
GRANULARES MODELL ZUR SIMULATION DER ERMÜDUNG VON METALLEN

Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades (Dr. rer. nat.)

der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

vorgelegt von

Judith Fingerhuth

aus Bonn-Bad Godesberg

Bonn, Oktober 2009

Angefertigt mit Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

1. Gutachter: Prof. Dr. K. Maier
2. Gutachter: Prof. Dr. M. Fiebig

Tag der Promotion: 10. Dezember 2009
Erscheinungsjahr: 2010

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Metall, Kristall	3
2.2	Verformung von Metall	10
2.3	Methoden zur Vorhersage der Lebensdauer bei Ermüdung	16
3	Modell und Simulation	19
3.1	Darstellung des Kristalls im Modell	19
3.2	Berechnung der Verformung	21
3.3	Spannungen in den Zellen	25
3.4	Plastizität	28
3.5	Erhöhung der Versetzungsdichte	29
3.6	Erhöhung der Leerstellenkonzentration	30
3.7	Ausgabe	32
4	Ergebnisse und Diskussion	35
4.1	Berechnung der Positionen der Körner	36
4.2	Von der elastischen Verformung zur Berechnung der Spannung in den Körnern	38
4.2.1	Dehnung im Hookeschen Gesetz	38
4.2.2	Plastische Korrektur	38
4.3	Einfluss der verschiedenen Mechanismen im Modell	39
4.3.1	Beiträge zur Spannung	39
4.3.2	Mechanismen zur Leerstellenproduktion	42
4.4	Einfluss der Parameter der Simulation	42
4.4.1	Einfluss der anfänglichen Zahl von Versetzungen	43

4.4.2 Einfluss der Anfangswerte	44
4.5 Simulationen	46
4.5.1 Variation der Verformungsamplitude	46
4.5.2 Simulation einer Vordeformation	47
4.5.3 Variation des Materials	47
4.6 Diskussion	53
5 Zusammenfassung	59
A Das Programm zur Simulation	61

Kapitel 1

Einleitung

Unter Ermüdung versteht man die allmähliche Akkumulation von Schaden in einem Werkstoff, der wechselnder Belastung ausgesetzt ist. Dass Ermüdung auch 150 Jahre nach ihrer ersten systematischen Untersuchung immer noch ein Problem ist, konnte man in den Jahren 2008 und 2009 anhand der gebrochenen und angerissenen ICE-Achsen und Sperrungen in den Berliner U-Bahnen in den Medien verfolgen. In solchen Fällen bedeutet Ermüdung lediglich hohe Kosten für die Unternehmen und Unannehmlichkeiten für die Fahrgäste, in anderen Fällen jedoch verursacht unentdeckte, unerwartete oder unbeachtete Ermüdung tragische Unfälle.

Um diese Folgen der Ermüdung zu verhindern gibt es drei Ansätze: Erstens kann man Teile für unendliche Lebensdauer auslegen, d.h. sie werden so dimensioniert, dass die entstehenden Belastungen nicht groß genug für einen Bruch sind. Zweitens kann man die sichere Lebensdauer des Teils abschätzen und tauscht es danach aus. Drittens kann man regelmäßig kontrollieren, ob Risse aufgetreten sind und wie groß diese sind, und bei Bedarf austauschen. Die Kontrollintervalle werden aus Erfahrungen mit dem Material, seiner Schwingfestigkeit und der Rissausbreitung in diesem Material, abgeschätzt. Die ersten beiden Ansätze gehen nicht effizient mit Material um, im dritten Ansatz entstehen hohe Kosten durch die Wartung und den Stillstand während der Wartung. Für alle drei Methoden ist es notwendig, die Lebensdauer eines Bauteils zuverlässig abschätzen zu können. Dafür ist man im Wesentlichen auf das material- und zeitintensive Wöhler-Verfahren angewiesen. Hierbei wird eine Vielzahl gleichartiger Proben bei unterschiedlichen Spannungsamplituden bis zum Bruch ermüdet und Spannungsamplitude und Zyklenzahl beim Bruch gegeneinander aufgetragen. Aus dem Resultat kann mit statistischen Methoden die Lebensdauer bei einer bestimmten Belastung abgeschätzt werden.

Die Vorhersage eines Ermüdungsbruchs durch Simulation ist trotz der Fortschritte in der Numerik und der enormen Steigerung der Rechenleistung der Computer in den letzten Jahrzehnten immer noch nicht möglich. Die existierenden Simulationsansätze gehen Brüche von beiden Seiten der Größenskala an. An der makroskopischen Seite wird das Material als kontinuierlich angesehen und mit Finite-Elemente-Methoden die Belastungen in einem Bauteil bestimmt. Dies ist in der Praxis bei Bauteilen mit komplexer Geometrie sehr hilfreich, da die Belastungen nicht durch Ähnlichkeitsprinzipien aus bekannten Geometrien hergeleitet

werden müssen, sondern berechnet werden können. Eine Simulation von Ermüdung ist hier nicht möglich, da bei der kontinuierlichen Betrachtung eines Materials die Ermüdung verursachenden Mikrostrukturen nicht miteinbezogen werden.

Am anderen Ende der Größenskala wird die Bewegung der einzelnen Atome im Kristallgitter mit Molekulardynamik berechnet. So kann z.B. das Aufbrechen der atomaren Bindungen beim Spröddbruch oder die Begegnung einer Versetzungslinie und einer Korngrenze auf atomarer Skala simuliert werden. Jedoch ist man aus Gründen der Rechenzeit auf wenige tausend Atome beschränkt. Man kann also die Wechselwirkung einzelner an der Ermüdung beteiligten Kristallfehler berechnen, die Simulation der Ermüdung in einem makroskopischen Bauteil erscheint zum jetzigen Zeitpunkt und auf absehbare Zeit wegen der Vielzahl der daran beteiligten Kristallfehler nicht möglich. Da eine Simulation der Ermüdung ab initio nicht möglich ist, ist man weiterhin auf das Experiment angewiesen.

Experimente von Bennewitz, Eich und Wirtz haben gezeigt, dass es eine Alternative zum kostspieligen Wöhler-Verfahren gibt: Aus der Messung des Anteils offenen Volumens mit Positronenannihilationsspektroskopie kann die Restlebensdauer einer ermüdeten Probe abgeschätzt werden. Bennewitz stellte fest, dass der Anteil offenen Volumens in einer deformierten Probe des austenitischen Stahls X6 CrNiTi 18-10, normiert auf den Referenzwert im unverformten Material, kurz vor dem Bruch einen materialtypischen Maximalwert annimmt. Da der Anteil offenen Volumens mit dem Logarithmus der Zyklenzahl zunimmt, ist eine Abschätzung der Lebensdauer durch Extrapolation aus einer Messung des Anteils offenen Volumens nach einer verglichen mit der Lebensdauer kleinen Anzahl von Verformungszyklen möglich. Im Prinzip wurde die Anwendbarkeit dieses Verfahrens für den ferritischen Stahl C45E [Eic06], die technische Aluminiumlegierung AA6082 [Wir08] und den ICE-Achsstahl A4T [Eic09] bestätigt, jedoch gibt es im ferritischen Stahl C45E und sehr wahrscheinlich in jedem mehrphasigen Werkstoff die zusätzliche Schwierigkeit, dass der Anteil offenen Volumens stark lokalisiert ansteigt. Der Grund für diese Lokalisierung ist nicht bekannt.

Ausgehend von diesen Ergebnissen ergibt sich ein neuer Ansatz zur Simulation der Ermüdung. Die Positronenannihilationsspektroskopie zeigt, dass der Anteil offenen Volumens eine gute Größe zur Messung des Fortschritts der Ermüdung ist und dass einige 10 μm eine gute Längenskala zur Betrachtung sind. Eine geeignete Simulation kann es in Kombination mit der Positronenannihilationsspektroskopie möglich machen, die Restlebensdauer eines Bauteils mit beliebiger Geometrie durch die Messung der Ermüdung an einer einzigen Probe des Materials zu bestimmen. Dabei wird aus der Messung der Maximalanteil des offenen Volumens bestimmt und als Rissbildungskriterium der Simulation verwendet.

Aus den oben geschilderten Problemen der Finite-Elemente-Methoden und Molekulardynamik geht hervor, dass eine solche Simulation weder auf einem zu groben noch zu feinen Raster arbeiten darf. Ein der Simulation zugrunde liegendes Modell darf die Mikrostrukturen, die physikalisch die Ermüdung verursachen, weder vernachlässigen noch sie einzeln betrachten. Es muss stattdessen mit geeigneten Mittelwerten arbeiten und passende Vorstellungen über die der Entwicklung dieser Mittelwerte zugrunde liegenden physikalischen Prozesse angeben. In dieser Arbeit wird ein nach diesen Kriterien entwickeltes Modell beschrieben und die Ergebnisse der dazugehörigen Simulation vorgestellt. Es zeigt sich, dass das Modell eine gute Grundlage zur Simulation der Ermüdung ist.

Kapitel 2

Grundlagen

Ermüdung bezeichnet die allmähliche Schädigung eines Materials bei zyklischer Belastung. Die Belastung im einzelnen Verformungszyklus ist dabei geringer als diejenige, die sofort zum Bruch führt, jedoch summiert sich der Schaden über viele Zyklen auf, so dass es schließlich zu einem Ermüdungsbruch kommt. Abhängig von der Größe der Belastung unterscheidet man zwischen Low, High und Ultra High Cycle Fatigue. Im Bereich des Low Cycle Fatigues sieht man schon bei einmaliger Belastung eine messbare plastische Verformung des Materials und beobachtet damit irreversible Prozesse. Die Lebensdauern bis zum Bruch betragen hier je nach Belastung zwischen einem und ca. 10^4 Zyklen. Im Bereich des (Ultra) High Cycle Fatigue sieht man bei einmaliger Belastung makroskopisch keine Veränderung am Material, die elastische Verformung ist also scheinbar reversibel. Mikroskopisch dagegen finden auch hier irreversible Prozesse statt, die bei ausreichend großer Wiederholung der Belastung schließlich zur Bildung eines Risses führen. Verantwortlich für die Irreversibilität sind die Interaktionen von Versetzungen.

In diesem Kapitel werden die Bewegung und Interaktion von Versetzungen sowie die sich unter zyklischer Belastung bildenden Versetzungsstrukturen beschrieben. Diese sind in Nickel und Kupfer, kubisch-flächenzentrierten Metallen mit welligem Gleitverhalten, besonders gut untersucht und verstanden. Nickel und Kupfer werden daher oftmals als Modellmaterialien verwendet. Da das Modell in dieser Arbeit für reines Nickel oder Kupfer als Material entwickelt wurde, wird hier die Beschreibung der Mikrostrukturen auf die für diese Materialien relevanten Punkte beschränkt.

Am Ende des Kapitels werden exemplarisch Methoden beschrieben, mit denen man Ermüdung vorhersagen und beherrschbar machen will.

2.1 Metall, Kristall

Die betrachteten Metalle sind Kristalle, d.h. die Atome sind auf einem periodischen Gitter, hier einem kubisch-flächenzentrierten, angeordnet. Jedoch ist bei einem realen Kristall die perfekte Periodizität immer gestört. Die Gitterfehler entstehen beim Wachsen des Kristalls und können durch spätere Temperaturbehandlung nur teilweise wieder entfernt werden. Für

die technische Verwendbarkeit von Metallen sind diese Fehler sogar von großer Wichtigkeit, sie werden gezielt hinzugefügt, um das mechanische Verhalten von Kristallen zu beeinflussen.

Die Ursache der plastischen Verformung und Ermüdung sind die unten detaillierter beschriebenen Versetzungen und die Hindernisse für deren Bewegung. Als Hindernisse werden in dieser Arbeit nur Korngrenzen zwischen den unterschiedlich orientierten Kristallkörnern des Polykristalls und andere Versetzungen berücksichtigt. Durch Fremdatome verursachte Effekte werden hier nicht betrachtet. Zwar spielen diese in Legierungen eine entscheidende Rolle, können in den hier betrachteten Modellsystemen Nickel und Kupfer aber zunächst vernachlässigt werden.

Versetzungen

Versetzungen sind linienförmige Defekte im Kristallgitter. Sie sind in jedem realen Kristall vorhanden, da sie beim Wachsen des Kristalls entstehen. Die mittlere Versetzungsdichte reicht von $10^4 m^{-2}$ in sehr gut ausgeheilten Halbleiterkristallen bis zu $10^{14} m^{-2}$ in stark deformierten Metallen. (z.B. [KH04])

Eine reale, gekrümmte Versetzungslinie in einem Kristall kann aufgeteilt werden in Segmente mit Stufencharakter [Oro34; Pol34; Tay34] und solche mit Schraubencharakter [Bur39]. Stufenversetzungen kann man sich vorstellen, als habe man einen Kristall entlang einer Kristallebene bis zur Versetzungslinie aufgeschnitten und eine Hälfte gegenüber der anderen senkrecht zur Versetzungslinie zusammendrückt (Abb. 2.1a); eine Schraubenversetzung, als habe man parallel zur Versetzungslinie gedrückt (Abb. 2.1b). Der Burgersvektor \vec{b} beschreibt die Verschiebung der Hälften gegeneinander¹. Bei einer Stufenversetzung steht er senkrecht zur Versetzungslinie, bei einer Schraubenversetzung liegt er parallel zu ihr (z.B. [HL82; KH04]). Durch die Periodizität des Kristallgitters werden Burgersvektoren, die primitiven Translationen entsprechen, bevorzugt [Pei40; Nab47] (siehe [HL82] Kap. 8,9). In kubisch-flächenzentrierten Kristallen spalten sich diese sog. vollständigen oder perfekten Versetzungen häufig in Partialversetzungen auf, die einem Stapelfehler entsprechen [HS48; Sho48] (siehe [HL82] Kap. 10).

Drückt eine Schubspannung τ die Teile des Kristalls beiderseits einer Gitterebene auseinander, so kann sich die Versetzungslinie in dieser Ebene bewegen. Diese konservative Bewegungsform heißt *Gleiten*. Die Gleitebene wird durch Burgersvektor und Versetzungslinie aufgespannt (siehe [HL82] Kap.1.) Als Gleitrichtung bevorzugt die Versetzungslinie die Richtung nächster Nachbarn im Kristallgitter [Fra49], als Gleitebenen werden dichtest gepackte Ebenen bevorzugt. Erleichtert wird die Gleitbewegung durch lokale Ausbuchtungen der Linie innerhalb der Gleitebene, sogenannte *Kinken*. Kinken sind in einer realen, gekrümmten Versetzungslinie von Anfang an enthalten oder bilden sich als Kinkenpaare ständig durch thermische Fluktuation² (siehe [HL82]). Sprünge der Versetzungslinie, die aus der aktiven Gleitebene

¹Die Orientierung des Burgersvektors ist willkürlich. In der Literatur werden beide Konventionen verwendet. Vgl. [HL82] S. 22.

²Im hier nicht betrachteten kubisch-raumzentrierten Gitter haben Schraubenversetzungen einen ausgedehnten Kern und sind bei tiefen Temperaturen unbeweglich. Bei hohen Temperaturen können sie durch thermisch entstandene Kinkenpaare gleiten.

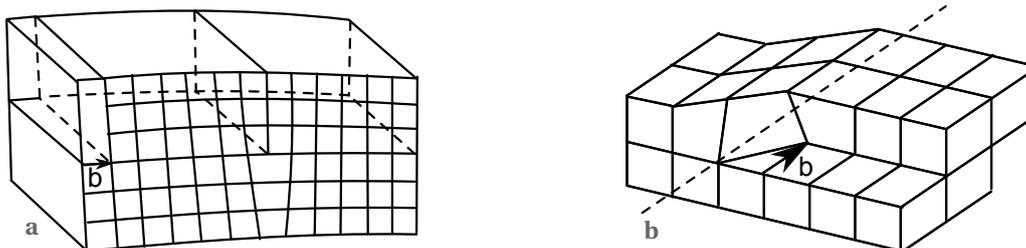


Abbildung 2.1 – Stufen- und Schraubenversetzung (aus [KH04])

Versetzungen sind linienförmige Defekte im Kristallgitter. Sie werden durch die Versetzungslinie und den Burgersvektor charakterisiert. Bei der Stufenversetzung (a) ist der Burgersvektor senkrecht zur Versetzungslinie, bei der Schraubenversetzung (b) sind sie parallel.

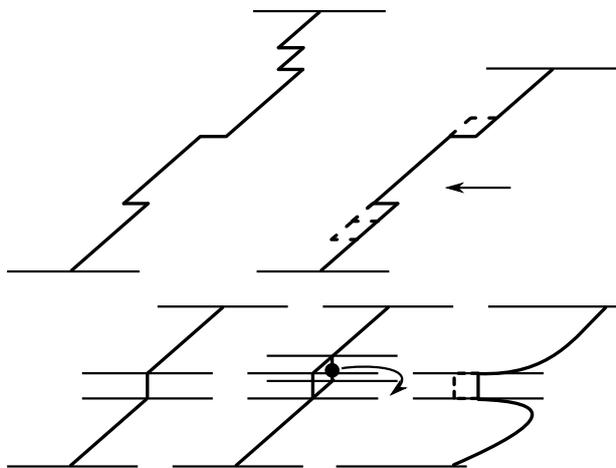


Abbildung 2.2 – Kinke und Gleiten einer Versetzung durch Kinken

Kinken sind Ausbuchtungen der Versetzungslinie, die innerhalb der Gleitebene liegen. Eine Kinke in einer Stufenversetzung hat Schraubencharakter und umgekehrt. Da eine Kinke per definitionem immer in der Gleitebene liegt, behindert eine Kinke die Gleitbewegung einer Versetzung nicht.

Abbildung 2.3 – Jog und Klettern eines Jogs

Ein Jog ist ein Sprung in einer Versetzungslinie, der aus der Gleitebene hinausführt. Ein Jog hat immer Stufencharakter. Er kann sich nicht durch Gleiten im aktiven Gleitsystem der Versetzung bewegen, sondern ist zur Bewegung auf Materialtransport angewiesen. Dies kann die Erzeugung oder Vernichtung von Leerstellen oder Zwischengitteratomen sein. Diese nicht-konservative Bewegungsart außerhalb der Gleitebene heißt Klettern. Ein Jog kann durch Jogdragging Punktdefekte produzieren.

hinausgehen, heißen *Jogs*. Sie können sich nicht konservativ durch Gleiten bewegen, sondern können nur durch Bewegung von Gitteratomen wandern. Die Bewegungsart außerhalb der Gleitebene durch Materialtransport heißt *Klettern* [Nab48] und ist auf Diffusion oder sehr hohe Spannungen angewiesen (siehe [HL82]). Da bei einer Schraubenversetzung Burgersvektor und Versetzungslinie parallel sind, kann eine Schraubenversetzung auf jeder dichtest gepackten Kristallebene gleiten, welche die Versetzungslinie enthält. Daher kann eine Schraubenversetzung Hindernisse auf einem Nebengleitsystem durch *quergleiten* umgehen, wenn die Schubspannung groß genug ist. Das wellige Gleitverhalten zeichnet sich dadurch aus, dass Quergleiten von Schraubenversetzungen schon bei kleinen Spannungen möglich ist. Ein Jog in einer Schraubenversetzung hat Stufencharakter und kann sich nicht mit dem Rest der Versetzung im aktuellen Gleitsystem der Versetzung weiterbewegen. Er kann nur durch Klettern der Versetzung hinterherkommen, wodurch er üblicherweise Leerstellen produziert³ (*Jogdragging*). Versetzungen verformen das Kristallgitter und sind von einem langreichweitigen Spannungs-

³Die Produktion von Zwischengitteratomen in Jogs mit umgekehrten Vorzeichen ist prinzipiell möglich. Wegen

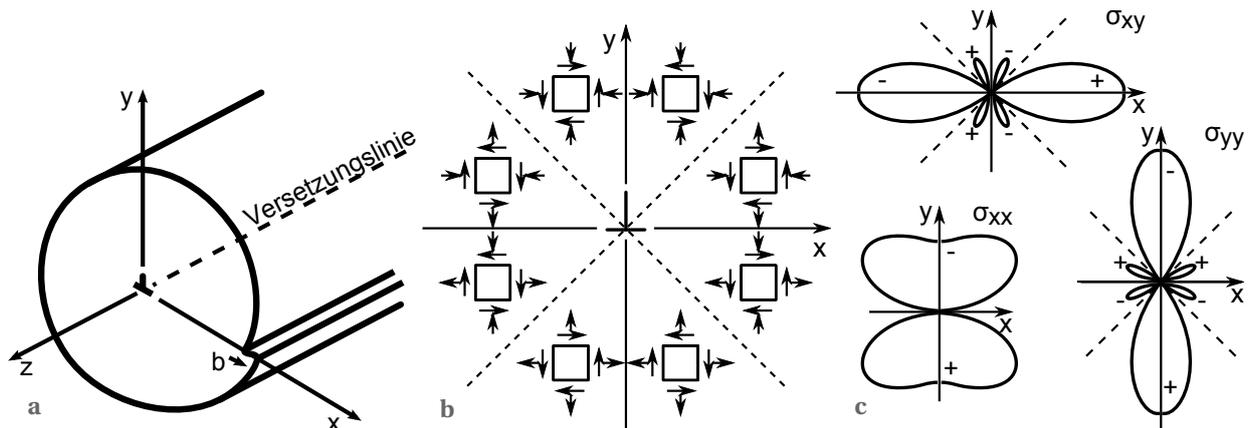


Abbildung 2.4 – Spannungsfeld einer Stufenversetzung (aus [HL82])

Versetzungen sind von einem langreichweitigen Spannungsfeld umgeben. Liegt eine Stufenversetzung wie in (a) im Koordinatensystem, so ist sie von einem Spannungsfeld gemäß Gl. 2.1 umgeben.

(b) gibt für diesen Fall die Richtungen der Zug- und Schubspannungen an.

(c) gibt für diesen Fall die Linien gleicher Spannungsbeträge in der xy -Ebene für die Zugspannungen σ_{xx} und σ_{yy} sowie die Schubspannung τ_{xy} an.

feld umgeben. In direkter Nähe zur Versetzungslinie muss die Berechnung des Spannungsfelds die Positionen der einzelnen Gitterpunkte einbeziehen. Für größere Abstände genügt es die Versetzung als Störung in einem kontinuierlichen, homogenen und isotropen Medium zu betrachten. Es ergibt sich für das Spannungsfeld einer Stufenversetzung außerhalb des Kernbereichs um die Versetzung (z.B. [HL82] S.76)

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \frac{y(3x^2+y^2)}{r^3} & \frac{x(-x^2+y^2)}{r^3} & 0 \\ \frac{x(-x^2+y^2)}{r^3} & \frac{y(-x^2+y^2)}{r^3} & 0 \\ 0 & 0 & 2\nu\frac{y}{r} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

Dabei liegt die Versetzung wie in Abb. 2.4 im Koordinatensystem, G ist der Schubmodul, ν die Poisson-Zahl des Materials und $r^2 = x^2 + y^2$. σ_{xx} , σ_{yy} und σ_{zz} sind Normalspannungen in x -, y - bzw. z -Richtung, während die τ_{ij} Schubspannungen parallel zur ij -Ebene sind. Es gilt $\tau_{ij} = \tau_{ji}$.

Das „Fernfeld“ einer Schraubenversetzung, die entlang der z -Achse eines Koordinatensystems läuft, ist (z.B. [HL82] S.60)

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{y}{r} \\ 0 & 0 & \frac{x}{r} \\ -\frac{y}{r} & \frac{x}{r} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Versetzungen sind also von einem langreichweitigen Spannungsfeld ($\sim 1/r$) umgeben.

der höheren Bildungsenergie von Zwischengitteratomen wandern diese Jogs jedoch entlang des Burgersvektors auf der Schraubenversetzung statt Punktdefekte zu erzeugen (siehe [NBH64]).

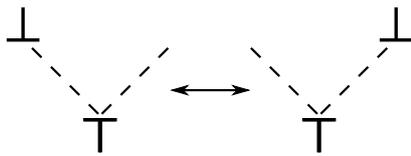


Abbildung 2.5 – Dipol von Stufenversetzungen

Zwei parallele Stufenversetzungen mit antiparallelem Burgersvektor bilden einen Dipol. Dieser hat zwei stabile 45°-Lagen, zwischen denen er umklappen kann. Ist der Abstand zwischen den Gleitebenen sehr klein (in Kupfer 1,6nm), so wird der Dipol instabil und kollabiert. Dabei lässt er Leerstellen oder Zwischengitteratome zurück.

Interaktion von Versetzungen

Durch die Langreichweitigkeit der Spannungsfelder beeinflussen sich Versetzungen in einem Kristall oder Korn auch schon bei großen Abständen bzw. geringen Versetzungsdichten. Eine Beschreibung der Wechselwirkung zwischen parallelen Versetzungen findet sich in [Nab52]. Von diesen sind im Weiteren wichtig:

- Parallele Versetzungslinien mit parallelen Burgersvektoren stoßen sich ab. Dies ist für Aufstauungen (engl.: Pileups) von Versetzungen relevant.
- Parallele Schraubenversetzungen mit antiparallelen Burgersvektoren ziehen sich an. Da Schraubenversetzungen nicht auf eine Gleitebene beschränkt sind, können sie sich durch Quergleiten nähern und annihilieren [See+57]. Die Annihilationslänge wird je nach Art der Verformung unterschiedlich abgeschätzt [EM79], für ermüdetes Kupfer wurde 50nm geschlossen [MAH79]. Dies ist für die unter zyklischer Verformung entstehenden Versetzungsstrukturen relevant.
- Parallele Stufenversetzungen mit antiparallelen Burgersvektoren bilden einen Versetzungsdipol. Dieser hat zwei stabile 45°-Lagen. Es wird vermutet, dass er bei zyklischer Belastung zwischen diesen Lagen quasireversibel umklappt (Abb. 2.5) (z.B. [Chr97]). Ist der Abstand zwischen den Stufenversetzungen klein (in Kupfer kleiner als ca. 1,6nm), so wird der Dipol instabil, disintegriert und es bleiben Punktdefekte zurück [Fri64; Cot77; ER73]. Dies ist ebenfalls relevant für die unter zyklischer Belastung entstehenden Versetzungsstrukturen.

Schneiden sich Schraubenversetzungen unterschiedlicher Gleitsysteme, so entsteht an der Schnittstelle ein unbeweglicher Jog und die Versetzung ist festgepinnt. Festgepinnte Versetzungen können zur Bildung von Versetzungsquellen und zur Versetzungsmultiplikation führen. Eine anschauliche Versetzungsquelle ist die Frank-Read-Quelle: Ist eine Versetzung an zwei Punkten festgepinnt, so kann sich unter Wirkung einer Schubspannung das Versetzungssegment dazwischen ausbuchen. Der Bogen erweitert sich, bis er sich schließlich zu einem Versetzungsring schließt, der sich weiter aufweitet und von der Versetzungsquelle entfernt. Die zur Aktivierung einer Versetzungsquelle nötige Schubspannung ist etwa

$$\tau_{quell} \approx \frac{Gb}{l} \quad (2.3)$$

wobei l die Länge des festgepinnten Versetzungssegments ist. Je nach Abschätzung variiert dieser Wert um Faktoren von 1/2 bis 2 [KH04; VV89; HL82].

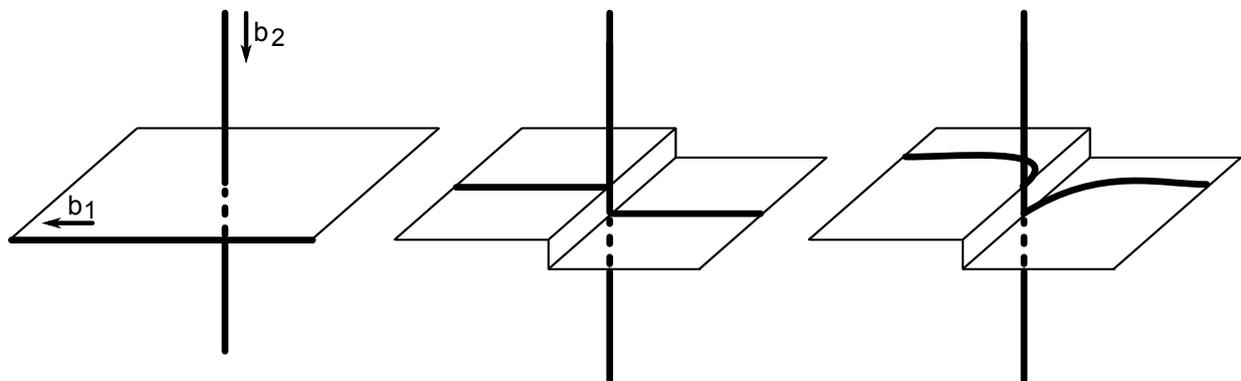


Abbildung 2.6 – Beim Schneiden von Schraubenversetzungen entsteht ein Jog. Dieser hat Stufencharakter und ist im Gleitsystem der Schraubenversetzungen nicht beweglich. Beim weiteren Gleiten der beweglichen Schraubenversetzung können durch Jogdrugging Punktdefekte erzeugt werden. (aus [VV89])

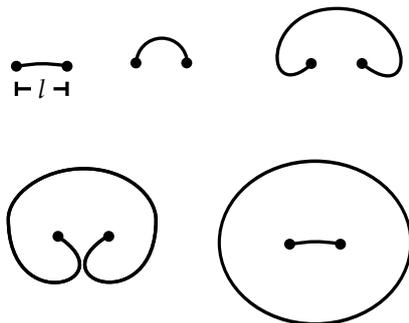


Abbildung 2.7 – Prinzip der Frank-Read-Quelle (aus [KH04])

Bei einer Frank-Read-Quelle ist ein Versetzungssegment der Länge l festgepinnt. Durch eine Schubspannung buchtet es sich aus und erweitert sich, falls die Spannung groß genug ist, um den kritischen Krümmungsradius $l/2$ zu überschreiten. Die ausgeweitete Versetzungslinie schließt sich zu einem Ring, der sich unter einer Schubspannung weiter von der Quelle entfernt. Gleichzeitig entsteht ein neuer Bogen, der sich ebenso weiten und entfernen kann.

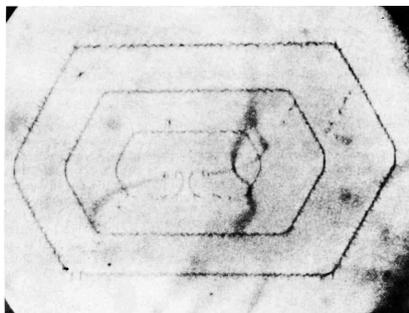


Abbildung 2.8 – Frank-Read-Quelle in Silizium [TD57]

Um die Versetzungslinien einer Frank-Read-Quelle sichtbar zu machen, wird Kupfer auf eine Silizium-Probe aufgebracht und diffundiert in diese hinein. Die Kupferatome lagern sich an die Versetzungslinien an und dort bildet sich ein Zustand in der Bandlücke, der im Infraroten absorbiert. Da Kupfer eine große Diffusionslänge in Silizium hat, werden alle Versetzungslinien dekoriert. Durchleuchtet man den Kristall seitlich mit Infrarotlicht und betrachtet ihn durch ein Infrarotmikroskop, so erscheint der Kristall dunkel und die Versetzungslinien hell (Dunkelfeldabbildung).

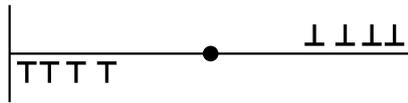


Abbildung 2.9 – Produziert eine Versetzungsquelle viele Versetzungen, so bewegen sich diese immer weiter von der Quelle weg, bis sie von einem Hindernis aufgehalten werden und sich aufstauen. Dabei sammeln sich vor den Hindernissen Versetzungen je einer Orientierung. Durch die gegenseitige Abstoßung der Versetzungen im Pileup ordnen sich diese in einer bestimmten Verteilung an. Geht man von einer symmetrischen Anordnung aus, so gibt Gl. (2.5) diese Verteilung an.

„Pileups“ von Versetzungen

Produziert eine Versetzungsquelle viele Versetzungen in einer Gleitebene, so werden diese – getrieben von der erzeugenden Spannung – durch den Kristall gleiten, bis sie auf ein Hindernis, wie etwa eine Korngrenze, treffen. Nun werden sich alle Versetzungen hinter der vordersten Versetzung aufstauen (engl.: pile up). Auf die vorderste Versetzung wirkt dabei nicht mehr nur die äußere Schubspannung, welche die Quelle aktiviert und das Gleiten verursacht hat, sondern auch die abstoßende Spannung der parallelen Versetzungen hinter ihr. Enthält der Pileup viele Versetzungen, so kann in der Summe die Spannung auf die erste Versetzung so groß sein, dass das Hindernis durchstoßen oder umgangen werden kann. Durch Pileups kann also plastische Verformung in einem Nachbarkorn oder ein Riss an einer Korngrenze initiiert werden. Das Konzept der Pileups wird gerne verwendet, um die Hall-Petch-Beziehung $\sigma_{\text{Fl}} \sim d^{-1/2}$, die Korngröße d und Fließspannung σ_{Fl} verbindet, zu erklären (siehe [HL82]).

Die Positionen der Versetzungen in einem zweiendigen Pileup der Länge l (siehe Abb. 2.9) können durch Betrachtung diskreter Versetzungen [EFN51] oder kontinuierlicher Versetzungsverteilungen [Esh49; Lei51] berechnet werden. Die kontinuierliche Variante ist für eine hohe Versetzungsanzahl im Pileup vorzuziehen [HL82]. Man geht davon aus, dass sich die Versetzungen im Pileup so anordnen, dass die Kraft durch die äußere Spannung die durch die anderen Versetzungen erzeugte Kraft aufhebt:

$$\tau b = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \int_{-l/2}^{l/2} \frac{n(\tilde{x})}{\tilde{x} - x} d\tilde{x} \quad \text{für } x \in [-l/2, +l/2] \quad (2.4)$$

Dabei ist $n(x)$ die Verteilung der Versetzungen entlang des Pileups, der sich im Intervall $[-l/2; l/2]$ befindet. Das Vorzeichen von $n(x)$ entscheidet nach Konvention über die Orientierung der Burgersvektoren der Versetzungen im Pileup. Man erhält

$$n(x) = \frac{2(1-\nu)\tau}{Gb} \frac{x}{\sqrt{(l/2)^2 - x^2}} \quad (2.5)$$

Es sammeln sich also vor den Hindernissen Versetzungen je einer Orientierung, deren Abstände untereinander mit wachsendem Abstand vom Ursprung kleiner werden (siehe Abb. 2.9). Für die Anzahl der Versetzungen in jedem „Arm“ des Pileups erhält man

$$N = \int_0^{l/2} n(x) dx = \frac{(1-\nu)l}{Gb} \tau \quad (2.6)$$

[Lei51; HL82] Die Spannung außerhalb des Pileups in Entfernung x von seinem Zentrum ist [FC98]

$$\tau_{\text{Pileup}}(x) = \frac{x}{\sqrt{x^2 - (l/2)^2}} \tau - \tau \quad (2.7)$$

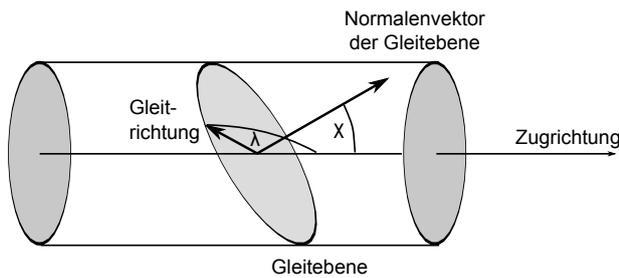


Abbildung 2.10 – Schmidfaktor

Mit dem Schmid- oder Orientierungsfaktor μ rechnet man äußere Zugspannung σ und Schubspannung τ in einem Gleitsystem ineinander um. Der Schmidfaktor ergibt sich aus dem Winkel χ zwischen Flächennormale der Gleitebene und Zugrichtung und dem Winkel λ zwischen Gleitrichtung und Zugrichtung: $\mu = \cos \chi \cdot \cos \lambda$

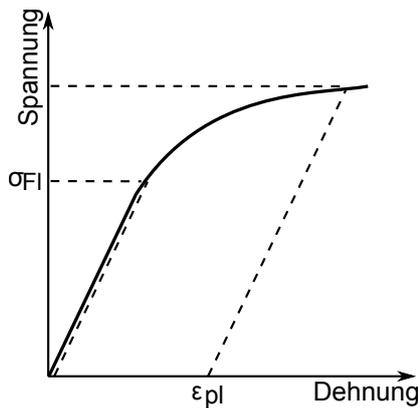


Abbildung 2.11 – Spannungs-Dehnungs-Kurve

Verformt man einen Kristall, so zeigt er für kleine Dehnungen eine Proportionalität zwischen Spannung und Dehnung (Hookescher Bereich). Hier ist die Verformung elastisch und scheinbar reversibel. Für Spannungen oberhalb der Fließspannung σ_{Fl} verhält sich der Kristall plastisch, ein Zurücknehmen der Spannung führt nicht mehr zu einem Zurückgehen zur Originallänge. Es bleibt eine plastische Dehnung ϵ_{pl} zurück. Da der Elastizitätsmodul in guter Näherung unabhängig von der Versetzungsdichte ist, ergibt sich die plastische Dehnung als $\epsilon_{pl} = \epsilon_{ges} - \frac{\sigma}{E}$

2.2 Verformung von Metall

Zieht man an einem Festkörper, so dass sich die Länge von L auf L' ändert, so erfährt er eine technische Dehnung $\epsilon_{tech} = \frac{L'-L}{L}$. Dies ist eine für kleine Dehnungen gültige Näherung der wahren Dehnung $\epsilon_{wahr} = \log(\frac{L'}{L})$. Die zum Verformen aufgewandte Kraft F erzeugt eine Spannung $\sigma = \frac{F}{A}$. Diese Zugspannung wirkt in den Gleitsystemen des Kristalls als eine Schubspannung τ , die zur Bewegung von Versetzungen führen kann. Zug- und Schubspannung sind in Kristallen über den Schmid- oder Orientierungsfaktor μ miteinander verknüpft: $\tau = \mu \cdot \sigma$. Der Schmidfaktor ergibt sich aus dem Winkel χ zwischen Flächennormale der Gleitebene und Zugrichtung und dem Winkel λ zwischen Gleitrichtung und Zugrichtung als $\mu = \cos \chi \cdot \cos \lambda$ (siehe Abb. 2.10).

Monotone Verformung

Für kleine Werte sind Spannung und Dehnung proportional, die Proportionalitätskonstante heißt Elastizitäts- oder E-Modul (Hookesches Gesetz $\sigma = \epsilon \cdot E$). In diesem Bereich kommt die Längenänderung des Kristalls hauptsächlich durch eine Vergrößerung der Atomabstände im Kristallgitter zustande. Übertrifft in einem Gleitsystem die Schubspannung durch die Verformung die zur Bewegung von Versetzungen notwendige Schubspannung, so werden sich in diesem Gleitsystem Versetzungen bewegen. Treffen diese allerdings auf nicht zu viele Hindernisse, bleibt die Versetzungsdichte nahezu unverändert und die Verformung kann als reversibel angesehen werden. Makroskopisch kehrt der Kristall scheinbar unverändert zu seiner Ausgangsform zurück. Dieser Bereich kleiner Verformungen im monotonen Zugversuch heißt elastischer Bereich. Er wird nach oben begrenzt durch die Fließspannung σ_{Fl} , ab der die

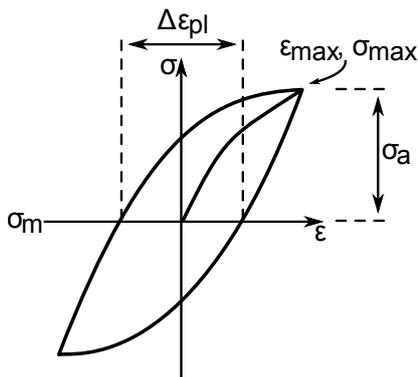


Abbildung 2.12 – Hysteresekurve bei zyklischer Verformung (aus [Chr97])
Bei zyklischer Verformung sieht man im Spannungs-Dehnungs-Diagramm eine Hysteresekurve.

Schubspannung in den Hauptgleitsystemen groß genug ist, dass Versetzungsmultiplikation in relevanter Menge stattfindet. Die Verformung findet nun hauptsächlich durch Abgleitung von Versetzungen statt und ist somit irreversibel. Makroskopisch kehrt der Kristall nach Entlastung nicht in seine Ursprungsform zurück, sondern es bleibt eine plastische Dehnung ϵ_{pl} zurück. Dieser Bereich heißt plastischer Bereich. Abb. 2.11 stellt den Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung beim monotonen Zugversuch schematisch dar.

Zyklische Verformung

Schon bei Spannungen weit unterhalb der Fließspannung finden irreversible Prozesse statt, die bei zyklischer Verformung über eine genügend große Zahl von Verformungszyklen zum Bruch durch Ermüdung führen.

Im Labor wird zyklische Verformung im einfachsten Fall uniaxial ausgeführt; wird ein Einkristall verformt, so orientiert man ihn häufig so, dass ein Gleitsystem einen maximalen Schmidfaktor hat und gegenüber den anderen bevorzugt ist (Einfachgleitung). Die Verformung wird spannungs- oder dehnungskontrolliert ausgeführt. Dabei variiert man die Spannung bzw. Dehnung periodisch um einen Mittelwert σ_m bzw. ϵ_m . Dieser Mittelwert kann dem entlasteten Zustand des Werkstücks entsprechen ($\sigma_m = 0$ bzw. $\epsilon_m = 0$; reine Wechselbeanspruchung), aber auch ein anderer Wert ist möglich. Neben der reinen Wechselbeanspruchung werden Experimente mit Schwellbeanspruchung durchgeführt, bei denen die Unterspannung σ_u , die kleinste im Zyklus erreichte Spannung, null ist.

Misst man Spannung und Dehnung, so erhält man im Spannungs-Dehnungs-Diagramm eine Hysteresekurve (Abb. 2.12).

Der Grund für die Ermüdung trotz kleiner Belastung liegt darin, dass immer, wenn Versetzungen sich bewegen und Hindernisse überwinden, irreversible Prozesse ablaufen und der dadurch entstehende Schaden sich im Laufe der Zeit aufsummiert. Um im Modell diese irreversiblen Prozesse quantifizieren zu können, ist es notwendig, die sich bei zyklischer Belastung ausbildenden Versetzungsstrukturen detaillierter zu betrachten.

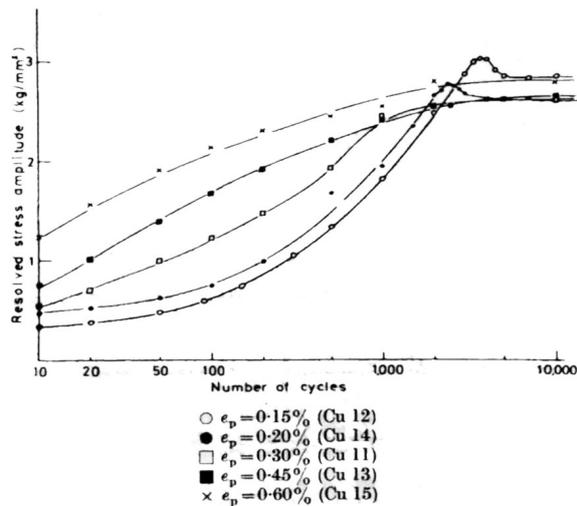


Abbildung 2.13 – Verfestigungskurve in Kupfer [Win74]

Ausgeheilte Metalle zeigen in der Regel Verfestigung in den ersten 1000-10000 Zyklen. Diese heißt zyklische Verfestigung. Bei dehnungskontrollierter Verformung zeigt sich Verfestigung durch ein Ansteigen der Maximalspannung.

Versetzungsstrukturen bei zyklischer Verformung

Da das Quergleiten von Schraubenversetzungen in kubisch-flächenzentrierten Kristallen mit welligem Gleitverhalten schon bei relativ kleinen Spannungen möglich ist, bilden sich hier typische Versetzungsmuster aus. Wenn man diese Kristalle aus dem ausgeheilten Zustand verformt, zeigen sie in den ersten 1000-10000 Zyklen einer zyklischen Verformung *zyklische Verfestigung*, d.h. bei dehnungskontrollierter Verformung nimmt die erreichte Maximalspannung von Zyklus zu Zyklus zu, bei spannungskontrollierter Verformung nimmt die Dehnung ab (Abb. 2.13). Nach dieser anfänglichen Verfestigung bleibt die Maximalspannung bzw. -dehnung für nahezu die gesamte restliche Lebensdauer konstant. Dies liegt daran, dass sich im Laufe der ersten mehreren 1000 Zyklen Versetzungsstrukturen bilden, die danach stabil bleiben und sich nicht mehr ändern. Die Art der gebildeten Versetzungsstrukturen hängt von der plastischen Dehnung ab und davon, ob die untersuchte Messprobe ein- oder polykristallin ist. Allen Strukturen ist gemein, dass es Bereiche hoher und niedriger Versetzungsdichten gibt, die sich wie Kanäle durch den Kristall ziehen (siehe Abb. 2.15). In den Bereichen hoher Versetzungsdichten finden sich hauptsächlich Dipole von Stufenversetzungen, in den Bereichen niedriger Versetzungsdichten hauptsächlich Schraubenversetzungen.

In Einkristallen bilden sich je nach Größe der plastischen Dehnung drei Arten von Strukturen. Zu jeder plastischen Dehnung gehört ein typischer Wert der Sättigungsspannung, die zusammen in der zyklischen Spannungs-Dehnungs-Kurve (CSSC) aufgetragen werden⁴ (Abb. 2.14). Sie zeigt eine ansteigende Kurve für kleine Dehnungen (Bereich A), ein Plateau für mittlere Dehnungen (Bereich B) und für große Dehnungen einen weiteren Anstieg (Bereich C). Ursache für die verschiedenen Bereiche der Kurve sind unterschiedliche Arten von Versetzungsstrukturen.

Bei kleinen plastischen Dehnungen findet Gleiten nur im Hauptgleitsystem statt. Die Stu-

⁴Man beachte: Zur Erstellung einer zyklischen Spannungs-Dehnungs-Kurve wird nicht eine Probe mit der Zeit mit immer größerer Dehnungsamplitude verformt, sondern jeder Punkt auf der Kurve entspricht einem eigenen Experiment, in dem bei gegebener Dehnungsamplitude die erreichte Sättigungsspannung nach der anfänglichen Verfestigung gemessen wurde.

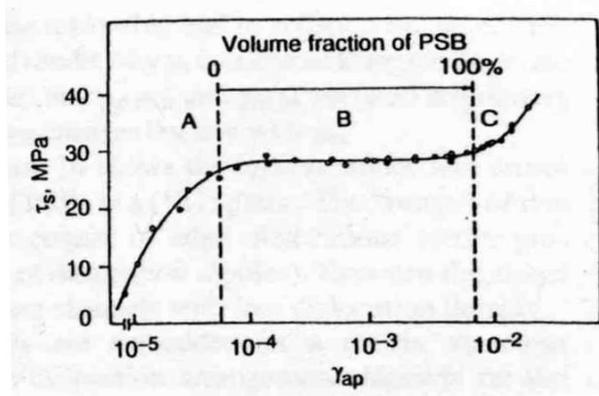


Abbildung 2.14 – Zyklische Spannungs-Dehnungskurve von Kupfer [Mug78]

Verformt man zyklisch, so erreicht die Verfestigungskurve am Ende der anfänglichen Verfestigung je nach plastischer Dehnung γ_{pl} verschiedene Sättigungsschubspannungen τ . Diese werden im zyklischen Spannungs-Dehnungs-Diagramm gegen die plastische Dehnung aufgetragen. Es ergibt sich für zur Einfachgleitung orientierte Einkristalle typischerweise ein Plateau für mittlere Dehnungen.

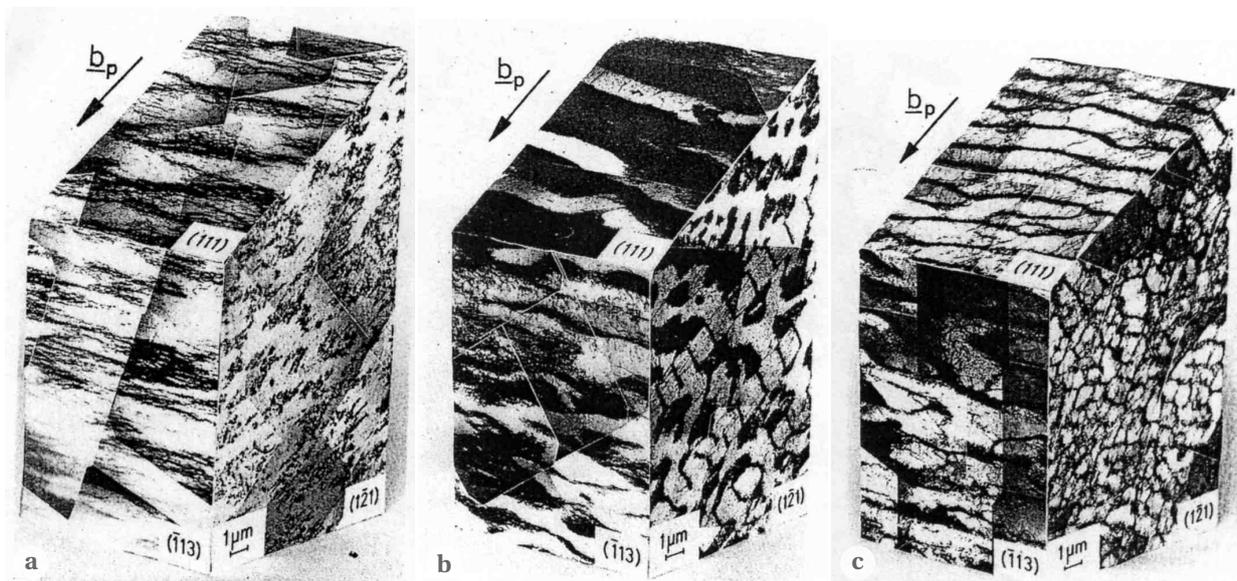


Abbildung 2.15 – TEM-Aufnahmen der Versetzungsstrukturen in Einkristallen [LCM86; MAH79]

Bei plastischen Dehnungen aus den Bereichen A, B und C der zyklischen Spannungs-Dehnungskurve wurde ein für Einfachgleitung orientierter Einkristall bis zur Sättigung zyklisch verformt. Es wurden TEM-Aufnahmen von je 3 Ebenen gemacht und dreidimensional montiert. Bereiche hoher Versetzungsdichte erscheinen dunkel.

(a) Im Bereich kleiner plastischer Dehnungen bilden sich lose Bündel oder Adern mit höherer Versetzungsdichte.

(b) Im Bereich mittlerer plastischer Dehnungen bilden sich innerhalb einer Matrix aus Adern und Kanälen leiterartige Bänder. Der Volumenanteil dieser persistenten Gleitbänder hängt von der plastischen Dehnung ab. Sind persistente Gleitbänder vorhanden, so findet die Verformung fast nur noch in den Gleitbändern statt.

(c) Im Bereich hoher plastischer Dehnung bilden sich Zellstrukturen. In den Wänden der Zellen finden sich neben Versetzungen des Hauptgleitsystems auch Versetzungen aus anderen Gleitsystemen. Eine solche Struktur mit langgezogenen Zellen sieht man nicht in jedem Material.

fenversetzungen finden sich zu Bündeln oder dichteren Adern (engl. veins) zusammen, die einen Volumenanteil von 50% haben (Abb. 2.15a). In diesem Bereich finden auch irreversible Prozesse statt, die jedoch so klein sind, dass es 10^9 oder mehr Zyklen braucht, bis sie zum Ermüdungsbruch führen können (Ultra oder Very High Cycle Fatigue, UHCF/VHCF; siehe [Mug09]).

Bei mittleren Dehnungen findet eine Lokalisierung der plastischen Verformung statt. Sie ist auf der Oberfläche des Kristalls durch linienförmige Markierungen zu sehen, die auch nach Polieren und erneutem Verformen an den selben Stellen wieder entstehen (engl.: persistent slip markings, PSM). Diese Markierungen müssen also äußeres Zeichen einer Struktur im Volumen sein, denen der Name persistente Gleitbänder (engl.: persistent slip band, PSB) gegeben wurde. Mikroskopisch äußern sie sich durch eine leiterförmige Struktur, die in Hauptgleitrichtung verläuft (Abb. 2.15a). Die Verformung ist in den persistenten Gleitbändern weitaus größer als in der umgebenden Matrix aus Adern von Versetzungen. Die Verformung findet in den persistenten Gleitbändern statt, indem Segmente der Stufenversetzungen aus den Wänden der Leiterstruktur ausbuchen und sich weiten wie bei einer Frank-Read-Quelle (Abb. 2.16b und 2.16a). Trifft dieser Bogen auf die gegenüberliegende Wand von Versetzungen, so kann der stufenartige Teil des Bogens teilweise in der Wand annihilieren, während der schraubenartige Teil durch den versetzungsarmen Kanal gleitet und dabei in den Wänden die Länge der Stufenversetzung vergrößert [EM79; Mug81; LK85; Tab+83]. In der Matrix findet die relativ kleine Verformung durch quasireversible Prozesse wie das Hin- und Herbiegen von Schraubenversetzungen [GM75; KW79] und das Umklappen von Dipolen statt (siehe [Chr97]). Die Spannung im zyklischen Spannungs-Dehnungs-Diagramm erhöht sich in diesem Bereich nicht, da das Material auf höhere Dehnungen mit einem höheren Volumenanteil von persistenten Gleitbändern reagiert.

Im Bereich hoher plastischer Dehnung (Abb. 2.15a) sind neben dem Hauptgleitsystem weitere aktiv. Es bilden sich Zellstrukturen, in deren Wänden neben Versetzungen des Hauptgleitsystems auch solche der anderen Gleitsysteme vorhanden sind.

Im Polykristall existieren mit Blick auf die Versetzungsstrukturen ebenso diese drei Bereiche, jedoch sind die Strukturen deutlich weniger ausgeprägt und die Grenzen zu niedrigeren Dehnungen verschoben. Das liegt daran, dass durch den Zusammenhalt der unterschiedlich orientierten Nachbarkörner komplexe Spannungsverhältnisse entstehen, durch die schon bei sehr viel kleineren Dehnungen eine Versetzungsbewegung außerhalb der Hauptgleitebene relevant wird. In einigen Körnern tauchen auch Unterbereiche mit verschiedenen Typen von Versetzungsstrukturen auf. (Siehe [Chr97])

Fehlstellenproduktion durch persistente Gleitbänder

Aus TEM-Untersuchungen und Widerstandsmessungen weiß man, dass die Fehlstellenkonzentration bei zyklischer Verformung zunimmt. Aus der Positronenannihilationspektroskopie weiß man außerdem, dass bei Ermüdung kurz vor dem Bruch eine maximale Konzentration offenen Volumens erreicht wird. Die Fehlstellenkonzentration ist also ein guter Parameter für

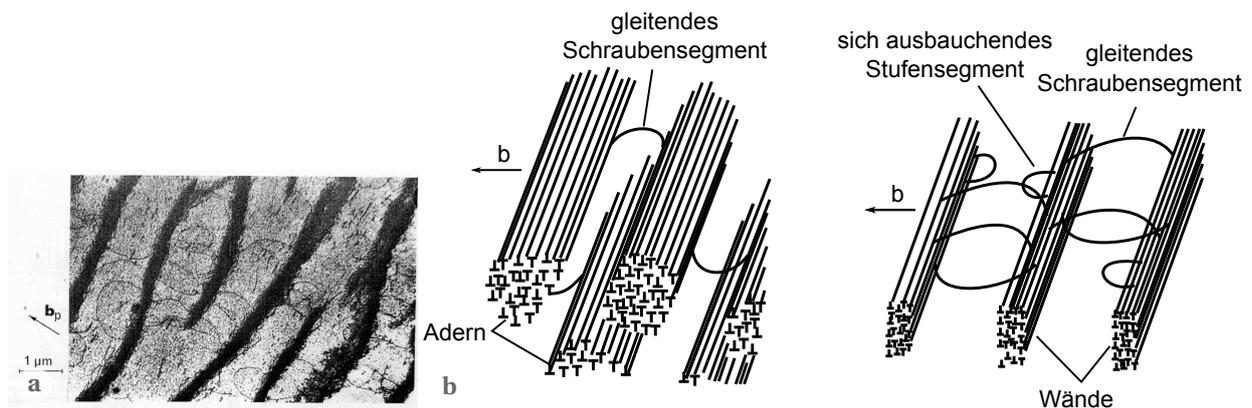


Abbildung 2.16 – (a) Detail-Aufnahme eines persistenten Gleitbands [MAH79]

In dieser TEM-Aufnahme sieht man Versetzungen, die zwischen den Wänden der persistenten Gleitbänder aufgespannt sind, und Versetzungsbögen. Sie wurden unter Belastung durch Bestrahlung mit Neutronen festgepinnt.

(b) Skizze der Versetzungsstrukturen in den persistenten Gleitbändern [Mug80]

Persistente Gleitbänder bestehen aus versetzungsreichen Wänden und versetzungsarmen Kanälen. Die Wände bestehen aus Dipolen von Stufenversetzungen. Diese sind stellenweise festgepinnt, die Stücke dazwischen können sich ausbuchen und als Bögen in die Kanäle hineinreichen. Wird ein Bogen durch eine Schubspannung geweitet und erreicht die gegenüberliegende Wand, so bildet der Stufenanteil dort mit anderen Versetzungen einen Dipol, während die Schraubenanteile weiter durch den Kanal gleiten und sich voneinander entfernen. Dabei verlängern sie auch die Länge der Stufenanteile in den Wänden. Treffen die Schraubenanteile auf eine entgegengesetzt gerichtete Schraubenversetzung, so annihilieren sie.

den Schaden.⁵

Das EGM-Modell von Essmann, Gösele und Mughrabi [EGM81] beschreibt u.a. die Produktion von Fehlstellen durch persistente Gleitbänder. Sie gehen wie oben beschrieben davon aus, dass sich die Versetzungen in den Wänden der persistenten Gleitbänder in einem dynamischen Gleichgewicht befinden und die äußere Verformung dadurch mitmachen, dass ständig neue Versetzungen produziert werden, die dann in zwei gegenüberliegenden Wänden der persistenten Gleitbänder mit dort vorhandenen Versetzungen Dipole bilden und annihilieren. Durch die Annihilation der Dipole entstehen Leerstellen oder Zwischengitteratome. Diese werden jedoch teilweise wieder von gleitenden Stufenversetzungen aufgesammelt, so dass es nach einer Weile zu einer Sättigung der Punktdefektkonzentration in den Wänden der persistenten Gleitbänder kommt. Da die Bildungsenergie von Leerstellen deutlich kleiner ist als die von Zwischengitteratomen, ist es plausibel, dass die gebildeten Punktdefekte größtenteils Leerstellen sind [Lom59].

Ist die Temperatur hoch genug, so sind die Leerstellen durch Diffusion sehr beweglich. Diejenigen, die im Grenzbereich des persistenten Gleitbands zur Matrix produziert werden, können in die Matrix entkommen, sich dort verteilen und z.B. an Versetzungen anlagern. Die Breite

⁵Die mit Widerstandsmessungen beobachtete Fehlstellenkonzentration erreicht nach wenigen Zyklen einen Sättigungswert, während mit der Positronenannihilationsspektroskopie bis zum Bruch eine steigende Konzentration offenen Volumens beobachtet wird. Dies liegt vermutlich daran, dass für Positronen Leerstellen, Leerstellencluster, Jogs und evt. sogar Kinken tiefe Haftstellen sind und damit als offenes Volumen gemessen werden, während bei Widerstandsmessungen Jogs und Kinken als Fehlertyp Versetzungslinie gemessen werden und nicht zusätzlich zum Gesamtwiderstand beitragen.

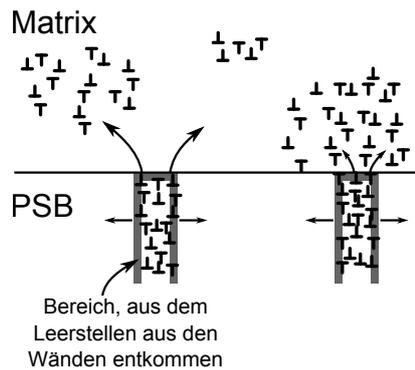


Abbildung 2.17 – Leerstellendiffusion im EGM-Modell (aus [EGM81])

Im EGM-Modell entstehen Leerstellen in den Wänden der persistenten Gleitbänder. Bei hohen Temperaturen sind diese durch Diffusion sehr mobil. Die meisten werden jedoch von Versetzungen im persistenten Gleitband aufgesammelt. Lediglich die in einem schmalen Bereich ($5-10\text{nm}$) an der Grenzfläche zwischen Gleitband und Matrix entstehenden Leerstellen schaffen es, in die Matrix zu entkommen und dort in Leerstellensenken zu verschwinden. Auf diese Weise wird ständig neues Material aus der Matrix in das persistente Gleitband transportiert.

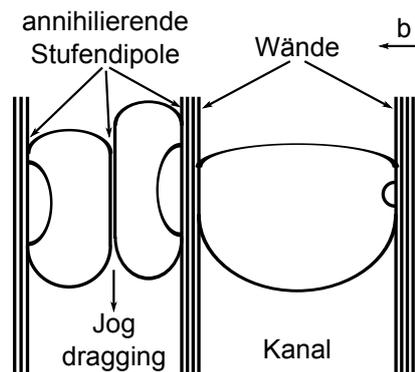


Abbildung 2.18 – Leerstellenproduktion im Polák-Modell (aus [Pol93])

Im Polák-Modell entstehen Leerstellen in den Wänden und Kanälen der persistenten Gleitbänder. In den Wänden entstehen sie, wenn ein Versetzungsbogen die gegenüberliegende Wand erreicht und dort einen Dipol bildet (rechts). In den Kanälen entstehen sie, wenn zwei Versetzungsringe aus gegenüberliegenden Wänden sich treffen. Sie bilden im Kanal einen Stufendipol, an dessen Enden Jogs entstehen. Bei der weiteren Wanderung der Schraubenanteile werden durch Jogdragging weitere Leerstellen produziert.

des Grenzbereichs ist näherungsweise so groß wie die mittlere Diffusionslänge der Fehlstellen vor Reaktion in der Wand. Für sehr bewegliche Fehlstellen ist die Breite des Grenzbereichs unabhängig von der Temperatur und wird mit typischerweise $5-10\text{nm}$ abgeschätzt.

Eine Erweiterung des EGM-Modells durch Polák [Pol87] kann die Details der auf der Oberfläche des Kristalls sichtbaren Spuren der persistenten Gleitbänder für kubisch-flächenzentrierte Metalle besser beschreiben als das EGM-Modell [MOP09]⁶. Polák geht davon aus, dass Punktdefekte im gesamten persistenten Gleitband und nicht nur in den Wänden durch Annihilation antiparalleler Stufenversetzungen und durch die Bewegung von Jogs entstehen [Pol93]. Da die Leerstellen homogen im ganzen Volumen des persistenten Gleitbands produziert werden, aber in den Wänden der persistenten Gleitbänder und den Adern der Matrix deutlich häufiger als in den Kanälen annihilieren, kommt es zu einer Umverteilung von Leerstellen aus den Kanälen heraus, also effektiv zu einem Transport von Masse in die Kanäle hinein.

Beide Modelle sagen für niedrige Temperaturen, bei denen Leerstellen nicht beweglich sind, eine Sättigung der Leerstellenkonzentration voraus.

2.3 Methoden zur Vorhersage der Lebensdauer bei Ermüdung

Im Folgenden werden exemplarisch Methoden zur Vorhersage der Lebensdauer oder Restlebensdauer bei Ermüdung vorgestellt. Alle Methoden zur Vorhersage der Ermüdung sind auf die

⁶Man beachte, dass Polák Mitautor in [MOP09] ist. Mughrabi, Mitautor von [EGM81], erwähnt in [Mug09] auch die Erweiterungen durch Polák, bewertet sie aber nicht.

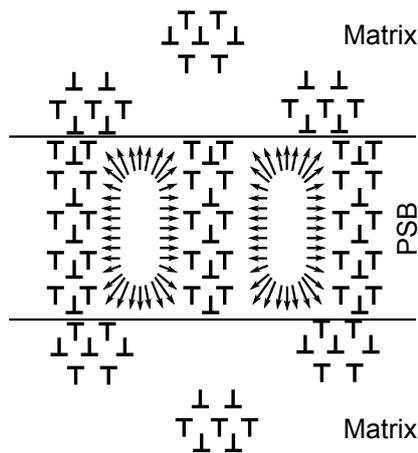


Abbildung 2.19 – Leerstellendiffusion im Polák-Modell (aus [PMO03])
 Im Polák-Modell entstehen Leerstellen in den Wänden und Kanälen des persistenten Gleitbands. Durch geringere Annihilation ist die effektive Konzentration von Leerstellen in der Mitte der Kanäle am größten. Diese diffundieren bei genügend hohen Temperaturen in die Wände und in den Grenzbereich zwischen Matrix und Gleitband. So wird ständig Material aus dem Grenzbereich in das Gleitband transportiert, es entstehen eine Extrusion, umgeben von zwei schmalen Intrusionen.

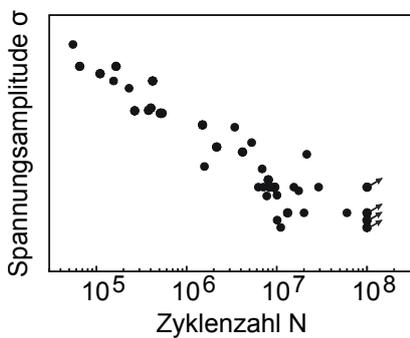


Abbildung 2.20 – Wöhler-Diagramm (aus [HM06])
 Ein Wöhler-Diagramm dient der statistischen Abschätzung der Belastbarkeit eines Materials. Dazu werden gleichartige Proben aus dem untersuchten Material bei verschiedenen, aber konstanten Wechselbelastungen zyklisch verformt, bis sie brechen. Die Belastung wird gegen die Zahl der Zyklen bis zum Bruch aufgetragen.

Beobachtung mindestens einer ermüdeten Probe angewiesen - eine ab initio-Simulation der Ermüdung ist wegen der Vielzahl der an der Ermüdung beteiligten Gitterfehler und Strukturen in absehbarer Zeit nicht vorstellbar.

Wöhler-Verfahren

Wegen der statistischen und komplexen Natur der Ermüdung werden zwei Proben aus dem gleichen Material, der gleichen Geometrie, der gleichen Vorbehandlung etc. bei gleicher Wechselbeanspruchung nicht nach einer gleichen Anzahl von Belastungszyklen brechen. Notiert man jedoch für eine genügend große Anzahl äquivalenter Proben die Bruchzyklenzahl bei verschiedenen, jeweils festen Wechselbelastungen, so kann man aus der resultierenden Wöhler-Kurve Bruchwahrscheinlichkeiten ablesen. Die Erstellung eines Wöhler-Diagramms ist zeit- und materialaufwändig. Mit Wöhler-Diagrammen und den daraus abgeleiteten Methoden lassen sich keine Aussagen über individuelle Werkstücke machen. Jedoch kann abgeschätzt werden, für welche Belastungen ein Material sinnvoll eingesetzt werden kann und ab wann es auf Risse überprüft und ausgetauscht werden sollte.

Beobachtung des Risswachstums

Werden Risse in einem Werkstück beobachtet, so können mit Hilfe der Bruchmechanik Aussagen über das weitere Anwachsen der Risse und damit über das endgültige

Versagen gemacht werden. Die Bruchmechanik berechnet aus der Geometrie des Risses die Spannungsverhältnisse vor dem Riss und macht Voraussagen über sein Wachstum.

Eine beliebte Methode zur Entdeckung von Rissen ist die Materialprüfung mit Ultraschall, wie sie auch in den in der Einleitung erwähnten ICE-Achsen verwendet wird. Hierbei wird ein Ultraschall-Puls in das Material gesandt, und sein Echo aufgenommen. Echos werden durch Reflexion des Schalls an Grenzflächen erzeugt. Enthält das aufgenommene Echo-Signal neben dem der Rückwand weitere Echos, oder kommt unerwarteterweise kein Echo zurück, so gibt es weitere Grenzflächen im Material, z.B. Risse. Mit dieser zerstörungsfreien Methode können nur Risse entdeckt werden, die bereits eine gewisse Größe haben. (Siehe z.B. [BS04])

Messung des Anteils offenen Volumens mit Positronenannihilationsspektroskopie

Mit der Positronenannihilationsspektroskopie hat man ein Werkzeug, um den Anteil offenen Volumens im Material zu untersuchen. Hierbei nutzt man, dass offene Volumen, wie z.B. Leerstellen, Leerstellencluster und Jogs, für ins Material eingebrachte Positronen attraktive Potentiale sind, in welche die thermalisierten Positronen während ihrer Diffusion durch das Material eingefangen werden. Positronen annihilieren mit Elektronen des Kristallgitters. Da die Elektronenimpulsverteilung im offenen Volumen sich von der im Zwischengitter unterscheidet, macht sich der Anteil offenen Volumens in einer mehr oder weniger starken Dopplerverbreiterung des 511keV -Photopeaks bemerkbar. Der S -Parameter ist ein Maß für die Dopplerverbreiterung des Photopeaks und damit für den Anteil offenen Volumens im Material [PN94; KRL99]. Da in vielen Metallen der S -Parameter normiert auf den S -Parameter des ungeschädigten Materials kurz vor dem Bruch einen für das Material typischen Wert annimmt, lässt sich also nicht nur eine Aussage über die fortschreitende Erhöhung des Anteils offenen Volumens machen, sondern auch - falls der Zusammenhang zwischen dieser Erhöhung und Zyklenzahl (z.B. logarithmisch) bekannt ist - eine Voraussage über die Restlebensdauer machen. Dies gelang zunächst am austenitischen Stahl X6 CrNiTi 18-10, in dem über das gesamte Volumen der S -Parameter gleichmäßig zunimmt [Ben02]. Im ferritischen Stahl C45E findet die Zunahme des S -Parameters stark lokalisiert statt. Durch die gute Ortsauflösung der Bonner Positronen-Mikrosonde konnte die Restlebensdauer in diesem Material vorhergesagt werden [Eic06]. So gelang auch eine Vorhersage für die technische Aluminiumlegierung AA6082 [Wir08] und den ICE-Achsstahl A4T [Eic09].

Kapitel 3

Modell und Simulation

In der Diplomarbeit [Fin06] wurde ein einfaches, granulares Modell vorgestellt, mit dem es gelang, einige Eigenschaften der zyklischen Verformung eines polykristallinen Metalls zu simulieren. Das Modell basierte auf dem Konzept des zellulären Automaten, dessen Zellen die Kristallite des Metalls darstellen. Die komplexen Eigenschaften der Kristallite wurden stark auf wenige skalare Größen vereinfacht. Das Modell war auf den eindimensionalen Fall einer Kette von Körnern beschränkt. Die Funktionen zur Schadensakkumulation waren ohne physikalische Grundlage ergebnisorientiert ausgewählt. Es gelang, Verfestigung und die Ausbreitung von Schadensstrukturen zu simulieren.

Dieses Modell wird hier entscheidend weiterentwickelt. Es wurde auf zwei und drei Dimensionen erweitert und die Mechanismen zur Schadensakkumulation wurden durch solche mit physikalischem Hintergrund ersetzt. Das Modell ist weiterhin reduziert auf die wichtigsten Prozesse, so dass eine Simulation kleiner, makroskopischer Proben (mm -Größenordnung) auf einem einzelnen Arbeitsplatzrechner möglich ist.

3.1 Darstellung des Kristalls im Modell

Die Kristallite des polykristallinen Metalls werden durch die Zellen eines zellulären Automaten repräsentiert¹. Sie werden dabei zu Quadern vereinfacht. Im eindimensionalen Modell bilden sie eine Kette, im zweidimensionalen ein dünnes Blech, im dreidimensionalen einen Quader (Abb. 3.1).

Die komplexen Eigenschaften eines Kristallkorns werden dabei durch wenige Parameter dargestellt: Die geometrische Form wird beschrieben durch einen Quader mit Kantenlängen l_x , l_y , l_z . Die drei Euler-Winkel θ , ψ und φ geben die Orientierung des Korns relativ zum äußeren Koordinatensystem mit Zugrichtung x an. Elastizitätsmodul E , Versetzungsdichte ρ/ρ_0 relativ zum Anfangszustand ρ_0 und Leerstellenkonzentration pro Atom c_V beschreiben das Verformungsverhalten des Korns.

¹Man beachte: Im zellulären Automaten ist die Länge der Körner eine Eigenschaft der Zellen. Die geometrische Anordnung wird durch die Definition der Nachbarschaft hergestellt.

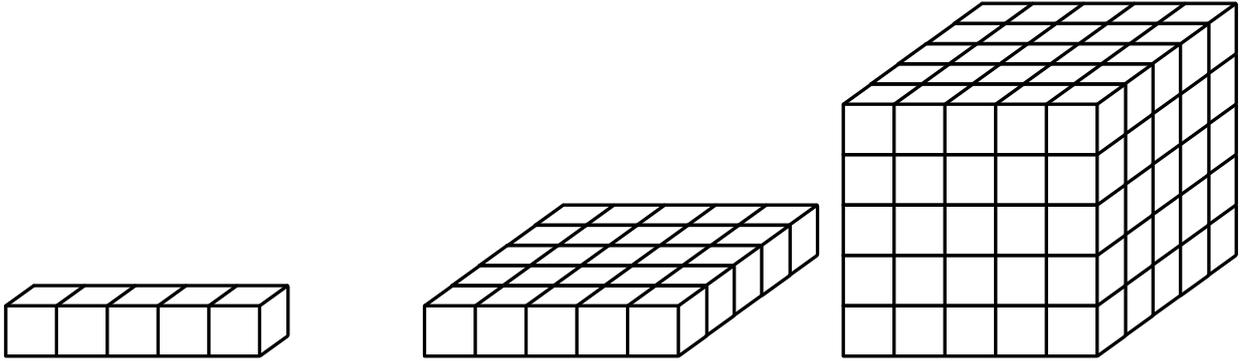


Abbildung 3.1 – Modell in den 3 Dimensions-Varianten

Die Position eines Kornes x ergibt sich durch Addition der Längen der Körner der gleichen Reihe mit kleinerem Index:

$$x(1) = 0 \quad (3.1)$$

$$x(i) = \sum_{j=1}^{i-1} l_x(j) = x(i-1) + l_x(i-1) \quad \text{für } i = 2 \dots N \quad (3.2)$$

Aus den Orientierungswinkeln kann für alle Gleitsysteme eines Kornes, charakterisiert durch Gleitrichtung \vec{r} und die Normale auf die Gleitebene \vec{n} , der Schmid- oder Orientierungsfaktor μ bestimmt werden (siehe [Fin06]). Das Gleitsystem mit dem höchsten Schmidfaktor ist das aktive Gleitsystem. Nur in diesem wird im Modell Versetzungsbewegung stattfinden. Zwischen äußerem Koordinatensystem (Zugrichtung, Lage der Nachbarkörner) und innerem Koordinatensystem (Gleitsysteme) wird durch Drehung um die drei Euler-Winkel $\theta \in [0; \pi)$, $\psi \in [0; \pi)$ und $\varphi \in [0; 2\pi)$ transformiert. Dabei verwende ich die Konvention, dass zunächst mit θ um die x -Achse, dann mit ψ um die y' -Achse und schließlich mit φ um die x'' -Achse gedreht wird. Die resultierende Drehmatrix ist

$$A = D_x(\theta)D_y(\psi)D_x(\varphi) \quad (3.3)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi \sin \varphi & \sin \psi \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \psi & \cos \theta \cos \varphi - \sin \theta \cos \psi \sin \varphi & -\cos \theta \sin \varphi - \sin \theta \cos \psi \cos \varphi \\ -\cos \theta \sin \psi & \sin \theta \cos \varphi + \cos \theta \cos \psi \sin \varphi & -\sin \theta \sin \varphi + \cos \theta \cos \psi \cos \varphi \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Ein Vektor \vec{v} des inneren Koordinatensystems wird im äußeren dargestellt durch $\vec{\tilde{v}} = A\vec{v}$, ein Vektor $\vec{\tilde{v}}$ des äußeren Koordinatensystems wird im inneren dargestellt durch $\vec{v} = A^T\vec{\tilde{v}}$.

Eine zentrale Rolle spielen im Modell die Spannungen, die auf ein Korn wirken. Ein Korn kann prinzipiell Zugspannungen in allen drei Raumrichtungen σ_x , σ_y , σ_z , sowie Schubspannungen $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{yz} = \tau_{zy}$, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ erfahren, falls es an der entsprechenden Grenzfläche einen Nachbarn hat. Im eindimensionalen Fall entfallen alle Schubspannungen, im zweidimensionalen Modell ist nur die Schubspannung τ_{xy} ungleich Null. Durch die von Versetzungen eines Nachbarkorns erzeugten Spannungen ist es möglich, dass die Zugspannungen σ_y und σ_z im eindimensionalen Modell bzw. σ_z im zweidimensionalen Modell nicht Null sind (siehe Abschnitt 3.3).

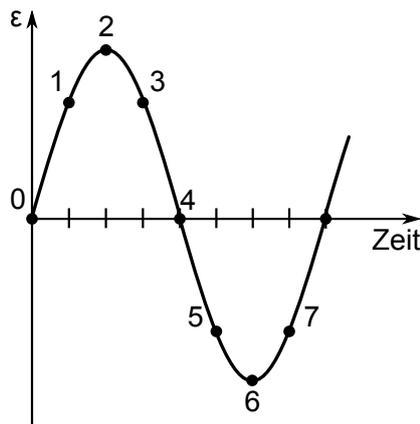


Abbildung 3.2 – Diskretisierung der äußeren Verformung in typischerweise 8 Zeitschritte

Verschiedene Materialien werden in diesem Modell durch die Materialeigenschaften Elastizitätsmodul E , Schubmodul G , Poissonzahl ν , Länge des Burgersvektors b und den typischen Durchmesser der Kristallite beschrieben. Als Länge des Burgersvektor wird der kleinstmögliche Wert, also der Abstand nächster Nachbarn im Kristallgitter, gewählt, da kleine Burgersvektoren energetisch bevorzugt sind. Einige zweiphasige Metalle können dargestellt werden, indem man den Körnern anteilig die Eigenschaften der Phasen gibt.

Eine Vordeformation einzelner, einiger oder aller Körner kann durch einen Startwert $\rho/\rho_0 > 1$ in den entsprechenden Körnern erreicht werden.

3.2 Berechnung der Verformung

Mit dem Modell wird eine dehnungskontrollierte, uniaxiale Verformung in x -Richtung simuliert. Dabei wird der Kristall sinusförmig um seine natürliche Länge verformt. Der Verformungszyklus wird in typischerweise 8 diskreten Zeitschritten berechnet² (siehe Abb. 3.2). In jedem Zeitschritt wird die Längenänderung der Körner nach dem Hookeschen Gesetz berechnet, als wäre die Verformung der Körner rein elastisch. Ist die Fließspannung in einem Korn überschritten, wird Plastizität als Korrektur der Spannung hinzugenommen (siehe Kap. 3.4). Zur Berechnung der elastischen Längenänderungen gibt es verschiedene Ansätze, die im folgenden beschrieben werden.

Berechnung durch einen zellulären Automaten

Es ist im Rahmen dieses Modells nicht sinnvoll, die Verformung durch einen zellulären Automaten zu berechnen. Denn wird eine Information nur von einer Zelle an ihre Nachbarn weitergegeben, so braucht man so viele Zeitschritte wie Zellen in einer Reihe, um eine Information, z.B. eine Positionsänderung, von einem Ende der Reihe zum anderen Ende zu transportieren. Das Modell soll aber schnell zu berechnen sein und jeder Verformungsschritt nur durch einen Zeitschritt simuliert werden. [Fin06]

²Eine Diskretisierung wird z.T. auch im Experiment verwendet.

Berechnung reihenweise durch ein iteratives Verfahren

Stattdessen wird die elastische Verformung einer Kette von Körnern durch eine iteratives Verfahren berechnet [Fin06]:

$$l'_x(i) = l_x(i) \cdot \left(1 + \frac{\Delta L_x}{E(i) \cdot \sum_j \frac{l_x(j) l'_x(j)}{E(j)}} l'_x(i) \right) \quad (3.5)$$

Im ersten Iterationsschritt werden die Längen $l_x(i)$ als Ansatz auf der rechten Seite eingesetzt. Hier werden gleichzeitig für alle Zellen einer Reihe aus der Gesamtlängenänderung ΔL_x , den Längen $l_x(i)$ und Elastizitätsmoduln $E(i)$ die neuen Längen der Körner $l'_x(i)$ berechnet. Dabei wird nur das Hookesche Gesetz und die Volumenerhaltung in jedem Korn benutzt.

Dieses Verfahren kann im zwei- oder dreidimensionalen Fall ebenso angewendet werden, wenn man die Reihen unabhängig voneinander berechnet. Alle Reihen haben zu Beginn die gleiche Gesamtlänge in Zugrichtung und erfahren in jedem Zeitschritt die gleiche Gesamtlängenänderung von ΔL_x .

Berechnung reihenweise durch eine geschlossene Formel

Alternativ zu dieser iterativen Berechnung wurde eine geschlossene Formel zur Berechnung der neuen Längen der Körner einer Kette getestet.

Man betrachte eine Kette von N Körnern. Ändert man die Gesamtlänge der Kette um ΔL_x , benötigt man dazu eine Kraft F . Jedes Korn zieht mit dieser Kraft F an seinen Nachbarkörnern

$$F = F(1) = F(2) = F(3) = \dots = F(N) \quad (3.6)$$

Mit $\sigma(i) = \frac{F(i)}{A(i)}$, $\varepsilon(i) = \frac{l'_x(i) - l_x(i)}{l_x(i)}$ und dem Hookeschen Gesetz $\sigma(i) = \varepsilon(i) \cdot E(i)$ folgt für $i = 1 \dots N$

$$\frac{l'_x(1) - l_x(1)}{l_x(1)} E(1) A(1) = \frac{l'_x(i) - l_x(i)}{l_x(i)} E(i) A(i) \quad (3.7)$$

$$\Rightarrow l'_x(i) = l_x(i) + l_x(i) \cdot \varepsilon(1) \cdot \frac{E(1) A(1)}{E(i) A(i)} \quad (3.8)$$

Die Gesamtlängenänderung ΔL_x ist die Differenz aus der Summe der Längen vor und nach

der Verformung

$$\Delta L_x = \sum_{i=1}^N l'_x(i) - \sum_{i=1}^N l_x(i) \quad (3.9)$$

$$= \sum_{i=1}^N l_x(i) \cdot \varepsilon(1) \cdot \frac{E(1)A(1)}{E(i)A(i)} + \sum_{i=1}^N l_x(i) - \sum_{i=1}^N l_x(i) \quad (3.10)$$

$$= \varepsilon(1) \cdot E(1)A(1) \cdot \sum_{i=1}^N \frac{l_x(i)}{E(i)A(i)} \quad (3.11)$$

$$\Rightarrow \varepsilon(1) = \frac{\Delta L_x}{E(1)A(1) \cdot \sum_{i=1}^N \frac{l_x(i)}{E(i)A(i)}} \quad (3.12)$$

$$\Rightarrow \varepsilon(j) = \frac{\Delta L_x}{E(j)A(j) \cdot \sum_{i=1}^N \frac{l_x(i)}{E(i)A(i)}} \quad (3.13)$$

$$\Rightarrow l'_x(j) = l_x(j) \left(1 + \frac{\Delta L_x}{E(j)A(j) \cdot \sum_{i=1}^N \frac{l_x(i)}{E(i)A(i)}} \right) \quad (3.14)$$

Nimmt man an, dass alle Körner das gleiche Volumen V haben, so ergibt sich mit $A(i) = V/l_x(i)$

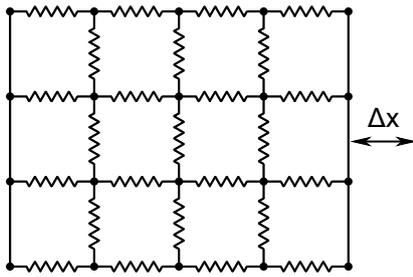
$$l'_x(i) = l_x(i) \cdot \left(1 + \frac{\Delta L_x}{E(i) \cdot \sum_j \frac{l_x(j)^2}{E(j)}} l_x(i) \right) \quad (3.15)$$

Dies ist auch der erste Iterationsschritt zum Lösen der iterativen Formel.

Bei den bisher vorgestellten Methoden wurden alle Reihen um den gleichen Betrag ΔL_x , aber unabhängig voneinander verformt. Insbesondere gibt es also zwischen quer zur Zugrichtung benachbarten Körnern keinerlei Verbindung oder Zusammenhalt. Diesen kann man auf zwei Arten herstellen: Einerseits kann man die Verformung aller Körner gleichzeitig berechnen oder man berechnet die Längen der Körner zunächst reihenweise und fügt dann eine Korrektur ein, die den Zusammenhalt mit den Nachbarn in Querrichtung einbezieht.

Berechnung für alle Körner gleichzeitig (zweidimensional)

Will man die Verformung aller Körner gleichzeitig berechnen, so muss man neben den Kräften in Zugrichtung, die zwischen benachbarten Körnern einer Reihe auftreten, auch die Scherkräfte zwischen benachbarten Körnern in Querrichtung beachten. Man stellt sich dazu den Kristall als durch Federn verbundene Gitterpunkte vor. In einem solchen *Lattice Spring Model* werden die Gitterpunkte bei gegebenen Randbedingungen (Verformung) so angeordnet, dass die Gesamtenergie aller Federn minimal ist. Sind K_n und K_t die Federkonstanten für Zug- bzw. Schubspannungen, \vec{n} und \vec{t} die Vektoren normal bzw. tangential zur ursprünglichen


Abbildung 3.3 – Lattice Spring Model

Ein Lattice Spring Model beschreibt den Kristall als mit Federn verbundene Gitterpunkte. Es wird traditionell verwendet, um Schwingungen im Kristallgitter zu berechnen. Es kann jedoch auch verwendet werden, um quasi-statisch die Verformung des Gitters zu berechnen.

Federposition und \vec{u} die Verschiebung eines Gitterpunkts, so ist

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\text{alle } i} \frac{1}{2} \sum_{j \text{ Nachbar von } i} K_n(i) ((\vec{u}(i) - \vec{u}(j)) \cdot \vec{n})^2 + K_t(i) ((\vec{u}(i) - \vec{u}(j)) \cdot \vec{t})^2 \quad (3.16)$$

die zu minimierende Energie [BH54; JS93]. Das kann in dem hier vorgestellten Fall noch vereinfacht werden, indem man Federn in Zugrichtung nur eine Bewegung in Normalrichtung erlaubt, Federn in Querrichtung nur Bewegung in Tangentialrichtung. Damit wird den Körnern zwar immer noch nicht erlaubt, aus ihrer Reihe auszuscheren, jedoch werden sie von ihren Nachbarn in Querrichtung festgehalten. Die Energie ist dann

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\text{alle } i} \frac{1}{2} \sum_{j \text{ Nachbar von } i} K_n(i) (x'(i) - x(i) - (x'(j) - x(j)))^2 + K_t(i) (y'(i) - y(i) - (y'(j) - y(j)))^2 \quad (3.17)$$

Es muss also in jedem Zeitschritt zur Berechnung der Positionen der N Gitterpunkte nach dem Hookeschen Gesetz eine Funktion mit $2N$ Variablen minimiert werden. Da jeder Verformungszyklus durch mindestens 2, typischerweise aber 8 oder mehr Zeitschritte dargestellt wird, stellt die gleichzeitige Berechnung aller Körner zunächst ein mit dem Ziel einer schnellen Simulation nicht vereinbares Verfahren dar.

Zusammenhalt durch nachträgliche Korrektur (zweidimensional)

Eine einfache Methode, um den Zusammenhalt in Querrichtung durch eine Korrektur auf die reihenweise berechneten Positionen herzustellen, ist eine Mittelung zwischen der reihenweise berechneten Position und der Mittelposition der Nachbarn in Querrichtung (siehe Abb. 3.4). Innerhalb der Reihe ergibt sich die Position eines Kornes z.B. gemäß Gl. 3.5

$$x'_{\text{reihe}}(i_0, j_0) = \sum_{i=1}^{i_0-1} l'_x(i) = \sum_{i=1}^{i_0-1} l_x(i) \cdot \left(1 + \frac{\Delta L_x}{E(i) \cdot \sum_m \frac{l_x(m) l'_x(m)}{E(m)}} l'_x(i) \right) \quad (3.18)$$

Wären nur die Kräfte durch die Nachbarn in Querrichtung aktiv, so hätte das Korn eine Position in der Mitte zwischen den Nachbarn

$$x'_{\text{quer}}(i_0, j_0) = \frac{1}{2} (x'_{\text{reihe}}(i_0, j_0 - 1) + x'_{\text{reihe}}(i_0, j_0 + 1)) \quad (3.19)$$

Eine gewichtete Mittelung der beiden Positionen stellt eine Verbindung zwischen den Reihen her

$$x'_{\text{korrr}}(i_0, j_0) = q \cdot x'_{\text{reihe}}(i_0, j_0) + (1 - q) \cdot x'_{\text{quer}}(i_0, j_0) \quad (3.20)$$

3.3. SPANNUNGEN IN DEN ZELLEN

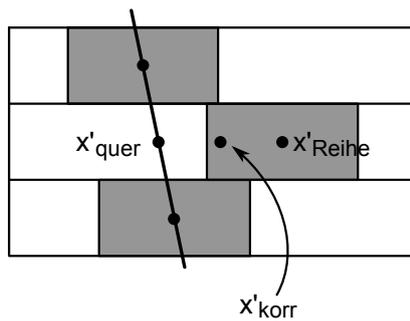


Abbildung 3.4 – Zusammenhalt durch eine einfache nachträgliche Korrektur

Zunächst werden die Positionen x'_{reihe} reihenweise, z.B. nach Gl. 3.5 bestimmt. Die Nachbarn in Querrichtung würden es aber bevorzugen, wenn das Korn zwischen ihnen die Position x'_{quer} hätte. Durch abschließende Mittelung wird die korrigierte Position des Korns x'_{korr} berechnet. Auf diese Weise wird ein zu großer Abstand zwischen benachbarten Körnern in Querrichtung verhindert.

Durch die Wichtung q lässt sich der Zusammenhalt zwischen den Reihen parametrisieren.

In Kapitel 4 werden die verschiedenen Verfahren zur Berechnung der Positionen verglichen.

3.3 Spannungen in den Zellen

Nach der Berechnung der neuen Längen und Positionen der Körner kann der Spannungszustand in jedem Korn berechnet werden. Es gibt drei Beiträge zur Spannung:

1. Einen Beitrag durch die äußere Verformung.
2. Einen Beitrag durch die Querkontraktion der Nachbarn in Querrichtung.
3. Einen Beitrag durch Pileups in einem der Nachbarkörner.

Spannung durch die äußere Verformung

Durch die Verformung des Kristalls ändern die Körner ihre Länge von $l_x(i)$ auf $l'_x(i)$ gemäß dem in Kap. 3.2 beschriebenen Verfahren. Nach dem Hookeschen Gesetz entsteht durch die Dehnung eine Spannung in x -Richtung.

$$\sigma_{x, \text{Verformung}}(i) = \varepsilon(i) \cdot E(i) \quad (3.21)$$

In Kap. 4 sieht man, dass zur Berechnung der Spannung nicht die technische Dehnung $\varepsilon_{\text{tech}} = \frac{l'_x - l_x}{l_x}$ verwendet werden darf, sondern die wahre Dehnung $\varepsilon_{\text{wahr}} = \log(l'_x / l_x)$ mindestens bis zur zweiten Ordnung genähert werden muss

$$\varepsilon = \frac{l'_x - l_x}{l_x} - \frac{1}{2} \left(\frac{l'_x - l_x}{l_x} \right)^2 \quad (3.22)$$

da sich der Fehler durch die Näherung über die Zyklen aufsummiert.

Spannung durch Querkontraktion der Nachbarn

Nimmt man Volumenerhaltung in jedem Korn an, so führt eine Dehnung von l_x auf l'_x in x -Richtung zu einer Änderung der Querschnittsfläche auf $l'_y \cdot l'_z = l_y \cdot l_z \cdot \frac{l_x}{l'_x}$. Vereinfachend kann

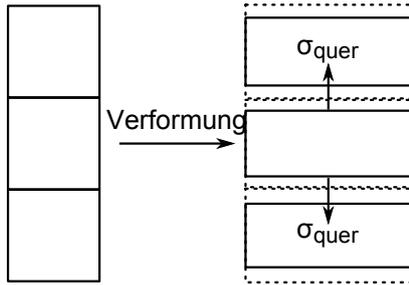


Abbildung 3.5 – Spannung durch Querkontraktion

Nimmt man Volumenerhaltung in den Körnern an, so bedeutet eine Verlängerung in x -Richtung eine Verkleinerung der Querschnittsfläche. Da Nachbarkörner aneinander hängen sollen, zieht ein Korn an seinen Nachbarn in Querrichtung. Die Spannung mit der in Querrichtung gezogen wird, wird nach dem Hookeschen Gesetz aus der Dehnung in Querrichtung berechnet.

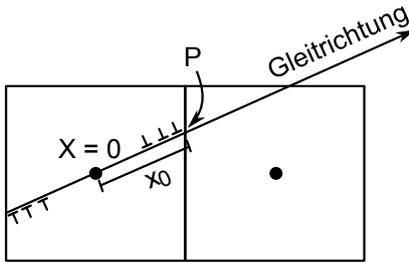


Abbildung 3.6 – Spannungen durch Pileups

Im Modell produziert eine Versetzungsquelle im Zentrum eines Kornes einen zweiendigen Pileup. Dieser staut sich an den Korngrenzen auf. Der Punkt, an dem die Gleitrichtung der Versetzungen im Pileup auf die Korngrenzfläche trifft, sei P , der Abstand zwischen dem Zentrum des Kornes und P sei x_0 . Gl. (3.27) gibt die durch den Pileup außerhalb des Kornes in Gleitrichtung produzierte Schubspannung $\tau_{\text{Pileup}}(x)$ an. Um die Spannung im Zentrum des Nachbarkorns zu berechnen wird angenommen, dass der Pileup eine Superversetzung mit Burgersvektor b_S ist, die im Punkt P sitzt.

man die Querkontraktion gleichmäßig auf y - und z -Richtung verteilen:

$$l'_y(i, j, k) = l_y(i, j, k) \cdot \sqrt{\frac{l_x(i, j, k)}{l'_x(i, j, k)}} \quad (3.23)$$

$$l'_z(i, j, k) = l_z(i, j, k) \cdot \sqrt{\frac{l_x(i, j, k)}{l'_x(i, j, k)}} \quad (3.24)$$

Sollen benachbarte Körner in Querrichtung zusammenhalten, so führt die Querkontraktion dazu, dass ein Korn mit einer Zugspannung an seinen Nachbarkörnern in Querrichtung zieht (Abb. 3.5). Diese ist so groß wie eine Spannung, die nach dem Hookeschen Gesetz eine Änderung von l_y auf l'_y bzw. von l_z auf l'_z bewirken würde.

$$\sigma_{y,\text{quer}}(i, j, k) = \varepsilon_y(i, j-1, k) \cdot E(i, j-1, k) + \varepsilon_y(i, j+1, k) \cdot E(i, j+1, k) \quad (3.25)$$

$$\sigma_{z,\text{quer}}(i, j, k) = \varepsilon_z(i, j, k-1) \cdot E(i, j, k-1) + \varepsilon_z(i, j, k+1) \cdot E(i, j, k+1) \quad (3.26)$$

Spannung durch Pileups in Nachbarkörnern

In der Diplomarbeit wurde die Idee präsentiert, dass eine große Versetzungsdichte in einem Korn durch Pileups an der Korngrenze zu zusätzlichen Spannungen in den Nachbarkörnern führt; jedoch konnte dieser Effekt nicht quantifiziert werden. Um dies jetzt zu tun, wird in diesem Modell eine Versetzungsquelle im Zentrum jedes Kornes angenommen. Produziert diese nun im aktiven Gleitsystem des Kornes einen Pileup, der sich an den Korngrenzen aufstaut, so wird die Spannung in den Nachbarkörnern um die durch die Versetzungen des Pileups produzierte Spannung erhöht (vgl. Kap. 2.1).

Abb. 3.6 zeigt ein Korn mit Pileup und ein Nachbarkorn. Zu berechnen ist die durch den Pileup verursachte Spannung im Zentrum des Nachbarkorns. Dazu muss der Schnittpunkt P des Pileups mit den Korngrenzflächen bestimmt und der Verbindungsvektor zwischen diesem Punkt und dem Zentrum des Nachbarkorns berechnet werden. Da beide Arme des Pileups aus parallelen Versetzungen mit parallelem Burgersvektor bestehen, werden sie als je eine Superversetzung betrachtet, deren Burgersvektor b_S ein Vielfaches des Burgersvektors einer einfachen Versetzung b_0 ist und die im Punkt P sitzt. Durch Einsetzen von b_S und der Koordinaten des Verbindungsvektors in Gl. 2.1 kann das durch die Superversetzung im Zentrum des Nachbarkorns verursachte Spannungsfeld berechnet werden.

Der Burgersvektor der Superversetzung b_S lässt sich durch Gleichsetzen der durch einen Pileup entlang der Gleitrichtung erzeugten Schubspannung (Gl. 2.7)

$$\tau_{\text{Pileup}}(x) = \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 - x_0^2}} - 1 \right) \tau(i) \quad (3.27)$$

und der entlang der Gleitrichtung erzeugten Schubspannung der Superversetzung (nach Gl. 2.1)

$$\tau_{\text{Super}}(x) = \frac{Gb_S}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{x - x_0} \quad (3.28)$$

für ein geeignetes x bestimmen. Dabei ist x_0 die Position der Superversetzung. Diese liegt auf der Korngrenzfläche und entspricht damit der halben Länge des Pileups. $\tau(i)$ ist die durch die äußere Verformung im aktiven Gleitsystem wirkende Schubspannung

$$\tau(i) = \frac{\sigma_{x,\text{Verformung}}(i)}{\mu(i)} \quad (3.29)$$

Da 3.27 und 3.28 nur in unmittelbarer Nähe von $x = x_0$ unterschiedliche Verläufe haben, insbesondere aber im relevanten Bereich³ $\frac{3}{2}x_0 \lesssim x \lesssim 3x_0$ für eine geeignete Wahl von b_S ähnlich verlaufen, ist eine Gleichsetzung der beiden Gleichungen für $x = 2x_0$ zur Bestimmung von b_S gerechtfertigt. Man erhält

$$b_S = \frac{2\pi(1-\nu)}{Gb_0} b_0 x_0 \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \right) \tau \quad (3.30)$$

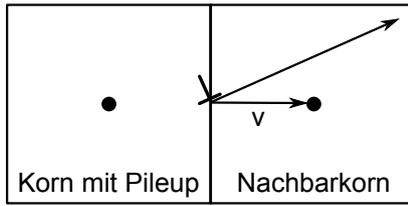
Um die Rechnung zu vereinfachen wird angenommen, dass alle Körner die gleiche Länge l haben, die Pileups ebenfalls die Länge l haben und die Superversetzung immer in der Mitte der Korngrenzflächen sitzt. Somit ist $x_0 = l/2$.

Verschiebt man das Koordinatensystem, so dass die Superversetzung in seinem Zentrum liegt und die x -Richtung die Gleitrichtung ist, so ist damit das Spannungsfeld um die Superversetzung

$$\sigma = -\frac{l}{2} b_0 \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \right) \tau(i) \begin{pmatrix} \frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} & \frac{x(-x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} & 0 \\ \frac{x(-x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} & \frac{y(-x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & 2\nu \frac{y}{x^2+y^2} \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

Da die Superversetzung auf der Mitte der Korngrenzflächen sitzt, ist der Verbindungsvektor zwischen der Superversetzung und dem Zentrum des nächsten Kornes (siehe Abb. 3.7)

³In diesem Bereich kann der Mittelpunkt eines Nachbarkorns liegen.


Abbildung 3.7 – Spannungen durch Pileups - vereinfacht

Zur Berechnung des Burgersvektors der Superversetzung wird vereinfachend angenommen, dass alle Körner gleich lang sind und die Superversetzung, die den Pileup repräsentiert, nicht im Punkt P (siehe Abb. 3.6) sitzt, sondern auf der Mitte der Korngrenzfläche. Gl. (3.31) gibt das Spannungsfeld um die Superversetzung an. Der Vektor zwischen Superversetzung und dem Zentrum des nächsten Kornes wird im inneren Koordinatensystem dargestellt und in Gl. (3.31) eingesetzt, um die Spannung im Zentrum des Nachbarkorns zu erhalten.

$$\tilde{\vec{v}} = \frac{l}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

für Körner in positive x -Richtung (die anderen Richtungen entsprechend). Im inneren Koordinatensystem mit der Superversetzung im Koordinatenursprung hat er die Darstellung

$$\vec{v} = A^T \tilde{\vec{v}} = \frac{l}{2} A^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

mit der Transponierten der Transformationsmatrix A^T aus Abschnitt 3.1. Diese Koordinaten werden nun in die obige Spannungsmatrix eingesetzt. So erhält man die Spannungen durch den Pileup in der Mitte des nächsten Kornes. Diese werden auf die bereits bestehenden Spannungen addiert.

$$\begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{x,\text{Verformung}} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{y,\text{quer}} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{z,\text{quer}} \end{pmatrix} + \sum_{\text{Nachbar}} \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{pmatrix}_{\text{pileup}} \quad (3.34)$$

3.4 Plastizität

Plastische Verformung wird als Korrektur der Spannungen eingeführt. Übersteigt die Spannung σ_x die Fließspannung σ_{Fl} , so wird der Wert der Spannung auf die Fließspannung herabgesetzt. Im nächsten Zeitschritt wird ausgehend vom korrigierten Wert der Spannung die neuen Spannungen im Korn berechnet.

Im einzelnen Korn sind die Hysteresekurven im Spannungs-Dehnungs-Diagramm also abschnittsweise linear (Abb. 3.8). Im Mittel über alle Körner ist die Kurve dagegen abgerundet, da die Fließspannung von Korn zu Korn durch die unterschiedlichen Orientierungen und die verschiedenen Versetzungsdichten variiert:

$$\sigma_{\text{Fl}}(i) = \sigma_{\text{ref}} \cdot \frac{\sqrt{\rho/\rho_0}}{\mu(i) \cdot M} \quad (3.35)$$

3.5. ERHÖHUNG DER VERSETZUNGSDICHTE

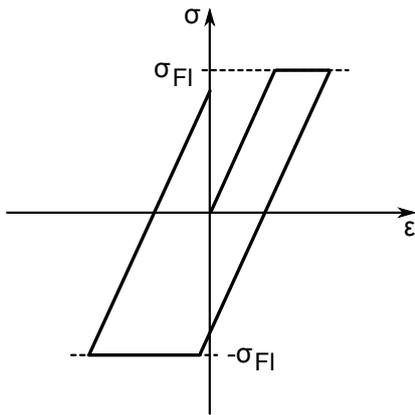


Abbildung 3.8 – Plastische Korrektur

Die Längen der Körner werden berechnet, als verformten sie sich rein elastisch. Eine Hysteresekurve wird durch eine Korrektur der Spannung hineingebracht: Übersteigt die Spannung in Zugrichtung die Fließspannung σ_{Fl} , so wird die Spannung auf die Fließspannung begrenzt.

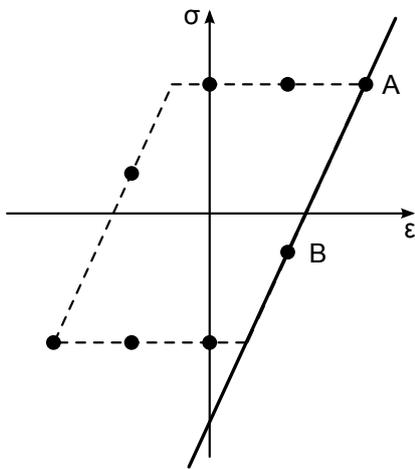


Abbildung 3.9 – Bestimmung der plastischen Dehnung

Im Modell wird die plastische Dehnung je Zyklus bestimmt, indem die Zeitschritte im Spannungs-Dehnungs-Diagramm, zwischen denen die Spannung einen Vorzeichenwechsel von + nach - hat (hier A und B), durch eine Gerade verbunden werden. Die Nullstelle dieser Gerade wird als plastische Dehnung angesehen.

Der Multiplikation mit $\sqrt{\rho/\rho_0}$ liegt das Prinzip der Versetzungshärtung zugrunde: Die Fließspannung erhöht sich mit $\sqrt{\rho}$ (z.B. [VV89]).

Der Faktor $\mu \cdot M$ berücksichtigt die Orientierung der einzelnen Körner. Dabei wird die gemessene, mittlere Fließspannung σ_{ref} zunächst durch den Taylor- oder Sachs-Faktor auf eine mittlere Schubspannung umgerechnet ($\tau_{ref} = \frac{\sigma_{ref}}{M}$) und dann für das individuelle Korn i auf eine spezielle Zugspannung zurückgerechnet ($\sigma(i) = \frac{\tau_{ref}}{\mu(i)}$). Der Taylor-Faktor $M = 3,06$ wird verwendet, falls man in allen Körnern von Mehrfachgleitung ausgeht; der Sachs-Faktor $M = 2,24$, falls man in allen Körnern Einfachgleitung annimmt (z.B. [Chr97]).

Die plastische Dehnung ϵ_{pl} kann man aus der resultierenden Hysteresekurve näherungsweise bestimmen, indem man nach Erreichen der maximalen Dehnung diejenigen Werte der Dehnung, zwischen denen die Spannung einen Vorzeichenwechsel hat, durch eine Gerade verbindet und deren Nullstelle bestimmt (siehe Abb. 3.9).

3.5 Erhöhung der Versetzungsdichte

Zur Erhöhung der Versetzungsdichte gehe ich davon aus, dass sich in jedem Korn eine Versetzungsquelle befindet. Zusätzlich nehme ich an, dass diese im Zentrum des Korns liegt.

Sie wird bei ausreichend großer Spannung aktiviert und durch die Spannung der von ihr produzierten Versetzungen wieder deaktiviert.

Die Spannung zur Aktivierung der Versetzungsquelle errechnet sich aus den Zugspannungen $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ und Schubspannungen $\tau_{xy}, \tau_{yz}, \tau_{xz}$. Durch diese Spannungskomponenten ergibt sich in einer Ebene mit Normalenvektor \vec{n} eine Spannung (z.B. [Dub97], S. C2)

$$\vec{s} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{pmatrix} \cdot \vec{n} \quad (3.36)$$

Ist diese Ebene eine Gleitebene, so wirkt in Gleitrichtung \vec{r} also eine Schubspannung von

$$\tau_{\text{eff}} = \vec{s} \cdot \vec{r} \quad (3.37)$$

Dies ist die Schubspannung, die im aktiven Gleitsystem zur Bewegung von Versetzungen und Aktivierung der Versetzungsquelle führt.

Übersteigt die Schubspannung im aktiven Gleitsystem die Quellspannung τ_{quell} , so erzeugt die Versetzungsquelle so lange Versetzungen in einem Pileup mit einer Verteilung $n(x)$ entlang der Gleitrichtung, bis die von den Versetzungen erzeugte Gegenspannung die erzeugende Spannung kompensiert (vgl. Kap. 2.1).

Die Anzahl der neu entstehenden Versetzungen ist

$$\Delta N_{\text{Vers}} = \frac{2l(1-\nu)}{Gb} (\tau_{\text{eff}} - \tau_{\text{quell}}) \quad (3.38)$$

Somit erhöht sich die relative Versetzungsdichte um

$$\Delta\rho/\rho_0 = \frac{\Delta N_{\text{Vers}}/V}{N_{0,\text{Vers}}/V} = \frac{\Delta N_{\text{Vers}}}{N_{0,\text{Vers}}} \quad (3.39)$$

Hierbei ist $N_{0,\text{Vers}}$ die Anzahl der vor Beginn der zyklischen Verformung in einem Korn vorhandene Anzahl von Versetzungen. Diese Größe ist experimentell nicht messbar. Die messbare Größe ist die Anzahl der Versetzungslinien, die eine Einheitsfläche durchstoßen (Versetzungsdichte ρ). Geht man davon aus, dass die Versetzungen so lang sind wie das Kristallkorn, so erhält man für eine Korngröße von $30\mu\text{m}$ und eine Versetzungsdichte von 10^{12}m^{-2} die Größenordnung von 1000 Versetzungen pro Korn. Es wurden verschiedene Werte für $N_{0,\text{Vers}}$ getestet und der Einfluss auf das Ergebnis beobachtet (siehe Kapitel 4).

3.6 Erhöhung der Leerstellenkonzentration

Das EGM- und das Polák-Modell beschreiben die Prozesse in persistenten Gleitbändern bei zyklischer Verformung. Beide Modelle beschreiben, wie stark sich die Leerstellenkonzentration pro Zyklus ändert. Allerdings sagen sie für tiefe Temperaturen, bei denen sich Leerstellen nicht durch Diffusion bewegen können, eine Sättigung der Leerstellenkonzentration nach

wenigen Zyklen (im EGM-Modell 65 Zyklen), voraus. Das ist zwar mit den Beobachtungen aus Widerstandsmessungen, aber nicht mit den Beobachtungen der Positronenannihilationspektroskopie vereinbar, die bis zum Bruch einen wachsenden Anteil von offenem Volumen misst. Grund sind mutmaßlich Jogs auf Versetzungslinien, die mit Widerstandsmessungen als versetzungsartige und nicht als leerstellenartige Defekte gemessen werden und mit Positronenannihilationspektroskopie als offenes Volumen gemessen werden. Daher wird hier das EGM-Modell [EM79] angepasst und um Jogs erweitert.

In diesem Modell wird die Versetzungsstruktur der Körner vereinfacht, indem die Existenz von persistenten Gleitbändern und Zellstrukturen zunächst vernachlässigt wird und lediglich eine Matrix-Struktur angenommen wird. Die Versetzungsstruktur in den Körnern besteht also aus Adern mit hoher Versetzungsdichte ρ_v und dazwischenliegenden Kanälen niedriger Versetzungsdichte ρ_{ch} , die jeweils 50% des Volumens einnehmen. Die Adern bestehen aus Dipolen von Stufenversetzungen, in die Kanäle ragen ausgebuchtete Versetzungsbögen aus den Adern hinein. Unter einer Schubspannung weiten sich diese Bögen und annihilieren in der gegenüberliegenden Ader teilweise, während die Querstücke des Bogens als Schraubenversetzung durch den Kanal gleiten (wie im EGM-Modell für die PSB angenommen). Punktdefekte werden zum einen wie im EGM-Modell durch Disintegration von Versetzungsdipolen in den Adern erzeugt [EM79; EGM81]. Zum anderen entstehen sie in den Kanälen durch Jogdragging, wenn eine gleitende Schraubenversetzung eine immobile Schraubenversetzung eines fremden Gleitsystems schneidet. Die Anzahl der Punktdefekte verringert sich in den Adern wie im EGM-Modell, wenn diese von Stufenversetzungen aufgesammelt werden.

Essmann und Mughrabi [EM79] geben die effektive Zunahme der Zahl der Punktdefekte pro Einheitsvolumen an mit

$$dN = \left(\frac{Z y_e^2 c_e}{2} \rho_e - \frac{2 y_p c_e}{b} N \right) d\gamma \quad (3.40)$$

Dabei ist Z die Anzahl der Atome pro Einheitsvolumen, y_e die Annihilationslänge für Stufenversetzungen, unterhalb derer ein Dipol instabil wird, c_e bezeichnet den Anteil der Dehnung, der durch Stufenversetzungen getragen wird, ρ_e ist die Dichte der Stufenversetzungen, y_p der Abstand, aus dem eine Versetzung Punktdefekte aufammelt, und $d\gamma = d\epsilon/\mu$ ist die Abgleitung im aktiven Gleitsystem. Durch Normierung auf die Anzahl der Atome pro Einheitsvolumen Z erhält man die Konzentration von Punktdefekten pro Atom. Nimmt man vereinfachend an, dass alle produzierten Punktdefekte Leerstellen sind, so ergibt sich für die Erhöhung der Leerstellenkonzentration

$$dc_{V,veins} = \frac{dN}{Z} = \left(\frac{y_e^2 c_e}{2} \rho_e - \frac{2 y_p c_e}{b} c_{V,veins} \right) d\gamma \quad (3.41)$$

Es wird in Anlehnung an [EM79] für die Produktion von Punktdefekten in den Adern $y_e = 1,6\text{nm}$ (Wert für Kupfer), $c_e = 1$ und $y_p = b$ angenommen. Da die Adern 50% des Volumens einnehmen, aber fast alleine zur Gesamtversetzungsdichte ρ beitragen, wird $\rho_e = 2\rho$ gesetzt.

Die Anzahl der produzierten Jogs in den Kanälen ergibt sich aus der Dichte der immobilen Waldversetzungen und der von mobilen Schraubenversetzungen überstrichenen Fläche. Ich nehme an, dass vor Beginn der Verformung Versetzungen mit einer Versetzungsdichte ρ_0 vorhanden sind, gleichmäßig auf alle Gleitsysteme und homogen im Raum verteilt sind

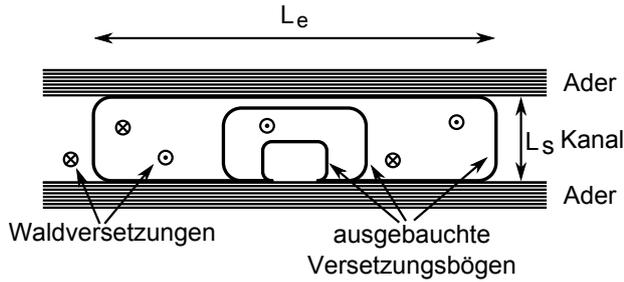


Abbildung 3.10 – Versetzungsbögen im EGM-Modell (nach [EM79], um Waldversetzungen erweitert)
 Das hier entwickelte Modell orientiert sich am EGM-Modell. Durch eine äußere Spannung entstehen Versetzungsbögen in den Kanälen zwischen versetzungsreichen Adern oder Wänden. Sie werden als rechteckig angenommen mit Seitenlängen L_s und L_e .

und jeweils zur Hälfte reine Stufen- und Schraubenversetzungen sind. Liegt die Versetzungslinie oder der Burgersvektor einer solchen Versetzung in der aktiven Gleitebene, so kann beim Schneiden der immobilen und mobilen Versetzung kein Jog entstehen. Es bleiben im kubisch-flächenzentriertem Gitter also 6 von 12 Gleitsystemen. Dadurch, dass die Hälfte der Waldversetzungen Stufenversetzungen sind und von den restlichen $\rho_0/4$ Schraubenversetzungen eine Hälfte falsch orientiert ist, so dass sie Zwischengitteratome produzieren würde, bleiben also noch $\rho_0/8$ Versetzungen pro Fläche zur Produktion von Leerstellen durch Jogs. Eine Abgleitung $d\gamma$ werde durch dv rechteckige Versetzungsringe pro Einheitsfläche mit mittleren Längen L_e und L_s getragen (siehe Abb. 3.10) [EM79]

$$d\gamma = L_e L_s b dv \quad (3.42)$$

d.h. die von Schraubenversetzungen überstrichene Fläche pro Einheitsvolumen ist

$$dA = 2 \frac{1}{2} L_e L_s dv = \frac{d\gamma}{b} \quad (3.43)$$

Die Dichte der passenden Waldversetzungen ist $\rho_0/8$, damit kommt es zu einer Anzahl von Jog-produzierenden Begegnungen pro Einheitsvolumen von

$$dN_{\text{chan}} = \frac{d\gamma \rho_0}{8b} \quad (3.44)$$

Da die Anzahl Z der Atome im kubisch-flächenzentriertem Gitter $\sqrt{2}/b^3$ pro Einheitsvolumen beträgt, erhöht sich die Leerstellenkonzentration in den Kanälen durch die Begegnung mit Waldversetzungen um

$$dc_{V,\text{chan}} = \frac{dN_{\text{chan}}}{Z} = m \frac{b^2 \rho_0}{8\sqrt{2}} d\gamma \quad (3.45)$$

bei einer Änderung der Abgleitung um $d\gamma$. Dabei ist $m \geq 1$ die Anzahl der pro Begegnung durch Jogdrugging produzierten Leerstellen.

3.7 Ausgabe

Mit den oben beschriebenen Mechanismen wird die Entwicklung der Eigenschaften der Körner unter zyklischer Belastung berechnet. Die folgenden Eigenschaften des Systems werden aufgezeichnet:

Spannungs-Dehnungs-Diagramm. In jedem Zeitschritt wird das Mittel der Spannungen aller Körner und die Gesamtdehnung des Kristalls notiert.

Verfestigungskurve. In jedem Zyklus wird zum Zeitpunkt der größten positiven Dehnung das Mittel der Spannungen aller Körner und die Nummer des Verformungszyklus notiert.

Fehlstellendichte In jedem Zyklus wird zum Zeitpunkt der größten positiven Dehnung das Mittel der Leerstellenkonzentrationen aller Körner und die Nummer des Verformungszyklus notiert.

Graphische Darstellung des Schadens (2D). Hier kann entweder die relative Versetzungsdichte oder die Konzentration von Fehlstellen als Schaden dargestellt werden. Zwischen einem Minimalwert und einem Maximalwert der betreffenden Größe wird (logarithmisch oder linear) eine Falschfarbenskala mit 256 Farben aufgespannt und jeder Zelle gemäß ihres Schadens ein Farbwert zugeordnet. Diese werden dann zweidimensional angeordnet in einer Graphik gespeichert.

Kapitel 4

Ergebnisse und Diskussion

Das in Kapitel 3 beschriebene Modell bietet verschiedene Methoden und Mechanismen zur Berechnung der Verformung und Schädigung eines Metalls bei zyklischer Verformung. Hier soll nun die Wirkung und der Einfluss der verschiedenen Methoden und Mechanismen untersucht werden.

Zunächst wird untersucht, welche der in Kapitel 3.2 vorgestellten Methoden zur Berechnung der Positionen der Körner nach einer Verformung geeignet sind. Dann wird beschrieben, dass zur Berechnung der Spannung aus der Dehnung nach dem Hookeschen Gesetz mindestens eine Näherung der Dehnung bis zur 2. Ordnung verwendet werden muss und dass die in 3.4 vorgestellte plastische Korrektur der Spannungen verantwortlich für das Zustandekommen einer Verfestigung ist. Hiernach werden die Mechanismen zur Produktion von Gitterfehlern untersucht: Der Einfluss der Spannungsbeiträge durch die äußere Verformung, die Querkontraktion und Pileups in den Nachbarkörnern auf die Erhöhung der Versetzungsdichte wird betrachtet, sowie die Erhöhung der Leerstellenkonzentration durch das EGM-Modell und das Schneiden mit Waldversetzungen. Als letzte Voruntersuchung muss geklärt werden, welchen Einfluss die Anzahl der Körner, die Startwerte der Eigenschaften der Körner und die anfängliche Anzahl von Versetzungen je Korn haben. Schließlich wird das Modell getestet und auf verschiedene Szenarien angewendet: Eine Variation der Dehnungsamplitude, die Simulation einer Vordeformation und der Vergleich eines ein- und eines zweiphasigen Materials.

Wenn nicht anders erwähnt, wurden die Berechnungen mit den Materialeigenschaften von Nickel und 10x10 Körnern durchgeführt. Die zur Berechnung der Erhöhung der Leerstellenkonzentration nach dem EGM-Modell notwendigen Daten liegen mir für Nickel nicht vor. In diesem Fall habe ich auf Daten für Kupfer zurückgegriffen, da sich beide Materialien bezüglich Verformung sehr ähnlich verhalten (siehe z.B. [Chr97]). In Tab. 4.1 sind die verwendeten Werte angegeben. Die Längen, Orientierungen, relative Versetzungsdichte und Elastizitätsmodul der einzelnen Körner werden gemäß den in der Tabelle angegebenen Verteilungen initialisiert.

Tabelle 4.1 – Zur Simulation verwendete Materialdaten und Verteilungen bei der Initialisierung

Eigenschaft	Wert
mittlere Korngröße	$d = 30 \mu\text{m}$ [SH02]
Gitterkonstante	$a = 352 \text{pm}$ [KH04]
Burgersvektor	$b = a/\sqrt{2} = 249,2 \text{pm}$
Elastizitätsmodul	$E = 196241 \text{MPa}$ [BS64]
Schubmodul	$G = 75511 \text{MPa}$ [BS64]
Poissonzahl	$\nu = 0,31$ [BS64]
anf. Versetzungsdichte	$\rho_0 = 5 \cdot 10^{11} \text{m}^{-2}$
anf. Zahl von Versetzungen	$N_0 = 3000$
Fließspannung	$\sigma_{\text{Fließ,ref}} = 57,8 \text{MPa}$ [BS64]
Quellspannung	$\tau_{\text{Quell,ref}} = 2Gb\sqrt{\rho_0} = 18,8 \text{MPa}$
Sachs- oder Taylor-Faktor	$M = 2,24$ (Sachs-Faktor)
Anzahl der Körner	in 2D: $L_x = 10, L_y = 10, L_z = 1$
Volumen der Körner	$V = 1$
x -Länge eines Korn ¹	$l_x(i) \in N(1; 0, 1)$ mit Randbedingung $\sum l_x(i) = L_x$
y -Länge der Körner	in 2D: $l_y(i) = V/l_x(i)$ in 3D: $l_y(i) \in N(1; 0, 1)$ mit Randbedingung $\sum l_y(i) = L_y$
z -Länge der Körner	in 2D: $l_z = 1$ in 3D: $l_z = V/(l_x(i)l_y(i))$
Euler-Winkel	$\theta(i) \in U(0; \pi/2)$; $\psi(i) \in U(0; \pi/2)$; $\varphi(i) \in U(0; \pi)$
rel. Versetzungsdichte	$\rho/\rho_0(i) \in N(2; 0, 25)$
Elastizitätsmodul	$E(i) \in E \cdot N(1; 0, 05)$

4.1 Berechnung der Positionen der Körner

Auch im mehrdimensionalen Modell werden die Positionen der Körner nach einer Verformung zunächst so berechnet, als sei die Verformung rein elastisch. Dabei werden die Reihen alle um den gleichen Betrag verformt. Zur Berechnung der Positionen der Körner nach einer Verformung stehen drei Verfahren zur Verfügung:

- die reihenweise Berechnung der Positionen nach einer iterativen Formel
- die reihenweise Berechnung der Positionen nach einer geschlossenen Formel
- die reihenweise Berechnung der Positionen nach einer der obigen Formeln mit anschließender Korrektur, um einen Zusammenhalt der einzelnen Reihen zu erzielen.

¹Die Längen l_x, l_y, l_z und das Volumen V sind auf die mittlere Korngröße normierte Größen. Ein Korn hat die tatsächliche Länge $l_x(i) \cdot d$ in x -Richtung und das Volumen $V \cdot d^3$

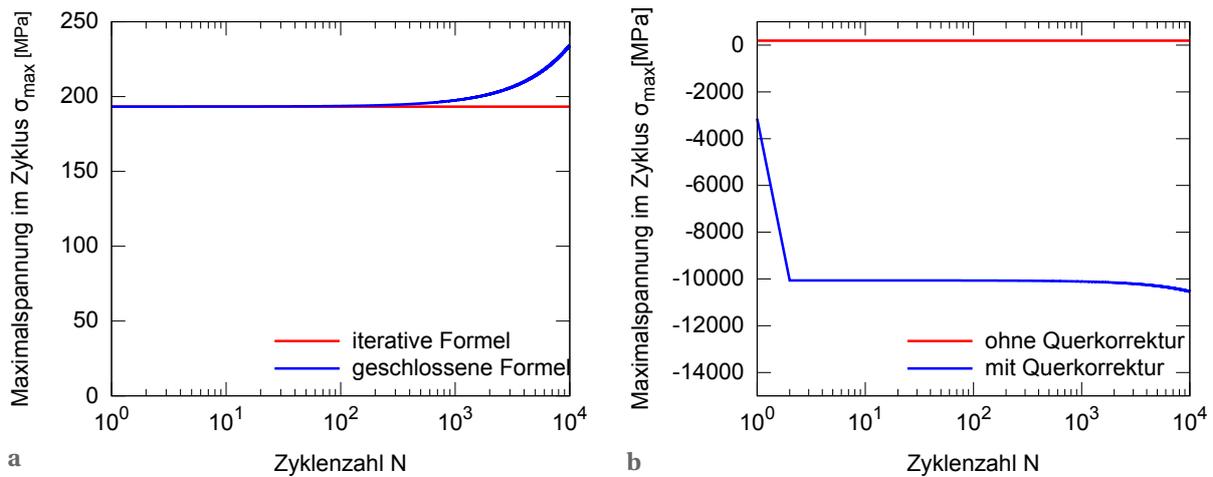


Abbildung 4.1 – Berechnung der Positionen der Körner nach einer Verformung durch verschiedene Verfahren. Da die Dehnung hier rein elastisch ist, erwartet man, dass die Verfestigungskurve eine Konstante ist. Die Positionen der Körner werden reihenweise berechnet.
 (a) Vergleich der durch iterative (rot) und geschlossene (blau) Formel berechneten Verfestigungskurven. Die geschlossene Formel ist nicht brauchbar.
 (b) Vergleich der durch die iterative Formel ohne (rot) und mit (blau) nachträglich hinzugefügten Zusammenhalt in Querrichtung berechneten Verfestigungskurven. Die einfache Mittlung aus Abschnitt 3.2 ist keine geeignete Korrektur.

Bei den ersten beiden Verfahren gibt es keinen Zusammenhalt zwischen den Reihen. Im dritten Verfahren wird er durch Mittlung nachträglich eingeführt. Aus der Diplomarbeit [Fin06] ist bekannt, dass die iterative Formel brauchbare Ergebnisse bei der Berechnung einer linearen Kette von Körnern liefert.

Berechnet man lediglich die elastische Verformung, so erwartet man, dass keine Verfestigung stattfindet. Die Verfestigungskurve sollte also eine Konstante sein.

Abb. 4.1a zeigt die nach der iterativen und der geschlossenen Formel berechnete Verfestigungskurve in den ersten 10000 Zyklen. Die nach der iterativen Formel berechnete Verfestigungskurve ist wie gefordert eine Konstante, die nach der geschlossenen Formel berechnete Verfestigungskurve nicht. Die geschlossene Formel ist also nicht brauchbar.

Abb. 4.1b zeigt die Auswirkungen eines nachträglich hineinkorrigierten Zusammenhalts durch eine Mittlung von Positionen (siehe 3.2). Beide Verfestigungskurven wurden nach der iterativen Formel berechnet, bei der blauen Kurve wurden die Positionen der Körner nachträglich durch Mittlung korrigiert. Die resultierende Verfestigungskurve ist keine Konstante und zudem sind die erreichten Spannungen durchweg negativ, d.h. für maximale, positive Dehnung wird eine negative Spannung, also ein Druck, erreicht. Daher ist das in 3.2 gegebene Verfahren zur nachträglichen Einführung eines Zusammenhalts nicht geeignet.

Die Berechnung der Verformung der einzelnen Körner erfolgt im Weiteren mit dem bewährten iterativen Verfahren Gl. 3.5, da sich die beiden anderen getesteten Verfahren als nicht geeignet erwiesen haben. Durch den fehlenden Zusammenhalt in Querrichtung ist es zur Zeit nur möglich, rechteckige bzw. quaderförmige Probengeometrien ohne Löcher zu beschreiben.

Will man kompliziertere Geometrien simulieren, so ist die Kombination des Modells mit einer Finite-Elemente-Rechnung oder einem Lattice Spring Model sinnvoll. In diesen Methoden sind Algorithmen entwickelt worden, die das Problem der Positionsbestimmung in komplexen Geometrien sehr effizient lösen. Eine solche Kombination wird in Abschnitt 4.6 getestet.

4.2 Von der elastischen Verformung zur Berechnung der Spannung in den Körnern

Sind die Positionen der Körner nach der Verformung berechnet, so wird die Spannung durch die Dehnung nach dem Hookeschen Gesetz berechnet. Übersteigt diese die von Orientierung und Versetzungsdichte abhängige Fließspannung eines Kornes, so wird die Spannung auf die Fließspannung herabgesetzt.

4.2.1 Dehnung im Hookeschen Gesetz

Die Spannung aus der elastischen Dehnung der Körner wird nach dem Hookeschen Gesetz berechnet. Wie Abb. 4.2 zeigt muss dazu mindestens eine Näherung 2. Ordnung der wahren Dehnung verwendet werden. Für den Fall rein elastischer Dehnung ohne Versetzungsmultiplikation erwartet man, dass die Verfestigungskurve eine Konstante ist. Dieses Ergebnis erhält man, wenn man die wahre Spannung bis in 2. Ordnung nähert (rote Kurve), eine Näherung bis in 1. Ordnung (technische Dehnung) genügt nicht (blaue Kurve). Für sehr hohe Zyklenzahlen muss man sogar höhere Ordnungen der Dehnung oder die wahre Dehnung verwenden (Abb. 4.2b, blaue Kurve).

4.2.2 Plastische Korrektur

Nach der Berechnung der Positionen der Körner und der Berechnung der Spannungen gemäß dem Hookeschen Gesetz wird die Spannung in den Körnern korrigiert, falls sie die Fließspannung übersteigt. Dann wird die Spannung auf die Fließspannung gesetzt. Ohne den Mechanismus zur Versetzungsmultiplikation bewirkt diese plastische Korrektur nur eine Reduzierung der in jedem Zyklus erreichten Maximalspannung (Abb. 4.3a).

Im Experiment beobachtet man einen Anstieg der Verfestigungskurve in den ersten Zyklen durch Versetzungsmultiplikation. Nimmt man in der Simulation den Mechanismus zur Erhöhung der Versetzungsdichte hinzu, so beobachtet man einen Anstieg der simulierten Verfestigungskurve, falls die plastische Korrektur ebenfalls mit einbezogen wird (blaue Kurve in Abb. 4.3b). Führt man keine plastische Korrektur durch, beobachtet man keinen Anstieg (rote Kurve). Der Anstieg der Verfestigungskurve rührt daher, dass die Spannung in den Körnern durch die Fließspannung begrenzt ist und diese mit der Versetzungsdichte steigt. Die Verfestigungskurve erreicht einen Sättigungswert, wenn entweder die Fließspannung so hoch geworden ist, dass die Verformung allein auf der Hookeschen Gerade abläuft, oder wenn die Versetzungsdichte so hoch geworden ist, dass sie die Bildung neuer Versetzungen verhindert.

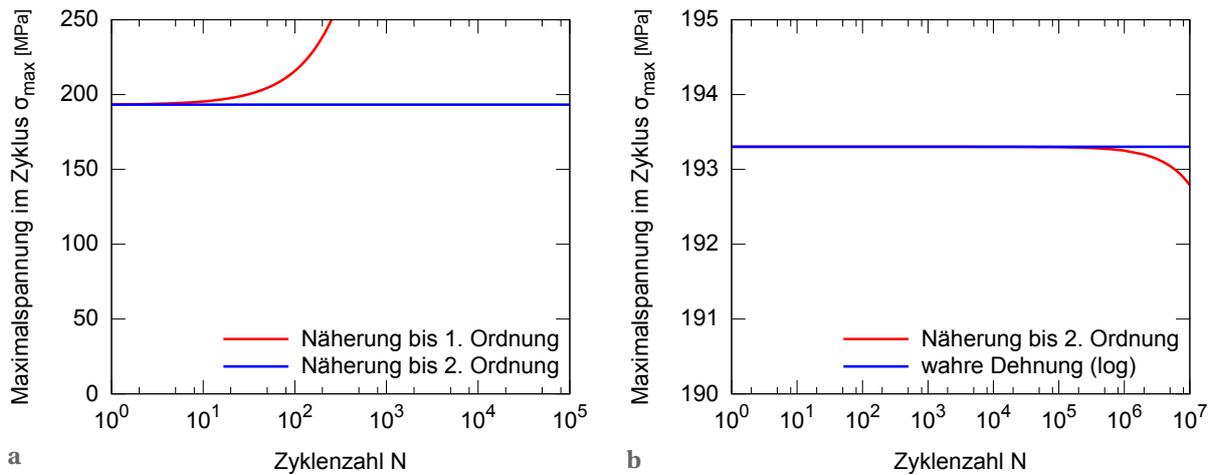


Abbildung 4.2 – Näherung der Dehnung im Hookeschen Gesetz

(a) Zur Berechnung der Spannungen aus den Dehnungen der Körner nach dem Hookeschen Gesetz darf man nicht die technische Dehnung (rote Kurve) verwenden, sondern muss die Dehnung mindestens bis 2. Ordnung nähern (blaue Kurve).

(b) Um das Abfallen bei hohen ($> 10^5$) Zyklenzahlen zu verhindern, muss eine Näherung noch höherer Ordnung oder die wahre Dehnung (blaue Kurve) verwendet werden. Hier wurde die wahre Dehnung verwendet.

In Abb. 4.3b ist ersteres der Fall: Die Sättigungsspannung entspricht der bei rein elastischer Rechnung berechneten Spannung.

4.3 Einfluss der verschiedenen Mechanismen im Modell

Aus den bisherigen Ergebnissen folgt, dass man die Dehnung durch die bewährte iterative Formel aus der Diplomarbeit berechnen muss, dass zur Berechnung der Spannung aus der elastischen Dehnung diese bis mindestens zur 2. Ordnung der wahren Dehnung genähert werden muss und dass erst die plastische Korrektur Verfestigung möglich macht.

Im Folgenden werden nun die Mechanismen zur Erhöhung der Versetzungsdichte und Leerstellenkonzentration hinzugenommen. Versetzungen werden produziert, indem eine Versetzungsquelle in der Mitte jedes Korns eine von der Schubspannung abhängige Anzahl neuer Versetzungen erzeugt. Die Leerstellenkonzentration erhöht sich im Modell durch Annihilation von Versetzungsdipolen und Schneiden von Versetzungen.

4.3.1 Beiträge zur Spannung

Zur Erhöhung der Versetzungsdichte ρ nimmt das Modell in der Mitte jedes Korns eine Versetzungsquelle an, die abhängig von der auf sie wirkenden Schubspannung Versetzungen produziert. Die Schubspannung im aktiven Gleitsystem wird aus dem dreiachsigen Spannungszustand der Kornmitte berechnet. Zum Spannungszustand können die äußere Spannung, eine

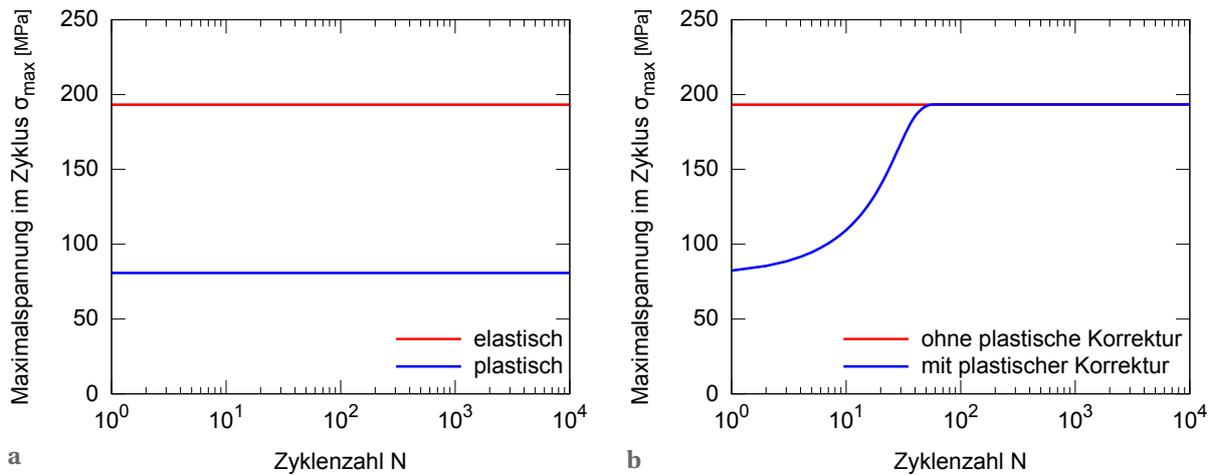


Abbildung 4.3 – Auswirkungen der plastischen Korrektur.

Durch die plastische Korrektur wird die Spannung durch die äußere Verformung in den Körnern auf die Fließspannung begrenzt. Die Fließspannung hängt von der Orientierung der Körner ab und steigt mit der Versetzungsdichte wie $\sqrt{\rho}$.

(a) Ist der Mechanismus zur Versetzungsmultiplikation abgeschaltet, so setzt die plastische Korrektur (blau) lediglich die Maximalspannung je Zyklus herunter.

(b) Sind Versetzungsquellen aktiv, so bewirkt die plastische Korrektur (blau), dass die Verfestigungskurve wie erwartet ansteigt.

Spannung durch die Querkontraktion der Nachbarkörner in Querrichtung und große Pileups von Versetzungen in den Nachbarkörnern beitragen.

Ist der Mechanismus zur Versetzungsmultiplikation eingeschaltet, so steigt die Versetzungsdichte von Zyklus zu Zyklus. Da angenommen wird, dass die Fließspannung proportional zu $\sqrt{\rho}$ ist, steigt durch die plastische Korrektur (siehe Abschnitt 3.4) mit der Versetzungsdichte auch die in jedem Zyklus maximal erreichte Spannung. Da aber auch angenommen wird, dass die zur Aktivierung der Quelle benötigte Spannung proportional zu $\sqrt{\rho}$ steigt, findet ab einer gewissen Versetzungsdichte keine weitere Versetzungsmultiplikation statt und die Verfestigungskurve erreicht einen Sättigungswert. Es ist möglich, dass die Verfestigungskurve bereits früher einen Sättigungswert erreicht, nämlich wenn die Fließspannung so groß geworden ist, dass die Verformung bei vorgegebener Dehnung alleine auf der Hookeschen Gerade stattfindet (siehe Abschnitt 4.2.2).

Abb. 4.4a zeigt den Einfluss, den die verschiedenen Beiträge zur Spannung auf die Verfestigungskurve haben. Dabei führen Beiträge mit größerem Betrag zu einem schnelleren Anstieg der Verfestigungskurve und einer höheren Sättigungsspannung.

Die äußere Spannung liefert den größten Beitrag (rote Kurve in Abb. 4.4a), da die Versetzungsquelle im Hauptgleitsystem operiert und das Hauptgleitsystem dasjenige ist, in dem eine äußere Spannung in Zugrichtung zur größten Schubspannung wird. Der Beitrag der äußeren Spannung σ_{xx} zur Schubspannung liegt bei $\tau_{\text{Verf}} = \mu\sigma_{\text{Verf}}$. Im Mittel über viele Körner beträgt die Spannung etwa $\tau_{\text{Verf}} \approx 0,45\sigma_{\text{Verf}}$. Die Verfestigungskurve erreicht im hier gezeigten Beispiel den Sättigungswert, da die Fließspannung so groß geworden ist, dass die Verformung alleine auf der Hookeschen Gerade erfolgt.

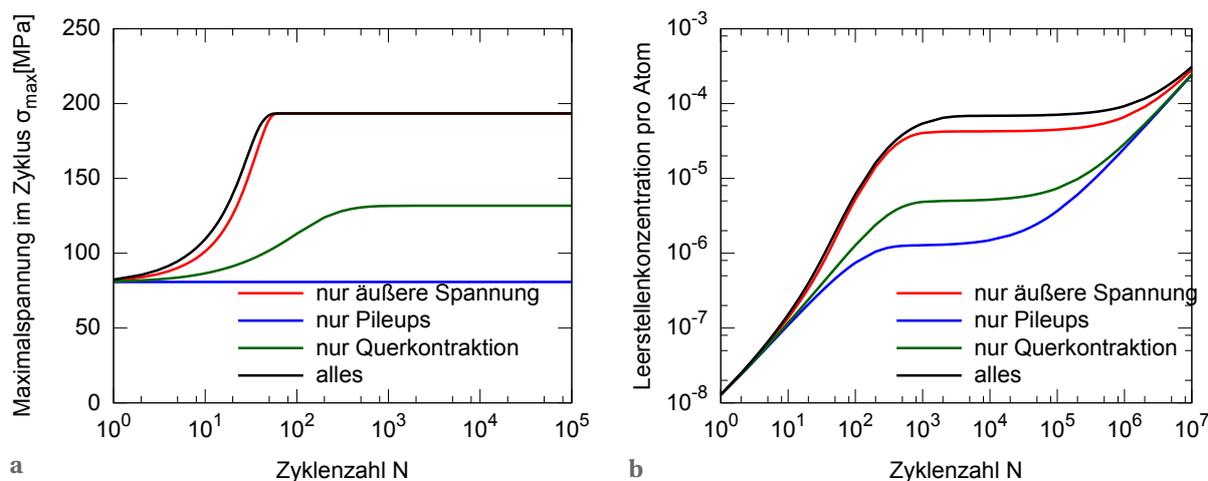


Abbildung 4.4 – Beiträge der Spannungen zur Verfestigungskurve.

(a) Größere Beiträge zur Spannung führen zu einem größeren und schnelleren Anstieg der Verfestigungskurve. Der größte Beitrag kommt von der äußeren Spannung (rote Kurve), ein weiterer, kleinerer durch die Querkontraktion der Nachbarkörner in Querrichtung (grüne Kurve). Der Beitrag durch Pileups in den Nachbarkörnern ist vernachlässigbar (blaue Kurve).

(b) Analog zu ihren Beiträgen zur Verfestigungskurve tragen die verschiedenen Spannungen durch das EGM-Modell zur Erhöhung der Leerstellenkonzentration bei. Bei hohen Zyklenzahlen, bei denen die Leerstellenkonzentration nur noch durch das Schneiden mit Waldversetzungen erhöht wird, sind alle Kurven parallel.

Der nächstgrößere Beitrag zur Schubspannung kommt von der Querkontraktion der Nachbarn in Querrichtung (grüne Kurve in Abb. 4.4a). Die Größe dieses Beitrags hängt von der Orientierung des Hauptgleitsystems relativ zur Querrichtung ab. In einigen Körnern liegt das Hauptgleitsystem so, dass durch die Querkontraktion eine große Schubspannung im Hauptgleitsystem produziert wird ($\tau_{Quer} \approx 0,5\sigma_{Quer}$), in anderen dagegen wird durch Querkontraktion keine Schubspannung produziert ($\tau_{Quer} \approx 0 \cdot \sigma_{Quer}$). Hier erreicht die Verfestigungskurve nicht den maximal möglichen Wert der Spannung, den Wert für eine rein elastische Verformung. Stattdessen entsteht der Sättigungswert dadurch, dass die Versetzungsdichte so groß geworden ist, dass die Produktion neuer Versetzungen verhindert wird.

Der kleinste Beitrag kommt durch Pileups in den Nachbarkörnern. Die größtmögliche durch den Pileup in der Mitte eines Nachbarkorns erzeugte Spannung ist $(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1)\tau_{Verf} = 0,16\tau_{Verf}$. Durch ungünstige Orientierung des Pileups und des Hauptgleitsystems des Nachbarkorns zueinander kann dieser Wert zusätzlich noch reduziert werden. Der Einfluss der Pileups in Nachbarkörnern auf die Verfestigungskurve ist vernachlässigbar (blaue Kurve in Abb. 4.4a).

Zur Entwicklung der Leerstellenkonzentration tragen alle Spannungsbeiträge bei. Bei hohen Zyklen laufen alle Kurven parallel, d.h. die Zunahme der Leerstellenkonzentration ist hier gleich; jedoch unterscheiden sich die bis dahin erreichten Leerstellenkonzentrationen. Dies liegt am unterschiedlich schnellen Anwachsen der Versetzungsdichten zu Beginn der zyklischen Verformung.

4.3.2 Mechanismen zur Leerstellenproduktion

Zur Erhöhung der Leerstellenkonzentration gibt es zwei Mechanismen. Beide gehen davon aus, dass sich im Material eine Versetzungsstruktur aus versetzungsreichen Adern und versetzungsarmen Kanälen bildet. Die Adern bestehen nur aus Dipolen von Stufenversetzungen, in den Kanälen gibt es hauptsächlich Schraubenversetzungen. Sobald die anfängliche Verfestigung abgeschlossen ist, befinden sich die Versetzungen in einem dynamischen Gleichgewicht, in dem ständig so viele Versetzungen neu produziert wie vernichtet werden.

In den Adern findet Produktion von Leerstellen durch den Kollaps enger Stufenversetzungsdipole statt. Hier werden aber gleichzeitig Leerstellen von Versetzungen wieder absorbiert, so dass sich nach einer Weile eine Sättigungskonzentration von Leerstellen bildet (EGM-Modell). In den Kanälen schneiden gleitende Schraubenversetzungen Waldversetzungen, die von Beginn an im Material vorhanden waren. Beim Schneiden entstehen Jogs, die selber schon ein offenes Volumen im Kristall sind und durch weiteres Gleiten der Schraubenversetzung durch Jogdragging weitere Leerstellen produzieren können. Da die Leerstellen bei Raumtemperatur quasi unbeweglich sind und eine von einer Schraubenversetzung aufgesammelte Leerstelle Jogcharakter hat, nimmt die Konzentration offenen Volumens in den Kanälen nicht ab.

Abb. 4.5 vergleicht die durch die zwei Modelle berechneten Leerstellenkonzentrationen. Die Produktion nach dem EGM-Modell (rote Kurve) nimmt zu Beginn der zyklischen Verformung stark zu, flacht dann ab und erreicht schließlich einen Sättigungswert. Da die Produktion von Leerstellen nach dem EGM-Modell proportional zur Versetzungsdichte ist, erklärt die anfängliche Zunahme der Versetzungsdichte bei der zyklischen Verfestigung die starke Zunahme der Leerstellenkonzentration zu Beginn. Das Erreichen einer Sättigungsspannung in der Verfestigungskurve bedeutet eine sehr viel kleinere Zunahme der Leerstellendichte - die Steigung der Kurve wird geringer. Da die Neuproduktion von Leerstellen irgendwann genau durch deren Vernichtung aufgehoben wird, erreicht die Leerstellenkonzentration im EGM-Modell einen Sättigungswert.

Im zweiten Mechanismus entstehen Leerstellen durch das Schneiden von gleitenden Schraubenversetzungen und Waldversetzungen in den Kanälen. Es entstehen deutlich weniger Leerstellen pro Verformungszyklus als durch das EGM-Modell. Man erwartet einen linearen Zusammenhang zwischen Leerstellenkonzentration und Zyklenzahl $c_V(N) = c_{V,0} + N \cdot \Delta c_V$. Die blaue Kurve in Abb. 4.4b ist die doppellogarithmische Darstellung dieser Gerade.

Da die beiden Mechanismen unabhängig voneinander sind, addieren sich die Zahlen der produzierten Leerstellen. Lässt man beide Mechanismen Leerstellen produzieren (grüne Kurve), so dominiert zu Beginn der EGM-Mechanismus, und nachdem dieser in Sättigung ist, die Produktion durch Schneiden mit Waldversetzungen.

4.4 Einfluss der Parameter der Simulation

Die anfängliche Zahl von Versetzungen im Korn ist eine Größe, die nicht experimentell bestimmt werden kann. Daher wird der Einfluss dieses Parameters auf die Simulation untersucht. Weiterhin könnten die Anzahl der Körner und die Anfangswerte der Eigenschaften der Körner

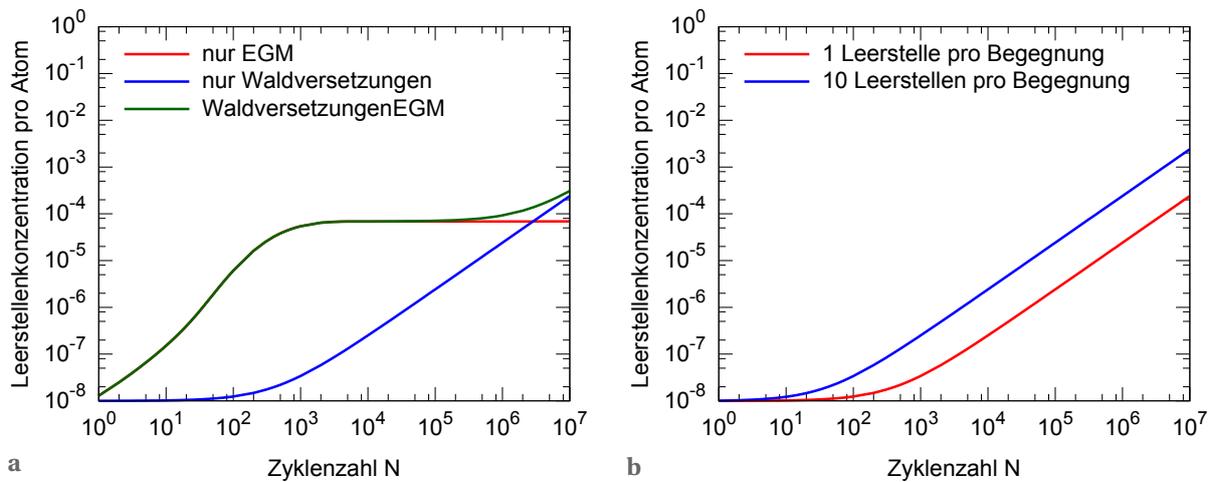


Abbildung 4.5 – Mechanismen zur Erhöhung der Leerstellenkonzentration.

(a) Zur Erhöhung der Leerstellenkonzentration stehen zwei Mechanismen zur Verfügung: Nach dem EGM-Modell (rote Kurve) steigt die Leerstellendichte zu Beginn stark an, erreicht aber bald einen Sättigungswert, da Leerstellen auch wieder vernichtet werden. Beim Schneiden von mobilen Schraubenversetzungen mit immobil Waldversetzungen (blaue Kurve) steigt die Leerstellenkonzentration sehr viel langsamer, dafür linear mit der Zyklenzahl an. Verwendet man beide Mechanismen (grüne Kurve), so dominiert zu Beginn das EGM-Modell, bei hohen Zyklenzahlen das Schneiden mit Waldversetzungen.

(b) Die Anzahl der pro Begegnung zwischen mobilen Stufenversetzungen und Waldversetzungen produzierten Leerstellen ist eine unbekannte Größe und damit ein freier Parameter des Modells. Hier wird die Kurve für 1 und 10 Leerstellen pro Begegnung verglichen.

einen entscheidenden Einfluss auf das Ergebnis haben. Daher werden auch sie variiert und die Ergebnisse verglichen.

4.4.1 Einfluss der anfänglichen Zahl von Versetzungen

Die Zahl der Versetzungen in einem Korn wird erhöht, indem eine Versetzungsquelle so viele Versetzungen produziert bis die Spannung der produzierten Versetzungen die Quelle stilllegt (siehe Abschnitt 3.5). Da im Modell jedoch nicht die absolute Anzahl von Versetzungen, sondern die Versetzungsdichte relativ zum unverformten Zustand relevant ist, muss die Zahl der neu produzierten Versetzungen auf die Zahl der Versetzungen im unverformten Zustand normiert werden.

Eine höhere anfängliche Anzahl von Versetzungen führt zu einer langsameren Zunahme der relativen Versetzungsdichte und damit, wie Abb. 4.6 zeigt, über die langsamer wachsende Fließspannung zu einer langsameren Verfestigung und einer langsameren Zunahme der Leerstellenkonzentration durch das EGM-Modell. Die erreichte Sättigungsspannung und die Zunahme der Leerstellenkonzentration durch das Schneiden mit Waldversetzungen bleiben unverändert. Über die anfängliche Zahl von Versetzungen kann also die Verfestigungsrate ohne Auswirkungen auf die übrigen Ergebnisse angepasst werden.

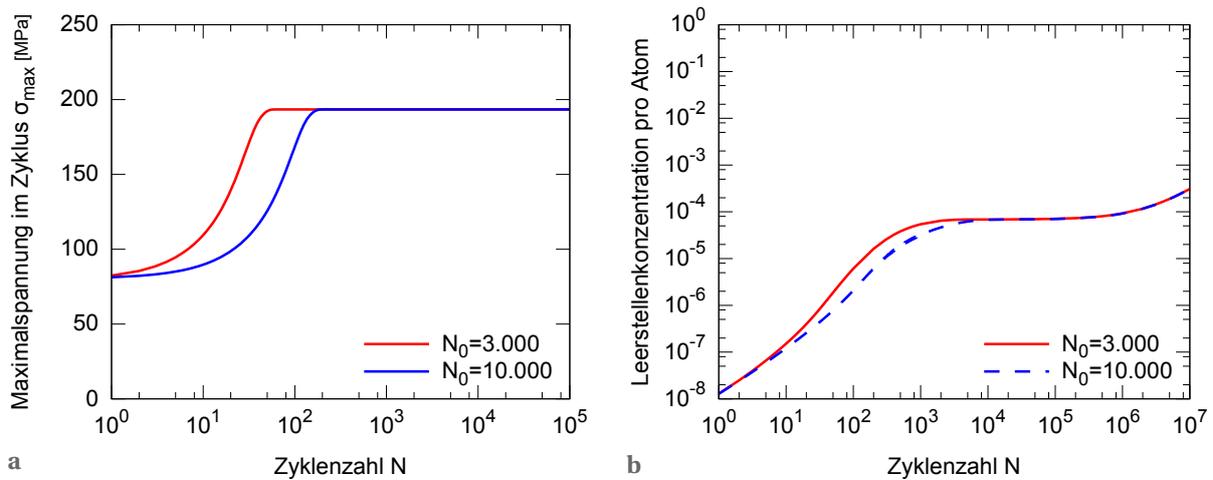


Abbildung 4.6 – Eine höhere anfängliche Anzahl von Versetzungen pro Korn führt zu einer langsameren anfänglichen Verfestigung (a) und einem langsameren Anstieg der Leerstellenkonzentration (b). Die erreichte Sättigungsspannung und die Zunahme der Leerstellenkonzentration durch das Schneiden mit Waldversetzungen bleiben gleich.

4.4.2 Einfluss der Anfangswerte

Durch die Initialisierung des Zufallszahlengenerators werden die anfänglichen Längen der Körner, ihre Orientierungen, Elastizitätsmoduln und anfängliche relative Versetzungsdichten festgelegt. Abb. 4.7a und 4.7b vergleichen exemplarisch Verfestigungskurve und Erhöhung der Leerstellenkonzentration für zwei verschiedene Initialisierungen des Zufallszahlengenerators. Der Unterschied ist gering. Die erreichte Sättigungsspannung ist nahezu gleich, der Verlauf der Verfestigungskurve und die Zunahme der Leerstellenkonzentration sind sehr ähnlich.

Dieser Eindruck wird durch Abb. 4.7c bestätigt. Sie zeigt die Verteilung der Sättigungsspannungen nach 7.000 Zyklen für verschiedene Konfigurationen der Ausgangswerte bzw. verschiedene Permutationen eines Satzes von Anfangswerten. Die Streuung ist klein.

Bei einer größeren Anzahl von Körnern bleibt der Mittelwert der Sättigungsspannungen gleich, während die Varianz der Verteilung abnimmt (siehe Abb. 4.7c). Jedoch ist auch bei 10×10 Körnern die Verteilung hinreichend schmal, so dass eine Rechnung repräsentativ ist.

Zur Streuung der Ergebnisse können die Absolutwerte und die Anordnung der Anfangswerte beitragen. Ihren Einfluss kann man untersuchen, indem man die Verteilung der Ergebnisse vergleicht, die entweder mit Permutationen eines Satzes von Anfangswerten oder mit verschiedenen Sätzen von Anfangswerten berechnet wurden. Abb. 4.7d vergleicht verschiedene Sätze von Anfangswerten (rote Kurve) mit Permutationen einen Satzes von Anfangswerten, wobei über alle Körner permutiert wurde (blaue Kurve). Wie man sieht, ist die Verteilung bei Permutation deutlich schmalere, es tragen also die Anordnung der Körner und die Verteilung der Absolutwerte der Stichprobe aus der zugrundeliegenden Verteilung zur Streuung der Ergebnisse bei. Die Mittelwerte der beiden Verteilungen sind leicht gegeneinander verschoben. Dies liegt vermutlich an der Wahl des Satzes von Anfangswerten zur Permutation.

4.4. EINFLUSS DER PARAMETER DER SIMULATION

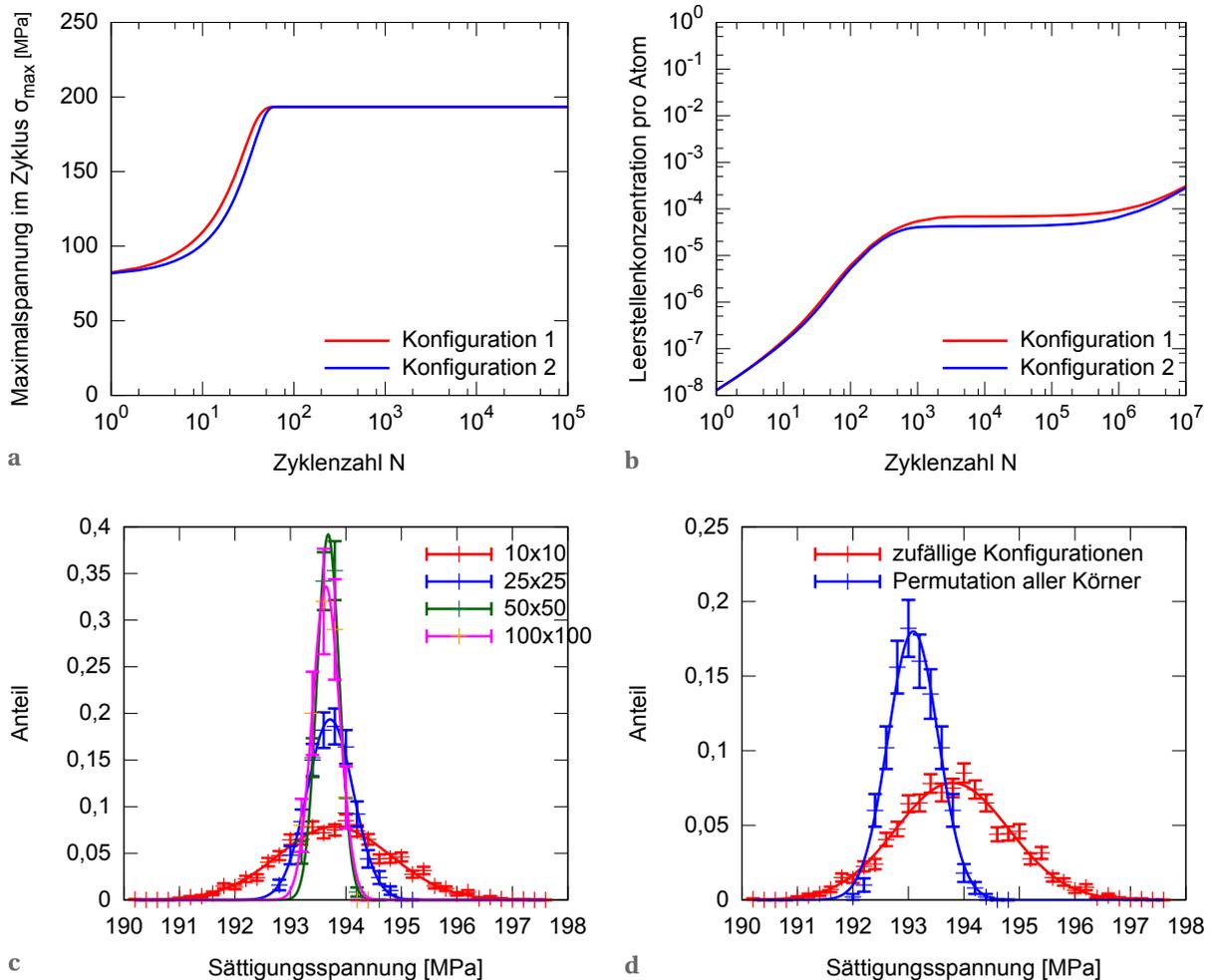


Abbildung 4.7 – Einfluss der Anfangswerte

(a) und (b) stellen den Einfluss der Anfangswerte auf Verfestigungskurve und Erhöhung der Leerstellenkonzentration exemplarisch dar. Der Unterschied ist gering. Es wurden zwei verschiedene Initialisierungen des Zufallszahlengenerators verwendet.

(c) Vergleich der Streuung der Sättigungsspannungen nach 7.000 Zyklen für 10x10, 25x25, 50x50 bzw. 100x100 Körner. Es wurden die Sättigungsspannungen von 2000, 500, 500 bzw. 100 Konfigurationen zufälliger Anfangswerte in ein Histogramm eingetragen. Man sieht, dass der Mittelwert der Sättigungsspannungen mit wachsender Körnerzahl gleich bleibt und dass die Varianz stark abnimmt. Zwischen 50x50 und 100x100 Körnern gibt es keinen wesentlichen Unterschied. Selbst bei 10x10 Körnern ist die Streuung klein.

(d) Vergleich der Streuung der Sättigungsspannungen nach 7.000 Zyklen für zufällige Konfigurationen der Anfangswerte (rote Kurve) und zufällige Permutationen eines Satzes von Anfangswerten (blaue Kurve). Es wurde mit jeweils 10x10 Körnern gerechnet. Die Sättigungsspannungen von 2000 bzw. 500 Konfigurationen wurden in ein Histogramm eingetragen. Die Breite der Verteilung bei Permutation ist deutlich kleiner. Es tragen also sowohl die Position der Körner, als auch der Satz von Anfangswerten zur Streuung der Ergebnisse bei.

4.5 Simulationen

Nachdem die Mechanismen im Modell und die Bedeutung der Parameter untersucht wurden, kann das Modell nun beispielhaft an Szenarien getestet werden: Wie verhält es sich bei Variation der Verformungsamplitude, bei Einführung einer Vordeformation und sieht man einen Unterschied zwischen einem ein- und einem zweiphasigem Material?

4.5.1 Variation der Verformungsamplitude

Die zyklische Verformung wird in der Simulation dehnungskontrolliert ausgeführt. Führt man zwei Versuche mit unterschiedlichen Dehnungsamplituden durch, so erwartet man für größere Dehnungsamplituden größere Sättigungsspannungen und einen Bruch bei niedrigeren Zyklenzahlen, d.h. ein schnelleres Anwachsen der Leerstellenkonzentration. Abb. 4.8 zeigt, dass das Modell diese Erwartung erfüllt.

Die erreichte Sättigungsspannung hängt linear von der Dehnungsamplitude ab (siehe Abb. 4.8b). Dies kann ich nicht direkt mit dem Experiment vergleichen, da mir keine experimentellen Daten zur Verfügung stehen. Mir liegen lediglich die Daten einer zyklischen Spannungs-Dehnungs-Kurve für polykristallines Nickel vor [SH02]. In zyklischen Spannungs-Dehnungs-Kurven wird die Sättigungsspannung nach der anfänglichen Verfestigung gegen den Logarithmus der plastischen Dehnung aufgetragen. Die Ergebnisse meiner Simulation sind nicht exakt mit dieser Kurve vergleichbar, da ich mit konstanter *Gesamtdehnungsamplitude* rechne, während zyklische Spannungs-Dehnungs-Kurven durch Experimente mit konstanter *plastischer* Dehnungsamplitude erstellt werden. In meiner Simulation nimmt die plastische Dehnung während der zyklischen Verfestigung ab. Abb. 4.8d vergleicht die experimentelle Spannungs-Dehnungs-Kurve mit der simulierten Spannung und plastischen Dehnung nach 7.000 Zyklen. Die zyklische Spannungs-Dehnungs-Kurve von polykristallinem Nickel [SH02; Mor94; Buq+01] zeigt wie zyklische Spannungs-Dehnungs-Kurven von Einkristallen drei Bereiche unterschiedlicher Steigung, jedoch sind die Bereiche beim Polykristall weniger stark ausgeprägt als beim Einkristall [SH02]. Die Bereiche unterschiedlicher Steigung werden mit den unterschiedlichen Typen von Versetzungsstrukturen erklärt, die man im Experiment beobachtet. Da im Modell jedoch nur eine Art von Versetzungsstruktur betrachtet wird, ist nicht zu erwarten, dass die Simulation wie das Experiment Bereiche verschiedener Steigung zeigt. Eine Erweiterung innerhalb des Modells ist prinzipiell möglich.

Die zyklische Spannungs-Dehnungs-Kurve ist in halblogarithmischer Darstellung in den drei Bereichen annähernd linear, d.h. die Sättigungsspannung steigt annähernd proportional mit dem Logarithmus der plastischen Dehnung (blaue Kurve, [SH02]). Die Kurve der simulierten Werte steigt in halblogarithmischer Darstellung stärker als linear (rote Kurve). Beschränkt man die Betrachtung jedoch auf kleine Dehnungen, so kann man auch diese Kurve als linear ansehen (Abb. 4.8d).

Die simulierten Werte stimmen nicht mit den experimentellen überein. Bei gleicher plastischer Dehnung sind die simulierten Werte etwa um einen Faktor 1,1 bis 1,5 größer als die experimentellen Werte. Wie bereits erklärt, wird eine genaue Übereinstimmung aber auch nicht erwartet, da die Simulation nicht exakt das Experiment nachempfindet: Das Experiment

wird mit konstanter plastischer Dehnung durchgeführt, während durch die Simulation eine Verformung mit konstanter Gesamtdehnungsamplitude beschrieben wird.

4.5.2 Simulation einer Vordeformation

Eine Vordeformation wird simuliert, indem man die anfängliche relative Versetzungsdichte ρ/ρ_0 in den Körnern nicht auf Werte um 1, sondern auf höhere Werte setzt. Dadurch ändert sich die Fließspannung, so dass man Änderungen an der Verfestigungskurve erwartet. Zusätzlich geschieht die Erhöhung der Leerstellenkonzentration schneller, da die Anzahl der Waldversetzungen erhöht wird.

Abb. 4.9a und 4.9b vergleichen zwei Simulationen, die sich nur in der anfänglichen relativen Versetzungsdichte unterscheiden. Die rote Kurve stellt eine ausgeheilte Probe durch eine Verteilung $N(2;0,25)$ der anfänglichen Versetzungsdichte dar, die blaue eine vordeformierte Probe mit der Verteilung $N(10;2,5)$. Die Verfestigungskurve der vordeformierten Probe ist sehr viel flacher, erreicht aber nahezu den gleichen Sättigungswert. In Abb. 4.9c wird dies bestätigt: Die Verteilung der Sättigungsspannungen ist nahezu unabhängig von der Verteilung der anfänglichen Versetzungsdichte. Auch eine größere Streuung der anfänglichen Versetzungsdichten führt nicht zu einer Verbreiterung der Verteilung der Sättigungsspannungen. Die Leerstellenkonzentration nimmt bei Vordeformation schneller zu. Im Bereich, in dem das EGM-Modell dominiert, geschieht dies durch den unterschiedlichen Verlauf der Verfestigungskurve. Später ist die höhere Anzahl von Waldversetzungen für den schnelleren Anstieg verantwortlich.

4.5.3 Variation des Materials

Streng genommen ist das Modell nur für Reinstmetalle mit kubisch-flächenzentrierter Struktur und welligem Gleitverhalten gültig, da die sich in diesen Metallen bildenden Versetzungsstrukturen Grundlage des Modells sind. Jedoch kann man zu Testzwecken auch versuchen, andere Materialien zu simulieren, um die Grenzen des Modells auszuloten. Durch Änderung der verwendeten Materialeigenschaften Elastizitätsmodul, Schubmodul, Poissonzahl und Burgersvektor kann ein anderes Material simuliert werden. Gibt man einem Teil der Körner andere Eigenschaften, so kann man zweiphasige Materialien simulieren.

Mittels Positronenannihilationsspektroskopie wurden unter anderem Restlebensdauervorhersagen für den einphasigen austenitischen Stahl X6 CrNiTi 18-10 [Ben02] und den zweiphasigen ferritischen Stahl C45E [Eic06] gemacht. Im austenitischen Stahl erhöht sich die Leerstellenkonzentration gleichmäßig im gesamten Volumen, während sie im ferritischen Stahl stark lokalisiert ansteigt. Diese beiden Materialien werden nun im Rahmen des Modells nachgebaut und die räumliche Verteilung der Leerstellenkonzentration verglichen.

Austenitische Stähle bestehen aus γ -Eisen. Dieses hat eine kubisch-flächenzentrierte Struktur. Bei Ermüdung bilden sich mit denen von Nickel und Kupfer vergleichbare Versetzungsstrukturen. Das Modell ist also voll auf einen einphasigen austenitischen Stahl anwendbar.

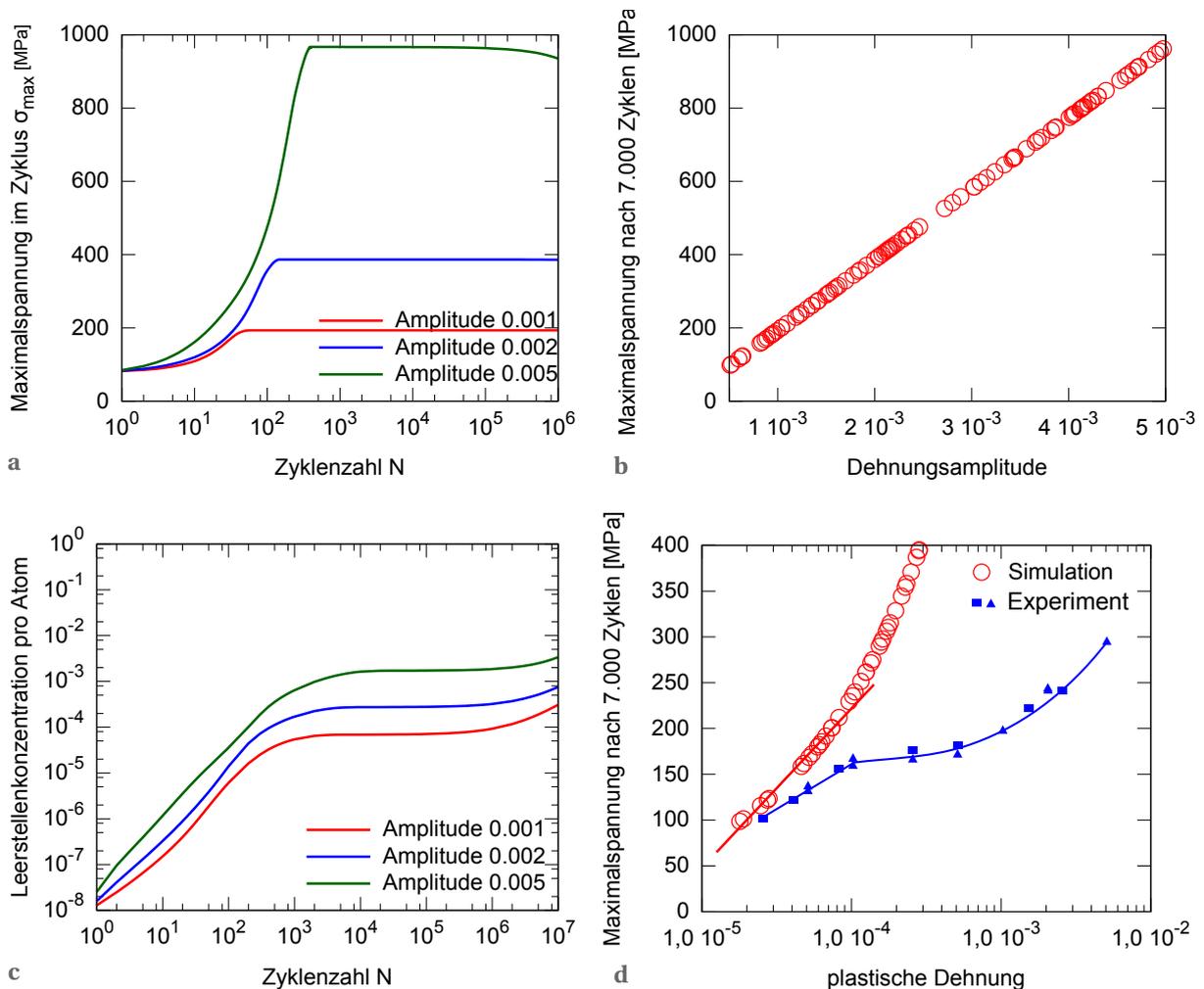


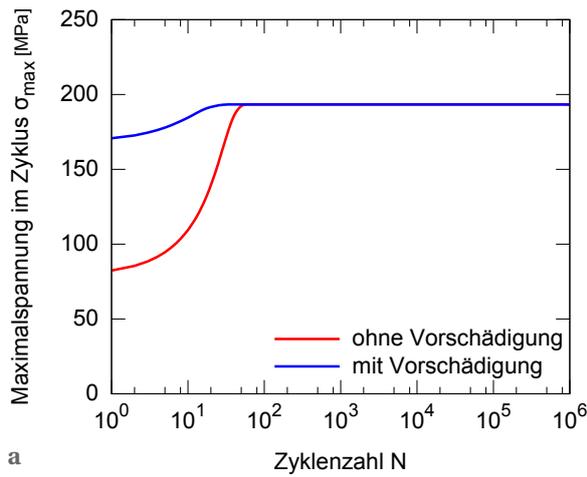
Abbildung 4.8 – Variation der Dehnungsamplitude

(a) Verfestigungskurve. Die Sättigungsspannung nach Ende der anfänglichen zyklischen Verfestigung nimmt für höhere Dehnungen einen höheren Wert an. Bei Zyklenzahlen ab ca. 10^5 fallen die Verfestigungskurven wieder ab. Dies fällt bei hohen Dehnungsamplituden besonders deutlich auf. Die Ursache ist vermutlich die Verwendung einer Näherung der wahren Dehnung bis 2. Ordnung (siehe Abb. 4.2b).

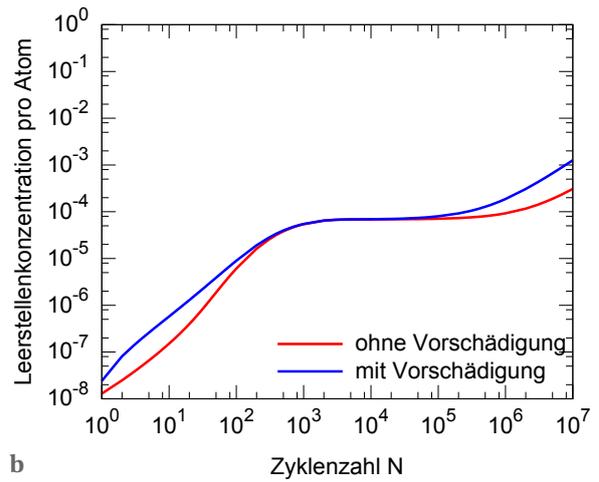
(b) Zwischen der Sättigungsspannung nach 7.000 Zyklen und der Dehnungsamplitude gibt es einen linearen Zusammenhang. Hier wurde mit der gleichen Konfiguration der Anfangswerte 100 mal bei verschiedenen, aber festen Dehnungen zwischen 0,5‰ und 5‰ eine zyklische Verformung simuliert.

(c) Die Erhöhung der Leerstellenkonzentration erfolgt für höhere Dehnungen schneller. Nimmt man an, dass es eine maximale Fehlstellenkonzentration vor dem Bruch gibt, so bedeutet dies, dass bei höheren Dehnungen der Bruch früher erfolgt.

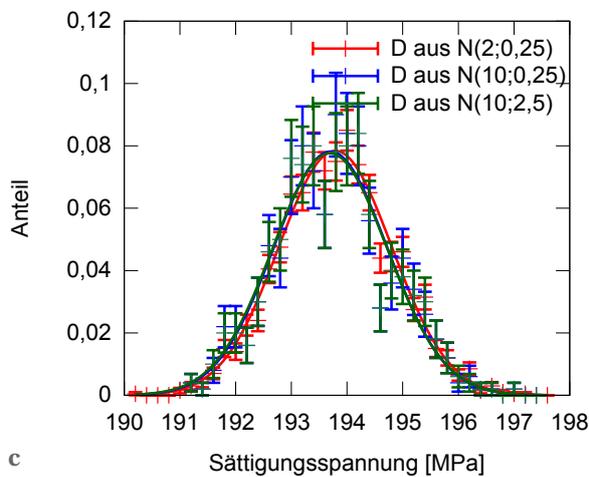
(d) Vergleich der Sättigungsspannungen für verschiedene Dehnungsamplituden (rot) mit einer experimentell bestimmten zyklischen Spannungs-Dehnungs-Kurve von polykristallinem Nickel (blau, [SH02]). Da die Simulation mit konstanter Gesamtdehnung rechnet, das Experiment aber mit konstanter plastischer Dehnung durchgeführt wird, erwartet man keine gute Übereinstimmung. Die simulierte Kurve zeigt nicht wie die experimentelle Kurve 3 Bereiche unterschiedlicher Steigung, da in der Simulation nur ein Art von Versetzungsstruktur betrachtet wird.



a



b



c

Abbildung 4.9 – Simulation einer Vordeformation

Eine Vorschädigung wird durch eine höhere anfängliche relative Versetzungsdichte simuliert.

(a) Die Verfestigungskurve einer vordeformierten Probe ist flacher als die einer ausgeheilten Probe, erreicht aber den gleichen Sättigungswert.

(b) Die Erhöhung der Leerstellendichte findet bei Vorschädigung schneller statt. Dies liegt bei hohen Zyklenzahlen an der höheren Zahl von Waldversetzungen.

(c) Sättigungsspannung nach 7.000 Zyklen für verschiedene Verteilungen der anfänglichen relativen Versetzungsdichte. Es wurden jeweils 10×10 Körner in 2000 Konfigurationen mit $D = \rho/\rho_0 \in N(2;0,25)$ und je 500 Konfigurationen mit $D \in N(10;0,25)$ bzw. $D \in N(10;2,5)$ verwendet. Die Verteilungen der Sättigungsspannungen sind nahezu gleich.

Der in [Eic06] untersuchte ferritische Stahl ist zweiphasig. Er besteht zu 60% aus Ferrit und zu 40% aus Perlit. Ferrit ist α -Eisen und hat eine kubisch-raumzentrierte Struktur, Perlit besteht aus feinen Lamellen. In den feinen Lamellen können sich Versetzungen nicht weit bewegen, so dass die Perlit-Phasen nicht wesentlich an der plastischen Verformung teilnehmen. Dieses Gefüge wird in der Simulation so umgesetzt, dass die Phasen durch Körner dargestellt werden und diese im Verhältnis 60:40 in Ferrit und Perlit eingeteilt werden. Die Ferritzellen verhalten sich in der Simulation normal, während in den Perlitzellen die Versetzungsmultiplikation stark unterdrückt ist. Die Versetzungsmultiplikation wird unterdrückt, indem die für Pileups zur Verfügung stehende Kornlänge durch einen Faktor 1000 geteilt wird - so entstehen nur 1/1000 der sonst üblichen Versetzungen in diesen Körnern.

In der graphischen Darstellung der Fehlstellendichte sind diese „Perlit-Körner“ deutlich zu erkennen: Sie zeigen während der gesamten Deformation eine stark verzögerte Zunahme der Leerstellenkonzentration und bleiben lange Zeit unverändert. Nach vielen Zyklen gleichen sich die Leerstellendichten in beiden Sorten von Körnern an.

Zur Berechnung wurden weiterhin die Materialeigenschaften von Nickel und nicht die der Stähle verwendet. Die graphischen Darstellungen (Abb. 4.10 und 4.11) der Leerstellenkonzentration im pseudo-austenitischen und pseudo-ferritischen Material unterscheiden sich deutlich. Die Versetzungsdichte im pseudo-ferritischen Material steigt zwar lokalisiert, dennoch bilden sich keine Versetzungsstrukturen, wie sie im Experiment beobachtet wurden.

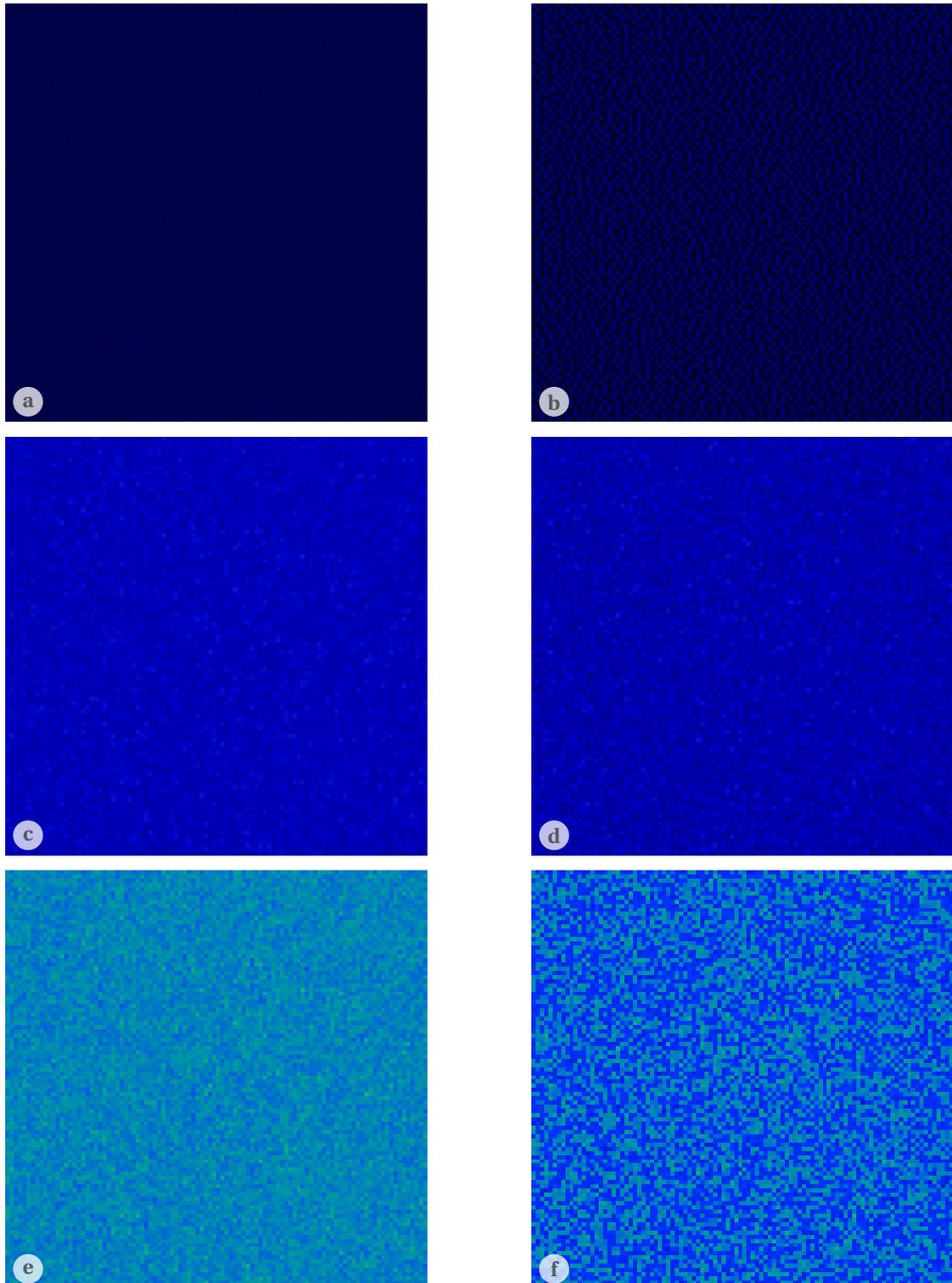


Abbildung 4.10 – Leerstellenkonzentrationen nach 1, 10, 100 Zyklen; 100x100 Körner
links pseudo-austenitisches, rechts pseudo-ferritisches Material
logarithmische Falschfarbendarstellung; Skala in 4.12e

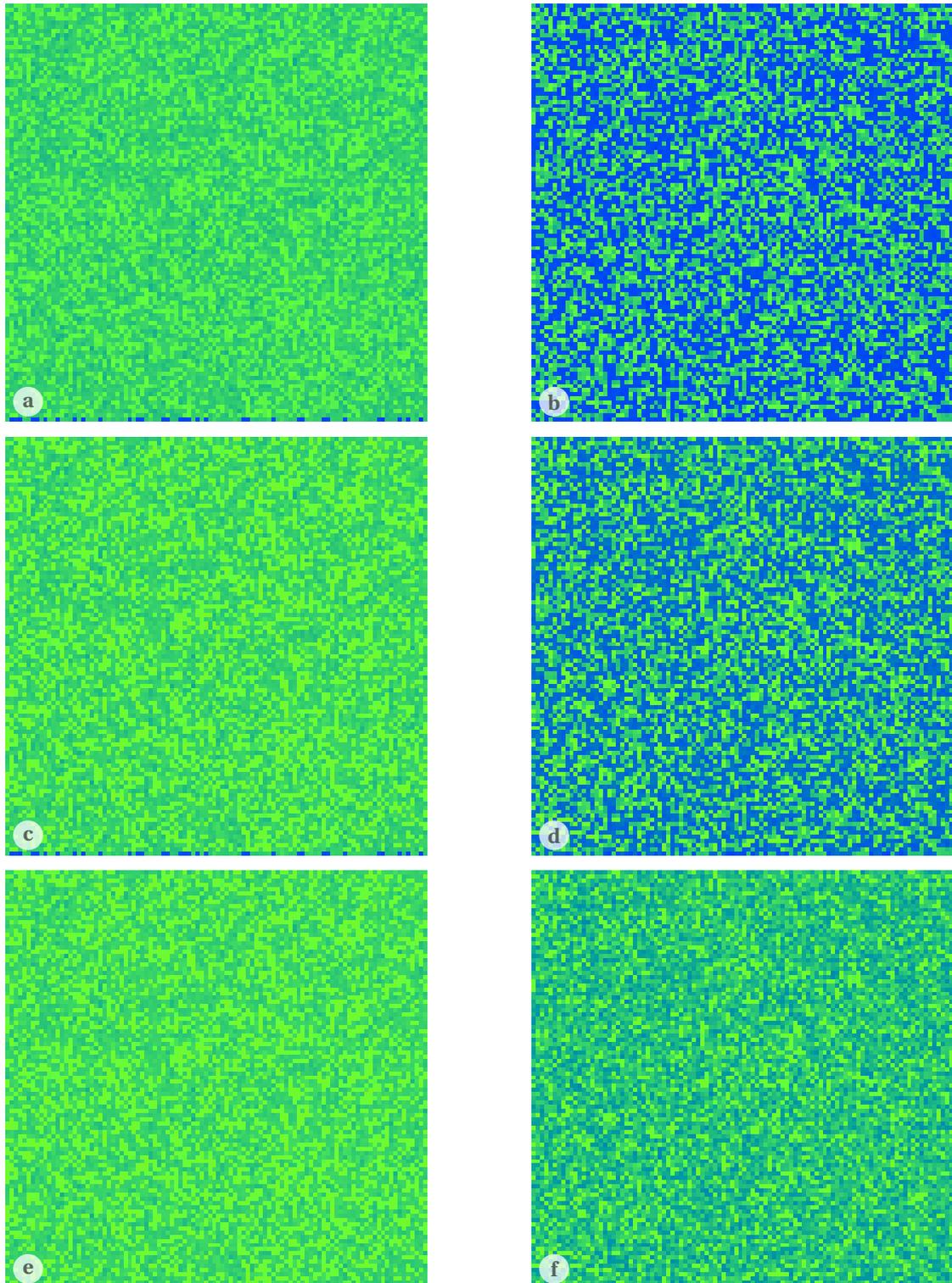


Abbildung 4.11 – Leerstellenkonzentrationen nach 10^3 , 10^4 , 10^5 Zyklen; 100x100 Körner
links pseudo-austenitisches, rechts pseudo-ferritisches Material
logarithmische Falschfarbendarstellung; Skala in 4.12e

4.6 Diskussion

Seit ihrer Entdeckung sind Plastizität und Ermüdung Gegenstand intensiver Forschung. Es gibt viele Ansätze, Ermüdung zu beschreiben. In der Bruchmechanik gelingt es inzwischen, auf atomarer Skala das Vorschreiten von Brüchen durch Molekulardynamik-Rechnungen zu simulieren. Geht es aber darum, die Restlebensdauer eines Werkstücks zu bestimmen, so ist man auf Verformungsexperimente angewiesen. Diese folgen bis heute dem vor mehr als 150 Jahren von Wöhler zuerst angewendeten Prinzip, eine Vielzahl gleichartiger Proben bis zum Bruch zu ermüden und aus der Verteilung der Bruchzyklenzahlen Rückschlüsse auf die Lebensdauer weiterer Proben des gleichen Materials zu ziehen. Dass dieses Prinzip nach so langer Zeit immer noch angewendet wird, obwohl die Versuche sehr zeit- und kostenintensiv sind, zeigt, dass es sich bei Ermüdung um ein hochkomplexes Phänomen handelt. Durch die Komplexität ist eine Vorhersage der Lebensdauer bei Ermüdung allein durch Berechnung aus ersten Prinzipien auf absehbare Zeit nicht vorstellbar.

Bennewitz zeigte [Ben02], dass es doch eine alternative experimentelle Methode gibt. Mit Positronenannihilationsspektroskopie kann der Anteil offenen Volumens im Material mittels des S -Parameters gemessen werden. Normiert man ihn auf den S -Parameter des unverformten Materials, so nimmt dieser relative S -Parameter in einigen Metallen kurz vor dem Bruch einen materialtypischen Wert an. Zudem steigt der relative S -Parameter in einigen Materialien linear mit dem Logarithmus der Zyklenzahl. Somit ist es in diesen Materialien möglich, eine einzige Probe bis zum Bruch zu ermüden und den Maximalwert zu bestimmen, um dann bei allen weiteren Proben des gleichen Materials die Restlebensdauer aus der Messung des relativen S -Parameters nach wenigen Verformungszyklen ($\sim 10^4$) zerstörungsfrei abzuschätzen.

Dies funktioniert gut im austenitischen Stahl X6 CrNiTi 18-10, da in diesem der relative S -Parameter gleichmäßig im gesamten Probenvolumen zunimmt. Doch schon in einem weiteren Modellmaterial, dem ferritischen Stahl C45E, ist die Restlebensdauer Vorhersage schwieriger. Hier nimmt der relative S -Parameter nur stark lokalisiert zu [HM06], so dass eine Messung mit hoher Ortsauflösung ($\sim 10\text{ micm}$) durchgeführt werden muss [Eic06]. Auf diese Weise ist es möglich, die Methode zur Restlebensdauerbestimmung auch für andere Materialien anzuwenden, wie für die technische Aluminiumlegierung AA6082 [Wir08] und den ICE-Achsstahl A4T [Eic09] gezeigt wurde. Jedoch fehlt eine Erklärung für die Lokalisierung des Anstiegs des Anteils offenen Volumens.

In dieser Arbeit werden Modellvorstellungen entwickelt, um die unterschiedlichen Verformungsverhalten, wie sie mit Positronenannihilationsspektroskopie beobachtet werden, zu erklären. Die Materialien, insbesondere Legierungen, unterscheiden sich in extrem vielen mikroskopischen Details. Es ist aber anzunehmen, dass viele von diesen für die Ausbildung des einen oder anderen Verformungsverhaltens nicht relevant sind. Durch die Vielzahl der Mikrostrukturen und die Komplexität ihrer Wechselwirkungen ist es zur Zeit nicht vorstellbar, allein auf mikroskopischer Grundlage aus ersten Prinzipien die unterschiedlichen Verformungsverhalten der Materialien erklären zu wollen. Es ist also legitim und notwendig, mit einem Modell zur Erklärung der unterschiedlichen Verformungsverhalten der Materialien auf mesoskopischer Ebene anzusetzen und starke Vereinfachungen durchzuführen.

Das entwickelte Modell sieht Versetzungen als Hauptursache für die plastische Verformung an,

betrachtet aber nie einzelne Versetzungen, sondern verwendet Versetzungsdichten und mesoskopische Versetzungsstrukturen, wie sie in Nickel und Kupfer beobachtet wurden. Nimmt man Versetzungen als Grundlage, so ist es natürlich, Kristallkörner als Einheiten des Modells zu betrachten, da Korngrenzen nahezu unüberwindliche Hindernisse für die Versetzungsbe-
wegung sind. Es wird angenommen, dass die Orientierung der Kristallkörner, d.h. die Lage der Gleitsysteme für Versetzungen in einem Korn, relativ zur Orientierung der Nachbarkörner und der äußeren Verformungsrichtung eine relevante Größe ist. Diese Arbeit zeigt, dass mit den unterschiedlichen Orientierungen, Größen, Elastizitätsmodulen und Versetzungsdichten der Körner und den Eigenschaften der jeweiligen Nachbarkörner bereits genug Gründe für ein unterschiedliches Verformungsverhalten im oben beschriebenen Sinne vorliegen.

Das Modell betrachtet eine Probe als regelmäßige Anordnung quaderförmiger Kristallkörner. Diese haben die Eigenschaften Länge in den drei Raumrichtungen, Elastizitätsmodul, Orientierung zur Zugrichtung und Versetzungsdichte. Elastizitätsmodul und Versetzungsdichte verstehen sich als Mittelwerte über ein Korn. Die geometrische Anpassung der Körner aneinander und die sich daraus ergebenden Spannungsverhältnisse werden vernachlässigt. Die Verformung wird reihenweise berechnet, als sei sie rein elastisch. Anschließend wird die Spannung in den Körnern korrigiert, falls sie die von der Versetzungsdichte abhängige Fließspannung übersteigt. Durch diese Korrektur kommt Plastizität in das Modell hinein. Sie äußert sich durch Hysterese im Spannungs-Dehnungs-Diagramm und ein Ansteigen der Maximalspannung in den ersten Zyklen (zyklische Verfestigung).

Zur Erhöhung der Versetzungsdichte wird im Modell angenommen, dass es in jedem Korn eine Versetzungsquelle gibt, die abhängig von der Schubspannung im Korn neue Versetzungen produziert, die sich an der Korngrenze aufstauen. Die Produktion neuer Versetzungen stoppt bei einer gewissen Versetzungsdichte, da zur Aktivierung der Versetzungsquelle eine Quellspannung überschritten werden muss, die bereits vorhandenen Versetzungen aber eine der äußeren Spannung entgegengerichtete Spannung verursachen. Dadurch erreicht die Verfestigungskurve nach wenigen Zyklen (~ 100 bis 10000) einen Sättigungswert, wie es auch im Experiment beobachtet wird. Die Kombination von plastischer Korrektur und Quellspannung ist also in der Lage, dieses grundlegende Verhalten abzubilden und bietet eine gute Basis zur weiteren Simulation des Verformungsverhaltens. Zur Schubspannung, welche die Anzahl neu produzierter Versetzungen bestimmt, tragen im Modell neben der Spannung durch die äußere Verformung eine Spannung durch die Nachbarkörner in Querrichtung und eine Spannung durch Pileups in den Nachbarkörnern bei. Wie sich jedoch herausstellt, ist der Wert der erreichten Sättigungsspannung fast ausschließlich durch die äußere Spannung bestimmt. Die anderen Spannungen tragen einen kleinen Teil zur Entwicklung der Leerstellenkonzentration bei.

Zur Erhöhung der Leerstellenkonzentration geht das Modell von den in Nickel und Kupfer beobachteten Versetzungsstrukturen, versetzungsarmen Kanälen und versetzungsreichen Adern oder Wänden, aus. Neben dem EGM-Modell [EM79; EGM81], das unter anderem Produktion und Annihilation von Leerstellen in den Adern oder Wänden beschreibt, wird die Produktion von Jogs durch das Schneiden mit Waldversetzungen in den Kanälen als zweiter Mechanismus zur Erhöhung des Anteils offenen Volumens verwendet. Das EGM-Modell sagt eine Sättigung der Leerstellenkonzentration nach wenigen Verformungszyklen voraus. Dies stimmt mit den Ergebnissen von Widerstandsmessungen überein. Mit Positronenannihilations-spektroskopie misst man jedoch einen Anstieg des Anteils offenen Volumens bis zum

Bruch. Offensichtlich sind also Leerstellen nicht der einzige Beitrag zum offenen Volumen. Es wird vermutet, dass der mit Positronenannihilationsspektroskopie gemessene steigende Beitrag zum offenen Volumen von Jogs auf Versetzungen kommt. Das EGM-Modell kann also nicht als einziger Mechanismus zur Produktion von offenem Volumen im Modell verwendet werden. Als weiterer Mechanismus wird die Produktion von Jogs durch das Schneiden gleitender Schraubenversetzungen mit bereits zu Beginn vorhandenen Waldversetzungen in den Kanälen hinzugenommen. Es wird angenommen, dass die Zahl der Jogs nicht abnimmt, da diese weder von gleitenden Versetzungen aufgesammelt werden können noch entlang der Versetzungslinie gleiten können, um in den Wänden zu annihilieren. Da dieser zweite Mechanismus nur von der Anzahl der Waldversetzungen und der Dehnungsamplitude abhängt, und diese während der gesamten Verformung konstant bleiben, führt er zu einem linearen Anstieg des offenen Volumens mit der Zyklenzahl. Mit Positronenannihilationsspektroskopie misst man einen Anstieg des S -Parameters mit dem Logarithmus der Zyklenzahl.

Will man nur die prinzipielle Entwicklung der Leerstellenkonzentration in verschiedenen Körnern vergleichen, so ist es nicht relevant, ob die Leerstellenkonzentration linear oder logarithmisch mit der Zyklenzahl steigt. Es genügt ein stetiger, streng monoton wachsender Zusammenhang. In der graphischen Falschfarben-Darstellung der Leerstellenkonzentration erkennt man, dass sie sich in den einzelnen Körnern unterschiedlich schnell entwickelt. Besonders deutlich wird der Unterschied in der Entwicklung beim Vergleich eines einphasigen und eines zweiphasigen Materials. Im zweiphasigen Material werden die unterschiedlichen Phasen durch zwei Sorten von Körnern repräsentiert. In einer Sorte wird die Produktion neuer Versetzungen stark verzögert, indem die zur Bildung eines Pileups vorhandene Länge auf $1/1000$ der üblichen Länge verkürzt wird. Dies ist inspiriert von den Lamellen in der Perlitphase des ferritischen Stahls C45E und führt offensichtlich zu einer stark unterschiedlichen Entwicklung der Leerstellenkonzentration in den zwei Sorten von Körnern. Da sich die Körner nach vielen Zyklen aber angleichen, ist die Entwicklung in den „Perlit-Körnern“ nur stark verzögert, und nicht prinzipiell anders.

Im Experiment sieht man beim ferritischen Stahl C45E die Bildung und Ausbreitung von Schädigungsstrukturen bei gleichförmiger Belastung (siehe Abb. 4.12a). Für die Ausbildung dieser Strukturen kann es zwei Gründe geben: Erstens kann es eine Wechselwirkung zwischen den Körnern geben, so dass bei starker Schädigung eines Kornes auch die Nachbarkörner stärker geschädigt werden. Die zweite mögliche Ursache für die Bildung von Schädigungsstrukturen kann ein winziger Riss im Material sein, der zu einem inhomogenen Spannungsfeld in der Probe führt. Dadurch wird die Spannung in den Körnern in einer Umgebung des Risses lokal erhöht, so dass es dort zu einer stärkeren Schädigung kommt.

Zur Simulation der ersten möglichen Ursache ist im Modell bereits ein prinzipiell geeigneter Mechanismus vorhanden, nämlich der Beitrag zur Schubspannung durch Pileups in den Nachbarkörnern. Ist in einem Korn die Versetzungsdichte in den ersten Zyklen besonders hoch, so ist auch die Fließspannung in diesem Korn größer als in den restlichen Körnern. Dies führt zu höheren Spannungen und einer größeren Produktionsrate von Versetzungen. Dadurch sind auch die durch Pileups in den Nachbarkörnern produzierten Spannungen größer. Allerdings zeigt sich, dass dieser Mechanismus nicht stark genug ist, um gegen die durch die äußere Verformung und die Querkontraktion erzeugten Spannungen anzukommen (vgl. Abb. 4.4a). Man sieht in der graphischen Falschfarben-Darstellung keine Bildung und Ausbreitung von

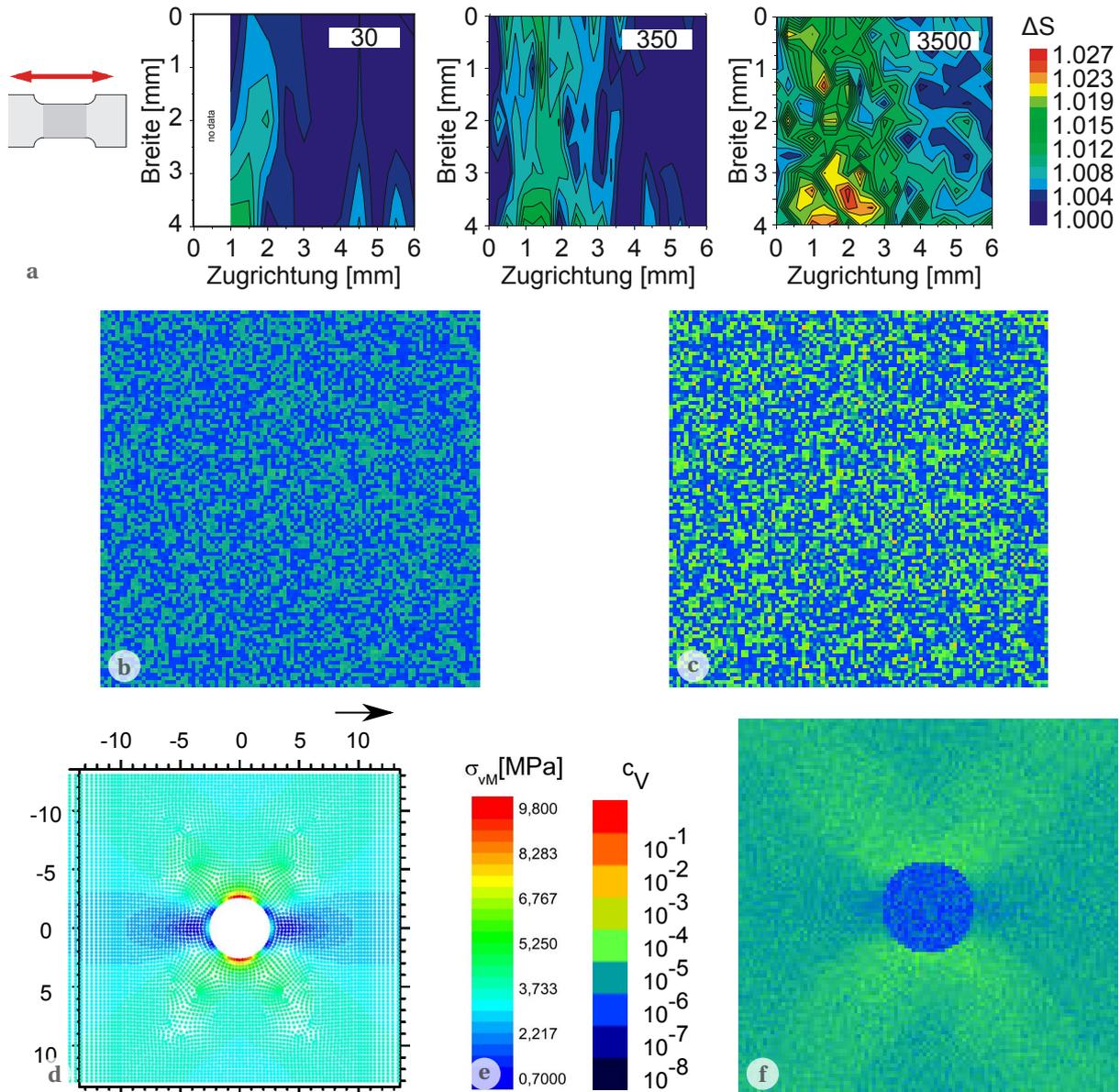


Abbildung 4.12 – Bildung und Ausbreitung von Schädigungsstrukturen

(a) Im Experiment [HM06]. In C45E wurde die Bildung von Schädigungsstrukturen trotz eines gleichförmigen Spannungsfeldes schon nach 30 Verformungszyklen gemessen. Diese breiten sich bei weiterer Verformung aus. Als Ursache ist eine Wechselwirkung zwischen Nachbarkörnern oder ein inhomogenes Spannungsfeld durch einen winzigen Riss denkbar.

(b)-(c) Im Modell durch Wechselwirkung der Nachbarkörner. Im Modell beobachtet man bei gleichförmiger Spannung keine Bildung von Strukturen, obwohl ein prinzipiell geeigneter Mechanismus zur Verfügung steht. Selbst wenn man den Einfluss dieses Mechanismus stark erhöht, sieht man keine Bildung von Strukturen (Bild rechts).

(d)-(f) Im Modell durch inhomogene Spannungsfelder. Wichtet man die Spannungen in den Körnern mit den Ergebnissen einer Finite-Elemente-Rechnung für eine gekerbte Probe, so beobachtet man eine inhomogene Erhöhung der Fehlstellendichte. Hier wurde statt des Spannungsfeldes um einen kleinen Riss das Spannungsfeld einer rechteckigen Probe mit Bohrung ((d), [Eic06]) verwendet.

Strukturen. Erhöht man zu Testzwecken die durch Pileups in Nachbarkörnern produzierten Spannungen um den Faktor 10^6 , so hat dies zwar einen Einfluss auf die Verfestigungskurve, eine Bildung von Schädigungsstrukturen sieht man aber auch dann nicht (Abb. 4.12c). Obwohl dieser Mechanismus prinzipiell geeignet wäre, führt er nicht zum gewünschten Resultat.

Zur Untersuchung der zweiten möglichen Ursache muss das durch den Riss bei Belastung entstehende inhomogene Spannungsfeld berechnet werden. Das kann besonders gut mit Finite-Elemente-Methoden gelöst werden. Man nutzt dann z.B. das so berechnete Spannungsfeld als Wichtungsfaktor, um die Spannungen in den Körnern zu verändern. Dieses Prinzip wurde statt mit dem Spannungsfeld durch einem winzigen Riss mit dem in einer rechteckigen Probe mit Bohrung getestet. Die Daten aus [Eic06] wurden auf ein 100×100 Körner großes Feld skaliert und werden in jedem Zyklus als Wichtungsfaktor an die Spannungen durch die äußere Verformung multipliziert. Auf diese Weise beobachtet man einen ungleichmäßig starken Anstieg der Leerstellenkonzentration, der dort am größten ist, wo auch die Spannungen am größten sind (Abb. 4.12d-f).

Somit kann durch Berechnung der Spannungsfelder mit einer Finite-Elemente-Methode und anschließende Berechnung der Ermüdung mittels des Modells im Prinzip die Ermüdung in beliebig geformten Proben simuliert werden. Die Beschränkung auf quaderförmige Proben wird auf diese Weise aufgehoben. Nach Definition von Bruchkriterien kann so im Prinzip die Restlebensdauer beliebig geformter Proben berechnet werden. Der Rechenaufwand zur Simulation der Ermüdung ist vergleichsweise gering: Je nach Probengröße kann die Simulation auf einem einzelnen Arbeitsplatzrechner innerhalb weniger Stunden durchgeführt werden.

Kapitel 5

Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Modells, mit dessen Hilfe man die Restlebensdauer zyklisch belasteter Werkstoffe abschätzen kann. Dieses Modell soll die Ermüdung makroskopisch großer Proben beschreiben. Da an der Ermüdung eine sehr große Zahl von Kristalldefekten beteiligt, und deren Wechselwirkungen sehr komplex ist, erscheint es aus heutiger Sicht nicht aussichtsreich, die Ermüdung einer großen Probe durch das Verhalten einzelner Kristalldefekte zu beschreiben. Ein passendes Modell muss also die Vorgänge bei der Ermüdung vereinfachend und zusammenfassend beschreiben.

Das entwickelte Modell beschreibt vereinfachend die Vorgänge bei der zyklischen Deformation eines polykristallinen Metalls. Das Metall wird dabei als Anordnung kleiner Quader betrachtet, welche die Kristallkörner des Metalls repräsentieren. Die Eigenschaften der Körner werden dabei stark auf wenige Parameter – Länge, Orientierung, E-Modul, Versetzungsdichte, Leerstellenkonzentration – reduziert. Die Substruktur der Körner oder das Verhalten einzelner Versetzungen wird nicht betrachtet. Stattdessen werden über ein Korn gemittelte Werte verwendet. Durch leicht verschiedene Anfangswerte der Eigenschaften unterscheiden sich die Körner.

Zur Simulation einer Verformung wird zunächst für jede Reihe die Position der Körner bestimmt, als sei die Verformung rein elastisch. Danach wird die Spannung in jedem Korn auf die Fließspannung zurückgesetzt, falls sie höher war. Die Fließspannung steigt mit der Versetzungsdichte. Mit dieser korrigierten Spannung in den Körnern wird nun die effektive Schubspannung im Hauptgleitsystem jedes Korns bestimmt. Zur effektiven Schubspannung trägt die Spannung durch die äußere Verformung, eine Spannung durch Querkontraktion der Nachbarn in Querrichtung und eine Spannung durch Pileups von Versetzungen in den Nachbarkörnern bei. Wie sich herausstellt, ist der Beitrag durch Pileups in den Nachbarkörnern vernachlässigbar gering und kann daher aus dem Modell ausgeschlossen werden.

Zur Erhöhung der Versetzungsdichte wird im Modell davon ausgegangen, dass im Zentrum jedes Korns eine Versetzungsquelle sitzt. Diese produziert eine bestimmte Anzahl neuer Versetzungen je nach effektiver Schubspannung. Die Anzahl der Versetzungen ist beschränkt, da sich diese in einem Pileup vor den Korngrenzen aufstauen. Da die bereits vor dem Verformungsschritt vorhandenen Versetzungen die Produktion neuer Versetzungen erschweren, wird

die effektive Schubspannung um eine von der Versetzungsdichte abhängige Quellspannung verringert.

Zur Erhöhung der Leerstellendichte wird eine andere Vorstellung der Versetzungsanordnung in den Körnern verwendet. Es wird von den tatsächlich in kubisch-flächenzentrierten Reinetallen mit welligem Gleitverhalten beobachteten Versetzungsstrukturen – versetzungsreiche Adern und versetzungsarme Kanälen – ausgegangen. Die Adern bestehen aus Dipolen von Stufenversetzungen, zwischen den Adern spannen sich Bögen von Schraubenversetzungen über die Kanäle. Anders als beobachtet wird im Modell angenommen, dass sich die Art der Struktur bei unterschiedlich großen Dehnungsamplituden nicht unterscheidet; insbesondere wird also die Bildung persistenter Gleitbänder im Modell nicht betrachtet. Außer den Versetzungen in der Struktur gibt es noch die bereits vor Beginn der zyklischen Verformung vorhandenen Versetzungen, die als Waldversetzungen nur in den Kanälen eine Rolle spielen. Die Stufenversetzungen in den Adern sind in kleine Stücke unterteilt und immer wieder festgepinnt.

Bei Verformung bauchen sich aus den Adern wie bei einer Frank-Read-Quelle Versetzungen aus. Diese Bögen werden vergrößert, bis sie die gegenüberliegende Ader erreichen. Dort annihiliert der stufenartige Teil des Bogens mit Stufenversetzungen aus der Ader, während die schraubenartigen Zwischenstücke sich voneinander entfernen und weiter durch den Kanal gleiten (EGM-Modell). Treffen sie auf passend orientierte Waldversetzungen mit Schraubencharakter, so bildet sich an der Schnittstelle ein Jog. Durch das Annihilieren der Stufenversetzungen und das Bilden der Jogs und anschließendes Jogdragging werden Leerstellen produziert.

Simuliert man mit diesem Modell eine dehnungskontrollierte zyklische Verformung, so beobachtet man zu Beginn eine zyklische Verfestigung, d.h. in den ersten 100 bis 10.000 Zyklen nimmt die in jedem Zyklus maximal erreichte Spannung zu und erreicht dann einen Sättigungswert. Dieses Verhalten ist sinnvoll und im Rahmen des Modells erklärbar. Die Leerstellenkonzentration erhöht sich im Laufe der Verformung immer weiter. Durch die zwei Mechanismen erfolgt diese Zunahme nicht gleichmäßig, sondern mit unterschiedlichen Raten. Durch unterschiedliche Anfangswerte der Korngröße, Orientierung und E-Modul finden diese Prozesse in den einzelnen Körnern unterschiedlich stark statt.

Die Simulation zeigt, dass es möglich ist, wesentliche Eigenschaften der zyklischen Verformung durch ein granulares, mesoskopisches Modell zu beschreiben. Das Modell reagiert robust auf eine Änderung der Parameter: Quantitativ erkennt man deutliche Unterschiede, qualitativ ändert sich hingegen nichts. Es gibt insbesondere keine Ausreißer. Die Mechanismen sind stabil und bei den physikalisch sinnvoll gewählten Parametern befindet sich das Modell nicht an einem kritischen Punkt. Das Modell ist durch Hinzufügen neuer Mechanismen zur Versetzungs- oder Leerstellenproduktion oder Kopplungen der Eigenschaften vielfältig erweiterbar. Es bietet eine stabile Grundlage für weitere Ideen.

Um das Modell auf beliebige Probengeometrien zu erweitern, kann es mit den Ergebnissen einer Finite-Elemente-Rechnung kombiniert werden. Die mit den Finite-Elemente-Methoden berechneten Spannungen werden dabei als Wichtungsfaktoren mit den Spannungen der Körner multipliziert. Damit ist es im Prinzip möglich, für beliebig geformte Probengeometrien die Ermüdung zu simulieren und eine Restlebensdauervorhersage zu machen.

Anhang A

Das Programm zur Simulation

Das Programm zur Simulation wurde in C++ geschrieben. Es wird unter Angabe der Dimensionen, Durchläufe, Anzahl der Körner pro Dimension und Anzahl der Verformungszyklen pro Durchlauf gestartet. Die Ergebnisse werden in Form von Textdateien (Verfestigungskurve, Entwicklung der mittleren Leerstellenkonzentration, Werte am Ende jeden Durchlaufs) oder Bilddateien (2D-Falschfarbendarstellung der Spannungen, Versetzungsdichte oder Leerstellenkonzentration) ausgegeben.

Die Eigenschaften der Körner werden in Instanzen der Klasse `cell` gespeichert. Sie enthält Variablen für die Eigenschaften der Körner, daraus abgeleitete Variablen und solche, die den Verformungszustand der Körner beschreiben:

- die Längen l_x , l_y und l_z in x -, y - bzw. z -Richtung und daraus abgeleitet die Positionen x , y und z .
- den Elastizitätsmodul E .
- die Euler-Winkel θ , ψ und φ , die die Orientierung des Korns angeben, und daraus abgeleitet die Vektoren von Gleitrichtung \vec{r} und Gleitflächennormalen \vec{n} und der Schmidfaktor μ des Hauptgleitsystems.
- die Spannungen σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , τ_{xy} , τ_{yz} , τ_{xz} und daraus zusammen mit der Orientierung abgeleitet die Schubspannung τ_{eff} im Hauptgleitsystem.
- die relative Versetzungsdichte ρ/ρ_0 und die Leerstellenkonzentration c_V

Die Probe wird durch ein Array vom Datentyp `cell` dargestellt. Durch die Anordnung der Körner im Array sind die Nachbarkörner bestimmt. Ist L die Anzahl der Körner pro Dimension, so ist die Anzahl der Elemente des Arrays

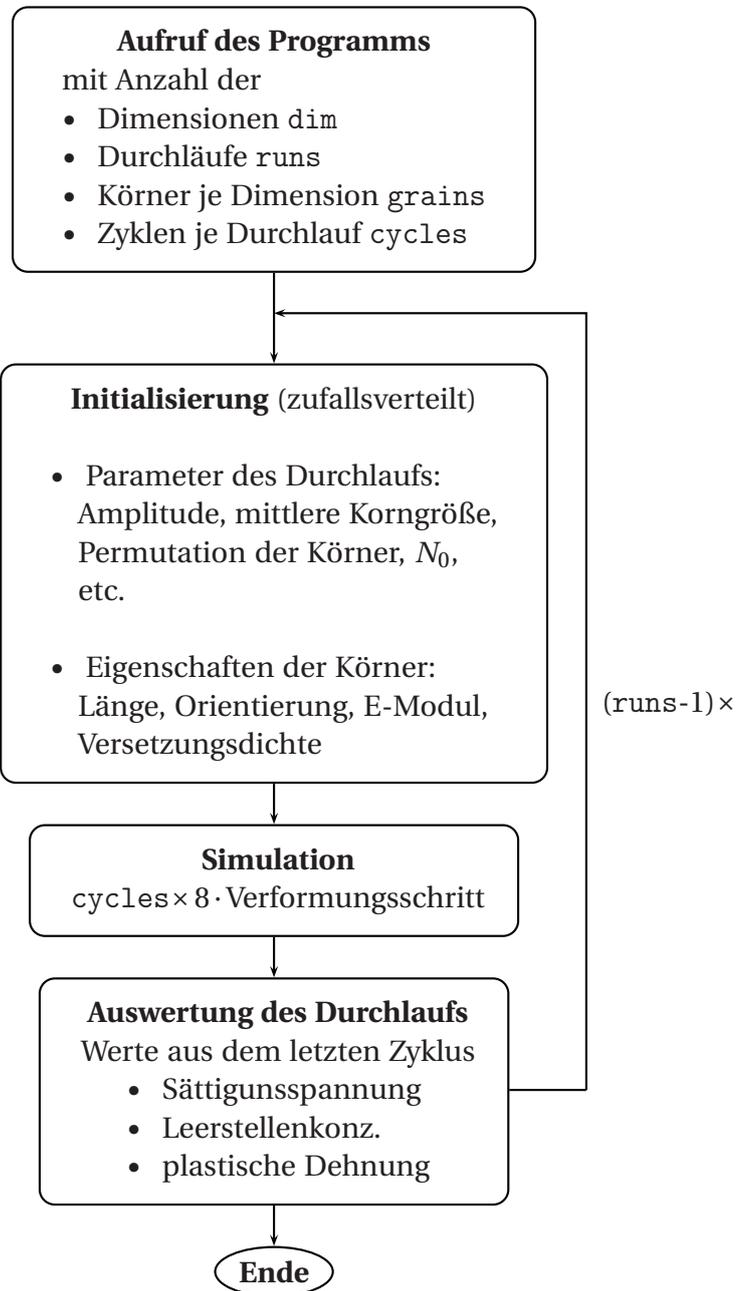
- in 1D: $(L + 2) \times 1 \times 1$
- in 2D: $(L + 2) \times (L + 2) \times 1$
- in 3D: $(L + 2) \times (L + 2) \times (L + 2)$

d.h. die eigentlich simulierten Körner sind an jedem Rand von einer Schicht zusätzlicher Körner umgeben. Dies erleichtert die Programmierung, da die eigentlichen Randkörner dann nicht gesondert betrachtet werden müssen.

Die zwei folgenden Diagramme geben eine Übersicht über den Ablauf des Programms und den Ablauf eines Verformungsschritts. Dabei ist zu beachten:

- Die Eigenschaften der Körner werden durch einen Zufallszahlengenerator gemäß vorgegebener Verteilungen initialisiert. Die eigentliche Simulation ist deterministisch.
- Wird mehr als ein Durchlauf berechnet, so wird ein zweiter Zufallszahlengenerator verwendet, um die Parameter des Durchlaufs zufällig festzulegen. So ist es möglich, die exakt gleiche „Probe“ unterschiedlich zu verformen und den Einfluss der Parameter zu testen. Parameter des Durchlaufs sind Dehnungsamplitude, mittlere Korngröße, mittlerer E-Modul und andere Materialeigenschaften, anfängliche Anzahl N_0 von Versetzungen pro Korn und eventuelle Permutation der Kornpositionen. Am Ende jedes Durchlaufs wird dieser ausgewertet und Maximalspannung, Leerstellenkonzentration und plastische Dehnung im letzten Zyklus in eine Datei geschrieben.
- Ein Verformungszyklus wird in typischerweise 8 Verformungsschritte aufgeteilt. Daher ist die Gesamtzahl der Verformungsschritte in einer Simulation $8 \cdot$ (Anzahl der Verformungsschritte).

Ablauf des Programms



Verformungsschritt

Vorgabe der Verformung (reihenweise)

$$\begin{aligned} x'(L_x, j) &= x_{\text{ref}}(L_x) (1 + \hat{\varepsilon} \cdot \sin(2\pi/8 \cdot t)) \\ \Delta L_x &= x'(L_x) - x(L_x) \end{aligned}$$

Berechnung der Kornlängen (reihenweise)

$$\begin{aligned} l'_x(i) &= l_x(i) \cdot \left(1 + \frac{\Delta L_x}{E(i) \cdot \sum_j \frac{l_x(j) l'_x(j)}{E(j)}} l'_x(i) \right) \\ l'_y(i) &= l_y(i) \cdot \sqrt{l_x(i) / l'_x(i)} \\ l'_z(i) &= l_z(i) \cdot \sqrt{l_x(i) / l'_x(i)} \end{aligned}$$

Berechnung der Spannungen

$$\sigma = \sigma_{\text{Verformung}} + \sigma_{\text{quer}} + \sigma_{\text{pileup}}$$

- Spannung durch die äußere Verformung & plastische Korrektur

$$\sigma_{xx, \text{Verformung}}(i) = \begin{cases} \varepsilon(i) \cdot E(i) & \text{falls } |\varepsilon(i) \cdot E(i)| < \sigma_{\text{Fließ}} \\ \sigma_{\text{Fließ}} & \text{falls } \varepsilon(i) \cdot E(i) \geq \sigma_{\text{Fließ}} \\ -\sigma_{\text{Fließ}} & \text{falls } \varepsilon(i) \cdot E(i) \leq -\sigma_{\text{Fließ}} \end{cases}$$

- Spannung durch Querkontraktion

$$\begin{aligned} \sigma_{yy, \text{quer}}(i, j, k) &= \varepsilon_y(i, j-1, k) \cdot E(i, j-1, k) + \varepsilon_y(i, j+1, k) \cdot E(i, j+1, k) \\ \sigma_{zz, \text{quer}}(i, j, k) &= \varepsilon_z(i, j, k-1) \cdot E(i, j, k-1) + \varepsilon_z(i, j, k+1) \cdot E(i, j, k+1) \end{aligned}$$

- Spannung durch Pileups in den Nachbarn

$$\sigma_{\text{pileup}}(i) = \sum_{\text{Nachbar}} \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{pmatrix}_{\text{pileup}}$$

Berechnung der Schubspannung

$$\tau_{\text{eff}} = (\sigma \cdot \vec{n}) \cdot \vec{r}$$

Erhöhung der Versetzungsdichte

$$\Delta \rho / \rho_0 = \frac{2l(1-\nu)}{Gb} \frac{1}{N_0} (\tau_{\text{eff}} - \tau_{\text{quell}})$$

Erhöhung der Leerstellenkonzentration

$$\begin{aligned} dc_V &= dc_{V, \text{veins}} + dc_{V, \text{chan}} \\ &= \left(\left(\frac{y_e^2 c_e}{2} \rho_e - \frac{2y_p c_e}{b} c_{V, \text{veins}} \right) + m \frac{b^2 \rho_0}{8\sqrt{2}} \right) dy \end{aligned}$$

Literatur

- [Ben02] K. Bennewitz. „Positronenspektroskopie an zyklisch verformten Titan und Eisenwerkstoffen“. Diss. Universität Bonn, 2002.
- [BH54] M. Born und K. Huang. *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Oxford University Press, New York, 1954.
- [BS04] H.-J. Bargel und G. Schulze, Hrsg. *Werkstoffkunde*. 8. Aufl. Springer, 2004, 134f.
- [BS64] Kap. Nickel, S. 311 –319. In: „Landolt-Börnstein, Band IV/2b“. Hrsg. von H. Borchers und E. Schmidt. 1964.
- [Buq+01] C. Buque u. a. „Dislocation structures in cyclically deformed nickel polycrystals“. *Materials Science and Engineering A* 300.1-2 (2001), S. 254 –262. DOI: 10.1016/S0921-5093(00)01784-6.
- [Bur39] J.M. Burgers. *Proc. Kon. Ned. Akad. Wetenschap.* 42 (1939), S. 293, 378.
- [Chr97] H.-J. Christ. Kap. Cyclic Stress-Strain Response and Microstructure, S. 73 –95. In: „Fatigue and fracture“. Hrsg. von S.R. Lampman. [10. ed.], 2. print. Bd. 19. ASM handbook. Materials Park, Ohio: ASM International, 1997. ISBN: 0871703858.
- [Cot77] R.M.J. Cotterill. „Does dislocation density have a natural limit?“ *Physics Letters A* 60.1 (1977), S. 61 –62. DOI: 10.1016/0375-9601(77)90321-8.
- [Dub97] Dubbel. *Taschenbuch für den Maschinenbau*. Hrsg. von W. Beitz und K.-H. Grote. Springer, 1997.
- [EFN51] J.D. Eshelby, F.C. Frank und F.R.N. Nabarro. „The equilibrium of linear arrays of dislocations“. *Philosophical Magazine* 42.327 (1951), S. 351 –364.
- [EGM81] U. Essmann, U. Gösele und H. Mughrabi. „A model of extrusions and intrusions in fatigued metals I. Point-defect production and the growth of extrusions“. *Philosophical Magazine A* 44.2 (1981), S. 405 –426. DOI: 10.1080/01418618108239541.
- [Eic06] P. Eich. „Ortsaufgelöste Bestimmung der Schädigung an ermüdetem Karbonstahl“. Diplomarbeit. Universität Bonn, 2006.
- [Eic09] P. Eich. „Zerstörungsfreie Abschätzung der Restlebensdauer metallischer Werkstoffe“. Diss. Universität Bonn, 2009.
- [EM79] U. Essmann und H. Mughrabi. „Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities“. *Philosophical Magazine A* 40.6 (1979), S. 731 –756. DOI: 10.1080/01418617908234871.

- [ER73] U. Essmann und M. Rapp. „Slip in copper crystals following weak neutron bombardment“. *Acta Metallurgica* 21.9 (1973), S. 1305 –1317. DOI: 10.1016/0001-6160(73)90172-7.
- [Esh49] J.D. Eshelby. *Philosophical Magazine* 40 (1949), S. 903.
- [FC98] L.H. Friedman und D.C. Chrzan. „Continuum analysis of dislocation pile-ups: influence of sources.“ *Philosophical Magazine A* 77.5 (1998), S. 1185 –1204.
- [Fin06] J. Fingerhuth. „Entwicklung eines Modells zur Schadensvorhersage in zyklisch belasteten Werkstoffen“. Diplomarbeit. Universität Bonn, 2006.
- [Fra49] F.C. Frank. *Physica* 15 (1949), S. 131.
- [Fri64] J. Friedel. *Dislocations*. Pergamon Press, 1964.
- [GM75] J.C. Grosskreutz und H. Mughrabi, S. 251 –326. In: „Constitutive Equations in Plasticity“. Hrsg. von A.S. Argon. MIT Press, 1975.
- [HL82] J.P. Hirth und J. Lothe. *Theory of Dislocations*. John Wiley & Sons, Inc., 1982.
- [HM06] M. Haaks und K. Maier. Kap. Predicting the Lifetime of Steel, S. 211 –232. In: „Extreme Events in Nature and Society“. Hrsg. von S. Albeverio, V. Jentsch und H. Kantz. Springer, 2006.
- [HS48] H.D. Heidenreich und W. Shockley. *Strength in Solids* (1948), S. 57.
- [JS93] A. Jagota und G.W. Scherer. „Viscosities and Sintering Rates of a Two-Dimensional Granular Composite“. *Journal of the American Ceramic Society* 76.12 (1993), S. 3123 –3135. DOI: 10.1111/j.1151-2916.1993.tb06617.x.
- [KH04] K. Kopitzki und P. Herzog. *Einführung in die Festkörperphysik*. 5. Auflage. Teubner, 2004.
- [KRL99] R. Krause-Rehberg und H. Leipner. *Positron Annihilation in Semiconductors - Defect Studies*. 1999.
- [KW79] D. Kuhlmann-Wilsdorf. „Dislocation behavior in fatigue III. Properties of loop patches – Do they participate in fatigue cycling?“ *Materials Science and Engineering* 39.1 (1979), S. 127 –139. DOI: 10.1016/0025-5416(79)90178-2.
- [LCM86] C. Laird, P. Charsley und H. Mughrabi. „Low-energy dislocation-structures produced by cyclic deformation“. *Materials Science and Engineering* 81 (1986), S. 433 –450.
- [Lei51] G. Leibfried. „Verteilung von Versetzungen im statischen Gleichgewicht“. *Zeitschrift für Physik* 130.2 (1951), S. 214 –226. DOI: 10.1007/BF01337695.
- [LK85] J. Lepinoux und L.P. Kubin. „In situ TEM observations of the cyclic dislocation behaviour in persistent slip bands of copper single crystals“. *Philosophical Magazine A* 51.5 (1985), S. 675 –696. DOI: 10.1080/01418618508245281.
- [Lom59] W.M. Lomer. „Defects in pure metals“. *Progress in Metal Physics* 8 (1959), S. 255 –320. DOI: 10.1016/0502-8205(59)90017-6.

- [MAH79] H. Mughrabi, F. Ackermann und K. Herz. In: *Proceedings of Symposium on Fatigue Mechanisms*. Hrsg. von J.T. Fong. Bd. ASTM-STP 675. American Society for Testing und Materials. 1979, S. 69–105.
- [MOP09] J. Man, K. Obrtlík und J. Polák. „Extrusions and intrusions in fatigued metals. Part 1. State of the art and history“. *Philosophical Magazine* 89.16 (2009), S. 1295–1336. DOI: 10.1080/14786430902917616.
- [Mor94] D.J. Morrison. „Influence of grain size and texture on the cyclic stress-strain response of nickel“. *Materials Science and Engineering: A* 187.1 (1994), S. 11–21. DOI: 10.1016/0921-5093(94)90326-3.
- [Mug09] H. Mughrabi. „Cyclic Slip Irreversibilities and the Evolution of Fatigue Damage“. *Metallurgical and Materials Transactions B* 40.4 (2009), S. 431–453. DOI: 10.1007/s11663-009-9240-4.
- [Mug78] H. Mughrabi. „The cyclic hardening and saturation behaviour of copper single crystals“. *Materials Science and Engineering* 33.2 (1978), S. 207–223. DOI: 10.1016/0025-5416(78)90174-X.
- [Mug80] H. Mughrabi. In: *Proc. fifth International Conference Strength of Metals and Alloys*. Hrsg. von G. Kostorz P. Haasen V. Gerold. Pergamon Press, 1980.
- [Mug81] H. Mughrabi, S. 241–257. In: „Continuum Models of Discrete Dystems 4“. Hrsg. von O. Brulin und R.K.T. Hsieh. North-Holland Publishing Company, 1981.
- [Nab47] F.R.N. Nabarro. „Dislocations in a simple cubic lattice“. *Proceedings of the Physical Society* 59.2 (1947), S. 256–272. DOI: 10.1088/0959-5309/59/2/309.
- [Nab48] F.R.N. Nabarro. *Report of a Conference of the Strength of Solids, Physical Society, London* (1948), S. 75.
- [Nab52] F.R.N. Nabarro. „Mathematical theory of stationary dislocations“. *Advances in Physics* 1.3 (1952), S. 269–394. DOI: 10.1080/00018735200101211.
- [NBH64] F.R.N. Nabarro, Z.S. Basinski und D.B. Holt. „The plasticity of pure single crystals“. *Advances in Physics* 13.50 (1964), S. 193–323. DOI: 10.1080/00018736400101031.
- [Oro34] E. Orowan. „Zur Kristallplastizität. III“. *Zeitschrift für Physik* 89.9 (1934), S. 634–659. DOI: 10.1007/BF01341480.
- [Pei40] R.E. Peierls. *Proc. Phys. Soc.* 52 (1940), S. 23.
- [PMO03] J. Polák, J. Man und K. Obrtlík. „AFM evidence of surface relief formation and models of fatigue crack nucleation“. *International Journal of Fatigue* 25.9-11 (2003). International Conference on Fatigue Damage of Structural Materials IV, S. 1027–1036. DOI: 10.1016/S0142-1123(03)00114-2.
- [PN94] M.J. Puska und R.M. Nieminen. „Theory of positrons in solids and on solid surfaces“. *Rev. Mod. Phys.* 66.3 (1994), S. 841–897. DOI: 10.1103/RevModPhys.66.841.
- [Pol34] M. Polanyi. „Über eine Art Gitterstörung, die einen Kristall plastisch machen könnte“. *Zeitschrift für Physik* 89.9 (1934), S. 660–664. DOI: 10.1007/BF01341481.
- [Pol87] J. Polák. „On the role of point defects in fatigue crack initiation“. *Materials Science and Engineering* 92 (1987), S. 71–80. DOI: 10.1016/0025-5416(87)90157-1.

- [Pol93] J. Polák. „Lattice defects in the process of fatigue in crystalline materials“. *Solid State Phenomena* 35-36 (Dislocations 93) (1993), S. 405 –410. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.35-36.405.
- [See+57] A. Seeger u. a. „Work-hardening and work-softening of face-centred cubic metal crystals“. *Philosophical Magazine* 2.15 (1957), S. 323 –350. DOI: 10.1080/14786435708243823.
- [SH02] A. Schwab und C. Holste. „Prediction of the cyclic stress-strain curve of polycrystalline nickel“. *Acta Materialia* 50.2 (2002), S. 289 –303. DOI: 10.1016/S1359-6454(01)00355-X.
- [Sho48] W. Shockley. „Half-Dislocations“. In: *Minutes of the Meeting at Chicago, Illinois December 29-31, 1947*. Bd. 73. 10. American Physical Society, 1948, S. 1217–1236. DOI: 10.1103/PhysRev.73.1217.
- [Tab+83] Teizo Tabata u. a. „Dislocation behaviour and the formation of persistent slip bands in fatigued copper single crystals observed by high-voltage electron microscopy“. *Philosophical Magazine A* 47.6 (1983), S. 841 –857. DOI: 10.1080/01418618308243124.
- [Tay34] G.I. Taylor. „The Mechanism of Plastic Deformation of Crystals. Part I. Theoretical“. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 145.855 (1934), S. 362 –387.
- [TD57] W.W. Tyler und W.C. Dash. „Dislocation Arrays in Germanium“. *Journal of Applied Physics* 28.11 (1957), S. 1221 –1224. DOI: 10.1063/1.1722622.
- [VV89] F. Vollertsen und S. Vogler. *Werkstoffeigenschaften und Mikrostruktur*. Carl Hanser Verlag, 1989.
- [Win74] A.T. Winter. „A model for the fatigue of copper at low plastic strain amplitudes“. *Philosophical Magazine* 30.4 (1974), S. 719 –738. DOI: 10.1080/14786437408207230.
- [Wir08] M. Wirtz. „Untersuchung von Plastizität und Ermüdung technischer Aluminiumlegierungen mit Positronen“. Diplomarbeit. Universität Bonn, 2008.