



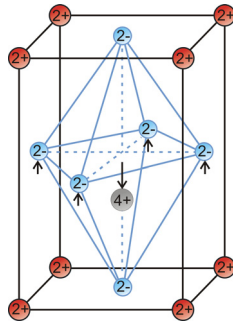
Einleitung und Motivation

Ferroelektrische Materialien werden heute bereits für Kraftherzeugungen, Sensorik und die informationstechnologische Datenspeicherung genutzt. Die grundlegende Eigenschaft die dafür genutzt wird, ist die elektromechanische Kopplung dieser Materialien. Die Kopplung kann nicht-linear sein. Dies beruht auf der Entwicklung und Veränderung von Polarisationsdomänen unterhalb der Curietemperatur.

Wie sich ferroelektrische Materialien verhalten, wenn sie durch ein elektrisches Feld belastet werden, ist ungefähr bekannt. Was passiert allerdings, wenn diese Materialien unter zusätzlicher mechanischer Spannung stehen? Wie verhalten sich dann die Polarisierungen mit ihren Dipolausrichtungen und Domänen? Das Resultat der numerischen Untersuchung zeigt: Sie lassen sich gezielt beeinflussen.

Theoretische Grundlagen des Mehrphasenmodells

Die Ausrichtung von Dipolen in ferroelektrischen Materialien wie Bariumtitanat (BaTiO_3) wird in dieser Arbeit durch ein Mehrphasenmodell modelliert, das mechanische und elektrische Grundgleichungen berücksichtigt.



Die Polarisation wird als Ordnungsparameter der Phasen genutzt. Das hier verwendete Modell definiert eine Art der freien Helmholtzenergie Ψ in der unter anderem Gradienten der Polarisation einen energetischen Beitrag liefern (Su & Landis 2007).

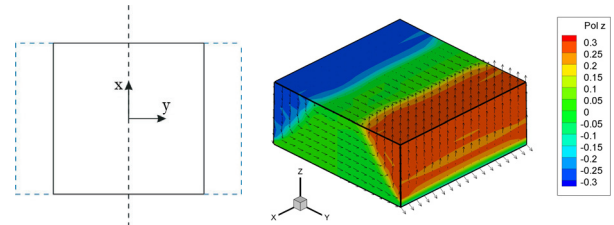
$$\begin{aligned}\Psi = & \frac{1}{2} a_{ijkl} P_{i,j} P_{k,l} + \frac{1}{2} \bar{a}_{ij} P_i P_j + \frac{1}{4} \bar{a}_{ijkl} P_i P_j P_k P_l \\ & + \frac{1}{6} \bar{a}_{ijklmn} P_i P_j P_k P_l P_m P_n \\ & + \frac{1}{8} \bar{a}_{ijklmnrs} P_i P_j P_k P_l P_m P_n P_r P_s \\ & + b_{ijkl} \varepsilon_{ij} P_k P_l + \frac{1}{2} c_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \\ & + f_{ijklmn} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} P_m P_n + g_{ijklmn} \varepsilon_{ij} P_k P_l P_m P_n \\ & + \frac{1}{2\kappa_0} (D_i - P_i)(D_i - P_i)\end{aligned}$$

Numerische Untersuchungen und Ergebnisse

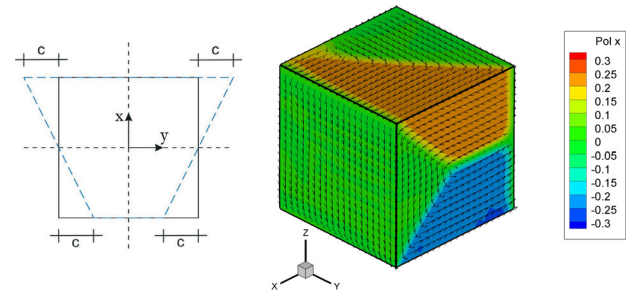
Die Nanodots werden mit verschiedenen Seiten- zu Höhenverhältnissen (Aspektraten), unterschiedlich aufgebrachtten Vorspannungen an der Unterseite wie auch variierender räumlicher Diskretisierung untersucht.

Anfangsentwicklung von Polarisationsdomänen:

Bsp.1: Bei einer einachsialen Verzerrung an der Unterseite des Nanodots stellt sich bei einer Dehnung von $\varepsilon_{xx} = 0.00$, $\varepsilon_{yy} = 0.82$ in [%] und einer Aspektrate von 0.4 die Tridomain-Topologie ein. 'Tridomain' aufgrund der drei eindeutig erkennbaren Domänen.



Bsp.2: Wird die Unterseite des Nanodots trapezförmig verzerrt ($c = 0.41\%$), stellt sich bei einer Aspektrate von 1.0 die Butterfly-Topologie ein.



Zyklische elektrische Belastung:

Nach der Anfangsentwicklung von Domänen folgt eine zyklisch elektrische Belastung in z-Richtung. Dabei ergibt sich eine differenzierte Hysteresekurve für jede bestimmte Aspektrate und Vorspannung. Aufgetragen sind hier für Bsp.1. die positiven (V1,V3,V5) und negativen (V2,V4,V6) Volumenanteile in x-, y- und z-Richtung über das bezogene elektrische Feld.

