

## Abstract

This progress report presents a thermodynamically and microscopically motivated constitutive model for piezoceramics within the framework of a research project supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft. This project is aimed at developing a finite element tool for the analysis of piezoceramic components taking into account the full range of large signal electromechanical hysteresis effects exhibited by these materials. Such a tool is necessary for the stress analysis being the basis for a reliability assessment of piezoceramic devices subject to domain switching processes.

In a first step, the hysteresis phenomena of piezoceramics and their microscopic origin were discussed, and the phenomena to be described were selected. Concerning the balance laws, the simplest form consisting of balance of momentum and Gauß' Law was derived by physically motivated assumptions step by step from nonlinear thermomechanics and Maxwell's Equations. Revision of the current literature revealed that a commonly accepted thermodynamic framework for phenomenological modeling has been established in the international scientific discussion.

Most of the work was devoted to constructing a phenomenological constitutive model for piezoceramics under multiaxial electromechanical loadings as the physical basis for the analysis tool. The unique feature of the model are microscopically motivated internal variables, which describe domain switching in the material, and which are related to the macroscopic irreversible polarization and strain. A switching condition was used to characterize the onset of the change of domain structure. The differential evolution equations of the internal variables were deduced by using the normality flow rule, such that thermodynamic restrictions are satisfied. An energy barrier function, which characterizes the saturation of the domain switching, was introduced to enforce a kinematical constraint for the evolution of the internal variables. In this way, only consistent irreversible polarization and strain states are possible. Numerical simulations of the material responses to some typical loading cases show that the model is capable of describing the nonlinear behavior of the piezoceramics.

In closing, the assumptions underlying the model are discussed in view of microscopic considerations.

## Kurzfassung

### Ein thermodynamisch und mikroskopisch motiviertes Konstitutivmodell für Piezokeramiken

Dieser Fortschrittsbericht beschreibt ein thermodynamisch und mikroskopisch motiviertes Konstitutivmodell für Piezokeramiken, das innerhalb eines von der Deutschen Forschungsgemeinschaft unterstützten Forschungsprojektes entstanden ist. In diesem Projekt soll für die Analyse piezokeramischer Komponenten ein Finite-Elemente-Werkzeug entwickelt werden, wobei der gesamte Großsignalbereich der elektromechanischen Hystereseeffekte, die in diesen Materialien auftreten, abgedeckt werden soll. Solch ein Werkzeug wird für Spannungsanalysen benötigt, die grundlegend sind für Zuverlässigkeitsbetrachtungen von piezokeramischen Bauteilen, in denen Domänenumklappprozesse stattfinden.

In einem ersten Schritt werden Hysteresephänomene von Piezokeramiken und deren mikroskopischer Ursprung diskutiert, und es werden die Phänomene, die im Weiteren beschrieben werden müssen, ausgewählt. Motiviert durch physikalische Annahmen wird das einfachst mögliche System von Bilanzgleichungen, bestehend aus Impulserhaltung und Gaußschem Gesetz, schrittweise aus der nichtlinearen Thermomechanik und den Maxwellgleichungen abgeleitet. Eine Durchsicht der aktuellen Literatur hat verdeutlicht, dass sich für die phänomenologische Modellierung ein allgemein anerkannter thermodynamischer Ansatz in der internationalen wissenschaftlichen Diskussion etabliert hat.

Der größte Teil der Arbeit widmet sich dann der Aufstellung eines phänomenologischen Konstitutivmodells für Piezokeramiken unter mehrachsiger elektromechanischer Belastung, das das physikalische Fundament für das Berechnungswerkzeug bildet. Besondere Merkmale des Modells sind mikroskopisch motivierte innere Variablen, die das Umklappen im Material beschreiben, und die zur makroskopischen irreversiblen Polarisierung und der Dehnung in Beziehung stehen. Eine Umklappkriterium wird benutzt, um das Einsetzen des Umklappens in der Domänenstruktur zu charakterisieren. Die Differentialgleichungen der inneren Variablen werden mit Hilfe der Normalitätsregel abgeleitet, wobei die thermodynamischen Nebenbedingungen erfüllt werden. Eine energetische Hürde wird eingeführt, welche die Sättigung des Domänenumklappens charakterisiert, um eine kinematische Beschränkung bei der Entwicklung der inneren Variablen zu erzwingen. Damit wird erreicht, dass ausschließlich konsistente irreversible Polarisierungs- und Dehnungszustände möglich sind. Numerische Simulationen des Materialverhaltens für einige typische Belastungsfälle zeigen, dass das Modell geeignet ist, das nichtlineare Verhalten von Piezokeramiken zu beschreiben.

Abschließend werden die dem Modell zugrunde liegenden Annahmen mit Hilfe einer mikroskopischen Betrachtungsweise diskutiert.