

# Herleitung eines konstitutiven Modells für Formgedächtnislegierungen

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
**Doktors der Ingenieurwissenschaften**  
von der Fakultät für Maschinenbau  
der Universität Karlsruhe

genehmigte

**Dissertation**

von

Dipl.-Math. techn. Levente Juhász  
aus Esztergom, Ungarn

Tag der mündlichen Prüfung: 21. Juni 2004

Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. E. Schnack  
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. U. Maas



Meinen Eltern gewidmet.



## Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Arbeit als DAAD-Stipendiat und später als wissenschaftlicher Angestellte am Institut für Technische Mechanik der Universität Karlsruhe.

Herrn Professor Dr.-Ing. Eckart Schnack danke ich für die tatkräftige Unterstützung und für die große Freiheit bei der Wahl und Bearbeitung meines Forschungsthemas.

Mein besonderer Dank gilt meinen ehemaligen Kollegen Priv.-Doz. Dr. Heiko Andrä und Dr.-Ing. Olaf Hesebeck. Ich kann mir nicht vorstellen, wie meine Doktorarbeit jetzt aussehen würde, wenn sie nicht als interessierter und kompetenter Diskussionspartner am Institut gewesen wären. Dr.-Ing. Tancredo Westphal Jr. danke ich sehr für seine Interesse an SMA und für viele Hinweise und Räte, wie man wissenschaftliche Texte zu formulieren weist.

Meinen Kollegen Dr.-Ing. Atanas Dimitrov, Dr.-Ing. Slav Dimitrov, Dr.-Ing. Jürgen Grünwald, Dr.-Ing. Tom-Alexander Langhoff, Dr. rer. nat. Jan Krieg, Dr. Romana Piat, Dr.-Ing. Zsuzsanna Szepesi, Dr.-Ing. Szabolcs Szikrai, Dr.-Ing. Karsten Türke und Dr.-Ing. Wolfgang Weikl sei gedankt, die in vielfältigen Weise zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Hier möchte ich mich den Mitarbeiter des Forschungszentrums Karlsruhe, Dr. Armin Grünhagen, Dr. Manfred Kohl und Dr. Berthold Krevet für die gute Zusammenarbeit danken.

Nun darf ich mich bei meinen ungarischen Kollegen aus der Technische Universität Budapest bedanken. Für den Anstoß zu meiner DAAD-Bewerbung und für viele kritische Diskussionen über meine Arbeit sei Professor Gyula Béda und Professor László Szabó gedankt. Für seine Unterstützung möchte ich mich bei Professor Gábor Stépán bedanken. Dr.-Ing. Árpád Pethő befaßte sich ebenfalls mit Fragen der Modellierung von SMA, so dass er mir ein wertvolles Feedback zu meinen Ideen geben konnte.

Ich möchte mich meinen Familie und Freunde danken, dass sie mich durch alle diese Jahre unterstützt haben.

Karlsruhe, im Februar 2005  
Levente Juhász

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>iii</b>
<b>1 Formgedächtnislegierungen</b>	<b>1</b>
1.1 Legierungen mit Formgedächtnis . . . . .	2
1.2 Eigenschaften der martensitischen Phasenumwandlung . . . . .	2
1.3 Grundlegende kristallografische Mechanismen . . . . .	6
1.4 Textur des Martensits . . . . .	9
1.5 Art des Kristallaufbaus . . . . .	10
1.6 Materialeigenschaften . . . . .	11
1.7 Zusammenhänge zwischen Kristall- und Materialeigenschaften . . . . .	13
1.8 Formgedächtniseffekte . . . . .	15
1.8.1 Zweiwegeeffekt ( <i>Two-Way-Effect</i> ) . . . . .	15
1.8.2 Einwegeeffekt ( <i>One-Way-Effect</i> ) . . . . .	16
1.8.3 Pseudoelastizität ( <i>Pseudoelasticity</i> ) . . . . .	16
1.9 Anwendungen . . . . .	17
1.10 Annahmen der Modellbildung . . . . .	18
<b>2 Thermodynamische Grundlagen</b>	<b>19</b>
2.1 Thermodynamischer Zustand und Prozess . . . . .	20
2.2 Innere Variablen . . . . .	21
2.3 Bilanzgleichungen . . . . .	23
2.3.1 Massenbilanz . . . . .	23
2.3.2 Impulsbilanz . . . . .	24
2.3.3 Energiebilanz, erster Hauptsatz der Thermodynamik . . . . .	25
2.3.4 Entropiebilanz, zweiter Hauptsatz der Thermodynamik . . . . .	26
2.4 Freie Energie . . . . .	27
2.5 Konstitutivgleichungen . . . . .	27
2.6 Evolutionsgleichungen . . . . .	29
2.7 Thermodynamisches Gleichgewicht . . . . .	30
<b>3 Modellierung von SMA</b>	<b>33</b>
3.1 Stand der Forschung . . . . .	33
3.1.1 Modelle auf der Basis eines Energiedichtefunktionalis . . . . .	34

3.1.2	Modelle mit Umwandlungsdiagramm . . . . .	36
3.1.3	Modelle mit plastischer Analogie . . . . .	40
3.1.4	Modelle mit thermodynamischen Kräften . . . . .	42
3.2	Ein neues thermodynamisches Materialmodell . . . . .	44
3.2.1	Ansatz des neuen Modells . . . . .	44
3.2.2	Freie Helmholtz-Energie . . . . .	46
3.2.3	Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik . . . . .	48
3.2.4	Erster Hauptsatz der Thermodynamik . . . . .	51
3.2.5	Kalibrierung der Modellparameter durch Materialdaten . .	53
3.2.6	Evolutionsgleichungen . . . . .	60
3.2.7	Modellierung der allgemeinen Belastung . . . . .	63
3.2.8	Spezialfall der reinen Reorientierung . . . . .	67
3.2.9	Zeitabhängige Formulierung der Evolutionsgleichungen . .	71
<b>4</b>	<b>Numerische Ergebnisse</b>	<b>73</b>
4.1	Diskretisierungsverfahren . . . . .	74
4.1.1	Iteration . . . . .	80
4.2	Temperaturabhängigkeit von SME . . . . .	80
4.3	Fitting von Modellparametern an Messergebnisse . . . . .	83
4.4	Berechnung der Reorientierung . . . . .	86
4.5	FEM . . . . .	90
4.5.1	Pseudoelastizität und Einwegeffekt . . . . .	92
4.5.2	Pseudoelastizität . . . . .	93
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>103</b>
	<b>A Legendresche Transformation</b>	<b>105</b>
	<b>B Modell von FRÉMOND</b>	<b>107</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>109</b>
	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>113</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>119</b>

# Einleitung

Als Formgedächtnislegierung (*Shape Memory Alloys* = SMA) werden Legierungen bezeichnet, die eine kristallographisch nahezu reversible martensitische Phasenumwandlung unter thermomechanischer Beanspruchung vorweisen. Hieraus resultieren verschiedene spezielle mechanische Materialeigenschaften, deren Anwendungsbereich immer breiter wird: Neben Anwendungen als reine Hauptkomponente werden die SMA auch mit anderen Komponenten in einer Sandwichstruktur eingesetzt oder in Form eines Schaums, z.B. als Knochenersatz, benutzt. Die charakteristischen mechanischen Eigenschaften von SMA hängen von der Temperatur ab, bei der die mechanische Belastung wirkt.

Um den kostenintensiven Prototypenbau zu reduzieren und eine Bauteiloptimierung zu ermöglichen, ist man auf numerische Simulation angewiesen. Hierbei wird heutzutage für komplexere Bauteile in der Praxis vor allem die Finite-Elemente-Methode (FEM) verwendet, für die ein konstitutives kontinuumsmechanisches Materialmodell eine unerlässliche Voraussetzung darstellt.

Die kontinuumsmechanische bzw. thermomechanische Modellierung der SMA beschreibt die Materialeigenschaften der SMA über zeitliche Evolution von Zustands- und Feldvariablen. In dieser Arbeit werden Mittel der Nichtgleichgewichtsthermodynamik (*nonequilibrium thermodynamics*) verwendet, die als Thermodynamik des Nichtgleichgewichts einen formalen Rahmen für die makroskopische Beschreibung irreversibler Prozesse darstellt.

Zur Beschreibung irreversibler Prozesse werden neben Zustandsvariablen, d.h. gewöhnlichen äußeren messbaren Variablen, weitere sogenannte *innere Variablen* eingeführt, um die Entwicklung der vor den Augen des Beobachters meistens versteckten inneren Struktur des Materials – wie die Phasenumwandlung in einer mehrphasigen Legierung – zu beschreiben. Weitere abhängige Zustandsvariablen können als Funktion der unabhängigen äußeren und inneren Variablen ausgedrückt werden.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, die mechanischen Eigenschaften der SMA unter mehrachsiger, nichtproportionaler thermomechanischer Belastung zu beschreiben. Insbesondere muss das sich mit der Temperatur signifikant ändernde

Materialverhalten berücksichtigt werden. Weiterhin soll die Zahl der eingeführten Modellparameter niedrig gehalten werden, damit die Modellparameter durch wenige und möglichst einfache Experimente bestimmt werden können. Bei SMA auftretende Ermüdungseffekte und der Einfluss der Plastifizierung werden in dieser Arbeit nicht behandelt. Diese Effekte können jedoch zusätzlich in die vorgeschlagenen Modelle eingebaut werden.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in 4 Kapitel. Nach der Einleitung werden in Kapitel 1 zuerst die Eigenschaften der martensitischen Phasenumwandlung als physikalische Grundlage von Formgedächtniseffekten zusammengefasst und deren Einflussparameter kurz dargestellt. Dabei wird die Komplexität der physikalischen Natur geschildert und die einschränkenden Annahmen für die Modellbildung erläutert.

Bevor bekannte SMA-Modelle und ein neues Modell in Kapitel 3 diskutiert werden, wendet sich das Kapitel 2 zunächst einer allgemeineren Fragestellung zu: Die thermodynamischen Grundlagen für ein kontinuumsmechanisches Materialmodell werden in diesem Kapitel zusammengefasst. Um ein neues Materialmodell zu formulieren, dessen Evolutionsgleichungen nicht vollständig willkürlich gewählt werden, bieten sich die Hauptsätze der Thermodynamik als sinnvolle Begrenzung an. Weiterhin bietet die Nichtgleichgewichtsthermodynamik Grundlagen für die Wahl der unabhängigen Variablen zur Modellierung der inneren Materialstruktur.

Kapitel 3 beschreibt im ersten Teil die bedeutendsten makroskopischen SMA-Modelle für polykristalle Materialien aus der Literatur. Dabei sind zuerst die Ergebnisse von TANAKA [104, 103] und BRINSON [15] zusammengefasst, die in einem Umwandlungsdiagramm (Temperatur-Vergleichsspannung-Ebene) die wichtigsten Abhängigkeiten der martensitischen Umwandlungen von thermomechanischen Belastungen abgebildet hatten: Im  $\sigma - T$ -Umwandlungsdiagramm sind die Bereiche, in denen die Phasenumwandlungen stattfinden, eingezeichnet, da es keine scharfen Umwandlungsgrenzen gibt. In der zweiten Gruppe werden die Modelle auf Basis der plastischen Analogie betrachtet, Arbeiten von LAGOUDAS, RANIECKI, AURICCHIO, PETHŐ und LEXCELLENT [77, 82, 85, 87, 88]. Die Idee der makroskopischen Beschreibung der Anisotropie bei Formgedächtniseffekten durch speziell gewählte *Fließgrenzen* wird beschrieben. Als letzte, dritte Gruppe werden die thermodynamisch basierten Modellen erläutert, die für die Definition der Evolutionsgleichungen der inneren Variablen thermodynamische Kräfte verwenden und damit eine thermodynamisch konsistente Beschreibung der Formgedächtniseffekte ermöglichen. Dabei wird eine freie Energiefunktion konstruiert, die neben den gewöhnlichen Termen der elastischen Energie spezielle Terme für mehrphasige SMA enthalten. Hier wird auf die Arbeiten von LEXCELLENT, RANIECKI und ZIOLKOWSKI [9, 12, 54, 55, 57, 85] verwiesen.

Diese drei Modellgruppen enthalten folgende, in sich sehr wichtige Modellierungs-

ideen, die bisher nicht in einem Modell zusammengeführt werden konnten:

1. Beschreibung des temperaturabhängigen Verhaltens von SMA durch das Phasendiagramm,
2. Berücksichtigung der Anisotropie der Phasenumwandlung durch spezielle Fließbedingungen,
3. Erreichen der thermodynamischen Konsistenz durch Verwendung der thermodynamischen Kräfte bei der Definition der Evolutionsgleichungen.

Auf Grundlage des Kapitels 2 wird in der zweiten Hälfte des Kapitels 3 ein neues thermodynamisches Materialmodell entwickelt, welches die erwähnten Vorteile der vorangegangenen Arbeiten vereinigt und zusätzlich die makroskopische Beschreibung der Reorientierung des Martensits ermöglicht. Reorientierung des Martensits bedeutet in dieser Hinsicht eine nahezu kristallographisch reversible Änderung der Martensitstruktur, wobei sich Martensitvarianten ineinander umwandeln und damit eine makroskopische Verformung hervorrufen. Dabei Energie dissipiert, aber nahezu keine Schädigung oder irreversible Kristalländerung in der SMA entsteht. Die Beschreibung der Reorientierung spielt bei der Modellierung von nichtproportionalen, thermomechanischen Belastungen eine entscheidende Rolle. Die Reorientierung führt unter nichtproportionaler Änderung des Spannungs- bzw. Dehnungszustandes zu einem deutlichen Spannungsabbau und ist deshalb wesentlich bei der Modellierung.

In dem neuen Modell wird durch eine tensorielle, innere Variable die innere Struktur der SMA aus der Sicht der makroskopischen Modellbildung erfasst. Dieser Ansatz erlaubt eine Prozessbeschreibung, die bei der Entwicklung der Kristallstruktur auch die aktuelle Kristallstruktur berücksichtigt. Weiterhin wird die thermodynamische Konsistenz des Modells bezüglich des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik für beliebige thermomechanische Belastungen erhalten, da bei den Evolutionsgleichungen die thermodynamischen Kräfte verwendet werden. Diese Vorgehensweise benötigt eine Weiterentwicklung der Funktion der inneren Energie, präsentiert in Literatur. Das statische Materialverhalten wird durch die Modellparameter in der freien Helmholtz-Energie bestimmt, während das kinematische Verhalten durch die Parameter in den Evolutionsgleichungen festgelegt wird. Es entsteht durch die gewählte Modellierung ein Gleichungssystem zwischen diesen Modellparametern und den üblichen gemessenen Materialdaten von SMA. Die Lösung dieses Gleichungssystems gibt die Definition der Modellparameter als Funktion von Materialdaten an und sichert die auf dem Umwandlungsdiagramm von BRINSON [15] basierenden gewünschten Eigenschaften des neuen Modells.

Die Diskretisierung des Modells und Beschreibung des numerischen Verfahrens

für die Berechnung von SMA erfolgt in Kapitel 4. Weiterhin werden Berechnungsbeispiele

- für die Modellierung von temperaturabhängigen SME,
- für die Bestimmung der Modellparameter bei nicht vollständigen Informationen über die zu modellierende SMA und
- für die Modellierung von reinen Reorientierung

gezeigt. Durch diese Beispiele werden die neuen Eigenschaften des Modells angesprochen und deren Bedeutung gezeigt. Das Modell zeigt ein qualitativ richtiges Verhalten bei mehrachsigen nichtproportionalen Belastungen.

Anschließend werden FEM-Berechnungen an einem mehrdimensionalen Bauteil für verschiedene SME vorgenommen.

Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung sowie Abbildungs-, Symbol- und Literaturverzeichnissen.

# Kapitel 1

## Formgedächtnislegierungen

Schon in der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts wurde eine Gruppe von Legierungen entdeckt, die wegen ihrer ungewöhnlichen Eigenschaften als Formgedächtnislegierungen (SMA<sup>1</sup>) bezeichnet wurden. Erst in den 80er Jahren wurde mit der thermomechanischen Modellierung von SMA begonnen. Diese Tatsache kann hauptsächlich auf drei Gründe zurückgeführt werden: Aufgrund nur weniger Anwendungen wurde am Anfang der Schwerpunkt der Forschung auf die metallurgische Erklärung der Grundeffekte gelegt, die Legierungskomponenten (z.B. Ti und Ni) waren ziemlich kostspielig und außerdem bereitete die Herstellung der Legierungen erhebliche Schwierigkeiten.

Heute wird der Anwendungsbereich der SMA immer breiter. Neben Anwendungen als reine Hauptkomponente werden die SMA auch mit anderen Komponenten in einer Sandwichstruktur eingesetzt oder in Form eines Schaums, z.B. als Knochenersatz, benutzt. Die immer vielfältigeren Anwendungen stellen neue spannenden Herausforderungen für die Modellierung dar. Bei den Anwendungen werden die drei grundsätzlichen charakteristischen Formgedächtniseffekte (Shape Memory Effect = SME) verwendet, nämlich der Zweiwegeeffekt (*Two-Way-Effect*), der Einwegeeffekt (*One-Way-Effect*) und die Pseudoelastizität (für einen Überblick über SME siehe HORNBÖGEN und PERKINS [40, 76]). Weiterhin können von diesen Gruppen abweichende Effekte erzielt werden, die als Nebeneffekt betrachtet werden, da sie durch den oben genannten drei grundsätzlichen SME (Haupteffekten) erklärt werden können (wie Übergänge bzw. Kombinationen von diesen Haupteffekten).

Jeder dieser charakteristischen Effekte kann auf die **martensitische Phasenumwandlung** (MPhU) in den Legierungen zurückgeführt werden. In diesem Kapitel

---

<sup>1</sup>Die englische Übersetzung *Shape Memory Alloy* und deren Abkürzung SMA werden als Fachbegriff im Allgemeinen in der Literatur verwendet. Daher wird auch in dieser Arbeit diese Abkürzung benutzt.

werden die wichtigsten metallurgischen und kristallografischen Eigenschaften der MPhU zusammengefasst, wobei auf die speziellen Merkmale im Fall der SMA hingewiesen wird. Durch die vorgestellten metallurgischen Phänomene werden die SME erklärt und ein Ausgangspunkt für die Modellierung gewonnen, wobei das Ziel der Modellierung formuliert wird. Einige Anwendungsbeispiele werden am Ende dieses Kapitels genannt.

## 1.1 Legierungen mit Formgedächtnis

SME wurden zum ersten Mal 1932 bei Au-Cd und 1938 bei Cu-Zn Legierungen beobachtet [23]. 1962 wurde die heute meist benutzte SMA im US amerikanischen *Naval Ordnance Laboratory* hergestellt und untersucht, eine Nickel-Titan-Legierung [19], die als *Nitinol* bezeichnet wird. Diese SMA zeigt bis heute den stabilsten und stärksten SME. In den letzten Jahren wurden neue Legierungen mit anderen Grundkomponenten eingeführt, vor allem Aluminium, Kupfer und Eisenlegierungen, die durch ihre niedrigeren Materialkosten in größeren Mengen eingesetzt werden können und ausreichend stabile SME haben, um auch unter zyklischer Belastung ausreichend Effekstabilität zu zeigen. Einige dieser Legierungen werden in [40, 98, 100] diskutiert. Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Modellierung und nicht mit der experimentellen Untersuchung der Legierungen. Weil immer weitere Legierungen mit SME entdeckt bzw. entwickelt werden, sind ausführliche Informationen über die SMA und über die neuesten Legierungen aus der aktuellen Fachliteratur zu entnehmen.

## 1.2 Eigenschaften der martensitischen Phasenumwandlung

In diesem Kapitel werden zuerst die generelle Eigenschaften der martensitischen Phasenumwandlung zusammengefasst und später die Besonderheiten bei der SMA genannt. Eine martensitische Phasenumwandlung ist nach der Definition der Metallurgen eine diffusionslose, reversibel adiabatisch oder isotherm durchführbare, strukturelle Phasenumwandlung 1. Ordnung. Die Phasenumwandlung läuft zwischen einer Hochtemperatur-Phase (meistens **Austenit**<sup>2</sup>) und dem **Martensit**<sup>3</sup> ab. Der entstehende Martensit ist oftmals thermodynamisch metastabil, mechanisch weich und duktil. Der martensitische Stahl bildet eine Ausnahme, bei dem

---

<sup>2</sup>Nach dem englischen Metallurgen SIR W. CH. ROBERTS-AUSTEN (1843-1902) genannt.

<sup>3</sup>Zu Ehren des deutschen Metallurgen A. MARTENS (1850-1914) bezeichnet.

eingekleitete C- und N-Atome die Gitterverschiebung in Eisen blockieren und dadurch enorme Härte und Zugfestigkeit hervorrufen.

Die wichtigsten Eigenschaften der martensitischen Phasenumwandlung sind in den folgenden Punkten stichwortartig zusammengefasst, wobei die letzten 3 Punkte ausschließlich für SMA gelten:

1. Die MPhU ist diffusionslos.
2. Die sogenannten Habitebenen beeinflussen die Bildung der Kristallstruktur.
3. Die MPhU erhöht die Versetzungsdichte.
4. Die Ausgangs- und Endkristalle der MPhU zeigen geometrische Zusammenhänge.
5. Die MPhU ist nicht vollständig. So genannter Restaustenit existiert.
6. Die MPhU ist mit vernachlässigbarer Volumenänderung verbunden.
7. Die MPhU ist kristallografisch reversibel.
8. Bei der MPhU entstehen die Keimpunkte im Inneren der einzelnen Kristallinen.

Diese Eigenschaften werden nun diskutiert, wobei die aus Sicht der Modellierung entscheidenden Aspekte mit fetten Buchstaben hervorgehoben sind:

*Diffusionslose Phasenumwandlung:* In diesem Zusammenhang bedeutet dies, dass die atomaren Verschiebungswege klein gegenüber der Gitterkonstante sind, weshalb durch die MPhU **keine Konzentrationsänderungen** in der Legierung entstehen und die Ausgangs- und Endphasen die gleiche chemische Zusammensetzung aufweisen. Eine andere wichtige Folge der Diffusionslosigkeit der Umwandlung ist beim zeitlichen Ablauf der MPhU zu bemerken: Die Umwandlung beginnt sofort, **ohne Inkubationszeit**. Die kleinen Atombewegungen unter der MPhU können korreliert stattfinden und laufen mit hoher Geschwindigkeit (praktisch mit Schallgeschwindigkeit) ab. Daraus resultiert zuerst ein **zeitunabhängiges Materialverhalten**<sup>4</sup>. Weil die Atome bei martensitischen Transformationen nur Entfernungen zurücklegen, die deutlich kleiner als die Gitterkonstante sind,

---

<sup>4</sup>Experimentell wurde zeitabhängiges Verhalten bei SMA beobachtet (siehe [38]) und dieses kann durch komplizierte innere Mechanismen erklärt werden. In dieser Arbeit wird dieses Phänomen berücksichtigt, jedoch auf Grund von fehlenden Materialdaten nicht numerisch berechnet.

können diese auch **bei tiefen Temperaturen** stattfinden, bei denen die Diffusion schon weitgehend eingefroren ist. Die tatsächliche MPhU wird durch Wärmetransport verzögert, da die Phasenumwandlungswärme ab- oder hintransportiert werden muss.<sup>5</sup>

*Kristallstruktur:* Bei der MPhU bilden sich meist einfache, aber verzerrte kubisch raumzentrierte (*krz* oder  $\alpha$ ) und kubisch flächenzentrierte (*kfz* oder  $\gamma$ ) oder unterschiedlich gepackte hexagonale (*hcp* oder  $\varepsilon$ ) Strukturen, die niedrigerere Kristallsymmetrie besitzen. Überwiegend hat die Ausgangsphase  $\alpha$  oder  $\gamma$  Struktur, während die martensitische Phase meistens  $\alpha$  oder  $\varepsilon$  Gitterstruktur besitzt [43]. Welche Kristallstruktur auftritt, kann durch die Zusammensetzung der konkreten Legierung beeinflusst werden [36, 93]. Unter der MPhU besteht ein **eindeutiger geometrischer** (oder kristallografischer) **Zusammenhang** zwischen den Ausgangs- und Endphasen. In den 80er Jahren des letzten Jahrhunderts wurden mathematische Formeln für die Beschreibung der  $\gamma \rightarrow \alpha$  Umwandlung, unter anderen in den Theorien von BAIN, von KURDJUMOV-SACHS und von NISHIYAMA [69, 78] entwickelt.

*Volumenänderung:* Die MPhU ist gegenüber gewöhnlichen Legierungen in der SMA näherungsweise **volumenerhaltend**, d.h. die Volumenänderung unter der martensitischen Umwandlung ist vernachlässigbar klein gegenüber gewöhnlichen Metalllegierungen, z.B. zwei Größenordnung kleiner als in Stahl (statt 4% nur 0,04%). Deshalb induziert die MPhU in einer SMA **keine plastischen Deformationen** an den Phasengrenzen oder Korngrenzen, wodurch eine kristallografisch reversible MPhU ermöglicht wird.

*Reversibilität:* Die MPhU ist *kristallografisch reversibel*, d.h. theoretisch kann die genaue Ausgangsstruktur nach einer Umwandlungs-Rückumwandlungs-Schleife zurückgewonnen werden. Bei der **Reversibilität** spielt die sehr kleine Volumenänderung eine entscheidende Rolle, da induzierte Spannungen keine innerkristallische Plastifizierung hervorrufen. Ein angrenzendes Thema an der Forschung von SMA stellen die sogenannten **TRIP**<sup>6</sup> Legierungen dar, bei denen eine erwünschte Plastifizierung unter der MPhU an den Phasengrenzen auftritt, die die Materialeigenschaften erheblich ändert. Plastifizierung infolge MPhU tritt in der Praxis bei den meisten SMA unerwünscht auf, wobei unter zyklischer Belastung eine **Ermüdung in der SME** beobachtet und eine **Änderung in der Charakteristik** der SME (z.B. Änderung der Umwandlungstemperaturen, wie später in diesem Kapitel diskutiert wird) erzeugt werden kann. In dieser Arbeit werden diese Effekte nicht betrachtet und ein reines, reversibles Formgedächtnis-Verhalten wird demzufolge angenommen<sup>7</sup>. Weiterhin wird unter der MPhU Ener-

<sup>5</sup>Deshalb können nur dünne SMA-Schichten oder dünne SMA-Drähte in höheren Frequenzbereichen eingesetzt werden.

<sup>6</sup>**Transformation Induced Plasticity.**

<sup>7</sup>D.h., es wird angenommen, dass die Materialeigenschaften bei der Simulation konstant sind.

gie dissipiert und damit der Prozess **energetisch irreversible!**

*Erhöhte Versetzungsdichte:* Experimente haben gezeigt, dass eine hohe Versetzungsdichte in der Martensitphase bei polykristallinen SMA unter MPhU entsteht, die gegenüber der gewöhnlichen Versetzungsdichte in Höhe von  $10^6 \text{ cm}^{-3}$  bis  $10^{12} \text{ cm}^{-3}$  liegt. Diese zunehmende Versetzungsdichte behindert das weitere Fortschreiten der MPhU und kann durch Inkompatibilitäten zwischen der Ausgangsphase und den entstehenden Martensitkristallen erklärt werden. Damit kommt es zu einer Art **Verfestigung** unter MPhU.

*Keimpunkte:* Bei stärkerer Vergrößerung lässt sich erkennen, dass die Martensitkristalle meistens in der Mitte des Austenitkorns entstehen (Abb. 1.1a). Dies hängt damit zusammen, dass eine Korngrenze immer mit stärkeren Kristallstörungen verbunden ist, die die Umwandlung behindern, deren Auswirkungen aber im Inneren des Korns am geringsten sind.

*Form der Martensitkristalle:* Während der MPhU breiten sich die Martensitkristalle von Keimpunkten in Form einer Nadel bzw. eines Diskus aus (Abb. 1.1b.), bis die Korngrenze bzw. ein anderer Martensitkristallit erreicht wird.

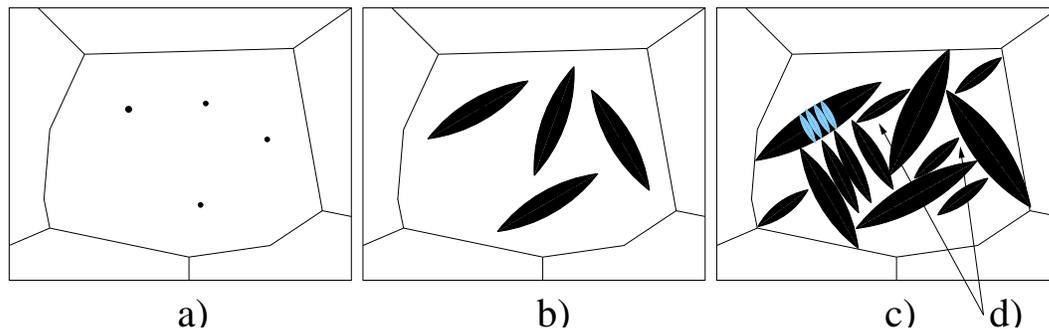


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der Martensitbildung in einem Austenit-Korn (siehe auch Abb.1.5): a) Entstehung des Keimpunktes, b) freie Martensitbildung, c) und d) Reorientierung mit Restaustenit.

Experimente haben gezeigt, dass diese Form der Martensitkristalle auf die Abhängigkeit der MPhU von den so genannten **Habitebenen** zurückgeführt werden kann. Diese Habitebenen sind gut definierbare geometrische Ebenen im Kristall, die unter der PU makroskopisch invariant bleiben [62, 69, 89]. Sie beeinflussen die räumliche Entwicklung der Martensitphase entscheidend. Entlang dieser Ebenen ist die MPhU begünstigt und schneller. Weiterhin bildet sich eine eindeutige Habitebenenstruktur aus diesen Ebenen in einem Kristallite, die unter der MPhU unverändert bleibt. Damit kann diese Struktur als Randbedingung der MPhU

---

Sie hängen nicht von der Belastungsgeschichte ab. Diese Annahme gilt besonders für Nitinol und für kleine Zyklenzahlen.

verstanden werden, die die möglichen Martensit-Varianten und Umwandlungen beschränkt. Wegen dieser Rolle als Begrenzung deuten die neuesten Arbeiten [31, 32] darauf hin, dass die Martensitkristalle unter einer allgemeinen Belastung immer in Gruppen auftreten, um bei gegebener Habitebenenstruktur dem Belastungszustand am besten entsprechen zu können. Unter sich zeitlich ändernder Belastung kann die so genannte Zwillingsbildung (Definition siehe folgende Abschnitt dieses Kapitels) auch innerhalb der Martensitnadeln beobachtet werden.

*Volumenanteil:* Aus dieser Gestalt der Martensitkristalle folgt auch, dass diese den Raum nicht vollständig ausfüllen können: Am Ende der Umwandlung ist der übrig gebliebene kleine austenitische Zwischenraum so stark durch innere Inkompatibilitäten eingespannt, dass keine weitere martensitische Keimbildung in diesem Raum möglich wird. Damit bleibt ein Austenitanteil nach der Phasenumwandlung zurück, der so genannte **Restaustenit** (Abb. 1.1d). Je höher deren Anteil ist, desto kleiner ist der SME, weil sie den an der MPhU teilnehmenden Volumenanteil des Körpers reduziert. Der Restaustenitanteil kann sich durch plastische Vorgänge erhöhen, weil die steigende Anzahl der bleibenden (plastisch erzeugten) Versetzungen die MPhU zusätzlich behindert.

### 1.3 Grundlegende kristallografische Mechanismen

Um den martensitischen Umwandlungsmechanismus besser verstehen zu können, sollen zwei grundlegende mikromechanische Prozesse hier kurz geschildert werden, die bei der MPhU eine wichtige Rolle spielen: Gleiten und Zwillingsbildung.

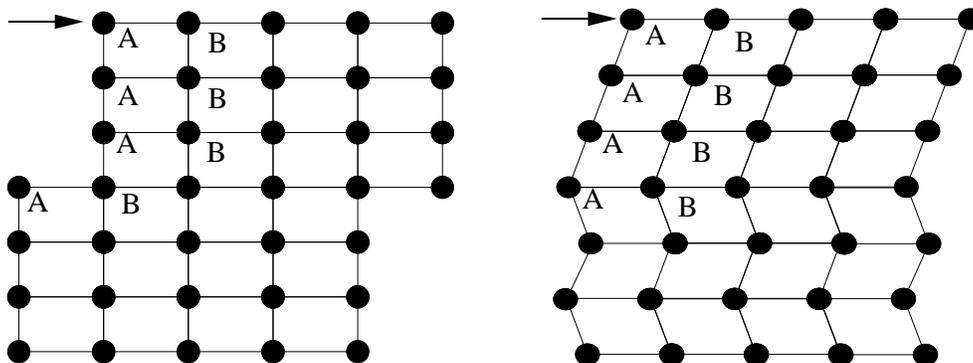


Abbildung 1.2: Schematische Darstellung von Gleiten (links) und Zwillingsbildung (rechts).

*Gleiten:* Unter einer ausreichend großen mechanischen Belastung findet ein Abgleiten in den Gittern statt, das mikromechanisch als Bewegung von Gitterebenen entlang der Ebenen und makroskopisch als plastische Deformation erscheint. Dieser Prozess kann nur entlang bestimmter Ebenen (Gleitebenen) und nur in bestimmten Gitterrichtungen (Gleitrichtungen) stattfinden. Diese Ebenen sind die dichtesten Atomebenen im Kristall. Das Gleiten kommt durch Scherung parallel zu den Gleitebenen zustande. Der Spannungszustand passt im Allgemeinen nicht mit dem gegebenen Gleitsystem zusammen. Deshalb wirkt nur ein entsprechender Anteil der Spannung für das Gleiten. Dieser Anteil kann durch den *Schmidtschen* Orientierungsparameter bestimmt werden [79, 43]. In einem Kristall gibt es mehrere Gleitstrukturen, aus denen diejenige zuerst aktiviert wird, entlang der die größte Schubspannung wirkt. Diese wird als Hauptgleitebene bezeichnet. Wenn die Spannung groß genug ist, um mehrere Gleitstrukturen gleichzeitig zu aktivieren, sprechen wir von mehrfachem Gleiten [51].

*Zwillingsbildung:* Zwei Kristalle werden Zwillinge genannt, wenn eine Transformation (Spiegelung an einer Ebene (Zwillings Ebene) oder Rotation um  $180^\circ$  Grad um eine Achse) existiert, die ein Kristall auf das andere abbildet (siehe [43]). Bei der Zwillingsbildung in SMA entstehen Varianten von Martensit, die sich voneinander nur in der Orientierung unterscheiden. Bei einem  $\alpha$ -Martensit ist die so genannte Zwillings Ebene die  $\{112\}$  Kristallebene. Weshalb sich in diesem am häufigsten auftretenden Fall aus Symmetriegründen 24 unterschiedliche Martensit-Zwillinge ergeben. Bei der Zwillingsbildung bildet sich eine versetzungsfreie Korngrenze zwischen den beiden Zwillingen, die einen sehr geringen Energieinhalt hat und hoch beweglich ist. Zwillingsbildung erfolgt in geeigneten Strukturen bei gewöhnlichen Legierungen mit abnehmender Temperatur und zunehmender Verformungsgeschwindigkeit durch Umklappen des Gitters in die neue Orientierung und spielt auch eine entscheidende Rolle als Ursache des Sprödbruchs. Bei SMA ist *die kritische Spannung* der Zwillingsbildung niedriger als beim Gleiten, so dass die Zwillingsbildung vor allem bei niedriger mechanischer Belastung unter der Fließgrenze, d.h. noch vor der plastischen Verformung, auftritt. Aus mechanischen Belastungsarten ist die Scherung entlang der Zwillings Ebene entscheidend, wie beim Gleiten die Scherung entlang der Gleitebenen im Fall von Plastizität. Durch die entstehenden höchstbeweglichen Zwillingsgrenzen ermöglicht die Zwillingsbildung den makroskopischen Effekt der **Reorientierung**, wobei unter mechanischem Einfluss die weniger günstige, schon existierende Zusammensetzung der Martensitvarianten sich in eine gegenüber dem neuen Spannungszustand günstigere umwandelt. Hierbei wandeln sich entlang der Zwillingsgrenzen verschiedene Martensitvarianten ineinander um, was aufgrund geringer Aktivierungsenergie schon bei kleinen Änderungen des Spannungszustandes möglich ist. In dieser Arbeit wird der Begriff **reine Reorientierung** für Reorientierung ohne MPhU verwendet (siehe noch Abschnitt 3.2.8). Der grundsätzliche Unterschied zwischen Gleiten und Zwillingsbildung besteht darin, dass die benachbarten Ato-

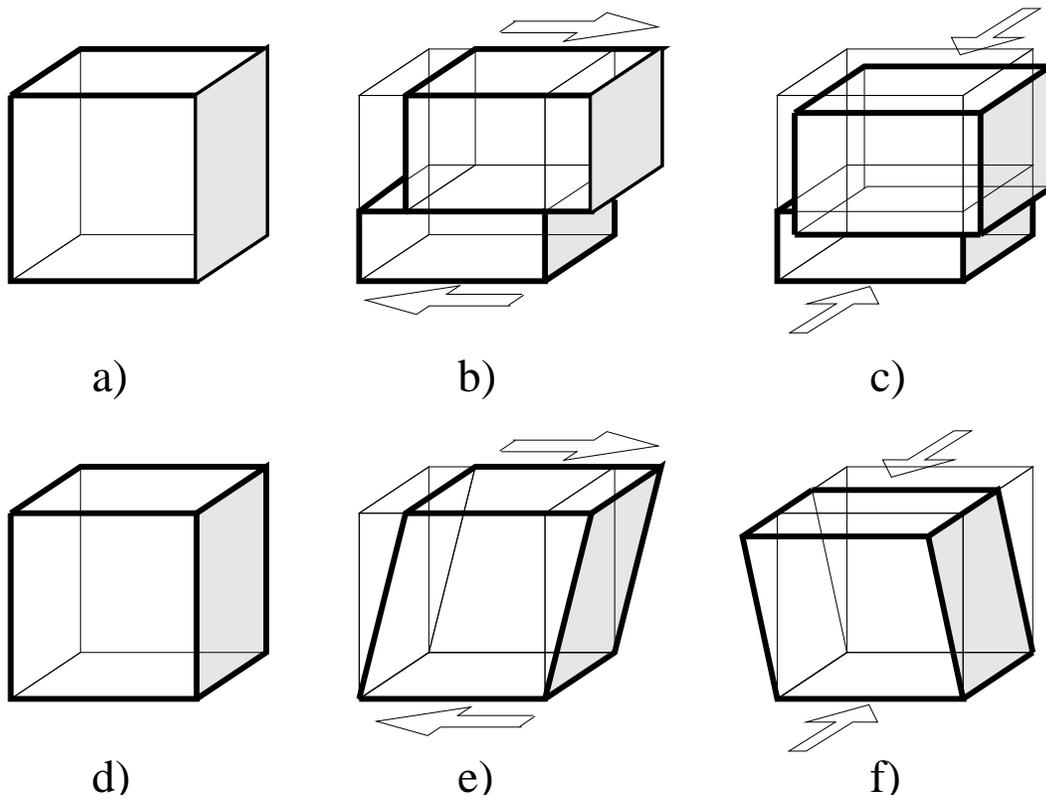


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung des Unterschieds zwischen Plastifizierung und Reorientierung unter nicht-proportionalen Belastungen: a) bis c): plastisches Verhalten, d) bis f): Reorientierung.

me durch Zwillingbildung voneinander nicht getrennt werden (siehe A-A Paare in Abb. 1.2). Damit besteht einerseits die Möglichkeit, bei der Zwillingbildung den Ausgangszustand zurückzugewinnen, wenn der Prozess in die gegengesetzten Richtung abläuft. Andererseits existiert ein Maximum der erzeugten inelastischen Verzerrungen, die durch die optimale Anordnung aller Zwillinge bestimmt ist. Weiterhin ermöglicht die niedrigere Aktivierungsenergie der Zwillingbildung, dass die Zwillinge sich ineinander umwandeln können (Reorientierung). Die Reorientierung hat damit eine ganz andere Charakteristik als die durch Gleiten hervorgerufene Plastizität unter mehrachsiger nicht-proportionaler Belastung (siehe Abb. 1.3). Dies liegt daran, dass ein Abbau der bisherigen Verzerrungen, die durch Spannungsumverteilung ungünstig geworden sind, bei der Reorientierung zwangsmäßig abläuft und ein Maximum der inelastischen Dehnung zu beobachten ist. Bei der Plastizität kann dagegen ein Abbau nur in speziellen Ausnahmefällen und nicht vollständig reversibel (auch im kristallografischen Sinne) stattfinden. Weiterhin ist im Fall der Plastizität eine Zunahme der plastischen Deformation bis zum Versagen des Materials möglich.

## 1.4 Textur des Martensits

Die martensitische Umwandlung kann unter mechanischem und/oder thermischem Einfluss stattfinden. Bei der **thermisch induzierten** Martensitbildung entstehen stochastisch orientierte Zwillinge, die ihre mit der Martensitbildung verbundenen Verzerrungen gegenseitig kompensieren. Diese Art Phasenumwandlung ist bei allen Metall-Legierungen zu beobachten und wird gewöhnlich in einem so genannten Phasendiagramm abhängig von den Legierungskomponenten und der Temperatur dargestellt.

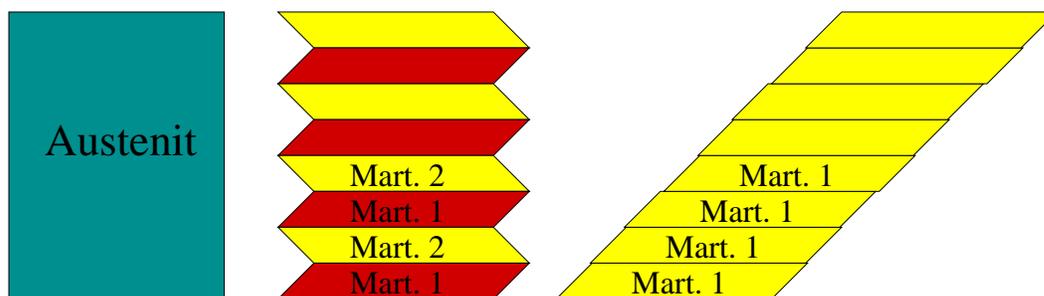


Abbildung 1.4: Schematische Darstellung der thermisch- bzw. spannungsinduzierten Martensit-Anordnung.

Bei **spannungsinduzierten** Martensitkristallen richten sich die Martensitzwillinge in die Richtung aus, die dem Spannungszustand am besten entspricht. Da-

mit entsteht eine geordnete Struktur der Martensitkristalle, die eine zusätzliche Deformation induziert, die (*phasen-*)*transformationsinduzierte Dehnung* (TID). Die TID ist meistens um zwei Größenordnungen größer als die maximal mögliche elastische Dehnung und dies erklärt auch die praktische Bedeutung des SME. Die TID kann sich durch Reorientierung der Zwillinge und durch Rekristallisierung der Phasen ändern. Weiterhin kann ein maximaler Wert der TID beobachtet werden, weil die optimale Orientierung aller Zwillinge des vollständig umgewandelten Volumens den maximalen Betrag der TID begrenzt (siehe Abb. 1.4).

## 1.5 Art des Kristallaufbaus

Gemäß des Kristallaufbaus können SMA in zwei große Gruppen aufgeteilt werden: **Einkristalle** und **Polykristalle**. Sie werden je nach Anwendung in beiden Formen hergestellt. Diese zwei Gruppen weisen auch im Fall gleicher Legierung grundsätzlich unterschiedliche Materialeigenschaften auf.

Ein *Einkristall* besteht aus einem einzigen Kristall, der bei der Herstellung aus einem Korn kontinuierlich gebildet wird. Einkristalle zeigen stark anisotrope Eigenschaften entsprechend der Kristallstruktur (Kristallebenen, Winkel), wobei die Orientierung der Endphasen eindeutig durch die Orientierung der Ausgangsphase bestimmt ist. D.h., aus der Ausgangsorientierung des Austenits kann die Orientierung der Martensitphase durch geometrische Überlegungen analytisch ermittelt werden [62, 69, 89]. Die Ausrichtung der neuen Martensitphase wird einerseits von der Originalausrichtung des Austenits, andererseits vom Typ der entstandenen Martensitvarianten festgelegt, wobei die Zahl der möglichen Varianten (24 im Fall von krz ( $\alpha$ ) Kristall) und deren räumliche Ausrichtungen durch die Kristallart (z.B. kfz ( $\gamma$ ), krz) begrenzt ist.

Im Gegensatz zu den Einkristallen sind die Materialeigenschaften von *Polykristallen* durch den statistischen Mittelwert der einzelnen Körner geprägt, nicht durch einen bestimmten Kristall. Alle austenitischen Körner sind beim Polykristall zufällig orientiert und stehen miteinander in Wechselwirkung. Obwohl die Orientierung der entstehenden Martensitvarianten innerhalb des Kornes von dessen Orientierung bestimmt ist, ist der Polykristall näherungsweise makroskopisch isotrop, zumindest wenn es keine Vorzugsorientierung der Körner (dadurch auch keine bevorzugte Martensitvariante) gibt.

Mit größer werdenden Korngrößen sind die Eigenschaften einzelner Körner dominierend und dadurch die mechanischen Eigenschaften von SMA auch stärker anisotrop. Auch beim Herstellungsprozess kann eine bestimmte Legierungsstruktur entstehen, die eine gewisse Orientierung des Austenits (und damit auch des Martensits) begünstigt und dadurch Anisotropie hervorruft (z.B. beim Walzen).

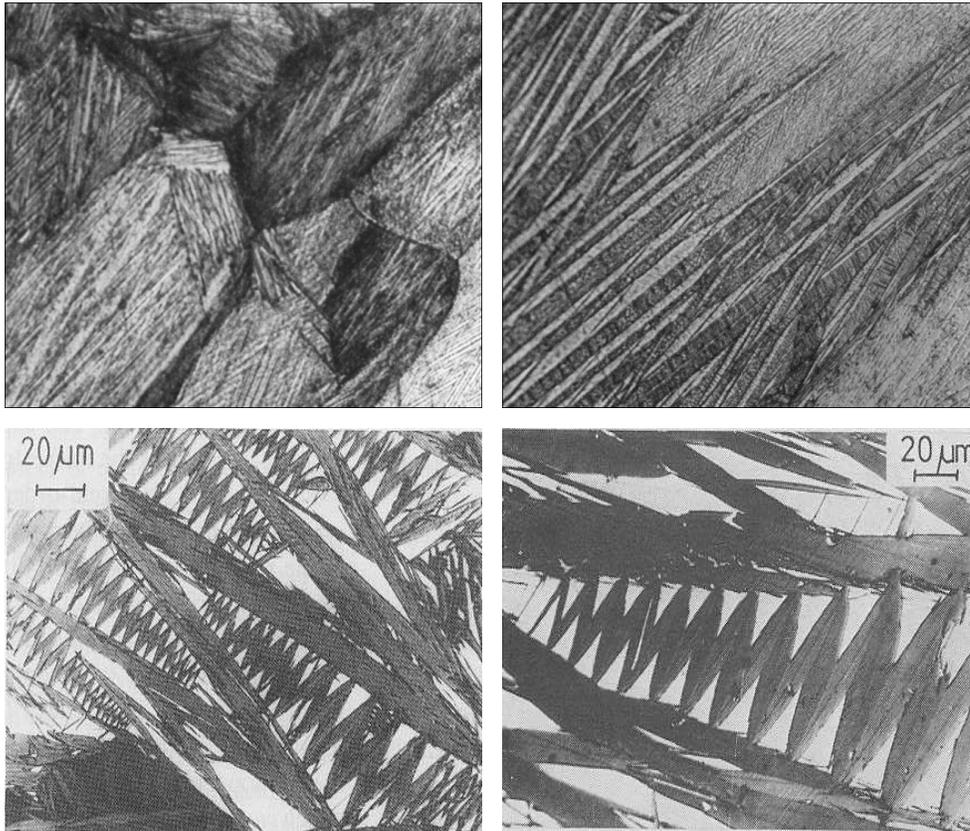


Abbildung 1.5: Mikroskopaufnahmen martensitischer Korngrenzen, wobei die Form der Martensitkristalle und die Entstehung von neuen Varianten innerhalb eines Martensitkristalls (Reorientierung) gut zu erkennen sind [26, 34, 42, 41].

In dieser Arbeit werden polykristalline SMA mit hinreichend kleinen Korngrößen<sup>8</sup> betrachtet und es wird keine vorhandene Struktur in der Legierung angenommen, so dass mit guter Näherung isotrope Polykristalle vorliegen.

## 1.6 Materialeigenschaften

Da in einer SMA auf Grund der Phasenumwandlung gleichzeitig mehrere Phasen vorkommen können, sind die unterschiedlichen elastischen Eigenschaften der einzelnen Phasen auch zu berücksichtigen. Experimentelle Ergebnisse haben gezeigt, dass die Unterschiede zwischen den Elastizitätskonstanten des Austenits und des Martensits im Falle des Ferromartensits nicht vernachlässigbar sind. Demgegenüber sind die Unterschiede bei nicht ferromartensitischen Fälle nahezu

<sup>8</sup>Relativ zur Geometrie des betrachteten/modellierten Körpers.

vernachlässigbar [20].

Weitere **charakteristische Materialgrößen** von SMA, die spezielle Eigenschaften beschreiben, müssen identifiziert werden. Es sind dies die Umwandlungstemperaturen und Spannungsgrenzen, bei denen die unterschiedlichen MPhU ablaufen, und der maximale Betrag der TID. Diese Werte bestimmen zusammen mit der Stabilität des SME (Ermüdungseffekte, Änderungen der Eigenschaften) weitgehend auch den möglichen Anwendungsbereich von SMA.

Aus historischen Gründen werden zuerst spezielle Temperaturwerte genannt, weil bei den gewöhnlichen Legierungen die MPhU durch Temperaturänderung hervorgerufen wird.

1. Die Anfangs- und Endtemperaturen der Austenit-Martensit-Umwandlung<sup>9</sup> sind die Temperaturwerte  $M_s$  (“start”) und  $M_f$  (“finish”), die vom Spannungszustand abhängen (siehe Abb. 1.6). Im Idealfall ist der martensitische Volumenanteil bei  $M_s$  0%, bei  $M_f$  100%. Für den Endpunkt der Umwandlung können eventuell andere prozentuale Werte festgelegt werden, entsprechend der von der Legierung abhängigen Restaustenitmenge<sup>10</sup> und Umwandlungsablauf (z.B. Zeitabhängigkeit). Weil diese Umwandlungstemperaturen im Allgemeinen spannungsabhängig sind, werden deren Werte für den spannungsfreien Fall mit  $M_{s0}$  bzw.  $M_{f0}$  speziell gekennzeichnet.
2. Die Anfangs- und Endtemperaturen der Martensit-Austenit-Umwandlung<sup>11</sup> sind die Temperaturwerte  $A_s$  (“start”) und  $A_f$  (“finish”), die ebenfalls spannungsabhängig sind. Analog zum vorher beschriebenen Fall werden deren Werte im spannungsfreien Zustand mit  $A_{s0}$  und  $A_{f0}$  bezeichnet.
3. Bei einer fixierten Temperatur können auch Spannungsgrenzen gemessen werden, bei denen die Umwandlung startet bzw. endet. Diese Spannungsgrenzen sind temperaturabhängig und werden in dieser Arbeit als  $\sigma_0(T)$  (bei  $M \rightarrow M$  bei Temperaturen bis zu  $M_{s0}$ ),  $\sigma_M(T)$  (bei  $A \rightarrow M$  bei Temperaturen über  $M_{s0}$ ) und  $\sigma_A(T)$  (bei  $M \rightarrow A$ ) bezeichnet.

Für die meisten Legierungen stehen die oben genannten Temperaturwerte in folgendem Verhältnis zueinander:

$$M_{f0} < M_{s0} < A_{s0} < A_{f0} .$$

Diese Spannungs- und Temperaturwerte beschreiben Umwandlungsgrenzen, die zuerst von TANAKA [104], später von BRINSON [18] in einem Temperatur-Spannungsdiagramm (siehe Abb. 1.6) zusammengefasst und experimentell gemessen

<sup>9</sup>Wird mit  $A \rightarrow M$  PU gekennzeichnet.

<sup>10</sup>Der Restaustenit ist der Austenitanteil, der nicht in Martensit umgewandelt werden kann (siehe Abb. 1.1d). Dieser ist bei polykristallinen Legierungen immer größer als Null.

<sup>11</sup>Wird mit  $M \rightarrow A$  gekennzeichnet.

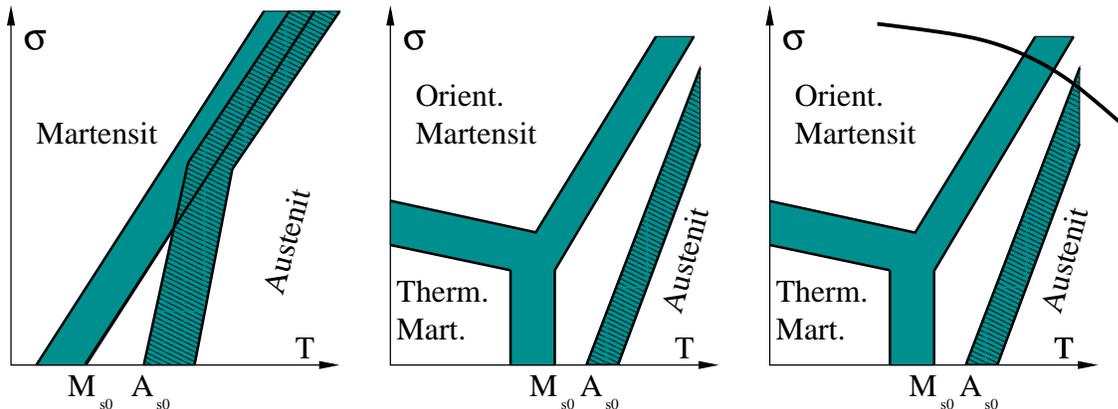


Abbildung 1.6: Schematische Umwandlungsdiagramm von SMA a) nach TANAKA, b) nach BRINSON, c) erweitert mit Berücksichtigung der Plastizität.

wurden. In diesen Arbeiten wurde die Abhängigkeit der Umwandlungsgrenzen von der Temperatur bzw. vom Spannungszustand erstmals zusammenhängend in einem großen Bereich des  $\sigma - T$ -Raumes beschrieben und dadurch die Modellierung der sich mit der Temperatur stetig und auch sich qualitativ ändernden SME ermöglicht (siehe noch Abschnitt 4.2). Diese Arbeit basiert ebenfalls auf diesen Ergebnissen (siehe ausführlich Abschnitt 3.1.2).

## 1.7 Zusammenhänge zwischen Kristall- und Materialeigenschaften

Die Wahl der chemischen Zusammensetzung und der Kristallstruktur sind zwei grundsätzliche Mittel der Legierungsplanung für Materialien mit gewünschten physikalischen Eigenschaften. Die charakteristischen Materialgrößen werden im Fall von SMA entscheidend durch Zusammensetzung und Struktur beeinflusst. Bereits kleine Änderungen der Zusammensetzung führen zu deutlichen Änderungen der charakteristischen Eigenschaften. Derartige Änderungen können bei der ungenauen Zusammenstellung der Legierer und auch bei der Ausformung des Bauteils unbeabsichtigt zustande kommen. Deshalb müssen sie auch bei der Modellierung bzw. bei den Anwendungen berücksichtigt werden. Nun werden grundlegende Zusammenhänge zwischen metallurgischen und thermomechanischen Eigenschaften der Legierungen aufgelistet.

*Fremdatome:* Man spricht von Fremdatomen wenn sich in einem Kristall, der aus Atomen einer Sorte A besteht, einzelne Atome einer zweiten Sorte B befinden. Diese können entweder den regulären Gitterplatz eines Atoms A besetzen (Substitution) oder sie können sich auf einem sog. Zwischengitterplatz aufhal-

ten. Dies tritt besonders dann ein, wenn die Atome B klein im Vergleich zu den Atomen A sind. Schon kleine Mengen solcher Fremdatome können die Materialeigenschaften sehr stark beeinflussen. Wenn die Grundlegierung mit Legierungen unterschiedlicher Atomdurchmesser legiert wird (z.B. Fe mit Al, Si oder Ge), führt dies zu einer Kristallhärtung und beeinflusst auch stark die Umwandlungstemperaturen. Einerseits können bei richtiger Auswahl der Legierer die Umwandlungstemperaturen in einem großen Bereich bestimmt werden, andererseits erzeugen große Umwandlungstemperaturänderungen aufgrund kleiner Konzentrationsänderungen erhebliche Schwierigkeiten bei der Herstellung.

*Plastische Deformation:* Bei plastischen Deformationen kann eine Doppelwirkung beobachtet werden. Einerseits wird die innere Deformation gesteigert und damit auch die Anzahl der Kristalldefekte erhöht, die als Martensitkeime dienen. Andererseits wird das Wachstum der Martensitkristalle durch Bildung weiterer Versetzungen erschwert und damit die Zwillingsbildung und das Gleiten behindert.

Experimente haben gezeigt, dass die Zunahme der Kristalldefekte zu einer Abnahme der Differenz zwischen  $M_{s0}$  und  $A_{s0}$  führt [89], d.h. steigende  $M_{s0}$  und sinkende  $A_{s0}$  Temperaturen und folglich Schrumpfung der thermischen Hysterese<sup>12</sup>.

Das erschwerte Wachstum der Martensitkristalle verursacht steigende kritische Spannungen bei der Umwandlung, da die Bildung weiterer Versetzungen die freie Bewegung der Phasengrenzen behindert [36, 112]<sup>13</sup>. Sowohl die kritischen Spannungen  $\sigma_M(T)$  und  $\sigma_A(T)$  als auch die Breite der Spannungsbereiche der Hin- und Rückumwandlung nehmen zu.

*Zyklische Belastung:* Zwei Grundformen der zyklischen Belastung können diskutiert werden, die isotherme und die thermische Form<sup>14</sup>. Im ersten Fall erzeugen die mechanischen Belastungen immer größere bleibende Deformationen durch Erzeugen weiterer Versetzungen, womit auch die Zunahme des Restaustenitanteils verbunden ist. Ähnlich zur Wirkung der plastischen Deformation wird die Spannungsgrenze  $\sigma_M$  durch die steigende Versetzungsdichte gesenkt. Der SME tritt wegen des steigenden Restphasenanteiles nach einer kritischen Belastungszyklenzahl nicht mehr auf [74, 92]. Bei thermischen zyklischen Belastungen kann ein

<sup>12</sup>Siehe Zweivegeeffekt in Abschnitt 1.8.1.

<sup>13</sup>Z.B. wenn eine nicht ideale SMA-Probe (d.h., dass auch plastische Effekte unter der MPhU auftreten) mechanisch belastet wird, gilt: Je niedriger die Temperatur ist, desto höher ist der Anteil der TID, der durch Erwärmung zurückgewonnen wird, und desto besserer SME kann erzielt werden. Dies deutet auf die Wirkung der plastischen Versetzungen hin: weil die plastische Fließgrenze bei niedrigeren Temperaturen höher liegt, treten die durch Plastizität induzierten Kristalldefekte bei der Belastung später auf und behindern demzufolge die MPhU weniger.

<sup>14</sup>SME können durch thermische und/oder mechanische Belastungen hervorgerufen werden. Um die Diskussion zu vereinfachen, werden diese Effekte getrennt diskutiert. Sie treten in der Praxis gleichzeitig auf, wobei eine von ihnen dominierend ist.

asymptotischer Zuwachs der bleibenden Deformationen beobachtet werden, wobei auch die kritische Temperatur  $M_{s0}$  ansteigt [13, 92].

*Korngröße:* Im Fall der Plastizität ist bekannt, dass die Fließgrenze mit sinkender Korngröße steigt. Weiterhin behindert die höhere Anzahl der Korngrenzen stärker die Versetzungsbewegung und führt damit zu einer stärkeren Verfestigung unter Plastifizierung. Weil die sinkende Korngröße gleichzeitig eine höhere Anzahl von Kristalldefekten bedeutet, erhöhen sich auch die Spannungsgrenzen der Phasenumwandlung durch erschwerte Keimbildung. Weiterhin kann eine kleiner werdende Effektgröße beobachtet werden, die auf den steigenden Restaustenitanteil zurückgeführt werden kann. Damit stellt die kleine Korngröße einerseits einen Nachteil bei SME dar. Andererseits bedeutet sie gleichzeitig ein mehr homogenes und isotropes Materialverhalten, weil die Einzelkristalle in den Körnern mit starker Anisotropie weniger die makroskopischen Materialeigenschaften prägen.

## 1.8 Formgedächtniseffekte

### 1.8.1 Zweiwegeeffekt (*Two-Way-Effect*)

Die Ausgangstemperatur liegt bei  $T < M_f$ , siehe Abb. 1.7a. Dieser Effekt tritt nur nach speziellen Behandlungen auf und ist stark von diesen abhängig. Streng genommen stellt der Zweiwegeeffekt damit keine Materialeigenschaft dar. Bei der Behandlung werden bleibende Versetzungen durch vielfältige zyklische Beanspruchungen hervorgerufen<sup>15</sup>, die bei der Abkühlung bestimmte Martensitvarianten durch innere Spannungen begünstigen. Deshalb entstehen einige Martensitvarianten in größerem Anteil aus dem Austenit unter Abkühlung anstelle einer gleichmäßigen Verteilung von Martensitvarianten und induzieren eine makroskopische Deformation (Form *B*)<sup>16</sup>. Beim Zweiwegeeffekt geschieht die Formänderung allein aufgrund der Änderung der Temperatur. Bei Erwärmung über die Temperatur  $A_f$  wandelt sich die martensitische *Ausgangsstruktur* in Austenit um bzw. bei Abkühlung unter  $M_f$  in die “gelernte Form” des Martensits zurück (Form *A*). Damit kann eine Tieftemperatur-Form *A* und eine Hochtemperatur-Form *B* beobachtet werden. Die Temperaturhysterese ( $A_f - M_f$ ) ist durch die Wahl der Legierer zwischen  $0.1 \text{ }^\circ K$  und  $100 \text{ }^\circ K$  einstellbar.

---

<sup>15</sup>Die zyklischen Beanspruchungen können sowohl mechanische Belastungen bei konstanter Temperatur als auch Abkühlungs-Erwärmungs-Zyklen bei konstanter Spannung sein, wobei die zyklische Beanspruchung bei konstanter Spannung einen größeren Zweiwegeeffekt erzeugt [74, 75, 92]. Dieser Effekt kann auch durch reine Zwillingbildung und Reorientierung ohne Phasenumwandlung erzielt werden [80].

<sup>16</sup>Der maximale Betrag der Formänderung ist immer kleiner als beim Einwegeeffekt.

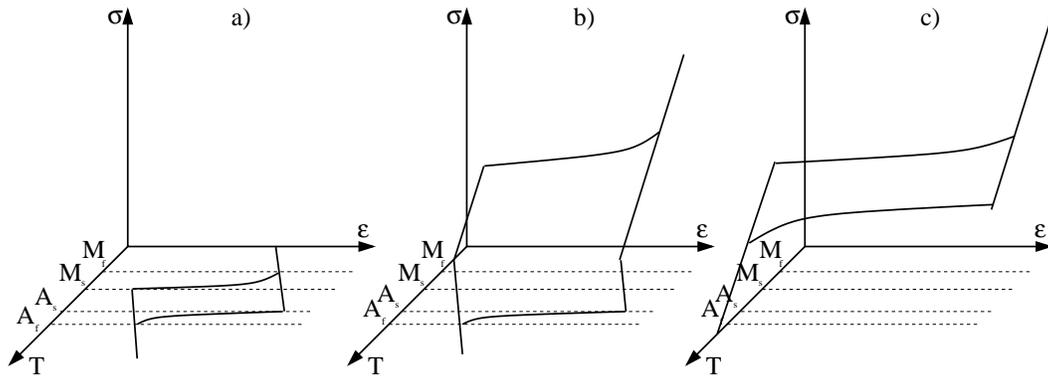


Abbildung 1.7: Formgedächtniseffekte: a) Zweiwegeeffekt, b) Einwegeffekt, c) Pseudoelastizität.

### 1.8.2 Einwegeffekt (*One-Way-Effect*)

Die Ausgangstemperatur liegt bei  $T < A_s$ , siehe Abb. 1.7b. Dieser Effekt kann bei allen SMA ohne spezielle Behandlung beobachtet werden. Unter dem Einwegeffekt wird eine mechanisch-thermische Beanspruchung der SMA verstanden, wobei zuerst die martensitische, unstrukturierte Ausgangsphase (Form *A*) bei niedriger Temperatur belastet wird. Nach hinreichend großer Belastung entstehen orientierte Martensitkristalle durch Zwillingsbildung (bzw. Reorientierung) und induzieren neben dem elastischen Verzerrungsanteil zusätzliche makroskopische Verzerrungen, die nach der Entlastung zurückbleiben (Form *B*). Im entlasteten Zustand kann eine MPhU durch Erwärmung über  $A_{f0}$  erzeugt werden, wobei sich der orientierte Martensit in Austenit umwandelt. Da die entstehenden Austenit-Kristalle keine Struktur aufweisen, bauen sich die spannungsinduzierten Verzerrungen durch MPhU ab und der Körper nimmt wieder die ursprüngliche Form an (Form *A* mit thermischer Ausdehnung). Bei der Abkühlung bis zur Ausgangstemperatur entstehen mangels orientierender Kraft unstrukturierte Martensitkristalle, die keine zusätzlichen Verzerrungen bilden (Form *A*, Abbau der thermischen Ausdehnung)<sup>17</sup>.

### 1.8.3 Pseudoelastizität (*Pseudoelasticity*)

Die Ausgangstemperatur liegt bei  $T > A_f$ , siehe Abb. 1.7c. Dieser Effekt tritt auch ohne spezielle Behandlung bei allen SMA unter einer Belastungs-Entlastungs-Schleife im Temperaturbereich  $T > A_f$  auf. Bei diesen Temperaturen ist der

<sup>17</sup>Der gleiche Prozess kann im Temperaturbereich  $M_s < T < A_s$  auch mit austenitische Ausgangsphase erzielt werden, wobei orientierter Martensit durch MPhU unter hinreichend großer Belastung entsteht, der zusätzliche Verzerrungen erzeugt (und dadurch kommt Form *B* zustande).

Austenit die stabile Phase, der sich unter Belastung über  $\sigma_M$  in strukturierten Martensit umwandelt. Bei dieser Umwandlung entsteht orientierter Martensit, wobei die Orientierung der angelegten Belastung entspricht. Diese Orientierung des Martensits ruft auch TID hervor. Jedoch wird diese zusätzliche Dehnung bei der Entlastung unter  $\sigma_A$  durch eine MPhU in Austenit wieder vollständig abgebaut, wobei Energie durch innere Reibungen dissipiert, so dass eine Hysterese zu beobachten ist. Weiterhin kommt eine nicht vollständig durchgeführte Belastungs-Entlastungs-Schleife oft vor, wobei nur ein Teil des Volumens an der Phasenumwandlung teilnimmt. Durch solche Belastungen entsteht eine Teil-Hysterese-Schleife, die in der Literatur **Subloop** genannt wird. Die Modellierung von *Subloops* ist Gegenstand der aktuellen Forschung [21, 65, 106, 107].

## 1.9 Anwendungen

Einige typische praktische Anwendungsbeispiele von SMA werden hier vorgestellt. Bei Anwendungen von SMA stellen die folgenden Eigenschaften große *Vorteile* dar: es wird eine große Leistungsfähigkeit pro Volumeneinheit erzielt<sup>18</sup>. Auch mit einfacher Konstruktion sind komplizierte Bewegungsarten realisierbar. Es können einfache Aktivierungsprozesse verwendet werden<sup>19</sup>. SMA zeigen stabile mechanische und physikalische Eigenschaften und ermöglichen Bewegungen ohne motorischen Antrieb. SMA-Konstruktionen haben damit ein sehr niedriges Versagensrisiko<sup>20</sup>. SMA ermöglichen einfache und billige Herstellungsverfahren durch einfache Konstruktionen und erlauben eine Miniaturisierung<sup>21</sup>.

Bei der Anwendung müssen jedoch *Nachteile* beachtet werden, wie schwierige Herstellungsprozesse und teure Legierungskomponenten bzw. bei billigeren Legierungen deutlich niedrigere Effektstabilität. Auch die durch thermische Aktivierung entstandene Wärme kann in vielen Fällen nicht genügend schnell abgeführt werden, um eine gewünschte Arbeitsfrequenz zu ermöglichen.

Heutzutage werden alle drei Grundeffekte bzw. deren Übergangseffekte technisch angewandt. Hierbei sind zwei Arten der Anwendung vorstellbar: entweder kann man die Formänderung der SMA direkt verwenden (*freie Formänderung*) oder man kann die Formänderung unterbinden und die entstehenden Spannungen nutzen (*unterdrückte Formänderung*). Im Folgenden werden Beispiele für beide Anwendungsarten aufgezeigt.

---

<sup>18</sup>Die erzeugbare Leistung pro Volumeneinheit bei Bewegungen gegenüber herkömmlichen Motoren.

<sup>19</sup>Z.B. Erwärmung durch elektrischen Widerstand.

<sup>20</sup>Besondere Bedeutung bei der Luft- und Raumfahrttechnologie.

<sup>21</sup>Mikrotechnologie, Medizintechnik, usw. siehe auch [53]

Die bekanntesten Beispiele für die Anwendung des Einwegeffektes sind Rohrverbindungen oder andere mechanische und elektrische Verbindungen. Der Einwegeffekt wird wegen seiner großen Zuverlässigkeit als Triebkraft für die einmalige Öffnung von Solarzellen eines Satelliten im Weltraum ausgenutzt. TiNi Legierungen sind wegen ihrer hohen Festigkeit hierfür besonders geeignet. Eine große Anzahl von Anwendungen von SMA gibt es in der Medizintechnik durch die gute Biokompatibilität und auch durch den niedrigeren Materialbedarf. Sie reichen von Implantaten, Bandscheibenersatz, Stents zum Aufweiten von Adern, Endoskope, die ihre Form an die Darmwindungen anpassen können (Zweiwegeffekt), Mikroaktoren bis zu Zahnspannen, die einen optimalen gleichmäßigen Druck auf das zu korrigierende Gebiss ausüben (Pseudoelastizität). Ein noch unerschlossenes Gebiet sind die SMA-Wärmekeftmaschinen. Sie sind in der Lage, geringe Temperaturunterschiede in Drehbewegung umzusetzen. Als weitere Einsatzmöglichkeit kann man die seismische Isolierung nennen, wobei die Energie der pseudoelastischen Hysterese für die Energiedissipation genutzt wird [108].

Legierungen mit Formgedächtnis gehören zu den intelligenten Materialien (*smart materials*) wie z.B. piezo-elektrische und magnetostriktive Werkstoffe. Letztere zeigen auch Formänderungen ( $< 0.1\%$ ), die aber fast zwei Größenordnungen kleiner als die der SMA ( $< 10\%$ ) sind, siehe [34, 43].

## 1.10 Annahmen der Modellbildung

In dieser Arbeit werden polykristalline SMA mit einer hinreichend kleinen Korngröße betrachtet. Es wird keine vorhandene Struktur in der Legierung angenommen, so dass die Annahme von isotropem Materialverhalten eine gute Näherung darstellt. Weiterhin wird die Plastifizierung während der MPhU vernachlässigt. Es wird also ein reines, reversibles Formgedächtnisverhalten angenommen. Die charakteristischen Materialeigenschaften der Legierung werden als konstant und von der Belastungsgeschichte unabhängig angenommen. Eine Ermüdung der Effekte wird dabei nicht berücksichtigt. Ferner werden die elastischen Eigenschaften der Ausgangs- und Produktphasen als gleich beschrieben, was im Fall einer Nicht-Eisen-Legierung mit guter Näherung zutreffend ist.

Erweiterungen des Modells sind aber möglich, die hier vernachlässigte Eigenschaften der SMA auch berücksichtigen.

# Kapitel 2

## Thermodynamische Grundlagen

In diesem Kapitel sollen einige Grundbegriffe der Theorie der irreversiblen Thermodynamik zur Entwicklung mechanischer Kontinuumsmodelle eingeführt werden. Speziell wird auf den ersten und zweiten Hauptsatz, den Begriff von inneren Variablen und deren Evolutionsgleichungen sowie die Definition der freien Energie eingegangen. Eine thermodynamisch basierte Vorgehensweise bietet bei der Modellierung neuartiger mechanischer Phänomene einen guten Ausgangspunkt und einen systematischen Rahmen und zeigt Grenzen auf, wie weit ein neues Modell seinen physikalischen Sinn bewahrt.

Die klassische Thermostatik und Thermodynamik und ihre Aussagen beschränken sich auf Gleichgewichtszustände. Wenn Prozesse sehr (aber endlich) langsam ablaufen, können sie als quasistatische Prozesse, als Abfolge von Gleichgewichtszuständen betrachtet werden. Dagegen sind wirkliche, nicht ideale Vorgänge stets mit endlicher Geschwindigkeit verlaufende irreversible Prozesse, Ausgleichsvorgänge gestörter Gleichgewichte.

Die irreversible Thermodynamik stellt als Thermodynamik des Nichtgleichgewichts einen formalen Rahmen für die makroskopische Beschreibung irreversibler Prozesse dar. Sie ist eine phänomenologische, aber logisch selbständige Theorie der Vorgänge in kontinuierlicher Materie, die sich für quasistatische Prozesse in diskontinuierlichen Systemen auf die klassische Thermodynamik (Thermostatik) reduziert. Dabei müssen lokale Zustandsvariablen eingeführt werden, die Feldvariablen sind, d.h. stetige Funktionen der Raumkoordinaten und der Zeit darstellen.

Die Methoden der irreversiblen Thermodynamik erlauben die Herleitung eines vollständigen Systems von Gleichungen für komplexe Phänomene. Die Universalität dieser Methode beruht auf der Universalität ihrer Grundlagen, den Hauptsätzen der Thermodynamik. Ein besonderer Vorteil der irreversiblen Thermodynamik

ist, nicht nur einfache irreversible Prozesse wie z.B. Wärmeleitung, innere Reibung, Diffusion oder chemische Reaktionen zu erfassen, sondern auch alle Kreuzeffekte zwischen den Einzelprozessen konsistent zu beschreiben.

## 2.1 Thermodynamischer Zustand und Prozess

Eine thermodynamische **Zustandsvariable**  $\phi_i \in \mathbb{R}^{n_i}$ ,  $i = 1, \dots, N$  ist eine makroskopische Größe mit beliebigen tensoriellen Eigenschaften ( $n_i = 1, 3, 6, 9$  usw.)<sup>1</sup>, die für das **materielle System**  $\Xi$  charakteristisch und durch eine Messvorschrift definiert ist. Das materielle System  $\Xi$  ist ein topologisch offener Bereich in dem materiellen Universum (dreidimensionaler Euklidischer Raum der klassischen Physik). Die Wahl von thermodynamischen Zustandsvariablen hängt nicht nur von der physikalischen Natur des Systems  $\Xi$  und deren Transformationen ab, sondern auch von der gewählten Methode und Genauigkeit der Beschreibung. Deswegen kann die Zahl  $N$  von angenommenen Zustandsvariablen sich nach unterschiedlichen Systemen und Theorien unterscheiden. Der gewählte Satz von thermodynamischen Zustandsvariablen  $\phi_i$ ,  $i = 1 \dots N$  errichtet beim charakterisierten System  $\Xi$  in einem Moment  $t$  den **thermodynamischen Zustand**  $\Theta(\phi_1, \dots, \phi_N, t)$  des materiellen Systems in der angegebenen Zeit  $t$ . Die Gesamtheit möglicher thermodynamischer Zustände heißt **thermodynamisches System**. Der Übergang zwischen zwei thermodynamischen Zuständen wird als **thermodynamischer Prozess** bezeichnet. Dieser Prozess ist **reversibel**, wenn der umgekehrte Prozessablauf in der Zeit durch die gleichen Schritte geschieht, wie ein Film, der zurückgespult wird. Alle andere Fälle sind irreversible thermodynamische Prozesse.

Die Thermostatik und die klassische Thermodynamik beschreiben reversible thermodynamische Prozesse. Hierbei können die Definitionen der Temperatur und der Entropie durch Gleichgewichtszustände verwendet werden und die Prozesse als statisch/quasistatisch und reversibel angenommen werden. Die Theorie der irreversiblen Thermodynamik beschreibt dagegen thermodynamische Prozesse und Zustände außerhalb des Gleichgewichtszustands. Wie thermodynamische Zustände außerhalb des Gleichgewichts charakterisiert werden können, wird mit unterschiedlichen Theorien beschrieben. Eine Zusammenfassung findet man z.B. in [24, 25, 61, 101]. In dieser Arbeit wird nun die Methode der *Thermodynamik mit inneren Variablen* dargestellt und später verwendet, um einen allgemeinen Rahmen für die makroskopische Beschreibung von irreversiblen Prozessen in SMA zu gewinnen. Diese Methode findet heutzutage auch bei den meisten modernen kontinuumsmechanische Materialtheorien Anwendung: bei den meisten Modellen für

<sup>1</sup>Entsprechend einer skalaren, vektoriellen, symmetrisch tensoriellen und einer allgemeinen tensoriellen Variablen.

Probleme der Plastizität, Schädigung und Beschreibung von *smart* Materialien.

In der Kontinuumsmechanik wird angenommen, dass ein materielles Volumen existiert, das so genannte **representative Volumen-Element (RVE)**, das statistisch repräsentativ für den Körper ist. Dieses RVE soll entsprechend der Mikrostruktur des Materials gewählt werden, so dass alle makroskopischen Zustandsvariablen im RVE als konstant angenommen werden können. Speziell bei den SMA bedeutet dies eine entsprechend kleine Kristallitgröße.

## 2.2 Innere Variablen

In der Theorie der **Thermodynamik mit inneren Variablen** werden weitere zusätzliche Zustandsvariablen  $\xi_i \in \mathbb{R}^{n_i}$ ,  $i = 1 \dots N_1$  mit unterschiedlichen tensoriellen Eigenschaften, den so genannten **inneren Variablen**, neben gewöhnlichen, messbaren Zustandsvariablen  $\phi_j$ ,  $j = 1 \dots N_0$  (wie Temperatur oder totale Verzerrung) eingeführt, um den allgemeinen thermodynamischen Zustand  $\Theta$  des Systems  $\Xi$  auch außerhalb des Gleichgewichts beschreiben zu können:

$$\Theta(\Xi, t) = \Theta(\phi_1, \dots, \phi_{N_0}, \xi_1, \dots, \xi_{N_1}, t), \quad (2.1)$$

wobei  $N = N_0 + N_1$  gilt. Diese zusätzlichen Variablen  $\xi_i$ ,  $i = 1 \dots N_1$  charakterisieren die innere Struktur des Materials und bleiben vor den Augen des äußeren Beobachters meistens versteckt. Nach MANDEL können wir immer sagen, dass *der schlaue Physiker immer probiert die inneren Variablen zu beobachten und zu messen*. Das heißt, dass die inneren Variablen in der Praxis messbar, aber meistens nicht kontrollierbar sind. Die inneren Variablen haben eine eindeutige physikalische Bedeutung.

Topologisch können die Nichtgleichgewichtprozesse folgendermaßen aufgefasst werden: Die eingeführten, zusätzlichen inneren Variablen erweitern die Dimension des Zustandsraums mit weiteren Koordinaten. Die zeitunabhängigen Zustände des isolierten Systems werden Gleichgewichtszustände genannt. Durch die Gleichgewichtszustände wird ein Unterraum des neuen ausgedehnten Zustandsraums aufgespannt, der Gleichgewichtsunterraum genannt wird. Die Trajektorien der Nichtgleichgewichtprozesse im Gleichgewichtsunterraum sind die reversiblen Prozesse ([61, 66], siehe Abb. 2.1). Im Allgemeinen werden aber die inneren Variablen auch im Gleichgewichtszustand benötigt, um den thermodynamischen Zustand zu beschreiben (siehe neues Modell in Abschnitt 3.2).

Bei der Wahl der inneren Variablen sind folgende allgemeine Kriterien bei der Modellbildung zu beachten:

- In einem neu zu entwickelnden Modell sollen zuerst die Zahl und die Dimen-

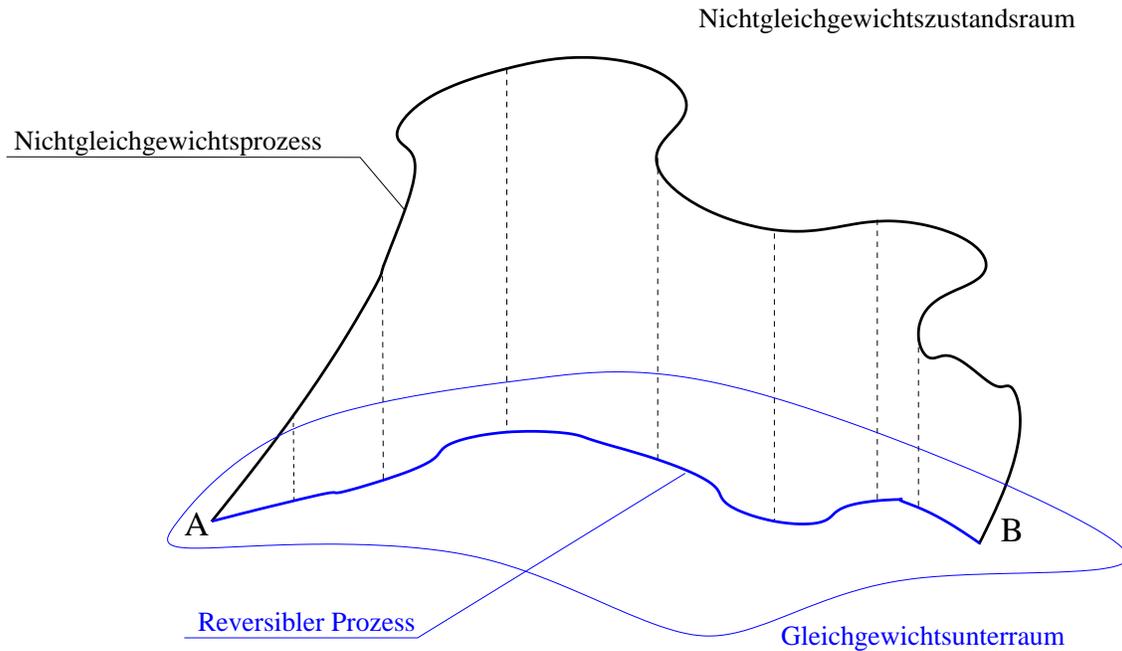


Abbildung 2.1: Reversibler Prozess als Trajektorie im Gleichgewichtsunterraum des Nichtgleichgewichtsprozesses zwischen zwei thermodynamischen Zuständen  $A$  und  $B$ .

sion der Zustandsvariablen festgelegt werden, wobei die Anzahl der zusätzlich eingeführten inneren Variablen möglichst niedrig gehalten werden soll. Im Allgemeinen kann man sagen, dass eine endliche Anzahl von inneren Variablen genügt, um den gewünschten Effekt mit der erzielten Genauigkeit zu beschreiben.

- Die physikalische Natur der inneren Variablen soll definiert werden. Im Allgemeinen gilt, dass die inneren Variablen eine messbare, aber nicht kontrollierbare Eigenschaft des Systems beschreiben (wie bestimmte Phasenanteile in einer SMA). Daher kann den inneren Variablen eine klare physikalische Bedeutung zugeordnet werden.
- Weiterhin soll ihre Rolle in den Konstitutivgleichungen geklärt werden, damit ihre Bedeutung mit Hinsicht auf die mechanischen Eigenschaften dargestellt wird. D.h., die Spannung soll als Funktion der Zustands- und inneren Variablen angegeben werden:

$$\sigma = f_{\sigma}(\phi_1, \dots, \phi_{N_0}, \xi_1, \dots, \xi_{N_1}). \quad (2.2)$$

Die inneren Variablen charakterisieren die irreversiblen Prozesse im Material, und deren zeitliche Entwicklung ist durch die **Evolutionsgleichungen** gegeben.

Damit beschreiben diese Evolutionsgleichungen die Entwicklung der irreversiblen (dissipativen) Prozesse im Material (siehe noch Abschnitt 2.6).

## 2.3 Bilanzgleichungen

Die Bilanzgleichungen sind allgemein geltende Prinzipien bzw. universelle Naturgesetze, die somit von den speziellen Kontinuumseigenschaften unabhängig sind und für alle Prozesse gelten. Bilanzgleichungen werden zunächst in integraler Form als globale Aussagen für den Gesamtkörper angegeben. Für hinreichend glatte Felder der zu bilanzierenden Größen können aber auch lokale Formulierungen in Differentialgleichungsform, die sich auf einen beliebigen kleinen Teil des Körpers beziehen, gewählt werden. Bleibt bei einem zu bilanzierenden Prozess die Bilanzgröße unverändert erhalten, haben die Bilanzgleichungen den Charakter von Erhaltungssätzen [2].

Formuliert werden hier die Bilanzgleichungen bzw. Erhaltungssätze für Masse, Impuls, Energie und Entropie.

### 2.3.1 Massenbilanz

Die Masse ist eine charakteristische Eigenschaft eines materiellen Körpers, die folgende drei grundlegende Eigenschaften vorweist: positive skalare, additive und bei der Bewegung sich nicht ändernde Größe. Aus der Additivität und Positivität folgt, dass die Masse ein positives skalares Maß im mathematischen Sinne für den Körper darstellt. In der Kontinuumsmechanik wird angenommen, dass dieses Maß stetig ist und deshalb eine Funktion  $\rho(\mathbf{x}, t)$  (Dichte) existiert, womit die Masse eines bestimmten Gebietes  $V$  des dreidimensionalen Euklidischen Raums im Zeitpunkt  $t$  wie folgt definiert werden kann:

$$m(t) = \int_V \rho(\mathbf{x}, t) dV, \quad (2.3a)$$

wobei in  $\mathbf{x}$  die Koordinaten eines materiellen Punktes des Körpers in der lokalen Konfiguration zusammengefasst sind. Die Massenbilanz besagt:

**Satz:** *Die Masse  $m$  eines Körpers bei fehlendem Masseaustausch über die Oberfläche und fehlendem Zuwachs oder Verlust von Masse im Inneren des Körpers bleibt für alle Zeiten konstant.*

Damit gilt:

$$m = m(t) = m(t_0) = \int_V \rho(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V_0} \rho_0(\mathbf{X}, t_0) dV_0, \quad (2.3b)$$

wobei  $V_0$  bzw.  $V$  die Volumen des Körpers zum Ausgangszeitpunkt  $t_0$  bzw. zu einem beliebigen Zeitpunkt  $t$ ;  $\mathbf{X}$  die Koordinaten des materiellen Punktes in der Ausgangskonfiguration bei  $t_0$  sind. Für einen beliebigen kleinen Teil des Körpers mit dem Volumen  $dV$  gilt mit Berücksichtigung des Bewegungsgesetzes

$$dm = \rho_0 dV_0 = \rho dV = \rho J dV_0, \quad (2.3c)$$

wobei  $J$  die Quadratwurzel der Determinante des Greenschen Verzerrungstensors (siehe u.a. [7]) ist und die Stetigkeit der Massenverteilung berücksichtigt wurde. Die Zeitableitung beider Seiten liefert die lokale Form der Massenbilanzgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.3d)$$

wobei  $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}|_{\mathbf{X}=\text{konst}}$  die Geschwindigkeit des lokalen materiellen Punktes ist.

### 2.3.2 Impulsbilanz

Der Impulsvektor  $\mathbf{p}$  eines Körpers ist gegeben mit (2.3c) als

$$\mathbf{p}(t) = \int_m \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) dm = \int_V \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t) dV. \quad (2.4a)$$

Die globale Impulsbilanz entspricht dem 2. Newtonschen Grundgesetz für Kontinua und kann wie folgt formuliert werden:

**Satz:** *Die Änderungsgeschwindigkeiten des Gesamtimpulses  $\mathbf{p}$  bei Deformation des Körpers ist gleich der Summe aller auf den Körper von außen wirkenden Oberflächen- und Volumenkräfte.*

Damit gilt:

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = \frac{d}{dt} \int_V \mathbf{v} \rho dV = \int_A \mathbf{t} dA + \int_V \mathbf{b} dV, \quad (2.4b)$$

wobei  $\mathbf{t}(\mathbf{x}, t)$  die Oberflächenkraft und  $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$  die Volumenkraft sind. Hierbei sind alle Größen in der lokalen Konfiguration gegeben (für die Formulierung in der Ausgangskonfiguration siehe [2, 7]). In lokaler Formulierung folgt daraus:

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \sigma_{ij,j} + b_i, \quad (2.4c)$$

wobei  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$  der Cauchy'sche Spannungstensor ist.

### 2.3.3 Energiebilanz, erster Hauptsatz der Thermodynamik

Der erste Hauptsatz der Thermodynamik stellt die Energiebilanz für ein beliebiges Volumen eines Körpers dar:

**Satz:** Die zeitliche Änderung der Gesamtenergie  $W$  innerhalb des betrachteten Volumens ist gleich der Summe aus der Geschwindigkeit der Wärmezufuhr  $Q$  sowie der Leistung  $P$  aller äußeren Kräfte, d.h. die Änderungsgeschwindigkeit der Gesamtenergie  $W$  ist gleich der gesamten äußeren Energiezufuhr  $P + Q$  [2].

Damit gilt:

$$\frac{dW}{dt} = P + Q. \quad (2.5a)$$

Die Gesamtenergie des Körpers setzt sich aus der inneren Energie  $U$  und der kinetischen Energie  $K$  zusammen:

$$W = U + K, \quad (2.5b)$$

wobei folgende Zusammenhänge gelten:

$$U = \int_V u_0 \rho \, dV, \quad K = \frac{1}{2} \int_V \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \rho \, dV, \quad (2.5c)$$

wobei  $u_0$  die spezifische innere Energie (innere Energiedichte pro Masseneinheit) ist. Weiterhin kann die Leistung der äußeren Volumen- und Flächenkräfte wie folgt angegeben werden:

$$P = \int_A \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, dA + \int_V \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \rho \, dV. \quad (2.5d)$$

Die Wärmezufuhr setzt sich aus zwei Teilen zusammen: Ein Teil entsteht durch skalare Wärmequellen  $r$  (Wärmequellendichte pro Masseneinheit) im Volumen und der andere Teil besteht aus der Wärmezufuhr durch die Oberfläche  $A := \partial V$ :

$$Q = \int_V r \rho \, dV - \int_A \mathbf{n} \cdot \mathbf{h} \, dA, \quad (2.5e)$$

wobei  $\mathbf{h}$  der Wärmestromvektor pro Einheitsfläche von  $A$  und  $\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)$  der nach außen zeigende Normalenvektor der Oberfläche sind. Ein positiver Wärmestromvektor bedeutet hierbei eine Wärmezufuhr ins System.

### 2.3.4 Entropiebilanz, zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Während der erste Hauptsatz der Thermodynamik ausdrückt, dass die Gesamtenergie eines Systems immer erhalten bleibt, dass lediglich nur eine Transformation von einer Energieform in eine andere beobachtet werden kann, formuliert der zweite Hauptsatz die Aussage, in welche Richtung solche Transformationen ablaufen können und ob sie reversibel sind.

Die Entropie  $S$  ist eine additive Funktion (extensive Größe), die durch

$$S = \int_m s \, dm = \int_V s\rho \, dV \quad (2.6a)$$

definiert ist, wobei  $s$  die Entropiedichte ist.

**Satz:** *Nach der globalen Form des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik gilt für jeden thermodynamischen Prozess in einem abgeschlossenen System*

$$\frac{d}{dt} \int_V s\rho \, dV \geq \int_V \frac{r}{T} \rho \, dV - \int_A \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{h}}{T} \, dA. \quad (2.6b)$$

**Satz:** *Der zweite Hauptsatz in lokaler Form (die Clausius-Duhamsche Ungleichung) lautet:*

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho\dot{\Phi} - \rho s\dot{T} - \mathbf{h}\nabla\ln T \geq 0, \quad (2.6c)$$

wobei  $\Phi = u - Ts$  die freie Helmholtz-Energie, eine vernünftig gewählte Zustandsfunktion ist.

Hierbei kann angenommen werden, dass die thermische Dissipation  $-\mathbf{h}\nabla\ln T$  positiv ist. Damit ergibt sich die zweite Hauptsatz in einer strengeren Form, die besagt:

$$D = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho\dot{\Phi} - \rho s\dot{T} \geq 0. \quad (2.6d)$$

Hier wird die Funktion  $D$  als spezifische Dissipationsfunktion bezeichnet. Die Funktion  $D$  stellt ein Maß für die Energiedissipation im Kontinuum dar. Ist  $D = 0$ , tritt keine Dissipation auf und der Prozess ist reversibel<sup>2</sup>.

<sup>2</sup>Die hier eingeführte Reversibilität ist ein Ausdruck für thermodynamische Prozesse im energetischen Sinn. In dieser Arbeit wird weiterhin ein anderer Begriff *kristallographischer Reversibilität* verwendet, der einen rein geometrischen Zusammenhang zwischen Ausgang und Produkt-Kristallstruktur unter MPhU charakterisiert (siehe Abschnitt 1.2).

## 2.4 Freie Energie

Die freie Energie spielt in einem thermodynamischen Materialmodell eine grundlegende Rolle, sie ist eine Zustandsfunktion. Das vollständige Differential der freien Energie gibt bei konstanter Temperatur an, wieviel Energie in mechanische Arbeit höchstens umgewandelt werden kann. Die freie Helmholtz-Energie  $\Phi$  wird durch innere Energie und Entropie mittels der Legendreschen-Transformation (siehe Anhang A) wie folgt definiert:

$$\Phi = u - Ts . \quad (2.7)$$

Die konkrete Definition der freien Energie greift auf Materialeigenschaften zurück. Auch im Fall von SMA können folgende Kenntnisse zur Formulierung der freien Energie nützlich sein:

1. Unter mechanischer Belastung werden die Atomabstände in einem metallischen Material geändert. Dadurch kommen makroskopische elastische Deformationen zustande und Energie wird gespeichert. Ähnlich wirkt eine Temperaturerhöhung, wobei eine makroskopische Wärmeausdehnung zu messen ist und weitere Energie gespeichert wird. Diese experimentellen Beobachtungen werden im elastischen Anteil der freien Energie berücksichtigt.
2. Im Fall eines Mehrphasenmaterials kann davon ausgegangen werden, dass die einzelnen Phasen unterschiedliche Materialeigenschaften und unterschiedliche spezifische innere Energien besitzen. Dafür wird ein Term in der freien Energie eingeführt, der direkt mit dem Anteil der Phasen proportional ist.
3. Weiterhin kommt eine Energie auf Grund von Inkompatibilitäten der Kristallen entlang der Phasengrenzen zustande. Diese Energie wird durch den sogenannten *Mischungsterm* beschrieben, dessen Definition eine bis jetzt nicht eindeutig entschiedene Frage bei der Modellbildung darstellt. In dieser Arbeit wird die Annahme von LEXCELLENT und RANIECKI [55, 115] herangezogen.

Die freie Energie des gesamten Systems entsteht als Summe der obigen Terme.

## 2.5 Konstitutivgleichungen

Die Konstitutivgleichungen (Stoffgesetz) eines Materials drücken dessen spezifische mechanische Eigenschaften aus und stellen daher kein allgemein gültiges Naturgesetz dar. Sie hängen neben dem Material selbst auch von der Genauigkeit der Beschreibung ab.

**Definition:** Als **Konstitutivgleichungen** werden Gleichungen in dem Materialmodell genannt, die die das makroskopische Kontinuumsverhalten beschreibenden Zustandsvariablen miteinander verknüpfen [2].

**Definition:** Ein Material wird als **einfacher Körper 1. Grades** bezeichnet, wenn die Konstitutivgleichungen nur lokale Größen verknüpfen. Alle Aussagen beziehen sich auf den gleichen materiellen Punkt und seine differentielle Umgebung ersten Grades [2].

In dieser Arbeit werden SMA als einfacher Körper 1. Grades betrachtet. Es wird eine rein lokale Theorie für die thermomechanische Beschreibung von SMA entwickelt. Nichtlokale Effekte werden vernachlässigt.

Während der Modellbildung sind bei den Konstitutivgleichungen folgende Schritte erforderlich (siehe [113]):

1. Formulierung der Konstitutivgleichungen.  
Hierbei ist zu klären, welche Variablen die Eingangs- und Ausgangsvariablen sind. Im Fall von SMA werden neben der Spannung und der Deformation auch die Temperatur berücksichtigt, da viele Grundeffekte mit der Temperaturänderung verbunden sind.
2. Einarbeitung von Materialsymmetrien.  
In dieser Arbeit werden SMA als isotrop angenommen, d.h., dass keine Kristallstruktur vorhanden ist, die zu anisotropem Verhalten führt. Diese Annahme führt zu wesentlichen Vereinfachungen der Konstitutivgleichungen.
3. Einarbeitung kinematischer Einschränkungen.  
Da bei der Phasenumwandlung so gut wie keine Volumenänderungen auftreten, wird im Modell angenommen, dass die Volumenänderungen rein elastischen Ursprung haben.

Bei der Definition der Konstitutivgleichungen sollen vor allem die Axiome der Materialtheorie berücksichtigt werden: Das Axiom des Determinismus (Der aktuelle Zustand des Kontinuums ist durch die aktuelle Beanspruchung und durch die gesamte Vorgeschichte vollständig bestimmt.), das Axiom von der materiellen Objektivität (Die Konstitutivgleichungen sind unabhängig von der Wahl des Bezugssystems bzw. von der Bewegung des Beobachtersystems im Raum.), das Axiom von der physikalischen Konsistenz (Die Bilanzgleichungen dürfen nicht verletzt werden.) und das Axiom von der lokalen Wirkung (Der Zustand des materiellen Punktes hängt nur von der unmittelbaren Umgebung ab.)<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>Diese Axiome werden ausführlich in [2] erläutert.

## 2.6 Evolutionsgleichungen

In einem Modell stellen die inneren Variablen zusätzliche Freiheitsgrade dar. Um das Gleichungssystem vervollständigen zu können, sollen die so genannten Evolutionsgleichungen der inneren Variablen immer zusätzlich definiert werden. Diese Gleichungen beschreiben die Zeitentwicklung der inneren Variablen, damit sie bei bekannten Anfangsbedingungen und bekannter Belastungsgeschichte für jeden Zeitpunkt berechnet sind.

Für kleine Verzerrungen gilt die additive Aufspaltung:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^{\text{ne}}, \quad (2.8)$$

wobei  $\varepsilon^e$  der elastische und  $\varepsilon^{\text{ne}}$  der inelastische Anteil der totalen Verzerrung  $\varepsilon$  ist.

**Bemerkung:** Der inelastische Anteil der Verzerrung  $\varepsilon^{\text{ne}}$  ist als innere Variable zu verstehen, deren Evolutionsgleichung zu definieren ist. Trotzdem wird  $\varepsilon^{\text{ne}}$  im Folgenden wegen der speziellen Rolle in den Konstitutivgleichungen von den anderen an dieser Stelle nicht weiter spezifizierten inneren Variablen getrennt behandelt.

Die freie Energiefunktion des Systems  $\Phi$  (2.7) kann nach LEMAITRE [56] immer in die folgende Form gebracht werden:

$$\Phi = \widehat{\Phi}(T, \varepsilon^e, \varepsilon^{\text{ne}}, \xi_1, \dots, \xi_{N_1-1}) = \Phi(T, \varepsilon^e, \xi_1, \dots, \xi_{N_1}). \quad (2.9)$$

Aus (2.6d) mit (2.8) und (2.9) folgt für die spezifische Dissipation:

$$\begin{aligned} D &= \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} - \rho \dot{\Phi} - \rho s \dot{T} \\ &= \left( \sigma_{ij} - \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e} \right) \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{ne}} + \rho \left( s - \frac{\partial \Phi}{\partial T} \right) \dot{T} - \rho \sum_{i=1}^{N_1} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_i} \dot{\xi}_i \geq 0, \end{aligned} \quad (2.10)$$

wobei die Positivität der Dissipation  $D$  unabhängig von  $\varepsilon^e$  und von  $T$  immer erfüllt sein soll. Daraus folgt:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e}, \quad s = -\frac{\partial \Phi}{\partial T}. \quad (2.11)$$

Mit (2.11) gilt für die spezifische Dissipation:

$$D = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{ne}} - \rho \sum_{i=1}^{N_1} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_i} \dot{\xi}_i \geq 0, \quad (2.12)$$

wobei beide Terme die mechanische Dissipation im System beschreiben. Gl. (2.12) stellt gleichzeitig auch eine Restriktion bezüglich der Definition der Evolutionsgleichungen der inneren Variablen dar.

Die Annahme der Existenz eines skalaren Dissipationspotenzials  $F$  führt zu weiterer Konkretisierung der Evolutionsgleichungen. Das Dissipationspotenzial  $F$  soll konvex sein und von der Form

$$F = F(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{ne}}, \dot{\boldsymbol{\xi}}). \quad (2.13)$$

Unter der Voraussetzung assoziierter Gesetze (Normalregel) gilt

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial F}{\partial \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{ne}}}, \quad \mathbf{X}_i = \frac{\partial F}{\partial \dot{\boldsymbol{\xi}}_i}, \quad (2.14)$$

wobei  $\mathbf{X}_i$  die zur inneren Variable  $\boldsymbol{\xi}_i$  assoziierte Größe ist. Diese werden auch als dissipative oder **thermodynamische Kräfte** bezeichnet. Mittels der Legendreschen Transformation (siehe Anhang A) kann ein *Pseudopotential*  $F = F^*(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X})$  konstruiert werden, so dass

$$F^*(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}) = \sup_{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{ne}}, \dot{\boldsymbol{\xi}}} \left( \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{ne}} + \mathbf{X}_i \dot{\boldsymbol{\xi}}_i - F(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{ne}}, \dot{\boldsymbol{\xi}}) \right), \quad (2.15)$$

und damit gilt

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{ne}} = \frac{\partial F^*}{\partial \sigma_{ij}}, \quad \dot{\boldsymbol{\xi}}_i = \frac{\partial F^*}{\partial \mathbf{X}_i}. \quad (2.16)$$

**Bemerkung:** Da das Dissipationspotenzial eine Fläche im Raum der inneren Variablen (gewöhnliche innere Variablen und inelastische Verzerrung) darstellt, kann dieses Konzept als Verallgemeinerung der aus der Plastizitätstheorie bekannten Fließfläche aufgefasst werden.

In dieser Arbeit werden später nur die **transformationsinduzierten Dehnungen** (später TID) als inelastische Dehnungen betrachtet und auf die Verwendung des Dissipationspotentials bei der Konstruktion der Evolutionsgleichungen verzichtet.

## 2.7 Thermodynamisches Gleichgewicht

Wie in den Abschnitten 2.1 und 2.2 erläutert, wird der thermodynamische Zustand des betrachteten Systems durch die Zustandsvariablen vollständig mit der gewünschten Genauigkeit beschrieben. Eine Änderung des thermodynamischen Systems führt zu Änderungen der Zustandsvariablen. Im Gegensatz dazu sind alle thermodynamischen Zustandsvariablen im Gleichgewicht konstant.

Deshalb folgt mit (2.12), dass auch die spezifische Dissipation  $D$  im Gleichgewicht Null ist. Wenn ein linearer Zusammenhang in einem thermodynamischen

System zwischen den thermodynamischen Flüssen  $\dot{\xi}_i$  und den thermodynamischen Kräften  $\mathbf{X}_j$  laut ONSAGER [72, 73] nach

$$\dot{\xi}_i = L_{ij} \mathbf{X}_j \quad (2.17)$$

gilt, dann verschwinden auch die thermodynamischen Kräfte im Gleichgewicht. Dieser lineare Zusammenhang gilt aber nur für spezielle Systeme.

Im Allgemeinen sind diese Zusammenhänge streng nichtlinear (siehe GYARMATI [35, 109] und MUSCHIK [61, 66]). In diesem Fall können Gleichgewichtszustände entstehen, bei denen die thermodynamischen Prozesse eingefroren sind, obwohl die thermodynamischen Kräfte nicht Null sind:

$$\dot{\xi}_i = 0, \quad \mathbf{X}_i \neq 0 \quad \forall i. \quad (2.18)$$

Ein Gleichgewichtszustand dieser Art wird **erzwungenes Gleichgewicht** genannt.



# Kapitel 3

## Modellierung von SMA

### 3.1 Stand der Forschung

Die Phasenumwandlung während eines Formgedächtniseffektes bedeutet einen inneren Strukturwandel der SMA. Um diese innere Struktur des Materials und deren Änderung zu erfassen, werden weitere zusätzliche, so genannte innere Variablen, in den mechanischen Modellen eingeführt. Das Gleichungssystem des Modells wird entsprechend der Anzahl der inneren Variablen ergänzt. Diese Gleichungen sind die Evolutionsgleichungen, die die Änderung der inneren Variablen abhängig vom thermodynamischen Zustand definieren (siehe ausführlich Abschnitt 2.6). Wie sich die inneren Variablen und deren Änderungen auf die mechanischen Eigenschaften des Materials auswirken, wird in den Konstitutivgleichungen beschrieben (siehe Abschnitt 2.2). Im Folgenden werden durch Diskussion einiger Modelle typische Antworten auf diese wichtigen Fragen der Modellierung (wie die Wahl der Zustandsvariablen oder die Definition der Konstitutiv- und der Evolutionsgleichungen) vorgestellt. Weiterhin ist es nicht Ziel dieses Kapitels, eine vollständige Zusammenfassung der Modellierung vom SMA/SME zu präsentieren<sup>1</sup>, vielmehr sollen die Richtungen und Meilensteine der Modellierung gezeigt werden, die Basis dieser Arbeit sind. In Folgenden werden die Modelle in Gruppen nach der betrachteten Modellierungsidee eingeteilt, wobei diese Gruppen meist keine allgemein verwendeten Termini darstellen.

Da in dieser Arbeit ein makroskopisches Kontinuumsmodell entwickelt wird, werden mikromechanische Modelle in diesem Kapitel nicht diskutiert.

---

<sup>1</sup>Ein umfassender und derzeit aktueller Überblick über den Stand der Modellierung findet man in [38, 71, 78].

### 3.1.1 Modelle auf der Basis eines Energiedichtefunktional

Zu dieser Gruppe werden Modelle gezählt, die auf der Basis des Energieminimierungsprinzips mittels einer speziell gewählten Energiefunktion (meistens freie Energiefunktion), die Phasenverteilung im Material beschreiben. Diese Energiefunktion ist meistens durch Überlegungen aus der statistischen Physik abgeleitet und wird als eine Funktion von Temperatur, Spannungszustand und der so genannten *Scherlänge* definiert, die die durch die einzelnen Phasen pro Volumenanteil induzierten Verschiebungen angibt. Diese Energiefunktion gibt an dem diskreten Scherlängenwert  $L$  der Phase  $\beta_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  einen Energiewert  $\Phi_i$  an (siehe Abb. 3.1). Damit kann die gesamte Energie des Körpers  $\Phi$  als eine durch die Phasenanteile gewichtete Summe dieser Energiewerte dargestellt werden in der Form:

$$\Phi = \sum_{i=1}^n \Phi_i \beta_i. \quad (3.1)$$

Die Energiefunktion ändert sich so, dass sich eine Energiegrube an der Scherwertstelle einer bestimmten Phase bildet, damit diese Phase, die dem gegebenen thermodynamischen Zustand bestens entspricht, durch das Energieminimierungsprinzip bevorzugt wird (siehe Abb. 3.1). Da diese Modelle von wenigen Ausnahmen abgesehen für eindimensionale Fälle bestimmt sind, sind die berücksichtigten Phasen die Martensitvarianten  $M^+$  und  $M^-$ , die einer positiven bzw. einer negativen Eigenschering entsprechen, und der Austenit, der mit keiner Eigenschering verbunden ist ( $n = 3$ ). Zu dieser Modellgruppe gehören die Arbeiten von FALK, MÜLLER, ACHENBACH und FRÉMOND [1, 27, 28, 64], die sich vor allem in der Wahl der Energiefunktion voneinander unterscheiden.

Diese Modelle haben einerseits einen Vorteil, nämlich die thermodynamisch konsistente Darstellung der SME (siehe Energieminimierungsprinzip, freie Energiefunktion; zweiter Hauptsatz der Thermodynamik ist immer erfüllt). Andererseits ist ein wesentlicher Nachteil dieser Modelle, dass sie **für den mehrachsigen Spannungszustand nicht einfach verallgemeinerbar** sind auf Grund der hohen Dimension des Raums der Energiefunktion. Z.B. im Fall eines Einkristalls existieren 24 unterschiedliche Martensitvarianten, wobei die Definition der Energiefunktion mit ausreichend vielen Energieminima abhängig vom thermodynamischen Zustand nicht mehr durchführbar ist. Modelle, wie FRÉMOND [28], die durch zwei Martensitvarianten allgemeine Belastungen zu beschreiben probieren, lassen grundlegende Wünsche bezüglich der physikalischen Genauigkeit übrig (siehe Anhang B). Ein weiterer schwerwiegender Nachteil dieser Modellgruppe ist, dass sie **keine klare und eine unvollständige Darstellung der Abhängigkeit** des mechanischen Verhaltens der SMA vom thermodynamischen

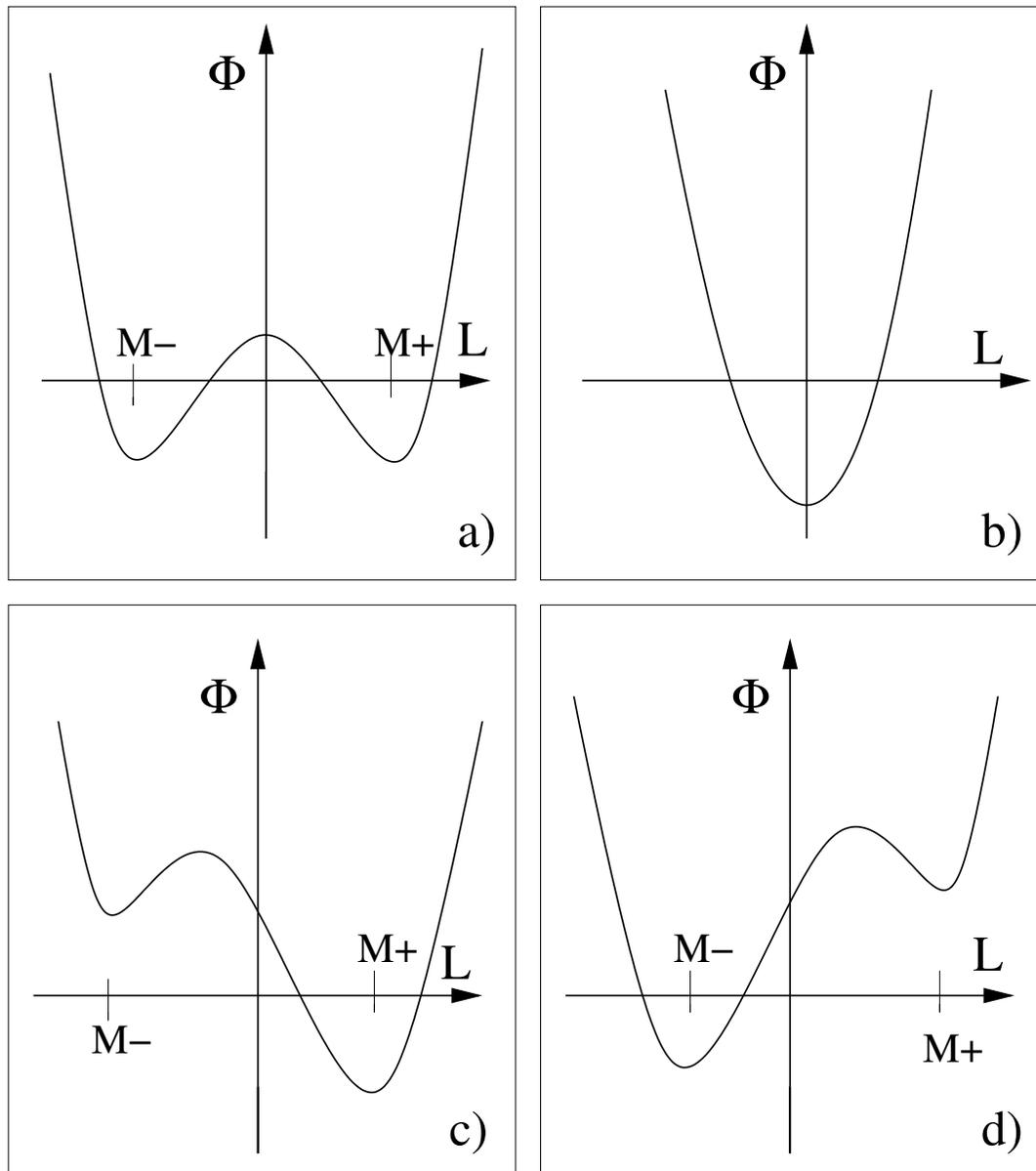


Abbildung 3.1: Freie Helmholtz-Energie als Funktion der Scherlänge bei Entstehung a) des thermisch induzierten Martensits; b) des Austenits; c) und d) des orientierten Martensits entsprechend dem Spannungszustand.

Zustand darstellen. Dies liegt daran, dass diese Abhängigkeit in der Definition der Energiefunktion eingebaut werden soll und damit eine zu komplizierte und schwer lösbare Aufgabe der Modellierung darstellt. Weiterhin sind in den neuesten Arbeiten von BHATTACHARYA [10] neue Wege für die Bestimmung der Energiefunktion vorgeschlagen, die auch für die mehrdimensionale Modellierung anwendbar sind.

### 3.1.2 Modelle mit Umwandlungsdiagramm

Als wichtigster Mangel weisen die Modelle auf Basis einer Energiefunktion die unklare oder fehlende Darstellung der Umwandlungsbedingungen (siehe ausführlich am Beispiel des Modells von FRÉMOND in Anhang B). Einen Ausweg bieten die Modelle mit Umwandlungsdiagramm. Zu dieser Gruppe gehören Modelle, die die Abhängigkeit aller möglichen Phasenumwandlungen vom thermodynamischen Zustand durch das so genannte **Umwandlungsdiagramm** angeben.

Unter dem Umwandlungsdiagramm wird eine einheitliche Darstellung sämtlicher Umwandlungsgrenzen im Temperatur-Spannungs- $T - \sigma$ -Raum verstanden. Damit wird die wichtigste Abhängigkeit der Phasenumwandlung vom thermodynamischen Zustand abgebildet. Es treten ganze Bereiche auf, in denen die Phasenumwandlungen stattfinden. Diese Bereiche werden durch die Linien begrenzt, an denen die Umwandlung in die neue Phase beginnt bzw. beendet ist. Diese Linien haben sich bei Experimenten mit guter Näherung als gerade ergeben. Während der Phasenumwandlung befindet sich der thermodynamische Zustand (abgebildet als Punkt im  $T - \sigma$ -Unterraum des Zustandsraums) zwischen den Anfangs- und Endlinien im  $T - \sigma$ -Diagramm. Die Dynamik der Phasenumwandlung kann unter Berücksichtigung dieser Anfangs- und Endbedingungen durch die Evolutionsgleichungen unabhängig definiert werden und kann eine Funktion von allen anderen Zustandsvariablen sein.

Das erste Umwandlungsdiagramm (siehe Abb. 3.2a, b, c.) wurde in der Arbeit von TANAKA [104] mit Gültigkeit für einachsige Belastungen eingeführt und experimentell bestätigt.

Auf die genaue Bedeutung dieses einfachen Umwandlungsdiagramms wird an dieser Stelle tiefer eingegangen, weil dieses oder ähnliche Diagramme heutzutage bei den meisten Modellen verwendet werden, um die Bedingungen der MPPhU zu beschreiben.

Im  $T - \sigma$ -Diagramm können die thermomechanischen Belastungen als ein gerichteter Pfad abgebildet werden, wobei die zur Ordinatenachse parallelen Linien isotherme mechanische Belastungen oder Entlastungen und die zur Abszissenachse parallelen Linien Temperaturänderungen bei konstantem Spannungsniveau

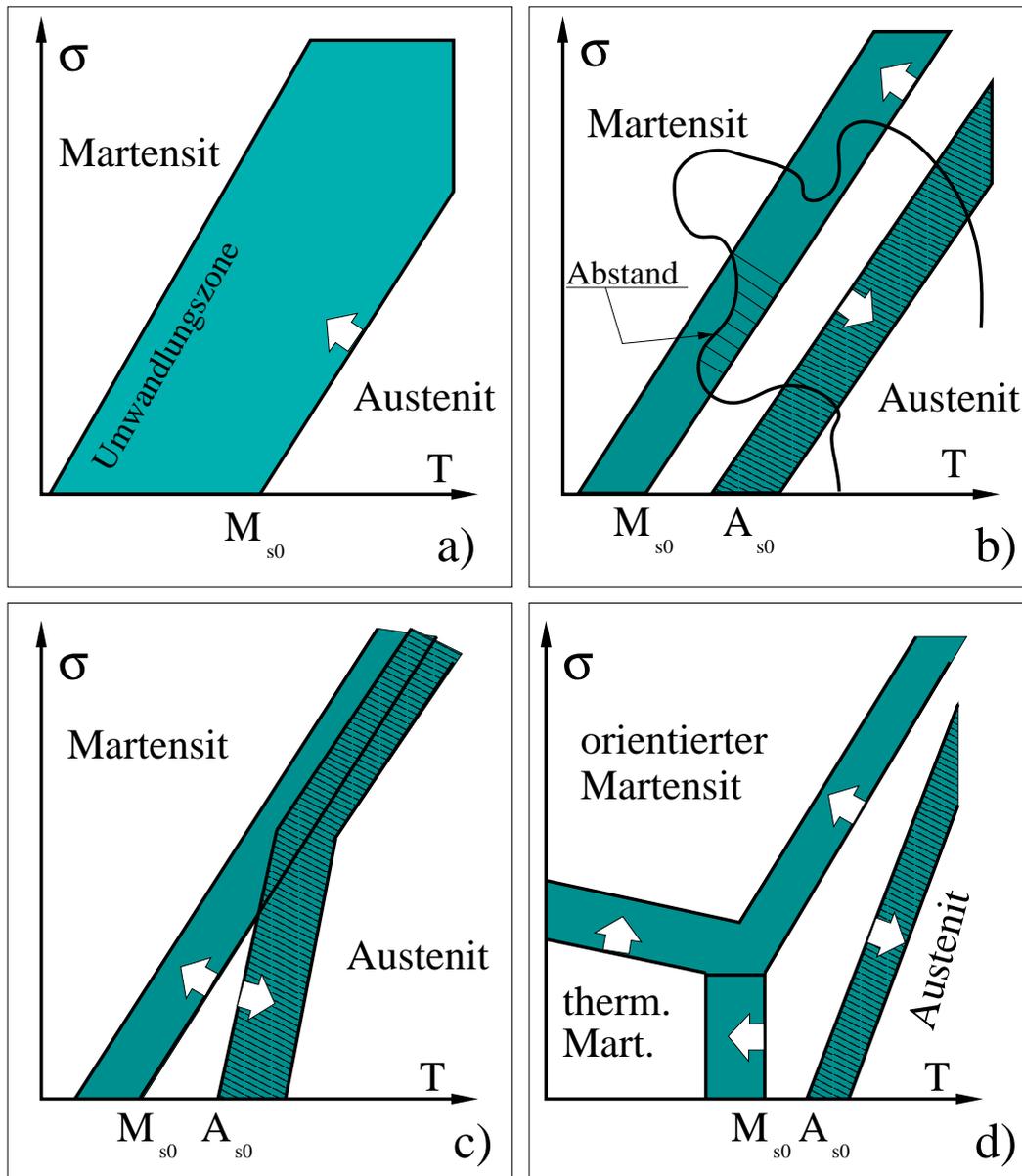


Abbildung 3.2:  $T - \sigma$ -Diagramm mit Umwandlungszonen a) Umwandlungszone zwischen Austenit und Martensit, wobei die Zone eine  $A \rightarrow M$  Umwandlung beschreibt, siehe Pfeil; b) Erste Version des Umwandlungsdiagramms nach TANAKA, wobei ein Belastungspfad angedeutet ist [104]; c) Verbessertes Umwandlungsdiagramm nach TANAKA [103]; d) Umwandlungsdiagramm nach BRINSON mit drei Zonen für thermisch induzierten (therm. Mart.) und den orientierten Martensit [15].

bedeuten. Diese speziellen Fälle haben besondere Bedeutungen, weil ausschließlich solche Belastungen beim charakteristischen, idealisierten SME<sup>2</sup> vorkommen. In der Praxis entstehen aber allgemeine Belastungspfade, deshalb ist die Tatsache von wesentlicher Bedeutung, dass das Umwandlungsdiagramm kontinuierlich die Abhängigkeit der Phasenumwandlung für den gesamten  $T - \sigma$ -Raum angibt: Wenn ein Belastungspfad in der angezeigten Richtung eine Umwandlungszone kreuzt, kommt die zugehörige Phasenumwandlung in Gang.

In den Arbeiten von TANAKA [102, 103, 104, 105] wurde ein Zwei-Phasen-System angenommen: Es wurde zwischen Martensit  $\beta^M$  und Austenit  $\beta^A = 1 - \beta^M$  unterschieden, wobei der Martensitanteil mit der inelastischen phasentransformationsinduzierten Verzerrung  $\varepsilon^{\text{tr}}$  (skalärer Wert) verbunden ist. Die Konstitutivgleichung lautet in Ratenformulierung (*rate Form*) für einachsige Fälle:

$$\dot{\sigma} = D : \dot{\varepsilon} + \Theta \dot{T} + \Omega \dot{\beta}^M . \quad (3.2)$$

Die Evolutionsgleichung ist für die Austenit-Martensit-Umwandlung

$$\dot{\beta}^M = 1 - e^{b_M c_M (M_s - T) + b_M \sigma} \quad (3.3a)$$

und für die Rückumwandlung

$$\dot{\beta}^M = e^{b_A c_A (A_s - T) + b_A \sigma} , \quad (3.3b)$$

wobei  $a_{M,A}$ ,  $b_{M,A}$  temperaturabhängige Materialparameter sind, und gilt

$$\frac{a_{M,A}}{b_{M,A}} = c_{M,A} .$$

$c_M$  und  $c_A$  geben die Steigung der Umwandlungsgrenzen an. Die Differentialgleichungen in (3.3) können wie folgt integriert werden:

$$\beta^A = e^{a_M (M_{s0} - T) + b_M \sigma} , \quad (3.4a)$$

$$\beta^M = 1 - e^{a_M (M_{s0} - T) + b_M \sigma} . \quad (3.4b)$$

Wenn folgende Umwandlungsbedingungen erfüllt sind, gelten die Ungleichungen

$$\sigma \geq c_M (T - M_{s0}) , \quad (3.5a)$$

$$\sigma \leq c_A (T - A_{s0}) . \quad (3.5b)$$

Diese Ungleichungen stellen Geraden als Grenzwert im  $T - \sigma$ -Diagramm dar. Die Gleichungen des Modells stellen einen eindeutigen Zusammenhang zwischen dem aktuellen thermodynamischen Zustand und der Phasenverteilung her, d.h. das Modell stellt eine *wegunabhängige Beschreibung* dar, wobei der aktuelle thermodynamische Zustand vollständig durch die kontrollierbaren, äußeren Variablen bestimmbar ist. Neben dem großen Vorteil des Modells, die klare Definition der Umwandlungsbedingungen, hat das Modell folgende Nachteile:

<sup>2</sup>Zweiwegeffekt, Einwegeffekt, Pseudoelastizität.

- Der Einweg-Effekt ist nur in speziellen Fällen mit dem Modell simulierbar, nämlich im Fall des austenitischen Ausgangszustandes.
- Keine Phasenumwandlung kann ohne Verformung beschrieben werden, obwohl bei SMA auch eine Phasenumwandlung derart stattfinden kann. Es liegt daran, dass der Martensitanteil mit der Verformung fest gekoppelt ist.
- Das Modells ist nur für eindimensionale thermomechanische Belastungen gültig.

Im Modell von BRINSON [8, 15, 16, 17, 18] wurde die Zahl der inneren Variablen, basierend auf experimentellen Ergebnissen von LIANG und ROGERS [59], erhöht: Die gesamte Martensit-Menge wird in zwei Teile geteilt. In einem Teil ist die Martensit-Orientierung zufällig, stochastisch verteilt, d.h. alle Martensit-Varianten kommen gleichmäßig verteilt im Kristallit vor. Dieser Anteil wird **thermisch induzierter Martensit**  $\beta^T$  genannt, da er nur bei Abkühlung entsteht. Dieser Martensitanteil ruft keine zusätzliche Deformation hervor. Der andere Teil des Martensits wird **spannungsinduzierter** oder orientierter Martensit  $\beta^\sigma$  genannt. Er entsteht unter mechanischer Belastung, wobei solche Martensit-Varianten oder -Kombinationen bevorzugt in größerer Menge entstehen, die eine zusätzliche Deformation hervorrufen, so dass die Spannung reduziert wird. Hierbei gilt:

$$\beta^M = \beta^T + \beta^\sigma, \quad (3.6a)$$

$$\beta^A = 1 - \beta^M. \quad (3.6b)$$

Diese Unterscheidung ermöglicht, dass die martensitische Umwandlung sowohl mit als auch ohne induzierter Deformation beschrieben werden kann. Die Teilung des Martensitanteils ist rein modelltechnisch begründet. Obwohl die zwei unterschiedlichen Martensitanteile keinerlei kristallografische Unterschiede aufweisen, wurden die ersten zwei der oben genannten Nachteile des Modells von TANAKA durch diese Wahl der inneren Variablen behoben. Ein Einweg-Effekt aus martensitischen Anfangszustand ( $\beta^T = 1$ ) kann auch beschrieben werden, wobei zuerst eine Reorientierung der Martensitkristalle stattfindet und so orientierter Martensit entsteht. Weiterhin kommt durch Abkühlung thermisch induzierter Martensit aus Austenit zustande, wobei keine Verformung induziert wird. In diesem Modell werden auch die Bedingungen sämtlicher Phasenumwandlungen durch ein Umwandlungsdiagramm angegeben, wobei das Diagramm entsprechend der erhöhten Vielfalt der berücksichtigten Phasenumwandlungen erweitert ist. Die Konstitutivgleichung des Modells lautet

$$\varepsilon = \frac{1}{E} \sigma + k \beta^\sigma, \quad (3.7)$$

wobei  $E$  der Elastizitätsmodul und  $k$  der Betrag der maximalen TID sind. Damit hat nur der orientierte Martensit  $\beta^\sigma$  Auswirkung auf den Verzerrungszustand. Die Evolutionsgleichungen wurden auf Basis des Umwandlungsdiagramms eingeführt, wobei die Umwandlungsgeschwindigkeit als eine Funktion des Abstandes des aktuellen thermodynamischen Zustandes von der aktiven Umwandlungsgrenze (siehe Abstand in Abb. 3.2b und [18, 8, 4]) definiert ist:

$$\dot{\beta}^\sigma = f_\sigma(\sigma, T, \beta^\sigma, \beta^T), \quad (3.8a)$$

$$\dot{\beta}^T = f_T(\sigma, T, \beta^\sigma, \beta^T). \quad (3.8b)$$

Modelle mit Umwandlungsdiagramm bieten eine systematische, experimentell begründete Darstellung des komplexen thermomechanischen Verhaltens von SMA, aber beschränken sich auf eine eindimensionale mechanische Belastung. Das als wichtigstes Resultat geltende Umwandlungsdiagramm wird bei den meisten weiteren Modellen verwendet, wobei die Erweiterung auf den mehrachsigen Spannungszustand im Diagramm durch Verwendung eines geeigneten Vergleichswerts möglich ist.

### 3.1.3 Modelle mit plastischer Analogie

Zu dieser Gruppe kann die Mehrheit der heutzutage verwendeten kontinuumsmechanischen Modelle für SMA zugeordnet werden. Hierbei wird die äußerliche Ähnlichkeit der SME mit der Plastifizierung als grundlegende Idee verwendet. Größter Vorteil der Methode ist die Möglichkeit der Anwendung der sowohl theoretisch als auch numerisch gut begründeten Basis der Plastizitätstheorie. Diese Modelle gelten meistens auch für **mehrdimensionale Belastungen**, wobei heutzutage noch oft eine proportionale Belastung ( $\boldsymbol{\sigma}(t) = f(t)\boldsymbol{\sigma}_0$  wobei  $\dot{\boldsymbol{\sigma}}_0 = 0$ ) angenommen wird.

Entsprechend der Anzahl der inneren Variablen, d.h. der Anzahl der möglichen Umwandlungsarten werden die Umwandlungsbedingungen ähnlich wie Fließbedingungen definiert:

$$F_i = \sigma_{\text{eq}}^* - f_i(T, \beta_i), \quad (3.9)$$

wobei  $\sigma_{\text{eq}}^*$  ein geeigneter Vergleichswert ist und  $f_i$  die  $i$ -te Fließbedingung mit Verfestigung unter der  $i$ -ten Umwandlungsart beschreibt. Es werden die folgenden Konsistenzbedingungen eingeführt:

$$F_i(\boldsymbol{\sigma}, T, \beta_i) \leq 0 \quad \text{und} \quad F_i = 0 \implies \dot{F}_i = 0. \quad (3.10)$$

Die Evolution der inelastischen Verzerrung wird mit Hilfe der Fließregel oder durch eine zusätzlich definierte Dissipationsfunktion (entsprechend der assoziierten oder nichtassoziierten Fließregel) definiert. Hierbei ist es wichtig zu bemerken, dass diese Beschreibung des Evolutionsprozesses wegabhängig ist. Das heißt,

der aktuelle thermodynamische Zustand ist nicht nur von den kontrollierbaren Zustandsvariablen sondern auch von der Belastungsgeschichte abhängig. Durch Verwendung der Normalenregel [37, 68] ist die Richtung der Evolution der inelastischen Verzerrungen ausschliesslich durch die Fließfläche definiert.

Wenn nur Martensit und Austenit als unterschiedliche Phasen berücksichtigt werden [60], wird auf das Umwandlungsdiagramm von TANAKA in Abb. 3.2b,c zurückgegriffen und die Funktionen  $f_i, i = 1, \dots, 4$ , auf Basis der Umwandlungsgrenzen definiert. Wenn aber auch wie bei BEKKER und BRINSON [?] zwischen orientierten und temperaturinduzierten Martensit unterschieden wird, dann wird auch die Zahl der Umwandlungsbedingungen auf 5 erhöht werden. Aber es kann auch eine erhöhte Zahl von Effekten beschrieben werden<sup>3</sup>. In diesen Modellen entsprechen die eingeführten inneren Variablen, die Volumen-Anteile der unterschiedlichen Phasen, in Bezug auf Plastizitätsmodelle den Verfestigungsvariablen: Sie charakterisieren das Ausmaß des Fortschreitens der Phasenumwandlung.

Die Definition der Vergleichsspannung in (3.9) entspricht im einfachsten Fall der von Mises Vergleichsspannung in (3.12b) und beschreibt damit ein isotropes Materialverhalten. Neueste Ergebnisse zeigen eine Anisotropie bei SMA [70, 87, 83, 88, 96, 97], die durch einen speziell gewählten Vergleichswert (eingeführt bei LAGOUDAS, QIDWAI, LEXCELLENT und RANIECKI [82, 85, 87, 88, 77]) berücksichtigt werden kann:

$$\sigma_{\text{eq}}^* := J_2(\boldsymbol{\sigma}) \left( 1 + \theta \frac{J_3(\boldsymbol{\sigma})}{J_2(\boldsymbol{\sigma})^3} \right)^\zeta + \omega J_1(\boldsymbol{\sigma}), \quad (3.11)$$

wobei die skalare Invarianten  $J_i, i = 1, 2, 3$  des Spannungstensors wie folgt definiert sind:

$$J_1(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_{kk}, \quad (3.12a)$$

$$J_2(\boldsymbol{\sigma}) = \sqrt{\frac{3}{2} \tilde{\sigma}_{ij} \tilde{\sigma}_{ij}} := \sigma_{\text{eq}}, \quad (3.12b)$$

$$J_3(\boldsymbol{\sigma}) = \det(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}), \quad (3.12c)$$

$$\tilde{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ij}. \quad (3.12d)$$

Hierbei ist  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$  der Spannungsdeviator. Die skalaren Werte  $\theta, \zeta$  und  $\omega$  sind Materialparameter. Dieser Vergleichswert basiert auf Erfahrungen von Messungen und auf der Plastizitätstheorie mit unsymmetrischen Fließflächen.

Typisch bei diesen Modellen ist die folgende getrennte Definition der Entwicklung der TID: Für die Austenit-Martensit Umwandlung gilt

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{\text{tr}} = \kappa_{ij} \dot{\beta}^\sigma. \quad (3.13)$$

<sup>3</sup>Siehe den Vergleich zwischen Modellen von TANAKA und BRINSON in Abschnitt 3.1.2.

Die Richtung der Entwicklung ist durch den Tensor  $\boldsymbol{\kappa}$  definiert. Der Tensor  $\boldsymbol{\kappa}$  kann durch die Fließfunktion  $F_i$  oder durch ein zusätzlich definiertes Dissipationspotenzial  $D(\boldsymbol{\sigma}, T, \beta^\sigma, \beta^T)$  gegeben sein. Zum Beispiel ist  $\boldsymbol{\kappa}$  bei BOYD und LAGOUDAS durch die folgende Gleichung definiert: [11, 14]:

$$\kappa_{ij} = \frac{\partial D(\boldsymbol{\sigma}, T, \beta^\sigma, \beta^A)}{\partial \tilde{\sigma}_{ij}} = k \frac{\tilde{\sigma}_{ij}}{\sigma_{\text{eq}}}, \quad \text{wenn } \dot{\beta}^\sigma > 0. \quad (3.14)$$

Die Rückumwandlung wird oft getrennt, losgelöst von der plastischen Analogie beschrieben, und ein proportionaler Abbau der TID wird angenommen [38, 81, 115]:

$$\kappa_{ij} = \frac{\varepsilon_{ij}^{\text{tr}}}{\varepsilon_{\text{eq}}^{\text{tr}}}, \quad \text{wenn } \dot{\beta}^\sigma < 0, \quad (3.15)$$

wobei  $\varepsilon_{\text{eq}}^{\text{tr}} = \sqrt{2/3 \varepsilon_{ij}^{\text{tr}} \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}}$  ist. AURICCHIO definiert auch eine Fließgrenze für die Martensit-Austenit-Umwandlung [5].

Bei diesen Modellen hängt generell die Richtung der Evolution bei der Austenit-Martensit-Umwandlung ausschließlich vom Spannungszustand (3.14), eventuell bei der Rückumwandlung nur von der bisherigen Orientierung (3.15) ab. Mit (3.14) und (3.15) kann bei der Rückumwandlung und im vollständig umgewandeltem Zustand keine weitere Orientierungsänderung des Martensits (Änderung des TID-Tensors) beschrieben werden. Weiterhin kann man im Allgemeinen für Gleichungen mit Struktur von (3.13) feststellen, dass sie Änderung von TID nur im Verbindung mit MPhU beschreiben können<sup>4</sup>. Deshalb sollen Modellen für reine Reorientierung eine grundsätzlich andere Evolutionsgleichung enthalten (siehe noch Abschnitt 3.2.8). Eine Diskussion der Reorientierung findet man in Kap. 4, wobei durch ein Benchmarktest die kritischen Punkte für die Modellbildung hervorgehoben werden.

### 3.1.4 Modelle mit thermodynamischen Kräften

Zu dieser Gruppe gehören die Modelle, bei denen thermodynamische Kräfte auf der Basis einer freien Energiefunktion (nach Helmholtz oder nach Gibbs) durch den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik definiert werden, um die *treibende Kraft* (*driving force*) der Änderung der inneren Variablen anzugeben. Die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen sind durch diese Kräfte formuliert und nicht wie bei plastischen Modellen durch die Normalregel. Weil die thermodynamischen Kräfte direkt von der freien Energie abgeleitet sind, spielt die Definition der freien Energie bei diesen Modellen die zentrale Rolle.

<sup>4</sup>Nach (3.13) gilt: wenn  $\dot{\beta}^\sigma \equiv 0$  ist infolgedessen  $\dot{\varepsilon}^{\text{tr}} \equiv \mathbf{0}$ .

Hierbei sollten vor allem die Arbeiten von LEXCELLENT, RANIECKI und ZIOLKOWSKI erwähnt werden. Zuerst wurde das  $R_L$  Modell [58, 84] entwickelt und später vielfältig weiterentwickelt [9, 12, 54, 55, 57, 85]. Hierbei wird wie beim Modell von BRINSON im Abschnitt 3.1.2 zwischen dem thermisch induzierten und orientierten Martensit in Modellierung unterschieden. Bei diesen Arbeiten wurde folgender Term der freien Energie nach [44] eingeführt, um den Energieanteil des Körpers, induziert durch die Wechselwirkung der Phasen, zu beschreiben:

$$\Phi^* = \beta^T \beta^\sigma \Phi^{MM} + \beta^\sigma \beta^A \Phi^{\sigma A} + \beta^T \beta^A \Phi^{TA}, \quad (3.16a)$$

wobei  $\Phi^{MM}$ ,  $\Phi^{\sigma A}$  und  $\Phi^{TA}$  Materialparameter sind. Da zwischen orientiertem und thermisch induziertem Martensit nur aus modelltechnischen Gründen unterschieden wird und kein physikalische Unterschied vorliegt, gilt:

$$\Phi^{\sigma A} = \Phi^{TA} =: \Phi^{MA} \neq \Phi^{MM}. \quad (3.16b)$$

Damit erhält der so genannte **Mischungsterm** der freien Energie die Form

$$\Phi^* = \beta^T \beta^\sigma \Phi^{MM} + \beta^M \beta^A \Phi^{MA}. \quad (3.16c)$$

Dieser Term macht eine Definition der freien Energie möglich, die zu den thermodynamischen Kräften mit den gewünschten Eigenschaften führt. Die Ableitung der thermodynamischen Kräfte greift auf die Clausius-Duhemsche Ungleichung (2.6c) zurück, wonach für die Dissipationsdichte  $D$  gilt:

$$D = \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} - \rho s \dot{T} - \rho \dot{\Phi} - \frac{1}{T} q_i \nabla_i T \geq 0. \quad (3.17)$$

Diese Ungleichung kann durch gewöhnliche Annahmen (siehe ausführlich in Abschnitt 3.2.3) in der Form

$$D = \mathbf{X}_i \dot{\xi}_i \quad (3.18)$$

geschrieben werden, wobei  $\mathbf{X}_i$  die thermodynamischen Kräfte sind. Diese neuen Größen sind konjugiert zu den inneren Variablen  $\xi_i$  und haben dieselben tensoriellen Eigenschaften. In diesen Modellen werden die Phasenanteile der angenommenen Martensitvarianten meist als skalare innere Variablen angenommen, deshalb sind die thermodynamische Kräfte auch skalare Größen.

Die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen sind als Funktion dieser Kräfte definiert. Im einfachsten Fall werden lineare Funktionen angesetzt:

$$\dot{\xi}_i = \lambda_i X_i, \quad (3.19)$$

wobei  $\lambda_i$  ein nicht negativer skalarer Multiplikator ist, der z.B. durch eine Konsistenzbedingung definiert wird, wie in [55]. Mit (3.18) und (3.19) ist das Gleichungssystem thermodynamisch konsistent, da der zweite Hauptsatz der Thermodynamik auf Grund der Definitionen der thermodynamischen Kräfte immer erfüllt ist (siehe noch Abschnitt 3.2.6).

Die Konstitutivgleichung der Modelle lautet im Allgemeinen:

$$\sigma_{ij} = D_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^T - \varepsilon_{kl}^{\text{tr}}), \quad (3.20)$$

wobei die Entwicklung der inelastischen TID  $\varepsilon^{\text{tr}}$  wie folgt definiert wird (vergleiche mit (3.14)):

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} = \kappa_{ij} \dot{\beta}^\sigma, \quad (3.21a)$$

$$\kappa_{ij} = \frac{3}{2} k \frac{\tilde{\sigma}_{ij}}{\sigma_{\text{eq}}}, \quad (3.21b)$$

wobei  $\dot{\kappa} \equiv \mathbf{0}$  gilt und damit implizit eine proportionale Belastung angenommen wird. Damit lässt sich das Problem der Reorientierung des Martensits in diesen Modellen vermeiden, da Reorientierung nur bei nichtproportionaler Belastung auftritt.

## 3.2 Ein neues thermodynamisches Materialmodell

Ein neues kontinuumsmechanisches Materialmodell, das auf der Basis der experimentellen Beobachtungen aus Kap. 1 sowie der Nichtgleichgewichtsthermodynamik aus Kap. 2 entwickelt wird, wird in diesem Kapitel im Kontext einer geometrisch linearen Formulierung vorgestellt. Ein wesentliches Ziel bei der Modellierung ist die thermodynamisch konsistente Darstellung der SME in einem breiten Temperaturbereich unter allgemeiner mechanischer Belastung auf der Basis einer rein makroskopischen Modellstruktur. Mikromechanische Modellierungsansätze finden bewusst keine Berücksichtigung, um die Formulierung möglichst einfacher Materialgleichungen zu ermöglichen und die wesentlichen Grundeffekte diskutieren zu können. Ein weiteres wesentliches Ziel ist die Entwicklung einer Modellstruktur, die durch wenige, gut messbare Materialparameter je nach Bedarf auf die aktuellen Materialeigenschaften angepasst werden kann. Dabei sollte jedoch die Anzahl an Materialparameter im Hinblick auf deren Identifikation beschränkt bleiben. Die hier präsentierten Ergebnisse stellen Weiterentwicklungen eines bereits veröffentlichten Materialmodells dar [3, 50, 46, 47, 48, 49].

### 3.2.1 Ansatz des neuen Modells

Nachdem verschiedene Möglichkeiten zur Wahl der inneren Variablen und zur Konstruktion der Evolutionsgleichungen in Abschnitt 3.1 vorgestellt und einige konkrete Modelle diskutiert wurden, soll nun der allgemeine Ansatz für das neue Modell formuliert werden.

Im neuen Modell wird der thermodynamische Zustand eines repräsentativen und ausreichend großen Bereiches (Repräsentative Volumenelement, RVE) eines Kontinuums  $\Omega$  beschrieben. Es wird angenommen, dass dieser Bereich die Bedingungen der statistischen Homogenität erfüllt. Um den thermodynamischen Zustand des RVEs zu beschreiben, wird der folgende endliche Satz  $\chi$  der Zustandsvariablen eingeführt:

$$\chi = \{\xi_i\} = \{\varepsilon^e, T, \varepsilon^{\text{tr}}, \beta^T\}, \quad (3.22)$$

wobei die berücksichtigte Zustandsvariable  $\varepsilon^e$  der elastische Verzerrungstensor,  $T$  die Temperatur,  $\varepsilon^{\text{tr}}$  der TID-Tensor und  $\beta^T$  der relative Phasenanteil des thermisch induzierten Martensits sind. Dieser Anteil  $\beta^T$  der Martensitphase weist keine spezielle Orientierung auf und deshalb induziert sein Entstehen keine makroskopische Verzerrung. In (3.22) sind  $\varepsilon^{\text{tr}}$  und  $\beta^T$  die **inneren Variablen**. Die Evolutionsgleichungen dieser Variablen, die die zeitliche Entwicklung angeben, werden später in Abschnitt 3.2.6 hergeleitet.

Der Volumenanteil des orientierten Martensits wird nicht als Zustandsvariable erfasst, sondern wird aus dem Zusammenhang zwischen dem aktuellen  $\varepsilon_{\text{eq}}^{\text{tr}}$  und maximalen Vergleichswert  $k$  der TID ermittelt. Der Phasenanteil  $\beta^\sigma$  stellt damit keine unabhängige Größe dar. In dieser Arbeit wird dieser Zusammenhang einfachheitshalber durch die folgende Gleichung ausgedrückt

$$\beta^\sigma = \frac{1}{k} \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{tr}} = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{3}{2} \varepsilon_{ij}^{\text{tr}} \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}}. \quad (3.23)$$

Diese Annahme des linearen Zusammenhangs vernachlässigt die durch die Kristallstruktur beeinflussten Unterschiede nach Belastungsart und das durch entstandene Martensitkristalle veränderte Maß der induzierten Verzerrungen pro Volumenanteil des orientierten Martensits. Weiterhin ermöglicht (3.23) in den meisten Fällen eine ausreichend gute Näherung. Gl. (3.23) beruht auf der Tatsache, dass ein größerer Anteil des strukturierten Martensits eine größere TID ermöglicht. Daraus folgt die Bedeutung dieser Phasenanteile in der Modellierung: Sein Maximum gibt das Maximum der TID an, da ein vollständig und für die Belastung optimal strukturierter Martensit gleichzeitig die höchste erreichbare TID darstellt. Beide Phasenanteile des Martensits  $\beta^T$  und  $\beta^\sigma$  und der Phasenanteil des Austenits  $\beta^A$  müssen die folgende Bedingungen erfüllen

$$\beta^\sigma \geq 0, \quad \beta^T \geq 0, \quad \beta^A \geq 0, \quad \beta^M + \beta^A = 1, \quad (3.24)$$

wobei  $\beta^M = \beta^\sigma + \beta^T$  der gesamte Volumenanteil des Martensits ist.

Unter der Voraussetzung kleiner Deformation wird die Verformung durch den linearisierten Eulerschen Verzerrungstensor  $\varepsilon$  ausgedrückt

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^T + \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}, \quad (3.25)$$

wobei  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  der Verschiebungsvektor in einem Punkt  $\mathbf{x}$  zu einem Zeitpunkt  $t$ ,  $u_{i,j} = \partial u_i / \partial x_j$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}^T$  die thermische Ausdehnung sind. In dieser Arbeit wird einfachheitshalber angenommen, dass jede Phase gleiche linearelastische, isotrope Materialeigenschaften hat. Weiterhin wird angenommen, dass beide Phasen gleiche lineare thermische Ausdehnungskoeffizienten haben.

### 3.2.2 Freie Helmholtz-Energie

Die Angabe einer geeigneten freien Energie  $\Phi$  ist eine komplexe Aufgabe von zentraler Bedeutung bei der Entwicklung eines thermodynamisch basierten Materialmodells. Hierbei sollen die physikalischen, metallurgischen und kristallographischen Kenntnisse über das Material einbezogen werden. Die freie Helmholtz-Energie  $\Phi(\boldsymbol{\chi})$  (siehe Abschnitt 2.4) wird in diesem Modell als Funktion der gewählten Zustandsvariablen definiert (JUHÁSZ ET AL. [46, 48, 49]), die eine weiterentwickelte Form der in der Literatur vorgestellten Form der freien Energie (entwickelt in den Arbeiten von FALK [27]; RANIECKI ET AL. [86]; LECLERCQ und LEXCELLENT [55]; GILLET et al., [33]; ZIOLKOWSKI und RANIECKI, [115]) darstellt und wie folgt definiert ist:

$$\Phi(\boldsymbol{\varepsilon}^e, T, \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}, \beta^T) = \Phi_0(\boldsymbol{\varepsilon}^e, T) + \sum_{i=\sigma, T, A} \Phi_i(\beta^\sigma, \beta^T, T) + \Phi^*(\beta^\sigma, \beta^T) + \kappa I_{\mathcal{K}}(\beta^\sigma, \beta^T). \quad (3.26a)$$

Die freie Energie ist als eine Summe von speziellen Gruppen erfasst. Diese sind der reversible Anteil  $\Phi_0$ , der phasenspezifische Anteil  $\Phi_i$  und der Mischungsterm  $\Phi^*$ . Der letzte Term ist als eine Indikatorfunktion  $I$  über das Gebiet  $\mathcal{K}$  formuliert. Diese Gruppen werden im Folgenden ausführlich diskutiert:

#### Reversibler Anteil:

$$\rho \Phi_0 = \frac{1}{2} \varepsilon_{kl}^e D_{klmn} \varepsilon_{mn}^e + \gamma_{kl} \varepsilon_{kl}^e (T - T_0) + c_v \left[ T - T_0 - T \ln \left( \frac{T}{T_0} \right) \right], \quad (3.26b)$$

wobei  $\mathbf{D}$  der isotrope Elastizitätstensor ist:

$$D_{ijkl} = \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \lambda\delta_{ij}\delta_{kl}. \quad (3.26c)$$

Hier sind  $\lambda$  und  $\mu$  die Laméschen Koeffizienten und  $\delta_{ij}$  ist das Kroneckersche Symbol.  $c_v$  bezeichnet die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen und  $T_0$  ist die Gleichgewichtstemperatur der Phasen.  $\boldsymbol{\gamma}$  ist der lineare thermische Ausdehnungstensor, der im Weiteren als isotrop angenommen wird. Durch eine mechanische Belastung werden die Atomabstände in einem metallischen Kristall verändert und Energie reversibel gespeichert, die dann durch Entlastung zurückgewonnen werden kann. Weiterhin kommt es infolge einer Erwärmung zu einer

thermischen Ausdehnung und durch gewachsene Atomabständen einer Energieaufnahme, die durch Abkühlung wieder freigegeben werden kann. Diese beiden reversiblen Energiespeicherungsprozesse werden im reversiblen Anteil der freien Energie zusammengefasst und hängen direkt mit der Konstitutivgleichung in (3.29) zusammen. Der letzte Term in (3.26b) ist die s.g. kalorische Funktion, die durch ein Experiment (siehe ausführlich z.B. in [38]) bestimmt ist. Wegen der Annahme, dass die elastischen und thermischen Materialkoeffizienten in allen Phasen gleich sind, hängt der Term  $\Phi_0$  von der Phasenverteilung nicht ab.

### Phasenspezifischer Anteil:

$$\Phi_i(\beta^\sigma, \beta^T, T) = (u_0^i - T s_0^i) \beta^i + \frac{1}{2} T \Pi_i (\beta^i)^2, \quad i = \sigma, T, A, \quad (3.26d)$$

wobei  $u_0^i$  die spezifische innere Energie,  $s_0^i$  die spezifische Entropie der Phasen und  $\Pi_i$  später näher erläuterte Materialparametern sind. Durch unterschiedliche Kristallstruktur weisen die beiden Phasen des Martensits und des Austenits in den SMA unterschiedliche thermodynamische Eigenschaften auf. D.h., beide Phasen haben unterschiedliche innere Energien und unterschiedliche Entropiewerte. Weil diese Energieterme sich in dem RVE aufsummieren, lassen sie sich als eine mit den Phasenanteilen gewichtete Summe darstellen<sup>5</sup>. Weiterhin wird im Modell angenommen, dass weitere temperaturabhängige Terme in der freien Energie auftauchen. Die hier eingeführten Materialparameter spielen eine wichtige Rolle bei der Anpassung des Modells an experimentelle Ergebnisse.

### Mischungsterm:

$$\Phi^* = \beta^T \beta^\sigma \Phi^{MM} + \beta^M \beta^A \Phi^{MA}, \quad (3.26e)$$

wobei  $\Phi^{MM}$  und  $\Phi^{MA}$  Materialparameter sind. Im allgemeinen Zustand koexistieren Austenit und Martensit gleichzeitig in einer SMA. Entlang der Phasengrenzen entstehen Zonen mit Inkompatibilitäten, die eine höhere Energie benötigen bzw. speichern als die homogenen Kristalle. Diese zusätzliche Energie hängt mit der Größe der Grenzfläche zusammen und ist gleich Null, wenn nur eine Phase existiert (siehe noch Abschnitt 3.1.4). Der Energiebedarf von Inkompatibilitäten wird in diesem Modell nach [55, 85] durch den Term in (3.26e) ausgedrückt.

### Indikatorfunktion:

$$\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^2, \quad \kappa I_{\mathcal{K}}(\mathbf{y}) = \begin{cases} 0 & \text{wenn } \mathbf{y} \in \mathcal{K} \\ \infty & \text{wenn } \mathbf{y} \notin \mathcal{K} \end{cases}, \quad (3.26f)$$

mit

$$\mathcal{K} = \{(\beta^\sigma, \beta^T) \in \mathbb{R}^2 \mid 0 \leq \beta^\sigma, 0 \leq \beta^T, \beta^\sigma + \beta^T \leq 1\}, \quad (3.26g)$$

---

<sup>5</sup>Siehe erster Term in (3.26d).

wobei  $\kappa \geq 0$  beliebig groß ist. Die Indikator-Funktion wird verwendet, um die Bedingungen (3.24) in der freien Helmholtz-Energie zu erfassen. Für unmögliche Phasenverteilungen (z.B. die Summe aller Phasenanteile mehr als 100%) ergeben sich unendlich große freie Energien. Sie sind beim Energieminimierungsprinzip ausgeschlossen. Weil diese Funktion keine stetige Funktion der Zustandsvariablen ist, ist ihre Verwendung in der freien Energie mit gewissem mathematischen Aufwand bei der Ableitungen verbunden.

### 3.2.3 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen werden in diesem Modell mittels so genannter thermodynamischer (dissipativer) Kräften definiert. Um diese Kräfte abzuleiten, wird der zweite Hauptsatz der Thermodynamik verwendet, der als Ausgangspunkt in ihrer räumlich lokalen Darstellung im Form der Clausius-Duhemschen Ungleichung (3.17) geschrieben wird. Die freie Helmholtz-Energie  $\Phi(\boldsymbol{\chi})$  ist in diesem Modell nach (3.26) definiert, wobei der gewählte Satz der Zustandsvariablen in (3.22) gegeben ist. Mit dieser Definition der freien Energie kann die Clausius-Duhemsche Ungleichung in (3.17) umgeschrieben werden als

$$\left( \sigma_{ij} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e} \right) \dot{\varepsilon}_{ij} + \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} - \rho \left( s + \frac{\partial \Phi}{\partial T} \right) \dot{T} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \beta^T} \dot{\beta}^T - \frac{1}{T} q_i T_{,i} \geq 0. \quad (3.27)$$

Da diese Ungleichung für beliebige  $\dot{\varepsilon}^e$  und  $\dot{T}$  gelten muss, folgen die nachstehende Potenzialbeziehungen:

$$\sigma_{ij} = \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e}, \quad s = - \frac{\partial \Phi}{\partial T}. \quad (3.28)$$

Mit der freien Helmholtz-Energie in (3.26a) ergibt sich für die erste Beziehung

$$\sigma_{ij} = D_{ijkl} \varepsilon_{kl}^e + \gamma_{ij}(T - T_0), \quad (3.29)$$

die auch **Konstitutivgleichung** genannt wird. Die Konstitutivgleichung des Materials in Gl. (3.29) ist ein experimentell bestätigtes Ergebnis und wird an dieser Stelle zur Kontrolle des Ansatzes der freien Energie verwendet. Für die in diesem Modell betrachteten SMA gilt, dass sie sich isotrop elastisch verhalten, solange keine MPhU auftritt. Weiterhin kann die Positivität der thermischen Dissipation ohne deutliche Einschränkung des Gültigkeitsbereichs des Modells angenommen werden:

$$- \frac{1}{T} q_i T_{,i} \geq 0. \quad (3.30)$$

Mit Gl. (3.28) und Ungleichung (3.30) kann sich (3.27) auf die folgende strengere Form des zweiten Hauptsatzes reduzieren<sup>6</sup>:

$$D := \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \beta^T} \dot{\beta}^T \geq 0. \quad (3.31)$$

Da die Phasenumwandlung in SMA praktisch keine Volumenänderung induziert (siehe Kap. 1), folgt für die TID  $\varepsilon^{\text{tr}}$  die Bedingung:

$$\varepsilon_{ii}^{\text{tr}} \equiv 0 \implies \dot{\varepsilon}_{ii}^{\text{tr}} = 0. \quad (3.32)$$

Damit ergibt sich der erste Term aus Gl. (3.31) zu

$$\sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} = (\tilde{\sigma}_{ij} + \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ij}) \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} = \tilde{\sigma}_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} + \frac{1}{3} \sigma_{kk} \dot{\varepsilon}_{ii}^{\text{tr}} = \tilde{\sigma}_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}}. \quad (3.33)$$

Mit (3.33) folgt

$$D = \left( \tilde{\sigma}_{ij} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}} \right) \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \beta^T} \dot{\beta}^T \geq 0. \quad (3.34)$$

Weiterhin kann die Dissipationsdichte  $D$  als Produkt von thermodynamischen Kräften und Flüssen aufgeschrieben werden:

$$D = X_{ij}^{\sigma} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} + X^T \dot{\beta}^T \geq 0, \quad (3.35)$$

wobei  $\mathbf{X}^{\sigma}$  und  $X^T$  die dissipativen oder **thermodynamischen Kräfte** sind. Die Zeitableitung der inneren Variablen  $\dot{\varepsilon}^{\text{tr}}$  und  $\dot{\beta}^T$  sind die so genannten dissipative oder **thermodynamischen Flüsse**. Durch einen Vergleich zwischen (3.34) und (3.35) sowie mit Hilfe von (3.23) ergeben sich folgende Zusammenhänge:

$$X_{ij}^{\sigma} := \tilde{\sigma}_{ij} - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}} = \tilde{\sigma}_{ij} - \rho \frac{3}{2} \frac{\varepsilon_{ij}^{\text{tr}}}{k^2 \beta^{\sigma}} \frac{\partial \Phi}{\partial \beta^{\sigma}}, \quad (3.36a)$$

$$X^T := -\rho \frac{\partial \Phi}{\partial \beta^T}. \quad (3.36b)$$

Die thermodynamischen Kräfte und die zugehörigen inneren Variablen sind keine konjugierten Paare bezüglich der freien Energie. Die Dissipationsdichte wird in diesem Modell mit Hilfe der thermodynamischen Kräfte definiert. Damit wurde keine weitere künstliche Potenzialfunktion eingeführt<sup>7</sup>. Mit der freien Helmholtz-

<sup>6</sup>Positivität der linken Seite wird in (3.27) ohne den nichtnegativen Term (3.30) verlangt.

<sup>7</sup>Ein Dissipationspotenzial könnte mit Hilfe der thermodynamischen Kräfte so gebildet werden, dass die inneren Variablen und die thermodynamischen Kräfte bezüglich dieses Potenzials konjugierte Paare sind. Dieses Potenzial spielt aber keine weitere Rolle in dieser Arbeit, da das Prinzip der maximalen Dissipation in diesem Modell nicht verwendet wird.

Energie (3.26) erhalten die thermodynamischen Kräfte folgende Form

$$X_{ij}^\sigma \in \tilde{\sigma}_{ij} - \rho \left[ \Delta u - \Delta s T + (\beta^\sigma \Pi_\sigma - \beta^A \Pi_A) T + \Phi^{MM} \beta^T \right. \\ \left. + (\beta^A - \beta^M) \Phi^{MA} - \partial_{\beta^\sigma} I_{\mathcal{K}}(\beta^\sigma, \beta^T) \right] \frac{3}{2} \frac{\varepsilon_{ij}^{\text{tr}}}{k^2 \beta^\sigma} =: \tilde{\sigma}_{ij} - f_\sigma(T, \beta^\sigma, \beta^T) \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}, \quad (3.37a)$$

$$X^T \in -\rho \left[ \Delta u - \Delta s T + (\beta^T \Pi_T - \beta^A \Pi_A) T + \Phi^{MM} \beta^\sigma \right. \\ \left. + (\beta^A - \beta^M) \Phi^{MA} - \partial_{\beta^T} I_{\mathcal{K}}(\beta^\sigma, \beta^T) \right] =: -f_T(T, \beta^\sigma, \beta^T), \quad (3.37b)$$

wobei  $\Delta u = u_0^A - u_0^\sigma = u_0^A - u_0^T$  und  $\Delta s = s_0^A - s_0^\sigma = s_0^A - s_0^T$  sind. Hierbei wurde verwendet, dass kein Unterschied aus thermodynamischer Sicht zwischen thermisch induziertem und spannungsinduziertem Martensit vorhanden ist (siehe noch LECLERCQ und LEXCELLENT [55]).

Die skalarwertigen Funktionen  $f_\sigma : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  und  $f_T : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  sind in (3.37) definiert. Weil die freie Helmholtz-Energie keine differenzierbare Funktion der Zustandsvariablen auf Grund der verwendeten Indikatorfunktion ist, muss das **Subdifferential** [90, 91, 99] zur Definition der Kräfte eingeführt werden:

$$\partial_{\beta^\sigma} I_{\mathcal{K}}(\beta^\sigma, \beta^T) = \{ b \in \mathbb{R} \mid b(y - \beta^\sigma) \leq I_{\mathcal{K}}(y, \beta^T) - I_{\mathcal{K}}(\beta^\sigma, \beta^T), \forall y \in \mathbb{R} \}, \quad (3.38a)$$

$$\partial_{\beta^T} I_{\mathcal{K}}(\beta^\sigma, \beta^T) = \{ b \in \mathbb{R} \mid b(y - \beta^T) \leq I_{\mathcal{K}}(\beta^\sigma, y) - I_{\mathcal{K}}(\beta^\sigma, \beta^T), \forall y \in \mathbb{R} \}. \quad (3.38b)$$

Das Subdifferential kann als Verallgemeinerung der partiellen Ableitung verstanden werden und beschreibt an den nicht differenzierbaren Stellen der Funktion eine Menge statt eines einzigen Wertes, an allen anderen Stellen ist sie gleich der partiellen Ableitung der Funktion (siehe konvexer Bereich  $\Omega$  an der Stelle  $A \in \partial\Omega$  in Abb. 3.3). Deshalb wurden die Kräfte in (3.37) in Form von Erhaltensrelationen statt Gleichungen formuliert.

Im Fall der Reorientierung des thermisch induzierten Martensits soll eine neue thermodynamische Kraft eingeführt werden, weil die bisherigen Kräfte nur die Phasenumwandlungen des Zweiphasensystems Austenit-Martensit charakterisieren können. In diesem speziellen Fall der Martensit-Martensit-Umwandlung gilt

$$-\dot{\beta}^T = \dot{\beta}^\sigma > 0, \quad (3.39)$$

da diese Phasenumwandlungsart nach experimentellen Erfahrungen nur in Richtung von thermisch induzierten nach spannungsinduzierten Martensit stattfinden kann ( $\beta^T \Rightarrow \beta^\sigma$ ). Mit (3.23), (3.37) und (3.39) ist die Dissipationsdichte gegeben

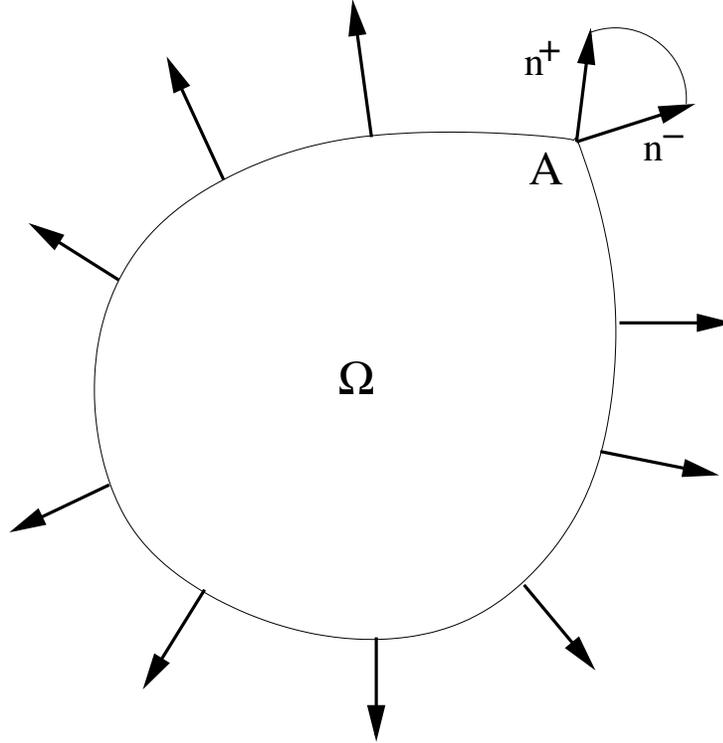


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des Subdifferentials.

als

$$\begin{aligned}
 D &= X_{ij}^\sigma \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} + X^T \dot{\beta}^T = X_{ij}^\sigma \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} - X^T \dot{\beta}^\sigma = X_{ij}^\sigma \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} - X^T \frac{\partial \beta^\sigma}{\partial \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} \\
 &= X_{ij}^\sigma \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} - X^T \frac{3}{2} \frac{\varepsilon_{ij}^{\text{tr}}}{k^2 \beta^\sigma} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} =: X_{ij}^{\sigma T} \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}}, \tag{3.40}
 \end{aligned}$$

wobei  $\mathbf{X}^{\sigma T}$  die neue tensorielle thermodynamische Kraft ist, definiert durch

$$\begin{aligned}
 X_{ij}^{\sigma T} \in \tilde{\sigma}_{ij} - \rho \left[ \beta^\sigma (\Pi_\sigma T - \Phi^{MM}) + \beta^T (\Phi^{MM} - \Pi_T T) - \partial_{\beta^\sigma} I(\beta^\sigma, \beta^T) \right. \\
 \left. - \partial_{\beta^T} I_K(\beta^\sigma, \beta^T) \right] \frac{3}{2} \frac{\varepsilon_{ij}^{\text{tr}}}{k^2 \beta^\sigma} =: \tilde{\sigma}_{ij} - f_{\sigma T}(T, \beta^\sigma, \beta^T) \varepsilon_{ij}^{\text{tr}}. \tag{3.41}
 \end{aligned}$$

Die Definition der Funktion  $f_{\sigma T}(T, \beta^\sigma, \beta^T) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  ist mit Gl. (3.41) gegeben.

### 3.2.4 Erster Hauptsatz der Thermodynamik

Weil die Phasenumwandlungen und damit auch die mechanischen Eigenschaften einer SMA wesentlich von der Temperatur abhängen und die Phasenumwandlung sowohl Wärme produzieren als auch konsumieren kann, soll die Kopplung

zwischen diesen Effekten bei der Modellbildung berücksichtigt werden. In diesem Abschnitt wird die Wärmeleitgleichung mit Hilfe des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik und der gewählten Form der freien Energie (3.26) abgeleitet. Die innere Energie  $u$  kann mit Hilfe der Legendre-Transformation (siehe Anhang A) durch die freie Helmholtz-Energie ausgedrückt werden:

$$u = \Phi + Ts = \Phi - T \frac{\partial \Phi}{\partial T}, \quad (3.42)$$

wobei Gl. (3.28)<sub>2</sub> verwendet wurde. Mit Gl. (3.26) folgt

$$\frac{\partial \Phi}{\partial T} = \gamma_{kl} \varepsilon_{kl}^e - c_v \ln \left( \frac{T}{T_0} \right) - \sum_{i=\sigma, T, A} s_0^i \beta^i + \frac{1}{2} \sum_{i=\sigma, T, A} \Pi_i (\beta^i)^2. \quad (3.43a)$$

Mit (3.43a) kann (3.42) umgeschrieben werden und für die innere Energie  $u$  ergibt sich

$$u = \frac{1}{2} \varepsilon_{kl}^e D_{klmn} \varepsilon_{mn}^e - \gamma_{kl} \varepsilon_{kl}^e T_0 + c_v (T - T_0) + \sum_{i=\sigma, T, A} u_0^i \beta^i + \Phi^* + \kappa I_{\mathcal{K}}(\beta^\sigma, \beta^T). \quad (3.43b)$$

Die Energieerhaltung (erster Hauptsatz der Thermodynamik) ist bei einer Wärmequelle  $F$  erfüllt, wenn

$$\dot{u} + q_{i,i} = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} + F. \quad (3.43c)$$

Es wird wie üblich angenommen, dass der Wärmefluss  $\mathbf{q}$  durch das Fouriersche Gesetz gegeben ist:

$$q_i = -k^* T_{,i}, \quad (3.43d)$$

wobei  $k^*$  die Wärmeleitfähigkeit der Legierung ist. Gl. (3.43c) kann mit (3.43b) und (3.43d) neu formuliert werden:

$$\begin{aligned} \gamma_{kl} \dot{\varepsilon}_{kl}^e T_0 + c_v \dot{T} + \sum_{i=\sigma, T, A} u_0^i \dot{\beta}^i + (\dot{\beta}^T \beta^\sigma + \beta^T \dot{\beta}^\sigma) \Phi^{MM} \\ + (\dot{\beta}^M \beta^A + \beta^M \dot{\beta}^A) \Phi^{MA} - k^* (T_{,i})_{,i} = F. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Gl. (3.44) beschreibt die Kopplung zwischen Phasenumwandlung und mechanischen und thermischen Prozessen. Diese Ableitung des Zusammenhangs unterschiedlicher Vorgänge in der Legierung ist thermodynamisch konsistent und basiert grundlegend auf der Wahl der freien Energiefunktion.

Die thermischen Rand- und Anfangsbedingungen sind:

$$k^* \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} + \alpha^* (T - T^*) = 0 \quad \text{auf } \partial \Omega \quad (3.45a)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T^0(\mathbf{x}), \quad (3.45b)$$

wobei  $\partial\Omega$  die Oberfläche des Körpers  $\Omega$ ,  $\alpha^*$  der Wärmeübertragungskoeffizient zwischen Körper  $\Omega$  und der Umgebung,  $T^*$  die Umgebungstemperatur und  $\mathbf{n}$  der äußere Normalenvektor der Oberfläche  $\partial\Omega$  des Körpers  $\Omega$  sind.

### 3.2.5 Kalibrierung der Modellparameter durch Materialdaten

Das Ziel dieses Abschnitts ist die Ableitung von Zusammenhängen zwischen den Parametern des Modells und einfach messbaren Materialeigenschaften von SMAs auf der Basis der folgenden zwei Bedingungen: Das Modell soll den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik erfüllen und für die Phasenumwandlungen gilt das Umwandlungsdiagramm laut Abb. 3.4a (siehe ausführlich Abschnitt 3.1.2). Die Diskussion beschränkt sich in diesem Abschnitt auf den Fall der einachsigen Belastung. Die Ergebnisse werden in Abschnitt 3.2.7 auch für den Fall mehrachsiger Belastung diskutiert. Anschließend bilden die Ergebnisse die Grundlage der Formulierung der Evolutionsgleichungen der inneren Variablen in Abschnitt 3.2.6. Die temperatur- und spannungsabhängigen Bedingungen der Phasenumwandlung werden durch das Umwandlungsdiagramm nach BRINSON beschrieben (siehe Abb. 3.4a und ausführlich in Abschnitt 3.1.2). Dieses Diagramm wurde auf Basis von einachsigen experimentellen Beobachtungen entwickelt und später auch für mehrachsige Belastungen durch den Vergleichswert des Spannungstensors verifiziert. Das Diagramm ist durch die Steigungen der einzelnen Umwandlungsgrenzen  $c_a$ ,  $c_m$  und  $c_x$ , durch den speziellen Spannungswert (Für Definition siehe Abb. 3.4a.)  $\sigma_0$  und durch die kritische Temperaturen im unbelasteten Zustand  $M_{f0}$ ,  $M_{s0}$ ,  $A_{s0}$  und  $A_{f0}$  vollständig gegeben, wobei für die Mehrzahl von SMA gilt:

$$M_{f0} < M_{s0} < A_{s0} < A_{f0} . \quad (3.46)$$

Dieses Diagramm ermöglicht die Handhabung von allen möglichen MPhU von SMA in einem breiten Temperaturbereich, wobei nicht nur die Grundeffekte, wie Temperatur- und Spannungshysterese bei Pseudoelastizität, Einwegeffekt, sondern auch deren Abhängigkeit von der Temperatur und dem Spannungsniveau erfasst werden.

Zuerst wird die MPhU des orientierten Martensits in Austenit in Hinsicht auf die aktive thermodynamische Kraft  $X^\sigma$  diskutiert, wobei der Fall des vollständig martensitischen Zustandes  $\beta^\sigma = 1$  im entlasteten Zustand  $\sigma = 0$  als Ausgangszustand betrachtet wird. Unter Erwärmung erreicht und überschreitet die Temperatur den kritischen Wert  $A_{s0}$  und die MPhU ( $\beta^\sigma \rightarrow \beta^A$ ) beginnt, entsprechend der metallurgischen Definition von  $A_{s0}$  (siehe in Abschnitt 1.6):

$$\dot{\beta}^\sigma < 0, \quad \forall T > A_{s0} . \quad (3.47)$$



Im eindimensionalen Fall folgt aus (3.23)

$$\dot{\beta}^\sigma = \frac{1}{k} \dot{\varepsilon}^{\text{tr}} \Rightarrow \text{sign}(\dot{\beta}^\sigma) = \text{sign}(\dot{\varepsilon}^{\text{tr}}) . \quad (3.48)$$

Mit Gl. (3.35) kann gezeigt werden, dass die erforderliche und hinreichende Bedingung die Erfüllung des zweiten Hauptsatzes ist, dass das Vorzeichen der Kraft  $X^\sigma$  und die Änderung  $\dot{\varepsilon}^{\text{tr}}$  der zugeordneten inneren Variable  $\varepsilon^{\text{tr}}$  identisch sind. Deshalb ergibt sich aus (3.47)

$$X^\sigma(T) \Big|_{\sigma=0, \beta^\sigma=1} \leq 0, \quad \forall T > A_{s0} . \quad (3.49)$$

Hierbei ist (3.47) ein experimentelles Resultat, und (3.49) beschreibt eine Bedingung für das Modell, die durch eine geeignete Wahl der Modellparameter erfüllt werden soll. Durch ähnliche Überlegungen gestützt auf dem Umwandlungsdiagramm können weitere Bedingungen für alle möglichen MPhU, d.h. für die Änderungen der Phasenanteile  $\beta^\sigma$  und  $\beta^T$  bzw. der zugehörigen Kräften  $X^\sigma$ ,  $X^T$  und  $X^{\sigma T}$ , formuliert werden.

Mit (3.37) und (3.41) sind die thermodynamischen Kräfte lineare Funktionen der Temperatur und des Spannungsdeviators. Deshalb müssen die folgenden beiden Bedingungen gleichzeitig erfüllt werden, um die erforderlichen Vorzeichen der Kräfte in den gegebenen Bereichen des Umwandlungsdiagramms zu sichern:

1. Die Lage der Nullstellen der Kräfte und
2. die Vorzeichen der partiellen Ableitungen der Kräfte bezüglich Temperatur und Spannung

sollen mit dem Umwandlungsdiagramm laut Abb. 3.4a im Einklang sein. Am Beispiel der Bedingung (3.49) bedeutet dies

1. Die Nullstelle der linearen Funktion  $X^\sigma(T) \Big|_{\sigma=0, \beta^\sigma=1}$  ist kleiner oder gleich  $A_{s0}$ , und
2.  $\frac{\partial X^\sigma(\sigma, T) \Big|_{\beta^\sigma=1}}{\partial T} < 0$  .

In Abb. 3.4b sind die möglichen Funktionen  $X^\sigma(T) \Big|_{\sigma=0, \beta^\sigma=1}$  dargestellt, abhängig von den Modellparametern, die diesen beiden Bedingungen erfüllen.

Diese Vorgehensweise ist neu gegenüber den in der Literatur üblichen punktwisen Tests (u.a. LECLERCQ und LEXCELLENT, 1996) und ermöglicht den Zusammenhang zwischen den experimentellen Ergebnissen und dem Vorzeichen der Kräfte

über den ganzen  $T - \sigma$ -Raum zu sichern. Diese Vorgehensweise gewinnt eine große Bedeutung, wenn die Evolutionsgleichungen basierend auf den thermodynamischen Kräften formuliert sind und die Richtung der tensoriellen thermodynamischen Kräfte nicht nur durch den Spannungsdeviator gegeben ist.

**Schritt 1:** Um die erste von beiden oben genannten Bedingungen in (3.49) zu erfüllen, werden im Folgenden die Modellparameter so gewählt, dass die thermodynamische Kraft gerade bei  $T = A_{s0}$  ihre Nullstellen annimmt:

$$X^\sigma|_{\sigma=0, T=A_{s0}, \beta^\sigma=1} = 0. \quad (3.50)$$

Diese Bedingung kann mit der Definition der Kraft  $X^\sigma$  in (3.37a) umgeschrieben werden als:

$$\Delta u - \Delta s A_{s0} + \Pi_\sigma A_{s0} - \Phi^{MA} = 0. \quad (3.51)$$

Mit der Annahme (3.50) beschränkt der experimentell gut messbare Temperaturwert  $A_{s0}$  die Wahl der Modellparameter, die andererseits die Kraft  $X^\sigma$  bestimmen.

Anhand von (3.50) und wegen der Linearität der thermodynamischen Kraft  $X^\sigma$  bezüglich  $T$  repräsentiert die Gleichung

$$X^\sigma(\sigma, T)|_{\beta^\sigma=1} = 0 \quad (3.52)$$

eine gerade Linie im  $T - \sigma$ -Diagramm (siehe Abb. 3.4c), die durch ihre Nullstelle ( $\sigma = 0, T = A_{s0}$ ) und durch ihre Steigung eindeutig gegeben ist. Diese Gerade wird **Null-Kraft-Linie** (NKL) der Kraft  $X^\sigma$  genannt, und gilt für die betrachtete Phasenumwandlung. Die weiteren möglichen Phasenumwandlungen des betrachteten Drei-Phasen-Systems und die zugeordneten thermodynamischen Kräfte können auf ähnliche Weise auf Basis des Umwandlungsdiagramms analysiert werden. Als Ergebnis erhält man weitere Null-Kraft-Linien der Kräfte bei einer gegebenen Phasenverteilung, die in einem gemeinsamen Diagramm zusammengefasst werden können (dicke Linien in Abb. 3.4d). Bis jetzt sind bei allen Linien nur speziellen Punkte gewählt, die Steigung der Linien kann noch frei gewählt werden, wobei folgenden Einschränkungen gelten:

$$c_1(T - M_{s0}) \leq c_m(T - M_{s0}) + \sigma_0, \quad \forall T \in (M_{s0}, T_{\max}), \quad (3.53a)$$

$$c_2(T - M_{s0}) \geq c_a(T - A_{s0}), \quad \forall T \in (A_{s0}, T_{\max}), \quad (3.53b)$$

$$c_3 \geq c_x. \quad (3.53c)$$

Hier ist  $T_{\max}$  eine beliebige oberste Temperaturgrenze (gegeben durch experimentelle Bedingungen und beschränkt durch die thermoplastischen Eigenschaften des Materials).

Alle Bedingungen bezüglich des Ortes der Nullstellen der Null-Kraft-Linie (gewählter Punkt und Steigung) mit den Definitionen der Kräfte in (3.36), (3.41) und

(3.55) stellen ein Gleichungssystem zwischen wohl definierten Materialdaten (Parameter des Umwandlungsdiagramms) und Modellparameter dar:

$$\text{Modell-Parameter:} \quad \{\Delta u, \Delta s, \Phi^{MA}, \Phi^{MM}, \Pi_A, \Pi_\sigma, \Pi_T\}, \quad (3.54a)$$

$$\text{Materialeigenschaften:} \quad \{A_{s0}, M_{s0}, c_k, c_x, \sigma_0, k\}. \quad (3.54b)$$

Dieses Gleichungssystem ist überbestimmt, aber es kann durch die folgende Annahmen gelöst werden. Die Steigungen  $c_1$  und  $c_2$  seien:

$$c_1 = c_k, \quad c_2 = c_k, \quad (3.55)$$

wobei  $c_k = \frac{1}{2}(c_a + c_m)$ . Weiterhin wird angenommen

$$X^\sigma(\sigma = 0, T = M_{s0}, \beta^A = 1) = 0, \quad (3.56a)$$

$$X^\sigma(\sigma = 0, T = M_{s0}, \beta^\sigma = 1) = 0, \quad (3.56b)$$

statt folgender Annahmen, die aus dem BRINSONSchen Umwandlungsdiagramm [15] in Abb. 3.4a (und mit (3.50)) folgen würden

$$X^\sigma(\sigma = \sigma_0, T = M_{s0}, \beta^A = 1) = 0,$$

$$X^\sigma(\sigma = 0, T = A_{s0}, \beta^\sigma = 1) = 0.$$

Alle Bedingungen sind in Tab. 3.1 zusammengefasst, wobei die Kräfte (erste Spalte) als Null angenommen sind an der gegebenen Stelle im  $T - \sigma$ -Raum (zweite und dritte Spalte) unter der angegebenen homogenen Phasenverteilung (vierte Spalte). Die Annahmen in (3.55) sind mit Hilfe der Definition der Kräfte berücksichtigt, siehe nicht spezifizierte  $(T, \sigma)$ -Paare in der zweiten und dritten Spalte in Tab. 3.1.

Mit dieser modifizierten Annahme kann das Gleichungssystem in Tab. 3.1 für die Modellparameter eindeutig gelöst werden:

$$\Phi^{MA} = 0, \quad (3.57a)$$

$$\Phi^{MM} = \frac{2}{3} k (\sigma_0 - M_{s0} c_3), \quad (3.57b)$$

$$\Pi_\sigma = -\frac{2}{3} k \frac{(c_3 - c_k) A_{s0} + c_k M_{s0}}{A_{s0}}, \quad (3.57c)$$

$$\Pi_A = -\Pi_\sigma, \quad (3.57d)$$

$$\Pi_T = -\frac{2}{3} c_3 k, \quad (3.57e)$$

$$\Delta s = -\frac{2}{3} k \frac{c_3 A_{s0} + c_k M_{s0}}{A_{s0}}, \quad (3.57f)$$

$$\Delta u = -\frac{2}{3} k c_k M_{s0}. \quad (3.57g)$$

Thermod. Kraft	$T$	$\sigma$	Phasenanteil	Zusammenhänge
$X^\sigma = 0$	$M_{s0}$	0	$\beta^\sigma = 1$	$M_{s0}(\Pi_\sigma - \Delta s) = -\Delta u + \Phi^{MA}$
$X^\sigma = 0$	$T > M_{s0}$	$\sigma$	$\beta^\sigma = 1$	$\frac{2}{3}c_k k = \Pi_\sigma - \Delta s$
$X^\sigma = 0$	$M_{s0}$	0	$\beta^A = 1$	$M_{s0}(\Pi_A + \Delta s) = \Delta u + \Phi^{MA}$
$X^\sigma = 0$	$T > M_{s0}$	$\sigma$	$\beta^A = 1$	$-\frac{2}{3}c_k k = \Pi_A + \Delta s$
$X^T = 0$	$A_{s0}$	$\sigma$	$\beta^T = 1$	$A_{s0}(\Pi_T - \Delta s) = -\Delta u + \Phi^{MA}$
$X^T = 0$	$M_{s0}$	$\sigma$	$\beta^A = 1$	$M_{s0}(\Pi_A + \Delta s) = \Delta u + \Phi^{MA}$
$X^{\sigma T} = 0$	$M_{s0}$	$\sigma_0$	$\beta^T = 1$	$\frac{2}{3}\sigma_0 k = \Phi^{MM} - \Pi_T M_{s0}$
$X^{\sigma T} = 0$	$T < M_{s0}$	$\sigma$	$\beta^T = 1$	$\frac{2}{3}k c_3 = -\Pi_T$

Tabelle 3.1: Annahmen bezüglich Nullstellen der Kräfte im  $T - \sigma$ -Raum und die resultierende Zusammenhänge zwischen Materialeigenschaften und Modellparametern.

**Bemerkung:** Das Ergebnis  $\Phi^{AM} = 0$  folgt aus der Annahme in Gl. (3.56). Die Gl. (3.57c)-(3.57e) drücken die Bedeutung der Erweiterung der freien Helmholtz-Energie Funktion von LECLERCQ und LEXCELLENT [55] und von RANIECKI et al. [86] mit dem Term

$$\frac{1}{2} T \sum_{i=\sigma, T, A} \Pi_i (\beta^i)^2$$

aus, wonach der eingeführte zusätzliche Modellparameter weitere wichtige Freiheitsgrade bei der Anpassung der Null-Kraft-Linien an das Umwandlungsdiagramm darstellen.

**Schritt 2:** Nachdem die Nullwerte der Kräfte im ersten Schritt mit dem Umwandlungsdiagramm in Einklang gebracht wurden, werden jetzt die Vorzeichen der Kräfte an beiden Seiten der Null-Kraft-Linien geprüft. Diese Vorzeichen sind durch partielle Ableitungen der Kräfte bestimmt und sollten mit dem Umwandlungsdiagramm im Einklang stehen:

$$\frac{\partial X^\sigma}{\partial \sigma} \geq 0, \quad \frac{\partial X^{\sigma T}}{\partial \sigma} \geq 0, \quad \frac{\partial X^T}{\partial T} \leq 0. \quad (3.58)$$

Die Ungleichungen (3.58)<sub>1</sub> und (3.58)<sub>2</sub> sind mit der Definition der Kräfte in (3.37a) und (3.41) automatisch erfüllt. Die Ungleichung (3.58)<sub>3</sub> kann mit den gewählten Modellparametern in (3.57) und Gl. (3.37b) umgeschrieben werden

als:

$$\left( \beta^M M_{s0} + \beta^A A_{s0} \right) c_k + \beta^\sigma A_{s0} c_3 \geq 0. \quad (3.59)$$

Es wird die strengere Bedingung, die Positivität beider Teile, geprüft. Weil  $c_k > 0$  ist, ist der erste Term für alle  $\beta^T$  und  $\beta^\sigma$  positiv. Der zweite Teil ist dann positiv, wenn  $c_3 \geq 0$  ist. Experimente haben gezeigt, dass bei den meisten SMA  $c_3 \leq 0$  gilt, deshalb sei  $c_3$

$$c_x \neq c_3 = 0. \quad (3.60)$$

Die Null-Kraft-Linien 1 und 2 und die MPhU-Bedingungen I und II sind mit der gleichen Kraft  $X^\sigma$  bei unterschiedlicher Phasenverteilung  $\beta^A = 1$  bzw.  $\beta^\sigma = 1$  verbunden.

Da die Null-Kraft-Linie den Ort des Vorzeichenwechsels der thermodynamischen Kraft bei beiden Phasenverteilung beschreibt, folgt

$$c_a(T - A_{s0}) < c_k(T - M_{s0}) < c_m(T - M_{s0}) + \sigma_0 \quad \forall T \in (A_{s0}, T_{\max}). \quad (3.61)$$

Diese Ungleichung drückt die Forderung aus, dass die Null-Kraft-Linien 1 und 2 und MPhU-Bedingung I und II einander nicht kreuzen dürfen. Durch die Restriktionen in (3.60) und (3.61) erhalten wir die folgende Form der Gleichungen der Modellparameter:

$$\Phi^{MA} = 0, \quad (3.62a)$$

$$\Phi^{MM} = \frac{2}{3} k \sigma_0, \quad (3.62b)$$

$$\Pi_\sigma = \frac{2}{3} \frac{c_k k (A_{s0} - M_{s0})}{A_{s0}}, \quad (3.62c)$$

$$\Pi_A = -\Pi_\sigma, \quad (3.62d)$$

$$\Pi_T = 0, \quad (3.62e)$$

$$\Delta s = -\frac{2}{3} \frac{c_k k M_{s0}}{A_{s0}}, \quad (3.62f)$$

$$\Delta u = \Delta s A_{s0}. \quad (3.62g)$$

Da die Umwandlungsbedingungen und Null-Kraft-Linien in den meisten Fällen im Modell nicht identisch sind, folgt, dass die Phasenumwandlung mit den Mitteln der Gleichgewichtsthermodynamik nicht beschrieben werden kann: Das absolute Gleichgewicht, wobei alle thermodynamischen Kräfte und Flüsse verschwinden, kann unter der Phasenumwandlung nicht erreicht werden. Die Kräfte sind nicht Null auch dann, wenn die thermodynamischen Flüsse eingefroren sind, d.h. auch zu Beginn der Umwandlung. Dieser Zustand ist das so genannte **erzwungene**

**Gleichgewicht**, ein wohl bekannter Begriff der Nichtgleichgewichtsthermodynamik (siehe noch MAUGIN und MUSCHIK [61] und Abschnitt 2.7). Dieses Phänomen ist auf den kristallografischen Aufbau von SMA zurückzuführen, wobei innere Spannungen und Kristalldefekte die Phasenumwandlung behindern. Deshalb kann die MPhU nur dann beginnen, wenn die treibenden Kräfte einen kritischen Wert bereits überschritten haben.

### 3.2.6 Evolutionsgleichungen

In diesem Abschnitt werden die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen basierend auf den Eigenschaften der thermodynamischen Kräfte definiert, wobei diese Gleichungen die kinematischen Eigenschaften des Materials beschreiben (siehe ausführlich Abschnitt 2.6) und damit das Gleichungssystem der gewählten Zustandsvariablen neben Konstitutiv- und Wärmeleitgleichung vervollständigen.

In diesem Modell wird nicht dem Standardweg der Elastoplastizitätstheorie<sup>8</sup> gefolgt, stattdessen wird eine "Mischung" verwendet: Einerseits werden Phasenumwandlungsbedingungen (ähnlich wie Fließbedingungen) für alle fünf möglichen Phasenumwandlungsarten basierend auf dem Umwandlungsdiagramm und experimentellen Ergebnissen eingeführt und eine Konsistenzbedingung bezüglich dieser Flächen gefordert, andererseits wird die Richtung der Entwicklung statt durch Verwendung der Normalenregel, durch die thermodynamische Kräfte gegeben<sup>9</sup>. Diese Vorgehensweise erlaubt eine thermodynamisch konsistente Beschreibung (Der zweite Hauptsatz wird stets erfüllt.) und eine genauere Anpassung an die Meßergebnisse bezüglich der Kinetik der Umwandlung.

Es werden folgende Phasenumwandlungsbedingungen basierend auf dem Umwandlungsdiagramm von BRINSON definiert

$$g_1(\boldsymbol{\sigma}, T, \beta^\sigma, \beta^T) = \sigma_{\text{eq}}^* - (\sigma_1(T) + \Delta\sigma_1(T) f_1(\beta^\sigma)) \leq 0, \quad (3.63a)$$

$$g_2(\boldsymbol{\sigma}, T, \beta^\sigma, \beta^T) = -\sigma_{\text{eq}}^* + (\sigma_2(T) - \Delta\sigma_2(T) f_2(\beta^\sigma)) \leq 0, \quad (3.63b)$$

$$g_3(\boldsymbol{\sigma}, T, \beta^\sigma, \beta^T) = \sigma_{\text{eq}}^* - (\sigma_3(T) + \Delta\sigma_3(T) f_3(\beta^\sigma)) \leq 0, \quad (3.63c)$$

$$g_4(T, \beta^\sigma, \beta^T) = -T + (M_{s0} - \Delta T_4(\sigma) f_4(\beta^T)) \leq 0, \quad (3.63d)$$

$$g_5(T, \beta^\sigma, \beta^T) = T - (A_{s0} + \Delta T_5(\sigma) f_5(\beta^T)) \leq 0, \quad (3.63e)$$

<sup>8</sup>Wobei ein Pseudopotenzial eingeführt wird und dessen Ableitungen nach thermodynamischen Kräften bei Definition der Evolutionsgleichungen verwendet werden. Siehe Abschnitt 3.1.3.

<sup>9</sup>Diese Annahme basiert auf den Ergebnissen des vorangegangenen Abschnitts, wobei gezeigt wurde, dass die Richtung der thermodynamischen Kräfte im eindimensionalen Fall (die Vorzeichen) durch die spezielle Wahl der Modellparameter mit dem Umwandlungsdiagramm abgestimmt werden kann.

wobei die Nummerierung der Abb. 3.4a entspricht. Die Vergleichsspannung  $\sigma_{\text{eq}}^*$  ist durch (3.11) definiert und wurde ausführlich in Abschnitt 3.1.3 diskutiert. Durch diese spezielle Definition der Vergleichsspannung sind die anisotropen Eigenschaften der Phasenumwandlungen berücksichtigt. Hierbei wurden die folgenden drei Schritte herangezogen:

1. Zuerst wird der **Anfang der Phasenumwandlung** durch die folgenden temperaturabhängigen Funktionen  $\sigma_i(T)$ ,  $i = 1, 2, 3$  beschrieben, die die Umwandlungsgrenzen im  $T-\sigma_{\text{eq}}$ -Raum (siehe Linien I,II und III in Abb. 3.4a) angeben:

$$\sigma_1(T) := c_m(T - M_{s0}) + \sigma_0, \quad (3.64a)$$

$$\sigma_2(T) := c_a(T - A_{s0}), \quad (3.64b)$$

$$\sigma_3(T) := c_x(T - M_{s0}) + \sigma_0. \quad (3.64c)$$

2. Die **Umwandlungszonen** (graue Bereiche in Abb. 3.4) sind durch die Funktionen  $\Delta T_{4,5}(\sigma_{\text{eq}})$  und  $\Delta\sigma_{1,2,3}(T)$  gegeben (siehe Abb. 3.5). Diese Funktionen beschreiben die Breite der jeweiligen Umwandlungszonen (bzw. die Größe der Verfestigung unter der Phasenumwandlung) und hängen mit der Phasenumwandlungscharakteristik zusammen. Sie sind in diesem Modell auf Grund von experimentellen Resultaten als konstant angenommen. Wegen der einfachen geometrischen Zusammenhänge im Umwandlungsdiagramm gelten die folgenden Zusammenhänge:

$$\Delta\sigma_1 = \Delta\sigma_3, \quad c_a\Delta T_5 = \Delta\sigma_2, \quad c_m\Delta T_4 = \Delta\sigma_1. \quad (3.65)$$

3. Die **Formfunktionen**  $f_i : \beta^\sigma \text{ oder } T \rightarrow [0, 1]$ ,  $i = 1, \dots, 5$  beschreiben die Kinetik der Phasenumwandlung, einen verfestigungsähnlichen Prozess: Die aktuell existierenden Martensit-Kristalle, innere Spannungen und Kristalldefekte erschweren die weitere Bildung von Martensit-Kristallen<sup>10</sup>. In der Praxis geben die Funktionen  $f_1$  und  $f_2$  die Form der Strecken  $\overline{BK}$  und  $\overline{CL}$  in Abb. 3.5 an. Alle andere Arten der MPhU (z.B. im Fall des Einweg-Effekts die Funktion  $f_3$  bei mechanischer Belastung und  $f_5$  bei Erwärmung) sind ähnlich definiert und können durch entsprechende experimentelle Daten bestimmt werden (siehe noch Kap. 4).

Mit den fünf Umwandlungsbedingungen (3.63) können alle Arten von Phasenumwandlung in einem Drei-Phasen-System (Austenit, orientierter Martensit und thermisch induzierter Martensit) charakterisiert werden. Damit können alle SME erfasst werden. Die anisotrope Eigenschaft der MPhU ist im verwendeten Vergleichswert des Spannungstensors in (3.11) berücksichtigt. Um die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen (auch für den Fall von nicht proportionalen Belastungen) abzuleiten, werden die folgende zwei Aussagen verwendet:

<sup>10</sup>Aus diesem Grund existiert auch der so genannte Restaustenit am Ende der MPhU.

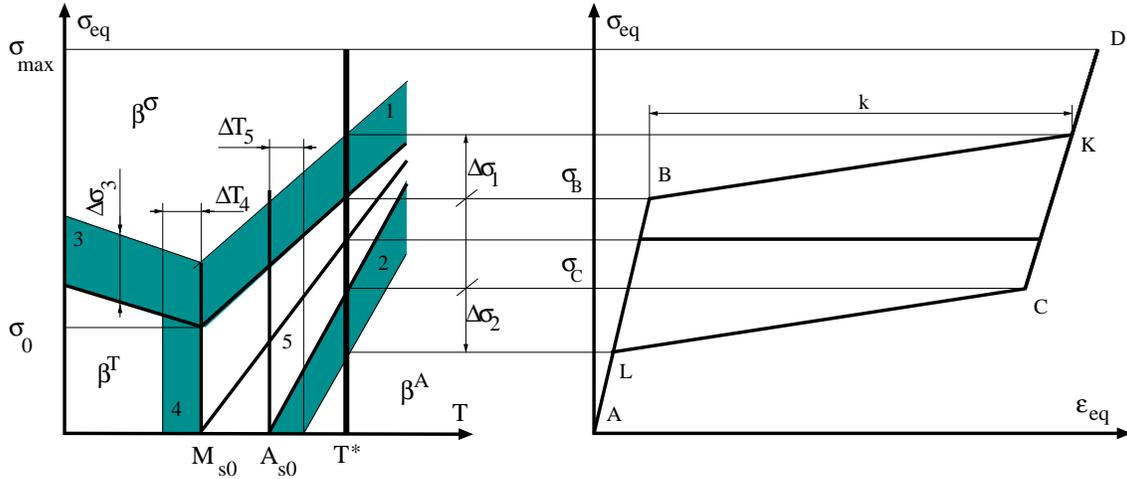


Abbildung 3.5: Das in diesem Modell verwendete Umwandlungsdiagramm von BRINSON [15] und dessen Bedeutung im Fall der Pseudoelastizität.

1. Annahme der Konsistenzbedingung bezüglich der aktiven Phasenumwandlungsbedingung ( $g_i = 0, \dot{g}_i = 0$ ), und
2. das Ergebnis des vorigen Abschnitts, dass die thermodynamischen Kräfte die Evolutionsrichtung der assoziierten inneren Variablen angeben<sup>11</sup>.

Auf Grund dieser beiden Punkte können die Evolutionsgleichungen mittels der thermodynamischen Kräfte in der folgenden einfachen Form notiert werden:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} = (\lambda_1 + \lambda_2) X_{ij}^{\sigma} + \lambda_3 X_{ij}^{\sigma T}, \quad (3.66a)$$

$$\dot{\beta}^T = (\gamma_3 + \gamma_4 + \gamma_5) X^T, \quad (3.66b)$$

wobei  $\lambda_m \geq 0, \gamma_p \geq 0$  und  $\lambda_m \lambda_n = 0$  wenn  $m \neq n, \gamma_p \gamma_q = 0$  wenn  $p \neq q, m, n \in \{1, 2, 3\}, p, q \in \{3, 4, 5\}$ . Die Indizes der Multiplikatoren  $\lambda_m$  und  $\gamma_p$  hängen mit den Indizes der Phasenumwandlungsbedingungen zusammen. Weiterhin können die skalare Multiplikatoren  $\lambda_m$  und  $\gamma_p$  (**Fließparameter**) mit Hilfe der Konsistenzbedingungen der zugehörigen MPhU-Bedingungen berechnet werden.<sup>12</sup>

$$g_m \leq 0, \quad \lambda_m \dot{g}_m = 0, \quad \lambda_m \geq 0, \quad m = 1, 2, 3, \quad (3.67a)$$

$$g_p \leq 0, \quad \gamma_p \dot{g}_p = 0, \quad \gamma_p \geq 0, \quad p = 3, 4, 5. \quad (3.67b)$$

<sup>11</sup>Im Fall allgemeiner Belastungen wird diese Annahme noch im Abschnitt 3.2.7 diskutiert und geprüft. Im einachsigen Fall reduziert sich das Problem der Identifizierung der Vorzeichen der Kräfte und der Entwicklung der Phasenanteile und wurde bereits im Abschnitt 3.2.5 diskutiert.

<sup>12</sup>Im Fall der Umwandlung  $\beta^T \rightarrow \beta^\sigma$  kann  $\lambda_3$  (wobei  $g_3 = 0, \dot{g}_3 = 0$ ) berechnet werden, und  $\gamma_3$  ist durch Gl. (3.39) gegeben.

**Anmerkung 1:** Die Evolutionsgleichungen (3.66) erfüllen die thermodynamische Konsistenz, weil die Dissipation  $D$  in (3.35) die folgende quadratische Form im gesamten Zustandsraum erhält:

$$D = (\lambda_1 + \lambda_2) (X_{ij}^\sigma)^2 + (\gamma_3 + \gamma_4 + \gamma_5) (X^T)^2, \quad (3.68)$$

oder im Fall der Reorientierung nach (3.40)

$$D = \lambda_3 (X_{ij}^{\sigma T})^2 \quad (3.69)$$

die wegen der Positivität der Multiplikatoren  $\lambda_m$  und  $\gamma_p$  immer positiv ist. Damit ist der zweite Hauptsatz der Thermodynamik immer erfüllt.

**Anmerkung 2:** Das neue Modell beschreibt eine zeitunabhängige Materialeigenschaft. Wenn diese Annahme für die betrachtete SMA nicht zutreffend ist, kann die Zeitabhängigkeit durch die freie Wahl der Multiplikatoren  $\lambda_m$  und  $\gamma_p$  abhängig vom Temperatur- und dem Spannungszustand<sup>13</sup> erfaßt werden, wobei keine Konsistenzbedingung bzgl. Umwandlungsgrenzen mehr besteht. Die Bedingungen (3.63) sollen weiterhin im quasi-statischen Grenzfall erfüllt werden. Für experimentelle Beobachtungen bezüglich Zeitabhängigkeit der Umwandlung siehe [39, 38].

**Anmerkung 3:** Es gibt spezielle Punkte im Umwandlungsdiagramm, an denen zwei Umwandlungsbedingungen gleichzeitig erfüllt sind. In diesen Fälle laufen zwei MPhU parallel ab, und es sollten beide Konsistenzbedingungen bezüglich der beiden aktiven MPhU-Bedingungen erfüllt werden. Durch diesen Prozess kommt ein Dreiphasen-System zustande.

**Anmerkung 4:** Die Verwendung von direkt definierten Umwandlungsbedingungen und die Formulierung der Evolutionsgleichungen sind ähnlich zur nicht-assozierten Fließregel in der Plastizitätstheorie. Die Abhängigkeit der Umwandlungsbedingungen von Phasenteilen ist ähnlich dem Konzept der isotropen Verfestigung.

**Anmerkung 5:** Die Konstitutivgleichung (3.29), die Wärmeleitgleichung (3.43c) und die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen (3.66) stellen eine vollständig gekoppelte thermo-mechanische Beschreibung der Phasenumwandlung dar.

### 3.2.7 Modellierung der allgemeinen Belastung

In Abschnitt 3.2.5 wurde gezeigt, dass das Vorzeichen der thermodynamischen Kraft mit dem Umwandlungsdiagramm basierend auf einer speziellen Wahl der Modellparameter (3.57) im Fall der einachsigen Belastung in Einklang gebracht

<sup>13</sup>Statt Berechnung durch die Konsistenzbedingungen.

werden kann. In diesem Abschnitt wird zuerst die Bedeutung des Umwandlungsdiagramms und anschließend die Eigenschaften der Kräfte im Fall der mehrachsigen Belastung diskutiert. Wegen fehlender umfassender experimenteller Ergebnisse ist das Ziel dieses Abschnitts die Plausibilität der Modelleigenschaften zu zeigen, aber die Annahmen können zur Zeit nicht vollständig durch Experimente verifiziert werden. Trotzdem werden einige Beispiele zur Anpassung des Modells basierend auf wenigen in der Literatur vorhandenen Experimenten im Kapitel 4 an numerische Ergebnisse dargestellt.

Die gewöhnliche Verallgemeinerung des Umwandlungsdiagramms von BRINSON [15] für allgemeine mehrachsige Belastungen nimmt indirekt ein isotropes Materialverhalten an: Die Vergleichsspannung wird durch den von Mises Vergleichswert berechnet. Experimente [70, 87, 83, 88, 96, 97] haben gezeigt, dass bei vielen Legierungen eine eindeutige Anisotropie unter mehrachsiger Belastung beobachtet werden kann. In diesem Modell wird die allgemeine Form des anisotropen Vergleichswerts (3.11) verwendet, wobei die verwendeten Konstanten in (3.11) durch die aktuellen Materialdaten ersetzt werden.

Es wurde bei der Formulierung der Evolutionsgleichungen der inneren Variablen  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}, \beta^T$  in (3.66) angenommen, dass die konjugierten thermodynamischen Kräfte die Richtung der Entwicklung des TID-Tensors geben. Nun soll die Richtung der Kräfte im Fall der allgemeinen, nicht proportionalen, mehrachsigen Belastung diskutiert werden. Hierbei wird auf die Ergebnisse von Abschnitt 3.2.5 aufgebaut, wobei das Vorzeichen der Kräfte durch eine geeignete Wahl der Modellparameter in (3.57) mit dem Umwandlungsdiagramm in Abb. 3.4 unter einachsiger Belastung in Einklang gebracht wird (siehe Abb. 3.6b). Das Ziel dieses Abschnitts ist es, die Konsistenz zwischen der Richtung der Kräfte und dem Umwandlungsdiagramm unter allgemeiner Belastung zu prüfen, wobei nur die tensoriellen Kräfte  $\mathbf{X}^\sigma$  und  $\mathbf{X}^{\sigma T}$  betrachtet werden sollen. Bei der skalaren Kraft  $X^T$  ändert sich mit Erhöhung der Dimension der Belastung nichts.

Weil die Kräfte vom aktuellen Spannungszustand  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ , von der existierenden Kristallstruktur (charakterisiert durch  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}$ ), von der Phasenverteilung und auch von der Temperatur abhängen, ist die Bestimmung der Richtung der Kräfte nicht trivial. Deshalb stellt diese neue Beschreibung der Phasenumwandlung neuartige Probleme dar und verlangt einen neuen Lösungsweg. Aber die eingeführte Methode ermöglicht die Beschreibung einiger wichtiger Effekte (wie z.B. reine Reorientierung).

Hier wird nur das komplexere Problem der tensorwertigen thermodynamischen Kraft  $\mathbf{X}^\sigma$  im Fall der allgemeinen Belastung betrachtet. Die Diskussion der anderen tensoriellen Kraft  $\mathbf{X}^{\sigma T}$  geschieht auf ähnliche Weise<sup>14</sup>. Entsprechend der

<sup>14</sup>Die Kraft  $\mathbf{X}^{\sigma T}$  ist aktiv im Fall der  $\beta^T \rightarrow \beta^\sigma$  MPhU. Diese Umwandlung kann nur in dieser Richtung beim Einwegeffekt geschehen. Bei der  $\beta^\sigma \rightarrow \beta^A$  MPhU ist die aktive Kraft

Gl. (3.37a) ist die Kraft  $\mathbf{X}^\sigma$  als Differenz von der deviatorischen Spannung und einem Term proportional zur Richtung des TID-Tensors gegeben:

$$\mathbf{X}^\sigma = \tilde{\boldsymbol{\sigma}} - f_\sigma(T, \beta^\sigma, \beta^T) \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}} := \tilde{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{tr}}, \quad (3.70)$$

wobei eine neu eingeführte tensorwertige Variable  $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{tr}}$  definiert ist, die nicht allein vom TID-Tensor abhängig ist, sondern auch von der Temperatur und der Phasenverteilung abhängt.

Auf ähnliche Weise können die folgenden weiteren Variablen  $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^e$  eingeführt werden:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma = f_\sigma(T, \beta^\sigma, \beta^T) \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^e = f_\sigma(T, \beta^\sigma, \beta^T) \boldsymbol{\varepsilon}^e, \quad (3.71)$$

wobei mit (3.25) gilt

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma = \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^e + \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{tr}}. \quad (3.72)$$

Mit der Definition der Modellparameter in (3.62) kann die in (3.37a) definierte Funktion  $f_\sigma$  wie folgt geschrieben werden:

$$f_\sigma = \frac{1}{k A_{s0} \beta^\sigma} \left\{ \left( c_k A_{s0} (1 - \beta^T) + c_k \beta^T M_{s0} \right) T + A_{s0} (\beta^T \sigma_0 - c_k M_{s0}) \right\}. \quad (3.73)$$

Im Modell wird verlangt, dass die Funktion  $f_\sigma$  für  $\forall T > M_{s0}$  (Gültigkeitsbereich der Kraft) und für alle Phasenverteilungen positiv ist, um die Richtung der Kraft einfacher diskutieren zu können. Aus dieser Forderung folgt die folgende Bedingung

$$A_{s0} \sigma_0 - M_{s0} c_k (A_{s0} - M_{s0}) > 0, \quad (3.74)$$

die leicht bei vorhandenen numerischen Daten geprüft werden kann.

Die tensorwertigen Variablen  $\mathbf{X}^\sigma$ ,  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^e$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{tr}}$  können in einen sechsdimensionalen HILBERT-Raum  $\mathbb{H}$  (Voigtsche Schreibweise) eindeutig transformiert werden, der mit folgendem **Skalarprodukt** ausgestattet ist:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_i v_i, \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{H}. \quad (3.75)$$

Basierend auf diesem Skalarprodukt läßt sich eine **Norm**, die Euklidische Norm, einführen:

$$\|\mathbf{u}\| = \sqrt{u_i u_i}, \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbb{H}. \quad (3.76)$$

---

wieder  $\mathbf{X}^\sigma$ . Weil nur eine Richtung der Umwandlung mit dieser Kraft erfasst werden soll, ist die Diskussion dieser Kraft deutlich einfacher.

Weiterhin wird der **Winkel zwischen zwei Elementen**  $\mathbf{u}$  und  $\mathbf{v}$  basierend auf dem Skalarprodukt (3.75) und auf die eingeführte Norm (3.76) definiert:

$$\cos(\alpha(\mathbf{u}, \mathbf{v})) = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{\|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|}, \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{H}. \quad (3.77)$$

Eine zweidimensionale Darstellung wird in Abb. 3.6 verwendet, um die Modelleigenschaften zu veranschaulichen<sup>15</sup>. Diese geometrische Darstellung der thermo-

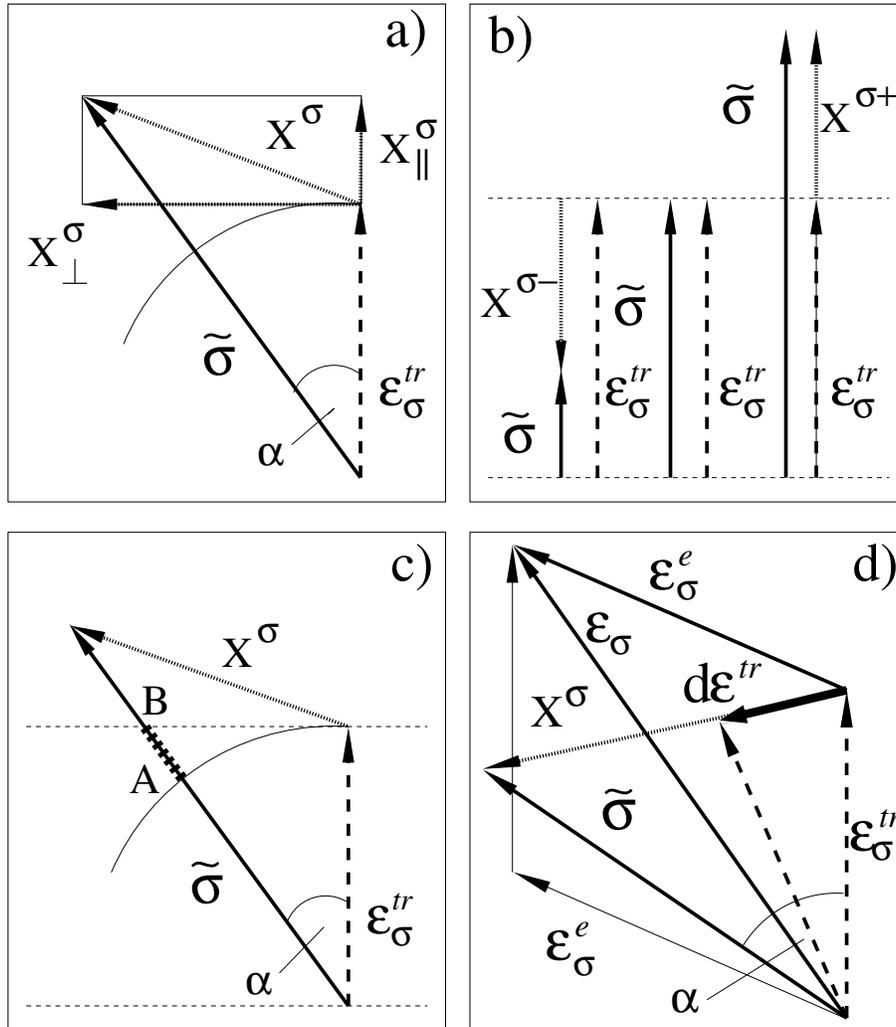


Abbildung 3.6: Die Darstellung der thermodynamischen Kraft  $\mathbf{X}^\sigma$  als Vektor im zweidimensionalen Raum.

dynamischen Kräfte ermöglicht eine Diskussion der Eigenschaften der Kräfte basierend auf einfachen geometrischen Zusammenhängen: Die thermodynamische

<sup>15</sup>Mit der Verwendung der Umskalierung in (3.71) lassen sich alle Vektoren im selben Raum darstellen, siehe Abb. 3.6d. Für den eindimensionalen Fall siehe Abb. 3.6b.

Kraft  $\mathbf{X}^\sigma$  repräsentiert die Differenz zwischen der deviatorischen Spannung  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$  und dem skalierten TID-Tensor  $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{tr}}$ , wobei diese beiden Vektoren einen Winkel  $\tilde{\alpha}$  bilden (siehe Abb. 3.6 a,d), definiert durch

$$\cos \tilde{\alpha} := \frac{\tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{tr}}}{\|\tilde{\boldsymbol{\sigma}}\| \|\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{tr}}\|} . \quad (3.78)$$

Dieser Winkel  $\tilde{\alpha}$  kann als **Maß der Konsistenz** zwischen dem Spannungszustand und der Martensitstruktur verstanden werden: Wenn sie vollständig konsistent sind, ist  $\tilde{\alpha} = 0$ .

Der Kraftvektor kann in zwei zueinander orthogonale Komponenten  $\mathbf{X}_\parallel^\sigma$  und  $\mathbf{X}_\perp^\sigma$  zerlegt werden (siehe Abb. 3.6 a,c), wobei die Komponente  $\mathbf{X}_\parallel^\sigma$  parallel zum Tensor  $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{tr}}$  gewählt wird. Es gelten die folgenden Gleichungen:

$$\mathbf{X}^\sigma = \mathbf{X}_\parallel^\sigma + \mathbf{X}_\perp^\sigma , \quad (3.79a)$$

$$0 = \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma^{\text{tr}} \cdot \mathbf{X}_\perp^\sigma , \quad (3.79b)$$

$$0 = \mathbf{X}_\parallel^\sigma \cdot \mathbf{X}_\perp^\sigma . \quad (3.79c)$$

Aus den Evolutionsgleichungen (3.66) folgt, dass die Kraft  $\mathbf{X}_\parallel^\sigma$  mit Zunahme und Abnahme des Betrages des TID-Tensors zusammenhängt. Die Komponente  $\mathbf{X}_\perp^\sigma$  bedeutet eine reine Richtungsänderung, die Drehung des TID-Tensors.

Die Komponente  $\mathbf{X}_\perp^\sigma$  zeigt in Richtung der Reduzierung des Winkel  $\tilde{\alpha}$ . Diese Tatsache deutet darauf hin, dass die thermodynamische Kraft eine Orientierungsänderung des TID-Tensors beschreibt, welche den Betrag der Kraft und die Orientierungsdifferenz zwischen dem TID-Tensor und dem Spannungszustand entsprechend der Gl. (3.66a) reduziert. Folglich beschreibt diese Kraft eine mehr konsistente Martensit-Orientierung als eine Kraft mit gleichem Betrag, deren Richtung der Richtung des Spannungsdeviator-Vektors entspricht.

Entsprechend der Dreiecksungleichung bezüglich der induzierten Norm des Hilbert-Raumes, nimmt der Betrag der Kraft  $\|\mathbf{X}^\sigma\|$  kontinuierlich mit steigendem Winkel  $\tilde{\alpha}$  zu (siehe Abb. 3.6a) und hat sein Minimum bei  $\tilde{\alpha} = 0$ . Basierend auf diesem Ergebnis kann der Betrag der aktiven thermodynamischen Kraft verwendet werden, um den Grad der Inkonsistenz der Martensitstruktur in der SMA abzuschätzen. Weiterhin kann das Ergebnis für die Beschreibung der reinen Reorientierung verwendet werden, wie nun diskutiert wird.

### 3.2.8 Spezialfall der reinen Reorientierung

In diesem Abschnitt soll der Spezialfall des Strukturwechsels des Martensits diskutiert werden, wobei keine Phasenumwandlung stattfindet. Solche Strukturänderungen treten auf, wenn entweder das ganze Volumen schon martensitisch ist und

deswegen keine Phasenumwandlung mehr möglich ist oder die weitere Phasenumwandlung blockiert ist<sup>16</sup>. Reine Reorientierung spielt eine entscheidende Rolle bei dem Spannungsabbau unter nichtproportionaler Belastung.

Per Definition finden bei der reinen Reorientierung keine Phasenumwandlungen statt. Die Phasenverteilung ändert sich nicht:

$$\dot{\beta}^i = 0, \quad i = A, \sigma, T. \quad (3.80a)$$

Mit der Annahme von (3.23) folgt:

$$\dot{\beta}^\sigma = 0 \iff \dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} \varepsilon_{ij}^{\text{tr}} = 0. \quad (3.80b)$$

Die Konsistenzbedingungen (3.67) können bei reinen Reorientierung nicht erfüllt werden, deshalb müssen für diesen speziellen Fall neue Evolutionsgleichungen der inneren Variablen konstruiert werden, wobei auch ein neues Konzept anstatt der Konsistenzbedingungen formuliert werden muss. Bei reiner Reorientierung beschreiben die folgenden Evolutionsgleichungen die Änderung der inneren Variablen  $\varepsilon^{\text{tr}}$  und  $\beta^T$  in diesem Modell:

$$\dot{\beta}^T \equiv 0, \quad (3.81a)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} = \lambda_4 X_{ij}^\sigma + \lambda_5 X_{ij}^{\sigma T} = \lambda_{4,5} X_{ij}^{\sigma, \sigma T}, \quad (3.81b)$$

wobei  $\lambda_i \geq 0$  für  $i = 4, 5$  und  $\lambda_4 \lambda_5 = 0$ . Die Bedingungen der reinen Reorientierung (3.80) müssen erfüllt werden. Da nur eine Kraft immer aktiv ist, wird die aktive Kraft in (3.81b) im weiteren einfachheitshalber mit  $\mathbf{X}^{\sigma, \sigma T}$  bezeichnet. Welche Kraft gerade aktiv ist, hängt von der Temperatur ab: Über  $M_{s0}$  wirkt  $\mathbf{X}^\sigma$ , sonst  $\mathbf{X}^{\sigma T}$ . Aus diesem Grund soll auch nur eine Unbekannte  $\lambda_{4,5}$  in (3.81b) bestimmt werden. Dieser unbekannte Multiplikator  $\lambda_{4,5}$  wird basierend auf den folgenden beiden Prinzipien bestimmt:

1. Einerseits sollte das Energieminimierungsprinzip bezüglich der gewählten Funktion der freien Helmholtz-Energie in (3.26) in dem neuen Gleichgewichtszustand erfüllt werden,
2. Andererseits soll das Material stabil auf die Änderungen der Zustandsvariablen unter dem thermodynamischen Prozess reagieren<sup>17</sup>. Materialstabilität heißt, dass kleine Änderungen in den kontrollierbaren äußeren Zustandsvariablen nur zu kleinen Änderungen in den übrigen Variablen führen dürfen.

Da diese beiden Forderungen nicht immer gleichzeitig erfüllt werden können, kann man über ein **Minimierungsproblem mit Restriktion** sprechen: Man sucht

<sup>16</sup>Z.B. wegen nicht ausreichend großer Belastung, Entlastung oder bei *Subloops* (Definition siehe in Abschnitt 1.8).

<sup>17</sup>Das stabile Materialverhalten der SMA ist ein experimentell bestätigtes Faktum.

die Stelle des Energieminimums in der Teilmenge des Zustandsraums, in der die Stabilitätsbedingung erfüllt ist.

Im Folgenden wird ein bekannter Gleichgewichtszustand  $\tilde{\Theta}$  (siehe ausführlich in Abschnitt 2.7) als Ausgangszustand beim Zeitpunkt  $\tilde{t}$  angenommen

$$\tilde{\Theta} = \tilde{\Theta}(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}, \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{tr}}, \tilde{\boldsymbol{\beta}}^T, \tilde{T}, \tilde{t}). \quad (3.82)$$

Weiterhin wird angenommen, dass dieser Gleichgewichtszustand durch eine bekannte und ausreichend kleine Änderung der kontrollierbaren Zustandsvariablen  $\boldsymbol{\varepsilon}$  und  $T$  entsprechend der thermomechanischen Belastung zum Zeitpunkt  $t^* > \tilde{t}$ ,  $(t^* - \tilde{t})/\tilde{t} \ll 1$  gestört wird. Da eine Temperaturänderung keine reine Reorientierung induziert, gilt zwangsläufig  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(t^*) - \boldsymbol{\varepsilon}(\tilde{t}) \neq \mathbf{0}$  bei dieser Zustandsänderung. Hierbei werden ausreichend kleine  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$  und  $\Delta T = T(t^*) - T(\tilde{t})$  im Sinne einer Störung, *Perturbation* des stabilen Ausgang-Gleichgewichtszustand verstanden.

Das Ziel ist, den neuen, eventuell erzwungenen Gleichgewichtszustand  $\Theta$  zu finden:

$$\Theta = \Theta(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}, \boldsymbol{\beta}^T, T, t^*). \quad (3.83)$$

Von den Zustandsvariablen sind hier nur die inneren Variablen  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}$  und  $\boldsymbol{\beta}^T$  unbekannt.

**Energieminimierungsprinzip:** Wegen (3.80) gilt  $\boldsymbol{\beta}^T = \tilde{\boldsymbol{\beta}}^T$ . Damit ergibt sich aus dem Energie-Minimum-Prinzip das folgende Minimierungsproblem mit der angenommenen Funktion (3.26) der freien Energie:

$$\min_{\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}} \Phi_{\boldsymbol{\beta}^i = \text{const}, \forall i}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}) \Leftrightarrow \min \left( \frac{1}{2} \varepsilon_{kl}^e D_{klmn} \varepsilon_{mn}^e + \gamma_{kl} \varepsilon_{kl}^e (T - T_0) \right), \quad (3.84)$$

wobei  $\boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}$  gilt. Mit der bekannten Ausgang-Martensitstruktur  $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{tr}}$  und der Evolutionsgleichung (3.81b) gilt für die neue Martensitstruktur  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}$  zum Zeitpunkt  $t^*$ :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{tr}} + \int_{\tilde{t}}^{t^*} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{tr}} dt = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{tr}} + \lambda_{4,5} \mathbf{X}^{\sigma, \sigma T}(t^* - \tilde{t}). \quad (3.85)$$

Hierbei wurde die Approximation der konstanten Verzerrungsgeschwindigkeit  $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{tr}}$  für das hinreichend kleine Zeitintervall  $[\tilde{t}, t^*]$  verwendet. Es ist einfach zu sehen, dass die Funktion (3.84) mit der Approximation (3.85) ein Polynom zweiter Ordnung in  $\lambda_{4,5}$  darstellt, deren größtes Glied auf Grund der positiven Definitheit des Elastizitätstensors  $\mathbf{D}$  mit einem positiven Koeffizienten multipliziert wird. Damit existiert ein eindeutiges Minimum des Polynoms bezüglich  $\lambda_{4,5}$ , das im Folgenden mit  $\lambda_{4,5}^{\text{min}}$  bezeichnet wird.

**Materialstabilität:** Zusätzlich soll die folgende Stabilitätsbedingung in dem neuen Gleichgewichtszustand bei  $t^*$  gelten

$$\Delta \varepsilon_{\text{eq}} \geq \Delta \varepsilon_{\text{eq}}^{\text{tr}}, \quad (3.86)$$

wobei  $\Delta \varepsilon^{\text{tr}} = \varepsilon^{\text{tr}}(t^*) - \varepsilon^{\text{tr}}(\tilde{t})$ ,  $\Delta \varepsilon = \varepsilon(t^*) - \varepsilon(\tilde{t})$  und der Vergleichswert der Verzerrungsänderungen wird nach (3.23) bestimmt. Mit der Evolutionsgleichung (3.81b) und mit (3.86) gilt:

$$\Delta \varepsilon_{\text{eq}} \geq \left( \int_{t^*}^{\tilde{t}} \lambda_{4,5} \mathbf{X}^{\sigma, \sigma T} dt \right)_{\text{eq}} = \lambda_{4,5} (t^* - \tilde{t}) X_{\text{eq}}^{\sigma, \sigma T}. \quad (3.87)$$

wobei die Approximation der unter dem Prozess konstanten  $\dot{\varepsilon}^{\text{tr}}$  verwendet wurde. Damit gilt für den größtmöglichen Multiplikator  $\lambda_{4,5}^{\text{max}}$ :

$$\lambda_{4,5}^{\text{max}} = \frac{\Delta \varepsilon_{\text{eq}}}{X_{\text{eq}}^{\sigma, \sigma T} (t^* - \tilde{t})}. \quad (3.88)$$

In diesem Modell wird der Multiplikator  $\lambda_{4,5}$  in (3.81b) als das Minimum von beiden Multiplikatoren  $\lambda_{4,5}^{\text{min}}$  und  $\lambda_{4,5}^{\text{max}}$  definiert:

$$\lambda_{4,5} = \min \{ \lambda_{4,5}^{\text{min}}, \lambda_{4,5}^{\text{max}} \}. \quad (3.89)$$

Damit ist die Stabilitätsbedingung während der Reorientierung immer erfüllt und stets der Gleichgewichtszustand mit der *möglichst* kleinsten freien Energie gewählt. Zusammenfassend gelten mit (3.66) und (3.81) die folgende Evolutionsgleichungen unter beliebiger mechanischen Belastung:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} = (\lambda_1 + \lambda_2) X_{ij}^{\sigma} + \lambda_3 X_{ij}^{\sigma T} + \lambda_{4,5} X_{ij}^{\sigma, \sigma T}, \quad (3.90a)$$

$$\dot{\beta}^T = (\gamma_3 + \gamma_4 + \gamma_5) X^T, \quad (3.90b)$$

wobei  $\lambda_i \lambda_j = 0 \forall i \neq j$ ,  $i, j = 1, \dots, 5$ ,  $\gamma_m \gamma_n = 0$ ,  $\forall m \neq n$ ,  $m, n = 3, 4, 5$  und  $\gamma_n \lambda_{4,5} = 0 \forall n$  sind.

**Anmerkung:** Da die freie Helmholtz-Energie in (3.26a) eine stetige Funktion der Zustandsvariablen ist, befindet sich das neue Energieminimum in der unmittelbaren Nähe des letzten Gleichgewichtszustandes (wo die freie Energie ihr Minimum bei bestimmten Zustandsvariablen angenommen hatte), wobei die Änderung des Zustandes durch eine kleine Änderung der Zustandsvariablen hervorgerufen wurde<sup>18</sup>. In dieser Arbeit ist es das Ziel, ein Modell zu entwickeln, wobei der neue Gleichgewichtszustand auch über Nicht-Gleichgewichtszustände berechnet werden kann (siehe Abb. 2.1) und die unmittelbare Nähe des neuen Gleichgewichtszustandes nicht angenommen werden kann. Deswegen stellt die Annahme der Materialstabilität und die Folgebedingung (3.86) eine wichtige Bedingung bei dieser konstitutiven Beschreibung der SMA dar.

<sup>18</sup>Im Fall von quasistatischer Belastung.

### 3.2.9 Zeitabhängige Formulierung der Evolutionsgleichungen

Im Abschnitt 3.2.6 - 3.2.8 wurden die Evolutionsgleichungen des Modells in einer zeitunabhängigen Formulierung diskutiert und als (3.90) gegeben.

In diesem Kapitel wird gezeigt, wie die Evolutionsgleichungen des Modells umformuliert werden können, wenn die SMA zeitabhängiges Materialverhalten aufweist. Für die Formulierung der Evolutionsgleichungen für den Fall des zeitabhängigen Materialverhaltens wird die Tatsache zu Grunde gelegt, dass der Betrag der thermodynamischen Kräfte je größer ist, desto weiter der thermodynamische Zustand von der Umwandlungsgrenze entfernt ist<sup>19</sup>. Es wird weiterhin angenommen, dass die MPhU-Geschwindigkeit desto größer ist, je höher die thermodynamischen Kräfte sind, die die MPhU vorantreiben (siehe [22]).

Die Evolutionsgleichungen in (3.66b) können damit nach dem Beispiel von viskoplastischen Evolutionsgleichungen [22] umformuliert werden zu:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} = X_{ij}^{\sigma} + X_{ij}^{\sigma T} + X_{ij}^{\sigma, \sigma T}, \quad (3.91a)$$

$$\dot{\beta}^T = X^T, \quad (3.91b)$$

Hierbei verstehen sich die Geschwindigkeiten der zeitunabhängigen Formulierung in (3.90) als Grenzwerte, die bei maximaler MPhU-Geschwindigkeit erreicht werden können.

---

<sup>19</sup>Es liegt daran, dass die thermodynamischen Kräfte lineare Funktionen der Zustandsvariablen sind und ihre Null-Werte entlang der Null-Kraft-Linien annehmen, wobei die Null-Kraft-Linien zwischen den Umwandlungsgrenzen liegen. Damit folgt, dass der Betrag der aktiven thermodynamischen Kraft mit zunehmender Entfernung von der aktiven Umwandlungsgrenze wächst.

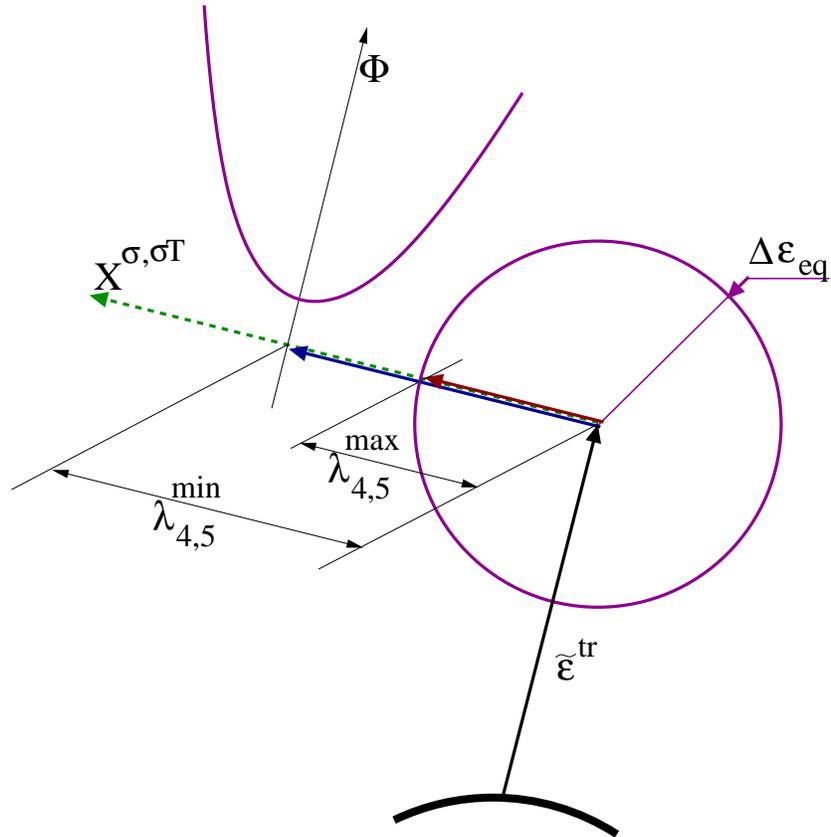


Abbildung 3.7: Suche des neuen Gleichgewichtszustands bei reiner Reorientierung (schematische Darstellung). Hierbei ist die aktuelle TID gegeben und durch die thermomechanische Belastung auch die aktive thermodynamische Kraft bekannt. Der skalare Multiplikator  $\lambda_{4,5}$  soll bestimmt werden. Hierzu kann die freie Helmholtz-Energie entlang der thermodynamischen Kraft für  $\forall \lambda \geq 0$  bestimmt werden. Damit ergibt sich entlang der Kraft ein skalares Minimierungsproblem, deren Lösung  $\lambda^{\min}$  ist. Weiterhin lässt sich die maximale Änderung der TID durch eine Kugel im Raum der TID darstellen und bestimmt einen Wert  $\lambda_{4,5}^{\max} \geq 0$ , womit die Änderung der TID gerade die Kugel erreicht. Der aktuelle Multiplikator  $\lambda_{4,5}^{\max}$  ergibt sich aus (3.89).

# Kapitel 4

## Numerische Ergebnisse

Ziel dieses Kapitels ist es, die numerische Umsetzung des in Abschnitt 3.2 dargestellten Modells und die Plausibilität der erzielten Ergebnisse zu zeigen. Hierbei werden Ergebnisse, die mit Verwendung des Computer-Algebra-Systems (CAS) MAPLE<sup>®</sup> [52] und des FEM-Programm ANSYS<sup>®</sup> [63] berechnet wurden, präsentiert. Hierbei wurden im ersten Fall eine reine Zeitdiskretisierung und im zweiten Fall eine Raum- und Zeitdiskretisierung mittels FEM [7, 114] vorgenommen.

MAPLE<sup>®</sup> wurde während der Entwicklung des Modells verwendet, um auf die Schnelle einen numerischen Test des Modells durchführen zu können. Hierbei wurde ausgenutzt, dass MAPLE<sup>®</sup> eine sehr kompakte und effektive Programmierung ermöglicht. Das Ziel war, eine numerische Umsetzung des Modells zu entwickeln, die sich in ANSYS<sup>®</sup> einbauen lässt. Deswegen wird das in Abschnitt 4.1 dargestellte Verfahren auf die Gegebenheiten der ANSYS<sup>®</sup>-Schnittstelle<sup>1</sup> angepasst und in den beiden Programmen verwendet. In Abschnitte 4.2 – 4.4 werden Benchmark-Tests mit MAPLE<sup>®</sup> berechnet, um die kritischen Probleme der Modellierung zu testen und die neuen Eigenschaften des Modells vorstellen zu können. Weiterhin wird dabei gezeigt, wie die Modellparameter durch die vorhandenen, evtl. nicht vollständigen Informationen bestimmt und auf die Kriterien der Berechnung angepasst werden können.

Im Abschnitt 4.5 werden mit dem FEM-Programm ANSYS<sup>®</sup> komplexere mehrdimensionale Bauteile berechnet und die Ergebnisse für die beiden betrachteten SME, den Einwegeffekt und die Pseudoelastizität, dargestellt.

---

<sup>1</sup>Da als Ziel eine FEM Berechnung mit Hilfe von ANSYS<sup>®</sup> durchzuführen ist, ist die numerische Umsetzung auf die Gegebenheiten von ANSYS<sup>®</sup> UPF (User Programmable Features) angepasst. Dieser spezielle Teil von ANSYS<sup>®</sup> bietet die Möglichkeit, neu entwickelte Materialmodelle einzubauen. Das Kriech-Modell mit Quellcode *usercr.F* bietet in ANSYS<sup>®</sup> einen möglichen Ausgangspunkt für die Implementierung des Modells, wobei ein explizites Euler-Schema (Euler vorwärts) verwendet wird.

## 4.1 Diskretisierungsverfahren

In diesem Abschnitt wird die Diskretisierung der konstitutiven Gleichungen des neuen Modells erläutert. Die Gleichungen sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst.

<i>Innere Variablen:</i>	
$\boldsymbol{\varepsilon}^{tr}$ und $\beta^T$	
$\beta^\sigma = \frac{1}{k} \varepsilon_{eq}^{tr}$	(3.23)
$\beta^\sigma + \beta^T + \beta^A = 1$	(3.24)
<i>Konstitutivgleichungen:</i>	
$\sigma_{ij} = D_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^T - \varepsilon_{kl}^{tr}),$	(3.29)
$D_{ijkl} = \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \lambda\delta_{ij}\delta_{kl}$	(3.26c)
<i>Thermodynamische Kräfte:</i>	
$X_{ij}^\sigma \in \tilde{\sigma}_{ij} - f_\sigma(T, \beta^\sigma, \beta^T) \varepsilon_{ij}^{tr}$	(3.37a)
$X^T \in -f_T(T, \beta^\sigma, \beta^T)$	(3.37b)
$X_{ij}^{\sigma T} \in \tilde{\sigma}_{ij} - f_{\sigma T}(T, \beta^\sigma, \beta^T) \varepsilon_{ij}^{tr}$	(3.41)
<i>Wärmeleitgleichung:</i>	
$\dot{u} + q_{i,i} = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} + F$	(3.43c)
<i>Vergleichsspannung für Berücksichtigung der Anisotropy:</i>	
$\sigma_{eq} = J_2(\boldsymbol{\sigma}) \left(1 + \theta \frac{J_3(\boldsymbol{\sigma})}{J_2(\boldsymbol{\sigma})^3}\right)^\zeta + \omega J_1(\boldsymbol{\sigma})$	(3.11)
<i>Evolutionsgleichungen von TID:</i>	
$\dot{\varepsilon}_{ij}^{tr} = (\lambda_1 + \lambda_2) X_{ij}^\sigma + \lambda_3 X_{ij}^{\sigma T} + \lambda_{4,5} X_{ij}^{\sigma, \sigma T}$	(3.90a)
<i>Evolutionsgleichung des thermisch induzierten Martensits:</i>	
$\dot{\beta}^T = (\gamma_3 + \gamma_4 + \gamma_5) X^T$	(3.90b)

Tabelle 4.1: Zusammenfassung der Gleichungen des neuen Modells.

Die Aufgabe der Festkörpermechanik besteht darin, die Spannungs- und Verzerrungsverteilungen sowie die Verschiebungen in beliebigen Punkten des Körpers bei vorgegebenen Anfangs- und Randbedingungen zu bestimmen. Dabei müssen folgende Bedingungen zu jedem Zeitpunkt  $t$  erfüllt werden:

- Gleichgewichtsbedingungen für die Kräfte
- Kompatibilitätsbedingungen von Verschiebungen und Verzerrungen
- Stoffgesetz

Die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems zur Berechnung eines neuen Zeitschrittes geschieht iterativ, wobei die drei aufeinander folgenden Schritte wiederholt werden:

1. Kompatibilität der Verschiebungen,
2. Bestimmung der inneren Kräfte durch das Stoffgesetz,
3. Minimalprinzip: Suche das Gleichgewicht zwischen inneren und äußeren Kräften,

Die Lösung des Schrittes 2. erfordert wiederum ein Iterationsverfahren, so dass zwei ineinander geschachtelte Iterationen notwendig sind.

Nur die innere Iteration für Schritt 2 wird in diesem Abschnitt ausführlich diskutiert, wobei der lokale Spannungszustand durch die Gleichungen in Tab. 4.1 ermittelt wird (Schritt 2). Der erste und dritte Schritt werden von ANSYS® erledigt und bilden daher keinen Gegenstand dieses Abschnitts (siehe ausführlich [7, 67, 114]).

Im zweiten Schritt wird das explizite Euler-Verfahren für die Zeitintegration der geschwindigkeitsunabhängigen (*rate independent*) neuen konstitutiven Gleichungen verwendet. Da ein nichtlineares Gleichungssystem in diesem Schritt zu lösen ist, wird ein Prädiktor-Korrektor-Verfahren verwendet.

Bei der Formulierung des numerischen Verfahrens werden mit dem Index  $n$  die Variablen im aktuellen äusseren Iterationsschritt bezeichnet. In jedem Schritt  $n$  ist der innere Spannungszustand zu ermitteln, wobei der totale Verzerrungstensor  ${}^n\boldsymbol{\varepsilon}$  und die Temperatur  ${}^nT$  gegeben sind. Dabei handelt es um ein iteratives Verfahren, deshalb werden die Variablen des aktuellen Iterationsschrittes mit  $i$  bezeichnet, wobei die Iterationsschritte  $i$  als bekannt und  $i + 1$  als zu berechnen angenommen werden. Weiterhin seien die Werte für  $i = 0$  gleich mit den bekannten Werten des Iterationsschrittes  $n - 1$ . (Der Index des Zeitschrittes  $m$  wird im Folgenden weggelassen, da alle Variablen des Iterationsschrittes zum gleichen Zeitschritt gehören.) Als Ergebnis von beiden Iterationen ergeben sich die Werte der Zustandsvariablen zum Zeitpunkt  $m + 1$ .

**Gegeben sind** die Zustandsvariablen vom letzten inneren Iterationsschritt  $i$ :

$${}_iy = \left\{ {}_i\boldsymbol{\varepsilon}^e, {}_i\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}, {}_i\beta^T \right\}. \quad (4.1a)$$

Weiterhin seien aus Schritt 1 (äußere Iteration) der totale Verzerrungstensor  ${}^n\boldsymbol{\varepsilon}$  und die Temperatur  ${}^nT$  gegeben.

**Gesucht sind** die neuen Werte der Zustandsvariablen

$${}_{i+1}\mathbf{y} = \left\{ {}_{i+1}\boldsymbol{\varepsilon}^e, {}_{i+1}\boldsymbol{\varepsilon}^{tr}, {}_{i+1}\beta^T \right\}, \quad (4.2a)$$

wobei gelten sollen

$${}^n\boldsymbol{\varepsilon} = {}_{i+1}\boldsymbol{\varepsilon}^e + {}_{i+1}\boldsymbol{\varepsilon}^{tr}, \quad (4.2b)$$

$$1 \geq {}_{i+1}\beta^T + {}_{i+1}\beta^\sigma. \quad (4.2c)$$

Das numerische Verfahren kann in die folgenden Schritte gegliedert werden:

**Schritt 1 (Elastischer Prädiktor):** Berechnung die Spannung  ${}_{i+1}\boldsymbol{\sigma}$  und die elastische Verzerrung  ${}_{i+1}\boldsymbol{\varepsilon}^e$  aus:

$${}_{i+1}\varepsilon_{ij}^e = {}^n\varepsilon_{ij} - {}_i\varepsilon_{ij}^{tr}, \quad (4.3a)$$

$${}_{i+1}\sigma_{ij} = D_{ijkl} {}_{i+1}\varepsilon_{kl}^e. \quad (4.3b)$$

Dieser Schritt entspricht dem *elastischen Prädiktor*, wobei ein rein elastisches Materialverhalten angenommen wird, um eine erste Näherung der Spannungsänderung im Zeitschritt zu erhalten.

**Schritt 2 (Umwandlungsgrenzen):** Berechnung der Phasenumwandlungsgrenzen nach (3.63), (3.64) und (3.65) mit den aktuellen Werten der Zustandsvariablen:

$$g_k^* = \sigma_k({}^nT) + \Delta\sigma_k({}^nT) f_k({}_i\beta^\sigma), \quad k = 1, 2, 3, \quad (4.4a)$$

$$g_4^* = M_{s0} - \Delta T_4({}_{i+1}\sigma_{eq}) f_4({}_i\beta^T), \quad (4.4b)$$

$$g_5^* = A_{s0} + \Delta T_5({}_{i+1}\sigma_{eq}) f_5({}_i\beta^T), \quad (4.4c)$$

wobei  $g_k^*$ ,  $k = 1, 2, 3$  Grenzspannungswerte und  $g_4^*$ ,  $g_5^*$  Grenztemperaturen abhängig von der Phasenverteilung sind.

**Schritt 3 (Bestimmung der Art der MPhU):** Berechnung der Position des Punktes B oder D in Abb. 4.1 ( ${}^nT$ ,  ${}_{i+1}\sigma_{eq}$ ) im Phasendiagramm. Weiterhin ist die Position des letzten berechneten Schrittes ( ${}^nT$ ,  ${}_i\sigma_{eq}$ ) bekannt (siehe Punkt A in Abb. 4.1), wobei  ${}_i\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} {}_i\boldsymbol{\varepsilon}^e$ . Der Vektor  $\overrightarrow{AB}$  oder  $\overrightarrow{AD}$  gibt die aktuelle Richtung der Zustandsänderung an. Der Punkt B oder D ist der sogenannte *elastische Prädiktor*, wobei zuerst zwischen Iterationsschritt  $i$  (Punkt A) und  $i + 1$  ein elastisches Materialverhalten angenommen wurde.

**Schritt 4 (Keine MPhU):** Wenn keine Phasenumwandlungsgrenze überschritten wurde und  $\beta^\sigma = 0$  ist<sup>2</sup>, ist die Berechnung in diesem Iterationsschritt abge-

<sup>2</sup>Es ist kein orientierter Martensit vorhanden.

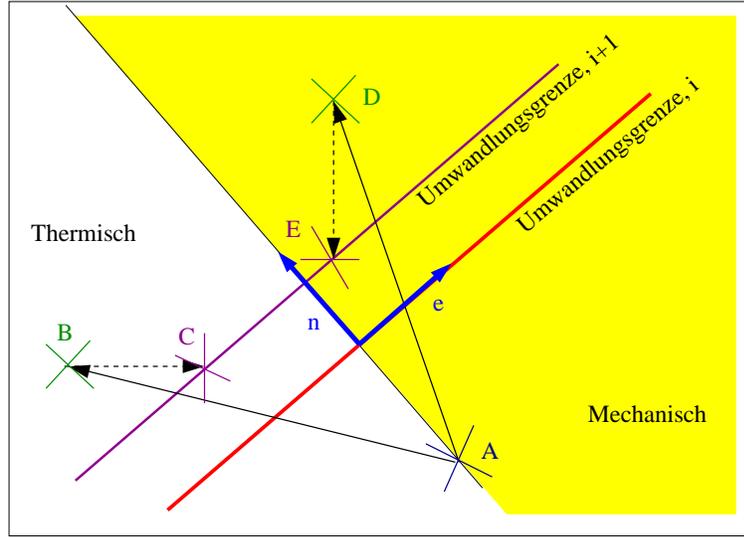


Abbildung 4.1: Berechnung des neuen thermodynamischen Zustandes während der Phasenumwandlung.

geschlossen und die neuen Iterationswerte sind:

$${}_{i+1}\varepsilon_{ij}^{\text{tr}} := {}_i\varepsilon_{ij}^{\text{tr}}, \quad (4.6a)$$

$${}_{i+1}\beta^\sigma := {}_i\beta^\sigma, \quad (4.6b)$$

$${}_{i+1}\beta^T := {}_i\beta^T, \quad (4.6c)$$

$${}_{i+1}\varepsilon_{ij}^e = {}^n\varepsilon_{ij} - {}_i\varepsilon_{ij}^{\text{tr}}, \quad (4.6d)$$

$${}_{i+1}\sigma_{ij} = D_{ijkl} {}_{i+1}\varepsilon_{kl}^e. \quad (4.6e)$$

In allen anderen Fällen folgt **Schritt 5**.

**Schritt 5: (Evolutionsgleichungen):** Berechnung der Evolution von inneren Variablen gemäß Gleichungen (3.90):

$${}_{i+1}\Delta\varepsilon_{jk}^{\text{tr}} = (\lambda_1 + \lambda_2) {}_{i+1}X_{jk}^\sigma + \lambda_3 {}_{i+1}X_{jk}^{\sigma T} + \lambda_{4,5} {}_{i+1}X_{jk}^{\sigma,\sigma T}, \quad (4.7a)$$

$${}_{i+1}\Delta\beta^T = (\gamma_3 + \gamma_4 + \gamma_5) {}_{i+1}X^T, \quad (4.7b)$$

wobei die thermodynamischen Kräfte in Iterationsschritt  $i + 1$  durch die Gleichungen (3.41), (3.37b) und (3.37a) und mit den aktuellen Werten der Zustandsvariablen  ${}_{i+1}\boldsymbol{\sigma}$ ,  ${}_i\varepsilon^{\text{tr}}$ ,  ${}_i\beta^\sigma$ ,  ${}_i\beta^T$ ,  ${}^nT$  bestimmt werden. Hierbei ist (4.7a) nur von Interesse. Die Lösung von (4.7b) ist trivial. Durch **Schritt 3** wird bestimmt, welche MPhU und welche tensorielle thermodynamische Kraft  ${}_{i+1}\mathbf{X}$  aktiv ist. Dadurch wird auch der Index  $m$  bestimmt, für den  $\lambda_m \neq 0$  und  $\lambda_n = 0$ ,  $\forall n \neq m$  in (4.7a) gilt. Das Ziel ist nun, diesen positiven Multiplikator  $\lambda_m$  zu bestimmen.

Mit Hilfe der Richtung von  $\overrightarrow{AB}$  bzw.  $\overrightarrow{AD}$  und durch den Richtungsvektor der

Umwandlungsgrenze kann die Art Zustandsänderung durch das folgende Skalarprodukt bestimmt werden:

$$m = \Delta_i e_i, \quad (4.7c)$$

wobei  $\Delta = \overrightarrow{AB}$  oder  $\Delta = \overrightarrow{AD}$  und  $\mathbf{e}$  der Richtungsvektor der Phasenumwandlungsgrenze ist. Hierbei können zwei Fälle auftreten:

- Die Phasenumwandlung wird durch eine Spannungsänderung (*mechanisch*,  $m \geq 0$ ) oder
- die Phasenumwandlung wird durch eine Temperaturänderung (*thermisch*,  $m < 0$ ) hervorgerufen.

Die Einordnung bei nicht eindeutigen Fällen erfolgt wie in Abb. 4.1, entsprechend dem gelben und weissen Bereich.

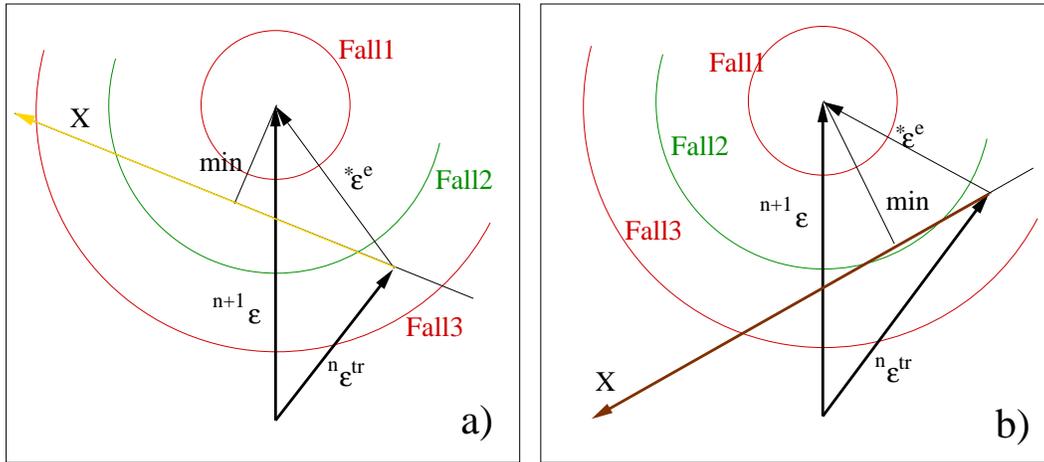


Abbildung 4.2: Zur Berechnung der positiven Multiplikatoren in den Evolutionsgleichungen im Fall 1: a) Umwandlung, b) Rückumwandlung.

**Fall 1: Mechanische Belastungsänderung.** Im Fall der spannungsinduzierten MPhU wird im **Schritt 2** ein kritischer Spannungswert  $\sigma_c$  bestimmt (sowohl bei Umwandlung als auch bei Rückumwandlung). Weiterhin kann ein skalarer Wert  $x_{\min}$  bestimmt werden<sup>3</sup>, so dass  $\forall x \in \mathbb{R}$  mit

$${}_{i+1}\sigma_{ij}(x) = D_{ijkl}({}^n\varepsilon_{kl} - {}_i\varepsilon_{kl}^{\text{tr}} - x {}_{i+1}X_{kl}), \quad (4.7d)$$

gilt

$$\sigma_{\text{eq}}(x_{\min}) = \sigma_{\min} \leq \sigma_{\text{eq}}(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (4.7e)$$

Damit sind die folgenden drei Fälle möglich (siehe noch Abb. 4.2 a und b):

<sup>3</sup>Das Problem führt auf ein quadratisches Polynom in  $x$ .

1.  $\sigma_c < \sigma_{\min}$ : Es existiert keine Lösung und  $\lambda_m = 0$ ,
2.  $\sigma_{\min} < \sigma_c < \sigma_{eq}$ : Es existiert eine Lösung und der Multiplikator  $\lambda_m$  kann bestimmt werden.
3.  $\sigma_{eq} < \sigma_c$ : Es existiert eine Lösung, aber die Änderung der TID wäre zu groß. Es wird  $\lambda_m = 0$  gesetzt.

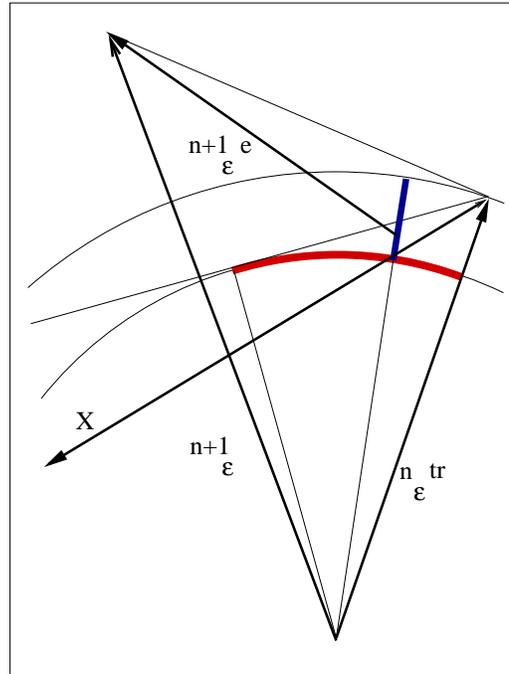


Abbildung 4.3: Berechnung der positiven Multiplikatoren  $\lambda_m$  in den Evolutionsgleichungen im Fall 2.

**Fall 2: Thermische Belastungsänderung.** Im Fall einer thermisch induzierten MPhU<sup>4</sup> wird angenommen, dass der Spannungswert konstant ist. Weiterhin ist durch eine Temperaturerhöhung eine neue Phasenverteilung durch das Phasendiagramm gegeben, siehe **Schritt 2**. Im Zustandsraum muss der Punkt ermittelt werden, der gleichzeitig der neuen Phasenverteilung ( ${}_{i+1}\beta^\sigma({}^nT)$ ,  ${}_{i+1}\beta^T({}^nT)$ ) und dem alten Spannungsniveau  ${}_i\sigma_{eq}$  entspricht. Dies erfolgt in zwei Schritten (siehe Abb. 4.3):

1. Ermittlung des Punktes entlang der aktiven thermodynamischen Kraft  $\mathbf{X}$ :

$${}_{i+1}^*\varepsilon_{ij}^{\text{tr}} = {}_i\varepsilon_{ij}^{\text{tr}} + x \quad {}_{i+1}X_{ij}, \quad (4.7f)$$

$${}_{i+1}^*\beta^\sigma({}^nT) = \frac{1}{k} \sqrt{{}_{i+1}\varepsilon_{ij}^{\text{tr}}(x) \quad {}_{i+1}\varepsilon_{ij}^{\text{tr}}(x)}. \quad (4.7g)$$

<sup>4</sup>Es kann nur eine Rückumwandlung auftreten. Siehe Diskussion zu Gl. (3.39) und Kap. 1.

Das Problem führt auf ein quadratisches Polynom in  $x$ .

2. In diesem thermodynamischen Zustand  $({}^n \boldsymbol{\varepsilon}, {}^* \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}, {}^n T, \beta^T)$  ist die zweite Forderung eines konstanten Spannungsniveaus  ${}_i \sigma_{eq} = {}_{i+1} \sigma_{eq}$  gewöhnlich nicht erfüllt. In diesem Schritt wird eine Änderung ausschließlich im Betrag von  ${}_{i+1}^* \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}$  vorgenommen und ein skalarer Wert  $x_2$  bestimmt, so dass

$${}_{i+1} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} = x_2 \cdot {}_{i+1}^* \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}} \quad (4.7\text{h})$$

$${}_{i+1} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^e = {}^n \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} - {}_{i+1} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{\text{tr}}, \quad (4.7\text{i})$$

$${}_{i+1} \sigma_{ij} = D_{ijkl} \cdot {}_{i+1} \boldsymbol{\varepsilon}_{kl}^e, \quad (4.7\text{j})$$

$${}_{i+1} \sigma_{eq} = {}_i \sigma_{eq}. \quad (4.7\text{k})$$

Die Gleichung (4.7k) führt auf ein quadratisches Polynom in  $x_2$ , wobei der gesuchte Multiplikator  $x_2$  durch die kleinste positive Lösung der Gleichungen (4.7k) definiert wird.

Durch die vorangehenden 5 Schritte sind alle Zustandsvariablen

$${}_{i+1} y = \left\{ {}_{i+1} \boldsymbol{\varepsilon}^e, {}_{i+1} \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}}, {}_{i+1} \beta^T \right\} \quad (4.8)$$

des neuen Iterationsschritt ermittelt.

**Anmerkung:** Das hier dargestellte numerische Verfahren ist neu und basiert auf der Annahme, dass die thermodynamischen Kräfte die Richtung der Änderung der inneren Variablen angeben. Um diese Annahme zu erfüllen, müssen die Bedingungen im Abschnitt 3.2.5 erfüllt werden. Weiterhin wird bei diesem numerischen Verfahren die in Abschnitt 3.2.8 verwendete geometrische Betrachtung benutzt.

### 4.1.1 Iteration

Da endliche Zeitschritte bei der Berechnung verwendet werden müssen, ist eine Iteration erforderlich, um das Gleichungssystem ausreichend genau lösen zu können. Die Iteration wird so lange fortgeführt, bis die folgende Norm der Abweichung der TID zwischen zwei Iterationen ausreichend klein geworden ist:

$$\| {}_i \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}} - {}_{i-1} \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tr}} \| \leq \delta, \quad (4.9)$$

wobei  $\delta \ll 1$  zu wählen ist.

## 4.2 Temperaturabhängigkeit von SME

SMA weisen ein temperaturabhängige Materialverhalten auf, wobei bei unterschiedlichen Temperaturen qualitativ unterschiedliche Phänomene zu beobach-

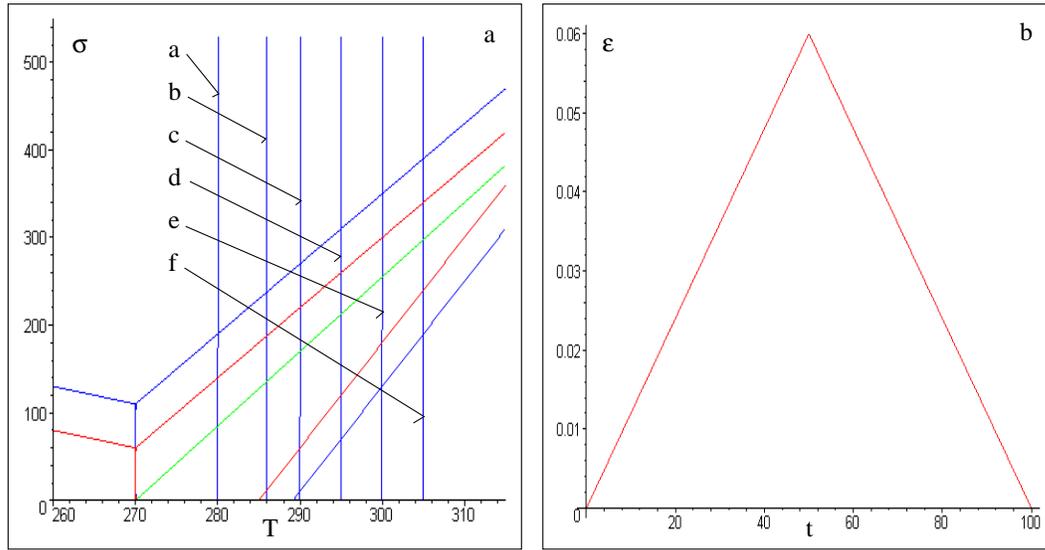


Abbildung 4.4: a) Umwandlungsdiagramm mit den Belastungspfaden. Die Bezeichnung der Phasen bezieht sich auf Abb. 4.5, b) Der zeitliche Ablauf der Gesamtdehnung.

ten sind (siehe Abschnitt 1.8). Bei der Modellierung müssen diese Effekte in ihrer Temperaturabhängigkeit erfasst werden<sup>5</sup>. Modelltechnisch ist die Temperaturabhängigkeit von SME im Umwandlungsdiagramm (siehe Abb. 3.2, Abb. 3.5 und Abb. 4.4a) beschrieben. In diesem Abschnitt sollen eine Reihe von numerischen Tests zeigen, wie bei steigender Temperatur der Einwegeffekt in pseudoelastisches Verhalten übergeht. Eine einachsige Belastung einer SMA wird bei unterschiedlichen Temperaturen (280, 286, 290, 295, 300 und 305 K) aufgebracht, wobei die Materialdaten in Tab. 4.2 zusammengefasst sind. Die Randbedingungen, d.h. die Gesamtdehnung  $\epsilon = \epsilon(t)$ , und das durch die Materialdaten definierte Umwandlungsdiagramm sind in Abb. 4.4 dargestellt. Abb. 4.5 lässt gut erkennen, wie der Einwegeffekt (Abb. 4.5a) über eine gemischte Form von beiden Effekten (Abb. 4.5b) bei höheren Temperaturen in reine Pseudoelastizität übergeht. Bei den Berechnungen ist die maximale TID  $k$  temperaturabhängig definiert und damit kann die schrumpfende Hysterese beschrieben werden<sup>6</sup>. Die Funktionen  $f_i = f_i(\beta^\sigma)$  in der Definition der Umwandlungsgrenzen in (3.63) sind einfachheitshalber in diesen Berechnungen als folgendes quadratisches Polynom

<sup>5</sup>In der Literatur sind viele Modelle veröffentlicht, die nur für einen bestimmten begrenzten Temperaturbereich gelten, und folglich nur begrenzt die SME wiedergeben.

<sup>6</sup>Durch  $k$  ist die *Länge* der Hysterese definiert. Die *Höhe* hängt von dem Abstand der Hin- und Rückumwandlungsgrenze ab und im Umwandlungsdiagramm beschrieben.

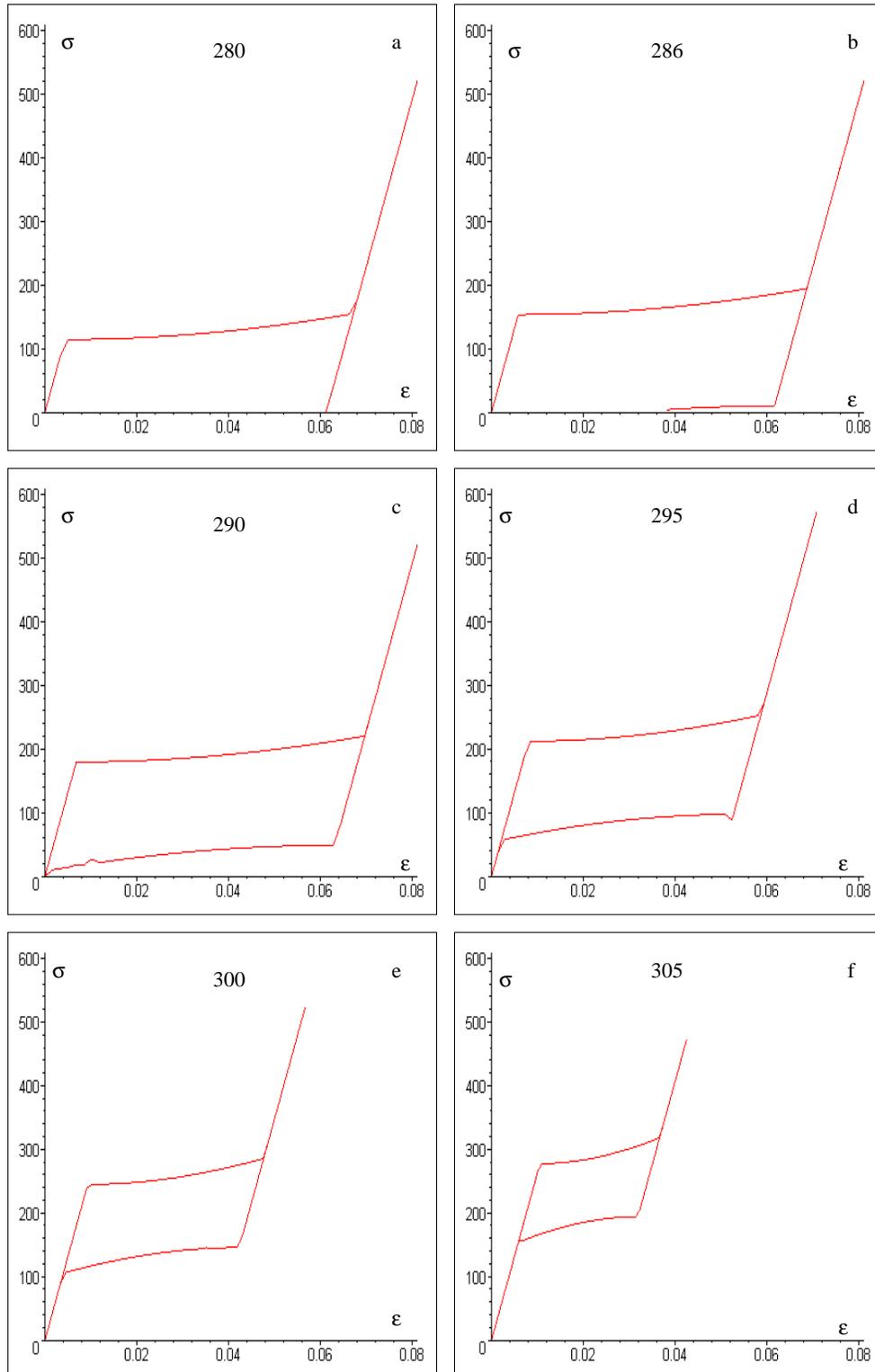


Abbildung 4.5: Änderung der SME in Abhängigkeit von der Temperatur, a)-f) Ergebnisse der Simulation dargestellt im Spannungs-Dehnungs-Diagramm bei einachsiger Belastung und unterschiedlichen Temperaturen. Die maximale TID  $k$  ist als a)-c) 5%, d) 4%, e) 3% und f) 2% gegeben.

Materialparameter	Wert	Einheit
$A_{s0}$	285	K
$M_{s0}$	270	K
$c_x$	-2	MPa/K
$c_a$	12	MPa/K
$c_m$	8	MPa/K
$c_k$	8.5	MPa/K
$\sigma_0$	60	MPa
$\Delta\sigma_{1,2,3}$	50	MPa
$k$	5...2	%
$E$	70000	MPa
$\nu$	0.3	—

Tabelle 4.2: Verwendete Materialdaten im Abschnitt 4.2.

angenommen:

$$f_1 = \Delta\sigma_1 (\beta^\sigma)^2, \quad (4.10a)$$

$$f_2 = \Delta\sigma_2 (\beta^\sigma)^2. \quad (4.10b)$$

### 4.3 Fitting von Modellparametern an Messergebnisse

Nach dem im Abschnitt 4.2 durch ein Beispiel die Bedeutung des Umwandlungsdiagramms gezeigt wurde, soll nun in diesem Abschnitt an einem Beispiel gezeigt werden, wie die Modellparameter für das Umwandlungsdiagramm im Fall von nicht vollständigen Informationen aus konkreten Messergebnissen bestimmt werden können. Hierbei können Materialparameter nur teilweise ermittelt werden, die mit dem beschreibenden Effekt (worüber Messdaten vorhanden sind) zusammenhängen. Alle andere Parameter müssen so gewählt werden, dass sie die Simulation nicht verfälschen.

Die Daten stammen von einer NiTi-Legierung aus [6]<sup>7</sup>. Die Messkurve einer Belastungs-Entlastungs-Kurve ist als  $\varepsilon - \sigma$ -Diagramm bekannt (siehe Messpunkte in Abb. 4.6a). Mit diesen Daten können die folgenden kritischen Spannungswerte

<sup>7</sup>Zusammensetzung: Ni: 55.5%, Ti: 44.4%, O: 0.026%, C: 0.053%, H: 0.000016%.

in (3.63a) und in (3.63b) direkt bestimmt werden:

$$\sigma_1(T = 273\text{K}) = 520 \text{ MPa} , \quad (4.11a)$$

$$\sigma_2(T = 273\text{K}) = 475 \text{ MPa} , \quad (4.11b)$$

$$\Delta\sigma_1 = 70 \text{ MPa} , \quad (4.11c)$$

$$\Delta\sigma_2 = 385 \text{ MPa} . \quad (4.11d)$$

Weiterhin sollen die Formfunktionen  $f_1$  und  $f_2$  für Hin- und Rückumwandlung in (3.63a) und in (3.63b) ermittelt werden. Die Messpunkte  $[\varepsilon_i, \sigma_i]$ ,  $i = 1 \dots N$  seien die zusammengehörenden Kurvenpunkte entlang der Umwandlung bzw. entlang der Rückumwandlung. Dann gilt:

$$\varepsilon_i^{tr} = \varepsilon_i - \frac{1}{E} \sigma_i , \quad (4.12)$$

$$\beta_i^\sigma = \frac{1}{k} \varepsilon_i^{tr} , \quad (4.13)$$

$$f_{1i} = \frac{\sigma_i - \sigma_1(T = 273\text{K})}{\Delta\sigma_1} , \quad f_{2i} = -\frac{\sigma_i - \sigma_2(T = 273\text{K})}{\Delta\sigma_2} . \quad (4.14)$$

Die Punkte  $[\beta_i^\sigma, f_i]$  geben die Messpunkte zur Bestimmung für  $f_1$  bzw.  $f_2$  an. In der Simulation wurden  $f_1$  und  $f_2$  durch ein Polynom vierter Ordnung interpoliert (siehe Abb. 4.6b und d)<sup>8</sup>. Nach der Wahl der kritischen Temperaturen  $A_{s0}$  und  $M_{s0}$  und der Spannungswert  $\sigma_0$  (siehe Tab. 4.3) können  $c_a$ ,  $c_m$  und  $c_k$  bestimmt werden:

$$c_a = \frac{\sigma_2(T = 273\text{K})}{273 - A_{s0}} , \quad (4.15)$$

$$c_m = \frac{\sigma_2(T = 273\text{K}) - \sigma_0}{273 - M_{s0}} , \quad (4.16)$$

$$c_k = \frac{\sigma_2(T = 273\text{K}) * 0.95}{273 - A_{s0}} . \quad (4.17)$$

Damit sind alle Modellparameter bestimmt und es kann das Umwandlungsdiagramm berechnet werden (siehe Abb. Abb.4.6c). Das Ergebnis der Simulation in Abb.4.6a zeigt, dass das Modell gut an Messergebnisse angepasst werden kann.

**Anmerkung:** Obwohl das Modell alle SME und deren Übergänge beschreiben kann, muss im Fall nicht vorhandener Materialdaten die Angabe auf die vorhandene Messdaten reduziert werden. In diesem Beispiel waren Messdaten nur für eine bestimmte Temperatur vorhanden. In diesem Fall von nicht vollständigen Materialdaten liefern die Berechnungen nur qualitativ, aber nicht quantitativ gute Ergebnisse für von Messdaten nicht beschriebenen Belastungspfaden<sup>9</sup>.

<sup>8</sup>Für praktische Anwendungen ist es empfohlen, mit einem Polynom erstmal  $-(f_2 + 1)$  zu interpolieren, um ausnutzen zu können, dass diese Funktion in Origo Null ist, genau wie bei  $f_1$ .

<sup>9</sup>In diesem Fall können z.B. der Einwegeffekt oder thermische MPhU auf Grund nicht vorhandener Information nicht quantitativ richtig beschrieben werden.

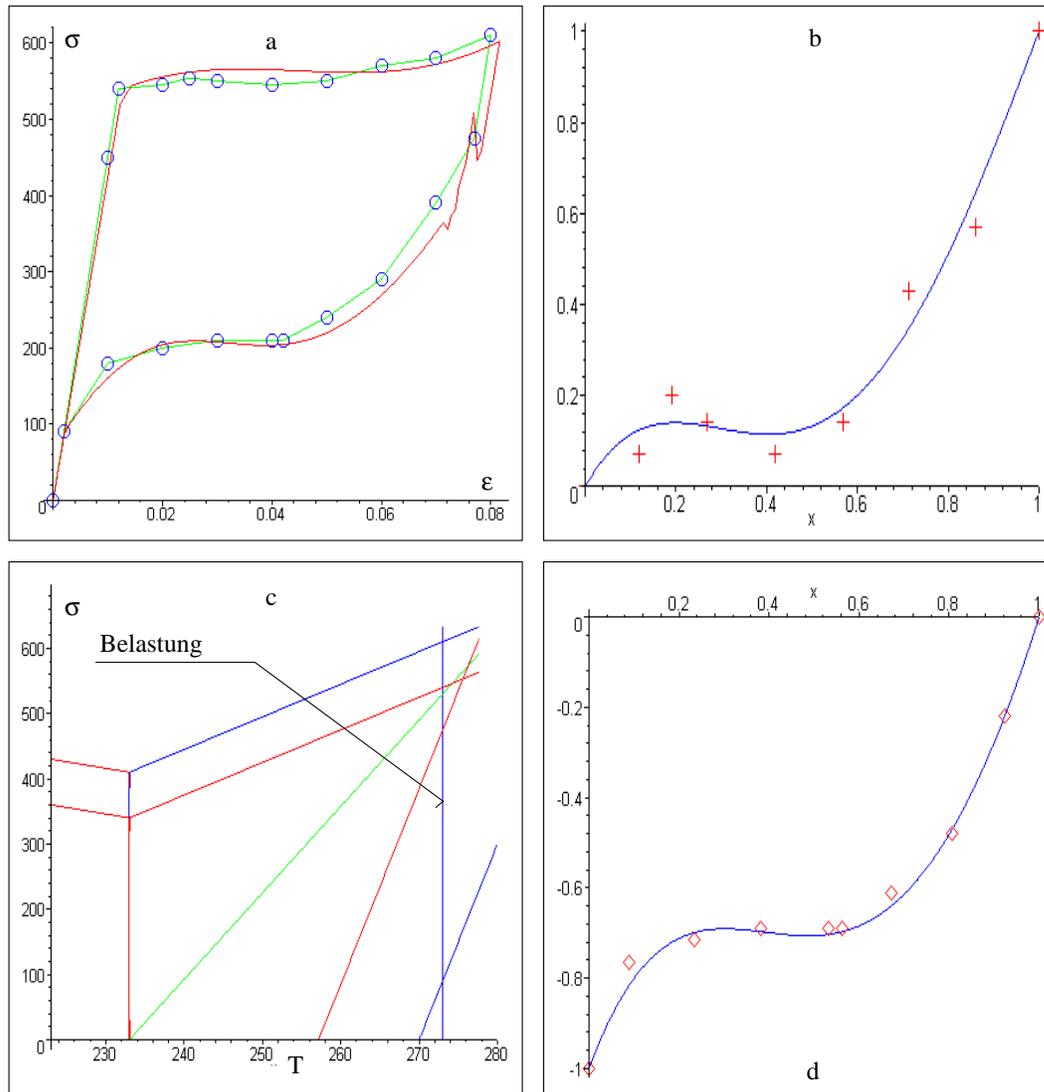


Abbildung 4.6: a) Ergebnis der Berechnung mit Messdaten, b) Formfunktion  $f_1 : x \rightarrow [0, 1], x \in [0, 1]$  für Austenit-Martensit Umwandlung und entsprechende Messdaten, c) Für die Berechnung verwendetes Umwandlungsdiagramm, d) Formfunktion  $f_2 : x \rightarrow [0, 1], x \in [0, 1]$  für Martensit-Austenit Rückumwandlung (mit  $-1$  multipliziert).

Materialparameter	Bekannt	Numerische Wert	Einheit
$A_{s0}$	Nein	285	K
$M_{s0}$	Nein	270	K
$c_x$	Nein	-2	MPa/K
$c_a$	Nein	12	MPa/K
$c_m$	Nein	8	MPa/K
$c_k$	Nein	8.5	MPa/K
$\sigma_0$	Nein	60	MPa
$\Delta\sigma_{1,3}$	Ja	70	MPa
$\Delta\sigma_2$	Ja	385	MPa
$k$	Ja	7.5	%
$E$	Ja	60000	MPa
$\nu$	Ja	0.3	-

Tabelle 4.3: Bekannte Materialdaten im Abschnitt 4.3.

## 4.4 Berechnung der Reorientierung

Das Ziel dieses Abschnitts ist die Erfassung der Reorientierung des Martensits durch den TID-Tensor. Dafür wird eine rein theoretisches Benchmark-Testexperiment gewählt, wobei in drei aufeinander folgenden Schritten Schub-Verzerrungen (erst  $\varepsilon_{23}$ , dann  $\varepsilon_{13}$  und anschließend  $\varepsilon_{12}$ ) aufgebracht und dann in umgekehrter Reihenfolge abgebaut werden (siehe Abb. 4.7d). Hierbei sollen die folgenden Fälle der Reorientierung diskutiert werden:

- nichtproportionale Belastung mit MPhU (siehe Abb. 4.7b und e, Strecke BC),
- nichtproportionale Entlastung mit MPhU (siehe Abb. 4.7b und e, Strecke EF),
- nichtproportionale Belastung/Entlastung ohne MPhU (siehe Abb. 4.7b und e, Strecke CDE),

Entlang der letzten Strecke CDE findet eine reine Reorientierung statt.

Der Test wurde mit MAPLE<sup>®</sup> durchgeführt. Es wird ein pseudoelastisches Materialverhalten bei einer Temperatur von 295 K simuliert. Die Materialdaten sind in

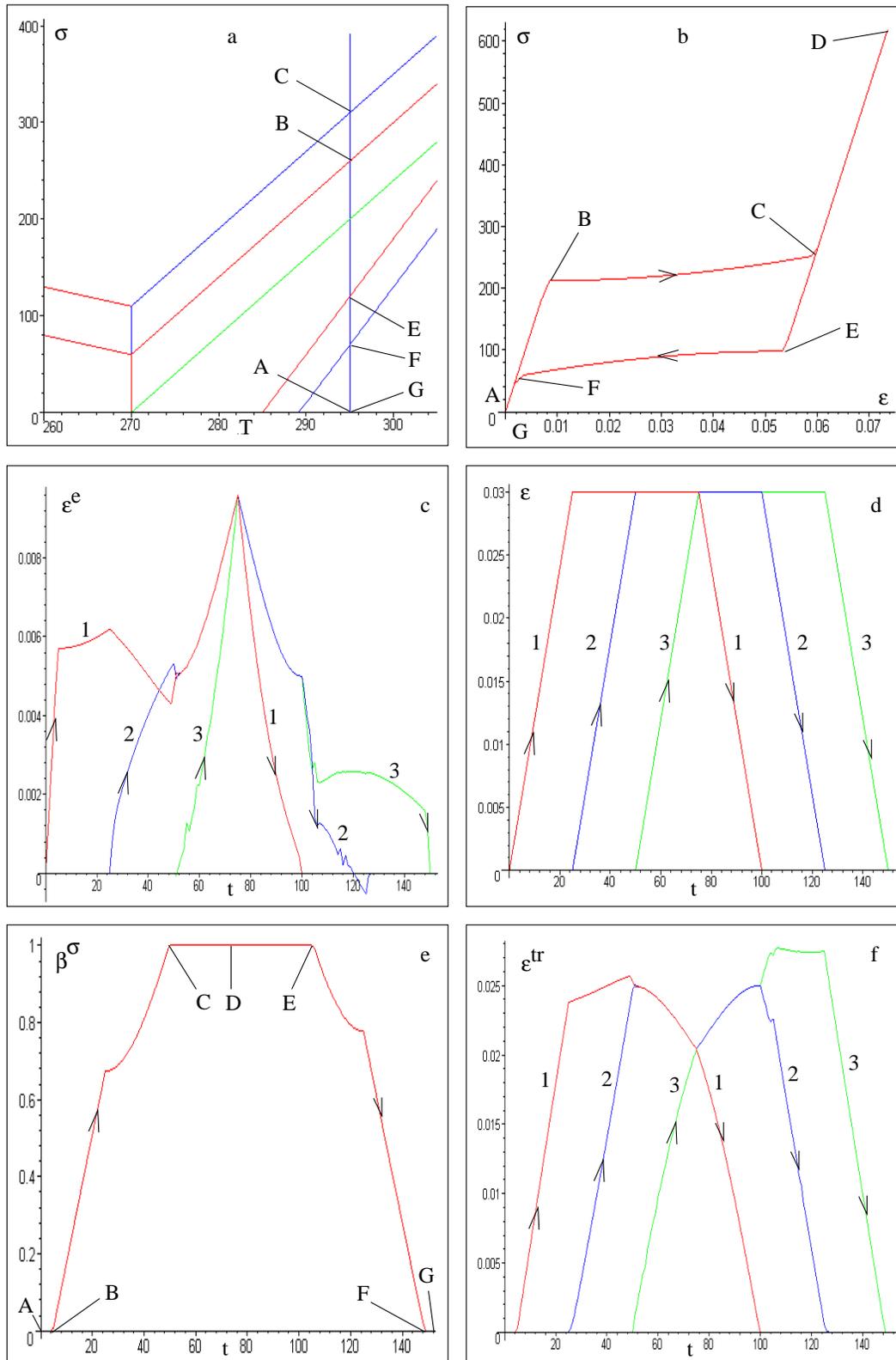


Abbildung 4.7: a) Umwandlungsdiagramm; b) Spannung-Dehnungsdiagramm; Komponente c) der elastischen Verzerrung  $\epsilon^e$ ; d) der totalen Verzerrung  $\epsilon$  (Randbedingung) und f) von TID  $\epsilon^{tr}$ , e) orientierter Martensitanteil  $\beta^\sigma$ .

Materialparameter	Numerische Wert	Einheit
$A_{s0}$	285	K
$M_{s0}$	270	K
$c_x$	-2	MPa/K
$c_a$	12	MPa/K
$c_m$	8	MPa/K
$c_k$	8	MPa/K
$\sigma_0$	60	MPa
$\Delta\sigma_{1,2,3}$	50	MPa
$k$	5	%
$E$	70000	MPa
$\nu$	0.33	-

Tabelle 4.4: Verwendete Materialdaten im Abschnitt 4.4.

Tab. 4.4 zusammengefasst<sup>10</sup>. Am Anfang der Simulation ist der Körper 100% austenitisch. Während der Simulation wird entlang der Strecke AD die Verzerrung erhöht, wobei zuerst die  $\varepsilon_{23}$ -, dann die  $\varepsilon_{13}$ - und anschließend die  $\varepsilon_{12}$ -Komponente (entsprechend 1,2,3 in Abb. 4.7 und Abb. 4.9) von 0% bis 3% linear ansteigend aufgebracht werden. In umgekehrter Reihenfolge werden die Verzerrungskomponenten während der Entlastung wieder abgebaut (Die Belastungsgeschichte ist in Abb. 4.7d dargestellt).

Dieses theoretische Beispiel wurde gewählt, um den gesamten Verzerrungsraum (an Stelle des Sechsdimensionalen entsprechend den 6 Komponenten des symmetrischen Verzerrungstensors, Voigtsche Schreibweise) in einem dreidimensionalen Unterraum diskutieren und darstellen zu können. Nur 3 Komponenten des symmetrischen Verzerrungstensors variieren und sind nicht Null (da keine Querkontraktionen auf Grund der Schub-Belastung auftreten). Damit kann man die Vektoren der Verzerrungen (eingeführt in Abschnitt 3.2.8, Voigtsche Schreibweise) ohne Informationsverlust im dreidimensionalen Raum darstellen. Alle Komponenten sind voneinander unabhängig<sup>11</sup>. Die Vektoren sind zu jedem Zeitpunkt vom Ursprung ausgehend dargestellt. Da es sich in der Simulation um einen zeitabhängigen Prozess handelt, werden in Abb. 4.9 nur die Endpunkte der Vek-

<sup>10</sup>Da in der Literatur sehr wenig experimentelle Ergebnisse zur nichtproportionalen Belastung vorliegen und die hier präsentierten Ergebnisse nicht mit einem konkreten Experiment abzugleichen sind, werden die für eine gewöhnliche NiTi-Legierung geltenden Materialdaten ohne konkreten Materialbezug verwendet. Die Formfunktionen  $f_1$  und  $f_2$  der MPhU wurden einfachheitshalber als quadratisches Polynom approximiert.

<sup>11</sup>Es wird isotropes elastisches Materialverhalten angenommen, siehe Gl. (3.32)

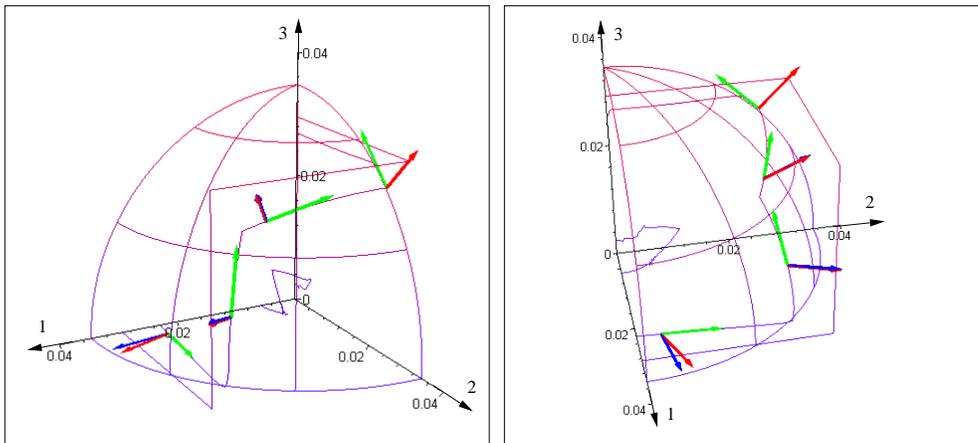


Abbildung 4.8: Darstellung der Richtung der Änderung der TID  $\dot{\epsilon}^{tr}$  (grün), der Spannung  $\sigma$  (rot) und der TID  $\epsilon^{tr}$  (blau) in verschiedenen Punkten der Belastung als Einheitsvektor mit der Länge von 1%.

toren in zeitlicher Reihenfolge dargestellt, um die Darstellung übersichtlicher zu machen. Weiterhin ist in Abb. 4.9 ein Achtel der Kugel angezeigt, deren Radius der maximalen TID  $k$  entspricht<sup>12</sup>. Geometrisch bedeutet dies, dass der Vektor der TID aus dieser Kugel nicht hinausreichen kann.

Das Materialverhalten kann in folgende Teile zerlegt werden:

1. Entlang der Strecke AB verhält sich das Material elastisch, da die kritische Spannung  $\sigma_1(T) = 250\text{MPa}$  der MPhU (Siehe Abb. 4.7a und b) bei der Belastungstemperatur  $T = 295\text{ K}$  noch nicht erreicht wird (siehe auch Abb. 3.5).
2. Entlang der Strecke BC findet die MPhU statt. Simultan läuft auch die Reorientierung ab (d.h., in Abb. 4.9 ändert sich nicht nur die Länge des TID-Vektors sondern auch ihre Richtung). Am Ende der Strecke BC ist die maximale TID erreicht. Der Körper ist 100% martensitisch. Dies ist in Abb. 4.9 der Punkt, wo der TID-Vektor die Kugel erreicht.
3. Entlang der Strecke CDE kann keine weitere MPhU stattfinden, da das Material schon im Punkt C 100% martensitisch ist und die Rückumwandlung erst bei Punkt E unter dem kritischen Spannungswert von 120 MPa

<sup>12</sup>Der Radius  $k'$  ist nicht mit  $k$  gleich, da es sich hier um die Euklidische Länge des Vektors des TID-Tensors in Voigtscher Schreibweise handelt, aber  $k$  ist durch den von Mises-Vergleichswert des TID Tensors eingeführt.

beginnen kann (siehe Abb. 4.7e und Abb. 4.9). Da sich die Belastung weiterhin nicht proportional ändert, wird eine Reorientierung erzwungen, um die freie Energie in (3.84) zu minimieren. Die Änderung der TID ist deutlich in Abb. 4.9 zu erkennen. Weiterhin ist hier leicht die Kurve der TID auf der Oberfläche der Kugel zu erkennen. Dieser Effekt ist die **reine Reorientierung**, da hier keine MPhU abläuft. Weiterhin kann man in Abb. 4.7b erkennen, dass entlang des Pfades CDE ein *lineares* Materialverhalten zu beobachten ist. Aus der Dreiecksungleichung in normierten Räumen folgt, dass alle abweichenden Pfade der TID in Abb. 4.9 zur Spannungserhöhung und dadurch zu einem *nichtlinearen* Materialverhalten führen würden, das im Widerspruch zu experimentellen Erfahrungen steht.

4. Auf der Strecke EF geschieht die Rückumwandlung (siehe Abb. 4.7e) und der Körper gewinnt seinen austenitischen Ausgangszustand zurück. Hier ist auch eine Reorientierung der TID zu erkennen.
5. Entlang der Strecke FG ist das Material 100% austenitisch und zeigt elastisches Materialverhalten.

**Anmerkung:** In Abb. 4.8 wurden in einigen Punkten die Spannung  $\sigma$ , die TID  $\epsilon^{tr}$  und die Änderung von TID  $\dot{\epsilon}^{tr}$  berechnet und als normierte Vektoren dargestellt. Man kann sofort erkennen, dass sich die Richtung der Änderung der TID nicht allein durch die Spannung oder durch die TID berechnen lässt. Die Änderung der TID ist durch die Abweichung des Spannungsfeldes und durch die aktuelle TID hervorgerufen und wird in diesem Modell durch thermodynamische Kräfte beschrieben. Daraus folgt, dass Evolutionsgleichungen der Art (3.14) und (3.15) die reine Reorientierung bzw. Reorientierung in Kombination mit MPhU nicht ausreichend genau beschreiben können.

## 4.5 FEM

In diesem Kapitel werden Berechnungen mit dem kommerziellen FEM-Programm ANSYS® gezeigt. Ziel dieses Kapitels ist es, durch einfache Beispiele die Funktionalität des Modells darzustellen. Um die geometrischen Effekte auf ein Minimum zu reduzieren, wird ein Balkenmodell mit Einwegeffekt und mit Pseudoelastizität berechnet. Hierbei werden die in Tab. 4.5 dargestellten Materialdaten bei allen in diesem Abschnitt behandelten Beispielen verwendet.

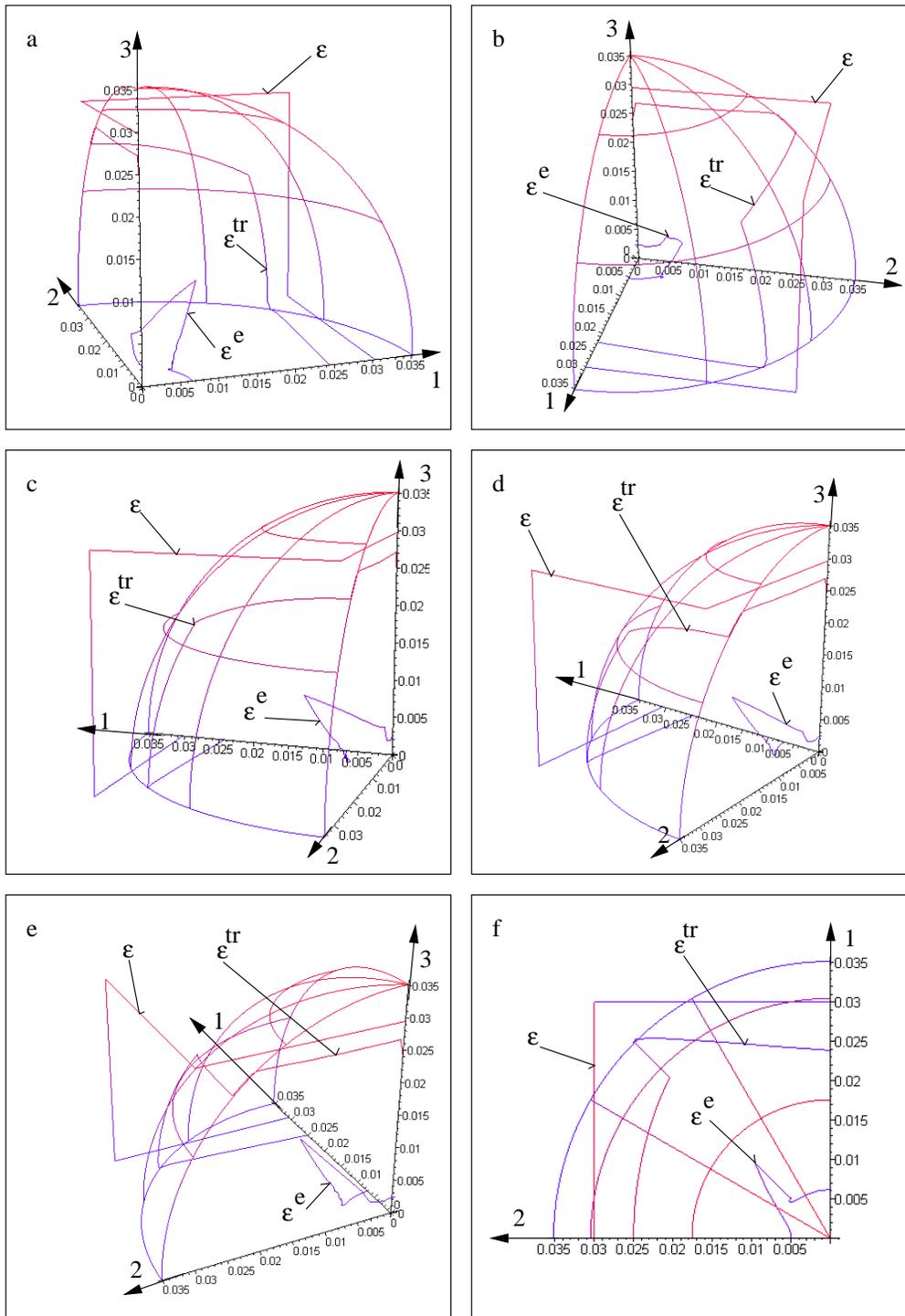


Abbildung 4.9: a)-f) TID, totale und elastische Dehnung während der Simulation im Raum der drei Schub-Verzerrungen. Die 6 Bilder zeigen unterschiedliche perspektivische Aussichten der gleichen Kurven. Die maximale TID definiert eine Kugel, die den maximalen Betrag der TID in diesem Raum begrenzt. Die Achsen 1, 2, 3 entsprechen den Komponenten von  $\epsilon_{yz}$ ,  $\epsilon_{xz}$  und  $\epsilon_{xy}$ .

Materialparameter	Numerische Wert	Einheit
$A_{s0}$	285	K
$M_{s0}$	270	K
$c_x$	-5	MPa/K
$c_a$	12	MPa/K
$c_m$	8	MPa/K
$c_k$	8.5	MPa/K
$\sigma_0$	100	MPa
$\Delta\sigma_{1,2,3}$	50	MPa
$k$	5	%
$E$	30000	MPa
$\nu$	0.3	-

Tabelle 4.5: Verwendete Materialdaten im Abschnitt 4.5.

### 4.5.1 Pseudoelastizität und Einwegeffekt

In den ersten beiden Fällen wird ein Balken belastet, indem am Ende des Balkens eine sich zeitlich ändernde Kraft aufgebracht wird, entsprechend Abb. 4.10a und b. Oberhalb der kritischen Temperatur  $A_{s0}$  tritt Pseudoelastizität auf. Beim Entlasten baut sich der Martensitanteil vollständig ab. Damit gewinnt der Balken seine Ausgangsform sowohl bei Zeitschritt 80 (entlastet beim Richtungswechsel der Kraft) als auch am Ende der Simulation bei Zeitschritt 160 zurück. Durch Vergleich von Abb. 4.11 und 4.12 lässt sich erkennen, dass die Komponenten der TID dem Spannungszustand entsprechen. Da keine Differenz zwischen Zug und Druck berücksichtigt wurde, sind die Hystereseschleifen sowohl bei positiven als auch bei negativen Werten der Kraft  $F$  identisch (siehe Abb. 4.10c).

Bei einer Temperatur unterhalb der kritischen Temperatur  $M_{s0}$  tritt unter mechanischer Belastung der sogenannte Einwegeffekt auf. Beim Einwegeffekt wandelt sich bei Entlastung der Martensit nicht mehr in Austenit um, da der Martensit bei diesen Temperaturen die stabilere Phase ist. Weiterhin kann sich der orientierte Martensit auch nicht in thermisch induzierten Martensit umwandeln. Daraus resultieren die folgenden beiden Effekte: Einerseits kann eine bleibende Deformation sowohl nach dem Entlasten bei Zeitschritt 80 als auch am Ende der mechanischen Belastung (Zeitpunkt 160) beobachtet werden, siehe Abb. 4.14 und Abb. 4.15. Andererseits kann bei wiederholter Belastung in Gegenrichtung die sogenannte reine Reorientierung beobachtet werden, wobei sich die Komponenten der TID ändern (In diesem Fall kehren sie sich vollständig um.), während der Vergleichswert der TID konstant bleibt, siehe Abb. 4.13f. Durch anschließende

Erwärmung wandelt sich der Martensit in Austenit um. Dadurch verschwindet die bleibende Deformation.

**Anmerkung:** Da ein kommerzielles FEM-Programm verwendet wurde, kann keine Iteration bei thermisch induzierten Phasenumwandlungen realisiert werden. Um dieses Problem umgehen zu können, wird die Temperatur treppenförmig erhöht und damit eine Suche nach der Gleichgewichtslage erzwungen. Hierbei stellt der Abbau der TID das größte numerische Problem dar, da der Abbau bei konstanter Gesamtdehnung große Pseudospannungen hervorruft, die durch die Gleichgewichtssuche abgebaut werden sollen.

### 4.5.2 Pseudoelastizität

In dieser Arbeit wird anschließend eine gelochte quadratische Scheibe berechnet, die am Rand gezogen wird. Die Berechnung zeigt eine MPhU entsprechend dem Spannungszustand, wodurch ein breites Spannungsplateau mit geringem Spannungsunterschied entsteht. Da die Randspannung als Randbedingung angegeben wurde, entsteht eine Spannungsspitze an der höchst belasteten Stelle (Punkt A in Abb. 4.16 und 4.18).

Die Berechnungen zeigen auch eine schwache Reorientierung bei Rückumwandlung durch geometrische Effekte (siehe Abb. 4.16f).

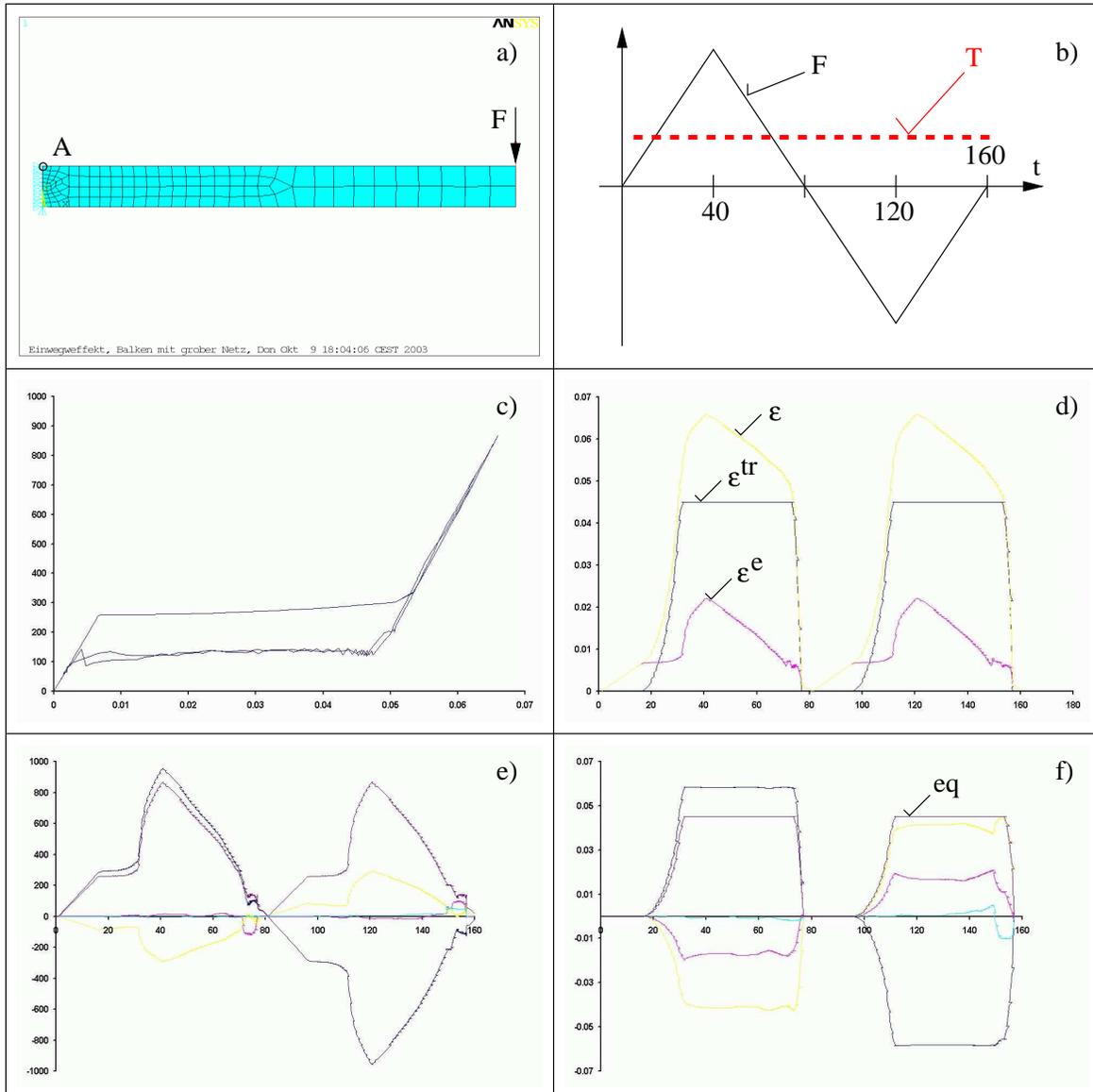


Abbildung 4.10: a) FEM-Netz und Randbedingungen, b) Zeitlicher Ablauf der Kraft  $F$  und Temperatur  $T$ , c) Spannungs-Dehnungs-Diagramm, d) Vergleichswert von totalen und elastischen Dehnungen sowie TID als Funktion der Zeit im Punkt A, e) Komponenten des Spannungstensors im Punkt A, f) Komponenten der TID im Punkt A.

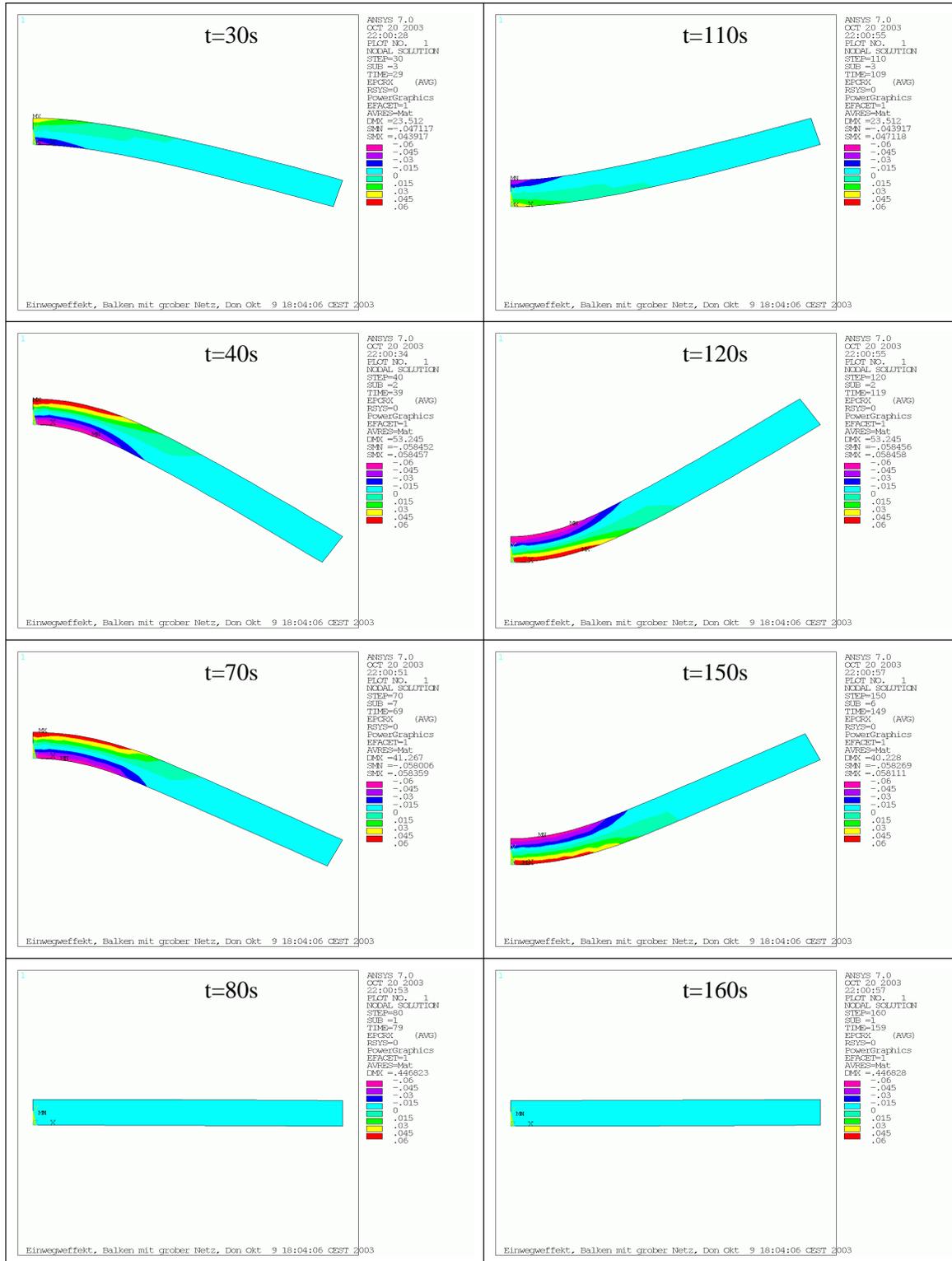


Abbildung 4.11: Pseudoelastizität,  $\epsilon_{xx}^{tr}$  Komponente der TID  $\epsilon^{tr}$ .

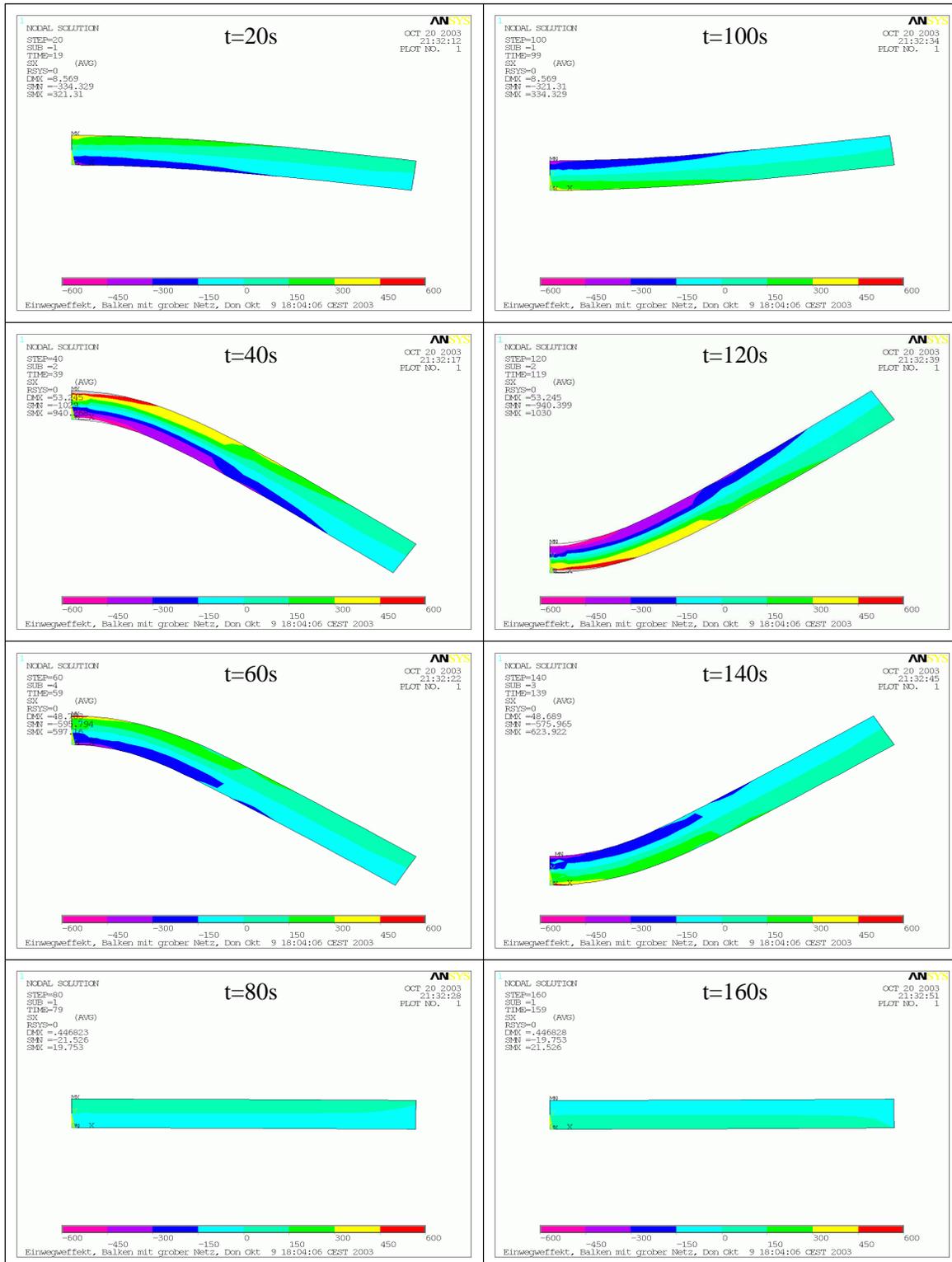


Abbildung 4.12: Pseudoelastizität,  $\sigma_{xx}$  Komponente des Spannungstensors  $\sigma$ .

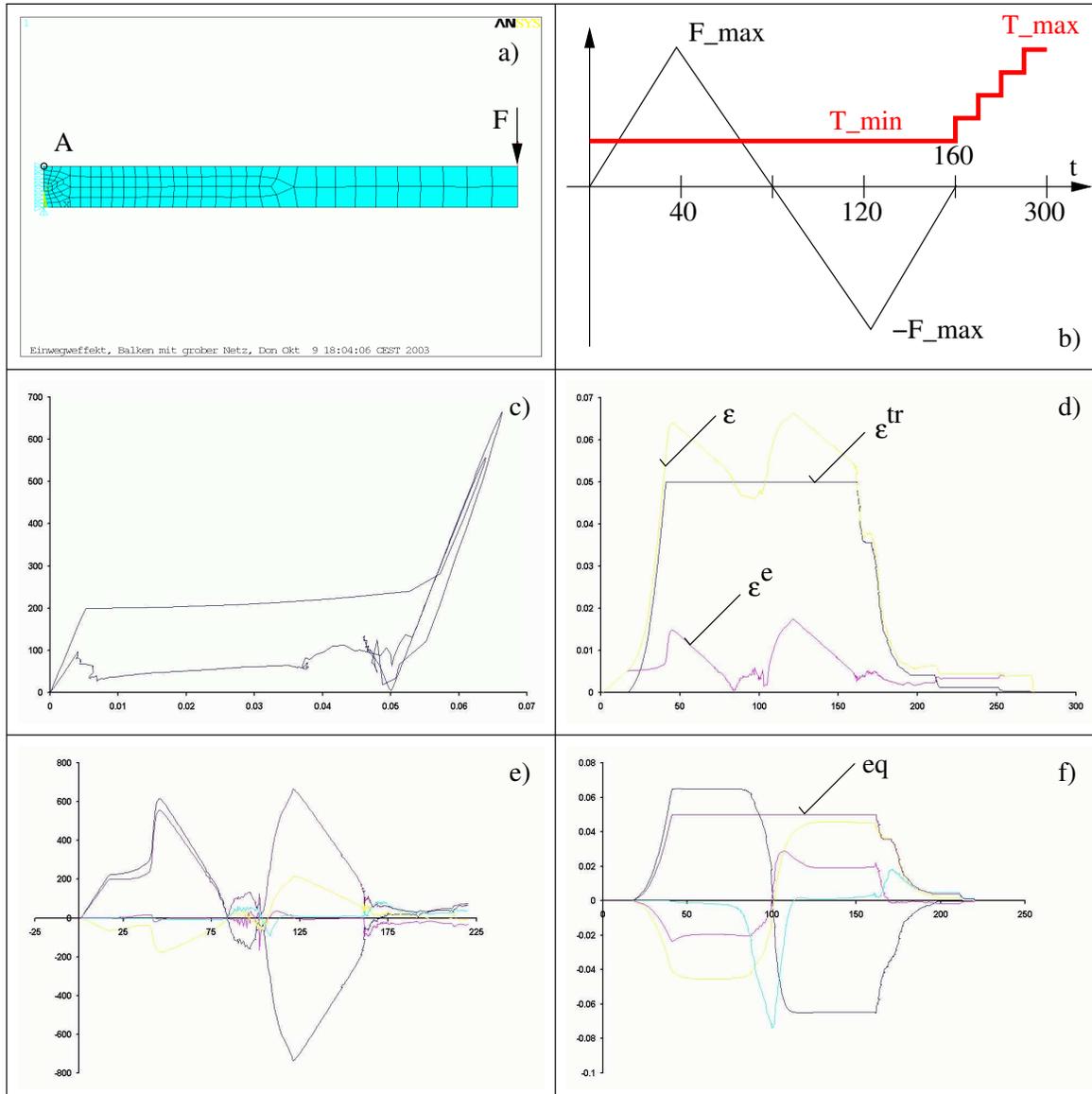


Abbildung 4.13: a) FEM-Netz und Randbedingungen, b) Zeitliche Ablauf der Kraft  $F$  und Temperatur  $T$ , c) Spannungs-Dehnungs-Diagramm, d) Vergleichswert von totalen und elastischen Dehnungen sowie TID als Funktion der Zeit im Punkt A, e) Komponenten des Spannungstensors im Punkt A, f) Komponenten der TID im Punkt A.

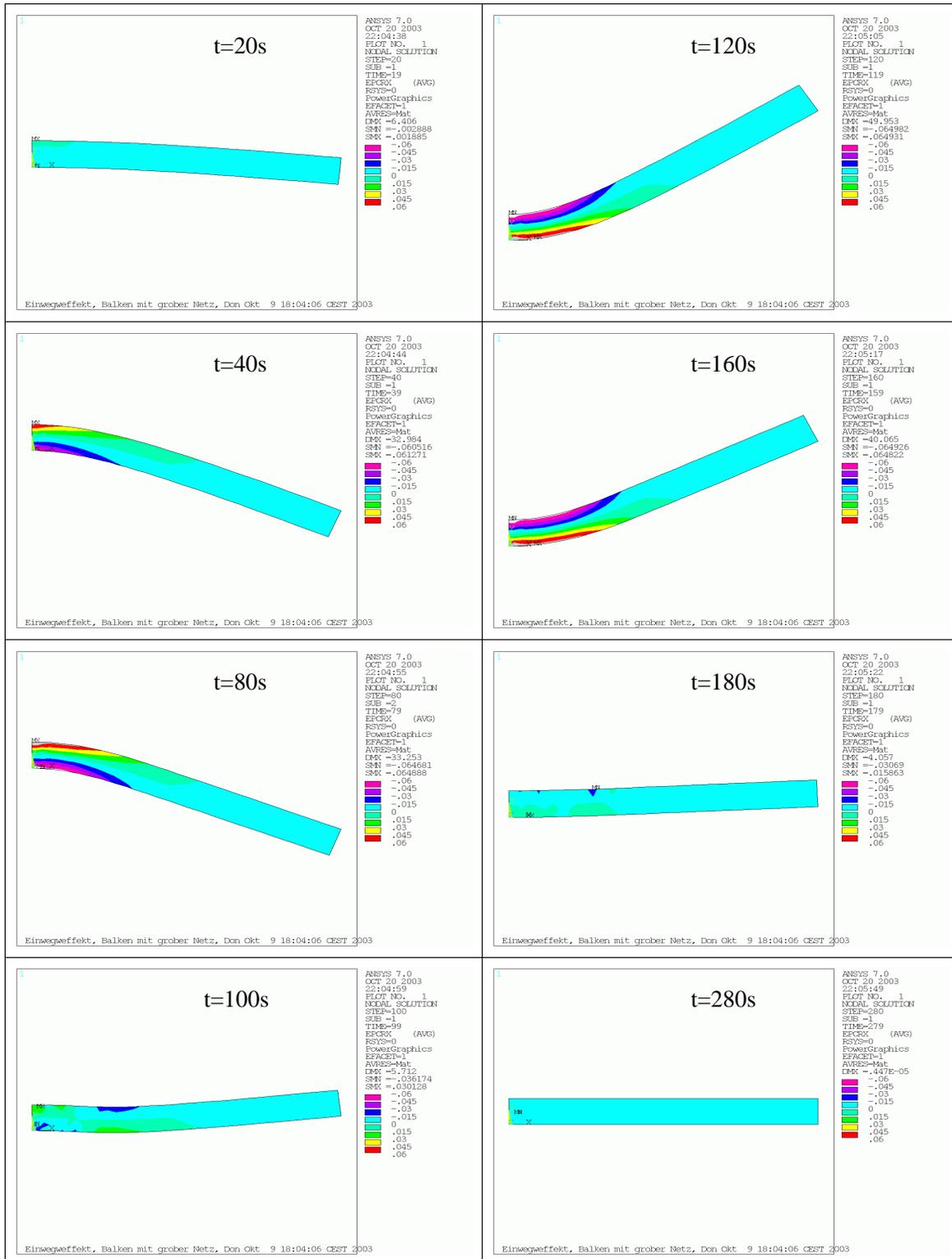


Abbildung 4.14: Einwegeffekt,  $\epsilon_{xx}$  Komponente der TID  $\epsilon^{tr}$ .

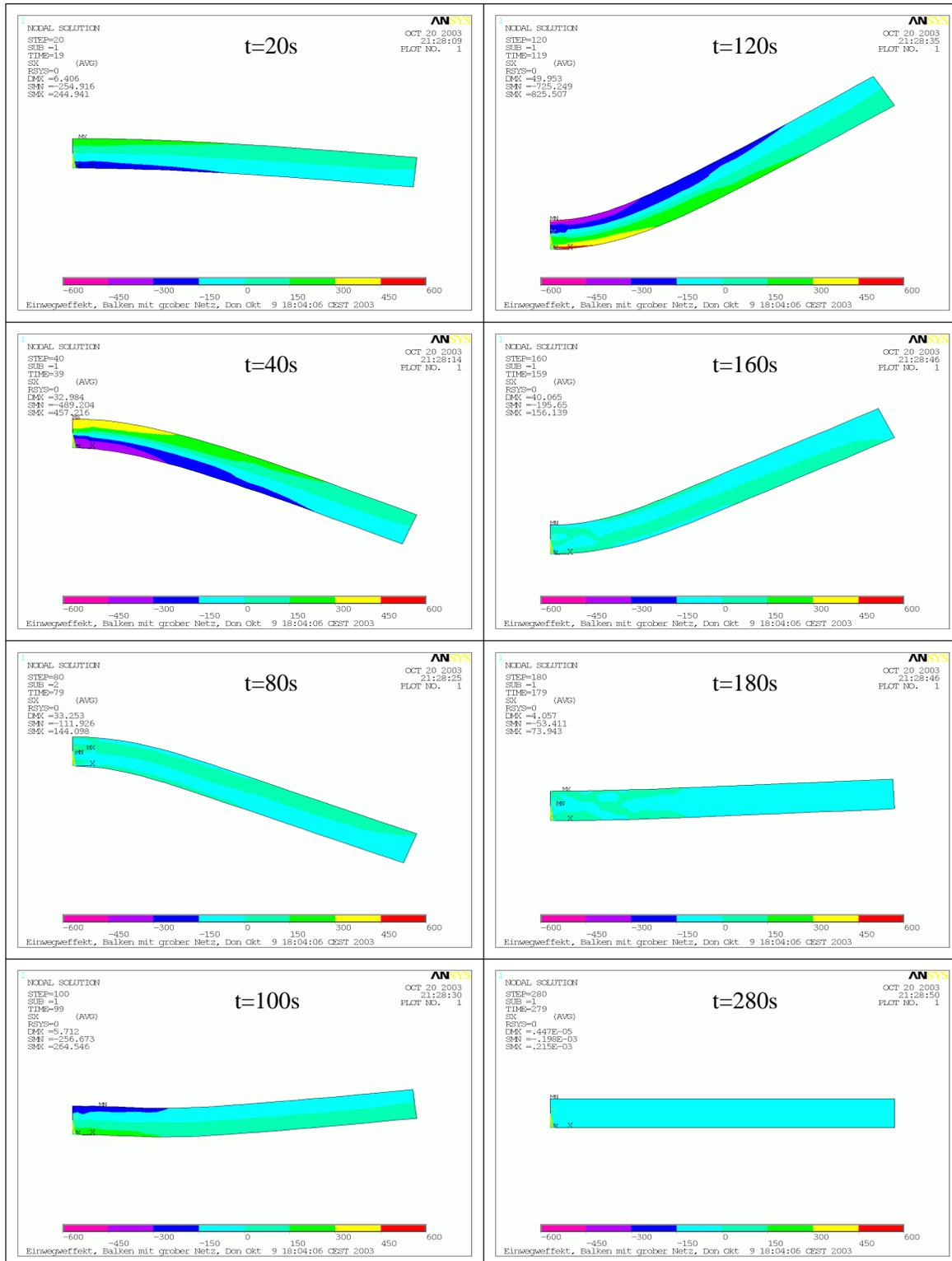


Abbildung 4.15: Einwegeffekt,  $\sigma_{xx}$  Komponente des Spannungstensors  $\sigma$ .

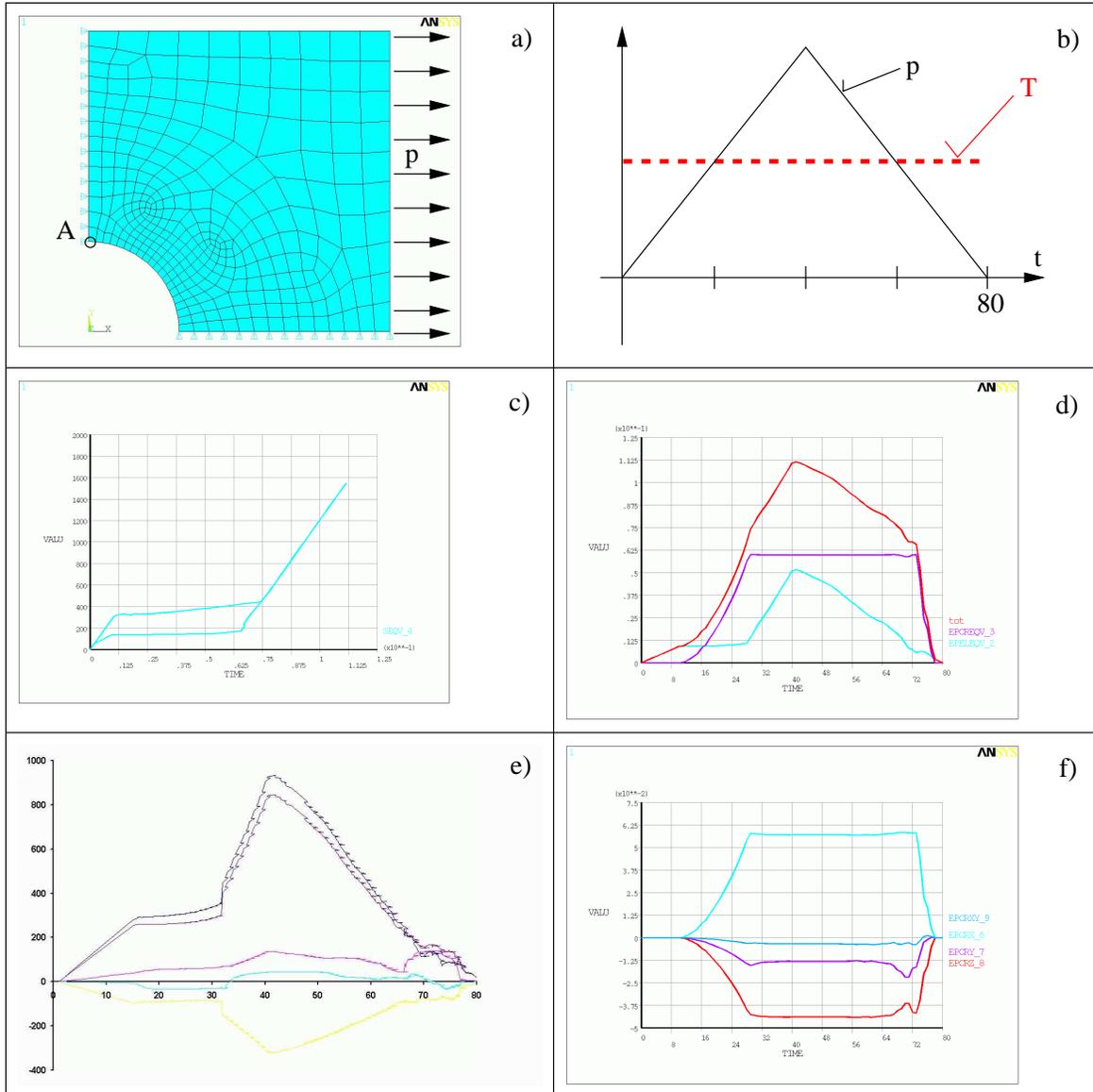


Abbildung 4.16: a) FEM-Netz und Randbedingungen, b) Zeitlicher Ablauf des Druckes  $p$  und der Temperatur  $T$ , c) Spannungs-Dehnungs-Diagramm, d) Vergleichswert von totalen und elastischen Dehnungen sowie TID als Funktion der Zeit im Punkt A, e) Komponenten des Spannungstensors im Punkt A, f) Komponenten der TID im Punkt A.

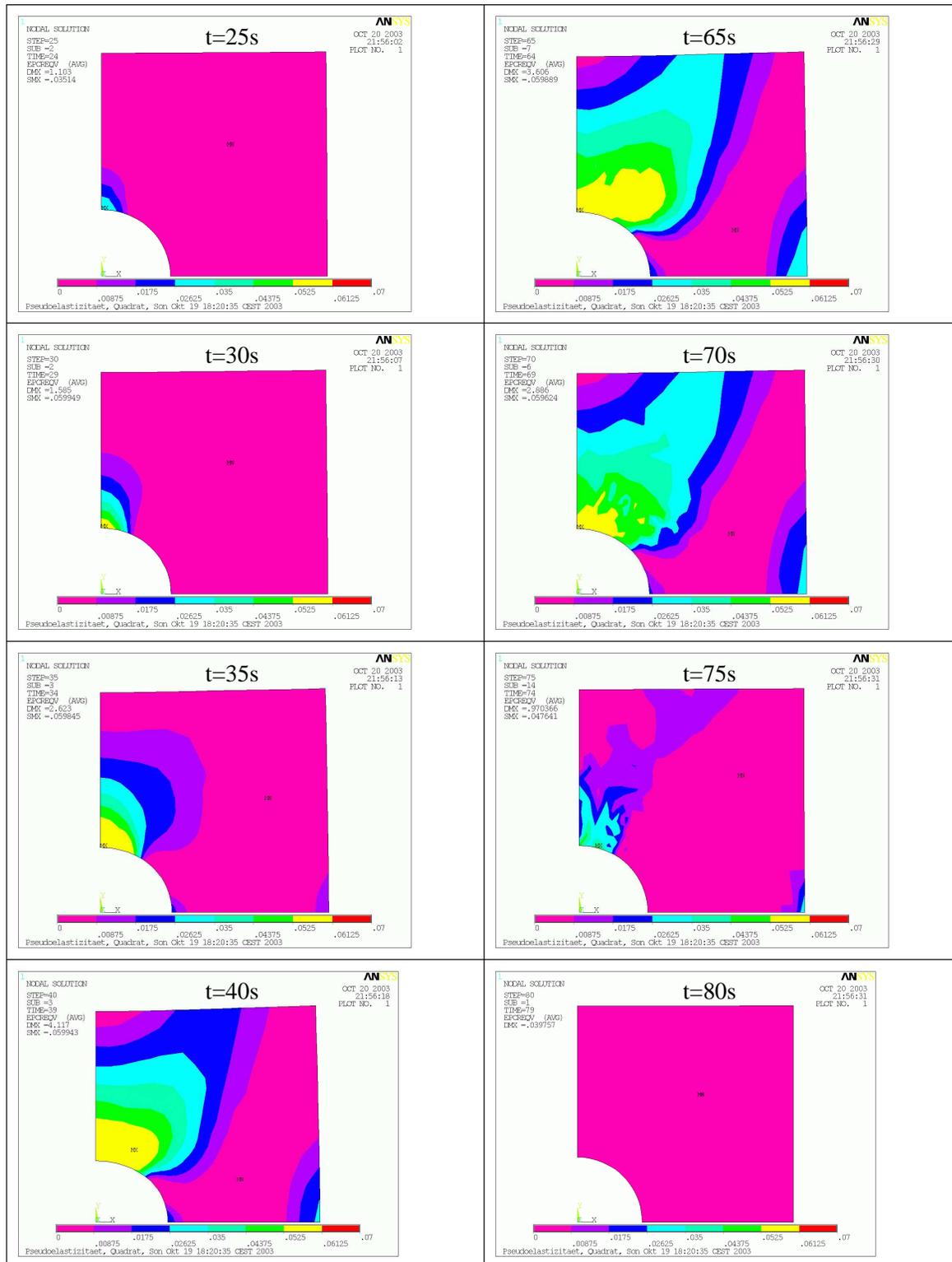


Abbildung 4.17: Pseudoelastizität,  $\epsilon_{xx}^{tr}$  Komponente der TID  $\epsilon^{tr}$ .

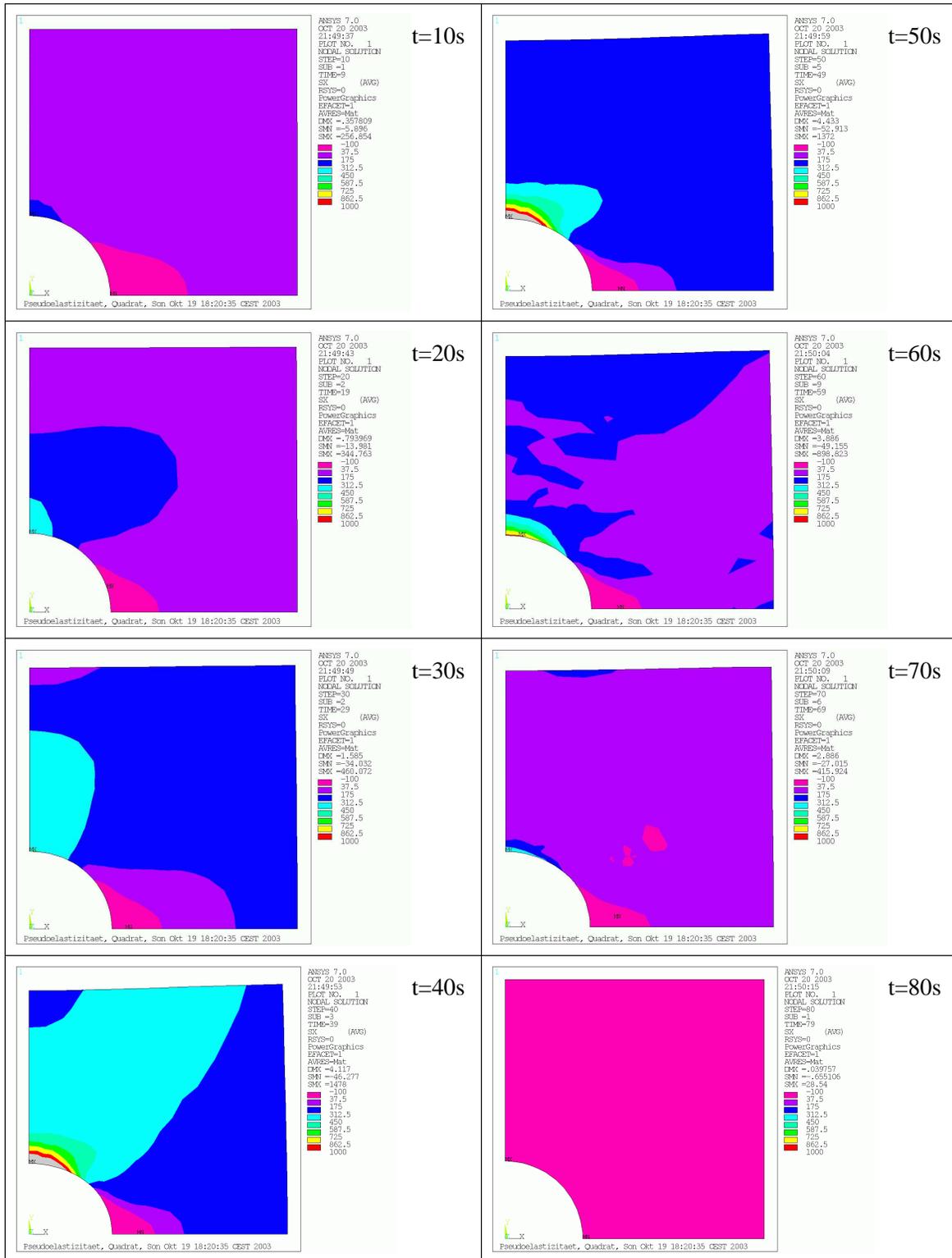


Abbildung 4.18: Pseudoelastizität,  $\sigma_{xx}$  Komponente des Spannungstensors  $\sigma$ .

# Zusammenfassung

Die Formgedächtnislegierungen (*Shape Memory Alloys* = SMA) weisen eine kristallographisch nahezu reversible martensitische Phasenumwandlung unter thermomechanischer Beanspruchung auf. Hieraus resultieren verschiedene spezielle mechanische Materialeigenschaften, deren Anwendungsbereich immer breiter wird. Um zukünftige Bauteile aus SMA auslegen, dimensionieren und optimieren zu können, wurde ein konstitutives Modell für die Strukturanalyse, z.B. mittels FEM, entwickelt. Da diese Bauteile eine immer kompliziertere Form annehmen, muss das Modell eine allgemeine thermomechanische Belastung adäquat erfassen. Bei SMA treten unter allgemeiner Belastung physikalische Prozesse, die zur Änderung der bisherigen Kristallstruktur führen, auch ohne Phasenumwandlung auf. Diese Prozesse werden Reorientierung genannt und in dieser Arbeit im Rahmen eines makroskopischen Modells beschrieben.

In dieser Arbeit wird ein grundsätzliches Verfahren zur Modellierung von SMA vorgeschlagen. Anhand von repräsentativen Beispielen werden die wichtigsten neuen Eigenschaften des Modells demonstriert. Es wird ein thermodynamisch basierter Weg beschritten, wobei innere Variablen mit zugehörigen thermodynamischen Kräften eingeführt werden. Dabei werden folgende beiden Annahmen getroffen:

- Thermodynamische Kräfte sind die treibenden Kräfte der inneren kristallographischen Prozesse.
- Ein Umwandlungsdiagramm beschreibt die spannungs- und temperaturabhängigen Umwandlungsgrenzen. (Um die SME vollständig beschreiben zu können, sind die Parameter des Umwandlungsdiagramms und Messdaten für die Transformationskinetik erforderlich.)

Um diese beiden Annahmen gleichzeitig erfüllen zu können, werden die Richtungen der verallgemeinerten Kräfte mit dem Umwandlungsdiagramm abgestimmt. Diese Abstimmung führt einerseits zu eindeutigen Zusammenhängen zwischen Modellparametern und einfach messbaren Materialparametern. Andererseits ist eine tiefgehende Analyse der Kräfte für die Abstimmung erforderlich. Dieser auf

thermodynamischen Kräften basierte und damit thermodynamisch konsistente Modellaufbau ist neu. Das Modell erlaubt die Beschreibung der inneren Prozesse des Materials (Phasenumwandlung, Reorientierung) in allen thermodynamischen Zuständen bzw. für beliebige thermomechanische nichtproportionale, mehrachsige Belastungen.

Anhand mehrerer Simulationen werden nicht nur die neuen Eigenschaften des Modells demonstriert, sondern es wird auch gezeigt, wie man die Modellparameter im Fall nicht vollständiger Messdaten über das Umwandlungsdiagramm herleiten kann. Weiterhin wird gezeigt, wie Reorientierung mit und ohne Phasenumwandlung unter nichtproportionaler Belastung mit dem Modell beschrieben werden kann. Dabei wird auf Widersprüche bei Modellansätzen mit Analogie zur Plastizität hingewiesen. Ziel der numerischen Simulationen ist es vor allem, die Zuverlässigkeit, die Flexibilität und die mögliche Anwendungsbreite der neuen Formulierung zu demonstrieren.

Sollen Plastizität oder andere irreversible kristallographische Prozesse berücksichtigt werden, sind weitere experimentelle Ergebnisse erforderlich, um die Wechselwirkung zwischen Phasenumwandlung und anderen kristallographischen Prozessen zu klären. Für die Weiterentwicklung des Modells mit Berücksichtigung dieser Wechselwirkungen bieten mikromechanische Modellansätze einen guten Ausgangspunkt. Erweiterungen mit Berücksichtigung der Ermüdung des SME und der Plastifizierung können durch Kombination des Modells mit Modellen für Plastizität und Materialschädigung entwickelt werden.

# Anhang A

## Legendresche Transformation

Das totale Differential einer Funktion  $f(x, y)$  sei gegeben als

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy = g(x, y) dx + h(x, y) dy. \quad (\text{A1})$$

Durch den Ansatz einer neuen Funktion  $F$  in der Form  $F = f - gx$  gelangt man zu dem totalen Differential von  $F$  auf folgende Art:

$$dF = d(f - gx) = g dx + h dy - g dx - x dg = -x dg + h dy. \quad (\text{A2})$$

Wenn man also  $F$  nicht als Funktion von  $x$  und  $y$ , sondern als Funktion von  $g$  und  $y$  auffasst, sind die partiellen Ableitungen von  $F(g, y)$  einfach durch  $-x$  bzw.  $h$  gegeben. Diese Umformulierung der Ausgangsfunktion nennt man *Legendre-Transformation*.

Im Prinzip könnte man an allen Stellen, wo die Legendresche Transformation angewandt wird, auch genauso gut Jacobi-Determinanten (also letztendlich die Kettenregel) benutzen, um partielle Ableitungen von gewissen unabhängigen Variablen auf andere zu transformieren. Die in der Thermodynamik durch Legendresche Transformation erhaltenen Zustandsgrößen haben aber jeweils in verschiedenen Zusammenhängen so wichtige Bedeutung, dass es unbequem (aber machbar) wäre, alle Rechnungen auf ein einziges thermodynamische Potential, z.B. die innere Energie  $E(S, V)$ , zurückzuführen.

Neben der inneren Energie werden oft die Helmholtzsche und Gibbssche freie Energie verwendet.



# Anhang B

## Modell von FRÉMOND

In diesem Teil der Arbeit wird das Modell von Fremond [28, 29, 30, 110, 111] kurz zusammengefasst und schließlich die kritische Stelle des Modells erläutert. In dem Modell werden Phasenanteile  $\beta_i$ , ( $i = 1, 2, 3$ ) als innere Variablen eingeführt, wobei  $\beta_1$  und  $\beta_2$  den Anteil von zwei verschiedenen Martensitvarianten und  $\beta_3$  den Anteil des Austenits beschreiben. Für die Konstitutivgleichung wird

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e} = \rho D_{ijkl} \varepsilon_{kl}^e + \rho \alpha(T) (\beta_2 - \beta_1) \delta_{ij} , \quad (\text{B1})$$

angesetzt, wobei  $\Phi$  das freie Helmholtz-Energie und  $\delta$  die Kroneckersche Delta sind. Die Funktion  $\alpha(T)$  ist als

$$\alpha(T) = \begin{cases} 0 , & \text{wenn } T_c \leq T \\ \frac{1}{2} c_\alpha (T - T_c)^2 , & \text{wenn } T_0 \leq T \leq T_c \\ \frac{1}{2} c_\alpha T_c^2 , & \text{wenn } T \leq T_0 \end{cases} , \quad (\text{B2})$$

definiert, wobei  $c_\alpha$ ,  $T_0$  und  $T_c$  Materialparameter sind und eine bestimmte Fallunterscheidung auftritt, obwohl sich die Fälle nur durch die Temperatur unterscheiden. Die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen lauten

$$\mathbf{0} \in \rho \begin{pmatrix} -\alpha(T) \operatorname{tr} \varepsilon^e + \frac{L}{T_0} (T - T_0) \\ +\alpha(T) \operatorname{tr} \varepsilon^e + \frac{L}{T_0} (T - T_0) \end{pmatrix} + \kappa \frac{\partial \boldsymbol{\beta}}{\partial t} + \rho \partial I_\kappa(\boldsymbol{\beta}) , \quad (\text{B3})$$

wobei  $\partial I_\kappa(\cdot)$  das Subdifferential der Indikatorfunktion  $I$  des Bereichs  $\kappa \in \mathbb{R}^2$  ist mit  $\kappa = \left\{ \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^2 : \forall \beta_i \in [0, 1]; \beta_1 + \beta_2 \leq 1 \right\}$ .

### Bemerkungen:

1. Gemäß der Konstitutivgleichung (B1) induziert die Phasenumwandlung eine reine Volumenänderung. Dies steht im Widerspruch zu experimentellen

Beobachtungen und theoretischen Resultaten, wonach die Phasenumwandlung in einer SMA vernachlässigbare Volumenänderungen induziert und damit erst die SME ermöglicht.

2. In Gl. (B3) beschreibt der Term  $-\alpha(T) \operatorname{tr} \varepsilon^e$  die Abhängigkeit der Entwicklung der inneren Variablen vom elastischen Verzerrungszustand bzw. Spannungszustand. Die Evolutionsgleichung (B3) enthält keine Spannungsgrenze der Phasenumwandlung, die aber grundlegend für die Beschreibung der SME ist.
3. Trotz der vorangehenden Bemerkungen liefert das Modell von FRÉMOND eventuell mit Modifikationen zuverlässige Resultate für Einwegeffekt und für das dynamische Verhalten von SMA-Drähten, siehe [45, 94, 95].

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematische Darstellung der Martensitbildung in einem Austenit-Korn (siehe auch Abb.1.5): a) Entstehung des Keimpunktes, b) freie Martensitbildung, c) und d) Reorientierung mit Restaustenit.	5
1.2	Schematische Darstellung von Gleiten (links) und Zwillingsbildung (rechts).	6
1.3	Schematische Darstellung des Unterschieds zwischen Plastifizierung und Reorientierung unter nicht-proportionalen Belastungen: a) bis c): plastisches Verhalten, d) bis f): Reorientierung.	8
1.4	Schematische Darstellung der thermisch- bzw. spannungsinduzierten Martensit-Anordnung.	9
1.5	Mikroskopaufnahmen martensitischer Korngrenzen, wobei die Form der Martensitkristalle und die Entstehung von neuen Varianten innerhalb eines Martensitkristalls (Reorientierung) gut zu erkennen sind [26, 34, 42, 41].	11
1.6	Schematische Umwandlungsdiagramm von SMA a) nach TANAKA, b) nach BRINSON, c) erweitert mit Berücksichtigung der Plastizität.	13
1.7	Formgedächtniseffekte: a) Zweiwegeeffekt, b) Einwegeeffekt, c) Pseudoelastizität.	16
2.1	Reversibler Prozess als Trajektorie im Gleichgewichtsunterraum des Nichtgleichgewichtprozesses zwischen zwei thermodynamischen Zuständen $A$ und $B$ .	22
3.1	Freie Helmholtz-Energie als Funktion der Scherlänge bei Entstehung a) des thermisch induzierten Martensits; b) des Austenits; c) und d) des orientierten Martensits entsprechend dem Spannungszustand.	35

3.2	$T - \sigma$ -Diagramm mit Umwandlungszonen a) Umwandlungszone zwischen Austenit und Martensit, wobei die Zone eine $A \rightarrow M$ Umwandlung beschreibt, siehe Pfeil; b) Erste Version des Umwandlungsdiagramms nach TANAKA, wobei ein Belastungspfad angedeutet ist [104]; c) Verbessertes Umwandlungsdiagramm nach TANAKA [103]; d) Umwandlungsdiagramm nach BRINSON mit drei Zonen für thermisch induzierten (therm. Mart.) und den orientierten Martensit [15]. . . . .	37
3.3	Schematische Darstellung des Subdifferentials. . . . .	51
3.4	a) Das BRINSONSche Umwandlungsdiagramm [15] mit MPhU Bedingungen I.-IV.; b) Parameterlinien der Funktion $X^\sigma(T)$ ; c) Null-Kraft-Linie der Kraft $X^\sigma$ bei $\beta^\sigma = 1$ ; d) System der Null-Kraft-Linien der Kräfte im Fall der homogenen Phasenverteilung. . . .	54
3.5	Das in diesem Modell verwendete Umwandlungsdiagramm von BRINSON [15] und dessen Bedeutung im Fall der Pseudoelastizität. . .	62
3.6	Die Darstellung der thermodynamischen Kraft $\mathbf{X}^\sigma$ als Vektor im zweidimensionalen Raum. . . . .	66
3.7	Suche des neuen Gleichgewichtszustands bei reiner Reorientierung (schematische Darstellung). Hierbei ist die aktuelle TID gegeben und durch die thermomechanische Belastung auch die aktive thermodynamische Kraft bekannt. Der skalare Multiplikator $\lambda_{4,5}$ soll bestimmt werden. Hierzu kann die freie Helmholtz-Energie entlang der thermodynamischen Kraft für $\forall \lambda \geq 0$ bestimmt werden. Damit ergibt sich entlang der Kraft ein skalares Minimierungsproblem, deren Lösung $\lambda^{\min}$ ist. Weiterhin lässt sich die maximale Änderung der TID durch eine Kugel im Raum der TID darstellen und bestimmt einen Wert $\lambda_{4,5}^{\max} \geq 0$ , womit die Änderung der TID gerade die Kugel erreicht. Der aktuelle Multiplikator $\lambda_{4,5}^{\max}$ ergibt sich aus (3.89). . . . .	72
4.1	Berechnung des neuen thermodynamischen Zustandes während der Phasenumwandlung. . . . .	77
4.2	Zur Berechnung der positiven Multiplikatoren in den Evolutionsgleichungen im Fall 1: a) Umwandlung, b) Rückumwandlung. . .	78
4.3	Berechnung der positiven Multiplikatoren $\lambda_m$ in den Evolutionsgleichungen im Fall 2. . . . .	79
4.4	a) Umwandlungsdiagramm mit den Belastungspfaden. Die Bezeichnung der Phasen bezieht sich auf Abb. 4.5, b) Der zeitliche Ablauf der Gesamtdehnung. . . . .	81

4.5	Änderung der SME in Abhängigkeit von der Temperatur, a)-f) Ergebnisse der Simulation dargestellt im Spannungs-Dehnungs-Diagramm bei einachsiger Belastung und unterschiedlichen Temperaturen. Die maximale TID $k$ ist als a)-c) 5%, d) 4%, e) 3% und f) 2% gegeben. . . . .	82
4.6	a) Ergebnis der Berechnung mit Messdaten, b) Formfunktion $f_1 : x \rightarrow [0, 1], x \in [0, 1]$ für Austenit-Martensit Umwandlung und entsprechende Messdaten, c) Für die Berechnung verwendetes Umwandlungsdiagramm, d) Formfunktion $f_2 : x \rightarrow [0, 1], x \in [0, 1]$ für Martensit-Austenit Rückumwandlung (mit $-1$ multipliziert). . . .	85
4.7	a) Umwandlungsdiagramm; b) Spannung-Dehnungsdiagramm; Komponente c) der elastischen Verzerrung $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ ; d) der totalen Verzerrung $\boldsymbol{\varepsilon}$ (Randbedingung) und f) von TID $\boldsymbol{\varepsilon}^{tr}$ , e) orientierter Martensitanteil $\beta^\sigma$ . . . . .	87
4.8	Darstellung der Richtung der Änderung der TID $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tr}$ (grün), der Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ (rot) und der TID $\boldsymbol{\varepsilon}^{tr}$ (blau) in verschiedenen Punkten der Belastung als Einheitsvektor mit der Länge von 1%. . . . .	89
4.9	a)-f) TID, totale und elastische Dehnung während der Simulation im Raum der drei Schub-Verzerrungen. Die 6 Bilder zeigen unterschiedliche perspektivische Aussichten der gleichen Kurven. Die maximale TID definiert eine Kugel, die den maximalen Betrag der TID in diesem Raum begrenzt. Die Achsen 1, 2, 3 entsprechen den Komponenten von $\varepsilon_{yz}, \varepsilon_{xz}$ und $\varepsilon_{xy}$ . . . . .	91
4.10	a) FEM-Netz und Randbedingungen, b) Zeitlicher Ablauf der Kraft $F$ und Temperatur $T$ , c) Spannungs-Dehnungs-Diagramm, d) Vergleichswert von totalen und elastischen Dehnungen sowie TID als Funktion der Zeit im Punkt A, e) Komponenten des Spannungstensors im Punkt A, f) Komponenten der TID im Punkt A. . . .	94
4.11	Pseudoelastizität, $\varepsilon_{xx}^{tr}$ Komponente der TID $\boldsymbol{\varepsilon}^{tr}$ . . . . .	95
4.12	Pseudoelastizität, $\sigma_{xx}$ Komponente des Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$ . . . .	96
4.13	a) FEM-Netz und Randbedingungen, b) Zeitliche Ablauf der Kraft $F$ und Temperatur $T$ , c) Spannungs-Dehnungs-Diagramm, d) Vergleichswert von totalen und elastischen Dehnungen sowie TID als Funktion der Zeit im Punkt A, e) Komponenten des Spannungstensors im Punkt A, f) Komponenten der TID im Punkt A. . . .	97
4.14	Einwegeffekt, $\varepsilon_{xx}^{tr}$ Komponente der TID $\boldsymbol{\varepsilon}^{tr}$ . . . . .	98
4.15	Einwegeffekt, $\sigma_{xx}$ Komponente des Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$ . . . . .	99
4.16	a) FEM-Netz und Randbedingungen, b) Zeitlicher Ablauf des Druckes $p$ und der Temperatur $T$ , c) Spannungs-Dehnungs-Diagramm, d) Vergleichswert von totalen und elastischen Dehnungen sowie TID als Funktion der Zeit im Punkt A, e) Komponenten des Spannungstensors im Punkt A, f) Komponenten der TID im Punkt A. . . .	100
4.17	Pseudoelastizität, $\varepsilon_{xx}^{tr}$ Komponente der TID $\boldsymbol{\varepsilon}^{tr}$ . . . . .	101

4.18 Pseudoelastizität, $\sigma_{xx}$ Komponente des Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$ . . . .	102
---	-----

# Symbolverzeichnis

Vektorielle bzw. tensorielle Größen werden im Text durch **Fettdruck** gekennzeichnet. In den Gleichungen wird die Indexschreibweise verwendet, in der die Einsteinsche Summationskonvention verwendet wird. Diese besagt, dass in einem multiplikativen Term über doppelt vorkommende Indizes zu summieren ist. Dabei wird für das Skalarprodukt zweier Vektoren folgende Schreibweise verwendet:

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{x} := X_i x_i .$$

Für Tensoren zweiter ( $\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}$ ) und vierter Stufe ( $\mathbf{D}$ ) sei

$$\boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma} := \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} , \quad \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon} := D_{ijkl} \varepsilon_{kl} .$$

Ein Komma vor einem unteren Index bedeutet, dass die Größe bezüglich der entsprechenden Koordinatenrichtung partiell differenziert wird.

## Griechische Buchstaben:

Symbol	Bedeutung	siehe
$\ \cdot\ $	euklidische Norm	(3.76)
$\tilde{\alpha}$	Winkel zwischen Spannung und Orientierungsrichtung	(3.78)
$\alpha^*$	Wärmeübertragungskoeffizient	(3.45a)
$\alpha$	Winkel zwischen zwei Vektoren	(3.77)
$\beta^\sigma$	spannungsinduzierter Martensitanteil	
$\beta^T$	thermisch induzierter Martensitanteil	
$\beta^M$	Martensitanteil	
$\beta^A$	Austenitanteil	
$\Delta\sigma_i, \Delta T_i$	Breite der Umwandlungszonen im Phasenumwandlungsdiagramm	
$\Delta u, \Delta s$	Differenz zwischen inneren Energien bzw. der Entropien von Austenit und Martensit	(3.37)
$\delta$	Kroneckersymbol	(2.6d)

**Griechische Buchstaben:**

Symbol	Bedeutung	siehe
$\delta$	kleine reelle Zahl	Kap. 4.1.1
$\varepsilon$	totale Dehnung	
$\varepsilon^{\text{tr}}$	transformationsinduzierte Dehnung (TID)	Kap. 1.4, (3.13)
$\varepsilon^e$	elastische Dehnung	
$\varepsilon^p$	plastische Dehnung	
$\varepsilon_\sigma, \varepsilon_\sigma^e, \varepsilon_\sigma^{\text{tr}}$	Transformierte Dehnungen	(3.71)
$\Phi_0$	reversibler Anteil der freien Energie	(3.26a)
$\Phi$	freie Helmholtz-Energie	(2.6c)
$\Phi^*$	Konfigurationsenergie in der freien Helmholtz-Energie	(3.16a)
$\Phi^{MM}, \Phi^{MA}$	Materialparameter für die Definition der Konfigurationsenergie der freien Helmholtz-Energie	(3.16)
$\phi_i$	Zustandsvariable mit beliebiger tensorieller Eigenschaft	Kap. 2.1
$\gamma$	lineare thermische Ausdehnung	(3.26b)
$\kappa$	Richtungstensor bei der Entwicklung von TID	(3.13)
$\lambda_i, \gamma_i$	Multiplikatoren in der Evolutionsgleichungen	(3.66)
$\lambda_{4,5}, \lambda_{4,5}^{\min}, \lambda_{4,5}^{\max}$	Multiplikatoren in Evolutionsgleichung im Fall von reiner Reorientierung	(3.89)
$\lambda, \mu$	Lamésche Koeffizienten	(3.26c)
$\nu$	Querkontraktionszahl	(3.26c)
$\Omega$	Körper mit Oberfläche $\partial\Omega$	Kap. 3.2
$\Pi_A, \Pi_\sigma, \Pi_T$	Materialparameter im neuen Modell	
$\rho$	Dichte	
$\sigma_{eq}$	Vergleichsspannung	
$\sigma_0, \sigma_M, \sigma_A$	Spannungsgrenzen der Phasenumwandlung	Kap. 1.6
$\sigma_i$	Spannungsgrenzen der Phasenumwandlung bei homogener Phasenverteilung	(3.63)
$\sigma$	Spannung	
$\tilde{\sigma}$	Spannungsdeviator	(3.33)
$\theta, \zeta, \omega$	Parameter der Anisotropie	(3.11)
$\Theta$	thermodynamischer Zustand	Kap. 2.1
$\Theta, \Omega$	Parameter des Modells von TANAKA	Kap. 3.1.2
$\xi_i$	innere Variablen	Kap. 2.1
$\Xi$	materielles System	Kap. 2.1

## Kleine lateinische Buchstaben

Symbol	Bedeutung	siehe
$b_A, c_A$	Materialparameter im Modell von TANAKA	(3.3)
$b_M, c_M$	Materialparameter im Modell von TANAKA	(3.3)
$c_1, c_2, c_3, c_k$	Steigungen der NKL im neuen Modell	(3.53)
$c_m, c_a, c_x$	Steigungen im Phasendiagramm nach BRINSON	Abb. 3.2
$c_v$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen	(3.26b)
$f_i$	Formfunktionen der Phasenumwandlung	(3.63)
$f_{\sigma T}$	skalarwertige Funktion bei Def. der thermodyn. Kraft	(3.41)
$f_{\sigma}, f_T$	skalarwertige Funktion bei Def. der thermodyn. Kraft	(3.37)
$g_i$	Phasenumwandlungsbedingungen	(3.63)
$\mathbf{h}$	Wärmestromvektor pro Flächeneinheit	(2.5e)
$k^*$	Wärmeleitfähigkeit der Legierung	(3.43d)
$k$	maximaler Betrag der transformationsinduzierten Dehnung	(3.7)
$m$	Masse	
$\mathbf{p}$	Impuls	
$\mathbf{q}$	Wärmefluss	(3.43d)
$r$	Wärmequelle (pro Masseneinheit)	(2.5e)
$s$	spezifische Entropie (pro Masseneinheit)	(2.6a)
$t$	Zeit	
$\mathbf{t}, \mathbf{k}$	Flächen- und Volumenkräfte	(2.5d)
$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$	Verschiebungsvektor	
$u_0$	Spezifische innere Energie	Kap. 2.3.3

## Große lateinische Buchstaben

Symbol	Bedeutung	siehe
$A_{s0}, A_{f0}$	Anfangs- und Endtemperaturen der Martensit-Austenit Umwandlung in entlastetem Zustand	Kap. 1.6
$\mathbf{D}$	Steifigkeitstensor oder Elastizitätstensor	(3.26c)
$D$	Dissipationsleistung, Dissipationsfunktion	(2.6d)
$E$	Elastizitätsmodul	(3.26c)
$F$	Wärmequelle	(3.43c)
$F_i$	Fließbedingungen bei Modellen mit plastischer Analogie	(3.9)
$J_1, J_2, J_3$	skalare Invarianten des Spannungstensors	(3.12)
$K$	kinetischen Energie	(2.5b)
$I_{\mathcal{K}}$	Indikatorfunktion	(3.26f)
$M_{s0}, M_{f0}$	Anfangs- und Endtemperaturen der Austenit-Martensit Umwandlung in entlastetem Zustand	Kap. 1.6
$N_0$	Anzahl von Zustandsvariablen	Kap. 2.1
$P$	Leistung aller äußeren Kräfte	Kap. 2.3.3
$Q$	Geschwindigkeit der Wärmezufuhr	Kap. 2.3.3
$T$	Temperatur	
$T_0$	Gleichgewichtstemperatur der Phasen	(3.26b)
$T^0(\mathbf{x})$	Anfangsbedingung der Temperaturverteilung im Körper	(3.45b)
$T_{max}$	Höchste Temperatur unter der Simulation	
$U$	Innere Energie	(2.5b)
$W$	Gesamtenergie des Systems	Kap. 2.3.3
$\partial_{(x)}f$	Subdifferential von $f$ nach $x$	(3.38)
$\mathbf{X}^\sigma, \mathbf{X}^{\sigma T}$	tensorielle thermodynamische Kräfte	
$X^T$	skalare thermodynamische Kraft	
$\mathbf{X}_i$	zur inneren Variable $\xi_i$ assoziierte Größe, dissipative Kraft	(2.14)
$\mathbf{X}_{\parallel}^\sigma, \mathbf{X}_{\perp}^\sigma$	Komponenten von $\mathbf{X}^\sigma$	(3.79)

**Verwendete Abkürzungen**

Symbol	Bedeutung	siehe
MPhU	martensitische Phasenumwandlung	Kap. 3
NKL	Nullkraftlinie, Ort in $T - \sigma$ -Raum, wo die thermodynamische Kraft verschwindet	Kap. 3.2.5
SMA	Formgedächtnislegierung	Kap. 3
TID	Transformationsinduzierte Dehnung	Kap. 3



# Literaturverzeichnis

- [1] M. Achenbach und I. Müller. Creep and yield in martensitic transformations. *Ingenieur-Archiv*, 53(2):73–83, 1983.
- [2] J. Altenbach und H. Altenbach. *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. Stuttgart : Teubner, 1994.
- [3] H. Andrä, O. Hesebeck, L. Juhász und E. Schnack. Simulation des thermo-mechanischen Verhaltens von Formgedächtnislegierungen unter mehrachsiger nichtproportionaler Belastung. *ZAMM*, 81(S2):329-330, 2001.
- [4] F. Auricchio und J. Lubliner. A uniaxial model for shape-memory alloys. *International Journal of Solids and Structures*, 34(27):3601–3618, 1997.
- [5] F. Auricchio und R.L. Taylor. Shape-memory alloys: Modelling and numerical simulations of the finite-strain superelastic behavior. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 143(1-2):175–194, 1997.
- [6] F. Auricchio, R.L. Taylor und J. Lubliner. Shape-memory alloys: Macromodelling and numerical simulations of the superelastic behavior. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 146(3-4):281–312, 1997.
- [7] K.-J. Bathe. *Finite-Element-Methode*. Berlin, Heidelberg : Springer, 1986.
- [8] A. Bekker und L.C. Brinson. Phase diagram based description of the hysteresis behavior of shape memory alloys. *Annals of Mathematics*, 46(10):3469–3476, 1998.
- [9] H. Benzaoui, C. LExcellent, N. Chaillet, B. Lang und A. Bourjault. Experimental study and modeling of a TiNi shape memory alloy wire actuator. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 8(7):619–629, 1997.
- [10] K. Bhattacharya und R.V. Kohn. Elastic energy minimization and the recoverable strains of polycrystalline shape-memory materials. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 139(2):99–180, 1997.

- [11] Z. Bo und D.C. Lagoudas. Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading. Part I: Theoretical derivations. *International Journal of Engineering Science*, 37(9):1089–1140, 1999.
- [12] M.L. Boubakar, S. Moyne, C. Lexcellent und Ph. Boisse. SMA pseudoelastic finite strains. Theory and numerical application. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 121(1):44–47, 1999. Special Issue on Shape Memory Alloys.
- [13] G. Bourbon, C. Lexcellent und S. Leclercq. Modelling of the non isothermal cyclic behaviour of a polycrystalline Cu-Zn-Al shape memory alloy. *Journal de Physique IV*, 5(Colloque C8 - Part I):221–226, 1995. (R. Gotthardt und J. van Humbeeck (Hrsg.), ICOMAT 95 - International Conference on Martensitic Transformations.)
- [14] J.G. Boyd und D.C. Lagoudas. A thermodynamical constitutive model for shape memory materials. Part I: The monolithic shape memory alloy. *International Journal of Plasticity*, 12(6):805–842, 1996.
- [15] L.C. Brinson. One-dimensional constitutive behavior of shape memory alloys: Thermomechanical derivation with non-constant material functions and redefined martensite internal variable. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 4(2):229–242, 1993.
- [16] L.C. Brinson, A. Bekker und S. Hwang. Deformation of shape memory alloys due to thermo-induced transformation. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 7(1):97–107, 1996.
- [17] L.C. Brinson und M.S. Huang. Simplifications and comparisons of shape memory alloy constitutive models. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 7(1):108–118, 1996.
- [18] L.C. Brinson und R. Lammering. Finite element analysis of the behavior of shape memory alloys and their applications. *International Journal of Solids and Structures*, 30(23):3261–3280, 1993.
- [19] W.J. Buehler, R.C. Wiley und J.V. Gilfrich. Effect of low-temperature phase changes on mechanical properties of alloys near composition TiNi. *Journal of Applied Physics*, 34(5):1475–1477, 1963.
- [20] R.W. Cahn, P. Haasen und E.J. Kramer (Hrsg.) *Materials science and technology. Band 5: Phase transformations in materials*, Weinheim [u.a.]: VCH, 1991.
- [21] E. Cesari, C. Seguí und A. Amengual. Subloop behaviour in the thermoelastic martensitic transformations. *Technical Report*, ICOMAT 92, Monterey Institute for Advanced Studies, Monterey, 1993.

- [22] J.-L. Chaboche. Thermodynamic formulation of constitutive equations and application to the viscoplasticity and viscoelasticity of metals and polymers. *International Journal of Solids and Structures*, 34(18):2239–2254, 1997.
- [23] L.C. Chang und T.A. Read. Plastic deformation and diffusionless phase changes in metals - The gold-cadmium beta phase. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, 191(1):47–52, 1951.
- [24] S.R. de Groot und P. Mazur. *Non-equilibrium thermodynamics*. Amsterdam : North-Holland, 1962.
- [25] S.R. de Groot und P. Mazur. *Grundlagen der Thermodynamik irreversibler Prozesse*. Mannheim : BI-Hochschultaschenbücher, 1969.
- [26] S. Eucken. *Schmelzspinnen von Legierungen mit Formgedächtnis*. Düsseldorf : VDI, 1987.
- [27] F. Falk. Wie hängt die freie Energie einer Memory-Legierung von der Verzerrung und der Temperatur ab? *ZAMM*, 60:118–120, 1980.
- [28] M. Frémond. Shape memory alloys. A thermomechanical model. In K.-H. Hoffmann und J. Sprekels (Hrsg.), *Free Boundary Problems - Theory and Applications I-II*, S. 295–306. London : Longman, 1989.
- [29] M. Frémond. Shape memory alloy. A thermomechanical macroscopic theory. In M. Frémond und S. Miyazaki (Hrsg.), *Shape Memory Alloys*, CISM Courses and Lectures, S. 3–68. Wien, New York : Springer, 1996.
- [30] M. Frémond und A. Visitin. Dissipation dans le changement de phase. Surfusion. Changement de phase irréversible. *Comptes rendus de l'Académie des Sciences, Série 2*, 301(18):1265–1268, 1985.
- [31] X.J. Gao und L.C. Brinson. A simplified multivariant SMA model based on invariant plane nature of martensitic transformation. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 13(12):795–810, 2002.
- [32] X.J. Gao, M.S. Huang und L.C. Brinson. A multivariant micromechanical model for SMAs. Part I: Crystallographic issues for single crystal model. *International Journal of Plasticity*, 16(10-11):1345–1369, 2000.
- [33] Y. Gillet, E. Patoor und M. Berveiller. Modélisation numérique des alliages à mémoire de forme. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 7(8):137–164, 1998.
- [34] F.-U. Glasauer. *Gedächtnislegierungen. Experimentelle Untersuchungen und Aufbau einer Wärmekraftmaschine*. Dissertation, TU Berlin, 1996.

- [35] I. Gyarmati. *Non-equilibrium thermodynamics: Field theory and variational principles*. Berlin : Springer, 1970.
- [36] A.A. Hamers und C.M. Wayman. Shape memory behavior in Fe-Mn-Co alloys. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 25(12):2723–2728, 1991.
- [37] W. Han und B.D. Reddy. Computational plasticity: The variational basis and numerical analysis. *Computational Mechanics Advances*, 2(4):283–400, 1995.  
([http://www.math.uiowa.edu/ftp/comp\\_math\\_rep/report-68.ps.Z](http://www.math.uiowa.edu/ftp/comp_math_rep/report-68.ps.Z))
- [38] D. Helm. *Formgedächtnislegierungen*. Dissertation, Uni. Gesamthochschule Kassel, 2001.
- [39] D. Helm und P. Haupt. Shape memory alloys: Thermomechanical modeling and finite element simulation at finite strains. In Ch.S. Lynch (Hrsg.), *SPIE's 7th Annual International Symposium on Smart Structures and Materials, Band 3992 - Active Materials: Behavior and Mechanics*, S. 548–559. Bellingham (WA) : SPIE, 2000.
- [40] E. Hornbogen. Alloys with shape memory - New materials for the technology of the future. *Zeitschrift für Metallkunde*, 5(41):488–493, 1987.
- [41] E. Hornbogen. *Legierungen mit Formgedächtnis*. Opladen : Westdeutscher Verlag, 1991.
- [42] E. Hornbogen und M. Thumann (Hrsg.). *Die martensitische Phasenumwandlung und deren werkstofftechnische Anwendungen*. Oberursel : DGM, 1986.
- [43] E. Hornbogen und H. Warlimont. *Metallkunde : Aufbau und Eigenschaften von Metallen und Legierungen*, 4. Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer, 2001.
- [44] Y. Huo und I. Müller. Nonequilibrium thermodynamics of pseudoelasticity. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 5(3):163–204, 1993.
- [45] L. Juhász. Modellierung von SMA (in Ungarisch). Diplomarbeit, TU Budapest, 1997.
- [46] L. Juhász, H. Andrä und O. Hesebeck. A simple model for SMA under multi-axial non-proportional loading. In K.-H. Hoffmann (Hrsg.), *Smart Materials, Proceedings of the 1st Caesarium, Bonn, November 17-19, 1999*, S. 51–65. Berlin : Springer, 2001.

- [47] L. Juhász, H. Andrä und O. Hesebeck. A Constitutive model of shape memory alloys based on viscoplastic like evolution equations. *Periodica Polytechnica / Mechanical Engineering*, 44(1):59–69, 2000.
- [48] L. Juhász, H. Andrä und O. Hesebeck. Simulation of the thermomechanical behavior of shape memory alloys under multi-axial non-proportional loading. In Ch.S. Lynch (Hrsg.), *SPIE's 7th Annual International Symposium on Smart Structures and Materials, Band 3992 - Active Materials: Behavior and Mechanics*, S. 484–495. Bellingham (WA) : SPIE, 2000.
- [49] L. Juhász, O. Hesebeck, H. Andrä und E. Schnack. Macroscopic modelling of shape memory alloys under non-proportional thermo-mechanical loadings. Part I: Thermodynamical fundamentals. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 13(12):825–836, 2002.
- [50] L. Juhász et al. Macroscopic modelling of shape memory alloys under non-proportional thermo-mechanical loadings. Part II: Reorientation, numerical results. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 2004 (in Vorbereitung).
- [51] A.S. Khan und S. Huang. *Continuum theory of plasticity*. New York : Wiley, 1995.
- [52] M. Kofler, G. Bitsch und M. Komma. *Maple. Einführung, Anwendung, Referenz*, 5. Auflage. München : Addison-Wesley, 2002.
- [53] M. Kohl, E. Just, W. Pflöging und S. Miyazaki. SMA microgripper with integrated antagonism. *Sensors and Actuators A - Physical*, 83(1-3):208–213, 2000.
- [54] S. Leclercq, G. Bourbon und C. Lexcellent. Plasticity like model of martensite phase transition in shape memory alloys. *Journal de Physique IV*, 5(Colloque C2):513–518, 1995. (A. Planes, J. Ortín und L. Mañosa (Hrsg.), ESOMAT 94 - IIIrd European Symposium on Martensitic Transformations.)
- [55] S. Leclercq und C. Lexcellent. A general macroscopic description of the thermomechanical behavior of shape memory alloys. *Journal of the mechanics and physics of solids*, 44(6):953–980, 1996.
- [56] J. Lemaitre. *A course on damage mechanics*, 2. Auflage. Berlin : Springer, 1996.
- [57] C. Lexcellent, S. Leclercq, B. Gabry und G. Bourbon. The two way shape memory effect of shape memory alloys: An experimental study and a phenomenological model. *International Journal of Plasticity*, 16(10-11):1155–1168, 2000.

- [58] C. Lexcellent, V. Torra und B. Raniecki. Hystérésis d'alliages thermoélastiques, étude comparative de quelques modèles de comportement des alliages à mémoire de forme. *Journal de Physique III*, 3(7):1463–1477, 1993.
- [59] C. Liang und C.A. Rogers. One-dimensional thermomechanical constitutive relations for shape memory materials. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 1:207–234, 1990.
- [60] J. Lubliner und F. Auricchio. Generalized plasticity and shape-memory alloys. *International Journal of Solids and Structures*, 33(7):991–1003, 1996.
- [61] G.A. Maugin und W. Muschik. Thermodynamics with internal variables. Part I: General concepts. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 19(3):217–249, 1994.
- [62] S. Miyazaki. Development and characterization of shape memory alloys. In M. Frémond und S. Miyazaki (Hrsg.), *Shape memory alloys*, CISM Courses and Lectures, S. 69–147. Wien, New York : Springer, 1996.
- [63] G. Müller und C. Groth. *FEM für Praktiker. Band 1: Grundlagen*, 5. Auflage. Renningen-Malmsheim : Expert, 2002.
- [64] I. Müller. A model for a body with shape-memory. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 70:61–77, 1979.
- [65] I. Müller und G. Zak. Thermodynamics of twinning. *Journal de Physique IV*, 5(Colloque C8 - Part I):197–201, 1995. (R. Gotthardt und J. van Humbeeck (Hrsg.), ICOMAT 95 - International Conference on Martensitic Transformations.)
- [66] W. Muschik (Hrsg.) *Non-equilibrium thermodynamics with applications to solids : Dedicated to the memory of Professor Theodor Lehmann*. Wien, New York : Springer, 1993.
- [67] K. Nasitta und H. Hagel. *Finite Elemente. Mechanik, Physik und nichtlineare Prozesse*. Berlin, Heidelberg : Springer, 1992.
- [68] S. Nemat-Nasser. Certain basic issues in finite-deformation continuum plasticity. *Meccanica*, 25:223–229, 1990.
- [69] Z. Nishiyama. *Martensitic transformation*. New York : Academic Press, 1978.
- [70] V. Novák, P. Sittner und N. Zárubová. Anisotropy of transformation characteristics of Cu-base shape memory alloys. *Materials Science and Engineering A - Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 234-236:414–417, 1997.

- [71] C. Oberste-Brandenburg. *Ein Materialmodell zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation unter Berücksichtigung der transformationsinduzierten Plastizität*. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 1999.
- [72] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. I. *Physical Review*, 37:405–426, 1931.
- [73] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. II. *Physical Review*, 38:2265–2279, 1931.
- [74] E. Patoor, P. Barbe, A. Eberhardt und M. Berveiller. Internal stress effect in the shape memory behaviour. *Journal de Physique IV*, 1(Colloque C4):95–100, 1991. (G. Guénin (Hrsg.), European Symposium on Martensitic Transformation and Shape Memory Properties.)
- [75] P. Perin, G. Bourbon, B.C. Goo, A. Charai, J. Bernardini und C. Lexcellent. Growth and characterization of shape memory Cu-Zn-Al single crystals. *Journal de Physique IV*, 5(Colloque C2):263–268, 1995. (A. Planes, J. Ortín und L. Mañosa (Hrsg.), ESOMAT 94 - IIIrd European Symposium on Martensitic Transformations.)
- [76] J. Perkins. *Shape memory effects in alloys*. New York und London : Plenum, 1975.
- [77] Á. Pethő. Investigation of behaviour of shape memory alloys. In K. Molnár, Gy. Ziaja und G. Vörös (Hrsg.), *Proceedings of the First Conference on Mechanical Engineering*, S. 209–213. Budapest : Springer, 1998.
- [78] Á. Pethő. *Formgedächtnislegierungen (in Ungarisch)*. Dissertation, TU Budapest, 2003.
- [79] J. Prohászka. *Einführung in die Metallurgie (in Ungarisch)*. Budapest : Tankönyvkiadó, 1988.
- [80] J. Prohászka und M.G. Kristyákné. Formgedächtnislegierungen (in Ungarisch). *Kohászat*, 121(7):290–301, 1988.
- [81] M.A. Qidwai und D.C. Lagoudas. Numerical implementation of a shape memory alloy thermomechanical constitutive model using return mapping algorithms. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 47(6):1123–1168, 2000.
- [82] M.A. Qidwai und D.C. Lagoudas. On thermomechanics and transformation surfaces of polycrystalline NiTi shape memory alloy material. *International Journal of Plasticity*, 16(10-11):1309–1343, 2000.

- [83] B. Raniecki, L. Dietrich, Z.L. Kowalewski, G. Socha, S. Miyazaki, K. Tanaka, und A. Ziolkowski. Experimental methodology for NiTi shape memory alloy testing under complex stress state. *Archives of Mechanics (Archiwum Mechaniki Stosowanej)*, 51(6):727–744, 1999.
- [84] B. Raniecki und C. Lexcellent.  $R_L$ -models of pseudoelasticity and their specification for some shape memory solids. *European Journal of Mechanics A - Solids*, 13(1):21–50, 1994.
- [85] B. Raniecki und C. Lexcellent. Thermodynamics of isotropic pseudoelasticity in shape memory alloys. *European Journal of Mechanics A - Solids*, 17(2):185–205, 1998.
- [86] B. Raniecki, C. Lexcellent und K. Tanaka. Thermodynamic models of pseudoelastic behavior of shape memory alloys. *Archives of Mechanics (Archiwum Mechaniki Stosowanej)*, 44(3):261–284, 1992.
- [87] B. Raniecki, S. Miyazaki, K. Tanaka, L. Dietrich und C. Lexcellent. Deformation behaviour of TiNi shape memory alloy undergoing R-phase reorientation in torsion-tension (compression) tests. *Archives of Mechanics (Archiwum Mechaniki Stosowanej)*, 51(6):745–784, 1999.
- [88] B. Raniecki, K. Tanaka und A. Ziolkowski. Testing and modeling of NiTi SMA at complex stress state - Selected results of Polish-Japanese research cooperation. *Material Science Research International, Special Technical Publication*, 2:327–334, 2001.
- [89] R.E. Reed-Hill. *Physical metallurgy principles*, 2. Auflage. New York : Van Nostrand, 1973.
- [90] R.T. Rockafellar. *Convex analysis*. Princeton : Princeton University Press, 1970.
- [91] R.T. Rockafellar. *The theory of subgradients and its applications to problems of optimization*. Berlin : Heldermann, 1981.
- [92] C. Rogueda, P. Vacher, C. Lexcellent, L. Contardo und G. Guénil. Pseudoelastic behaviour and two way memory effect in Cu-Zn-Al alloys. *Journal de Physique IV*, 1(Colloque C4):409–414, 1991. (G. Guénil (Hrsg.), European Symposium on Martensitic Transformation and Shape Memory Properties.)
- [93] A. Sato und T. Mori. Development of a shape memory alloy Fe-Mn-Si. *Materials Science and Engineering A - Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 146(1-2):197–204, 1991.
- [94] S. Seelecke. *Zur Thermodynamik von Formgedächtnislegierungen*. Düsseldorf : VDI, 1996.

- [95] S. Seelecke. Equilibrium thermodynamics of pseudoelasticity and quasiplasticity. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 8(5):309–322, 1996.
- [96] P. Sittner, Y. Hara und M. Tokuda. Experimental study on the thermoelastic martensitic transformation in shape memory alloy polycrystal induced by combined external forces. *Metallurgical and Material Transactions A - Physical Metallurgy and Materials Science*, 26(11):2923–2935, 1995.
- [97] P. Sittner und V. Novák. Anisotropy of martensitic transformations in modeling of shape memory alloy polycrystals. *International Journal of Plasticity*, 16(10-11):1243–1268, 2000.
- [98] B. Skrotzki. *Temperaturen und Verlauf der martensitischen Umwandlung in Eisenlegierungen*. Düsseldorf : VDI, 1992.
- [99] G.E. Stavroulakis. Nonsmooth computational mechanics algorithms, quasidifferentiability and related topics. *Advances in Engineering Software*, 26(3):171–184, 1996.
- [100] D. Stöckel, E. Hornbogen, F. Ritter und P. Tautzenberger. *Legierungen mit Formgedächtnis. Industrielle Nutzung des Shape-Memory-Effektes. Grundlagen, Werkstoffe, Anwendungen*. Ehningen bei Böblingen : Expert, 1988.
- [101] K. Sulzmann. *Thermodynamik irreversibler Vorgänge bei grossen Verformungen*. Dissertation, TH Aachen, 1968.
- [102] K. Tanaka. A thermomechanical sketch of shape memory effect: One-dimensional tensile behavior. *Research Mechanics*, 18(3):251–263, 1986.
- [103] K. Tanaka, T. Hayashi und Y. Itoh und H. Tobushi. Analysis of thermomechanical behavior of shape memory alloys. *Mechanics of Materials*, 13(3):207–215, 1992.
- [104] K. Tanaka, S. Kobayashi und Y. Sato. Thermomechanics of transformation pseudoelasticity and shape memory effect in alloys. *International Journal of Plasticity*, 2(1):59–72, 1986.
- [105] K. Tanaka und S. Nagaki. A thermomechanical description of materials with internal variables in the process of phase transitions. *Ingenieur-Archiv*, 51(5):287–299, 1982.
- [106] K. Tanaka, F. Nishimura, T. Hayashi, H. Tobushi und C. LExcellent. Phenomenological analysis on subloops and cyclic behavior in shape memory alloys under mechanical and/or thermal loads. *Mechanics of Materials*, 19(4):281–292, 1995.

- [107] K. Tanaka, F. Nishimura und H. Tobushi. Phenomenological analysis on subloops in shape memory alloys due to incomplete transformation. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 5(4):487–493, 1994.
- [108] J. van Humbeeck. General aspects of shape memory alloys. In *Memory Alloys for New Seismic Isolation and Energy Dissipation Devices. Manside Project, Final Workshop*, Band 2, S. II9–II44, Servizio Sismico Nazionale : Rom, 1999.  
(<http://www.serviziosismico.it/prog/1999/Manside/atti/index.html>)
- [109] J. Verhás. *Thermodynamik und Rheologie (in Ungarisch)*. Budapest : Műszaki Könyviadó, 1985.
- [110] G. Wörsching. *Numerische Simulation des Verhaltens von Materialien mit Formgedächtnis*. Dissertation, TU München, 1993.
- [111] G. Wörsching. Numerical simulation of the Frémond model for shape memory alloys. *ZAMM*, 76(4):273–276, 1996.
- [112] J.H. Yang, H. Chen und C.M. Wayman. Development of Fe-based shape memory alloys associated with face-centered cubic-hexagonal close-packed martensitic transformation. Part I: Shape memory behavior. *Metallurgical and Material Transactions A - Physical Metallurgy and Materials Science*, 23(5):1431–1437, 1992.
- [113] H. Ziegler und Ch. Wehrli. The derivation of constitutive relations from the free energy and the dissipation function. *Advances in Applied Mechanics*, 25:183–238, 1987.
- [114] O.C. Zienkiewicz. *Methode der Finite Elemente*, 2. Auflage. München : Hanser, 1984.
- [115] A. Ziolkowski und B. Raniecki. On the macroscopic free energy potential for shape memory alloys treated as a two-phase continuum. *Archives of Mechanics (Archiwum Mechaniki Stosowanej)*, 51(6):885–911, 1999.