
4 Grundgleichungen der nichtlinearen thermoelektromechanischen Feldtheorie für Festkörper	43
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
5	Grundlagen der Materialmodellierung	61
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
II	Mathematisch–physikalische Modellbildung	73
6	Modellierung der visko–ferroelektrischen Dissipation und Eigenerwärmung in Ferroelektrika	75
6.1	Konzept zur Beschreibung der Dissipation und Auswertung der Dissipations- ungleichung	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 frei- er 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
7	Geschlossenes und konsistentes Konzept zur Herleitung thermodynamischer Potentiale auf Basis rheologischer Modelle und Anwendung auf das hybride Modell	89
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 Grö- ßen	97
7.3.3	Analytische Betrachtungen für sinusförmige Beanspruchungen	100
7.3.4	Leistungsbilanz und Wärmeleitungsgleichung	101
8	Skalenübergang zum makroskopischen RVE und numerische Umsetzung	101
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 Me- thode	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
III Anwendungen, Experimente und Simulationsergebnisse		119
9	Grundlagen des ferroelektrischen energy harvestings	121
9.1	Grundidee des ferroelektrischen energy harvestings	122
9.2	Theoretische Grundlagen zur Beschreibung und Beurteilung von ferroelektri- schen energy harvesting Kreisprozessen	124
9.2.1	Analyse von Kreisprozessen	124
9.2.2	Beurteilung von Kreisprozessen	127
9.3	Optimierungsprozess	127
10	Simulationsergebnisse und experimentelle Befunde: Hystereseverhalten und Selbsterwärmung	129
10.1	Vergleiche zwischen numerisch und experimentell ermittelten Hysteresen ohne Berücksichtigung viskoelastischer Effekte	130
10.2	Verifikation des viskoelastischen Materialverhaltens mittels des hybriden Mo- dells 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
11	Ergebnisse zum ferroelektrischen energy harvesting	155
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
IV Abschlussbetrachtungen		167
12	Zusammenfassung	169
13	Fazit und Ausblick	173
V Anhang		175
A	Überblick über die Zugänge zum zweiten Hauptsatz der Thermodynamik	177

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