Modellierung und Simulation kristallplastischer Werkstoffe mit Hilfe von Versetzungsdichten

von der Fakultät Maschinenbau
der Universität Dortmund
zur Erlangung des Grades
Doktor-Ingenieur
(Dr.-Ing.)
genehmigte Dissertation

von
Hoang-Nguyen Tran
aus Hue, Vietnam

Dortmund 2005

Hoang-Nguyen Tran

Modellierung und Simulation kristallplastischer Werkstoffe mit Hilfe von Versetzungsdichten

Übersicht: Versetzungen werden als wesentlicher Bestandteil des metallischen Gefüges betrachtet, das viele Eigenschaften eines Metalls, insbesondere die technologisch wichtigen, bestimmt. Die Versetzungsbewegung im Kristall führt zu plastischer Abgleitung auf kristallographischen Ebenen in kristallographischen Richtungen. Die Bewegungsfreiheit der Versetzungen hängt stark von deren Wechselwirkungen ab, die die Verformungsverfestigung der Kristalle bestimmen.

In der vorliegenden Arbeit wird ein kristallplastisches Werkstoffmodell vorgeschlagen, das eine vertiefte Untersuchung des Verformungsverhaltens von kubisch-flächenzentrierten Metallen erlaubt. Das Modell basiert auf der Entwicklung der Versetzungsdichte, die experimentell messbar ist. Zusätzlich wird das Modell geschwindigkeitsabhängig formuliert, das sowohl isotrope als auch anisotrope Eigenschaften abbildet.

Da metallische Werkstoffe in der Regel polykristallin aufgebaut sind, wird ein Pollykristall als Verband mehrerer Einkristalle mit unterschiedlichen kristallographischen Orientierungen betrachtet. Wesentliche mechanische Eigenschaften vom Ein- und Polykristall werden durch Simulationen unter der Anwendung dieses Werkstoffmodells richtig wiedergegeben. Darüber hinaus gelingt es, Gesetzmäßigkeiten für das Auftreten der Spannungsüberhöhungen in der korngrenzennahen Umgebung sowie der Dehnungslokalisierungen abzuleiten, die eine potentielle Vorstufe zur Schädigung darstellen.

Modeling and Simulation of crystal-plastic Materials based on the Evolution of the Dislocation Density

Abstract: Dislocations are considered as essential part of the metallic microstructure, which affects many properties of a metall, particularly the technological aspects. The motion of dislocations in crystal gives rise to plastic slipping on crystalographic planes in crystalographic directions. The freedom of the motion of dislocations depends strongly on the interaction of dislocations, which determines the work hardening of crystalls.

The present work proposes a crystal-plastic model that allows the investigation of the deformation behaviour of cubic face-centered metals. The model is based on the evolution of dislocation density, which can be determined in experiments. Additionally, the model is rate-dependend formulated and reproduces the isotropic and anisotropic properties.

Since metallic materials generally possess a polycrystalline structure, a polycrystal will be considered as an assembly of single crystals, which have different crystalographic orientations. Caculations with this model show that the essential mechanical properties of single crystals and polycrystals are reproduced correctly. Moreover, it is possible to establish conditions for the formation of higher stress at grain bounderies and strain localisations, which are possible starting points for damage.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Mechanik der Fakultät Maschinenbau der Universität Dortmund.

Herrn Prof. Dr.rer.nat. B. Svendsen gilt mein besonderer Dank für seine zahlreichen Anregungen sowie die Betreuung und Förderung dieser Arbeit.

Herrn Prof. Dr.-Ing. K. Thermann danke ich für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Korreferates.

Bei Herrn Dipl.-Ing. V. Levkovitch und Herrn Dr.-Ing. F. Reusch bedanke ich mich für die kritische Durchsicht der Arbeit und viele konstruktive Anmerkungen.

Allen Mitgliedern des Lehrstuhls für Mechanik und vom Fachgebiet Mechanik, inbesondere Maschinendynamik danke ich für die schöne gemeinsame Zeit.

Ganz besonders aber danke ich meiner Frau Thai-Hang, ohne deren Verständnis und Unterstützung diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Meinem Sohn Hoang-Luc danke ich auch, dass er viel Freude und Entspannung im Leben bereitet hat.

Dortmund, im Juli 2005

Hoang-Nguyen Tran

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Versetzungen, die nach topologischer Eigenschaft die Gitterbaufehler sind, werden auch als wesentlicher Bestandteil des metallischen Gefüges in Betracht gezogen. Die Definition des Gefüges oder der Mikrostruktur beruht auf der Gesamtheit aller nicht im thermodynamischen Gleichgewicht befindlichen Kristallbaufehler (nach Art, Zahl, Verteilung, Größe und Form) eines Metalls (s. Haasen [36]). Es zeigt sich, dass viele Eigenschaften von Metallen, insbesondere die technologisch wichtigen, gerade durch dieses Gefüge bestimmt sind. Für die Verwendbarkeit der Metalle in Konstruktionen des Ingenieurbaus ist die mechanische Festigkeit am wichtigsten, die weitgehend durch das Gefüge beeinflusst wird, also eine strukturfehlerbestimmte Eigenschaft eines Metalls ist. Weiterhin sind metallische Werkstoffe überwiegend nicht aus einem einzigen Kristall, sondern polykristallin aufgebaut. Ihre Bestandteile, die Körner, verhalten sich sowohl elastisch als auch inelastisch anisotrop. Sie verbinden sich durch Korngrenzen, die Teil des Gefüges sind. Die Körner unterscheiden sich voneinander durch ihre kristallographischen Orientierungen und ihre Größe, so dass jedes Korn (von einem gemeinsamen Bezugsystem aus betrachtet) andere Eigenschaften besitzt. Zusammen mit dem Zwang zum Zusammenhalt des Gefüges führt diese Anisotropie bei Belastung zu inhomogener Verteilung von Spannung und Verformung auf Kornebene. Die in der Folge auftretenden Dehnungslokalisierungen geben Informationen über eine potentielle Schädigung, die von technischer Bedeutung ist.

Durch Versetzungen ist die leichte Verformbarkeit metallischer Kristalle möglich. Die Versetzungsbewegungen führen zu plastischer Abgleitung eines Kristalls auf einer ausgezeichneten kristallographischen Ebene (Gleitebenen) um einen elementaren Translationsvektor $\mathbf{b}$ (Burgers-Vektor) in einer ausgezeichneten Gitterrichtung (Gleitrichtung). Die Wechselwirkung der sich multiplizierenden Versetzungen erzeugt die Verformungsverfestigung der Kristalle. Gerade diese Wechselwirkung mit ihren Multiplikationsmöglichkeiten ist das größe Problem der Kristallplastizität, die in dieser Arbeit besser verstanden werden soll. Die systematische Untersuchung der Verfestigung der Metalle in den letzten Jahrzehnten hat eine Vielfalt von Informationen geliefert, nicht nur über die zu jeder Verformung gehörige Versetzungsanordnung mittels TEM, Röntgen-Topographie und Ätzengrubenbeobachtungen, sondern auch über die Abhängigkeit der Verfestigungskurve von der Orientierung der Zugachse, der Temperatur, Probengröße, Verformungsgeschwindigkeit, Stapelfehlerenergie usw. (s. Seeger [87]). Besonders informativ sind auch die Ergebnisse von Gleitstufenvermessungen auf verformten Kristallen. Dabei geben Gleitstufen an, wo und wieviele Stufenversetzungen in die Kristalloberfläche ausgetreten sind. Die von diesen Versetzungen nach Auskunft der Gleitstufenlängen überstrichenen Teile der Gleitebene bestimmen die Abgleitung.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist, zu einem tieferen Verständnis der Kristallplastizität mit Hilfe von Versetzungen beizutragen. Basierend auf vorhandenen Erkenntnissen und Ansätzen wird ein Werkstoffmodell entwickelt, mit dessen Hilfe das lokale Verformungsverhalten polykristalliner Metalle untersucht wird und so Zusammenhänge zwischen charakteristischen Verformungsgrößen verstanden werden können. In Anbetracht des Polykristalls als Verband gekoppelter Einkristalle mit unterschiedlichen Orientierungen sollen wichtige physikalische Einkristalleigenschaften durch dieses Werkstoffmodell richtig wiedergegeben werden. Zusätzlich muss das entwickelte Werkstoffmodell die folgenden wichtigen Anforderungen für ein reales Material erfüllen: So soll es ein geschwindigkeitsabhängiges Deformationsverhalten beschreiben und isotrope sowie anisotrope Eigenschaften abbilden können. Beim Übergang von elastischen auf plastische Zustandsänderungen muss die Fließgrenze eindeutig sein, so dass das Schmidsche Schubspannungsgesetz erfüllt wird (s. Abschnitt 1.1.2). Letztlich soll das Werkstoffmodell für große Deformationen und drei dimensional formuliert werden.

Die Arbeit beginnt mit der Erklärung wichtiger Notationen und der Geometrie des hier im Mittelpunkt stehenden kubisch-flächenzentrierten (kfz) Kristalls, die zur Beschreibung plastischer Abgleitung auf Gleitsystemen nötig ist. Anschließend werden Eigenschaften von Versetzungen vorgestellt, deren Bewegung und Wechselwirkung im Zusammenhang mit plastischer Verformung durch Abgleitung auf Gleitsystemen ausführlich behandelt werden. Die in der Folge auftretenden Fließspannungen und Rückspannungen, die zur Verfestigung des Kristalls beitragen, werden eingeführt. Die typische Einkristall-Fließkurve mit unterschiedlichen Verfestigungsraten wird vorgestellt und diskutiert. Schließlich werden wichtige Eigenschaften bei der Verformung von Polykristallen beschrieben.

Der folgende Abschnitt 2 gibt einen Überblick über die ausgewählten Modellansätze aus der Literatur, die sich ebenfalls mit der Untersuchung lokaler Fließvorgänge in Kristallen beschäftigen. Dabei wird die quantitative Entwicklung von Versetzungsdichten, Fließ- und Rückspannungen sowie Gleitraten ,,konzentriert behandelt". Vor- und Nachteile der einzelnen Ansätze werden anschließend diskutiert.

Der Abschnitt 3 fasst zunächst die Grundlagen der Kontinuumsmechanik und der speziellen Mechanik eines Kristalls zusammen. Zusammen mit den in den beiden letzten Abschnitten gewonnenen Erkenntnissen wird dann ein neues Werkstoffmodell vorgestellt, das das Verhalten der kfz-Kristalle in Abhängigkeit von der Formänderungsgeschwindigkeit, also viskoplastisch, sowie von der Temperatur beschreibt. Das Modell basiert auf der Entwicklung der Versetzungsdichte und wird sowohl für große als auch kleine Verformung formuliert. Dabei werden isotrope und anisotrope Verfestigung berücksichtigt. Die Integration konstitutiver Gleichungen zur Lösung interner Zustandsvariablen wird mit Hilfe der implizten Eulerschen Rückwärtsmethode durchgeführt und dann in dreidimensionale Finite-Elemente-Formulierungen übertragen.

Zur Überprüfung des neu entwickelten Werkstoffmodells werden Ergebnisse von Simulationsrechnungen im Abschnitt 4 präsentiert. Im Mittelpunkt steht die Frage, inwieweit das Modell in der Lage ist, bekannte physikalische Phänomene der Ein- und Polykristallplastizität wiederzugeben. Zusätzlich werden Einflüsse der Modellparameter auf die Verformung beschrieben. Auf Parameteranpassungen an konkrete Experimente wird allerdings verzichtet. Der letzte Abschnitt ,,Zusammenfassung und Überblick" schließt diese Arbeit ab.

1 Grundbegriffe der Kristallplastizität

Zur Untersuchung des Verformungsverhaltens von Metallen sowohl im Einkristall- als auch im Polykristall-Zustand sind die werkstoffkundlichen Grundlagen zunächst zu behandeln. Dabei sind die besonderen geometrischen Eigenschaften der Kristalle zu erörtern, die wesentliche Einflüsse auf Verformung haben. Im Mittelpunkt steht das Verhalten kubisch-flächenzentrierter, reiner Metalle im Tieftemperaturbereich. Anschließend werden einige wichtige Notationen für diese Geometrie vorgestellt, um die Beschreibung von Kristalleigenschaften zu erleichtern.

Die Tatsache, dass Verformung in Metallen im wesentlichen plastisch ist, lässt die Beschränkung dieser Arbeit auf plastische Verformung und deren Zusammenhängen zu. Plastische Verformung erfolgt im Wesentlichen durch Abgleitung auf kristallographischen Ebenen in kristallographischen Richtungen. Diese Abgleitungen werden durch die Bewegung von Versetzungen in der Kristallstruktur ermöglicht. Die Bewegungsfreiheit der Versetzungen hängt stark von deren Wechselwirkungen ab, die sich wiederum in unterschiedlichen kristallographischen Lagen differenziert verhalten. Um die Versetzungen zu mobilisieren muss die Schubspannung bei Beginn plastischer Verformung einen kritischen Wert erreichen, der als Fließspannung bezeichnet wird.

Da die mechanischen Eigenschaften der Metalle technisch interessant sind, spielen entsprechende Untersuchungsmethoden eine wesentliche Rolle in der Metallkunde. Dabei ist hier nicht an elastisches Verhalten gedacht, sondern an plastische Eigenschaften bei der Kristallverformung. Es bieten sich neben dem Zug- oder Druckversuch an einem Stab oder an einer Platte auch der Kriechversuch und die Härteprüfung (s. WASSERMANN [98]) an. Besonders bei einachsiger Verformung von kubisch-flächenzentrierten Einkristallen (kfz-Einkristallen) ist der ausgeprägte qualitative Verlauf der sogenannten Fließkurve, bei der es drei Phasen mit unterschiedlichen Steigerungen gibt (Abschnitt 1.5). Auch unter der Betrachtung von Polykristallen als Verband gekoppelter Einkristalle mit unterschiedlichen kristallographischen Orientierungen werden die wichtigsten Einkristalleigenschaften in diesem Abschnitt ausführlich beschrieben.

Im Rahmen der Einführung von Grundbegriffen der Kristallplastizität wird auf die Herleitung von Gleichungen und Nachweisen physikalischer oder geometrischer Eigenschaften in diesem Abschnitt verzichtet. Allerdings wird auf einschlägige Literaturen verwiesen, so dass bei Bedarf an entsprechender Stelle nachgeschlagen werden kann.

1.1 Geometrie der kfz-Einkristalle

1.1.1 Gleitsysteme und Notationen

In einer dichtestmöglichen Oktaeder-Atomanordnung der kfz-Kristalle bilden sich bestimmte kristallographische Ebenen und Richtungen, die die Verformung der Kristalle beeinflussen. Für kfz-Kristalle sind die $\{111\}$-Ebenen und die $\langle 110 \rangle$-Richtungen (Abbildung 1) maßgebend. In jeder der vier unterschiedlichen $\{111\}$-Ebenen liegen dabei drei Gleitrichtungen,

A2 $(\bar{1}11)[01\bar{1}]$	B2 $(111)[0\bar{1}1]$
A3 $(\bar{1}11)[101]$	B4 $(111)[10\bar{1}]$
A6 $(\bar{1}11)[\bar{1}\bar{1}0]$	B5 $(111)[\bar{1}10]$
C1 $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$	D1 $(1\bar{1}1)[0\bar{1}\bar{1}]$
C3 $(\bar{1}\bar{1}1)[\bar{1}0\bar{1}]$	D4 $(1\bar{1}1)[\bar{1}01]$
C5 $(\bar{1}\bar{1}1)[1\bar{1}0]$	D6 $(1\bar{1}1)[110]$

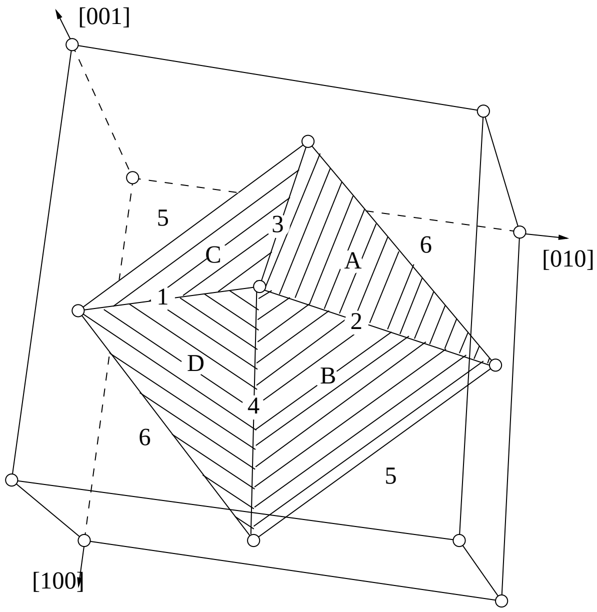


Abbildung 1: Notationen der Gleitsysteme in kfz-Kristallen nach Schmid und Boas [86].

so dass sich insgesamt zwölf Kombinationen, sogenannte Gleitsysteme, ergeben. Aufgrund differenzierter Abgleitung auf unterschiedlichen Gleitsystemen ist es empfehlenswert, eine feste Notation zu verwenden, um die Wechselwirkung zwischen den mikromechanischen Mechanismen auf den einzelnen Gleitsystemen zu beschreiben bzw. besser zu verstehen. Eine viel verwendete, leicht reproduzierbare Notation ist die von Schmid und Boas [86], bei der das zuerst abgleitende System (Primärsystem) die Indizierung (111) für die Gleitebene und

System-Nr.	Normalvektor der Gleitebene	Gleitrichtungsvektor	Schmid und Boas
1	$\mathbf{n}_1^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)^T$	$\mathbf{m}_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,-1)^T$	$B4$
2	$\mathbf{n}_2^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)^T$	$\mathbf{m}_2^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,1,0)^T$	$B5$
3	$\mathbf{n}_3^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)^T$	$\mathbf{m}_3^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,-1,1)^T$	$B2$
4	$\mathbf{n}_4^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-1,1,1)^T$	$\mathbf{m}_4^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,1,-1)^T$	$A2$
5	$\mathbf{n}_5^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-1,1,1)^T$	$\mathbf{m}_5^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,-1,0)^T$	$A6$
6	$\mathbf{n}_6^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-1,1,1)^T$	$\mathbf{m}_6^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,1)^T$	$A3$
7	$\mathbf{n}_7^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-1,-1,1)^T$	$\mathbf{m}_7^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,0,-1)^T$	$C3$
8	$\mathbf{n}_8^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-1,-1,1)^T$	$\mathbf{m}_8^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1,0)^T$	$C5$
9	$\mathbf{n}_9^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-1,-1,1)^T$	$\mathbf{m}_9^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,1,1)^T$	$C1$
10	$\mathbf{n}_{10}^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,-1,1)^T$	$\mathbf{m}_{10}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,-1,-1)^T$	$D1$
11	$\mathbf{n}_{11}^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,-1,1)^T$	$\mathbf{m}_{11}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1,0)^T$	$D6$
12	$\mathbf{n}_{12}^0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,-1,1)^T$	$\mathbf{m}_{12}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,0,1)^T$	$D4$

Tabelle 1: Verwendete Numerierung der Gleitsysteme mit Vektorkomponenten zusammen mit Angabe der Notation nach Schmid und Boas [86].

$[10\bar{1}]$ für die Gleitrichtung erhält. Die Abkürzung B4 für das Primärsystem weist den Buchstaben B auf die Gleitebene und die Zahl 4 auf die zugehörige Gleitrichtung zu. Analogerweise werden die Indizierungen für die verbleibenden Systeme vergeben (Abbildung 1).

Neben der Notation von Schmid und Boas ist die Numerierung der Gleitsysteme mit angegebenen Vektorkomponenten nach Jordan und Walker [52] zu erwähnen, die vorteilhaft für die numerische Umsetzung ist und in dieser Arbeit auch verwendet wird. Es beginnt mit dem Primärsystem $(111)[10\bar{1}]$ äquivalent zu B4 nach Schmid und Boas. Die Reihenfolge der restlichen Numerierung wird in Tabelle 1 mit Hinweis auf die entsprechende Notation nach Schmid und Boas angegeben.

1.1.2 Das Schmidsche Schubspannungsgesetz

Die Aktivierung der Gleitsysteme kennzeichnet den Beginn plastischer Verformung im Kristall. Die Voraussetzung für diese Abgleitvorgänge geht vom Schmidschen Schubspannungsgesetz (Schmid [85]) aus, d.h. die Abgleitung auf einem Gleitsystem findet statt, wenn die (Schmidsche) Schubspannung τ auf diesem Gleitsystem einen kritischen Wert τ_{krit} (also die Fließspannung, die im wesentlichen vom Material sowie der Temperatur abhängt, s. Abschnitt 1.4) erreicht. Weiterhin ist die auf das Gleitsystem wirkende Schubspannung nichts anderes als die Projektion des auf der Gleitebene wirkenden Spannungsvektors auf die Gleitrichtung und damit lautet das Schmidsche Schubspannungsgesetz

$$\tau := (\boldsymbol{\sigma}\,\mathbf{n}) \cdot \mathbf{m} \;\geq\; \tau_{krit}\,, \tag{1}$$

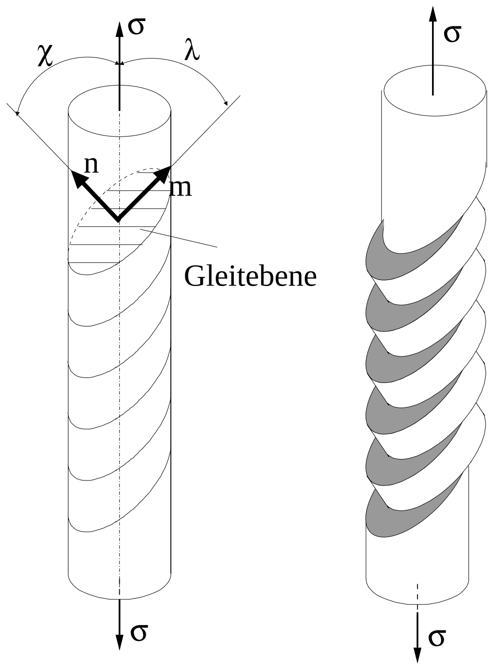


Abbildung 2: Demonstration eines einachsigen Zugversuches zur Bestimmung der Schmidschen Schubspannung

das als Fließbedingung für ein System gilt. Dabei ist $\boldsymbol{\sigma}$ der Spannungstensor und $\mathbf{n}$ bzw. $\mathbf{m}$ der Einheitsnormalen- bzw. Einheitsgleitrichtungsvektor (s. Tabelle 1). Gemäß der Ungleichung (1) fängt auf demjenigen Gleitsystem an zu gleiten, das am günstigsten bezüglich der äußeren Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ orientiert ist.

Für die einachsige Zugverformung an Einkristallen bei gegebener Nennspannung σ ist die Schmidsche Schubspannung angenähert durch (Haasen [36]):

$$\tau \simeq \sigma \,.\, \cos\chi \, \cos\lambda \; =: \; \sigma \,.\, m_S \tag{2}$$

wobei χ bzw. λ die Winkel zwischen der Zugachse und Gleitebenennormale bzw. Gleitrichtung bezeichnen (Abbildung 2). Der Faktor $m_S := \cos\chi \cos\lambda$ wird als der Schmidfaktor des Gleitsystems bei bestimmter Kristallorientierung relativ zur Zugachse bezeichnet. Eine Darstellung der Schmidfaktoren des primären Gleitsystems B4 in der stereographischen (001)-Projektion (s. Anhang A.2) ist in der Abbildung 3 zu sehen, wobei der maximale Wert von 0,5 für die Orientierung $\chi = \lambda = 45°$ erreicht wird.

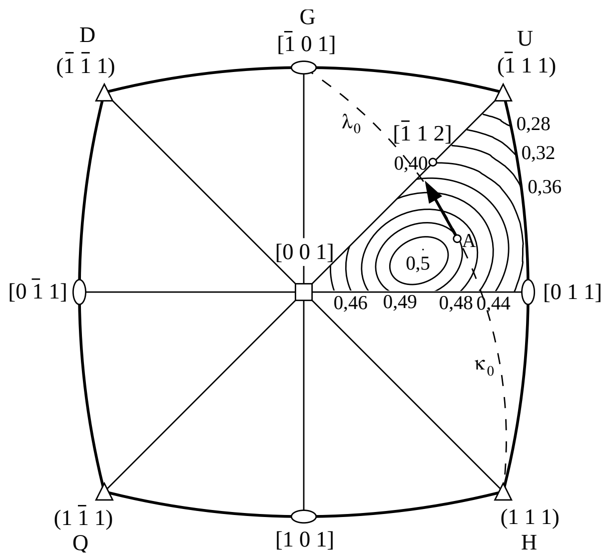


Abbildung 3: Darstellung der Schmidfaktoren im $[001] - [011] - [\bar{1}11]$ Standarddreieck der stereographischen (001)-Projektion beim Zugversuch. Die eingetragenen Linien entsprechen den konstanten Schmidfaktoren für das Hauptgleitsystem.

1.1.3 Geometrie der Verformung in kfz-Einkristallen

Plastische Verformung wird meist in einem Zug- (oder Druck-)Versuch an einem Stab untersucht, nicht aber in einem direkt Abgleitung erzeugenden Schubversuch, bei dem die Orientierung des Kristalls sich nicht ändert. Im Lauf der plastischen Verformung ändert sich ständig die Kristallorientierung relativ zur festen Zug- bzw. Druckachse. Dies liegt daran, dass die Lage der Probenlängs- bzw. Zugachse durch Einspannung der Zugmaschine erhalten bleibt, was zu einer Gitterverdrehung gegenüber der Probenachse führt (Abbildung 4). Durch die ständige geometrische Änderung während der plastischen Verformung

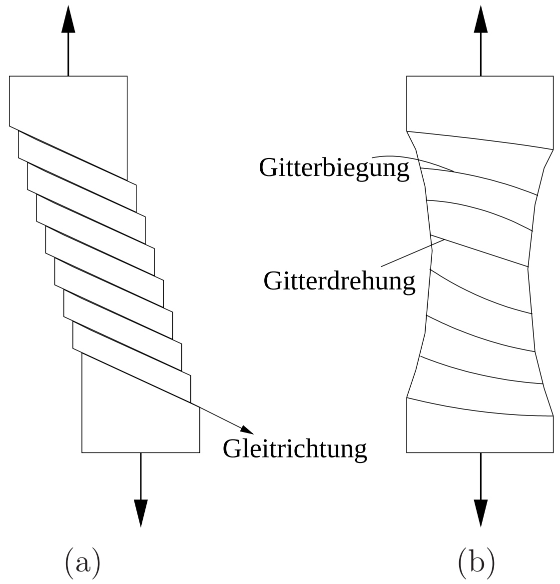


Abbildung 4: Zur Änderung der kristallographischen Orientierung im Zugversuch: (a) Einfachgleitung bei freier Verformung. (b) Gitterdrehung und -biegung durch Einspannung der Zugachse.

ändert sich entsprechend die Schmidsche Schubspannung gemäß der Gleichung (2) und führt zu einer charakteristischen Fließkurve mit unterschiedlichen Phasen. Im Folgenden wird die Geometrie der Verformung in einem Zugversuch demonstriert. P sei die Ausgangslage der Zugachse relativ zu den lokalen Kristallkoordinaten, die in einem sog. stereographischen „Standarddreieck" $[001] - [011] - [\bar{1}11]$ dargestellt ist (Abbildung 5(a)). In dieser Lage ist das Gleitsystem B4 (hier nach Notation von Schmid und Boas) so günstig orientiert, dass die Abgleitung zuerst nur auf diesem System (nach elastischer Phase) stattfindet, also Einfachgleitung. Bei der Abgleitung bewegt sich die Zugachse dementsprechend auf die primäre Gleitrichtung $[\bar{1}01]$ (Gleitrichtung von B4) zu. Erreicht die Zugachse durch die Orientierungsänderung den Rand des Standarddreiecks, so tritt ein zweites Gleitsystem mit Gleitrichtung [011], also Gleitsystem C1, aufgrund der günstigen Lage auf, wodurch sich die resultierende Gleitrichtung von $[\bar{1}01]$ auf $[\bar{1}12]$ ändert ($[\bar{1}01] + [011] = [\bar{1}12]$). Entsprechend wandert die Zugachse relativ auf die $[\bar{1}12]$-Richtung zu.

Liegt die Ausgangslage der Zugachse auf dem Großkreis $[\bar{1}01] - [011]$, so stößt die Orientierung der Zugachse bei Erreichen der Symmetralen direkt auf die $[\bar{1}12]$-Richtung und ändert sich folglich ihre Richtung nicht mehr.

In der Regel findet man leichte Abweichungen von diesem idealen Verhalten derart, dass bei Erreichen der Symmetralen das primäre Gleitsystem weiter allein aktiv bleibt, so dass die Zugachse über die Symmetrale hinausschießt (Abbildung 5(b)). Je weiter sie sich auf die primäre Gleitrichtung $[\bar{1}01]$ zubewegt, desto aktiver wird das sekundäre Gleitsystem C1 und damit kehrt die Orientierung der Zugachse zur Symmetralen zurückkehrt. Dieses Überschießen kann als latente Verfestigung verstanden werden, d.h. die sekundären Gleitsysteme werden bei Betätigung des primären Gleitsystems verfestigt.

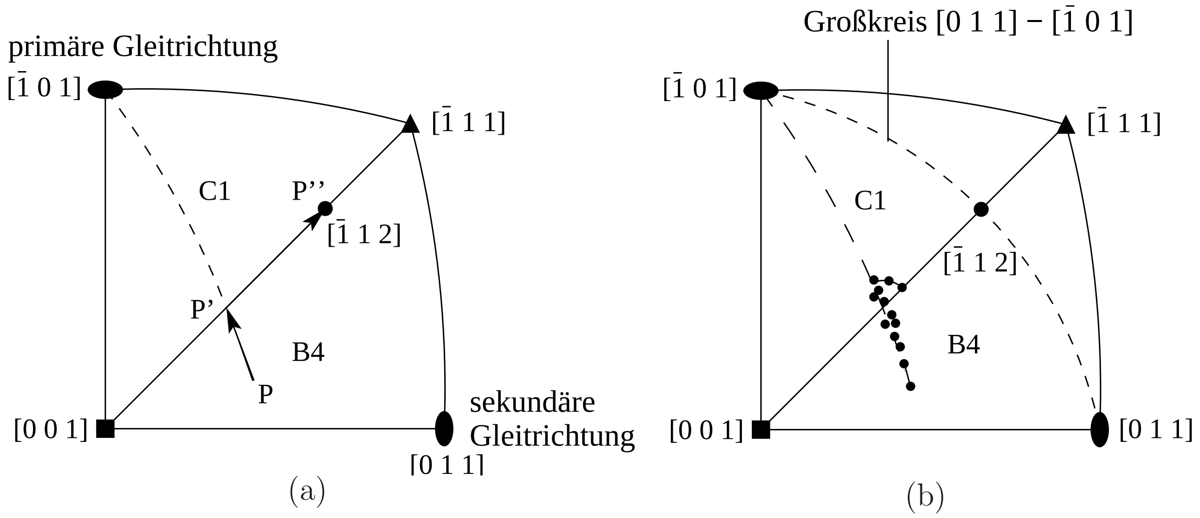


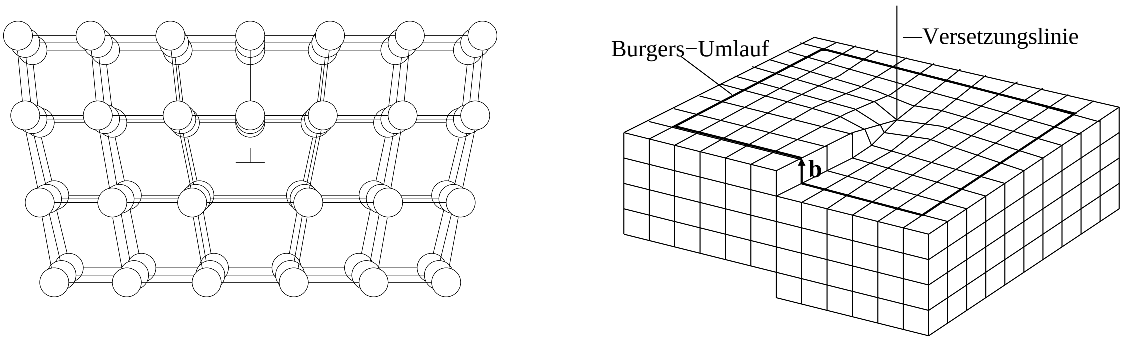
Abbildung 5: (a) Lageänderung der Zugachse relativ zum Kristall durch das gleitaktive Primärsystem B4 im einachsigen Zugversuch; (b) Latente Verfestigung bei Aktivierung des Sekundärsystems C1 durch Überschießen ins Standarddreieck $[001] - [\bar{1}11] - [\bar{1}01]$.

1.2 Versetzungen in Kristallen

1.2.1 Topologische Eigenschaften von Versetzungen

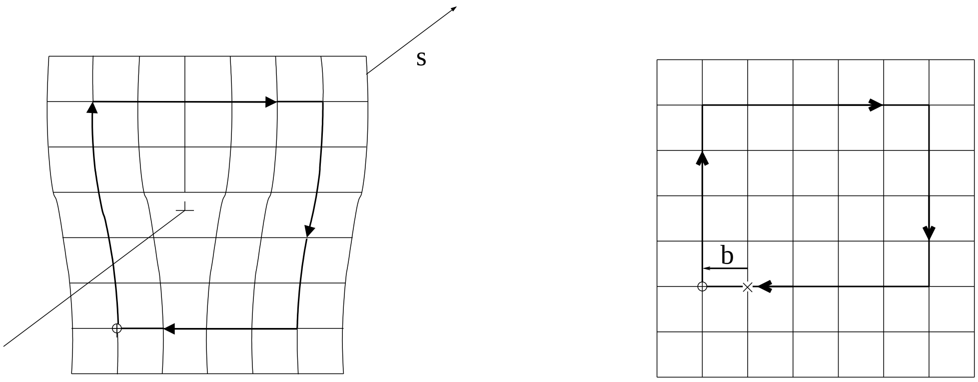
Versetzungen in metallischen Kristallen sind nach topologischer Eigenschaft die Gitterbaufehler. Sie stellen Liniendefekte des Kristalls dar, welche den Anteil einer Ebene, auf der die Abgleitung stattfindet, vom Rest der Ebene abgrenzen. Mit Hilfe des Transmission-Elektronen-Mikroskops (TEM) können die Versetzungen von dünnen Metallfolien (Dicke $\simeq 0,1\mu m$) direkt beobachtet und in drei Arten aufgeteilt werden. Eine Stufenversetzung entsteht dort, wo eine kristallographische Ebene endet. Die Begrenzungslinie dieser Teilebene im Kristall wird als Stufenversetzung bezeichnet (Abbildung 6(a) mit dem Symbol $\perp$). Eine andere Art von Versetzungen, Schraubenversetzung, erhält man, wenn man die beiden Trennflächen nicht senkrecht, sondern parallel zur Begrenzungslinie des Schnitts um einen Atomabstand verschiebt (Abbildung 6(b)). Geht man auf einer Ebenen senkrecht zur Versetzungslinie um die Schraubenversetzung herum, so kommt man nicht zum Ausgangspunkt zurück, sondern bewegt sich auf einer Schraubenlinie. Die Versetzungslinien sind meist nur auf kurzen Teilstücken reine Stufen- oder Schraubenversetzungen. Im Allgemeinen sind sie eine Kombination beider Komponenten: gemischte Versetzung, bei der die Verschiebung der getrennten Kristallite geneigt (also weder senkrecht noch parallel) zur Schnittbegrenzung wird. Die Häufigkeit von Versetzungen, die Versetzungsdichte, wird als die Anzahl der Versetzungen pro Fläche angegeben.

Eine Versetzung wird durch ihr Linienelement $d\boldsymbol{\ell}$ und den sog. Burgers-Vektor $\mathbf{b}$, um den die Kristallteile sich gegeneinander verschieben, wenn eine Versetzung sich bewegt, charakterisiert. Der Burgers-Vektor wird durch den sog. Burgers-Umlauf (Abbildung 7) definiert. Im gestörten Kristall wählt man einen geschlossenen Umlauf im Uhrzeigersinn um die positive Richtung der Versetzungslinie. Vollzieht man den gleichen Umlauf im perfekten Kristall, so sind Anfangs- und Endpunkt des Umlaufs um einen Burgers-Vektor verschoben. Zusätz-



(a) (b)

Abbildung 6: Darstellung von Stufenversetzung (a) und Schraubenversetzung (b) als Gitterbaufehler.



(a) (b)

Abbildung 7: Zur Definition des Burgers-Vektors durch den Burgers-Umlauf im (a) gestörten und (b) ungestörten Kristall.

lich muss der Burgers-Vektor ein Translationsvektor des Gitters sein, damit die kristalline Struktur erhalten bleibt.

Betrachtet man nun eine orientierte Versetzungslinie $\boldsymbol{\ell}$, so ist der Burgers-Vektor der Stufen- bzw. Schraubenversetzung senkrecht bzw. parallel zur deren Versetzungslinie. Bei gemischtem Versetzungstyp kann in jedem Punkt der Versetzungslinie die Versetzung in einen Stufen- und in einen Schrauben-Anteil zerlegt werden, so dass sich der Burgers-Vektor analog zerlegt in

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_\perp + \mathbf{b}_\parallel \tag{3}$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_\perp &= (\mathbf{b}.(\mathbf{l} \times \mathbf{e}))(\mathbf{l} \times \mathbf{e}) \\ \mathbf{b}_\parallel &= (\mathbf{b}.\mathbf{l})\mathbf{l}\,, \end{aligned}$$

wobei $\mathbf{l} := \frac{d\boldsymbol{\ell}}{|d\boldsymbol{\ell}|}$ und $\mathbf{e} := \frac{\mathbf{l}\times\mathbf{b}}{|\mathbf{l}\times\mathbf{b}|}$ die Tangential- und Normaleneinheitsvektor der Versetzungslinie $\boldsymbol{\ell}$ sind.

Letztlich können Versetzungen nur an einer freien Oberfläche, an einer anderen Versetzung oder an einem anderen Kristalldefekt (z.B. einer Korngrenze) enden. Diese Stetigkeit wurde ebenfalls von NABARRO [71] geometrisch streng bewiesen.

1.2.2 Bewegung von Versetzungen

Durch lokale Störung des Gitters um eine Versetzung werden elastische Verzerrungen hervorgerufen, welche in erster Linie vom Burgers-Vektor und von der Geometrie der Versetzungslinien abhängen. Es bilden sich dabei eigene Spannungsfelder, die, neben eventuell von außen angelegten Spannungsfeldern, die Bewegung der Versetzungen ermöglichen. Wird nun ein Linienelement $d\boldsymbol{\ell}$ einer Versetzung um $d\mathbf{r}$ bewegt, so müssen beide Seiten des Elements ($d\boldsymbol{\ell} \times d\mathbf{r}$) relativ zueinander um den Burgers-Vektor $\mathbf{b}$ verschoben werden (s. Abbildung 8, HAASEN [36]). Liegt $d\mathbf{r}$ nicht in der Gleitebene ($\mathbf{b} \times d\boldsymbol{\ell}$), dann öffnet sich bei der Verschiebung ein Volumenelement

$$dV = \mathbf{b}.(d\boldsymbol{\ell} \times d\mathbf{r}) = d\mathbf{r}.(\mathbf{b} \times d\boldsymbol{\ell}) \ . \tag{4}$$

Eine solche Bewegung mit $dV \neq 0$ nennt man nicht-konservativ oder Klettern und mit $dV = 0$ konservativ oder Gleiten. Eine Schraubenversetzung besitzt in diesem Sinn keine bevorzugte Gleitebene, so dass sie leicht ihre initiale Ebene für eine äquivalente Kristallebene verlassen kann (Quergleiten). Dies gilt nicht für Stufenversetzungen, die durch Einbau von Leerstellen oder Zwischengitteratome an ihrer Extrahalbebene klettern (s. Abbildung 9). Offenbar erfordern nicht-konservative Bewegungen (Klettern) einen Materialtransport durch Diffusion und dementsprechend eine thermische Aktivierung. Sie finden deshalb seltener als konservative Bewegungen statt und werden überwiegend bei höheren Temperaturen beobachtet.

Gleiten und Klettern von geraden Versetzungen beginnen oft lokal von Kinken und Sprüngen aus. Eine Kinke ist ein Knick in der Versetzungslinie und bringt die Versetzung um den Elementarschritt in der Gleitebene vorwärts (s. Abbildung 10), während Sprünge die Versetzungslinie aus der Gleitebene heraus führen (s. Abbildung 11). Die zwangsläufigen Schneidvorgänge von in unterschiedlichen Gleitebenen beweglichen Versetzungen (s. Abschnitt 1.2.3) führen zu Sprüngen. Je nach Typ der schneidenden Versetzungen können die erzeugten

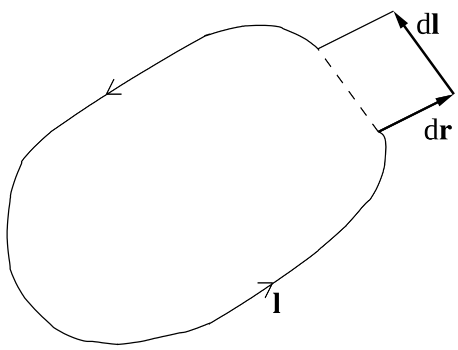


Abbildung 8: Ausdehnung eines Versetzungsrings durch Element $d\boldsymbol{\ell} \times d\mathbf{r}$.

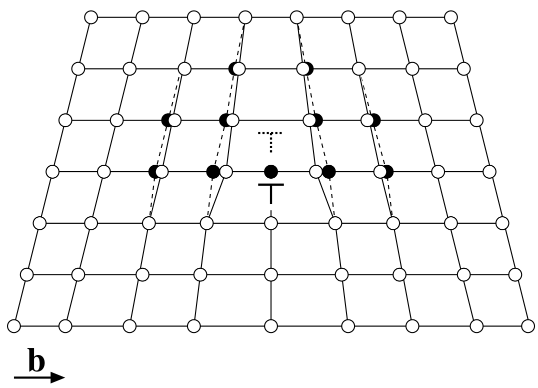


Abbildung 9: Klettern von Stufenversetzung aus gestrichelter Positionen durch Einbau von Leerstellen.

Sprünge die Beweglichkeit der Versetzungen beeinträchtigen. Im Fall von zwei Stufenversetzungen wird ein gleitfähiger Sprung erzeugt, der sich mit den restlichen Versetzungen bewegen kann (Honeycombe [48]). Hingegen hat der beim Schnitt zweier Schraubenversetzungen erzeugte Sprung einen Stufencharakter, weshalb er im Tieftemperaturbereich sesshaft ist. Die vom Linienelement $d\boldsymbol{\ell}$ und Burgers-Vektor $\mathbf{b}$ aufgespannte Gleitebene des Sprungs stimmt mit der Gleitebene der Schraubenversetzung nicht überein, so dass die Bewegung der Schrauben stark behindert wird. Falls sie sich weiter in ihre ursprüngliche Richtung bewegen sollen, können sie nicht mehr durch Gleiten sondern nur durch Klettern folgen. Es geschieht eine nichtkonservative Bewegung, bei der je nach relativer Lage von Halbebene und Sprung die Anlagerung von Leerstellen und Zwischengitteratomen stattfindet (Hirth und Lothe [45]). Diese geometrischen Überlegungen deuten darauf hin, dass durch eine Wechselwirkung zwischen verschiedenen Gleitsystemen die Beweglichkeit der Schraubenversetzungen mehr behindert wird als die der Stufenversetzungen.

Die oben genannten Versetzungsbewegungen resultieren aus Kräften, die durch eigene bzw. von außen angelegte Spannungen entstehen und auf Versetzungen ausüben. Die Verschiebung eines Flächenelements $d\mathbf{a} = d\boldsymbol{\ell} \times d\mathbf{r}$ um $\mathbf{b}$ erfordert die Arbeit

$$dA = \mathbf{b}.(\boldsymbol{\sigma}.d\mathbf{a}) = \mathbf{b}\boldsymbol{\sigma}.(d\boldsymbol{\ell} \times d\mathbf{r}) = d\mathbf{r}.(\mathbf{b}\boldsymbol{\sigma} \times d\boldsymbol{\ell}) \tag{5}$$

Aus der Defintion einer mechanischen Arbeit hat der Term

$$d\mathbf{f} := \mathbf{b}\boldsymbol{\sigma} \times d\boldsymbol{\ell} \tag{6}$$

die Bedeutung einer Kraft, die nach ihren Erfinder als Peach-Koehler-Kraft bezeichnet wurde. Diese Kraft ist im Sinn der Thermodynamik die konjugierte Größe zur Bewegung einer Versetzung. Sie wirkt senkrecht zum Tangentenvektor $\mathbf{l} := \frac{d\boldsymbol{\ell}}{|d\boldsymbol{\ell}|}$ der Versetzungslinie $\boldsymbol{\ell}$.

Bei hohen Temperaturen können lokale Störungen durch Versetzungen die Gitterschwingungen verursachen. Die dadurch entstandene Spannung, wenn sie hinreichend groß ist, kann die Versetzungen zur Bewegung führen. Die sogenannte Peierls-Nabarro-Kraft, die mindestens aufgewandt wird, um die Versetzung starr um eine Gitterkonstante a zu verschieben, ist berechnet worden (z.B. Hirth und Lothe [45]):

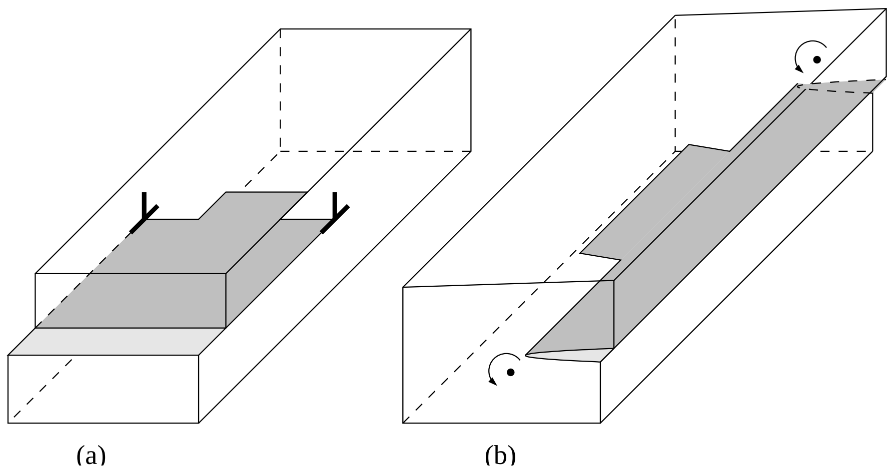


Abbildung 10: Kinken von Stufen- (a) und Schraubenversetzung (b).

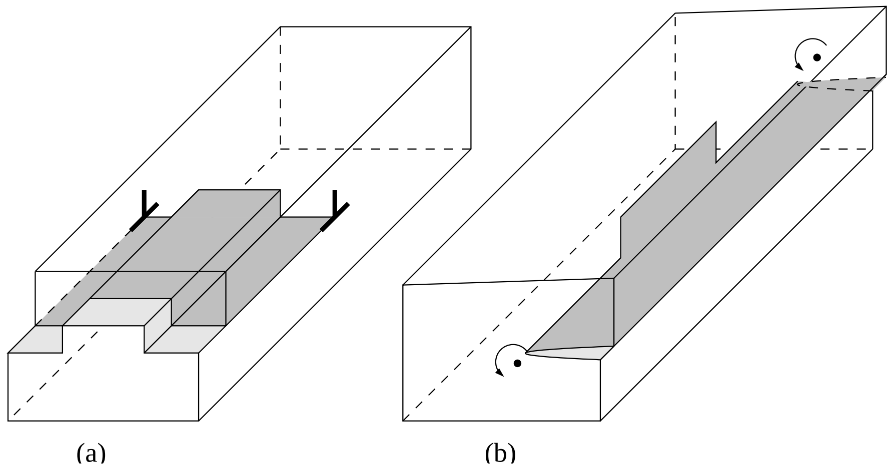


Abbildung 11: Sprünge von Stufen- (a) und Schraubenversetzung (b).

$$\mathbf{f}_{PN} = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left\{\frac{2\pi a}{b(1-\nu)}\right\} , \tag{7}$$

wobei G und ν der Schubmodul und die Querkontraktionszahl sind. Die Gleichung (7) zeigt, dass sich Versetzungen in den Ebenen mit großem Netzabstand (z.B. kfz- oder hdp-Metalle mit dichtester Packung) und mit dem kleinstmöglichen Bürgers-Vektor leichter bewegen. Für solche Kristalle ist $\mathbf{f}_{PN} \approx 10^{-5}G$ vernachlässigbar klein. Für einige Kristalle wie Ge, Si und überwiegend kubisch raumzentrierte Metalle ist $\mathbf{f}_{PN} \approx 10^{-2}G$ relativ groß. Tatsächlich sind Versetzungen in diesen Metallen infolge der thermischen Aktivierung bei noch geringeren Kräfte als $\mathbf{f}_{PN}$ beweglich. Ihre Bewegung erfolgt allerdings nicht durch Translation sondern durch Gleitung von Kinken (Haasen [36]). Die Selbstenergie einer Kinke besteht aus Peierls- und elastischer Linienenergie zufolge

$$E_k = \frac{4b}{\pi}\sqrt{E_{PN}E_L} . \tag{8}$$

1.2.3 Wechselwirkung von Versetzungen

Mit unterschiedlichem Richtungsvorzeichen vom Linienelement $d\boldsymbol{\ell}$ gegenüber dem Burgers-Vektor $\mathbf{b}$ kann die Wechselwirkungskraft in Gleichung (6) die Rolle der Anziehung bzw. Abstoßung zwischen Versetzungen übernehmen. Für z.B zwei beliebig orientierte gleichartige Versetzungen mit den Burgers-Vektoren $\mathbf{b}_1$ und $\mathbf{b}_2$ kann die Wechselwirkung aus der Vereinigungsreaktion $(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$ abgeschätzt werden. Die dabei entstehende Energie steigt bzw. fällt proportional zu $(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)^2 - \mathbf{b}_1^2 - \mathbf{b}_2^2 = 2\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2$, je nachdem, ob Abstoßung $(\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 > 0)$ oder Anziehung $(\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 < 0)$ vorliegt. Die Vereinigung wird aber unter Umständen durch mangelnde Gleitmöglichkeiten der beteiligten Versetzungen verhindert. Das $(\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2)$-Kriterium zeigt, dass Versetzungen mit möglichst kurzem Burgers-Vektor unter Energiegewinn in sog. Shockley-Partialversetzungen zerfallen.

Man kann die Wechselwirkung zwischen Versetzungen in zwei Arten unterteilen: kurzreichend oder weitreichend. Für die kurzreichende Wechselwirkung sind die Schneideprozesse von anziehenden Versetzungen verantwortlich (Abbildung 12). Nach Baird und Gale [8]) schneiden sich zwei anziehende Versetzungssegmente A_1A_1' und A_2A_2' im Punkt F (Abbildung 12(a)) und bilden dabei das gemeinsame Versetzungssegment PQ (Abbildung 12(b)) auf der Schnittgeraden der beiden Gleitebenen. Abhängig von der wirkenden Spannung stellt sich die Länge des Versetzungssegments PQ so ein, dass die Gesamtenergie der Anordnung minimal wird. Übersteigt die Spannung einen kritischen Wert, so kollabiert die Anordnung und der Schneidvorgang wird vollendet. Durch solche Schneidevorgänge zwischen anziehenden Versetzungen können sich stabile Versetzungsknoten bilden, wobei aus topologischen Eigenschaften der Versetzungen auch Kinken oder Sprünge entstehen (Reed-Hill [80]). Da die Energie einer Versetzung proportional zu ihrer Länge ist (Haasen [36]), und diese Länge durch Kinken und Sprünge zunimmt, ist für deren Bildung ebenfalls zusätzliche Arbeit zu verrichten. Sesshafte Sprünge werden hauptsächlich durch Schneiden von Schraubenversetzungen in anderen Gleitebenen erzeugt, während gleitfähige Sprünge beim Schnitt zweier Stufenversetzungen (Honeycombe [48]) entstehen.

Die weitreichende Wechselwirkung entsteht bei Abstoßung der Versetzungen mit gleichen

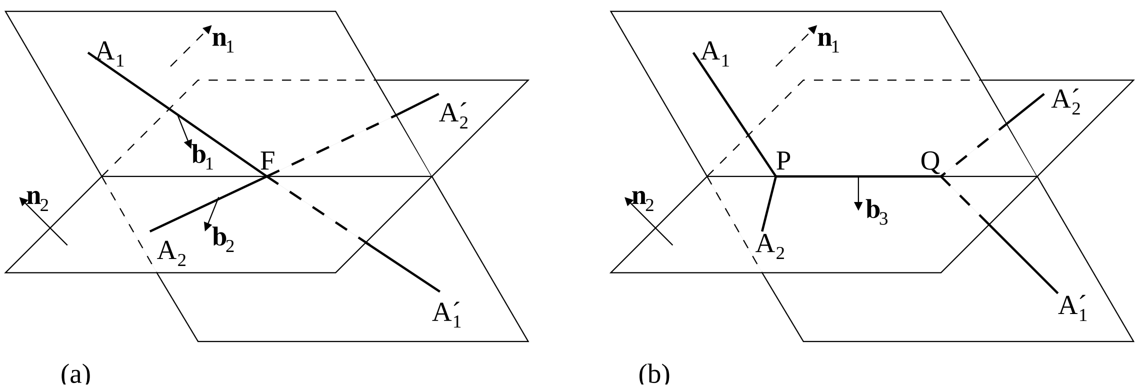


Abbildung 12: (a) Schneidvorgang von Versetzungssegmente A_1A_1' und A_2A_2' im Punkt F, (b) zwischenzeitliche Bildung des gemeinsamen Versetzungsstücks PQ.

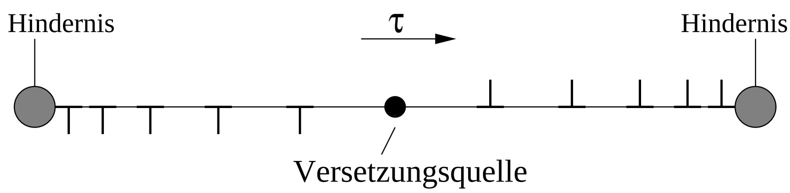


Abbildung 13: Aufstauung von Stufenversetzungen vor Hindernissen.

Vorzeichen, also ($\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2 > 0$), die sich aber vor Hindernissen, z.B. sesshaften Sprünge oder Korngrenzen, aufstauen. Sie üben eine abstoßende Kraft auf die nachfolgenden Versetzungen mit gleichem Vorzeichen aus (Abbildung 13). Solche Versetzungsaufstauungen sind durch Anätzen und TEM vielfach beobachtet worden (Hirth und Lothe [46]).

Eine andere weitreichende Wechselwirkung kommt zustande durch energetische günstige Anordnungen von Versetzungen in Kristallen im Laufe der Verformung, z.B. auftretende Zellstrukturen im Tieftemperaturbereich (Holt [47]). Hierbei sind die Versetzungen so angeordnet, dass in der Nähe der Zellwände hohe Versetzungsdichten zu finden sind, während die zellinneren Bereiche fast versetzungsfrei sind. Durch starke lokale Diskrepanzen von Versetzungsdichten überlagern sich die Spannungsfelder von solchen immobilisierten Versetzungen zu kinematischen Rückspannungen, die die Beweglichkeit der Versetzungen beeinflussen.

1.2.4 Versetzungsbildung und -annihilation

Im Laufe der Bewegung nähern bzw. schneiden sich die Versetzungen. Das dabei entstandene Spannungsfeld bewirkt eine kurzreichende Wechselwirkung zwischen Versetzungen, wodurch Versetzungen neu gebildet oder auch vernichtet werden können. Die bei den Schneideprozessen entstehenden Kinken und Sprünge beeinflußen die Beweglichkeit der Versetzungen überwiegend negativ, da sie sich als Hindernisse darstellen. Die z.B. beim Schnitt der Schraubenversetzungen erzeugten gleitunfähigen Sprünge behindern die Versetzungsbewegung, da die vom Versetzungselement und dem Burgers-Vektor aufgespannte Gleitebene des Sprungs mit der Gleitebene der Schraubenversetzungen nicht übereinstimmt. Eine entsprechende Bewegung ist nur durch das Klettern (oder nicht-konservativ) von Leerstellen oder Zwischengitteratomen möglich (Hirth und Lothe [45]), wobei eine Arbeit zu verrichten ist. Im Tieftemperaturbereich ist die Behinderung von solchen sesshaften Sprüngen besonders stark, da es sehr wenig Zwischengitteratome oder Leerstellen gibt.

Die Energie einer Versetzung kann als Linienspannung E_L betrachtet werden und ist proportional zu ihrer Länge (Haasen [36]). Unter einer Spannung τ krümmt sich eine Versetzung, die an beiden Enden durch Hindernisse (z.B Korngrenze oder sesshafte Sprünge, usw.) festgehalten ist, zu einem Radius $r_K = E_L/\tau b$. Ist der Radius kleiner als der halbe Abstand $l/2$ der Ankerpunkte, so wird die Versetzung instabil (Dieter [20]) und baucht sich zwischen den Ankerpunkten auf bis zur Erzeugung vollständiger Versetzungsringe (Abbildung 14) und reproduziert sich dabei. Die Einsatzspannung dieser Instabilität ist die Orowan-Spannung

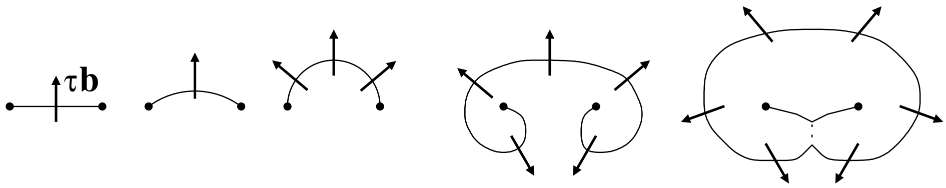


Abbildung 14: Frank-Read-Quelle erzeugt einen Versetzungsring und reproduziert sich.

$$\tau = \frac{2E_L}{bl} \approx \alpha \frac{Gb}{l} \tag{9}$$

mit einem Zahlenfaktor α, der von der Anordnung benachbarter Versetzungen abhängt, also dem Einfluss der latenten Verfestigung. Die Versetzungsmultiplikation durch solche Quellen wurde 1950 von Frank und Read [29] vorgeschlagen und gilt als einer von vielen wichtigen Mechanismen zur Erzeugung der Versetzungen. Ein ähnlicher Prozess findet bei Versetzungen statt, die nur an einem Ende festgehalten sind. Hier wickelt sich die Versetzung aufgrund der äußeren Spannung zu einer Spirale auf, und es kann durch eine Versetzungsreaktion ähnlich beim Frank-Read-Mechanimus zur Bildung eines Versetzungsrings kommen. Solche Quellenmechanismen wurden experimentell bestätigt (Kitter [53] und Dash [19]). Einen Überblick über die wichtigsten Mechanismen geben z.B. Hirth und Lothe [45].

Die Versetzungsdichte eines unverformten Kristalls liegt in der Größenordnung von $10^{10} m^{-2}$ (Anzahl der Versetzungen und Durchstoßpunkte pro Kontrollfläche). Dabei sollen die Versetzungen auf die Gleitsysteme gleichmäßig verteilt werden, so dass auf jedem Gleitsystem eine anfängliche Versetzungsdichte von ungefähr $10^9 m^{-2}$ vorliegt. Im Laufe der plastischen Verformungen steigen die Versetzungsdichten auf den aktivierten Gleitsystemen stark an, wobei die Gesamtversetzungsdichte bei ihrer Sättigung bis zu $10^{15} m^{-2}$ erreichen wird (Essmann und Mughrabi [24]).

Mit steigender Versetzungsdichte erhöht sich die Wahrscheinlichkeit des ,,Zusammentreffens" von zwei Versetzungen in einer gemeinsamen Gleitebenen mit unterschiedlichen Vorzeichen, wobei sie sich gegenseitig annihilieren. Der hier benutzte Begriff ,,Zusammentreffen" ist so zu verstehen, dass sich Versetzungen bis zu einem kritischen Abstand annähern, bevor sie sich auslöschen. Ursache hierfür ist, dass Versetzungen Eigenspannungen besitzen und damit Kräfte aufeinander ausüben (Hirth und Lothe [45]). Die Größenordnung des ,,kritischen Annihilationsabstandes" z.B. in Kupfer liegt für Schraubenversetzungen zwischen 50 und 500 nm (Essmann und Mughrabi [24]) und für Stufenversetzungen deutlich niedriger. Das bedeutet, dass sich Schraubenversetzungen bei näherem Gleitebenenabstand nach Quergleiten wahrscheinlicher auslöschen als Stufenversetzungen durch Klettern auf andere Gleitebenen. Die Kletterprozesse von Stufenversetzungen spielen nach Weertman [102] nur bei höheren Temperaturen eine Rolle, während sich im Tieftemperaturbereich eine Vielzahl von Stufen-Dipolen bei der Deformation bilden (Essmann und Rapp [26]). Die Überlegenheit von beiden Prozessen zur Bildung und Auslöschung von Versetzungen ist während der Deformation gegenläufig, bis eine Kompensation erreicht wird, also eine Sättigung der Versetzungsdichte (Essmann und Mughrabi [24]).

1.3 Zusammenhang von Versetzungsbewegung und plastischer Verzerrung

1.3.1 Plastische Verzerrung einer Versetzung

Es wurde erwähnt, dass plastische Verformung wesentlich durch Abgleitung von Versetzungen auf kristallographischen Ebenen hervorgerufen werden. Nun ist die Frage, wie groß die plastische Verzerrung wird, wenn eine Versetzungsschleife der Länge ℓ eine Fläche A überstreicht. Aufgrund vielfältiger Eigenschaften von Versetzungen wird hier vereinfachend angenommen, dass diese Versetzungsschleife sich in einem homogengen Spannungsfeld $\boldsymbol{\sigma}$ nur in ihrer ursprünglichen Gleitebene mit dem Normalvektor $\mathbf{n}$ und der Geschwindigkeit $\mathbf{v}$ bewegt (Mura [70]). Die geleistete Arbeit eines Spannungsfelds während der Verschiebung eines infinitesimalen Versetzungssegments $d\boldsymbol{\ell}$ um $d\mathbf{r}$ ist (siehe Abbildung 15)

$$dW(\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{b}(d\boldsymbol{\ell} \times \mathbf{v}). \tag{10}$$

Die entsprechende Leistung für die gesamte Schleife beträgt demnach

$$P(\boldsymbol{\sigma}) = \oint_\ell \boldsymbol{\sigma}\mathbf{b}(d\boldsymbol{\ell} \times \mathbf{v}) = -\oint_\ell \boldsymbol{\sigma}\mathbf{b}\mathbf{n}\, v d\ell = -\oint_\ell \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{b} \otimes (\mathbf{v} \times \mathbf{l})] d\ell \tag{11}$$

mit $\mathbf{n} = d\boldsymbol{\ell} \times \mathbf{v}/|d\boldsymbol{\ell} \times \mathbf{v}|\,, \mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt\,, |\mathbf{v}| = v$ und $d\boldsymbol{\ell} = \mathbf{l}d\ell$. Damit ist die gesamte Arbeit W des Spannungsfelds $\boldsymbol{\sigma}$, während die Versetzung eine Gesamtfläche A überstreicht

$$W(\boldsymbol{\sigma}) = -\int_A \boldsymbol{\sigma}\mathbf{b}\mathbf{n}\, dA = -\int_A \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{b} \otimes \mathbf{n}) dA\,. \tag{12}$$

Die Arbeit W^* eines Spannungsfelds $\boldsymbol{\sigma}^*$, das eine plastische Verzerrung $\boldsymbol{\epsilon}_p$ in einem Volumen V erzeugt, ist außerdem gegeben durch

$$W(\boldsymbol{\sigma}^*) = \int_V \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \boldsymbol{\epsilon}_p\, dV\,. \tag{13}$$

Durch den Vergleich der Gleichungen (12) und (13) unter Berücksichtigung der Symmetrie des Verzerrungstensors ergibt sich die plastische Verzerrung

$$\boldsymbol{\epsilon}_p(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{b} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{b})\delta(\mathbf{x} - A)\,, \tag{14}$$

wobei eine Dirac-Distribution mit ihrer Verteilung $\delta(\mathbf{x} - A)$ als Delta-Funktion[1] verwendet wurde. Dieses Ergebnis lässt sich auch so interpretieren, dass die Eigenspannungen, welche

[1] Die Delta-Funktion besitzt folgende Eigenschaften:

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \begin{cases} 0 & \text{wenn} \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_0 \\ 1 & \text{wenn} \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_0 \end{cases}$$

$$f \mapsto \int_V f(\mathbf{x})\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) dV = \begin{cases} f(\mathbf{x}_0)\,, & \text{wenn} \quad \mathbf{x}_0 \in V \\ 0\,, & \text{wenn} \quad \mathbf{x}_0 \notin V \end{cases}$$

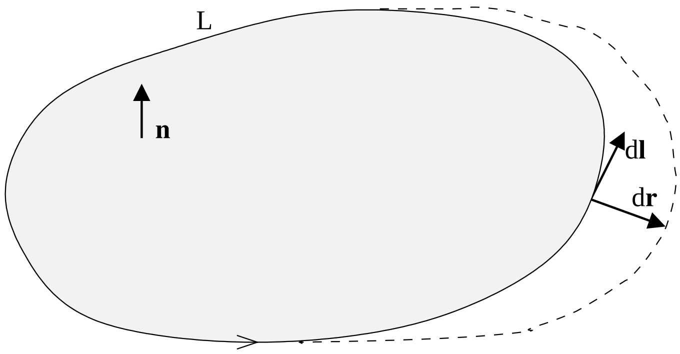


Abbildung 15: Verschiebung eines Versetzungsegment $d\boldsymbol{\ell}$ um $d\mathbf{r}$.

für den Zusammenhalt des Körpers verantwortlich sind, durch die plastischen Verzerrungen in einem plastisch verformten Körper abgebaut werden. Die bleibende Dehnung ist dann rein plastisch und entspricht dem symmetrisierten Gradienten der plastischen Verschiebungen des Elements.

Analog lässt sich die plastische Verzerrungsrate $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p$ aus der Gleichung (11) herleiten

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}[\mathbf{b} \otimes (\mathbf{v} \times \mathbf{l}) + (\mathbf{v} \times \mathbf{l}) \otimes \mathbf{b}]\delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\ell})\,. \tag{15}$$

1.3.2 Übertragung auf das repräsentative Volumenelement

Im Allgemeinen erhält ein Kristallit oder Einkristall viele Versetzungen, deren Bewegungen zu einer heterogenen Verformung führen. Die Mittelwerte der plastischen Verzerrungen und der Verzerrungsgeschwindigkeiten sind aber unter Voraussetzung eines homogenen Spannungsfeldes ermittelt worden. Um die Ergebnisse von Gleichungen (14) und (15) verwenden zu können, muss das Gesamtvolumen als Verbund mehrerer sehr kleiner Teilvolumen, die sog. repräsentativen Volumenelemente (RVE), betrachtet werden, in denen die Versetzungen durch ihre Bewegung nur homogene Verformungen verursachen. Andererseits soll das RVE groß genug sein, damit die festgestellten Zusammenhänge in Gleichungen (14) und (15) nicht von den speziellen Anordnungen der Versetzungen innerhalb des RVE abhängen. Für ein repräsentatives Volumenelement mit dem Volumen V, in dem n Versetzungen wandern, ist die mittlere plastische Verzerrungsgeschwindigkeit

$$\begin{aligned} <\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p> &= \frac{1}{V}\int_V \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p\, dV \\ &= -\frac{1}{2V}\int_V \sum_{i=1}^{n}[\mathbf{b}_i \otimes (\mathbf{v}_i \times \mathbf{l}_i) + (\mathbf{v}_i \times \mathbf{l}_i) \otimes \mathbf{b}_i]\delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\ell}_i)dV \\ &= -\frac{1}{2V}\sum_{i=1}^{n}\oint_{\ell_i}[\mathbf{b}_i \otimes (\mathbf{v}_i \times \mathbf{l}_i) + (\mathbf{v}_i \times \mathbf{l}_i) \otimes \mathbf{b}_i]d\ell \\ &= -\frac{1}{2V}\sum_{i=1}^{n}[\mathbf{b}_i \otimes \mathbf{n}_i + \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{b}_i]\dot{A}_i\,. \end{aligned} \tag{16}$$

Der Term

$$\dot{A}_i = \int d\dot{A}_i = \oint_{\ell_i} |\mathbf{v}_i \times \mathbf{l}_i| d\ell_i \tag{17}$$

ist die Zeitableitung der überstrichenen Fläche A_a, wenn die Versetzung mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v}$ in ihrer Gleitebene wandert. Die mittlere plastische Verzerrung $< \boldsymbol{\epsilon}_p >$ ist damit gegeben zu

$$< \boldsymbol{\epsilon}_p >= -\frac{1}{2V} \sum_{i=1}^{n} [\mathbf{b}_i \otimes \mathbf{n}_i + \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{b}_i] A_i \,. \tag{18}$$

Als Sonderfall betrachten wir nun einen Würfel der Länge ℓ, in dem sich nur gerade Stufenversetzungen parallel zur z-Achse mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = -v \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|}$ in Gegenrichtung des Burgers-Vektors $\mathbf{b}$ bewegen. Die Wanderung solcher Versetzungen ruft eine positive Verschiebung der oberen Fläche in Richtung von $\mathbf{b}$ hervor. Aus den Gleichungen (16) und (17) ergibt sich die entsprechende Abgleitung

$$\dot{\gamma} =< \dot{\epsilon}_p^{xy} >= \varrho b v, \tag{19}$$

wobei $\varrho = n/\ell^2$ die Versetzungsdichte ist. Die Gleichung (19) ist als die Orowan-Beziehung bekannt (Orowan [75]). Sie gibt einen Zusammenhang zwischen den mikroskopischen und makroskopischen Größen an.

1.3.3 Kleine Verzerrungen im Einkristall

In einem Einkristall können mehrere Gleitsysteme $a = 1, 2, ..., N$, welche durch die jeweiligen Burgers-Vektoren $\mathbf{b}_a = \mathbf{m}_a b_a$ und ihre Gleitebene $\mathbf{n}_a$ charakterisiert sind, gleichzeitig aktiv sein. Der Beitrag eines einzelnen aktiven Gleitsystems ist durch Gleichung (16) gegeben

$$\begin{aligned} < \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p >_a &= -\frac{n_a}{2V} [\mathbf{m}_a \otimes \mathbf{n}_a + \mathbf{n}_a \otimes \mathbf{m}_a] b_a \sum_{a=1}^{n_a} \dot{A}_a \\ &= -\frac{1}{2} \dot{\gamma}_a [\mathbf{m}_a \otimes \mathbf{n}_a + \mathbf{n}_a \otimes \mathbf{m}_a] \,, \end{aligned} \tag{20}$$

wobei

$$\dot{\gamma}_a = -\frac{n_a}{V} b_a \sum_{a=1}^{n_a} \dot{A}_a \tag{21}$$

die mittlere Scherung auf dem Gleitsystem a darstellt, und n_a die Anzahl der Versetzungen auf diesem Gleitsystem ist. Die akkumulierte plastische Verzerrungeschwindigkeit ergibt sich aus der Summe aller Gleitsysteme

$$< \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p >= \sum_{a=1}^{N} \frac{1}{2} \dot{\gamma}_a [\mathbf{m}_a \otimes \mathbf{n}_a + \mathbf{n}_a \otimes \mathbf{m}_a] \,. \tag{22}$$

1.4 Fließspannung und Rückspannung

Plastische Verformung in Kristallen beginnt erst bei der Aktivierung der Gleitsysteme, auf denen die Schmidsche Schubspannung die kritische Fließspannung τ_f übersteigt (das Schmidsche Schubspannungsgesetz, Abschnitt 1.1.2). Diese Fließspannung ist im wesentlichen abhängig vom Material, seiner Reinheit, möglichen Legierungszusätzen sowie der Temparatur. In der Regel nimmt τ_f mit zunehmender Reinheit und Temparatur ab und erhöht sich bei wachsender Konzentration von Legierungszusätzen, wobei die Stärke des Effekts vom zulegierten Element abhängt. Eine detaillierte experimentelle Studie der genannten Abhängigkeiten ist z.B. bei WILLE U.A. [106] zusammengefasst. Die Größenordnung von τ_f liegt bei $10^{-5}G$, wobei G den Schubmodul bezeichnet. Für das im Raumtemparatur befindliche Kupfer mit seiner Reinheit von 99,999% bzw. 99,98% liegt τ_f bei ca. 0,35 bzw. $0,95 MPa$.

Mit zunehmender plastischer Verformung und damit Versetzungsdichte erhöht sich die Wahrscheinlichkeit für das Zusammentreffen von Versetzungen, womit kurzreichende Wechselwirkungen entstehen. Das Maß für solche Wechselwirkungen ist die Fließspannung. Dagegen nimmt der Abstand benachbarter Gleitebenen, die freie Weglänge L, bei zunehmender Versetzungsdichte bis zu einem kritischen Abstand (Annihilationsabstand) ab. Also muss die Fließspannung umgekehrt proportional zur freien Weglänge sein

$$\tau_f \sim \frac{Gb}{L}\,, \tag{23}$$

wobei G der Schubmodul und b der Betrag des Burgers-Vektors ist. Aus Dimensionsüberlegungen ist die freie Weglänge L umgekehrt proportional zur Wurzel der Versetzungsdichte ϱ

$$L \sim \frac{1}{\sqrt{\varrho}}\,, \tag{24}$$

wodurch sich zusammen mit Gleichung (23) die kritische Fließspannung ergibt

$$\tau_f \sim Gb\sqrt{\varrho}\,. \tag{25}$$

Diese Beziehung ist nach TAYLOR [93] benannt und war zunächst für die Wechselwirkung paralleler Stufenversetzungen bestimmt. Experimentelle Messungen von Versetzungen durch Ätzgruben auf Cu-Einkristallen, die bis zu Fließspannung τ_f verformt wurden, bestätigten diese Beziehung (s. LIVINGSTON [62]).

Im Allgemeinen ist die Wechselwirkung von Versetzungen überwiegend kurzreichend, wobei das ,,Schneiden eines Versetzungswaldes[2]" die Verfestigung wesentlich verursacht. Die Versetzungsdichte ϱ in Gleichung (25) wird durch die Waldversetzungsdichte ϱ_w ersetzt, so dass die Fließspannung nur in Abhängigkeit von der Waldversetzungsdichte ϱ_w angegeben wird (s. auch Abschnitt 2.2)

$$\tau_f \sim Gb\sqrt{\varrho_w}\,. \tag{26}$$

[2]Versetzungen, die sich außerhalb der Hauptgleitebene befinden.

Der Zusammenhang $\tau_f \sim \sqrt{\varrho_w}$ wurde bei direkten Messungen der Versetzungsgeschwindigkeit auf der Basisebene von Zinkkristallen, in deren Pyramidenebenen Waldversetzungen eingebracht worden waren, bestätigt (Vreeland [107]).

Die lineare Proportionalität von Fließspannungen zur Wurzel von Versetungsdichten in Gleichungen (25) und (26) gilt sowohl bei tiefen als auch bei hohen Temperaturen. Der Proportionalfaktor ist allerdings von der Temperatur abhängig, wodurch eine thermische Schwankung auf die Schneideprozesse und die daraus folgenden Sprungbewegungen von Versetzungen aufgebracht wird.

Anders als kurzreichende Wechselwirkung entsteht weitreichende Wechselwirkung durch energetisch günstige Anordnungen von Versetzungen in Kristallen im Laufe der Verformung (s. Abschnitt1.2.3). Die Versetzungen, die den Laufweg L auf einer Gleitebene zurückgelegt haben, bleiben am Ende der Gleitlinie liegen und üben eine Rückspannung auf die Quelle aus. Zusammen mit den sekundären Versetzungen, die als Hindernisse den Laufweg L begrenzen, bilden diese Versetzungen solche Stränge, Dipol- und Multipolanordnungen, die in elektronenmikroskopischen Durchstrahlungsaufnahmen normalerweise zu sehen sind (Mughrabi [69]). Das sind die Quellen der inneren Spannungen im Kristall, die von weiteren Versetzungen auf ihrem Weg durch den Kristall überwunden werden müssen. Fasst man diese kinematische Rückspannung x mit der Schmidschen Schubspannung τ zusammen, so ergibt sich eine effektive Spannung

$$\tau_{eff} = \tau - x \, . \tag{27}$$

Damit gilt nun die entsprechende Fließbedingung

$$\tau_{eff} \geq \tau_{kin} \, . \tag{28}$$

Bezogen auf ein Gleitsystem kann die kinematische Rückspannung aufgrund ihrer anisotropen Natur bei einer möglichen Abgleitung eine behindernde oder unterstützende Wirkung haben. Die erstere ist der Fall mit gleichem Richtungssinn von Schmidscher Schubspannung und kinematischer Rückspannung und die letzte ist der Fall des gegengesetzten Richtungssinns. Bei monotonen Zugversuchen an Einkristallen (siehe Abschnitt 1.5) ist der Betrag kinematischer Rückspannung relativ klein gegenüber der Schmidschen Schubspannung und Fließspannung, so dass sie nur eine quantitative, nicht aber qualitative Rolle spielt. Der qualitative Verlauf von Einkristall-Fließkurven ändert sich dabei nicht. Hingegen ist der Einfluss von kinematischer Rückspannung besonders stark bei Zugversuchen mit Lastwechsel oder bei der Verformung von Polykristallen, die sich als Verband von Einkristallen unterschiedlicher kristallographischer Orientierung verstehen lassen. Dabei sind die Körner, Subkörner und die oben genannten Zellstrukturen reichlich vorhanden und die Korngrenzen sowie Zellwände zeigen sich als Hindernisse, in deren Umgebung hohe Versetzungsdichten zu finden sind. Die Existenz der kinematischen Rückspannung in anisotropen Werkstoffen lässt sich als Bauschinger-Effekt bei Einkristallzugversuchen mit Lastumkehr (z.B. Edwards [21], [22] an Kadmium und Zink) bzw. mit zyklischen Lastwechseln (z.B. Wadsworth [100] an Kupfer, Giese und Estrin [33] an Aluminium, Blochwitz und Veit [14] an Nickel) nachweisen.

1.5 Einkristall-Fließkurve

Die Verformungsgeometrie beim Zugversuch an kfz-Einkristallen (vgl. Abschnitt 1.1.3) zeigt die Aktivierung der Gleitsysteme in Abhängigkeit von der relativen Lage der Zugachse bezogen auf dem Einkristall. Mit Hilfe von der Versetzungstheorie soll diese Verformung mit typischer Einkristall-Fließkurve (Abbildung 16) ergänzend erklärt werden. Aufgetragen ist die auf dem Primärgleitsystem wirkende Schmidsche Schubspannung τ über der akkumulierten Abgleitung aktivierter Gleitsysteme γ_{akk}. Die Fließkurve zeigt bei richtiger kristallographischer Anfangsorientierung und bei großer Deformation normalerweise drei Bereiche mit unterschiedlichen Steigungen, sog. Verfestigungsraten. Beispielsweise sei die Ausgangslage der Zugachse im „weichen"[3] Bereich des $[001] - [011] - [\bar{1}11]$- Standarddreiecks der stereographischen (001)-Projektion. Im Bereich I herrscht die Einfachgleitung auf dem aktiven Gleitsystem B4 vor, auf dem die primären Versetzungen durch günstige Orientierung mit wenig Hindernissen zu mobilisieren beginnen („easy-glide"). Diese relativ ungestörten Versetzungsbewegungen lassen sich experimentell bestätigen, dass Scharen mit relativen langen Gleitlinien zu erkennen sind (z.B. Masing [65]). Aufgrund der langen freien Weglänge und noch keiner wesentlichen Wechselwirkung zwischen den Versetzungen steigt die Abgleitung zeitlich schneller als die durch äußere Belastung entstehende Schubspannung auf dem Primärsystem B4, so dass sich nur eine geringe Verfestigungsrate θ_I ergibt, ca. $10^{-4}G$.

Durch Aktivierung der Sekundärsysteme, besonders des nächsten günstig orientierten Gleitsystems C1, erhöhen sich die Versetzungsdichten auf den Sekundärsystemen, so dass die Wahrscheinlichkeit der Schneideprozesse von Versetzungen (sog. kurzreichende Wechselwirkung) steigt. Die dabei immer mehr erzeugenden sesshaften Versetzungskonfigurationen erschweren die Versetzungsbewegung und damit die Abgleitung auf dem primären Gleitsystem B4 zunehmend und führen zu kurzwelliger Periodizität der Versetzungsanordnung. Für Neubildung und Bewegung der mobilen Versetzungen ist folglich eine wachsende Schubspannung erforderlich (Seeger u.a. [88]), so dass sich die Verfestigungsrate θ_{II} bis ca. $10^{-2}G$ erhöht, die allerdings unabhängig von Temperatur und Gleitrate ist (Vreeland [107]). In diesem Bereich erhöht sich auch die primäre Fließspannung aufgrund der steigenden Versetzungsdichte auf den Sekundärsystemen als Waldversetzungen für das Primärsystem. Diese Verfestigungsphänomene werden auch sog. latente Verfestigung genannt.

Zusätzliche Erklärungen für den starken Anstieg der Verfestigungsrate im Bereich II versuchen Hirsch [44] und Mott [68] der behindernden Wirkung der Versetzungssprünge bei kurzreichenden Wechselwirkungen von Versetzungen zuzuschreiben. Die dataillierte Untersuchung von Hirsch [44] zeigt, dass es Sprüngen in Schraubenversetzungen bei geeigneter Lage der Halbebene möglich ist, in Richtung der Schraubenachse zu gleiten. Die eigentliche Bewegung von Schraubenversetzung wird jedoch in jedem Fall erschwert. Obwohl Hirsch [44] Versetzungsaufstauungen berücksichtigt, geht jedoch von einer lokalen Erholung durch Sekundärgleitung aus, die zur Bildung der Versetzungsknäuel beiträgt. Der Spannungsanstieg resultiert letztendlich aus der kurzreichenden Behinderung durch die Verknäuelungen. Die Theorie von Kuhlmann-Wilsdorf [60] berücksichtigt die inhomogene Versetzungsanordnung in zellförmigen Strukturen, die sich im Lauf der Deformation verkleinern, so dass

[3] nicht zu nah an den Bereichgrenzen des Standarddreiecks, also „harten" Bereichen, wo die Mehrfachgleitungen ausgeprägt sind (s. Abbildung 22).

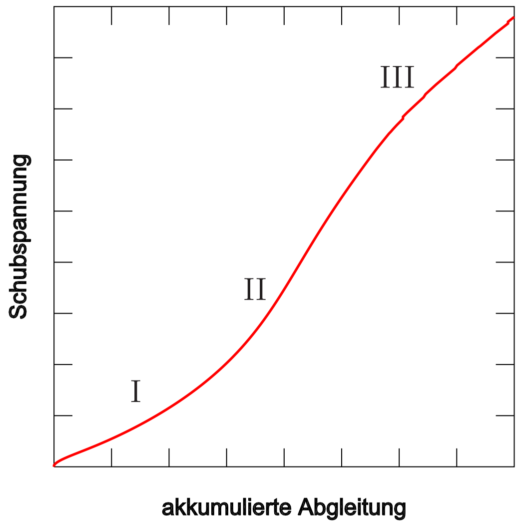


Abbildung 16: Qualitative Verlauf der Einkristall-Fließkurve bei monoton einachsigem Zugversuch mit drei unterschiedlichen Verfestigungsraten.

sich die Versetzungen bei gleichzeitigem Anstieg ihrer Dichte multiplizieren. Der hieraus resultierende Anstieg der Quellspannung führt zur Verfestigung.

Wichtige Hinweise zur Gleitaktivität auf den einzelnen Systemen liefern Messungen der jeweiligen Versetzungsdichten von Essmann und Rapp [26], die an schwach neutronenbestrahltem Kupfer durchgeführt wurden. Der mit Hilfe von elektronenmikroskopischen Durchstrahlungsaufnahmen gewonnene Verlauf von primärer (ϱ_{pr}) und (über die restlichen Systeme summierter) sekundärer (ϱ_{sek}) Versetzungsdichte zeigt, dass (ϱ_{pr}) während der Einfachgleitung zunächst stark ansteigt und dann eine Tendenz zur Sättigung anstrebt. Die sekundäre Versetzungsdichte entwickelt sich wesentlich erst mit dem Einsetzen des Bereichs II und zwar quadratisch mit der Abgleitung bzw. Fließspannung, die in diesem Bereich proportional zur Abgleitung ansteigt. Schließlich übersteigt sie die primäre Versetzungsdichte. Dieser Effekt tritt deutlich bei Messungen von Neuhaus u.a. [73] an Cu-1,3%Mn auf, der auch in Simulationsergebnissen dieser Arbeit wiedergegeben wird (s. Abbidung 29).

Bei großer Abgleitung im Bereich III werden die Versetzungen nicht nur erzeugt, sondern auch durch zunehmende Hindernisse vernichtet. Damit steigen die Fließspanungen langsamer, tendieren zur Sättigung. Durch kontinuierliche steigende Schubspannungen erhöht sich die Spannungsdifferenz, so dass die Versetzungen ihre ursprünglichen Gleitebenen z.B. durch Quergleiten von Schrauben bzw. Klettern von Stufen (s. Abschnitt 1.2.2) verlassen können. Dies kann bei höheren Temparaturen durch zusätzliche thermische Aktivierung noch erleichtert werden. Es zeichnet sich eine verstärkte Erholungsphase durch Abbau innerer Spannungen auf. Diese bestimmt den Bereich III der Verfestigungskurven kubischer Kristalle sowie das Kriechen bei hohen Temperaturen. Die Verfestigungsrate θ_{III} in diesem Bereich liegt bei ca. $\theta_{III} = 10^{-3}G$.

Die Identifizierung des Bereichs III mit der Quergleitung ist durch Gleitstufenbeobachtung gelungen, wobei ein Zerfall des Kristalls in Zellen und Subkörner beobachtet wurde, und die Stufenversetzungen sich nach Annihilation der Schrauben in Kleinwinkel-Korngrenzen umlagern, die gegeneinander um den kleinen Winkel ψ, je nach dem Versetzungsgehalt ihrer Grenzen verkippt sind (z.B. HAASEN [36]). Das führt bei der Gleitung von einem Subkorn zum anderen dazu, dass Differenzversetzungen des Burgers-Vektors ($\psi\mathbf{b}$) in der Grenze liegenbleiben. Das bedeutet wiederum eine erneute athermische Verfestigung, die nach dem erholungsbedingten Abfall der Verfestigungsrate im Bereich III als neuer Bereich IV sichtbar wird. Besonders erkennt man bei Polykristallen den thermisch aktivierten Abfall von θ_{III} mit zunehmender Verformung (Fließspannung τ_f) bis auf so kleine Werte, dass die mit τ_f wieder steigende Verfestigungsrate θ_{IV} dominiert (Torsionversuchen an Cu-Polykristall ZEHETBAUER [108]). Schließlich setzt im Bereich V dann Klettern ein, und die Verfestigungsrate fällt endgültig ab. Die beiden Prozesse, Quergleitung und Klettern, können bei hohen Temperaturen oder kleinen (γ/Gb) auch in vertauschter Reihenfolge als Bereiche III und V auftreten (SIETHOFF [89]).

1.6 Verformung bei Polykristallen

Technische Metalle sind fast alle vielkristallin aufgebaut. Sie besitzen neben ihrer Kristallstruktur ein Gefüge, das aus verschieden orientierten Körnern oder verschieden zusammengesetzten Phasen aufgebaut ist. In dieser Arbeit wird der Polykristall als Verband von Einkristallen unterschiedlicher kristallographischer Orientierung betrachtet, die an den Korngrenzen miteinander verbunden sind. Trotzdem ist es nicht zweckmäßig, die Verfestigungskurve des Polykristalls als über alle Orientierungen gemittelte Einkristall-Verfestigungskurve zu betrachten. Denn bei Einkristallen hängt die Verfestigungskurve sehr stark von der Orientierung ab, bei der die Beteiligung sekundärer Gleitsysteme entscheidend ist. Dieses Verhalten überlagert sich beim Polykristall und führt zu den besonderen Effekten an den Korngrenzen und Trippelpunkten, die in dieser Arbeit untersucht und erklärt werden sollen.

Die plastische Verformung von Polykristallen unterscheidet sich von der von Einkristallen in zweierlei Hinsicht: Erstens ist die freie Weglänge (oder der Laufweg) L der Versetzung durch die Korngrenzen als Hindernisse erheblich beschränkt und ist maximal gleich dem Korndurchmesser, nicht aber dem Probendurchmesser. Zweitens sind die Schmidfaktoren der Einzelkörner durch ihre unterschiedlichen Orientierungen so verschieden, dass sich die Einzelkörner bei gegebener Zugspannung ganz anders verformen würden, wenn sie nicht miteinander verbunden wären. Für diese Eigenschaft hat ASHBY [7] den Begriff der „geometrisch notwendigen" Versetzungen eingeführt, der dem der „statistisch gespeicherten" Versetzungen entgegengestellt ist. Eine Demonstration für die geometrisch notwendigen Versetzungen bei der Verformung eines Polykristalls ist in Abbildung 17 zu sehen. Hingen die Körner nicht zusammen (b), dann entstünden aufgrund ihrer verschiedenen Orientierungen und Schmidfaktoren Zwischenräume und Überlappungen von Material bei der Verformung. Erst der Einbau geeigneter Versetzungsanordnungen (c) an den Korngrenzen ermöglicht es die Körner des Polykristalls nahtlos wieder zu verbinden (d).

Im Gegensatz zu den statistisch gespeicherten Versetzungen, die im Kristall relativ homogen verteilt sind, liegen die geometrisch notwendigen Versetzungen hauptsächlich in Korngren-

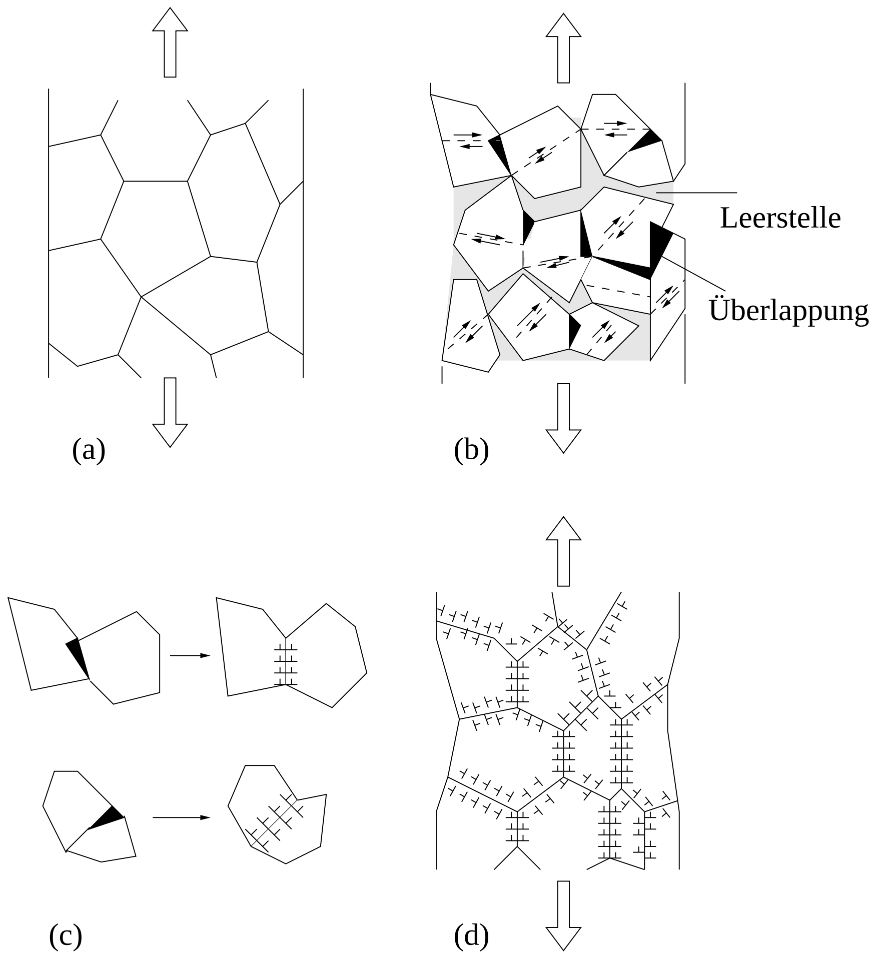


Abbildung 17: Darstellung geometrisch notwendiger Versetzungen bei der Zugverformung eines Polykristalls: Hingen die Körner nicht zusammen (b), dann entstünden Zwischenräume und Überlappungen von Material bei der Verformung. Erst die Einführung geeigneter Versetzungsanordnungen (c) erlaubt es, den Zusammenhang der Körner wiederherzustellen (d) (Haasen [36]).

zennähe, wo die Inkompatibilitätsspannungen wirken (Haasen [36]). Trifft eine Versetzung auf die Korngrenze, so findet sie im Nachbarkorn im Allgemeinen keine zu ihrem Burgers-Vektor passende Gleitebene. Dadurch bilden sich schnell Aufstauungen vor den Korngrenzen, die die kinematische Rückspannung auf anderen Versetzungen beeinflussen (vgl. Abschnitt 1.2.3). Die Erhöhung dieser lokalen Spannungen führt einerseits zur Aktivierung der in der Korngrenzennähe liegenden Versetzungsquellen und andererseits zum Durchtritt der Versetzungen durch die Korngrenzen und der nachfolgenden Abgleitung auf Gleitsystemen des Nachbarkorns (Schatt [84]). Experimentelle Bestätigung für das Letztere sind die geknickten Gleitlinien an der Korngrenzen (Hook und Hirth [49]).

Betrachtet man das plastische Verformungsverhalten der Körner, so stellt man fest, dass eine inhomogene Verteilung von Verformung und Belastung schon im elastischen Bereich zu erkennen ist. Diese findet nicht nur von Korn zu Korn, sondern auch innerhalb einzelner Körner statt. Dies liegt daran, dass der Kristallverband zum Zusammenhalt gezwungen wird, dessen einzelne Bestandteile sich aufgrund ihrer Anisotropie und unterschiedlichen Orientierung eigentlich inkompatibel verformen.

Bei zunehmender Verformung erhöht sich die Zugspannung, und damit die Schmidsche Schubspannung. Beim Überschreiten der kritischen Fließspannung beginnen zunächst lokale plastische Fließvorgänge, und danach die Abgleitvorgänge auf Gleitsysteme mit größten Schmidfaktoren. Die Aktivierung der in der Korngrenzennähe liegenden Versetzungsquellen aufgrund der Kompatibilitätsanforderung zwischen den Körnern führt schon früh zu Mehrfachgleitung und damit verbundenen gegenseitigen Versetzungsbehinderungen. Dadurch tritt die Einfachgleitung im Bereich I mit geringer Verfestigung in Polykristallen nicht auf und macht Polykristalle sehr viel fester als Einkristalle. Aufgrund des Zwangs zur kompatiblen Verformung müssen nach dem theoretischen Kriterium von VON MISES [99] zu jedem Korn fünf unabhängige[4] Gleitsysteme aktiviert werden. Das bedeutet, dass jedes Korn fünf unabhängige Komponenten ϵ_{ij} des Dehnungstensors $\boldsymbol{\epsilon}$ durch Abgleitung in Gleitsystemen realisieren muss (die 6. Komponente ist aufgrund der Volumenkonstanz festgelegt). Mit Hilfe des sogenannten Thompson-Tetraeders für kfz-Kristallen lässt sich dieser Vorgang theoretisch erklären (z.B. HAASEN [36]), der auch in einer modellmäßigen Beschreibung von KRÖNER [59] verdeutlicht wird. Experimentell zeigt sich dagegen, dass im Korninnnern oft nur wenige Gleitsysteme aktiv sind (HONEYCOMBE [48]). Während es in der Korngrenzennähe sehr schnell zu Mehrfachgleitung kommt, sind auch nicht immer fünf aktiven Gleitsysteme vorhanden (HOOK und HIRTH [49]). Besonders stark ist die Inkompatibilität an Tripelpunkten von drei Körnern. Trotz der für Einfachgleitung günstigen Orientierungen von Körnern kommt es in unmittelbarer Umgebung von Tripelpunkten zu Mehrfachgleitung (REY U.A. [81]).

Im Fortgang der weiteren Deformation tragen nach und nach alle Körner zur inelastischen Verformung bei. Die starke Spannungsüberhöhung in der Umgebung der Korngrenzen sowie die relativ homogen verteilte Spannung im Korninnern werden ausgeprägter. Die inhomogene Dehnungsverteilung bleibt nach wie vor erhalten, aber das Verhältnis von maximaler zu minimaler Dehnung steigt stetig. In der Umgebung von Korngrenzen ist die Verformung allerdings kleiner als im Korninnern, da die Korngrenzen fester sind. Die Gleitaktivität ist aufgrund der ortsabhängigen Gitterrotationen lokal unterschiedlich, auch innerhalb einzelner Körner, wie schon bei der Einkristallverformung verdeutlicht wurde. Bei sehr großen Verformungsgraden drehen sich viele Körner quasi als Ganzes in sogenannte Vorzugsrichtungen, die vor allem vom Verformungsprozess (z.B. Tiefziehen, Walzen, usw.) und vom Material abhängen. Es bilden sich dabei Verformungstexturen, die in Polfiguren dargestellt werden (s. HAASEN [36]).

Ferner hängt die Aktivierung der Gleitsysteme von der Korngröße ab, da kleinere Körner stärker verfestigen als größere. Dies liegt daran, dass die Fließspannung beispielsweise bei kfz-Polykristallen etwa um das zehnfache größer ist als bei entsprechenden Einkristallen mit ,,weicher" Anfangsorientierung KOVACS [58] und mit abnehmender Korngröße ansteigt. HALL [37] und PETCH [76] fanden die später nach ihnen benannte quantitative Beziehung

[4]Unabhängig ist ein Gleitsystem dann, wenn die durch seine Gleitung bewirkte Formänderung nicht durch Gleitung in einer Kombination von anderen Gleitsystemen ersetzt werden kann.

für die Schubspannung

$$\tau = \tau_f + k_y \, d^{-1/2} \tag{29}$$

durch Messung an weichem Stahl. Darin bezeichnet τ_f die Fließspannung im Korn mit dem mittleren Durchmesser d, in dem die Versetzungen aufgestaut sind, und τ die erforderliche Schubspannung, um die Versetzungsquellen im Nachbarkorn zu aktivieren. Die Hall-Petch-Konstante k_y ist ein Maß für die Wechselwirkung der Körner und ist für verschiedene Materialien unterschiedlich. Ist die freie Weglänge und damit die Aufstaulänge der Versetzungen kleiner als der Korndurchmesser, dann sollte τ unabhängig von d sein. Die Hall-Petch-Beziehung ist für viele Werkstoffe experimentell bestätigt worden (z.B. Al-Hardary u.a. [1] an Aluminium, Hansen u.a. [38] an Kupfer) und ist die Grundlage der makroskopischen Festigkeit in Abhängigkeit der Korngröße von Polykristallen.

Ein weiterer Einflussfaktor in der Werkstoffentwicklung ist die Temperatur. Bis zur halben Schmelztemperatur sind Korngrenzen sehr fest, so dass Körner sich nur einschränkt bewegen. Im Hochtemperaturbereich nimmt die Festigkeit zwischen den Körnern ab, so dass Korngrenzengleiten ermöglicht wird. Dabei entstehen an Tripelpunkten große Spannungsdifferenzen, die nur durch Materietransport abgebaut werden können (Raj und Ashby [78]).

2 Materialmodelle für Kristallplastizität

In Anbetracht der Polykristalle als Verband gekoppelter Einkristalle werden alle Formulierungen immer zunächst für Einkristalle bestimmt. Die Entwicklung eines Materialmodells geht von zwei unterschiedlichen Strategien (Tabelle 3) aus, die einerseits auf phänomennologischem Ansatz basiert, und die sich andererseits mit zugrunde liegenden physikalischen Vorgängen verknüpft. Selbstverständlich bietet jede Strategie ihre Vor- und Nachteile. Neben der Strategie sind einige Rahmenbedingungen noch zu berücksichtigen, ob ein Materialmodell für große oder kleine Verformungen, für schnelle oder langsame Verformungen, für Hoch- oder Tieftemperatur verwendet werden soll.

In diesem Abschnitt werden qualitative und quantitative Materialmodelle in einem Überblick vorgestellt. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse dienen zur Aufstellung eines neuen Modellansatzes, der qualitative Eigenschaften plastischer Verformung besser beschreibt.

2.1 Versetzungsentwicklung

Die Wechselwirkung der sich multiplizierenden Versetzungen beeinflusst die Verfestigung der Kristalle. Mit der Tatsache, dass Versetzungen am Anfang plastischer Verformung erzeugt und im Laufe weiterer Verformung auch gleichzeitig vernichtet werden (Abschnitt 1.2.4), stellte Kocks [56] den Ansatz einer quantitativen Entwicklung der gesamten Versetzungsdichte ϱ in makroskopischen Modellen zur Beschreibung isotroper Verfestigung vor:

$$\dot{\varrho} \;=\; \frac{1}{bL}\,\dot{\epsilon} - k_o \varrho\,\dot{\epsilon} \tag{30}$$

Die Größe k_o betrachtet Kocks als Konstante, während sie bei Estrin [25] von der Dehnrate $\dot{\epsilon}$ abhängt. Die (über alle Systeme gemittelte) freie Weglänge L wird umgekehrt proportional zur Wurzel aus der gesamten Versetzungsdichte angenommen (Taylor [93]):

$$L \;\sim\; \frac{1}{\sqrt{\varrho}} \tag{31}$$

Unter mikroskopischer Betrachtung trennen Essmann und Mughrabi [24] die Entwicklung der Versetzungsdichten nach Stufen- und Schraubenversetzungen mit unterschiedlichen freien Weglängen und kritischen Annihilationsabständen. Folglich erhält man zwei Entwicklungsgleichungen, die jedoch beide formell einen zu Gleichung (30) identischen Aufbau besitzen. Außerdem wird die Entwicklung der Versetzungen auf einzelnen Gleitsystemen mit unterschiedlicher Abgleitung betrachtet, womit sich eine quantitative Versetzungsentwicklung in der Form ergibt:

$$\dot{\varrho}_a \;=\; \frac{1}{bL_a}\dot{\gamma}_a - 2\frac{y_c}{b}\varrho_a\dot{\gamma}_a\,. \tag{32}$$

Dabei bezeichnen sich die Größe b und y_c als der Betrag des Burgers-Vektors und der kritische Annihilationsabstand, bei dem die Versetzungen annihiliert werden.

Die Erzeugungs- und Annihilationsvorgänge von Versetzungen in Gleichung (32) können aus folgenden Überlegungen hergeleitet werden. Unter der mikroskopischen Betrachtung mit der Annahme, dass die auf einem System a neugebildeten Versetzungen bis zur ihrer Immobilierung eine mittlere freie Weglänge L_a, die dem Durchmesser des Versetzungsrings entspricht, zurücklegen können, ist für ein Gleitinkrement $d\gamma_a$ eine Zunahme $d\varrho_a^+$ der Versetzungsdichte um

$$d\varrho_a^+ = \frac{1}{bL_a} d\gamma_a \tag{33}$$

erforderlich (Essmann und Mughrabi [24]). Mit steigender Versetzungsdichte erhöht sich gleichzeitig die Wahrscheinlichkeit, dass sich Versetzungen in einer gemeinsamen Gleitebene mit unterschiedlichen Richtungssinnen durch gegenseitige Anziehung auslöschen. Aus geometrischen Überlegungen wurde die Häufigkeit solcher Prozesse in Abhängigkeit von Versetzungsdichte, Gleitaktivität, Burgers-Vektor und kritischen Annihilationsabstand entsprechend bestimmt:

$$d\varrho_a^- = 2\frac{y_c}{b}\varrho_a d\gamma_a \, . \tag{34}$$

Fasst man Gleichungen (33) und (34) zusammen und leitet nach der Zeit ab, so erhält man die Entwicklungsgleichung (32) für die Versetzungsdichte.

Die Versetzungsbildung und Annihilation sind zunächst abhängig von der Abgleitung. Basierend auf Gleichung (32) formuliert Teodosiu [95] die Entwicklung der Versetzungsdichten unabhängig von dem Richtungssinn der Abgleitung, und beschreibt damit die isotrope Verfestigung der Kristalle:

$$\dot{\varrho}_a = \frac{1}{bL_a} \mid \dot{\gamma}_a \mid -2\frac{y_c}{b}\varrho_a \mid \dot{\gamma}_a \mid \, . \tag{35}$$

Unter der Berücksichtigung des Rechenaufwandes ist die Entwicklung der Versetzungen nach Ohashi [74] vereinfacht worden. Er berücksichtigt nur den Bildungsterm entsprechend Gleichung (32) und vernachlässigt dabei die Annihilationsvorgänge. Dies führt zu den stetig steigenden Versetzungsdichten auf den Gleitsystemen, was den experimentellen Ergebnissen von Neuhaus u.a. [73] widerspricht. Im Allgemeinen wird der Ansatz (32) bzw. (35) für die Entwicklung der Versetzungsdichten im Sinne kristallplastischer Berechnung von vielen Autoren verwendet, so dass er in dieser Arbeit auch zu finden ist.

Bei der Bestimmung der freien Weglänge L_a des jeweiligen Systems unterscheiden sich die Vorgehensweisen. Im makroskopischen Bereich, wie oben erwähnt, ist die mittlere freie Weglänge umgekehrt proportional zur Wurzel aus der gesamten Versetzungsdichte ϱ geschätzt (Gleichung (31), Taylor [93]). Die freie Weglänge L_a, die die auf einem System neugebildeten Versetzungen bis zu ihrer Immobilisierung zurücklegen können, ist nach Essmann und Mughrabi [24] als algebraische Funktion der Abgleitung angegeben, die bei Einfachgleitung konstant bleibt und bei einsetzender Mehrfachgleitung stetig monoton abfällt. Diese Abhängigkeit von Abgleitungen ist eher phänomenologischer Natur. Teodosiu [95] berücksichtigt dagegen die kurzreichende Wechselwirkung von Versetzungen und gibt für die mittlere freie Weglänge der Versetzung auf einem System in Abhängigkeit von Hindernissen bei der Abgleitung die folgende Beziehung an:

$$L_a \;=\; K\Big(\sum_{b\neq a}\varrho_b\Big)^{-\frac{1}{2}}, \tag{36}$$

wobei K ein Modellparameter ist. In dieser Formulierung wird die mittlere freie Weglänge aus den Versetzungsdichten der anderen Gleitsysteme (ausschließlich der des betrachteten Gleitsystems) bestimmt. Die von TEODOSIU [95] benutzte umgekehrte Proportionalität zur Wurzel aus der Summe der Versetzungsdichten der anderen Systeme hat eine ähnliche Form wie der Ansatz von TAYLOR [93] in Gleichung (31), und lässt sich aus der Dimensionsüberlegung begründen, wobei sich der Proportionalitätsfaktor K während der Verformung nach ESTRIN [25] möglicherweise ändern könnte.

Im Prinzip stellen die Versetzungen gegenüber anderen Versetzungen in gleicher Gleitebene keine Hindernisse dar (NAKADA U.A. [72]), weshalb eine Immobillisierung von Versetzungen vor allem durch die jeweiligen Waldversetzungen geschieht. Folglich erstreckt sich die Summation der Versetzungsdichten statt der anderen Systeme wie in Gleichung (36) nur über die jeweiligen Waldsysteme, was durch den Summationsindex b_s ausgedrückt wird:

$$L_a \;=\; K\Big(\sum_{b_s}\varrho_{b_s}\Big)^{-\frac{1}{2}}. \tag{37}$$

Diese Gleichung lässt sich mit Hilfe von der Spaltenmatrix $\vec{Z}_a$ der die Komponenten 0 und 1 enthaltenen Matrix $\mathbf{Z}$ gemäß

$$\begin{aligned}\mathbf{Z} \;&=\; \begin{pmatrix} 0&0&0&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 0&0&0&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 0&0&0&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\ 1&1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&1\\ 1&1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&1\\ 1&1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&1\\ 1&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1&1\\ 1&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1&1\\ 1&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1&1\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&1&0&0&0\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&1&0&0&0\\ 1&1&1&1&1&1&1&1&1&0&0&0 \end{pmatrix}\\ &=: \Big(\;\vec{Z}_1,\;\vec{Z}_2,\;\vec{Z}_3,\;\vec{Z}_4,\;\vec{Z}_5,\;\vec{Z}_6,\;\vec{Z}_7,\;\vec{Z}_8,\;\vec{Z}_9,\;\vec{Z}_{10},\;\vec{Z}_{11},\;\vec{Z}_{12}\;\Big)\end{aligned} \tag{38}$$

einsichtlicher darstellen (HARDER [39]):

$$L_a = K\Big(\vec{Z}_a^T\,\vec{\varrho}\Big)^{-\frac{1}{2}}. \tag{39}$$

Der Vektor $\vec{\varrho}$ enthält 12 Komponenten aus Versetzungsdichten auf den 12 Gleitsystemen, und $\vec{Z}_a^T$ ist der transponierte Matrixvektor von $\vec{Z}_a$. Diese Darstellung ist sehr hilfreich für die numerische Umsetzung in dieser Arbeit.

2.2 Isotrope latente Verfestigung

In der Vergangenheit hat es eine Reihe von Untersuchungen zum latenten Verfestigungsverhalten gegeben. Beispielhaft seien hier die Arbeiten von Kocks u.a. [55] an Aluminium, Jackson u.a. [51] an Kupfer, Franciosi u.a. [28] an Kupfer und Aluminium, Wessels u.a [105] an Cu-Al-Legierungen sowie Nakada u.a. [72] an Eisen genannt. Latente Verfestigung beruht auf gegenseitigen Einflüssen von Versetzungen bei ihrer Bewegung im Kristall. Als quantitatives Maß für die Erforschung der Zusammenhänge wird oft das latente Verfestigungsverhältnis („latent hardening ratio", LHR) verwendet, das als Verhältnis der kritischen Fließspannung eines Sekundärsystems a zur Fließspannung des Primärsystems r_1, also

$$LHR_a = \frac{r_a}{r_1} \tag{40}$$

definiert ist. Der qualitative LHR-Verlauf über der primären bzw. akkumulierten[5] Abgleitung im Verfestigungsbereich I soll mit einem Grenzwert $LHR = 1$ für gegen Null gehende Dehnung, was der Annahme gleicher kritischer Fließspannungen auf allen Gleitsystemen in der unbelasteten Probe entspricht, beginnen. Nach steilem Anstieg wird es ein Maximum erreichen und dann monoton bis auf Grenzwerte fallen (Abbildung 18). Die Messwerte von Franciosi u.a. [28] für Kupfer- und Aluminium-Proben bestätigen diese Annahme, wobei dieser qualitativer LHR-Verlauf bei Kupfer aufgrund der stärkeren latenten Verfestigung nicht so eindeutig wie bei Aluminium gegeben ist.

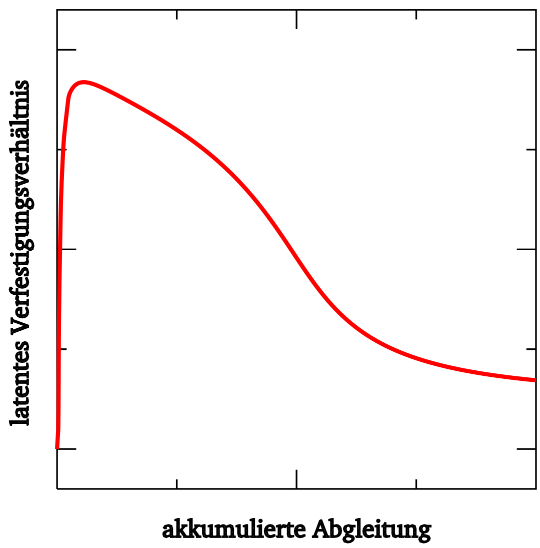


Abbildung 18: Qualitativer Verlauf des latenten Verfestigungsverhältnises über der akkumulierten Abgleitung im Bereich I.

Die LHR-Werte sind im Allgemeinen von Metall zu Metall unterschiedlich. Relative Unterschiede zwischen den Gleitsystemen wurden von vielen Autoren festgestellt, wobei die Einteilung der Gleitsysteme in einzelne Gruppen oft voneinander abweicht (s. Tabelle 2).

[5] Im Bereich I mit Einfachgleitung sind die akkumulierte und primäre Abgleitung gleich.

	Kocks u.a. (Al)	Jackson u.a. (Cu)	Franciosi u.a. (Cu, Al)
große LHR	A2, A3, A6, C1, C3, C5, D1, D4, D6	A2, A6, C1, C5, D1, D4, D6	A6, C1
mittlere LHR		A3, C3	A2, C5, D1, D6
kleine LHR	B2, B5	B2, B5	A3, B2, B5, C3, D4

Tabelle 2: Einteilung der Gleitsysteme nach der experimentell bestimmten Stärke der latenten Verfestigung.

Kocks u.a. [55] nehmen nur eine Zweiteilung der Systeme vor. Ihren Messungen zufolge ist die latente Verfestigung der komplanaren Systeme (B2, B5) klein, während alle anderen sich nicht wesentlich voneinander unterscheiden. Jackson u.a. [51] beobachteten bei letzteren eine geringere Verfestigung derjenigen Systeme (C3, A3), deren Burgers-Vektoren senkrecht auf denen der Primärversetzungen stehen. Bei der Einteilung von Franciosi u.a. [28] wird die geringe latente Verfestigung dem Quergleitssystem D4 zugeordnet. Abgesehen von diesen Unterschieden ist allen Untersuchungen gemein, dass das LHR im Verfestigungsbereich I nach dem Maximum monoton auf Werte nahe 1,0 fällt.

Die verschieden starke latente Verfestigung der einzelnen Gleitsysteme resultiert aus der unterschiedlich starken Behinderung der Sekundärversetzungen durch Primärversetzungen. Dabei spielen die unterschiedlichen Schneidvorgänge, d.h. die kurzreichenden Wechselwirkungen, die entscheidende Rolle. Die detaillierten Untersuchungen von Jackson u.a. [51] an Kupfer zeigen dabei, dass die gebildeten Sprünge oder Kinken für eine nachfolgende Behinderung sorgen, jedoch nicht für die unterschiedliche latente Verfestigung verantwortlich sind, d.h. eine Korrelation von Stufen- und Kinkenbildung zur Größe des LHR-Wertes konnte nicht gefunden werden. Vielmehr wurde vermutet, dass die sich beim Schneidvorgang ausbildende Versetzungskonfiguration das Ausmaß der latenten Verfestigung bestimmt. Zusätzlich wird häufig angenommen (z.B. Franciosi u.a. [28], Bassini u.a. [11]), dass die vorhandene bzw. nicht vorhandene Gleitfähigkeit der Reaktionsversetzungen bestimmt, wie stark die Versetzungsbehinderung ausfällt. Die Spannung, die zum Auftreten der Konfiguration notwendig ist, hat hingegen weniger Einfluss, wie die Berechnungen von Baird und Gale [8] zeigen.

Im Folgenden werden Einflüsse von Versetzungen auf Fließspannungen quantitativ diskutiert, denn die Fließspannungen sind nicht durch dynamische Effekte bedingt, sondern durch die inneren Spannungen aller Versetzungen. Es wurde im Abschnitt 1.4 erwähnt, dass die Fließspannungen linear von der Wurzel der jeweiligen Versetzungsdichte und der Waldversetzungsdichte abhängen. Solche Abhängigkeiten sind auch experimentell bestätigt worden (Heinrich u.a. [42], Mecking u.a. [66]). Die Frage bleibt, wie die unterschiedlichen Beiträge der einzelnen Gleitsysteme zur Fließspannung berücksichtigt werden. Franciosi u.a. [28] machen den Ansatz für die kritische Fließspannung auf dem System a in der Form:

$$r_a = Gb\sqrt{\sum_{b=1}^{N} A_{ab}\, \varrho_b}\ , \tag{41}$$

wobei Parameter A_{ab} die Wechselwirkung zwischen den Gleitsystemen beschreiben. Der Fall

$a = b$ entspricht der eigenen Verfestigung des Systems und $a \neq b$ der latenten Verfestigung. Die Konstanten G, b und N sind der Schubmodul, der Betrag des Burgers-Vektors und die Anzahl der Gleitsysteme. Einen ähnlichen Ansatz, in dem die gewichteten Wurzeln der Versetzungsdichten summiert werden, verwenden OHASHI [74] sowie BALKE und ESTRIN [10] in ihrem Modell zur Untersuchung von Scherbandausbildung in Einkristallen:

$$r_a = Gb \sum_{b=1}^{N} A_{ab} \sqrt{\varrho_b} \,. \tag{42}$$

Durch eine bessere Bestätigung mit experimentellen Ergebnisse (z.B. von FRANCIOSI [28]) ist die Formulierung in Gleichung (41) besser geeignet als die in Gleichung (42), so dass nur die erstere im weiteren Vorgehen berücksichtigt werden soll. Die in der Gleichung (41) verwendeten Parameter A_{ab} sind im Allgemeinen sehr schwierig zu bestimmen, da die Natur der Wechselwirkung zwischen verschiedenen Gruppen von Versetzungen äußerst komplex ist. Man kennt bis jetzt fünf verschiedenen Reaktionstypen von mobilen Versetzungen auf dem System a mit den Waldversetzungen auf den anderen Systemen und die eventuelle Wechselwirkung mit Versetzungen auf dem eigenen System, und somit können die Konstanten A_{ab} grundsätzlich sechs verschiedenen Parameter annehmen:

- A_{LC} für die Bildung stabiler, nicht gleitfähiger ,,Lomer-Cottrell-Versetzungen"
- A_{GL} für die Bildung stabiler, gleitfähiger Versetzungen
- A_{HL} für die Bildung instabiler ,,Hirth-Locks-Versetzungen"
- A_{QU} für die Annihilation oder Abstoßung beim Aufeinandertreffen mit Primärversetzungen
- A_{KO} für die Wechselwirkung der mobilen Versetzungen mit den (lokalen gebildeten) Sekundärversetzungen, die aus Gleitvorgängen auf einem komplanaren System resultieren
- A_{SV} für die Wechselwirkung der mobilen Versetzungen mit den (lokalen gebildeten) Sekundärversetzungen, die aus Gleitvorgängen auf einem eigenen System resultieren.

Die oben genannten Wechselwirkungstypen verdeutlichen folgende Anschauungen: Im Abschnitt 1.2.3 wurde der Schneidevorgang zwischen zwei anziehenden Versetzungssegmenten nach BAIRD und GALE [8] beschrieben. Bezogen auf die Notationen von SCHMID und BOAS [85] treffen beispielsweise die Versetzungen des Primärsystems B4 mit denen des Systems C1 aufeinander, so dass in diesem anziehenden Fall ein gemeinsames Versetzungssegment mit dem Burgers-Vektor $\frac{a}{2}[110] = \frac{a}{2}[10\bar{1}] + \frac{a}{2}[011]$ entsteht, wobei a die Gitterkonstante des Kristalls ist (vgl. Abbildung 12). Das gemeinsame Versetzungssegment liegt auf der Schnittgeraden der Ebenen der Systeme $B4$ und $C1$, weist also in Richtung $[1\bar{1}0]$, also senkrecht zu der Ebene, die von zwei Normalvektoren $[111]$ und $[\bar{1}\bar{1}1]$ der zugehörigen Systeme $B4$ und $C1$ aufgespannt ist. Der Normalvektor der Gleitebene dieses gemeinsamen Versetzungssegments steht immer senkrecht auf dem zugehörigen Burgers-Vektor und Linienelement, ist also durch (001) indiziert. Da diese Ebene keine der ausgewiesenen kristallographischen

Gleitebenen ist, ist das gebildete Versetzungssegment nicht gleitfähig. Dies wird nach seinem Entdecker als Lomer-Versetzung bezeichnet (Lomer [63]), die analog auch bei der Versetzungsreaktionen der Systeme $B4$ und $A6$ entstehen kann. In Erweiterung der Lomer-Versetzungen berücksichtigt Cottrell [18] die Aufspaltung der Versetzungen vor und nach dem Schneidevorgang, die vor allem im kubisch-flächenzentrierten Gitter auftritt. Die dabei entstehenden nicht gleitfähigen, aufgespaltenen ,,Lomer-Cottrell-Versetzungen" bilden analog zu den Lomer-Versetzungen ein starkes Hindernis für nachfolgende Versetzungen.

Bei dem Aufeinandertreffen von Versetzungen des Primärsystems B4 mit denen der Systeme A2, C5, D1 oder D6 ist in entsprechenden Analysen festzustellen, dass die Reaktionsprodukte Gleitebenen vom {111}-Typ besitzen, also gleitfähig sind und dem Beitrag von A_{GL} entsprechen. Ein weiteres Reaktionsprodukt von Teilversetzungen ist die ,,Hirth-Locks-Versetzung", die bei dem Aufeinandertreffen von Versetzungen des Primärsystems B4 mit denen der Systeme A3 bzw. C3 entsteht. Da die zugehörigen Burgers-Vektoren senkrecht auf denen des Primärsystems stehen, kommt es dabei nur zu einem geringen Energiegewinn, wodurch die Versetzung nicht stabil wird. Im Gegensatz zu den ,,Lomer-Cottrell-Versetzungen" sind die ,,Hirth-Locks-Versetzungen" sehr selten zu beoachten, wie Jackson u.a. [51] in ihrem Überblick zu experimentellen Ergebnissen feststellen.

Die Wechselwirkung von Versetzungen auf den Systemen B4 und D4 führt zu einer Annihilation oder Abstoßung der Versetzungen, da die zugehörigen Burgers-Vektoren entgegengesetzt stehen. Eine stabile Versetzungsanordnung wie in Abbildung 12 ist nicht möglich. Demzufolge ist der Beitrag A_{QU} zur latenten Verfestigung relativ gering gegenüber A_{LC} der ,,Lomer-Cottrell-Versetzung" (Franciosi u.a [28]). Schließlich sind die Reaktionsprodukte von Versetzungen einer Gleitebene, die aus der Wechselwirkung einerseits zwischen den komplanaren Systeme B2, B5 und dem Primärsystem B4, bei den Schneidevorgänge und damit verbundenen kurzreichenden Behinderungen selten vorhanden sind, und anderseits aus eigenem System resultieren. Die erstere führen Nakada u.a. [72] auf einen Mangel an mobilen Versetzungen auf den komplanaren Sekundärsystemen zurück, die durch die lokalen Versetzungsknäuel blockiert bzw. immobilisiert sind. Der Beitrag von A_{SV} bezeichnet sich als Selbstverfestigung eines Systems.

Während die Versetzungsdichte das quantitative Ausmaß der Behinderung durch Schneidevorgänge bestimmt, beschreiben die Parameter A_{ab} die Qualität der Wechselwirkung. Trotz des entscheidenden Verhältnisses zwischen den Parameter A_{ab} sollen die Zahlenwerte des einzelnen Parameters A_{ab} nach Heinrich u.a. [42] und Baird u.a. [8] im Bereich von 0,1 bis 0,2 liegen, wobei aber auch eine Abweichung dieser Werte möglich ist. Bei legiertem Material erhöht sich nach Heinrich u.a. [42] die Fließspannung um eine von der Verformung unabhängige Größe r_L, so dass sich die Gleichung (41) wie folgt ergibt:

$$r_a \;=\; r_L + Gb\sqrt{\sum_{b=1}^{N} A_{ab}\,\varrho_b}\ . \tag{43}$$

Unter Berücksichtigung der wechselseitigen geometrischen Beziehungen der Gleitsysteme werden die Parameter A_{ab} als Komponente einer Matrix $\mathbf{A}$ zugeordnet, die auch für eine numerische Umsetzung sinnvoll verwendet werden kann. Die Gleichung (43) wird in der

Form

$$r_a \;=\; r_L + Gb\sqrt{\vec{A}_a^T\vec{\varrho}}\;, \tag{44}$$

umgeschrieben und gibt entsprechend die Beiträge der Verfestigung durch verschiedene Wechselwirkungen von Versetzungen an. Der Vektor $\vec{A}_a$ ist der Spaltenmatrix der Matrix $\mathbf{A}$ gemäß:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A} = &\left(\vec{A}_1,\ \vec{A}_2,\ \vec{A}_3,\ \vec{A}_4,\ \vec{A}_5,\ \vec{A}_6,\ \vec{A}_7,\ \vec{A}_8,\ \vec{A}_9,\ \vec{A}_{10},\ \vec{A}_{11},\ \vec{A}_{12} \right) \\
= &\begin{pmatrix}
A_{SV} & A_{KO} & A_{KO} & A_{GL} & A_{LC} & A_{HL} & A_{HL} & A_{GL} & A_{LC} & A_{GL} & A_{GL} & A_{QU} \\
 & A_{SV} & A_{KO} & A_{GL} & A_{HL} & A_{LC} & A_{GL} & A_{QU} & A_{GL} & A_{LC} & A_{HL} & A_{GL} \\
 & & A_{SV} & A_{QU} & A_{GL} & A_{GL} & A_{LC} & A_{GL} & A_{HL} & A_{HL} & A_{LC} & A_{GL} \\
 & & & A_{SV} & A_{KO} & A_{KO} & A_{GL} & A_{LC} & A_{HL} & A_{HL} & A_{GL} & A_{LC} \\
 & & & & A_{SV} & A_{KO} & A_{GL} & A_{HL} & A_{LC} & A_{GL} & A_{QU} & A_{GL} \\
 & & & & & A_{SV} & A_{QU} & A_{GL} & A_{GL} & A_{LC} & A_{GL} & A_{HL} \\
 & & & & & & A_{SV} & A_{KO} & A_{KO} & A_{GL} & A_{LC} & A_{HL} \\
 & & & & & & & A_{SV} & A_{KO} & A_{GL} & A_{HL} & A_{LC} \\
 & & & \text{symm.} & & & & & A_{SV} & A_{QU} & A_{GL} & A_{GL} \\
 & & & & & & & & & A_{SV} & A_{KO} & A_{KO} \\
 & & & & & & & & & & A_{SV} & A_{KO} \\
 & & & & & & & & & & & A_{SV}
\end{pmatrix} .
\end{aligned} \tag{45}$$

Eine völlig andere Methode zur Bestimmung der kritischen Fließspannung ist der phänomenologische Weg, auf dem die Entwicklung der Fließspannung nicht von der Versetzungsdichte sondern direkt von der Abgleitungsrate abhängig ist. Ausgehend vom einfach formulierten Taylor-Modell (Taylor [94]):

$$\dot{r} = h_0 \sum_{b=1}^{N} \mid \dot{\gamma}_b \mid \tag{46}$$

lautet der Ansatz von Peirce u.a. [77] und Asaro und Needleman [6]

$$\dot{r}_a = \sum_{b=1}^{N} H_{ab} \mid \dot{\gamma}_b \mid \;\; . \tag{47}$$

Statt der Konstante wie A_{ab} in Gleichung (41) verwenden Peirce u.a. [77] in ihrer Simulation lokaler Verformung in Einkristallen für H_{ab} die phänomenologische Form:

$$H_{ab} \;=\; [q_l + (1 - q_l)\delta_{ab}]\, H_b \;, \tag{48}$$

wobei H_b als Beitrag der Selbstverfestigung zu betrachten ist. Der Modellparameter q_l bestimmt das Verhältnis von latenter Verfestigung zur Selbstverfestigung für nicht-komplanare Gleitsysteme und ist im Allgemeinen nicht konstant, sondern liegt im Bereich von 1,0 bis 1,4. Zu dem Ansatz von Peirce u.a. [77] und Asaro und Needleman [6] ist zu bemerken, dass die Fließspannung gemäß Gleichung (47) aufgrund des fehlenden Erholungsterms bei fortwährender Abgleitung unbegrenzt steigt. Dadurch ist diese Formulierung nur für kleine Verformungen geeignet.

Im Modellansatz von MÉRIC und CAILLETAUD [15], [67] hat die kritische Fließspannung eine algebraische Gleichung in der Form

$$r_a = \sum_{b=1}^{N} H_{ab} \, . \, Q(1 - e^{\Lambda \gamma_b^{akk}}) \; , \tag{49}$$

$$\gamma_b^{akk} := \int_0^t \mid \dot{\gamma}_b \mid dt \; . \tag{50}$$

Neben den neuen konstanten Modellparameter Q und Λ in Gleichung (49) sind die konstanten latenten Verfestigungsgrößen H_{ab} in diesem Ansatz wieder zu finden. Weiterhin berücksichtigen MÉRIC und CAILLETAUD [15], [67] gemäß Gleichung (49) die Erholungsvorgänge, die beispielsweise der Annihilation der Versetzungen entsprechen. Bei großer Verformung kann ein Sättigungszustand der Fließspannung eintreten. Schließlich gibt statt der inkrementellen Abgleitung des einzelnen Gleitsystems die akkumulierte Abgleitung γ_{akk} gemäß Gleichung (50) das Maß der Entwicklung von Fließspannung an.

Aus den Überlegungen, dass die Fließspannung abhängig von der Versetzungsdichte ist (Gleichung (41)), die wiederum vom Betrag der Abgleitungsrate (Gleichung (32)) abhängt, sind die Ansätze in Gleichungen (47) und (49) nachvollziehbar. Trotz der isotropen Eigenschaften bleiben die Fließspannungen im Hinblick auf physikalischen Interpretationen wenig aussagekräftig, da es keine direkte Verknüpfung mit den zugrunde liegenden physikalischen Vorgängen gibt, und zwar mit Versetzungsdichten, die nicht nur die Wechselwirkungen mit Bildung, Annihilation oder gegenseitiger Behinderung beschreiben, sondern sich auch in Experimenten bestimmen bzw. überprüfen lassen.

2.3 Anisotrope Verfestigung

Im Gegensatz zur isotropen Verfestigung ist die anisotrope Verfestigung abhängig vom Richtungssinn der Belastung. Sie entsteht durch Überlagerung von inneren Spannungsfeldern und denen der äußeren Belastung und führt dabei zu einem effektiven Spannungsfeld bei der Verformung. Einem solchen Einfluss kann bei einer Abgleitung in Abhängigkeit der Schmidschen Schubspannung eine behindernde oder unterstützende Wirkung zukommen. Die Existenz der anisotropen Verfestigung wird als der Bauschinger-Effekt betrachtet und wurde in Experimenten mit Lastwechseln von EDWARDS und WASHBURN [21] bestätigt.

In Analogie zur quantitativen Versetzungsentwicklung lässt sich die Entwicklung der kinematischen Rückspannung x_a mittels eines Verfestigungs- und eines Entfestigungsterms formulieren (MÉRIC und CAILLETAUD [15], [67] oder JORDAN und WALKER [52]):

$$\dot{x}_a = c_a \, \dot{\gamma}_a - d_a \, x_a \mid \dot{\gamma}_a \mid \; , \tag{51}$$

wobei die Konstante c_a und d_a die Modellparameter sind. In dieser Form ist der Term $c_a\dot{\gamma}_a$ in Abhängigkeit sowohl von dem Betrag als auch von der Richtung der Abgleitung angegeben.

Außerdem kann eine sich auf einem Gleitystem entwickelnde Rückspannung x_a nur einen Einfluss auf dieses System ausüben, d.h. es wird nur Selbstverfestigung berücksichtigt, was den experimentellen Ergebnisse bei Zink von Edwards und Washburn [21] widerspricht. Bei diesem Experiment wirkt die kinematische Rückspannung nicht nur auf das System selbst, sondern abhängig von der geometrischen Lage auch auf anderen Syteme. Einen Ansatz zur Beschreibung von solchen wechselseitigen Auswirkungen von Rückspannungen auf die einzelnen Systeme versucht Weng [103], [104] in folgender Gleichung zu formulieren:

$$x_a \;=\; x_{,b}\,\cos\alpha_{ab}\,\cos\beta_{ab}\;. \tag{52}$$

Dabei ist $x_{,b}$ die Rückspannung, die ausschließlich aus Fließvorgängen auf System b resultiert, und x_a der Einfluss von $x_{,b}$ auf System a. Der Winkel α_{ab} bzw. β_{ab} ist der Winkel zwischen den Gleitebenennormalen bzw. den Gleitrichtungen der Systeme a und b. Bezogen beispielsweise auf das System B4 als Primärsystem bei Einfachgleitung ergeben sich laut Gleichung (52) für kubisch-flächenzentrierte Kristalle die folgenden Beziehungen:

$$\begin{array}{lclclclclcl}
x_1 &=& x_{,1}\,, & x_2 &=& -\frac{1}{2}\,x_{,1}\,, & x_3 &=& -\frac{1}{2}\,x_{,1}\,,\\
x_4 &=& \frac{1}{6}\,x_{,1}\,, & x_5 &=& -\frac{1}{6}\,x_{,1}\,, & x_6 &=& 0\,,\\
x_7 &=& 0\,, & x_8 &=& -\frac{1}{6}\,x_{,1}\,, & x_9 &=& \frac{1}{6}\,x_{,1}\,,\\
x_{10} &=& \frac{1}{6}\,x_{,1}\,, & x_{11} &=& \frac{1}{6}\,x_{,1}\,, & x_{12} &=& -\frac{1}{3}\,x_{,1}\,.
\end{array} \tag{53}$$

Dabei sind Gleitsystemvektoren entsprechend der Tabelle (1) gewählt. Das Vorzeichen von x_a allein kann keine Aussage über Behinderung oder Unterstützung der Gleitung auf den entsprechenden Systemen geben, sondern nur in Verbindung mit dem Vorzeichen der jeweiligen Schmidschen Schubspannung τ_a beantwortet werden.

Aus den Überlegungen, dass kristallplastische Modelle im Allgemeinen Abgleitvorgänge über Kinetik und Kinematik der beteiligten Gleitsysteme beschreiben, sollte die sich ausbildende Rückspannung wie die äußere Spannung tensoriellen Charakter haben. In Analogie zur Berechnung der Schmidschen Schubspannung gemäß Gleichung (1) muss sich jede Rückspannung x_a nach Harder [39] als Projektion des kinematischen Rückspannungstensors $\mathbf{X}$ auf dem Gleitsystem a darstellen lassen:

$$x_a \;=\; (\mathbf{X}\mathbf{n}_a).\mathbf{m}_a \qquad \text{für} \quad a = 1, ..., N\;. \tag{54}$$

Der Rückspannungstensor $\mathbf{X}$ soll das gesamte Rückspannungsfeld aus der Überlagerung der sich auf einzelnen Systeme ausbildenden Spannungsfelder darstellen und hat folgende Form:

$$\mathbf{X} \;=\; \sum_a \omega_a(\mathbf{m}_a \otimes \mathbf{n}_a + \mathbf{n}_a \otimes \mathbf{m}_a)\;, \tag{55}$$

wobei das Symbol $\otimes$ das dyadische (bzw. innere) Produkt kennzeichnet. Die Werte ω_a stellen dabei die auf dem System a wirkenden Rückspannungen dar, die ausschließlich durch Abgleitvorgänge auf dem System a hervorgerufen wurden. Ihre Entwicklung ist der Gleichung (51) entsprechend

$$\dot{\omega}_a \;=\; c_a\,\dot{\gamma}_a - d_a\,\omega_a\mid\dot{\gamma}_a\mid\;. \tag{56}$$

Abhängig von den Modellparametern c_a und d_a können ω_a und damit auch x_a sowohl positive als negative Werte annehmen, und zeigen ihren anisotropen Charakter. Weiterhin berücksichtigt die Formulierung von HARDER [39] gemäß Gleichungen (54) und (55) die wechselseitigen Auswirkungen von Rückspannungen auf die einzelnen Systeme, die in Experimenten von EDWARDS und WASHBURN [21] bestätigt wurden. Im Vergleich mit den Ergebnissen vom WENG-Ansatz in Gleichung (52) ist im Folgenden ein entsprechendes Rechnungsbeispiel bezogen auf das Primärsystem B4 bei Einfachgleitung für kubisch-flächenzentrierte Kristalle dargestellt:

$$\begin{aligned} x_1 &= \omega_1\,, & x_2 &= -\tfrac{1}{2}\,\omega_1\,, & x_3 &= -\tfrac{1}{2}\,\omega_1\,, \\ x_4 &= \tfrac{1}{6}\,\omega_1\,, & x_5 &= -\tfrac{1}{2}\,\omega_1\,, & x_6 &= -\tfrac{2}{3}\,\omega_1\,, \\ x_7 &= \tfrac{2}{3}\,\omega_1\,, & x_8 &= -\tfrac{1}{2}\,\omega_1\,, & x_9 &= \tfrac{1}{6}\,\omega_1\,, \\ x_{10} &= \tfrac{1}{6}\,\omega_1\,, & x_{11} &= \tfrac{1}{6}\,\omega_1\,, & x_{12} &= -\tfrac{1}{3}\,\omega_1\,. \end{aligned} \tag{57}$$

Es gibt dabei im Vergleich mit den Werten aus der Gleichung (53) mit $\omega_1 \equiv x_{,1}$ unterschiedliche Rückspannungen nur auf vier Systemen (5,6,7,9), während auf den restlichen exakte Übereinstimmung herrscht. Besonders erfüllen die Werte aus (57) die folgenden Verträglichkeitsbedingungen komplett (HARDER [39]):

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + x_3 &= 0 \\ x_4 + x_5 + x_6 &= 0 \\ x_7 + x_8 + x_9 &= 0 \\ x_{10} + x_{11} + x_{12} &= 0 \\ x_1 + x_6 - x_7 - x_{12} &= 0 \\ x_2 + x_5 + x_8 + x_{11} &= 0 \\ x_3 - x_4 - x_9 + x_{10} &= 0 \end{aligned} \tag{58}$$

Die oben genannten Verträglichkeitsbedingungen (59) resultieren aus der Erfüllbarkeit des Gleichungssatzes (54), da der Rückspannungstensor $\mathbf{X}$ als symmetrischer Tensor nur sechs unabhängige Komponenten besitzt und die kristallographischen Vektoren $\mathbf{n}_a$ und $\mathbf{m}_a$ festliegen. Sie verdeutlicht die Erfüllung gewisser Bedingungen zwischen den Rückspannungsprojektionen auf einer Gleitebene (erste vier Gleichungen) sowie zwischen denen aller vier Ebenen (restliche vier Gleichungen).

2.4 Gleitrate

Die Entwicklung der konstitutiven Gleichungen für die Abgleitung geht von Orowan-Beziehung OROWAN [75] aus

$$\dot{\gamma} \;=\; \varrho_m\, b\, \bar{v}\,, \tag{59}$$

die einen quantitativen Zusammenhang zwischen der Gleitrate $\dot{\gamma}$ und der Dichte der sich mit mittlerer Geschwindigkeit $\bar{v}$ bewegenden Versetzungen ϱ_m mit dem Betrag ihres Burgers-Vektors b liefert (s. auch Gleichung (19)). Theoretische und experimentelle Arbeiten zeigen, dass die mobile Versetzungsdichte sowie die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit und damit auch die Gleitrate von der Spannung und der Temperatur abhängen. Nach Frost und Ashby [30] ist eine quadratische Abhängigkeit der mobilen Versetzungsdichte von der wirkenden Schubspannung gemäß

$$\varrho_m \;\sim\; \tau^2 \tag{60}$$

möglich, die auch durch theoretische Überlegungen von Argon [4] bestätigt wird. Die Beziehung (59) zeigt auch, dass die Abgleitung auf Gleitebenen mit der Versetzungsbewegung verbunden ist. Bei der Bestimmung der mittleren Versetzungsgeschwindigkeit $\bar{v}$ müssen einerseits die Änderung der Schubspannung und andererseits die Temperatur berücksichtigt werden. Aufgrund der niedrigen freien Aktivierungsenergie des Kristalls im Tieftemperaturbereich entscheidet die Änderung der Schubspannung und damit die relative Lage des Kristalls zur Zugachse über die Entwicklung der Versetzungen (Abschnitte 1.1.3 und 1.5). Bei steigender Temperatur erhöht sich entsprechend die freie Aktivierungsenergie ΔF, die für die Versetzungsbewegung auch beim Überwinden von Hindernisse durch Schneideprozesse erforderlich ist. Der thermisch aufzubringende Anteil, die frei Enthalpie ΔG, nimmt folglich mit zunehmender Spannung gemäß

$$\Delta G(\tau) \;=\; \Delta F - \Delta W(\tau) \tag{61}$$

ab (Gerdes [32]), wobei $\Delta W(\tau)$ die geleistete Arbeit der äußeren Spannung ist. Die freie Aktivierungsenthalpie $\Delta G(\tau)$ bestimmt die Häufigkeit des Überwindens von Hindernissen und lässt sich durch eine Arrheniusbeziehung mit der mittleren Versetzungsgeschwindigkeit entsprechend

$$\bar{v} \;\sim\; \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau)}{kT}\right) \tag{62}$$

verknüpfen, wobei sich k und T als Boltzmannkonstante und absolute Temperatur bezeichnen. Unter Beachtung, dass Versetzungsschneiden als wesentlicher Behinderungsmechanismus für die mobilen Versetzungen anzusehen ist, schlagen Kocks u.a. [54] einen phänomenologischen Ansatz für die freie Aktivierungsenthalpie in Abhängigkeit von den Spannungen vor:

$$\Delta G \;=\; \Delta F\left[1 - \left(\frac{\tau}{s}\right)^p\right]^q , \tag{63}$$

wobei die freie Aktivierungsenergie ΔF nach Frost und Ashby [30] als Konstante in der Größenordnung von 0,2 ... 1,0 Gb^3 liegt. Die dabei neu berücksichtigte Größe s ist als Bezugsspannung zu interpretieren, bei der es mit thermischer Unterstützung zur Hindernisüberwindung kommt. Für die Anwendung eines thermisch aktivierten Modells bei gegebener Dehnrate ist die sogenannte homologe Temperatur T_h, also das Verhältnis der aktuellen Temperatur zur Schmelztemperatur, entscheidend. Die Potenzzahlen p und q in Gleichung (63) liegen in den Bereichen

$$0 \le p \le 1 \quad \text{und} \quad 1 \le q \le 2\,, \tag{64}$$

und dienen zur Kontrolle, dass die freie Enthalpie ΔG von ΔF bei $(\tau = 0)$ bis 0 bei $(\tau = s)$ abnimmt. Die Gleichungen (59), (60), (62) und (63) ergeben eine konstituve Gleichung für die Gleitrate in Abhängigkeit von der Spannung (und damit geschwindigkeitsabhängig) gemäß

$$\dot{\gamma} \ \sim \ \tau^2 . \exp\left\{ -\frac{\Delta F}{kT}\left[1 - \left(\frac{\tau}{s}\right)^p\right]^q \right\} . \tag{65}$$

Diesem Ansatz folgen viele Autoren zur Berücksichtigung einzelner Gleitsysteme und deren Gleitrichtungen im Kristall. Bei Modell von ANAND U.A. [3] wird eine effektive Spannung gemäß

$$\tau_a^{eff} \ = \mid \tau_a \mid - r_a \tag{66}$$

verwendet, wobei r_a als die kritische Fließspannung angesehen wird, bei der die Versetzungen ohne Hilfe thermischer Fluktuation Hindernisse überwinden können. Mit dem Ansatz einer phänomenologischen Fließgrenze ergibt sich für eine Gleitrate

$$\dot{\gamma}_a \ = \ \begin{cases} 0 & \text{für} \quad \tau_a^{eff} \leq 0 \ , \\ \dot{\gamma}_0 \exp\left\{ -\frac{\Delta F}{kT}\left[1 - \left(\frac{\tau_a^{eff}}{s_a}\right)^p\right]^q \right\} . \operatorname{sgn}(\tau_a) & \text{für} \quad 0 < \tau_a^{eff} \leq s_a \ , \end{cases} \tag{67}$$

wobei $\dot{\gamma}_0$ als Modellparameter anzusehen ist. In diesem Ansatz beginnt die plastische Verformung, wenn die Schmidsche Schubspannung die kritische Fließspannung r_a übersteigt. Dagegen bleibt die effektive Schubspannung τ_a^{eff} immer unter einer von der Temperatur abhängigen Schwellspannung s_a, bei der die Versetzungen trotz Hilfe thermischer Fluktuation Versetzungshindernisse nicht überwinden können. Trotz der Unterscheidung zwischen r_a und s_a entwickeln sie sich gemeinsam gemäß Gleichungen (47) und (48)

$$\dot{y}_a = \dot{r}_a + \dot{s}_a = \sum_{b=1}^{N} H_{ab} \mid \dot{\gamma}_b \mid \ . \tag{68}$$

Für kubisch flächenzentrierte Kristalle ist das Verhältnis s_a/r_a bei gegebener Temperatur nach COTTRELL und STOKES [17] unabhängig von der (globalen) Dehnung, und liegt beispielsweise für Aluminium im Bereich von 0,5 bis 1,0. Dagegen spielt s_a für kubisch raumzentrierte Kristalle die Rolle von Peierls-Spannungen (s. Abschnit 1.2.2) und bleibt damit näherungsweise konstant (ANAND U.A. [3]).

Hingegen betrachtet HARDER [39] s_a für kubisch flächenzentrierte Kristalle als die Schwellspannung für die Hindernisüberwindung von Versetzungen gemäß Gleichung (41). Aus Gleichung (65) mit der Vereinfachung $p = q = 1$ folgt die Gleitrate ohne Fließgrenze

$$\dot{\gamma}_a \ = \ \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau_a^{eff}}{G}\right)^2 \exp\left\{\frac{\Delta F}{kT}\,\frac{\mid \tau_a^{eff} \mid}{s_a}\right\} . \operatorname{sgn}\left(\tau_a^{eff}\right) \ , \tag{69}$$

Die hier verwendete effektive Schubspannung τ_a^{eff} berücksichtigt statt kurzreichender Wechselwirkung von Versetzungen wie bei ANAND U.A. [3] die weitreichende kinematische Rückspannung x_a (Gleichung (54)) und wird durch die Gleichung

$$\tau_a^{eff} \ = \ \tau_a - x_a \ . \tag{70}$$

ermittelt. Unabhängig von den thermodynamischen Effekten sind phänomenologische Ansätze für die Gleitrate $\dot{\gamma}$ in mehreren Veröffentlichungen zu finden. Darunter sind sowohl der Exponentialansatz z.B. von HAVLIČEK U.A. [40], [41]

$$\dot{\gamma}_a \quad = \quad \begin{cases} 0 & \text{für} \quad \mid \tau_a \mid < s_a \\ \dot{\gamma}_0 \left\{ \exp\left[\delta \left(\frac{|\tau_a|}{s_a} - 1 \right) \right] - 1 \right\} . \operatorname{sgn}(\tau_a) & \text{für} \quad \mid \tau_a \mid \geq s_a \end{cases} \tag{71}$$

als auch Potenzansätze von MÉRIC und CAILLETAUD [67], [15]

$$\dot{\gamma}_a \quad = \quad \begin{cases} 0 & \text{für} \quad \mid \tau_a - x_a \mid < r_a \\ \left(\frac{|\tau_a - x_a| - r_a}{s_a} \right)^n . \operatorname{sgn}(\tau_a - x_a) & \text{für} \quad \mid \tau_a - x_a \mid \geq r_a \end{cases} \tag{72}$$

oder von TEODOSIU [95]

$$\dot{\gamma}_a = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_a}{s_a} \right|^n . \operatorname{sgn}(\tau_a) \tag{73}$$

Darin bezeichnen die Größen δ und n konstante Modellparameter. Die isotropen Fließspannungen in diesen Modellen sind unterschiedlich. Während HAVLIČEK U.A. die Gleichung (47) und MÉRIC und CAILLETAUD die Gleichung (49) die phänomenologischen Fließspannungen direkt in Abhängigkeit der Gleitrate verwenden, übernimmt TEODOSIU die Formulierung von FRANCIOSI gemäß Gleichung (41) unter Berücksichtigung der Wechselwirkung von Versetzungen. In bisherigen Veröffentlichungen werden die Exponentialansätze meist für die Gleitrate (z.B. Gleichungen (67), (69), (71)) zur Beschreibung des Materialverhaltens im Tieftemperaturbereich verwendet, während die Potenzansätze (z.B. Gleichungen (72), (73)) im Hochtemperaturbereich verwendet werden. Im Allgemeinen gibt es aber keine klare Festlegung eines Modells für einen bestimmten Temperaturbereich. Es hängt vielmehr von Verwendung entsprechender Fließspannung als isotrope Verfestigung und eventuell von kinematischer Rückspannung als anisotrope Verfestigung ab, die sowohl qualitative als auch quantitative Eigenschaften richtig beschreiben. Solche Verfestigungsarten sind in beiden letzten Abschnitten 2.2 und 2.3 veranschaulicht.

2.5 Zusammenfassung vorgestellter Materialmodelle

Die bisher in der Kristallplastizität veröffentlichen Modellansätze, die in Zusammenhang mit dem verwendeten Materialmodell in dieser Arbeit (s. Tabelle 4) stehen, wurden in diesem Abschnitt vorgestellt. Sie weisen einige prinzipielle Gemeinsamkeiten auf, weichen jedoch im Vorgehen in anderen Punkten voneineinder ab. Ausgehend vom plastischen Deformationsgradient $\mathbf{F}_p$ als Funktion von der Abgleitungsrate $\dot{\gamma}$ sind die Entwicklungsansätze für die Gleitrate von entscheidender Bedeutung. Sie wurden sowohl aus phänomenologischen Überlegungen formuliert als auch aus physikalischen Betrachtung hergeleitet, wodurch entsprechende Vor- und Nachteile entstehen. Es stehen Exponential- und Potenzansätze zur Formulierung der Gleitrate zur Verfügung (Abschnitt 2.4), die von der Schubspannung, kinematischen Rückspannung und Fließspanung abhängt. Die Entwicklung solcher Spannungen

Tabelle 3: Zusammenfassung der vorgestellten Werkstoffmodelle im Vergleich mit dem verwendetem Modell zur Berechnung lokaler Fließvorgänge in Polykristallen (GS: Gleitsystem(e)).

Autoren	Havliček [40], [41]	Meric [67]	Teodosiu [95]	Ohashi [74]	Harder [39]	Tran (s. Tabelle 4)
Dimensionen	2D	3D	3D	3D	3D	3D
Zugelasene Verformungen	klein	groß	groß	klein	groß	groß
Materials-verhalten	visko-plastisch	visko-plastisch	visko-plastisch	elasto-plastisch	visko-plastisch	visko-plastisch
Fließgrenze	explizit	explizit	ohne	explizit	ohne	explizit
Isotrope Verfestigung	kritische Fließspannung	kritische Fließspannung	Versetzungs-dichte	Versetzungs-dichte	Versetzungs-dichte	Versetzungs-dichte
Kinematische Verfestigung	ohne	Rückspannung abhängig von eigenem GS	ohne	ohne	Rückspannung abhängig von allen GS	Rückspannung abhängig von allen GS

erfordert tiefe Kenntnisse der Materialstruktur, insbesonders das Verhalten von Versetzungen und Gefügen an den Korngrenzen.

Die Unterschiede beim Vorgehen betreffen nicht nur die gewählten konstitutiven Gleichungen, sondern auch die Auswahl eines FEM-Rahmens, wobei der Rechenaufwand berücksichtigt werden muss. Eine Zusammenfassung vorgestellter Modelle mit ihrem FEM-Rahmen zum Vergleich des in dieser Arbeit verwendeten Werkstoffmodells wird in Tabelle 3 dargestellt.

Abgesehen vom Aufbau der konstitutiven Gleichungen wird das Modellverhalten entscheidend durch Modellparameter bestimmt (s. Abschnitt 4.2.5). Einige Parameter sind durch experimentelle Ergebnisse festgelegt, während die anderen durch theoretische Überlegungen abgeschätzt bzw. frei gewählt werden. Bei den Entwicklungsgleichungen (35) und (51) spielen die Verhältnisse K/y_c und c_a/d_a eine wichtige Rolle, wie schnell sich die Versetzungsdichte und kinematische Rückspannungen entwickeln. Weiterhin sind die latenten Verfestigungsgrößen A_{ab} und deren Verhältnisse entscheidend nicht nur für den Betrag kritischer Schubspannung, sondern auch für die Aktivierung der Gleitsysteme. Alle diese gewonnenen Erkenntnisse geben uns einen Überblick des Forschungsstandes der Kristallplastizität. Sie dienen uns nun als Grundlagen zur Entwicklung eines neuen modifizierten Werkstoffmodells, das viele Kristalleigenschaften beschreibt.

3 Große Deformationen der Kristallplastizität

Neben mikromechanischen Eigenschaften bei kleinen Deformationen kommen einige Eigenschaften des Kristalls bei großen Verformungen hinzu. Besonders sind die Gitterdrehungen und damit verbundenen Orientierungsänderungen der Kristalle bezogen auf gegebenen Randbedingungen (z.B. Zugrichtung oder äußere Belastung, etc.). Weiterhin ermöglicht Quergleitung von Schraubenversetzungen bei großer Deformation die Annihilation von Versetzungen, die sich gegenseitig anziehen. Es führt zum Abbau innerer Spannung (z.B. Bereich III bei Einkristall-Fließskurve).

Im vorliegenden Abschnitt wird zunächst ein Überblick über die wichtigen kontinuumsmechanischen Grundgleichungen eines deformierbaren Körpers gegeben, die die Voraussetzungen für die Formulierung der Verzerrungs- und Spannungsmaße im verwendeten Werkstoffmodell und der zum Einsatz kommenden Finite-Elemente sind. Speziell für Kristalle wird die Kontinuumsmechanik formuliert, die anschließend mit den konstitutiven Gleichungen eines neuen modifizierten kristallplastischen Werkstoffmodells ergänzt wird. Die numerische Integration der Stoffgleichungen wird mit Hilfe einer benutzterdefinierten Schnittstelle UMAT (*engl. user material*) in das kommerzielle FE-Programm ABAQUS implementiert, das den erforderlichen Berechnungsrahmen liefert.

Zu erwähnen sei an dieser Stelle, dass alle mathematischen Formulierungen bzw. die verwendeten Tensoren auf lokalem Kristallkoordinatensystem bezogen sind. Für Implementierung in das FE-Programm ABAQUS müssen sie allerdings ins globale Probenkoordinatensystem transformiert werden. Die Überführung wird durch die Tranformationsmatrix $\mathbf{Q}$ (s. Anhang A.3) ermöglicht. Eine einheitliche Darstellung von Tensoren in mathematischen Gleichungen ist im Anhang A.1 zu finden.

3.1 Kontinuumsmechanische Grundgleichungen

Der Deformationsprozess eines Festkörpers $\mathcal{B}$ wird als Transport materieller Punkte betrachtet, deren Ortsvektoren eindeutig zugeordnet sind. Zu einer fest gewählten Anfangszeit, oder Referenzzeit, t_0 befindet sich der materielle Punkt mit dem Ortsvektor $\mathbf{x}_0$ in der Referenzkonfiguration κ_0 des Körpers. Durch den Deformationsprozess, also den Materialtransport, wird der materielle Punkt zu einem Ort $\mathbf{x}$ verschoben, der zu einer zu dieser Zeit t befindlichen Momentankonfiguration κ gehört (Abbildung 19). Der Verschiebungsvektor $\mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t)$ zwischen der Ausgangs- und der Momentankonfiguration dieses materiellen Punktes ergibt sich aus der Differenz

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t) = \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t) - \mathbf{x}_0 \,. \tag{74}$$

Der durch Differentiation von $\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)$ nach $\mathbf{x}_0$ erhaltene Tensor

$$\mathbf{F} \;:=\; \frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)}{\partial \mathbf{x}_0} \tag{75}$$

heißt Deformationsgradient, der das infinitesimale Linienelement $d\mathbf{x}_0$ in der Ausgangskonfiguration κ_0 in das infinitesimale Linienelement $d\mathbf{x}$ in der Momentankonfiguration κ trans-

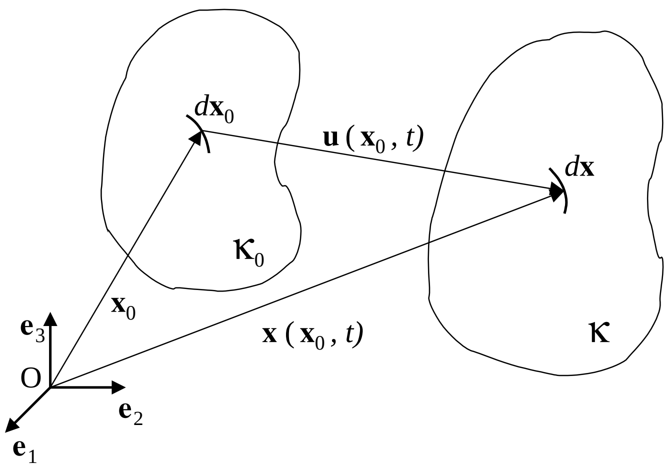


Abbildung 19: Kinematik eines materiellen Punktes

formiert. Man spricht von homogener Deformation des Kontinuums, wenn $\mathbf{F}$ nicht von $\mathbf{x}_0$ abhängt.

Die Geschwindigkeit des materiellen Punktes zum Zeitpunkt t ist definiert durch zeitliche Differentation vom Ortvektor $\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)$

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)}{\partial t} \tag{76}$$

Aus den beiden Gleichungen (75) und (76) ergibt sich die zeitliche Ableitung des Deformationsgradienten zu

$$\dot{\mathbf{F}} = \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{x}_0} = (\nabla \dot{\mathbf{x}})\mathbf{F}. \tag{77}$$

Der Term

$$\mathbf{L} := \nabla \dot{\mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} \tag{78}$$

wird als Geschwindigkeitsgradient bezeichnet.

Das infitesimale verformte Flächenelement $d\mathbf{a}$ und das Volumenelement dV werden mit Hilfe des Deformationgradienten $\mathbf{F}$ durch

$$d\mathbf{a} \; = \; \det(\mathbf{F})\mathbf{F}^{-T} d\mathbf{a}_0 \quad \text{und} \quad dV \; = \; \det(\mathbf{F}) dV_0 \tag{79}$$

abgebildet (z.B. Chadwick [16]), wobei $d\mathbf{a}_0$ und dV_0 das Flächenelement und das Volumenelement in der Ausgangskonfiguration κ_0 sind. Die Invertierbarkeit von $\mathbf{F}$ und die Forderung nach positivem Volumen bedingen

$$\det(\mathbf{F}) \geq 0 \; . \tag{80}$$

Der Deformationsgradient $\mathbf{F}$ kann als reine Streckung des Körperelementes mit daran anschließender Rotation oder umgekehrt verstanden werden. Er lässt sich damit algebraisch multiplikativ in einen orthogonalen Drehtensor $\mathbf{R}$ und einen Rechtsstreckungstensor $\mathbf{U}$ bzw. Linksstreckungstensor $\mathbf{V}$ zerlegen

$$\mathbf{F} \;=\; \mathbf{R}\mathbf{U} \;=\; \mathbf{V}\mathbf{R}\,. \tag{81}$$

Aufgrund der Orthogonalität des Drehtensors $\mathbf{R}$ gemäß $\mathbf{R}^T = \mathbf{R}^{-1}$ ergeben sich beide Streckungstensoren $\mathbf{U}$ und $\mathbf{V}$ aus Gleichung (81)

$$\mathbf{U} \;=\; \sqrt{\mathbf{F}^T\mathbf{F}} \quad \text{und} \quad \mathbf{V} \;=\; \sqrt{\mathbf{F}\mathbf{F}^T} \tag{82}$$

als symmetrisch und positiv definit. Die Tensoren

$$\mathbf{C} \;:=\; \mathbf{F}^T\mathbf{F} \;=\; \mathbf{U}^2 \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{B} \;:=\; \mathbf{F}\mathbf{F}^T \;=\; \mathbf{V}^2 \tag{83}$$

sind entsprechend der rechte bzw. linke Cauchy-Green-Tensor.

Die auf einem Flächenelement $d\mathbf{a}$ der Momentankonfiguration entfallende Kraft ist durch den Cauchyschen Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ gegeben

$$d\mathbf{f} \;=\; \boldsymbol{\sigma} d\mathbf{a} \;=\; \det(\mathbf{F})\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} d\mathbf{a}_0\,. \tag{84}$$

Der Tensor

$$\mathbf{P} \;:=\; \det(\mathbf{F})\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} \tag{85}$$

liefert nach Anwendung auf ein zugehöriges Flächenelement $d\mathbf{a}_0$ der Ausgangskonfiguration κ_0 die Kraft $d\mathbf{f}$ und heißt 1. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor. Er ist allerdings nicht symmetrisch, weshalb man den 2. Piola-Kirchhof-Spannungstensor gemäß

$$\mathbf{S} \;:=\; \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P} \;=\; \det(\mathbf{F})\mathbf{F}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} \tag{86}$$

als symmetrischen Tensor verwendet. Für den räumlich gewichteten Cauchyschen Spannungstensor ist der Kirchhoff-Spannungstensor mit dem Volumenverhältnis $\mathbf{K}$

$$\mathbf{K} \;:=\; \det(\mathbf{F})\,\boldsymbol{\sigma} \;=\; \mathbf{F}\mathbf{S}\mathbf{F}^T \tag{87}$$

eingeführt, der ebenfalls symmetrisch ist.

Da es sich hier um Deformation eines Festkörpers als Materialtransport handelt, müssen folgende Gesetze erfüllt werden. Das erste ist das Erhaltungsgesetz der Masse gemäß

$$m = \int_{\kappa_0} \rho_0 \, dV_0 = \int_{\kappa} \rho \, dV\,. \tag{88}$$

Ein Fluss der Masse durch die Oberfläche $\partial\kappa$ des Körpers sei ausgeschlossen. Mit Verwendung der zeitlichen Ableitung führt Gleichung (88) zu einer lokalen Form für die Erhaltung der Masse (z.B. GURTIN [35])

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \, , \tag{89}$$

wobei $\rho(\mathbf{x}, t)$ die momentane Massendichte $[kg/m^3]$ und $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ die Geschwindigkeit ist.

Die zeitliche Änderung des zum Materialtransport zugehörigen Impulses resultiert aus den von außen einwirkenden Volumen- und Oberflächenkräften, also hier der auf ein Volumenelement dV wirkenden Kraftdichte $\mathbf{f}$ und dem auf ein Flächenelement $d\mathbf{a}$ wirkenden Spannungsvektor $\mathbf{t}$. In der lokalen Momentankonfiguration $\kappa_i \subset \kappa$ ist dies gegeben durch

$$\frac{d}{dt} \int_{\kappa_i} \rho \mathbf{v} \; dV = \int_{\kappa_i} \mathbf{f} \; dV + \int_{\partial\kappa_i} \mathbf{t} \; da \, . \tag{90}$$

Mit der Wahl eines Ortvektors $\mathbf{x}_0$ für den Bezugspunkt des Momentengleichgewichtes ist die Drehimpulsbilanz entsprechend

$$\frac{d}{dt} \int_{\kappa_i} \rho (\mathbf{x}_0 \times \mathbf{v}) \; dV = \int_{\kappa_i} (\mathbf{x}_0 \times \mathbf{f}) \; dV + \int_{\partial\kappa_i} (\mathbf{x}_0 \times \mathbf{t}) \; da \, . \tag{91}$$

Der auf ein Flächenelement $d\mathbf{a}$ wirkende Spannungsvektor $\mathbf{t}$ lässt sich durch die Cauchysche Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ und den normalen Einheitsvektor $\mathbf{n}$ von $d\mathbf{a}$ darstellen

$$\mathbf{t} \; = \; \boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{n} \, . \tag{92}$$

Mit Hilfe des Gaußschen Divergenz-Theorems ergibt Gleichung (90) das sogenannte 1. Gesetz der Bewegung (lokale oder starke Form):

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^T + \rho \mathbf{f} = \rho \dot{\mathbf{v}} \, . \tag{93}$$

Für eine Testfunktion $\delta\mathbf{u}$ als virtuelles Verschiebungsfeld folgt aus Gleichungen (90), (92) und (93) die schwache Form der Bewegungsgleichung (oder das Prinzip der virtuellen Verschiebung) (z.B. GURTIN [35]):

$$\int_{\kappa_i} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla(\delta\mathbf{u}) \; dV + \int_{\kappa_i} \rho \dot{\mathbf{v}} \cdot \delta\mathbf{u} \; dV = \int_{\kappa_i} \rho \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} \; dV + \int_{\partial\kappa_i} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u} \; da \, . \tag{94}$$

Das Prinzip sagt aus: wenn sich ein Körper im Gleichgewicht befindet, ist für beliebige, kleine, virtuelle, auf den Körper einwirkende Verschiebungen, die die Randbedingungen erfüllen, die gesamte innere virtuelle Arbeit gleich der Summe aus virtueller Arbeit der äußeren Belastungen und dem Trägheitsterm. Doe Anwendung des Prinzips der virtuellen Verschiebung zur Aufstellung von Finite-Elemente-Gleichungen wird im Berechnungsrahmen des FE-Programms ABAQUS (s. Abschnitt 3.5.1) geschildert.

3.2 Kontinuumsmechanik eines Kristalls

Aufgrund der besonderen Geometrie und Eigenschaften des Kristalls ist es zweckmäßig, den Deformationsgradienten $\mathbf{F}$ in einen elastischen Anteil $\mathbf{F}_e$ und einen plastischen Anteil $\mathbf{F}_p$ multiplikativ zu zerlegen (Lee [61], Teodosiu [95], Rice [82]):

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p \; . \tag{95}$$

Dabei beschreibt $\mathbf{F}_p$ eine (gedachte) Zwischenkonfiguration κ^* nach einer plastischen Deformation (gekennzeichnet durch die Abgleitung γ_a), bei der die Lage der Gleitsystemvektoren $\mathbf{m}_a^0$ und $\mathbf{n}_a^0$ erhalten bleibt, und das Material quasi durch das Gitter fließt. Anschließend wird die Zwischenkonfiguration aufgrund der Kompatibilität des umgehenden Gitters durch eine elastische Verzerrung $\mathbf{U}_e$ und zusammen mit einer Starrkörperdrehung $\mathbf{R}$ gemäß

$$\mathbf{F}_e = \mathbf{R}\mathbf{U}_e \tag{96}$$

auf die Momentankonfiguration κ geführt (Abbildung 20). Die multiplikative Zerlegung der Gleichung (95) betrifft dabei nicht die globale Konfiguration des ganzen Körpers, sondern bezieht sich nur auf eine unmittelbare oder infinitesimale Umgebung eines Gitterpunktes, dessen elastische Verformung entsprechend sehr klein und unabhängig von den plastischen Vorgängen ist (elastischer Isomorphismus, Svendsen [90]).

Die dabei durch die elastisch-rotatorische Verformung geänderte Gleitrichtung und Gleitnormale eines Gleitsystems a sind entsprechend

$$\mathbf{m}_a = \mathbf{F}_e \mathbf{m}_a^0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{m}_a^0 = \mathbf{F}_e^{-1} \mathbf{m}_a \tag{97}$$

$$\mathbf{n}_a = \mathbf{F}_e^{-T} \mathbf{n}_a^0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{n}_a^0 = \mathbf{F}_e^{T} \mathbf{n}_a \; . \tag{98}$$

gegeben.

In hyperelastisch-plastischer Formulierung für Stoffgesetze lautet die freie elastische Energiedichte (z.B. Svendsen [91]):

$$\psi_e(\mathbf{C}, \mathbf{F}_p) = \frac{1}{2} \mathbf{E}_e \cdot \mathcal{C}_e[\mathbf{E}_e] \; , \tag{99}$$

wobei $\mathcal{C}_e$ den Elastizitätstensor vierter Ordnung bezeichnet (s. Anhang A.4). Der Tensor

$$\mathbf{E}_e := \frac{1}{2}(\mathbf{C}_e - \mathbf{I}) \tag{100}$$

präsentiert den elastischen Greenschen Verzerrungstensor, der durch den elastischen rechten Cauchy-Greenschen Deformationstensor

$$\mathbf{C}_e := \mathbf{F}_p^{-T} \mathbf{C} \mathbf{F}_p^{-1} = \mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e \tag{101}$$

definiert wird. Die Ableitung von $\psi_e(\mathbf{C}, \mathbf{F}_p)$ nach $\mathbf{C}$ bzw. nach $\mathbf{F}_p$ ergibt den 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor

$$\mathbf{S} := 2\psi_{e,\mathbf{C}} \tag{102}$$

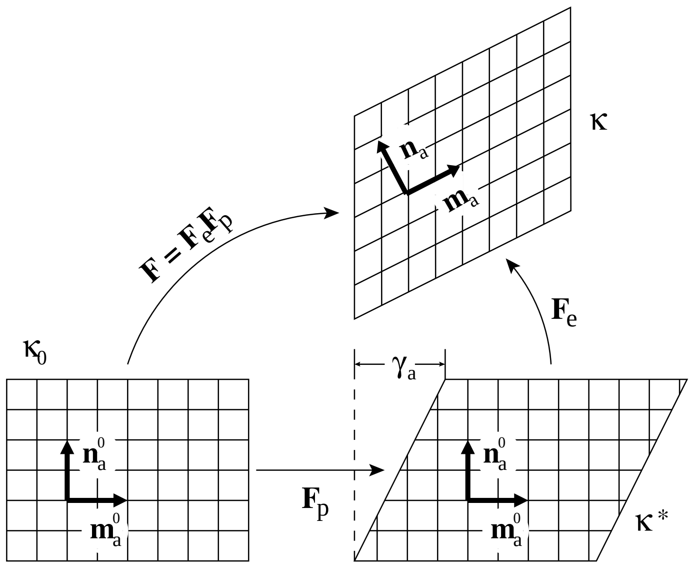


Abbildung 20: Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten in einen plastischen und einen elastisch-rotatorischen Anteil.

und die nach Mandel [64] genannte Mandelspannung

$$\mathbf{M} := -\psi_{e,\mathbf{F}_p}\mathbf{F}_p^T = \mathbf{C}_e\mathbf{S}_e \ , \tag{103}$$

wobei

$$\mathbf{S}_e := \mathcal{C}_e[\mathbf{E}_e] \tag{104}$$

die 2. Piola-Kirchhoffsche Spannung in Hinsicht auf die Konfiguration des elastischen Anteils der freien Energiedichte gemäß Gleichung (99) bezeichnet.

Der Zusammenhang zwischen Mandelspannung und der Kirchhoffschen bzw. Cauchyschen Spannung, hergeleitet aus den Gleichungen (87), (95) und (103), ist wie folgt gegeben:

$$\mathbf{M} = \mathbf{F}_e^T\mathbf{K}\mathbf{F}_e^{-T} = \det(\mathbf{F})\,\mathbf{F}_e^T\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}_e^{-T} \tag{105}$$

3.3 Konstitutive Gleichungen

Bei kontrollierter Verformung wird davon ausgegangen, dass der Deformationsgradient $\mathbf{F}$ und seine materielle Zeitableitung $\dot{\mathbf{F}}$ zu jeder Zeit bekannt sind. Der Geschwindigkeitsgradient $\mathbf{L}$ gemäß Gleichung (78)

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} \tag{106}$$

wird dadurch bestimmt. Durch Einsetzen der zeitlichen Ableitung von $\mathbf{F}$ in Gleichung (95) erhalten wir schließlich

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}_e\mathbf{F}_e^{-1} + \mathbf{F}_e\dot{\mathbf{F}}_p\mathbf{F}_p^{-1}\mathbf{F}_e^{-1} \ . \tag{107}$$

Der erste Summand ist nur von $\mathbf{F}_e$ und seiner zeitlicher Ableitung abhängig und kann daher als ,,elastischer Geschwindigkeitsgradient" betrachtet werden. Der ,,plastische Geschwindigkeitsgradient" $\mathbf{L}_p$ für einen materiellen Punkt, definiert als formuliert

$$\mathbf{L}_p = \dot{\mathbf{F}}_p \mathbf{F}_p^{-1} \ , \tag{108}$$

setzt sich additiv aus den Beiträgen aller aktiven Gleitsystemen zusammen (z.B. Teodosiu [95]):

$$\mathbf{L}_p = \sum_a \mathbf{L}_{pa} = \sum_a \dot{\gamma}_a (\mathbf{m}_a^0 \otimes \mathbf{n}_a^0) \ . \tag{109}$$

Dabei ist $\dot{\gamma}_a$ die Gleitrate auf den jeweiligen Gleitsystem a mit der Gleitrichtung $\mathbf{m}_a$ und Gleitnormale $\mathbf{n}_a$ (s. Abschnitt 2.4). Die Beziehung (109) hat eine ähnliche Form wie Gleichung (22), die eine mittlere makroskopische plastische Verzerrungsgeschwindigkeit darstellt. Kombination der Beziehungen (108) und (109) ergibt die konstitutive Gleichung für den plastischen Deformationstensor:

$$\dot{\mathbf{F}}_p = \mathbf{L}_p \mathbf{F}_p = \sum_a \dot{\gamma}_a (\mathbf{m}_a^0 \otimes \mathbf{n}_a^0) \mathbf{F}_p \ . \tag{110}$$

Ansätze für Gleitrate sowie für Verfestigung sind im Abschnitt 2.4 vorgestellt und ausführlich diskutiert worden. Im Folgenden wird ein neuer Ansatz für die Gleitrate als ein neues Materialmodell entwickelt und untersucht.

Basierend auf dem Modell von Méric und Cailletaud [15], [67] wird zusätzlich ein Parameter $\dot{\gamma}_0[s^{-1}]$ als die Referenz-Dehnrate für die Gleitrate $\dot{\gamma}_a$ hinzugefügt, so dass die Gleichheit der physikalischen Einheiten gewährleistet wird:

$$\dot{\gamma}_a = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad \mid \tau_a - x_a \mid < r_a \\ \dot{\gamma}_0 \Big(\frac{|\tau_a - x_a| - r_a}{s_a} \Big)^n \operatorname{sgn}(\tau_a - x_a) & \text{für} \quad \mid \tau_a - x_a \mid \geq r_a \end{cases} \tag{111}$$

Dieser Ansatz erhält eine explizite Fließgrenze sowie die kinematische Rückspannung x_a. Die Spannung s_a ist nach Méric und Cailletaud [15], [67] als konstante Modellparameter für das Gleitsystem a bei gegebener Temperatur. In der Tat ist s_a als Bezugsspannung angesehen, bei der Versetzungen nur mit thermischer Unterstützung Hindernisse überwinden. Also muss s_a von der Entwicklung der Versetzungen abhängen. Neben der Bezugsspannung s_a muss die von den Versetzungen abhängige kritische Schubspannung r_a so betrachtet werden, dass die Versetzungen ohne Hilfe thermischer Fluktuation Hindernisse überwinden können. Für kubisch-flächenzentrierte Kristalle ist das Verhältnis

$$\xi(T) := \frac{s_a}{r_a} \tag{112}$$

bei gegebener Temperatur T nach Cottrell und Stokes [17] unabhängig von der (globalen) Dehnung und ist mit Vereinfachung für alle Gleitsysteme gleich. Experimentelle Untersuchung an Aluminium-Einkristallen von Cottrell und Stokes [17] ergeben für ξ Werte im Bereich

$$0,5 \leq \xi \leq 1,0 \ . \tag{113}$$

Einsetzen von Gleichung (112) in Gleichung (111) ergibt eine von der Temperatur abhängige Gleitrate

$$\dot{\gamma}_a \;=\; \begin{cases} 0 & \text{für} \quad |\, \tau_a - x_a \,| < r_a \\ \dot{\gamma}_0 \xi^{-n}(T) \Big(\frac{|\tau_a - x_a|}{r_a} - 1 \Big)^n . \operatorname{sgn}(\tau_a - x_a) & \text{für} \quad |\, \tau_a - x_a \,| \geq r_a \end{cases} \tag{114}$$

Mit Hilfe der MaCauley-Klammer $\langle \; \rangle$ gemäß

$$\langle x \rangle := \frac{1}{2}(|\, x \,| + x) \tag{115}$$

und dessen Ableitung $\langle x \rangle' = \frac{1}{2}(\operatorname{sgn}(x) + 1)$ lässt sich die Beziehung (114) in eine einfache Form umschreiben

$$\dot{\gamma}_a = \dot{\gamma}_0 \xi^{-n}(T) \left\langle \frac{|\, \tau_a - x_a \,|}{r_a} - 1 \right\rangle^n \operatorname{sgn}(\tau_a - x_a) \;, \tag{116}$$

wobei die Funktion

$$\langle \phi_a \rangle := \left\langle \frac{|\, \tau_a - x_a \,|}{r_a} - 1 \right\rangle \tag{117}$$

die dem Gleitsystem a zugehörige Fließfunktion präsentiert. In den Gleichungen (116) und (117) steht auf ersten Blick statt der dynamischen Fließspannung s_a die statische Fließspannung r_a im Nenner. Tatsächlich ist aber nur die dynamische Fließspannung $s_a = r_a \xi(T)$ durch Multiplikation mit dem Term $\xi^{-n}(T)$ vor die MaCauley-Klammer $\langle \; \rangle$ gezogen. Weiterhin wird ein Gleitsystem erst aktiviert, wenn die effektive Schubspannung $\tau_a^{eff} := \tau_a - x_a$ betragsmäßig größer als die statische Fließspannung r_a wird, so dass die Ansätze (116) und (117) ihre physikalischen Bedeutungen erfüllen.

Im Vergleich mit dem Potenzansatz von Teodosiu [95] gemäß Gleichung (73) ist die Gleichung (116) eine Erweiterung mit Berücksichtigung nicht nur der Fließgrenze, sondern auch der kinematischen Rückspannung und der Temperatur bei der Entwicklung der Gleitrate. Dabei werden sowohl statische als auch dynamische Verfestigung berücksichtigt, die von der Versetzungsentwicklung abhängen. Bei dem Ansatz von Teodosiu [95] findet Abgleitung auf jedem System theoretisch nach beliebiger Deformation statt, was die anfängliche elastische Phase der Werkstoffe nicht wiedergibt. Ein Ansatz mit Fließgrenze wie (116) beschreibt hingegen die Eigenschaften des Metalls, realitätsnäher.

In Analogie zu Gleichung (1) wird die Schmidsche Schubspannung τ_a mit Hilfe des Kirchhoffschen Spannungstensors $\mathbf{K}$ (s. Gleichung (87)) für größe Deformation definiert

$$\tau_a := (\mathbf{K}\,\mathbf{n}_a) \cdot \mathbf{m}_a = (\mathbf{M}\,\mathbf{n}_a^0) \cdot \mathbf{m}_a^0 \;. \tag{118}$$

Dabei sind $\mathbf{n}_a^0$, $\mathbf{m}_a^0$ bzw. $\mathbf{n}_a$, $\mathbf{m}_a$ die Gleitsystemsvektoren des Systems a in Referenz- bzw. Momentankonfiguration. Der Tensor $\mathbf{M}$ ist die Mandel-Spannung (s. Gleichung (103)).

Für die Rückspannung mit Berücksichtigung der Verträglichkeitsbedingungen gemäß Gleichungssystem (59) ist der Ansatz von HARDER [39] zu wählen (Gleichung (54)):

$$x_a = (\mathbf{X}\,\mathbf{n}_a)\cdot\mathbf{m}_a = \mathbf{X}\cdot(\mathbf{n}_a\otimes\mathbf{m}_a)\ , \tag{119}$$

mit dem Rückspannungstensor (Gleichung (55)):

$$\mathbf{X} = \sum_a \omega_a(\mathbf{m}_a^0\otimes\mathbf{n}_a^0 + \mathbf{n}_a^0\otimes\mathbf{m}_a^0)\ , \tag{120}$$

und der Entwicklung dessen Komponenten (Gleichung (56)):

$$\dot{\omega}_a = c_a\dot{\gamma}_a - d_a\omega_a \mid \dot{\gamma}_a \mid\ . \tag{121}$$

Für kubisch-flächenzentrierte Kristalle entwickelt sich die statische Fließspannung r_a grund–sätzlich mit der thermischen Fließspannung s_a zusammen, womit das Verhältnis

$$\xi(T) := \frac{s_a}{r_a}$$

bei gegebener Temperatur T nach COTTRELL und STOKES [17] unabhängig von der (globalen) Dehnung bleibt. Gemäß Gleichung (41) ergibt sich

$$y_a := r_a + s_a = (1+\xi(T))\,r_a = \left(1+\frac{1}{\xi(T)}\right)s_a = Gb\sqrt{\vec{A}_a^T\vec{\varrho}}\ , \tag{122}$$

so dass die Entwicklung der kritischen Fließspannungen r_a und s_a in Abhängigkeit von Versetzungen und Temperatur entsprechend gegeben werden

$$r_a = \frac{Gb}{1+\xi(T)}\sqrt{\vec{A}_a^T\vec{\varrho}}\ , \tag{123}$$

$$s_a = \frac{Gb\xi(T)}{1+\xi(T)}\sqrt{\vec{A}_a^T\vec{\varrho}}\ . \tag{124}$$

Die zeitliche Entwicklung der Versetzungen ist nach dem Ansatz von TEODOSIU [95] gemäß Gleichung (35) zu wählen

$$\dot{\varrho}_a = \frac{1}{bL_a} \mid \dot{\gamma}_a \mid -2\frac{y_c}{b}\varrho_a \mid \dot{\gamma}_a \mid\ , \tag{125}$$

mit den mittleren freien Weglängen nach HARDER [39] (s. Gleichung (39)):

$$L_a = \frac{K}{\sqrt{\vec{Z}_a^T\vec{\varrho}}}\ . \tag{126}$$

3.4 Zusammenfassung des verwendeten Werkstoffmodells

In letzten Abschnitten wurden die Herleitung sowie die Ansätze von Werkstoffgleichungen vorgestellt. Eine übersichtliche Darstellung der verwendeten Gleichungen wird in Tabelle 4 zusammengefasst.

Es handelt sich um ein neues kristallplastisches Werkstoffmodell für sowohl Einkristalle als auch Polykristalle, die als Verband von Einkristallen unterschiedlicher kristallographischer Orientierungen betrachtet werden. Das Modell wird für große Deformation in 3-Dimensionen formuliert. Es ist geschwindigkeitsabhängig (also viskoplastisch) mit expliziter Fließgrenze. Die Gleitrate ist mit der Entwicklung von Versetzungen eng verbunden, die experimentell sowohl qualitativ als auch quantitativ bestimmt werden können. Sie berücksichtigt sowohl statische als auch dynamische Verfestigung in Abhängigkeit von Temperatur. Neben isotropen Eigenschaften, z.B. Fließspannung, wird die kinematische Rückspannung als anisotope Größe berücksichtigt, so dass die Effekte an den Korngrenzen bei Vielkristall-Verformung sowie der Bauschinger-Effekt bei lastwechselndem Zugversuch gut wiedergegeben werden können. Für Untersuchungen der Spannungsverteilung in korngrenzennahen Umgebungen sowie an Tripelpunkten werden lediglich die Effekte der Imkompatibilität durch unterschiedliche Kornorientierungen in Betracht gezogen.

multiplikative Zerlegung:	$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p$	(95)
plastischer Deformationstensor:	$\dot{\mathbf{F}}_p = \mathbf{L}_p \, \mathbf{F}_p = \sum_a \dot{\gamma}_a (\mathbf{m}_a^0 \otimes \mathbf{n}_a^0) \mathbf{F}_p$	(110)
Gleitrate:	$\dot{\gamma}_a = \dot{\gamma}_0 \xi^{-n} \left\langle \frac{\mid \tau_a - x_a \mid}{r_a} - 1 \right\rangle^n \operatorname{sgn}(\tau_a - x_a)$	(116)
Schmidsche Schubspannung:	$\tau_a := (\mathbf{K}\, \mathbf{n}_a) \cdot \mathbf{m}_a = (\mathbf{M}\, \mathbf{n}_a^0) \cdot \mathbf{m}_a^0$	(118)
Mandelspannung:	$\mathbf{M} = \mathbf{C}_e \mathbf{S}_e = \mathbf{C}_e \, \mathcal{C}_e [\mathbf{E}_e]$	(103)
elastische Greensche Verzerrung:	$\mathbf{E}_e = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_e - \mathbf{I}) = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e - \mathbf{I})$	(100)
kinematische Rückspannung:	$x_a = (\mathbf{X}\, \mathbf{n}_a^0) \cdot \mathbf{m}_a^0$	(54)
Rückspannungstensor:	$\mathbf{X} = \sum_a \omega_a (\mathbf{m}_a^0 \otimes \mathbf{n}_a^0 + \mathbf{n}_a^0 \otimes \mathbf{m}_a^0)$	(55)
Komponente des Rückspannungstensors:	$\dot{\omega}_a = c_a \dot{\gamma}_a - d_a \omega_a \mid \dot{\gamma}_a \mid$	(56)
Fließspannung:	$r_a = \frac{Gb}{1+\xi} \sqrt{\vec{A}_a^T \vec{\varrho}}$	(123)
Versetzungsdichte:	$\dot{\varrho}_a = \frac{1}{bL_a} \mid \dot{\gamma}_a \mid - 2 \frac{y_c}{b} \varrho_a \mid \dot{\gamma}_a \mid$	(35)
mittlere freie Weglänge:	$L_a = \frac{K}{\sqrt{\vec{Z}_a^T \vec{\varrho}}}$	(39)

Tabelle 4: Ein neues kristallplastisches Werkstoffmodell zur Simulation von Zugversuchen an Ein- und Polykristallen.

Die Festparameter des Materials sind die drei im anisotropen Elastizitätstensor $\mathcal{C}_e$ eingehenden elastischen Konstanten c_{11}, c_{12} und c_{44} (s. Anhang A.4) sowie der Schubmodul G und der Betrag des Burgers-Vektors b. Daneben sind einige Modellparameter in einer recht guten Größenordnung abzuschätzen. Durch die gut experimentell bestimmtbare Versetzungsdichte ϱ und deren freie Weglänge L eines reinen kfz-Kristalls ergeben sich für K Werte im Bereich von 1 bis 100. Zahlenwerte sind in der Arbeit von ESTRIN [25] mit $K = 10$, von TEODOSIU U.A. [95] mit $K = 75$ und von MECKING U.A. [66]) mit $K = 100$ zu finden. Der kritische Annihilationsabstand y_c ist abhängig vom Versetzungstyp. Für Schraubenversetzungen im Kupfer geben ESSMANN und MUGHRABI [24]) Werte zwischen 50 und 500 nm als Größenordnung an. Der kritische Annihilationsabstand von Stufenversetzungen ist aber deutlich kleiner. Die zur Beschreibung der isotropen latenten Verfestigung der Versetzungen verwendeten Komponenten A_{ab} liegen nach HEINRICH U.A. [42] und BAIRD U.A. [8] im Bereich 0,1 ... 0,2, wobei individuelle Abweichungen einzelner Komponenten nach oben oder unten denkbar sind. Das Verhältnis ξ zwischen statische und dynamische Fließspannung bei gegebener Temperatur T ist nach COTTRELL und STOKES [17] unabhängig von der (globalen) Dehnung und liegt z.B. für Aluminium im Bereich von 0,5 ... 1,0. Die Parameter c_a und d_a zur Bestimmung kinematischer Verfestigung x_a eines Gleitsystems sind normalerweise frei gewählt. Dabei ist es zu beachten, dass sie die Rückspannung nicht zu schnell zur Sättigung führen. Die Modellparameter $\dot{\gamma}_0$ und n beschreiben die Empfindlichkeit des Fließens eines Gleitsystems. Um zu einer vernunftigen Gleitrate zu gelangen ist die Wahl von $\dot{\gamma}_0$ abhängig von n, so dass der Wertebereich von $\dot{\gamma}_0$ und n sich kaum eingrenzen lässt.

3.5 Numerische Algorithmen und Implemetierung

Die konstitutiven Gleichungen (110), (116), (56), (35) des neuen kristallplastischen Werkstoffmodells in Tabelle 4 sind nichtlinear abhängig. Zur Lösung solcher nichtlinearen Differentialgleichungen für einen Gaußpunkt muss im allgemeinen ein inkrementelles Verfahren verwendet werden. Dabei werden Gleichungen zunächst für einen inkrementellen Zeitschritt linearisiert und dann aufintegriert. Die erhaltenen Ergebnisse werden für nächsten Zeitschritt verwendet.

Für eine kontinuierliche Struktur mit mehreren Gaußpunkten bietet sich allerdings z.B. das kommerzielle FE-Programm ABAQUS, dessen besonderer Vorteil in der Möglichkeit besteht, über die benutzerdefinierte Schnittstelle UMAT beliebiges Werkstoffmodell zu simulieren. Bei kontrollierter Verformung mit gegebenem Deformationsgradient $\mathbf{F}$ und seiner materiellen Zeitableitung $\dot{\mathbf{F}}$ benötigt ABAQUS die aktuelle Cauchysche Spannung und die tangentiale Steifigkeit, die in Abhägigkeit vom Materialmodell berechnet werden müssen. Die Ergebnisse werden anschließend über UMAT in das FE-Programm ABAQUS implementiert.

Der vorliegende Abschnitt beschreibt zunächst den Berechnungsrahmen von ABAQUS, das ein Newton-Raphson-Verfahren verwendet, um Lösungen iterativ zu finden (z.B. BATHE [12]). Anschließend wird die lokale Integration der konstitutiven Gleichungen zur Lösung interner Zustandsvariablen geschildert, die die implizite Eulersche Rückwärtsmethode verwendet (siehe Anhang A.5). Letztlich wird die tangentiale Steifigkeitsmatrix in Abhängigkeit von den durch Integration erhaltenen Zustandvariablen für ABAQUS formuliert.

3.5.1 Finite-Elemente-Methode in ABAQUS

Der Ausgangspunkt für die Berechnung in ABAQUS ist das Prinzip der virtuellen Verschiebung gemäß der Gleichung (94) in einem isothermen, quasistatischen Deformationsprozess:

$$\int_{\kappa_i} \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \boldsymbol{\epsilon} \, dV = \int_{\kappa_i} \rho \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\partial \kappa_i} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} \, da \,. \tag{127}$$

Dabei wird der Dehnungstensor als Gradient des Verschiebungsvektors betrachtet, also $\boldsymbol{\epsilon} = \nabla(\mathbf{u}(\mathbf{x}))$. Die Komponenten von Spannungs- und Dehnungstensoren werden, wie bei numerischen Anwendungen üblich, als Spaltenmatrizen geschrieben:

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} &:= (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \sigma_{xy}, \sigma_{yz}, \sigma_{xz})^T \,, \\ \vec{\epsilon} &:= (\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z, 2\epsilon_{xy}, 2\epsilon_{yz}, 2\epsilon_{xz})^T \,. \end{aligned} \tag{128}$$

Die in $\vec{\epsilon}$ vorgenommene Verdoppelung der Nebendiagonalelemente von $\boldsymbol{\epsilon}$ erfüllt die Gleichheit in der Gleichung (127) und zusätzliche Vereinfachung numerischer Operationen.

Zum Auffinden einer Näherungslösung nach der Finite-Element-Methode (z.B. Huebner [50] oder Bathe [12]) wird die kontinuierliche Struktur näherungsweise als eine Gruppierung diskreter Elemente betrachtet, die in Knotenpunkten auf den Rändern der Elemente untereinander verbunden sind. Die vom Ort $\mathbf{x}$ eines finiten Elements abhängigen virtuellen Verschiebungen $\delta\mathbf{u}(\mathbf{x})$ und Verzerrungen $\vec{\epsilon}$ werden als Funktionen der virtuellen Knotenverschiebungen $\delta\bar{\mathbf{u}}$ dieses Elements dargestellt:

$$\begin{aligned} \delta\mathbf{u}(\mathbf{x}) &= \mathbf{H}(\mathbf{x})\delta\bar{\mathbf{u}} \,, \\ \delta\vec{\epsilon}(\mathbf{x}) &= \mathbf{B}(\mathbf{x})\delta\bar{\mathbf{u}} \,, \end{aligned} \tag{129}$$

wobei $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ und $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ die Verschiebungsinterpolations- und Verzerrungs-Verschiebungs-Matrizen sind. Man erhält $\mathbf{B}$ durch partielles Differenzieren nach Koordinaten und durch Kombinieren der Zeilen der Matrix $\mathbf{H}$. Durch das Einsetzen von Gleichungen (129) in Gleichung (127) mit der Anwendung von (128) ergibt:

$$\delta\bar{\mathbf{u}}^T \left[\int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \vec{\sigma} \, dV - \int_{\kappa_i} \rho \mathbf{H}^T \mathbf{f} \, dV + \int_{\partial\kappa_i} \mathbf{H}^T \mathbf{t} \, da \right] = 0 \,. \tag{130}$$

Diese Gleichung ist für beliebige virtuelle Knotenverschiebungen $\delta\bar{\mathbf{u}}$ nur erfüllbar, wenn der Term in der eckigen Klammer zu Null wird. Da der zweite und dritte Summand die äußeren Lasten an Knotenpunkten beschreiben und bei gegebenen Randbedingungen bekannt sind, werden sie als bekannte Spaltenmatrix der äußeren Lasten in $\mathbf{p}$ zusammengefasst. So erhält man zum Zeitpunkt t die folgenden Gleichgewichtsbedingungen:

$$\int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \vec{\sigma} \, dV - \mathbf{p}(t) = \mathbf{0} \,. \tag{131}$$

Da die Spannung $\vec{\sigma}$ für nichtlineare Materialgesetze entsprechend nichtlinear von den Knotenverschiebungen abhängt, kann Gleichung (131) nur inkrementell gelöst werden. Es bietet sich die am häufigsten verwendeten Newton-Raphson-Iterationsschemen zur Lösung von nichtlinearen Finite-Elemente-Gleichungen an. Dieses Verfahren setzt voraus, dass die Verschiebungen $\mathbf{u}(t)$ zum Zeitpunkt t als iterative Lösungen berechnet worden sind, und die Gleichgewichtsbedingungen erfüllt sind, also

$$\int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \vec{\sigma}(\mathbf{u}(t))\, dV - \mathbf{p}(t) = \mathbf{0} \tag{132}$$

gilt. Nun ist die Aufgabe, die Lösungen im nachfolgenden Zeitinkrement Δt, also zum Zeitpunkt $t + \Delta t$, bei Änderung $\Delta\mathbf{u}$ der Verschiebungen so zu bestimmen, dass die Gleichgewichtsbedingungen zu diesem Zeitpunkt

$$\int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \vec{\sigma}(\mathbf{u}(t+\Delta t))\, dV - \mathbf{p}(t+\Delta t) = \mathbf{0}\,. \tag{133}$$

erfüllt bleiben.

Eine Taylorsche Reihenentwicklung der Näherungslösung

$$\mathbf{u}(t+\Delta t) = \mathbf{u}(t) + \Delta\mathbf{u} \tag{134}$$

der nichtlinearen Gleichung (133) liefert

$$\int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \vec{\sigma}(\mathbf{u}(t+\Delta t))\, dV - \mathbf{p}(t+\Delta t) + \frac{\partial}{\partial\mathbf{u}} \int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \vec{\sigma}\, dV \bigg|_{\mathbf{u}(t+\Delta t)} \Delta\mathbf{u} = \mathbf{0}\,. \tag{135}$$

Dabei wird es angenommen, dass die äußeren Lasten nicht von den Verschiebungen abhängen. Der Term

$$\boldsymbol{\kappa} := \frac{\partial}{\partial\mathbf{u}} \int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \vec{\sigma}\, dV = \int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \frac{\partial\vec{\sigma}}{\partial\vec{\epsilon}} \frac{\partial\vec{\epsilon}}{\partial\mathbf{u}}\, dV = \int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \frac{\partial\vec{\sigma}}{\partial\vec{\epsilon}} \mathbf{B}\, dV \tag{136}$$

heißt Tangentensteifigkeitsmatrix.

Im Allgemeinen erfolgt die Lösung der nichtlinearen Gleichung (133) iterativ gemäß

$$\mathbf{u}_{i+1}(t+\Delta t) = \mathbf{u}_i(t+\Delta t) + \Delta\mathbf{u}_i, \tag{137}$$

wodurch das Verbesserungsinkrement $\Delta\mathbf{u}_i$ der i-ten Iteration

$$\Delta\mathbf{u}_i = -\boldsymbol{\kappa}_i^{-1} \Big[\int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \vec{\sigma}(\mathbf{u}_i(t+\Delta t))\, dV - \mathbf{p}(t+\Delta t) \Big] \tag{138}$$

gegeben ist. Hierbei ist

$$\boldsymbol{\kappa}_i = \int_{\kappa_i} \mathbf{B}^T \frac{\partial\vec{\sigma}}{\partial\vec{\epsilon}} \mathbf{B}\, dV \bigg|_{\mathbf{u}_i(t+\Delta t)} \tag{139}$$

die Tangentensteifigkeitsmatrix im i-ten Iterationsschritt, die als nichtsingulär angenommen wird.

Die Iteration wird so lange fortgesetzt, bis die endgültigen Lösungen gefunden werden, die das Konvergenzkriterium erfüllen, d.h. die Norm des Differenzvektors der zwei folgenden iterativen Euler-Vektoren ist kleiner als die vorgegebene Toleranz

$$\|\mathbf{r}_{i+1}(t+\Delta t)-\mathbf{r}_i(t+\Delta t)\| \leq E_{Tol}\,. \tag{140}$$

Bei FEM-Berechnungen kommt es häufig vor, dass iterative Lösungen von den wirklichen gesuchten Werten weit entfernt sind, und die berechneten Verschiebungen sich in jeder Iteration nur sehr wenig ändern, aber fortfahren, so dass sehr viele Iterationen benötigt werden. Es bietet sich an, einen verkürzten Zeitschritt Δt verwenden, um Lösungen schnell zu finden. Umgekehrt kommt es bei deutlicher Erfüllung des Akzeptanzkriteriums (140) zu einer Vergrößerung des nachfolgenden Zeitschritts, so dass auf dieser Weise der Rechenaufwand verringert wird.

Das in diesem Abschnitt beschriebene allgemeine Lösungsverfahren resultiert im wesentlichen zwei Aufgaben: die lokale Integration konstitutiver Gleichungen und die Bestimmung der tangentialen Steifigkeitsmatrix. Die beiden Aufgaben müssen dafür sorgen, dass an jeder Stützstelle, also dem sog. Gaußpunkt, ein Gleichgewichtszustand gegeben wird, und die Spannung in Abhängigkeit von der aktuellen Verschiebung berechnet werden kann. Die Details in Hinsicht auf das verwendete Werkstoffmodell werden im folgenden Abschnitten konkretisiert.

3.5.2 Lokale Integration der Materialgleichungen

Zur Vereinfachung bei der Integration der konstitutiven Gleichungen (110), (116), (56), (35) benutzen wir den Betrag der Gleitrate

$$\dot{\vartheta}_a := \mid \dot{\gamma}_a \mid = \dot{\gamma}_a \,\mathrm{sgn}(\tau_a - x_a) \tag{141}$$

und die Fließfunktion gemäß der Gleichung (117). Dadurch ergeben sich die konstitutiven Gleichungen:

$$\begin{aligned}
\dot{\mathbf{F}}_p &= \mathbf{L}_p\,\mathbf{F}_p = \sum_a (\mathbf{m}_a^0 \otimes \mathbf{n}_a^0)\,\mathrm{sgn}(\tau_a - x_a)\dot{\vartheta}_a\,\mathbf{F}_p\,,\\
\dot{\vartheta}_a &= \dot{\gamma}_0 \xi^{-n}\left\langle \phi_a \right\rangle^n\,,\\
\dot{\omega}_a &= [c_a \mathrm{sgn}(\tau_a - x_a) - d_a\omega_a]\dot{\vartheta}_a\,,\\
\dot{\varrho}_a &= \left(\frac{1}{bL_a} - 2\frac{y_c}{b}\varrho_a\right)\dot{\vartheta}_a\,.
\end{aligned} \tag{142}$$

Für die Integration dieser konstitutiven Gleichungen wird vorausgesetzt, dass zum Zeitpunkt t, also dem n-ten lokalen Integrationsschritt entsprechend, die Lösungen dieser konstitutiven Gleichungen bei gegebenen Randbedingungen durch lokale Newton-Raphson-Iteration für diesen Integrationsschritt erhalten sind, und das Momentengleichgewicht erfüllt ist, d.h.

$$\vec{\varepsilon}_n := (\mathbf{F}_p, \vec{\vartheta}, \vec{\omega}, \vec{\varrho})_n \tag{143}$$

sind bekannt. Die Zustandsvariablen sind dabei in Vektoren zusammengefasst

$$\begin{aligned} \vec{\vartheta} &:= (\vartheta_1,\ \ldots,\ \vartheta_{12})^T \\ \vec{\omega} &:= (\omega_1,\ \ldots,\ \omega_{12})^T \\ \vec{\varrho} &:= (\varrho_1,\ \ldots,\ \varrho_{12})^T \end{aligned} \tag{144}$$

und der Tensor $\mathbf{F}_p$ wird für die numerische Umsetzung als Vektor betrachtet, dessen Indizen wie folgt $\{11, 12, 13, 21, 22, 23, 31, 32, 33\}$ sortiert werden.

Im Hinblick auf die numerische Integration ist es einfacher $\mathbf{F}_e$ statt $\mathbf{F}_p$ zu verwenden, da sich fast alle Spannungstensoren in Abhängigkeit vom $\mathbf{F}_e$ darstellen lassen. Den plastischen Deformationsgradienten $\mathbf{F}_p$ erhalten wir gemäß der Gleichung (95) wie folgt:

$$\mathbf{F}_p = \mathbf{F}_e^{-1}\mathbf{F}\ . \tag{145}$$

Zum Zeitpunkt t seien N Gleitsysteme aktiv. Mit Hilfe der impliziten Eulerschen Rückwärtsmethode (siehe Anhang A.5) erhalten wir zum Zeitpunkt $t+\Delta t$, also dem (n+1)-ten lokalen Integrationsschritt entsprechend, den Eulerschen Vektor

$$\mathbf{r}_{\vec{\varepsilon}} := (\mathbf{r}_{\mathbf{F}_e}, \mathbf{r}_{\vec{\vartheta}}, \mathbf{r}_{\vec{\omega}}, \mathbf{r}_{\vec{\varrho}}) \tag{146}$$

mit seinen $(3N+9)$ Komponenten

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e} &= \mathbf{F}_e\Lambda(\Delta\mathbf{L}_p) - \mathbf{F}\mathbf{F}_{pn}^{-1}\ , \\ r_{\vartheta_a} &= \Delta\vartheta_a - \dot{\gamma}_0\xi^{-n}\left\langle\phi_a\right\rangle^n\Delta t\ , \\ r_{\omega_a} &= \Delta\omega_a - [c_a\mathrm{sgn}(\tau_a - x_a) - d_a\omega_a]\Delta\vartheta_a\ , \\ r_{\varrho_a} &= \Delta\varrho_a - \Big(\frac{1}{bL_a} - 2\frac{y_c}{b}\varrho_a\Big)\Delta\vartheta_a\ . \end{aligned} \tag{147}$$

Der Tensor $\mathbf{F}_e$ wird für die numerische Umsetzung als Vektor betrachtet, dessen Indizen entsprechend $\{11, 12, 13, 21, 22, 23, 31, 32, 33\}$ sortiert werden. Die Herleitung der Eulerschen Vektorkomponenten sind in dem Anhang A.5 zu sehen, wobei

$$\Delta\varepsilon_j := \varepsilon_j(t+\Delta t) - \varepsilon_j(t) \tag{148}$$

die Differenz von Vektorkomponente zum Zeitpunkten $t+\Delta t$ und t bezeichnet. Es sei nochmals zu erwähnen, dass $\mathbf{F}_{pn}^{-1}$ die Inverse von dem im n-ten lokalen Integrationsschritt erhaltenen $\mathbf{F}_{pn}$ und

$$\Delta\mathbf{L}_p := \mathbf{L}_p\Delta t = \sum_a(\mathbf{m}_a^0 \otimes \mathbf{n}_a^0)\mathrm{sgn}(\tau_a - x_a)\Delta\vartheta_a\ . \tag{149}$$

als inkrementale Form von $\mathbf{L}_p$ ist. Der Term

$$\mathbf{F}_{etr} := \mathbf{F}\mathbf{F}_{pn}^{-1} \tag{150}$$

präsentiert die sogenannte „Belastung" (*engl. „trial"*) lokaler elastischen Deformation (z.B. SVENDSEN [91]). Direkt von der Eulerschen Integration ergibt

$$\Lambda(\Delta\mathbf{L}_p) = (\mathbf{I} - \Delta\mathbf{L}_p)^{-1}\,. \tag{151}$$

Eine Alternative zu dieser Form bietet sich die Exponentialform von $\Delta\mathbf{L}_p$, deren Linearisierung wie foglt ergibt

$$\Lambda(\Delta\mathbf{L}_p) := \exp(\Delta\mathbf{L}_p) \approx \mathbf{I} + \Delta\mathbf{L}_p + \frac{1}{2}\Delta\mathbf{L}_p\Delta\mathbf{L}_p\,. \tag{152}$$

Numerische Test mit dieser Approxmation und mit der direkt von Eulerscher Rückwärtsmethode erhaltenen Gleichung (151) zeigt, dass die letztere zuerst bei $\det(\mathbf{F}_p) = 1$ zunehmend inelastisch zu deformieren beginnt (SVENDSEN [91]), weshalb wir in dieser Arbeit die Exponentialform gemäß der Gleichung (152) verwenden.

Das Gleichungssystem (147) enthält $(3N + 9)$ nichtlinear abhängige Gleichungen für die unbekannten Zustandsvariablen $\vec{\varepsilon} := (\mathbf{F}_e, \vec{\vartheta}, \vec{\omega}, \vec{\varrho})$ bei gegebenem Deformationsgradienten $\mathbf{F}$, wobei N Gleitsysteme zu diesem Zeitpunkt aktiv sind. Die lokale Lösung (hier in jedem Gaußpunkt) dieses Gleichungssystems erfolgt durch das Newton-Raphson-Verfahren für die i-te Iteration gemäß:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_e \\ \vec{\vartheta} \\ \vec{\omega} \\ \vec{\varrho} \end{bmatrix}_i = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_e \\ \vec{\vartheta} \\ \vec{\omega} \\ \vec{\varrho} \end{bmatrix}_{i-1} - \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\mathbf{F}_e} & \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\vec{\vartheta}} & \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\vec{\omega}} & \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\vec{\varrho}} \\ \mathbf{r}_{\vec{\vartheta},\mathbf{F}_e} & \mathbf{r}_{\vec{\vartheta},\vec{\vartheta}} & \mathbf{r}_{\vec{\vartheta},\vec{\omega}} & \mathbf{r}_{\vec{\vartheta},\vec{\varrho}} \\ \mathbf{r}_{\vec{\omega},\mathbf{F}_e} & \mathbf{r}_{\vec{\omega},\vec{\vartheta}} & \mathbf{r}_{\vec{\omega},\vec{\omega}} & \mathbf{r}_{\vec{\omega},\vec{\varrho}} \\ \mathbf{r}_{\vec{\varrho},\mathbf{F}_e} & \mathbf{r}_{\vec{\varrho},\vec{\vartheta}} & \mathbf{r}_{\vec{\varrho},\vec{\omega}} & \mathbf{r}_{\vec{\varrho},\vec{\varrho}} \end{bmatrix}_{i-1}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e} \\ \mathbf{r}_{\vec{\vartheta}} \\ \mathbf{r}_{\vec{\omega}} \\ \mathbf{r}_{\vec{\varrho}} \end{bmatrix}_{i-1}. \tag{153}$$

Für die $(i{-}1)$-Iteration sind die Zustandsvariablen $\vec{\varepsilon}_{i-1} := (\mathbf{F}_e, \vec{\vartheta}, \vec{\omega}, \vec{\varrho})_{i-1}$ berechnet worden. Damit sind der Eulervektor und die Komponenten der Jacobi-Matrix $\mathbf{J} := \mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\vec{\varepsilon}}$, die durch Ableitungen von Eulerschen Vektorkomponenten nach jeweiligen Zustandsvariablen erhalten sind, bekannt. Die Komponenten der Jacobi-Matrix sind im folgenden analytisch hergeleitet:

i. Ableitung von $\mathbf{r}_{\mathbf{F}_e}$ nach $\vec{\varepsilon}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\mathbf{F}_e} &= \mathbf{I}\,, \\ \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\vartheta_a} &= \operatorname{sgn}(\tau_a - x_a)\mathbf{F}_e\Big[\mathbf{m}_a^0 \otimes \mathbf{n}_a^0 + \frac{1}{2}\Big\langle \mathbf{m}_a^0 \otimes \mathbf{n}_a^0, \Delta\mathbf{L}_p\Big\rangle\Big]\,, \\ \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\omega_a} &= \mathbf{0}\,, \\ \mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\varrho_a} &= \mathbf{0}\,. \end{aligned}$$

ii. Ableitung von $\mathbf{r}_{\vec{\vartheta}}$ nach $\vec{\varepsilon}$:

$$r_{\vartheta_a,\mathbf{F}_e} = -\dot{\gamma}_0\xi^{-n} n\,\langle\phi_a\rangle^{n-1}\,\langle\phi_a\rangle'\,\Delta t\,\underbrace{r_a^{-1}\operatorname{sgn}(\tau_a - x_a)\,\tau_{a,\mathbf{F}_e}}_{\phi_{a,\mathbf{F}_e}}\,,$$

$$
\begin{aligned}
r_{\vartheta_a,\vartheta_b} &= \delta_{ab}\,,\\
r_{\vartheta_a,\omega_b} &= \dot\gamma_0\xi^{-n}n\,\langle\phi_a\rangle^{n-1}\,\langle\phi_a\rangle'\,\Delta t\,\underbrace{r_a^{-1}\mathrm{sgn}(\tau_a-x_a)\,x_{a,\omega_b}}_{-\phi_{a,\omega_b}}\,,\\
r_{\vartheta_a,\varrho_b} &= \dot\gamma_0\xi^{-n}n\,\langle\phi_a\rangle^{n-1}\,\langle\phi_a\rangle'\,\Delta t\,\underbrace{r_a^{-1}(\phi_a+1)\,r_{a,\varrho_b}}_{-\phi_{a,\varrho_b}}\,,
\end{aligned}
$$

wobei

$$
\begin{aligned}
\langle\phi_a\rangle' &= \frac{1}{2}(\mathrm{sgn}(\phi_a)+1)\,,\\
\tau_{a,\mathbf{F}_e} &= \mathbf{F}_e\tau_{a,\mathbf{E}_e}\\
&= \mathbf{F}_e\Big[2\mathrm{sym}\{(\mathbf{m}_a^0\otimes\mathbf{n}_a^0)\mathbf{S}_e\}+\mathcal{C}_e\mathrm{sym}\{\mathbf{C}_e(\mathbf{m}_a^0\otimes\mathbf{n}_a^0)\}\Big]\,,\\
x_{a,\omega_b} &= \delta_{ab}\Big[(\mathbf{m}_a^0\otimes\mathbf{n}_a^0+\mathbf{n}_a^0\otimes\mathbf{m}_a^0)\mathbf{n}_a^0\Big]\mathbf{m}_a^0\,,\\
r_{a,\varrho_b} &= \frac{Gb}{1+\xi(T)}\frac{A_{ab}}{\sqrt{\vec A_a.\vec\varrho}}\,.
\end{aligned}
$$

iii. Ableitung von $\mathbf{r}_{\vec\omega}$ nach $\vec\varepsilon$:

$$
\begin{aligned}
r_{\omega_a,\mathbf{F}_e} &= \mathbf{0}\,,\\
r_{\omega_a,\vartheta_b} &= -\delta_{ab}[c_a\mathrm{sgn}(\tau_a-x_a)-d_a\omega_a]\,,\\
r_{\omega_a,\omega_b} &= \delta_{ab}[1+d_a\Delta\vartheta_a]\,,\\
r_{\omega_a,\varrho_b} &= 0\,.
\end{aligned}
$$

iv. Ableitung von $\mathbf{r}_{\vec\varrho}$ nach $\vec\varepsilon$:

$$
\begin{aligned}
r_{\varrho_a,\mathbf{F}_e} &= \mathbf{0}\,,\\
r_{\varrho_a,\vartheta_b} &= -\delta_{ab}\Big(\frac{1}{bK}\sqrt{\vec Z_a\vec\varrho}-2\frac{y_c}{b}\varrho_a\Big)\,,\\
r_{\varrho_a,\omega_b} &= 0\,,\\
r_{\varrho_a,\varrho_b} &= \delta_{ab}-\Big(\frac{1}{bK}\frac{Z_{ab}}{\sqrt{\vec Z_a\vec\varrho}}-2\frac{y_c}{b}\delta_{ab}\Big)\Delta\vartheta_a\,.
\end{aligned}
$$

Die Lösung $\vec\varepsilon$ wird nach der i-ten Iteration dann akzeptiert, also der lokale (n+1)-te Integrationsschritt ist dann erfolgsreich, wenn die relative Fehler, die als Norm des von den beiden Euler-Vektoren $\mathbf{r}_{\vec\varepsilon}$ und $\mathbf{r}_{\vec\varepsilon_n}$ gebildeten Differenzvektors $\|\mathbf{r}_{\vec\varepsilon}-\mathbf{r}_{\vec\varepsilon_n}\|$ gilt, eine vorzugebende Toleranzgrenze nicht übersteigt:

$$
\|\mathbf{r}_{\vec\varepsilon}-\mathbf{r}_{\vec\varepsilon_n}\|\le E_{Tol}\,. \tag{154}
$$

Andernfalls wird der Zeitschritt verkürzt, und der lokale Integrationsschritt wird wiederholt. Umgekehrt kommt es bei deutlicher Erfüllung des Akzeptanzkriteriums (154) zu einer Vergrößerung des nachfolgenden Zeitschritts, so dass auf dieser Weise der Rechenaufwand verringert wird.

3.5.3 Die konsistente Materialtangente für ABAQUS

Mit der lokalen Lösung des Systems (142) durch die Newton-Raphson-Iteration (153) formulieren wir nun die tangentiale Steifigkeitsmatrix, die sogenannte konsistente Materialtangente (s. Gleichung (136)). Zusammen mit dem oben geschilderten Materialmodell wird die Materialtangente durch die Schnittstelle UMAT in die mit ABAQUS berechnente FE-Modelle eingebracht. Die Formulierung der konsistenten Materialtangente für geschwindigkeitsabhängige Werkstoffmodelle bei großer Deformation ist im Allgemeinen sehr kompliziert und kann statt vom Differenzieren der Cauchyschen Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ nach dem Verzerrungstensor $\boldsymbol{\epsilon}$ wie in Gleichung (136) nur durch Linearisierung der Kirchhoffschen Spannung $\mathbf{K}$ bezüglich des Deformationsgradienten $\mathbf{F}$ realisiert werden. Aus den Gleichungen (101), (103) und (105) wird die Kirchhoffsche Spannung wie folgt umformuliert:

$$\mathbf{K} = \mathbf{F}_e \mathbf{S}_e \mathbf{F}_e^T = \det(\mathbf{F})\, \boldsymbol{\sigma}\,. \tag{155}$$

Die Linearisierung von $\mathbf{K}$ in Hinsicht auf die Variation $\delta\mathbf{F}$ von $\mathbf{F}$ und deren Zerlegung in einen symmetrischen Anteil $\mathbf{D}_\delta\mathbf{F}$ und antisymmetrischen Anteil $\mathbf{W}_\delta\mathbf{F}$, also

$$\delta\mathbf{F} = \mathbf{D}_\delta\mathbf{F} + \mathbf{W}_\delta\mathbf{F}\,, \tag{156}$$

erfolgt (s. Svendsen [90])

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{F}}\mathbf{K} &= (D_{\mathbf{F}}\mathbf{K})[\delta\mathbf{F}] \\ &= \mathbf{K}_{,\mathbf{F}_e}\,(D_{\mathbf{F}}\mathbf{F}_e)[\mathbf{D}_\delta\mathbf{F} + \mathbf{W}_\delta\mathbf{F}] \\ &= [\mathbf{W}_\delta\mathbf{F}, \mathbf{K}] + \mathbf{K}_{,\mathbf{F}_e}\,(D_{\mathbf{F}}\mathbf{F}_e)[\mathbf{D}_\delta\mathbf{F}] \\ &= [\mathbf{W}_\delta\mathbf{F}, \mathbf{K}] + \det(\mathbf{F})\mathcal{C}_{\text{Umat}}[\mathbf{D}_\delta]\,, \end{aligned} \tag{157}$$

wobei

$$\mathcal{C}_{\text{Umat}} := (\det\mathbf{F})^{-1}\mathbf{K}_{,\mathbf{F}_e}\,(D_{\mathbf{F}}\mathbf{F}_e)(\mathbf{I}\underline{\otimes}\mathbf{F}) \equiv \text{DDSDDE} \tag{158}$$

die konsistente Materialtangente für ABAQUS/UMAT (mit der Variable DDSDDE) definiert ist. Für die Ableitung vom Kirchhoffschen Spannungstensor $\mathbf{K}$ nach dem elastischen Deformationsgradienten $\mathbf{F}_e$ muss $\mathbf{K}$ zunächst aus der Gleichungen (104) und (155) umformuliert werden:

$$\mathbf{K} = \mathbf{F}_e \mathbf{S}_e \mathbf{F}_e^T = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_e\underline{\otimes}\mathbf{F}_e^T)\mathcal{C}_e[\mathbf{F}_e^T\mathbf{F}_e - \mathbf{I}]\,. \tag{159}$$

Die Ableitung von $\mathbf{K}$ nach $\mathbf{F}_e$ ergibt einen vierstufigen Tensor gemäß

$$\mathbf{K}_{,\mathbf{F}_e} = \mathbf{I}\underline{\otimes}\mathbf{S}_e\mathbf{F}_e^T + \mathbf{F}_e\mathbf{S}_e\overline{\otimes}\mathbf{I} + \frac{1}{2}(\mathbf{F}_e\underline{\otimes}\mathbf{F}_e^T)\mathcal{C}_e(\mathbf{F}_e^T\underline{\otimes}\mathbf{I} + \mathbf{I}\overline{\otimes}\mathbf{F}_e)\ . \tag{160}$$

Da $\mathbf{F}_e$ ein Teil von den gesamten Zustandsvariablen $\vec{\varepsilon} := (\mathbf{F}_e, \vec{\vartheta}, \vec{\omega}, \vec{\varrho})$ ist, erfolgt die algorithmische Ableitung von $\mathbf{F}_e$ nach $\mathbf{F}$ durch die Ableitung von $\vec{\varepsilon}$ nach $\mathbf{F}$ mit Hilfe von der Jacobi-Matrix $(\mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\vec{\varepsilon}})$ gemäß

$$D_{\mathbf{F}}\mathbf{F}_e \quad \subset \quad D_{\mathbf{F}}\vec{\varepsilon}(\mathbf{F}, \vec{\varepsilon}) = -(\mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\vec{\varepsilon}})^{-1}\mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\mathbf{F}}\ . \tag{161}$$

Es wurde vom Eulerschen Vektor (147) wie folgt hergeleitet

$$\begin{aligned}
& \mathbf{r}_{\vec{\varepsilon}}(\mathbf{F}, \vec{\varepsilon}(\mathbf{F})) = 0 \\
\Rightarrow\ & \mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\vec{\varepsilon}} d\vec{\varepsilon} + \mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\mathbf{F}} d\mathbf{F} = 0 \\
\Rightarrow\ & \mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\vec{\varepsilon}}\vec{\varepsilon}_{,\mathbf{F}}\, d\mathbf{F} + \mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\mathbf{F}} d\mathbf{F} = 0 \\
\Rightarrow\ & \mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\vec{\varepsilon}}\vec{\varepsilon}_{,\mathbf{F}} + \mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\mathbf{F}} = 0 \\
\Rightarrow\ & D_{\mathbf{F}}\vec{\varepsilon}(\mathbf{F}, \vec{\varepsilon}) := \vec{\varepsilon}_{,\mathbf{F}} = -(\mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\vec{\varepsilon}})^{-1}\mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\mathbf{F}}
\end{aligned}$$

mit

$$\mathbf{r}_{\vec{\varepsilon},\mathbf{F}} \quad = \quad (\mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\mathbf{F}}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0})\,,$$

wobei

$$\mathbf{r}_{\mathbf{F}_e,\mathbf{F}} = -\mathbf{F}_{etr,\mathbf{F}} = \mathbf{I}\underline{\otimes}\mathbf{F}_{pn}^{-1} \tag{162}$$

sich aus der ersten Gleichung von (147) und der Definition von $\mathbf{F}_{etr}$ (Gl. (150)) ergibt.

Damit ist Formulierung für die numerische Umsetzung vom Materialmodell gemäß der Tabelle 4 mit der durch Eulersche Rückwärtsmethode gewonnenen Integration für die lokale Newton-Raphson-Iteration über die benutzerdefinierte Schnittstelle UMAT in das FE-Programm ABAQUS vervollständigt.

4 Simulationen und Ergebnisse

Für die vorgestellten Ansätze im Abschnitt 4 sollen Simulationsversuche an Einkristallen und Polykristallen im folgenden untersucht werden. Besonders interessant ist dabei die Frage, inwieweit die physikalischen Eigenschaften mit den gewählten konstitutiven Gleichungen vor allem bei Einkristallverformung richtig wiedergegeben werden. Weiterhin sollen Effekte in Korninnern und, sehr wichtig, an Korngrenzen bei Verformung der Polykristalle genauer untersucht werden. Von untergeordneter Bedeutung ist es hingegen, über die komplexe ortsabhängige Verteilung von Belastung und Verformung in einer realen Probe detaillierte Vorhersagen zu machen. Für alle Simulationsrechnungen wird die Formulierung für große Deformation verwendet, da die Gitterdrehungen bei Erreichen bestimmter Verformungsgraden eine wichtige Rolle spielen.

4.1 Verwendete Modellparameter

Die Modellparameter für Simulationsversuche in dieser Arbeit orientieren sich an den Eigenschaften von reinem Kupfer, bei dem die lokalen Fließvorgänge und die Einkristall-Fließkurve aufgrund der starken elastischen Anisotropie besonders ausgeprägt sind. Sie gelten sowohl für Einkristallen als auch Polykristallen, die als Verband mehrerer Einkristalle mit unterschiedlichen kristallographischen Orientierungen betrachtet werden. An den Korngrenzen sind die Einkristallen miteinander verbunden. Neben den Festparametern des Materials wie den anisotropen Elastizitätskonstanten c_{11}, c_{12}, c_{44} und dem Burgers-Vektor $\mathbf{b}$ sowie dem Schubmodul G ist die Bestimmung der restlichen Modellparameter sehr schwierig. Man will einerseits die wichtigen physikalischen Eigenschaften von der Simulation erhalten, aber muss andererseits die numerische Stabilität bei Integration konstitutiver Gleichungen gewährleisten. Außerdem müssen die Modellparameter so gewählt werden, dass sie in physikalisch sinnvollen Bereichen liegen. Unter diesen Gesichtspunkten stellt sich mit Kenntniss über Einflüsse von Modellparametern (s. Abschnitt 4.2.5) heraus, dass die verwendeten Parametern in Tabelle 5 für die Simulation an Kristallen unter der Anwendung des Werkstoffmodells gemäß Tabelle 4 geeignet sind. Es wird darauf verzichtet, die Modellaussagen mit Hilfe numerischer Parameteroptimierungsalgorithmen quantitativ an konkrete Experimente anzupassen.

c_{11} $[MPa]$	c_{12} $[MPa]$	c_{44} $[MPa]$	b $[nm]$	G $[MPa]$	n $[1]$	$\xi(T)$ $[1]$	c_a $[MPa]$	d_a $[1]$
$1,68 \cdot 10^5$	$1,21 \cdot 10^5$	$0,75 \cdot 10^5$	$0,256$	$0,42 \cdot 10^5$	$4,3$	$0,7$	$16,0$	$2,0$
A_{SV} $[1]$	A_{LC} $[1]$	A_{GL} $[1]$	A_{HL} $[1]$	A_{KO} $[1]$	A_{QU} $[1]$	$\dot{\gamma}_0$ $[s^{-1}]$	K $[1]$	y_c $[nm]$
$0,07$	$0,2$	$0,17$	$0,15$	$0,15$	$0,15$	$4,6 \cdot 10^{-2}$	$11,7$	$0,4$

Tabelle 5: Verwendete Modellparameter zur Simulation von Zugversuchen an Kristallen.

Durch Einschränkung des Wertbereichs einiger Parameter (s. Abschnitt 2.5) sind die Modellparameter in Tabelle 5 für die Simulationen gewählt. Die Parameter $K = 32,6$ und $y_c = 3,58nm$ sind für die Entwicklung der Versetzungen verantwortlich. Der Wert des kritischem Annihilationsabstands y_c entspricht größenordnungsmäßig dem von Stufenversetzungen, womit der Tatsache Rechnung getragen wird, dass im allgemeinen mehr Stufen- als Schraubenanteile vorliegen. Die zur Beschreibung der isotropen latenten Verfestigung der Versetzungen verwendeten Komponenten A_{ab} liegen damit im angenäherten Bereich 0,1 ... 0,2 nach HEINRICH U.A. [42] und BAIRD U.A. [8]. Die Anfangsversetzungsdichte ϱ^0 auf allen 12 Gleitsystemen soll gleich sein und liegt in der Größenordnung von $10^9 m^{-2}$, damit die Gesamtversetzungsdichte den mittleren Wert von $12 \times 10^9 m^{-2} \approx 10^{10} m^{-2}$ besitzt. Zusammen mit dem Schubmodul G, dem Betrag des Burgers-Vektors b, dem Verhältnis $\xi(T)$ und den Komponeneten A_{ab} ergibt sich gemäß der Gleichung (123) einen Startwert der kritischen Fließspannung r^0 von $0,34MPa$ auf allen Gleitsystemen. Letztlich werden die die kinematische Verfestigung bestimmenden Parameter c_a und d_a eines Gleitsystems so gewählt, dass die Rückspannung x_a aufgrund der im Tieftemperaturbereich wenig ausgeprägten Erholungsvorgänge nicht zur Sättigung gelangt (GERDES [32]).

4.2 Zugversuch an einem Einkristall

4.2.1 FE-Modell

In einem experimentellen einachsigen Zugversuch wird die Probenmitte untersucht, bei der eine fast homogene Spannungsverteilung zu finden ist. Um zu der Annäherung dieser realen Probe zu gelangen, wird das in Abbildung 21 skizzierte FE-Modell für den Einkristall verwendet, wobei es möglich ist, durch entsprechende Randbedingungen ein homogenes Spannungsfeld zu bekommen.

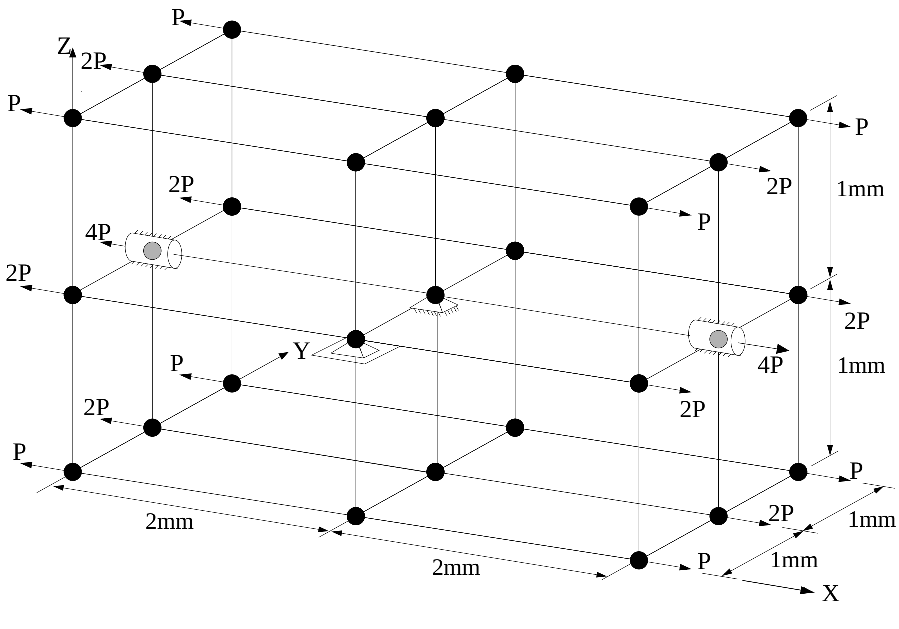


Abbildung 21: Lastgesteuertes FE-Modell zur Simulation von Einkristall-Zugversuchen.

Das Modell besteht aus acht Acht-Knoten-Quaderelementen (also z.B. C3D8 in ABAQUS), die mit linearen Ansatzfunktionen arbeiten. Die Probenlängsachse ist in x-Richtung (also Zugrichtung) gerichtet. Der Zentralknoten wird dabei komplett festgehalten, um Starrkörperbewegung im Raum zu vermeiden. Durch zusätzliche Lagerungen von zwei äußeren mittleren Knoten in y- und z-Richtung ist die Ausrichtung der Probenlängsachse fixiert. Ferner sorgt die bei $x = 2mm, y = 0, z = 1mm$ einwertige Lagerung in z-Richtung dafür, dass Rotationsbewegungen um die Längsachse ausgeschlossen werden, aber Querkontraktionen hingegen möglich sind.

Um einen homogenen einachsigen Spannungszustand in der Probe zu bekommen, muss die Simulation last- und nicht dehnungsgesteuert duchgeführt werden. Dabei sind Verkippungen der Stirnflächen aufgrund der Nachgiebigkeit des Materials möglich, damit die Abhängigkeit von Gitterdrehung und Abgleitung bei der Simulation zugelassen wird. Weiterhin müssen die Verhältnisgrößen der an den Stirnflächenknoten angreifenden, richtungstreuen Einzelkräfte entsprechend richtig abgestimmt werden (s. Abbildung 21). Die Kräfte wachsen dabei mit gleicher Geschwindigkeit. In den Simulationen ist die resultierende Kraft ($P_{res} = 16P$) mit der Geschwindigkeit ($\dot{P}_{res} = 1,6 \cdot 10^{-2} N s^{-1}$) gewählt, womit dies einer mittleren Spannungsgeschwindigkeit von $\dot{\sigma} = 4,0 \cdot 10^{-3} MPa\, s^{-1}$ entspricht, aus der eine mittlere Dehnrate von $\dot{\epsilon} = 3,0.10^{-5} s^{-1}$ resultiert.

4.2.2 Ergebnisse von Zugversuchsimulation

Im folgenden werden die Ergebnisse der Simulation des Zugversuches an einer Einkristallprobe präsentiert, die eine "weiche" Anfangsorientierung relativ zur Zugsachse besitzt (Abbildung 22). Die Ergebnisse dienen zur Kontrolle der Fähigkeit des Werkstoffmodells gemäß Tabelle 4, inwieweit die physikalischen Eigenschaften richtig wiedergegeben werden.

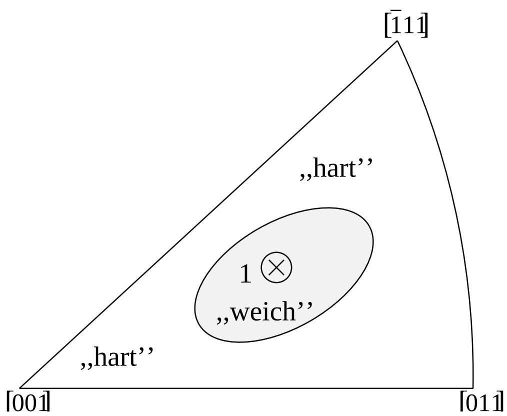
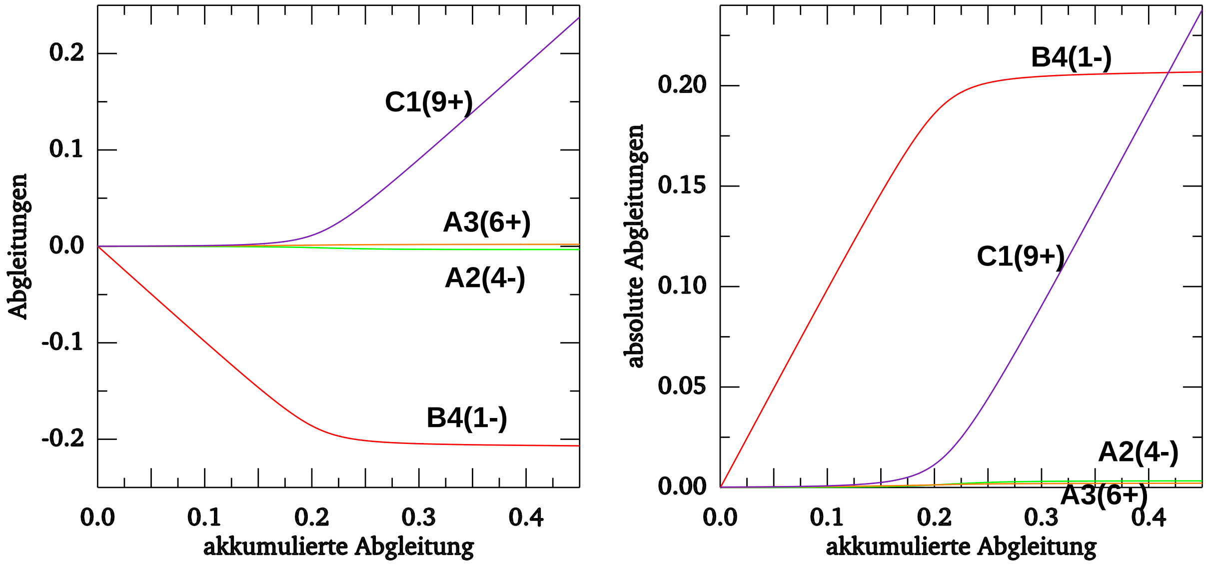


Abbildung 22: Anfangsorientierung des Einkristalls relativ zur Zugachse für Simulation des einachsigen Zugversuches.

Die Abbildung 23 zeigt die Aktivierung der Gleitsysteme bei der Zugversuchsimulation an Einkristallen bei der Anfangsorientierung (Position 1) mit dem Schmidfaktor $m_S = 0,487$ innerhalb des stereographischen Standarddreiecks $[001] - [011] - [\bar{1}11]$. Aufgetragen sind



(a) (b)

Abbildung 23: Aktivierung von Gleitsystemen: das Primärsystem ist B4(1-), das stärkste aktive Sekundärsystem ist C1(9+).

die Abgleitungen (Abbildung 23(a)) und deren Betrag (Abbildung 23(b)) auf vier aktiven Gleitsystemen B4, C1, A2 und A3 gegenüber der akkumulierten Abgleitung γ_{akk} von allen aktiven Gleitsystemen (betragsmäßig, siehe Gleichung (50)). Es zeigt eindeutig, dass im ersten Bereich, also bis zu 12% der akkumulierten Abgleitung, tatsächlich Einfachgleitung vorliegt: Neben dem am günstigsten orientierten Primärsystem B4 (nach der Notation von Schmid und Boas) ist kein weiteres System aktiv. Das Primärsystem B4 entspricht dem Gleitsystem 1 in dieser Simulation und hat einen negativen Richtungssinn, so dass es B4(1-) zugeordnet wird, dessen Abgleitung auf der Kristallebene (111) in der Gleitrichtung $[10\bar{1}]$ stattfindet (s. Abbildung 1). Zur Mehrfachgleitung im Bereich II kommt es erst oberhalb von 12% der akkumulierten Abgleitung, bei dem sekundäre Gleitsysteme aktiv werden. Besonders ist das Gleitsystem C1(9+), das durch Verschiebung der Zugachse kristallographisch so günstig orientiert wird, dass es immer schneller abgleitet (s. Abschnitt 1.1.3). Die Gleitaktivität auf den Gleitsystemen A2(4-) und A3(6+) ist allerdings relativ gering gegenüber der von C1(9+) und B4(1-). Das Vorzeichen der Abgleitung aller aktiven Gleitsystemen sind in Abbildung 23(a) zu sehen.

Nach einem anfänglich schnellen Anstieg tendiert die Abgleitung auf dem Primärsystem B4(1-) ab Ende des Verfestigungsbereichs II, also bei ca. 22% der akkumulierten Abgleitung, zur Sättigung. Dagegen steigt die Gleitaktivität auf dem Sekundärsystem C1(9+) stark an, dass sie die Gleitaktivität auf B4(1-) im Bereich III übersteigt (Abbildung 23(b)). In diesem Bereich wird die Gleitrate auf dem System B4(1-) zu Null und auf dem System C1(9+) fast konstant (Abbildung 24). Das ist ein Hinweis dafür, dass die latente Verfestigung durch diesen beiden aktiven Gleitsystemen B4(1-) und C1(9+) im Bereich III im Gegensatz zu Bereich II wesentlich reduziert wird, so dass die Selbstverfestigungen überwiegend vorhanden sind.

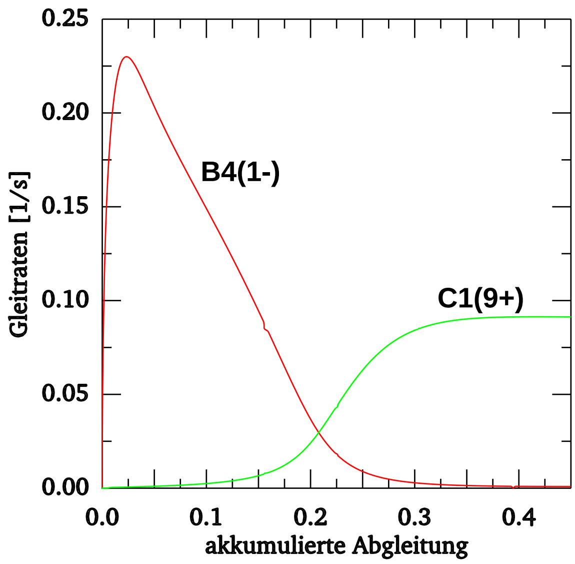


Abbildung 24: Gleitraten von zwei stärksten aktiven Gleitsystemen B4(1-) und C1(9+).

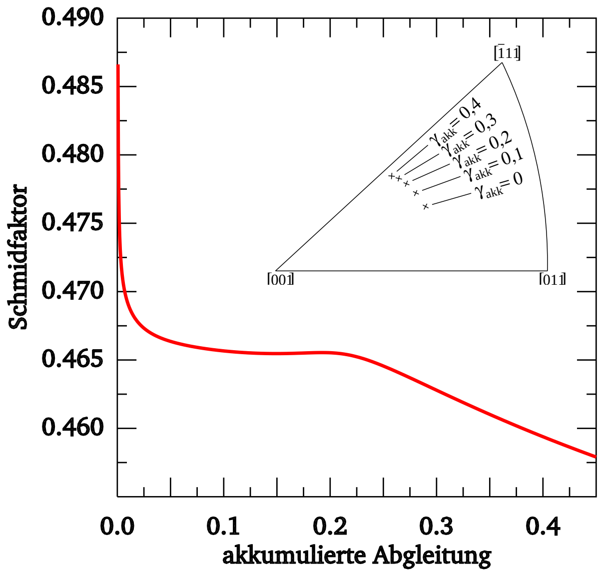
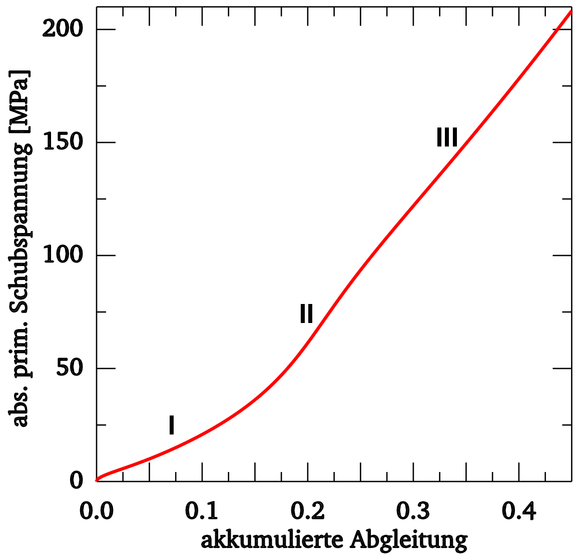
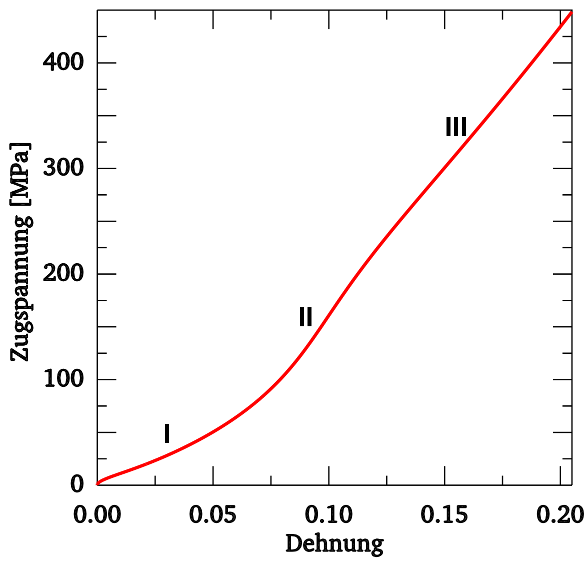


Abbildung 25: Verlauf des Schmidfaktors zur Beschreibung der Orientierungsänderung des Einkristalls gegenüber die Zugachse.

Die Aktivierung der Gleitsysteme ist, wie schon erwähnt, möglich durch Verschiebung zu einer günstigen Orientierung des Einkristalls gegenüber der Zugachse im Laufe der Zugverformung. Die diese Lagenänderung darstellende Größe ist der Schmidfaktor (Abbildung 25). Mit dem Anfangswert 0,487 fällt der Schmidfaktor aufgrund des starken Anstiegs der primären Gleitrate zunächst auf ca. 0,466 und stabilisiert sich dann im Bereich II. Er fällt wieder leicht im Bereich III. Die Lage der Zugachse relativ zum Einkristall ist im stereographischen Standarddreieck $[001] - [011] - [\bar{1}11]$ dargestellt.



(a)



(b)

Abbildung 26: Einkristall-Fließkurve (a) und Spannungs-Dehnungs-Diagramm (b) von Zugversuchsimulation an Einkristall bei ,,weicher" Anfangsorientierung.

Die nächste wichtige Eigenschaft dieser Zugversuchsimulation ist die erhaltene Einkristall-Fließkurve, die durch drei Bereiche mit unterschiedlichen Steigungen, sog. Verfestigungsraten, ausgeprägt ist (Abbildung 26(a)). Dabei wird die primäre Schmidsche Schubspannung über der akkumulierten Abgleitung aufgetragen. Bei gleichzeitiger Betrachtung der Abbildungen 23 und 26(a) zeigt der Bereich I eindeutig die Einfachgleitung auf dem Primärsystem B4(1-). Zur wesentlichen Mehrfachgleitung im Bereich II kommt es erst oberhalb von 12% akkumulierter Abgleitung, die bis zu dieser Stelle mit der Primärgleitung identisch ist. Der Bereich III beginnt bei ca. 22% der akkumulierten Abgleitung und erstreckt sich bis zum Ende des Zugversuchs[6]. Die drei Verfestigungsraten $\theta = \frac{d\tau_1}{d\gamma}$ betragen $\theta_I \approx 247MPa = G/170$, $\theta_{II} \approx 600MPa = G/70$ und $\theta_{III} \approx 420MPa = G/100$, sind zwar höher als die in Experimenten gemessenen Werte, aber qualitativ richtig. Die Gründe für die Entstehung dieser typischen Einkristall-Fließkurve werden nach der Analyse von internen Zustandsgrößen wie Spannungen und Versetzungen erläutert.

Makroskopisch betrachtet zeigt die Zugspannung-Dehnung-Kurve einen ähnlichen Verlauf wie die Einkristall-Fließkurve, so dass ebenfalls drei Bereiche zu sehen sind (Abbildung 26(b)). Diese qualitative Ähnlichkeit wurde in den Experimenten von Takeuchi [92] bestättigt. Der Unterschied liegt abgesehen vom Betrag noch darin, dass die Zugspannung schon am Anfang der Deformation ansteigt, während die primäre Schmidsche Spannung bei der Einkristall-Fließkurve mit dem Wert der anfänglichen kritischen Fließspannung $r^0 = 0,34MPa$ beginnt, die in der Vergrößerung der Abbildung 26 (die hier nicht dargestellt ist) bzw. durch Betrachtung der Gleichung (116) zu erkennen ist.

[6]Es gibt tatsächlich den Bereich IV mit steigender Verfestigungsrate (z.B. Gil Sevillano u.a. [34] oder Alberdi Garitaonandia [2]), der hier nicht eindeutig zu sehen ist, aber sich in Abbildung 32 für Gleitrate vermuten lässt. Dabei fällt die Gleitrate in diesem Bereich leicht ab. Es liegt daran, dass die Schmidschen Spannungen durch Quergleitung von Schraubenversetzungen sowie durch Klettern von Stufenversetzungen (Abschnitt 1.2.4) schneller als die akkumulierte Abgleitung, deren Gleitsrate abfällt, ansteigen.

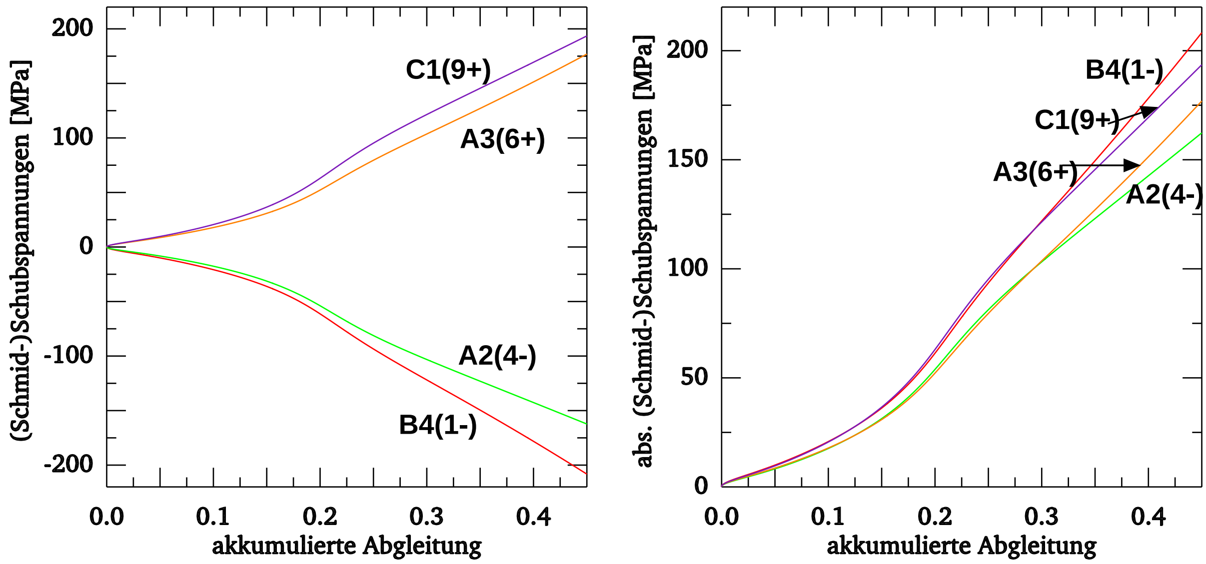


Abbildung 27: Entwicklung der Schmidschen Schubspannungen über der akkumulierten Abgleitung.

Für die Analyse der Verfestigungsmechanismen ist die Entwicklung von Versetzungen und Spannungen aktiver Gleitsysteme zu betrachten. Dabei werden die isotropen Eigenschaften von Versetzungen und Fließspannungen sowie die Anisotropie der Schmidschen und Rückspannungen verdeutlicht. Zusätzlich stellt sich heraus, welche Rückspannungen die Gleitvorgänge unterstützen bzw. behindern. Das latente Verfestigungsverhältnis LHR sowie der Einfluss von Modellparametern sollen schließlich in Betracht gezogen werden.

Die Abbildung 27 zeigt die Schmidschen Schubspannungen auf den aktiven Gleitsystemen über der akkumulierten Abgleitung. Das Vorzeichen der Schubspannungen entspricht dem in Abbildung 23. Die drei Bereiche mit unterschiedlichen Verfestigungsraten in jeder Auftragung sind dabei zu erkennen. Aufgrund der günstigen kristallographischen Orientierung und damit verbundenen größerem Schmidfaktor m_s (s. Abschnitt 1.1.2) ist der Betrag der Schmidschen Schubspannung auf dem Primärsystem B4(1-) im Laufe der Deformation etwas größer als der auf den Sekundärsystemen.

Der Verlauf kinematischer Rückspannungen auf aktiven Gleitsystemen (Abbildung 28) zeigt zunächst das gleiche Vorzeichen wie die Schmidschen Schubspannungen, woraus es sich auf die Behinderung bei der Abgleitung deutet. Die Beträge sind allerdings relativ klein gegenüber denen der Schmidschen Spannungen und sind nicht in einer einfachen Weise zuzuordnen. Bei richtungstreuem Zugversuch an Einkristallen spielen kinematische Rückspannungen nur eine geringe Rolle, so dass sich der qualitative Verlauf der Fließkurven nicht viel ändert. Hingegen sind sie bei lastwechselndem Zugversuch wichtiger, da der Bauschinger-Effekt auftritt, und die Abgleitvorgänge durch kinematische Rückspannungen deutlicher beeinflusst werden.

Die isotropen Materialgrößen sind die Versetzungsdichten und Fließspannungen, deren Entwicklungen sehr stark voneinander abhängig sind (s. Gleichung (123)). Die Abbildung 29 zeigt die Entwicklung der (mobilen) Versetzungen auf den aktiven Gleitsystemen. Im Be-

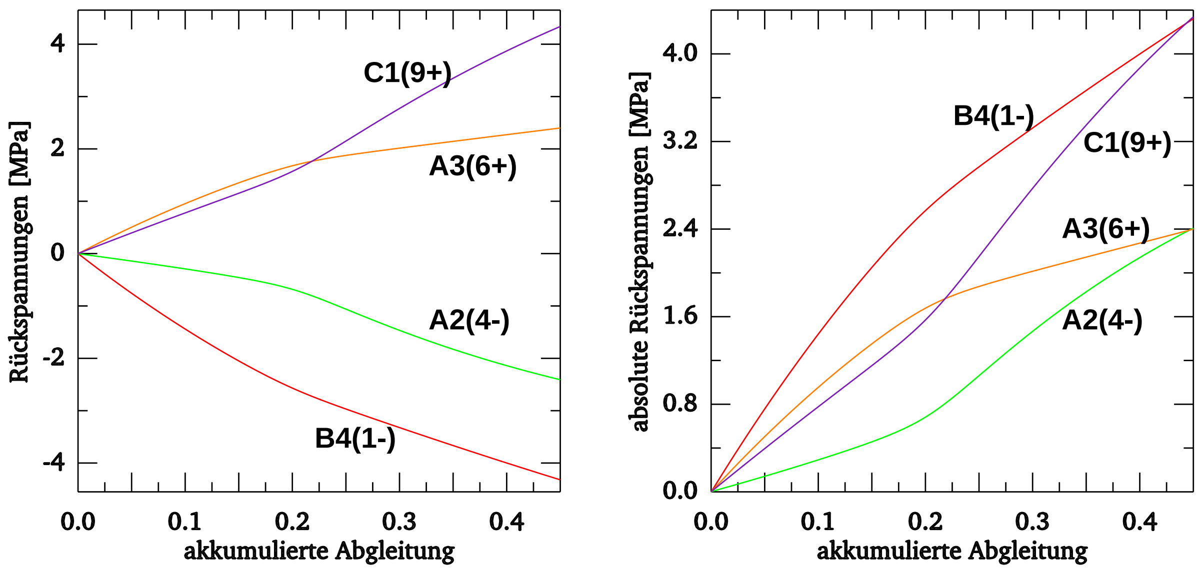


Abbildung 28: Entwicklung der Rückspannungen über der akkumulierten Abgleitung.

reich der Einfachgleitung sind die Versetzungen auf dem Primärsystem B4(1-) aufgrund günstiger Orientierung sehr mobil, so dass sie sich bei noch wenigen Hindernissen relativ ungestört bewegen und große Beiträge zur Abgleitung leisten (s. Abbildung 23). Beim Übergang in den zweiten Bereich beginnen zusätzlich die Versetzungen auf dem Sekundärsystem[7] zu gleiten. Die einsetzende Bewegung auf den Sekundärsystemen wird zunächst durch die im Bereich I gebildeten Primärvesetzungen stark behindert, die sich als Waldversetzungen für Sekundärversetzungen darstellen. Diese können nur sehr kurze Wege zurücklegen, bis sie immobilisiert werden. Trotz der relativ starken Versetzungsmultiplikation bleibt die Abgleitung auf den Sekundärsystemen wegen der starken Einflüsse der kurzen Gleitwege verhältnismäßig gering (s. Abbildung 23, auch GARSTONE U.A. [31]). Umgekehrt sorgt die steigende Versetzungsdichte auf den Sekundärsystemen, hier besonders auf dem System C1(9+) aufgrund der Verschiebung der Zugachse zu deren Gunsten dafür, dass die Bewegung der Primärversetzungen durch entstehende Hindernisse erschwert wird. Sie tendieren ab Ende des Bereichs II (ca. 20% der akkumulierten Abgleitung) zur Sättigung und werden von den Sekundärversetzungen überholt. Dieser Effekt tritt bei Messungen von NEUHAUS U.A. [73] an Cu-1,3%Mn sehr deutlich auf. Der quadratische Anstieg der Versetzungsdichte auf dem Sekundärsystem C1(9+) (Abbildung 29) wurde auch bei den Messungen von MUGHRABI [69] und ESSMANN [23] bestätigt.

Die Entwicklung der Versetzungen entscheidet den Verlauf der Fließspannungen gemäß der Gleichung (123) (s. Abbildung 30). Bezogen auf die zwei am stärksten aktiven Gleitsysteme B4(1-) und C1(9+) ist hier ein betragmäßiger umgekehrter Verlauf von Fließspannungen gegenüber der Versetzungsdichten zu sehen, was qualitativ richtig ist. Im Bereich I bei hohen mobilen Primärversetzungen sind die sekundären Fließspannungen viel größer als die

[7]Aufgrund des messtechnisch hohen Aufwandes wird häufig darauf verzichtet, die Sekundärversetzungen ihren spezifischen Gleitsystemen zuzuordnen. Bei Messungen von NEUHAUS U.A. [73] sind die Sekundärsysteme gleich aktiv, während bei ESSMANN UND RAP [26] eine vorherrschende Aktivität auf Gleitsystem C1(9+) zu finden ist, was dem Simulationsergebnis in der Abbildung 29 entspricht.

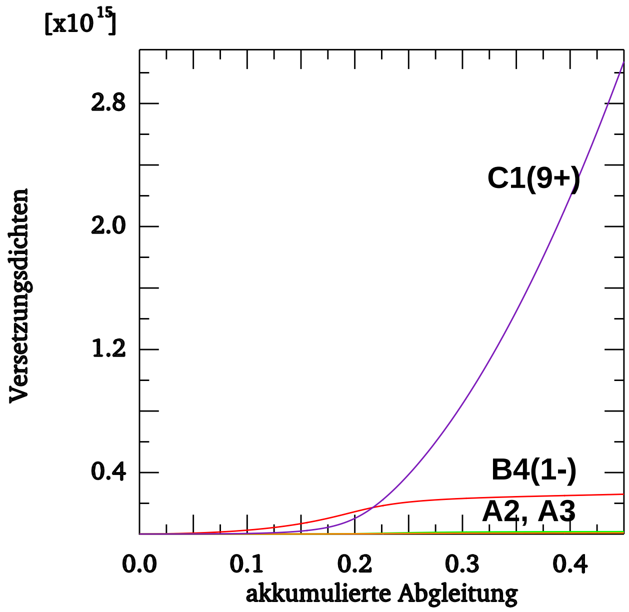


Abbildung 29: Entwicklung der Versetzungsdichten über der akkumulierten Abgleitung.

primäre Fließspannung B4(1-), so dass nur Einfachgleitung auf B4(1-) möglich ist. Dies liegt daran, dass für die Fließspannung verantwortliche Schneidvorgänge nur von Waldversetzungen abhängig sind. Die zahlreich gebildeten Primärversetzungen behindern mögliche Gleitvorgänge auf Sekundärsystemen stark. Im Bereich II steigen die Sekundärversetzungen an, die sich als Waldversetzungen für das Primärsystem darstellen, wodurch die Bewegung der Primärversetzungen erschwert wird. Die Fließspannung auf dem Primärsystem B4(1-) übersteigt die auf den Sekundärsystemen. Diese wird bei Betrachtung der Gleichung (123) verständlicher, wobei der Term $A_{LC}\,\varrho_9$ von „Lomer-Cottrell-Versetzungen" (vgl. Abschnitt 2.2) auf dem Sekundärsystem C1(9+) einen großen Beitrag leistet.

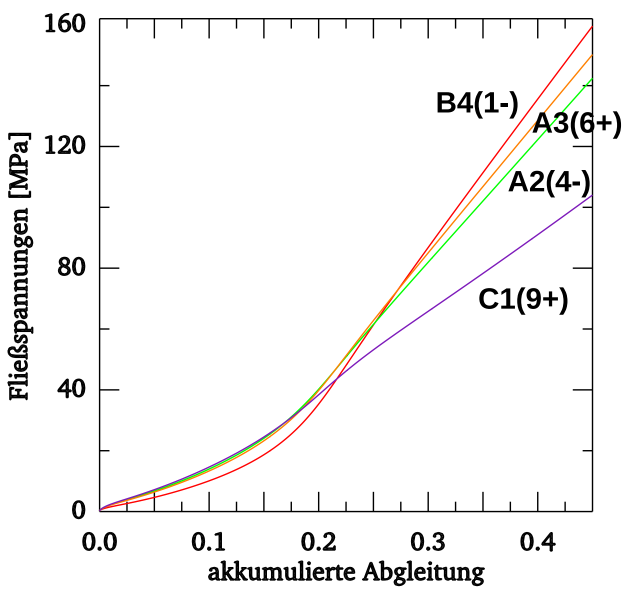


Abbildung 30: Entwicklung der Fließspannungen über der akkumulierten Abgleitung.

4.2.3 Untersuchung zum latenten Verfestigungsverhalten

Das latente Verfestigungsverhältnis LHR wurde im Abschnitt 2.2 diskutiert. Zur Kontrolle soll hier das Ergebnis der Simulation in Betracht gezogen werden. In Anlehnung an die Definition (18) werden LHR-Werte in dieser Rechnung, bei der B4(1-) das Primärsystem ist, wie foglt bestimmt:

$$LHR_a = \frac{r_a}{r_{pr}} = \frac{r_a}{r_1} \ . \qquad (163)$$

Die in dieser Arbeit gewählten Komponenten der **A**-Matrix bedingen drei verschiedene LHR-Verläufe, die in Abbildung 31 über der akkumulierten Abgleitung aufgetragen sind. Alle drei Kurven steigen zunächst stark an, um nach Durchlaufen eines Maximums der Höhe $LHR = 1,4...1,6$ langsam abzufallen. Im Bereich I bleiben sie größer als 1,0, was Experimente bestätigt. Das Entstehen des typischen LHR-Verlaufs wurde im Abschnitt 2.2 erläutert. Die Kurve des Systems C1(9+), dessen Versetzungen mit den Versetzungen des Primärsystems B4(1-) Lomer-Cottrell-Barrieren bilden können, liegt dabei am höchsten (s. Abschnitt 2.2). Diese gilt auch für das nicht aktivierte Gleitsystem A6(5)[8]. Etwas niedriger verläuft die Kurve des Systems A2(4-), auch für andere Systeme C5(8), D1(10) und D6(11), deren mobile Versetzungen gleitfähige Konfigurationen eingehen. Die Versetzungen der restlichen Systemen A3(6+) sowie B2(3), B5(2), C3(7) und D4(12) können keine stabilen Versetzungskonfigurationen mit den Primärversetzungen bilden, so dass die LHR-Kurve im Bereich I am niedrigsten liegt. Die LHR-Werte gehen ab Ende des Bereichs II unterhalb von 1,0 und tendieren im Bereich III zur Sättigung. Die Primärgleitvorgänge werden hier durch Sekundärversetzungen stark behindert und erreichen damit ihre Sättigung.

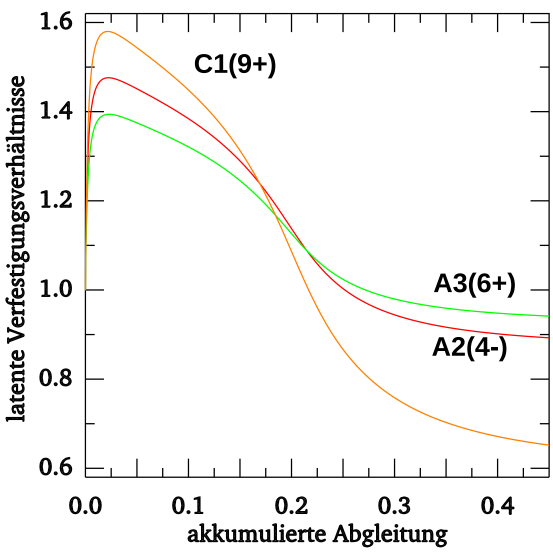


Abbildung 31: Verlauf der latenten Verfestigungsverhältnisse über der akkumulierten Abgleitung.

[8]Auf die Kennzeichnung +/- für Richtungssinn wird hier verzichtet, da dieses System nicht aktiv ist, d.h. die effektive Spannung ist aufgrund ungünstiger Lage noch kleiner als die kritische Fließspannung.

4.2.4 Zur Erklärung der Einkristall-Fließkurve

Die typische Einkristall-Fließkurve wurde im Zusammenhang mit der Versetzungsdichte im Abschnitt 1.5 beschrieben. Die durch Simulation ermittelte Einkristall-Fließkurve in Abbildung 26 wird im wesentlichen durch das jeweilige Zusammenspiel von Schmidscher Schubspannung, kinematischer Rückspannung und kritischer Fließspannung bestimmt. Beim Vergleichen mit den Abbildungen 27, 28 und 30 stellt sich heraus, dass die kinematischen Rückspannungen keine wesentliche Rolle spielen. Eine förderliche Rolle kommt dabei der sich durch Versuchsbedingungen (Lage und Zugachse bleiben erhalten) einstellenden Gitterrotation zu, so dass die Schmidsche Schubspannung für einige Sekundärsysteme relativ zum Primärsystem B4(1-) betragsmäßig immer größer wird. Aufgrund des gegenüber den restlichen Komponenten der **A**-Matrix relativ kleinen Wertes von A_{SV} sind die sekundären Fließspannungen im Bereich I zunächst größer als die primäre Fließspannung, so dass die Einfachgleitung auf dem Primärsystem B4(1-) ermöglicht wird. Die Schmidsche Schubspannung des günstig orientierten Gleitsystems B4(1-) steigt zunächst schneller als die Fließspannung an. Die Gleitrate auf B4(1-) und damit die Abgleitung erhöhen sich, so dass die Verfestigungsrate θ_I bei der Auftragung Schmidscher Schubspannung über der akkumulierten[9] Abgleitung einen relativ kleinen Wert besitzt.

Der Verlauf der erhaltenen Gleitrate bei Auftragung über der akkumulierten Abgleitung γ_{akk} wird in Abbildung 32 dargestellt. Dabei werden vier Bereiche mit unterschiedlichen Steigungen von Gleitraten zu sehen. Diese erklären auch den möglichen Bereich IV (ab 33% der akkumulierten Abgleitung) bei der Einkristall-Fließkurve.

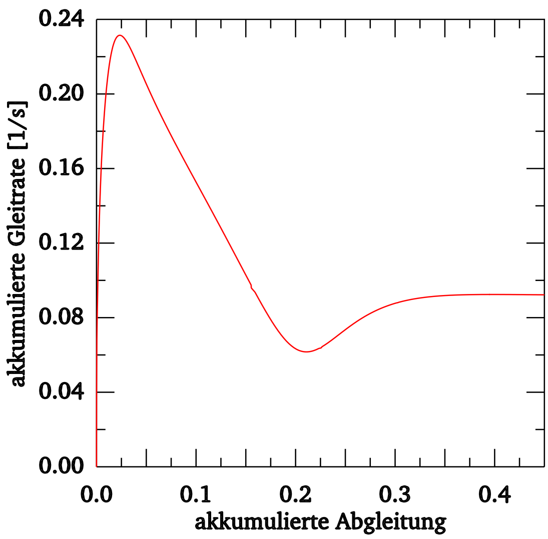


Abbildung 32: Verlauf der akkumulierten Gleitrate über der akkumulierten Abgleitung.

Der starken Anstieg der Verfestigungsrate im Bereich II resultiert aus Zunahme der primären Fließspannung, die sich aufgrund der steigenden Versetzungsdichte auf den Sekundärsystemen als Waldversetzungen für das Primärsystem ergibt. Dies führt zu einer steigender Abgleitung mit abklingender Geschwindigkeit auf dem Primärsystem B4(1-). Das aktivierte

[9] Im Bereich I mit Einfachgleitung auf B4(1-) ist die akkumulierte Abgleitung gleich der primären Abgleitung (s. Abbildung 23).

Sekundärsystem C1(9+) trägt noch sehr wenig zur akkumulierten Abgleitung bei, so dass die kontinuierlich steigende Schmidsche Schubspannung zur höheren Verfestigungsrate führt.

In Bereich III übersteigt die primäre Fließspannung die sekundären (Abbildung 30) und führt die primäre Abgleitung zur Sättigung. Hingegen fällt die Fließspannung auf C1(9+) aufgrund der Sättigung der Primärversetzung eindeutig zurück. Die Gleitaktivität auf C1(9+) nimmt zu und trägt wesentlich zur akkumulierten Abgleitung bei. Die Verfestigungsrate wird dadurch kleiner, womit es bei kontinuielicher steigender Schmidscher Schubspannung zu einer Erhöhung der Verfestigungsrate führt.

4.2.5 Zum Einfluss von Modellparameter

Die Bestimmung von Modellparametern für die Simulation an Kristallen ist sehr schwierig. Konzentriert man sich zunächst auf das Modellverhalten des Kristalls, so lassen sich folgende Einflüsse von Modellparametern feststellen. Wird das Verhältnis y_c/K größer, so entwickeln sich die Versetzungen langsamer, d.h. die Abgleitung von Versetzungen wird schwieriger. Die Verfestigungsverhältnisse entwickeln sich weniger ausgeprägt. Dieses Verhältnis bestimmt die Sättigungswerte der Versetzungsdichte, besonders die auf dem Primärsystem B4(1-) (s. Abbildung 29). Eine Veränderung der latenten Verfestigungsgrößen A_{ab} der $\mathbf{A}$-Matrix gemäß Gleichung (45) kann die Aktivierung der Sekundärsystemen früher oder später herbeiführen, d.h. wird das Verhältnis z.B. zwischen der Selbstverfestigung A_{SV} und der latenten Verfestigung A_{LC} kleiner, so wird das Sekundärsystem C1(9+) später aktiviert, wodurch der Bereich I in der Einkristall-Fließkurve verlängert wird. Bei Vergrößerung dieses Verhältnisses kann es zu deutlichen ,,Überschwingern" der kristallographischen Orientierung in das C1-Feld kommen, wobei sich die Systeme B4(1-) und C1(9+) im Abgleiten abwechseln.

Der Beitrag der kinematischen Rückspannung x_a des aktiven Gleitsystems a ist zum Vergleich mit der Schmidschen Spannung τ_a relativ klein, so dass die kinematische Rückspannung keine wesentliche qualitative Änderung der Verfestigungskurve verursacht. Aufgrund der überwiegenden Behinderungseigenschaften der Rückspannungen kann eine Vergrößerung von c_a bzw. eine Verkleinerung von d_a für ausgeprägtere latente Verfestigungskurve sorgen, wobei sich gleichzeitig die Verfestigungsrate im Bereich I erhöht.

Die Potenzzahl n und der Vorfaktor $\dot{\gamma}_0$ in der konstitutiven Gleichung (114) der Gleitrate beschreiben die Empfindlichkeit der Abgleitung. Ihre Einflüsse auf Verfestigung sind entgegengesetzt. Die Gleitrate $\dot{\gamma}$ im Bereich I wird bei größeren n kleiner, so dass es zu einer späteren Aktivierung der Sekundärsysteme kommt. Der Verlauf der Einkristall-Fließkurve wird weniger ausgeprägt. Größere n verursachen auch die numerische Instabilität bei der Integration konstitutiver Gleichungen. Hingegen verringert sich die Verfestigungsrate im Bereich II bei kleinerer n.

4.3 Zugversuch an einem Polykristall

Die folgenden Simulationsergebnisse sollen das im Abschnitt 1.6 beschriebene Verhalten der plastischen Verformung von Polykristallen wiedergeben. Dabei sind die wichtigen Eigenschaften: die Spannungsüberhöhung in der korngrenzennahen Umgebungen, die starke Inhomogenität der Spannungen an den Tripelpunkten zwischen drei Nachbarkörnern, und die homogenen Spannungsverteilung im Korninnern.

4.3.1 FE-Modell zur Simulation vom Zugversuch an einem Polykristall

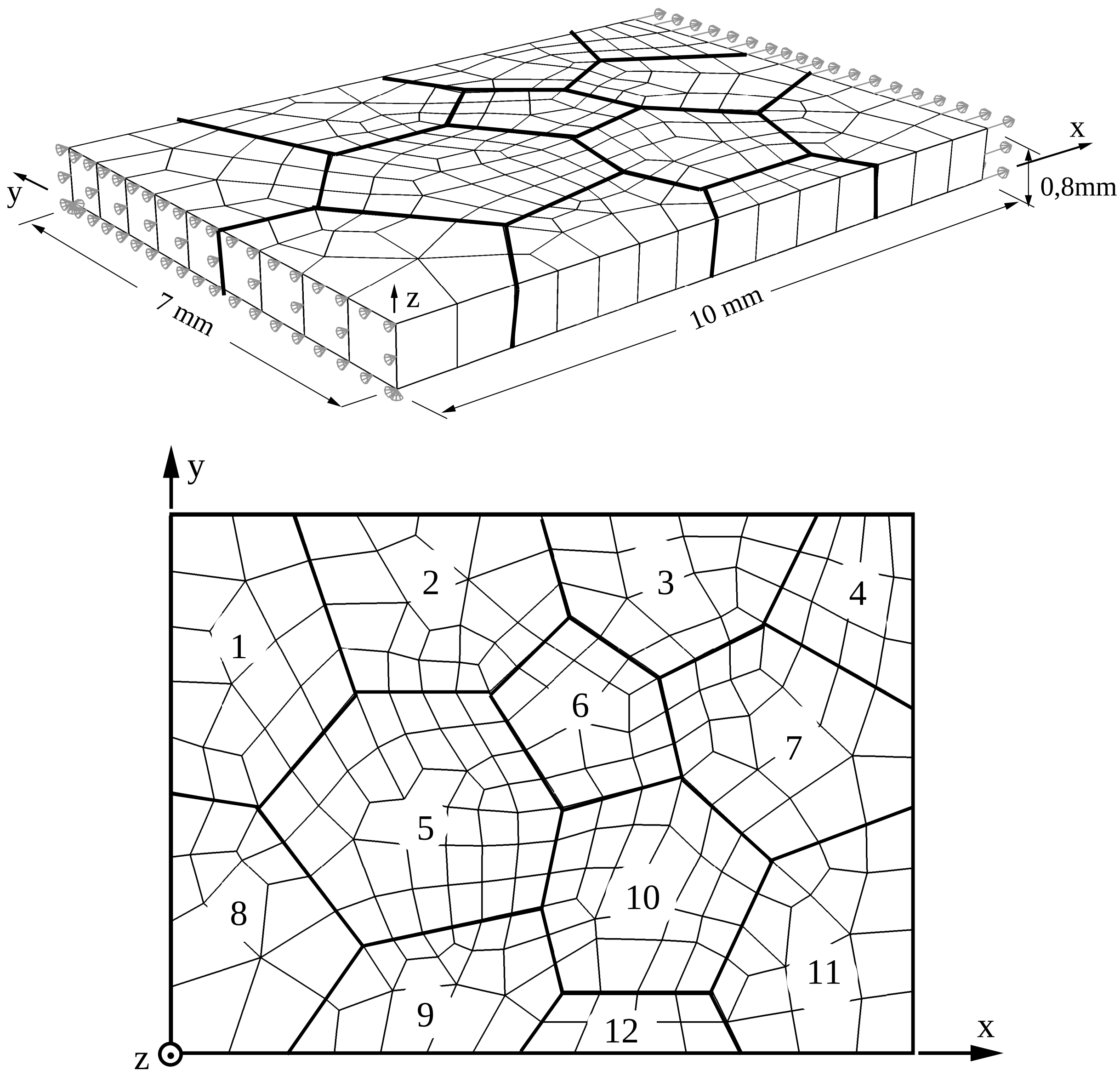


Abbildung 33: Verwendetes FE-Modell zur Simulation vom Zugversuch an Polykristallen. Das obere Bild zeigt die perspektivische Darstellung mit Bemaßung, Lagerung und Belastung des Polykristalls. Die 2-dimesionale Darstellung in (x, y)-Ebene mit Nummerierung der Körner wird zur Auswertung der Ergebnisse verwendet (unten).

Gemäß der Betrachtung des Polykristalls als Verband mehrerer Einkristalle mit unterschiedlichen kristallographischen Orientierungen, die an des Korngrenzen miteinander verbunden sind, wird das FE-Modell für die Simulation an Polykristallen generiert (s. Abblidung 33 und bei Harder [39]). Das Modell besteht aus 211 in einer Schicht[10] angeordneten Acht-Knoten-Quarderelemanten (also Elementtyp C3D8 in ABAQUS). Vergleichbare Proben wurden bei Polykristall-Simulationsrechnungen von vielen Autoren (z.B. Teodosiu [95], Evers u.a [27]) eingesetzt. Die Probe ist an ihrem linken Rand ($x = 0$) gelagert, wo sämtliche Knoten in x-Richtung, also in Belastungsrichtung, festgehalten sind. Zusätzlich ist der Knoten im Ursprung in z-Richtung sowie der Knoten bei $(0, 7mm, 0)$ in y- und z-Richtung fixiert, wodurch keine Starrkörpertranslationen und -rotationen möglich sind. Hingegen sind Querkontraktionen erlaubt, so dass es zu keinen zusätzlichen Zwängen durch die Lagerung kommt.

Zum Zugversuch an diesem Polykristall wird die Simulation verschiebungsgesteuert durchgeführt. Dabei werden sämtliche Knoten am rechten Rand ($x = 10mm$) der Probe mit der gleichen konstanten Geschwindigkeit $\dot{u}_x = 1,0 \cdot 10^{-5} mm/s$ in x-Richtung verschoben, was zu einer globalen Dehnrate von $\dot{\epsilon}_x = 1,0 \cdot 10^{-6} s^{-1}$ führt.

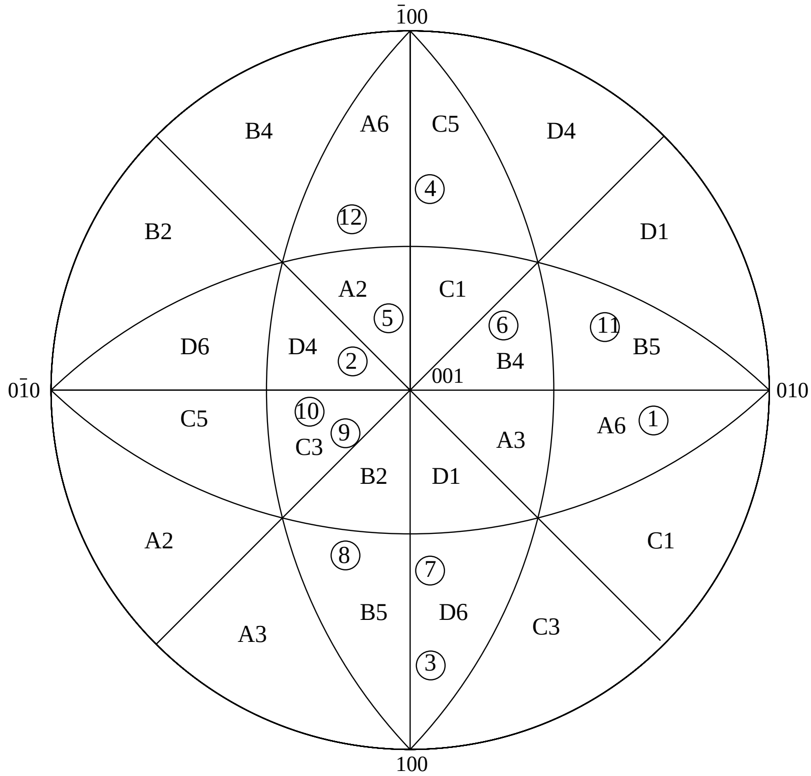


Abbildung 34: Kristallographische Orientierungen der 12 Körner relativ zur Zugachse in inverser stereographischer Projektion mit Angabe der am günstigsten orientierten Gleitsysteme (nach Notation von Schmid und Boas).

Die Werkstoffparameter in jedem Korn sind gleich und entsprechen exakt denen der Einkristallsimulation. Die kristallographischen Orientierungen der Körner relativ zur Zugachse

[10] Aus Rechenzeitgründen wurde auf Netzverfeinerungen in z-Richtung verzichtet. Kontrollrechnungen von Harder [39] mit mehreren Elementschichten zeigten keine wesentlichen Veränderungen der Ergebnisse bzw. beobachteten Phänomene. Auch bei eigenen Kontrollrechnungen für ein kleineres FE-Modell mit 3 Körnern bleiben die wichtigen Eigenschaften an korngrenzennahen Umgebungen, an Tripelpunkten sowie in Korninnern unverändert.

(x-Achse) sind in inverser streographischer Projektion mit Angabe der am günstigsten orientierten Gleitsysteme (nach Notation von SCHMID und BOAS) in Abbildung 34 dargestellt. Ihre Wahl ist willkürlich, wobei sich für eine gute Repräsentation eines realen Gefüges ein möglichst größes Spektrum unterschiedlicher Orientierungen darstellen soll. Während die Körner 3, 4 und 11 für Einfachgleitung anfänglich orientiert sind, liegen die restlichen Körner für Mehrfachgleitung günstig.

4.3.2 Ergebnisse der Simulationsrechnungen

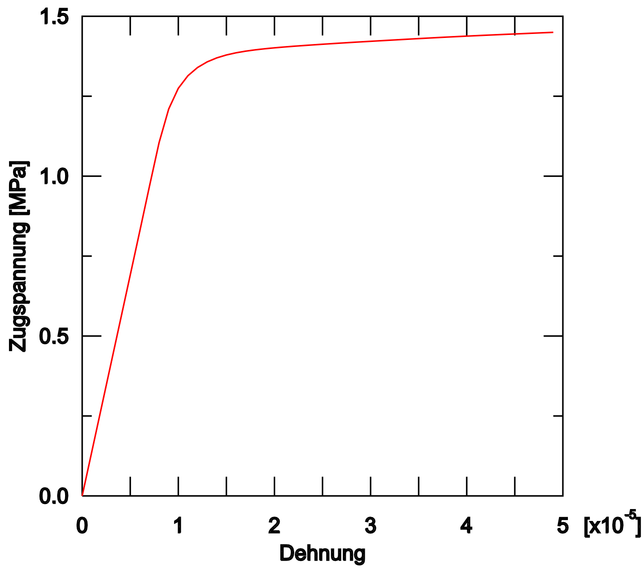


Abbildung 35: Globale Spannungs-Dehnungs-Kurve, Anfangsphase des Zugversuchs.

Zur Auswertung der Simulationsergebnisse wird das globale Spannungs-Dehnungs-Diagramm des Zugversuchs zunächst betrachtet (Abbildung 35). Dabei wird nur die Anfangsphase der Verfestigungskurve gezeigt, bei der die Übergangsphase von elastisch auf plastisch untersucht wird. Die global plastische Verformung beginnt schon bei kleiner Dehnung von $0,9 \cdot 10^{-5}$. Die kritische Fließspannung beträgt ca. $1,2MPa$. Der experimentelle Wert für 99,98% reines Kupfer liegt bei ca. $1,0MPa$ (s. HONEYCOMBE [48]).

Die lokale Belastung und Dehnung auf den Abbildungen 36 und 37 im noch elastischen Bereich zeigen schon ihre Inhomogenität. Diese findet nicht nur von Korn zu Korn, sondern auch innerhalb einzelner Körner statt. Verantwortlich dafür ist der Zwang zum Zusammenhalt des Kristallverbandes, dessen einzelne Bestandteile sich aufgrund ihrer Anisotropie und unterschiedlichen Orientierung eigentlich inkompatibel verformen würden. Das Verhältnis von Maximal- zu Minimalwert liegt bei σ_x und ϵ_x etwa bei 4. Im Vergleich mit der globalen Verfestigungskurve kann es zu lokalen Überhöhungen in beiden Fällen um den Faktor 1,4 führen. Die Spannungsüberhöhung an der Korngrenzen und Tripelpunkten ist allerdings noch nicht deutlich erkennbar.

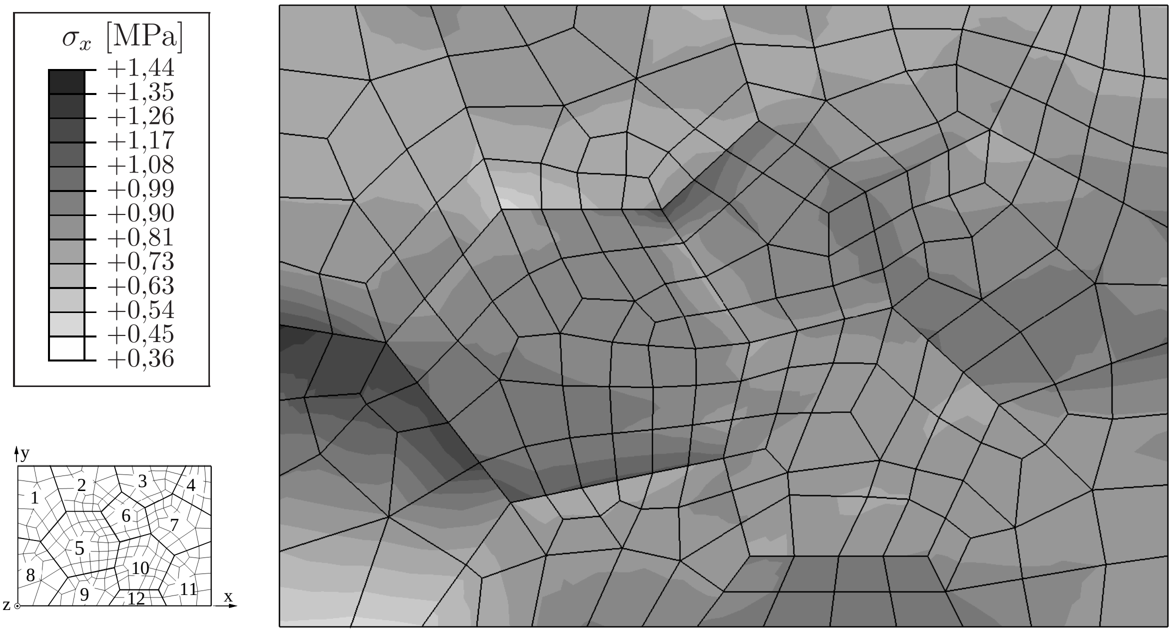


Abbildung 36: Zugspannungsverteilung σ_x in der global elastsichen Verformungsphase.

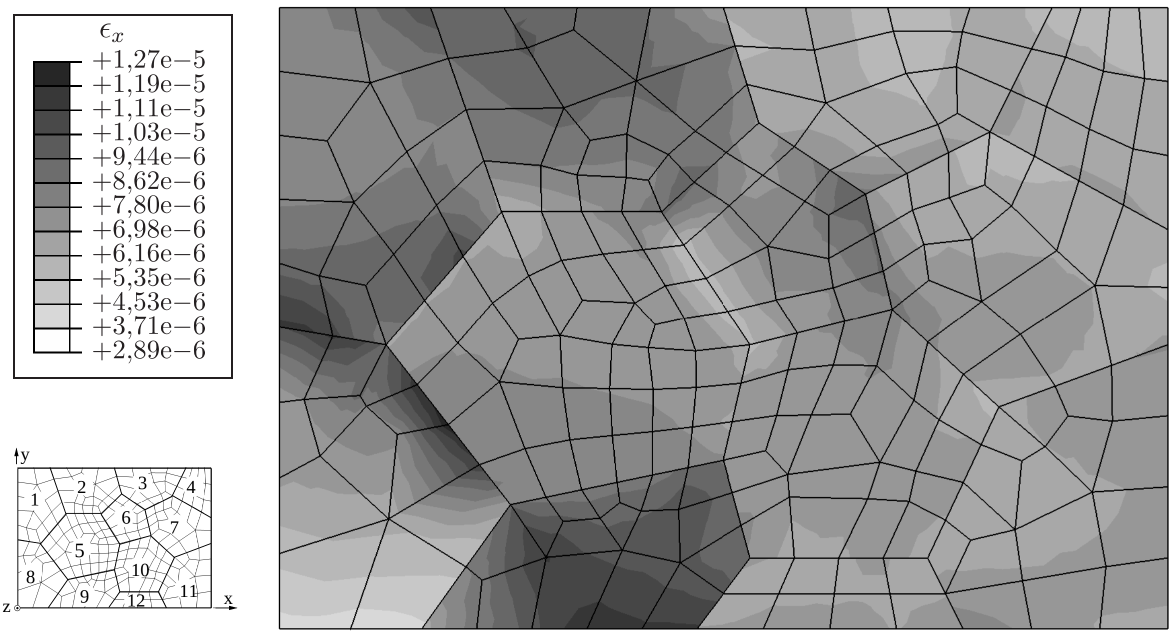


Abbildung 37: Dehnnungsverteilung ϵ_x in der global elastsichen Verformungsphase.

Beobachtet man den weiteren Verlauf des Zugversuchs, so ist zunächst festzustellen, dass sich die aktiven Zonen stärker herausprägen. Sie beginnen zusammenzuwachsen und führen zur relativ starken Spannungserhöhung an einigen Korngrenzen und zur Inhomogenität der Spannung an einigen Tripelpunkten (Abbildung 38). Diese werden im Fortgang der plastischen Verformung immer ausgeprägter. Abbildung 39 zeigt die Spannungsverteilung σ_x bei einer globalen Dehnung von $5 \cdot 10^{-5}$, bei der es sich ein gewissermaßes Ende des elastisch-plastischen Übergangsbereichs markiert.

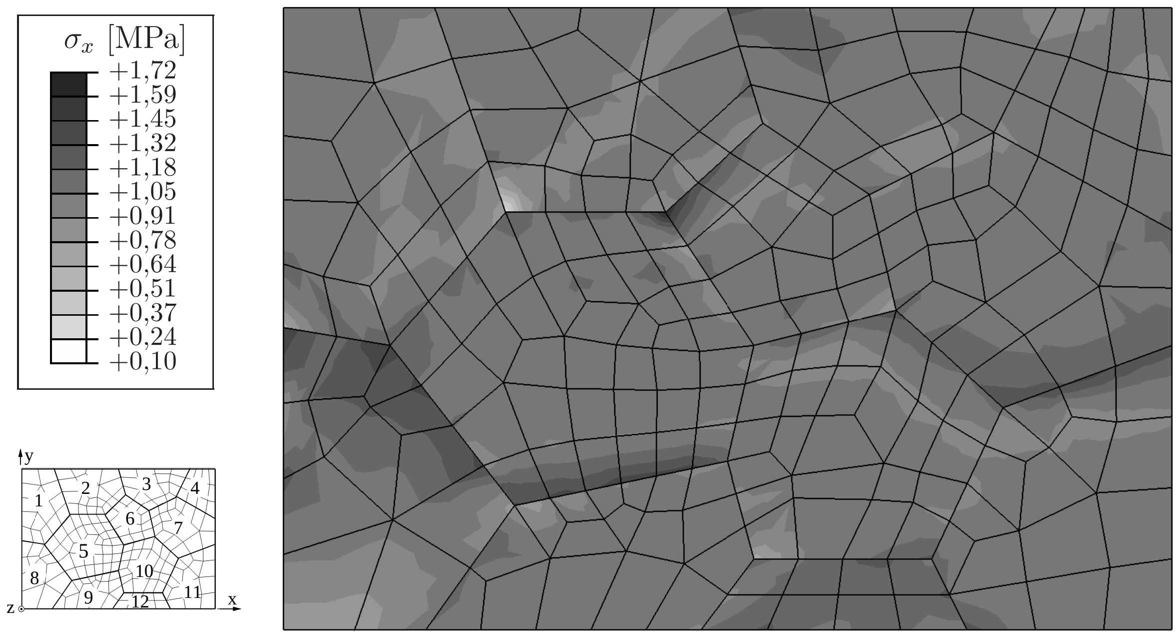


Abbildung 38: Zugspannungsverteilung σ_x bei globaler Dehnung von $2 \cdot 10^{-5}$.

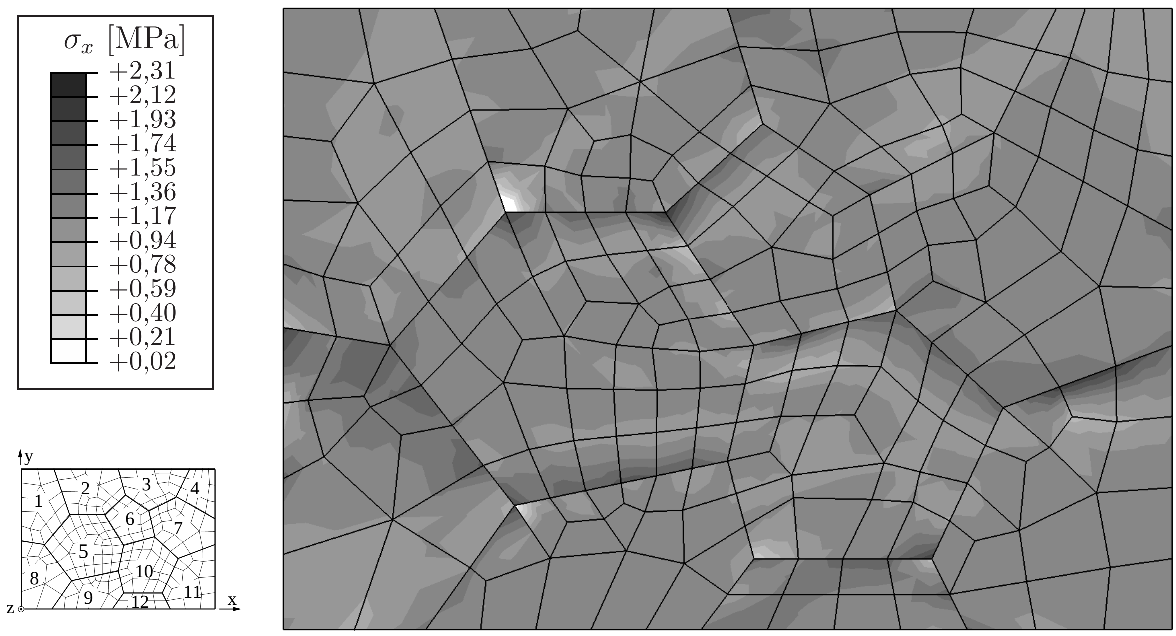


Abbildung 39: Zugspannungsverteilung σ_x bei globaler Dehnung von $5 \cdot 10^{-5}$.

Das Verhältnis von Maximal- zu Minimalwert erhöht sich bei σ_x von 4 im global elastischen Bereich auf über 10 nach diesem Lastschritt. Besonders finden sich stark erhöhte Spannungen überwiegend an einer Seite der in Zugrichtung liegenden Korngrenzen, was zu einer möglichen späteren Korngleitung an der Korngrenze führen kann. Weiterhin treten an den Tripelpunkten zwischen den Körnern z.B. 1/2/5, 2/5/6, 5/8/9 und 10/11/12 sehr starke inhomogene Spannungsverteilungen auf. Besonders gefährdet ist der am Tripelpunkt der

Körner 1/2/5, bei dem Spannungen vom Minimal- bis zum Maximalwert auftreten.

Die starke Spannungsüberhöhung an Korngrenzen sowie die hohe Inhomogenität an Tripelpunkten lassen sich auf Zwang zum Zusammenhalt der Körner zurückführen. Hingegen sind die Spannungen im Inneren der Körner relativ homogen verteilt. Der Durchschnittswert liegt bei $0,7 MPa$, also 1/3 des Maximalwertes an einigen Korngrenzen oder Tripelpunkten.

Zur Demonstration der mehrachsigen Belastung dient die Darstellung der Normalspannung σ_y in Abbildung 40, auf der sowohl Zug- als auch Druckbereiche zu beobachten sind. Die hohe Zugbelastung konzentriert sich in korngrenzennaher Umgebung zwischen Korn 5 und Korn 6 und am Tripelpunkt der Körner 7/10/11, während die Druckbelastung am Tripelpunkt der Körner 1/2/5 auftritt. Betrachtet man nun die gesamte Spannungsverteilung für alle Komponenten, so ist die von Misessche[11] Spannung σ_{vM} zu wählen (Abbildung 41), die sich als kontinuummechanische Größe für die Beschreibung der Formänderungsfestigkeit des Körpers eignet. Es ist deutlich zu sehen, dass die Spannungsüberhöhungen an fast allen Korngrenzen aufgetreten sind, und eine relativ homogene Spannungsverteilung in Korninnern entstanden ist. Die Spannung in Korninnern liegt etwa 1/3 niedriger als die an den Korngrenzen. Die Inhomogenität an Tripelpunkten ist allerdings im Vergleich mit Korngrenzen etwa gleich.

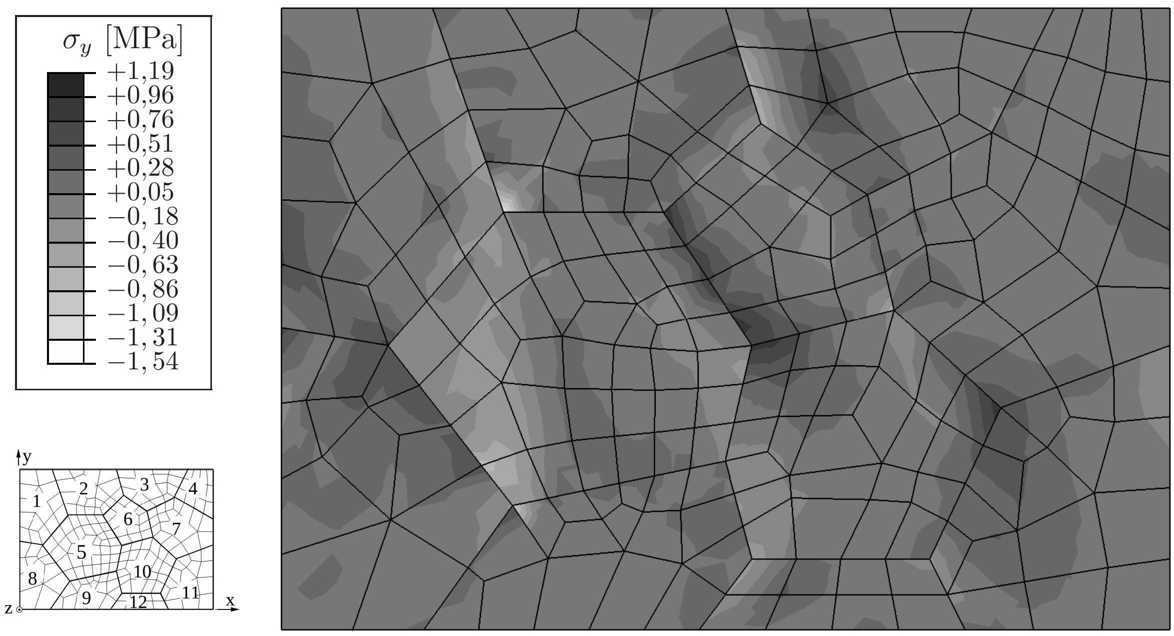


Abbildung 40: Normalspannungsverteilung σ_y bei globaler Dehnung von $5 \cdot 10^{-5}$.

Gegensätzlich zur Spannungsverteilung ist die Dehnungsverteilung in Abbildung 42. In der Umgebung von Korngrenzen ist die Verformung viel kleiner als in Korninnern, da die Korn-

[11]Die von Misessche Spannung ist definiert als

$$\sigma_{vM} = \left\{ \frac{1}{2}[(\sigma_x - \sigma_y)^2 + (\sigma_y - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_x)^2] + 3[\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{xz}^2] \right\}^{1/2}.$$

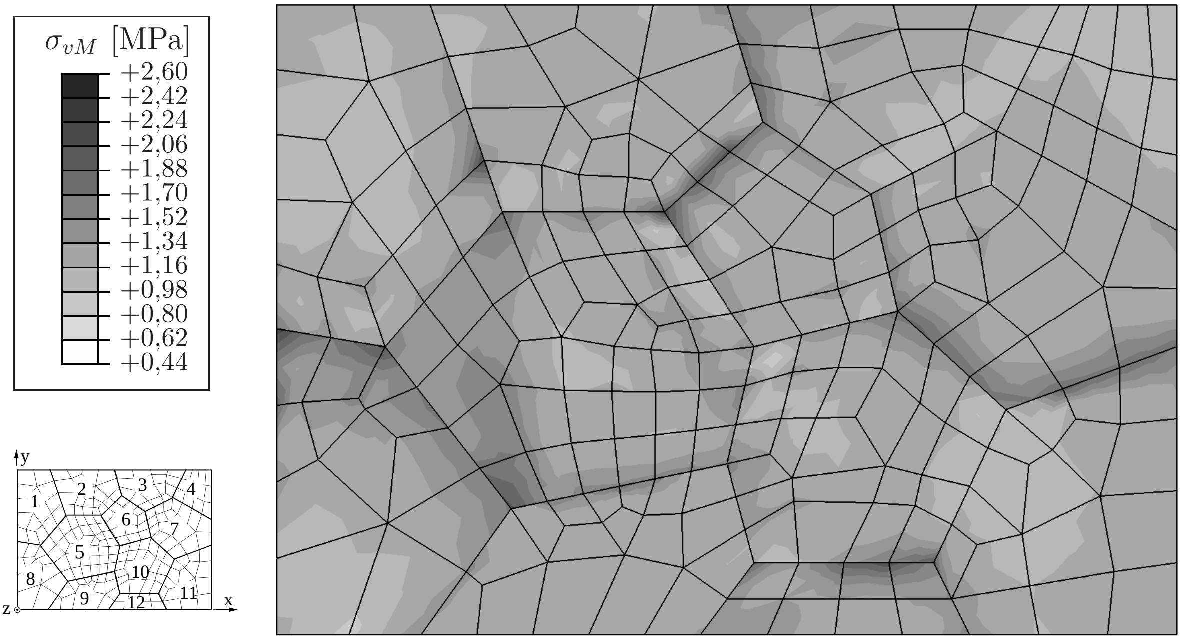


Abbildung 41: von Misessche Spannungsverteilung bei globaler Dehnung von $5 \cdot 10^{-5}$.

grenzen fester sind. Das Verhältnis von maximaler zu minimaler Dehnung erhöht sich auf 10. Bei der Betrachtung der Dehnungsverteilung ϵ_x (Abbildung 42) und der akkumulierten Abgleitung γ_{akk} (Abbildung 43) sehen wir eine Ähnlichkeit mit dem Zugversuch des Einkristalls (s. Abbildung 26). Diese Ähnlichkeit zeigt, dass die plastische Verformung im wesentlichen aus Versetzungsabgleitung auf Gleitsystemen resultiert, was am Anfang behauptet wurde. Die Gleitaktivität ist aufgrund der ortsabhängigen Gitterrotationen lokal unterschiedlich, auch innerhalb einzelner Körner.

Abbildung 44 zeigt die Verteilung des maximalen Betrags der Schmidschen Schubspannungen auf dem jeweils am stärksten belasteten Gleitsystem. Sie zeigt an, welche Körner günstig zur Zugsachse orientiert sind und damit einen größeren Schmidfaktor besitzen. Für die weiteren Untersuchungen ist von großer Bedeutung, die Anzahl der aktivierten Gleitsysteme zu erfahren. Tabelle 6 fasst die Aktivität der einzelnen Systemen in jedem Korn in dieser Anfangsphase zusammen, wobei auch Hinweise auf Einfach- und Mehrfachgleitung gegeben sind. Bei der Betrachtung der Abbildung 44 wird eine Tendenz erkennbar, dass die Körner an der linken Seite, also der fixierten Seite, (wie z.B. Körner 1, 2, 5, 8, 9) stark belastet sind. Im Korn 5 scheint lokale Gitterrotation vorhanden zu sein, da die Schmidsche Schubspannung stark inhomogen verteilt ist. Die Körner 3, 4, 7 und 11 sind relativ

Korn/ Aktivität	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
stark	A6	D4			A2, D1	B4	D6	B5	C3			
schwach	B5	A3	D6	C5	A3	A3	D1	B2	B2, D4	C3, D4	B5	A2, A6

Tabelle 6: Aktivität der einzelnen Systemen im jeweiligen Korn.

ungünstig zu Zugachse orientiert, so dass sie am wenigsten belastet sind. Ähnlich sieht die Verteilung der maximalen Versetzungsdichte auf dem jeweilige Gleitsystem in Abbildung 45 aus, denn große Schmidsche Schubspannungen erleichteren Versetzungsbewegung auf den entsprechenden Gleitsystemen.

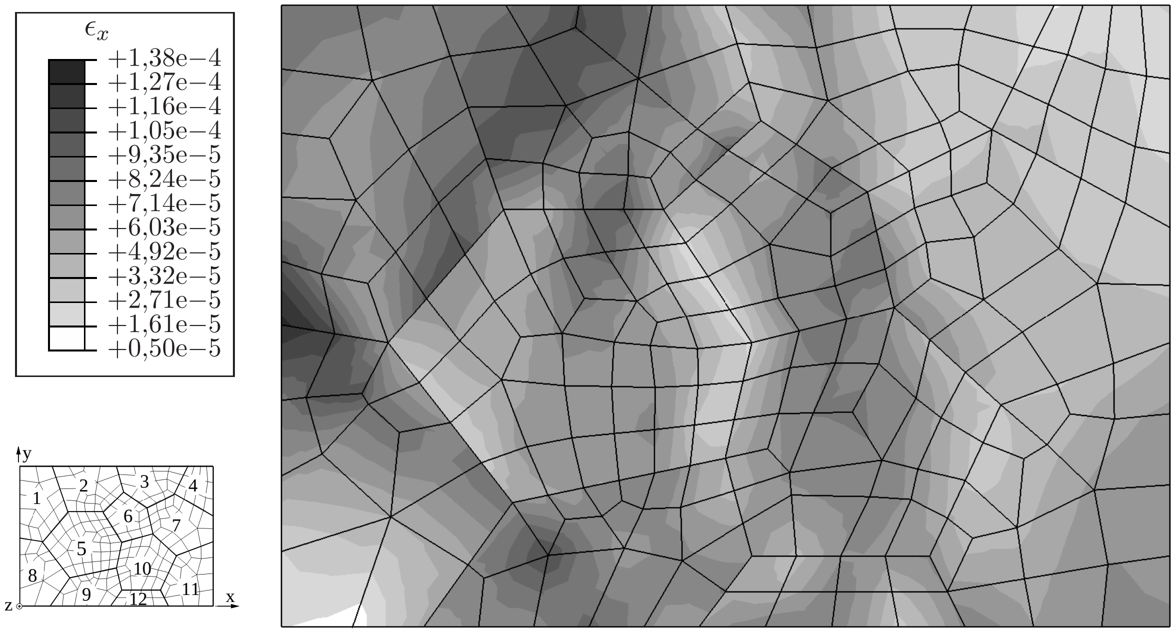


Abbildung 42: Dehnungsverteilung ϵ_x bei globaler Dehnung von $5 \cdot 10^{-5}$.

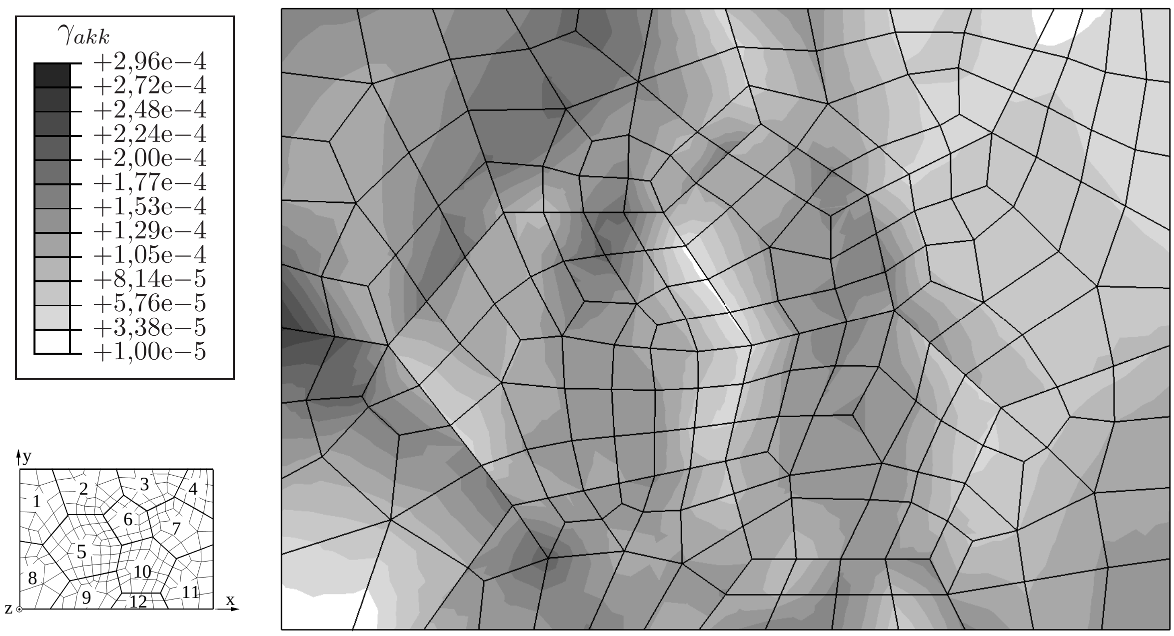


Abbildung 43: Verteilung der akkumulierten Abgleitung γ_{akk} bei globaler Dehnung von $5 \cdot 10^{-5}$.

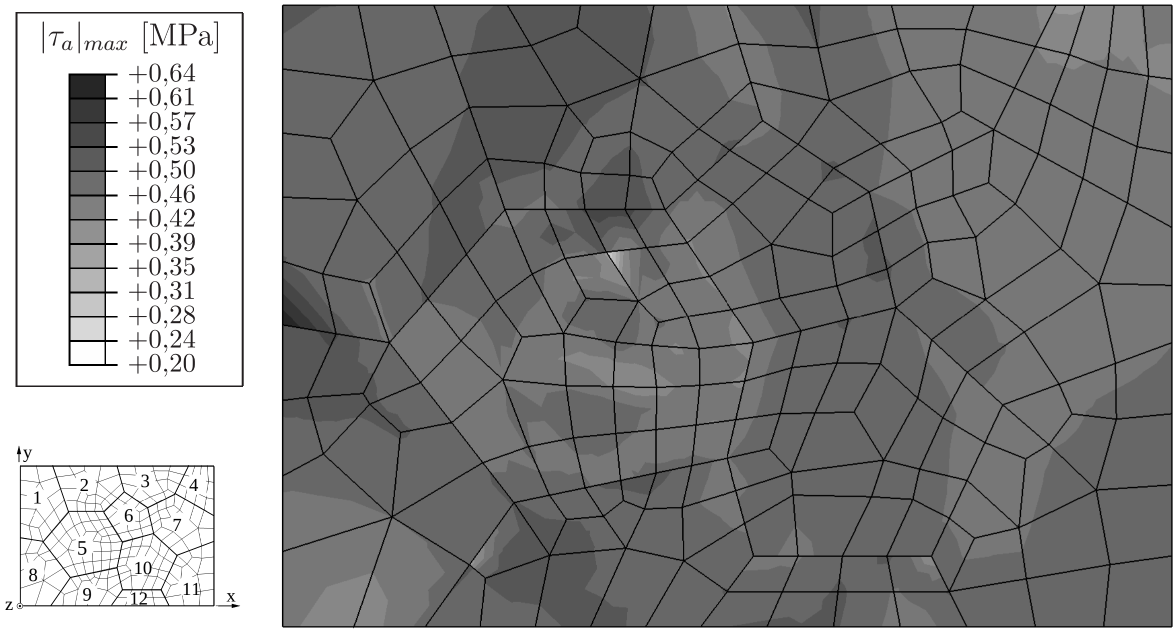


Abbildung 44: Maximale Betrag $|\tau_a|_{max}$ der Schmidschen Schubspannung auf dem jeweils stärksten belasteten System bei globaler Dehnung von $5 \cdot 10^{-5}$.

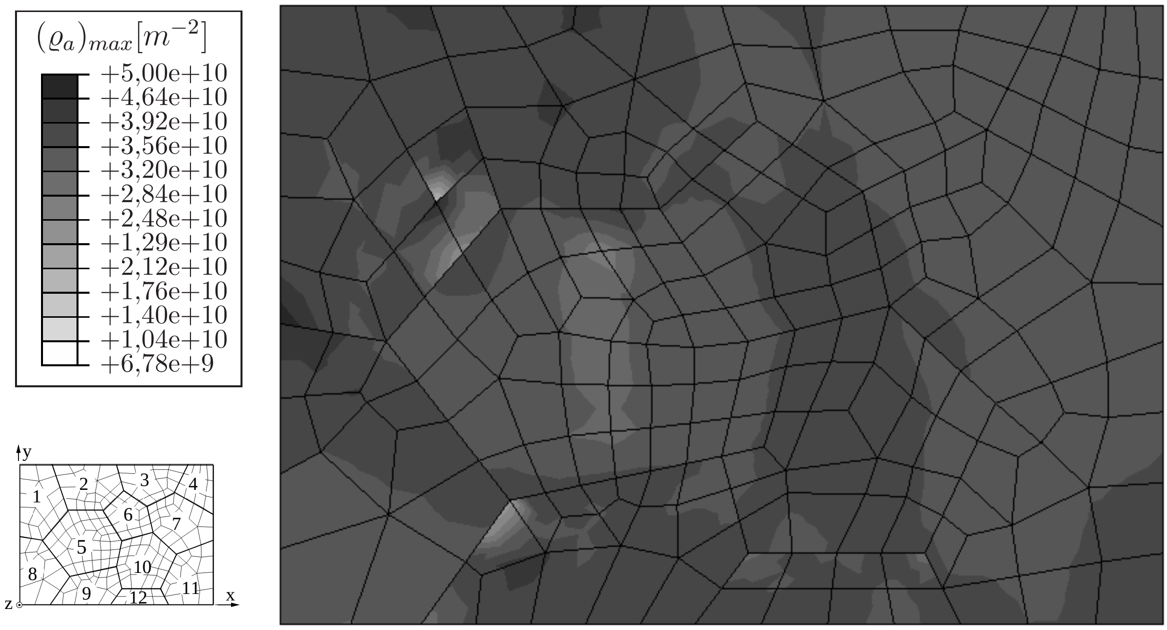


Abbildung 45: Verteilung der maximalen Versetzungsdichte $(\varrho_a)_{max}$ auf jeweiligem Gleitsystem bei globaler Dehnung von $5 \cdot 10^{-5}$.

Bei steigender Deformation wird die Stabilität der numerischen Integration zunehmend beeinträchtigt, da die Mehrfachgleitung durch Aktivierung der Gleitsysteme entsprechend erhöht wird. Gemäß des Werkstoffmodells mit expliziter Fließgrenze (s. Gleichung (116)) wird ein System aktiviert, wenn die effektive Schubspannung größer als die Fließspannung ist. Die neu aktivierten Systeme, die noch vernachlässigbaren kleinen Beitrag im Vergleich mit den von zuerst aktiven Systemen leisten, verursachen Instabilität bei der Integration der konstitutiven Gleichungen, so dass die Rechnung bei nicht-erfülltem Konvergenzkriterium abgebrochen wird. Aus diesem Grund wird willkürlich vorausgesetzt, dass ein System als aktiv gilt, wenn seine Gleitrate vom Betrag her 1% der maximal (Auswertung aller Gleitsysteme in der gesamten Probe über die komplette Versuchsdauer) beobachteten Gleitrate erreicht. Unter dieser Annahme werden einige wenig aktive Systeme aussortiert, was die Stabilität der numerischen Integration erhöht. Diese Technik führt zu Abweichungen in den quantitativen Ergebnissen, nicht aber bei qualitativen Eigenschaften, die in dieser Arbeit im Vordergrund stehen.

Wir betrachten nun große Verformung beim Zugversuch am Polykristall. Abbildung 46 zeigt die Spannungsverteilung σ_x bei einer globalen Dehnung von 1%. Beim Vergleich mit der Abbildung 39 bleiben die qualitativen Eigenschaften unverändert, also Spannungsüberhöhung an korngrenzennaher Umgebung und relativ homogene Spannungsverteilung in Korninnern. Unerwartet findet Druckbelastung an einigen Stellen (z.B an Korngrenzen zwischen Körnern 1/8, 3/7 und 7/11 sowie im Korn 9) in Zugrichtung statt. Dies könnte daran liegen, dass sich die betroffenen Umgebungen unter dem Zwang zum Zusammenhalt der Körner drehen, wobei es zur Änderung der lokalen Belastungsrichtung führt.

Bei der von Misesschen Spannungsverteilung (Abbildung 47) sind Spannungsüberhöhungen an Korngrenzen und relativ homogene Spannungsverteilung in Korninnern deutlicher zu sehen. Weiterhin ist das Verhältnis zwischen maximalen und minimalen Werten stark gestiegen, von ca. 5-fach bei $5 \cdot 10^{-5}$ globaler Dehnung (Abbildung 41) auf über 100-fach nach 1% gesamter Dehnung. Stark gefährdet sind die korngrenzennahen Umgebungen der Körner 1/8, 2/6, 3/6, 6/7, 7/10, 7/11 und 8/9, bei den die Spannungüberhöhung stattfindet.

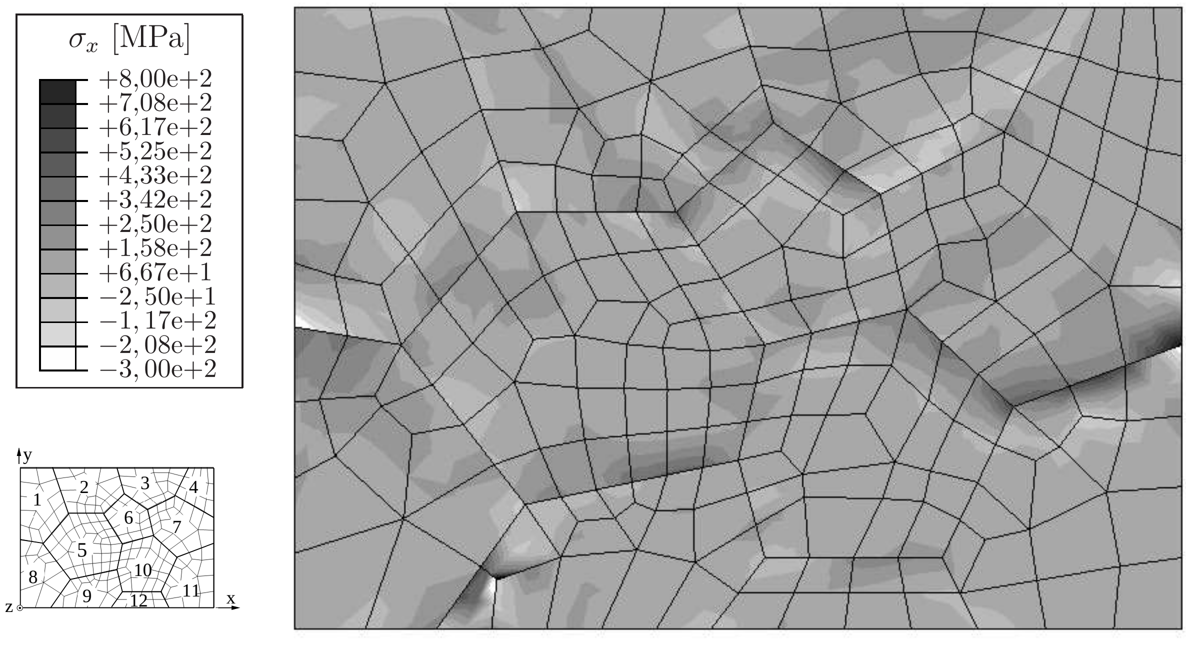


Abbildung 46: Verteilung der Spannung σ_x bei globaler Dehnung von 1%.

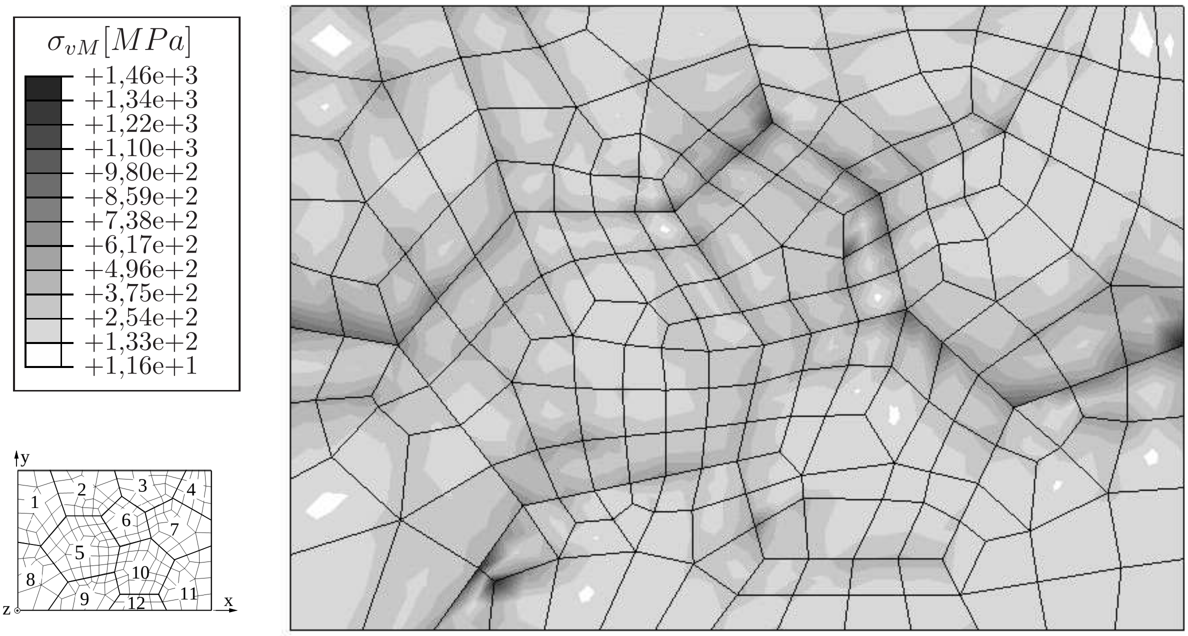


Abbildung 47: von Misessche Spannungsverteilung bei globaler Dehnung von 1%.

Abbildung 48 zeigt die Aufteilung der globalen Dehnung ϵ_x von 1% auf die einzelnen Körner. Der Vergleich mit den Abbildungen 37 und 42 offenbart, dass der Großteil der Deformation von den Körnern geleistet wurde, die sich schon zu Beginn des Versuchs platisch verformen. Neben den sich schon anfänglich herausbildenden Lokalisierungen in den um Korn 5 liegenden Körnern treten nun die starke Verformungszentren in den Körnern 3 und 11 in Erscheinung. Die Verformung im Korn 5 erscheint schwächer. Der Korn 5 ist sehr ,,hart" orientiert, so dass die Verformung an dessen inneren Korngrenzen sogar auf Null zurückgeht. Das ist auch der Grund, warum die Körner um Korn 5 starke Verformung erfahren. Im Allgemeinen ist die Verformung in der korngrenzennahen Umgebungen viel kleiner als im Korninneren. Es liegt an großer Festigkeit aufgrund der Anisotropie und der unterschiedlichen Orientierungen der Körner, so dass starke Spannungsüberhöhung an Korngrenzen auftritt. Die Inhomogenität der Verteilung hat quantitativ deutlich zugenommen: Sie verteilt sich vom minimalen Wert bei fast Null bis auf den maximalen Wert von 4%, obwohl die globale Dehnung bei 1% liegt.

Ähnlich zur Abbildung 48 ist die Aufteilung der akkumulierten Abgleitung, die hier nicht dargestellt wird. Diese Ähnlichkeit haben wir bei den Abbildungen 42 und 43 schon gesehen, woraus wir die wesentliche Verformung durch plastische Abgleitsvorgänge bestätigen. Für weitere Untersuchung soll auch die Aufteilung des maximalen Betrags der Schmidschen Schubspannung (Abbildung 49) in Betracht gezogen werden, die die Hinweise auf Aktivierung der Gleitsysteme in einzelnen Körnern gibt. Der Vergleich mit der Abbildung 44 zeigt eine deutliche Verlagerung der hohen Spannung an die Korngrenzen und der niedrigen Spannung in das Korninnere, so dass sich die Inhomogenität stark erhöht. Im Korn 7 tritt nun eine starke Belastung in Erscheinung, während der untere Teil des Korn 11 fast entlastet wird. Die Abbildung 48 ähnelt nun der Verteilung der von Misesschen Spannung (Abbildung 47).

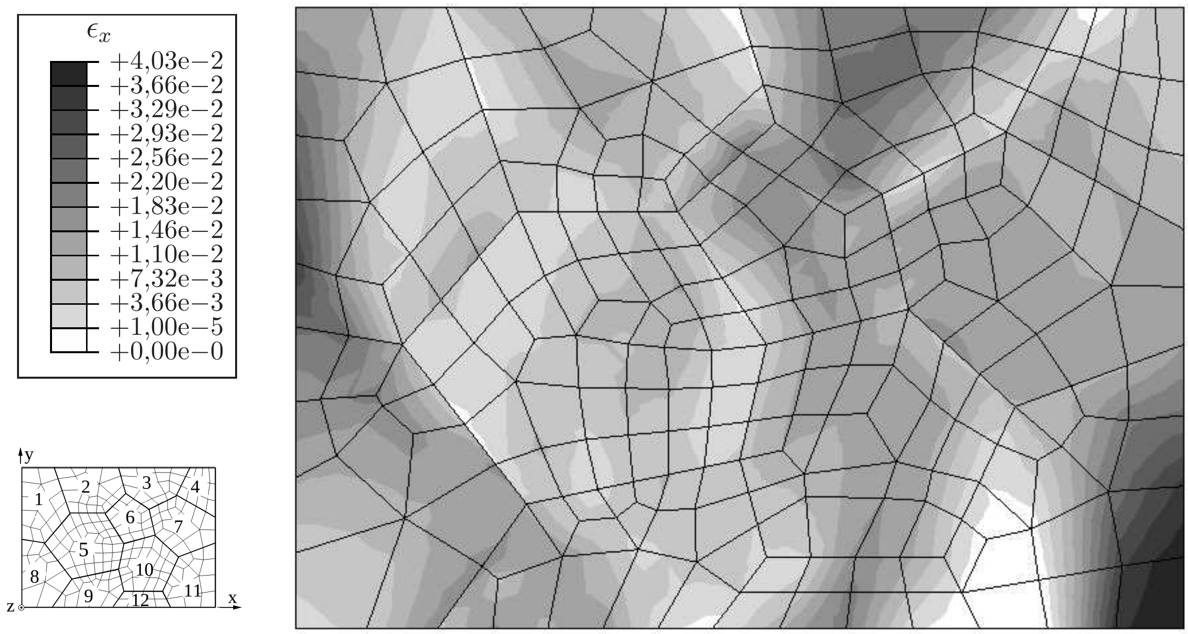


Abbildung 48: Dehnungsverteilung ϵ_x bei globaler Dehnung von 1%.

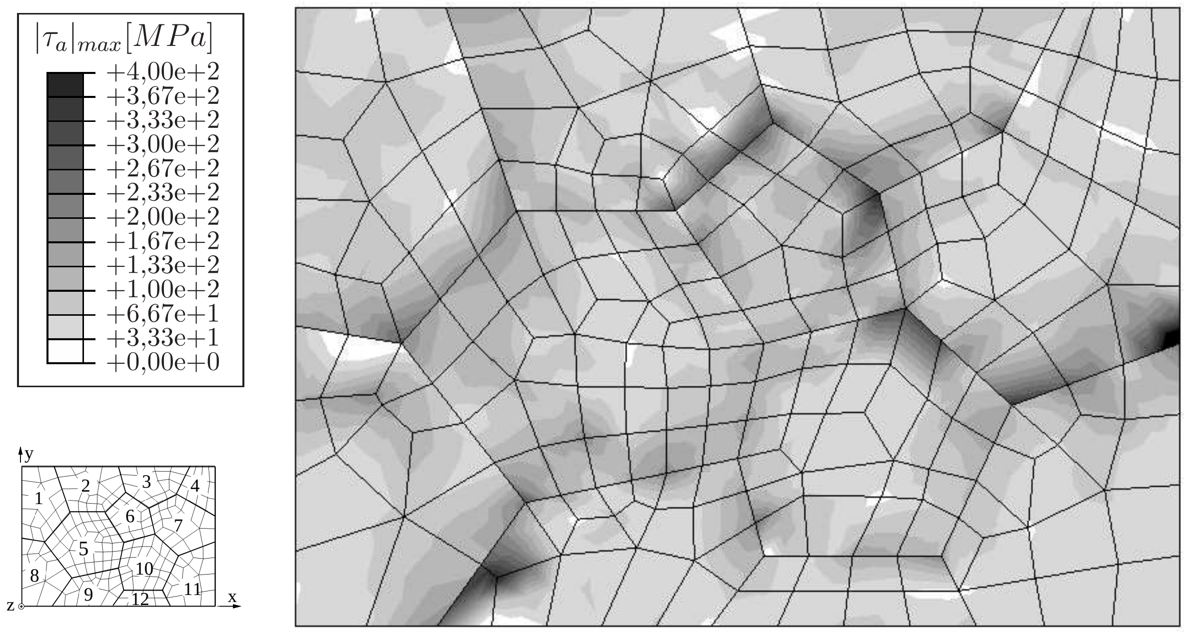


Abbildung 49: Maximale Betrag $|\tau_a|_{max}$ der Schmidschen Schubspannung auf dem jeweiligen stärksten belasteten System bei globaler Dehnung von 1%.

5 Zusammenfassung und Überblick

Plastische Verformung in Metallen erfolgt im wesentlichen durch Abgleitung auf kristallographischen Ebenen in kristallographischen Richtungen, also auf Gleitsystemen. Die Abgleitsvorgänge sind im wesentlichen direkt mit der Versetzungsbewegung in der Kristallstruktur verbunden, die durch Einwirkung von (Schmidscher) Schubspannung ermöglicht wird. Unter Schmidscher Schubspannung versteht man die Projektion des Spannungsvektors auf die Gleitrichtung des Systems. Erreicht die Schmidsche Schubspannung den Wert kritischer Fließspanung, beginnt auf dem entsprechenden System das plastische Gleiten. Das sogenannte Schmidsche Schubspannungsgesetz muss bei plastischer Verformung erfüllt werden.

In dieser Arbeit wurde ein neu modifiziertes Werkstoffmodell entwickelt, das das Verformungsverhalten von kristallplastischen Werkstoffe beschreibt. Das Modell ist geschwindigkeitsabhängig, also viskoplastisch, mit expliziter Fließgrenze und wurde für große Deformation in 3-Dimensionen formuliert. In diesem Werkstoffmodell ist insbesondere die Abhängigkeit der Gleitrate von der Entwicklung der Versetzungsdichte, die experimentell sowohl qualitativ als auch quantitativ bestimmt werden kann. Bei der Formulierung der Gleitrate werden nicht nur die statische sondern auch die dynamische Verfestigung berücksichtigt, die von der Versetzungsdichte und Temperatur abhängen. Sie besitzen isotrope Eigenschaften. Infolge der Wechselwirkung zwischen Versetzungen kommt die latente Verfestigung zwischen Gleitsystemen zustande. Neben isotroper Verfestigung wird kinematische Rückspannung als anisotrope Größe verwendet, die durch eine tensorielle Entwicklungsgleichung beschrieben wird. Sie spielt bei monotonen Zugversuchen an Einkristallen nur eine kleine Rolle. Hingegen ist sie sehr wichtig bei lastwechsenden Zugversuchen zur Beschreibung des Bauschinger-Effekts sowie bei Verformung an Polykristallen mit besonderen Effekten an den Korngrenzen.

Die numerische Umsetzung resultierte aus zwei wesentlichen Aufgaben: die lokale Integration von den konstitutiven nichtlinearen Werkstoffgleichungen und die Bestimmung der tangentiellen Steifigkeitsmatrix für aktuelle Verschiebung. Die beiden Aufgaben müssen dafür sorgen, dass an jeder Stützstelle, also dem sog. Gaußpunkt, ein Gleichgewichtszustand gefunden wird, und die Spannung in Abhängigkeit von der aktuellen Verschiebung berechnet werden kann. Für die erste Aufgabe wurde die implizite Eulersche Rückwärtsmethode verwendet. Bei jedem Integrationsschritt wird ein Newton-Raphson-Verfahren benötigt, um die Lösung interner Zustandsvariablen iterativ zu finden. Bei der Bestimmung der Steifigkeitsmatrix für große Deformation geht man von der Kirchhoffschen Spannung aus, die in Hinsicht auf den Deformationsgradienten linearisiert wird. Alle theoretischen Herleitungen wurden in einem C-Programm umgesetzt, das mit Hilfe einer Schnittstelle UMAT in das FE-Programm ABAQUS implementiert. Die Einbindung der Werkstoffgleichungen in einen geeigneten Finite-Elemente-Rahmen ermöglichte umfangreiche numerische Untersuchungen sowohl an Ein- als auch an Polykristallen. Dabei lag der Schwerpunkt auf einer qualitativen Analyse der Vorgänge, die experimentell bestimmt wurden. Auf Parameteranpassungen an konkrete Experimente wurde allerdings verzichtet.

Bei der Einkristallsimulation zur Kontrolle der Fähigkeit des Werkstoffmodells ist es gelungen, die wichtigen Eigenschaften wiederzugeben. Dabei ist die typische Einkristall-Fließkurve erhalten worden, obwohl die Erholung im Bereich III der Verfestigungskurve nicht ganz eindeutig aufgetreten ist, da das mitverantwortliche Quergleiten nur bedingt berücksichtigt wird. Die Aktivierung der einzelnen Gleitsysteme für Ein- und Mehrfachgleitung ist entsprechend richtig gelungen sowie der Abgleitungsverlauf auf Primär- und Sekundärsystem ist wie erwartet gegeben. Die Ähnlichkeit zwischen Einkristall-Fließkurve und Zugspannungs-Dehnungs-Kurve von Simulation bestätigen die experimentellen Ergebnisse von Takeuchi [92]. Die quadratische Entwicklung der Sekundärversetzungen, die im Bereich II die Primärversetzungen übersteigen, sowie die Sättigung der Primärversetzungen im Bereich III stimmen qualitativ mit den Messungen von Neuhaus u.a. [73], Mughrabi [69] und Essmann [23] überein. Richtig vorhergesagt wird auch der charakteristische Verlauf des latenten Verfestigungsverhältnisses über der akkumulierten Abgleitung.

Für den Zuzgversuch am Polykristall wurde eine Simulationsprobe gewählt, die aus zwölf in Dickenrichtung durchgehenden Körnern besteht. Die Ergebnisse von dieser Simulation zeigen die Wiedergabe wichtiger Polykristalleigenschaften. Schon bei makroskopisch elastischer Verformung kommt es infolge der inhomogenen Belastungsverteilung, die sich aufgrund der Anisotropie und unterschiedlichen Kornorientierungen einstellen, zu lokalen Fließvorgängen. Beim Übergang von makroskopisch elastischer zu plastischer Verformung bilden sich starke Spannungsüberhöhung in korngrenzennahen Umgebungen und große Inhomogenität an Tripelpunkten, während eine relativ homogene Spannungsverteilung in Korninneren stattgefunden hat. Diese Effekte werden bei weiterer Verformung ausgeprägter. Hingegen ist die Dehnungsverteilung, bei der die Verformung sehr schwach an Korngrenzen und stark in Korninneren stattfindet.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass das Modell die wichtigen Kristalleigenschaften qualitativ wiedergibt. Bei quantitativer Betrachtung scheinen die gewählten Modellparameter (s. Tabelle 5) das Material fester zu machen, so dass hohe Spannung für einen Verformungsgrad benötigt wird. Das ist auch der Grund für die Instabilität bei der numerischen Umsetzung, besonders bei Simulation von Polykristallverformung. Es wird in der Zukunft erforderlich sein, die Modellannahmen durch den direkten Vergleich mit Experimenten zu überprüfen und gegebenenfalls zu verbessern. Hierzu sollen verschiedene Vergleiche mit Ein- und Polykristallversuchen gemacht werden, wobei vor allem die Messung von Dehnungsfeldern sowie die Gleitlinienbeobachtung zur Bestimmung der Versetzungsdichte als sinnvoll erachtet werden. In diesem Zusammenhang sollen numerische Anpassungsstrategien verstärkt eingesetzt werden, um die richtigen Modellparameter zu bestimmen und damit die quantitativen Aussagen zu präzisieren. Es ist ebenfalls wichtig, größeren Verformungsgrad bei der Zugversuchsimulation am Polykristall zu erreichen, womit Rissvorgänge entsprechend untersucht werden können.

A Anhang

A.1 Tensorrechnung und Notationen

Für eine einheitliche Darstellung von Tensoren in mathematischen Formen und Gleichungen ist wie folgt geregelt: Die Tensoren erster Ordnung sind mit kleinen fettgedruckten Buchstaben (z.B. $\mathbf{u}$) bzw. mit Vektorsymbol (z.B. $\vec{A}$ oder $\vec{\epsilon}$), die Tensoren zweiter Ordnung mit größen fettgedruckten Buchstaben (z.B. $\mathbf{A}$) bzw. kleinen griechischen fettgedruckten Buchstaben (z.B. $\boldsymbol{\sigma}$) und die Tensoren vierter Ordnung mit größen kalligraphischen Buchstaben (z.B. $\mathcal{C}$) gekennzeichnet.

Im Abschnitt 3 wurde die Einsteinsche Summationskonvention stillschweigend verwendet, die beispielweise für zwei (Euler-)Tensoren zweiter Ordnung $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ darstellt:

$$A_{ik}B_{kj} \equiv \sum_{k=1}^{3} A_{ik}B_{kj} \ .$$

Entsprechend werden das innere Produkt von Tensoren mit unterschiedlichen Ordnungen

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}\cdot\mathbf{v} &= u_i v_i \ , \\
(\mathbf{A}\cdot\mathbf{v})_i &= A_{ij}v_j \ , \\
\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} &= A_{ik}B_{ki} \ , \\
(\mathcal{C}\cdot\mathbf{A})_{ij} &= C_{ijkl}A_{lk} \ , \\
(\mathcal{C}\cdot\mathcal{D})_{ijkl} &= C_{ijmn}D_{nmkl}
\end{aligned}$$

und das äußere Produkt von Tensoren (z.B. SVENDSEN [91]):

$$\begin{aligned}
(\mathbf{u}\otimes\mathbf{v})_{ij} &= u_i v_j \ , \\
(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{ijkl} &= A_{ij}B_{kl} \ , \\
(\mathbf{A}\underline{\otimes}\mathbf{B})_{ijkl} &= A_{ik}B_{lj} \ , \\
(\mathbf{A}\overline{\otimes}\mathbf{B})_{ijkl} &= A_{il}B_{kj}
\end{aligned}$$

dargestellt. Die Lineare Abbildung eines Tensors zweiter Stufe $\mathbf{B}$ durch einen Tensor vierter Stufe $\mathcal{C}$ wird wie folgt gegeben:

$$\mathcal{C}[\mathbf{B}] = C_{ijkl}B_{kl} \ .$$

Dadurch sind einige Kombinationen von Tensorprodukten für die verwendete Ableitung von Tensoren zu beachten:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{A}\otimes\mathbf{C})[\mathbf{B}] &:= (\mathbf{B}\cdot\mathbf{C})\mathbf{A} \ , \\
(\mathbf{A}\underline{\otimes}\mathbf{C})[\mathbf{B}] &:= \mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{C} \ , \\
(\mathbf{A}\overline{\otimes}\mathbf{C})[\mathbf{B}] &:= \mathbf{A}\mathbf{B}^T\mathbf{C} \ .
\end{aligned}$$

Für (Euler-)Tensoren zweiter Ordnung sind Jacobi- und Lie-Klammer gemäß:

$$\langle\mathbf{A},\mathbf{B}\rangle = (\mathbf{I}\underline{\otimes}\mathbf{B} + \mathbf{B}\underline{\otimes}\mathbf{I})[\mathbf{A}], \qquad [\mathbf{A},\mathbf{B}] = (\mathbf{I}\underline{\otimes}\mathbf{B} - \mathbf{B}\underline{\otimes}\mathbf{I})[\mathbf{A}] \ .$$

A.2 Stereographische Projektion

Für die Bestimmung der Lage der Zugachse relativ zur Elementarzelle des Kristalls bietet sich die stereographische Projektion an (Abbildung 50). Man stellt sich dazu den Ursprung des Kristallkoordinatensystems im Mittelpunkt einer Einheitskugel vor. Die Zugachse, die durch den Mittelpunkt verlaufe, schneidet eine Halbkugeloberfläche im Punkt S. Dieser wird mit dem Projektionspol, z.B. (0, 0, -1) verbunden. Der Durchstoßpunkt P durch die Ebene $z = 0$ kennzeichnet die auf dieser Ebene pojizierte Lage der Zugachse. Wählt man z.B. die Kristallkoordinaten so, dass das Gleitsystem (111)[$\bar{1}$01] (unter der Annahme einachsiger Zugbelastung) zuerst aktiviert wird, so liegt die Projektion im Standarddreieck [001] – [011] – [$\bar{1}$11].

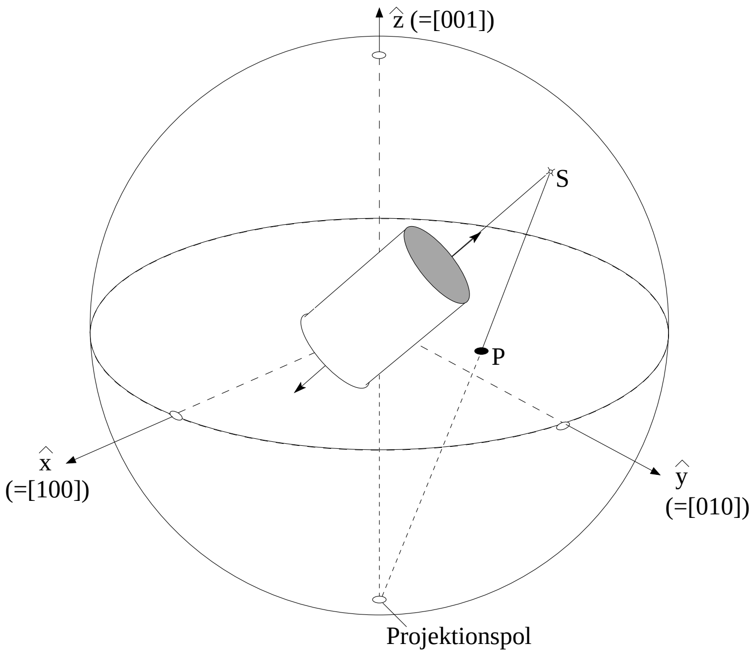


Abbildung 50: Stereographische (001)-Projektion des kubischen Gitters.

Die stereographische Projektion hat folgende Eigenschaften (s. Haasen [36]):

- Ein Kreis auf der Kugel wird als ebener Kreis abgebildet; sein Mittelpunkt stimmt im allgemein nicht mit dem des ebenen Kreises überein.
- Großkreise auf der Kugel werden als Kreisbögen abgebildet, die den Grundkreis in zwei diametralen Punkten schneiden.
- Die Projektion ist winkeltreu, aber nicht flächentreu.

Bei der praktischen Arbeit mit der stereographischen Projektion kann man mit Hilfe vom Wulffschen Netz den Winkel zwischen zwei Kristallrichtungen oder die Projektion der Zugachse bestimmen (s. Haasen [36]).

A.3 Transformationsmatrizen

Die verwendeten Tensoren in dieser Arbeit wurden im (lokalen) Kristallkoordiantensystem formuliert, während das FE-Programm ABAQUS im (globalen) Probenkoordinatensystem berechnet wurde. Es ist daher notwendig, das lokale System $\{\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*\}$ in das globale System $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ zu überführen. Es bietet sich die drei Eulerwinkel für aufeinanderfolgende Drehungen um die definierten Achsen wie foglt (vgl. Abbidung 51):

- Drehung des lokalen Systems mit dem Winkel $-\rho$ um die $\mathbf{e}_3^*$-Achse, d.h. um ρ im Uhrzeigersinn, überführt $\mathbf{e}_1^*$ in $\mathbf{s}$ und $\mathbf{e}_2^*$ in $\mathbf{t}_1$.
- Drehung des Systems $\{\mathbf{s}, \mathbf{t}_1, \mathbf{e}_3^*\}$ mit dem Winkel $-\theta$ um die $\mathbf{s}$-Achse überführt $\mathbf{t}_1$ in $\mathbf{t}_2$ und $\mathbf{e}_3^*$ in $\mathbf{e}_3$.
- Drehung des Systems $\{\mathbf{s}, \mathbf{t}_2, \mathbf{e}_3\}$ mit dem Winkel $-\alpha$ um die $\mathbf{e}_3$-Achse überführt $\mathbf{s}$ in $\mathbf{e}_1$ und $\mathbf{t}_2$ in $\mathbf{e}_2$.

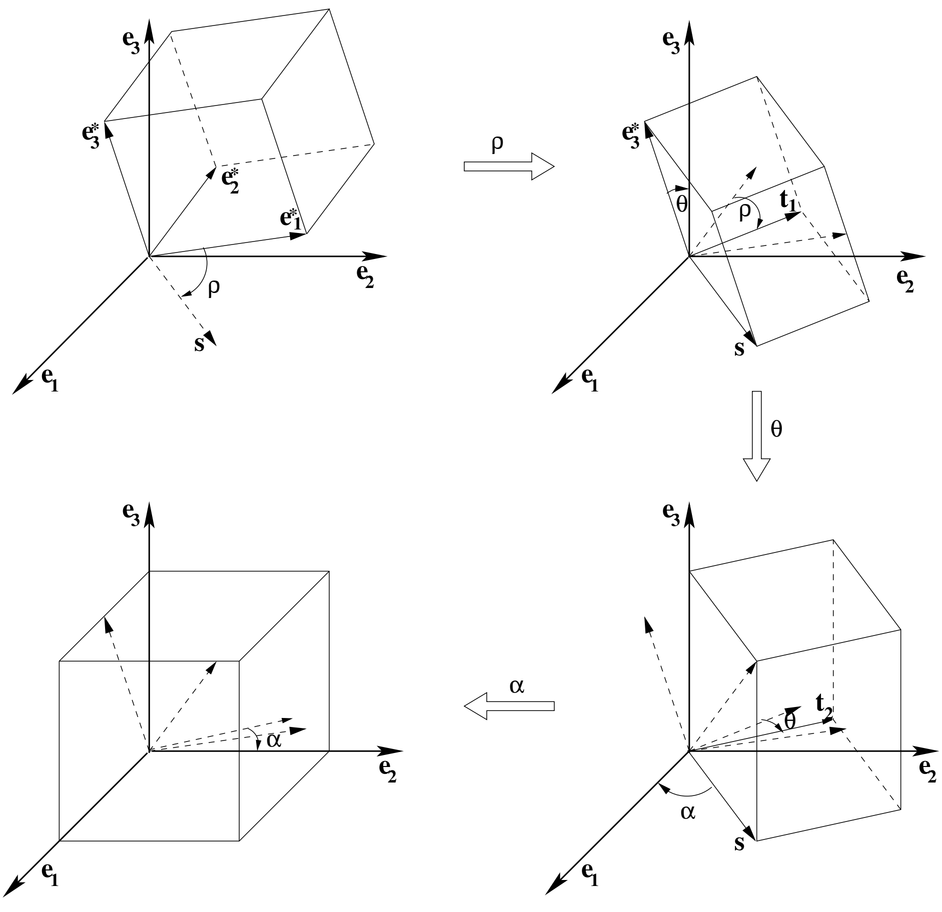


Abbildung 51: Überführung des lokalen Systems $\{\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*\}$ ins globale System $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ mit Hilfe der Eulerschen Drehwinkel $\{\alpha, \theta, \rho\}$.

Dabei liegt der Vektor $\mathbf{s}$ auf der Schnittgerade von $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$- und $\{\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*\}$-Ebene. Die Eulerschen Drehwinkel $\{\alpha, \theta, \rho\}$ sind als die Winkel zwischen jeweiligem Vektorpaar $(\mathbf{e}_1, \mathbf{s})$, $(\mathbf{e}_3, \mathbf{e}_3^*)$ und $(\mathbf{e}_1^*, \mathbf{s})$ bezeichnet.

Die Transformationsmatrix $\mathbf{Q}$ zur Überführung vom lokalen System $\{\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*\}$ in das globale System $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ hat in Abhängigkeit von den Eulerwinkel die folgende Gestalt:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\rho - \sin\alpha\cos\theta\sin\rho & \sin\alpha\cos\rho + \cos\alpha\cos\theta\sin\rho & \sin\theta\sin\rho \\ -\cos\alpha\sin\rho - \sin\alpha\cos\theta\cos\rho & -\sin\alpha\sin\rho + \cos\alpha\cos\theta\cos\rho & \sin\theta\cos\rho \\ \sin\alpha\sin\theta & cos\alpha\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{164}$$

A.4 Elastizitätstensor

Das elastische Verhalten eines Materials lässt sich durch das Hookeschen Gesetz beschreiben:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{C}_e[\boldsymbol{\epsilon}] \qquad \text{bzw.} \qquad \sigma_{ij} = C_{ijkl}\,\epsilon_{kl}\,. \tag{165}$$

Dabei werden die zweistufigen Tensoren der Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ und elastischen Dehnung $\boldsymbol{\epsilon}$ über den Elastizitätstensor vierter Ordnung $\mathcal{C}_e$ verknüpft. Im lokalen Kristallkoordianetensystem $\{\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*\}$ sowie globalen Probenkoordianetensystem $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ ist der vierstufige Tensor $\mathcal{C}_e$ bei Verwendung der Einsteinschen Summationskonvention wie foglt dargestellt:

$$\mathcal{C}_e = C^*_{ijkl}\mathbf{e}_i^* \otimes \mathbf{e}_j^* \otimes \mathbf{e}_k^* \otimes \mathbf{e}_l^* = C_{ijkl}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l\,. \tag{166}$$

Die Transformation der Tensorkomponenten vom lokalen ins globale Koordinatensystem und umgekehrt ist durch die Transformationsmatrix $\mathbf{Q}$ gegeben:

$$C^*_{ijkl} = C_{mnpq}Q_{mi}Q_{nj}Q_{pk}Q_{ql} \qquad \text{bzw.} \qquad C_{ijkl} = C^*_{mnpq}Q_{im}Q_{jn}Q_{kp}Q_{lq}\,. \tag{167}$$

Für die kfz-Kristalle ist $\mathcal{C}_e$ aus drei (in Metallkunde oft bezeichneten) Konstanten c_{11}, c_{12} und c_{44} aufgebaut, wobei die Komponente C^*_{ijkl} des Tensors $\mathcal{C}_e$ bezüglich des Kristallkoordinatensystems wie folgt bestimmt werden:

$$\begin{array}{lllllllll} C^*_{1111} & = & C^*_{2222} & = & C^*_{3333} & & & = & c_{11} \\[4pt] C^*_{1122} & = & C^*_{1133} & = & C^*_{2233} & & & = & \\ C^*_{2211} & = & C^*_{3311} & = & C^*_{3322} & & & = & c_{12} \\[4pt] C^*_{1212} & = & C^*_{1221} & = & C^*_{2112} & = & C^*_{2121} & = & \\ C^*_{1313} & = & C^*_{1331} & = & C^*_{3113} & = & C^*_{3131} & = & \\ C^*_{2323} & = & C^*_{2332} & = & C^*_{3223} & = & C^*_{3232} & = & c_{44} \end{array} \tag{168}$$

Die restlichen Komponenten von $\mathcal{C}_e$ sind identisch Null, allerdings nur bei Bezugnahme auf das Kristallkoordinatensystem.

A.5 Eulersche Vektorkomponenten

Die im Abschnitt 3.5.2 verwendete implizite Eulersche Rückwärtsmethode zur Integration der Materialgleichungen wird in diesem Abschnitt in einem allgemeinen Form beschrieben.

Es geht um die Zeitintegration eines gekoppelten nichtlinearen Differentialgleichungssystems gemäß:

$$\dot{\mathbf{y}} = \dot{\mathbf{y}}(\mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}, t); \qquad \mathbf{y}(t=0) = \mathbf{y}_0 \,, \tag{169}$$

wobei $\mathbf{y}$ ein Vektor mit N Komponente, und t die Zeit sind. Die Eulersche Rückwärtsmethode setzt voraus, dass der Anfangswert jedes Integrationsschritts $\mathbf{y}_0$ bekannt bzw. berechnet worden ist. Die Linearisierung des Gleichungssystems (169) für einen kleinen Zeitschritt Δt ergibt

$$\mathbf{y} - \mathbf{y}_0 = \dot{\mathbf{y}}(\mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}, t)\Delta t \,, \tag{170}$$

woraus es weiter zum sog. Eulervektor umgeformt wird

$$\mathbf{r}_{\mathbf{y}} := \mathbf{y} - \mathbf{y}_0 - \dot{\mathbf{y}}(\mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}, t)\Delta t = 0. \tag{171}$$

Für den Fall

$$\mathbf{y} = \vec{\varepsilon}_n := (\mathbf{F}_e, \vec{\vartheta}, \vec{\omega}, \vec{\varrho})_n \tag{172}$$

als der Vektor der Zustandsvariablen werden die Eulerschen Vektorkomponenten $\mathbf{r}_{\mathbf{F}_e}$ für $\mathbf{F}_e$ im $(n+1)$-ten lokalen Integrationsschritt in Gleichung (146) aus der Gleichung (110) wie folgt hergeleitet:

$$\begin{aligned}
\dot{\mathbf{F}}_p &= \mathbf{L}_p \mathbf{F}_p \\
\Rightarrow \mathbf{F}_p &= \Lambda(\Delta \mathbf{L}_p)\mathbf{F}_{pn} \\
\Rightarrow \mathbf{F}_e^{-1}\mathbf{F} &= \Lambda(\Delta \mathbf{L}_p)\mathbf{F}_{pn} \\
\Rightarrow \mathbf{F}\mathbf{F}_{pn}^{-1} &= \mathbf{F}_e\Lambda(\Delta \mathbf{L}_p),
\end{aligned}$$

wobei $\mathbf{F}_{pn}$ der plastische Deformationstensor im n-ten lokalen Integrationsschritt. Die Herleitung anderer Euler-Vektorkomponenten $\mathbf{r}_{\vec{\vartheta}}, \mathbf{r}_{\vec{\omega}}, \mathbf{r}_{\vec{\varrho}}$ ist einfach, so dass es schließlich das Gleichungssystem (147) ergibt:

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}_{\mathbf{F}_e} &= \mathbf{F}_e\Lambda(\Delta \mathbf{L}_p) - \mathbf{F}\mathbf{F}_{pn}^{-1} \,, \\
r_{\vartheta_a} &= \Delta\vartheta_a - \dot{\gamma}_0 \left\langle \phi_a \right\rangle^{n_a} \Delta t \,, \\
r_{\omega_a} &= \Delta\omega_a - [c_a \mathrm{sgn}(\tau_a - x_a) - d_a\omega_a]\Delta\vartheta_a \,, \\
r_{\varrho_a} &= \Delta\varrho_a - \left(\frac{1}{bL_a} - 2\frac{y_c}{b}\varrho_a\right)\Delta\vartheta_a \,.
\end{aligned}$$

Der Tensor $\mathbf{F}_e$ wird für die nummerische Umsetzung als Vekor betrachtet, deren Indizen in Folgenderweise $\{11, 12, 13, 21, 22, 23, 31, 32, 33\}$ sortiert werden.

A.6 Wichtige Formelzeichen

Tensoren

$\mathcal{C}_e$	vierstufiger Elastizitätstensor (s. Gl. (99) und (165))
$\mathcal{C}_{\text{Umat}}$	konsistente Materialtangente für ABAQUS/UMAT (s. Gl. (158))
$\mathbf{C}_e$	elastischer rechter Cauchy-Greenscher Deformationstensor (s. Gl. (101))
$\mathbf{E}_e$	elastischer Greenscher Verzerrungstensor (s. Gl. (100))
$\mathbf{F}$	Deformationsgradient (s. Gl. (95))
$\mathbf{F}_e$	elastischer Anteil des Deformationsgradienten (s. Gl. (95))
$\mathbf{F}_p$	plastischer Anteil des Deformationsgradienten
$\mathbf{K}$	Kirchhoffscher Spannungstensor (s. Gl. (95))
$\mathbf{L}$	Geschwindigkeitsgradient (s. Gl. (106))
$\mathbf{L}_p$	plastischer Geschwindigkeitsgradient (s. Gl. (108) und (109))
$\mathbf{M}$	Mandelscher Spannungstensor (s. Gl. (103))
$\mathbf{S}_e$	elastischer Anteil des 2. Piola-Kirchhoffschen Spannung (s. Gl. (104))
$\mathbf{Q}$	Transformationsmatrix (s. Gl. (164))
$\boldsymbol{\sigma}$	Cauchyscher Spannungstensor (s. Gl. (105))
$\mathbf{X}$	kinematischer Spannungstensor (s. Gl. (55))

Vektoren

$\mathbf{b}$	Burgers-Vektor (s. Abb. (7))
$\mathbf{f}$	spezifische Volumenkräfte (s. Gl. (90))
$\mathbf{m}^0$	Gleitrichtungsvektor in Anfangsorientierung (s. Gl. (97))
$\mathbf{m}$	aktueller Gleitrichtungsvektor (s. Gl. (97))
$\mathbf{n}^0$	Gleitebenennormalenvektor in Anfangsorientierung (s. Gl. (98))
$\mathbf{n}$	aktueller Gleitebenennormalenvektor (s. Gl. (98))
$\mathbf{r}_{\vec{\varepsilon}}$	Eulervektor (s. Gl. (146) und (147))
$\mathbf{t}$	spezifische Oberflächenkräfte (s. Gl. (90))
$\mathbf{u}$	Verschiebungsvektor (s. Gl. (74))
$\Delta\mathbf{u}_i$	i-te Näherung für inkrementelle Knotenverschiebung (s. Gl. (138))
$\mathbf{x}$	Ortsvektor (s. Gl. (74))
$\vec{\varepsilon}_n$	Vektor der Zustandsvariablen $(\mathbf{F}_p, \vec{\vartheta}, \vec{\omega}, \vec{\varrho})$ (s. Gl. (143))
$\vec{\vartheta}$	zusammengefasste betragsmäßige Gleitraten (s. Gl. (144))
$\vec{\omega}$	zusammengefasste kinematische Verfestigungsgrößen (s. Gl. (144))
$\vec{\varrho}$	zusammengefasste Versetzungsdichten (s. Gl. (144))
$\vec{A}_a^T$	a-te Zeile der Matrix **A** (s. Gl. (45))
$\vec{Z}_a^T$	a-te Zeile der Matrix **Z** (s. Gl. (38))

Skalare

a	Zählerindex für die Gleitsysteme
A_{ab}	Wechselwirkungskoeffizienten für die istrope Verfestigung (s. Gl. (41))
b	Betrag der Burgers-Vektors (s. Gl. (35))
c_{11}, c_{12}, c_{44}	elastische Konstanten (s. Gl. (168))
c, d	Werkstoffparameter für die Entwicklung der kinematischen Rückspannung (s. Gl. (56))
G	Schubmodul (s. Gl. (56))
K	Werkstoffparameter für die Entwicklung der freien Weglänge (s. Gl. (39))
L	mittlere freie Weglänge für die Versetzungsbewegung (s. Gl. (39))
n	Werkstoffparameter (s. Gl. (116))
r_a	statische Fließspannung auf Gleitsystem a (s. Gl. (123))
s_a	dynamische Fließspannung auf Gleitsystem a (s. Gl. (124))
T	Temperatur (s. Gl. (56))
$t, \Delta t$	Zeit bzw. Zeitinkrement (s. Gl. (146))
x_a	kinematische Rückspannung auf Gleitsystem a (s. Gl. (54))
y_c	kritischer Annihilationsabstand (s. Gl. (35))
$\dot{\gamma}_a$	Gleitrate auf Gleitsystem a (s. Gl. (116))
γ_{akk}	akkumulierte Abgleitung (s. Gl. (50))
$\dot{\vartheta}_a$	Betrag der Gleitrate auf Gleitsystem a (s. Gl. (141))
ω_a	Komponente kinematischer Rückspannung auf Gleitsystem a (s. Gl. (56))
ϱ_a	Versetzungsdichte auf Gleitsystem a (s. Gl. (35))
ϱ^0	Anfangsversetzungsdichte (s. Tab. 5)
τ_a	Schmidsche Schubspannung auf Gleitsystem a (s. Gl. (118))
ξ	Verhältnis zwischen statische und dynamische Fließspannung (s. Gl. (112))

Literatur

[1] Al-Hardary, J.T., N.J. Petch und E.R. de los Rios: Phil. Mag. 47, 896, 1983

[2] Alberdi Garitaonandia, J.M.: PhD thesis, University of Navarra, 1984

[3] Anand, L., S. Balasubramanian und M. Kothari: Constitutive Modeling of Polycrystalline Metals at Large Strains, in Large Plastic Deformation of Crystalline Aggregates, CISM Courses and Lectures No. 376, Edited by C. Teodosiu, Springer-WienNewYork, 1997

[4] Argon, A.S.: Internal Stresses Arising from the Interaction of Mobile Dislocations, Scripta Met. 4, 1001, 1970

[5] Asaro, R.J.: Crystal Plasticity, J. Appl. Mech. 50, 921-934, 1983

[6] Asaro, R.J., A. Needleman: Texture Development and Strain Hardening in Rate Dependent Polycrystals, Acta Metall. 33, 923-953, 1985

[7] Ashby, M.F.: The Deformation of plastically non-homogeneous materials, Phil. Mag. 21, 399-424, 1970

[8] Baird, J.D. und B. Gale: Attractive Dislocation Intersections and Work Hardening in Metals, Phil. Trans. Roy. Soc. A257, 553-582, 1965

[9] Balasubramanian, S. und L. Anand: Elasto-Viscoplastic Constitutive Equations for Polycrystalline FCC Materials at Low Homologous Temperatures, Journal of The Mechanics and Physics of Solids, 50, 101-126, 2002

[10] Balke, H. und Y. Estrin: Micromechanical Modelling of Shear Banding in Single Crystals, International Journal of Plasticity 10, No. 2, 133-147, 1994

[11] Bassini, Z.S. und T.-Y. Wu: Latent Hardening in Single Crystals, II. Analytical Characterization and Preditions, Proc. R. Soc. Lond. A 435, 21-41, 1991

[12] Bathe, K.-J.: Finite Element Procedures, Prentice Hall, Upper Saddle River, N.Y., 1996

[13] Blewitt, T.H., R.R. Coltman und J.K. Redman: Dislocations and mechanical properties of crystals, Newyork: Wiley, 1955

[14] Blochwitz C. und U. Veit: Plateau Behaviour of Fatigued FCC Single Crystals, Crystal Rev. & Technol. 17, No. 5, 529-551, 1982

[15] Cailletaud, G.: Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux, Thèse de doctorat, Univ. P. et M. Curie, Paris, 1987

[16] Chadwick, P.: Continuum Mechanics, 2nd ed., Dover Publications, Inc., Mineola, New York, 1999

[17] COTTRELL, A.H. UND R. STOKES: Effects of Temperature on the Plastic Properties of Aluminium Crystals, Proc. R. Soc. London A233, 17-34, 1955

[18] COTTRELL, R.M.J., Phys. Lett. A 60, 61, 1977

[19] DASH W.C.: The Observation of Dislocations in Silicon, Int. Conf. on Dislocations and Mechanical Properties of Crystals 1956, John Welley & Sons, Inc., 57-68, New York, 1957

[20] DIETER G.E., JR.: Mechanical Metallurgy, McGraw-Hill, New York, 1961

[21] EDWARDS, E.H., J. WASHBURN UND E.R. PARKER: Some observations on the work hardening of metals, Trans. AIME 197, 1525, 1953

[22] EDWARDS UND E.H., J. WASHBURN: Strain Hardening of Latent Slip Systems in Zinc Crystals, Trans. AIME 200, 1239, 1954

[23] ESSMANN, U.: Elektronenmikroskopische Untersuchung der Versetzungsanordnung verformter Kupfereinkristalle, phys. stat. sol. 17, 725-737, 1966

[24] ESSMANN, U. UND H. MUGHRABI: Annihilation of Dislocations during Tensile and Cyclic Deformation and Limits of Dislocation densities, Phil. Mag. A 40, No. 6, 731-756, 1979

[25] ESTRIN, J.: Stoffgesetze der plastischen Verformung und Instabilitäten des plastischen Fließens, VDI Forschungsheft 642, 1-48, 1987

[26] ESSMANN, U. UND M. RAPP: Slips in Copper Crystals following weak Neutron Bombardment, Acta metall. 21, 1305-1317, 1973

[27] EVERS, L.P., D.M. PARKS, W.A.M. BREKELMANS UND M.G.D. GEERS: Crystal Plasticity Model with Enhanced Hardening by Geometrically Necessary Dislocation Accumulation, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 50, 2403-2424, 2002

[28] FRANCIOSI, P.: The Concepts of Latent Hardening and Strain Hardening in Metallic Single Crystals, Acta metall. 33, No. 9, 1601-1612, 1985

[29] FRANK, F.C. UND W.T. READ: Multiplication Processes for Slow Moving Dislocations, Pys. Rev. 49, 722-723, 1950

[30] FROST, H.J. UND M.F. ASHBY: Deformation-Mechanism-Maps, The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics, Pergamon Press, Oxford, 1982

[31] GARSTONE, J., R.W.K. HONEYCOMB UND G. GREETHAM: Easy Glide of Cubic Metal Crystals, Acta metall. 4, No. 5, 485-494, 1956

[32] GERDES, R.: Ein stochastisches Werkstoffmodell für das inelastische Materialverhalten metallischer Werkstoffe im Hoch- und Tieftemperaturbereich, Braunschweiger Schriften zur Mechanik, Mechanik-Zentrum, TU Braunschweig, 1995

[33] GIESE A. UND Y. ESTRIN: Mechanical Behaviour and Microtructure of Fatigued Aluminium Single Crystals, Scripta Metallurgica et Materialia 28, 803, 1993

[34] GIL SEVILLANO, J., P. VAN HOUTTE UND E. AERNOUDT: Prog. Master Sci, 25:69, 1981

[35] GURTIN, M.E.: An Introduction to Continuum Mechanics, Academic Press, San Diego, California, 1981

[36] HAASEN, P.: Physikalische Metallkunde, 3. Auflage, Spinger-Verlag, Berlin, 1994

[37] HALL, E.O.: The Deformation and Ageing of Midl Steel: III. Discussion of Resuls, Proc. Phys. Soc. (London) 64B, 747, 1951

[38] HANSEN, N. UND B. RALPH: The Strain and Grain Size Dependence of the Flow Stress of Copper, Acta metall. 30, 411-417, 1982

[39] HARDER, J.: Simulation lokaler Fließvorgänge in Polykristallen, Doktorarbeit 1997

[40] HAVLICEK, F., J. KRATOCHVIL, M. TOKUDA UND V. LEV: Finite Element Model of Plastically deformed Multicrystal, Int. J. of Plasticity 6, 281-291, 1990

[41] HAVLICEK, F., M. TOKUDA Computational Study of Polycrystalline Behaviour under Complex Loading Conditions, in Proceedings of Plasticity 1991, Hrsg. Boehler, J.P. und A.S. Khan, 135-138, 1991

[42] HEINRICH, H., R. NEUHAUS UND CH. SCHWINK: Dislocation Structure and Densities in Tensile Deformed CuMn Crystals Oriented for Single Glide, phys. stat. sol. (a) 131, 299-308, 1992

[43] HILL, R. UND J.R. RICE: Constitutive analysis of elastic-plastic crystals and arbitrary strain, Journal of The Mechanics and Physics of Solids, 20, 401-413, 1972

[44] HIRSCH, P.B.: Extended Jogs in Dislocations in Faced-Centred Cubic Metals, Phil. Mag. 7, No. 73, 67-93, 1962

[45] HIRTH, J.P.: On Dislocation Interactions in the fcc Lattice, J. Appl. Phys. 32, No. 4, 700-706, 1961

[46] HIRTH J.P. UND J. LOTHE: Theory of Dislocations, McGraw-Hill, Newyork, 1968

[47] HOLT, L.D.: Dislocation Cell Formation in Metals, Int. J. Non-Linear Mech. 41, No. 8, 3197 ff., 1970

[48] HONEYCOMBE, R.W.K.: The Plastic Deformation of Metals, Edward Arnold, London, 1975

[49] HOOK, R.E. UND J.P. HIRTH: Trans. Japan Inst. Metals 9, Suppl. 778, 1968

[50] HUEBNER, K. H.: The Finite Element Method for Engineers, J. Wiley & Sons, Inc., New York, N.Y., 1975

[51] JACKSON P.J. UND Z.S. BASINSKI: Latent Hardening and the Flow Stress in Copper Single Crystals, Canadian Journal of Physics 45, 707-735, 1967

[52] JORDAN, E.H. UND K.P. WALKER: A Viscoplastic Model for Single Crystals, J. of Engineering Materials and Technology 114, 19-26, 1992

[53] KITTER, CH.: Einführung in die Festkörperphysik, München: Oldenbourg 1969; 1983

[54] KOCKS, U.F., A.S.ARGON UND M.F. ASHBY: Thermaldynamics and Kinetics of Slip, in Progress Materials Science, Pergamon Press, 1975

[55] KOCKS, U.F. UND T.B. BROWN: Latent Hardening in Aluminium, Acta metall. 14, 87-98, 1966

[56] KOCKS, U.F.: Laws for Work-Hardening and Low-Temperature Creep, Transactions of the ASME, 76-85, 1976

[57] KOCKS, U.F. UND H. MECKING: Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case, Progress in Materials Science 48, 171-273, 2003

[58] KOVACS, I. UND L. ZSOLDOS: Dislocations in Crystals, Akadémiai Kiadó, Budapest, Pergamon Press, Oxford, 1973

[59] KRÖNER, E.: Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. Berlin, Göttingen, Heidelberg: Springer 1959.

[60] KUHLMANN-WILSDORF, D.: Unified Theory of Stages II and III of Work-Hardening in Pure F.c.c. Metal Crystals, in Hirth und Weertman (Hrsg.), Workhardening, 97-132, Newyork, 1968

[61] LEE, E.H.: Elastic-Plastic Deformation at Finite Strains, Journal of Applied Mechanics, 36, 1-4, 1969

[62] LIVINGSTON, J.D.: Trans. AIME 215, 566, 1959

[63] LOMER W.M.: A Dislocation Reaction in the Face-Centred Cubic Lattice, Phil. Mag. 42, 1327-1331, 1951

[64] MANDEL, J.: Plasticité classique et viscoplasticité, Lectures Notes Int. Centre for Mech. Sci. (Udine, 1971), Spinger, Berlin, 1972

[65] MASING, G.: Grundlagen der Metallkunde, Springer-Verlag, Berlin, 1955

[66] MECKING, H. UND G. BULIAN: Correlations between Stress, Strain and Dislocation Arrangement in weakly deformed Copper Single Crystals, Acta Met. 24, 249-260, 1976

[67] MÉRIC, L. UND G. CAILLETAUD: Finite Element Implementation of a Model for Single Crystals at Finite Strain, New Advances in Computational Structural Mechanics, hrsg. von P. Ladeveze und O.C. Zienkiewicz, 1992

[68] MOTT N.F.: Work Hardening of Metals - 1960 Institute of Metals Lecture, Trans. AIME 218, No. 6, 961-968, 1960

[69] Mughrabi, H.: Elektronenmikroskopische Untersuchung der Versetzungsanordnung verformter Kupfereinkristalle im belasteten und entlasteten Zustand, Disertation, Universität Stuttgart, 1970 (Teil III)

[70] Mura, T.: Micromechanics of defects in solids, Martinus Nijhoff Publishers, 1982, The Hague.

[71] Nabarro, F.R.N: Theory of crystal dislocations, Oxford University Press, 1967, Oxford

[72] Nakada, Y. und A.S. Keh: Latent Hardening in Iron Single Crystals, Acta metall. 14, 961-972, 1966

[73] Neuhaus R. und Ch. Schwink: Solid Solution Strengthening, in Materials Science and Technology, Hrsg. Cahn, Haasen, Kramer, 6 (Hrsg. Maghrabi), 191-250, VCH Verlag, Weinheim, 1993

[74] Ohashi,T.: Computer Simulation of Non-Uniform Multiple slip in Face Centered Cubic Bicrystals, Transaction of the Japan Institute of Metals 28, No. 11, 906-915, 1987

[75] Orowan E.: Problems of Plastic Gliding, Proc. Physical. Society 52, 8-22, 1940

[76] Petch, N.J.: J. Iron Steel Inst. 174, 25, 1953

[77] Peirce, D., R.J. Asaro und A. Needleman: An Analysis of Nonuniform and Localized Deformation in Ductile Single Crystals, Acta metall. 30, 1087-1119, 1982

[78] Raj, R. und M.F. Asby: Trans. AIME 2, 1113, 1971

[79] Read W.T., Jr.: Dislocations in Crystals, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1953

[80] Reed-Hill, R.E.: Physical Metallurgy Principles, Van Nostrand Reinhold, New York, 1964 37, 447, 1931

[81] Rey, C., P. Mussot und A. Zaoui: Effects of Junction of Grain Boundaries on the Mechanical Behaviour of Polycrystals, in Grain Boundary Structure and Related Phenomena, Proceedings of JIMIS-4 (1986). Supplement to Transactions of the Japan Institute of Metals

[82] Rice, J.R.: Inelastic constitutive relations for solids: an internal variable theory and its application to metal plasticity, Journal of The Mechanics and Physics of Solids, 19, 433-455, 1971

[83] Saada, G.: Sur le Durcissement du à la Recombinaison des Dislocations, Acta metall. 8, 841-847, 1960

[84] Schatt, W.: Einführung in die Werkstoffwissenschaften, VEB Grundstoffindustrie, 6, 1987

[85] Schmid, E.: Elektrochem. 37, 447, 1931

[86] Schmid, E. und W. Boas: Kristallplastizität mit besonderer Berücksichtigung der Metalle, Spinger, Berlin, 1935

[87] Seeger, A.: Handbuch der Physik, Band VII, 2. Berlin, Göttingen, Heidelberg: Springer 1958

[88] Seeger, A., J. Diehl, S. Marder und H. Rebstock: Work-Hardening and Work-Softing of Face-Centred Cubic Metal Crystals, Phil. Mag. 2, 323, 1957

[89] Siethoff, H., W. Schröter: Zeitschrift für Metallkunde 75, 475, 1984

[90] Svendsen, B.: A Thermodynamic Formulation of Finite-Deformation Elastoplasticity with Hardening Based on the Concept of Material Isomorphism, Int. J. Plasticity 14, 473-488, 1998

[91] Svendsen, B.: Continuum Thermodynamic Models for Crystal Plasticity Including The Effects of Geometrically-necessary Dislocations, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 50, 1297-1329, 2002

[92] Takeuchi T.: Work Hardening of Copper Single Crystals with Mutiple Glide Orientations, Trans. JIM, 16, 629-640, 1975

[93] Taylor G.I.: The Mechanism of Plastic Deformation of Crystals, Part I.- Theoretical, Proceedings of the Royal Society, A145, 1934

[94] Taylor G.I.: Plastic Strain in Metals, J. Inst. Metals 62, 307-324, 1938

[95] Teodosiu, C.: A dynamic theory of dislocations and its applications to the theory of the elastic-plastic continuum, in: Proc. Conf. Fundamental Aspect of Dislocation Theory, Washington 1969 (hrsg. von Simmons J.A., R. de Wit und R. Bullough), Nat. Bur. Stand. and Special Publ. 317, vol. 2, 837-876, 1970

[96] Teodosiu, C. und F. Sidoroff: A theory of finite elastoviscoplasticity of single crystals, International Journal of Engineering Science, 14, 165-175, 1976

[97] Teodosiu, C.: Materials Science Input to Engineering Models, in Modeling of the Plastic Deformation and its Engineering Applications, Risø National Laboratory, Denmark, ISBN 87-550-1826-2, 125, 1992

[98] Wassermann, G.: Praktikum der Metallkunde und Werkstoffprüfung. Berlin, Heidelberg, New York: Springer 1965.

[99] von Mises, R.: Mechanik der plastischen Formänderung von Kristall, Z. angew. Math. Mech. 8, 161, 1928

[100] Wadsworth, N.J.: Work Hardening of Copper Crystals under Cyclic Loading, Acta Metallurgica 11, 663, 1963

[101] Wei, C., S. Lin, R.G. Qian und J.M. Hsiao: Computer Simulation of the Effect of Grain Size on the Properties of Polycrystalline Specimens by Finite Element Method, Acta metall. mater. 39, No. 8, 2051-2057, 1991

[102] WEERTMAN,J.: Dislocation Climb Theory of Steady-State Creep, Trans. Am. Soc. Metals 61, No. 4, 681-694, 1968

[103] WENG, G.J.: Kinematic Hardening Rule in Single Crystals, Inst. J. Solids Structures 15, 861-870, 1979

[104] WENG, G.J.: Anisotropic Hardening in Single Crystals and the Plasticity of Polycrystals, Jounal of Plasticity 3, 315-339, 1987

[105] WESSELS, E.J.H. UND P.J. JACKSON: Laten Hardening in Copper-Aluminium Alloys, Acta metall. ul17, 241-248, 1969

[106] WILLE, TH., W. GIESEKE UND CH. SCHWINK: Quantitative Analysis of Solution Hardening in Seclected Copper Alloys, Acta metall. 35, No. 11, 2679-2693, 1987

[107] VREELAND, T.: Dislocations Dynamics, Edited by Rosenfield, A.R. et al, p.529, McGraw-Hill, New York 1968

[108] ZEHETBAUER, H.: Acta Met. 41, 589, 1993

[109] ZHOU, Y., K.W. NEALE UND L.S. TÓTH: A Modified Model for Simulating Latent Hardening during the Plastic Deformation of Rate-Dependent FCC Polycrystals, Int. J. Plasticity 9, 961-978, 1993

Lebenslauf

Name:		Tran, Hoang-Nguyen
Geburtsdatum:		06. Juni 1971
Geburtsort:		Hue, Vietnam
Familienstand:		verheiratet und ein Kind
Staatsangehörigkeit:		Deutsch
Schulausbildung:	1977 - 1988	Schulbesuch in Hue, Vietnam
	1990 - 1993	Max-Planck-Gymnasium in Göttingen, Allgemeine Hochschulreife
Studium:	1993 - 1998	Physikstudium an der Universität Göttingen, Diplom am 09. Juli 1998
Berufliche Tätigkeiten:	1998 - 2000	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachbereich Physik der Universität Bremen
	seit 8/2000	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Mechanik der Universität Dortmund, Prof. Dr. rer. nat. B. Svendsen

Dortmund, in Juli 2005

Tran, Hoang-Nguyen