

**Entwicklung eines Modells  
zur Schadensvorhersage  
in zyklisch belasteten Werkstoffen**

**von  
Judith Fingerhuth**

Diplomarbeit in Physik  
angefertigt am  
Helmholtz–Institut für Strahlen– und Kernphysik

vorgelegt der  
Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der  
Rheinischen Friedrich–Wilhelms–Universität Bonn

im November 2006



Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die Zitate als solche kenntlich gemacht habe.

Referent: Prof. Dr. K. Maier  
Korreferent: Prof. Dr. G. M. Schütz



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen des Modells</b>	<b>5</b>
2.1	Einachsiger Zugversuch . . . . .	5
2.2	Zyklische Verformung . . . . .	7
2.3	Versetzungen . . . . .	10
2.3.1	Der Schmidfaktor . . . . .	12
2.3.2	Versetzungsbewegung . . . . .	13
2.4	Nickel . . . . .	15
2.5	Die Bonner Positronen-Mikrosonde . . . . .	16
2.6	Zellulärer Automat . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Modell</b>	<b>23</b>
3.1	Geometrie . . . . .	23
3.2	Zellulärer Automat . . . . .	24
3.3	Elastische Verformung . . . . .	25
3.3.1	Simulation durch einen zellulären Automaten . . . . .	25
3.3.2	Simulation durch eine nicht-lokale Funktion . . . . .	27
3.4	Orientierungsabhängigkeit . . . . .	28
3.5	Plastische Verformung . . . . .	32
3.6	Schädigung . . . . .	35
3.7	Ergebnisse . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Ausblick</b>	<b>45</b>
4.1	Erweiterung der Simulation . . . . .	45
4.1.1	Mehrere Dimensionen . . . . .	45
4.1.2	Zwei Orientierungswinkel . . . . .	46
4.1.3	Substruktur der Körner: Persistente Gleitbänder . . . . .	46
4.1.4	Definition von Abbruchbedingungen . . . . .	46
4.1.5	Andere Materialien . . . . .	47
4.2	Experimentelle Bestätigung . . . . .	47
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>49</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

Die Ermüdung von Werkstoffen unter zyklischer Belastung stellt für die Wirtschaft ein Problem dar. Die Lebensdauer eines Bauteils unter zyklischer Belastung ist nicht berechenbar, sondern es lässt sich lediglich mit der fast 150 Jahre alten Methode der Wöhler-Diagramme [Wöh58] und daraus abgeleiteten statistischen Methoden [Gas39][Son97] die Wahrscheinlichkeit abschätzen, dass ein Bauteil die geforderte Anzahl von Belastungszyklen überlebt. Ist das Bauteil wichtig für Stabilität und Sicherheit, so wird es zum einen häufig größer dimensioniert, da es so im Mittel höhere Belastungen ertragen kann, und zum anderen weit vor Erreichen seiner wirklichen Lebensdauer ausgetauscht, um einen Bruch des Bauteils im laufenden Betrieb zu verhindern. Dieses Verfahren ist teuer, momentan aber zur Gewährleistung der Sicherheit notwendig. Für die Wirtschaft wäre es also interessant, aus wenigen Zyklen der Belastung die restliche Lebensdauer des Werkstücks abzuschätzen.

Eine experimentelle Methode zur Schadensvorhersage ist die Untersuchung eines Werkstücks mit Positronen. Dabei werden Positronen als Sonde für Fehlstellen genutzt. Eine Schadensvorhersage ist für viele Metalle möglich, da sie beim Bruch eine materialtypische Fehlstellendichte aufweisen. Mit der Bonner Positronen-Mikrosonde ist es möglich, ortsaufgelöst die Fehlstellendichte in einem belasteten Werkstück zu bestimmen. Im Frühjahr diesen Jahres wurde in einem Blindtest unterschiedlich lange belasteten, gleichartigen Proben so die Zyklenzahl zugeordnet und die Zyklenzahl beim Bruch extrapoliert. Die Ergebnisse aus der Mikrosondenmessung stimmen gut mit den tatsächlichen Zyklenzahlen, auch der Zyklenzahl beim Bruch, überein [Eic06]. Die Positronen-Mikrosonde kann also zur Schadensvorhersage verwendet werden.

In dieser Diplomarbeit wird eine andere Methode zur Schadensvorhersage gewählt. Es wird ein neues Modell der Schädigung entwickelt und am Computer simuliert. Bisherige Ansätze, Computersimulationen in der Schadensvorhersage einzusetzen, beschränken sich auf statische Finite-Elemente-Methoden (FEM) [Zie67] oder Simulationen weniger Atome direkt vor der Risspitze [Abr03]. In FEM-Rechnungen wird das Werkstück in diskrete Stücke aufgeteilt und in diesen durch numerisches Lösen von Differentialgleichungssystemen die aus der äußeren Spannung resultierenden lokalen Spannungen berechnet. Bei Entlastung bleibt das Werkstück ohne Spuren der

Belastung ungeschädigt zurück. Eine FEM-Simulation mit Gedächtnis wird an Metallen noch nicht eingesetzt. FEM-Simulationen betrachten das Werkstück mit den Mitteln der Kontinuumsmechanik. Simulationen auf atomarer Ebene (Molekulardynamik) müssen sich aus Rechenzeitgründen auf zu wenige Atome (maximal  $10^6$ ) in der interessanten Zone, also etwa vor der Rissspitze beschränken. Mit diesem Ansatz lassen sich Versetzungen und ihre Wechselwirkungen, die für das zyklische Verhalten eines Werkstücks im Wesentlichen verantwortlich sind, nur schwer beschreiben. Diese beiden Ansätze sind also zur Schadensvorhersage noch nicht geeignet. Eine Beschreibung der Versetzungsdynamik erscheint wegen der großen Anzahl von Versetzungen ( $10^6 \text{cm}^{-2}$  bis  $10^{12} \text{cm}^{-2}$ ) in einem Werkstück auch nicht sinnvoll.

Das in dieser Diplomarbeit entwickelte Modell beschreibt ein Werkstück auf der Ebene der Kristallkörner. Es soll einfach genug sein, um in vernünftiger Rechenzeit auf einem guten Arbeitsplatzrechner simulierbar zu sein, aber noch ausreichend detailliert, um die Entwicklung der Schädigung richtig wiederzugeben. Vereinfachungen sind also gewollt. Die Betrachtung der Kristallkörner und die Beobachtung von sich langsam von einem Korn auf die direkte Umgebung ausdehnenden Schwachstellen legt ein granulares Modell mit einer Wechselwirkung zwischen den Nachbarkörnern nahe. Ein solches granulares und lokales Simulationskonzept kann durch einen zellulären Automaten realisiert werden. Es wurde also ein Modell der Schädigung auf Basis eines zellulären Automaten entwickelt, das als Grundeinheit die Kristallkörner hat. Die Eigenschaften der Körner sind auf möglichst wenige skalare Parameter reduziert, die Körner haben keine Substruktur. Das Modell ist eindimensional und hat die einfachste geometrische Form, nämlich eine Kette von Quadern. Elastizitätsmodul, kritische Schubspannung und Kristallstruktur entsprechen den Werten von reinem Nickel. Die Simulationsergebnisse müssen daher mit dem Verhalten von reinem Nickel unter zyklischer Belastung verglichen werden.

Mit diesem Modell kann die Schädigung einer Probe mit einer Länge im mm- bis cm-Bereich durch 100 bis 1000 Körner simuliert werden. Sie zeigt zyklische Verfestigung in den ersten  $10^5$  Zyklen. Bis zur Schadensvorhersage an einem Werkstück mit realistischer Geometrie und aus einem technisch interessanten Material ist es ein weiter Weg, aber die ersten Ergebnisse machen Hoffnung, dass die Idee eines granularen Modells auf der Ebene der Kristallkörner ein guter Ansatz zur Schadensvorhersage ist.



# Kapitel 2

## Grundlagen des Modells

Grundlagen des Modells sind das Verhalten von Werkstoffen unter Belastung und das Konzept des zellulären Automaten aus der Automatentheorie. Werkstoffe unter Zugbelastung verhalten sich zunächst elastisch und jenseits der Fließspannung plastisch. Bei Spannungen oberhalb der Zugfestigkeit reißen sie. Ist die Belastung zyklisch, so reichen je nach Zyklenzahl schon Spannungen unterhalb der Fließspannung zum Bruch des Werkstücks; dieses Verhalten heißt Ermüdung. Der Grund für die Ermüdung von Werkstoffen sind die aus der Versetzungsbewegung resultierenden irreversiblen Schäden im Gefüge (Abschnitt 2.3).

Das Modell ist für reines Nickel entwickelt worden. Daher werden in Abschnitt 2.4 kurz die relevanten Eigenschaften von reinem Nickel beschrieben.

Zur experimentellen Überprüfung der Simulationsergebnisse kann die Bonner Positronen-Mikrosonde verwendet werden (Abschnitt 2.5).

Schließlich wird das Konzept des zellulären Automaten, das für das Modell als Grundlage diente, vorgestellt (Abschnitt 2.6).

### 2.1 Einachsiger Zugversuch

Zur Beschreibung eines einachsigen Zugversuchs, also eines Versuchs, bei dem ein Werkstück entlang einer Achse bis zum Bruch in die Länge gezogen wird, verwendet man die Größen Spannung und Dehnung, die aus den direkt messbaren Größen Kraft und Längenänderung folgendermaßen hervorgehen:

Verlängert man ein Werkstück der Länge  $L$  um ein Stück  $\Delta L$ , so braucht man, um diese Verlängerung zu erhalten, eine Kraft  $F$ . Die Spannung ist die Kraft normiert auf die momentane Querschnittsfläche  $A$  des Werkstücks:

$$\sigma_{wahr} = \frac{F}{A} \quad (2.1)$$

Die Dehnung ist definiert als

$$\varepsilon_{wahr} = \ln \frac{L + \Delta L}{L} \quad (2.2)$$

Oft verwendet man statt der wahren Dehnung die Näherung erster Ordnung, die anschaulich die relative Längenänderung ist

$$\varepsilon_{tech} = \frac{\Delta L}{L} \quad (2.3)$$

Sie heißt technische Dehnung. Statt der wahren Spannung wird häufig die technische Spannung verwendet, bei der die Kraft auf die ursprüngliche Querschnittsfläche normiert wird:

$$\sigma_{techn} = \frac{F}{A_0} \quad (2.4)$$

Da in einem sehr großen Bereich der Verformung Volumenerhaltung gilt, kann man aus den gemessenen technischen Größen die wahren Größen berechnen:

$$\begin{aligned} \sigma_{wahr} &= \sigma_{tech} (1 + \varepsilon_{tech}) \\ \varepsilon_{wahr} &= \ln(1 + \varepsilon_{tech}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Erhöht man die Dehnung, so beobachtet man verschiedene Stadien der Verformung. Zunächst ist das Verhalten elastisch, d.h. nach der Entlastung nimmt der Körper

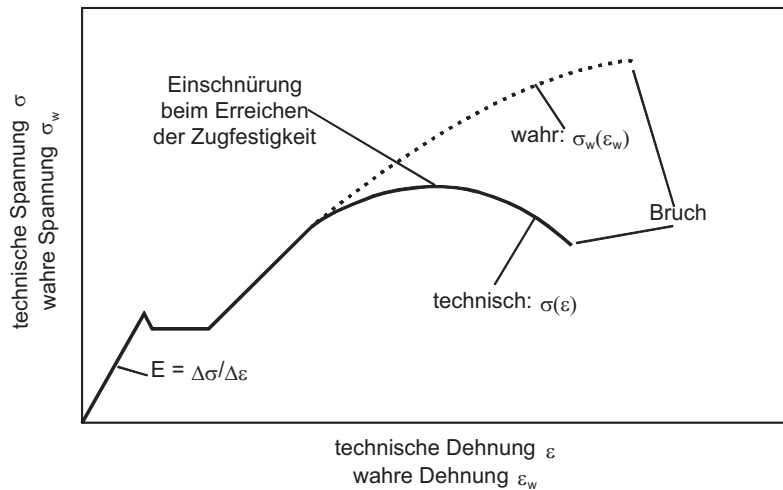


Abbildung 2.1: Spannungs-Dehnungs-Diagramm. Nach dem elastischen Bereich folgt der plastische Bereich. Hier ist ein Teil der Verformung irreversibel. Beim Erreichen der Zugfestigkeit beginnt die Einschnürung, schließlich bricht das Werkstück. [Mit79]

äußerlich unverändert seine ursprüngliche Form an. Fast im gesamten elastischen Bereich ist die Spannung proportional zur Dehnung. Es gilt das Hooksche Gesetz

$$\sigma = E \cdot \varepsilon \quad (2.6)$$

Der Proportionalitätsfaktor ist eine materialabhängige Konstante und heißt Elastizitätsmodul oder kurz E-Modul.

Die Fließspannung ist die Grenze zwischen elastischem und plastischem Bereich. Im plastischen Bereich besteht die Gesamtdehnung aus einem plastischen und einem elastischen Anteil. Plastische Dehnung ist der Anteil an der Gesamtdehnung, der nach der Entlastung zurückbleibt; der Rest ist elastische Dehnung. Plastische Dehnung entsteht durch Abgleitung von Versetzungen und ist daher irreversibel. (Mehr zur Versetzungsbewegung in Abschnitt 2.3). Die Verformung im plastischen Bereich ist bis zur Zugfestigkeit gleichmäßig, danach schnürt sich das Werkstück an einer Stelle ein. An dieser Stelle verringert sich der Querschnitt des Werkstücks stärker als auf der übrigen Länge. Der lokal kleinere Querschnitt führt zu lokal höheren Spannungen und damit schnell zum Riss des Werkstücks. Im Spannungs-Dehnungs-Diagramm (Abb. 2.1) der technischen Größen ist die Zugfestigkeit als Maximum zu sehen.

## 2.2 Zyklische Verformung

Belastet man ein Werkstück zyklisch, so bedeutet das z. B., dass es abwechselnd zu gleichen Beträgen um eine Mittellage gestaucht und/oder gedehnt wird. Diese Mittellage kann der unbelastete oder ein belasteter Zustand des Werkstücks sein. Im ersten Fall ist die Spannungsamplitude die höchste während der Verformung vorkommende Spannung. In allen Fällen beobachtet man im Spannungs-Dehnungs-Diagramm Hysteresekurven (Abb. 2.2). Diese sind aber nicht immer geschlossen. Die meisten

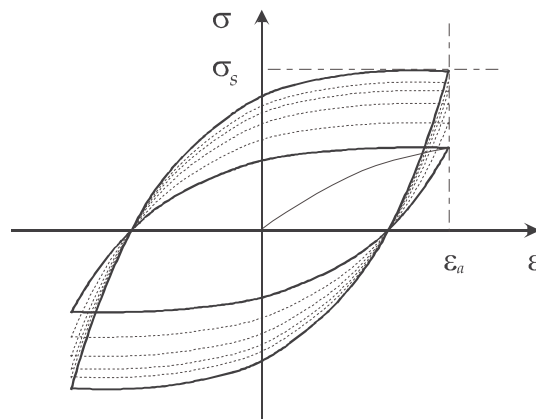


Abbildung 2.2: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für eine dehnungskontrolliert durchgeführte zyklische Belastung. Mit wachsender Zyklenzahl steigt die Spannungsamplitude (zyklische Verfestigung). [Haa03]

Materialien zeigen in den ersten Zyklen zyklische Verfestigung: Verformt man dehnungskontrolliert, d.h. mit gleichbleibender Dehnung, so benötigt man von Zyklus zu Zyklus eine größere Spannung, um eine vorgegebene Dehnung zu erreichen. Im spannungskontrollierten Versuch verringert sich die durch die vorgegebene, konstante

Spannungsamplitude erzeugte Dehnung von Zyklus zu Zyklus. Nach einigen tausend Zyklen ist ein stationärer Zustand erreicht, die Spannungsamplitude im dehnungskontrollierten Versuch steigt nicht weiter, sondern bleibt auf dem Sättigungswert [Win74]. Einige Materialien zeigen am Ende ihrer Lebensdauer eine Entfestigung, d.h. die zum Erreichen einer Dehnung nötige Spannung wird geringer, oder umgekehrt formuliert: mit der gleichen Spannungen lassen sich immer höhere Dehnungen erreichen. Die Verfestigung wird in einem Diagramm dargestellt, in dem die Sättigungsspannung gegen den Logarithmus der Zyklenzahl aufgetragen wird. Abb. 2.3 zeigt die Verfestigungskurve für Kupfer bei verschiedenen plastischen Dehnungen.

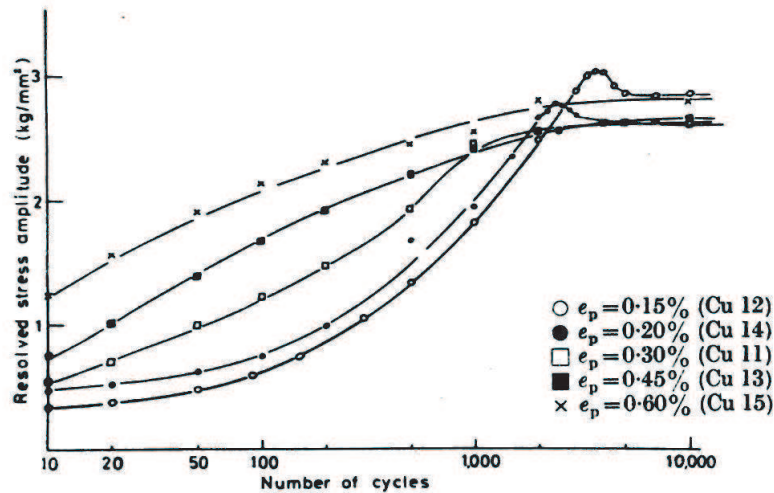


Abbildung 2.3: Beginn der Verfestigungskurve von Kupfer für plastische Dehnungen zwischen 0,15% und 0,6%. Nach etwa 5000 Zyklen ist die Sättigungsspannung erreicht. [Win74]

Ermittelt man die Sättigungsspannung für verschiedene plastische Dehnungen und trägt die Sättigungsspannung gegen die plastische Dehnung auf, so erhält man eine sogenannte zyklische Spannungs-Dehnungs-Kurve (z.B. Abb. 2.4).

Auskunft über die Haltbarkeit eines Werkstoffs unter zyklischer Belastung geben Wöhler-Diagramme (Abb. 2.5). Ihre Erstellung braucht viel Zeit und Material, da bei verschiedenen Spannungen gleichartige Werkstücke solange zyklisch belastet werden, bis sie brechen oder eine vorher festgelegte maximale Zyklenzahl erreicht ist. Der Bruch jeder Probe wird im Wöhler-Diagramm notiert. Aus der Gesamtheit der Punkte kann man nun abschätzen, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Werkstück der getesteten Art eine bestimmte Belastung eine vorgegebene Zahl von Zyklen überlebt. Da die Probengeometrien und die Ermüdungsbedingungen genormt sind, lassen sich in begrenztem Umfang die Werte für andere, nicht getestete Bauteilgeometrien berechnen. Für jedes interessante Material, für jede interessante Mittelspannung und für jede Standardgeometrie muss jedoch ein Wöhler-Diagramm erstellt werden.

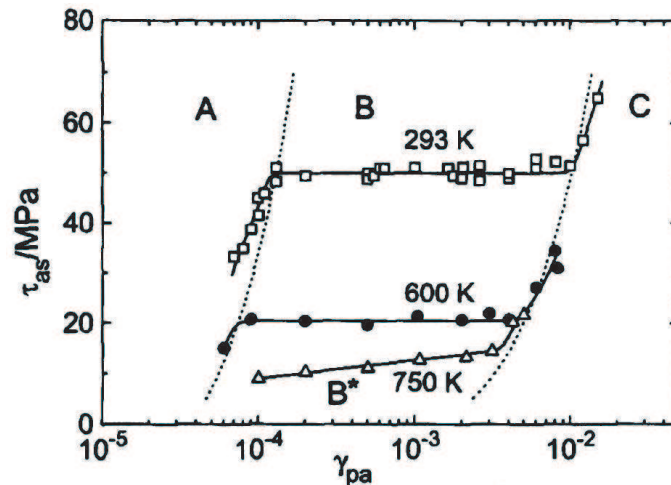


Abbildung 2.4: Zyklische Spannungs-Dehnungs-Kurve von Nickel bei verschiedenen Temperaturen [Bre97]. Sie zeigt die Sättigungsspannung in Abhängigkeit der plastischen Dehnung. Um einen Punkt im Diagramm zu erhalten, muss mit konstanter plastischer Dehnungsamplitude so lange zyklisch belastet werden, bis die Sättigungsspannung erreicht ist. Der flache Teil der Kurve (B) wird durch persistente Gleitbänder verursacht, eine Substruktur in der Versetzungsverteilung innerhalb der Körner.

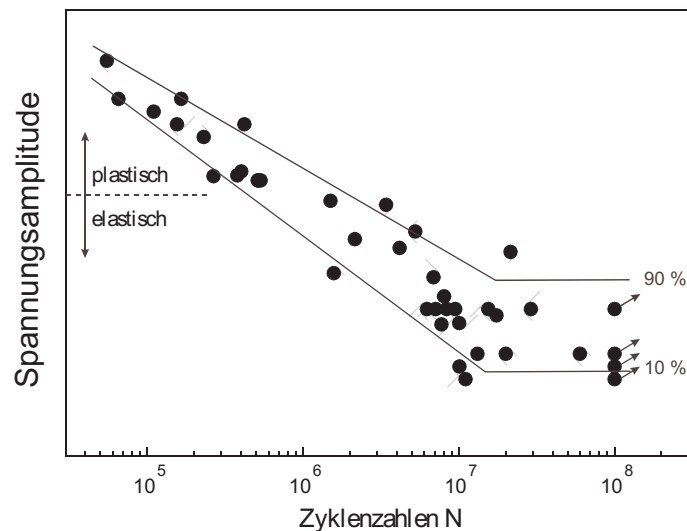


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung eines Wöhler-Diagramms. Für ein Wöhler-Diagramm werden viele gleichartige Werkstücke bei unterschiedlichen Belastungen bis zum Bruch (oder einer maximalen Zyklenzahl) zyklisch verformt. Jeder Bruch ergibt einen Eintrag im Diagramm. Grenzlinien geben die Überlebenswahrscheinlichkeit an. [Wöh58]

## 2.3 Versetzungen

Die mechanischen Eigenschaften eines realen Kristalls werden hauptsächlich durch seine Gitterfehler, also durch sein Abweichen vom idealen Kristall, bestimmt. Für das zyklische Verhalten einphasiger Werkstoffe sind hauptsächlich Versetzungen verantwortlich. Deshalb werden in dieser Diplomarbeit nur Versetzungen betrachtet.

Versetzungen wurden als theoretisches Konzept eingeführt, um die reale Schubfestigkeit von Kristallen zu erklären. Die reale Schubfestigkeit ist um mehrere Größenordnungen kleiner als die theoretisch berechnete. Bei der theoretischen Berechnung geht man davon aus, dass man gleichzeitig die Bindungen aller Atome entlang der Gleitebene lösen muss um sie in die nächste stabile Lage zu verschieben. Man erhält dabei eine Schubfestigkeit in der Größenordnung des Schubmoduls  $G$  (bei Metall-Einkristallen 10GPa bis 100GPa), die um den Faktor  $10^3$  bis  $10^4$  größer ist als die beobachteten Werte.

Löst man nur die Verbindung zweier Atome gleichzeitig, so reduziert sich die zur

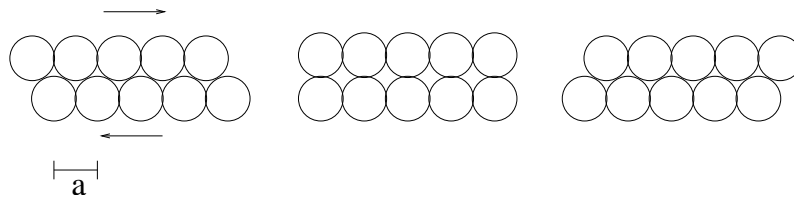


Abbildung 2.6: Will man alle Atome einer Kristallebene gleichzeitig in die nächste stabile Lage bringen, so braucht man dafür Spannungen in der Größenordnung des Schubmoduls.

Ableitung benötigte Schubspannung. Eine Konfiguration, die gewährleistet, dass immer nur wenige Atome gleichzeitig ihre Position um eine kleine Strecke ändern müssen, ist die Versetzung. Sie ist ein linienartiger Gitterfehler, der die bereits abgeglittenen Bereiche des Kristalls von den nicht abgeglittenen trennt. Für eine gerade Versetzungslinie lassen sich zwei Grenzfälle der Geometrie konstruieren: Stufenversetzung und Schraubenversetzung. Eine reale Versetzung ist jedoch fast immer gekrümmt, sie hat stufenartige und schraubenartige Abschnitte. Eine Versetzung ist charakterisiert durch Burgersvektor und Versetzungslinie. Der Burgersvektor schließt einen gleichschrittigen Umlauf um die Versetzung im gestörten Gitter. Bei einer Stufenversetzung steht der Burgersvektor senkrecht zur Versetzungslinie. Man kann sich eine Stufenversetzung als eingeschobene Halbebene vorstellen, die Versetzungslinie ist die Begrenzung der Halbebene im Kristall. Bei einer Schraubenversetzung steht der Burgersvektor parallel zur Versetzungslinie.

Bewegt sich eine Versetzung ohne Materietransport, so spricht man von Gleiten. Dazu sind relativ kleine Schubspannungen vonnöten, eben die gemessenen realen Schubfestigkeiten (1MPa bis 50MPa). Bei Stufenversetzungen findet das Gleiten in einer Gleitebene statt, die durch Versetzungslinie und Burgersvektor aufgespannt

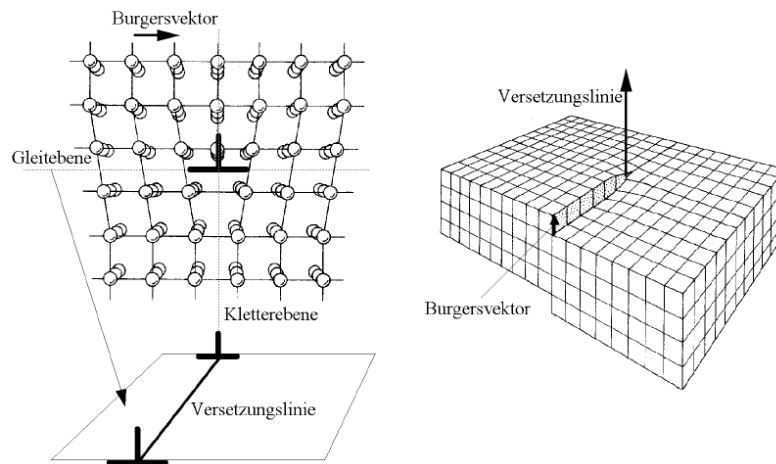


Abbildung 2.7: Links: Eine Stufenversetzung sieht aus wie eine eingeschobene Halbebene. Der Burgersvektor steht senkrecht auf der Versetzungslinie. Rechts: Bei einer Schraubenversetzung ist ein Teil des Kristalls gegenüber dem anderen in Richtung der Versetzungslinie abgeglitten. Hier ist der Burgersvektor parallel zur Versetzungslinie. [Wid97]

wird. Die Versetzung gleitet in Richtung des Burgersvektors. Bei Schraubenversetzungen ist die Gleitebene nicht wohldefiniert, jede dichtestgepackte Ebene kann Gleitebene sein. Die Ebene, in der Gleiten tatsächlich stattfindet, ist die aktive Gleitebene einer Schraubenversetzung. Da es für eine Schraubenversetzung mehrere mögliche Gleitebenen gibt, für eine Stufenversetzung jedoch nur eine, ist eine reine Schraubenversetzung beweglicher als eine Stufenversetzung. Eine Versetzung gleitet immer in die Richtung innerhalb der Gleitebene, die senkrecht zur Versetzungslinie ist.

Hat eine Stufenversetzung den ganzen Kristall durchquert, so zeigt sich an der Oberfläche eine Stufe mit der Länge des Burgersvektors. Die Summe dieser kleinen Abscherungen durch viele Versetzungen heißt Abgleitung  $a$  und ist mit der makroskopischen Dehnung  $\varepsilon$  über den Schmidfaktor oder Orientierungsfaktor  $\mu$  verknüpft [Vol89].

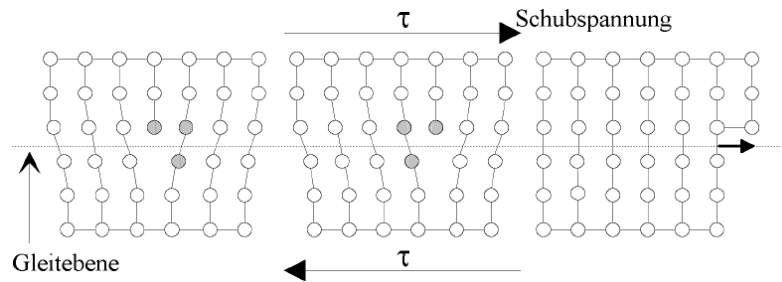


Abbildung 2.8: Wirkt in der Gleitebene in Gleitrichtung eine Schubspannung  $\tau$ , so wird eine Stufenversetzung zum Gleiten gebracht. Dabei werden nur jeweils wenige Atome ein kleines Stück verschoben.

### 2.3.1 Der Schmidfaktor

Eine Gleitebene ist immer eine dichtestgepackte Ebene, eine Gleitrichtung eine dichtestgepackte Richtung. Die Kombination aus Gleitebene und Gleitrichtung nennt man Gleitsystem. Jedem Gleitsystem wird ein Schmidfaktor  $\mu$  zugeordnet, der die Umrechnung zwischen den äußeren Größen Spannung  $\sigma$  und Dehnung  $\varepsilon$  und den für das Gleitsystem relevanten Größen Schubspannung  $\tau$  und Abgleitung  $a$  vermittelt:

$$\tau = \mu \cdot \sigma \quad a = \frac{\varepsilon}{\mu}. \quad (2.7)$$

Diese Beziehungen gelten nur für einzelne Kristallkörner oder Einkristalle. Für Polykristalle wird unter der Annahme, dass in allen Kristallkörnern Einfachgleitung stattfindet, statt dessen der Sachs-Faktor  $M = 2.24$  verwendet [Mug81]

$$\tau = \frac{\sigma}{M} \quad a = M \cdot \varepsilon. \quad (2.8)$$

Der Schmidfaktor ist definiert als

$$\mu = \cos \chi \cos \lambda, \quad (2.9)$$

dabei ist  $\chi$  der Winkel zwischen Zugrichtung und Flächennormalen der Gleitebene und  $\lambda$  der Winkel zwischen Zugrichtung und Gleitrichtung (Abb. 2.9). Der Schmidfaktor verschwindet, wenn die Gleitebene parallel oder senkrecht zur Zugrichtung ist. Dann kann auf diesem Gleitsystem kein Gleiten stattfinden. Das ist auch anschaulich klar (Abb. 2.10): Im ersten Fall zieht man an beiden Kristallhälften mit gleicher Kraft in die gleiche Richtung, die beiden Hälften können sich also nicht gegeneinander verschieben; im zweiten Fall zieht man obere und untere Kristallhälfte auseinander, die beiden Hälften können sich auch hier nicht gegeneinander verschieben. Der Schmidfaktor ist maximal, wenn Gleitebene und Gleitrichtung einen Winkel von  $45^\circ$  zur Zugrichtung haben. Dann ist der Schmidfaktor 0,5.



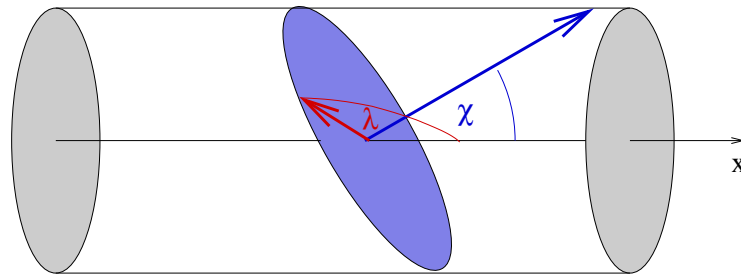


Abbildung 2.9: Mit Hilfe des Schmidfaktors  $\mu = \cos \chi \cos \lambda$  wird die auf ein Gleitsystem wirkende Schubspannung und die daraus resultierende Abgleitung berechnet.

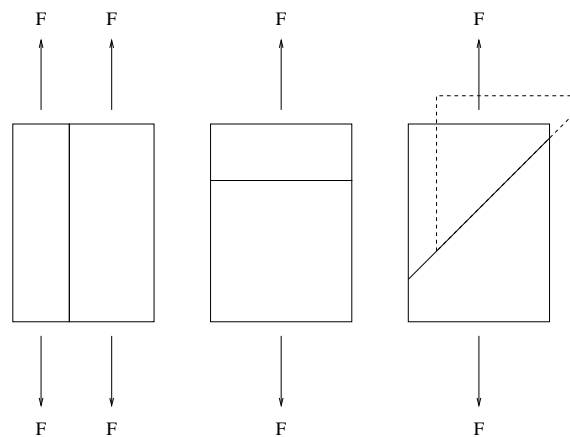


Abbildung 2.10: Ist die Gleitebene senkrecht oder parallel zur Zugrichtung, so können die beiden Seiten des Kristalls sich nicht gegeneinander verschieben, es kann kein Gleiten stattfinden. Beträgt der Winkel zwischen Gleitebene und Zugrichtung und der zwischen Gleitrichtung und Zugrichtung  $45^\circ$ , so ist der Schmidfaktor maximal.

Liegt eine äußere Spannung an, so ist das Gleitsystem mit dem höchsten Schmidfaktor aktiv und nur auf diesem findet Gleiten von Versetzungen statt. Für große äußere Spannungen kann auch in dem Gleitsystem mit dem nächsthöheren Schmidfaktor die Schubspannung dazu ausreichen, dass Versetzungen gleiten. Dann findet Mehrfachgleitung statt. Es ist möglich, dass ein Kristall so orientiert ist, dass schon zu Beginn zwei Gleitsysteme den höchsten Schmidfaktor haben. Dann findet schon bei kleinen Spannungen Mehrfachgleitung statt.

### 2.3.2 Versetzungsbewegung

Eine Versetzung kann sich innerhalb ihrer Gleitebene bewegen (Gleiten) oder sich in parallele Gleitebenen bewegen (Klettern oder Quergleiten). Gleiten geschieht ohne Materietransport, beim Klettern müssen Leerstellen und Zwischengitteratome

angelagert oder emittiert werden. Beide Bewegungsarten geschehen abschnittsweise durch die Bewegung von Kinken bzw. Sprüngen in der Versetzung (Abb. 2.11). Eine Kinke ist ein Knick in der Versetzungslinie innerhalb der Gleitebene, der zwei

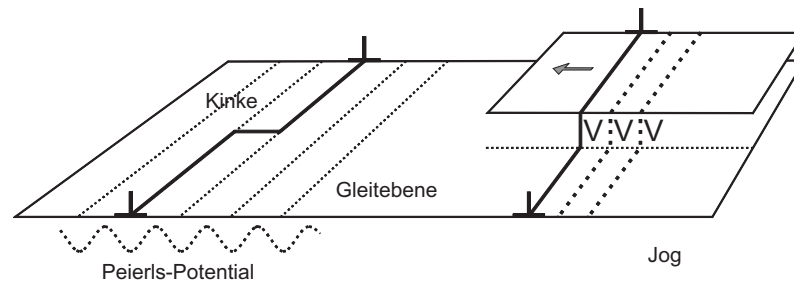


Abbildung 2.11: Links: Eine Kinke ist ein Knick in der Versetzungslinie, der in der Gleitebene liegt. Durch Auseinanderlaufen von Kinken gleiten Versetzungen. Rechts: Ein Sprung oder Jog verbindet zwei Versetzungsstücke in parallelen, benachbarten Gleitebenen. Er liegt außerhalb der Gleitebene und kann daher nicht wie der Rest der Versetzung gleiten. Bewegt sich ein Sprung, erzeugt er eine Kette von Leerstellen (V) hinter sich. [Haa03]

Versetzungsstücke in benachbarten Peierls-Tälern, den stabilen Lagen für Versetzungen, miteinander verbindet. Ein Sprung oder Jog ist ein Knick der Versetzungslinie aus der Gleitebene hinaus in die nächste parallele Ebene. Beim Gleiten bewegt sich ein Kinkenpaar entlang der Versetzungslinienrichtung auseinander. Die Energie zur Bildung von Kinkenpaaren liegt bei kfz-Metallen im meV-Bereich, so dass auch bei tiefen Temperaturen ständig Kinkenpaare durch thermische Fluktuationen gebildet werden [Sch92]. Durch eine äußere Spannung laufen die beiden Kinken des Paares in entgegengesetzte Richtungen auseinander und schließlich liegt die gesamte Versetzungslinie im nächsten Peierls-Tal. Gibt es Hindernisse vor der Versetzung in Gleitrichtung, so kann eine Kinke sich nicht weiterbewegen und die Versetzung kann an dieser Stelle nicht weitergleiten. An dieser Stelle wird die Versetzung aufgestaut. Hindernisse können alle Arten von Gitterfehlern sein, insbesondere aber immobile Anordnungen von Versetzungen oder Waldversetzungen. Immobile Versetzungsanordnungen sind z. B. Versetzungsdipole, also Stufenversetzungen mit antiparallelen Burgersvektoren, die sich aufeinander zu bewegt und mit geringem Abstand getroffen haben. Ein solcher Versetzungsdipol ist eine stabile Konfiguration. Waldversetzungen sind Versetzungen in einem inaktiven Gleitsystem, die die aktive Gleitebene durchstoßen. Schneiden sich Versetzungen, so entsteht in der sich weiter bewegenden Versetzung ein Sprung. Ein Sprung in einer Schraubenversetzung hat Stufencharakter und kann sich nicht mit der Schraubenversetzung mitbewegen. Der Sprung ist nur durch Emission oder Anlagerung von Leerstellen beweglich, ist also auf Diffusion angewiesen. Dadurch ist seine Beweglichkeit material- und temperaturabhängig. An einem Sprung wird eine Schraubenversetzung festgepinnt.

Hinter einer festgehaltenen Versetzung stauen sich andere Versetzungen der gleichen Gleitebene mit gleichem Burgersvektor auf. Die Versetzungen wechselwirken durch ein weitreichendes, mit  $(1/r)$  abfallendes Spannungsfeld innerhalb eines Kornes miteinander. Zwei Versetzungen eines Gleitsystems mit parallelen Burgersvektoren stoßen sich ab, während zwei mit antiparallelen Burgersvektoren sich anziehen. Durch eine äußere Spannung gleiten Versetzungen mit parallelen Burgersvektoren in die gleiche Richtung, Versetzungen mit antiparallelen Burgersvektoren in entgegengesetzte Richtungen. Versetzungen mit parallelen Burgersvektoren stauen sich also an einem Hindernis auf. Versetzungen mit antiparallelen Burgersvektoren bilden, wenn sie sich mit nur wenigen Gitterkonstanten Abstand treffen, einen Versetzungsdipol, wenn sie in der gleichen Gleitebene gleiten, annihilieren sie.

Ist eine Versetzung an zwei Hindernissen festgepinnt und treibt die äußere Spannung und die Spannungsfelder der nach ihr gleitenden und aufgestauten Versetzungen sie weiter, so baucht sich die Versetzung zwischen den Hindernissen aus. Je kleiner der Krümmungsradius, desto höher ist die erforderlichen Spannung, um die Versetzung weiter auszubauchen. Ist der kleinste Krümmungsradius, nämlich der halbe Abstand der Hindernisse, erreicht, so braucht es keine noch größere Spannung, um das Gebiet des (noch nicht geschlossenen) Versetzungsringes weiter zu vergrößern. Treffen sich schließlich hinter den Hindernissen die Teilstücke der Versetzung, so annihilieren sie und es bleibt ein zwischen den Hindernissen festgepinntes Versetzungsstück und ein geschlossener Versetzungsring, der sich weiter vergrößert und wegbewegt, zurück. Durch eine solche Frank-Read-Quelle erhöht sich die Versetzungsdichte im Kristall [Kop04]. Die Prozesse, unter denen sich durch Wechselwirkung von Versetzungen mit anderen Versetzungen und sonstigen Hindernissen die Versetzungsdichte erhöht, werden unter dem Begriff Versetzungsmultiplikation zusammengefasst.

Durch die höhere Versetzungsdichte wächst einerseits die Schubspannung im Kristall, andererseits steigt aber auch die Zahl der Hindernisse für die Versetzungsbewegung. Dies führt im Ergebnis zur beobachteten Verfestigung während der plastischen Verformung.

## 2.4 Nickel

Als Grundlage für die Simulation wurde reines Nickel als zu simulierender Werkstoff ausgewählt. Nickel hat ein kubisch-flächenzentriertes (kfz) Gitter wie viele andere Metalle (z. B. Al, Cu, Ag, Au, Pt,  $\gamma$ -Fe). Die mechanischen Eigenschaften von Nickel sind umfassend untersucht [Hol04]. Kupfer und Aluminium sind für die Simulation nicht geeignet, da die Kristallite eines Polykristalls eine Ausdehnung im cm-Bereich haben, wenn sie für die Untersuchung durch Positronenvernichtung vorbereitet sind. Die Simulation soll aber direkt mit den Messungen der Bonner Positronen-Mikrosonde (Auflösung 5 – 200  $\mu\text{m}$ ) vergleichbar sein und die Kristallite als kleinste Einheit haben. Nickel-Kristallite haben etwa eine Größe von 20  $\mu\text{m}$ . In Tabelle 2.1 sind Fließgrenze, Zugfestigkeit und E-Modul von Nickel zweier unterschiedlicher, hohen Reinheiten notiert.

	Ni 99,99%	Ni 99,73%
0,2%-Grenze $\sigma_{0,2}$	57,8 MPa	
Zugfestigkeit $\sigma_{zB}$	315,8 MPa	
E-Modul $E$		196GPa

Tabelle 2.1: Mechanische Eigenschaften von Nickel [Lan64], umgerechnet die SI-Einheit. Aus der Fließspannung wurde unter Verwendung des Sachs-Faktors  $M = 2,24$  die kritische Schubspannung des unverformten reinen Nickels errechnet. Leider liegen  $E$  und  $\sigma_{0,2}$  nicht für den gleichen Reinheitsgrad von Nickel vor.

Als kfz-Kristall hat Nickel 12 Gleitsysteme, nur 5 davon sind unabhängig [Vol89]. In Abb. 2.12 sind die Gleitebenen eingezeichnet, die Gleitrichtungen sind die Flächendiagonalen des Gitters, die in den Gleitebenen liegen.

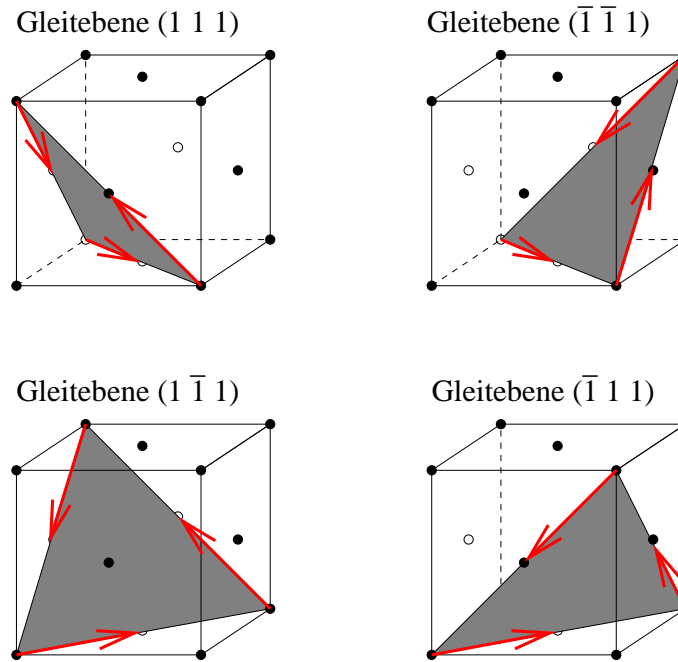


Abbildung 2.12: Die zwölf Gleitsysteme in kfz-Kristallen. Die Gleitebenen sind grau eingezeichnet, die Gleitrichtungen rot. Es gibt drei Gleitrichtungen pro Gleitebene. Sie sind diejenigen Flächendiagonalen des Gitters, die in den Gleitebenen liegen.

## 2.5 Die Bonner Positronen-Mikrosonde

Eine experimentelle Überprüfung der Ergebnisse der Simulation kann mit Hilfe der Bonner Positronen-Mikrosonde (BPM) geschehen. Die BPM kann mittels Positronen-

Doppler-Spektroskopie (DB) mit sehr guter Ortsauflösung ( $5 - 200\mu\text{m}$ ) die Fehlstellendichte und damit die Schädigung eines belasteten Werkstoffs bestimmen [Haa03] [Gre97]. Positronen-Doppler-Spektroskopie ist neben Lebensdauermessung und Untersuchung der gestörten Winkelkorrelation die dritte Methode, Positronen-Annihilations-Spektroskopie zur zerstörungsfreien Materialuntersuchung zu verwenden [Wes73].

Werden Positronen in einen Festkörper gebracht, so thermalisieren sie innerhalb weniger Pikosekunden [Nie80]. Die danach folgende Diffusion kann als dreidimensionaler Random-Walk beschrieben werden [Pus94]. Für die Diffusionslänge gilt  $L_+ \approx \sqrt{6D_+\tau_+}$ . Mit einem Diffusionskoeffizienten in der Größenordnung von  $10^{-4}\text{m}^2$  [Leo93] und einer Lebensdauer von 100 - 300 ps (in defektarmen Metallen, [Pus94]) ergeben sich Diffusionslängen von 300 - 500 nm.

Während der Diffusion hält sich das Positron im Zwischengitter auf, da es von den positiv geladenen Atomrümpfen abgestoßen wird. Liegt am Diffusionsweg eine Stelle mit niedriger Atomrumpfdichte, so stellt das ein attraktives Potential für das Positron dar. Solche Stellen sind z. B. Leerstellen, Leerstellencluster oder eine Versetzungslinie. Das Positron kann in dem Potential eingefangen werden und je nach Tiefe des Potentials wieder entweichen. Die Übergangsraten dafür werden im Trapping-Modell beschrieben [Ber70][Con71][Bra72][Fra74]. Das Potential einer Leerstelle ist etwa 1eV tief [Sch81]. Aus einem solchen Potential kann ein Positron nicht mehr entkommen; es bleibt bis zur Annihilation am Ort der Leerstelle gefangen. Das Potential einer Versetzung ist nur 50 - 100 meV tief [Dau74][Häk89][Häk90][Wid99]. Aus solchen entkommt das Positron, welches eine Energie von etwa 40 meV bei Raumtemperatur hat, laut Trapping-Modell mit endlicher Wahrscheinlichkeit. In Lebensdauermessungen wird jedoch fast kein Unterschied zwischen den Annihilationsignalen aus Fehlstellen und Versetzungen beobachtet. Dem Einfang in eine Versetzung folgt also fast immer ein Einfang in eine assoziierte Leerstelle der Versetzung [See55][Hir61]. Versetzungen sind wahrscheinlich schnelle Diffusionswege für Positronen, erhöhen also die Länge der Diffusionswege und machen so den Einfang in eine assoziierte Leerstelle wahrscheinlicher [Wid99].

Annihiliert das Positron schließlich mit einem Elektron, so sendet das Paar zwei Gammaquanten aus. Diese haben im Schwerpunktsystem eine Energie von je 511 keV und werden mit einem Winkel von  $180^\circ$  zueinander ausgesandt. Im Laborsystem muss der Impuls des Elektrons miteinbezogen werden. Der Impuls des Positrons kann wegen der geringen kinetischen Energie des Positrons ( $\approx 0,04\text{eV}$ ) gegenüber dem Elektronenimpuls ( $E \approx 1 - 10\text{eV}$ ) vernachlässigt werden. Der transversale Anteil des Elektronenimpulses  $p_T$  führt zu einer Störung der  $180^\circ$ -Winkelkorrelation, der longitudinale Anteil  $p_L$  zu einer Verschiebung der Energie um  $\Delta E = \pm \frac{1}{2}p_L c$ . Diese kann als Dopplerverbreiterung der 511keV-Linie im Annihilationsspektrum gemessen werden. Ein Maß für die Breite des Peaks ist der  $S$ -Parameter. Er ist der Quotient aus dem Integral über den inneren Teil des Photopeaks und dem Integral über den ganzen Peak.

$$S = \frac{A_s}{A}. \quad (2.10)$$

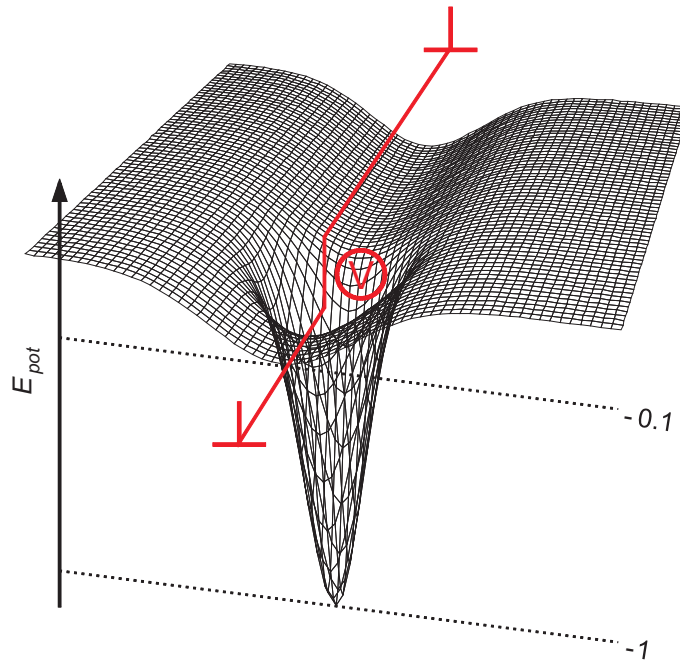


Abbildung 2.13: Potential einer Versetzung und der assoziierten Leerstelle (V). Aus dem Potentialtal einer Versetzung kann ein Positron thermisch entkommen, aus dem Potentialtopf der Leerstelle nicht. Vermutlich leiten Versetzungen Positronen zu ihren assoziierten Leerstellen. [Wid99b]

Der S-Parameter hängt von der Wahl der Integrationsgrenzen zur Bestimmung von  $A_s$  ab. Sollen Messungen vergleichbar sein, müssen sie auf einen wohldefinierten Referenzwert bezogen werden [Haa03]. Bei Metallen ist dies der S-Parameter des ausgeheilten Materials  $S_0$ . Der so definierte Wert heißt relativer S-Parameter.

$$S_{rel} = \frac{S}{S_0}. \quad (2.11)$$

Die Dopplerverbreiterung gibt Auskunft über die Fehlstellendichte. Denn in Fehlstellen ist es wahrscheinlicher, dass das Positron mit einem Elektron mit niedrigem Impuls aus dem Valenz- oder Leitungsband annihiliert, im Zwischengitter ist dagegen die Annihilation mit einem Rumpfelektron wahrscheinlicher und dadurch die Dopplerverbreiterung größer. Ein höherer S-Parameter zeigt also eine höhere Fehlstellendichte an.

Die Bonner Positronen-Mikrosonde liefert einen sehr feinen monochromatischen Positronenstrahl. Sie ist eine Kombination von Positronenquelle und Raster-Elektronen-Mikroskop (REM). Sie wird entweder im REM-Modus verwendet, etwa zur Festlegung eines Koordinatensystems und Identifizierung der zu untersuchenden Stellen, oder im Positronen-Modus zur Materialuntersuchung. Der Positronenstrahl erhält seine geringe Ausdehnung durch die geschickte Geometrie von  $^{22}\text{Na}$ -Quelle und

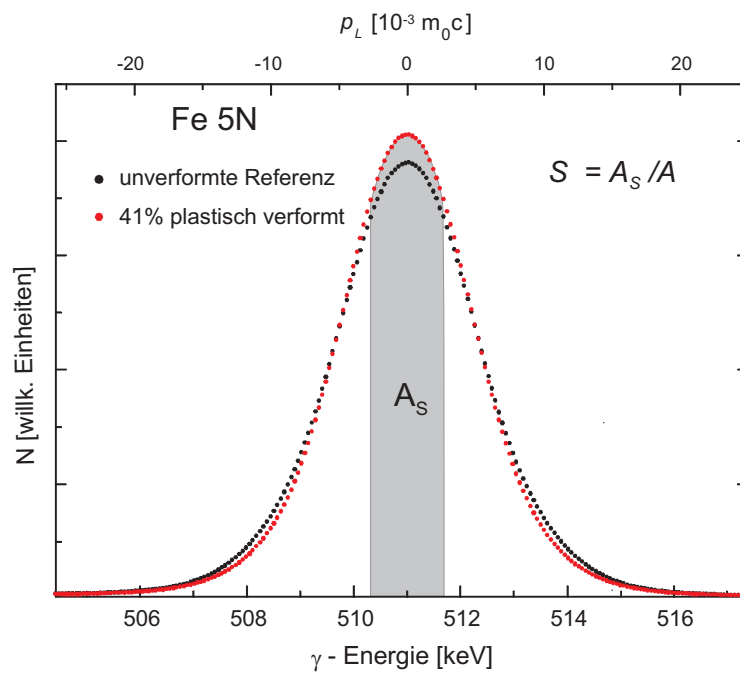


Abbildung 2.14: Der S-Parameter ist ein Maß für die Dopplerverbreiterung des Annihilationsspektrums. Er gibt den Anteil der Fläche in der Mitte des Peaks an der Gesamtfläche des Peaks an. Aus dem S-Parameter kann man auf die Fehlstellendichte schließen. [Haa03]

Wolfram-Moderator. Da die ausgesandten Positronen aus einem nur sehr kleinen Phasenraumsegment kommen, lassen sie sich sehr gut fokussieren. Positronenquelle und Elektronenkanone liegen auf den gegenüberliegenden Seiten eines magnetischen Prismas, das die vorfokussierten Strahlen in die REM-Säule lenkt. Dort werden sie weiter fokussiert und treffen schließlich auf die Probe, die auf einem beweglichen Probenstisch liegt. Unterhalb des Probenstischs befindet sich ein Ge-Detektor, der die Annihilationsstrahlung der Positronen mit Elektronen aus der Probe detektiert [Haa03].

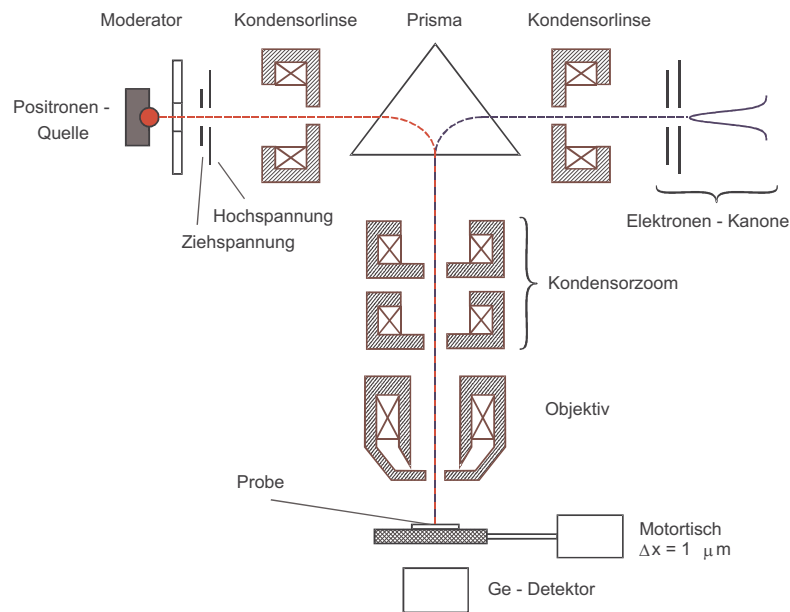


Abbildung 2.15: Skizze der Bonner Positronen-Mikrosonde. Sie kann entweder mit Positronen oder als Raster-Elektronen-Mikroskop betrieben werden. Beide Strahlen werden durch ein magnetisches Prisma in die REM-Säule gelenkt und dort fokussiert. Sie treffen auf die Probe, die auf einem Motortisch liegt. Die Annihilationsstrahlung wird mit einem Germanium-Detektor detektiert. [Haa03]

## 2.6 Zellulärer Automat

Ein zellulärer Automat ist ein Konzept aus der theoretischen Informatik. Er beschreibt die zeitliche Entwicklung von Zellen, die auf einem Gitter angeordnet sind. Jede der Zellen hat einen Zustand aus einer endlichen Menge von möglichen Zuständen. Die Zeitentwicklung erfolgt in diskreten Schritten und in allen Zellen gleichzeitig. Dabei hängt der Zustand einer Zelle nach einem Zeitschritt nur vom Zustand der Nachbarzellen vor dem Zeitschritt ab.

Formal ist ein zellulärer Automat definiert als ein 4-Tupel  $\langle \mathcal{L}, \mathcal{S}, \mathcal{N}, f \rangle$  aus einem Gitter  $\mathcal{L}$ , einer endlichen Menge von möglichen Zuständen  $\mathcal{S}$ , einer Menge von Nachbarschaftsindizes  $\mathcal{N}$  und einer Übergangsfunktion  $f$  [Wei97]<sup>1</sup>.

Das Gitter  $\mathcal{L}$  ist diskret und regelmäßig. Seine Elemente  $x \in \mathcal{L}$  heißen Zellen. Sie können durch ganze Zahlen indiziert werden. Über die Indizes können Zellen addiert und subtrahiert werden. Zu jedem Zeitpunkt  $t$  hat das Gitter eine Konfiguration, d.h. es gibt eine Funktion  $C_t : \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{S}$ , die jeder Zelle  $x \in \mathcal{L}$  einen Zustand  $C_t(x) \in \mathcal{S}$  zuordnet.

Die Nachbarschaft einer Zelle sind diejenigen Zellen  $y \in \mathcal{L}$ , deren Indicedifferenz in

<sup>1</sup>Es gibt andere Definitionen des zellulären Automaten, die z. B. die Nachbarschaft nicht über eine Menge von Indizes, sondern als Funktion definieren [Ada94].



$\mathcal{N}$  liegt:

$$\mathcal{N}(x) = \{y \in \mathcal{L} \mid y - x \in \mathcal{N}\}. \quad (2.12)$$

Eine Zelle kann in ihrer eigenen Nachbarschaft liegen oder auch nicht. Die Mächtigkeit von  $\mathcal{N}$  ist die Anzahl der Nachbarn  $n$ .

Ist zum Beispiel die Nachbarschaft auf einem eindimensionalen Gitter als die Zelle selbst und die rechts angrenzende Zelle festgelegt, so ist  $\mathcal{N} = \{0, +1\}$ . Die Nachbarn der Zelle mit Index 17 sind dann also die Zellen mit Index 17 und Index 18.

Die Übergangsfunktion  $f : \mathcal{S}^n \rightarrow \mathcal{S}$  bestimmt die Konfiguration des Gitters im nächsten Zeitschritt  $t + 1$ . Die Konfiguration der Nachbarschaft  $C_t(\mathcal{N}(x))$  ist dabei  $C_t(\mathcal{N}(x))$

Für alle Zellen gilt

$$C_{t+1}(x) = f(\{C_t(y) \mid y \in \mathcal{N}(x)\}). \quad (2.13)$$

Der Zustand einer Zelle ist also nur vom Zustand der Nachbarzellen im vorherigen Zeitschritt bestimmt.

Ist das Gitter endlich, so fügt man an den Rändern des Gitters eine Schicht von Hilfszellen hinzu, die nicht zum Gitter gehören, aber einen erlaubten Zustand haben und Nachbarn der Gitterzellen am Rand des Gitters sein können. Ihr zeitliches Verhalten wird nicht durch die Übergangsfunktion bestimmt, sondern durch Randbedingungen. Die häufigsten sind periodische, reflexive und feste Randbedingungen. Bei periodischen Randbedingungen hat (im eindimensionalen zellulären Automaten mit Nachbarschaft  $\{-1, 0, +1\}$ ) der linke Nachbar der ersten Zelle den gleichen Zustand wie die letzte Zelle, der rechte Nachbar der letzten Zelle den Zustand der ersten Zelle (Abb. 2.16 oben). Bei reflexiven Randbedingungen hat die Hilfszelle den gleichen Zustand wie die Zelle, deren Nachbar sie ist; der linke Nachbar der ersten Zelle also den gleichen Zustand wie die erste Zelle (Abb. 2.16 unten). Bei festen Randbedingungen hat die Hilfszelle einen Zustand unabhängig vom Zustand der Gitterzellen.

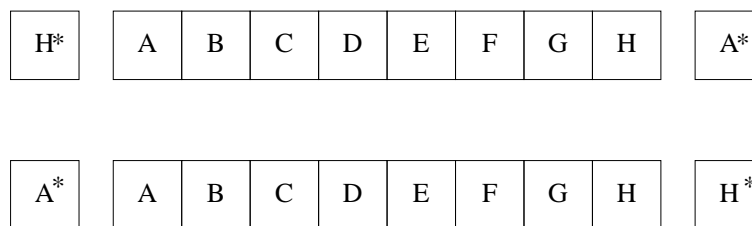


Abbildung 2.16: Illustration periodischer Randbedingungen (oben) und reflexiver Randbedingungen (unten) bei einem eindimensionalen zellulären Automaten. Die Zellen  $H^*$  und  $A^*$  gehören nicht zum Gitter, sind aber Nachbarn der Gitterzellen  $A$  und  $H$ .  $H^*$  hat den gleichen Zustand wie  $H$ ,  $A^*$  hat den gleichen Zustand wie  $A$ . [Wei97].



# Kapitel 3

## Modell

Das in dieser Diplomarbeit entwickelte Modell ist ein eindimensionales, granulares Modell des Festkörpers. Es beschreibt den Festkörper als eine Kette von fest miteinander verbundenen Kristalliten. Der Festkörper wird einachsiger und dehnungskontrolliert zyklisch verformt.

Die Information über die elastische Verformung der Kristallite wird durch nicht-lokale Funktionen weitergegeben (Abschnitt 3.3), danach werden in jedem Korn plastische Korrekturen hinzugerechnet (Abschnitt 3.5). Die Information über Schädigung und Verfestigung wird durch die lokalen Übergangsfunktionen eines zellulären Automaten weitergegeben (Abschnitt 3.6).

Dieses einfache Modell kann wichtige Eigenschaften einer realen zyklischen Festkörperdeformation reproduzieren, etwa die Hysterese-Kurve im Spannungs-Dehnungs-Diagramm oder die zyklische Verfestigung eines anfangs weichen Materials bis zu einer gewissen stationären Härte (Abschnitt 3.7). Zur realistischen Simulation eines Festkörpers bedarf es allerdings noch einiger Erweiterungen, diese werden im Ausblick (Kapitel 4) beschrieben.

### 3.1 Geometrie

Im Modell wird der Festkörper auf der Ebene der Körner betrachtet. Dabei wird jedoch nicht die Form realer Körner verwendet, sondern die Körner werden als Quader mit Seitenlängen von  $20\mu\text{m}$  betrachtet. Da im Programm jedoch nicht die absoluten Längen und Längenänderungen, sondern nur relative Längenänderungen eine Rolle spielen, wurde die Länge auf den Wert 1 gesetzt. Je nach Anzahl der Körner können so Festkörper im Millimeter- oder Zentimeter-Bereich simuliert werden.

Die Körner hängen fest zusammen, die Verbindungen sind nicht dehnbar und übertragen Kräfte ohne Verlust. Die Körner selber sind entsprechend ihren elastischen und plastischen Eigenschaften dehnbar.

Der Festkörper wird einachsiger in  $x$ -Richtung abwechselnd gedehnt und gestaucht. Die äußere Anregungsfunktion ist sinusförmig. Eine Periode wird in 8 Zeitschritte eingeteilt. Dabei wird das Korn an der Position  $x = 0$  festgehalten, das Korn an der Stelle  $x = x_{max}$  wird um seine Ausgangsposition ausgelenkt. Die Übertragung

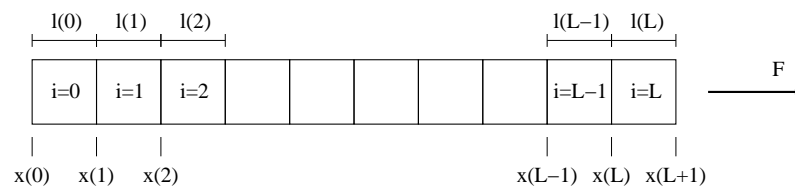


Abbildung 3.1: Skizze der geometrischen Anordnung der Kristallkörner. Sie sind in einer langen Kette verbunden. Die Position  $x(0)$  bleibt unverändert; die Position  $x(L+1)$  wird sinusförmig um ihre Ruhelage ausgelenkt.

der äußeren Deformation auf die Körner wird im Abschnitt 3.3 beschrieben. Die deformierten Körner haben immer noch die Form von Quadern, ihre Fläche quer zur  $x$ -Richtung verändert sich so, dass das Volumen erhalten ist. Damit ist die Spannung innerhalb eines Kornes konstant.

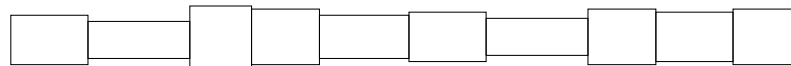


Abbildung 3.2: Skizze der deformierten Kristallkörner. Ihr Länge in Zugrichtung wird durch die äußere Dehnung und die E-Module der Körner bestimmt; ihre Fläche quer zur Zugrichtung ändert sich so, dass das Volumen erhalten ist. Nach der Verformung haben die Körner immer noch die Form von Quadern (bzw. Rechtecken in der 2D-Ansicht).

## 3.2 Zellulärer Automat

Dieses Modell beruht auf dem Konzept des zellulären Automaten. Die Zellen entsprechen den Körnern eines Festkörpers, ihre Eigenschaften sind

- Länge
- E-Modul
- Orientierung des Kristallgitters zur Zugrichtung
- Schädigung (Versetzungsdichte relativ zur Versetzungsdichte des unverformten Materials).

Die Werte der Eigenschaften sind nicht diskret wie das in der formalen Definition des zellulären Automaten gefordert war.

Im eindimensionalen Modell besteht die Nachbarschaft aus dem links und dem rechts

Länge in $x$ -Richtung	$l_x(i)$
E-Modul	$E(i)$
Orientierung (siehe 3.4)	$\varphi(i)$
Schädigung	$S = \sqrt{\frac{\rho}{\rho_0}}$
Querschnittsfläche	$A(i) = \frac{V}{l_x(i)}$
Position in $x$ -Richtung	$x(i) = \sum_{j=0}^{i-1} l_x(j)$
Schmidfaktor (siehe 3.4)	$\mu = \mu(\varphi)$
Dehnung (in $x$ -Richtung)	$\varepsilon'(i) = \frac{l'_x(i) - l_x(i)}{l_x(i)}$
Spannung	$\sigma(i) = E(i)\varepsilon(i)$

Tabelle 3.1: Übersicht über die Parameter des Modells und die daraus abgeleiteten Größen

angrenzenden Korn. Die Übergangsfunktion regelt die Akkumulation der Schädigung und wird in Abschnitt 3.6 näher beschrieben.

Die Längen werden alle mit dem Wert 1 initialisiert, die Schädigung, die die Versetzungsdichte normiert auf die Versetzungsdichte des unverformten Materials angeben soll, hat zu Beginn der Simulation in allen Körner den Wert 1. E-Modul und Orientierung variieren von Korn zu Korn. Die Orientierungswinkel sind gleichverteilt im Intervall  $[0, \pi/2]$ . Die E-Moduln stammen aus einer Gleichverteilung mit Breite  $0,1 \cdot E_0$  um den Elastizitätsmoduln von reinem Nickel  $E_0 = 196\text{GPa}$ .

Außer den vier oben erwähnten Parametern werden in der Implementierung des Modells weitere, abgeleitete Größen verwendet. In der Tabelle 3.1 sind die Notationen der Eigenschaften von Zellen und abgeleiteter Größen angegeben. Die Position einer Zelle mit Index  $i$  wird notiert als  $x(i)$ . Ist eine Zeitentwicklung angegeben, so bezeichnen ungestrichene Größen die Eigenschaften vor einem Zeitschritt, die gestrichenen Größen die Eigenschaften danach.

## 3.3 Elastische Verformung

### 3.3.1 Simulation durch einen zellulären Automaten

Um mit dem Konzept des zellulären Automaten vertraut zu werden, wurde ein zellulärer Automat mit oben beschriebener Geometrie implementiert. Als Übergangsfunktion wurde eine Diffusionsgleichung verwendet:

$$x'(i) = \frac{1}{3} (x(i-1) + x(i) + x(i+1)) \quad (3.1)$$

Die Berechnung der elastischen Verformung zur Simulation der Schädigung über  $10^8$  oder mehr Verformungszyklen ist mit einem zellulären Automaten jedoch nicht sinnvoll.

Erhält jede Zelle nur Informationen von ihren Nachbarzellen, so braucht man mindestens so viele Zeitschritte wie es Körner gibt, um die Information über die äußere Auslenkung zum festgehaltenen Ende bei  $x = 0$  zu übermitteln. Ist die äußere Auslenkung zu schnell, so werden die Körner in der Nähe des bewegten Endes schon wieder zusammengedrückt, während die Körner am feststehenden Ende sich eigentlich noch verlängern müssten. In diesem Fall wird die Information über die Auslenkung nicht vollständig oder im Extremfall überhaupt nicht an die entfernten Körner weitergegeben.

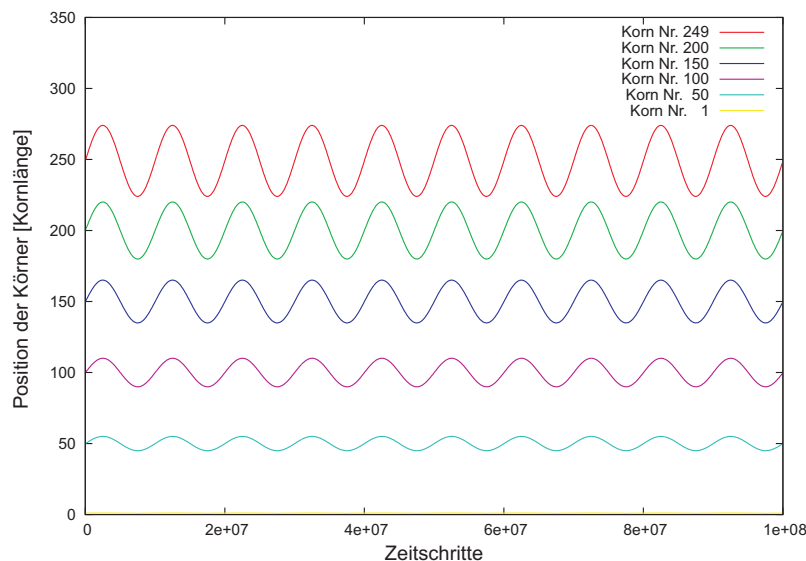


Abbildung 3.3: Auslenkung der Körner auf verschiedenen Positionen bei Simulation der elastischen Verformung durch einen zellulären Automaten mit Gl. (3.1) als Übergangsfunktion. Die Frequenz der Auslenkung beträgt  $10^{-7}$ , um 10 Zyklen der Verformung zu simulieren benötigt man  $10^8$  Zeitschritte. Hier wird die elastische Verformung aller Körner richtig simuliert.

Ist die äußere Auslenkung langsam genug, dann wird die Information vollständig an alle Körner weitergegeben. Langsam genug bedeutet aber einige tausend bis millionen Zeitschritte pro Periode der sinusförmigen Auslenkung. Diese große Anzahl von Zeitschritten macht die Simulation sehr langsam. Es ist also prinzipiell möglich, aber nicht sinnvoll, die elastische Verformung durch einen zellulären Automaten zu simulieren, da die Information über die Schädigung mit der Geschwindigkeit der äußeren Auslenkung an die Nachbarkörner weitergegeben wird, und damit auf einer sehr viel größeren Zeitskala. Daher wird im Modell eine nicht-lokale Übergangsfunktion verwendet.

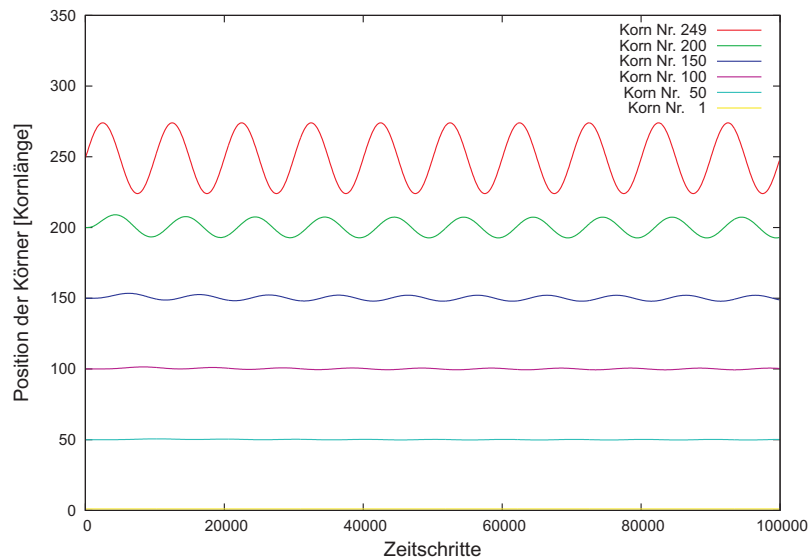


Abbildung 3.4: Auslenkung der Körner auf verschiedenen Positionen bei Simulation der elastischen Verformung durch einen zellulären Automaten mit Gl. (3.1) als Übergangsfunktion. Die Frequenz der Auslenkung beträgt  $10^{-4}$ . Hier verformen sich nur die Körner am Ende der Kette, diese dafür sehr stark. Vgl. Abb. 3.3

### 3.3.2 Simulation durch eine nicht-lokale Funktion

Es wurde eine Funktion gesucht, die unter Kenntnis der E-Moduln der Körner und der Gesamtlängenänderung des Körpers die Längenänderung der einzelnen Körner berechnet.

Der Vorgang der Verformung wird in Zeitschritte aufgeteilt. Der Zustand vor der Verformung ist bekannt, nun soll der Spannungs-Dehnungs-Zustand im folgenden Zeitschritt berechnet werden, nachdem die Kette der Körner um  $\Delta L_x$  verlängert bzw. verkürzt wurde. Wurde dabei von außen mit einer Kraft  $F$  gezogen, so stellt sich nun in jedem Korn eine Spannung  $\sigma(i)$  je nach Querschnittsfläche  $A(i) = \frac{V}{l_x(i)}$  ein, die Kraft an jeder Korngrenze ist gleich der äußeren Kraft.

$$\sigma(i) = \frac{F}{A(i)} = \frac{F \cdot l_x(i)}{V}. \quad (3.2)$$

Im Hookschen Bereich gilt für die Spannung nach der Dehnung

$$\sigma'(i) = E'(i) \cdot \varepsilon'(i) = E'(i) \cdot \frac{l'_x(i) - l_x(i)}{l_x(i)}. \quad (3.3)$$

Es gilt also

$$\begin{aligned}
 \varepsilon'(i) &= \frac{l'_x(i) - l_x(i)}{l_x(i)} = \frac{\sigma'(i)}{E'(i)} = \frac{F' \cdot l'_x(i)}{V \cdot E'(i)} \\
 \Rightarrow l'_x(i) - l_x(i) &= \frac{F' \cdot l_x(i) l'_x(i)}{V \cdot E'(i)} \\
 \Rightarrow \Delta L_x &= \sum_j l'_x(j) - \sum_j l_x(j) = \frac{F'}{V} \cdot \sum_j \frac{l_x(j) l'_x(j)}{E'(j)}
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Für die Kraft  $F'$ , die in jedem Korn wirkt, gilt also

$$F' = \frac{\Delta L_x \cdot V}{\sum_j \frac{l_x(j) l'_x(j)}{E'(j)}} \tag{3.5}$$

Setzt man das in Gl. (3.4) ein und formt um, so erhält man

$$l'_x(i) = l_x(i) \cdot \left( 1 + \frac{\Delta L_x}{E'(i) \cdot \sum_j \frac{l_x(j) l'_x(j)}{E'(j)}} l'_x(i) \right). \tag{3.6}$$

Nimmt man noch an, dass sich während der Verformung der E-Modul nicht ändert, das also  $E'(i) = E(i)$  ist, so erhält man eine Formel für die neue Länge des  $i$ -ten Korns, die mit dem Computer rekursiv lösbar ist:

$$l'_x(i) = l_x(i) \cdot \left( 1 + \frac{\Delta L_x}{E(i) \cdot \sum_j \frac{l_x(j) l'_x(j)}{E(j)}} l'_x(i) \right). \tag{3.7}$$

In der Herleitung wurde die technische Dehnung  $\varepsilon_{tech} = \frac{l'_x - l_x}{l_x}$  anstelle der wahren Dehnung  $\varepsilon_{wahr} = \ln \frac{l'_x}{l_x}$  verwendet. Dies führt dazu, dass für sehr große Dehnungen, etwa ab  $\varepsilon_{tech} = 10$ , die Kurve im Spannungs-Dehnungs-Diagramm von der Hook'schen Geraden abweicht. Diese Abweichung ist für die Simulation aber uninteressant, da hier Dehnungen bis maximal  $\varepsilon_{tech} = 0,1$  verwendet werden.

In der Literatur kommen sowohl dehnungskontrollierte als auch spannungskontrollierte zyklische Verformungen vor [Mit79]. Es wurde auch eine Formel für eine spannungskontrollierte Verformung entwickelt. Beide Varianten benötigen etwa die gleiche Laufzeit. Der dehnungskontrollierten Version wurde der Vorzug gegeben, da die in der Arbeitsgruppe verwendete Verformungsmaschine [Wid98] dehnungskontrolliert arbeitet und eine dehnungskontrollierte Simulation so einfacher mit dem Experiment verglichen werden kann.

### 3.4 Orientierungsabhängigkeit

Die Orientierung ist eine sehr wichtige Eigenschaft der Körner. Denn durch unterschiedliche Orientierung der Gleitsysteme zur Zugrichtung wirkt die äußere Zugspannung verschieden stark als Schubspannung auf die Gleitsysteme der Körner und



verursacht damit orientierungsabhängige Abgleitung. Die Orientierung eines Korns ändert sich im Laufe der Zeit, da sich das Korn durch Abgleitung eindreht. Dadurch kann ein anderes Gleitsystem zum aktiven Gleitsystem werden und es kommt zur Versetzungsmultiplikation.

Die Orientierung eines Korns ist die Lage der (100)- und (010)-Richtung des Kristallgitters relativ zum äußeren Koordinatensystem. Der Übergang vom äußeren zum inneren Koordinatensystem wird durch eine Drehmatrix  $A$  vermittelt, die wegen der Symmetrie des Problems zwei unabhängige Parameter hat. Ein Vektor  $\vec{v}$  des inneren Koordinatensystems wird im äußeren dargestellt durch den gedrehten Vektor  $\tilde{\vec{v}} = A\vec{v}$ .

Zur Berechnung des Schmidfaktors eines Gleitsystems

$$\mu = \cos \chi \cos \lambda \quad (3.8)$$

muss man den Normalenvektor der Gleitebene  $\vec{n}$  und den Vektor der Gleitrichtung in äußeren Koordinaten darstellen, also  $\tilde{\vec{n}} = A\vec{n}$  und  $\tilde{\vec{r}} = A\vec{r}$  berechnen. Man erhält dann  $\cos \chi$  und  $\cos \lambda$  als Skalarprodukt dieser Vektoren mit dem Vektor der

Zugrichtung  $\vec{e}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ :

$$\cos \chi = \tilde{\vec{n}} \cdot \vec{e}_x \quad (3.9)$$

$$\cos \lambda = \tilde{\vec{r}} \cdot \vec{e}_x \quad (3.10)$$

Für alle 12 Gleitsysteme des kfz-Gitters wird der Schmidfaktor berechnet. Das System mit dem höchsten Schmidfaktor ist das aktive Gleitsystem: nur in diesem findet Abgleitung statt.

Da sich im Laufe der Simulation der Winkel durch Abgleitung und Eindrehen ändern kann (siehe dazu den folgenden Abschnitt), muss in jedem Schritt das aktive Gleitsystem bestimmt werden. Dazu müssen in jedem Zeitschritt für jedes Korn 4 Sinus- oder Kosinuswerte berechnet werden und zu 12 Schmidfaktoren kombiniert werden. Der Einfachheit halber beschränkt sich dieses erste Modell jedoch auf einen Drehwinkel  $\varphi$ . Das Kristallgitterkoordinatensystem geht aus dem äußeren durch Drehung um den Winkel  $\varphi$  um die  $z$ -Achse hervor. Damit reduziert sich die Drehmatrix auf

$$A = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Nun müssen pro Korn und Zeitschritt nur noch ein Sinus- und ein Kosinuswert berechnet werden und zu drei Schmidfaktoren kombiniert werden. Denn nun haben immer 4 Gleitsysteme den gleichen Schmidfaktor – ein Wechsel zwischen Gleitsystemen einer Klasse ist nicht mehr möglich. Dadurch ist die Anzahl der Gleitsystemwechsel kleiner und das Anwachsen der Schädigung verlangsamt sich. Das jetzige Modell dient dazu, die Machbarkeit der Simulation der Materialschädigung durch

einen zellulären Automaten zu überprüfen. Es hat sich gezeigt, dass trotz der Vereinfachung auf einen Orientierungswinkel der verwendete Ansatz gut geeignet ist, Materialschädigung zu simulieren.

Zur Berechnung der Winkeländerung durch Eindrehen des Kornes nach Abgleitung überlegt man folgendes: Durch Abgleitung  $a$  verlängert sich das Korn in  $x$ -Richtung insgesamt um  $\varepsilon_{pl} \cdot l_x$ , quer zur  $x$ -Richtung um  $\Delta l_{quer}$ . Wie man in Abbildung 3.5 sieht, ist

$$\Delta l_{quer} = a \cdot l_x \cdot \cos(90^\circ - \lambda) = a \cdot l_x \cdot \sin \lambda \quad (3.12)$$

Nun betrachtet man einen Schnitt durch das Korn, so dass Gleitrichtung und damit Abgleitung in der Papierebene liegt (Abb. 3.6). Man nimmt an, dass das Korn sich nun so eindreht, dass die Verbindungslinie zwischen den Mitten der oberen und unteren Außenfläche in die Richtung der Zugachse zeigt. Für den Winkel  $\Delta\varphi$  zwischen alter und neuer Zugrichtung gilt

$$\tan(\Delta\varphi) = \frac{\Delta l_{quer}}{l_x} = \frac{a l_x \sin \lambda}{l_x} = a \sin \lambda. \quad (3.13)$$

Da die Winkeländerungen kleiner als  $1^\circ$  sind, ist die Kleinwinkelnäherung erlaubt:

$$\Delta\varphi = a \sin \lambda \quad (3.14)$$

Gleitsystemwechsel durch Eindrehen sollten jedoch bei einer Dehnung von 1% nur in 5% der Körner stattfinden<sup>1</sup>. Dieser Prozess sollte also bei der Erhöhung der Schädigung nur eine untergeordnete Rolle spielen.

---

<sup>1</sup>Dieser Wert ergibt sich durch Vergleich der Fläche der Bereiche mit Breite  $2\Delta\varphi$  um diejenigen Linien auf der Kugeloberfläche, für die zwei Gleitsysteme den gleichen Schmidfaktor haben, mit der Gesamtfläche der Kugeloberfläche  $4\pi$ . In diesen Bereichen kann eine Änderung der Orientierung zu einem Gleitsystemwechsel führen.

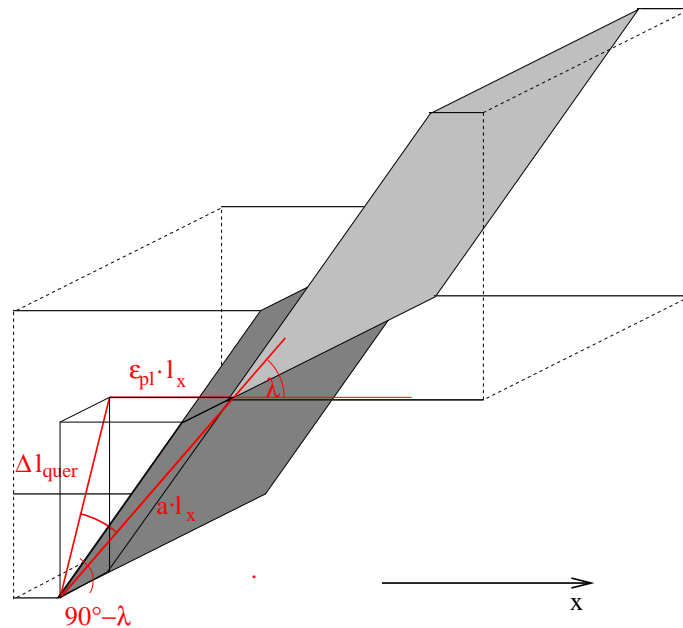


Abbildung 3.5: Gleitet die eine Hälfte eines Kornes gegenüber der anderen entlang der Gleitebene in Gleitrichtung um einen Betrag  $a$  ab, so verlängert sich das Korn in Zugrichtung um  $\varepsilon_{pl}$ , quer zur Zugrichtung um  $\Delta l_{quer} = a \cdot l_x \cdot \sin \lambda$ .

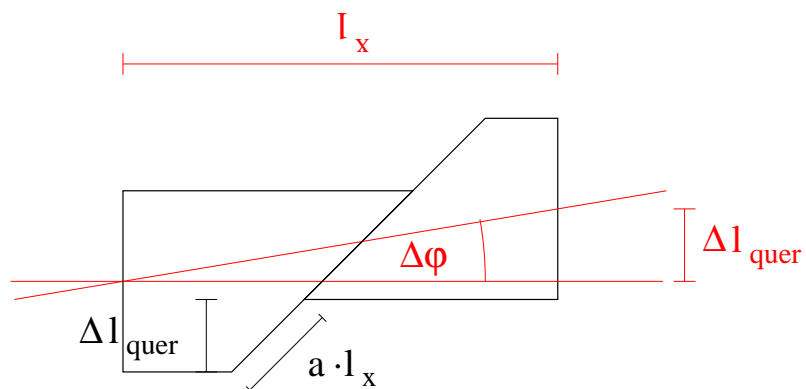


Abbildung 3.6: Schnitt durch ein abgeglittenes Korn, so dass die Gleitrichtung in der Papierebene liegt. Der Winkel  $\Delta\varphi$  zwischen alter und neuer Zugrichtung ergibt sich aus der Längenänderung quer zur Zugrichtung  $\Delta l_{quer}$  und der Länge in  $x$ -Richtung  $l_x$ .

### 3.5 Plastische Verformung

Die plastische Verformung wird simuliert, indem man annimmt, dass oberhalb der kritischen Spannung für Abgleitung die Verformung nur noch durch Abgleitung und nicht mehr durch elastische Dehnung stattfindet. Als kritische Spannung wird die Fließspannung, die aus Zugversuchen bekannt ist, angenommen,  $\sigma_{krit,0} = 58\text{MPa}$ . Ab dieser Spannung findet äußerlich bemerkbar Abgleitung statt. Dieser Wert für die Zugspannung lässt sich mit dem Sachs-Faktor auf die für Abgleitung nötige Schubspannung  $\tau_{krit,0} = \sigma_{krit,0}/M = 26\text{MPa}$  umrechnen. Diese Werte gelten jedoch nur für das vorher unverformte Material mit geringer Versetzungsdichte. Während der zyklischen Verfestigung steigt die Versetzungsdichte an. Die für das Abgleiten notwendigen Schubspannungen steigen proportional zur Wurzel aus der Versetzungsdichte [Vol89]. Man erhält also für die kritische Spannung zum Beginn der plastischen Verformung

$$\sigma_{krit} = \frac{\tau_{krit}}{\mu} = \frac{\tau_{krit,0}}{\mu} \sqrt{\frac{\rho}{\rho_0}} \quad (3.15)$$

Durch die unterschiedliche Orientierung der Körner unterscheiden sich die kritischen Spannungen der Körner.

Im Spannungs-Dehnungs-Diagramm läuft dann ein Verformungszyklus folgendermaßen ab (siehe Abb. 3.7): Bei einer Spannung von 0 und Dehnung von 0 startend

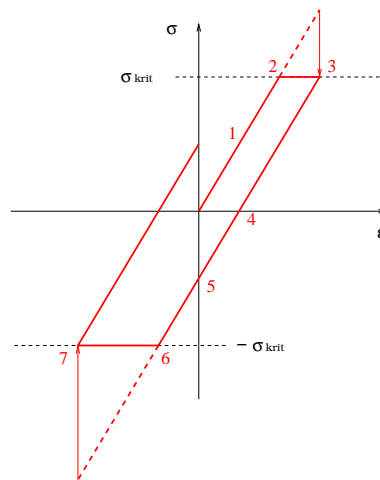


Abbildung 3.7: Zyklische Spannungs-Dehnungs-Kurve eines Korns (vereinfachte Hysteresekurve), wenn ab einer kritischen Spannung  $\sigma_{krit}$  die Dehnung nur noch rein plastisch durch Abgleitung stattfindet. Die Nummern werden im Text erklärt.

folgt die Kurve erst dem Hookschen Gesetz, sie ist eine Gerade mit dem E-Modul als Steigung (1). Ist die kritische Spannung erreicht (2), erhöht sich die Spannung nicht weiter, die Dehnung steigt aber noch bis zum von außen vorgegebenen Wert an (3). In diesem Bereich ist die Kurve eine Gerade mit Steigung 0. Nun wird die

Dehnung auf den Wert 0 und dann auf den maximal negativen Wert gesenkt. Bei einer Dehnung von 0 hat die Spannung einen endlichen negativen Wert (5). Noch vor Erreichen der maximal negativen Dehnung erreicht die Spannung wieder den kritischen Spannungswert (6). Hier erhöht sich die Spannung wieder nicht weiter, die Verformung geschieht als reine plastische Verformung durch Abgleitung (7). Danach wird wieder zurück bis zur maximal positiven Dehnung gedehnt. Das Ergebnis ist eine eckige Hysteresekurve.

Im Modell wird nun vereinfachend angenommen, dass sich die Längen der Körner gemäß dem Hookschen Gesetz, das heißt linear-elastisch, einstellen. Dann wird die aus dieser Dehnung resultierende Spannung mit dem Hookschen Gesetz berechnet. Übersteigt diese in einem Korn die kritische Spannung, so wird die berechnete Spannung ignoriert und die Spannung in diesem Korn auf den kritischen Wert gesetzt. Verformt man nun eine Kette von Körnern plastisch und trägt den Mittelwert der Spannungen in den einzelnen Körnern gegen die Gesamtdehnung auf, so erhält man eine abgerundete Hysteresekurve (siehe Abb. 3.8 - 3.10).

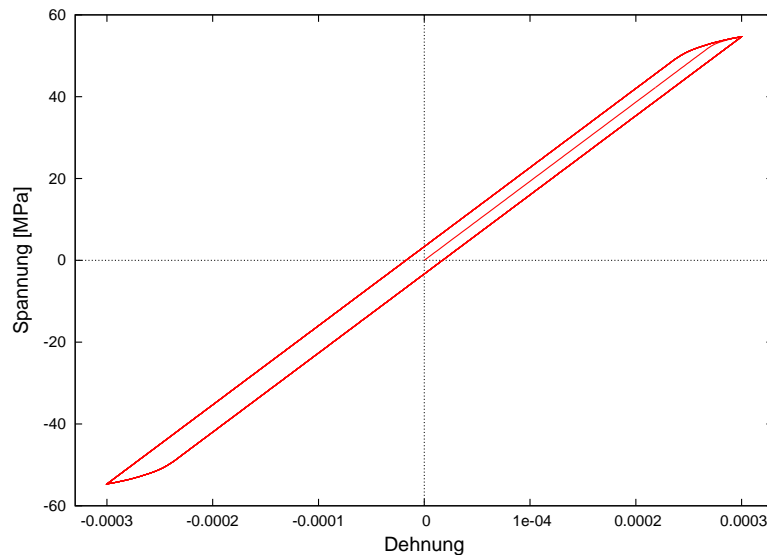


Abbildung 3.8: Spannungs-Dehnungs-Kurve vieler Körner unter zyklischer Belastung für die Dehnung 0,03%. Da alle Körner auf Grund der unterschiedlichen Orientierungen verschiedene kritische Spannungen und außerdem verschiedene E-Moduln haben, ist die Kurve runder. Zur schöneren Darstellung wurden für eine Sinusperiode 80 Zeitschritte verwendet.

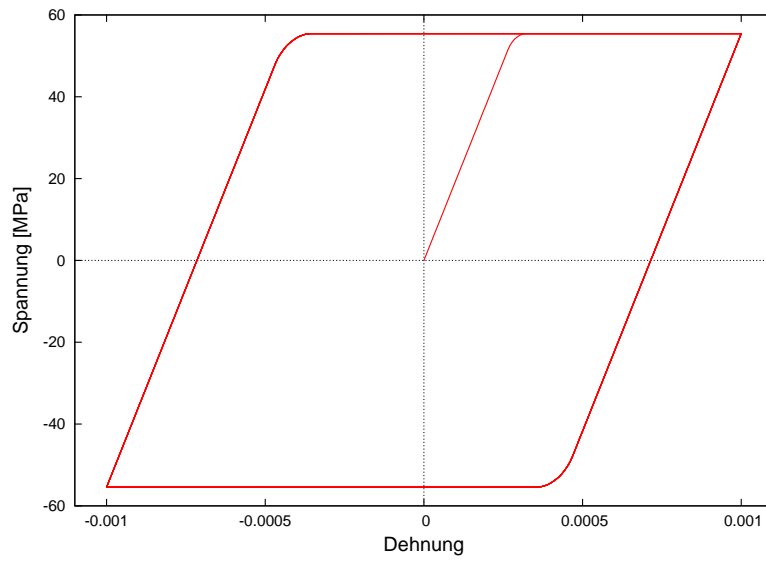


Abbildung 3.9: Vgl. Abb. 3.8. Dehnungsamplitude 0,1%.

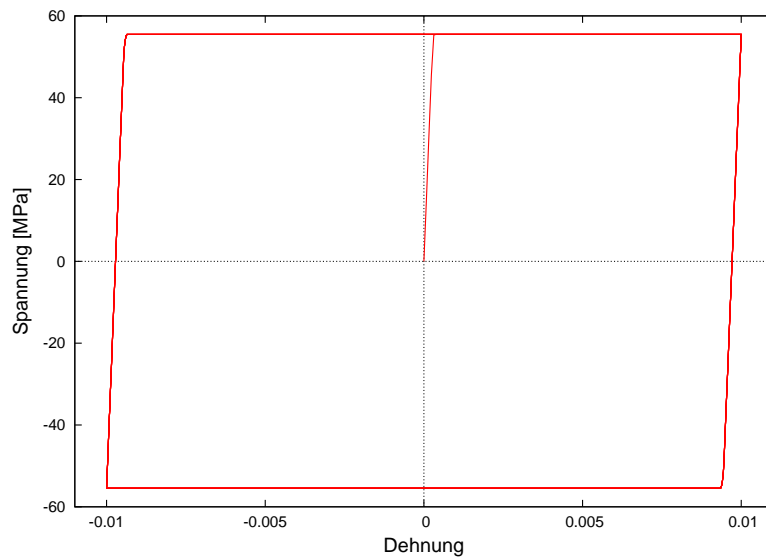


Abbildung 3.10: Vgl. Abb. 3.8. Dehnungsamplitude 1%.

## 3.6 Schädigung

Versetzungen bestimmen das Verhalten eines Festkörpers unter zyklischer Belastung. Ihre Anzahl steigt durch die Bildung von Versetzungsquellen durch Wechselwirkung von Versetzungen mit Hindernissen, die schon vor Beginn der Belastung vorhanden sind oder die durch einen Wechsel des aktiven Gleitsystems entstehen. In diesem Modell wird nur die Bildung von Versetzungsquellen nach einem Gleitsystemwechsel betrachtet. In einer Erweiterung des Modells sollten jedoch auch die anderen Mechanismen in Betracht gezogen werden, da Gleitsystemwechsel bei Dehnungen um 1% nur in wenigen Körnern stattfinden.

Im Modell ist die Korneigenschaft der Schädigung als Verhältnis der momentanen Versetzungsdichte zur Versetzungsdichte des ausgeheilten Festkörpers definiert

$$S = \frac{\rho}{\rho_0} \quad (3.16)$$

Die Versetzungsdichte des ausgeheilten Festkörpers hat etwa den Wert  $\rho_0 = 10^{10}\text{m}^{-2}$  bis  $10^{11}\text{m}^{-2}$ , extrem stark geschädigtes Material kurz vor dem Bruch hat eine Versetzungsdichte der Größenordnung  $\rho_{max} = 10^{16}\text{m}^{-2}$ . Der Parameter  $S$  sollte also Werte zwischen 1 und  $10^6$  annehmen.

Für das Modell wurde nun eine Übergangsfunktion gesucht, die beim Schneiden von Versetzungen die Versetzungsdichte erhöht. In einem ersten Ansatz wurde eine Funktion gewählt, die beim Wechsel des aktiven Gleitsystems die Schädigung mit einem Faktor  $f$  multipliziert.

$$S'(i) = S(i) \cdot f. \quad (3.17)$$

Die Wahl der Übergangsfunktion und des Werts für  $f$  ist willkürlich, trotzdem liefert sie schon gute Ergebnisse. Denn nur durch diese Schädigungsfunktion und durch das Eindrehen der Körner durch Abgleitung und den damit verbundenen Wechsel der aktiven Gleitsysteme erreicht man eine Verfestigung, d.h. die Spannungsamplitude steigt von einem anfänglichen Wert innerhalb der ersten 10000 Zyklen auf einen deutlich höheren Sättigungswert. Eine stationäre Spannung wird im Experiment nach 5000 bis 10000 Zyklen beobachtet [Win74].

Bis hierhin hängt der Zustand eines Kornes im nächsten Zeitschritt teilweise vom Zustand aller anderen Körner im vorherigen Zeitschritt (bei der Berechnung der Längen durch elastische Verformung, Abschnitt 3.3) und teilweise nur vom Zustand des Kornes selber im vorherigen Zeitschritt ab (bei der Berechnung der plastischen Deformation, dem Eindrehen des Kornes und der Versetzungsmultiplikation nach einem Gleitsystemwechsel). Das Prinzip des zellulären Automaten wurde, außer im granularen/zellulären Aufbau des Gitters, noch nicht verwendet. Die Wechselwirkung mit den Nachbarn muss aber hinzugefügt werden, da sich sonst *weak spots* nicht ausbreiten können. Weak spots werden Stellen genannt, die schon nach wenigen Zyklen (etwa 30 Zyklen) eine deutlich höhere Fehlstellendichte als der Rest des untersuchten Materials haben. Aufnahmen der Bonner Positronen Mikrosonde zeigen, dass sich von einer solchen Schwachstelle aus mit wachsender Zyklenzahl Gebiete mit erhöhter Fehlstellendichte ausbreiten [Haa06] (siehe Abb. 3.11).

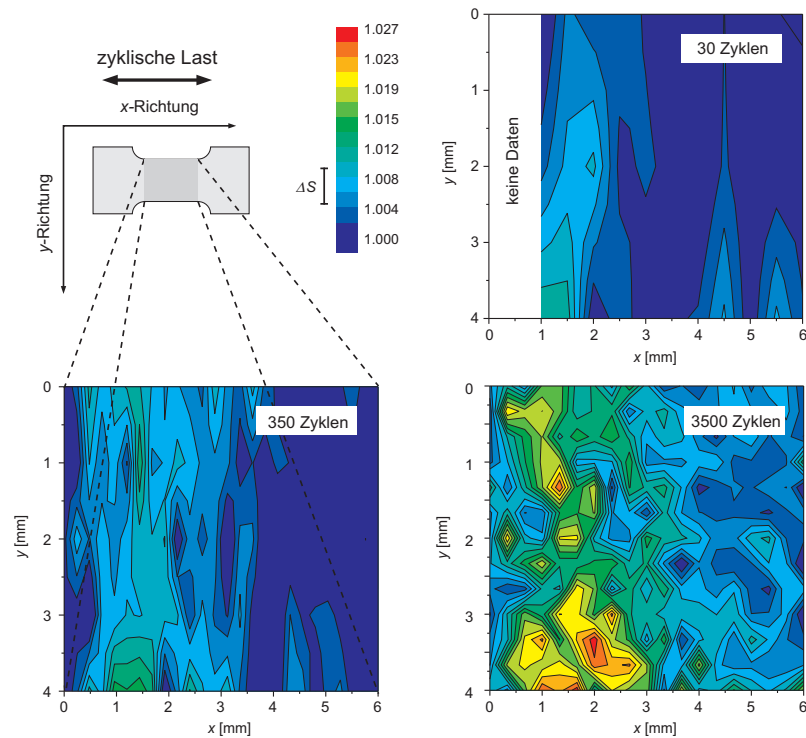


Abbildung 3.11: Falschfarbendarstellung von Aufnahmen einer zyklisch belasteten C45E-Probe mit der Bonner Positronen-Mikrosonde. Rote Bereiche zeigen einen hohen S-Parameter an, dunkelblaue Bereiche haben den S-Parameter des unverformten Material. Obwohl im untersuchten Bereich die Spannung gleichmäßig verteilt ist, gibt es einen Bereich, der schon nach 30 Zyklen eine höhere Fehlstellendichte aufweist. Von dieser Schwachstelle breitet sich die erhöhte Fehlstellendichte auf die umgebenden Bereiche aus. [Haa06]

Ein erster Ansatz zur Nachbarwechselwirkung beruht auf dem Prinzip, dass sich Versetzungen an den Korngrenzen aufstauen und dort die Spannung durch die Störungen im Gitter steigt. Ist die Spannung zu groß, wird sie abgebaut, indem im Nachbarkorn Versetzungen erzeugt werden. Dabei wird zufällig (und symmetrisch) entschieden, ob sie nach rechts oder links weitergegeben wird. Die Übergangsfunktion lautet

$$\begin{aligned}
 S'(i) &= f \cdot S(i) \\
 &+ p \Theta(S(i-1) - S_{krit}) (S(i-1) - S_{krit}) \\
 &\quad \text{falls der linke Nachbar Schädigung nach rechts übergibt} \\
 &+ p \Theta(S(i+1) - S_{krit}) (S(i+1) - S_{krit}) \\
 &\quad \text{falls der rechte Nachbar Schädigung nach links übergibt} \\
 &- p q \Theta(S(i) - S_{krit}) (S(i) - S_{krit}) .
 \end{aligned} \tag{3.18}$$



Dabei ist  $\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } x < 0 \\ 1 & \text{falls } x \geq 0 \end{cases}$  die Stufenfunktion.

Übersteigt in einem Nachbarkorn die Versetzungsdichte einen kritischen Wert  $S_{krit}$ , so wird ein Anteil  $p$  der überschüssigen Versetzungsdichte an eines der Nachbarkörner transferiert. Übersteigt im Korn selber die Versetzungsdichte den kritischen Wert, so werden Versetzungen in einem Nachbarkorn erzeugt, im Korn selber wird Spannung abgebaut und die Versetzungsdichte sinkt um einen Anteil  $q$ .

Die Übergangsfunktion und die Wahl der Parameter sind wieder willkürlich. Weitere Mechanismen der Nachbarwechselwirkung werden nicht berücksichtigt. In einem erweiterten Modell sollten sie in Betracht gezogen werden. Bisher werden aber durch Gleitsystemwechsel in einigen wenigen Körnern (etwa 1 - 3 %) zu Beginn höhere Schädigungen erzeugt. Von diesen Körnern breitet sich dann im Laufe der Zeit durch die oben beschriebene Nachbarwechselwirkung die Schädigung auf die Nachbarkörner aus. Ein Beispiel für diese Weitergabe der Schädigung an die Nachbarkörner ist in Abb. 3.12 zu sehen.

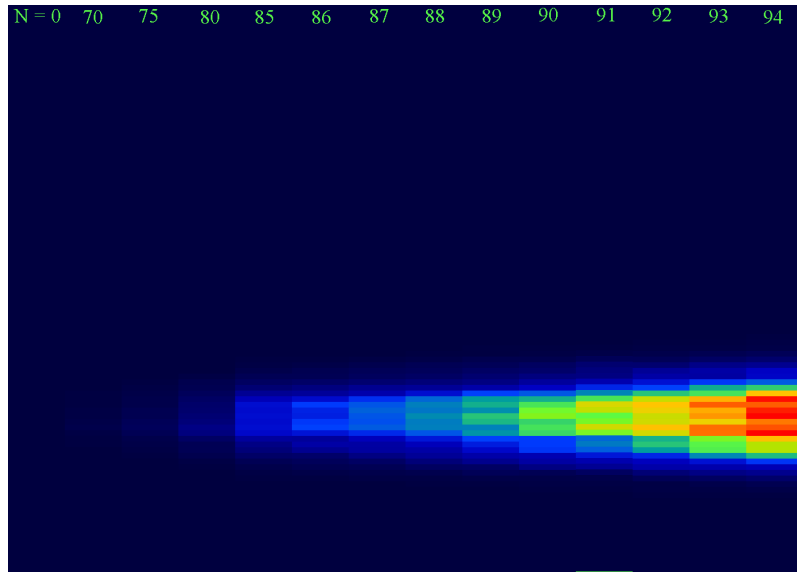


Abbildung 3.12: Ausbreitung der Schädigung von einem anfänglich durch Zufall schwächeren Korn auf seine Nachbarn. Dunkelblau dargestellte Felder haben eine Schädigung  $S = 1$ , tiefrote eine Schädigung von  $S = 10^6$ . Innerhalb weniger Zyklen steigt die Schädigung stark an. Die Wahl der Parameter (Sinusamplitude:  $\varepsilon_{max} = 0,5\%$ ,  $f = 2$ ,  $S_{thr} = 50$ ,  $p = 0,05$ ,  $q = 0,5$ ) begünstigt dieses schnelle Materialversagen. Es gibt nicht die physikalische Wirklichkeit wieder, illustriert aber die Nachbarwechselwirkung.

### 3.7 Ergebnisse

Abb. 3.13 zeigt die experimentelle Verfestigungskurve von Nickel. Mit dem Sachs-Faktor  $M = 2,24$  wurde Zugspannung und plastische Dehnung in Nickel-Polykristallen aus Schubspannung und Abgleitung berechnet. Der Bereich der plastischen Dehnung, der mit dem Modell simulierbar ist ( $\varepsilon_{pl} > 0,005$ ), liegt im Bereich C der zyklischen Spannungs-Dehnungs-Kurve, also nach dem Plateau-Bereich B. Die Mechanismen, die zum Plateau führen (Persistente Gleitbänder [Win74]), werden im Modell aber nicht berücksichtigt. Es lässt sich so kein direkter Vergleich ziehen, aber es lässt sich die Plateau-Spannung als Mindestspannung für den Sättigungswert der Spannung angeben. Diese liegt bei ungefähr 110 MPa.

Wählt man in der Simulation die Parameter  $\varepsilon_{max} = 0,01$ ,  $f = 2$ ,  $S_{thr} = 50$ ,  $p = 0,05$ ,  $q = 0,99$ , so erhält man in einem Drittel der Fälle eine Kurve wie sie in Abb. 3.14 zu sehen ist. In der Hälfte der Fälle bricht die Probe in den ersten Zyklen, d.h. in mindestens einem Korn wird eine Versetzungsdichte von  $10^6 \rho_0$  überschritten; in den restlichen Fällen ist die Verfestigung sehr gering, da keine Gleitsystemwechsel stattfinden. Da sich jedoch auch dann durch Eindrehen die Orientierung ändert und damit über die Schmidfaktoren die kritische Spannung zur Abgleitung, kommt es auch hier zu einer sehr leichten Verfestigung.

Es wird wie im Experiment (Abb. 3.13) die Sättigungsspannung nach  $10^4$  Zyklen erreicht. Die geforderte Mindestspannung von 110 MPa wird erreicht. Das Zustandekommen des flachen Teils der Kurve zwischen den Zyklen 100 und 1000 muss allerdings noch untersucht werden.

Im Modell gibt es folgende Parameter, die variiert werden können:

- Die Amplitude der sinusförmigen Auslenkung  $\varepsilon_{max}$ . Sie sollte mindestens 0,005 der Gesamtlänge betragen, sonst ist keine Verfestigung sichtbar. Eine Verbesserung des Modells sollte auch für wesentlich kleinere Auslenkungen Verfestigung voraussagen.
- Den Faktor  $f$ , um den beim Gleitsystemwechsel die Schädigung erhöht wird. Hier sind, je nach Einstellung der anderen Parameter, Werte zwischen 1,001 und 2 sinnvoll.
- Die Schädigung  $S_{krit}$ , ab der im Nachbarkorn Versetzungen erzeugt werden. Dieser Parameter ist im jetzigen Modell häufig sehr niedrig gewählt, z. B.  $S_{krit} = 50$ , damit überhaupt eine Nachbarwechselwirkung zu stande kommt.
- Den Anteil  $p$  der überzähligen Schädigung, der in diesem Fall auf das Nachbarkorn übertragen wird. Üblicherweise hat dieser Parameter den Wert 0,5% oder 5%.
- Den Anteil  $q$ , um den im Korn die Schädigung reduziert wird. Dieser Parameter ist sehr häufig groß, also 0,9 oder sogar 0,99, damit ein exponentielles Wachsen der Schädigung (was bei häufigem Gleitsystemwechsel und großem  $f$  vorkommt) gemindert wird.

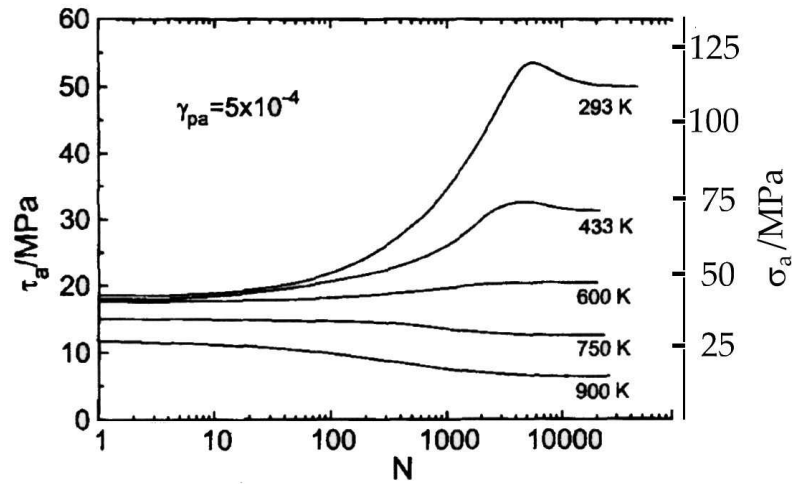


Abbildung 3.13: Verfestigungskurve von Nickel bei einer plastischen Ableitung von  $5 \cdot 10^{-4}$  und zyklische Spannungs-Dehnungs-Kurve von Nickel bei verschiedenen Temperaturen [Bre97]. Es wurde mit dem Sachs-Faktor  $M = 2,24$  eine Umrechnung auf Zugspannung und plastische Dehnung von Nickel-Polykristallen vorgenommen.

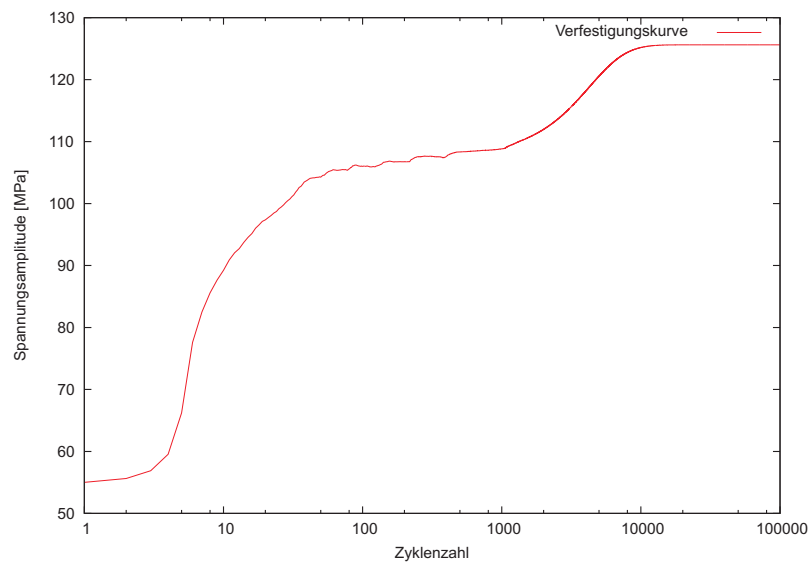


Abbildung 3.14: Mit Hilfe des Modells berechnete Verfestigungskurve. Die Parameter sind  $\varepsilon_{max} = 0,01$ ,  $f = 2$ ,  $S_{thr} = 50$ ,  $p = 0,05$ ,  $q = 0,99$ .

Für verschiedene Parametersätze wurden für 400 Proben  $10^5$  Zyklen der Verformung durchlaufen, um den Einfluss der Parameter auf die Verfestigung zu testen. Wenn es nicht in den ersten  $10^5$  Zyklen zum Bruch kommt, d.h. wenn die Schädigung in keinem Korn einen Wert von  $10^6$  überschreitet, so wird die Spannung bei Zyklus  $10^5$  als Sättigungsspannung notiert.

Zunächst wurde die Nachbarwechselwirkung nicht mit einbezogen (der Transfer-Parameter  $p$  ist 0; die Wahl von  $S_{thr}$  und  $q$  ist daher irrelevant.)

Wird der Parameter  $f$  variiert (Abb. 3.15), so streut die erreichte Sättigungsspannung für höheres  $f$  stärker. Das erklärt sich dadurch, dass die Häufigkeit der Gleitsystemwechsel zufällig ist und bei höherem  $f$  dieser zufällige Aspekt stärker ins Gewicht fällt.

Für höhere Amplituden der sinusförmigen Auslenkung (Abb. 3.16) finden in immer mehr Körnern Gleitsystemwechsel statt. Das sieht man daran, dass sich der Schwerpunkt zu höheren Sättigungsspannungen verschiebt.

Ist die Nachbarwechselwirkung ausgeschaltet, so bricht keine Probe vor Erreichen des  $10^5$ -ten Zyklus. Nimmt man die Nachbarschaftswechselwirkung hinzu, so gibt es je nach Parameterwahl einen zum Teil sehr großen Anteil gebrochener Proben (bis zu 80%).

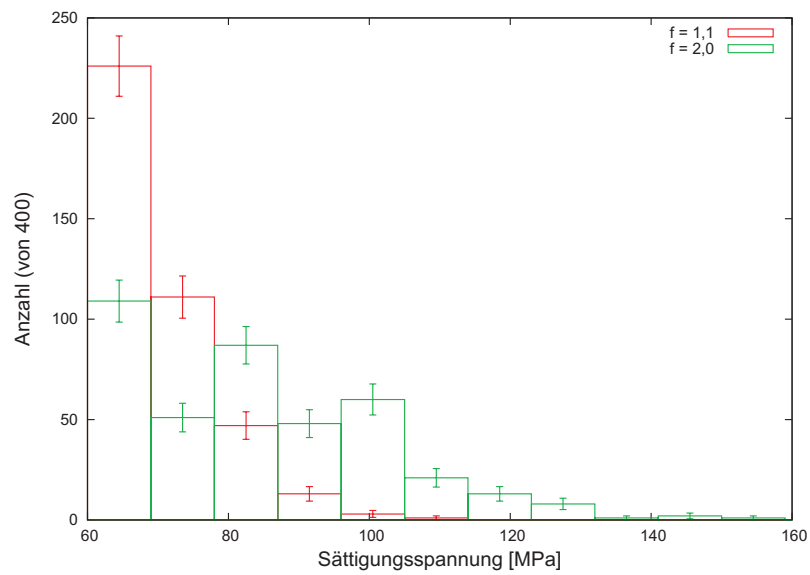


Abbildung 3.15: Die Entwicklung von 400 Proben je Parametersatz wurde bis Zyklus  $10^5$  simuliert. Hier wird die Häufigkeit der dabei erreichten Sättigungsspannungen dargestellt. Hier wurde der Parameter  $f$  variiert. Die anderen Parameter waren in beiden Parametersätzen gleich:  $\varepsilon_{max} = 0,01$ ,  $S_{thr}$  irrelevant,  $p = 0$ ,  $q$  irrelevant

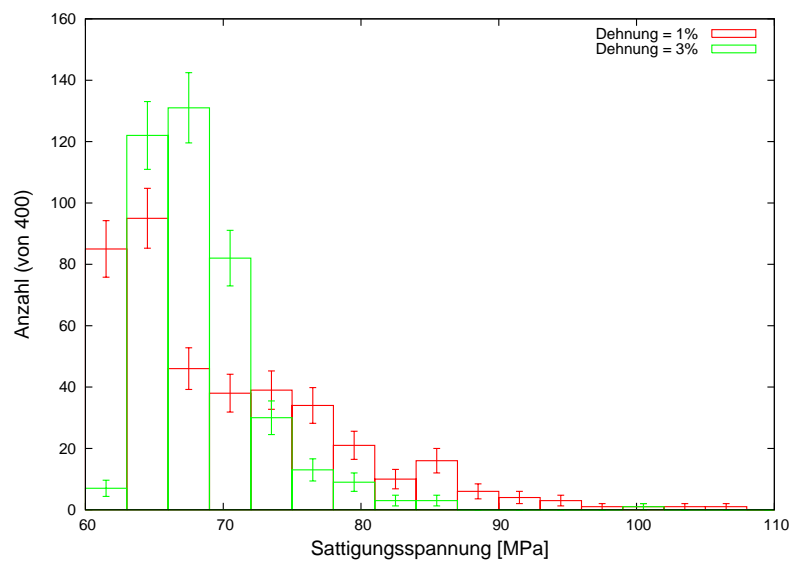


Abbildung 3.16: Vgl. 3.15. Hier wird die Amplitude der Auslenkung  $\varepsilon_{max}$  variiert. Werte der anderen Parameter:  $f = 1,1$ ,  $S_{thr}$  irrelevant,  $p = 0$ ,  $q$  irrelevant

Die Nachbarwechselwirkung kann durch drei Parameter geändert werden: Ihre Stärke  $p$ , die Schwelle  $S_{thr}$ , ab der sie einsetzt, und ihre "Dämpfung"  $q$ .

Wird ein größerer Anteil der überschüssigen Schädigung an ein Nachbarkorn übertragen (größeres  $p$ ), so nimmt die Streuung der erreichten Sättigungsspannungen zu. Außerdem werden höhere Sättigungsspannungen erreicht.

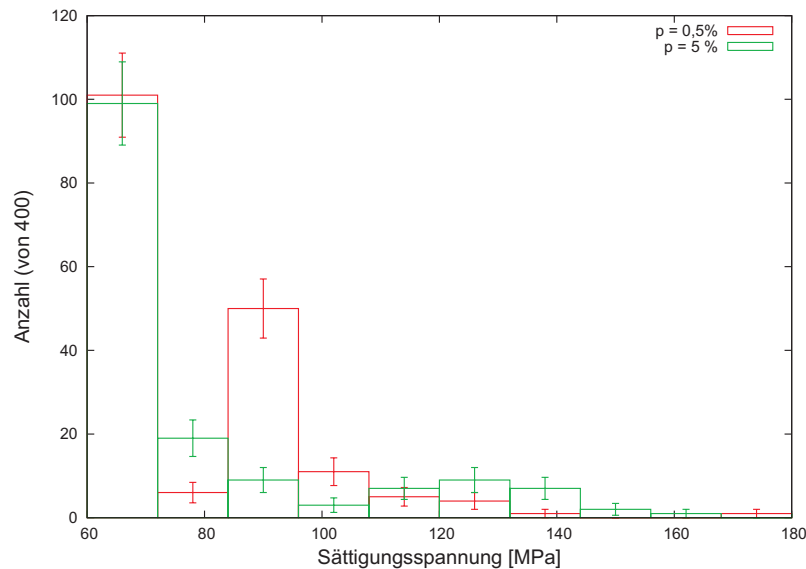


Abbildung 3.17: Vgl. 3.15. Hier wird der Übertrag  $p$  an überschüssiger Schädigung an die Nachbarkörner variiert. Werte der anderen Parameter:  $\varepsilon_{max} = 0,01$ ,  $f = 2$ ,  $S_{thr} = 50$ ,  $q = 0,99$ . Von 400 Proben überleben bis Zyklus  $10^5$  bei  $p = 0,5\%$  ( $178 \pm 13$ ) Proben und bei  $p = 5\%$  ( $156 \pm 12$ ) Proben.

Der Parameter  $q$  dient vor allem dazu, das exponentielle Anwachsen der Schädigung, welches bei häufigen Gleitsystemwechseln durch Multiplikation der Schädigung mit  $f > 1$  stattfindet, zu dämpfen. In Abb. 3.18 sieht man den Effekt eines zu kleinen Werts für  $q$ : Deutlich mehr Stücke brechen in den ersten 100.000 Zyklen und sind daher nicht im Diagramm verzeichnet (Abb. 3.19). Man sieht außerdem, dass es bei niedrigem  $q$  keine Sättigungsspannungen im mittleren Bereich (80 - 100MPa) gibt. Finden also viele Gleitsystemwechsel statt, so ist ein exponentielles Anwachsen der Schädigung bis zum Bruch nicht mehr aufzuhalten.

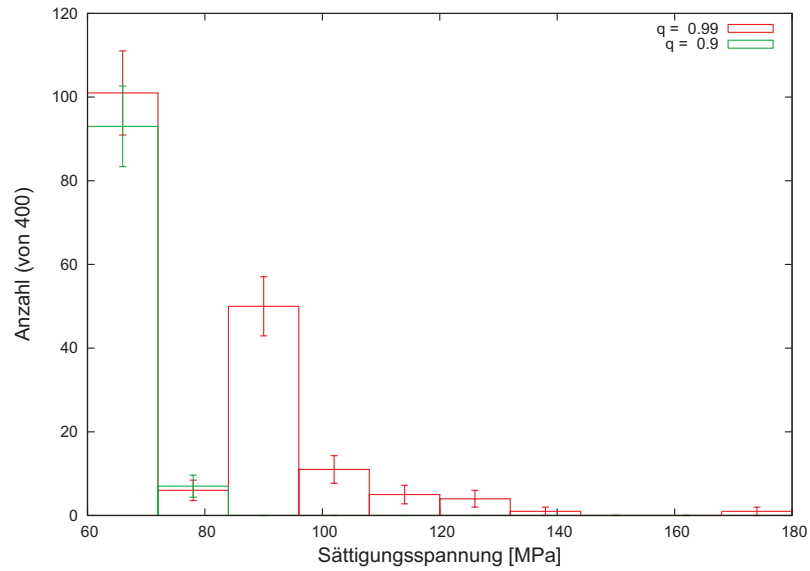


Abbildung 3.18: Vgl. 3.15. Hier wird der Anteil  $q$  der überschüssigen Schädigung, die durch Übertrag an den Nachbarn abgebaut wird, variiert. Werte der anderen Parameter:  $\varepsilon_{max} = 0,01$ ,  $f = 2$ ,  $S_{thr} = 50$ ,  $p = 0,05$ . Zum Überleben der Proben siehe die nachfolgende Abbildung 3.19

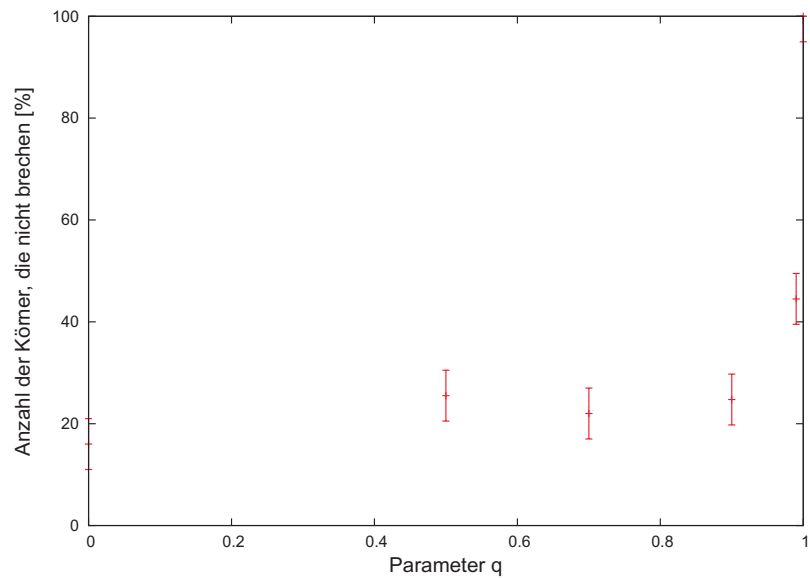


Abbildung 3.19: Prozentsatz der nicht vor dem  $10^5$ -ten Zyklus gebrochenen Proben in Abhängigkeit vom Parameter  $q$ . Wie man sieht, sollte  $q$  zwischen 0,99 und 1 gewählt werden.

Ist die Barriere für den Übertrag von Schädigung auf den Nachbarn zu klein ( $S_{thr} = 5$ ), so kommt es in deutlich mehr Proben zum Bruch. Ist die Schwelle hoch genug, so sorgt eine niedrigere Schwelle dafür, dass in den Proben, die sich auch durch Nachbarwechselwirkung verfestigen, höhere Sättigungsspannungen erreicht werden können.

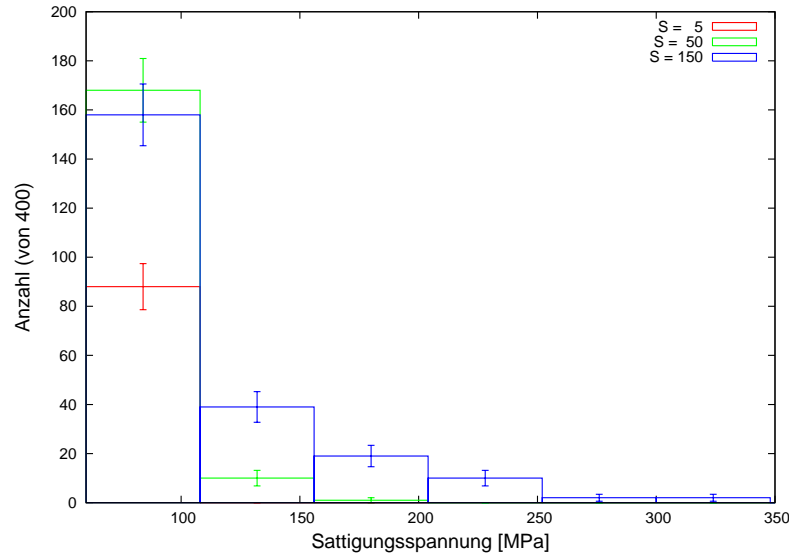


Abbildung 3.20: Vgl. 3.15. Hier wird die Höhe der Schwelle  $S_{thr}$  zum Übertrag von Schädigung auf den Nachbarn, variiert. Werte der anderen Parameter:  $\varepsilon_{max} = 0,01$ ,  $f = 2$ ,  $p = 0,05$ ,  $q = 0,99$ . Von 400 Proben überleben bis Zyklus  $10^5$  bei  $S_{thr} = 5$  ( $87 \pm 9$ ) Proben, bei  $S_{thr} = 50$  ( $178 \pm 13$ ) Proben und bei  $S_{thr} = 150\%$  ( $229 \pm 15$ ) Proben.

Insgesamt kommt es durch das Eindrehen einzelner Körner also zu Gleitsystemwechseln und dadurch zu zyklischer Verfestigung. Die Sättigungsspannung aus der Simulation sind vergleichbar mit den experimentellen Werten (Abb. 3.13) und werden nach etwa der gleichen Zyklenzahl erreicht. Die Form der Sättigungskurve und der zum Teil sehr hohe Anteil gebrochener Proben stimmen jedoch nicht mit dem Experiment überein.

Das sollte auch nicht so sein, da hier nur der Schädigungsmechanismus nach Gleitsystemwechsel und eine Nachbarwechselwirkung betrachtet werden. Der wesentlich wichtigere Schädigungsmechanismus durch Wechselwirkung der Versetzungen mit den Hindernissen, die natürlicherweise in jedem Korn vorhanden sind, ist noch nicht in Betracht gezogen worden. Das Modell muss also noch deutlich erweitert und verbessert werden.



# Kapitel 4

## Ausblick

### 4.1 Erweiterung der Simulation

Die beiden wichtigsten Punkte zur Verbesserung des Modells sind die Verbesserung der Übergangsfunktionen und die Erweiterung der Simulation auf zwei bzw. drei Dimensionen. Es müssen Übergangsfunktionen gesucht werden, die nicht nur passable oder gute Ergebnisse liefern, sondern physikalisch begründbar sind. Die Erweiterung in mehrere Dimensionen ist nicht ein einfaches Hinzufügen weiterer Körner und Umdefinition des Begriffs Nachbarschaft, sondern wirft einige neue Fragen auf. Die Simulation der Rissausbreitung wird z. B. erst durch mehrere Dimensionen möglich.

#### 4.1.1 Mehrere Dimensionen

Bei der Erweiterung auf zwei bzw. drei Dimensionen müssen neue Zellen hinzugefügt werden und die Definition der Nachbarschaft von den zwei Zellen rechts und links auf die 4 bzw. 6 angrenzenden Zellen erweitert werden.

Es ist sinnvoll, in der Schädigungsübertragungsfunktion alle Raumrichtungen gleichberechtigt zu behandeln. Im ersten Schritt wird in  $x$ -Richtung wie in Kapitel 3 beschrieben elastisch und plastisch verformt. Die Längenänderungen in  $y$ - bzw.  $y$ - und  $z$ -Richtung wird durch Volumenerhaltung in jedem Korn berechnet. In der dreidimensionalen Simulation kann die Längenänderung gleichmäßig auf  $y$ - und  $z$ -Richtung verteilt werden:

$$l'_y(i) = \frac{V}{\sqrt{l'_x(i)}} = l_y(i) \sqrt{\frac{l_x(i)}{l'_x(i)}}$$
$$l'_z(i) = \frac{V}{\sqrt{l'_x(i)}} = l_z(i) \sqrt{\frac{l_x(i)}{l'_x(i)}}$$

Wird die Richtung der Ableitung bestimmt, kann dann die Längenänderung unter  $y$ - und  $z$ -Richtung realistischer aufgeteilt werden. Dazu müssen noch Formeln ent-

wickelt werden und es muss getestet werden, ob die Vorteile dieser realistischeren Aufteilung die längeren Laufzeiten des Programms rechtfertigen.

Durch die Verformung der Nachbarkörner in  $y$ - und  $z$ -Richtung entstehen mehrachsige Spannungszustände. In einer einfachen Erweiterung des Modells verformen sich in der  $yz$ -Ebene benachbarte Zellen unabhängig voneinander, denn die Längen hängen nur von Zellen der selben Reihe in  $x$ -Richtung ab. Um den Zusammenhalt der Körner zu gewährleisten, müssen in der  $yz$ -Ebene weitere Spannungen auftreten. Zur Berechnung dieser Spannungen müssen Formeln entwickelt werden und der Effekt dieser mehrachsigen Spannungszustände auf die Realitätsnähe und Laufzeit der Simulation ermittelt werden.

### 4.1.2 Zwei Orientierungswinkel

Eine weitere Verbesserung des Modells ist die Erweiterung der Orientierung von einem auf zwei Parameter. Damit werden alle 12 Gleitsysteme des kfz-Gitters in die Simulation miteinbezogen. Das Problem außer der längeren Rechenzeit für die zusätzlich auszurechnenden Winkelfunktionen ist die Tatsache, dass die Veränderung der Winkel durch Abgleitung und Eindrehen sich nicht mehr so einfach berechnen und nähern lässt, wie das in Abschnitt 3.4 beschrieben wurde.

### 4.1.3 Substruktur der Körner: Persistente Gleitbänder

Bei der Betrachtung von zyklischen Spannungs-Dehnungs-Kurven (cyclic stress strain curve, CSSC) fällt ein Plateaubereich bei mittleren plastischen Dehnungen auf. Dieser rührt daher, dass ab den Dehnungen am Beginn des Plateaubereichs sich sogenannte persistente Gleitbänder (persistent slip band, PSB) bilden [Win74]. Die plastische Verformung findet nur noch in diesen Bändern statt, nicht mehr in der umgebenden Matrix. Im Bereich des Plateaus steigt nun die stationäre Spannung nicht weiter, weil nach und nach der Anteil der Bänder am Gesamtvolumen gesteigert wird. Erst wenn dieser Anteil 100% des Volumens einnimmt, wird die stationäre Spannung weiter gesteigert. Um dieses Plateau der CSSC simulieren zu können, bedarf es der Einbeziehung einer Substruktur in den Körnern.

### 4.1.4 Definition von Abbruchbedingungen

Ein weiterer wichtiger Punkt, um den das Modell erweitert werden muss, ist die Festlegung von Abbruchbedingungen. Für einen intragranularen Riss, also einen Riss quer durch ein Korn, muss lediglich eine Grenze im Parameter  $S$  festgelegt werden, also die Versetzungsdichte, die ein Korn zum Reißen bringt. Beim intergranularen Riss, einem Riss entlang einer Korngrenze zwischen zwei Körnern hindurch, ist die Sache schwieriger. Ein intergranularer Riss kann in einem Modell dadurch repräsentiert werden, dass sich zwei benachbarte Körner zu weit voneinander entfernen. Im aktuellen Modell gibt es noch keine Möglichkeit für die Körner, sich voneinander

zu entfernen, da die Position eines Kornes als Summe der Längen der Körner mit kleinerem Index definiert ist. Hier muss also noch eine entscheidende Änderung am Modell gemacht werden.

Damit verbunden ist auch die Simulation nach der Bildung eines Mikrorisses an einer Stelle. Nun haben die anderen Körner in der selben  $yz$ -Scheibe den Ausfall dieser einen Verbindung aufzufangen. Die Verringerung der Querschnittsfläche führt bei gleicher äußeren Kraft zu einer erhöhten Spannung in den anderen Körnern der selben  $yz$ -Scheibe. Dies führt zu einer schnelleren Schädigung. Es wird interessant sein zu sehen, ob das dann entwickelte Modell in der Lage ist, die Rissausbreitung zu beschreiben.

#### 4.1.5 Andere Materialien

Eine weitere Erweiterungsmöglichkeit ist die Hinwendung zu technisch interessanteren Materialien als reinem Nickel. Reine Metalle werden selten verwendet, technisch interessant sind Legierungen, die häufig nicht einphasig sind. Interessant wäre es insbesondere, Stähle zu betrachten. An welchen Stellen (außer den Gleitsystemen und Materialkonstanten) das bestehende Modell abzuändern ist, ist noch nicht abzusehen.

## 4.2 Experimentelle Bestätigung

Nach der Erweiterung auf zwei Dimensionen und der Verbesserung der Übergangsfunktionen wird man einen direkten Vergleich mit dem Experiment wagen dürfen. Mit der Bonner Positronen-Mikrosonde können zweidimensionale Aufnahmen der Fehlstellendichte in unterschiedlich stark und lange ermüdeten Nickelproben mit einer Ortsauflösung von  $< 50\mu\text{m}$  gemacht werden. Zeigen sich ähnliche Strukturen und Entwicklungen, so bestätigt das die Idee des Modells. Dann kann ein Vergleich zwischen dem  $S$ -Parameter der Mikrosondenuntersuchung und dem Schädigungsparameter der Simulation gezogen werden.

Ein Vergleich mit dem Experiment ist aber erst sinnvoll, wenn die Simulation zweidimensional arbeitet. Es gibt zwar Materialien, die als eindimensionale Kette betrachtet werden können, z. B. ein ausgeheilter Kupferdraht, der eine sogenannte Bambusstruktur bildet. Ein Draht lässt sich aber nur schwer in einer zyklischen Verformungsmaschine verformen, denn in den Kompressionsphasen würde er wohl statt sich zusammendrücken zu lassen seitlich ausbrechen und sich verbiegen. Daher muss vor dem Vergleich mit dem Experiment erst die Simulation erweitert werden.



# Kapitel 5

## Zusammenfassung

Es wurde ein eindimensionales, granulares Modell der zyklischen Schädigung von Werkstoffen entwickelt und implementiert. Die Zellen des Modells entsprechen den Körnern eines Festkörpers, die Eigenschaften eines Kornes werden durch die vier skalaren Parameter Länge, E-Modul, Orientierung und Schädigung beschrieben. Die Verformung erfolgt dehnungskontrolliert und ist sinusförmig. Das Modell verwendet eine nicht-lokale Funktion zur Berechnung der Längen der einzelnen Körner nach dem Hookschen Gesetz. Die plastische Verformung wird durch Korrekturen in der Spannung nachträglich hinzugerechnet.

Die Orientierung der Körner spielt eine wesentliche Rolle. Über den Schmidfaktor bestimmt sie die kritische Spannung mit, ab der plastische Verformung stattfindet. Nach der Abgleitung kann in wenigen Körnern durch Eindrehen eines Kornes und Änderung der Orientierung ein anderes Gleitsystem aktiviert werden. Das führt durch Versetzungsmultiplikation zur Erhöhung der Schädigung. Im entwickelten Modell ist die Orientierung auf einen Winkel reduziert. Dadurch können je 4 Gleitsysteme nicht mehr voneinander unterschieden werden und es können keine Schneidprozesse zwischen ihnen stattfinden.

Der Schädigungsparameter entspricht der momentanen Versetzungsdichte normiert auf die Versetzungsdichte im ausgeheilten Zustand. Es gibt im Modell zwei Mechanismen, die zur Erhöhung der Versetzungsdichte beitragen: Zum einen erhöht sich die Versetzungsdichte, wenn in einem Korn das aktive Gleitsystem gewechselt wird, denn beim Schneiden von Versetzungen entstehen Versetzungsquellen. Zum anderen werden bei sehr hoher Versetzungsdichte im Nachbarkorn Versetzungen erzeugt und im Korn selber die Versetzungsdichte etwas reduziert. Beide Übergangsfunktionen zur Erhöhung der Schädigung müssen genauer untersucht werden. Es müssen außerdem weitere Mechanismen zur Erhöhung der Schädigung einbezogen werden, da Gleitsystemwechsel bei niedrigen Dehnungen nur in wenigen Körnern vorkommen.

Trotz der vielen Näherungen liefert das Modell schon gute Ergebnisse. Es produziert Hysterese-Kurven im Spannungs-Dehnungs-Diagramm. Schon die unterschiedliche Orientierung der Körner und leicht unterschiedliche E-Moduln zu Beginn der Simulation führen dazu, dass mit dem einfachen Schädigungsmechanismus nach einigen Zyklen wenige Körner deutlich stärker geschädigt sind als die restlichen Körner. In

diesen Körnern steigt die Schädigung und Härte aber nicht bis ins Unendliche, sondern bleibt ab einem gewissen Zeitpunkt stationär. Die Übertragung von Schädigung auf den Nachbarn führt zu einer langsamen Ausbreitung dieser geschädigten Stellen. Diese ermutigenden Ergebnisse und die kurze Laufzeit der Simulation sprechen dafür, dass der Ansatz eines granularen Modells auf der Ebene der Kristallkörner geeignet ist, um die Ermüdung von zyklisch belasteten Werkstoffen zu simulieren. Bis das Modell zur Schadensvorhersage verwendet werden kann, muss aber noch viel getan werden. Zunächst muss das Modell in die zweite Dimension erweitert werden und Bedingungen für einen Riss definiert werden. Ist dies geschehen, so können die Ergebnisse der Simulation direkt mit den Ergebnissen einer noch durchzuführenden Untersuchung von zyklisch belastetem Nickel an der Bonner Positronen-Mikrosonde verglichen werden. Fällt dieser Vergleich nach Einarbeiten von Verbesserungen in das Modell schließlich positiv aus, so kann über andere, technisch interessantere Materialien und kompliziertere Probengeometrien nachgedacht werden. Wenn all diese Überlegungen zu positiven Ergebnissen führen, hat man eine Möglichkeit, Wöhler-Diagramme nur am Computer, ohne Materialverbrauch und in kürzerer Zeit zu erstellen.

# Literaturverzeichnis

- [Abr03] F. F. Abraham, *Adv. Phys.* **52**(2003) 727
- [Ada94] A. Adamatzky, Identifikation of Cellular Automata, Taylor & Francis Ltd., London (1994)
- [Bra72] W. Brandt und R. Paulin, *Phys. Rev. B* **5**(1972) 2430
- [Bre97] J. Bretschneider, C. Hoste und B. Tippelt, *Acta mater.* **45**(1997) 3775
- [Ber70] M. Bertolaccini und A. Dupasquier, *Phys. Rev. B* **1**(1972) 2896
- [Con71] D. Connors, V. Crisp und R. West, *J. Phys. F* **1**(1971) 355
- [Dau74] C. Dauwe, M. Dorikens, L. Dorikens-Vanpraet und D. Seger, *Appl. Phys.* **5**(1974) 117
- [Eic06] Patrick Eich, Diplomarbeit, Universität Bonn (2006)
- [Fra74] W. Frank und A. Seeger, *Appl. Phys.* **3**(1974) 66
- [Gas39] E. Gassner, *Luftwissen* **6**(1939) 61
- [Gre97] H. Greif, M. Haaks, U. Holzwarth, U. Männig, M. Tongbhoyai, T. Wider, K. Maier, J. Bihl und B. Huber, *Appl. Phys. Lett.* **15**(1997) 2115
- [Haa03] M. Haaks, Dissertation, Universität Bonn (2003)
- [Haa06] M. Haaks und K. Maier, in: *Extreme Events in Nature and Society*; Hrsg.: S. Albeverio, V. Jentsch, H. Kantz; Springer, Berlin, Heidelberg, New York (2006)
- [Häk89] H. Häkkinen, S. Mäkinen und M. Manninen, *Europhys. Lett.* **9**(1989) 809
- [Häk90] H. Häkkinen, S. Mäkinen und M. Manninen, *Phys. Rev. B* **41**(1990) 12441
- [Hir61] P. Hirsch und D. Warrington, *Philos. Mag.* **6**(1961) 735
- [Hol04] C. Holste, *Phil. Mag.* **84**(2004) 299
- [Kop04] K. Kopitzki, P. Herzog, Einführung in die Festkörperphysik, B. G. Teubner Verlag Stuttgart, Leipzig, Wiesbaden (2004)

- [Lan64] Landolt-Brönstein, Band IV/2b; Hrsg. H. Borchers und E. Schmidt (1964) 307
- [Leo93] W.R. Leo, *Techniques for Nuclear and Particle Physics Elements*; 2nd revised ed., Springer New York (1993)
- [Mit79] M.R. Mitchell, in: *Metals Handbook, Vol 19: Fatigue and Fracture*; Hrsg. S. Lampman; Am. Soc. of Metallurgy (1997) 228
- [Mug81] H. Mughrabi und R. Wang, in: *Deformation of Polycrystals: Mechanisms and Microstructure*, Proc. 2nd RisøInt. Symp. on Metallurgy and Materials Sciencs; Hrsg.: H. Hansen, A. Horsewell, T. Leffers, H. Lilholt (1981) 87
- [Mül06] I. Müller, M. Haaks, A. Schöps und H. Franz *Phys. Stat. Sol. A* **203**(2006) R31
- [Nie80] R.M. Nieminen und J. Oliva, *Phys. Rev. B* **22**(1980) 2226
- [Pus94] M. Puska und R. Nieminen, *Rev. Mod. Phys.* **66**(1994) 841
- [See55] A. Seeger, *Philos. Mag.* **46**(1955) 1194
- [Sch81] H. Schäfer, Habilitation, Universität Stuttgart (1981)
- [Sch92] W. Schilling, in: *Bergmann und Schäfer: Lehrbuch der Experimentalphysik - Festkörper*, Band 6; Walter de Gruyter, Berlin, New York (1992)
- [Son97] C.M. Sonsino, H. Kaufmann und V. Grubisic, *Mater. Manuf. Process.* **106**(1997) 649
- [Vol89] F. Vollertsen und S. Vogler, *Werkstoffeigenschaften und Mikrostruktur*, Carl Hanser Verlag, München, Wien (1989)
- [Wei97] J. R. Weimar, *Simulation with Cellular Automata*, Logos-Verlag, Berlin (1997)
- [Wes73] R. West, *Adv. Phys.* **22**(1973) 263
- [Wid97] T. Wider, Diplomarbeit, Universität Bonn (1997)
- [Wid98] T. Wider, S. Hansen, U. Holzwarth und K. Maier, *Phy. Rev. B.* 57(1998) 5126
- [Wid99] T. Wider, K. Maier, U. Holzwarth, *Phys. Rev. B* **60**(1999) 179
- [Wid99b] T. Wider, Dissertation, Universität Bonn, 1999
- [Win74] A.T. Winter., *Phil. Mag.* **30**(1974) 719
- [Wöh58] A. Wöhler, *Zeitschrift für Bauwesen* **8**(1858) 642



- [Zie67] O. C. Zienkiewicz, The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics; McGraw-Hill (1967)