

# **Die Übertragung von mikrostrukturellen Eigenschaften aus der diskreten Versetzungsdynamik in Kontinuumsbeschreibungen**

Zur Erlangung des akademischen Grades  
**Doktor der Ingenieurwissenschaften**  
der Fakultät für Maschinenbau  
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte  
**Dissertation**  
von

Dipl.-Ing. Markus Stricker

Tag der mündlichen Prüfung: 24.1.2017  
Hauptreferent: Prof. Dr. rer. nat. Peter Gumbsch  
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Dierk Raabe



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz (CC BY-SA 4.0): <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de>



## Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand am Institut für Angewandte Materialien – Computational Materials Science am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) in einem wissenschaftlich inspirierenden und gleichzeitig freundschaftlichen Umfeld. Sie ist eingebettet in die Forschergruppe FOR1650 *Dislocation based plasticity* und wurde im Rahmen des Projekts WE3544/5-1 der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) durchgeführt.

Besonderer Dank gebührt Prof. Dr. Peter Gumbsch dafür, dass er mir die Möglichkeit eröffnete, am Institut diese Arbeit durchzuführen - sowie für die Unterstützung und die wertvollen Diskussionen. Seine Neugier und sein Antrieb sind mir zum Vorbild geworden. Die Freiheit, die ich während der Durchführung meiner Arbeit genießen durfte, weiß ich sehr zu schätzen.

Prof. Dr. Dierk Raabe danke ich hiermit herzlich für die Übernahme des Korreferats und sein Interesse an dieser Arbeit.

Bei Dr. Daniel Weygand bedanke ich mich für die vielen Gespräche wissenschaftlicher, technischer aber auch privater Natur, die maßgeblich zum Gelingen meiner Arbeit beitrugen. Zudem danke ich ihm für seine Ermutigung und Motivation, Dingen auf den Grund zu gehen. Seine Art hat meinen Blick auf die Wissenschaft geprägt.

Außerdem möchte ich mich bei allen Kollegen und ehemaligen Kollegen für das freundschaftliche Miteinander und offene Türen bedanken. Besonderer Dank gilt meinem Zimmerkollegen Severin Schmitt für die gute Zusammenarbeit, die inspirierenden Diskussionen aber auch die Freundschaft, die sich über die Jahre entwickelt hat.

Der Systemadministratorin Yiyue Li danke ich für die technische Unterstützung.

Unserem Sekretariat mit Andrea Doer und Ines Knoch danke ich herzlich für die Unterstützung bei allen administrativen Angelegenheiten.

Meinen Eltern sage ich danke für die Unterstützung und beständige Ermutigung, meinen Weg zu suchen, finden und dann auch zu gehen.

Zuletzt danke ich meiner Frau Mirjam für ihre konstante Unterstützung. Ich bin täglich dankbar, dass wir uns gefunden haben und freue mich darauf, unseren Weg weiter gemeinsam zu gehen.

*Karlsruhe, Oktober 2016*

Markus Stricker



# Kurzfassung (Abstract)

Physikalisch begründete versetzungsdichtebasierte Modelle zur Beschreibung der plastischen Verformung auf Kontinuumsebene benötigen in homogenisierter Form die Information der darunterliegenden Mikrostruktur. Mit Hilfe dreidimensionaler Versetzungsdynamiksimulationen wird ein Modell zur Bildung der gleitfähigen Reaktion in einer Ratenformulierung entwickelt. Außerdem dienen weitere Simulationen dazu, einen Beitrag zum Verständnis der Versetzungswechselwirkung mit und durch Korngrenzen im Bezug auf die Kontinuumsmodellierung derselben zu leisten. Ein um die gleitfähige Reaktion erweitertes versetzungsdichtebasiertes Kontinuumsmodell zeigt den Effekt der Erweiterung: an einem Minimalbeispiel lassen sich Gleitsysteme mit Versetzungsdichte bevölkern, die vorher frei von Versetzungen waren. Die Ergebnisse der Simulationen zur Wechselwirkung von Versetzungen durch Korngrenzen zeigen zum einen, dass das verwendete Modell der effektiven Transmission durch Superposition im diskreten Fall im Allgemeinen gut funktioniert. Zum anderen wird deutlich, dass ein Kontinuumsmodell einer Korngrenze nicht ausschließlich durch eine Fließgrenze und ein Verfestigungsgesetz abgebildet werden kann, da die Dehnungsprofile innerhalb einzelner Körner durch die Spannungswechselwirkung von Versetzungen links und rechts der Korngrenze beeinflusst werden.

Physically motivated dislocation density based models for the description of plastic deformation do need information about the underlying processes in a homogenized form. A rate formulation for the formation of the glissile junction for usage in continuum descriptions is developed by using three-dimensional Discrete Dislocation Dynamics. Furthermore, a contribution to the understanding of grain boundary modeling in Discrete Dislocation Dynamics as well as continuum descriptions is made. By extending an existing crystal plasticity model, the effect of the glissile junction is shown

with a minimal example: previously unpopulated glide systems can be populated through the new rate formulation. Additionally, it is shown, that continuum theories need an explicit model for the grain boundary and one part of it is the stress-interaction of dislocations left and right of the grain boundary.

# Veröffentlichungen

P. Stoyanov, P. A. Romero, R. Merz, M. Kopnarski, M. Stricker, P. Stemmer, M. Dienwiebel, und M. Moseler. Nanoscale sliding friction phenomena at the interface of diamond-like carbon and tungsten. *Acta Materialia*, 67: 395–408, 2014

M. Stricker, J. Gagel, S. Schmitt, K. Schulz, D. Weygand, und P. Gumbsch. On slip transmission and grain boundary yielding. *Meccanica*, 51(2):271–278, 2015

E. Bayerschen, M. Stricker, S. Wulfinghoff, D. Weygand, und T. Böhlke. Equivalent plastic strain gradient plasticity with grain boundary hardening and comparison to discrete dislocation dynamics. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 471(2184), 2015

M. Stricker und D. Weygand. Dislocation multiplication mechanisms - glissile junctions and their role on the plastic deformation at the microscale. *Acta Materialia*, 99:130–139, 2015

**Anmerkung:** Die letzten drei Veröffentlichungen entstanden während meiner Arbeit am Institut für Angewandte Materialien - Computational Materials Science und sind teilweise Vorarbeiten für die im Rahmen dieser Dissertation vorgestellten Ergebnisse. Einzelne, dort entnommene Ergebnisse, sind im Text durch eine Zitation kenntlich gemacht.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Kurzfassung (Abstract)</b>	<b>vii</b>
<b>1. Einleitung und Hintergrund</b>	<b>1</b>
<b>2. Plastizität, ein Multiskalenproblem</b>	<b>5</b>
2.1. Versetzungsreaktionen und Kaltverfestigung . . . . .	6
2.2. Versetzungs-Korngrenz-Wechselwirkung . . . . .	11
2.3. Verwendete Methoden . . . . .	18
2.3.1. Diskrete Versetzungsdynamik . . . . .	18
2.3.2. Kristallplastizität . . . . .	22
<b>3. Ergebnisse</b>	<b>31</b>
3.1. Gleitfähige Reaktion . . . . .	32
3.2. Korngrenzen . . . . .	50
3.2.1. Bikristall, eine Gleitebene, effektive Auslöschung .	51
3.2.2. Bikristall, Homogenisierung, ein Gleitsystem . . .	54
3.2.3. Bikristall, ein Gleitsystem, symmetrische Kippkorn- grenze . . . . .	57
3.2.4. Bikristall, ein Gleitsystem, symmetrische Drehkorn- grenze . . . . .	60
3.2.5. Bikristall, alle Gleitsysteme, symmetrische Dreh- korngrenze . . . . .	63
3.2.6. Trikristall mit Drehkorngrenzen unter Zugbelastung	67
<b>4. Diskussion</b>	<b>73</b>
4.1. Die gleitfähige Reaktion als Versetzungs-Multiplikations- mechanismus . . . . .	73
4.1.1. Einfluss der Probengröße . . . . .	74
4.1.2. Einfluss der Anfangsstruktur . . . . .	76

4.1.3.	Einfluss der aktivierten Gleitsysteme auf den plastischen Dehnungsanteil . . . . .	78
4.1.4.	Korrelation der Spannungsabfälle mit plastischer Dehnung aus Reaktionsprodukten . . . . .	80
4.1.5.	Vergleich gleicher Anfangsstrukturen mit und ohne gleitfähigem Reaktionsmechanismus . . . . .	81
4.1.6.	Entwicklung eines Kontinuumsmodells für die Bildung neuer Versetzungsdichte durch die gleitfähige Reaktion . . . . .	82
4.2.	Elastische Wechselwirkung von Versetzungen durch Korngrenzen . . . . .	89
4.2.1.	Effektiver Dehnungstransport in zwei Dimensionen und Vergleich mit CDD . . . . .	89
4.2.2.	Effektiver Dehnungstransport bei Verschmierung der Wechselwirkung . . . . .	91
4.2.3.	Die Korngrenze als Randbedingung und der Übergang zum Kontinuum . . . . .	93
4.2.4.	Der Vergleich von Dehnungsprofilen von Trikristallen aus der Versetzungsdynamik mit einem Kontinuumsmodell . . . . .	95
4.2.5.	Grenzen des Korngrenzmodells in der Versetzungsdynamik . . . . .	97
<b>5.</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>99</b>
<b>A.</b>	<b>Gleitsystemindizierung</b>	<b>101</b>
<b>B.</b>	<b>Nachbearbeitung von Daten</b>	<b>103</b>
B.1.	Sortierung der Daten für die Korrelationsanalyse. . . . .	103
B.2.	Berechnung des Vorfaktor C . . . . .	104
<b>C.</b>	<b>Details zur Implementierung des Modells in DAMASK</b>	<b>109</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>113</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1. Bildung einer nicht gleitfähigen Lomer-Reaktion. . . . .	8
2.2. Die gleitfähige Reaktion. . . . .	10
2.3. Reaktionsmatrix des <i>kfz</i> Kristalls. . . . .	10
2.4. Geometrische Parameter zur Beschreibung einer Korngrenze	15
2.5. Effektiver Dehnungstransport im zweidimensionalen Fall .	16
2.6. Dekomposition des finiten Randwertproblems. . . . .	19
2.7. Schematische Dekomposition des Deformationsgradienten.	23
3.1. Datensatz einer Simulation mit $d = 1.0 \mu\text{m}$ , FR-Quellen. .	36
3.2. Wie Abb. 3.1, aber relaxierte Anfangsstruktur. . . . .	37
3.3. Wie Abb. 3.1, aber direkt belastet. . . . .	38
3.4. Anteil $f_G$ der Versetzungsdichte aus gleitfähigen Reaktionen.	39
3.5. Wie Abbildung 3.4, aber Anteil der plastischen Dehnung .	40
3.6. Wie Abbildung 3.1, aber Zugrichtung ist $\langle 111 \rangle$ , initialisiert mit FR-Quellen. . . . .	41
3.7. Wie Abb. 3.1, aber: Zwei Simulationen mit gleicher An- fangsstruktur. . . . .	43
3.8. Vergleich der Simulationen mit und ohne gleitfähiger Reaktion.	44
3.9. Vergleich der Histogramme (von Mises Vergleichsspannung) mit und ohne gleitfähige Reaktionen. . . . .	45
3.10. Visualisierung der Verformung mit 25-facher Vergrößerung von zwei Simulationen mit gleicher Anfangsstruktur bei einer Totaldehnung von $\varepsilon_{\text{tot}} = 1.0 \%$ . . . . .	46
3.11. Fließspannung über $d\sqrt{\rho}$ bei $\varepsilon_{\text{pl}} = 0.2 \%$ der Simulationen mit und ohne gleitfähiger Reaktion. . . . .	48
3.12. Anzahl der Subnetzwerke pro Simulation über $d\sqrt{\rho}$ bei $\varepsilon_{\text{pl}} = 0.5 \%$ der Simulationen mit und ohne gleitfähiger Reaktion. . . . .	49

3.13. Anzahl der Knoten im Versetzungsnetzwerk mit mehr als 2 Verbindungen pro Simulation über $d\sqrt{\rho}$ bei $\varepsilon_{pl} = 0.5\%$ der Simulationen mit und ohne gleitfähiger Reaktion. . . . .	50
3.14. <i>Quasi</i> -2D Fall für die effektive Transmission von plastischer Dehnung. . . . .	52
3.15. Vergleich der Kristallvarianten (1)-(3). . . . .	53
3.16. Wie Abb. 3.15(b), aber CDD Simulationen. . . . .	53
3.17. Schema des Kontinuumsbilds der Wechselwirkung von Versetzungen über eine Korngrenze hinweg. . . . .	55
3.18. Vergleich von vier Bikristallen, Variation der Quellverteilung. . . . .	56
3.19. Symmetrische Kippkorngrenze von Bikristallen. . . . .	58
3.20. Inhomogene Scherspannungsverteilung im Bikristall ohne Versetzungen. . . . .	59
3.21. Gemittelte plastische Dehnungsprofile zu Abb. 3.19 für den $0^\circ$ Fall. . . . .	60
3.22. Versetzungswall in V-Form bei symmetrischer Kippkorngrenze. . . . .	61
3.23. Konvention für den Drehwinkel und Mikrostruktur nahe der Korngrenze. . . . .	61
3.24. Spannungs-Dehnungskurven der Drehwinkelkorngrenzen mit einem Gleitsystem. . . . .	62
3.25. Gemittelte plastische Dehnungsprofile entlang der Scherichtung für verschiedene Drehkorngrenzen. . . . .	63
3.26. Momentaufnahme eines Bikristalls mit symmetrischer Drehkorngrenze mit homogener Scherbelastung. . . . .	64
3.27. Spannung und Dehnungsprofile der einzelnen Körner (K1, K2) gegen ein elastisches Korn sowie der Bikristall mit und ohne Wechselwirkung. Hervorgehoben: konst. plastische Dehnung. . . . .	66
3.28. Spannung und Dehnungsprofile der einzelnen Körner (K1, K2) gegen ein elastisches Korn sowie der Bikristall mit und ohne Wechselwirkung. Hervorgehoben: gleiches Spannungsniveau. . . . .	67
3.29. Trikristall, schematisch mit Abmessungen und Zugrichtung. . . . .	68
3.30. emittelte Spannungs-Dehnungskurven von Trikristallen mit und ohne Transparenz für Spannungsfelder von Versetzungen. . . . .	69

3.31. Dehnungsprofile für Trikristalle mit $5^\circ$ (links) und $35^\circ$ Verdrehung des mittleren Kornes entlang der Zugrichtung bei $\varepsilon^{\text{pl}} = 0.1, 0.2, 0.3\%$ . . . . .	70
3.32. Wie Abb. 3.31, rechts, aber Gradientenplastizität. . . . .	71
4.1. $d\sqrt{\rho}$ als Funktion der Versetzungsdichte $\rho$ . . . . .	75
4.2. Anteil der plastischen Dehnung aus gleitfähigen Reaktionen für $d = 0.5\ \mu\text{m}$ . . . . .	75
4.3. Anteil der plastischen Dehnung aus gleitfähigen Reaktionen für $d = 2.0\ \mu\text{m}$ . . . . .	76
4.4. Anteil der plastischen Dehnung aus gleitfähigen Reaktionen, Mittelwerte in Intervallen und linearer Approximation. . .	79
4.5. Vorfaktor $C$ aus Formel 4.5 für alle Paarungen; ermittelt wie beschrieben in Anhang B.2. . . . .	84
4.6. Spannungs-Dehnungskurven des Plastizitätsmodells mit und ohne gleitfähiger Reaktion aus DAMASK. . . . .	87
4.7. Versetzungsdichteentwicklung einzelner Gleitsysteme mit (gestrichelt) und ohne (durchgezogen) gleitfähiger Reaktion aus DAMASK. . . . .	87
4.8. Vergleich des Dehnungsprofils aus DDD und CDD mit Kornrenzmodell. . . . .	91
4.9. Vergleich der DDD Profile mit elastischer Wechselwirkung mit den Dehnungsprofilen der Gradientenplastizität aus [Bayerschen et al., 2015b]. . . . .	96
4.10. Vergleich der DDD Profile ohne Wechselwirkung mit den Dehnungsprofilen der Gradientenplastizität aus [Bayerschen et al., 2015b]. . . . .	97
B.1. Visualisierung des Pearson $r$ -Wertes. . . . .	104
B.2. Versetzungsdichteentwicklung der einzelnen Gleitsysteme einer Simulation. . . . .	105
B.3. Plastische Dehnung pro Gleitsystem. . . . .	106
B.4. Gemessene positive Dichteproduktion von Gleitsystem D4 und Dichteproduktion. . . . .	107
C.1. Spannungs-Dehnungskurven der Plastizitätsmodelle dislocation, und disglissile mit und ohne gleitfähiger Reaktion. . . . .	110
C.2. Versetzungsdichteentwicklung einzelner Gleitsysteme. . . . .	111



# Tabellenverzeichnis

3.1.	Materialparameter, ähnlich Aluminium . . . . .	31
3.2.	Überblick über die Anzahl und $d\sqrt{\rho}$ Bereiche der Simulationen, sortiert nach der Kantenlänge $d$ . . . . .	33
3.3.	Zusammenfassung der Korrelationmittelswerte aus 331 Simulationen. . . . .	42
3.4.	Absolute Werte für die Verschiebung $u_x$ . . . . .	46
3.5.	Überblick über die Anzahl und $d\sqrt{\rho}$ Bereiche der Simulationen zum direkten Vergleich der gleitfähigen Reaktion mit und ohne gleitfähiger Reaktion. . . . .	47
4.1.	Reaktionstabelle für die gleitfähige Reaktion in DAMASK-Notation. . . . .	85
A.1.	Schmid-Boas Notation der Gleitsysteme aus Abb. 2.3 . . .	101
A.2.	Schmid-Boas Notation der Normalen- und Burgersvektoren im <i>kfz</i> Kristall . . . . .	101



# Symbole und Abkürzungen

## Abkürzungen

**KG** Korngrenze

**CDD** Continuum Dislocation Dynamics

**DAMASK** Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit

**FE** Finite Elemente

**FHG** Freiheitsgrad

**FR** Frank-Read

**GNV** geometrisch notwendige Versetzungen

**hdp** hexagonal dichtest gepackt

**K** Korn

**kfz** kubisch flächenzentriert

**krz** kubisch raumzentriert

**MD** Molekulardynamik

**OF** Oberfläche

## Symbole

$\alpha$  Index Gleitsystem

$a_{\alpha\beta}$  Interaktionsmatrix von Gleitsystemen

$A$  Fläche

$b$  Norm des Burgersvektors

$\mathbf{b}$  Burgersvektor

$C$  Skalierungsfaktor für das Ratenmodell zur Bildung gleitfähiger Reaktionen

$\varepsilon$  Dehnung

$f_G$  Anteil der Versetzungsdichte aus gleitfähigen Reaktionen

$\varphi$  Winkel

$G$  Schubmodul

$\gamma$  Scherung

$k_{\mathbf{B}}$  Boltzmann-Konstante

$\mathbf{m}^\alpha$  Gleitrichtung eines Gleitsystems  $\alpha$

$\mathbf{n}^\alpha$  Gleitebenennormale des Gleitsystems  $\alpha$

$\mathbf{n}$  Normalenvektor der Gleitebene

$\rho^\alpha$  Versetzungsdichte auf Gleitsystem  $\alpha$

$\rho$  Versetzungsdichte

$r$  Pearson Korrelationskoeffizient

$\tau$  Schubspannung

$\tau_{\mathbf{C}}^\alpha$  kritische Schubspannung eines Gleitsystems  $\alpha$

$\tau_{\mathbf{C}}$  kritische Schubspannung

$T$  Temperatur

$\tilde{\mathbf{u}}$  Verschiebungsfeld von Versetzungen im unendlichen Raum

$\hat{\mathbf{u}}$  Verschiebungsfeld des Festkörpers

$V$  Volumen



# 1. Einleitung und Hintergrund

Die korrekte Vorhersage plastischer Deformationsprozesse in metallischen Werkstoffen setzt physikalisch korrekte Modelle zur Beschreibung von mikrostrukturellen Vorgängen voraus. Technologisch ist die Möglichkeit der Vorhersage des mechanischen Verhaltens in allen metallverarbeitenden Branchen interessant. Vor allem die Bauteilminiaturisierung erfordert neue Modelle jenseits klassischer Kontinuumsplastizität [Kröner, 2001]. Eine physikalische Kontinuumsbeschreibung plastischer Verformung beruht auf dem Verständnis des Verhaltens der kleinsten Einheit der plastischen Verformung: der Bewegung einer Versetzung. Die plastische Verformung in ihrer kleinsten Einheit ist experimentell zwar prinzipiell messbar [Menter, 1956], in der Praxis jedoch schwer zu extrahieren, insbesondere die Bewegung von Versetzungen. Außerdem erschwert die Bestimmung der genauen Rand- und Anfangsbedingungen des Experiments die Interpretation der Daten. Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Methode der Diskreten Versetzungsdynamik bietet dagegen exakte Kontrolle über Rand- und Anfangsbedingungen sowie einen Blick in die Evolution der Mikrostruktur. Deshalb eignet sie sich als Grundlage zum Verständnis plastischer Vorgänge und ihre gemittelten Ergebnisse als Referenz für die Entwicklung von Kontinuumsmodellen.

Eine erfolgreiche Anwendung erfuhr die Versetzungsdynamik in der Versetzungs-Hindernis-Interaktion [Foreman und Makin, 1966, 1967], in zweidimensionalen Simulationen vom Versetzungsaufstau an Hindernissen [Amodeo und Ghoniem, 1988], ihr kollektives Verhalten [Gulluoglu et al., 1989, Amodeo und Ghoniem, 1990], sowie in den letzten etwa 20 Jahren auch immer mehr in drei Dimensionen [von Blanckenhagen et al., 2001, Weygand et al., 2002, Bulatov et al., 2004]. Schon bald konnten erste Parameter für Kontinuumsbeschreibungen aus Versetzungsdynamiksimulationen gewonnen werden [Madec et al., 2002, Devincere et al., 2006, 2008]

Als prägnantes Beispiel soll hier die Bestimmung der Verfestigungsparameter für die Matrixform der Taylor-Beziehung [Franciosi et al., 1980] dienen.

In Kontinuumsatheorien wird zur Beschreibung der Verfestigung häufig die Taylor-Beziehung verwendet, welche die Fließspannung  $\tau_c$  mit der Versetzungsdichte  $\rho$  verknüpft  $\tau_c \propto a\sqrt{\rho}$ . Bei der klassischen Variante der Taylor-Beziehung ist  $a$  ein einzelner Parameter, der nicht berücksichtigt, dass sich die verschiedenen Versetzungsreaktionen unterschiedlich stark auf die Verfestigung einzelner Gleitsysteme auswirken. Der Übergang auf die Matrixform ermöglicht eine Beschreibung der Verfestigung auf der Basis der Versetzungsreaktion einzelner Gleitsysteme  $\alpha$  mit allen anderen Gleitsystemen  $\beta$ :  $\tau_c^\alpha \propto \sqrt{\sum_\beta a_{\alpha\beta}\rho^\beta}$ . Die nun zur Beschreibung der Verfestigung benötigten Werte der Matrix  $a_{\alpha\beta}$  lassen sich experimentell nicht direkt ermitteln. Speziell entworfene Versetzungsdynamiksimulationen machen es jedoch möglich, die Einträge der Matrix zu bestimmen. Dies trägt dazu bei, Kontinuumsformulierungen auf eine physikalische Basis zu stellen, indem die Informationen aus der Skala einzelner Reaktionen in Matrixeinträge zur Beschreibung der Interaktion von Versetzungsdichten homogenisiert werden [Devincere et al., 2006].

Neben der Verfestigung ist für physikalisch motivierte Kontinuumsformulierungen auch die Beschreibung der Multiplikation von Versetzungen wichtig. Im Rahmen dieser Arbeit ist insbesondere die Multiplikation von Versetzungen durch topologische Veränderungen gemeint, wozu Quergleiten und die gleitfähige Reaktion zu zählen sind. Bei beiden Reaktionen entsteht ein neues Gleitsystem. Während bei Quergleiten allerdings der Burgersvektor erhalten bleibt, wird bei der gleitfähigen Reaktion durch die vektorielle Summe der Reaktionspartner ein neuer Burgersvektor gebildet. Quergleiten ist ein thermisch aktivierter Prozess und kann in Kontinuumsformulierungen stochastisch beschrieben werden [Xia und El-Azab, 2015]. Die gleitfähige Reaktion dagegen hängt von der Bewegung und einer Trefferwahrscheinlichkeit von Versetzungen ab, die diese Reaktion bilden. Bisher wurde in der Literatur nur die Auswirkung der gleitfähigen Reaktion auf die Verfestigung untersucht. Die Multiplikation von Versetzungen aufgrund der gleitfähigen Reaktion und die damit einhergehende topologische Änderung der Mikrostruktur wurde bisher nur angedeutet [Weygand, 2014b, Stricker et al., 2015]. Die vorliegende Arbeit schließt diese Lücke indem sie eine Ratenformulierung zur Multiplikation von Versetzungen durch die gleitfähige Reaktion motiviert, aus Versetzungsdynamiksimulationen ein Modell ableitet und in einem Minimalbeispiel die Auswirkungen in einer versetzungsdichtebasierten Kontinuumsformulierung zeigt.

Des Weiteren befasst sich die Arbeit mit der Wechselwirkung von Versetzungen an und durch Korngrenzen. Existierende Kontinuumsformulierungen enthalten viele Ansätze zur Beschreibung einer Korngrenze, jedoch schafft es keine, die Versetzungs-Versetzungs-Wechselwirkung über Korngrenzen hinweg genau zu beschreiben und Korngrenzfließen wird oft phänomenologisch motiviert.

In dieser Arbeit wird zunächst geklärt, unter welchen Voraussetzungen das hier verwendete Modell der effektiven Transmission im Rahmen der Versetzungsdynamik gilt. Danach wird anhand aktueller Literatur die Interpretation der Korngrenze in Kontinuumsformulierungen (Gradientenplastizität, Continuum Dislocation Dynamics) diskutiert und es werden die Konsequenzen der Interpretationen im direkten Vergleich dargestellt.

In Kapitel 2 erfolgt eine Literaturübersicht, eine detaillierte Einführung in die Fragestellungen sowie in die verwendeten Methoden und danach eine Einbettung dieser Arbeit in den aktuellen Forschungsstand. In Kapitel 3 werden die gewonnenen Ergebnisse dargestellt und in Kapitel 4 diskutiert. Alle drei Kapitel sind jeweils nach den folgenden beiden Fragestellungen untergliedert:

- Die gleitfähige Reaktion als Versetzungsmultiplikationsmechanismus.
- Versetzungswechselwirkungen über Korngrenzen hinweg.

Bei der Auswertung der Ergebnisse liegt der Fokus auf der Übertragbarkeit der Befunde in Kontinuumsbeschreibungen.

Abschließend werden in Kapitel 5 die gewonnenen Erkenntnisse zusammengefasst und mögliche Ansätze für weiterführende Forschungen vorgestellt.



## 2. Plastizität, ein Multiskalenproblem

Die plastischen Eigenschaften von kristallinen Festkörpern, insbesondere von Metallen, werden von der Bewegung von Versetzungen bestimmt. Diese linienartigen Kristalldefekte sind verantwortlich für die Fähigkeit eines Werkstoff, sich plastisch zu verformen. Sie bestimmen sowohl die hohe Festigkeit von nanostrukturierten Materialien, das Umformverhalten von Strukturwerkstoffen, tektonische Vorgänge im Erdmantel sowie die Zuverlässigkeit von Halbleitern [Devincre et al., 2008]. Bei Dioden hat z.B. die Existenz von Versetzungen in der Nähe der metallisierten Oberfläche negative Auswirkungen auf die Lebensdauer, weil Diffusion im p-n Übergang einen Kurzschluss verursachen kann [Nakamura und Chichibu, 2000]. Als Träger der Plastizität stellen diese mikroskopischen Defekte auch die Ursache für das makroskopisch beobachtbare Verhalten von Materialien wie Kriechen, Ermüdung, Duktilität, Sprödeheit, Indentierungshärte und Reibung sowie Kristallwachstum und das Verhalten bei Strahlenschädigung verantwortlich dar.

Die Eigenschaften von Versetzungen und deren Auswirkungen machen die Entwicklung einer Plastizitätstheorie auf Basis eines mechanistischen Verständnisses von Versetzungen technologisch relevant. Allerdings ist die Vereinfachung der Versetzungsmechanik in ein System partieller Differentialgleichungen, die mit Standardwerkzeugen der Kontinuumsmechanik berechenbar sind, eine nicht zu unterschätzende Herausforderung. Insbesondere deswegen, weil sich das Problem über mehrere Größenordnungen erstreckt [Cottrell, 2002]. Die in diesem Zusammenhang in den vergangenen Jahren verfolgte Herangehensweise ist ein Multiskalenansatz, der verschiedene Methoden von der atomistischen Beschreibung bis hin zu Kontinuumsbeschreibungen verbindet [Curtin und Miller, 2003, Liu et al., 2004, Groh und Zbib, 2009, Srivastava et al., 2013]. In der Mitte dieser Größen-

und Zeitskala lässt sich die Methode der diskreten Versetzungsdynamik einordnen, eine sogenannte mesoskopische Simulationsmethode [Needleman, 2000]. Mit dieser können Versetzungen in einem Kontinuum verfolgt werden und dadurch deren kollektives Verhalten studiert werden [Bulatov und Cai, 2006, Kubin, 2013]. Die typische Größenordnung solcher Simulationen liegt im Bereich von  $1 - 100 \mu\text{m}$  wobei auf die elastische Theorie diskreter Versetzungen zur Beschreibung von Plastizität [Hull und Bacon, 2011, Po et al., 2014] zurückgegriffen wird. Die Schwierigkeit mesoskopischer Methoden liegt darin, alle *notigen* Ereignisse auf der atomaren Skala zu modellieren und dabei differenzieren zu können, welche Phänomene für eine gegebene Problemstellung abgebildet werden müssen [LeSar, 2014]. Das Verständnis der Eigenschaften und der Wechselwirkungen von Versetzungen bildet daher die Voraussetzung für eine repräsentative Modellierung und damit den Schlüssel zur Vorhersage des makroskopischen mechanischen Verhaltens von Bauteilen. Diese Arbeit bedient sich der Methode der diskreten Versetzungsdynamik um versetzungsbasierte Vorgänge in der Größenordnung mehrerer Versetzungen zu verstehen und diese in Kontinuumsbeschreibungen zu übertragen.

Im Folgenden werden Versetzungsreaktionen mit Fokus auf Verfestigung betrachtet und die Modellierung von Korngrenzen in bestehenden Kontinuumsmodellen dargestellt, kritisch betrachtet und daraus die Motivation dieser Arbeit abgeleitet.

## 2.1. Versetzungsreaktionen und Kaltverfestigung

Die Plastizität von Metallen beruht auf der Bewegung und der Bildung neuer Versetzungen. Dabei haben Versetzungsreaktionen neben elastischer Versetzungswechselwirkungen eine Schlüsselfunktion [Nabarro et al., 1964]. Beide sind die Ursache dafür, dass ein Material während der plastischen Verformung verfestigt [Franciosi et al., 1980, Nabarro und Hirth, 2004, Kubin et al., 2008]. Eine Reaktion tritt auf als Konsequenz der Wechselwirkung zweier (oder mehrerer) Versetzungen über ihr Spannungsfeld. Die attraktive Wechselwirkung zweier Versetzungen wird eine Reaktion

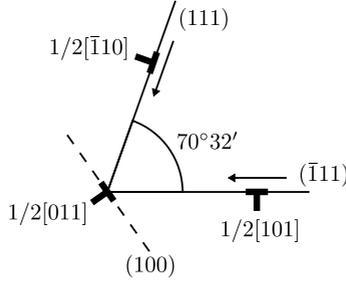
gebildet – die Triebkraft für die Reaktion, der Verringerung der elastischen Energie. Letzte ist proportional zum Quadrat des Burgersvektor [Hull und Bacon, 2011]:

$$E_{\text{el}} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (2.1)$$

mit dem Schubmodul  $G$ , dem Betrag des Burgersvektors  $b$ , der Querkontraktionszahl  $\nu$ , der oberen Integrationsgrenze  $R$  und dem Abschneideradius außerhalb des Versetzungskerns  $r_0$ . Wenn zwei Versetzungen mit den Burgersvektoren  $b_1$  und  $b_2$  eine Reaktion bilden, die als Burgersvektor die Summe beider reagierenden Burgersvektoren  $b_3$  hat, ist dies energetisch günstiger, wenn  $b_3^2 = (b_1^2 + b_2^2)^2 < b_1^2 + b_2^2$ . Abhängig von den beteiligten Burgersvektoren und Gleitebenen ist das Produkt dann entweder gleitfähig oder nicht. Die vier möglichen Reaktionen im *kfz* Kristall (ausgenommen der koplanaren Reaktion von Versetzungen in der gleichen Ebene) sind die Lomer-, Hirth-, kollineare und die gleitfähige Reaktion [Saada und Veyssiere, 2002]. Alle, ausgenommen der letzten, bilden Reaktionen die nicht gleitfähig sind, da der resultierende Burgersvektor nicht in einer der beiden ursprünglichen Ebenen liegt. Abbildung 2.1 zeigt repräsentativ für alle nicht gleitfähigen Reaktionen die Geometrie der Lomer-Reaktion. Zwei Stufenversetzungen gleichen Typs  $\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{111\}$  bilden an der Schnittlinie ihrer Gleitebenen eine Versetzung des Typs  $\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{001\}$ . Die neu gebildete Versetzung liegt nicht mehr in einer dichtest gepackten Ebene und ist somit nicht gleitfähig. Dies hat zur Folge, dass weitere Versetzungsbewegung verhindert wird. Dabei verringert sich die Energie pro Längeneinheit durch die Reaktion um 50 % [Hull und Bacon, 2011].

Reaktionen behindern zusätzlich die Bewegung nachfolgender Versetzungen auf den beteiligten Gleitebenen sowie die Bewegung von Versetzungen auf anderen Gleitebenen als sogenannte Waldversetzungen [Hull und Bacon, 2011].

Der Zusammenhang zwischen Dehnungsinkrement  $d\gamma$  und Bewegung  $\Delta x$  einer Stufenversetzungsdichte  $\rho$  mit Burgersvektor  $b$  in  $x$ -Richtung ist  $d\gamma = \rho b \Delta x$ . Um nun auf den beteiligten Ebenen um das Inkrement  $d\gamma$  plastisch zu verformen, muss die Schubspannung um das Inkrement  $d\tau$



**Abbildung 2.1.:** Bildung einer nicht gleitfähigen Lomer-Reaktion. Zwei Versetzungen vom Typ  $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \{111\}$  bilden eine  $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \{001\}$  Versetzung. Nach [Hull und Bacon, 2011].

erhöht werden. Dies wird Verfestigung genannt, wobei das Verhältnis dieser beiden Größen  $d\tau/d\gamma$  ist als Verfestigungsrate bezeichnet wird.

Um diesen versetzungs-basierten Mechanismus in Kontinuumsbeschreibungen zu übertragen, wird angenommen, dass die kritische Spannung  $\tau_C^\alpha$  für die Aktivierung eines Gleitsystems  $\alpha$  eine Funktion der in allen anderen Gleitsystemen  $\beta$  vorhandenen Versetzungen, bzw. allgemeiner: deren Versetzungsdichte  $\rho^\beta$  ist. Die kritische Spannung ist durch die verallgemeinerte Taylor-Beziehung gegeben [Mandel, 1965, Hill, 1966, Franciosi et al., 1980]:

$$\tau_C^\alpha = Gb \sqrt{\sum_{\beta} a_{\alpha\beta} \rho^\beta} \quad (2.2)$$

Die Interaktionsmatrix  $a_{\alpha\beta}$  enthält für den *kfz* Kristall aus Symmetriegründen sechs unabhängige dimensionslose Koeffizienten für die jeweiligen paarweisen kurz- und langreichweitigen Wechselwirkungen [Madec et al., 2003, Devincere et al., 2006]. Vier davon sind die Lomer-, Hirth-, kollineare und die gleitfähige Reaktion. Die beiden anderen stellen rein elastische Wechselwirkungen dar, entweder zwischen Versetzungen auf parallelen Gleitebenen (Dipole) oder auf derselben Gleitebene. Diese sind im Vergleich aber schwach [Basinski und Basinski, 1980, Sevillano, 2006] und

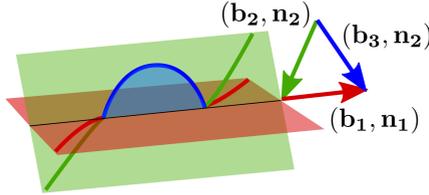
werden deshalb oft vernachlässigt [Madec et al., 2003].

Der tatsächliche Wert dieser Koeffizienten lässt sich nur schwer aus der Theorie abschätzen [Bassani und Wu, 1991] oder aus Experimenten extrahieren. Eine Möglichkeit ist die indirekte Messung von Versuchen in Einfachgleitrichtung [Wu et al., 1991]. So wird in Experimenten zur latenten Verfestigung in einem ersten Schritt zunächst nur ein primäres Gleitsystem aktiviert. In einem zweiten Schritt folgt dann die Aktivierung eines vorher inaktiven latenten Systems. Die latente Verfestigung des ersten Schrittes wird dann durch die Fließspannung des zweiten Schrittes abgeschätzt.

Eine weitere Möglichkeit ist die Verwendung von 3D Versetzungsdynamik-Simulationen. Dabei werden für die Implementierung und Kalibrierung der konstitutiven Gesetze zur Reaktionsbildung Reaktionsstärken aus MD-Simulationen ermittelt [Devincre und Kubin, 1994, Madec et al., 2002, 2003]. Die Stärke von MD Simulationen ist es, einzelne Reaktionen isoliert zu betrachten und daraus Reaktionsstärken ableiten zu können [Rodney und Phillips, 1999]. Allerdings lässt sich mit diesen Informationen noch keine Aussage über das kollektive Verhalten von Versetzungen treffen. Mit diesen lokalen Reaktionsstärken lassen sich aber unter zusätzlicher Verwendung eines Multiskalenansatzes mit Einbezug der Versetzungsdynamik die Koeffizienten der Interaktionsmatrix  $a_{\alpha\beta}$  für die Verwendung in Kontinuumstheorien in vernünftiger Genauigkeit ermitteln [Devincre et al., 2006, Amodeo et al., 2014, Bertin et al., 2014].

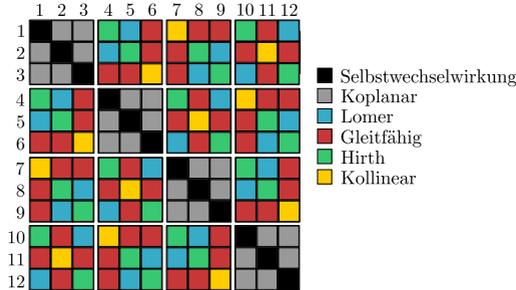
Bei all diesen Arbeiten geht es darum, ein Modell für die Kaltverfestigung zu entwickeln, also zum Beispiel die Parameter der Interaktionsmatrix aus Gleichung 2.2 zu bestimmen. Versetzungsreaktionen werden dabei bisher nur unter diesem Gesichtspunkt betrachtet. Das Wissen, dass die gleitfähige Reaktion mobile Dichte eines Gleitsystems erzeugen kann, wird bisher unter der Annahme, dass die Reaktion stark ist (relativer Zahlenwert des Parameters), vernachlässigt [Madec et al., 2003, Devincre et al., 2006]. Bei der gleitfähigen Reaktion sind zwei Versetzungen mit unterschiedlichem Burgersvektor beteiligt. Deren Wechselwirkung ist attraktiv und die (vektorielle) Summe beider bildenden Burgersvektoren ist gleitfähig auf einem der Primärsysteme. Abbildung 2.2 zeigt diesen Vorgang: Das System 1 (rot) bildet mit System 2 (grün) ein neues, gleitfähiges System 3 (blau). Der resultierende Burgersvektor ist die vektorielle Addition beider beteiligten Primärsysteme und gleitfähig auf Ebene 2. Diese neue Verset-

zung stellt eine Frank-Read (FR) Quelle dar, deren Endpunkte auf der Schnittgeraden beider beteiligten Ebenen entlanggleiten können.



**Abbildung 2.2.:** Gleitfähige Reaktion: System 1 ( $\mathbf{b}_1, \mathbf{n}_1$ ) in rot, mit dem Burgersvektor  $\mathbf{b}_1$  parallel zur Schnittlinie beider Ebenen, bildet mit System 2 ( $\mathbf{b}_2, \mathbf{n}_2$ ) in grün, das neue gleitfähige System 3 ( $\mathbf{b}_3, \mathbf{n}_2$ ) in blau.

Von den 132 möglichen Reaktionen im *kfz* Kristall (ohne der Wechselwirkungen in der gleichen Gleitebene) ist die gleitfähige Reaktion mit einer Anzahl von 48 die Kombination, welche sich am häufigsten ergibt.



**Abbildung 2.3.:** Schematische Reaktionsmatrix des *kfz* Kristalls. Die Zahlen 1 bis 12 symbolisieren die 12 Gleitsysteme (siehe Tab. A.1 für die vektorielle Bezeichnung).

Abbildung 2.3 zeigt schematisch alle im *kfz* Kristall möglichen Reaktionen. Die gleitfähige Reaktion ist in rot dargestellt, während die Selbstwechselwirkungen und koplanaren Reaktionen in schwarz und grau abgebildet werden. Die Farben blau, grün und gelb repräsentieren die jeweils nicht gleitfähigen Reaktionen Lomer, Hirth und die kollineare Reaktion. Rein optisch ist bereits hier die große Zahl der möglichen Kombinationen er-

kennbar.

Jüngere Untersuchungen zeigen, dass der Anteil an Versetzungen aus gleitfähigen Reaktionen an der Gesamtversetzungsdichte nach der Verformung und der Beitrag zur gesamten plastischen Dehnung in einer Größenordnung von 20 % liegen [Weygand, 2014a].

In Versetzungsdynamiksimulationen von Mikroproben wird zudem beobachtet, dass die Bildung von gleitfähigen Reaktionen mit dem Abfall der makroskopischen Spannung zusammen fallen kann [Stricker und Weygand, 2015]. Der Grund für das plötzliche Relaxieren einer Probe könnte eine lokale Änderung der Versetzungstopologie aufgrund der Bildung einer gleitfähigen Reaktion sein. Die Veränderung der Topologie bewirkt, dass Versetzungen, die vorher im Netzwerk durch Reaktionen fixiert waren, nun beweglich sind, sich losreißen und dadurch die Probe makroskopisch relaxieren Csikor et al. [2007].

Das deutet darauf hin, dass die gleitfähige Reaktion eine größere Rolle in der plastischen Verformung spielt, als bisher angenommen und sich die genaue Untersuchung dieser Rolle lohnt: Eine Modell, das makroskopisches plastisches Fließen basierend auf Vorgängen in der Mikrostruktur beschreiben will, sollte daher auch diesen Mechanismus mit berücksichtigen.

## 2.2. Versetzungs-Korngrenz-Wechselwirkung

Die plastische Verformung polykristalliner Materialien wird in großen Teilen durch die Korngröße und die Eigenschaften der Korngrenzen definiert. Eine der ersten Erklärungen, die makroskopisches Materialverhalten von polykristallinen Materialien mit Vorgängen in der Mikrostruktur erklärt, ist die Hall-Petch-Beziehung [Hall, 1951, Petch, 1953]: Korngrenzen behindern das freie Gleiten von Versetzungen und führen so zu einem Aufstau von Versetzungen. Das wiederum bewirkt eine Verfestigung des Materials, wobei gilt: Je kleiner die Körner, desto *fester* ist das Material. In der Werkstofftechnik wird dieser Effekt gezielt genutzt, um durch Kornfeinung die Streckgrenze zu erhöhen. Dieser Effekt soll jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht genauer betrachtet werden. Die Versetzungs-Korngrenz-Wechselwirkung ist auch ein Multiskalenproblem [Robertson et al., 2011]: Einzelne Vorgänge in der Mikrostruktur ergeben als Ganzes

das makroskopische Materialverhalten. MD Simulationen können die komplexen Wechselwirkungen einzelner Versetzungen abbilden und zwar ohne Annahmen über konstitutives Verhalten [Koning et al., 2002, Jin et al., 2006, Bitzek et al., 2008, Cheng et al., 2008, Bachurin et al., 2010]. Allerdings sind sie zeitlich sowie räumlich zu begrenzt um kollektives Verhalten abbilden zu können.

Kontinuumsmodelle sind bisher noch nicht in der Lage, diese komplexen Wechselwirkungen an der Korngrenze zu modellieren. Das ist insbesondere der Fall, wenn der Verlauf von Dehnungsprofilen von Interesse ist und nicht nur makroskopische Größen wie Spannung und Dehnung, siehe z.B. [Zikry und Kao, 1996, Biner und Morris, 2002, Gurtin, 2008, van Beers et al., 2013, Bayerschen et al., 2015a]. Die Schwierigkeit besteht darin, die Wechselwirkung auf ein effektives Modell und einen reduzierten Parametersatz abzubilden. Je nach Kompatibilität der Gleitsysteme der beteiligten Körner (kristallographische Orientierung, bzw. Missorientierung) werden die Spannungsspitzen, die sich durch den Aufstau von Versetzungen ergeben, durch direkte Transmission, Transmission mit residuellem Burgersvektor, durch indirekte Transmission oder gar nicht abgebaut [Sutton und Balluffi, 1996]. Zur Beschreibung des Problems ergibt sich also mindestens folgender Parametersatz [Koning et al., 2002]:

- die kristallographische Definition der Korngrenze
- die beteiligten Burgersvektoren
- die beteiligten Gleitebenen
- der Spannungszustand
- die Temperatur
- etc.

Rein geometrisch lässt sich eine Korngrenze durch fünf makroskopische und drei mikroskopische Freiheitsgrade (FHG) parametrisieren [Sutton und Balluffi, 1996]. Als die fünf makroskopischen FHG werden üblicherweise der Missorientierungswinkel, der Missorientierungsachsenvektor und der Normalenvektor der Korngrenzebene verwendet [Spearot und Sangid, 2014]. Drei zusätzliche mikroskopische FHG hängen mit der Translation der beiden Kristallgitter parallel und orthogonal zur Korngrenze zusammen. Es gibt in der Literatur Ansätze, den vollen Parametersatz zu verwenden,

doch eine tatsächliche Umsetzung hat bisher noch nicht stattgefunden [van Beers, 2015].

An dieser Stelle stellt sich die Frage: Welche dieser Parameter sind entscheidend, um auf der Kontinuumsebene die plastische Verformung und die Transmission plastischer Dehnung durch die Korngrenze zu charakterisieren?

Bestehende Kontinuumstheorien beschreiben die Versetzungs-Korngrenz-Wechselwirkung meist durch eine Fließregel für die Korngrenze, die sich von der im Korninneren unterscheidet. Die Formulierungen enthalten einen Energieausdruck für die Korngrenze, der von den Dehnungsgradienten oder einer äquivalenten Dehnung abhängt [Aifantis et al., 2009, Wulfinghoff et al., 2013]. Des Weiteren gibt es Ansätze, die Missorientierung (und damit die Geometrie) durch die Definition eines Nye- [Voyiadjis et al., 2014] oder Burgers-Tensors [Gurtin und Needleman, 2005] in der Fließregel zu berücksichtigen [Gurtin, 2008]. Der plastischen Deformation der Korngrenze wird dann durch einen Energiedissipationsausdruck pro Fläche Rechnung getragen. Allerdings führt dies zu physikalisch schwer interpretierbaren Randbedingungen. So lässt sich beispielsweise

$$\varepsilon_{ij}^{\text{pl}} \Big|_{\text{KG}} = 0 \quad (2.3)$$

als Randbedingung finden [Aifantis et al., 2009]. Das bedeutet, dass einer Korngrenze, die ein zweidimensionales Gebilde ist, eine plastische Dehnung zugeschrieben wird, die sich per Definition auf ein Volumen bezieht:

$$\varepsilon_{ij}^{\text{pl}} = \frac{A}{2V} (b_i n_j + b_j n_i), \quad (2.4)$$

wobei  $A$  die überstrichene Fläche einer Versetzung ist,  $V$  das Volumen, in dem die plastische Dehnung ausgewertet wird und  $b_i$  und  $n_i$  jeweils die Komponenten des Burgersvektors bzw. der Gleitebenennormale sind [Bulatov

und Cai, 2006]<sup>1</sup>. Im Extremfall bedeutet die Bedingung aus Gleichung 2.3, dass eine Korngrenze starr ist und keine plastische Dehnung zulässt. In der Realität ist allerdings keine Korngrenze starr. Denn eine Versetzung, die sich selbst ohne Transmission direkt bis zur Korngrenze bewegt und dort stehen bleibt, bewirkt durch ihr elastisches Feld eine lokale Verformung der Korngrenze. In [Gottschalk et al., 2015] werden verschiedene Korngrenzmodelle miteinander verglichen und deren Grenzen ausgelotet.

Aus experimentellen Beobachtungen ist bekannt, dass sich durch geometrische Kriterien für die Transmission von Versetzungen präzise Vorhersagen treffen lassen [Lagow et al., 2001, Guo et al., 2014, Kacher et al., 2014]. Frühe Ansätze, die aktiven Gleitsysteme bei Transmissionsprozessen vorherzusagen, sind rein geometrischer Natur [Livingston und Chalmers, 1957], berücksichtigen somit also nicht die auf den beteiligten Gleitebenen herrschende Schubspannung. Ein nachfolgendes Modell korrigiert dies [Shen et al., 1986]. Dennoch kann auch mit diesem Modell der Fall nicht abgebildet werden in dem Gleitsysteme, die große plastische Dehnung produziert haben, einfach stoppen, obwohl die resultierende Schubspannung am größten ist. Zusammengefasst führt die Vorhersage des im zweiten Korn aktivierten Gleitsystems zu drei Kriterien [Lee et al., 1989]:

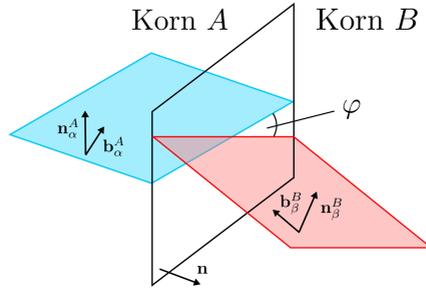
1. Ein geometrisches Kriterium: der Winkel zwischen den beiden Schnittlinien der ein- und ausgehenden Gleitebenen soll minimiert werden (Winkel  $\varphi$  in Abbildung 2.4), d.h. es geht um die *Passung* der beteiligten Gleitsysteme.
2. Die Schubspannung, induziert durch das eingehende Gleitsystem, soll auf dem ausgehenden Gleitsystem maximiert werden.
3. Der residuelle Burgersvektor, der sich aus der Differenz zwischen aus- und eingehendem Burgersvektor ergibt ( $\mathbf{b}_{\text{res}} = \mathbf{b}_{\beta}^B - \mathbf{b}_{\alpha}^A$ , siehe Abbildung 2.4), soll minimiert werden.

Ein Nachteil ist die experimentell schwer messbare Orientierung der Korngrenze. Eine Verbesserung kann die Modifikation liefern, bei der statt der

---

<sup>1</sup>In einer zweidimensionalen Formulierung würde die Formel entsprechend statt der Fläche  $A$  eine überstrichene Länge  $L$  und statt des Volumens  $V$  eine ausgewertete Fläche  $A$  beinhalten. Dies ändert jedoch nichts an der Argumentation, da dadurch die plastische Dehnung auf eine Fläche bezogen wird und die Korngrenze statt einer Fläche eine Linie ist.

Missorientierung der sich treffenden Überschneidungslinien die Missorientierung zwischen den Gleitebenennormalen verwendet wird [Werner und Prantl, 1990].

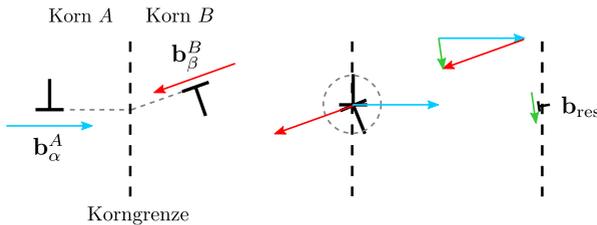


**Abbildung 2.4.:** Illustration der geometrischen Parameter einer Korngrenze im Fall von zwei Gleitsystemen: Die Normalen der Gleitebenen und der Korngrenze, sowie die beiden Burgersvektoren sind eingezeichnet. Aus diesen Werten lassen sich die fünf makroskopischen Parameter bestimmen. Mit  $\varphi$  wird der Winkel zwischen den beiden Schnittlinien der Gleitebenen mit der Korngrenze bezeichnet.

Untersuchungen zur Versetzungs-Korngrenz-Wechselwirkung mit MD Simulationen haben die Kombination dieser Geometrie- und Spannungskriterien für die Vorhersage von plastischer Transmission von einzelnen Versetzungen weitgehend bestätigt [Spearot und Sangid, 2014, Bieler et al., 2014]. Abbildung 2.4 illustriert die Größen, die für die Bestimmung der fünf makroskopischen Parameter nötig sind. Pro Korn ist jeweils ein Gleitsystem dargestellt, wobei die Indizes  $\alpha$  und  $\beta$  die Gleitsysteme und  $A$  und  $B$  die Kornzugehörigkeit bezeichnen. Durch die Variation der Gleitsysteme  $\alpha, \beta = 1 \dots 12$  und die Anwendung obiger Kriterien gelangt man so zu einer Vorhersage, wie sich die Korngrenze als Widerstand für Plastizität verhält. Um die Erkenntnisse aus Experimenten und MD-Simulationen mit einzelnen Versetzungen in eine Kontinuumstheorie zu übertragen, bietet sich eine vereinfachte Betrachtung der Korngrenze an, die die genaue atomare Struktur der Korngrenze vernachlässigt. Mesoskopische Ansätze wie die Versetzungsdynamik können dabei helfen, die Kriterien zur Transmission zu kalibrieren. Z.B. lassen sich Kleinwinkelkorngrenzen direkt durch Versetzungen abbilden [Liu et al., 2011, 2012, Verdhan und Kapoor,

2015]. Dadurch kann die kollektive Wechselwirkung von eingehenden Gleitsystemen über eine Korngrenze hinweg untersucht werden inklusive der Versetzungsreaktionen, die sich durch die Wechselwirkung von Versetzungen aus den Körnern mit denen der Korngrenze ergeben.

Dieser Vergleich setzt jedoch voraus, dass die Wechselwirkung von Versetzungen über Korngrenzen hinweg sowie die Wechselwirkung von Versetzungen mit Korngrenzen in der Versetzungsdynamik abgebildet werden können. Im Fall einer Kleinwinkelkorngrenze ist dies modellbedingt gegeben. Jedoch kann nicht jede Korngrenze eindeutig und vernünftig durch Versetzungen oder deren Superposition dargestellt werden. Dort wären dann Transmissionsgesetze nötig. Da Transmissionsgesetze in der Versetzungsdynamik aufgrund Geometrie, Topologie und kontinuumsmechanischer Konsistenz im allgemeinen Fall schwer zu implementieren sind, gibt es Ansätze die Wechselwirkungen auf einfacherem Weg abzubilden: Die indirekte oder effektive Transmission [Quek et al., 2014]. Dieser Fall wird in Abbildung 2.5 illustriert: Die Versetzung mit dem Burgersvektor  $\mathbf{b}_\alpha^A$  trifft unter Belastung auf einer Korngrenze. Von der anderen Seite nähert sich eine Versetzung mit dem Burgersvektor  $\mathbf{b}_\beta^B$ . Die Superposition dieser beiden ergibt eine Versetzung mit einem residuellen Burgersvektor *in* der Korngrenze (unter Annahme einer unendlich dünnen Korngrenze).



**Abbildung 2.5.:** Schema der effektiven Transmission im zweidimensionalen Fall. Nach [Quek et al., 2014].

In [Quek et al., 2014] wird die Herkunft der zweiten Versetzung von rechts durch eine geeignete Quellenwahl im Korn  $B$  geklärt<sup>2</sup>. In Korn  $B$  befinden sich Quellen, die durch die extern angelegte Spannung nicht aktiviert werden können. Falls der Aufstau an der Korngrenze von Versetzungen

<sup>2</sup>Manchmal wird die Frage der Validität des Modells gar nicht gestellt, sondern einfach verwendet [Lefebvre et al., 2007, Balint et al., 2008].

im Korn  $A$  jedoch groß genug ist, wird die Spannung an der Position der Quelle so weit abgesenkt, dass diese aktiviert wird. Sie emittiert dann eine Versetzung, deren negativer Anteil die Korngrenze je nach Neigung ganz oder teilweise relaxiert und deren positiver Anteil in Korn  $B$  als *transmittierte* Versetzung interpretiert werden kann. Mit diesem Kniff kann eine als undurchbringbares Hindernis modellierte Korngrenze effektiv Versetzungen und damit Plastizität transmittieren.

Eine ähnliche Argumentation ist auch im Dreidimensionalen möglich. Auch hier kann einem gegebenen Dehnungszustand (und damit auch einem Spannungszustand) verschiedene Superpositionen von Versetzungsanordnungen zugrunde liegen [Zhang et al., 2014, Zhang und Aifantis, 2015]. Bei kontinuumsmechanischer Betrachtung sind diese auflösungsbedingt äquivalent. Dieses Erkenntnis erlaubt einen gewissen Spielraum bei der Interpretation von Ergebnissen aus Versetzungsdynamiksimulationen.

Für die Versetzungsdynamik existiert ein einfaches Modell der Transmission, das im Grunde dem Mechanismus für Quergleiten entspricht [Imrich et al., 2014]. Dieses Modell ist aber beschränkt auf bestimmte Korngrenzen in denen der Winkel zwischen ein- und ausgehenden Gleitebenen dem des Winkels für Primär- und Quergleitebene entspricht. Ein weiteres existierendes Modell beruht auf einer Art Quellmechanismus [El-Awady et al., 2011, Zhou und LeSar, 2012]. Sobald eine Versetzung an einer Korngrenze zum Stehen kommt, wird die Spannung gemessen. Erreicht die Spannung einen vorher gewählten Wert, wird auf der anderen Seite der Korngrenze eine Versetzung generiert. Die Limitierung dieses Modells ist, dass es zwischen den Körnern keine Missorientierung geben darf. Korngrenzen sind hier numerische Hindernisse, die ansonsten gleich orientierte Kristalle bzw. Körner voneinander trennen.

Um allgemeine Korngrenzen mit der Versetzungsdynamik in drei Dimensionen zu untersuchen, wird also entweder ein komplexes Transmissionsmodell benötigt oder eine *Interpretationshilfe* des bestehenden Zustands. Da sich in zwei Dimensionen die Interpretation von superponierten Versetzungen bewährt hat [Quek et al., 2014] und sowohl korrekte Spannungs- als auch Verschiebungsfelder liefert, stellt sich die Frage ob in drei Dimensionen für allgemeine Korngrenzen komplexe Transmissionskriterien nötig sind. Insbesondere die Verwendung von Ergebnissen aus Versetzungsdynamiksimulationen zum Vergleich mit kontinuumsmechanischen Größen legt nahe, dass sie es nicht sind [Hochrainer et al., 2007, Sandfeld et al., 2011, Hochrainer et al., 2014].

Ein weiteres Argument gegen die Implementierung eines Transmissionsgesetzes ist der Widerstand von Korngrenzen gegenüber Transmission von Versetzungen. Dieser kann abhängig von der Missorientierung im Vergleich zur Bewegung von Versetzungen im normalen Gitter sehr groß sein, sodass Versetzungen nur selten tatsächlich transmittiert werden [Hasson und Goux, 1971, Li et al., 2009, Koning et al., 2002]. Der Superpositionsansatz mit der Interpretation effektiver Transmission scheint daher gerechtfertigt: Es kann gezeigt werden, dass in einem Szenario mit einer künstlichen Korngrenze, die zwei Kristalle gleicher Orientierung voneinander trennt, kein Transmissionskriterium nötig ist [Stricker et al., 2015], da die Superposition und damit die Effektivwirkung des Zustands alles Nötige abdeckt. Die Frage, ob diese Interpretation auch im Mehrfachgleitfall und mit Kipp- und Drehkorngrenzen noch möglich ist, ist jedoch nicht geklärt und wird deshalb in dieser Arbeit untersucht. Außerdem fehlen bisher für Kontinuumsmodelle Modellierungsansätze zum Transport von plastischer Dehnung inklusive entsprechender Randbedingungen für eine versetzungsdichtebasierte Beschreibung. Auch dieser Aspekt wird in dieser Arbeit betrachtet.

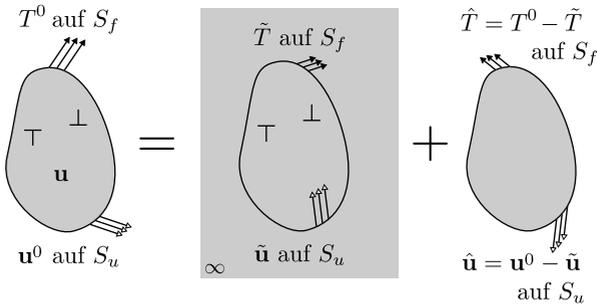
## 2.3. Verwendete Methoden

Dieses Kapitel führt zunächst in die diskrete Versetzungsdynamik ein. Dabei wird neben dem Grundprinzip auf die Besonderheiten dieser Methode eingegangen. Anschließend folgt eine Einführung in die Kristallplastizität als Beispiel einer Kontinuumsformulierung.

### 2.3.1. Diskrete Versetzungsdynamik

Die diskrete Versetzungsdynamik gehört zu den mesoskopischen Simulationmethoden. In ihr wird die Basis der plastischen Verformung, die Physik von Versetzungen, in ein elastisches Kontinuum eingebettet. Dadurch ist es möglich, die Plastizität von kristallinen Materialien direkt als Konsequenz der Bewegung von Versetzungen zu berechnen, anstatt sich ihr durch die Wahl eines phänomenologischen Materialmodells mit entsprechenden Parametern anzunähern [Bulatov et al., 2004].

In der Versetzungsdynamik werden Versetzungen als Liniendefekte in einem linear elastischen Medium modelliert. Die Linien tragen Eigenschaften, also ihr Spannungs- und Verschiebungsfeld, und bewegen sich nach empirischen Mobilitätsgesetzen, abhängig von der Kristallstruktur, bzw. des zugrunde liegenden Materialmodells. Die Lösung der diskontinuierlichen Verschiebungsfelder wird dabei als eine Superposition der (analytischen, im Unendlichen definierten) Verschiebungsfelder von Versetzungen  $\tilde{\mathbf{u}}$  mit der elastischen Lösung des Körpers  $\hat{\mathbf{u}}$  berechnet [Van der Giessen und Needleman, 1995, Weygand et al., 2001]. Dabei wird  $\hat{\mathbf{u}}$  z.B. mit der Finite-Elemente (FE) Methode gelöst. Das Superpositionsprinzip wird in Abbildung 2.6 dargestellt.



**Abbildung 2.6.:** Dekomposition des finiten Randwertproblems, nach [Van der Giessen und Needleman, 1995].

Aus Überlagerung der FE-Felder mit den Feldern der Versetzungen im Unendlichen ergibt sich die Gesamtlösung:

$$\sigma_{ij} = \tilde{\sigma}_{ij} + \hat{\sigma}_{ij}, \quad \varepsilon_{ij} = \tilde{\varepsilon}_{ij} + \hat{\varepsilon}_{ij}, \quad u_i = \tilde{u}_i + \hat{u}_i, \quad (2.5)$$

wobei die ( $\tilde{\quad}$ )-Felder die Summe aller Felder von individuellen Versetzungen im unendlichen isotropen Medium sind. Die mit ( $\hat{\quad}$ ) bezeichneten Felder sind die elastischen Felder aus der FEM und genügen den Randbedingungen:

$$\hat{T}_i = T_i^0 - \tilde{T}_i \quad \text{mit} \quad \tilde{T}_i = \tilde{\sigma}_{ij} n_j, \quad (2.6)$$

$$\hat{u} = u_0 - \tilde{u} \quad (2.7)$$

wobei  $T_i^0$  die an der Oberfläche vorgegeben Spannungen und  $u_0$  die vorgegebenen Verschiebungen sind.  $n_j$  bezeichnet die Oberflächennormale. Für Oberflächenspannung  $\hat{T}_i$  und die Spannungsbeiträge aus Versetzungen allgemein wird der analytische Ausdruck aus [Devincre, 1995] verwendet. Die im Code verwendete Methode zur Berechnung der Verschiebungsbeiträge von Versetzungen geht auf [Barnett, 1985] zurück.

Die diskreten Versetzungen mit ihren Spannungs- und Verschiebungsfeldern bewegen sich im Kristall auf diskreten Gleitebenen. Die numerische Repräsentation einer Versetzung ist im verwendeten Code als Knoten realisiert. Diese Knoten sind die Freiheitsgrade, die über gerade Segmente miteinander verbunden [Kukta, 1998] sind. Zusätzlich können Knoten, die in Reaktionen, Quergleiten und Oberflächenwechselwirkung involviert sind, in ihrer Bewegung eingeschränkt werden [Weygand et al., 2002]. Alle diese Vorgänge sind über konstitutive Zusammenhänge implementiert [Weygand et al., 2002, Weygand und Gumbsch, 2005]. Die bisherigen Ausführungen definieren die Auswirkungen einer Versetzung in einem elastischen Medium und es fehlt noch ihre zeitliche Evolution auf Basis der lokalen Kraft.

Die Umsetzung im verwendeten Code wird als gut nachvollziehbares Beispiel anhand einer einzelnen Versetzung gezeigt, deren Knoten alle im Volumen liegen und keine Überschneidung mit einer zweiten Versetzung aufweisen. Die lokale Versetzungsgeschwindigkeit  $v(\ell)$  am Ort  $\mathbf{r}(\ell)$  entlang einer gekrümmten Koordinate  $\ell$ , die die Versetzung parameterisiert, ergibt sich durch Interpolation, äquivalent einer eindimensionalen Finite-Elemente-Methode [Weygand et al., 2002]:

$$v_i(\ell) = \sum_{A=1}^N N_A(\ell) V_{Ai} \quad (i = 1, \dots, 3), \quad (2.8)$$

wobei  $V_{Ai}$  die  $i$ -te Komponente der Knotengeschwindigkeit  $\mathbf{V}_A$  und  $N_A$  die lineare Formfunktion des Knotens  $A$  ist.

Die Geschwindigkeit wird an jedem Punkt durch die lokale wirkende Kraft bestimmt. Diese wird Peach-Koehler Kraft genannt:

$$\mathbf{f}_{PK} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \times d\boldsymbol{\ell}, \quad (2.9)$$

wobei  $\boldsymbol{\sigma}$  die Gesamtspannung darstellt und  $d\boldsymbol{\ell}$  den Tangentenvektor an der Stelle der Versetzung bezeichnet. Es wird allerdings nur die Gleitkomponente von  $\mathbf{f}_{PK}$  verwendet. Die Kletterkomponente von  $\mathbf{f}_{PK}$ , senkrecht

zur Gleitebene, wird unter der Annahme hinreichend tiefer Temperaturen vernachlässigt (kein Klettern). Der Zusammenhang zwischen wirkender Kraft und Geschwindigkeit ist dann unter vereinfachenden Annahmen durch ein konstitutives Gesetz gegeben [Hirth und Lothe, 1982]<sup>3</sup>:

$$v_i(\ell) = \frac{f_i(\ell)}{D}, \quad (2.10)$$

mit  $D = \mu b/V_T$ , wobei  $V_T$  ein temperaturabhängiger *Reibungswiderstand* ist.

Diese Ausführungen bilden die Grundbausteine der Versetzungsdynamik. Diese Grundbausteine wurden seit Anfang der 1990er Jahre in zwei- sowie dreidimensionale Implementierungen mit unterschiedlichen Schwerpunkten umgesetzt [Kubin und Canova, 1992, Devincze und Condat, 1992, Van der Giessen und Needleman, 1995, Fivel et al., 1997, Rhee et al., 1998, Cleveringa et al., 2000, Blanckenhagen, 2002, Bulatov et al., 2004, Bulatov und Cai, 2006, Arsenlis et al., 2007]. Die existierenden Implementierungen bilden z.B. verschiedene Kristallsysteme ab: von *kfz* über kubisch raumzentriert (*krz*) sowie hexagonal dichtest gepackt (*hdp*) [Kubin et al., 1992, Tang et al., 1998, Wu et al., 2013].

Für Details der numerischen Implementierung des hier verwendeten Codes wird auf die Referenzen [Weygand et al., 2001, 2002, Weygand und Gumbsch, 2005, Weygand et al., 2009, Senger, 2010] verwiesen.

Einen großen Nachteil der Versetzungsdynamik stellt ihr hoher Rechenaufwand dar. Da für die Spannungsberechnung bei der Wechselwirkung alle Versetzungen mit allen wechselwirken ( $\mathcal{O}(N^2)$ , wobei  $N$  die Anzahl der Segmente bezeichnet), wird eine Simulation immer aufwändiger, je mehr Segmente bei der Verformung entstehen. Dieses Problem lässt sich nicht gänzlich umgehen, da die Spannungsfelder von Versetzungen mit  $1/r$ , mit  $r$  als Abstand, abklingen. Neben bekannten Parallelisierungsstrategien wie OpenMP oder MPI, gibt es aber Methoden um die Simulation ohne Verlust der Genauigkeit signifikant zu beschleunigen. Diese Methoden setzen an der

---

<sup>3</sup>Für allgemeine Zusammenhänge siehe auch [Johnston und Gilman, 1959, Greenman et al., 1967].

Wechselwirkungsberechnung von weiter entfernten Versetzungen an. Beispielsweise kann durch die Verwendung eines Sub-Zeitschritt-Schemas die Rechnung um zwei Größenordnungen beschleunigt werden [Weygand et al., 2002, Weygand und Gumbsch, 2005]. Im Sub-Zeitschritt wird zwischen lokalen und globalen Anteilen der Versetzungswechselwirkung unterschieden. Des Weiteren werden im Sub-Zeitschritt nur die lokalen Wechselwirkungen von Versetzungen neu berechnet, während die globalen als konstant angenommen werden. Die Subinkrementation wird wiederholt, bis sich die Versetzungsstruktur innerhalb eines maximalen Zeitintervalls entwickelt hat, um dann alle Wechselwirkungen neu zu berechnen. Zusätzlich kann für die langreichweitige Wechselwirkung eine zweite, gröbere, Diskretisierung der Versetzungen verwendet werden, was sich direkt auf die Ordnung  $N$  auswirkt. Begründet im Beschleunigungspotential dieser Methode, wird diese mittlerweile auch in anderen Codes eingesetzt [Sills und Cai, 2014, Sills et al., 2016].

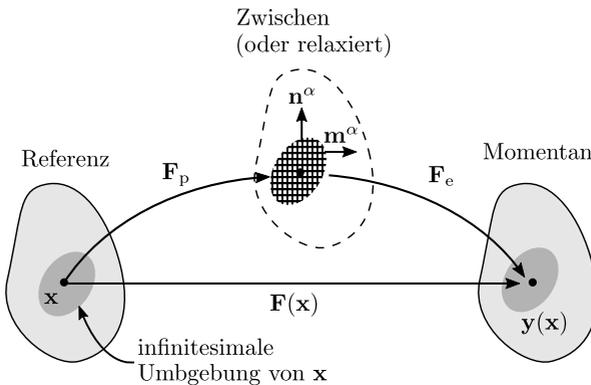
Ein weiterer Ansatz, die Simulation zu beschleunigen, ist die Einführung eines 'Abschneideradius', und alle Wechselwirkungen zwischen Segmenten zu vernachlässigen, die weiter weg sind [Gulluoglu et al., 1989, Kubin et al., 1992, Devincere und Kubin, 1997]. Da das Spannungsfeld einer Versetzung im unendlichen elastischen Medium allerdings mit  $1/r$  abfällt, führt die Einführung dieses 'Abschneideradius' zu Artefakten im Kraftfeld.

Eine andere Herangehensweise zur Beschleunigung der Wechselwirkungsberechnung ist die Verwendung der Schnellen Multipolmethode für die Wechselwirkungsberechnung weit entfernter Segmente [Zbib et al., 1998, LeSar und Rickman, 2002, Wang et al., 2004, Arsenlis et al., 2007]. *Weit* bedeutet hier, dass der Abstand zwischen Versetzungen deutlich größer ist als die Segmentlänge. Die Verwendung dieser Methode führt zu einem Rechenaufwand von  $\mathcal{O}(N)$  für weiter entfernte Segmente und die Rechenzeit wird nicht mehr durch Wechselwirkungsberechnung dominiert [Arsenlis et al., 2007].

### 2.3.2. Kristallplastizität

Kristalline Materialien verhalten sich unter mechanischer Belastung im Allgemeinen anisotrop. Das ist zum einen der Anisotropie des Elastizitätstensors und zum anderen den diskreten Gleitebenen geschuldet, auf

denen sich die Versetzungen bewegen. Obwohl der Mechanismus der Versetzungsbewegung als Erklärung für die Anisotropie der Plastizität seit den 1930er Jahren bekannt ist [Taylor, 1934a,b, Orowan, 1934a,b,c, Polanyi, 1934], wurde erst in den 1980er Jahren damit begonnen, diesen auch in der Modellierung in Kontinuumstheorien in 2D [Peirce et al., 1982] und später dann in 3D [Becker et al., 1991, Roters, 2011] zu berücksichtigen. Kontinuumsmodelle, die die kristalline Anisotropie berücksichtigen, ordnet man der Kristallplastizität zu [Hill, 1966, Rice, 1971]. Dabei wird der Verschiebungsgradient in einen elastischen und in einen plastischen Anteil zerlegt [Kröner, 1959, Lee, 1969]. Beide Anteile sind im Allgemeinen inkompatibel, d.h. nicht als Gradient eines Vektorfelds interpretierbar. Dieses Kapitel führt die Größen ein, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden, ohne die gesamte Festkörpermechanik zu wiederholen. Für diese Einführungen sowie deren numerische Umsetzung wird auf [Bower, 2009, Chadwick, 2012, Jirásek und Bazant, 2002, Rappaz et al., 2010] verwiesen. Eine umfangreiche Einführung in die Kristallplastizität bieten z.B. [Roters et al., 2010, 2011].



**Abbildung 2.7.:** Schematische Dekomposition des Deformationsgradienten  $\mathbf{F}$ . Die beiden Vektoren  $\mathbf{m}^\alpha$  und  $\mathbf{n}^\alpha$  bezeichnen die Gleitrichtung (also den Burgersvektor) und die Gleitebenenormale der zugrundeliegenden Kristallstruktur in der Zwischen- bzw. relaxierten Konfiguration, nach [Roters et al., 2011].

Abbildung 2.7 zeigt die Zerlegung des Deformationsgradienten. Der plastische Anteil  $\mathbf{F}_p$  bildet dabei die Referenzkonfiguration in einen elastisch unverzerrten Zustand ab (Zwischenzustand bzw. relaxierter Zustand). Dieser Zustand entspricht einem *fiktiven* Zustand, bei dem jeder materielle Punkt entlastet, d.h. lediglich plastisch und nicht elastisch verformt ist. Die zweite Abbildung aus der Zwischen- in die Momentankonfiguration ist die elastische Verzerrung und Rotation des Gitters und wird mit  $\mathbf{F}_e$  bezeichnet. Dadurch ergibt sich der Gesamtgradient, der die Referenz- in die Momentankonfiguration abbildet als multiplikative Zerlegung

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p. \quad (2.11)$$

Diese Zerlegung ist nicht eindeutig, da zwischen elastischer und Zwischenkonfiguration eine beliebige Starrkörperrotation und ihr Inverses stehen könnte. Der plastische Anteil  $\mathbf{F}_p$  wird dabei durch die Abgleitraten der einzelnen Gleitsysteme bestimmt [Rice, 1971]. Für ein Plastizitätsmodell wird nun ein Zusammenhang zwischen dem Dehnungsgradienten und der Abgleitungsrate, also ein Konstitutivgesetz für plastisches Fließen, benötigt. Der Geschwindigkeitsgradient  $\mathbf{L}$  ist gegeben durch:

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}, \quad (2.12)$$

und die plastische Deformation entwickelt sich nach

$$\dot{\mathbf{F}}_p = \mathbf{L}_p \mathbf{F}_p. \quad (2.13)$$

Da im Rahmen dieser Arbeit Versetzungsgleiten als einziger Verformungsprozess betrachtet wird, lässt sich  $\mathbf{L}_p$  vereinfacht schreiben als [Rice, 1971]

$$\mathbf{L}_p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha. \quad (2.14)$$

Hierbei bezeichnet  $\dot{\gamma}^\alpha$  die Abgleitrate des Gleitsystems  $\alpha$  während  $\mathbf{m}^\alpha$  und  $\mathbf{n}^\alpha$  die Abgleitrichtung (Burgersvektor) und die Gleitebenennormale beschreiben.

Es lassen sich zwei Klassen Konstitutivmodellen unterscheiden, die Plastizität beschreiben: phänomenologische und versetzungs- oder mikrostrukturbasierte Modelle.

**Phänomenologische Modelle** Zur phänomenologischen Beschreibung wird oft die kritische Schubspannung eines Gleitsystems  $\tau_C^\alpha$  als Zustandsvariable herangezogen [Roters et al., 2011]. Die Scherrate eines Gleitsystems  $\alpha$  wird dann als eine Funktion der kritischen und der auf der Gleitebene wirkenden Schubspannung  $\tau^\alpha$  geschrieben:

$$\dot{\gamma}^\alpha = f(\tau^\alpha, \tau_C^\alpha). \quad (2.15)$$

Die Entwicklung der Zustandsvariable  $\tau_C^\alpha$  ist folglich eine Funktion der gesamten Scherung  $\gamma$  sowie der Scherrate  $\dot{\gamma}$

$$\tau_C^\alpha = g(\gamma, \dot{\gamma}). \quad (2.16)$$

Der Zusammenhang zwischen Scherrate und Scherspannung in der Gleitebene wird als kinetischer Zusammenhang z.B. in der Form [Rice, 1971, Hutchinson, 1976, Peirce et al., 1982]

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^\alpha}{\tau_C^\alpha} \right|^{\frac{1}{m}} \operatorname{sgn}(\tau^\alpha) \quad (2.17)$$

beschrieben. Die zu bestimmenden bzw. festzulegenden Parameter sind hierbei die Referenzscherrate  $\dot{\gamma}_0$  und die Ratenabhängigkeit der Abgleitung  $m$ . Der Einfluss auf die Verfestigung eines Gleitsystems  $\alpha$  von allen anderen Gleitsystemen  $\beta$  geht über  $\dot{\tau}_C^\alpha$  ein:

$$\dot{\tau}_c^\alpha = h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^\beta|, \quad (2.18)$$

wobei  $h_{\alpha\beta}$  als Verfestigungsmatrix bezeichnet wird:

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} \left[ h_0 \left( 1 - \frac{\tau_c^\beta}{\tau_s} \right)^a \right]. \quad (2.19)$$

Die Verfestigungsmatrix bildet die mikromechanischen Wechselwirkungen zwischen einzelnen Gleitsystemen ab. Hierbei sind  $h_0$ ,  $a$  und  $\tau_s$  phänomenologische Verfestigungsparameter, die im Falle von *kfz* Kristallstruktur für alle Systeme gleich sind. Mit  $q_{\alpha\beta}$  wird die latente Verfestigung beschrieben. Die kritische Schubspannung eines Systems  $\tau_c^\alpha$ , wird damit zur Funktion der Scherraten auf anderen Systemen  $\beta$  [Franciosi und Zaoui, 1982, Franciosi, 1985].

Dieses Plastizitätsmodell ist beschränkt, weil es als Zustandsvariable nur die kritische Schubspannung und Verfestigungsparameter des jeweiligen Systems beschreibt. Es fehlt beispielsweise etwa eine Größenabhängigkeit, die durch eine versetzungs- bzw. mikrostrukturbasierte Beschreibung ermöglicht wird.

**Versetzungs-basierte Modelle** Die Basis für das in dieser Arbeit erweiterte Modell ist eine versetzungs-basierte Formulierung. Plastizität ist bei Modellen dieser Art ein Resultat aus der sich entwickelnden Mikrostruktur bzw. der Versetzungsdichten auf den einzelnen Gleitsysteme  $\rho^\alpha$ . Hierfür wird die Versetzungsdichte pro Gleitsystem  $\rho^\alpha$  als Größe zur Charakterisierung eingeführt. Dafür wird die oben verwendete kritische Scherspannung  $\tau_c^\alpha$  (Gl. 2.18) durch den Zusammenhang mit der Versetzungsdichte  $\rho^\alpha$  ersetzt.

Im Folgenden wird die Grundidee eines versetzungs-basierten Modells basierend auf [Ma und Roters, 2004, Ma et al., 2006a,b] erläutert. Ähnliche Modelle finden sich in [Acharya, 2001, Arsenlis und Parks, 2002, Gao und Huang, 2003, Sedláček et al., 2003, Arsenlis et al., 2004b,a, Cheong und Busso, 2004, Varadhan et al., 2006].

Das Konzept des Burgersvektors sowie des Burgersumlaufs wird zunächst in den Kontinuumsfall übertragen [Nye, 1953]. Der Zusammenhang zwischen der Ableitung des plastischen Verzerrungstensors und dem Netto-Burgersvektorinhalt ist über den Versetzungsdichtetensor gegeben, welcher ein Maß für die Inkompatibilität darstellt. Dieser erlaubt es, die geometrisch notwendigen Versetzungen (GNV) mit dem Dehnungsgradient ins Verhältnis zu setzen. Üblicherweise wird als kinetischer Zusammenhang die Orowan-Gleichung verwendet, welche die (mobile) Versetzungsdichte auf einem Gleitsystem  $\rho^\alpha$  mit der Rate der plastischen Dehnung desselben ins Verhältnis setzt und somit eine kontinuumsmechanische Größe in die Physik von Versetzungen übersetzt:

$$\dot{\gamma}^\alpha = \rho^\alpha b v^\alpha, \quad (2.20)$$

dabei ist  $b$  der Betrag des Burgersvektors und  $v^\alpha$  die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit des Gleitsystems  $\alpha$ . Dieser Zusammenhang lässt sich an Stelle von Gleichung 2.17 verwenden. Hierbei wird die gesamte Versetzungsdichte  $\rho_{\text{tot}}^\alpha$  häufig in mehrere Untermengen geteilt: Es gibt eine mobile Dichte, die sich tatsächlich bewegt, eine immobile Dichte, die zur Verfestigung beiträgt (*Waldversetzungen*), eine parallele Dichte, die zur Dipolbildung beiträgt, etc. Eine detaillierte Beschreibung ist an dieser Stelle jedoch nicht von Relevanz und wird deshalb nicht weiter ausgeführt. Es gilt jetzt zum einen die Entwicklung der Zustandsvariable  $\rho^\alpha$  sowie die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit  $v^\alpha$  zu beschreiben. Während die Evolutionsgleichungen für immobile Versetzungsdichte auf Versetzungsreaktionen und der Bildung von Dipolen sowie Erholung beruhen [Roters et al., 2000], ist die Beschreibung der Evolution der *mobilen* Versetzungsdichte weitaus komplexer: Sowohl die Anzahl der mobilen Versetzungen als auch deren mittlere Geschwindigkeit wirken sich auf die plastische Dehnrate aus. Eine erste Überlegung wäre nun, eine der beiden Variablen festzuhalten und die andere zu verändern – allerdings ändern sich in der Realität beide Variablen zur gleichen Zeit. Eine Möglichkeit zur gleichzeitigen Entwicklung ist die Minimierung der Fließspannung pro Inkrement [Roters, 2003]. Dabei kommt die Annahme zum Tragen, dass die *richtige* Evolution der Versetzungsstruktur eine der beiden Bedingungen erfüllt [Ma und Roters, 2004]:

- Die gegebene externe Spannung erzeugt maximale plastische Verformung.
- Die gegebene plastische Verformung erzeugt minimale externe Spannung.

Dies führt zum Zusammenhang für die Schubspannung auf System  $\alpha$

$$\tau_\alpha = c_1 G b \sqrt{\rho_{P\alpha} + \rho_{M\alpha}} + \frac{Q_{\text{slip}}}{c_2 c_3 b^2} \left[ 1 + \frac{k_B T}{Q_{\text{slip}}} \ln \left( \frac{2\dot{\gamma}_\alpha}{b\nu_0 c_2} \frac{\sqrt{\rho_{F\alpha}}}{\rho_{M\alpha}} \right) \right] \sqrt{\rho_{F\alpha}} \quad (2.21)$$

wobei  $c_1$  ein Parameter zum Skalieren des athermischen Widerstands der Passierspannung,  $G$  der Schubmodul,  $b$  der Betrag des Burgersvektors,  $\rho_{P\alpha}$  und  $\rho_{M\alpha}$  die parallele und mobile Dichte,  $\rho_F^\alpha$  die Waldversetzungen des Gleitsystems,  $Q_{\text{slip}}$  die effektive Aktivierungsenergie für Versetzungsgleiten,  $c_2$  eine Konstante zur Skalierung der Versetzungsgeschwindigkeit auf Basis thermisch aktivierter Versetzungsbewegung,  $c_3$  eine Konstante zur Skalierung des Aktivierungsvolumens,  $K_B$  die Boltzmannkonstante,  $T$  die absolute Temperatur und  $\nu_0$  die Aktivierungsfrequenz für thermische aktivierte Versetzungsbewegung bezeichnet.

Für die mobile Versetzungsdichte aus Gleichung 2.20 kann nun mit obigen Annahmen, der Einschränkung

$$\left( \frac{\partial \tau_\alpha}{\partial \rho_{M\alpha}} \right)_{\dot{\gamma}_\alpha, \rho_{P\alpha}, \rho_{M\alpha}} = 0 \quad (2.22)$$

für Gleichung 2.21 und unter Annahme von  $\rho_{M\alpha} > 0$  das Skalierungsgesetz

$$\rho^\alpha = \frac{2k_B T}{c_1 c_2 c_3 G b^3} \sqrt{\rho_P^\alpha \rho_F^\alpha} \quad (2.23)$$

berechnet werden. Eine genaue Herleitung findet sich in [Roters, 2011]. Unter der Annahme thermisch aktivierter Versetzungsbewegung ergibt sich die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit als eine Funktion von einer freien Weglänge  $\lambda^\alpha$  und einer Frequenz  $\nu^\alpha$ , einer effektiven Aktivierungsenergie  $Q_{\text{slip}}$ , der Temperatur und der effektiven Scherspannung des Gleitsystems  $\tau_{\text{eff}}^\alpha$ :

$$v^\alpha = f(\lambda^\alpha, \nu^\alpha, Q_{\text{slip}}, V^\alpha, \tau_{\text{eff}}^\alpha, T). \quad (2.24)$$

Dabei ist vor allem die Berechnung der effektiven Scherspannung von Interesse. Diese setzt sich zusammen aus der Scherspannung und einer Passierspannung  $\tau_{\text{pass}}^\alpha \propto \sqrt{\rho_{\text{P}}^\alpha + \rho^\alpha}$ :

$$\tau_{\text{eff}}^\alpha = \begin{cases} |\tau^\alpha| - \tau_{\text{pass}}^\alpha & \text{für } |\tau^\alpha| > \tau_{\text{pass}}^\alpha \\ 0 & \text{für } |\tau^\alpha| \leq \tau_{\text{pass}}^\alpha \end{cases} \quad (2.25)$$

Indem der phänomenologische Zusammenhang für Verfestigung durch die Entwicklung der Versetzungsdichten ersetzt wird, wird das Modell vervollständigt. So ergeben sich für die Verfestigung im vorliegenden Modell vier Prozesse: Versetzungsreaktionen und Dipolbildung, welche die Versetzungsdichte erhöhen, sowie athermische und thermische aktivierte Annihilation von Versetzungsdichten als Erholungsprozess.

In der vorliegenden Arbeit werden die Entwicklungsgleichungen zur Versetzungsmultiplikation, der Dipolbildung und Annihilation für die mobile Dichte aus Gleichung 2.23 um eine weitere zur Bildung der gleitfähigen Reaktion erweitert. Dies geschieht als Ratenformulierung und wirkt sich insofern auf die Topologie aus, als dass zwei Gleitsysteme nach den Zusammenhängen aus Abbildung 2.3 ein drittes System bilden.

Die Kristallplastizität in Verbindung mit einer Finite-Elemente-Methode ermöglicht es, das mechanische Verhalten von Bauteilen auf Basis der Mikrostrukturentwicklung vorherzusagen. Das umfasst natürlich auch Polykristalle, Untersuchungen zur plastischen Anisotropie und Untersuchungen zur Kodelformation von großen Kornaggregaten. Der im Vergleich

zur Versetzungsdynamik geringere Rechenaufwand lässt die Simulation von deutlich größeren Proben sowie großer plastischer Dehnung zu.

# 3. Ergebnisse

Für die in Kapitel 2.1 und 2.2 motivierten Fragestellungen werden nun nachfolgend die durchgeführten Simulationsergebnisse vorgestellt. Die gewählten Parameter und Randbedingungen für die Simulationen, die den Ergebnissen zugrunde liegen sind auf die beiden Fragestellungen zugeschnitten:

- Welche Rolle spielt die gleitfähige Versetzungsreaktion bei der plastischen Verformung und der Verfestigung?
- Wie sieht ein Transmissionkriterium für Versetzungen durch Korngrenzen im Rahmen der Versetzungsdynamik aus, bzw. ist überhaupt ein Kriterium notwendig?

Soweit nicht anders gekennzeichnet, entsprechen die verwendeten Materialparameter den Werten von elastisch isotropem Aluminium, angegeben in Tabelle 3.1.

Parameter	Wert
Schubmodul $G$	27 GPa
Querkontraktionszahl $\nu$	0.347
Gitterkonstante $a$	0.4040496 nm
Kristallsystem	$kfz$
Dämpfkoeffizient $B$	$1 \times 10^{-4}$ Pa s [Mason und Rosenberg, 1966, Fivel, 1997]
Masse pro	
Versetzungseinheitslänge $m$	$1.1 \times 10^{-16}$ kg/m [Bitzek et al., 2004]

**Tabelle 3.1.:** Materialparameter, ähnlich Aluminium

### 3.1. Gleitfähige Reaktion

Die Datenbasis für die Untersuchung der Auswirkung der gleitfähigen Reaktion besteht aus 331 uniaxialen Zugversuchen, welche mit der diskreten Versetzungsdynamik simuliert wurden. Das grundsätzliche Vorgehen ist wie in [Stricker und Weygand, 2015], der Datensatz ist ein anderer und die Analyse geht darüber hinaus<sup>1</sup>.

Alle Proben haben einen quadratischen Querschnitt und ein Aspektverhältnis von  $AR = 3$ , um den Einfluss der Randbedingungen zu minimieren. Zur Charakterisierung genügt somit die Kantenlänge  $d$  des Querschnitts. Diese variiert von  $d = 0.5 - 2.0 \mu\text{m}$ . Zudem wird die Zugrichtung von einer Einfachgleitrichtung  $\langle 234 \rangle$  bis Mehrfachgleitrichtung  $\langle 100 \rangle$  variiert – und damit die Wahrscheinlichkeit, dass Versetzungen sich treffen und Reaktionen bilden. Tabelle 3.2 gibt einen Überblick über den Parameterraum, den die Simulationen abdecken sowie über die Anzahl der Simulationen der vier Größen. Die Anzahl der Simulationen pro Größe ergibt sich aus der Streuung der mechanischen Antwort. Da kleine Proben eine hohe statistische Variation in ihrer mechanischen Antwort haben, ist die Anzahl der Simulationen für die kleineren  $d$  größer [Kraft et al., 2010, Senger et al., 2011, 2008].

Die dritte Spalte der Tabelle enthält einen Parameter, welcher eine makroskopische Größe, die Kantenlänge  $d$ , mit einer mikrostrukturellen Größe  $\sqrt{\rho}$ , ins Verhältnis setzt. Dieser Parameter soll mit der Wahrscheinlichkeit zur Bildung von Reaktionen korrelieren: Die Wahrscheinlichkeit zur Reaktionsbildung ist zum einen dann höher, wenn vorhandene Versetzungen mehr Raum zur Interaktion haben ( $d = \text{var.}, \sqrt{\rho} = \text{konst.}$ ). Zum anderen ist die Reaktionswahrscheinlichkeit dann höher, wenn in einem gegebenen Volumen mehr Versetzungen vorhanden sind ( $d = \text{konst.}, \sqrt{\rho} = \text{var.}$ ). Durch Multiplikation beider Variablen entsteht nun ein dimensionsloser Parameter, der sich zur Charakterisierung eignet. Falls die Annahmen zur Wahrscheinlichkeit stimmen, sollten sich Proben mit ähnlichem  $d\sqrt{\rho}$  ähnlich verhalten [Zaiser und Sandfeld, 2014]. Alle Proben sind bis zu einer Totaldehnung von  $\varepsilon_{\text{tot}} = 0.5\%$  verformt und dieser Wert dient im Folgenden als Referenz. Wo nicht anders angegeben, beziehen sich die

<sup>1</sup>Die Verwendung eines neuen Datensatzes ergibt sich durch einen nach teilweisem Datenverlust unvollständigen *alten* Rohdatensatz, bei dem nicht mehr alle mikrostrukturellen Größen und deren Verläufe vorhanden sind.

Größe $d$ [ $\mu\text{m}$ ]	Anzahl Konfigurationen	$d\sqrt{\rho}$ Bereich bei $\varepsilon_{\text{tot}} = 0.5\%$
0.5	133	0.7 – 8.6
1.0	97	0.6 – 11.0
1.5	62	2.3 – 13.9
2.0	39	2.0 – 10.5

**Tabelle 3.2.:** Überblick über die Anzahl und  $d\sqrt{\rho}$  Bereiche der Simulationen, sortiert nach der Kantenlänge  $d$ . Die Anzahl ist die Summe über alle drei Anfangsstrukturen und Zugrichtungen.

ermittelten Größen auf diesen Referenzwert.

Neben der Variation der Zugrichtung und Größe ist die Mikrostruktur der Proben auf drei verschiedener Varianten generiert:

- (i) Anfangskonfigurationen mit zufällig verteilten FR-Quellen (Position, Orientierung in der Ebene und Länge). Zwei Bedingungen begrenzen die Zufälligkeit: Zum einen, dass alle Gleitsysteme gleichmäßig mit Quellen bevölkert werden und zum anderen, dass die Quellenlänge im Bereich von  $2\rho_{\text{ini}}^{-1/2} \pm 20\%$  liegt, wobei  $\rho_{\text{ini}}$  die Anfangsdichte ist und so gewählt wird, dass sich die Mikrostruktur multiplikationsgesteuert<sup>2</sup> entwickelt [Zhang et al., 2014].
- (ii) Anfangskonfigurationen, die aus einem Relaxationsprozess entstehen: Hierfür wird eine Probe mit zufällig verteilten geschlossenen Versetzungsringen (Mittelpunkt, Radius) initialisiert und bis zu einer Totaldehnung von  $\varepsilon_{\text{tot}} = 0.15\%$  belastet. Diese kleine Belastung dient dazu, dass instabile Teile des Netzwerks schon im Relaxationsprozess verschwinden. Das hat zu Folge, dass sich ein relativ stabiles

<sup>2</sup>Wenn die Quellengröße kleiner gewählt wird als es ca. dem mittleren Abstand der Versetzungen entspricht, wird plastisches Fließen von der Selbstwechselwirkung der Quellsegmente statt der Wechselwirkung zwischen verschiedenen Versetzungen dominiert. Im Verlauf einer Simulation zeigt sich dies als eine künstliche Erhöhung der Fließspannung. Bei größeren Dehnungen bilden sich durch Versetzungs-Versetzungs-Wechselwirkungen größere Quellen und die stationäre Fließspannung wird geringer. Die Quellenlänge entspricht also nicht der Charakteristik der Mikrostruktur und sog. *softening* wird beobachtet.

Netzwerk bildet, das während des Zugversuchs nur noch wenig Versetzungsdichte verliert. Das Ergebnis ist eine Struktur, die frei von künstlich festgehaltenen Punkten ist (das sind z.B. die Endpunkte der FR-Quellen aus Variante (i)). Für den Relaxationsprozess werden alle Gleitsysteme mit der gleichen Anzahl an Versetzungsringen initialisiert. Dabei dürfen die Mittelpunkte der Ringe auch außerhalb des Volumens liegen und das Volumen nur durchstoßen [Motz et al., 2009].

- (iii) Die dritte Variante entspricht Variante (ii), allerdings wird hier der Relaxationsprozess komplett übersprungen und die Probe direkt mit der Zugbelastung beaufschlagt. Konzeptionell kommt dies einem *Ausschneiden* aus einer Volumensimulation sehr nahe, inklusive der Plastizität bei kleinen Dehnungen [Zhou et al., 2010].

Die Verschiebungsrandbedingungen werden am oberen und unteren Ende der Probe aufgebracht. Am unten Ende wird die Verschiebung in allen drei Raumrichtungen auf Null gesetzt; am oberen Ende wird die Verschiebung in Zugrichtung mit der Dehnrate  $\dot{\epsilon} = 5000 \text{ s}^{-1}$  aufgebracht, die beiden anderen Richtungen sind spannungsfrei. Alle anderen Oberflächen sind spannungsfrei und offen für Versetzungen.

Um die Anteile der Gesamtversetzungsdichte und Totaldehnung aufgrund gleitfähiger Reaktionen und der restlichen Versetzungen auseinanderhalten zu können, ist ein Marker-Schema implementiert, das jede Versetzung kennzeichnet, die aus einer gleitfähigen Reaktion entsteht. Alles, was in Folge aus dieser markierten Versetzung hervorgeht, wird mit diesem Marker versehen: Quergleiten, weitere Reaktionen, etc., da die Verformungsgeschichte ohne die gleitfähige Reaktion anders abgelaufen wäre. Dieser Marker wird dann in einem Nachbearbeitungsschritt genutzt, um die jeweiligen Beiträge zur Versetzungsdichte und plastischen Verformung zu berechnen. Die plastische Dehnung wird nach Gleichung 2.4 berechnet. Das Markerschema lässt in Grenzen eine Unterscheidung zwischen verschiedenen Generationen gleitfähigen Reaktionen zu. Zudem können Reaktionsprodukte, die im Verlauf der weiteren Simulation quergleiten, identifiziert werden. Der Hauptbeitrag zur plastischen Dehnung liefern Reaktionsprodukte aus erster Generation. Eine Untersuchung dieser Größen zeigt, dass die plastische Dehnung aus Reaktionsprodukten ohne Quergleiten etwa 30 % unter der gesamten plastischen Dehnung aus Reaktionsprodukten liegt. Das Weglassen aller Generationen  $> 1$  senkt den Beitrag um die gleiche Größenordnung.

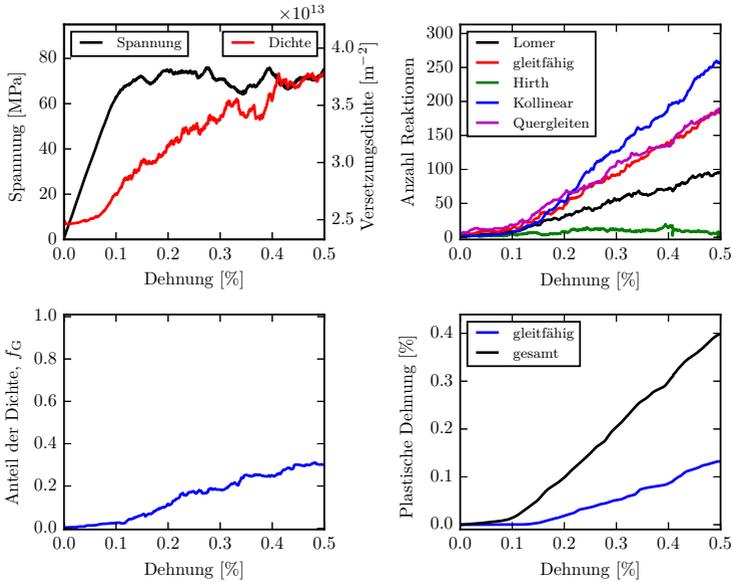
Es wird deshalb davon ausgegangen, dass der größte Beitrag aus Versetzungen der ersten Generation stammt und eine Unterscheidung nicht nötig ist.

Nachfolgend werden die verschiedenen generierten Anfangsstrukturen miteinander verglichen. Abbildung 3.1 beinhaltet den Datensatz einer Simulation, die mit FR-Quellen initialisiert ist (Fall (i)). Enthalten sind die Spannungs-Dehnung-Kurve, die Entwicklung der Versetzungsdichte und die Anzahl der Reaktionen im Verlauf der Simulation (Lomer, gleitfähige, Hirth, Kollinear, Quergleiten). Dargestellt ist außerdem der Anteil der Versetzungsdichte, der aus gleitfähigen Reaktionen entstanden ist ( $f_G$ ), die gesamte plastische Dehnung, sowie die plastische Dehnung, die auf Versetzungen aus gleitfähigen Reaktionen zurückgeführt werden kann. Die Spannungs-Dehnung-Kurve zeigt einen linear-elastischen Bereich mit einem leichten Anstieg der Dichte aufgrund des leichten Ausbauchens der FR-Quellen. Sobald die kritische Spannung der FR-Quellen erreicht ist, verformt sich die Probe plastisch und Reaktionen bilden sich. Dabei liegt die Anzahl der gleitfähigen Reaktionen gleichauf mit der Anzahl von Quergleitvorgängen, lediglich die kollineare Reaktion (Versetzungsumnullung) kommt noch öfter vor. Der Anteil der Dichte aus gleitfähigen Reaktion  $f_G$  steigt über der Verlauf der Belastung auf 30 % an; der Anteil an der gesamten plastischen Verformung liegt mit etwa 40 % in der gleichen Größenordnung.

Abbildung 3.2 zeigt den Datensatz einer Simulation, die mit einer relaxierten Anfangsstruktur initialisiert ist (Fall (ii)). Zu Beginn der Belastung ist der Anstieg der Spannung größer als die elastische Gerade. Das hängt mit ein paar wenigen Versetzungen zusammen, die noch nicht fest im Netzwerk verankert sind und das Volumen verlassen<sup>3</sup>. Dies zeigt auch die anfängliche Dichteentwicklung. Diese schnelle Veränderung der Mikrostruktur ist auch an der Anzahl der Reaktionen sichtbar: Zu Beginn steigen alle Zähler sprunghaft an, um sich dann gleichmäßiger zu entwickeln. Auch hier stellt die gleitfähige Reaktion am Ende zusammen mit der kollinearen diejenige Reaktion mit der größten Anzahl dar. Der Anteil  $f_G$  steigt auf 60 % und der Beitrag zur plastischen Dehnung auf etwa 50 %.

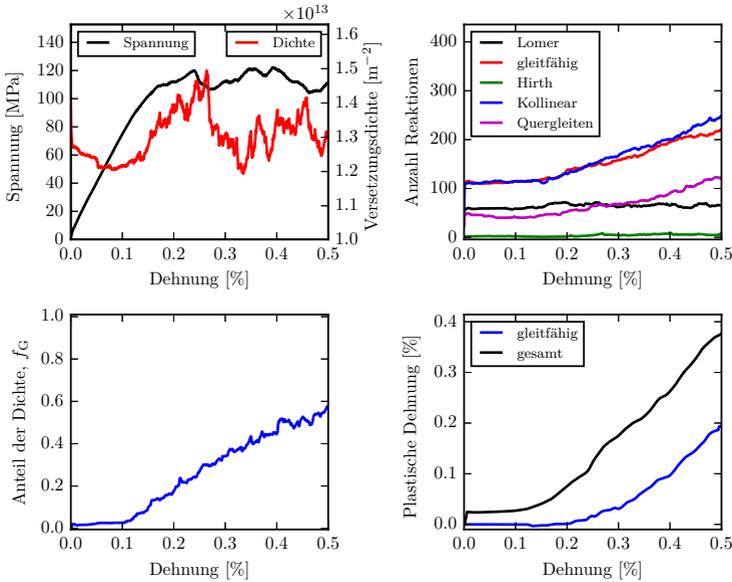
---

<sup>3</sup>Versetzungen, deren Bewegungsrichtung entgegen der makroskopischen Verformungsrichtung ist, lassen die Probe künstlich steifer erscheinen.



**Abbildung 3.1.:** Datensatz einer Simulation mit  $d = 1.0 \mu\text{m}$ , initialisiert mit FR-Quellen (i) und Zugrichtung  $\langle 100 \rangle$ : Spannungs-Dehnungs-Kurve, Versetzungsdichteentwicklung, Anzahl der Reaktionen, Entwicklung von  $f_G$  und der Beitrag der Versetzungen aus gleitfähigen Reaktionen an der plastischen Dehnung. Der Wert von  $d\sqrt{\rho} = 6.17$ .

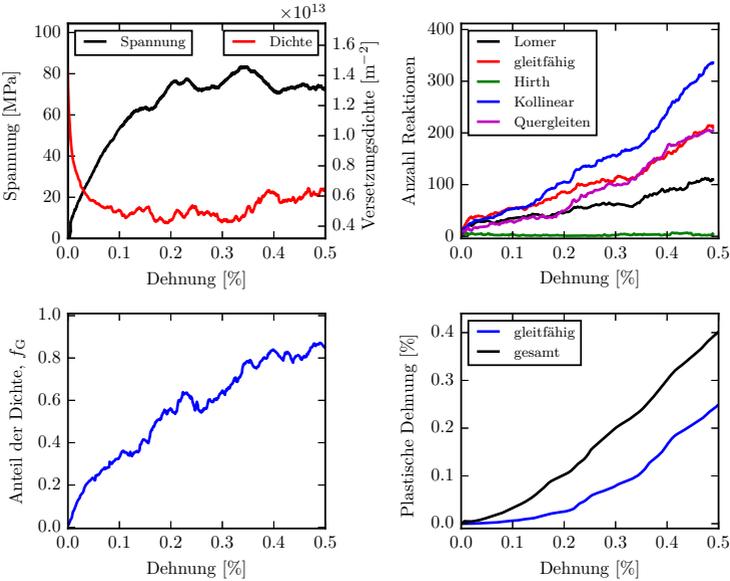
Ein Datensatz, der ohne Relaxationsprozess belastet wurde (Fall (iii)), ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Es fehlt ein deutlich ausgeprägter linear-elastischer Bereich. Die Mikroplastizität zu Beginn der Belastung ist auf die noch nicht *fixierte* Versetzungsstruktur zurückzuführen. Bildkräfte, Selbstwechselwirkung und äußere Spannung sind noch nicht im Gleitgewicht und etwa die Hälfte der Versetzungsdichte geht bis zur Dehnung von 0.05 % verloren. Ab diesem Punkt hat sich ein relativ stabiles Netzwerk gebildet und die Dichte bleibt über den weiteren Verlauf zunächst nahezu konstant und steigt anschließend leicht an. Die Anzahl der Reaktionen steigt zu Beginn ebenfalls stärker an als im weiteren Verlauf und die gleitfähige Reaktion ist neben der kollinearen und neben Quergleiten diejenige mit



**Abbildung 3.2.:** Wie Abb. 3.1, aber initialisiert mit einer relaxierten Mikrostruktur (ii) und  $d\sqrt{\rho} = 3.45$ .

der größten Anzahl. Der Anteil  $f_G$  steigt auf knapp 90% und der Beitrag zur plastischen Dehnung auf etwa 75%.

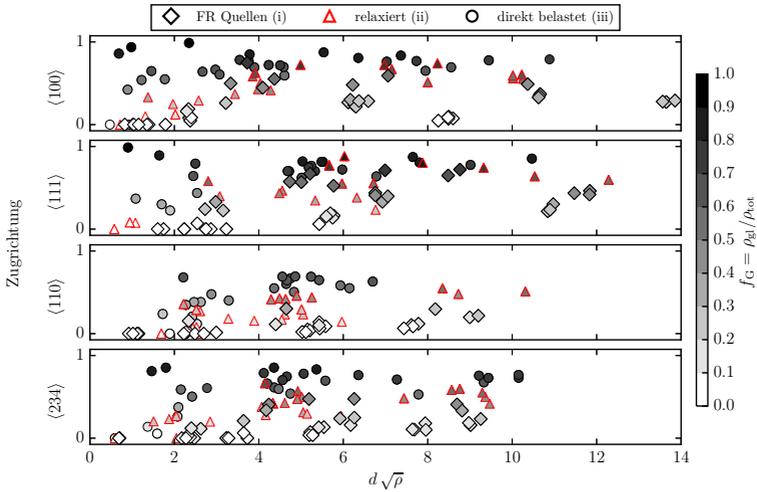
Nachdem die Unterschiede in der mechanischen Antwort der drei Arten zur Generierung der Versetzungsanfangsstruktur dargestellt sind, folgt nun die zusammengefasste Darstellung aller Simulationen aus Tabelle 3.2. Abbildung 3.4 enthält für alle Simulationen den Anteil  $f_G$  der Versetzungsdichte bei einer Totaldehnung von  $\varepsilon_{\text{tot}} = 0.5\%$ , der aus gleitfähigen Reaktionen entstanden ist. In der Darstellung ist sowohl die Position der Datenpunkte auf den Ordinaten als auch die Graustufe mit  $f_G$  assoziiert. Dabei sind die Simulationen nach ihrer Zugrichtung sortiert. Von unten nach oben steigt die Anzahl der aktivierten Gleitsysteme. Auf der Abszisse ist der oben beschriebene dimensionslose Parameter  $d\sqrt{\rho}$



**Abbildung 3.3.:** Wie Abb. 3.1, aber initialisiert mit Versetzungsringen und direkt belastet (iii),  $d = 1.5 \mu\text{m}$  und  $d\sqrt{\rho} = 3.45$ .

aufgetragen. Außerdem ist gekennzeichnet, welche Art der Anfangskonfiguration bei jeder Simulation zugrunde liegt. Insbesondere die equilibrierte, relaxierte Anfangsstruktur ist zusätzlich mit roter Farbe gekennzeichnet. Die Simulationen mit Zugrichtungen  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  zeigen ab einem Wert von  $d\sqrt{\rho} \approx 4$ , dass immer mehr als 10% der Dichte aus gleitfähigen Reaktionen entstanden ist. Bei den anderen beiden Richtungen  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 234 \rangle$  ist keine genaue Grenze zu erkennen, wobei höhere Werte von  $d\sqrt{\rho}$  auch zu größeren Dichteanteilen aus der Reaktion tendieren.

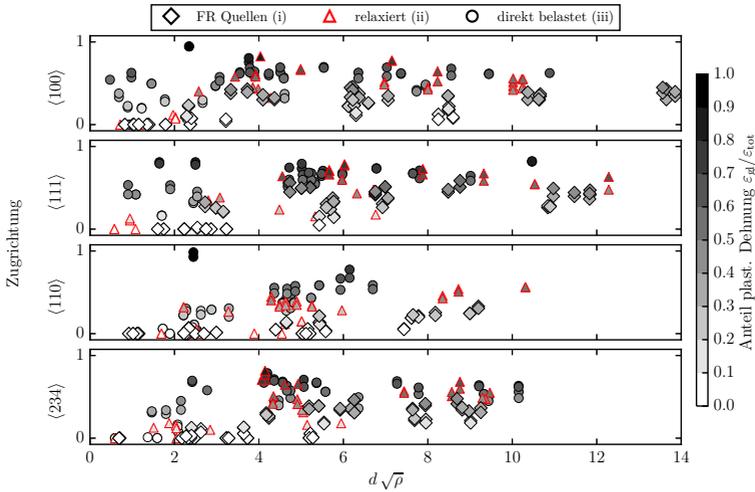
Speziell die Simulationen mit equilibrierten Strukturen zeigen im Bereich von  $0 \leq d\sqrt{\rho} \leq 4$  einen Anstieg, um dann ab  $d\sqrt{\rho} \approx 4$  einen konstant hohen Beitrag der Versetzungsdichte aus gleitfähigen Reaktionen aufzuweisen.



**Abbildung 3.4.:** Anteil  $f_G$  der Versetzungsdichte, die aus gleitfähigen Reaktionen entstanden ist. Alle Werte beziehen sich auf den Referenzpunkt  $\varepsilon_{\text{tot}} = 0.5\%$ . Die Symbole markieren die zur jeweiligen Simulation gehörende gewählte Anfangsmikrostruktur.

Abbildung 3.5 zeigt den entsprechenden Anteil der plastischen Dehnung in Zugrichtung bei Referenztotaldehnung. Auch hier sind die Daten wieder aufgeteilt nach Zugrichtung und die Anfangsstruktur ist markiert. Dabei ist eine Tendenz über alle Richtungen hinweg erkennbar: Von kleinen  $d\sqrt{\rho}$  und der Einfachgleitrichtung (links unten) hin zur hohen Werten und Mehrfachgleitrichtung, steigt der Anteil der plastischen Dehnung an, was sich insbesondere im Fall der relaxierten Anfangsstrukturen zeigt.

Aufgrund der Beobachtung, dass Veränderungen in  $f_G$ , der Anzahl der gleitfähigen Reaktionen und der Anstieg der plastischen Dehnung aus Versetzungen diesen Ursprungs mit einer raschen Abnahme der Spannung in Verbindungen stehen, wird eine Korrelationsanalyse durchgeführt. Abbildung 3.6 verdeutlicht die Verbindung zwischen allen Variablen. Während des Spannungsabfalls ab einer Totaldehnung von etwa  $\varepsilon_{\text{tot}} \approx 0.2\%$  nimmt insbesondere die Anzahl der gleitfähigen Reaktionen stark zu. Auch der

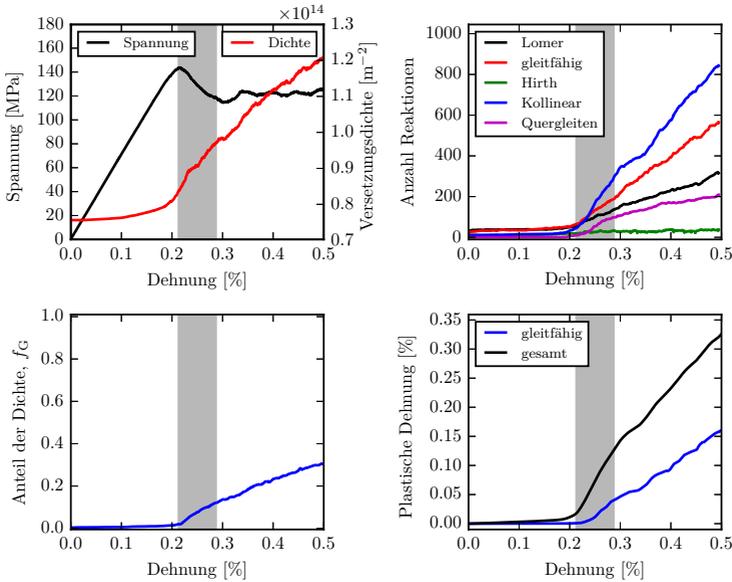


**Abbildung 3.5.:** Wie Abbildung 3.4, aber hier ist der Anteil der plastischen Dehnung, der aus gleitfähigen Reaktionen entstanden ist dargestellt.

Anteil an der Gesamtversetzungsdichte nimmt zu und die plastische Dehnung dieser Versetzungen macht einen Sprung.

Für eine statistische Analyse aller Spannungsabfälle wird die Spannungsrate, die plastische Dehnung von Versetzungen aus gleitfähigen Reaktionen, die gesamte plastische Dehnung sowie die Differenz aus beidem im Nachhinein ausgewertet. Die Auswertung der plastischen Dehnung im Nachhinein unterscheidet sich insofern von jener während der Simulation, dass sie währenddessen aufgrund der Verschiebungsfelder von Versetzungen berechnet wird. Die Berechnung im Nachhinein basiert auf Formel 2.4, welche die überstrichene Fläche einer Versetzung als Basis nimmt. Die nun vorliegenden Daten werden sortiert wie in Kapitel B.1 beschrieben.

Das Ergebnis der Sortierung hinterlässt 1462 (23%) valide Datenreihen, aus denen die Korrelation berechnet wird. Eine Datenreihe besteht aus Datenpunkten aus den Teilen der Spannungs-Dehnungs-Kurve an denen die Spannung monoton fällt ( $d\sigma/d\epsilon < 0$ ). Von diesen 1462 Datenreihen haben 727 ein  $r_{gl} < 0$ , sind also *korrekt* korreliert im Sinne der Annahme aus Gleichung B.1:  $\epsilon_{pl,gl} \propto -\sigma$ . Von diesen hat etwa die Hälfte (338) die



**Abbildung 3.6.:** Wie Abbildung 3.1, aber Zugrichtung ist  $\langle 111 \rangle$  und initialisiert mit FR-Quellen (i),  $d\sqrt{\rho} = 10.97$ . Zusätzlich ist der Bereich des Spannungsabfalls mit einem grauen Balken hinterlegt.

Korrelation der plastischen Dehnung aus Produkten von gleitfähigen Reaktionen einen höheren Wert als die des Rests ( $r_{\text{gl}} = -0.88$ ,  $r_{\text{rest}} = -0.03$ ). Tabelle 3.3 zeigt die ermittelten Korrelationskoeffizienten.

Der Datensatz, welcher [Stricker und Weygand, 2015] zugrunde liegt<sup>4</sup>, zeigt leicht andere Werte bei gleicher Tendenz: Nach der Sortierung haben 60% der Spannungsabfälle eine höhere (negative) Korrelation mit der plastischen Dehnung von Versetzungen, die aus gleitfähigen Reaktionen entstanden sind und die entsprechenden Pearson Korrelationskoeffizienten sind  $r_{\text{gl}} = -0.75$  und  $r_{\text{rest}} = -0.12$  [Stricker und Weygand, 2015].

<sup>4</sup>Der Datensatz der Veröffentlichung hinterlässt nach gleichem Sortierschema 74 Datenreihen. Die verwendete Methode zur Berechnung der plastischen Dehnung konnte im Vergleich zum Datensatz der Veröffentlichung hinsichtlich Genauigkeit optimiert werden.

Wert	Gleitfähig	Rest
Anzahl Spannungsabfälle	338	727
Anteil	46 %	54 %
$\langle r \rangle$	-0.88	-0.03

**Tabelle 3.3.:** Zusammenfassung der Korrelationmittelswerte aus 331 Simulationen von Spannungsabfall mit plastischer Dehnung aus Versetzungsdichte, die aus gleitfähigen Reaktionen entstanden ist und dem Rest.

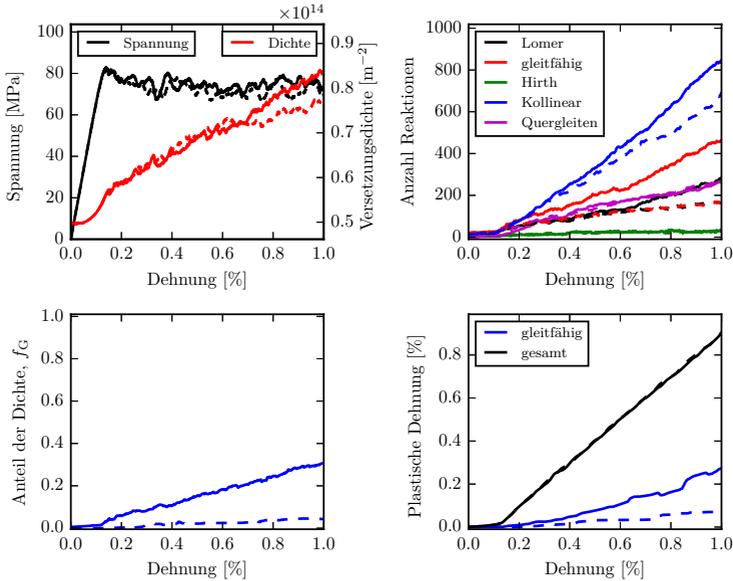
Zusammenfassend bedeutet dies, dass es möglich ist, Spannungsabfälle mit dem Anstieg der plastischen Dehnung aus Reaktionsprodukten der gleitfähigen Reaktion zu korrelieren. Wenn diese tatsächlich korrelieren, dann ist der  $r$ -Wert im Vergleich zur Korrelation mit der plastischen Dehnung aus den restlichen Versetzungen deutlich höher im Sinne einer negativen Korrelation, während der Koeffizient für den Rest keine Korrelation zeigt.

### Simulationen mit gleicher Anfangsstruktur mit und ohne gleitfähigen Reaktionen

Als weitere Validierung des Effekts, den gleitfähige Reaktionen auf die Verformung haben, dienen zunächst 10 verschiedene Anfangsstrukturen, bei denen jeweils ein Zugversuch mit implementierter konstitutiver Regel der gleitfähigen Reaktion und ein Zugversuch ohne gerechnet wird. Die Kantenlänge ist  $d = 1 \mu\text{m}$ , die Anfangsversetzungsdichte beträgt  $5 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$ . Diese ist gleichmäßig als FR-Quellen auf allen Gleitsystemen verteilt. Exemplarisch folgt ein Vergleich für einen Fall. Keine der anderen Simulationen zeigt qualitative oder quantitative (bis auf *normale* Streuungen) Unterschiede.

Abbildung 3.7 zeigt einen Vergleich von zwei Simulationen mit gleicher Anfangsstruktur, eine mit und eine ohne den Mechanismus zur Bildung von gleitfähigen Reaktionen. Konkret wird die über ein konstitutives Gesetz implementierte Reaktionsbildung nicht ausgeführt. Das heißt die Versetzungen wechselwirken zwar über ihr Spannungsfeld, produzieren aber keine *neue* Versetzung. Dass es dennoch ein paar Reaktionen gibt und wenig Dichte, die aus gleitfähigen Reaktionen stammt, liegt an gleitfähigen Reaktionen, die sich in der Gleitebene bilden können: Falls in einer Ebene zwei

Versetzungen miteinander reagieren, bilden sie eine Versetzung des dritten Gleitsystems.

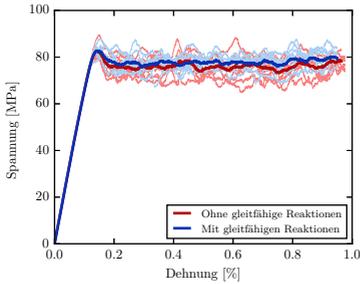


**Abbildung 3.7.:** Wie Abb. 3.1, aber: Zwei Simulationen mit gleicher Anfangsstruktur. Durchgezogene Linie: gleitfähiger Mechanismus an, gestrichelte Linie aus. Außerdem ist die Totaldehnung mit  $\varepsilon_{\text{tot}} = 1.0\%$  zum Ende der Simulation doppelt so hoch.

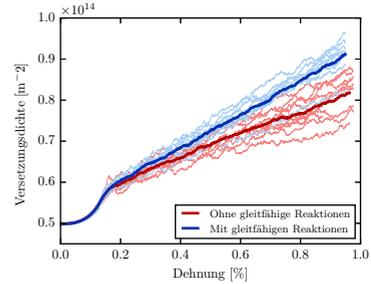
Das Fließspannungsniveau ist sowohl am Anfang sowie auch im Verlauf beider Simulationen auf einem sehr ähnlichen Niveau. Es gibt im Fall ohne den Mechanismus wenige kollineare Reaktionen, aber alle (bis auf die gleitfähige Reaktion) sind deckungsgleich. Auch die gesamte plastische Dehnung unterscheidet sich weder im Verlauf noch beim Endwert.

Abbildung 3.8(a) fasst alle Spannungs-Dehnungskurven dieser Simulationsreihe zusammen, inklusive einem arithmetischen Mittelwert. Die oben erwähnte Beobachtung bestätigt sich hier wieder: Beide Mittelwerte der Spannung liegen über den Verlauf der Simulation auf gleichem Niveau und auch die Streuung einzelner Simulationen ist ähnlich, wobei die Varianten

ohne die gleitfähige Reaktion breiter streuen. In Abbildung 3.8(b) sind die Verläufe der Gesamtversetzungsdichten sowie die Mittelwerte dargestellt. Die Gesamtversetzungsdichte entwickelt sich mit gleitfähiger Reaktion auf einem Niveau etwa 12,5% höher als die Simulationen ohne. Unter der Annahme, dass die Fließspannung proportional zur Wurzel der Gesamtversetzungsdichte ist  $\sqrt{\rho_{\text{tot}}}$ , sollten sich die Fließspannungen um etwa 6% unterscheiden. Dies ist jedoch nicht der Fall.



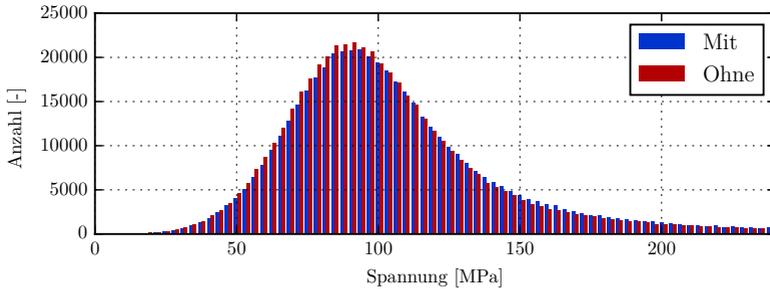
(a) Spannung über Totaldehnung.



(b) Gesamtversetzungsdichte über Totaldehnung

**Abbildung 3.8.:** Vergleich der Simulationen mit und ohne gleitfähiger Reaktion. Einzelwerte (dünn) und Mittelwerte (fett).

Um die lokalen Spannungen miteinander zu vergleichen, werden diese pro Freiheitsgrad des FE-Gitters (Auflösung von  $16 \times 48 \times 16$  Elemente, was einer Kantenlänge von 62,5 nm entspricht) pro Simulation bei  $\varepsilon_{\text{tot}} = 1\%$  ausgewertet. Die Spannungen sind pro Freiheitsgrad in von Mises Vergleichsspannungen umgerechnet. Abbildung 3.9 zeigt ein Histogramm der Summe der Datensätze mit und ohne gleitfähiger Reaktion. Die obere Grenze der Vergleichsspannung beträgt  $3 \times 80$  MPa, d.h. sie entspricht ungefähr der dreifachen stationären Fließspannung, damit Spannungsspitzen aufgrund von Singularitäten im Spannungsfeld von Versetzungen vernachlässigt werden. Der direkte Vergleich zeigt, dass es um die Fließspannung ( $75 \text{ MPa} < \sigma < 120 \text{ MPa}$ ) mehr Materialpunkte gibt als im Fall ohne gleitfähiger Reaktionen. Dies bedeutet, dass es im interessierenden Spannungsbereich um die Fließspannung eine leichte Erhöhung der lokalen von Mises Vergleichsspannung ohne gleitfähige Reaktion gibt.

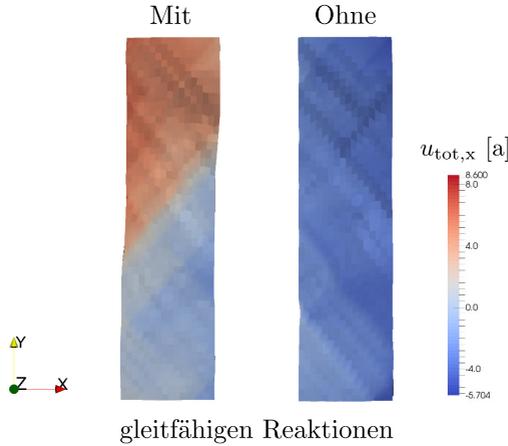


**Abbildung 3.9.:** Vergleich der Histogramme (von Mises Vergleichsspannung) mit und ohne gleitfähige Reaktionen der Simulationen aus Abb. 3.8.

Ein deutlicher Unterschied zwischen den zwei Varianten ist im direkten Vergleich der Verschiebung erkennbar. Abbildung 3.10 beinhaltet die Verformung von zwei gleich initialisierten Simulationen bei einer Totaldehnung in Zugrichtung von  $\varepsilon_{\text{tot}} = 1.0\%$  mit 25-facher Vergrößerung. Die Einfärbung entspricht der Totalverschiebung in  $x$ -Richtung. Beide Simulationen haben das gleiche makroskopische Spannungsniveau und auch eine Analyse einer von Mises-Vergleichsspannung zeigt keine Unterschiede in der Verteilung im Volumen. Die Unterschiede der Verschiebung - hier in  $x$ -Richtung - ist aber deutlich zu erkennen: Die Variante mit gleitfähigen Reaktionen zeigt eine deutlich sichtbare Verschiebung in die positive Richtung, während sich die Variante ohne gleitfähige Reaktionen in negative Richtung verformt. Die Unterschiede in der Verschiebung deuten makroskopisch darauf hin, dass die darunterliegende Versetzungsstruktur sehr unterschiedlich ist bzw. sich unterschiedlich entwickelt hat.

Tabelle 3.4 zeigt die Zahlenwerte für die minimale und maximale Verschiebung für die gleich initialisierten Proben aus Abbildung 3.10. Die Verschiebung in  $x$ -Richtung ist bei diesem Probenpaar nahezu asymmetrisch: Die Probe mit gleitfähigen Reaktionen verformt sich stark in positive  $x$ -Richtung, die ohne gleitfähige Reaktionen in negative  $x$ -Richtung.

Diese Tendenz zeigt sich aber nicht über alle gleich initialisierten Simulationen. Die Variation in der Verschiebung ist über alle Simulationen hinweg erkennbar, ob mit oder ohne gleitfähigen Reaktionen, in der glei-



**Abbildung 3.10.:** Visualisierung der Verformung mit 25-facher Vergrößerung von zwei Simulationen mit gleicher Anfangsstruktur bei einer Totaldehnung in Zugrichtung von  $\varepsilon_{\text{tot}} = 1.0\%$ . Die Einfärbung entspricht der Gesamtverschiebung in  $x$ -Richtung in Gitterkonstanten.

Gleitfähig	$u_{x,\min}$ [nm]	$u_{x,\max}$ [nm]
Mit	-1,01	3,47
Ohne	-2,05	0.47

**Tabelle 3.4.:** Absolute Werte für die Verschiebung  $u_x$  für die Simulationen aus Abb. 3.10

chen Größenordnung.

Zusätzlich zur Simulationsreihe mit 10 gleichen Proben von oben, gibt es noch eine weitere Simulationsreihe mit einer Variation der Größen, Richtungen und Anfangsdichten, bei denen jede Anfangsstruktur einmal mit und einmal ohne den Mechanismus der gleitfähigen Reaktion gerechnet ist. Alle Simulationen dieser Reihe sind mit FR-Quellen initialisiert. Tabelle 3.5 gibt einen Überblick über den Wertebereich und die Anzahl pro Größe. Im Rahmen dieser Simulationsreihe ist es nicht sinnvoll Dehnungen aus gleitfähigen Reaktionen zu untersuchen, da die Hälfte der Simulationen

Größe $d$ [ $\mu\text{m}$ ]	Anzahl Konfigurationen	$d\sqrt{\rho}$ Bereich bei $\varepsilon_{\text{tot}} = 0.5\%$
0.5	23	2.3 – 8.4
1.0	13	6.1 – 10.7
1.5	12	3.6 – 11.4
2.0	8	2.4 – 5.9

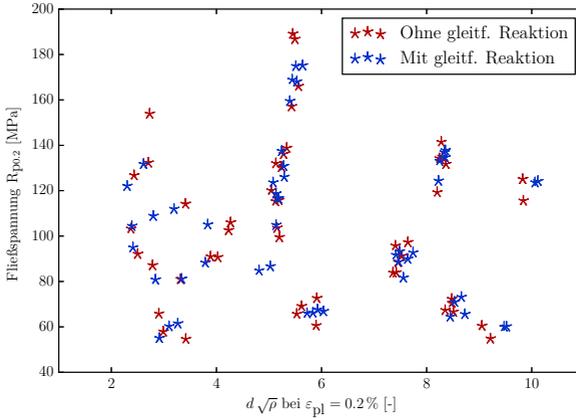
**Tabelle 3.5.:** Überblick über die Anzahl und  $d\sqrt{\rho}$  Bereiche der Simulationen zum direkten Vergleich der gleitfähigen Reaktion mit und ohne gleitfähiger Reaktion, sortiert nach der Kantenlänge  $d$ . Die Anzahl ist die Summe und Zugrichtungen. Die Anfangsstruktur besteht aus FR-Quellen.

diese nicht enthalten. Die 10-Simulationen-Reihe von oben deutet an, dass es nur wenig bzw. keinen Unterschied in der stationären Fließspannung bei einem Vergleich mit und ohne gleitfähiger Reaktion (siehe Abb. 3.8(a)). Im Folgenden wird deshalb die technische Fließspannung, also die Spannung bei einer plastischen Dehnung von  $\varepsilon_{\text{pl}} = 0.2\%$ , untersucht.

In Abbildung 3.11 sind die technischen Fließspannungen über  $d\sqrt{\rho}$  mit der Dichte  $\rho$  bei Erreichen der Fließspannung aus der Simulationsreihe von Tabelle 3.5 dargestellt. Neben kleinen Unterschieden bei der Fließspannung, ist kein genereller Trend feststellbar, der die Simulationen mit gleitfähiger Reaktion von denen ohne unterscheidet.

Der Vergleich der 10-Simulationen-Reihe von oben bezüglich Verschiebungen deutet darauf hin, dass sich die darunter liegende, anfänglich identische Mikrostruktur während der nominell *gleichen* Belastung anders entwickelt. Deshalb werden nun die topologischen Veränderungen der Simulationsreihe aus Tabelle 3.5 untersucht.

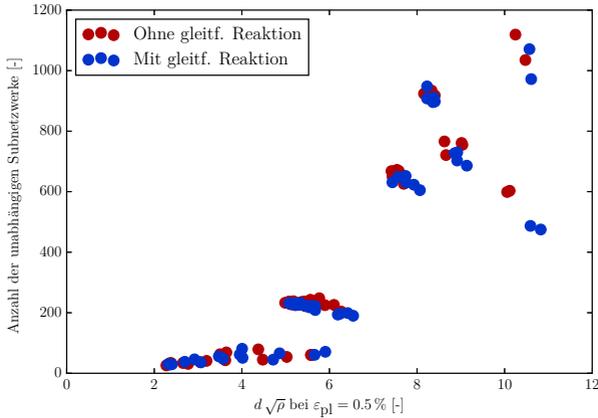
Die Multiplikation von Versetzungen durch die gleitfähige Reaktion hat zur Folge, dass ein gegebenes Netzwerk tendenziell *vernetzter* ist. Das bedeutet, dass sich eine Anfangsstruktur, die einmal mit und einmal ohne gleitfähigen Mechanismus belastet wird, im Fall mit gleitfähiger Reaktion ein dichteres, bzw. zusammenhängenderes Netzwerk ausbilden sollte. In Abbildung 3.12 ist die Anzahl der Subnetzwerke pro Simulation über  $d\sqrt{\rho}$  dargestellt. Als Subnetzwerk wird hier ein Teil der Versetzungsstruktur



**Abbildung 3.11.:** Fließspannung über  $d\sqrt{\rho}$  bei  $\varepsilon_{pl} = 0.2\%$  der Simulationen mit und ohne gleitfähiger Reaktion.

innerhalb eines Simulationsvolumens bezeichnet, das keine Verbindung zu einem anderen Teil der Versetzungsstruktur hat. Im einfachsten Fall kann sich hinter einem Subnetzwerk eine einzelne Versetzung verbergen, im komplexesten Fall aber auch ein durch Reaktionen und Quergleiten verbundenes Netzwerk, das aus vielen Tausend Versetzungen besteht. Über die Größe der Subnetzwerke wird durch diese Darstellung keine Aussage getroffen. In Abbildung 3.12 ist ein zwar kleiner, aber durchgehender Trend erkennbar: Die Simulationen ohne gleitfähige Reaktion haben mehr Subnetzwerke, die nicht miteinander verbunden sind.

Eine zusätzliche topologische Aussage über den Vernetzungsgrad lässt sich über die Anzahl der Verbindungen eines Knoten treffen. Im allgemeinen Fall einer einzelnen Versetzung ist die Anzahl der Verbindungen pro Knoten 2: Jeder Knoten ist, mit Ausnahme von Oberflächenknoten, mit mindestens zwei anderen über ein Segment topologisch verknüpft. Im Fall einer gleitfähigen Reaktion haben mindestens 2 Knoten 3 Nachbarn (siehe Abb. 2.2). Auch andere Versetzungsreaktionen können Knoten mit 3 Nachbarn hinterlassen. Deswegen ist dieses Maß nicht dazu geeignet, gleitfähige Reaktionen aus einem Netzwerk zu isolieren, kann aber trotzdem dazu dienen, Unterschiede zwischen zwei Mikrostrukturen zu charakterisieren.

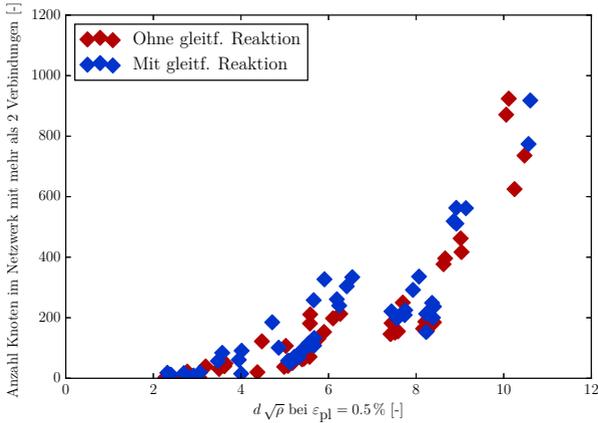


**Abbildung 3.12.:** Anzahl der Subnetzwerke pro Simulation über  $d\sqrt{\rho}$  bei  $\varepsilon_{PI} = 0.5\%$  der Simulationen mit und ohne gleitfähiger Reaktion.

Es lässt sich eine qualitative Tendenz der Vernetzung ableiten. Die Anzahl der Knoten pro Simulation, die mindestens 3 Nachbarn haben, ist in Abbildung 3.13 dargestellt. Auch hier ist wieder ein kleiner, aber durchgängiger, Trend identifizierbar: Die Simulationen mit gleitfähiger Reaktion haben mehr Knoten mit mindestens 3 Nachbarn, was auf eine *stärkere* Vernetzung der Versetzungsstruktur schließen lässt.

In Abbildung 3.11 und stärker in den Abbildungen 3.12 und 3.13 fällt eine Gruppierung von Werten auf. Hier zeigen sich zum einen die identischen Anfangsstrukturen, die einmal mit und ohne gleitfähiger Reaktion simuliert wurden und sich sowohl in  $d\sqrt{\rho}$  (also in Dichte und Größe) am gewählten Auswertepunkt sowie in der ausgewerteten Größe nur in Tendenzen unterscheiden.

Die Untersuchung der Auswirkung der gleitfähigen Reaktion ist mit diesen Ergebnissen nun abgeschlossen und es folgt die Darstellung der Ergebnisse zur Fragestellung der Versetzungswechselwirkung über Korngrenzen hinweg.



**Abbildung 3.13.:** Anzahl der Knoten im Versetzungsnetzwerk mit mehr als 2 Verbindungen pro Simulation über  $d\sqrt{\rho}$  bei  $\epsilon_{pl} = 0.5\%$  der Simulationen mit und ohne gleitfähiger Reaktion.

## 3.2. Korngrenzen

Korngrenzen sind im verwendeten Framework der Versetzungsdynamik als undurchdringbare Hindernisse implementiert. Die Unterschiede zwischen zwei Körnern ergeben sich durch deren differente kristallographische Orientierung. Eine räumliche Ausdehnung, wie sie sich bei realen nicht hochsymmetrischen Korngrenzen im atomaren Bereich manchmal findet, hat eine Korngrenze hier nicht.

Soweit nicht anders bezeichnet haben alle Bikristalle Abmessungen von  $1.5\ \mu\text{m} \times 0.75\ \mu\text{m} \times 0.75\ \mu\text{m}$  in  $x$ ,  $y$ ,  $z$ -Raumrichtung. Die Verdrehung im Kippkorngrenzfall geschieht um die  $z$ -Achse, die der Drehkorngrenzen um die  $x$ -Achse.

Die Auswertung des plastischen Dehnung erfolgt nach Formel 2.4. Dabei ist die Auflösung der Auswertung wählbar (Postprocessing). Die Formel wird anschließend pro Subvolumen und pro Versetzung ausgewertet und summiert.

Die mechanische Randbedingung ist, wo nicht anders beschrieben, eine

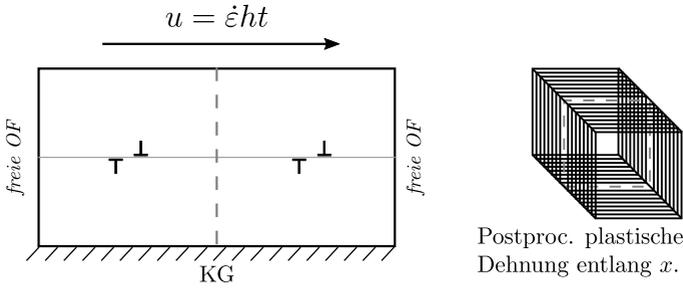
inhomogene Scherung: Eine Verschiebungsrandbedingung von  $u_x = u_y = u_z = 0$  am unteren Rand und eine dehnratengesteuerte Verschiebung  $u_x = \dot{\epsilon}t$  am oberen Rand.

### 3.2.1. Bikristall, eine Gleitebene, effektive Auslöschung

Zur Veranschaulichung des Modells wird ein *quasi*-2D Fall herangezogen. *Quasi* deshalb, da es sich im Prinzip um einen zweidimensionalen Fall handelt, aber im Dreidimensionalen gerechnet wird. Abbildung 3.14 stellt schematisch den Bikristall dar, der dafür verwendet wird: Zwei gleich große, kubische Körner mit einer Kantenlänge von  $0.75\ \mu\text{m}$  und gleicher kristallographischer Orientierung sind durch eine künstliche Korngrenze getrennt. Sobald Versetzungen diese erreichen, werden sie numerisch gestoppt. Drei unterschiedliche Fälle werden gezeigt:

- (1) Als Referenz für optimale Transmission wird die künstliche Korngrenze entfernt: Das Resultat ist ein Einkristall der doppelten Länge.
- (2) Eine Variante, die eine volle Transparenz für die Spannungs- und Verschiebungsfelder von Versetzungen über die Korngrenze hinweg gewährleistet, also volle Wechselwirkung.
- (3) Eine Variante ohne Transparenz und damit auch ohne Wechselwirkung der Spannungsfelder. Die Versetzungen wechselwirken allerdings trotzdem indirekt über ihre Verschiebungsfelder, da die Korngrenze eine Kodeformation beider Körner ermöglicht.

In Abbildung 3.15 werden die Ergebnisse für die drei Fälle veranschaulicht. In Abbildung 3.15(a) sind die Scherspannungsverläufe dargestellt. Die Variante (1) ohne künstliche Korngrenze zeigt elastisch perfekt-plastisches Verhalten. Sobald die aufgelöste Schubspannung die kritische Spannung der Quelle erreicht, wird eine neue Versetzung emittiert, die das ganze Volumen durchlaufen kann und damit den ganzen Kristall hindernisfrei abschert. Variante (2) mit elastisch transparenter Korngrenze zeigt makroskopisch das gleiche Verhalten. Sobald die kritische Spannung erreicht ist, werden gleichzeitig die Quellen in beiden Körnern aktiviert, die dann bis zur Korngrenze laufen und sich somit dort durch ihre Spannungs- und Verschiebungsfelder effektiv auslöschung (vergl. Abb. 2.5). Variante (3)

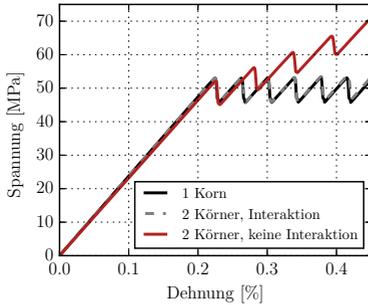


**Abbildung 3.14.:** *Quasi-2D* Fall für die effektive Transmission von plastischer Dehnung. Links: Schematischer Bikristall mit einer planaren Korngrenze (KG), links und rechts freie Oberflächen (OF) mit Scherbelastung. In beiden Körnern befindet sich eine FR-Quelle gleicher Größe sowie gleichem Burgersvektor. KG in der Mitte in grau gestrichelt markiert. Rechts: schematische Darstellung der Scheiben, in denen die plastische Dehnung in Richtung der Scherung ausgewertet wird.

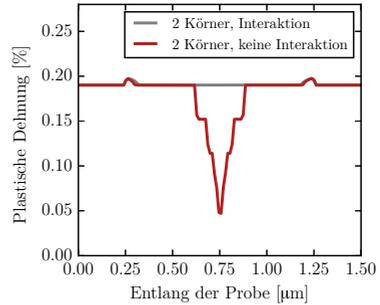
ohne elastisch transparente Korngrenze zeigt einen deutlichen Anstieg der Spannung, was an dem Aufstau der Versetzungen an der Korngrenze liegt. Die Nicht-Auslöschung der elastischen Felder der Versetzungen ist effektiv wie eine Wand.

Die Nicht-Auslöschung wird verdeutlicht im Dehnungsprofil in Abbildung 3.15(b). Der Zeitpunkt zu dem das Dehnungsprofil dargestellt ist entspricht dem Zeitpunkt, zu welchem jede Quelle vier Versetzungen emittiert hat. Die Fälle (1) und (2) unterscheiden sich nicht und zeigen einen konstanten Wert entlang der Scherrichtung. Variante (3) ohne Wechselwirkung zeigt den Aufstau der Versetzungen an der Korngrenze. An den Stufen des Profils ist die Position der einzelnen Versetzungen sichtbar. Die erste Versetzung, die von jeder Quelle emittiert wird, bewegt sich bis an die Korngrenze. Die Folgenden sehen deren Spannungsfeld und bleiben somit im Gleichgewichtsabstand stehen, der typisch für den Aufstau von Versetzungen an einem Hindernis ist.

In Abbildung 3.16 sind die Dehnungsprofile für den Fall mit und ohne Wechselwirkung wie in Abbildung 3.15(b) aus *continuum dislocation dynamics* (CDD) Simulationen dargestellt [Stricker et al., 2015]. Hier wird die



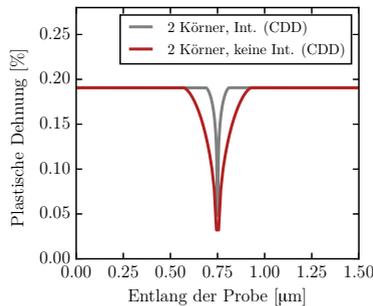
(a) Scherspannung über Scherdehnung.



(b) Plastische Dehnungsprofile entlang Scherrichtung nach 5 emittierten Versetzungen.

**Abbildung 3.15.:** Vergleich der Varianten (1)-(3): Ohne künstliche Korngrenze (Einkristall), mit und ohne Transparenz der künstlichen Korngrenze (Bikristall).

Dichteformulierung der CDD klar: Statt den einzelnen diskreten Stufen wie im DDD Profil ohne Wechselwirkung, ergibt sich ein kontinuierlicher Verlauf der plastischen Dehnung nahe der Korngrenze (ohne Wechselwirkung). Im Fall mit Wechselwirkung weist das CDD Profil an der Korngrenze einen Einschnitt statt eines durchgängigen Plateaus auf.



**Abbildung 3.16.:** Wie Abb. 3.15(b), für Ergebnisse aus CDD Simulationen.

### 3.2.2. Bikristall, Homogenisierung, ein Gleitsystem

Um mit diskreten Versetzungen der Kontinuumsrepräsentation einer Versetzungsdichte und damit einer *unscharfen* Wechselwirkung an der Korngrenze näher zu kommen, lassen sich neben der Erhöhung der Anzahl der Quellen zwei Parameter ändern:

Zum einen kann die Orientierung<sup>5</sup> der Quellen verändert werden, was eine diffuse Aktivierung der Quellen zur Folge hat. Diffus bedeutet, dass die Quellen nicht synchron und symmetrisch ausbauchen, wie im Fall aus Abbildung 3.14, sondern die Aktivierung einzelner Quellen zeitlich und örtlich variiert.

Zum anderen kann durch die Platzierung auf Gleitebenen, die sich nicht mehr exakt treffen, die Wechselwirkung und damit die perfekte Auslöschung an der Korngrenze selbst *verschmiert* werden.

Abbildung 3.17(a) stellt diese Überlegung schematisch dar: Aus diskreten Stufenversetzungen auf diskreten Gleitebenen mit eins-zu-eins-Wechselwirkung wird eine Dichteverteilung, die links und rechts der Korngrenze aufstaut und miteinander interagiert.

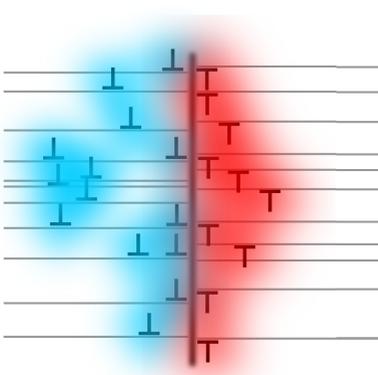
Die mechanische Randbedingung in diesem Kapitel ist eine homogene Scherung; Über die Höhe des Bikristalls wird eine linear zunehmende Verschiebung mit einer Dehnrate in  $x$ -Richtung vorgegeben. Sie ist eine lineare Interpolation von  $u_x = 0$  am unteren Ende und  $u_x = \dot{\epsilon}t$  am oberen Ende.

Eine entsprechende Momentaufnahme einer Versetzungsdynamiksimulation ist in Abbildung 3.17(b) dargestellt. Die Farbe der Versetzungen ist entsprechend der Zugehörigkeit zum linken oder rechten Korn gewählt. Zudem ist das geschnittene Volumen qualitativ nach der von Mises Vergleichsspannung eingefärbt. Diese zeigt im unteren Viertel direkt an der Korngrenze eine Spannungsüberhöhung und damit eine Lokalisierung, die typisch für die Betrachtung diskreter Systeme ist und später näher erläutert wird.

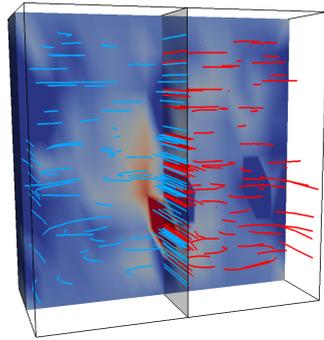
Abbildung 3.18 zeigt die Ergebnisse für zwei Varianten des nicht exakten Treffens von Versetzungen links und rechts der Korngrenze (hier als *Unschärfe* bezeichnet). Jede dieser Kurven ist über fünf Simulationen und

---

<sup>5</sup>Hier: bei festgehaltenem Burgersvektor im Laborsystem wird die Orientierung der Quelle variiert.



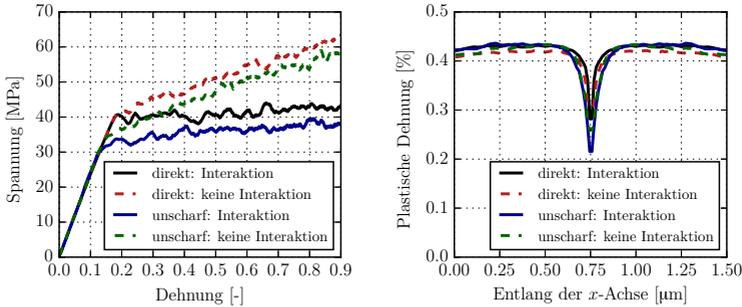
(a) Schematisch: Übergang von diskreten Versetzungen zu einer Dichtepäsentation.



Einfärbung: von Mises Vergl.sp.

(b) Versetzungsdynamik Momentaufnahme einer Konfiguration mit Variation der Orientierung und Bevölkering von nicht schneidenden Gleitebenen.

**Abbildung 3.17.:** Schema des Kontinuumsbilds der Wechselwirkung von Versetzungen über eine Korngrenze hinweg: Zufällig verteilte diskrete Versetzungen werden Approximation einer Dichtedarstellung (blau/rot für linkes/rechtes Korn).



(a) Rekonstruierte Scherspannung über (b) Plastische Dehnungsprofile entlang Scherrichtung bei konstanter makroskopischer plastischer Dehnung.

**Abbildung 3.18.:** Vergleich von vier Bikristallen: zwei Konfigurationen bei denen sich die Gleitebenen direkt treffen, zwei, bei denen sie sich nicht direkt treffen, jeweils mit und ohne elastische Wechselwirkungen über die Korngrenze hinweg. Jede Kurve ist eine Mittelung über fünf Simulationen.

über die Kristallsymmetrie gemittelt<sup>6</sup>. Auch hier ist die plastische Dehnung entlang der Scherrichtung in Scheiben ausgewertet (wie in Abb. 3.14, rechts). Die Randbedingung ist hier im Gegensatz zum Fall des Bikristalls (Abb. 3.14) eine aufgeprägte homogene Scherung über die komplette Höhe. Es findet keine Korrektur der Bildkräfte statt. Das FE Volumen wird nur dafür verwendet, damit das Volumen für Versetzungen endlich ist. Außerdem sind die Bikristalle nun doppelt so hoch, um die Anzahl der Gleitebenen entlang der Probenhöhe und damit den interessierenden Bereich der Korngrenze zu vergrößern.

Der erste Fall ist die Variation der Orientierung der Quellen in der Ebene, bei sich noch immer direkt treffenden Gleitebenen. Mit der gleichen Anfangsstruktur ist einmal der Fall mit und einmal der ohne elastische Wechselwirkung gezeigt. Eine weitere Variante ist zusätzlich um die Variation der Positionierung der Quellen auf Gleitebenen ergänzt, die sich nicht exakt treffen. Auch hier ist jeweils eine Realisierung mit und eine

<sup>6</sup>Die Mittelung über die Kristallsymmetrie bedeutet eine Mittelung des Profils punktsymmetrisch bei  $x = 0.75 \mu\text{m}$ .

ohne Wechselwirkung dargestellt. Die unterschiedlichen Fälle zeigen nun folgendes Verhalten:

**(I) Direkt, mit elastischer Wechselwirkung** Die Spannungs-Dehnungskurve hat einen nahezu elastisch perfekt-plastischen Übergang mit geringer Verfestigung. Die zeigt sich vor allem bei gleicher Dehnung im einfachen Fall aus Abbildung 3.15(a), d.h. bis zu einer Dehnung von etwa 0.4%. Das entsprechende Dehnungsprofil zeigt ein Plateau und fällt zur Korngrenze hin ab. Der Wert an der Korngrenze selbst ist im Vergleich der höchste.

**(II) Direkt, ohne elastische Wechselwirkung** Hier zeigt die Spannungs-Dehnungskurve eine lineare Verfestigung und im Vergleich das höchste Spannungsniveau. Das Profil ist im Wesentlichen gleich wie im Fall mit Wechselwirkung, allerdings ist das Spannungsniveau um einen Faktor von ca. 1.5 höher.

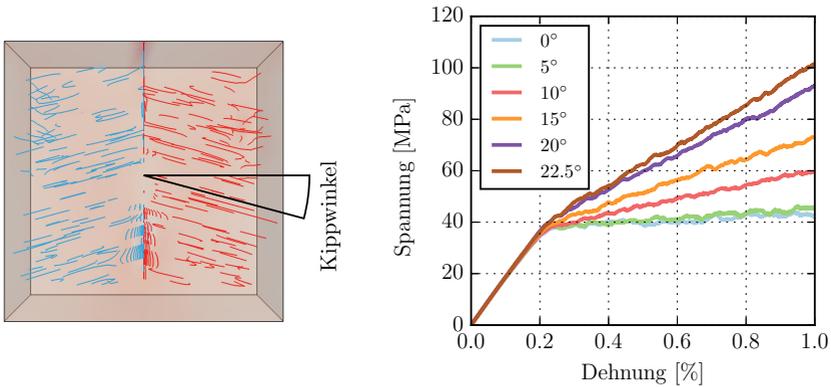
**(III) Unscharf, mit elastischer Wechselwirkung** Die Spannungs-Dehnungskurve zeigt im Vergleich die niedrigsten Werte. Sie liegt über den gesamten Verlauf der Belastung etwa 10% unter Fall (I). Sie zeigt am Anfang bei einer Dehnung bis 0.4% keinen linearen Bereich, sondern weist eine geringe Verfestigung auf. Das Dehnungsprofil ist in den Körnern selbst auf gleichem Niveau mit den anderen drei Fällen, der Wert direkt an der Korngrenze ist um etwa 20% geringer als in Fall (I).

**(IV) Unscharf, ohne elastische Wechselwirkung** Hier weist die Spannungs-Dehnungskurve auch eine lineare Verfestigung auf. Sie ist gleichauf mit der Variante (II). Ihr Dehnungsprofil ist den anderen gleich, aber wie Fall (II) auch bei deutlich höherer Spannung im Vergleich zu den Fällen (I) und (III).

### 3.2.3. Bikristall, ein Gleitsystem, symmetrische Kippkorngrenze

Der nächste Schritt der effektiven Auslöschung, immer noch ein quasi-2D Fall, ist die symmetrische Verkippung der Gleitsysteme in beiden Körnern. Ein residueller Burgersvektor bleibt hier auch dann vorhanden, wenn sich Versetzungen von links und rechts der Korngrenze direkt treffen (siehe

Abb. 2.5). In Abbildung 3.19(a) ist die Konvention für die Angabe des Winkels abgebildet. Ein Winkel von 5 % bedeutet einen Kippwinkel von insgesamt 10 %. Abbildung 3.19(b) zeigt die Spannungs-Dehnungskurven der Verkippungen von 0° bis 22.5°. Eine zunehmende Verkippung resultiert in einer stärkeren Verfestigung. Die Fälle<sup>7</sup> 0° und 5° Verkippung sind fast deckungsgleich, erst eine größere Verkippung macht sich am makroskopischen Verhalten bemerkbar.



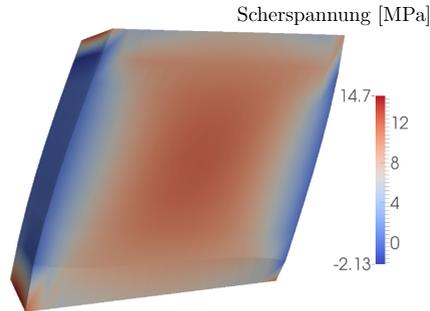
(a) Konvention für den Kippwinkel.

(b) Gemittelte Spannungs-Dehnungskurven, Variation des Kippwinkels.

### Abbildung 3.19.: Symmetrische Kippkornkrenze von Bikristallen.

Abbildung 3.20 zeigt die Scherspannungsverteilung des Bikristalls ohne Versetzungen. Die Oberfläche selbst ist spannungsfrei (nach Formel 2.6). Die Schubspannungskomponente, die die Bewegung von Versetzungen bewirkt, ist in der Mitte der Probe relativ homogen, wird aber zum Rand links und rechts zu Null. Die negativen Werte der Skala sind im Bereich der Kanten. Das hat zur Folge, dass den Versetzungen am Rand die Triebkraft fehlt und nur von innen kommende Versetzungen sie endgültig nach außen schieben können.

<sup>7</sup>Der Fall 0° entspricht mikrostrukturell dem Fall *unscharf mit Wechselwirkung* aus Abb. 3.18. Der Unterschied zum Fall oben ist eine inhomogene Randbedingung.

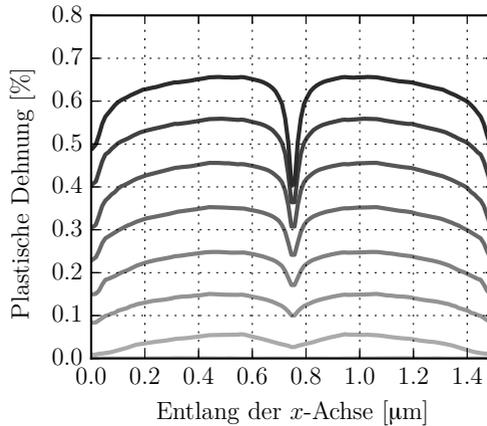


**Abbildung 3.20.:** Inhomogene Scherspannungsverteilung im Bikristall ohne Versetzungen. Passend zu Abb. 3.19.

Die plastischen Dehnungsprofile für den  $0^\circ$  Fall werden in Abbildung 3.21 veranschaulicht. Bei  $x = 0 \mu\text{m}$  und  $x = 1.5 \mu\text{m}$  wird deutlich, welche Auswirkung das inhomogene Scherspannungsfeld hat: Am Rand verlassen die Versetzungen wegen der entgegengesetzten Spannung das Volumen nur, wenn Versetzungen aus der Mitte auf Grund der Spannung im Inneren nach außen getrieben werden. Auf die Darstellung der weiteren Profile wird aus diesem Grund verzichtet.

Interessant ist hier aber die Entwicklung des Gradienten über den Belastungsverlauf. Mit zunehmender Totaldehnung steigt auch der Wert der plastischen Dehnung in den Volumina links und rechts an der Korngrenze. Des Weiteren wird der Gradient deutlich steiler. Diese Entwicklung ist nicht linear.

Bei symmetrischen Kippkorngrenzen gibt es eine weitere Auffälligkeit (unabhängig davon ob homogen oder inhomogen Scherung aufgebracht wird). Bei größerem Winkel formen die Versetzungen einen Wall. Am deutlichsten zeigt dies Abbildung 3.22 mit einem Ausschnitt vom Ende einer Simulation mit  $22.5^\circ$  Verkippung. Zu Beginn werden die FR-Quellen entsprechend ihrer Orientierung in der Gleitebene aktiviert. Am unteren Ende, an welchem die Gleitebene im Volumen bezüglich der Gleitrichtung kurz ist, stauen sich als erstes die Versetzungen an. Auch in der Mitte und weiter oben laufen Versetzungen im frühen Stadium der Belastung bis an die Korngrenze. Sobald sich aber mehrere Versetzungen in der Spitze des  $V$ 's übereinander angestaut haben, beginnen die Versetzungen weiter

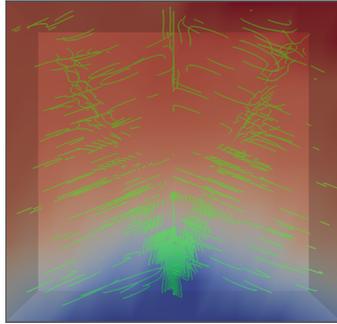


**Abbildung 3.21.:** Gemittelte plastische Dehnungsprofile zu Abb. 3.19 für den  $0^\circ$  Fall mit zunehmender makroskopischer Verformung in Schritten von  $\Delta\varepsilon_{pl} = 0.05\%$  (makroskopisch).

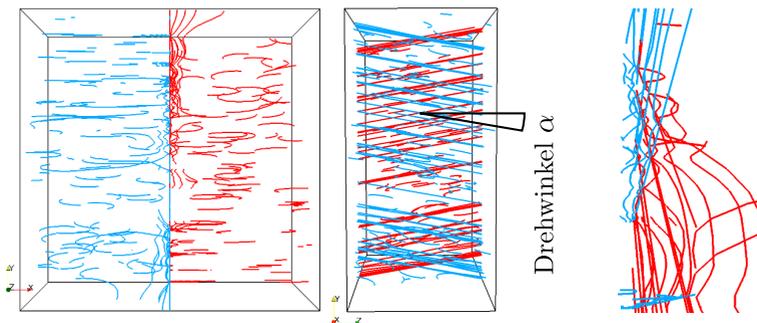
oben sich wieder von der Korngrenze weg zu bewegen und stoppen in der Verlängerung der Gleitebenennormale über den Versetzungen in der Spitze des V.

### 3.2.4. Bikristall, ein Gleitsystem, symmetrische Drehkorngrenze

Als nächste Stufe der geometrischen Komplexität folgt die symmetrische Drehkorngrenze mit einem Gleitsystem. In Abbildung 3.23 ist die Konvention für den Drehwinkel  $\alpha$  sowie die Mikrostruktur nahe der Korngrenze dargestellt. Auch hier bedeutet die Winkelangabe eine symmetrische Verdrehung und einen effektiven Drehkorngrenzwinkel des doppelten Werts. Durch die Markierung der Kornzugehörigkeit (links/rechts - blau/rot) wird in der rechten Darstellung die effektive Auslöschung deutlich. Dort, wo sich die Versetzungen links und rechts der Korngrenze schneiden, wird die Spannung verringert und die Versetzungen bewegen sich in Folge näher an die Korngrenze.



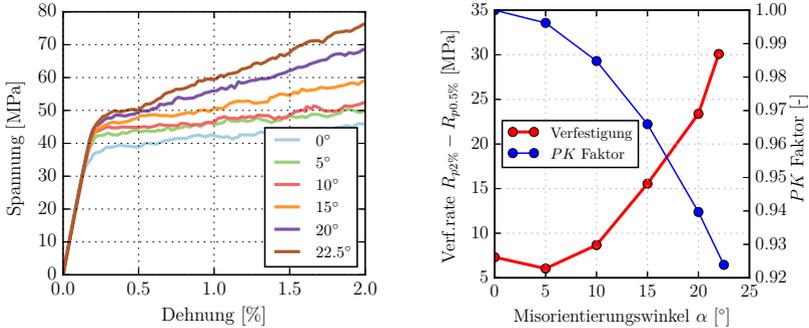
**Abbildung 3.22.:** Versetzungswall in V-Form bei symmetrischer Kippkorngrenze. Versetzungen in grün, die Einfärbung des Simulationsvolumens entspricht qualitativ der plastischen Verschiebung in Scherrichtung.



**Abbildung 3.23.:** Konvention für den Drehwinkel und Mikrostruktur nahe der Korngrenze. Blau/rot kennzeichnet die Zugehörigkeit von Versetzungen zum linken/rechten Korn.

In Abbildung 3.24(a) sind die gemittelten rekonstruierten<sup>8</sup> Spannungs-Dehnungskurven der sechs Drehkornrenzfälle dargestellt. Dabei steigt mit zunehmender Missorientierung die Verfestigung an. Der  $\alpha = 0^\circ$ -Fall zeigt hier, ebenso wie der Fall *unscharf mit Wechselwirkung* aus Abbildung 3.18(a), eine leichte Verfestigung und kein elastisch perfekt-plastisches Verhalten.

Abbildung 3.24(b) verdeutlicht die Verfestigung, die mit zunehmender Missorientierung nahezu quadratisch  $\propto \alpha^2$  zunimmt, sowie den Peach-Koehler-Faktor  $PK$ . Das ist der sog. Schmidfaktor, normiert auf den maximalen Schmidfaktor der Versetzungen bei Missorientierung  $\alpha = 0^\circ$ . Dieser nimmt mit zunehmender Verfestigung quadratisch ab  $\propto -\alpha^2$ , also genau invers zur Verfestigungsrate.



(a) Gemittelte rekonstruierte Spannungs-Dehnungskurven.

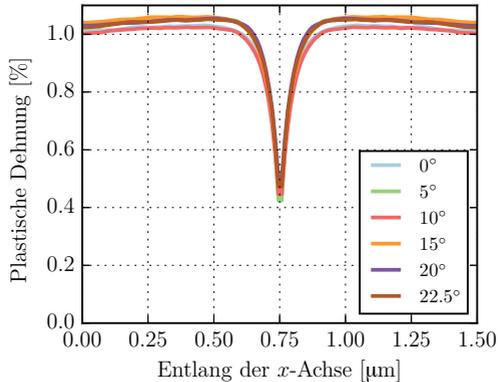
(b) Verfestigungsrate und Peach-Koehler Kraft Faktor.

**Abbildung 3.24.:** Spannungs-Dehnungskurven der Drehwinkelkorngrenzen mit einem Gleitsystem, Verfestigungsrate und Peach-Koehler Faktor.

Abbildung 3.25 zeigt die zugehörigen Dehnungsprofile für alle sechs Missorientierungen bei 1% makroskopischer plastischer Dehnung. Die Profile der verschiedenen Missorientierungen unterscheiden sich im Rahmen der Genauigkeit nicht. Alle haben ein Plateau vom Rand ( $x = 0 \mu\text{m}$ ,  $x = 1.5 \mu\text{m}$ )

<sup>8</sup>Da die makroskopische Spannung im ganzen Volumen homogen vorgegeben wird, ist im Nachhinein eine Rekonstruktion der Spannungs-Dehnungskurve nötig. Dazu wird die makroskopische plastische Dehnung pro Schritt ausgewertet und die Relaxation, die diese makroskopisch bewirkt von der vorgegebenen Spannung subtrahiert.

bis fast an die Korngrenze bei  $x = 0.75 \mu\text{m}$ . Die Gradienten an der Korngrenze sind identisch, wie auch die Werte der plastischen Dehnungen im letzten Mittelungsvolumen an der Korngrenze.

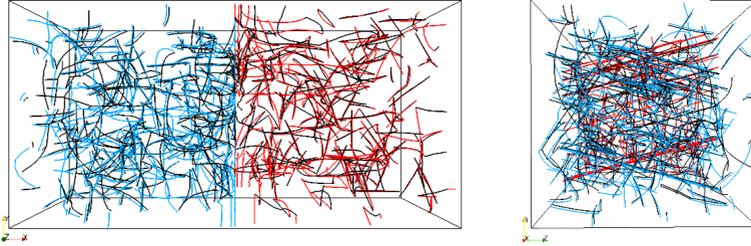


**Abbildung 3.25.:** Gemittelte plastische Dehnungsprofile entlang der Scherichtung für verschiedene Drehkorngrenzen bei konstant 1% makroskopischer plastischer Dehnung.

### 3.2.5. Bikristall, alle Gleitsysteme, symmetrische Drehkorngrenze

Um die Komplexität weiter zu erhöhen, werden im nächsten Schritt alle anderen Gleitsysteme ebenso bevölkert. Dies hat zur Folge, dass ein Gleitsystem einen höheren Schmidfaktor hat. Dennoch gibt es eine Verteilung bzw. Verschmierung in der Aktivierung, da die Quellen sich in ihrer Orientierung unterscheiden.

In diesem Kapitel werden zunächst die Ergebnisse aus Einzelsimulationen aufgezeigt.



**Abbildung 3.26.:** Momentaufnahme eines Bikristalls mit symmetrischer Drehkorngrenze mit homogener Scherbelastung, in dem alle Gleitsysteme bevölkert sind. Drei überlagerte Mikrostrukturen, Beschreibung im Text.

In Abbildung 3.26 ist eine Momentaufnahme der Mikrostrukturen aus drei Simulationen überlagert dargestellt:

- Blau: Mikrostruktur einer Simulation in der nur das linke Korn (K1) mit FR-Quellen initialisiert ist, das andere verhält sich rein elastisch.
- Rot: wie blaue Struktur, aber rechtes Korn (K2) mit Quellen initialisiert.
- Schwarz: Beide Körner sind mit FR-Quellen initialisiert und deformieren gleichzeitig, ohne Wechselwirkung der Spannungsfelder über Korngrenzen hinweg.

Der Fall *schwarz*, in dem beide Körner mit Quellen initialisiert werden, wird auf zwei verschiedene Arten simuliert. Einmal mit und einmal ohne Wechselwirkung der Versetzungen aus unterschiedlichen Körnern über ihr Spannungsfeld.

In Abbildung 3.26 ist zu erkennen, dass sich die Mikrostruktur der einzelnen Körner trotz unterschiedlicher Randbedingung an der Korngrenze sehr ähnlich sind (jeweils blau/rot gegen schwarz). Diese vier Simulationen lassen einen Vergleich zwischen verschiedenen Randbedingungen von Körnern an der gemeinsamen Korngrenze zu. Zum einen gibt es die bekannte Referenz mit zwei plastischen Körnern (wie Abb. 3.15, aber alle Gleitsysteme bevölkert), deren Versetzungen einmal über ihr Spannungsfeld und über ihr Verschiebungsfeld (hier als *mit Wechselwirkung* bezeichnet) wechselwirken und einmal nur über Verschiebungsfeld (hier als *ohne Wechselwirkung*

bezeichnet). Dies zeigt den Einfluss der Spannungswechselwirkung bei voller Gleitsystembevölkerung.

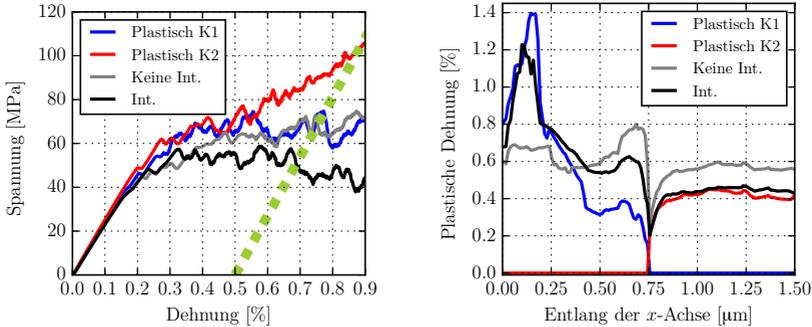
Des Weiteren ist beobachtbar, wie sich die anfänglich gleichen Mikrostrukturen der einzelnen Körner gegen jeweils ein elastisches Korn verhalten, was dazu dient, den Einfluss der Verschiebungsfeldwechselwirkung aufzuzeigen.

Abbildung 3.27 enthält die vier Spannungs-Dehnungskurven sowie die zugehörigen Dehnungsprofile bei einer makroskopischen plastischen Dehnung von  $\varepsilon_{pl} = 0.5\%$ . Bei jenen Fällen, in denen ein Korn mit einem elastischen Partner kodiformiert, wird die gesamte plastische Dehnung von einem Korn getragen.

Im direkten Vergleich zeigen alle ungefähr die gleiche Fließspannung von  $\approx 40$  MPa (Abb. 3.27(a)). Ab Überschreiten der Fließspannung zeigen sie jedoch ein anderes Verhalten. Korn 1 (K1) verfestigt erst leicht bis etwa 65 MPa, um dann bei relativ konstanter Spannung weiter plastisch zu verformen. Korn 2 (K2) zeigt ab der Fließgrenze eine lineare Verfestigung. Die Variante mit zwei plastischen Körnern ohne Spannungswechselwirkung zeigt nach Fließbeginn eine kleine lineare Verfestigung. Und die Variante mit voller Wechselwirkung besitzt nach Erreichen der anfänglichen Fließspannung zuerst ein Plateau von etwa 50 MPa, um dann ab 0.6 % Totaldehnung mit abnehmender Spannung weiter plastisch zu verformen.

Die zugehörigen plastischen Dehnungsprofile in Abbildung 3.27(b) weisen trotz Unterschieden ähnliche Tendenzen auf. Korn 1 weist bei  $x = 0.2 \mu\text{m}$  eine lokalisierte Dehnungsspitze auf und fällt zur Korngrenze bei  $x = 0.75 \mu\text{m}$  stark ab. Korn 2 verformt sehr homogen mit einem plateauähnlichen Verlauf, der mit einem Gradienten an der Korngrenze auf null geht. Im Fall von zwei bevölkerten Körnern ohne Spannungswechselwirkung ist im linken Korn ein Dehnungsplateau mit einem schmaleren Plateau am linken Rand und einer Dehnungsspitze mit scharfem Gradienten links der Korngrenze erkennbar. Die rechte Hälfte des Bikristalls plastifiziert homogen.

Im Fall voller Transparenz, also mit Spannungswechselwirkung, ist in der linken Hälfte die lokalisierte Spitze des einzeln deformierenden Korns auch vorhanden, allerdings mit 1.2 % plastischer Dehnung 16 % unter dem Maximum. Hin zur Korngrenze verläuft das Profil plateauähnlich mit einem leichten Hochpunkt wie im Fall ohne Wechselwirkung. Der Gradient links der Korngrenze ist im Fall Korn 1 alleine und mit Wechselwirkung etwa



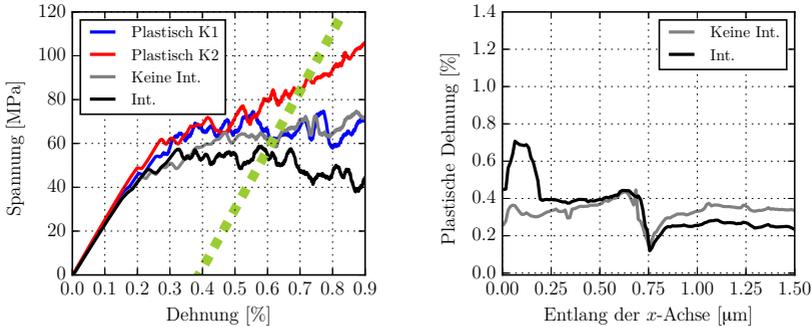
(a) Spannungs-Dehnungskurven mit elastischer Gerade bei makroskopischer plastischer Dehnung von 0.5 %.

(b) Dehnungsprofile bei konstanter makroskopischer plastischer Dehnung.

**Abbildung 3.27.:** Spannung und Dehnungsprofile der einzelnen Körner (K1, K2) gegen ein elastisches Korn sowie der Bikristall mit und ohne Wechselwirkung bei konstanter makroskopischer plastischer Dehnung.

gleich, während der Fall ohne Wechselwirkung deutlich steiler ist. Die rechte Hälfte plastifiziert in den Fällen mit und ohne Wechselwirkung näherungsweise gleich wie das Korn 2 alleine und auch die Gradienten sind sich sehr ähnlich. Zur Verdeutlichung: Während das rechte Korn (K2) in allen Fällen ähnlich ist, hat das Profil mit voller Wechselwirkung im linken Korn (K1) Eigenschaften aus den beiden anderen Fällen - hier sind die lokalisierte Spitze am linken Rand sowie die der leichte Anstieg mit scharfem Gradienten direkt links der Korngrenze erkennbar.

Da in Abbildung 3.27 die Profile bei gleicher makroskopischer plastischer Dehnung sehr unterschiedlich sind, folgt noch eine Auswertung der Profile für die Fälle mit und ohne Wechselwirkung bei nahezu gleicher Spannung. Abbildung 3.28(a) veranschaulicht den Punkt der Auswertung: Bei makroskopischer plastischer Totaldehnung liegen die beiden Spannungswerte für die Fälle mit und ohne Wechselwirkung bei knapp 60 MPa nahezu gleich hoch. Die zugehörigen Profile in Abbildung 3.28(b) sind dann bezüglich der Gradienten an der Korngrenze sehr ähnlich. Die Spitze im linken Korn im Fall von Wechselwirkung bildet dennoch ein Unterscheidungsmerkmal. Im rechten Korn bleibt das Plateau erhalten.



(a) Spannungs-Dehnungskurven und elastische Gerade für nahezu gleicher Spannung der Fälle mit und ohne Wechselwirkung.

(b) Dehnungsprofile für die Fälle mit und ohne Wechselwirkung bei konstanter makroskopischer plastischer Dehnung und nahezu gleicher Spannung.

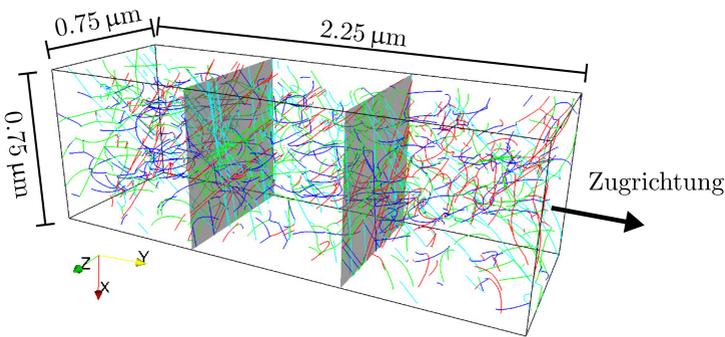
**Abbildung 3.28.:** Spannung und Dehnungsprofile der einzelnen Körner (K1, K2) gegen ein elastisches Korn sowie der Bikristall mit und ohne Wechselwirkung.

### 3.2.6. Trikristall mit Drehkorngrenzen unter Zugbelastung

Die Geometrie der Simulationen in diesem Kapitel geht auf [Aifantis et al., 2009] zurück und besteht aus drei kuboiden Körnern mit Kantenlänge  $0.75 \mu\text{m}$  mit  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung, die entlang der Zugachse angeordnet sind. Das mittlere Korn ist in [Aifantis et al., 2009] um  $35^\circ$  um die Zugachse verdreht. In [Bayerschen et al., 2015b] gibt es neben dieser auch eine Verdrehung um  $5^\circ$ , mit dem Ziel, die Unterschiede der Versetzungswechselwirkungen bei verschieden starker Missorientierung zu untersuchen. Außerdem ist die Zugrandbedingung eine andere: Während in [Aifantis et al., 2009] die Verschiebung der Oberfläche in  $x$ - und  $z$ -Richtung frei ist, ist die Verschiebung hier (und in [Bayerschen et al., 2015b]) nicht möglich - d.h. es gibt keine Querkontraktion von Oberflächen, die mit Verschiebungsrandbedingungen beaufschlagt sind ( $y = 0$  und  $y = y_{\text{max}}$ , siehe Abb. 3.29). Die Verschiebungsrandbedingung bei  $y = y_{\text{max}}$  wird mit einer Dehnrage von  $\dot{\epsilon} = 5000 \text{ s}^{-1}$  aufgebracht.

Den folgenden Ergebnissen liegen jeweils die gleichen Anfangsstrukturen

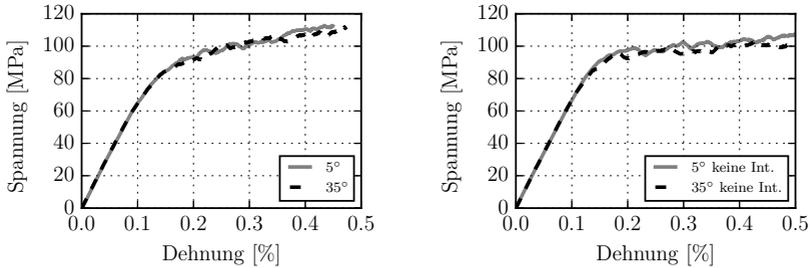
zugrunde: Fünf verschiedene Anfangsstrukturen werden jeweils für eine Verdrehung des mittleren Kornes mit und ohne Transparenz der Korngrenze für die elastischen Felder von Versetzungen berechnet. Hierbei ist insbesondere das mittlere Korn von Interesse, denn es hat, im Vergleich zu den Bikristallen in den vorherigen Kapiteln, zwei Korngrenz-Randbedingungen. Die Anfangsversetzungsdichte liegt bei  $\rho \approx 7.4 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$  und die Quelllänge ist mit  $\ell = 1/\sqrt{\rho} \approx 0.12 \mu\text{m}$  etwa doppelt so lang wie der mittlere Versetzungsabstand. Somit liegt das System im multiplikationsdominierten plastischen Regime [Aifantis et al., 2009, Kraft et al., 2010].



**Abbildung 3.29.:** Trikristall, schematisch mit Abmessungen und Zugrichtung. Korngrenzen sind als graue Flächen markiert.

Abbildung 3.30 zeigt die Spannungs-Dehnungskurven für  $5^\circ$  und  $35^\circ$  Drehkorngrenzen mit und ohne Wechselwirkung von Versetzungen über die Korngrenze hinweg. Die Varianten mit Wechselwirkung (Abbildung 3.30(a)), d.h. mit voller Transparenz der Spannungsfelder, unterscheiden sich nicht. Beide haben eine Fließspannung von etwa 80 MPa und zeigen danach lineare Verfestigung. Die Varianten ohne Wechselwirkung (Abbildung 3.30(b)) unterscheiden sich ebenfalls nicht, sie haben eine Fließspannung von etwa 90 MPa und zeigen danach eine kleinere, aber auch lineare Verfestigung.

In Abbildung 3.31 sind die Dehnungsprofile für beide Drehkorngrenzen mit (links) und ohne (rechts) Wechselwirkung entlang der Zugachse bei makroskopischer plastischer Dehnung von  $\varepsilon^{\text{Pl}} = 0.1, 0.2, 0.3\%$  dargestellt. Die Profile sind Mittelwerte über jeweils fünf Simulationen. Zudem wird



(a) Mit Transparenz für elastische Felder von Versetzungen.

(b) Ohne Transparenz für elastische Felder von Versetzungen.

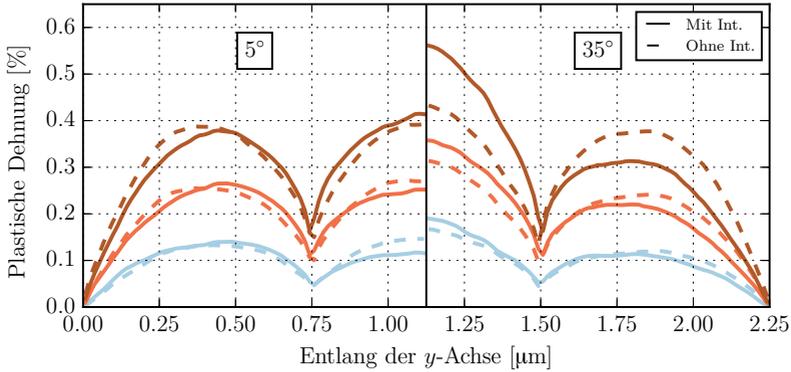
**Abbildung 3.30.:** Gemittelte Spannungs-Dehnungskurven von Trikristallen mit und ohne Transparenz für Spannungsfelder von Versetzungen für  $5^\circ$  und  $35^\circ$  Drehkorngrenzen. Jede Kurve ist über fünf Simulationen gemittelt.

durch Ausnützen der Kristallsymmetrie um  $y_{\max}/2$  ein weiterer Mittelungsschritt durchgeführt. Die kombinierte Darstellung bietet sich an, weil um  $0.75 \mu\text{m}$  kristallsymmetrisch gemittelt wird.

Die beiden Profile mit Wechselwirkung (links) unterscheiden sich in ihrer Verteilung. Die mit  $5^\circ$  *kleine* Missorientierung zeigt eine relativ gleichmäßige Verteilung der Dehnung in allen drei Körnern. Bei  $35^\circ$  Verdrehung ist das Profil dominiert von der plastischen Aktivität im mittleren Korn. Die Gradienten an den inneren Korngrenzen sind im  $5^\circ$  Fall symmetrisch bis zur Mitte der Körner. Im  $35^\circ$  Fall sind sie nur in der Nähe der Korngrenze bei gleicher makroskopischer plastischer Dehnung symmetrisch und weichen dann nach etwa  $0.1 \mu\text{m}$  stark voneinander ab: Im mittleren Korn bleibt die Steigung bis fast zur Kornmitte erhalten, während sie in den beiden äußeren Körnern schnell abnimmt.

In Abbildung 3.31 sind die Dehnungsprofile zu Abbildung 3.30 dargestellt. Da die Profile kristallsymmetrisch um  $y_{\max}/2$  gemittelt werden, bietet sich eine geteilte Darstellung an. In der linken Hälfte sind die Profile, aufsteigend für eine makroskopische plastische Dehnung von  $\varepsilon^{\text{pl}} = 0.1, 0.2, 0.3\%$  für eine Verdrehung des mittleren Kornes um  $5^\circ$  mit (durchgezogen) und ohne (gestrichelt) Transparenz für die Spannungsfelder von Versetzungen

dargestellt. Die rechte Hälfte zeigt die Profile für eine Verdrehung von  $35^\circ$ .



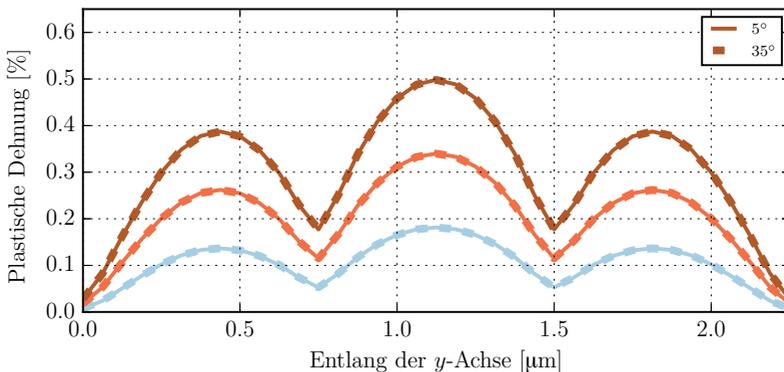
**Abbildung 3.31.:** Dehnungsprofile für Trikristalle mit  $5^\circ$  (links) und  $35^\circ$  Verdrehung des mittleren Kornes entlang der Zugrichtung bei  $\varepsilon^{\text{pl}} = 0,1, 0,2, 0,3\%$  makroskopischer plastischer Dehnung. Alle Profile sind sowohl über fünf Simulationen als auch kristallsymmetrisch bezüglich  $y_{\text{max}}/2$  gemittelt.

Die Profile bei einer kleinen Verdrehung von  $5^\circ$  sind mit und ohne Transparenz für Spannungsfelder relativ ähnlich. Bei  $y = 0 \mu\text{m}$  ist die unterscheiden sich die Gradienten mit zunehmender makroskopischer plastischer Dehnung. Bei  $\varepsilon^{\text{pl}} = 0,1\%$  sind die Profile im linken Korn noch relativ gleich, im mittleren Korn ist plastische Dehnung der Variante ohne Wechselwirkung höher. Bei  $\varepsilon^{\text{pl}} = 0,3\%$  kehrt sich dieses Verhältnis um. An der Korngrenze bei  $y = 0,75 \mu\text{m}$  sind die Gradienten für den Fall mit Wechselwirkung steiler. Auch die plastische Dehnung an der Korngrenze selbst ist leicht höher.

Im Gegensatz dazu unterscheiden sich die Profile der Verdrehung von  $35^\circ$  deutlich. Der Fall ohne Wechselwirkung ist den beiden  $5^\circ$  Profilen insofern ähnlich, als dass sich die Plastizität auf alle Körner relativ gleichmäßig verteilt. Das Profil mit Wechselwirkung zeigt eine deutliche höhere plastische Dehnung des mittleren Kornes, das sein Maximum in der Mitte der Probe bei  $y = 1,125 \mu\text{m}$  hat.

Zusammengefasst zeigen sich die folgenden Beobachtungen:

- Der  $5^\circ$  Fall mit Wechselwirkung zeigt eine relativ homogene Verteilung der plastischen Dehnung in den drei Körnern mit nahezu symmetrischen Gradienten links und rechts der beiden inneren Korngrenzen.
- Der  $35^\circ$  Fall mit Wechselwirkung zeigt dagegen eine inhomogene die Verteilung: Das mittlere Korn weist eine deutlich höhere plastische Verformung auf.
- Der  $5^\circ$  Fall ohne Wechselwirkung weist auch eine relativ homogene Verteilung der plastischen Dehnung der drei Körner auf, allerdings ist die plastische Dehnung nahe der Korngrenze nicht ganz so hoch wie im Fall mit Wechselwirkung.
- Die Profile des  $35^\circ$  Falls ohne Wechselwirkung zeigen eine Tendenz zur inhomogenen Verteilung des plastischen Dehnung in den einzelnen Körnern, diese ist jedoch nur schwach ausgeprägt im Vergleich zum Fall mit Wechselwirkung: Im mittleren Korn ist der Maximalwert der plastischen Dehnung höher als in den äußeren beiden Körnern.



**Abbildung 3.32.:** Wie Abb. 3.31, rechts, aber Ergebnisse aus Gradientenplastizitätssimulationen [Bayerschen et al., 2015b].

Abbildung 3.32 beinhaltet die entsprechenden Dehnungsprofile aus Kontinuumsimulationen mit Gradientenplastizität<sup>9</sup>. Diese Profile sind [Bayerschen et al., 2015b] entnommen. Das Kontinuumsmodell enthält Gradienten- und Korngrenzverfestigung auf Basis einer äquivalenten Dehnung. Die Ergebnisse sollen den Fall  $5^\circ$  und  $35^\circ$  mit Wechselwirkung abbilden. Der Verlauf der plastischen Dehnung ähnelt den Ergebnissen aus diskreten Versetzungsdynamiksimulationen. Die Werte an den Korngrenzen sind exakt gleich, da diese zur Kalibrierung verwendet werden (siehe [Bayerschen et al., 2015b] für das genaue Vorgehen). Eine Veränderung der Missorientierung des mittleren Kornes zeigt aber keine Veränderung der Ergebnisse.

---

<sup>9</sup>von Eric Bayerschen, ITM KIT Karlsruhe

# 4. Diskussion

## 4.1. Die gleitfähige Reaktion als Versetzungs-Multiplikationsmechanismus

Die in Kapitel 3.1 dargestellten Ergebnisse lassen erkennen, dass die gleitfähige Reaktion im beobachteten Dichte- und Größenregime häufig auftritt. Eine systematische Variation der Zugachse, der Größe und der Anfangsversetzungsdichte zeigt, dass die Versetzungen, die auf diesen Mechanismus zurückzuführen sind, bis zu einem Anteil von  $f_G = 0.9$  der Gesamtdichte ansteigen (Abb. 3.4). Dies geschieht allerdings nur bei den nicht equilibrierten Anfangsstrukturen. Der Anteil der Dichte aus gleitfähigen Reaktionen der relaxierten Strukturen ergibt einen Anteil von  $f_G \approx 0.5$ . Weiterhin verdeutlicht die Analyse des Beitrags zur makroskopischen plastischen Dehnung der Versetzungen als Produkt einer gleitfähigen Reaktion, dass die Reaktionen nicht nur gebildet werden, sondern die Reaktionsprodukte auch einen signifikanten Anteil an der plastischen Dehnung haben, also mobil sind. Dieser entspricht in etwa dem Anteil der Dichte (Abb. 3.5).

Eine Reduktion des Parameterraums durch die Multiplikation einer makroskopischen Kantenlänge  $d$  mit der Wurzel aus der mikrostrukturellen Versetzungsdichte  $\sqrt{\rho}$  erscheint sinnvoll zur Unterscheidung zwischen einzelquellengesteuerter und multiplikationsdominierter Plastizität: Unter  $d\sqrt{\rho} < 4$  streuen die Anteile der Dichte sowie die Anteile zur plastischen Dehnung zwischen 0 und 1. Ab  $d\sqrt{\rho} \approx 4$  sind die Anteile an Dichte und plastischer Dehnung relativ homogen bei  $\approx 0.5\%$  (Abb. 3.4 und 3.5). Kleine Werte ( $d\sqrt{\rho} < 4$ ) zeigen bei allen vier Zugrichtungen eine größere Variation als bei den Werten darüber. Die wenigen Quellen und das ungünstige Oberflächen- zu Volumenverhältnis begrenzen die Multiplikation von Versetzungen im unteren Bereich. Das zeigt sich im binären Verhalten für sehr

kleine  $d\sqrt{\rho}$ : Sowohl der Dichteanteil als auch der Beitrag zur plastischen Dehnung ist nahe 0 oder nahe 1. Die schwächste Quelle relaxiert das System<sup>1</sup>. Falls diese aus einer gleitfähigen Reaktion stammt, ist  $f_G$  größer und damit gleichzeitig auch die plastische Dehnung aus Reaktionsprodukten. Mit größerem Anfangswert von  $d\sqrt{\rho}$  wird eine einzelne Quelle weniger relevant und die Wahrscheinlichkeit für die Bildung von Reaktionen wird höher. Dies begünstigt im Allgemeinen sowohl die Bildung aber auch das Blockieren von Versetzungen im Volumen. Ab Werten von  $d\sqrt{\rho} \approx 4$  zeigen fast alle relaxierten Systeme einen Dichteanteil von  $f_G \approx 0.5$  und einen ähnlich großen Anteil der plastische Dehnung aus diesem Mechanismus. Der Parameter  $d\sqrt{\rho}$  eignet sich somit zur Charakterisierung des Regimes, in dem das Bauteilverhalten von Einzelquellen-dominiertem zu multiplikationsgesteuertem Verhalten übergeht.

### 4.1.1. Einfluss der Probengröße

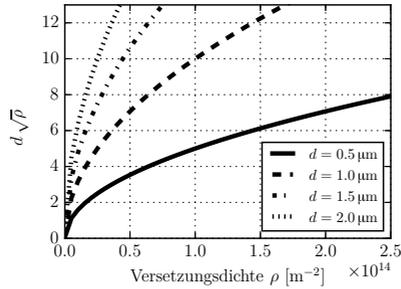
Abbildung 4.1 stellt für jede Probengröße  $d = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0 \mu\text{m}$   $d\sqrt{\rho}$  als Funktion der Versetzungsdichte  $\rho$  dar. Die Abbildung 4.1 verdeutlicht, dass die Probengröße  $d$  einen linearen Einfluss auf den dimensionslosen Parameter  $d\sqrt{\rho}$  hat. Darum folgt eine Aufschlüsselung der Ergebnisse aus Abbildung 3.5 nach  $d = 0.5 \mu\text{m}$  und  $d = 2.0 \mu\text{m}$ , um Unterschiede bei konstantem  $d\sqrt{\rho}$  zu diskutieren.

Abbildung 4.2 zeigt den Anteil der plastischen Dehnung aus gleitfähigen Reaktionen der Proben mit  $d = 0.5 \mu\text{m}$ . Der Anteil streut über alle Zugrichtungen im Bereich von  $\varepsilon_{\text{gl}}/\varepsilon_{\text{tot}} = 0 - 0.9$ . Dies ist typisch für kleine Proben, bei denen eine statistische Streuung der Antwort zu erwarten ist und bestätigt die obigen Aussagen zur Rolle einzelner Quellen in kleinen Proben.

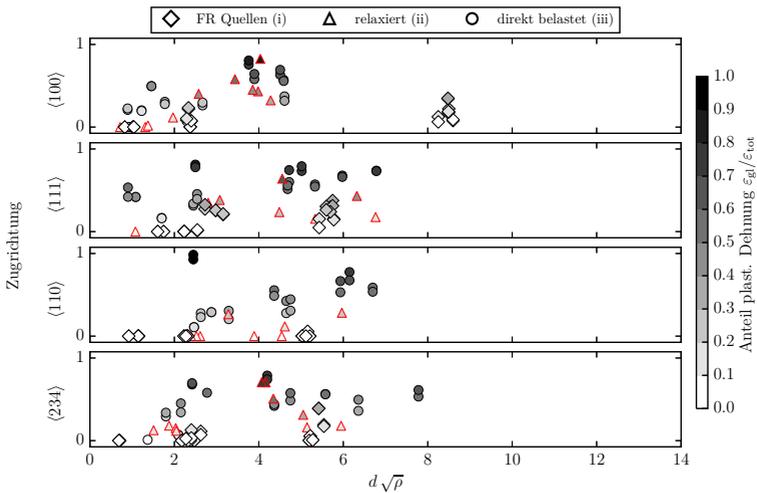
Der Anteil der plastischen Dehnung an der Gesamtdehnung der größten Proben mit  $d = 2.0 \mu\text{m}$  ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Außer bei kleinen Werten für  $d\sqrt{\rho} \lesssim 4$  ist der Anteil  $\varepsilon_{\text{gl}}/\varepsilon_{\text{tot}} \geq 0.4$ . Die Ausnahmen sind bei der  $\langle 110 \rangle$  Zugrichtung im Bereich von  $d\sqrt{\rho} \lesssim 4$  und enthalten einen Ausreißer bei der Zugrichtung  $\langle 100 \rangle$  bei  $d\sqrt{\rho} \approx 2$ .

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass sich die Probengröße  $d$  bezüglich

<sup>1</sup> Quelle bedeutet hier nicht zwangsläufig eine FR-Quelle, sondern alles, was als Quelle fungieren kann: stabile Konstrukte aus einer Relaxation, Quergleiten, etc.

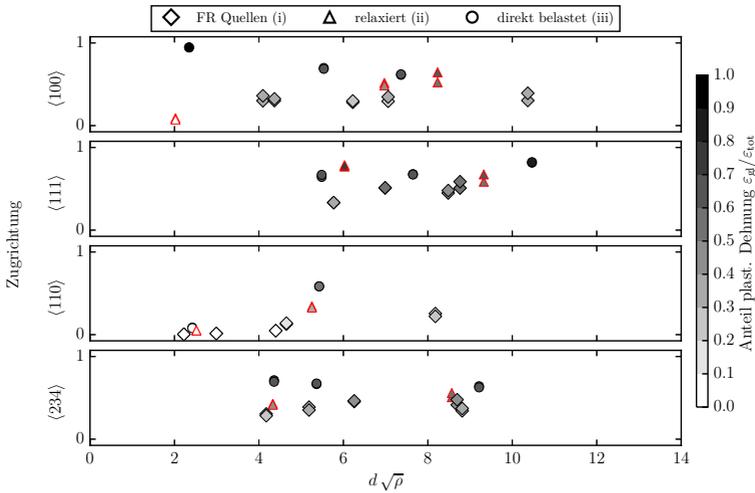


**Abbildung 4.1.:**  $d\sqrt{\rho}$  als Funktion der Versetzungsdichte  $\rho$  für die vier Probengröße  $d$ .



**Abbildung 4.2.:** Anteil der plastischen Dehnung, der aus gleitfähigen Reaktionen entstanden ist, für die Probengröße  $d = 0.5 \mu\text{m}$ .

dem Parameter  $d\sqrt{\rho}$  mit Hinblick auf den Anteil zur plastischen Dehnung von Versetzungen aus gleitfähigen Reaktionen ab etwa  $d\sqrt{\rho} \approx 4$  nicht signifikant auswirkt.



**Abbildung 4.3.:** Anteil der plastischen Dehnung, der aus gleitfähigen Reaktionen entstanden ist für die Probengröße  $d = 2.0 \mu\text{m}$ .

#### 4.1.2. Einfluss der Anfangsstruktur

Die Unterschiede aus den verschiedenen Anfangsstrukturen zeigen sich beim Verhalten bei sehr kleinen Dehnungen. Die relaxierten (ii) (Abb. 3.2) und direkt belasteten (iii) (Abb. 3.3) Konfigurationen zeigen keinen deutlichen linear elastischen Bereich im Gegensatz zur Anfangsstruktur mit FR-Quellen (Abb. 3.1). Da diese Strukturen zu Beginn der Simulation noch kein stabiles Netzwerk haben und von einem Gleichgewicht weit entfernt sind, bewegen sich die Versetzungen z.B. auch entgegen der Belastungsrichtung, was sich makroskopisch in einer Spannungszunahme zeigt, die steiler als die elastische Gerade ist (Abb. 3.3). Für den Fall von direkt belasteten Anfangsstrukturen (iii) liegt das daran, dass die angelegte äußere Spannung nicht ausreicht um den anfangs nicht equilibrierten Zustand zu stabilisieren.

Im Fall relaxierter Anfangsstrukturen (ii) wird im Relaxationsprozess eine Verschiebungsrandbedingung (Zug) angelegt. Bezüglich dieser Verschiebung – bzw. der induzierten Spannung – ist die Struktur stabil. Nun wird

in der tatsächlichen Simulation die Verschiebung wieder auf Null gesetzt und Teile des Versetzungsnetzwerks verlieren ihre Stabilität. Es kann sich lokal eine bezüglich des Relaxationsprozesses negative Spannung ergeben und Versetzungen verlassen entgegen der makroskopisch angelegten Spannung das Probenvolumen. Die Dichteentwicklung zeigt deswegen in beiden Fällen ohne FR-Quellen eine Abnahme der Versetzungsdichte am Anfang der Belastung.

Im Gegensatz dazu bewegen sich die Strukturen, die mit FR-Quellen initialisiert werden, nur bei einer Zunahme der Spannung und verhalten sich damit linear elastische bei sehr kleinen Dehnungen (Abb. 3.1). Die Anfangsstruktur wird über den Verlauf der Simulation weniger wichtig, jedoch kann ein Trend benannt werden: Der Anteil  $f_G$  und der Beitrag zur plastischen Dehnung ist für die relaxierten und die direkt belasteten Anfangsstrukturen tendenziell höher. Eine Erklärung hierfür ist, dass in den FR-Quellen-initialisierten Simulationen die Quellen nicht zerstört werden können. Deshalb bleiben diese aktivierbar und tragen somit auch zur Produktion neuer Versetzungsdichte bei, die nicht auf eine gleitfähige Reaktion zurückzuführen ist.

Es lässt sich also festhalten, dass die Art der Initialisierung der Anfangsstruktur zwar im Einzelfall große Unterschiede zur Folge haben kann. Wird allerdings ein Maß betrachtet, das wie hier bei einer Totaldehnung von  $\varepsilon_{\text{tot}} = 0.5\%$  ausgewertet wird, sind die beobachteten Trends über alle Anfangsstrukturen gleich. Diese Beobachtung bestätigt das aus der Literatur bekannte Ergebnis [Motz et al., 2009]: Relaxierte Strukturen ohne künstlich fixierte Punkte bilden im Relaxationsprozess bzw. während der Belastung Strukturen aus, die ähnlich stabil sind wie die fixierten Punkte von *künstlichen* FR-Quellen.

Als *realistischste* Anfangsstruktur sind die relaxierten Strukturen anzusehen. Der Relaxationsprozess lässt sich aber noch optimieren: Zum einen könnte man den Relaxationsprozess als Be- und Entlastungszyklus durchführen. Das führt zu einer stabilen Struktur bei Verschiebung Null. Zum anderen könnte man den Nullpunkt der Verschiebung der Simulation auf den Endpunkt der Relaxation setzen und damit der durch den Relaxationsprozess entstandenen plastischen Dehnung Rechnung tragen.

Die Strukturen, die mit FR-Quellen initialisiert werden, können auch als *realistisch* angesehen werden, wenn die Anzahl der künstlich festgehaltenen Segmente (bzw. ein Knoten des Segmentes) im Vergleich zur Gesamtanzahl der vorhandenen Segmente klein ist. Ein Minimum für das Verhältnis ist

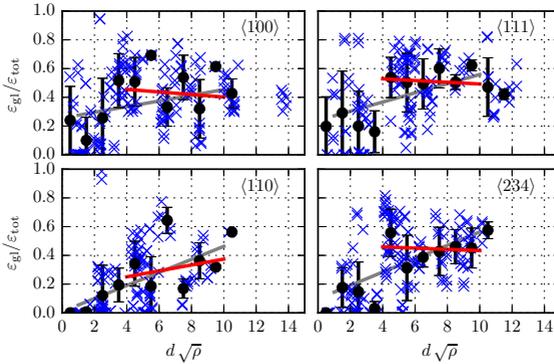
ein Faktor von etwa 10 von freien zu künstlich festgehaltenen Segmenten. Diese grobe Abschätzung ergibt sich aus einer Simulation, die bewusst künstlich initialisiert wird, indem die Länge der Quellen zu klein gewählt wird, also ihre kritische Spannung für das gegebene System zu hoch ist. Makroskopisch lässt sich an der Spannungs-Dehnungskurve zunächst eine Zunahme der Spannung beobachten. Danach fällt die Spannung wieder ab und das Spannungsniveau für plastisches Fließen ist deutlich kleiner. Beobachtet man die Mikrostruktur über diesen Bereich, zeigt sich Folgendes: Nachdem die angelegte Spannung ausreicht um die Quellen zu aktivieren, bildet sich durch Reaktionen ein Versetzungsnetzwerk mit einer dem System entsprechenden Quellverteilung. Das Verhältnis der künstlich festgehaltenen Segmente zur Anzahl aller Segmente im System hat sich von 40 % auf 8 % verringert.

Die am wenigsten realistische Anfangsstruktur ist die nicht equilibrierte, direkt belastete Variante. Sie ist nicht im Gleichgewicht und ist im Rahmen dieser Arbeit als nicht verwendbar anzusehen. Unverhältnismäßig viele Reaktionen, die bei kleinen Dehnungen im Ungleichgewicht entstehen, verzerren die Auswertung hin zu größeren Anteilen an der Dichte und plastischen Dehnung aus der gleitfähigen Reaktion.

### 4.1.3. Einfluss der aktivierten Gleitsysteme auf den plastischen Dehnungsanteil

Die Auswirkung in der kristallographischen Orientierung und damit die Anzahl der aktivierten Gleitsysteme ist nur im Bereich von  $d\sqrt{\rho} \lesssim 4$  erkennbar. In diesem Bereich streuen die Ergebnisse für den Anteil der plastischen Dehnung (Abb. 3.5) der Richtungen  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  zwischen 0 und 1, während bei den anderen beiden Richtungen  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 234 \rangle$  der Anteil der plastischen Dehnung bis auf einen Ausreißer  $\varepsilon_{\text{gl}}/\varepsilon_{\text{tot}} < 0.5$  ist. Für Werte von  $d\sqrt{\rho} > 5$  sind die Beiträge konstant hoch und die Zugrichtung hat einen vernachlässigbaren Einfluss.

Abbildung 4.4 zeigt die Anteile der plastischen Dehnung der Zugrichtungen mit Mittelwerten in Intervallen von  $\Delta d\sqrt{\rho} = 1$ , der Standardabweichung sowie einer linearen Approximation mit der Methode der kleinsten Quadrate über den gesamten Wertebereich (grau) und eine Approximation ab  $d\sqrt{\rho} \geq 4$  (rot). Die Approximation über den gesamten Wertebereich weist einen linearen Anstieg der plastischen Dehnung bei allen Zugrichtungen auf.



**Abbildung 4.4.:** Anteil der plastischen Dehnung aus gleitfähigen Reaktionen über  $d\sqrt{\rho}$ . Datensatz aus Abb. 3.5 mit Mittelwerten in Intervallen von  $\Delta d\sqrt{\rho} = 1$ , Standardabweichung und zwei linearen Approximationen.

Auffällig ist jedoch, dass sich bei allen Zugrichtungen außer der  $\langle 110 \rangle$  im Bereich ab etwa  $d\sqrt{\rho} \geq 4$  ein Plateau befindet. Eine lineare Approximation (rot) bestätigt diese Tendenz.

Im Datensatz aus [Stricker und Weygand, 2015] zeigen die drei Orientierungen, die Mehrfachgleitung ermöglichen, in etwa die gleiche Steigung bei einer Approximation über den gesamten Wertebereich, während die Einfachgleitrichtung eine etwas geringere Steigung aufweist. Als mögliche Erklärung wird in [Stricker und Weygand, 2015] die statistische Wahrscheinlichkeit benannt, mit der sich Versetzungen unterschiedlicher Gleitsysteme treffen können: Eine  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung hat acht Gleitsysteme mit Schmidfaktor  $m = 0.408$ , die anderen vier  $m = 0$ . Deshalb ist eine durch eine gleitfähige Reaktion entstehende Versetzung entweder mit maximalem Schmidfaktor oder null. Die Einfachgleitrichtung hingegen zeigt ein anderes Bild: Eine Versetzung des Gleitsystems mit dem höchsten Schmidfaktor bewegt sich durch weniger mobile Versetzungen und bildet damit auch eine gleitfähige Reaktion mit einem Schmidfaktor, der kleiner ist als das Maximum. Das führt tendenziell zur Verfestigung statt weiterer Mobilität der Reaktionsprodukte.

Im vorliegenden Datensatz steigen die Anteile der plastische Dehnung aller

Zugrichtungen auf etwa den gleichen Wert von  $\varepsilon_{\text{gl}}/\varepsilon_{\text{tot}} \approx 0.5$  bei  $d\sqrt{\rho} = 10$  (Abb. 4.4).

Die Unterschiede der beiden Datensätze lassen sich zu einer Aussage zusammenfassen: Über alle Orientierungen steigt der Anteil der plastischen Dehnung aus gleitfähigen Reaktionsprodukten mit zunehmender Größe und Dichte. Eine Extrapolation der linearen Approximation über den gesamten Wertebereich scheint nicht sinnvoll, da sich im vorliegenden Datensatz ab etwa  $d\sqrt{\rho} \geq 4$  ein Plateau bildet. Einen Hinweis zur Abschätzung, wie sich ein Kontinuum verhalten könnte, bietet Abbildung 4.3: Die größten Proben des vorliegenden Datensatzes zeigen ab  $d\sqrt{\rho} > 4$  hohe Werte für die plastische Dehnung aus gleitfähigen Reaktionen im Bereich von  $\varepsilon_{\text{gl}}/\varepsilon_{\text{tot}} \approx 0.5$ . Aus diesem Grund und aus der Beobachtung, dass sich für  $d\sqrt{\rho} > 4$  ein Plateau bildet (Abb. 4.4) kann man schließen, dass sich der Anteil der plastischen Dehnung für größere Proben in Richtung Kontinuumsbeschreibungen *unabhängig* von der Zugrichtung im Bereich von etwa  $\varepsilon_{\text{gl}}/\varepsilon_{\text{tot}} \approx 0.5$  bewegt. Das bedeutet, dass die gleitfähige Reaktion ein wichtiger Mechanismus zur Multiplikation von Versetzungen ist.

#### 4.1.4. Korrelation der Spannungsabfälle mit plastischer Dehnung aus Reaktionsprodukten

Die Untersuchung der Korrelation von Spannungsabfällen mit der plastischen Dehnung aus Reaktionsprodukten der gleitfähigen Reaktion zeigt eine direkte Verbindung für ein Drittel der betrachteten Abfälle (Tab. 3.3). Die teilweise Korrelation deutet darauf hin, dass plötzliche Versetzungsbewegung und damit einhergehende Relaxation, die in Mikrometer-Proben beobachtet werden [Csikor et al., 2007], zum Teil mit der Bildung von gleitfähigen Reaktionen zusammenhängen können. Die gleitfähige Reaktion hat als Reaktionsprodukt eine Versetzung mit neuem Burgersvektor, die einer Probe mit gegebener Versetzungstopologie einen neuen Weg zur Relaxation bieten kann. Da aus der vorliegenden Untersuchung nur hervorgeht, dass die gleitfähige Reaktion solch ein Relaxationsmechanismus sein kann, wird vorgeschlagen, die Bedingungen unter denen dies passiert genauer zu ermitteln.

#### 4.1.5. Vergleich gleicher Anfangsstrukturen mit und ohne gleitfähigem Reaktionsmechanismus

Ein Vergleich von Simulationen gleicher Größe und hoher Dichte mit gleicher Anfangsstruktur, die jeweils einmal mit und einmal ohne gleitfähige Reaktion gerechnet sind, zeigt keinen eindeutigen Trend bei den makroskopischen Größen, wie Fließspannung (Abb. 3.8(a)) oder eine von Mises Verteilung von Spannungswerten im Volumen (Abb. 3.9). Nur die Gesamtdichteentwicklungen zeigen einen Unterschied (Abb. 3.8(b)). Ein weiterer Unterschied ist beim direkten Vergleich von Verschiebungen einzelner Simulationen auszumachen (Abb. 3.10). Die zweite Simulationsreihe (Tab. 3.5), bei der ein breiter Wertebereich von  $d\sqrt{\rho}$  und allen Zugrichtungen abgedeckt wird, zeigt auch beim makroskopischen Wert der technischen Fließspannung  $R_{p0.2}$  keinen eindeutigen Trend.

Wird hingegen das Versetzungsnetzwerk genauer untersucht, so zeigt sich, dass die Vernetzung im Fall mit gleitfähiger Reaktion größer ist, weil es weniger *einzelne* Versetzungen, bzw. Subnetzwerke in einzelnen Simulationen gibt (Abb. 3.12) und der Vernetzungsgrad innerhalb der Struktur größer ist (Abb. 3.13).

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der makroskopische Einfluss auf das Spannungs-Dehnungsverhalten einer Probe vernachlässigbar ist. Ist man jedoch an einer genauen Modellierung interessiert, die die korrekte plastische Verschiebung aus der zugrunde liegenden Versetzungsbewegung liefert, so wird die gleitfähige Reaktion benötigt. Sie sorgt für ein tendenziell dichteres Netzwerk (Abb. 3.12 und 3.13), das dabei keine höhere Fließspannung als Folge hat. Bei den Simulationen bei denen die gleitfähige Reaktion *abgeschaltet* ist, werden die Versetzungen durch reine Spannungswechselwirkung immobilisiert. Die Variante mit der Bildung einer neuen Versetzung bietet dem System dagegen zum einen die Möglichkeit, eine andere Komponente des Spannungstensors zu relaxieren, zum anderen geht dies aber auch direkt mit der Bildung neuer Versetzungsdichte einher. Das heißt, die Bildung neuer Versetzungsdichte durch eine Reaktion und damit ein Beitrag zur Verfestigung wird durch die Möglichkeit der lokalen Relaxation aufgehoben. Diese mikroskopischen Tendenzen deuten darauf hin, dass der Mechanismus der gleitfähigen Reaktion vor allem in speziellen Lastfällen, wie z.B. in Gradienten, eine größere Rolle spielt, wo

lokale Veränderungen in der Versetzungsstruktur eine andere, eventuell einfachere, Relaxation der lokalen Spannungen ermöglichen.

#### 4.1.6. Entwicklung eines Kontinuumsmodells für die Bildung neuer Versetzungsdichte durch die gleitfähige Reaktion

Die Rolle, die die gleitfähige Reaktion bei der Zugverformung unter oben genannten Bedingungen spielt, ihre Auswirkung auf die makroskopische Verformung (siehe Abb. 3.10) und die Korrelation mit Spannungsabfällen verdeutlichen die Wichtigkeit dieses Mechanismus. Deshalb wird im Folgenden eine Ratenformulierung zur Bildung von Versetzungsdichte entwickelt, die sich in versetzungsdichte basierten Kontinuumsformulierungen verwenden lässt [Stricker und Weygand, 2015].

Es wird die Nomenklatur von Abbildung 2.2 verwendet. Die Indizes 1, 2 bezeichnen die beiden Primär-Gleitsysteme, deren Reaktion auf Gleitsystem mit Index 3 eine gleitfähige Versetzung erzeugt und somit als Quelle dient. Die Argumentation folgt dem Vorgehen der Reaktionsbildungsrate aus [Ma und Roters, 2004].

Die Bildungsrate des aktiven Systems mit einem Waldsystem wird ausgedrückt über eine Kollisionsfrequenz  $\phi_i$ . Zur Ermittlung wird der mittleren Versetzungsabstand  $L_j$  des Gleitsystems  $j$  durch

$$L_j \propto \frac{1}{\sqrt{\rho_j}} \quad (4.1)$$

herangezogen. Dabei bezeichnet  $\rho_j$  die Versetzungsdichte auf System  $j$ . Die Kollisionsfrequenz  $\phi_i$  von Versetzungen auf Gleitsystem  $i$  mit Dichte  $\rho_j$  ist dann gegeben durch

$$\phi_i = \frac{v_i}{L_j} \quad i \neq j, \quad (4.2)$$

wobei  $v_i$  die Versetzungsgeschwindigkeit des Gleitsystems  $i$  bezeichnet. Die gesamte Produktionsrate  $\dot{\rho}_3$  ergibt sich nun durch die Wechselwirkung

einer mobilen Dichte auf Gleitsystem 1 mit einer Dichte auf Gleitsystem 2 und umgekehrt:

$$\dot{\rho}_3 \propto \rho_1 \phi_1 + \rho_2 \phi_2. \quad (4.3)$$

Daraus ergibt sich

$$\dot{\rho}_3 \propto \rho_1 v_1 \sqrt{\rho_1} + \rho_2 v_2 \sqrt{\rho_2}. \quad (4.4)$$

Wird nun die Orowan-Gleichung  $\rho_i v_i = \dot{\gamma}_i / b$  für jedes System  $i$  eingesetzt, führt dies zu

$$\dot{\rho}_3 = C (\sqrt{\rho_1} |\dot{\gamma}_2| + \sqrt{\rho_2} |\dot{\gamma}_1|) \quad (4.5)$$

$$\dot{\rho}_1 = \dot{\rho}_1 - \dot{\rho}_3, \quad (4.6)$$

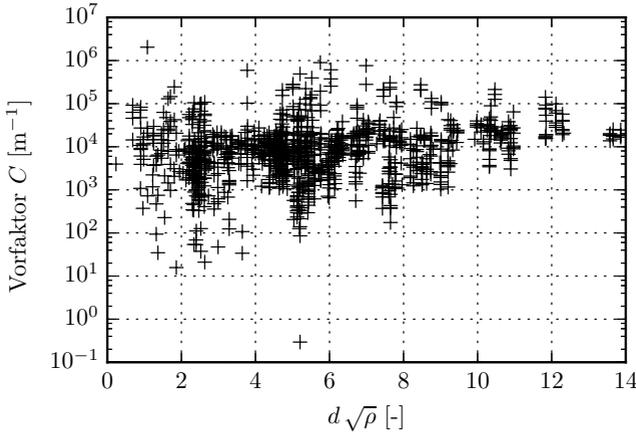
$$\dot{\rho}_2 = \dot{\rho}_2 - \dot{\rho}_3. \quad (4.7)$$

Hierbei ist  $C$  in erster Näherung eine Konstante, die von der Norm des Burgersvektor  $b$  und der effektiven Länge der neu produzierten Reaktion abhängt. Da die Wechselwirkungsrate unabhängig vom Vorzeichen der Bewegung ist (und damit auch von der Richtung der plastischen Dehnung  $\dot{\gamma}_i$ ), werden hier die absoluten Beträge der Dehnraten verwendet. Zusätzlich müssen beide bildenden Systeme um die gleiche Rate kleiner werden.

Physikalisch zeigt diese Gleichung sinnvolle Grenzwerte: Für eine von Null verschiedene Bildungsrate auf System 3 müssen beide Dichten  $\rho_i$  von Null verschieden sein und mindestens eine Dichte muss sich bewegen, was durch die Dehnrate des Systems gewährleistet ist.

Für eine sinnvolle Verwendung des Modells aus Gleichung 4.5, muss zumindest eine Größenordnung für den Parameter  $C$  bestimmt werden. Eine untere Grenze von  $C$  kann unter der Annahme bestimmt werden, dass die Dichtezunahme auf Gleitsystemen mit Schmidfaktor  $m = 0$  nur auf der Bildung der gleitfähigen Reaktion beruht. Da die Versetzungen keine Kraft erfahren, können diese nicht ausbauchen und somit multiplizieren. Diese Dichtezunahme wird nun pro Simulation für ein Gleitsystem mit Schmidfaktor  $m \approx 0$  gemessen und mit der Vorhersage aus dem Modell (Gleichung 4.5) verglichen. Die Skalierungskonstante der Vorhersage mit

dem tatsächlich gemessenen Wert ergibt den Vorfaktor  $C$ . Die genaue Vorgehensweise zur Bestimmung ist in Anhang B.2 beschrieben. Diese Vorgehensweise wird nun auf alle Simulationen aus Tabelle 3.2 angewendet. Pro Simulation wird jedes Gleitsystem mit Schmidfaktor von  $m \approx 0$  ausgewertet. Für Zugrichtung [100] sind das vier Gleitsysteme, [110] acht, [111] sechs und [234] eines.



**Abbildung 4.5.:** Vorfaktor  $C$  aus Formel 4.5 für alle Paarungen; ermittelt wie beschrieben in Anhang B.2.

Abbildung 4.5 zeigt die ermittelten Konstanten der  $m \approx 0$  Gleitsysteme. Da die Spannweite sehr groß ist, ist eine logarithmische Darstellung gewählt. Hier ist der Vorfaktor als Funktion von  $d\sqrt{\rho}$  dargestellt. Jede andere Darstellung hätte auch gewählt werden können, wie z.B. über die Größe, Dichte, Anteil an plastischer Dehnung oder die Zugrichtung; Es ergibt sich keine Korrelation mit einer offensichtlichen Größe. In der gewählten Darstellung wird aber deutlich, dass mit zunehmender Dichte und Größe, also größerem  $d\sqrt{\rho}$  und damit auch ausgeglichener Bildungswahrscheinlichkeit, die Variation des Parameters deutlich abnimmt und der Mittelwert in etwa der gleichen Größenordnung mit ca  $10^4 - 10^5 \text{ m}^{-1}$  bleibt. Der rechte Rand der Abbildung geht von der Dichte und Größe der Simulationen in ein Kontinuumsverhalten über und eine Extrapolation

ergibt dann etwa einen Wert von  $C = 10^4 - 10^5 \text{ m}^{-1}$ . Die Erweiterung des versetzungsdichtebasierten Modell `dislotwin` des *open source* Kristallplastizitätscode DAMASK [Roters et al., 2012] um die Bildung der gleitfähigen Reaktion aus Gleichung 4.5 wird im Folgenden beschrieben. Neben der Implementierung von Formel 4.5 ist auch eine Interaktionsmatrix zur Bildung von gleitfähigen Reaktionen nötig (entspricht den roten Kästchen aus Abb. 2.3). Tabelle 4.1 zeigt alle gleitfähigen Reaktionen wie in DAMASK implementiert.

Zielsystem	Bild.	Systeme
1	2+6	3+11
2	1+6	3+7
3	1+11	2+7
4	3+5	6+8
5	3+4	6+10
6	4+8	5+10
7	5+9	8+12
8	1+9	7+12
9	1+8	5+7
10	2+12	9+11
11	4+12	9+10
12	2+10	4+11

**Tabelle 4.1.:** Reaktionstabelle für die gleitfähige Reaktion in DAMASK-Notation.

Details zur Implementierung finden sich im Anhang C. Ein einfacher Zugversuch dient als Beispiel der Auswirkungen der zusätzlichen gleitfähigen Reaktion. Das elastische Problem wird mit dem in DAMASK enthaltenen Spektrallöser gelöst. Die Geometrie ist ein gleichseitiger Würfel mit einer Diskretisierung von  $2 \times 2 \times 2$  Elementen<sup>2</sup>. Die Randbedingungen des

<sup>2</sup>Das ist die minimale Anzahl für den Spektrallöser. Es soll kein Problem mit Anfangs- und Randbedingungen gelöst, sondern nur die Funktionalität der Erweiterung

Spektrallösers sind der Deformationsgradient  $\dot{\mathbf{F}}$  und der Piola-Kirchhoff-Spannungstensor  $\bar{\mathbf{P}}$

$$\dot{\mathbf{F}} = \begin{bmatrix} 1 \times 10^{-3} & * & 0 \\ 0 & * & 0 \\ * & * & * \end{bmatrix} \text{ s}^{-1}, \quad (4.8)$$

$$\bar{\mathbf{P}} = \begin{bmatrix} * & 0 & * \\ * & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ MPa}, \quad (4.9)$$

wobei \* für eine freie Komponente steht.

Um die Auswirkungen der gleitfähigen Reaktionen zu verdeutlichen, wird der Vorfaktor künstlich hoch auf  $C = 2 \times 10^7 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$  gesetzt. Die restlichen Materialkonstanten und Fitting-Parameter sind an Aluminium angepasst. Die Zugrichtung ist in  $x$ . Das bedeutet, die Systeme 1, 4, 7 und 10 haben einen Schmidfaktor von  $m = 0$ , alle anderen  $m = 0.408$ .

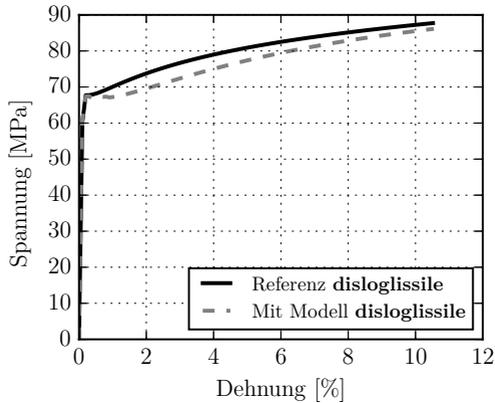
Zu Beginn werden alle Systeme mit  $m = 0$ , sowie System 2 mit einer Dichte von  $0.8 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$  bevölkert. Das entspricht einer Gesamtversetzungsdichte von  $\rho_{\text{tot}} = 4 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ .

Abbildung 4.6 zeigt die Spannungs-Dehnungskurven des erweiterten Modells mit und ohne gleitfähiger Reaktion. Die Fließspannung liegt in beiden Fällen mit  $\sigma_f \approx 68 \text{ MPa}$  gleich auf, die Verfestigung ist ähnlich, allerdings bleibt die Variante mit gleitfähiger Reaktion immer leicht unter der Variante ohne. Das ist den Versetzungsdynamiksimulationsergebnissen aus Abbildung 3.8 sehr ähnlich: Die Fließspannung ist auf gleichem Niveau und während der plastischen Verformung gibt es makroskopisch keinen großen Unterschied.

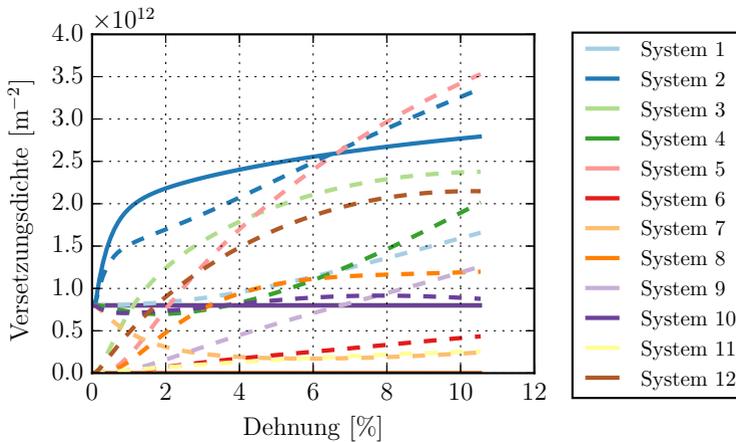
Abbildung 4.7 zeigt die Versetzungsdichteentwicklung aller Gleitsysteme mit und ohne gleitfähiger Reaktion. Ohne gleitfähige Reaktion (durchgezogen) ist das einzige System mit Dichteänderung das anfängliche bevölkerte

---

getestet werden. Die tatsächliche Größe ist irrelevant, weil sich alles homogen verhält.



**Abbildung 4.6.:** Spannungs-Dehnungskurven des Plastizitätsmodells mit und ohne gleitfähiger Reaktion aus DAMASK.



**Abbildung 4.7.:** Versetzungsdichteentwicklung einzelner Gleitsysteme mit (gestrichelt) und ohne (durchgezogen) gleitfähiger Reaktion aus DAMASK.

System 2 mit Schmidfaktor  $m = 0.408$ . Alle andere Systeme bleiben auf ihrer anfänglichen Dichte von  $0.8 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ . Mit gleitfähiger Reaktion (gestrichelt) gelingt es, alle anderen Systeme im Lauf der Belastung zu bevölkern.

Ein physikalischer Fall, der diese Mikrostruktur zu Beginn der Belastung hat könnte so entstanden sein: Zuerst werden die drei Systeme durch Zug in eine Einfachgleitrichtung bevölkert, während alle anderen nahezu unbevölkert bleiben. Danach folgt die hier dargestellte Zugbelastung in eine Mehrfachgleitrichtung und das obige Bild stellt sich ein.

## 4.2. Elastische Wechselwirkung von Versetzungen durch Korngrenzen

### 4.2.1. Effektiver Dehnungstransport in zwei Dimensionen und Vergleich mit CDD

Die Idee der effektiven Transmission von Versetzungen durch die Superposition der Spannungs- und Verschiebungsfelder wird in zweidimensionalen diskreten Versetzungsmodellen schon erfolgreich verwendet [Balint et al., 2005, 2008, Quek et al., 2014, 2015]. In diesen Modellen stellt die Korngrenze (wie auch hier) ein physikalisch undurchdringbares Hindernis für Versetzungen dar. Das physikalische Bild, das dahinter steckt (siehe Abb. 2.5) ist im Zweidimensionalen auch anschaulich. Was bisher in der Literatur gefehlt hat, ist eine systematische Untersuchung dieses Modells und ein Vergleich mit fehlender Transparenz (keine elastische Wechselwirkung) für die Spannungswechselwirkung von Versetzungen.

Das erste Setup (Abb. 3.14) ist dazu da, den Fall von Stufenversetzungen im Dreidimensionalen abzubilden und zeigt auch das erwartete Ergebnis: Ist die Transparenz für Spannungsfelder gegeben, ergibt sich in der Größenordnung der plastischen Dehnung effektive Transmission (Abb. 3.15(b), graue Kurve). Nachdem die ersten beiden Versetzungen sich effektiv auslöschten, gleiten die folgenden Versetzungen in eine spannungsfreie Korngrenze. Dieses Verhalten ist makroskopisch nicht von dem Fall zu unterscheiden, der keine künstliche Korngrenze enthält.

Wird die Korngrenze intransparent für die Spannung von Versetzungen, ergibt sich ein Aufstau von Versetzungen bei entsprechend höherer makroskopischer Spannung (Abb. 3.15(a)) und der entsprechenden Signatur im Dehnungsprofil (Abb. 3.15(b), rote Kurve).

Zwei Beobachtungen lassen sich an diesem Modell festhalten:

- Obwohl die Korngrenze ein undurchdringbares Hindernis für Versetzungen ist, ergibt sich im Fall von Spannungstransparenz ein Wert von ungleich 0 für die plastische Dehnung. Das liegt daran, dass die plastische Dehnung in Scheiben (Abb. 3.14) ausgewertet wird und die Scheiben jeweils links und rechts der Korngrenze liegen. Der

Wert der Korngrenze selbst ergibt sich dann aus der Interpolation der Werte links und rechts davon.

- Korngrenzfließen, also eine finite plastische Dehnung, heißt nicht zwangsläufig, dass Versetzungen von einem in das nächste Korn transmittiert werden müssen.

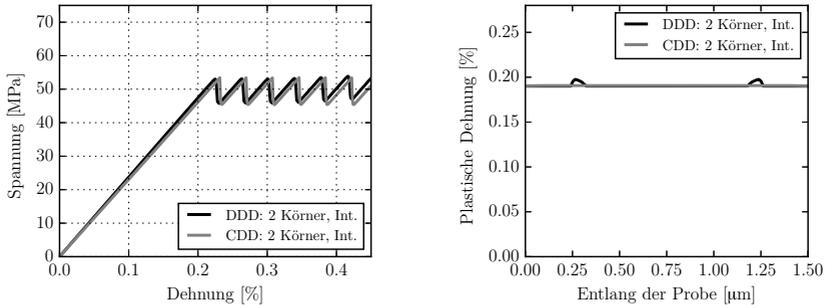
Zusammenfassend bedeutet dies, dass in einem einfachen Fall wie diesem für die diskrete Versetzungsdynamik kein zusätzliches Transmissionskriterium nötig ist, sofern zu Beginn Versetzungsquellen in beiden Körnern vorhanden sind.

Das CDD Profil ohne elastische Wechselwirkung aus Abbildung 3.16 passt exakt zum diskreten Fall ohne Wechselwirkung; der Fall mit elastischer Wechselwirkung stimmt nicht mit dem aus der Versetzungsdynamik überein. Das ist zum einen auf die Geschwindigkeitsrandbedingung  $v = 0$  an der Korngrenze in der CDD zurückzuführen. Die plastische Dehnung wird über die Orowangleichung ( $\partial_t \gamma = \rho b v$ ) berechnet. Deshalb ist diese Randbedingung effektiv eine Randbedingung für die plastische Dehnung  $\gamma = 0$  an der Korngrenze. Diese Null ist an der Korngrenze nicht zu sehen, da mit stückweise konstantem  $\gamma$  gerechnet wird.

Zum anderen ist dies die Signatur einer Kontinuumsbeschreibung. Die Position der einzelnen Versetzungen ist nicht mehr bekannt und deswegen ist die Auslöschung auch nicht mehr exakt (Abb. 3.17(a)). Das konzeptionell gleiche diskrete Modell aus Abbildung 3.17(b) zeigt das gleiche Verhalten: Makroskopisch ist die Spannungs-Dehnungskurve elastisch-perfekt plastisch, aber die Profile weisen den gleichen Einschnitt an der Korngrenze auf, da sich die Felder nicht exakt auslöschten (Abb. 3.18).

In Abbildung 4.8 ist ein Vergleich zwischen DDD und CDD mit einem simplen *Wechselwirkungsmodell*<sup>3</sup> der Versetzungsdichten zwischen den beiden Elementen links und rechts der Korngrenze dargestellt. Sowohl der Übergang vom elastischen zum perfekt-plastischen Bereich als auch die

<sup>3</sup>Simulation von Severin Schmitt, KIT Karlsruhe, unveröffentlicht. Die Dichte auf der Gleitebene links mit positiver Dichte und von rechts mit negativer Dichte löscht sich an der Korngrenze direkt aus. Das Modell ist essentiell eine einfache Summierung der Dichte in den Volumina links und rechts der Korngrenze. Nach Summation bleibt nur die plastische Dehnung übrig, keine Dichte. Die Interpretation im Sinne eine Kontinuumsformulierung könnte auch sein, dass sich das Mittelungsvolumen für die Versetzungsdichte über die Korngrenze hinweg erstreckt.



(a) Scherspannung über Scherdehnung.

(b) Plastische Dehnungsprofile entlang Scherrichtung nach 5 emittierten Versetzungen.

**Abbildung 4.8.:** Vergleich des Dehnungsprofils aus DDD und CDD mit Korngrenzmodell.

Aktivierung der Quellen werden mit diesem simplen Modell korrekt vorhergesagt. Zusätzlich stimmt auch mit diesem Wechselwirkungsmodell das Dehnungsprofil – im Gegensatz zu Abbildung 3.16, wo die Randbedingung  $v = 0$  eine Absenkung der plastischen Dehnung an der Korngrenze zur Folge hat.

Dieses Beispiel verdeutlicht die Notwendigkeit eines Transmissionsgesetzes für Kontinuumsformulierungen.

#### 4.2.2. Effektiver Dehnungstransport bei Verschmierung der Wechselwirkung

Neben der zufälligen Verteilung und Orientierung der Quellen wird bei dieser Parametervariation die effektive Auslöschung durch Verkippen bzw. Verdrehen behindert.

Reine Verkipfung bzw. Verdrehung zeigen makroskopisch den gleichen Trend (Abb. 3.19(b) und 3.24(a)): Eine zunehmende Missorientierung der Körner führt makroskopisch zu einer höheren Spannung. Dies liegt neben der Veränderung des Schmid-Faktors, der für etwa 8% des Spannungsanstiegs verantwortlich ist (Abb. 3.24(b)), auch an der *schlechteren* effektiven

Auslöschung der Versetzungen links und rechts der Korngrenze. Bei einer *echten* Kippkorngrenze, die aus Stufenversetzungen besteht, könnte man eine Änderung der Fließspannung erwarten.

Für das Spannungsfeld eines solchen Versetzungswalls aus Stufenversetzungen gibt es eine analytische Lösung [Li, 1960]. Aus dieser ist zunächst ersichtlich, dass eine solche Konfiguration kein langreichweitiges Spannungsfeld hat. Das heißt, die Modellierung durch tatsächliche Versetzungen sollte sich nur lokal an der Korngrenze auswirken. Die lokale Wirkung ist eine lineare Erhöhung der Spannung mit zunehmender Missorientierung, die benötigt wird um eine freie Versetzung durch eine solche Konfiguration hindurchzudrücken. Ein größerer Missorientierungswinkel und damit eine größere Anzahl von Versetzungen bietet einen höheren Widerstand für freie Versetzungen.

Die Fließspannung der hier simulierten Bikristalle ist dadurch nicht betroffen, da die Verteilung der Quellen im Volumen homogen ist und die Versetzungen nach Aktivierung zunächst genügend Platz für die Bewegung haben. Alle diese Bikristalle haben die (statistisch, also im Bezug auf Orientierung und Platzierung im Volumen) gleiche Verteilung der FR-Quellen mit gleicher kritischer Spannung und die gleiche Korngröße. Die makroskopische Fließspannung hängt hier also nicht vom Kippwinkel ab, sondern von der Länge der Quelle. Eine zusätzliche Erhöhung der Spannung nach Einsetzen der plastischen Dehnung könnte sich einstellen. Dazu müsste man aber die Kleinwinkelkorngrenze, wie oben beschrieben, durch Versetzungen modellieren (wie z.B. bei [Liu et al., 2012]). Da die Korngrenze in der Versetzungsdynamik aber nur ein numerischer Stop und nicht das reale Spannungsfeld sowie den Versetzungsinhalt einer Kippkorngrenze abbildet, ist dieser Einfluss nicht zu sehen.

Die plastischen Dehnungsprofile der Randbedingung für die  $0^\circ$  Verkippung (Abb. 3.21) weisen nicht das erwartete Plateau mit Absenkung an der Korngrenze auf, sondern zusätzlich noch eine Verminderung der plastischen Dehnung zum Rand der Probe. Eine Erklärung hierfür ist teilweise der Scherspannungsverlauf in der Probe, wie in Abbildung 3.20 dargestellt. Zusätzlich bildet sich eine Art Polygonisierung (Abb 3.22) unter Scherspannung aus: Die unterschiedlichen Längen der Gleitebenen im Volumen führen dazu, dass sich Versetzungen übereinander anordnen und nicht bis ganz an die Korngrenze laufen. Eine effektive Auslöschung findet nur sehr lokalisiert im unteren Bereich statt.

Die Profile der Drehkorngrenzen (aus Abbildung 3.25) zeigen keinen eindeu-

tigen Unterschied, jedoch ergeben sich diese bei deutlich unterschiedlichen Spannungsniveaus, also verschiedenen mechanischen Zuständen. Abbildung 3.24(a) zeigt bei 2 % Scherdehnung zwischen  $0^\circ$  und  $22.5^\circ$  Verdrehung einen Unterschied von knapp 70 %. Die effektive Auslöschung der Spannungsfelder von Versetzungen unterschiedlichen Vorzeichens links und rechts der Korngrenze ist deutlich zu erkennen.

Die Schlussfolgerung aus der Variation der Missorientierung ist, dass sich die Simulationen makroskopisch qualitativ so verhalten, wie man es von einer Kontinuumsformulierung erwartet. Die gemessene makroskopische Spannung lässt sich aber nicht alleine durch einen Unterschied im Schmid-Faktor der entsprechenden Gleitebenen erklären, sondern wird vor allem auch von der Wechselwirkung der Versetzungen durch die Korngrenze hindurch bestimmt.

### 4.2.3. Die Korngrenze als Randbedingung und der Übergang zum Kontinuum

Die vier Bikristallsimulationen, bei denen alle Gleitsysteme bevölkert werden (Kap. 3.2.5) dienen dazu, das bestehende Spektrum zur Modellierung einer Korngrenze in der Versetzungsdynamik darzustellen und deren Unterschiede herauszuarbeiten. Neben den bekannten Varianten eines Bikristalls mit und ohne Wechselwirkung der Versetzungen über ihr Spannungsfeld, wird zusätzlich die gleiche Mikrostruktur pro Korn jeweils noch gegen ein elastisches Korn simuliert.

Aus dem Vergleich dieser Simulationen (Abb. 3.27) lässt sich schließen, dass die zugrunde liegende Mikrostruktur den Charakter der Dehnungsprofile vorgibt. Dies wird besonders deutlich im rechten Korn von  $x = 0.75 - 1.5 \mu\text{m}$  (Abb. 3.27(b)). Dort sind sich alle drei Profile der Simulation sehr ähnlich. Aber auch im ersten Korn bei  $x = 0 - 0.75 \mu\text{m}$  sind Gemeinsamkeiten der Profile erkennbar: Eine Erhöhung der Dehnung im linken Bereich und nahe an der Korngrenze. Die Unterschiede im linken Korn lassen sich auf Lokalisierungen zurückführen. So haben Versetzungen im plastischen Korn 1 gegen ein elastisches Korn 2 an der Korngrenze keine *Partner*, mit denen sie sich effektiv auslöchen können. Dies wird deutlich an den Werten der plastischen Dehnung zwischen blauer, schwarzer und grauer Kurve. Das Maximum des Dehnungsprofils ergibt sich am linken Rand.

Auffällig ist zudem, dass die plastische Dehnung im Fall ohne Wechselwirkung an der Korngrenze in Korn 1 höher ist als im Fall mit Wechselwirkung. Die Erklärung dafür liegt in der Mikrostruktur. Stellt man diesen Vergleich mit mehreren Simulationen dar und mittelt noch zusätzlich kristallsymmetrisch, ergibt sich das erwartete Bild.

Zusätzlich ist erkennbar, dass sich die vier Simulationen auf unterschiedlichen Spannungsniveaus befinden (Abb. 3.27(a), grüne Linie). Der Fall mit voller Transparenz hat, wie zu erwarten, das niedrigste Spannungsniveau mit etwa 50 MPa, während sich das plastische Korn 2 gegen ein elastisches Korn bei etwa 100 MPa befindet und das bei gleicher makroskopischer plastischer Gesamtdehnung.

Zuletzt lässt sich aus diesem Vergleich der Spannung des Korn 1 gegen elastisch und dem Fall keiner Wechselwirkung schließen, dass sich globale und damit homogenisierte Maße, wie eine Spannung, lokal in sehr unterschiedliche Dehnungsprofilen zeigen. Besonders hervorzuheben ist, dass die dargestellten Dehnungsprofile ebenso Mittelwerte über Scheiben sind und die Information tatsächlicher Lokalisierung der Dehnung in drei Dimensionen dabei verloren geht. Diese Dehnungslokalisierung ist für kontinuumsmechanische Beschreibungen einer Korngrenze eine Herausforderung, sofern sie denn überhaupt abgebildet werden soll, denn die Mikrostruktur ist, wenn überhaupt, als eine homogenisierte Dichte vorhanden und eventuelle Lokalisierungen werden verschmiert.

Als qualitative Aussage lässt sich also zusammenfassen, dass sich die einzelnen Körner, wie auch zu erwarten war, unterschiedlich verhalten. Allerdings ist die Signatur der Mikrostruktur, also der anfänglichen Versetzungsverteilung, in allen Fällen der Belastung zu erkennen. Die *speziellen* Randbedingungen eines Korns, d.h. also ob es gegen ein elastisches, ein plastisches oder mit oder ohne Wechselwirkung verformt, beeinflusst die Bewegung von Versetzungen. An dieser Stelle sei nochmals hervorgehoben, dass eine Kontinuumsformulierung, die solche Unterschiede reproduzieren soll, Lokalisierungen nicht nur an der Korngrenze, sondern auch deren Auswirkungen im Korn selbst abbilden muss.

#### 4.2.4. Der Vergleich von Dehnungsprofilen von Trikristallen aus der Versetzungsdynamik mit einem Kontinuumsmodell

Die Simulation der Trikristalle mit unterschiedlichen Missorientierungen sowie mit und ohne Transparenz zeigen in ihren Spannungs-Dehnungskurven einen unerwarteten Trend: Die beiden Simulationsreihen ohne Transparenz für elastische Felder (Abb. 3.30(b)) weisen eine geringere Verfestigung auf als die mit Transparenz (Abb. 3.30(a)). Das ist unerwartet, da die Transparenz der Spannungsfelder in den Simulationen mit Bikristallen mit quasi-2D Versetzungen (nur ein Gleitsystem) zu einer geringeren Verfestigung führen.

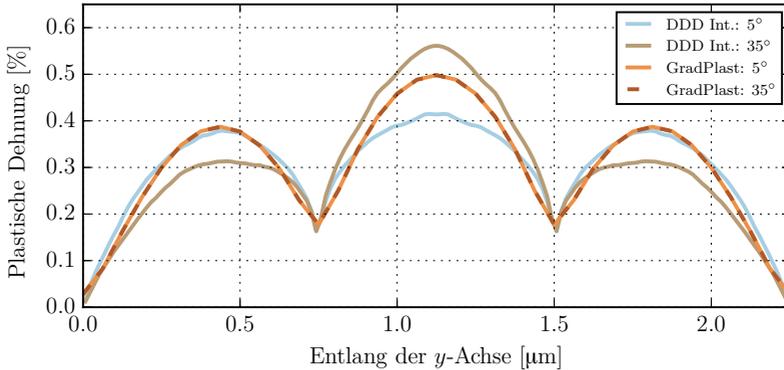
Die Ergebnisse dieser Arbeit lassen folgende Beobachtung zu: Im Fall von quasi-2D Bikristallen ergibt sich bei unterschiedlicher Missorientierung das gleiche plastische Dehnungsprofil. Dabei benötigt es mit zunehmender Missorientierung aber ein höheres Spannungsniveau (für Kippkorngrenzen Abb. 3.19 und Drehkorngrenzen Abb. 3.24(a) und 3.25). Der 3D Trikristall mit allen Gleitsystemen zeigt ein umgekehrtes Bild: Bei nahezu gleicher makroskopischer Spannung (Abb. 3.30) unterscheiden sich die plastischen Dehnungsprofile (Abb. 3.31).

Eine Erklärung dafür lässt sich aus den vorliegenden Daten nicht ableiten. Allerdings zeigen die vorliegenden Ergebnisse, dass das Bild durch die volle Bevölkerung der Gleitsysteme deutlich komplexer wird.

Ein mögliches Vorgehen zur Untersuchung dieser Beobachtung wäre die systematische Variation der Anzahl der Gleitsysteme bei Bikristallen. Ein Hinweis gibt hier die einzelne Simulation eines voll bevölkerten Bikristalls aus Abbildung 3.28. Die Spannung bei der die beiden Profile ausgewertet werden ist nahezu identisch, während die Profile sich deutlich unterscheiden. Hier wären aber mehrere Simulationen nötig, um Artefakte, also die Auswirkungen einzelner Versetzungen aufgrund der Anfangsverteilung der Quellen, von Einzelsimulation zu mitteln.

Ein Vergleich der Dehnungsprofile aus Versetzungsdynamiksimulationen mit Gradientenplastizität ergibt, dass eine Änderung der Missorientierung im letzteren Modell keine Wirkung zeigt. Legt man alle Kurven mit elastischer Wechselwirkung übereinander, ergibt sich Abbildung 4.9. Die Profile der Gradientenplastizität liegen zwischen denen der beiden DDD Profile.

Die Werte der plastischen Dehnung an der Korngrenze sind gleich, da sie zur Kalibrierung des Kontinuumsmodells verwendet wurden.

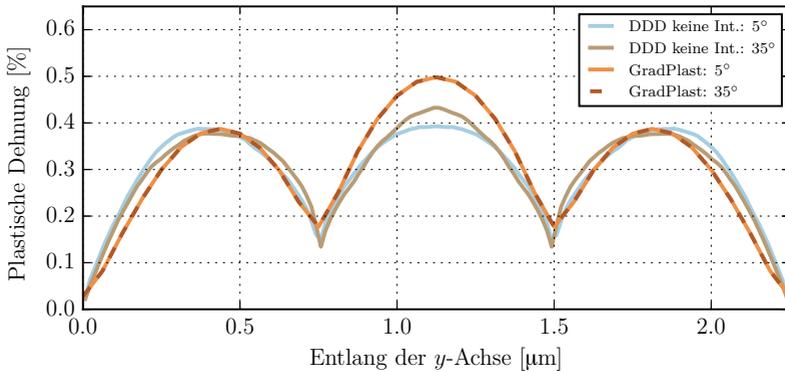


**Abbildung 4.9.:** Vergleich der DDD Profile mit elastischer Wechselwirkung mit den Dehnungsprofilen der Gradientenplastizität aus [Bayerschen et al., 2015b].

Die Profile ohne elastische Wechselwirkung (Abb. 4.10) sind sich qualitativ näher: Die Plastizität verteilt sich homogener in den Körnern. Allerdings stimmen dann die Werte an der Korngrenze nicht mehr.

Ein Grund für die qualitative Nähe könnte sein, dass ein Versetzungsdynamik-Korngrenzmodell ohne die Wechselwirkung der Spannung von Versetzungen nahe der Korngrenze konzeptionell einer der Modellierung der Korngrenze im vorliegenden Fall nahe ist. Verfestigung wird im vorliegenden Kontinuumsmodell über nur eine Variable modelliert, eine äquivalente plastische Dehnung. Im Fall der Versetzungsdynamik ist, wie in Kapitel 4.2.3 beschrieben, die Wechselwirkung der Versetzungen nicht komplett abgeschaltet. Über ihre Verschiebungsfelder verformen die beiden Körner trotzdem gemeinsam – es fehlt nur die Wechselwirkung über ihr Spannungsfeld.

Daraus lässt sich schließen, dass eine Kontinuumsformulierung, die sich auf ein äquivalentes Maß zur plastischen Dehnung beschränkt, zwar qualitativ ähnliche Profile als Ergebnis hat, sich jedoch unsensibel gegenüber der Änderung der Missorientierung zeigt, die durch die Wechselwirkungen von



**Abbildung 4.10.:** Vergleich der DDD Profile ohne Wechselwirkung mit den Dehnungsprofilen der Gradientenplastizität aus [Bayerschen et al., 2015b].

Versetzungen auf verschiedenen Gleitebenen hervorgerufen wird. Die Verfestigung der Korngrenze wird modellbedingt sehr gut abgebildet, aber die Verläufe ins Korn nicht. Die Versetzungsdynamikergebnisse zeigen, dass die Änderung der Missorientierung (bei gleicher Anzahl aktivierter Systeme) zwischen Körnern weniger die Gradienten direkt an der Korngrenze, als den Verlauf der plastischen Dehnung durch die ganze Probe beeinflussen. Die Auswirkungen sind somit nicht lokal.

Die Modellierung einer Korngrenze im Kontinuum, welche physikalisch nichts anderes ist als ein Stoßpunkt zwischen zwei verschieden orientierten Gittern, muss also eine unterschiedliche Wechselwirkung bei unterschiedlicher Missorientierung abbilden. Reine plastische Dehnungen – oder wie im vorliegenden Modell eine äquivalente plastische Dehnung – reichen folglich nicht.

### 4.2.5. Grenzen des Korngrenzmodells in der Versetzungsdynamik

Das Modell der effektiven Transmission in der Versetzungsdynamik funktioniert in den oben gezeigten Beispielen sehr gut. Eine sinnvolle Verwendung des Modells setzt bei Vergleichen mit Kontinuumsbeschreibungen eine relativ hohe Dichte (im Bereich von  $> 10^{12} \text{ m}^{-2}$ ), eine homogene Verteilung der Quellen im ganzen Volumen und keine starke Lokalisierung der Plastizität voraus. Die homogene Verteilung ist deshalb wichtig, weil sich an der Korngrenze genügend Versetzungen befinden müssen, die eine effektive Auslöschung (Abb. 2.5) ermöglichen. Die größte Schwachstelle dieses Ansatzes ist, dass Körner, die anfangs keine Versetzungen enthalten, im Verlauf der Belastung nicht mit Versetzungen bevölkert werden können, da ein echter Transmissionsmechanismus fehlt.

Eine weitere Limitierung hängt vom Anwendungsgebiet ab. Dem vorliegenden Modell fehlt ein Mechanismus für Korngrenzgleiten. In zwei Dimensionen gibt es bereits ein Modell, das zusätzlich Versetzungsquellen in Korngrenzen mit entsprechendem Burgersvektor einbringt [Quek et al., 2015]. Diese werden mechanisch, wie alle anderen Versetzungen behandelt und können deshalb in der Korngrenze auftretende Spannungspitzen sowie eine extern angelegte Spannung über Korngrenzgleiten relaxieren. Sie haben aber ihr eigenes Mobilitätsgesetz und ihre Bewegung ist beschränkt auf einen Pfad entlang der Korngrenze. Bei größer werdenden Körnern ist der Relaxationsmechanismus Korngrenzgleiten weniger wichtig und die Relaxation von externer Belastung wird durch normales Versetzungsgleiten im Material dominiert.

## 5. Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit konnte gezeigt werden, dass die gleitfähige Reaktion ein wichtiger Mechanismus der plastischen Verformung ist, der bisher in der Versetzungsdynamik sowie kontinuumsmechanischen Modellen nur unter dem Gesichtspunkt der Verfestigung betrachtet und verwendet wird. Die Wichtigkeit zeigt sich zum einen darin, dass etwa die Hälfte der Versetzungsdichte nach Belastung aus Versetzungen besteht, die eine direkte oder indirekte Konsequenz der gleitfähigen Reaktion sind. Zum anderen sind diese Versetzungen mobil und tragen somit maßgeblich zur makroskopischen plastischen Dehnung bei. Die Auswirkung der Reaktion ist makroskopisch zwar nicht zu erkennen, mikroskopisch ergibt sich aber eine eindeutige Tendenz zur stärkeren Vernetzung der Versetzungen sowie eine höhere Versetzungsdichte bei gleichzeitig fast unveränderter Fließspannung. Außerdem ergibt sich bei gleicher Versetzungsanfangsstruktur ein gänzlich anderes Verformungsbild. Aus diesem Grund wurde ein Modell für die Verwendung in versetzungsdichtebasierten Kontinuumsbeschreibungen entwickelt und mit dem Datensatz der Versetzungsdynamiksimulationen parametrisiert. Ein um die Versetzungsmultiplikation durch die gleitfähige Reaktion erweitertes Kontinuumsmodell zeigt an einem Minimalbeispiel, dass die Multiplikation funktioniert. Das vorgestellte Modell leistet einen Beitrag, bestehende versetzungsdichtebasierte Kontinuumstheorien um einen weiteren physikalischen Mechanismus zu erweitern, der eine homogenisierte Variante einzelner Reaktionen darstellt.

Die Untersuchungen zur Wechselwirkung der Versetzungen durch Korngrenzen zeigen, dass in bestimmten Grenzen kein zusätzliches Transmissionsgesetz in der Versetzungsdynamik nötig ist. Dieses Erkenntnis ist zunächst losgelöst von einer eventuellen Verwendung der Ergebnisse. Die einzige Voraussetzung ist, dass in allen Körnern bereits von Anfang an genügend

Versetzungen existieren, um die effektive Auslöschung zu garantieren. Im Vergleich mit existierenden Modellierungen von Korngrenzen in Kontinuumsbeschreibungen wird aus den vorliegenden Ergebnissen deutlich, dass im Fall der Gradientenplastizität eine Reduktion auf eine Variable – eine äquivalente plastische Dehnung – eine Änderung der Missorientierung nicht in einem Unterschied in Dehnungsprofilen abbilden kann. Im Vergleich mit der CDD wird erkennbar, dass aufgrund der Randbedingungen (Geschwindigkeit der Versetzungsdichte an der Korngrenze) ein eigenes Gesetz zur Auslöschung von Versetzungsdichte an der Korngrenze notwendig ist und die effektive Transmission durch Superposition nicht ausreicht bzw. nicht korrekt ist. Vor allem bei kleinen Proben müssen die individuellen Randbedingungen an der Korngrenze einzelner Körner in Kontinuumsformulierungen so gestaltet werden, dass sie sowohl eine Missorientierung als auch eine langreichweitige Auswirkung der Korngrenze auf das gesamte Dehnungsprofil der Körner abbilden.

Eine Fortsetzung dieser Arbeit bietet sich vor allem im Bezug auf das Modell der gleitfähigen Reaktion für dichtebasierte Kontinuumsformulierungen an. Das Minimalmodell in dieser Arbeit zeigt bisher nur, dass es prinzipiell funktioniert. Ein Fall, bei dem die Erweiterung zu einer *besseren* Modellierung führt, sind möglicherweise Belastungen mit starken Gradienten. Ein Beispiel dafür ist die Indentierung einer Oberfläche. In [Reuber et al., 2014] ist die Übereinstimmung zwischen Experiment [Kysar et al., 2010] und Simulation prinzipiell zwar sehr gut, allerdings zeigt die Simulation eine steifere Antwort, weniger Dehnung und zudem weniger Gitterrotationen. Ein Modell, das um die gleitfähige Reaktion erweitert wird, könnte hier eventuell eine bessere Übereinstimmung liefern.

# A. Gleitsystemindizierung

Die folgenden Tabellen übersetzen die Gleitsystemindizierung in die Schmid-Boas Notation.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
B2	B4	B5	C1	C3	C5	A2	A3	A6	D1	D4	D6

**Tabelle A.1.:** Schmid-Boas Notation der Gleitsysteme aus Abb. 2.3

Normale	Vektor	Burgersindex	Vektor
A	$(1\bar{1}\bar{1})$	1	$(01\bar{1})$
B	$(111)$	2	$(0\bar{1}1)$
C	$(\bar{1}\bar{1}1)$	3	$(101)$
D	$(\bar{1}1\bar{1})$	4	$(10\bar{1})$
		5	$(\bar{1}10)$
		6	$(\bar{1}\bar{1}0)$

**Tabelle A.2.:** Schmid-Boas Notation der Normalen- und Burgersvektoren im *kfz* Kristall



# B. Nachbearbeitung von Daten

## B.1. Sortierung der Daten für die Korrelationsanalyse von Spannungsabfällen mit plastischer Dehnung aus gleitfähigen Reaktionen

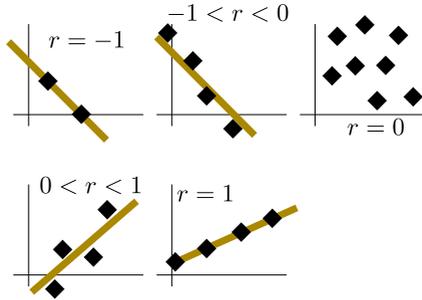
Die Datenreihen der Simulationen, die im Nachhinein berechnet werden, passen in wenigen Fällen nicht exakt auf die Datenreihen, die während der Simulation berechnet werden. Das liegt z.B. an unterschiedlichen Methoden wie etwa die Berechnung der plastischen Dehnung auf zwei Arten: Einmal Verschiebungsfelder, ein anderes Mal die überstrichene Fläche. Das führt dann dazu, dass lineare Zusammenhänge wie die plastische Dehnung mit dem Rückgang der Spannung nach Formel B.1 nicht mehr gegeben sind.

$$\varepsilon_{\text{pl}} = \varepsilon_{\text{tot}} - \frac{\sigma}{E} \quad (\text{B.1})$$

Diese Linearität lässt sich zwischen zwei Datenreihen durch das den Korrelationskoeffizient nach Pearson  $r$  quantifizieren. Abbildung B.1 visualisiert für die drei Grenzfälle und zwei Zwischenschritte entsprechende Datenreihen.

Die Datenreihen plastische Dehnung und Spannung für die Auswertung der Korrelation werden vor der Analyse nun wie folgt sortiert:

- (1) Alle Daten, bei denen die Spannungsrate positiv ist (also mit einer Zunahme der Spannung zusammenhängen), werden vernachlässigt, weil nur die Spannungsabfälle von Interesse sind. Ein einzelner Abfall wird hierbei als *ein* Datensatz für die Korrelation angesehen.



**Abbildung B.1.:** Visualisierung des Pearson  $r$ -Wertes, der eine lineare Korrelation zwischen zwei Datenreihen mit 1 bewertet, sofern sie positiv linear ist und mit  $-1$  bei einer negativen Korrelation.

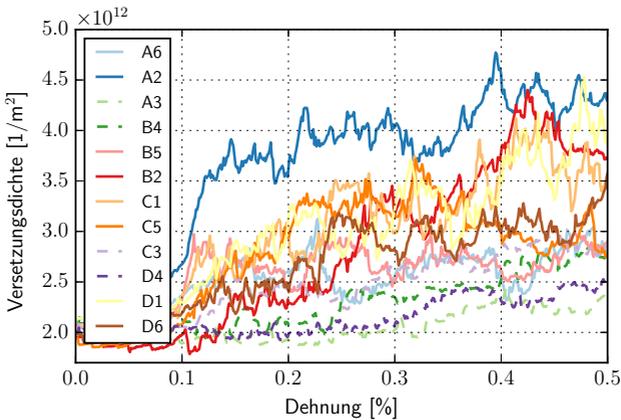
- (2) Der Pearson Korrelationskoeffizient  $r$  wird nun für jeden Datensatz zwischen der Spannungsrate und der plastischen Dehnung, die im Nachhinein über die überstrichenen Flächen berechnet wurde, ausgewertet. Alle Datensätze, deren  $r < -0.8$  sind, werden unter der Annahme, dass die beiden Datenreihen nicht zusammenpassen, ignoriert.
- (3) Für alle restlichen Datensätze werden folgende Korrelationskoeffizienten berechnet
  - (a) Pearson Korrelation zwischen Spannungsrate und plastischer Dehnungsrate von Versetzungen mit Ursprung in gleitfähigen Reaktionen
  - (b) Pearson Korrelation zwischen Spannungsrate und der plastischen Dehnungsrate von allen anderen Versetzungen

## B.2. Berechnung des Vorfaktors für das Quellmodell

Die untere Grenze des Vorfaktors  $C$  (Formel 4.5) für eine Kontinuumsformulierung zur Bildung von gleitfähigen Reaktionen wird unter der

Annahme bestimmt, dass die Dichtezunahme auf Gleitsystemen mit einem Schmidfaktor von  $m = 0$  rein auf der Bildung der gleitfähigen Reaktion beruht. In Fällen von Gleitsystemen mit Schmidfaktor  $m \neq 0$  lässt sich die Dichtezunahme durch einfache Versetzungsbewegung und Ausbauchung nicht mehr von dem Anteil aus der Bildung von Dichte durch die gleitfähige Reaktion trennen. Ein weiterer Vorteil der  $m = 0$  Gleitsysteme ist, dass auch Quergleiten keine Rolle spielt, da Versetzungen nur Quergleiten, wenn die aufgelöste Schubspannung in der Quergleitebene höher ist als in der Primärebene.

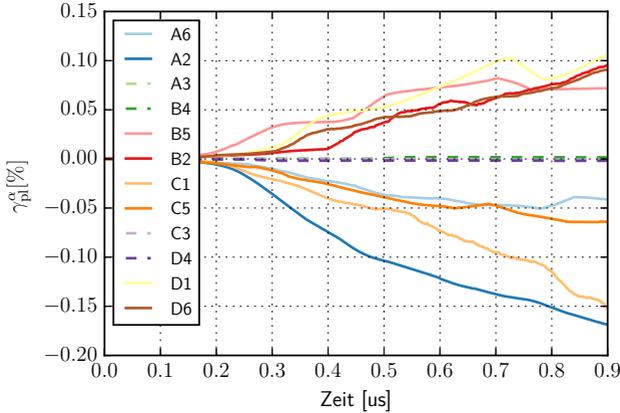
Am Beispiel einer Simulation und einem Gleitsystem mit  $m = 0$  wird im Folgenden die Vorgehensweise beschrieben. Abbildung B.2 zeigt die Dichtentwicklung einer Simulation mit Zugrichtung  $\langle 100 \rangle$ , aufgeteilt auf die einzelnen Gleitsysteme nach Schmid-Boas Notation. Die durchgezogenen Linien entsprechen hier Gleitsystemen mit  $m = 0.408$ , die gestrichelten  $m = 0$ .



**Abbildung B.2.:** Versetzungsdichtentwicklung der einzelnen Gleitsysteme einer Simulation mit Zugrichtung  $\langle 100 \rangle$  und  $d = 1.0 \mu\text{m}$  in Schmid-Boas Notation. Die durchgezogenen Linien sind Gleitsysteme mit einem Schmidfaktor  $m = 0.408$ , die gestrichelten  $m = 0$ .

Abbildung B.2 zeigt, dass trotz eines Schmidfaktors von  $m = 0$  auf den Gleitsystemen A3, B4, C3 und D4 neue Versetzungsdichte entsteht. Diese

neu entstandene Dichte ist auf diese Systemen aber nicht mobil und erzeugt keine plastische Dehnung, wie in Abbildung B.3. Allerdings kann Dichte alleine durch ihre Anwesenheit auf diesen Systemen wieder neue gleitfähige Reaktionen auf anderen Systemen erzeugen und sorgt somit für eine andere Mikrostrukturentwicklung.



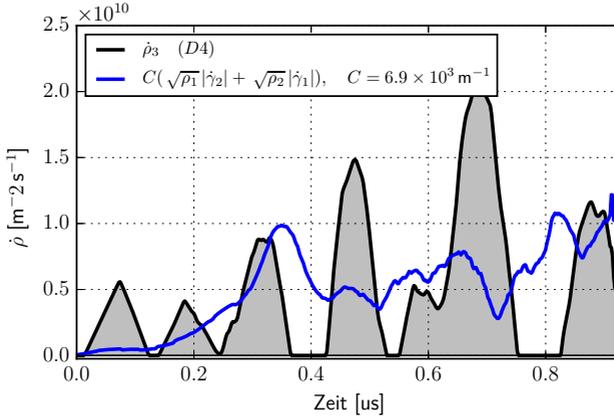
**Abbildung B.3.:** Plastische Dehnung pro Gleitsystem als  $\gamma^\alpha$  aus Formel 2.14. Hier noch nicht die Zeitableitung.

Ausgehend von obiger Annahme kann nun für beispielsweise Gleitsystem D4 der Vorfaktor der Formel 4.5 berechnet werden. Zunächst werden die  $\gamma_i^\alpha$  nach der Zeit abgeleitet um die Raten zu erhalten und danach werden über die Interaktionsmatrix zur Bildung von gleitfähigen Reaktionen die Gleitsysteme bestimmt, die neue Dichte auf D4 produzieren können. Die beiden Möglichkeiten eine gleitfähige Reaktion auf Gleitsystem D4 zu bilden sind in Symbolen:

$$D4 = C1 + D6 \quad (\text{B.2})$$

$$D4 = A6 + D1. \quad (\text{B.3})$$

Diese beiden Beiträge lassen sich nicht trennen und es wird der Einfachheit halber angenommen, dass beide Beiträge den gleichen Vorfaktor haben.



**Abbildung B.4.:** Gemessene positive Dichteproduktion von Gleitsystem D4 und Dichteproduktion nach Formel 4.5 für beide Varianten (Formeln B.2 und B.3) der Bildung einer gleitfähigen Versetzung mit  $C = 6.9e3$ .

Nach Berechnung aller  $\dot{\gamma}^\alpha$  und der Auswertung der Versetzungsdichten auf den einzelnen Gleitsystemen, wird zunächst die Dichtezunahme auf Gleitsystem D4 integral gemessen, alle negativen Raten werden abgeschnitten (siehe Abbildung B.4,  $\dot{\rho}_3$ ). Danach die Formel für die Kombinationen aus Gleichungen B.2 und B.3 berechnet, beide Beiträge addiert und ebenso integriert. Das Verhältnis ergibt dann die Konstante:

$$C = \frac{\int_0^{t_{\max}} \dot{\rho}_{D4} dt}{\int_0^{t_{\max}} \sqrt{\rho_{C1}} |\dot{\gamma}_{D6}| + \sqrt{\rho_{D6}} |\dot{\gamma}_{C1}| + \sqrt{\rho_{A6}} |\dot{\gamma}_{D1}| + \sqrt{\rho_{D1}} |\dot{\gamma}_{A6}| dt} \quad (\text{B.4})$$

Im Beispiel ergibt sich für die Konstante der Wert  $C \approx 6.9 \times 10^3 \text{ m}^{-1}$ . Diese Vorgehensweise wird nun auf alle Simulationen angewendet. Ausgehend von Gleitsystemen mit sehr kleinem Schmidfaktor, bzw. 0 werden die

beiden Möglichkeiten zur Bildung einer gleitfähigen Reaktion herangezogen, ausgewertet, integriert und dann für jeweils ein System die Konstante  $C$  bestimmt.

## C. Details zur Implementierung des Modells in DAMASK

Das Modell aus Gleichung 4.5 ist aufbauend auf das DAMASK-Modell `dislotwin` implementiert. Dieses dient auch als Referenz zur korrekten Implementierung aller Änderungen im Code.

Eine Kopie von `dislotwin` mit Namen `disloglissile` wird einmal mit und einmal ohne das implementierte Modell (mittels Compiler-Switch) mit dem ursprünglichen Modell verglichen. Die kristallographische Orientierung in Zugrichtung ist  $\langle 100 \rangle$ . Die Belastung wird dehnratengesteuert über folgende Komponenten vorgegeben:

```
fdot 1.0e-3 * 0 0 * 0 * * *
```

die Randbedingungen für die Spannungskomponenten sind komplementär:

```
stress * 0 * * 0 * 0 0 0
```

die Last wird durch:

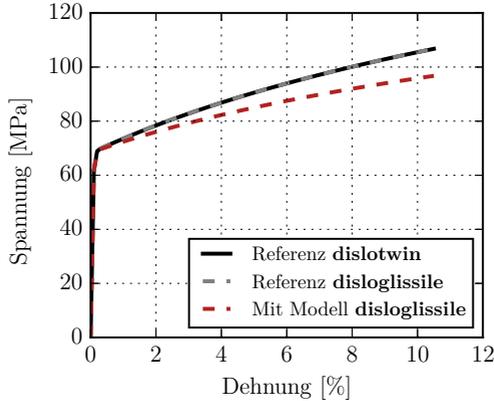
```
time 100 incs 100
```

inkrementiert. Der Vorfaktor wird auf  $C = 2 \times 10^7 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$  gesetzt um den Effekt zu verstärken. Das Problem wird durch den DAMASK-internen Spektrallöser gelöst.

Abbildung C.1 zeigt die Spannungs-Dehnungs-Kurven der drei Fälle. Der Vergleich von `disloglissile` mit ausgeschalteter gleitfähiger Reaktion

zeigt keine Veränderung zum originalen `dislotwin` Modell. Sobald die Bildung von gleitfähigen Reaktionen mittels Ratenmodell angeschaltet wird, sinkt die Spannung.

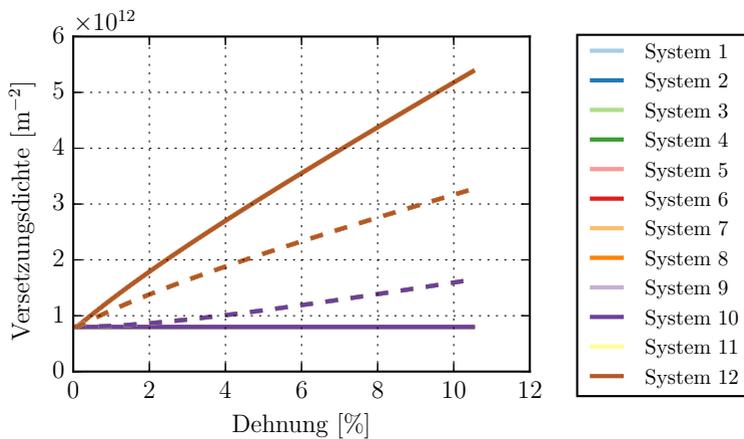
Die Multiplikation der Versetzungsdichte auf den Gleitsystemen erfolgt



**Abbildung C.1.:** Spannungs-Dehnungskurven der Plastizitätsmodelle `dislotwin`, und `disloglissile` mit und ohne gleitfähiger Reaktion.

(ohne gleitfähige Reaktion) allein aufgrund der aufgelöste Schubspannung. Die Systeme 1, 4, 7 und 10 haben einen Schmidfaktor von  $m = 0$ , alle anderen  $m = 0.408$ ; die Aktivierung der Gleitsysteme zeigt sich entsprechend. Abbildung C.2 zeigt die Dichtentwicklung mit und ohne gleitfähiger Reaktion. Die Symmetrie des Belastungsfalls und der kristallographischen Orientierung hat zur Folge, dass alle Gleitsysteme mit gleichem Schmidfaktor aufeinander fallen: Systeme mit Schmidfaktor größer null in braun, gleich null in violett.

Aus Abbildung C.2 ist ersichtlich, dass durch den großen Vorfaktor von  $C$  im Fall mit gleitfähiger Reaktion im direkten Vergleich Versetzungsdichte verloren geht. Das erklärt auch die geringere Verfestigung aus Abbildung C.1.



**Abbildung C.2.:** Versetzungsdichteentwicklung einzelner Gleitsysteme mit (gestrichelt) und ohne (durchgezogen) gleitfähiger Reaktion aus DAMASK.



# Literaturverzeichnis

- A. Acharya. A model of crystal plasticity based on the theory of continuously distributed dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(4):761 – 784, 2001.
- K. E. Aifantis, J. Senger, D. Weygand, und M. Zaiser. Discrete dislocation dynamics simulation and continuum modeling of plastic boundary layers in tricrystal micropillars. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 3(1):012025, 2009.
- J. Amodeo, B. Devincere, P. Carrez, und P. Cordier. Dislocation reactions, plastic anisotropy and forest strengthening in mgo at high temperature. *Mechanics of Materials*, 71:62 – 73, 2014.
- R. Amodeo und N. Ghoniem. Dynamical computer simulation of the evolution of a one-dimensional dislocation pileup. *International Journal of Engineering Science*, 26(7):653 – 662, 1988.
- R. J. Amodeo und N. M. Ghoniem. Dislocation dynamics. ii. applications to the formation of persistent slip bands, planar arrays, and dislocation cells. *Phys. Rev. B*, 41:6968–6976, Apr 1990.
- A. Arsenlis und D. M. Parks. Modeling the evolution of crystallographic dislocation density in crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(9):1979–2009, 2002.
- A. Arsenlis, D. M. Parks, R. Becker, und V. V. Bulatov. On the evolution of crystallographic dislocation density in non-homogeneously deforming crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(6):1213–1246, 2004a.
- A. Arsenlis, B. D. Wirth, und M. Rhee. Dislocation density-based constitutive model for the mechanical behaviour of irradiated cu. *Philosophical Magazine*, 84(34):3617–3635, 2004b.

- A. Arsenlis, W. Cai, M. Tang, M. Rhee, T. Opperstrup, G. Hommes, T. G. Pierce, und V. V. Bulatov. Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15(6):553, 2007.
- D. Bachurin, D. Weygand, und P. Gumbsch. Dislocation-grain boundary interaction in  $\langle 111 \rangle$  textured thin metal films. *Acta Materialia*, 58(16): 5232–5241, 2010.
- D. Balint, V. Deshpande, A. Needleman, und E. V. der Giessen. A discrete dislocation plasticity analysis of grain-size strengthening. *Materials Science and Engineering: A*, 400–401:186 – 190, 2005. Dislocations 2004: An International Conference on the Fundamentals of Plastic Deformation.
- D. Balint, V. Deshpande, A. Needleman, und E. V. der Giessen. Discrete dislocation plasticity analysis of the grain size dependence of the flow strength of polycrystals. *International Journal of Plasticity*, 24(12): 2149–2172, 2008.
- D. M. Barnett. The displacement field of a triangular dislocation loop. *Philosophical Magazine A*, 51(3):383–387, 1985.
- S. Basinski und Z. Basinski. Plastic deformation and work hardening. *Dislocations in solids*, 4:261–362, 1980.
- J. L. Bassani und T.-Y. Wu. Latent hardening in single crystals ii. analytical characterization and predictions. *Proceedings: Mathematical and Physical Sciences*, 435(1893):21–41, 1991.
- E. Bayerschen, A. T. McBride, B. D. Reddy, und T. Böhlke. Review on slip transmission criteria in experiments and crystal plasticity models. *Journal of Materials Science*, 51(5):2243–2258, 2015a.
- E. Bayerschen, M. Stricker, S. Wulfinghoff, D. Weygand, und T. Böhlke. Equivalent plastic strain gradient plasticity with grain boundary hardening and comparison to discrete dislocation dynamics. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 471(2184), 2015.

- R. Becker, J. Butler, H. Hu, und L. Lalli. Analysis of an aluminum single crystal with unstable initial orientation (001) [110] in channel die compression. *Metallurgical Transactions A*, 22(1):45–58, 1991.
- N. Bertin, C. Tomé, I. Beyerlein, M. Barnett, und L. Capolungo. On the strength of dislocation interactions and their effect on latent hardening in pure magnesium. *International Journal of Plasticity*, 62(0):72 – 92, 2014.
- T. Bieler, P. Eisenlohr, C. Zhang, H. Phukan, und M. Crimp. Grain boundaries and interfaces in slip transfer. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 18(4):212 – 226, 2014. Slip Localization and Transfer in Deformation and Fatigue of Polycrystals.
- S. B. Biner und J. R. Morris. A two-dimensional discrete dislocation simulation of the effect of grain size on strengthening behaviour. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 10(6):617, 2002.
- E. Bitzek, D. Weygand, und P. Gumbsch. Atomistic study of edge dislocations in fcc metals: drag and inertial effects. In *IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength*, pages 45–57. Springer, 2004.
- E. Bitzek, C. Brandl, P. M. Derlet, und H. Van Swygenhoven. Dislocation cross-slip in nanocrystalline fcc metals. *Phys. Rev. Lett.*, 100:235501, Jun 2008.
- B. v. Blanckenhagen. *Versetzungen in dünnen Metallschichten*. PhD thesis, Universität Stuttgart, Holzgartenstr. 16, 70174 Stuttgart, 2002.
- A. F. Bower. *Applied mechanics of solids*. CRC press, 2009.
- V. Bulatov und W. Cai. *Computer Simulations of Dislocations*. Oxford Series on Materials Modelling Series. OUP Oxford, 2006.
- V. Bulatov, W. Cai, J. Fier, M. Hiratani, G. Hommes, T. Pierce, M. Tang, M. Rhee, K. Yates, und T. Arsenlis. Scalable line dynamics in paradisi. In *Supercomputing, 2004. Proceedings of the ACM/IEEE SC2004 Conference*, page 19, nov. 2004.
- P. Chadwick. *Continuum mechanics: concise theory and problems*. Courier Corporation, 2012.

- Y. Cheng, M. Mrovec, und P. Gumbsch. Atomistic simulations of interactions between the  $1/2 \langle 111 \rangle$  edge dislocation and symmetric tilt grain boundaries in tungsten. *Philosophical Magazine*, 88(4):547–560, 2008.
- K.-S. Cheong und E. P. Busso. Discrete dislocation density modelling of single phase {FCC} polycrystal aggregates. *Acta Materialia*, 52(19):5665–5675, 2004.
- H. Cleveringa, E. V. der Giessen, und A. Needleman. A discrete dislocation analysis of mode I crack growth. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(6–7):1133–1157, 2000.
- A. Cottrell. Comment. a brief view of work hardening. *Dislocations in Solids*, 11:vii–xvii, 2002.
- F. F. Csikor, C. Motz, D. Weygand, M. Zaiser, und S. Zapperi. Dislocation avalanches, strain bursts, and the problem of plastic forming at the micrometer scale. *Science*, 318(5848):251–254, 2007.
- W. A. Curtin und R. E. Miller. Atomistic/continuum coupling in computational materials science. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 11(3):R33, 2003.
- B. Devincere. Three dimensional stress field expressions for straight dislocation segments. *Solid State Communications*, 93(11):875–878, 1995.
- B. Devincere und M. Condat. Model validation of a 3d simulation of dislocation dynamics: Discretization and line tension effects. *Acta Metallurgica et Materialia*, 40(10):2629 – 2637, 1992.
- B. Devincere und L. Kubin. Mesoscopic simulations of dislocations and plasticity. *Materials Science and Engineering: A*, 234–236(0):8–14, 1997.
- B. Devincere und L. P. Kubin. Simulations of forest interactions and strain hardening in fcc crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2(3A):559, 1994.
- B. Devincere, L. Kubin, und T. Hoc. Physical analyses of crystal plasticity by dd simulations. *Scripta Materialia*, 54(5):741–746, 2006.
- B. Devincere, T. Hoc, und L. Kubin. Dislocation mean free paths and strain hardening of crystals. *Science*, 320(5884):1745–1748, 2008.

- J. A. El-Awady, S. I. Rao, C. Woodward, D. M. Dimiduk, und M. D. Uchic. Trapping and escape of dislocations in micro-crystals with external and internal barriers. *International Journal of Plasticity*, 27(3):372 – 387, 2011.
- M. Fivel. *Etudes numériques à différentes échelles de la déformation plastique des monocristaux de structure CFC*. Phd thesis, INPG, GPM2, France, 1997.
- M. Fivel, M. Verdier, und G. Canova. 3D simulation of a nanoindentation test at a mesoscopic scale. *Materials Science and Engineering: A*, 234–236(0):923–926, 1997.
- A. Foreman und M. Makin. Dislocation movement through random arrays of obstacles. *Canadian Journal of Physics*, 45(2):511–517, 1967.
- A. J. E. Foreman und M. J. Makin. Dislocation movement through random arrays of obstacles. *Philosophical Magazine*, 14(131):911–924, 1966.
- P. Franciosi. The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metallurgica*, 33(9):1601–1612, 1985.
- P. Franciosi und A. Zaoui. Multislip in f.c.c. crystals a theoretical approach compared with experimental data. *Acta Metallurgica*, 30(8):1627 – 1637, 1982.
- P. Franciosi, M. Berveiller, und A. Zaoui. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metallurgica*, 28(3):273–283, 1980.
- H. Gao und Y. Huang. Geometrically necessary dislocation and size-dependent plasticity. *Scripta Materialia*, 48(2):113 – 118, 2003.
- D. Gottschalk, A. McBride, B. Reddy, A. Javili, P. Wriggers, und C. Hirschberger. Computational and theoretical aspects of a grain-boundary model that accounts for grain misorientation and grain-boundary orientation. *arXiv:1505.01822v1*, 2015.
- W. F. Greenman, T. Vreeland, und D. S. Wood. Dislocation mobility in copper. *Journal of Applied Physics*, 38(9):3595–3603, 1967.
- S. Groh und H. M. Zbib. Advances in discrete dislocations dynamics and multiscale modeling. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 131(4):041209, 2009.

- A. Gulluoglu, D. Srolovitz, R. LeSar, und P. Lomdahl. Dislocation distributions in two dimensions. *Scripta Metallurgica*, 23(8):1347 – 1352, 1989.
- Y. Guo, T. Britton, und A. Wilkinson. Slip band–grain boundary interactions in commercial-purity titanium. *Acta Materialia*, 76:1 – 12, 2014.
- M. E. Gurtin. A theory of grain boundaries that accounts automatically for grain misorientation and grain-boundary orientation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56(2):640–662, 2008.
- M. E. Gurtin und A. Needleman. Boundary conditions in small-deformation, single-crystal plasticity that account for the burgers vector. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(1):1–31, 2005.
- E. O. Hall. The deformation and ageing of mild steel: III discussion of results. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 64(9):747–754, 1951.
- G. Hasson und C. Goux. Interfacial energies of tilt boundaries in aluminium. experimental and theoretical determination. *Scripta Metallurgica*, 5(10): 889 – 894, 1971.
- R. Hill. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 14(2):95–102, 1966.
- J. P. Hirth und J. Lothe. Theory of dislocations. 1982.
- T. Hochrainer, M. Zaiser, und P. Gumbsch. A three-dimensional continuum theory of dislocation systems: kinematics and mean-field formulation. *Philosophical Magazine*, 87(8-9):1261–1282, 2007.
- T. Hochrainer, S. Sandfeld, M. Zaiser, und P. Gumbsch. Continuum dislocation dynamics: Towards a physical theory of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 63(0):167–178, 2014.
- D. Hull und D. J. Bacon. *Introduction to dislocations*, volume 37. Elsevier, 2011.

- J. Hutchinson. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 348, pages 101–127. The Royal Society, 1976.
- P. J. Imrich, C. Kirchlechner, C. Motz, und G. Dehm. Differences in deformation behavior of bicrystalline cu micropillars containing a twin boundary or a large-angle grain boundary. *Acta Materialia*, 73(0):240–250, 2014.
- Z.-H. Jin, P. Gumbsch, E. Ma, K. Albe, K. Lu, H. Hahn, und H. Gleiter. The interaction mechanism of screw dislocations with coherent twin boundaries in different face-centred cubic metals. *Scripta Materialia*, 54(6):1163–1168, 2006. Viewpoint set no. 40: Grain boundary engineering.
- M. Jirásek und Z. P. Bazant. *Inelastic analysis of structures*. John Wiley & Sons, 2002.
- W. G. Johnston und J. J. Gilman. Dislocation velocities, dislocation densities, and plastic flow in lithium fluoride crystals. *Journal of Applied Physics*, 30(2):129–144, 1959.
- J. Kacher, B. Eftink, B. Cui, und I. Robertson. Dislocation interactions with grain boundaries. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 18(4):227 – 243, 2014. Slip Localization and Transfer in Deformation and Fatigue of Polycrystals.
- M. d. Koning, R. Miller, V. V. Bulatov, und F. F. Abraham. Modelling grain-boundary resistance in intergranular dislocation slip transmission. *Philosophical Magazine A*, 82(13):2511–2527, 2002.
- O. Kraft, P. A. Gruber, R. Mönig, und D. Weygand. Plasticity in confined dimensions. *Annual review of materials research*, 40:293–317, 2010.
- E. Kröner. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 4(1):273–334, 1959.
- E. Kröner. Benefits and shortcomings of the continuous theory of dislocations. *International journal of solids and structures*, 38(6):1115–1134, 2001.

- L. Kubin. *Dislocations, mesoscale simulations and plastic flow*, volume 5. Oxford University Press, 2013.
- L. Kubin und G. Canova. The modelling of dislocation patterns. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 27(8):957 – 962, 1992.
- L. Kubin, B. Devincre, und T. Hoc. Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals. *Acta Materialia*, 56(20):6040–6049, 2008.
- L. P. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincre, V. Pontikis, und Y. Bréchet. Dislocation microstructures and plastic flow: a 3d simulation. *Solid State Phenomena*, 23:455–472, 1992.
- R. V. Kukta. *Observations on the Kinetics of Relaxation in Epitaxial Films Grown on Conventional and Compliant Substrates: a Continuum Simulation of Dislocation Glide Near an Interface*. PhD thesis, Brown University, 1998.
- J. Kysar, Y. Saito, M. Oztop, D. Lee, und W. Huh. Experimental lower bounds on geometrically necessary dislocation density. *International Journal of Plasticity*, 26(8):1097 – 1123, 2010. Special Issue In Honor of Lallit Anand.
- B. Lagow, I. Robertson, M. Jouiad, D. Lassila, T. Lee, und H. Birnbaum. Observation of dislocation dynamics in the electron microscope. *Materials Science and Engineering: A*, 309–310:445 – 450, 2001. Dislocations 2000: An International Conference on the Fundamentals of Plastic Deformation.
- E. H. Lee. Elastic-plastic deformation at finite strains. *Journal of Applied Mechanics*, 36(1):1–6, 1969.
- T. Lee, I. Robertson, und H. Birnbaum. Prediction of slip transfer mechanisms across grain boundaries. *Scripta Metallurgica*, 23(5):799 – 803, 1989.
- S. Lefebvre, B. Devincre, und T. Hoc. Yield stress strengthening in ultrafine-grained metals: A two-dimensional simulation of dislocation dynamics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(4):788 – 802, 2007.

- R. LeSar. Simulations of dislocation structure and response. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 5(1):375–407, 2014.
- R. LeSar und J. M. Rickman. Multipole expansion of dislocation interactions: Application to discrete dislocations. *Physical Review B*, 65:144110, Apr 2002.
- J. C. Li. The interaction of parallel edge dislocations with a simple tilt dislocation wall. *Acta Metallurgica*, 8(5):296 – 311, 1960.
- Z. Li, C. Hou, M. Huang, und C. Ouyang. Strengthening mechanism in micro-polycrystals with penetrable grain boundaries by discrete dislocation dynamics simulation and hall–petch effect. *Computational Materials Science*, 46(4):1124–1134, 2009.
- B. Liu, D. Raabe, P. Eisenlohr, F. Roters, A. Arsenlis, und G. Hommes. Dislocation interactions and low-angle grain boundary strengthening. *Acta Materialia*, 59(19):7125–7134, 2011.
- B. Liu, P. Eisenlohr, F. Roters, und D. Raabe. Simulation of dislocation penetration through a general low-angle grain boundary. *Acta Materialia*, 60(13–14):5380 – 5390, 2012.
- W. Liu, E. Karpov, S. Zhang, und H. Park. An introduction to computational nanomechanics and materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(17–20):1529 – 1578, 2004. Multiple Scale Methods for Nanoscale Mechanics and Materials.
- J. Livingston und B. Chalmers. Multiple slip in bicrystal deformation. *Acta Metallurgica*, 5(6):322 – 327, 1957.
- A. Ma und F. Roters. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals. *Acta Materialia*, 52(12):3603–3612, 2004.
- A. Ma, F. Roters, und D. Raabe. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity {FEM} including geometrically necessary dislocations. *Acta Materialia*, 54(8):2169–2179, 2006a.
- A. Ma, F. Roters, und D. Raabe. On the consideration of interactions between dislocations and grain boundaries in crystal plasticity finite element modeling – theory, experiments, and simulations. *Acta Materialia*, 54(8):2181 – 2194, 2006b.

- R. Madec, B. Devincre, und L. Kubin. Simulation of dislocation patterns in multislip. *Scripta Materialia*, 47(10):689–695, 2002.
- R. Madec, B. Devincre, L. Kubin, T. Hoc, und D. Rodney. The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening. *Science*, 301(5641):1879–1882, 2003.
- J. Mandel. Generalisation de la theorie de plasticite de W. T. Koiter. *International Journal of Solids and Structures*, 1(3):273–295, 1965.
- W. P. Mason und A. Rosenberg. Phonon and electron drag coefficients in single-crystal aluminum. *Physical Review*, 151:434–441, Nov 1966.
- J. W. Menter. The direct study by electron microscopy of crystal lattices and their imperfections. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 236(1204):119–135, 1956.
- C. Motz, D. Weygand, J. Senger, und P. Gumbsch. Initial dislocation structures in 3-D discrete dislocation dynamics and their influence on microscale plasticity. *Acta Materialia*, 57(6):1744–1754, 2009.
- F. Nabarro und J. Hirth. *Dislocations in solids*, 12. Dislocations In Solids. North-Holland Publ., 2004.
- F. Nabarro, Z. Basinski, und D. Holt. The plasticity of pure single crystals. *Advances in Physics*, 13(50):193–323, 1964.
- S. Nakamura und S. F. Chichibu. *Introduction to nitride semiconductor blue lasers and light emitting diodes*. CRC Press, 2000.
- A. Needleman. Computational mechanics at the mesoscale. *Acta Materialia*, 48(1):105 – 124, 2000.
- J. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1(2):153–162, 1953.
- E. Orowan. Zur Kristallplastizität. I. *Zeitschrift für Physik*, 89(9-10): 605–613, 1934a.
- E. Orowan. Zur Kristallplastizität. II. *Zeitschrift für Physik*, 89(9-10): 614–633, 1934b.

- E. Orowan. Zur Kristallplastizität. III. *Zeitschrift für Physik*, 89(9-10): 634–659, 1934c.
- D. Peirce, R. Asaro, und A. Needleman. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metallurgica*, 30(6):1087 – 1119, 1982.
- N. Petch. The cleavage strength of polycrystals. *Journal of Iron and Steel Research Institute*, 174:25–28, 1953.
- G. Po, M. Mohamed, T. Crosby, C. Erel, A. El-Azab, und N. Ghoniem. Recent progress in discrete dislocation dynamics and its applications to micro plasticity. *Journal of the Minerals, Metals and Materials society*, 66(10):2108–2120, 2014.
- M. Polanyi. Über eine Art Gitterstörung, die einen Kristall plastisch machen könnte. *Zeitschrift für Physik*, 89(9-10):660–664, 1934.
- S. S. Quek, Z. Wu, Y. W. Zhang, und D. J., Srolovitz. Polycrystal deformation in a discrete dislocation dynamics framework. *Acta Materialia*, 75(0):92–105, 2014.
- S. S. Quek, Z. H. Chooi, Z. Wu, Y. W. Zhang, und D. J. Srolovitz. The inverse hall–petch relation in nanocrystalline metals: A discrete dislocation dynamics analysis. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 88:252–266, 2015.
- M. Rappaz, M. Bellet, und M. O. Deville. *Numerical modeling in materials science and engineering*, volume 32. Springer Science & Business Media, 2010.
- C. Reuber, P. Eisenlohr, F. Roters, und D. Raabe. Dislocation density distribution around an indent in single-crystalline nickel: Comparing nonlocal crystal plasticity finite-element predictions with experiments. *Acta Materialia*, 71(0):333 – 348, 2014.
- M. Rhee, H. M. Zbib, J. P. Hirth, H. Huang, und T. de la Rubia. Models for long-/short-range interactions and cross slip in 3d dislocation simulation of bcc single crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 6(4):467, 1998.

- J. Rice. Inelastic constitutive relations for solids: An internal-variable theory and its application to metal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 19(6):433 – 455, 1971.
- I. M. Robertson, C. A. Schuh, J. S. Vetrano, N. D. Browning, D. P. Field, D. J. Jensen, M. K. Miller, I. Baker, D. C. Dunand, R. Dunin-Borkowski, et al. Towards an integrated materials characterization toolbox. *Journal of Materials Research*, 26(11):1341–1383, 2011.
- D. Rodney und R. Phillips. Structure and strength of dislocation junctions: An atomic level analysis. *Physical Review Letters*, 82:1704–1707, Feb 1999.
- F. Roters. A new concept for the calculation of the mobile dislocation density in constitutive models of strain hardening. *physica status solidi (b)*, 240(1):68–74, 2003.
- F. Roters. *Advanced material models for the crystal plasticity finite element method : development of a general CPFEM framework*. PhD thesis, Aachen, 2011. Aachen, Techn. Hochsch., Habil.-Schr., 2011.
- F. Roters, D. Raabe, und G. Gottstein. Work hardening in heterogeneous alloys—a microstructural approach based on three internal state variables. *Acta Materialia*, 48(17):4181–4189, 2000.
- F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D. Tjahjanto, T. Bieler, und D. Raabe. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*, 58(4):1152–1211, 2010.
- F. Roters, P. Eisenlohr, T. R. Bieler, und D. Raabe. *Crystal Plasticity Finite Element Methods: In Materials Science and Engineering*. John Wiley & Sons, 2011.
- F. Roters, P. Eisenlohr, C. Kords, D. Tjahjanto, M. Diehl, und D. Raabe. Damask: the düsseldorf advanced material simulation kit for studying crystal plasticity using an fe based or a spectral numerical solver. *Procedia IUTAM*, 3(0):3 – 10, 2012. IUTAM Symposium on Linking Scales in Computations: From Microstructure to Macro-scale Properties.

- G. Saada und P. Veyssiere. Work hardening of face centred cubic crystals. dislocation intersection and cross-slip. *Dislocations in Solids*, 11:413, 2002.
- S. Sandfeld, T. Hochrainer, M. Zaiser, und P. Gumbsch. Continuum modeling of dislocation plasticity: Theory, numerical implementation, and validation by discrete dislocation simulations. *Journal of Materials Research*, 26:623–632, 3 2011.
- R. Sedláček, J. Kratochvíl, und E. Werner. The importance of being curved: bowing dislocations in a continuum description. *Philosophical Magazine*, 83(31-34):3735–3752, 2003.
- J. Senger. *Versetzungsdynamiksimulation der mechanischen Eigenschaften von Mikrometerproben*. PhD thesis, IAM-ZBS, KIT Karlsruhe, 2010.
- J. Senger, D. Weygand, P. Gumbsch, und O. Kraft. Discrete dislocation simulations of the plasticity of micro-pillars under uniaxial loading. *Scripta Materialia*, 58(7):587–590, 2008.
- J. Senger, D. Weygand, C. Motz, P. Gumbsch, und O. Kraft. Aspect ratio and stochastic effects in the plasticity of uniformly loaded micrometer-sized specimens. *Acta Materialia*, 59(8):2937–2947, 2011.
- J. G. Sevillano. *Flow Stress and Work Hardening*, volume 6, chapter 2, pages 11–88. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2006.
- Z. Shen, R. Wagoner, und W. Clark. Dislocation pile-up and grain boundary interactions in 304 stainless steel. *Scripta Metallurgica*, 20(6):921 – 926, 1986.
- R. B. Sills und W. Cai. Efficient time integration in dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 22(2): 025003, 2014.
- R. B. Sills, A. Aghaei, und W. Cai. Advanced time integration algorithms for dislocation dynamics simulations of work hardening. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 24(4):045019, 2016.
- D. E. Spearot und M. D. Sangid. Insights on slip transmission at grain boundaries from atomistic simulations. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 18(4):188 – 195, 2014. Slip Localization and Transfer in Deformation and Fatigue of Polycrystals.

- K. Srivastava, R. Gröger, D. Weygand, und P. Gumbsch. Dislocation motion in tungsten: Atomistic input to discrete dislocation simulations. *International Journal of Plasticity*, 47:126 – 142, 2013.
- P. Stoyanov, P. A. Romero, R. Merz, M. Kopnarski, M. Stricker, P. Stemmer, M. Dienwiebel, und M. Moseler. Nanoscale sliding friction phenomena at the interface of diamond-like carbon and tungsten. *Acta Materialia*, 67:395–408, 2014.
- M. Stricker und D. Weygand. Dislocation multiplication mechanisms - glissile junctions and their role on the plastic deformation at the microscale. *Acta Materialia*, 99:130–139, 2015.
- M. Stricker, J. Gagel, S. Schmitt, K. Schulz, D. Weygand, und P. Gumbsch. On slip transmission and grain boundary yielding. *Meccanica*, 51(2): 271–278, 2015.
- A. P. Sutton und R. W. Balluffi. *Interfaces in crystalline materials*. Monographs on the physics and chemistry of materials ; 51. Clarendon Press, Oxford, 1. publ. (with corr.) edition, 1996.
- M. Tang, L. Kubin, und G. Canova. Dislocation mobility and the mechanical response of b.c.c. single crystals: A mesoscopic approach. *Acta Materialia*, 46(9):3221 – 3235, 1998.
- G. I. Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. Part I. Theoretical. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Containing Paper of a Mathematical and Physical Character*, 145(855): 362–387, 1934a.
- G. I. Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. Part II. Comparison with observations. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 145(855):388–404, 1934b.
- P. van Beers. *Multiscale modelling of grain boundary plasticity*. PhD thesis, Eindhoven University of Technology, 2015.
- P. van Beers, G. McShane, V. Kouznetsova, und M. Geers. Grain boundary interface mechanics in strain gradient crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 61(12):2659–2679, 2013.

- E. Van der Giessen und A. Needleman. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 3(5):689, 1995.
- S. N. Varadhan, A. J. Beaudoin, A. Acharya, und C. Fressengeas. Dislocation transport using an explicit galerkin/least-squares formulation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 14(7):1245, 2006.
- N. Verdhan und R. Kapoor. Interaction of dislocations with low angle tilt boundaries in fcc crystals. *Computational Materials Science*, 98(0):149–157, 2015.
- B. von Blanckenhagen, P. Gumbsch, und E. Arzt. Dislocation sources in discrete dislocation simulations of thin-film plasticity and the hall-petch relation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 9(3):157, 2001.
- G. Z. Voyiadjis, D. Faghihi, und Y. Zhang. A theory for grain boundaries with strain-gradient plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 51(10):1872–1889, 2014.
- Z. Wang, N. Ghoniem, und R. LeSar. Multipole representation of the elastic field of dislocation ensembles. *Physical Review B*, 69:174102, May 2004.
- E. Werner und W. Prantl. Slip transfer across grain and phase boundaries. *Acta Metallurgica et Materialia*, 38(3):533–537, 1990.
- D. Weygand. Mechanics and dislocation structures at the micro-scale: Insights on dislocation multiplication mechanisms from discrete dislocation dynamics simulations. In *Dislocation Plasticity*, volume 1651 of *MRS Proceedings*, 1 2014a.
- D. Weygand. Mechanics and Dislocation Structures at the Micro-Scale: Insights on Dislocation Multiplication Mechanisms from Discrete Dislocation Dynamics Simulations. 1651, 2014b.
- D. Weygand und P. Gumbsch. Study of dislocation reactions and rearrangements under different loading conditions. *Materials Science and Engineering: A*, 400–401(0):158–161, 2005.

- D. Weygand, L. Friedman, E. van der Giessen, und A. Needleman. Discrete dislocation modeling in three-dimensional confined volumes. *Materials Science and Engineering: A*, 309–310(0):420–424, 2001. Dislocations 2000: An International Conference on the Fundamentals of Plastic Deformation.
- D. Weygand, L. H. Friedman, E. V. der Giessen, und A. Needleman. Aspects of boundary-value problem solutions with three-dimensional dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 10(4):437–468, 2002.
- D. Weygand, J. Senger, C. Motz, W. Augustin, V. Heuveline, und P. Gumbsch. High performance computing and discrete dislocation dynamics: Plasticity of micrometer sized specimens. In W. E. Nagel, D. B. Kröner, und M. M. Resch, editors, *High Performance Computing in Science and Engineering '08*, pages 507–523. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- C.-C. Wu, P. Chung, S. Aubry, L. Munday, und A. Arsenlis. The strength of binary junctions in hexagonal close-packed crystals. *Acta Materialia*, 61(9):3422 – 3431, 2013.
- T.-Y. Wu, J. L. Bassani, und C. Laird. Latent hardening in single crystals i. theory and experiments. *Proceedings: Mathematical and Physical Sciences*, 435(1893):1–19, 1991.
- S. Wulfinghoff, E. Bayerschen, und T. Böhlke. A gradient plasticity grain boundary yield theory. *International Journal of Plasticity*, 51(0):33–46, 2013.
- S. Xia und A. El-Azab. Computational modelling of mesoscale dislocation patterning and plastic deformation of single crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23(5):055009, 2015.
- M. Zaiser und S. Sandfeld. Scaling properties of dislocation simulations in the similitude regime. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 22(6):065012, 2014.
- H. M. Zbib, M. Rhee, und J. P. Hirth. On plastic deformation and the dynamics of 3d dislocations. *International Journal of Mechanical Sciences*, 40(2–3):113–127, 1998.

- X. Zhang und K. Aifantis. Examining the evolution of the internal length as a function of plastic strain. *Materials Science and Engineering: A*, 631(0):27–32, 2015.
- X. Zhang, K. E. Aifantis, J. Senger, D. Weygand, und M. Zaiser. Internal length scale and grain boundary yield strength in gradient models of polycrystal plasticity: How do they relate to the dislocation microstructure? *Journal of Materials Research*, 29:2116–2128, 2014.
- C. Zhou und R. LeSar. Dislocation dynamics simulations of plasticity in polycrystalline thin films. *International Journal of Plasticity*, 30–31(0): 185–201, 2012.
- C. Zhou, S. B. Biner, und R. LeSar. Discrete dislocation dynamics simulations of plasticity at small scales. *Acta Materialia*, 58(5):1565–1577, 2010.
- M. Zikry und M. Kao. Inelastic microstructural failure mechanisms in crystalline materials with high angle grain boundaries. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(11):1765 – 1798, 1996.