

Entwicklung einer versetzungsbasierten Kontinuumstheorie mittels mechanismusbasierter Homogenisierung

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

genehmigte
Dissertation

von

Dipl.-Math. techn. Severin Stefan Schmitt

Tag der mündlichen Prüfung:	03. April 2018
Hauptreferent:	Prof. Dr. Peter Gumbsch
Korreferent:	Prof. Dr. Thomas Hochrainer



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

Meine Dissertation ist am Institut für Angewandte Materialien – Computational Materials Science am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) im Rahmen der DFG Forschergruppe FOR1650 *Dislocation based plasticity* entstanden.

Ich möchte mich bei Herrn Prof. Peter Gumbsch für seine Unterstützung und sein Interesse an meiner Arbeit bedanken. Seine Anforderungen an wissenschaftliches Arbeiten waren stets eine große Motivation für mich. Sein Institut bietet ein außergewöhnliches Umfeld und viel Raum für konstruktive fachliche und nicht-fachliche Diskussionen.

Ich danke Herrn Prof. Thomas Hochrainer für die Übernahme des Korreferats meiner Dissertation.

Des Weiteren möchte ich mich bei allen Kollegen und Freunden für die Unterstützung, die Inspiration und für unsere gemeinsam verbrachte Zeit bedanken. Ein besonderer Dank gilt Dr. Katrin Schulz, Dr. Daniel Weygand, Prof. Dr. Lars Pastewka und Dr. Markus Stricker, die auf unterschiedliche Art und Weise Einfluss auf meine Arbeit genommen und zu deren erfolgreichem Abschluss beigetragen haben.

Meiner Mutter danke ich ganz besonders dafür, dass sie mich immer dazu ermutigt hat, mich neuen Herausforderungen zu stellen und an diesen Erfahrungen zu wachsen.

Zu guter Letzt möchte ich mich bei meiner Frau Kai für den Rückhalt und das Verständnis bedanken, das Sie mir besonders in den letzten Monaten entgegen gebracht hat.

Severin Schmitt
Bonn, Mai 2018

Kurzfassung (Abstract)

Die Entwicklung einer physikalischen Kontinuumstheorie aus einer Versetzungsdichtetheorie erfordert eine homogenisierte Darstellung der physikalischen Grundlagen der Versetzungsdynamik. Dabei lassen sich die Wechselwirkungen von Versetzungen mittels einer homogenisierten Darstellung der freien Energie bzw. der resultierenden Kräfte des Systems oder durch das explizite Homogenisieren einzelner Mechanismen in das System einbringen. In beiden Fällen werden die Informationen aus diskreten Versetzungsdynamiksimulationen gewonnen und es stellt sich die Frage, unter welchen Bedingungen eine Allgemeingültigkeit der entsprechenden Theorie erzielt werden kann. In dieser Arbeit wird die mechanismusbasierte Homogenisierung der Wechselwirkung von Versetzungen eines Gleitsystems in 2D und eine Homogenisierung des Frank-Read-Mechanismus zur Produktion von Versetzungsdichte hergeleitet. Hierbei ist speziell der Übergang von Systemen in denen einzelne Versetzungen dominieren hin zu Systemen von Versetzungsensembeln von Interesse. In diesem Zusammenhang wird das Konzept des Kontinuumslimits eingeführt und untersucht, in wie weit sich dieses Konzept dazu eignet, die Gültigkeit von physikalischen Kontinuumstheorien zu charakterisieren.

The formulation of a physically motivated continuum theory requires a homogenized representation of the underlying physics of the dislocation dynamics. The interaction of dislocations can be homogenized by developing a formulation of the free energy or the resulting internal forces or by an explicit homogenization of individual mechanisms dominating a specific system of dislocations. In both cases the information is incorporated based on discrete dislocation dynamics simulations and the question is raised under which conditions a generally valid continuum theory can be derived. Within this work the interactions of dislocations of single slip configuration in 2D and the Frank-Read mechanism for density production are explicitly homogenized. The investigation of the transition from a regime of single dislocations to a regime of dislocation ensembles arouses special interest. In this context the concept of the continuum limit is introduced to characterize the general validity of physically motivated continuum theories.

Veröffentlichungen

K. Schulz, D. Dickel, S. Schmitt, S. Sandfeld, D. Weygand, P. Gumbsch. *Analysis of dislocation pile-ups using a dislocation-based continuum theory*. Modelling Simul. Mater. Sci. and Eng., 2014, 22, 025008.

D. Dickel, K. Schulz, S. Schmitt, P. Gumbsch. *A Continuum Formulation of Stress Correlations of Dislocations in Two Dimensions*. Technische Mechanik, 2014, 34, 205-212.

D. Dickel, S. Schmitt, K. Schulz, P. Gumbsch. *Dipole formation and yielding in a two-dimensional continuum dislocation model*. Phys. Rev. B, American Physical Society, 2014, 90, 094118.

M. Stricker, J. Gagel, S. Schmitt, K. Schulz, D. Weygand, P. Gumbsch. *On slip transmission and grain boundary yielding Meccanica*. Springer Netherlands, 2015, 1-8.

S. Schmitt, P. Gumbsch, K. Schulz. *Internal stresses in a homogenized representation of dislocation microstructures*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2015, 84, 528-544.

Anmerkung: Die Veröffentlichung Schmitt et al. (2015) beinhaltet einen Großteil der Ergebnisse aus Kapitel 3.1 und Kapitel 5.1 dieser Arbeit.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Motivation	1
1.2. Stand der Forschung	2
1.3. Gliederung	4
2. Grundlagen zur Entwicklung einer versetzungsbasierten Kontinuumstheorie	5
2.1. Diskrete Versetzungsdynamik	7
2.2. Mittelung diskreter Versetzungsstrukturen	9
2.2.1. Regularisierung	11
2.2.2. Ensemblemittelwertbildung	12
2.3. Versetzungsdichtetheorie	14
2.4. Versetzungsmobilität	16
3. Mechanismusbasierte Homogenisierung	21
3.1. Wechselwirkung von Versetzungen innerhalb eines Gleitsystems	22
3.1.1. Schrittweise Homogenisierung der Darstellung von Versetzungen	22
3.1.2. Wechselwirkung auf diskreten Gleitebenen (I)	23
3.1.3. Wechselwirkung auf homogenisierten Gleitebenen (II)	26
3.2. Frank-Read Quellen	28
4. Charakterisierung des Kontinuumslimits	37
4.1. Heuristische Analyse des Kontinuumslimits	38
4.2. Grundlagen zur Definition des Kontinuumslimits	40
4.3. Definition eines Maßes für das Kontinuumslimit	41
5. Ergebnisse	43
5.1. Wechselwirkungen innerhalb eines Gleitsystems	43
5.1.1. Modellierung mittels diskreter Gleitebenen (I)	43
5.1.2. Modellierung mittels homogenisierter Gleitebenen (II)	45
5.1.3. Homogenisierte Gleitebenen unterhalb des Kontinuumslimits	50
5.1.4. Eigendehnungsformulierung geneigter Gleitebenen	53
5.2. Quellmechanismus	56
5.2.1. Diskrete Quellverteilung	56

5.2.2.	Homogene Quellverteilung	58
5.2.3.	Größeneffekt	59
5.3.	Balkenbiegung	61
5.3.1.	Parameter des Quellmodells	61
5.3.2.	Reine Biegung	65
5.3.3.	Biegung eines Kragbalkens	70
5.4.	Kontinuumslimit	74
5.4.1.	Kontinuumslimit für polarisierte Dichten	77
5.4.2.	Kontinuumslimit für nicht-polarisierte Dichten	79
6.	Diskussion	93
6.1.	Homogenisierung der Wechselwirkung von Versetzungen	93
6.2.	Homogenisierung des Quellmechanismus	97
6.3.	Kontinuumslimit	105
7.	Zusammenfassung und Ausblick	111
Anhang		115
A.	Disklinationen und Versetzungen	115
B.	Eigendehnungsformulierung geneigter Gleitsysteme	118
C.	Auswertungen der Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik	119
D.	Konvergenz der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen	121
E.	Weitere Ergebnisse zur Charakterisierung des Kontinuumslimits	122
F.	Reichweite der Korrelationsfunktionen	123
Literaturverzeichnis		125

1. Einleitung

1.1. Motivation

Experimentelle Belege für Größeneffekte in materialwissenschaftlichen Untersuchungen haben die Notwendigkeit offenbart, skalenabhängige Beschreibungen zur Charakterisierung unterschiedlicher Phänomene und Belastungsfälle zu formulieren (Ashby, 1970, Fleck et al., 1994, Arzt, 1998, Uchic et al., 2004). Für eine allgemeine Beschreibung der Größeneffekte der Fließspannung wird das Verhältnis der externen Längenskala eines Systems im Verhältnis zur inneren charakteristischen Länge betrachtet. Die charakteristische Länge eines Versetzungsnetzwerks kann sich vom mittleren Versetzungsabstand über die Größe von Versetzungszellen bis hin zu makroskopischen Größen der Mikrostruktur erstrecken und beschreibt die für den Anwendungsfall dominierende Eigenschaft (Zaiser et al., 2007). Detailliertes Verständnis über die physikalischen Zusammenhänge lässt sich aus diskreten Versetzungsdynamiksimulationen gewinnen, welche vollständige Informationen über den Zustand und die zeitliche Entwicklung von Versetzungsnetzwerken liefern (Weygand et al., 2002, Bulatov und Cai, 2006, Kubin, 2013, Po et al., 2014). Trotz der immensen Weiterentwicklung der verfügbaren Rechenleistung ist diese Methode auf kleine Bauteilabmessungen beschränkt und so wurden parallel dazu phänomenologische Kontinuumstheorien zur Beschreibung der Größeneffekte und dem Übergang zu klassischen Kontinuumstheorien entwickelt (Ashby, 1970, Fleck und Hutchinson, 1993, Nix und Gao, 1998, Gurtin, 2002). Phänomenologische Kontinuumstheorien dienen dazu beobachtete Zusammenhänge abzubilden um u.a. Größeneffekte modellieren zu können. Im Allgemeinen eignen sich diese Theorien nicht dazu, das physikalische Verständnis zu vertiefen, da bereits die Grundlage der plastischen Verformung, also die Bewegung von Versetzungen, nicht oder nur eingeschränkt abgebildet wird.

An ihre Stelle treten versetzungsbasierte bzw. physikalische Kontinuumstheorien, die auf der Homogenisierung der Bewegung von Versetzungen basieren und welche zwei wesentliche

Aufgaben erfüllen sollen: zum einen die Erweiterung des Verständnisses über versetzungsinduzierte Längenskalen und zum anderen die Erweiterung klassischer gradientenbasierter Kontinuumstheorien durch eine mögliche physikalische Interpretation der Modellparameter. Die ersten Versuche zur Darstellung der Kinematik von Versetzungssystemen mittels Versetzungsdichten wurde gleichzeitig von Kondo (1952), Nye (1953), Bilby et al. (1955) und Kröner (1958) angestellt. Ihre Überlegungen mündeten in der Formulierung einer kinematisch abgeschlossenen Versetzungsdichtetheorie, die die Zusammenhängigkeit der Versetzungslinien, die Umwandlung von Versetzungsorientierungen und die natürliche Linienproduktion aufgrund der Krümmung von Versetzungen in einer 3-dimensionalen Theorie berücksichtigt (Hochrainer, 2006). Diese Theorie bildet die Grundlage, um mit entsprechenden Konstitutivgesetzen der Versetzungsmobilität die physikalischen Eigenschaften von Versetzungssystemen zu homogenisieren und als Kontinuumstheorie zugänglich zu machen (Hochrainer et al., 2014).

1.2. Stand der Forschung

Viele der bis dahin vorgestellten Theorien haben für Spezialfälle die oben genannten Anforderungen an eine Versetzungsdichtetheorie erfüllt, aber bieten keinen Ansatz zur Verallgemeinerung der Ergebnisse (Sedláček et al., 2003, Acharya und Roy, 2006, Arsenlis et al., 2004, Zaiser und Hochrainer, 2006, Reuber et al., 2014). Für Versetzungssysteme in 2 Dimensionen haben Groma (1997) und Zaiser et al. (2001) die Idee von Korrelationsensoren von Kröner (1969) aufgenommen und mittels statistischer Mechanik die Korrelationsfunktionen positiver und negativer gerader Versetzungen berechnet. Die berechneten Korrelationsfunktionen bilden die Grundlage für eine Versetzungsdichtetheorie in 2 Dimensionen Groma et al. (2003). Zur Übertragung der Ansätze auf eine allgemeine 3-dimensionale Theorie wurde von Kosevich (1979) erstmals ein zusätzlicher Parameter zur Beschreibung der Linienorientierung eingeführt. Es folgte die Verallgemeinerung der statistischen Mechanik für gekrümmte Linien durch El-Azab (2000) mittels der Einführung eines höherdimensionalen Phasenraums und Grundlagen zur Berechnung der Korrelationsfunktionen in 3 Dimensionen, die im weiteren von El-Azab et al. (2007), Deng und El-Azab (2007) und Csikor et al. (2008) untersucht wurden.

Die von Hochrainer (2006) formulierte Versetzungsdichtetheorie fasst diese Entwicklung in einer kinematisch vollständigen Theorie in einem höherdimensionalen Raum für den Ort und die Orientierung gemittelter Versetzungen zusammen. Mittels einer Alignment-tensorenentwicklung lässt sich die höherdimensionale Theorie in eine "vereinfachte" Theorie überführen, die sich aus interpretierbaren Größen einer Versetzungsdichte zusammensetzt (Hochrainer et al., 2014, Hochrainer, 2015). Die Vereinfachung der höherdimensionalen Theorie durch den Abschluss der Alignment-tensorenentwicklung ermöglicht es, unterschiedliche Anforderungen an eine Versetzungsdichtetheorie zu berücksichtigen (Monavari et al., 2014, Hochrainer, 2015).

Um aus einer kinematisch vollständigen Versetzungsdichtetheorie eine physikalische Kontinuumstheorie zu entwickeln, muss eine Formulierung der Konstitutivgesetze der Versetzungsmobilität durch konsistentes Homogenisieren entwickelt werden, sodass aus der momentanen Beschreibung der Versetzungsdichte die resultierenden Kräfte des Versetzungssystems berechnet werden können (Zaiser, 2015).

Ein allgemeiner energetischer Ansatz umfasst das Aufstellen eines Funktionals der freien Energie z.B. durch Aufstellen des Funktionals passend zu diskreten Versetzungsdynamiksimulationen (Groma et al., 2006, 2015). Das Funktional kann durch einen thermodynamischen Ansatz mittels einer effektiven Temperatur zur Beschreibung der Reichweite der Versetzungskorrelationen (Limkumnerd und Van der Giessen, 2008, Kooiman et al., 2015) oder durch konsistente Mittelung der freien Energie diskreter Versetzungssysteme, ähnlich der Dichtefunktionaltheorie für Systeme von Elektronen, durch das Aufteilen in langreichweitige und Korrelationsenergien (Zaiser, 2015) aufgestellt werden. Für einen kräftebasierten Ansatz werden statt der Herleitung eines Funktionals der freien Energie direkt die resultierenden Kräfte, also die Gradienten der freien Energie, des Systems gemittelt (Kocks und Scattergood, 1969, Zaiser et al., 2001, Groma et al., 2003, Hochrainer, 2016).

Eine andere Herangehensweise ist durch das Homogenisieren einzelner zugrundeliegender Mechanismen gegeben. Beispiele dafür sind das Verfestigungsverhalten nach Taylor für unterschiedliche Versetzungsinteraktionen (Franciosi et al., 1980, Devincere et al., 2006), die Homogenisierung der Wechselwirkung von Versetzungsdichten in 1-dimensionalen Versetzungsaufstaus (Schulz et al., 2014) oder das Reproduzieren des Frank-Read Mechanismus für 2-dimensionale diskrete Versetzungsdynamiksimulationen (Van der Giessen und Needleman, 1995, Benzerga et al., 2004, Benzerga, 2008, Shishvan et al., 2008) oder physikalische Kontinuumstheorien (Zhu et al., 2014).

Alle Herangehensweisen haben gemein, dass sie Informationen aus diskreten Versetzungsdynamiksimulationen benötigen, um die physikalischen Zusammenhänge entweder explizit oder implizit berücksichtigen zu können. Prinzipiell müssen diese Informationen in Form von Modellparametern für unterschiedliche Problemstellungen aus verschiedenen diskreten Versetzungsdynamiksimulationen gewonnen werden. Es stellt sich die Frage unter welchen Bedingungen eine auf diese Art und Weise abgeleitet physikalische Kontinuumstheorie eine allgemeingültige Theorie darstellt (Zaiser, 2015) oder anders formuliert unter welchen Voraussetzungen ein Satz an Modellparametern gewonnen werden kann, der für alle Arten von Simulationen seine Gültigkeit behält.

In dieser Arbeit wird der Fokus auf das Homogenisieren spezieller Aspekte der Versetzungssysteme gelegt (bezeichnet mit *mechanismusbasierte Homogenisierung*) um den Übergang vom Einfluss einzelner Versetzungen hin zu Versetzungsensembles zu untersuchen. Des Weiteren wird eine Herangehensweise zur Untersuchung der Allgemeingültigkeit von physikalischen Kontinuumstheorien durch das Konzept des Kontinuumslimits eingeführt.

1.3. Gliederung

In Kapitel 2 erfolgt die Einführung in die theoretischen Grundlagen der diskreten Versetzungsdynamik in 2 Dimensionen, der Mittelung diskreter Versetzungsstrukturen und der Versetzungsdichtetheorie nach Hochrainer (2015). In Kapitel 3 werden Modelle für die Homogenisierung der Versetzungswechselwirkungen innerhalb eines Gleitsystems und der Versetzungsdichteproduktion durch Frank-Read Quellen entwickelt. Die Homogenisierung basiert auf dem Verständnis der physikalischen Zusammenhänge und wird deshalb als *mechanismusbasierte Homogenisierung* bezeichnet. Um den Gültigkeitsbereich einer allgemeinen Versetzungsdichtetheorie zu charakterisieren, wird in Kapitel 4 die Definition und ein Maß für das *Kontinuumslimit* eingeführt. In Kapitel 5 werden sowohl die eingeführten Modelle der Versetzungsdichtetheorie als auch das Maß für das Kontinuumslimit anhand von diskreten Versetzungsdynamiksimulationen untersucht. Dabei wird die Biegung als Anwendungsbeispiel mit der größtmöglichen Verallgemeinerung in 2 Dimensionen betrachtet. In Kapitel 6 werden diese Ergebnisse besonders mit Blick auf das Kontinuumslimit diskutiert und abschließend werden in Kapitel 7 die Erkenntnisse dieser Arbeit zusammengefasst und Herausforderungen zu deren Verallgemeinerung erörtert.

2. Grundlagen zur Entwicklung einer versetzungsbasierten Kontinuumstheorie

Die Grundlage zur Modellierung von versetzungsbasierten Plastizitätstheorien liegt einerseits im Verständnis der Bewegung und der Wechselwirkungen von Versetzungen und andererseits im Verständnis der Produktion von Versetzungen jeweils auf unterschiedlichen Skalen. Das gewonnene Verständnis wird von kleinen Skalen auf größere Skalen übertragen, mit dem Ziel, die physikalischen Informationen zu erhalten und gleichzeitig eine Reduktion der Anzahl der Freiheitsgrade zu erreichen.

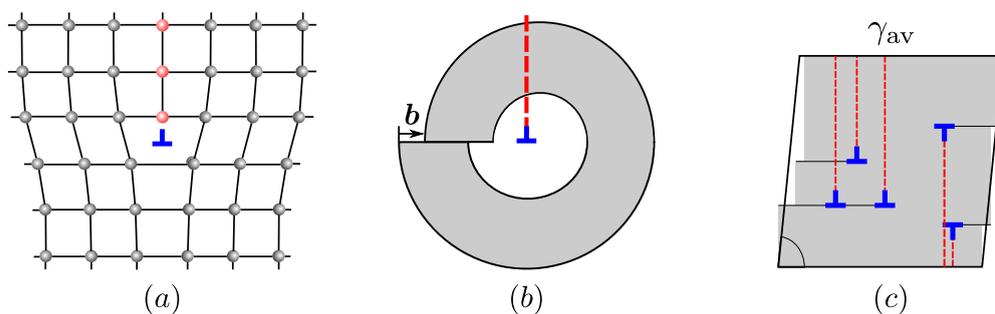


Abbildung 2.1: Die unterschiedlichen Skalen der versetzungsbasierten Plastizität. Von der (a) Atomistik (Darstellung der Versetzungslinien über Atomgitterkonfigurationen) über (b) die diskrete Versetzungsdynamik (hier: Konfiguration zur Bestimmung des singulären Spannungsfelds einer geraden Versetzung im unendlichen elastischen Medium ohne den Versetzungskern) hin zu (c) der Kontinuumstheorie für Versetzungen (Definition einer Volumengröße γ_{av} zur Charakterisierung der plastischen Deformation aufgrund von Versetzungsbewegung).

Abbildung 2.1 zeigt Darstellungen verschiedener Skalen, auf denen Informationen über unterschiedliche Aspekte der Versetzungen gesammelt werden. Atomistische Simulationen werden verwendet, um Informationen über Versetzungen auf der atomaren Ebene (Abb. 2.1 a) zu gewinnen. Diese Informationen dienen als Grundlage für die diskrete Versetzungsdynamik. Die diskrete Versetzungsdynamik beschreibt Versetzungen als Linien-defekte in einem elastischen Medium. Die langreichweitige Wechselwirkung von Versetzungen werden aus der analytischen Lösung der Spannungs- und Verschiebungsfelder im unendlichen elastischen Medium gewonnen (Volterra, 1907, Hirth und Lothe, 1982) und mit den fehlenden Informationen aus atomistischen Simulationen ergänzt. Dazu gehört Grundlegendes wie die Beschreibung der nichtlinearen Zusammenhänge innerhalb des Versetzungskerns (Cai et al., 2003), sowie die Konstitutivgesetze der Versetzungsmobilität für kubisch flächenzentrierte Materialien (Cai und Bulatov, 2004, Bitzek und Gumbsch, 2004, 2005) und der Einfluss des Versetzungskerns auf das anormale Versetzungsgleiten von kubisch raumzentrierten Materialien (Moriarty et al., 2002, Bulatov und Cai, 2002, Cai und Bulatov, 2004, Vitek et al., 2004, Gröger und Vitek, 2008). Weitere Beispiele sind die Beschreibung kurzreichweitiger Wechselwirkungen / Versetzungsreaktionen (Bulatov et al., 1998, Shenoy et al., 2000) und Wechselwirkungen mit Korngrenzen (Moriarty et al., 2002). Mit der diskreten Versetzungsdynamik können ganze Netzwerke von Versetzungen und deren Einfluss auf das makroskopische Materialverhalten untersucht werden. Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik sind durch den numerischen Rechenaufwand aufgrund der langreichweitigen Wechselwirkungen auf die Mikrometerskala beschränkt.

Um den Übergang auf größere Skalen zu ermöglichen, wird eine vollständige Beschreibung der Versetzungsstruktur gesucht, die eine Darstellung unabhängig von der Anzahl der Versetzungen ermöglicht. Eine solche Versetzungsdichtetheorie soll sowohl die Übertragung des physikalischen Verständnisses auf die Skala der klassischen Kontinuumstheorie ermöglichen, als auch die internen Längenskalen zur Beschreibung von Größeneffekten auf der Mikrometerskala korrekt abbilden können.

Die Entwicklung einer physikalischen Versetzungsdichtetheorie lässt sich in zwei Teile unterteilen. Zum einen wird eine gemittelte Beschreibung der Versetzungsstrukturen benötigt, die es erlaubt, die Kinematik der Versetzungsbewegung, also die Evolution der Versetzungen als zusammenhängende und gekrümmte Linien, vollständig abzubilden, und zum anderen muss aus dieser Darstellung die Informationen zur Wechselwirkung von Versetzungen und zu Versetzungsreaktionen bestimmt werden können. Dazu werden die physikalischen Informationen aus atomistischen Simulationen (u.a. die Versetzungsmobilität) und Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik (u.a. Paarkorrelationen (El-Azab, 2000, Zaiser et al., 2001, Groma et al., 2003) und Versetzungsreaktionen (Devincre et al., 2006)) mittels Homogenisierung für die Versetzungsdichtetheorie nutzbar gemacht. Eine wichtige Vergleichsgröße zwischen der diskreten und der kontinuierlichen Darstellung von Versetzungen ist die Definition der plastischen Verzerrung als das Verhältnis der abgescherten Fläche zu dem gegebenen Volumen multipliziert mit dem Betrag der Abscherung (Abb. 2.1 c). Während die Größe des Mittelungsvolumens in der diskreten Versetzungstheorie expli-

zit eingeführt werden muss, ist sie grundlegend, um eine kontinuierliche Versetzungstheorie definieren zu können, und stellt ein wichtiges Charakteristikum einer Versetzungsdichtesimulation dar.

Im Folgenden werden die Grundlagen der diskreten Versetzungsdynamik und der Mittelung von diskreten Versetzungsstrukturen vereinfacht in einer 2-dimensionalen Darstellung beschrieben und es wird ein Überblick über die Herleitung einer 3-dimensionalen Versetzungsdichtetheorie gegeben (Hochrainer et al., 2007, Hochrainer, 2015). Ein Bestandteil der Versetzungsdichtetheorie ist eine Eigendehnungsformulierung (Lemarchand et al., 2001, Sandfeld et al., 2013), die es ermöglicht, die resultierenden Spannungen aus einer gegebenen plastischen Verzerrung zu berechnen. Diese Methode erlaubt eine korrekte Darstellung der Wechselwirkungen von Versetzungen, solange die Auflösung im Bereich des minimalen Versetzungsabstandes liegt (Lemarchand et al., 2001), und liefert den Ansatz zur Homogenisierung der Wechselwirkungen von Versetzungen in dieser Arbeit.

2.1. Diskrete Versetzungsdynamik

Da sich die vorliegende Arbeit auf die 2-dimensionale Betrachtung von Versetzungen beschränkt, wird die diskrete Versetzungsdynamik formal nur im 2-Dimensionalen eingeführt. Dies bedeutet eine starke Einschränkung der physikalischen Eigenschaften von Versetzungen, da diese auf gerade Stufenversetzungen reduziert werden und somit die Untersuchung von Versetzungsstrukturen im Sinne eines Netzwerks nicht möglich ist. Im Allgemeinen benötigen Reaktionen von Versetzungen eine 3-dimensionale Betrachtung, da sie das Schneiden zweier Versetzungen auf unterschiedlichen Gleitebenen mit unterschiedlichen Burgersvektoren beschreiben. Des Weiteren ist die Annihilation von Versetzungen stark limitiert, da Stufenversetzungen auf unterschiedlichen Gleitebenen sich nur durch Versetzungsklettern, also durch Leerstellendiffusion, auslöschen können. Im Vergleich dazu können sich Schraubenversetzungen durch Quergleiten, dem Wechsel auf andere Gleitebenen, die den Burgersvektor enthalten, auslöschen. Erhalten bleibt ausschließlich die Dipolbildung, welche durch die Betrachtung unendlich langer Versetzungen einen überproportionalen Einfluss im Vergleich zu 3-dimensionalen Systemen erhält.

Diese Arbeit hat nicht das Ziel eine 2-dimensionale Theorie zu entwickeln, welche möglichst viele Eigenschaften der 3-dimensionalen Versetzungsdynamik abbildet, wie beispielsweise die Arbeiten von Van der Giessen und Needleman (1995), Cleveringa et al. (1997), Needleman und der Giessen (2001), Benzerga et al. (2004), Benzerga (2008) und Shishvan et al. (2008). Der Augenmerk liegt vielmehr auf dem Verständnis der physikalischen Mechanismen und deren Homogenisierung für eine Kontinuumstheorie. Daher beschränken wir uns auf Mechanismen, die explizit in einer 2-dimensionalen Theorie abgebildet werden können.

Für die 2-dimensionale diskrete Mikrostruktur kann jedes Gleitsystem durch die Schnittpunkte $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1,\dots,n}$ der Stufenversetzung mit der repräsentativen Ebene beschrieben werden, die senkrecht zu den Versetzungslinien liegt und durch den Burgersvektor $\mathbf{b} = |\mathbf{b}|\mathbf{e}_1$

sowie die Gleitebenennormale \mathbf{n} beschrieben wird. Das Vorzeichen der Versetzungen ist durch $s_i \in \{+, -\}$ gegeben.

Für kubisch flächenzentrierte Materialien lassen sich die möglichen Gleitsysteme durch den Thompson Tetraeder beschreiben (Thompson, 1953). Um die Spannungen zwischen Versetzungen zu berechnen, wird die Bewegungsgleichung mittels der Peach-Köhler Kraft

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)\mathbf{b}_j) \times \mathbf{l}_j \quad (2.1)$$

berechnet. $\boldsymbol{\sigma}$ ist die Spannung, die Versetzung j auf Versetzung i ausübt und der Tensor \mathbf{l}_j beschreibt die Linienrichtung der Versetzung. Der Anteil der Peach-Köhler Kraft $\mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_1$, der in Gleitrichtung wirkt, entspricht der Projektion der resultierenden Schubspannungen auf das entsprechende Gleitsystem. Ein Konstitutivgesetz für die Versetzungsgeschwindigkeit wird, wie oben beschrieben, aus atomistischen Simulationen bestimmt. Für kubisch flächenzentrierte Materialien lässt sich die Versetzungsgeschwindigkeit über

$$v(\mathbf{x}_i) = |\mathbf{b}|B^{-1}s_i \left(\tau_{\text{ext}}(\mathbf{x}_i) + \sum_{k \neq i}^n s_k \tau_{\text{ind}}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k) \right) \quad (2.2)$$

berechnen. B ist ein temperaturabhängiger Reibungswiderstand und b der Betrag des Burgersvektors. Die resultierende Schubspannung des Gleitsystems aufgrund der aufgeprägten Randbedingungen wird mit τ_{ext} bezeichnet. Die Gleichung

$$\tau_{\text{stufe}}(x, z) = \frac{\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - z^2)}{(x^2 + z^2)^2} \quad (2.3)$$

bezeichnet das analytische Spannungsfeld einer Stufenversetzung. Für die Herleitung und analytischen Ausdrücke siehe z.B. Hirth und Lothe (1982).

Ein entscheidender Mechanismus, um die Plastizität auf der Mikroskala vorhersagen zu können, sind Versetzungsquellen. In der 3-dimensionalen diskreten Versetzungsdynamik erhält man den Frank-Read Mechanismus implizit durch die Darstellung von an beiden Enden gepinnten Versetzungslinien. Durch Versetzungsreaktionen können sich in einem Versetzungsnetzwerk während der Belastung neue Quellen unterschiedlicher Länge bilden, die besonders bei der Modellierung kleiner Bauteile ($\sim \mu\text{m}$) einen großen Einfluss auf die effektive Fließspannung haben können, da sich eine charakteristische effektive Quelllänge abhängig von den Bauteilabmessungen entwickelt (Senger et al., 2008). Für 2-dimensionale Theorien muss dieser Mechanismus durch ein explizites Modell ersetzt werden, das die Aktivierungsspannung (kritische Schubspannung nach dem Orowanschen Modell) und die Aktivierungszeit der Frank-Read Quelle vorhersagt (Van der Giessen und Needleman, 1995, Benzerga et al., 2004, Benzerga, 2008, Shishvan et al., 2008). Darüber hinaus besteht die Frage der dynamischen Entwicklung der charakteristischen Quelllänge, die in 2-dimensionalen Theorien über eine statistische Betrachtung modelliert werden kann (Benzerga et al., 2004). Eine konsistente Modellierung von Versetzungsquellen in einer Kontinuumstheorie wird in Abschnitt 3.2 untersucht.

Eine wichtige Größe, um Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik mit Kontinuumsstheorien zu vergleichen und Rückschlüsse auf deren Modellierung zu ermöglichen, ist die plastische Verzerrung

$$\gamma_j = |\mathbf{b}^{(j)}| \frac{A_j}{V} \quad (2.4)$$

bzw. der plastische Verzerrungstensor

$$\boldsymbol{\beta}_{\text{pl}} = \sum_{j=1}^{\alpha} \frac{A_j}{V} \mathbf{b}_j \otimes \mathbf{n}_j, \quad (2.5)$$

die sich aus der abgesicherten Fläche A_i innerhalb des Mittelungsvolumens V berechnen. Die Mittelungsgröße zur Berechnung der plastischen Verzerrung wird explizit eingeführt.

Eine vollständige 3-dimensionale Betrachtung der diskreten Versetzungsdynamik finden sich in Weygand et al. (2002), Weygand und Gumbsch (2005), Bulatov und Cai (2006), Kubin (2013) und Po et al. (2014).

2.2. Mittelung diskreter Versetzungsstrukturen

Das Mitteln diskreter Versetzungsstrukturen hat zum Ziel, aus einer diskreten Mikrostruktur von Versetzungen eine kontinuierliche Darstellung zu gewinnen. Das kann zum einen durch das Regularisieren einer einzelnen Mikrostruktur als auch durch Ensemblemittelwertbildung über eine Menge von statistisch äquivalenten Simulationen erreicht werden. Eine mögliche Interpretation der Versetzungsdichte ist die Unschärfe der Kenntnis über die exakte Position einer Versetzungslinie. Dabei bietet das Regularisieren die Möglichkeit, Kontinuumsimulationen nahe an der Skala der diskreten Versetzungsdynamik zu vergleichen und eine mechanismusbasierte Homogenisierung der Wechselwirkungen von Versetzungen durchzuführen.

Beim Mitteln von Versetzungsstrukturen ergibt sich implizit die Definition von *geometrisch notwendigen* und *statistisch gespeicherten Versetzungen* abhängig von der Auflösung des Systems. Geometrisch notwendige Versetzungen sind Versetzungen, die zur Beschreibung der Verzerrung des perfekten Kristallgitters notwendig sind (Gao und Huang, 2003). Statistisch gespeicherte Versetzungen sind entgegengesetzt orientierte Versetzungen, die sich beim Mitteln effektiv auslöschen. Bei einer Auflösung in der Größenordnung des minimalen Versetzungsabstands sind ausschließlich geometrisch notwendige Versetzungen vorhanden, während sich der Anteil der statistisch verteilten Versetzungen mit abnehmender Auflösung immer weiter erhöht. Da die klassische *Kontinuumsstheorie von Versetzungen* auf der Beschreibung von geometrisch notwendigen Versetzungen beruht (Kondo, 1952, Nye, 1953, Bilby et al., 1955, Kröner, 1958), ist sie für die Beschreibung der Evolution von allgemeinen Versetzungsstrukturen bei beliebiger Auflösung ungeeignet.

Um eine vollständige Darstellung einer gemittelten Mikrostruktur zu erhalten, muss bei der Mittelung die Orientierung der Versetzungen berücksichtigt werden (El-Azab, 2000, Hochrainer et al., 2007). Dazu wird formal ein höherdimensionaler Raum eingeführt, der die Versetzungen anhand ihrer Orientierung unterscheidet. In 2 Dimensionen lässt sich die höherdimensionale Mittelung ganz einfach über die Einteilung in positive und negative Versetzungsdichte gewinnen (Groma, 1997, Groma et al., 2003). In 3 Dimensionen wird dazu der *höherdimensionale Versetzungsdichtetensor* $\alpha^{\mathbb{I}}$ eingeführt (Hochrainer et al., 2007, Hochrainer, 2015). Ein Versetzungsring in \mathbb{R}^2 (im natürlichen Versetzungsraum) wird im höherdimensionalen Versetzungsraum $\mathbb{Q} = \mathbb{R}^2 \times [0, 2\pi)$ abgebildet (siehe Abb. 2.2), wobei die zusätzliche Dimension den Winkel φ zwischen dem Burgersvektor \mathbf{b} und der Linienrichtung \mathbf{l} beschreibt.

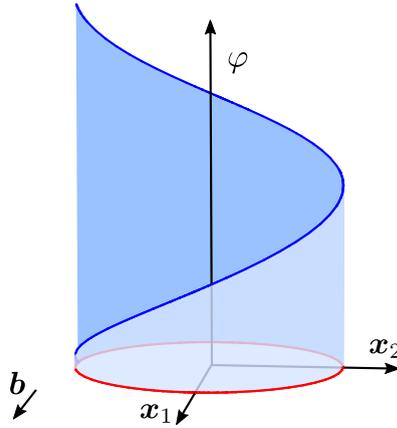


Abbildung 2.2: Der diskrete Versetzungsring im natürlichen Versetzungsraum \mathbb{R}^2 (rot) und im höherdimensionalen Versetzungsraum \mathbb{Q} (blau).

Im Vergleich zur klassischen Kontinuumstheorie erhält die Mittelung im höherdimensionalen Raum \mathbb{Q} die vollständige Information über die Versetzungsstruktur. Die Definition von geometrisch notwendigen und statistisch gespeicherten Versetzungen ist obsolet. Um den höherdimensionalen Versetzungsdichtetensor ausdrücken zu können, wird die skalare Gesamtversetzungsdichte $\rho^{\mathbb{I}}$ eingeführt. Die höherdimensionale Linienrichtung

$$\mathbf{l}^{\mathbb{I}} = (\mathbf{l}, k^{\mathbb{I}}) \quad (2.6)$$

setzt sich zusammen aus der Linienrichtung \mathbf{l} und der Krümmung der Versetzungslinie $k^{\mathbb{I}} = \partial_s \varphi$. Daraus wird die Krümmungsdichte $q^{\mathbb{I}} = k^{\mathbb{I}} \rho^{\mathbb{I}}$ definiert. Der höherdimensionale Versetzungsdichtetensor

$$\alpha^{\mathbb{I}} = \rho^{\mathbb{I}} \mathbf{l}^{\mathbb{I}} \otimes \mathbf{b} \quad (2.7)$$

lässt sich analog zum klassischen Versetzungsdichtetensor über die Versetzungsdichte $\rho^{\mathbb{I}}$, die Linienrichtung $\mathbf{l}^{\mathbb{I}}$ und den Burgersvektor \mathbf{b} darstellen.

Das gleiche Prinzip lässt sich auch auf ein Versetzungsnetzwerk anwenden, wobei das Mittelungsvolumen dann eine Gleitlamelle, also eine Gleitebene "endlicher Höhe", repräsentiert und diskrete Gleitebenen nicht individuell unterschieden werden.

Der höherdimensionale Versetzungsdichtetensor bildet die Grundlage für eine kinematisch abgeschlossene Kontinuumstheorie für Versetzungen (Hochrainer et al., 2014). Mittels der Multipolentwicklung der höherdimensionalen Versetzungs- und Krümmungsdichte lässt sich eine Folge von Alignmenttensoren

$$\rho^{\mathbb{I}} \rightarrow \boldsymbol{\rho}^{(0)}, \boldsymbol{\rho}^{(1)}, \boldsymbol{\rho}^{(2)}, \dots \quad (2.8)$$

$$\mathbf{q}^{\mathbb{I}} \rightarrow \mathbf{q}^{(0)}, \mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{q}^{(2)}, \dots \quad (2.9)$$

definieren, die die höherdimensionalen Größen im natürlichen Versetzungsraum approximieren (Hochrainer, 2015). Dabei beschreibt $\rho := \boldsymbol{\rho}^{(0)}$ die Gesamtversetzungsdichte und $\boldsymbol{\rho} := \boldsymbol{\rho}^{(1)}$ den Tensor der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte. In der klassischen Theorie werden die geometrisch notwendigen Versetzungen mit $\boldsymbol{\kappa}$ bezeichnet. Analog dazu wird die Krümmungsdichte $q := \mathbf{q}^{(0)}$ definiert.

2.2.1. Regularisierung

Die Regularisierung einer diskreten Versetzungsdichte basiert auf der Idee, dass in einer Kontinuumstheorie die exakte Position der diskreten Versetzung nicht bekannt ist. Stattdessen ist entweder eine Wahrscheinlichkeit mit der die Versetzung in einem bestimmten Volumen zu finden ist oder die Anzahl an Versetzungen innerhalb einer gegebenen Fläche bzw. die Linienlänge der Versetzungen innerhalb eines gegebenen Volumens dargestellt.

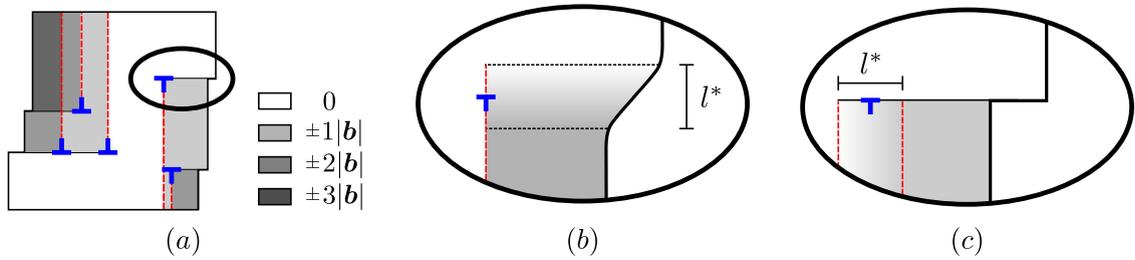


Abbildung 2.3: (a) Betrag des plastischen Verschiebungsfeldes u_{pl} aufgrund des Abscherens durch diskrete Versetzungen. (b) und (c) beschreiben die Regularisierung von u_{pl} senkrecht zur Gleitrichtung bzw. in Gleitrichtung.

Dies entspricht einer Regularisierung des plastischen Verschiebungsfeldes, das von der Bewegung einer diskreten Versetzung verursacht wird. Abbildung 2.3 (a) zeigt den Betrag des plastischen Verschiebungsfeldes u_{pl} in Gleitrichtung und mit der Festlegung einer Regularisierungsgröße l^* können die charakteristischen Sprünge in u_{pl} entlang der Gleitebenen und entlang der eingefügten Halbebenen regularisiert werden (siehe Abb. 2.3 (b) und (c)). Die Regularisierung senkrecht zur Gleitebene entspricht dem Einführen einer plastischen Verzerrung

$$\gamma(u_{\text{pl}}) = \nabla u_{\text{pl}} \cdot \mathbf{n}. \quad (2.10)$$

Dabei wird ein Zusammenhang zwischen der abgescherten Fläche und dem Betrag des Abscherens mit einem gegebenen Mittelungsvolumen hergestellt (vgl. Gl. (2.4)).

Die Regularisierung in Gleitrichtung entspricht dem Einführen einer Liniendichte in 2 Dimensionen bzw. einer Flächendichte in 3 Dimensionen und somit ergibt sich die Versetzungsdichte als

$$\boldsymbol{\kappa} = -\frac{1}{|\mathbf{b}|} \mathbf{n} \times \nabla \gamma(u_{\text{pl}}). \quad (2.11)$$

(siehe Abschnitt 2.3). Für die Versetzungsdichtetheorie in 3 Dimensionen muss die Regularisierung entweder auf den höherdimensionalen Versetzungsraum oder auf die Alignmenttensorenentwicklung der Versetzung- und der Krümmungsdichte übertragen werden (Sandfeld und Po, 2015). In 2 Dimensionen entspricht dies dem Mitteln über die Menge der positiven Versetzungen und die Menge der negativen Versetzungen.

2.2.2. Ensemblemittelwertbildung

Aus Sicht der statistischen Mechanik bleibt aufgrund der nicht ergodischen Eigenschaften¹ der Versetzungsdynamik nur die Mittelwertbildung mittels Ensemblemittelwerten (Zaiser, 2015). Folgender Abschnitt setzt sich aus den Arbeiten von Groma (1997), Zaiser et al. (2001), Groma et al. (2003), Hochrainer (2006) und Zaiser (2015) zusammen. Hochrainer (2006) gibt einen detaillierten Überblick über Ensemblemittelwerte im Kontext der höherdimensionalen Versetzungsdichtetheorie und El-Azab (2000) über die Grundlagen von Korrelationen in 3 Dimensionen.

Ensemblemittelwertbildung beschreibt das Mitteln über eine Menge statistisch äquivalenter Realisierungen, die im Allgemeinen für die Anzahl der Realisierungen m für $m \rightarrow \infty$ konvergiert. Damit lässt sich aus einer diskreten Simulationen mit n Versetzungen

$$\{s_{(i)}, \mathbf{x}_{(i)}\}_{i=1, \dots, n} \quad (2.12)$$

z.B. die 1-Partikeldichtefunktion

$$\rho_1^{\text{d}}(s, \mathbf{x}) = \left\langle \sum_{i=1}^n \delta_{ss_{(i)}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{(i)}) \right\rangle \quad (2.13)$$

oder die 2-Partikeldichtefunktion der Versetzungen mit Vorzeichen $s, s' \in \{+, -\}$ als

$$\rho_2^{\text{d}}(s, s', \mathbf{x}, \mathbf{x}') := \left\langle \sum_{i=1}^n \sum_{k \neq i}^n \delta_{ss_{(i)}} \delta_{s's_{(k)}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{(i)}) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_{(k)}) \right\rangle \quad (2.14)$$

definieren. $\langle \cdot \rangle$ bezeichnet die Integration über ein gegebenes Mittelungsvolumen um den Punkt \mathbf{x} , wobei formal ein Grenzwertprozess in der Umgebung jeder δ -Distribution durchgeführt werden muss (Hochrainer, 2006). Für die Ensemblemittelwertbildung werden die

¹ Ein dynamisches System wird als ein ergodisches System bezeichnet, wenn der zeitliche Mittelwert mit dem Mittelwert über eine Menge von Systemen übereinstimmt.

k -Partikeldichtefunktionen ρ_k^d von m statistisch äquivalenten Simulationen gebildet und der Ensemblemittelwert als

$$\rho_k(s_1, \dots, s_k, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \rho_k^d(s_1, \dots, s_k, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k) \quad (2.15)$$

definiert. Die vollständige Charakterisierung einer Realisierung ist durch die n -Partikeldichtefunktion ρ_n und die zugehörige Evolutionsgleichung gegeben (Groma, 1997).

$$\frac{1}{n!} \rho_n(s_1, \dots, s_n, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_n \quad (2.16)$$

beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass für $i = 1, \dots, n$ eine Versetzung von Typ s_i in einer Umgebung $d\mathbf{x}_i$ von \mathbf{x}_i gefunden wird. Für eine weniger genaue Darstellung lässt sich die k -Partikeldichtefunktion und deren Evolutionsgleichung für $k < n$ durch die rekursive Beziehung

$$\rho_k(s_1, \dots, s_k, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k) = \frac{1}{n-k} \sum_{s_{k+1}} \int \rho_{k+1}(s_1, \dots, s_{k+1}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k+1}) d\mathbf{x}_{k+1} \quad (2.17)$$

aus der n -Partikeldichtefunktion und deren Evolutionsgleichung bestimmen. Die Vereinfachung liefert eine Hierarchie von Evolutionsgleichungen, die jeweils von der Partikeldichtefunktion der nächst höheren Ordnung abhängt. Die Evolutionsgleichung der 1-Partikeldichtefunktion ergibt sich zu

$$\partial_t \rho_1(s, \mathbf{x}, t) = - \sum_{s'} s s' \int \partial_{\mathbf{x}} (\rho_2(s, s', \mathbf{x}, \mathbf{x}', t) F(\mathbf{x} - \mathbf{x}')) d\mathbf{x}'. \quad (2.18)$$

Hier ist $F = b\tau_{\text{ind}}$ die Peach-Köhler-Kraft (vgl. Gleichung (2.1)). Mit einer sinnvollen Annahme für die 2-Partikeldichtefunktion lassen sich ausreichend genaue Informationen über das Versetzungssystem und alle Skalierungseigenschaften des Versetzungssystems abbilden (Zaiser et al., 2001). Da eine räumliche Mittelung alleine nicht ausreicht und diese zudem weitere Skalierungseigenschaften aufweist (Ansatz $\rho_2(s, s', \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \rho_1(s, \mathbf{x})\rho_1(s', \mathbf{x}')$), werden die Paarkorrelationsfunktionen $d_{ss'}$ mit dem Ansatz

$$\rho_2(s, s', \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \rho_1(s, \mathbf{x})\rho_1(s', \mathbf{x}') (1 + d_{ss'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \quad (2.19)$$

berücksichtigt (Groma, 1997, Zaiser et al., 2001). Es wird die Gewichtsfunktion

$$w_{ss'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 1 + d_{ss'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \quad (2.20)$$

definiert, wobei $\rho_1(s', \mathbf{x}') w_{ss'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') / n d\mathbf{x}'$ die bedingte Wahrscheinlichkeit beschreibt, dass eine Versetzung von Typ s' in einer Umgebung von \mathbf{x}' unter der Bedingung gefunden wird, dass eine Versetzung mit Vorzeichen s und Position \mathbf{x} gegeben ist.

Mit den hier gegebenen Definitionen lässt sich aus einer Menge von Realisierungen mittels der Ensemblemittelwertbildung (vgl. Gleichung (2.15)) die Korrelationsfunktionen $d_{ss'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ (vgl. Gleichung (2.19)) durch das Screenen von Versetzungen gewinnen (Zaiser et al., 2001). Diese Charakterisierung ist äquivalent zum Debye Screenen einer externen Ladung (Zaiser et al., 2001) und die resultierenden Korrelationsfunktionen werden im Folgenden als gescreente Korrelationsfunktionen bezeichnet.

2.3. Versetzungsdichtetheorie

Eine ausführliche Herleitung der höherdimensionalen Versetzungsdichtetheorie und der Möglichkeiten zur Reduzierung der Theorie mittels Multipolentwicklungen findet sich in (Hochrainer, 2015). Im Folgenden wird eine Übersicht der Theorie ausschließlich für den Fall von Versetzungsgleiten und unter der Annahme isotroper Versetzungsgeschwindigkeit gegeben. Diese Vereinfachung ist bei Betrachtung von isotropen, kubisch flächenzentrierten Materialien sinnvoll. Die Versetzungsgeschwindigkeit

$$\mathbf{v} = v \mathbf{l} \times \mathbf{n} \quad (2.21)$$

ist immer senkrecht zur Linienrichtung \mathbf{l} und wird mit der skalaren Versetzungsgeschwindigkeit v charakterisiert.

Die *klassische Versetzungsdichtetheorie* (Kröner, 1958) ist auf die Darstellung von geometrisch notwendigen Versetzungen $\boldsymbol{\kappa}$, also für bestimmte Spezialfälle oder eine hohe Auflösung (es muss $\rho = |\boldsymbol{\kappa}|$ gelten), beschränkt.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha} &= \boldsymbol{\kappa} \otimes \mathbf{b} && \text{Versetzungsdichtetensor} \\ \partial_t \boldsymbol{\alpha} &= -\nabla \times (\mathbf{v} \times \boldsymbol{\alpha}) && \text{Evolutionsgleichung} \\ \nabla \cdot \boldsymbol{\alpha} &= 0 && \text{Kompatibilitätsbedingung} \end{aligned}$$

Der Versetzungsdichtetensor

$$\boldsymbol{\alpha} = \nabla \times \boldsymbol{\beta}_{\text{pl}} \quad (2.22)$$

ist als Maß für die plastische Inkompatibilität aufgrund der plastischen Verzerrung γ bzw. des plastischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\beta}_{\text{pl}}$ definiert (siehe Abschnitt 2.1).

Die Evolutionsgleichung des Versetzungsdichtetensors beruht auf dem Orowanschen Gesetz

$$\partial_t \gamma = |\mathbf{b}| v \rho, \quad (2.23)$$

das den Zusammenhang zwischen dem Versetzungsfluss $v\rho$ und der plastischen Verzerrung γ beschreibt. An dieser Stelle begründet sich auch die Einschränkung der klassischen Versetzungsdichtetheorie. Der Versetzungsdichtetensor $\boldsymbol{\alpha}$ bildet die Inkompatibilität zu einem gegebenen Zeitpunkt und zu einer gegebenen Auflösung korrekt ab, aber die Theorie versagt bei der Vorhersage der plastischen Verformungsrate falls $\rho \neq |\boldsymbol{\kappa}|$. Allerdings ergibt sich (unter der Annahme von Versetzungsbewegung ausschließlich in der Gleitebene) ein fundamentaler Zusammenhang zwischen der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte $\boldsymbol{\kappa}$ und der plastischen Verformung γ

$$\boldsymbol{\kappa} = -\frac{1}{|\mathbf{b}|} \mathbf{n} \times \nabla \gamma. \quad (2.24)$$

Damit können Gradienten der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte $\boldsymbol{\kappa}$ als Gradienten 2. Ordnung der plastischen Dehnung identifiziert werden.

Durch das Einführen eines höherdimensionalen Versetzungsraums (siehe Abschnitt 2.2), ermöglicht die *höherdimensionale Versetzungsdichtetheorie* den Erhalt aller mikrostrukturellen Informationen und somit auch ohne Einschränkung die Vorhersage der plastischen Deformationsrate. Analog zum natürlichen Versetzungsraums wird die isotrope Versetzungsgeschwindigkeit

$$\mathbf{v}^{\mathbb{I}} = (\mathbf{v}, -\partial_s v) \quad (2.25)$$

aus der Linienrichtung und der skalaren Geschwindigkeit bestimmt.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}^{\mathbb{I}} &= \rho^{\mathbb{I}} \mathbf{l}^{\mathbb{I}} \otimes \mathbf{b} && \text{höherdimensionale Versetzungsdichtetensor} \\ \hat{\nabla} \cdot \boldsymbol{\alpha}^{\mathbb{I}} &= 0 && \text{Kompatibilitätsbedingung} \\ \partial_t \rho^{\mathbb{I}} &= -\hat{\nabla} \cdot (\rho^{\mathbb{I}} \mathbf{v}^{\mathbb{I}}) + q^{\mathbb{I}} v^{\mathbb{I}} && \text{Evolutionsgleichung der Versetzungsdichte} \\ \partial_t q^{\mathbb{I}} &= -\hat{\nabla} \cdot (q^{\mathbb{I}} \mathbf{v}^{\mathbb{I}}) - \rho^{\mathbb{I}} \hat{\nabla}_{\mathbf{t}^{\mathbb{I}}} \hat{\nabla}_{\mathbf{t}^{\mathbb{I}}} v^{\mathbb{I}} && \text{Evolutionsgleichung der Krümmungsdichte} \end{aligned}$$

Durch die Projektion auf den natürlichen Versetzungsraum kann die höherdimensionale Theorie reduziert werden und man erhält eine unendliche Hierarchie von Evolutionsgleichung der Alignmenttensoren. Mit einer sinnvollen Annahme soll dieses System für eine möglichst niedrige Ordnung geschlossen werden (Hochrainer et al., 2014, Monavari et al., 2014, Hochrainer, 2015, Monavari et al., 2016). Der Abschluss 1. Ordnung liefert eine Theorie, die Informationen über die Orientierung von statistisch gespeicherter Versetzungen nicht abbilden kann. Das bedeutet, dass statistisch gespeicherte Versetzungen als homogen orientiert approximiert werden. Die Theorie 2. Ordnung ermöglicht es, diese Information zu erhalten. Die Gesamtversetzungsdichte wird durch die Gesamtversetzungsdichte der Stufen- und Schraubenanteile ersetzt (Monavari et al., 2016). Der Nachteil ist ein größerer numerischer Aufwand hinsichtlich der Anzahl der Freiheitsgrade, der Implementierung der Evolutionsgleichungen und der zu berücksichtigenden Randbedingungen.

Ein möglichst trivialer Ansatz für den Abschluss 1. Ordnung (Theorie mit Unbekannten $\rho, \boldsymbol{\rho}, q$) ist die lineare Interpolation zwischen den Grenzfällen einer vollständigen statistisch gespeicherten Versetzungsdichte

$$\boldsymbol{\rho}_{\text{SSD}}^{(2)} = \frac{\rho}{2} \mathbb{I}^{(2)} \quad (2.26)$$

und einer reinen geometrisch notwendigen Versetzungsdichte

$$\boldsymbol{\rho}_{\text{GND}}^{(2)} = \frac{1}{|\boldsymbol{\rho}|} \boldsymbol{\rho} \otimes \boldsymbol{\rho}. \quad (2.27)$$

Für die Krümmungsdichte wird angenommen, dass alle Versetzungen in einem Mittelungsvolumen die gleiche Krümmung besitzen. Der Krümmungsdichtetensor wird durch

$$\mathbf{q} = -\frac{q}{\rho} \boldsymbol{\rho}^{\perp} \quad (2.28)$$

approximiert wobei $\boldsymbol{\rho}^\perp = (\boldsymbol{\rho}_2, -\boldsymbol{\rho}_1)$ den zu $\boldsymbol{\rho}$ senkrechten Anteil beschreibt. Daraus ergibt sich das Gleichungssystem der *reduzierten Versetzungsdichtetheorie 1. Ordnung*:

$$\partial_t \boldsymbol{\rho} = -\nabla \cdot (v \boldsymbol{\rho}^\perp) + v q \quad (2.29)$$

$$\partial_t \boldsymbol{\rho} = \nabla \times (\rho v \mathbf{n}) \quad (2.30)$$

$$\partial_t q = -\nabla \cdot (-v \mathbf{q} + \boldsymbol{\rho}^{(2)} \cdot \nabla v) \quad (2.31)$$

mit

$$\boldsymbol{\rho}^{(2)} = \frac{1}{2|\boldsymbol{\rho}|^2} ((\rho + |\boldsymbol{\rho}|) \boldsymbol{\rho} \otimes \boldsymbol{\rho} + (\rho - |\boldsymbol{\rho}|) \boldsymbol{\rho}^\perp \otimes \boldsymbol{\rho}^\perp). \quad (2.32)$$

Eine weitere Variante des Abschlusses 1. Ordnung ist die Verwendung des Prinzips der maximalen (Informations-) Entropie (Monavari et al., 2014), das auch für einen Abschluss höherer Ordnung angewendet werden kann (Monavari et al., 2016).

Die reduzierte Versetzungsdichtetheorie liefert eine kinematisch abgeschlossene Theorie, d.h. dass zu einer gegebenen Versetzungsgeschwindigkeit v die Evolution der Versetzungsstruktur als zusammenhängende und gekrümmte Linien korrekt vorhergesagt werden kann (Monavari et al., 2014, Hochrainer et al., 2014). Da in dieser Arbeit ausschließlich vereinfachte 2-dimensionale Betrachtungen gemacht werden, wird im Folgenden auf die Herleitung einer 2-dimensionalen Versetzungsdichtetheorie eingegangen.

2.4. Versetzungsmobilität

Zusätzlich zum *kinematischen Abschluss* der Versetzungsdichtetheorie (d h. zu gegebener Versetzungsgeschwindigkeit v lässt sich die Evolution der Versetzungsdichte als zusammenhängende und gekrümmte Linien korrekt vorhersagen) wird der *dynamische Abschluss* der Theorie benötigt. Der dynamische Abschluss erfordert, dass aus einer gegebenen Mikrostruktur $\{\gamma_i, \rho_i, \boldsymbol{\rho}_i, q_i\}_{i=1,\dots,s}$ zum Zeitpunkt t eine Versetzungsgeschwindigkeit v bestimmt werden kann, welche die physikalischen Grundlagen der Versetzungswechselwirkungen, -reaktionen und -bewegung in der gemittelten Theorie abbildet. Dies erfordert eine genaue Kenntnis der Mechanismen und eine konsistente Homogenisierung, um die notwendigen Informationen für die gemittelte Theorie bereit zu stellen. Diese Fragestellung ist zentraler Bestandteil dieser Arbeit und wird anhand 2-dimensionaler Probleme untersucht.

Wie in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt werden zur Herleitung von physikalisch motivierten Kontinuumstheorien Informationen, wie die der Versetzungskorrelationen, von niedrigen Skalen auf die Skala der Kontinuumstheorie übertragen. Darauf basierend kann die Darstellung der elastischen Energie diskreter Versetzungssysteme mittels der höherdimensionalen Theorie für eine kontinuierliche Darstellung erweitert werden (Zaiser, 2015).

Hier besteht die Frage, ob bzw. unter welchen Voraussetzungen daraus eine allgemeingültige Theorie abgeleitet werden kann. Diese Fragestellung wird für die 2-dimensionale Darstellung (Groma, 1997, Groma et al., 2003, Ispánovity et al., 2008) in Kapitel 4 untersucht.

Das Konstitutivgesetz der Versetzungsgeschwindigkeit für kubisch flächenzentrierte, isotrope Materialien lautet

$$v(\mathbf{x}) = |\mathbf{b}|B^{-1} \tau_{\text{res}}(\mathbf{x}) \quad (2.33)$$

wobei $\tau_{\text{res}} = \tau_{\text{ext}} + \tau_{\text{int}}$ die resultierende Schubspannung ist, die aus einem internen Anteil τ_{int} und einem äußeren Anteil τ_{ext} besteht (vgl. Gleichung (2.2)).

Für die Darstellung der 2-dimensionalen Mikrostruktur bezeichnet ρ die Gesamtversetzungsdichte und κ die geometrisch notwendige Stufenversetzungsdichte (anstatt des geometrisch notwendigen Versetzungstenor ρ). Nach der Mittelung der diskreten Versetzungsstruktur lässt sich die innere Spannung

$$\tau_{\text{int}}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \kappa(\mathbf{x}') \tau_{\text{stufe}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (2.34)$$

aufgrund einer Stufenversetzungsdichte κ durch die Konvolution mit dem analytischen Spannungsfeld τ_{stufe} beschreiben. Diese Darstellung ist exakt, solange die Auflösung der Versetzungsdichte kleiner als der minimale Versetzungsabstand ist, d.h. ausschließlich geometrisch notwendige Versetzungen vorhanden sind.

Versetzungsmobilität mittels Ensemblemittelwertbildung

Groma (1997), Groma et al. (2003) und Ispánovity et al. (2008) nutzen die Ensemblemittelwertbildung um eine 2-dimensionale Versetzungsdichtetheorie für die Gesamtversetzungsdichte ρ und die Dichte der geometrisch notwendigen Stufenversetzungen κ herzuleiten. Mit der Evolutionsgleichung (2.18) und dem Ansatz (2.19) ergibt sich das Gleichungssystem

$$\partial_t \rho = -|\mathbf{b}|B^{-1} \partial_1 (\kappa (\tau_{\text{sc}} + \tau_{\text{ext}} - \tau_{\text{f}} + \tau_{\text{b}})) \quad (2.35)$$

$$\partial_t \kappa = -|\mathbf{b}|B^{-1} \partial_1 (\rho (\tau_{\text{sc}} + \tau_{\text{ext}} - \tau_{\text{f}} + \tau_{\text{b}})) \quad (2.36)$$

für die Beschreibung einer Stufenversetzungsdichte (Groma et al., 2003). τ_{ext} ist die Spannung der aufgetragenen Belastung, τ_{sc} beschreibt den Anteil der langreichweitigen internen Spannungen mittels der Konvolution in Gleichung (2.34) abhängig von der Auflösung der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte. Die Fließspannung

$$\tau_{\text{f}}(\mathbf{x}) = \frac{C\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \sqrt{\rho(\mathbf{x})} \quad \text{mit} \quad C = \int \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} d_a(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.37)$$

und die Rückspannung

$$\tau_{\text{b}}(\mathbf{x}) = -\frac{D\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \frac{\partial_1 \kappa(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} \quad \text{mit} \quad D = \int \frac{x^2(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} d(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.38)$$

sind abhängig von den Korrelationsfunktionen $d = 1/4(d_{++} + d_{--} + d_{+-} + d_{-+})$ und $d_a = 1/2(d_{+-} + d_{-+})$.

Ein äquivalentes Gleichungssystem lässt sich aus der reduzierten Versetzungsdichtetheorie 1. Ordnung über die Annahme eines ebenen Dehnungszustands und gerader Stufenversetzungen gewinnen

$$\partial_t \rho = -\partial_1 (\kappa v) \quad (2.39)$$

$$\partial_t \kappa = -\partial_1 (\rho v). \quad (2.40)$$

Dieses Gleichungssystem ist unter der Annahme, dass die Versetzungsgeschwindigkeit v zu einer gegebenen Mikrostruktur bekannt ist, kinematisch abgeschlossen. Für eine effiziente numerische Berechnung der internen Spannungen wird eine Eigendehnungsformulierung zur Approximation der Konvolution (2.34) genutzt.

Eigendehnungsformulierung

Das Integral (2.34) kann durch eine Eigendehnungsformulierung der plastischen Verzerrung approximiert werden (Mura, 1987, Lemarchand et al., 2001, Sandfeld et al., 2013). Die Analogie der Eigendehnungsformulierung zu Gleichung (2.34) ergibt sich aus Gleichung (2.24). Mit der Eigendehnungsformulierung lässt sich die Wechselwirkung von diskreten Versetzungen vollständig abbilden, so lange die Auflösung kleiner als der minimale Versetzungsabstand ist.

Für die linear-elastische Theorie kleiner Dehnung wird der symmetrische Verzerrungstensors in einen elastischen und einen plastischen Anteil

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{el}} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}} \quad (2.41)$$

zerlegt. Der Projektionsoperator

$$\mathbb{M}^{(j)} = \frac{1}{2|\mathbf{b}^{(j)}|} \left(\mathbf{n}^{(j)} \otimes \mathbf{b}^{(j)} + \mathbf{b}^{(j)} \otimes \mathbf{n}^{(j)} \right) \quad (2.42)$$

beschreibt sowohl die Projektion der plastischen Verzerrung eines Gleitsystems in das globale Koordinatensystem

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\gamma = \sum_{j=1}^{\alpha} \gamma^{(j)} \mathbb{M}^{(j)}, \quad (2.43)$$

als auch die Projektion der Schubspannung auf das Gleitsystem

$$\boldsymbol{\tau}^{(j)} = \mathbb{M}^{(j)} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.44)$$

Für die Eigendehnungsformulierung wird der Anteil der plastischen Verzerrung ebenfalls als rein elastisch angenommen und somit ergibt sich das Konstitutivgesetz

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}[\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}}] + \boldsymbol{\sigma}_\gamma \quad (2.45)$$

mit dem Anteil der Eigenspannung

$$\boldsymbol{\sigma}_\gamma = \mathbb{C}[\boldsymbol{\varepsilon}_\gamma] \quad (2.46)$$

und der Kompatibilitätsbedingung

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_\gamma. \quad (2.47)$$

\mathbb{C} ist der isotrope Steifigkeitstensor 4. Ordnung. Die Lösung des Spannungsfeldes der Eigendehnungsformulierung

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{es}} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\sigma}_\gamma. \quad (2.48)$$

ergibt sich aus der Lösung des Verschiebungsfeld \mathbf{u} und der induzierten Eigendehnung $\boldsymbol{\sigma}_\gamma$. Wenn die Randbedingungen der zugrundeliegenden Belastung des diskreten Versetzungsproblems aufgebracht werden, können die externen Spannungen und die Eigendehnungsformulierung

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{es}} = \boldsymbol{\sigma}_{\text{ext}} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{int}} \quad (2.49)$$

in einem Gleichungssystem gelöst werden. In Kapitel 3.1 wird eine schrittweise Homogenisierung dieses Ansatzes eingeführt².

² Die Eigendehnungsformulierung ist unter Verwendung der Finiten Elemente Methode der deal.II Bibliotheken implementiert (Bangerth et al., 2007). Für die Eigendehnungsformulierung der Biegebalken mit geneigten Gleitsystemen werden die deal.II Bibliotheken um die Diskretisierung mit dreieckigen Elementen erweitert (siehe Kapitel 5.1.4).

3. Mechanismusbasierte Homogenisierung

Zur Entwicklung von physikalisch motivierten Kontinuumstheorien wird ein Skalenübergang wie in Abbildung 2.1 dargestellt verwendet. Das Ziel ist es, eine Reduktion der Anzahl der Freiheitsgrade zu erreichen und gleichzeitig den Verlust der Informationen von kleinen Skalen zu minimieren. Dabei können sowohl Informationen in Form von Parametern transformiert werden als auch gezielt physikalische Mechanismen homogenisiert werden. Die Bezeichnung *mechanismusbasierte Homogenisierung* definiert im Folgenden die Untersuchung eines Mechanismus basierend auf einer schrittweisen Homogenisierung des Systems.

Ein Beispiel für die Modellierung von Versetzungstheorien mittels einer Informationstransformation in Form von Parametern ist die Verfestigung nach Taylor abhängig von $\sqrt{\rho}$ (Taylor, 1934). Mit diesem Ansatz¹ lassen sich unterschiedliche Versetzungsreaktionen homogenisieren und in Form von Parametern für eine Kontinuumstheorie bereitstellen (Franciosi et al., 1980, Gómez-García et al., 1999, Madec et al., 2003, Devincere et al., 2006). Ein Nachteil dieses Ansatzes ist die Vorhersage der Versetzungsbewegung mittels einer mittleren Versetzungsgeschwindigkeit für alle Versetzungen. Intuitiv lässt sich vermuten, dass dieser Ansatz sinnvoll für große Skalen ist, bei denen die interne Längenskala unterhalb der Auflösung des Systems zu finden ist. Für Systeme, bei denen die Auflösung unterhalb der internen Längenskala liegt, kann es entscheidend sein, statistisch gespeicherte Versetzungen von Dipolen in einer Kontinuumstheorie zu unterscheiden (z.B. mittels der freien Weglänge von Versetzungen (Reuber et al., 2014, Dickel et al., 2014)).

Im Folgende konzentrieren wir uns auf die Darstellung der internen Spannungen und des Frank-Read-Mechanismus für eine Kontinuumstheorie. Das Ziel ist es, diese Mechanismen

¹ Die Rechtfertigung dieses makroskopischen Ansatzes liegt in der Tatsache, dass das Ähnlichkeitsgesetz ("law of similitude") über viele Größenordnungen und unterschiedliche Materialien und Belastungsarten beobachtet werden kann. (Kuhlmann-Wilsdorf, 1962, Raj und Pharr, 1986, Sauzay und Kubin, 2011)

mittels einer mechanismusbasierten Homogenisierung zu untersuchen, um Größeneffekte der Mikroplastizität modellieren zu können. In Kapitel 5 werden diese Formulierungen einzeln und anhand unterschiedlicher Szenarien validiert.

3.1. Wechselwirkung von Versetzungen innerhalb eines Gleitsystems

Die internen Spannungen sollen mittels einer Eigendehnungsformulierung aus der plastischen Verzerrung ε_γ , wie in Kapitel 2.4 eingeführt, berechnet werden. Die resultierende Spannung σ_{es} liefert eine exakte Lösung, falls

$$\tau_{\text{int}} = \tau_{\text{es}} + \tau_{\text{lokal}} \quad (3.1)$$

eingeführt, der sowohl numerischer als auch physikalischer Natur sein kann.

3.1.1. Schrittweise Homogenisierung der Darstellung von Versetzungen

Für die Modellierung der internen Spannung wird schrittweise der Grad der Homogenisierung, wie in Abbildung 3.1 dargestellt, erhöht. Im ersten Schritt wird die Homogenisierung in der Gleitebene betrachtet (I) und untersucht, wie die Eigendehnungsformulierung die interne Spannung einer solchen Konfiguration abbilden kann. Die Konfiguration mit repräsentativen diskreten Gleitebenen wird als quasi-kontinuierlich bezeichnet. Anschließend wird das System zusätzlich senkrecht zur Gleitebene homogenisiert (II) und darauf aufbauend ein physikalisches Modell für die internen Spannungen abgeleitet. Dies wird als kontinuierliches System bezeichnet. Der allgemeine Fall (III) wird in Kapitel 5.1.4 untersucht.

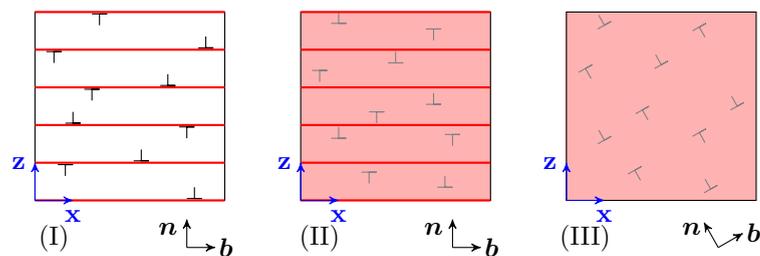


Abbildung 3.1: Die Untersuchung der internen Spannungen wird im Grad der Homogenisierung des Systems unterschieden: (I) Homogenisierung innerhalb der Gleitebenen (quasi-kontinuierlich) und (II) zusätzlich eine Homogenisierung senkrecht zur Gleitebene (kontinuierlich). (III) beschreibt eine beliebige kontinuierliche Darstellung wie sie in Kapitel 5.3 verwendet wird.

3.1.2. Wechselwirkung auf diskreten Gleitebenen (I)

Versetzungsbewegung auf einer diskreten Gleitebene resultiert im Abscheren in Gleitrichtung. Um das resultierende Spannungsfeld numerisch berechnen zu können, muss das singuläre Verschiebungsfeld u_{pl} regularisiert werden. Die notwendige Regularisierung wird in Abbildung 2.3 (b) schematisch dargestellt und entspricht dem Einführen einer Regularisierungslänge h_* , mit deren Hilfe eine effektive plastische Verzerrung

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\gamma^* = \frac{\llbracket u_{\text{pl}} \rrbracket}{2h_*} \mathbb{M} \quad (3.2)$$

aus dem Sprung des Verschiebungsfeldes $\llbracket u_{\text{pl}} \rrbracket$ berechnet wird. Mit $\boldsymbol{\varepsilon}_\gamma^*$ kann die Eigendehnungsformulierung (Gleichungen (2.45) bis (2.48)) gelöst werden.

Im Folgenden wird eine lokale Spannungskorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ (Nahfeldkorrektur) bestimmt, die den Fehler der Regularisierung abhängig von h_* beschreibt. Die eingeführte Regularisierung senkrecht zur Gleitebene entspricht der Approximation einer einzelnen Stufenversetzung mittels einem Disklinationsdipol (Definition der Deklination in Appendix A). Ein detaillierter Vergleich zwischen der Eigendehnungsformulierung und dem Disklinationsdipol sowie die Abhängigkeit der Regularisierungsgröße h_* ist in Appendix A gegeben.

Herleitung der lokalen Spannungskorrektur

Um den Fehler der Regularisierung zu berechnen, wird das analytische Spannungsfeld einer Stufenversetzung τ_{stufe} (Gleichung (2.3)) mit dem analytischen Spannungsfeld des Disklinationsdipols (dd)

$$\tau_{\text{dd}}(x, z) = \frac{\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)2h_*} \left(\frac{x(z+h_*)}{x^2+(z+h_*)^2} - \frac{x(z-h_*)}{x^2+(z-h_*)^2} \right) \quad (3.3)$$

mit einer Dipolhöhe von $2h_*$ verglichen. Entlang $z = 0$ vereinfacht sich das Spannungsfeld zu

$$\tau_{\text{dd}}(x) = \frac{\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \frac{x}{x^2+h_*^2}. \quad (3.4)$$

An dieser Stelle nutzen wir die Analogie der Eigendehnungsformulierung und der Konvolution der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte κ mit dem analytischen Spannungsfeld τ_{stufe} (Gleichung (2.34)). Wir definieren den Fehler zu einer gegebenen Versetzungsdichte κ als Konvolution mit dem Fehler in der Approximation des Spannungsfeldes τ_{stufe}

$$\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}(x) = \int_{\Omega_{\text{SP}}} \kappa_2(x') (\tau_{\text{stufe}}(x-x') - \tau_{\text{dd}}(x-x')) dx' \quad (3.5)$$

entlang einer gegebenen Gleitebene Ω_{SP} . Vereinfacht ergibt sich

$$\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}(x) = + \frac{\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \int_{\Omega_{\text{SP}}} \kappa(x') \left(\frac{1}{x-x'} - \frac{x-x'}{(x-x')^2+h_*^2} \right) dx' \quad (3.6)$$

$$= - \frac{\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \int_{\Omega_{\text{SP}}} \kappa(x') \frac{h_*^2}{(x'-x)((x-x')^2+h_*^2)} dx'. \quad (3.7)$$

Die Versetzungsdichte κ wird lokal durch die Taylorreihenentwicklung

$$\kappa(x') \approx \kappa(x) + \partial_1 \kappa(x)(x' - x) + \frac{1}{2} \partial_1^2 \kappa(x)(x' - x)^2 + O(x' - x)^3 \quad (3.8)$$

für $|x' - x| < c$ approximiert ($\partial_1 \kappa = \nabla \kappa \cdot \mathbf{e}_1$). Die Konstante $c > 0$ ist im Verhältnis zur Länge L der Gleitebene klein und definiert eine Umgebung $B(c, x) := [x - c, x + c]$. Formal konvergiert der Kern vom Integral (3.5) nicht schnell genug gegen 0, um eine Rechtfertigung der Approximation von κ mittels der Taylorreihenentwicklung zu liefern. Daher wird die Konvolution auf die Umgebung $B(c, x)$ beschränkt in der Annahme, dass der Fehler durch die Approximation der Eigendehnungsformulierung mittels des Disklinationsdipols einen Fehler in der gleichen Größenordnung beschreibt. Mit der Taylorreihenentwicklung und der Einschränkung auf $B(c, x)$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}(x) = & -\frac{\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \left(\kappa(x) \int_{B(c,x)} \frac{h_*^2}{(x-x')((x-x')^2+h_*^2)} dx' \right. \\ & + \partial_x \kappa(x) \int_{B(c,x)} \frac{h_*^2}{((x-x')^2+h_*^2)} dx' \\ & \left. + \partial_x^2 \kappa(x) \int_{B(c,x)} \frac{h_*^2(x'-x)}{((x-x')^2+h_*^2)} dx' \right). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Der erste und der letzte Term der rechten Seite sind ungerade Integrale bzgl. x und verschwinden bei der Integration. Der mittlere Term liefert

$$\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}(x) = -\frac{\mu|\mathbf{b}|h_*}{\pi(1-\nu)} \partial_x \kappa(x) \arctan\left(\frac{c}{h_*}\right). \quad (3.10)$$

Um den Parameter c zu bestimmen wird ein Benchmarksystem gelöst. Der Fehler, der durch die Nahfeldkorrektur beschrieben wird, wird größer wenn c groß ist, da dann der Fehler durch die Approximation von κ mit der Taylorreihenentwicklung groß wird. Andererseits wird der Fehler auch größer wenn c klein gewählt wird, da nur ein kleiner Anteil der Versetzungsdichte für die Spannungsberechnung genutzt wird. Aus dieser Argumentation folgt, dass ein Optimum für c existiert, welches den Fehler minimiert. Anhand einer homogenisierten Stufenversetzung

$$\kappa(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}s} \exp\left(-\frac{x^2}{2s^2}\right), \quad (3.11)$$

(Gauss verteilt um $x_0 = 0$ mit Standardabweichung $s = 0.32 h_0$, wobei h_0 die charakteristische Größe des Benchmarksystem ist) wird mittels Quadratur die Referenzlösung

$$\tau_{\text{ref}}(x) = \int_{\Omega_{\text{SP}}} \kappa(x') \tau_{\text{stufe}}(x - x') dx' \quad (3.12)$$

für die interne Spannung berechnet. Der Parameter c wird so bestimmt, dass der Fehler zwischen τ_{ref} und $\tau_{\text{es}} + \tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ unabhängig von h_* minimiert wird.

Abbildung 3.2 zeigt die Spannungsfelder τ_{es} (links) und $\tau_{\text{es}} + \tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ (rechts) für $c = 2.416h_*$ (c ist mit einer Genauigkeit von 0.5% berechnet) im Vergleich zur Referenz τ_{ref} für verschiedene h_* . Wir wählen $h_* = h_k$ mit $h_k = 2^{-k}h_0$ bezogen auf die charakteristische Länge h_0 . Der linke Plot zeigt die Abhängigkeit der Eigendehnungsformulierung von der Regularisierungsgröße h_* und der rechte Plot zeigt, dass mit der Nahfeldkorrektur die Abhängigkeit von der Regularisierung näherungsweise verschwindet. Im Allgemeinen ist die Regularisierungsgröße entsprechend der Auflösung des Systems gewählt.

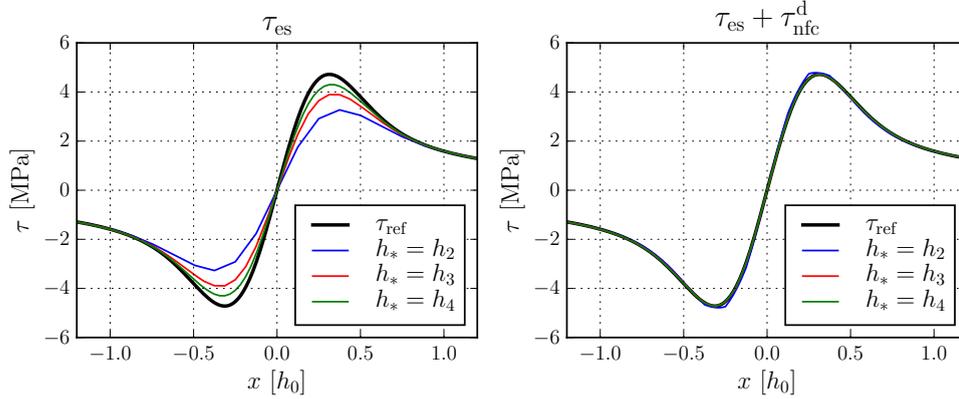


Abbildung 3.2: Die interne Spannung τ_{ref} aufgrund einer homogenisierten Stufenversetzung (Gleichung (3.11)) im Vergleich zu der resultierenden Spannung τ_{es} der Eigendehnungsformulierung (links) und im Vergleich zu dem korrigierten Spannungsfeld $\tau_{\text{es}} + \tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ (rechts) für unterschiedliche $h_* = h_k$ mit $h_k = 2^{-k}h_0$.

Die lokale Spannungskorrektur

Der Fehler aufgrund der Regularisierung der Problemstellung kann mit der Nahfeldkorrektur

$$\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}(x) = \int_{\Omega_{\text{SP}}} \kappa(x') (\tau_{\text{stufe}}(x - x') - \tau_{\text{dd},h_*}(x - x')) dx' \quad (3.13)$$

$$= -\frac{\tilde{c}\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} h_* \partial_1 \kappa(x) \quad (3.14)$$

mit $\tilde{c} = 2.356$ korrigiert werden. Damit lässt sich die resultierende Gleitspannung des quasi-kontinuierlichen Systems durch

$$\tau_{\text{res}} = \mathbb{M} : (\boldsymbol{\sigma}_{\text{ext}} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{es}}) + \tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}. \quad (3.15)$$

ausdrücken. In Kapitel 5.1 wird die eingeführte Formulierung anhand von Versetzungsaufstaus untersucht.

3.1.3. Wechselwirkung auf homogenisierten Gleitebenen (II)

Die Homogenisierung des quasi-kontinuierlichen Systems lässt sich mathematisch durch eine Interpolation der repräsentativen diskreten Gleitebenen beschreiben. Der Unterschied liegt darin, dass eine Flächendichte $[\text{m}^{-2}]$ definiert wird und das Orowan Gesetz implizit eine plastische Verzerrung definiert. Des Weiteren induziert die Richtung der Homogenisierung (senkrecht zur Gleitebene), dass diskrete Versetzungen als Versetzungswände approximiert werden. Da in dieser Approximation a priori keine Informationen über die Ausrichtung der Versetzungen innerhalb eines Volumenelementes bekannt sind, ist die Annahme von Versetzungswänden sinnvoll, da es eine energetisch günstige Konfiguration der Versetzungen beschreibt. Basierend auf dieser Annahme wird in diesem Kapitel eine Formulierung für die interne Spannung einer kontinuierlichen Mikrostruktur entwickelt.

Herleitung der lokalen Spannungskorrektur

Für die Entwicklung einer Formulierung zur Darstellung der internen Spannung einer kontinuierlichen Mikrostruktur werden Disklinationen genutzt. Der Disklinationsdipol beschreibt eine kontinuierliche Verteilung von Versetzungen (siehe Abbildung A.2) über eine gegebene Länge. Die Dipollänge h_* wird entsprechend dem Abstand zweier repräsentativen diskreten Gleitebenen des quasi-kontinuierlichen Systems gewählt. Abbildung 3.3 beschreibt das Vorgehen zur Approximation einer Versetzungswand bestehend aus positiven Versetzungen. Die endliche Versetzungswand (i) lässt sich durch zwei Versetzungskonfigurationen abbilden: einer unendlichen Versetzungswand (ii) und einem Disklinationsdipol (iii). Der Disklinationsdipol lässt sich, wie in Kapitel 3.1.2 beschrieben, durch die Eigendehnungsformulierung berechnen und rechtfertigt den generellen Ansatz aus Gleichung (3.1) so lange sich die Darstellung der unendlichen Versetzungswand als lokaler Spannungsanteil ausdrücken lässt.

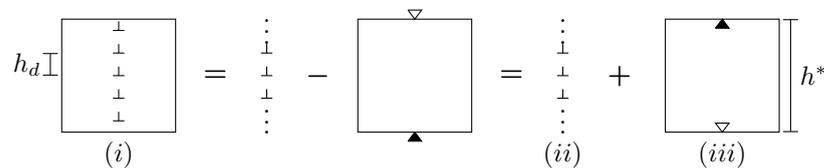


Abbildung 3.3: Die Approximation einer beschränkten Versetzungswand bestehend aus positiven Stufenversetzungen (i) und deren Darstellung durch eine unendliche Versetzungswand (ii) und dem Disklinationsdipol (iii).

Im Folgenden wird der lokale Spannungsanteils der unendlichen Versetzungswand (ii) hergeleitet. Das z -periodische Spannungsfeld einer unendlichen Versetzungswand ist durch die unendliche Reihe

$$\tau_{\text{per}, h_d}(x, z) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{\mu |\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - (z - ih_d)^2)}{(x^2 + (z - ih_d)^2)^2} \quad (3.16)$$

gegeben (Hirth und Lothe, 1982), wobei h_d den Abstand zweier benachbarter Versetzungen beschreibt. Die unendliche Reihe konvergiert und liefert

$$\tau_{\text{per},h_d}(x, z) = \frac{\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \frac{2\pi^2 x (\cos(2\pi z/h_d) \cosh(2\pi x/h_d) - 1)}{h_d^2 (\cos(2\pi z/h_d) - \cosh(2\pi x/h_d))^2}. \quad (3.17)$$

Wie zu Beginn erwähnt, handelt es sich bei der kontinuierlichen Darstellung um eine Darstellung mittels Flächendichten [m^{-2}]. Aus einer Liniendichte κ_{qc} der quasi-kontinuierlichen Darstellung und der Homogenisierungslänge h_* lässt sich eine Flächendichte

$$\kappa(x, z) = \frac{\kappa_{\text{qc}}(x)}{h_*} \quad (3.18)$$

für $(x, z) \in \Omega_{\text{SP}}^*$ auf der homogenisierten Gleitebene Ω_{SP}^* approximieren (stückweise konstante Interpolation). Daraus definieren wir die Nahfeldkorrektur

$$\tau_{\text{nfc}}^c(x, z) = \int_{\Omega_{\text{SP}}^*} \kappa(x', z') \tau_{\text{per},h_d}(x - x', z - z') dx' dz'. \quad (3.19)$$

Analog zur Herleitung der Nahfeldkorrektur wird eine Taylorreihenentwicklung von κ (der Kern von Gleichung (3.27) konvergiert ausreichend schnell gegen 0) und das Wegfallen der ungeraden Integrale genutzt, um die Nahfeldkorrektur durch

$$\tau_{\text{nfc}}^c(x, z) = -\partial_1 \kappa(x, z) \int_{\Omega_{\text{SP}}^*} (x - x') \tau_{\text{per},h_d}(x - x', z - z') dx' dz' \quad (3.20)$$

zu approximieren. Des weiteren wird das Integral durch Integration über die quasi-kontinuierliche Gleitebene approximiert. Für $z = 0$ vereinfacht sich das Spannungsfeld einer unendlichen Versetzungswand zu

$$\tau_{\text{per},h_d}(x) = \frac{\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \frac{\pi^2 x}{h_d^2 \sinh(\pi x/h_d)^2} \quad (3.21)$$

und die Nahfeldkorrektur ergibt sich zu

$$\tau_{\text{nfc}}^c(x, z) = -\partial_1 \kappa(x, z) h_* \int_{\Omega_{\text{SP}}} (x - x') \tau_{\text{per},h_d}(x - x') dx' \quad (3.22)$$

$$= -\frac{c\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} h_* h_d \partial_1 \kappa(x, z). \quad (3.23)$$

In diesem Fall kann die Konstante c analytisch integriert werden und liefert

$$c = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x'^2}{\sinh(x')^2} dx' \approx 1.047. \quad (3.24)$$

Die lokale Spannungskorrektur

Für die Formulierung der Nahfeldkorrektur fehlt die Bestimmung des mittleren Versetzungsabstands h_d in der Versetzungswand. Die Anzahl der Versetzungen N im Mittelungsvolumen Ω_m ist durch

$$N(x, z) = \int_{\Omega_m(x, z)} \rho(x', z') dx' dz' = \rho(x, z) h_*^2 \quad (3.25)$$

gegeben. Falls weniger als eine Versetzung im Mittelungsvolumen vorhanden ist, ist eine Darstellung als Versetzungswand nicht sinnvoll. In diesem Fall wählen wir $h_d = h_*$. Falls mehr als eine Versetzung vorhanden ist ($N(x, z) \geq 1$), ergibt sich der mittlere Abstand zu

$$h_d(x) = h_* N(x, z)^{-1} = \rho(x, z)^{-1} h_*^{-1} \quad (3.26)$$

und die Nahfeldkorrektur insgesamt zu

$$\tau_{\text{nfc}}^c(x, z) = -\frac{c\mu|\mathbf{b}|}{2\pi(1-\nu)} \cdot \begin{cases} \rho(x, z)^{-1} \partial_1 \kappa(x, z), & \text{falls } N(x, z) \geq 1 \\ h_*^2 \partial_1 \kappa(x, z), & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.27)$$

mit $c = 1.047$. Für $N < 1$ ergibt sich der Übergang zur quasi-kontinuierlichen Darstellung der Nahfeldkorrektur τ_{nfc}^d . Das zusätzliche Produkt h_* ergibt sich aus der Darstellung des kontinuierlichen Systems durch Flächendichten. Analog zum quasi-kontinuierlichen System lässt sich die resultierende Spannung durch

$$\tau_{\text{res}} = \mathbf{M} : (\boldsymbol{\sigma}_{\text{ext}} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{es}}) + \tau_{\text{nfc}}^c \quad (3.28)$$

darstellen.

Es bleibt festzuhalten, dass die Nahfeldkorrektur τ_{nfc}^c des kontinuierlichen Systems eine große Ähnlichkeit zur Rückspannung τ_b aus Gleichung (2.38) aufweist. Die Nahfeldkorrektur wird unter der Annahme von Versetzungswänden als charakteristische Versetzungskonfiguration hergeleitet und der mittlere Versetzungsabstand ist durch $\rho(x, z)^{-1} h_*^{-1}$ gegeben. Falls weniger als eine Versetzung in einem Mittelungsvolumen vorhanden ist, kann formal keine Versetzungswand gebildet werden. Der mittlere Versetzungsabstand ist also durch h^* nach oben beschränkt, d.h. $\rho(x, z)^{-1/2} < h_*$. Für die Herleitung von τ_b wird der mittlere Versetzungsabstand $\rho^{-1/2}$ als charakteristische Längenskala eingeführt. Wird der mittlere Versetzungsabstand als lokale Größe $\rho(x, z)^{-1/2}$ betrachtet, ist eine Beschränkung auf die Größe des Mittelungsvolumen sinnvoll, da dessen Aussagekraft außerhalb des Mittelungsvolumen nicht aus der lokalen Größe validiert werden kann.

3.2. Frank-Read Quellen

Für Simulationen der diskrete Versetzungsdynamik wird der Quellmechanismus der Frank-Read Quellen zur Modellierung von Problemstellungen der Mikroplastizität verwendet.

Eine Frank-Read Quelle besteht aus einer, an beiden Enden fixierten, Versetzungslinie, deren Bewegung durch den Orowan Mechanismus beschrieben wird. Der Quellmechanismus basiert auf der Auflösung der Spannung im Raum und der Aktivierung einzelner Quellen in der Zeit. Die sequentielle Aktivierung der Frank-Read Quellen wird durch die zufällige Orientierung der Quellen und normalverteilte Quelllängen l_s erreicht und ermöglicht es, den Beitrag einer einzelnen Quellaktivierung zur makroskopischen Relaxierung des Systems für andere Quellen messbar zu machen. Die Zeit, die eine produzierte Versetzung benötigt, um die mittlere freie Weglänge zurück zu legen, wird im Folgenden als die charakteristische Zeit t_{char} bezeichnet. Für diskrete Versetzungsdynamiksimulationen ist der Zeitschritt der Simulationen $\Delta t \ll t_{\text{char}}$ kleiner als die charakteristische Zeit t_{char} .

Klassische Quellmodelle für 2-dimensionale Theorien basieren auf der Modellierung der Emissionszeit t_{em} , die zu einer gegebenen Schubspannung τ benötigt wird, um einen Versetzungsring vollständig abzulösen (Van der Giessen und Needleman, 1995, Benzerga et al., 2004, Benzerga, 2008, Shishvan et al., 2008). Ein solches Modell eignet sich für spannungsbasierte Randbedingungen, da in diesem Fall die Quellaktivierungsrate einer einzelnen Versetzung $\dot{\xi} \sim t_{\text{em}}^{-1}$ entspricht. Es ist eine Auflösung der Spannung im Raum und der Quellaktivierung in der Zeit erforderlich (vgl. die räumliche und zeitliche Auflösung in Yefimov et al. (2004) und Yefimov und van der Giessen (2005)). Da diese Modelle von der Auflösung der Spannungen abhängig sind und die Quellaktivierungsrate für dynamische Belastungen nicht von der Emissionszeit t_{em} bestimmt wird, kann eine Homogenisierung in der Zeit für $\Delta t > t_{\text{char}}$ keine Beschreibung einer physikalischen Quellaktivierungsrate für eine Kontinuumstheorie liefern.

Für das Modell eines homogenisierten Quellmechanismus werden drei Aspekte berücksichtigt:

1. Für eine Kontinuumstheorie gilt im Allgemeinen $\Delta t \geq t_{\text{char}}$. Um die wegfallende Wechselwirkung für die Quellaktivierung zu kompensieren, wird der Einfluss der Belastungsart auf den Beitrag einer einzelnen Quellaktivierung zur makroskopischen Relaxation vor dem entsprechenden Zeitschritt abgeschätzt.
2. Die Auflösung der internen Spannungen τ_{int} ist abhängig von der Auflösung des Systems h^* , da ausschließlich geometrisch notwendige Versetzungen einen Dehnungsgradienten verursachen (vgl. Gleichung (2.11)).
3. Ein produzierter Versetzungsring hat einen Durchmesser von ungefähr $5l_s$ (Zhu et al., 2014) und definiert daher die "natürliche" Auflösung

$$h^* \geq 5l_s \tag{3.29}$$

durch die gewählte Quelllänge l_s .

Im Folgenden wird ein homogenisiertes Quellmodell basierend auf der dehnungsgesteuerten Belastung des Systems hergeleitet. Es wird eine obere Schranke für die globale Quellaktivierungsrate hergeleitet und die lokale Quellaktivierungsrate aus einem lokalen Maß

abgeleitet. Die Summe der lokalen Quellaktivierungsraten darf die obere Schranke nicht überschreiten. Die globale Quellaktivierungsrate wird für allgemeine Belastungen abhängig von der mittleren freien Weglänge der Versetzungen beschrieben. Für den Fall der Biegung wird die globale Quellaktivierungsrate abhängig von der induzierten plastischen Krümmung hergeleitet.

Eine obere Schranke für die globale Quellaktivierungsrate

Für die Homogenisierung des Quellmodells wird angenommen, dass die maximale globale Quellaktivierungsrate $\dot{\xi}_{\text{prod}}$ durch das Gleichgewicht zwischen der internen plastischen Dehnrate $\dot{\epsilon}_{\text{pl}}$ und der externe Dehnrate $\dot{\epsilon}_{\text{ext}}$ gegeben ist. Dieser Fall entspricht makroskopisch einem ideal plastischen Materialverhalten. Um die Gleichgewichtsbedingung nutzen zu können, wird ein Maß für die interne plastische Dehnrate $\dot{\epsilon}_{\text{pl}}$ eingeführt.

Dazu wird die aktuelle mittlere Weglänge einer Versetzung, bzw. in 3 Dimensionen die mittlere abgescherte Fläche pro Versetzungsring², des j -ten Gleitsystems durch

$$d_{\text{av}}^{(j)} = \frac{\langle \gamma^{(j)} \rangle}{b \langle \rho_{\text{prod}}^{(j)} \rangle} \quad (3.31)$$

berechnet. Dabei bezeichnet $\langle \cdot \rangle$ die Integration über das gesamte Volumen und $\rho_{\text{prod}}^{(j)}$ die bisher produzierte Versetzungsdichte. Aus der "erwarteten" plastischen Dehnung einer Quellaktivierung

$$\gamma_{\text{erwartet}}^{(j)} = \frac{2d_{\text{av}}^{(j)}b}{\Omega} \quad (3.32)$$

und der Quellaktivierungsrate $\dot{\xi}_{\text{prod}}$ lässt sich die "erwartete" plastische Dehnrate

$$\dot{\epsilon}_{\text{pl,erwartet}} = \dot{\xi}_{\text{prod}} \sum_{j=1}^{\alpha} \gamma_{\text{erwartet}}^{(j)} \mathbb{M}^{(j)} : \mathbb{M}_{\text{ext}} \quad (3.33)$$

abschätzen. Die Projektionsoperatoren $\mathbb{M}^{(j)}$ sind in Gleichung (2.42) definiert und $\dot{\epsilon}_{\text{ext}} \mathbb{M}_{\text{ext}}$ ist die tensorielle Darstellung der externen Belastung, so dass $\mathbb{M}^{(j)} : \mathbb{M}_{\text{ext}}$ letztlich dem Schmid Faktor der unterschiedlichen Gleitsystemen entspricht. Aus dem Gleichgewicht

$$\dot{\epsilon}_{\text{ext}} = \dot{\epsilon}_{\text{pl,erwartet}} \quad (3.34)$$

² In 3 Dimensionen wird analog die mittlere abgescherte Fläche A_{av} definiert als

$$A_{\text{av}}^{(j)} = \frac{2\pi \langle \gamma^{(j)} \rangle}{b \langle q_{\text{prod}}^{(j)} \rangle} \quad (3.30)$$

wobei $q_{\text{prod}}^{(j)}$ der produzierten Krümmungsdichte und $\langle q_{\text{prod}}^{(j)} \rangle = 2\pi n_{\text{prod}}$ einem Vielfachen der produzierten Versetzungsringe n_{prod} entspricht.

folgt die maximale globale Quellaktivierungsrate

$$\dot{\xi}_{\text{prod}} = \frac{\dot{\epsilon}_{\text{ext}}}{\sum_{j=1}^{\alpha} \gamma_{\text{erwartet}}^{(j)} \mathbb{M}^{(j)} : \mathbb{M}_{\text{ext}}}. \quad (3.35)$$

Die maximale globale Quellaktivierungsrate wird in 3 Dimensionen analog aus der mittleren abgescherten Fläche A_{av} bestimmt.

Das lokale Maß für die Quellaktivierungsrate

In der Theorie sorgt der Frank-Read Mechanismus dafür, dass eine Quelle die lokale Spannung überhalb der kritischen Quellspannung $\tau_{\text{krit}}^{\text{lok}}$ relaxiert. Um dieses Verhalten für eine Kontinuumstheorie zu modellieren, wird das "erwartete" Spannungsinkrement $\Delta\tau_{\text{erw}}^{\text{lok}}$ für den folgenden Zeitschritt abgeschätzt. Eine Möglichkeit zur Abschätzung des erwarteten Spannungsinkrement

$$\Delta\tau_{\text{erw}}^{\text{lok}} = \mathbb{M} : \Delta\boldsymbol{\sigma}_{\text{ext}} \quad (3.36)$$

ist das lokale elastische Spannungsinkrement³. Die Definition von "lokal" wird über den mittleren Quellabstand $h_s = \max(\rho_s^{-1/2}, h^*)$ abgeleitet, der nach unten durch die Auflösung h^* des Systems beschränkt ist. Ist $h_s = h^*$, so wird von einer homogenen Verteilung gesprochen, da pro Mittelungsvolumen mindestens eine Quelle vorhanden ist. Die lokale Quellaktivierungsrate beschreibt die Dichteproduktion eines Mittelungsvolumen. Wird lokal die kritische Quellspannung $\tau_{\text{krit}}^{\text{lok}}$ überschritten, so wird die Dichteproduktion im zugehörigen Mittelungsvolumen aktiviert. Die lokale Quellaktivierungsrate

$$\dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}} = \frac{1}{\Delta t} \frac{\Delta\tau_{\text{erw}}^{\text{lok}} - \Delta\tau_{\text{fluss}}^{\text{lok}}}{\Delta\tau_s^{\text{lok}}} \quad (3.37)$$

berechnet sich aus dem erwarteten Spannungsinkrement $\Delta\tau_{\text{erw}}^{\text{lok}}$, dem Beitrag zur Relaxation durch den momentanen Versetzungsfluss $\Delta\tau_{\text{fluss}}^{\text{lok}} = \mu\gamma_{\text{fluss}}^{\text{lok}}$, dem lokalen Beitrag zur Relaxation aufgrund einer abgescherten Versetzung $\Delta\tau_s^{\text{lok}}$ und dem Schermodul μ . Es werden Bereiche mit einem hohen erwarteten Spannungsinkrement und einem niedrigen Versetzungsfluss für die Produktion von Versetzungsdichte bevorzugt. Entsprechend der lokalen Umgebung, die durch h_s definiert ist, wird der Beitrag zur Relaxation durch Abscheren einer Versetzung als

$$\Delta\tau_s^{\text{lok}} = \mu \frac{b}{h_s} \quad (3.38)$$

³ Die Wahl dieses Ansatzes liegt zum einen darin begründet, dass der Anteil der internen Spannung $\Delta\boldsymbol{\sigma}_{\text{int}}$ einer spannungsgesteuerten Belastung entspricht, welche durch das vorgestellte Modell nicht abgebildet werden kann. Zum anderen ist die Darstellung der internen Spannung abhängig von der Auflösung des Systems.

angenommen. Die Summe der lokalen Quellaktivierungsraten wird nach oben durch die maximale globale Quellaktivierungsrate beschränkt. Ist

$$\sum_i \dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}}(i) > \dot{\xi}_{\text{prod}}, \quad (3.39)$$

werden die lokalen Quellaktivierungsraten $\dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}}$ im k -ten Mittelungsvolumen mit

$$\dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}}(k) = \frac{\dot{\xi}_{\text{prod}}}{\sum_i \dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}}(i)} \dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}}(k) \quad (3.40)$$

skaliert. Eine Gewichtung zwischen den Gleitsystemen ergibt sich implizit aus dem vorgeschlagenen Algorithmus.

Das Einbringen der Versetzungsdichte erfolgt über einen Quellterm in der Kontinuitätsgleichung der Gesamtdichte ρ (vgl. Gleichung (2.39))

$$\partial_t \rho = -\partial_1(\kappa v) + \partial_t \rho_{\text{prod}} \quad (3.41)$$

mit

$$\partial_t \rho_{\text{prod}} = \dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}} \frac{2}{\Omega^{\text{lok}}} \quad \text{in 2 Dimensionen und} \quad (3.42)$$

$$\partial_t \rho_{\text{prod}} = \dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}} \frac{2\pi r}{\Omega^{\text{lok}}} \quad \text{in 3 Dimensionen.} \quad (3.43)$$

Ω^{lok} beschreibt die Größe des Mittelungsvolumen. In 3 Dimensionen muss zusätzlich ein anfänglicher Radius r gewählt werden (siehe Gleichung (3.29)) und der Quellterm konsistent für die Evolution der Krümmungsdichte (vgl. Gleichung (2.31))

$$\partial_t q = -\nabla \cdot (-v \mathbf{q} + \boldsymbol{\rho}^{(2)} \cdot \nabla v) + \partial_t q_{\text{prod}} \quad (3.44)$$

mit

$$\partial_t q_{\text{prod}} = \dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}} \frac{2\pi}{\Omega^{\text{lok}}} \quad (3.45)$$

berücksichtigt werden.

Die Quellaktivierungsrate für den Fall der reine Biegung

Für den Fall des Biegens kann das globale Maß für die maximale Produktionsrate $\dot{\xi}_{\text{prod}}$ nicht durch die mittlere Weglänge beschrieben werden. Stattdessen relaxiert die plastische Krümmung des Balkens aufgrund von geometrisch notwendigen Versetzungen das anliegende Biegemoment. Abbildung 3.4 (a) zeigt, wie durch das Einfügen von Halbebenen eine plastische Krümmung erzeugt wird.

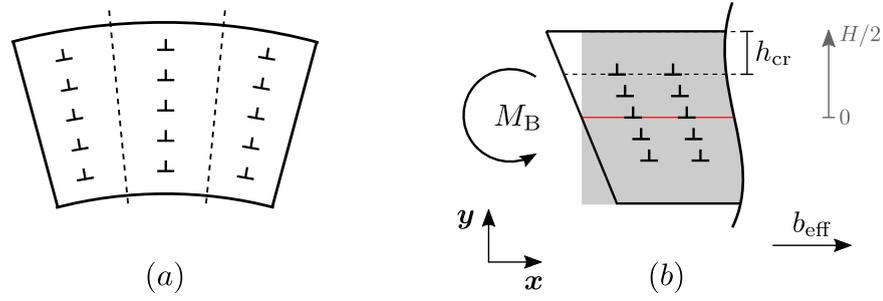


Abbildung 3.4: (a) Beschreibung der plastischen Krümmung durch geometrisch notwendige Versetzungen (Ashby, 1970) und (b) der elastische Bereich h_{cr} im Dehnungsgradienten aufgrund eines anliegenden Biegemomentes M_B .

Motz und Dunstan (2012) haben gezeigt, dass der Größeneffekt in kleinen Balken durch das Modell der kritischen Dicke⁴ zur Abschätzung der Länge des Versetzungsaufbaus, der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte und das Einsetzen der plastischen Verformung verwendet werden kann. Dazu wird das Dehnungsintegral

$$I = \int_0^{H/2} \varepsilon_{xx,el}(y) dy \quad (3.46)$$

definiert und ein kritischer Wert für das Dehnungsintegral bestimmt (Dunstan und Bushby, 2004). Für Aluminium beträgt das kritische Dehnungsintegral

$$I_{krit} \approx 2b_{Al} = 0.572 \text{ nm}. \quad (3.47)$$

Die Theorie und die Ergebnisse von Dunstan und Bushby (2004) und Motz und Dunstan (2012) haben gezeigt, dass das Dehnungsintegral nach Einsetzen der plastischen Verformung konstant bleibt und $I = I_{krit}$ gilt (siehe Abbildung 3.5). Aus dieser Bedingung lässt sich eine Quellaktivierungsrate abhängig von der elastischen Oberflächendehnung, dem Dehnungsgradienten und dem Dehnungsincrement an der Oberfläche berechnen.

Die in Abbildung 3.5 dargestellten Steigungen sind durch

$$m^{(n)} = \frac{\varepsilon_{el}^{(n)}}{h_{cr}^{(n)}} \quad (3.48)$$

und

$$m^{(n+1)} = m^{(n)} + \frac{2\Delta\varepsilon_{ext}}{H} \quad (3.49)$$

gegeben. Aus der neuen Steigung $m^{(n+1)}$ lässt sich mit Hilfe der Bedingung $I = I_{krit}$ die

⁴ Das Modell der kritischen Dicke würde ursprünglich zur Beschreibung der plastischen Verformung von verspannten Epitaxialschichten von Frank und van der Merwe (1949) eingeführt.

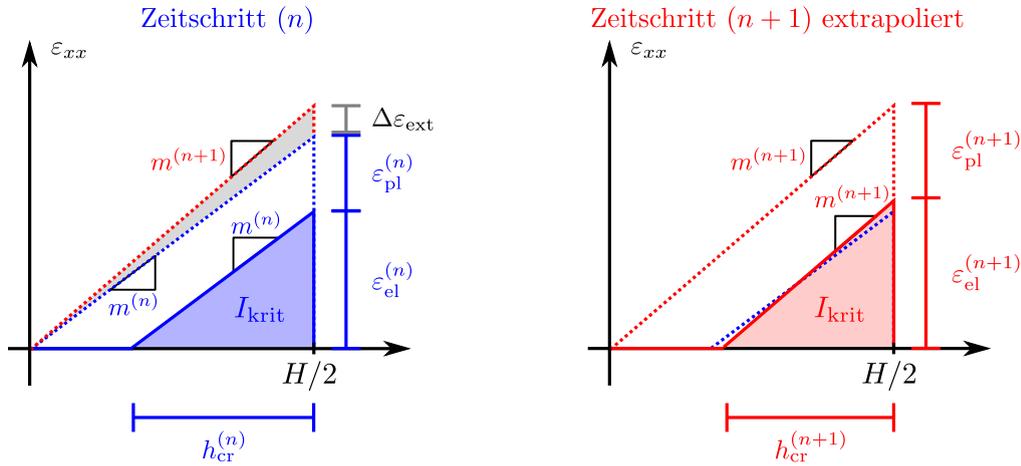


Abbildung 3.5: Abbildung des approximierten Dehnungszustands in Zeitschritt (n) und dem extrapolierten Zeitschritt (n+1) in der oberen Hälfte des Balkens. $h_{cr}^{(n)}$ und $h_{cr}^{(n+1)}$ beschreiben den Bereich mit $\varepsilon_{el} > 0$ und $\Delta\varepsilon_{ext}$ das Dehnikrement an der Balkenoberfläche aufgrund des aufgeprägten Biegemoments.

neue Länge $h_{cr}^{(n+1)}$

$$\int_0^{h_{cr}^{(n+1)}} m^{(n+1)} y dy = I_{krit}$$

$$\Rightarrow h_{cr}^{(n+1)} = \sqrt{\frac{2I_{krit}}{m^{(n+1)}}} \quad (3.50)$$

bestimmen.

Basierend auf den Größen $h_{cr}^{(n)}$, $h_{cr}^{(n+1)}$, $\varepsilon_{el}^{(n)}$ und $\varepsilon_{el}^{(n+1)}$ kann eine geometrisch notwendige Versetzungsdichte zur Relaxation des Dehnungsgradienten bestimmt werden. Um den Dehnungsgradienten $m^{(n+1)}$ im Bereich $[0, H/2 - h_{cr}^{(n+1)}]$ um die neutrale Faser mit geometrisch notwendigen Versetzungen zu relaxieren, muss eine geometrisch notwendige Versetzungsdichte von

$$\kappa^{(n+1)} = \frac{m^{(n+1)}}{b_{eff}} \quad (3.51)$$

vorhanden sein. Der Zusammenhang folgt aus Gleichung (2.11). Der effektive Burgersvektor $b_{eff} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{e}_x$ ist der Anteil des Burgersvektor in Balkenrichtung. Für die Biegung entspricht die Quellaktivierungsrate der Produktionsrate der geometrisch notwendigen Versetzungen, da die jeweils entgegengesetzt orientierte Versetzung das System an der Oberfläche verlässt. Die Quellaktivierungsrate berechnet sich demnach aus der Differenz der Anzahl der geometrisch notwendigen Versetzungen zwischen zwei Zeitschritten zu

$$\dot{\xi}_{prod} = \frac{2}{\Delta t} \left(L \left(\frac{H}{2} - h_{cr}^{(n+1)} \right) \kappa^{(n+1)} - L \left(\frac{H}{2} - h_{cr}^{(n)} \right) \kappa^{(n)} \right). \quad (3.52)$$

Mit Gleichungen (3.48), (3.49) und (3.50) lässt sich die Quellaktivierungsrate durch

$$\dot{\xi}_{\text{prod}} = \frac{2}{\Delta t} \frac{L}{b_{\text{eff}}} \left(\varepsilon_{\text{el}}^{(n)} + \Delta \varepsilon_{\text{ext}} - \sqrt{2I_{\text{krit}} \left(m^{(n)} + \frac{2\Delta \varepsilon_{\text{ext}}}{H} \right)} \right) \quad (3.53)$$

ausdrücken. Damit lässt sich aus der elastischen Oberflächendehnung $\varepsilon_{\text{el}}^{(n)}$ und dem Gradienten $m^{(n)}$ die Quellaktivierungsrate des nächsten Zeitschrittes vorhersagen.

Das Modell der kritischen Dicke beschreibt einen homogenen Zustand in Balkenrichtung und Gleichung (3.53) liefert eine obere Schranke für die globale Quellaktivierungsrate. Abhängig von den lokalen elastischen Inkrementen, wie zu Beginn dieses Kapitels beschrieben, lässt sich eine lokale Quellaktivierungsrate der Mittelungsvolumen bestimmen. Für den Fall der Biegung eines Kragbalkens wird das Modell der kritischen Dicke auf den mittleren Zustand des Balkens angewendet und entsprechend das kritische Dehnungsintegral angepasst. Unter der Annahme eines linear abfallenden Biegemomentes entlang des Balkens, ist das wahre Biegemoment und das wahre Dehnungsintegral an der Einspannung doppelt so groß wie der Mittelwert. Dementsprechend muss das kritische Biegemoment und das kritische Dehnungsintegral für den Fall der reinen Biegung mit einem Faktor von 0.5 angepasst werden.

Der Algorithmus

Abbildung 3.6 zeigt den Algorithmus für die Berechnung des homogenisierten Quellmechanismus, der sich aus folgenden drei Schritten zusammen setzt: lokale Quellaktivierung falls die kritische Quellspannung $\tau_{\text{krit}}^{\text{lok}}$ überschritten ist (1), das Berechnen einer lokalen Quellaktivierungsrate $\dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}}$ (2) und das Berechnen einer maximalen globalen Quellaktivierungsrate $\dot{\xi}_{\text{prod}}$ als obere Schranke der Summe der lokalen Quellaktivierungsraten (3). Das Modell der maximalen globalen Quellrate wird abhängig von der Belastung des Systems gewählt.

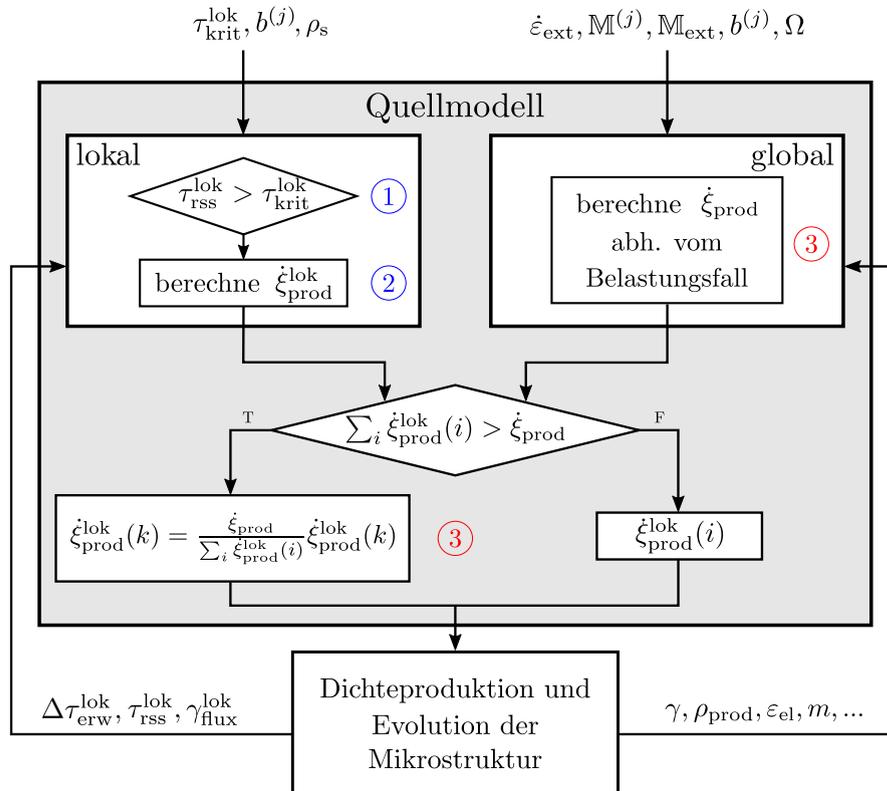


Abbildung 3.6: Der homogenisierte Quellmechanismus, der sich aus folgenden drei Schritten zusammensetzt: lokale Quellaktivierung falls die kritische Quellspannung $\tau_{\text{krit}}^{\text{lok}}$ überschritten ist (1), das Berechnen einer lokalen Quellaktivierungsrate $\dot{\xi}_{\text{prod}}^{\text{lok}}$ (2) und das Berechnen einer maximalen globalen Quellaktivierungsrate $\dot{\xi}_{\text{prod}}$ als obere Schranke der Summe der lokalen Quellaktivierungsraten (3).

4. Charakterisierung des Kontinuumslimit

Das Ziel der Entwicklung von physikalischen Kontinuumstheorien ist es, kinematische Modelle der Versetzungsdynamik in konsistente Kontinuumsformulierungen zu überführen. Dazu müssen Informationen von niedrigen Skalen homogenisiert werden, um die physikalischen Eigenschaften des Systems, trotz einer Reduktion der Anzahl der Freiheitsgrade, weitgehend zu erhalten. Durch das Mitteln von diskreten Versetzungsstrukturen in einem höherdimensionalen Raum, können diskrete Versetzungsstrukturen konsistent als Versetzungsdichten dargestellt werden (El-Azab, 2000, Hochrainer et al., 2007). Der Nachteil einer einfachen räumlichen Mittelung ist der Verlust von Informationen über die relative Lage der Versetzungen unterhalb der Mittelungslänge und damit der Verlust von wichtigen Informationen zur Beschreibung der internen Kräfte des Systems. Über Ensemblemittelwertbildung können diese Informationen in Form von Korrelationsfunktionen bestimmt werden, die eine interne Längenskala durch den mittleren Versetzungsabstand $\rho_t^{-1/2}$ induzieren (siehe Kapitel 2.2.2 und Zaiser et al., 2001). Roy et al. (2008) kommen zu dem Schluss, dass speziell in Fällen, in denen der mittlere Versetzungsabstand groß ist im Vergleich zur Dimension des Systems, die Gültigkeit von versetzungsbasierten Kontinuumsformulierungen nicht ausreichend untersucht ist. Der Bereich des Parameterraums, in dem die interne Längenskala im Vergleich zur Dimension des Systems klein ist, wird nach Cleveringa et al. (1997) als *Kontinuumslimit* bezeichnet.

Die Charakterisierung des Kontinuumslimits dient dazu, die Frage zu beantworten, ob sich das diskrete System ähnlich einem homogenisierten System verhält oder ob der diskrete Charakter einen nicht zu vernachlässigbaren Einfluss ausübt. Ein zugängliches Beispiel ist die Verteilung von Quellen in unterschiedlich großen Mikroproben. In einem sehr kleinen System können sehr wenige bis keine Quellen vorhanden sein und beliebig viele in einer großen Probe. Die entsprechenden Dehnungsprofile werden unterschiedlich sein und es stellt sich die Frage, ab welcher Balkengröße der Unterschied zu einem Balken mit sehr

vielen Quellen vernachlässigbar klein wird. Diese Fragestellung ergibt sich u.a. aus der Diskussion der Ergebnisse der Mikrobiegung in Kapitel 5.3.

Im Kontinuumslimit verhalten sich diskrete Simulationen wie klassische Kontinuumstheorien, also wie Kontinuumstheorien ohne interne Längenskala (Cleveringa et al., 1997). Das bedeutet, dass diskrete Simulationen im Kontinuumslimit das Skalierungsverhalten von Kontinuumstheorien erfüllen. Da sich für eine 2-dimensionale Betrachtung Familien von Lösungen bzgl. der Skalierung der Längenskala des Systems definieren lassen¹, kann diese Fragestellung hier auf die Invarianz der Simulationen bezüglich der Anzahl der Versetzungen im System reduziert werden. Eine weitere notwendige Bedingung für die Charakterisierung einer allgemeingültigen Kontinuumsformulierung ist eine schwache Abhängigkeit der Simulationen von den Anfangsbedingungen (Zaiser, 2015). Ist die schwache Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen nicht gegeben, so muss explizit sichergestellt werden, dass der Einfluss der Anfangsbedingung auch in einer Versetzungsdichtetheorie abgebildet werden kann. Fraglich ist, ob es in diesem Fall eine allgemeingültige Versetzungsdichtetheorie formuliert werden kann, ohne diese auf Spezialfällen aufzubauen.

Das Ziel dieses Kapitels ist es, die Definition des Kontinuumslimit nach Cleveringa et al. (1997) zu konkretisieren und dessen Existenz für 2-dimensionale Versetzungssimulationen nachzuweisen. Durch das Kontinuumslimit wird eine Grundlage für die Charakterisierung allgemeingültiger Kontinuumsformulierungen, wie die, der Approximation der elastischen Energie mittels der tensoriellen Darstellungen von Versetzungsdichten (Zaiser, 2015), gelegt und insbesondere auf deren Gültigkeitsbereich hingewiesen. Des Weiteren wird anhand der in dieser Arbeit entwickelten Kontinuumsformulierung in 2 Dimensionen gezeigt, dass eine mechanismusbasierte Homogenisierung für eine vollständige Darstellung des Übergangs von diskreten Simulationen zu Simulationen im Kontinuumslimit notwendig ist.

Als Motivation für die Existenz des Kontinuumslimits dient eine heuristische Analyse von Ensemblemittelwerten berechnet auf einem beschränkten Gebiet für eine unterschiedliche Anzahl von Versetzungen.

4.1. Heuristische Analyse des Kontinuumslimits

Es werden n positive Versetzungen eines Gleitsystems zufällig auf einem Gebiet $\Omega = [0, L] \times [0, H]$ verteilt, welches durch undurchlässige Randbedingungen beschränkt ist und in einem unendlichen Medium eingebettet ist. Das System wird ohne externe Spannung relaxiert. Aus dem Konstitutivgesetz der Versetzungsgeschwindigkeit der diskreten Versetzungsdynamik für Einfachgleiten folgt (Gleichung (2.2)), dass die relaxierten Versetzungskonfigurationen unabhängig von den Materialparametern und der Längenskala des Systems sind (vgl. Kapitel 5.4). Das System ist durch das Seitenverhältnis $L/H = 8$ und die Anzahl der Versetzungen n charakterisiert.

¹ Durch die intrinsische Skalierungseigenschaften von Versetzungssystemen werden Familien von Lösungen anhand der Anzahl der Versetzungen n in 2 Dimensionen identifiziert (Zaiser und Sandfeld, 2014).

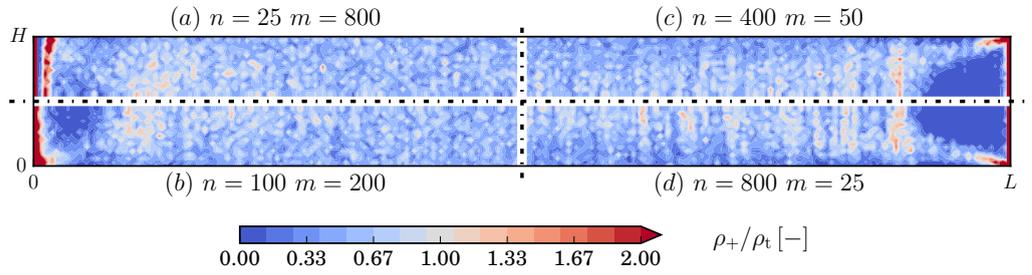


Abbildung 4.1: Die Ensemblemittelwerte der relaxierten 1-Partikeldichtefunktion ρ_+ für $n = 25, 100, 400$ und 800 Versetzungen auf einem beschränkten Gebiet $\Omega = [0, L] \times [0, L/8]$. Die Ensemblemittelwerte sind auf die mittlere Anzahl der Versetzungen normalisiert und die Anzahl der Simulationen $\bar{m}_S(n)$ jeder Simulationsreihe ist so gewählt, dass die Gesamtanzahl der Versetzungen $n \cdot \bar{m}_S(n) = 2 \cdot 10^4$ ist. Die Ergebnisse sind entlang der x - und der y -Achse symmetrisiert und jeder Quadrant zeigt das Ergebnis einer Simulationsreihe mit einer Auflösung von $h_* = H/32$.

Abbildung 4.1 zeigt die Ensemblemittelwerte der relaxierten 1-Partikeldichtefunktion ρ_+ für $n = 25, 100, 400$ und 800 Versetzungen. Die Ensemblemittelwerte sind auf die mittlere Anzahl der Versetzungen normalisiert und die Anzahl der Simulationen $\bar{m}_S(n)$ jeder Simulationsreihe ist so gewählt, dass die Gesamtanzahl der Versetzungen $n \cdot \bar{m}_S(n) = 2 \cdot 10^4$ ist. Die Ergebnisse sind entlang der x - und der y -Achse symmetrisiert und jeder Quadrant zeigt das Ergebnis für eine andere Anzahl von Versetzungen mit einer Auflösung von $h_* = H/32$. Anhand der Charakteristika der relaxierten 1-Partikeldichtefunktion ρ_+ am Rand des Gebietes, lässt sich eine Invarianz zwischen den Ergebnissen für $n = 25, 100$ und 400 Versetzungen ausschließen. Die Ergebnisse für $n = 400$ und 800 Versetzungen hingegen zeigen ähnliche Charakteristika, d.h. eine starke Versetzungswand am Rand bestehend aus 25% aller Versetzungen, einer versetzungsfreien Zone in der Größe der Höhe der Versetzungswand und einer homogenen Verteilung in der Mitte des Gebietes. Die Ergebnisse lassen vermuten, dass der strukturelle Einfluss des endlichen Gebietes mit der Abnahme des mittleren Versetzungsabstands $\rho_t^{-0.5}$ an Dominanz gewinnt. Da zwischen den Ensemblemittelwerten für $n = 400$ und 800 nur noch ein kleiner quantitativer Unterschied zu beobachten ist, scheint ein Grenzwert n_{KL} für das Kontinuumslimit zwischen $400 \leq n_{KL} \leq 800$ eine sinnvoll Annahme zu sein.

Um die Ähnlichkeit der Ensemblemittelwerte messbar zu machen, wird auf der Grundlage der Korrelationsfunktionen unterschiedlicher Ensemblemittelwerte ein Maß für das Kontinuumslimit eingeführt.

4.2. Grundlagen zur Definition des Kontinuumslimit

Zur Charakterisierung des Kontinuumslimit für Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik wird die Definition der Korrelationsfunktionen aus Gleichung (2.19) verwendet. Um statt den absoluten Korrelationsfunktionen $d_{ss'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ die relativen Korrelationsfunktionen $d_{ss'}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ berechnen zu können, wird angenommen, dass eine ausreichend homogene Verteilung der Versetzungen vorliegt. Der Vorteil der relativen Korrelationsfunktionen ist die Mittelung der Korrelationsfunktion über alle Versetzungen im System und somit eine bessere Statistik bei gleicher Anzahl an Simulationen. Zur Berechnung der relativen Korrelationsfunktionen, werden die 1- und die 2-Partikeldichtefunktion aller Versetzungen bestimmt und gemittelt. Unter der Annahme einer homogenen Verteilung der Versetzungen auf dem Gebiet $\Omega = [0, L] \times [0, H]$, kann die relative 1-Partikeldichtefunktion analytisch durch

$$\rho_1^h(\mathbf{x}) = \frac{\rho_t \int \mathbf{I}_\Omega(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}'}{\int_\Omega 1 d\mathbf{x}'} \quad (4.1)$$

beschrieben werden. $\mathbf{I}_\Omega(\mathbf{x})$ bezeichnet die Indikatorfunktion, die gleich 1 ist für $\mathbf{x} \in \Omega$ und ansonsten gleich 0. Für $\mathbf{x} = [x_1, x_2]$ erhält man

$$\rho_1^h(\mathbf{x}) = \left(1 - \frac{|x_1|}{L}\right) \left(1 - \frac{|x_2|}{H}\right) \rho_t. \quad (4.2)$$

Aus Gleichung (2.19) und mit dem analytischen Ausdruck für die effektive 1-Partikeldichtefunktion ρ_1^h lassen sich die relativen Korrelationsfunktionen durch

$$d_{ss'}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{\rho_2(s, s', \mathbf{x})}{\rho_1^h(\mathbf{0})\rho_1^h(\mathbf{x})} - 1, & -L < x_1 < L \text{ und } -H < x_2 < H \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.3)$$

berechnen. Zu Beginn von Kapitel 5.4 wird die durch ρ_1^h eingeführte Normierung im Detail beschrieben. Die relativen Korrelationsfunktionen sind äquivalent zu den gescreenten Korrelationsfunktionen (Ispánovity et al., 2008). Für Simulationen ohne externe Spannung $\tau_{\text{ext}} = 0$ lassen sich die Vorzeichen aller Versetzungen vertauschen, ohne die berechnete Gleichgewichtskonfiguration zu verändern. Deshalb ergeben sich für $\tau_{\text{ext}} = 0$ nur zwei unabhängige Korrelationsfunktionen d_{++} und d_{+-} , da $d_{++} = d_{--}$ und $d_{+-} = d_{-+}$. Die Korrelationsfunktionen werden symmetrisiert, so dass alle Informationen für $\varphi \in [0, \pi/2]$ abgebildet werden.

Aus der Korrelationsfunktion $d_{ss'}$ lässt sich die Winkelkorrelationsfunktion

$$d_{ss'}^\varphi(\varphi) = \int_{r_0}^{r_1} d_{ss'}(\mathbf{x}(r, \varphi)) r dr \quad (4.4)$$

und die entsprechende Gewichtsfunktion

$$w_{ss'}^\varphi(\varphi) = \int_{r_0}^{r_1} (1 + d_{ss'}(\mathbf{x}(r, \varphi))) r dr \quad (4.5)$$

$$= \frac{r_1^2 - r_0^2}{2} + d_{ss'}^\varphi(\varphi) \quad (4.6)$$

durch radiale Integration über $r \in [r_0, r_1]$ bestimmen. Der relative Fehler der Winkelkorrelationsfunktion $d_{ss'}^\varphi$ bzgl. der Winkelkorrelationsfunktion $\tilde{d}_{ss'}^\varphi$ (im Folgenden als "Referenz" bezeichnet) wird durch

$$\epsilon \left(d_{ss'}^\varphi, \tilde{d}_{ss'}^\varphi \right) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{|w_{ss'}^\varphi(\varphi) - \tilde{w}_{ss'}^\varphi(\varphi)|}{|\tilde{w}_{ss'}^\varphi(\varphi)|} d\varphi \quad (4.7)$$

definiert. Für die Gewichtsfunktion der Referenz muss gelten $\tilde{w}_{ss'}^\varphi > 0$. Diese Bedingung ist im Allgemeinen für ausreichend viele Versetzungen abhängig von der Diskretisierung von φ erfüllt, muss aber bei Berechnung des relativen Fehlers überprüft werden².

4.3. Definition eines Maßes für das Kontinuumslimit

Um das Kontinuumslimit anhand von diskreten Versetzungsdynamiksimulationen messbar zu machen, muss eine "schwache" Definition des Kontinuumslimits eingeführt werden. Eine schwache Definition des Kontinuumslimits ist notwendig, da zwei unterschiedliche Korrelationsfunktionen für die gleiche Anzahl an Versetzungen und Simulationen keine identischen Ergebnisse liefern, sondern mit einem statistischen Fehler behaftet sind. Der Fehler

$$\epsilon_s \left(d_{ss'}^\varphi, \tilde{d}_{ss'}^\varphi \right) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{|w_{ss'}^\varphi(\varphi) - \tilde{w}_{ss'}^\varphi(\varphi)|}{\frac{1}{2} |w_{ss'}^\varphi(\varphi) + \tilde{w}_{ss'}^\varphi(\varphi)|} d\varphi \quad (4.8)$$

zwischen zwei formal identischen Korrelationsfunktionen $d_{ss'}^\varphi$ und $\tilde{d}_{ss'}^\varphi$ wird als statistischer Fehler ϵ_s bezeichnet.

Invarianz bzgl. der Anzahl der Versetzungen

Eine Korrelationsfunktion wird als invariant bzgl. der Anzahl der Versetzungen bezeichnet, wenn der relative Fehler ϵ bzgl. einer Korrelationsfunktion mit doppelt so vielen Versetzungen den gleichen Fehler produziert, wie der statistische Fehler ϵ_s , also der relative Fehler bzgl. einer Korrelationsfunktion mit der gleichen Anzahl an Versetzungen. Da der statistische Fehler von einzelnen Realisierungen abhängig ist, wird zu jeder Anzahl von Simulationen und Versetzungen der mittlere relative und statistische Fehler über eine Menge von Ensemblemittelwerten gebildet.

$$(n \cdot m = \text{konst.} / n \text{ wird variiert.})$$

² Mit zunehmender Anzahl n an Versetzungen und Anzahl m an Simulationen, nehmen die Datenpunkte zur Berechnung der Korrelationsfunktionen zu. Da die Korrelationsfunktionen eine endliche Reichweite besitzen, gilt $d_{ss'} \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$. Damit existiert kein Winkel φ_0 , für den $d_{ss'}^\varphi(\varphi_0) = -1$ ist. Mit zunehmendem $n \cdot m$ abhängig von der Diskretisierung von φ sinkt die Wahrscheinlichkeit, dass $d_{ss'}^\varphi(\varphi_0) = -1$ zufällig aufgrund von zu wenig Datenpunkten auftritt.

Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen

Die Abhängigkeit der Korrelationsfunktionen von einer konkreten Realisierung der Anfangsbedingungen wird untersucht, indem Ensemblemittelwerte über eine unterschiedliche Anzahl von Simulationen zu einer gegebenen Anzahl von Versetzungen miteinander verglichen wird. Es wird eine kritische Anzahl von Simulationen bestimmt, damit der relative Fehler und der statistische Fehler bzgl. der gewählten Referenz die gleiche Größe haben.

($n = konst.$ / m wird variiert.)

Einfluss des Randes

Durch die starke Polarisierung der Simulationen in Abbildung 4.1 am Rand des beschränkten Gebietes wird ein Einfluss des beschränkten Gebietes mit zunehmender Anzahl von Versetzungen in Form von regelmäßigen Versetzungswänden sichtbar. Um den Einfluss des Randes zu charakterisieren, werden die Korrelationsfunktionen darauf hin untersucht, ob sie durch das Auftreten der regelmäßigen Versetzungsstrukturen beeinflusst werden. Die daraus folgende Längenskala des Einfluss des Randes wird im Verhältnis zur interne Längenskala (definiert durch den mittleren Versetzungsabstand $\rho^{-1/2}$) untersucht.

5. Ergebnisse

5.1. Wechselwirkungen innerhalb eines Gleitsystems

Die Validierung der internen Spannung des quasi-kontinuierlichen und des kontinuierlichen Systems (vgl. Abbildung 3.1) erfolgt an einer Konfiguration, die starke Versetzungsaufstaus induziert. Die Materialparameter sind durch das Schermodul μ [GPa], die Poissonzahl $\nu = 0.33$, den Betrag des Burgersvektors b [nm] und den Dämpfungskoeffizienten B [Pa·s] gegeben. Dabei skalieren die Ergebnisse von Relaxationssimulationen mit μ , b und der absoluten Längenskala des Systems. Da die Zeitabhängigkeit keinen Einfluss auf den relaxierten Zustand hat, kann B beliebig gewählt werden.

Die Simulationen des quasi-kontinuierlichen und des kontinuierlichen System (im Folgenden mit CDD bezeichnet) werden mit Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik (im Folgenden mit DDD bezeichnet) validiert. Dazu wird, wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, der Ensemblemittelwert über eine Anzahl von m statistisch äquivalenten Simulationen gebildet.

Für die quasi-kontinuierliche Theorie (I) wird untersucht, ob die eingeführte Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ (Gleichung (3.14)) die interne Spannung richtig abbildet, sodass Versetzungsaufstaus der Ensemblemittelwerte reproduziert werden.

Für die kontinuierliche Theorie (II) mit der Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{c}}$ (Gleichung (3.27)) liegt der Schwerpunkt auf der Analyse des Einflusses der Auflösung des Systems. Eine Voraussetzung für die Formulierung einer konsistenten Kontinuumstheorie ist, dass eine Vergrößerung des Systems keinen Einfluss auf das Ergebnis des Systems hat.

5.1.1. Modellierung mittels diskreter Gleitebenen (I)

Abbildung 5.1 zeigt die Konfiguration der diskreten Versetzungsdynamik (links) und die Modellierung mit dem quasi-kontinuierlichen System (rechts). Für die diskrete Verset-

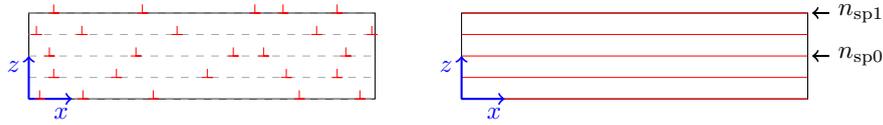


Abbildung 5.1: Die Konfiguration der diskreten Versetzungsdynamik (links) und der quasi-kontinuierlichen Theorie (rechts). Für die diskrete Versetzungsdynamik werden n positive Versetzungen zufällig auf n_{sp} diskreten Gleitebenen verteilt.

zungsdynamik werden zufällig $n = 400$ positive Versetzungen auf den diskreten Gleitebenen auf dem Gebiet $L \times H$ mit $L = 8H$ verteilt und das System wird ohne externe Spannung relaxiert ($\tau_{\text{ext}} = 0$ MPa). Das Gebiet wird als Einbettung in einem unendlichen Medium modelliert und die Ränder des Gebietes sind undurchlässig für Versetzungen. Die Gleitrichtung ist horizontal im System ausgerichtet und die Anzahl der Gleitebenen n_{sp} wird variiert (in Abbildung 5.1 ist beispielhaft $n_{\text{sp}} = 5$ gewählt). Für die Kontinuumstheorie wird eine homogene Dichte von statistisch gespeicherten Versetzungen

$$\rho = \kappa = \frac{n}{n_{\text{sp}}L} \quad (5.1)$$

für $n = 400$ Versetzungen auf $n_{\text{sp}} = 3, 5$ und 9 diskreten Gleitebenen verteilt.

Abbildung 5.2 stellt die Ergebnisse auf der mittleren und der oberen Gleitebene, wie in Abbildung 5.1 mit $n_{\text{sp}0}$ und $n_{\text{sp}1}$ bezeichnet, dar. Die Ergebnisse sind an der x - und der y - Achse des Systems symmetrisiert und die Hälfte der Gleitebenen von $[0, L/2]$ ist dargestellt. Die Ergebnisse sind auf die mittlere Versetzungsdichte $\rho_t = n/L$ normalisiert. Mit den gestrichelten Linien werden die Ensemblemittelwerte von $m = 10$ diskreten Simulationen abgebildet. Neben dem Versetzungsaufstau am Rand des Gebietes ($x < 0.1L$) und

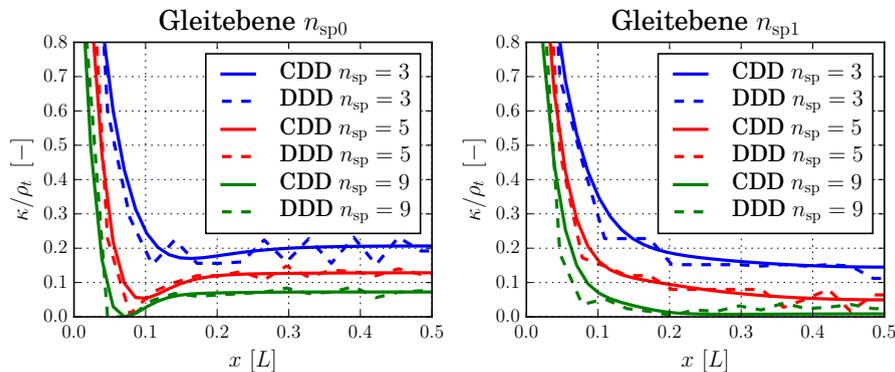


Abbildung 5.2: Vergleich der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte der diskreten Simulationen und der Kontinuumstheorie für unterschiedliche Anzahl von Gleitebenen n_{sp} . Die Ergebnisse der mittleren Gleitebene (bez. mit $n_{\text{sp}0}$) und oberen Gleitebene (bez. mit $n_{\text{sp}1}$) sind dargestellt.

dem Plateau in der Mitte des Gebietes ($0.2L < x < 0.5L$) ist auf der mittleren Gleitebene ein lokales Minimum der Versetzungsdichte im Bereich von $0.05L < x < 0.2L$ zu beobachten. Mit steigender Anzahl an Gleitebenen n_{sp} wird der Gradient des Versetzungsaufstaus immer größer und das lokale Minimum der Versetzungsdichte geht gegen 0. Für $n_{\text{sp}} = 9$ Gleitebenen bildet sich eine versetzungsfreie Zone.

Die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamik lassen sich mit der quasi-kontinuierlichen Theorie reproduzieren. Die wichtigsten Charakteristika sind der Gradient des Versetzungsaufstaus, der unabhängig von der Anzahl der Gleitebenen richtig abgebildet wird, das lokale Minimum der Versetzungsdichte und der homogene Bereich der Versetzungsdichte in der Mitte des Gebiets.

5.1.2. Modellierung mittels homogenisierter Gleitebenen (II)

Für die Validierung des kontinuierlichen Systems mit homogenisierten Gleitebenen mittels diskreter Versetzungsdynamiksimulationen, werden n Versetzungen zufällig auf dem gesamten Gebiet $L \times H$ mit $L = 8H$ verteilt. Es wird zwischen dem Fall einer polarisierten Versetzungsdichte mit Versetzungen eines Vorzeichens und einer nicht-polarisierten Versetzungsdichte mit der gleichen Anzahl an positiven und negativen Versetzungen unterschieden. In beiden Fällen ist das Gebiet in ein unendliches elastisches Medium eingebettet und der Rand des Gebietes ist undurchlässig für Versetzungen. Abbildung 5.3 stellt das Setup der diskreten Versetzungsdynamik und der Kontinuumstheorie dar.

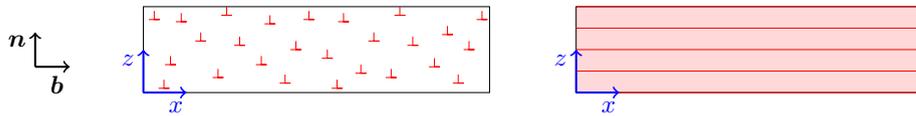


Abbildung 5.3: Setup der diskreten Versetzungsdynamik (links) und des kontinuierlichen Modells (rechts). Die Versetzungen der diskreten Simulationen werden zufällig auf dem gesamten Gebiet verteilt.

Polarisierte Dichte

Abbildung 5.4 zeigt den Ensemblemittelwert über $m = 200$ diskrete Simulationen. Die resultierende Versetzungsdichte ist um x - und z -Achse symmetrisiert und die Hälfte des Gebietes $[0, L/2]$ ist dargestellt. Das Ergebnis ist auf die mittlere Versetzungsdichte normiert und mit einer Auflösung von $h_* = H/32$ dargestellt. Die Charakteristika, die für den quasi-kontinuierlichen Fall für $n_{\text{sp}} = 9$ zu beobachten sind, werden auch hier beobachtet. Am Rand des Gebietes bildet sich eine Versetzungswand bestehend aus 25% der Versetzungen, der sich eine versetzungsfreie Zone anschließt. Im homogenen Bereich in der Mitte des Gebietes ist zu sehen, dass sich die Versetzungen in Form von Versetzungswänden anordnen.

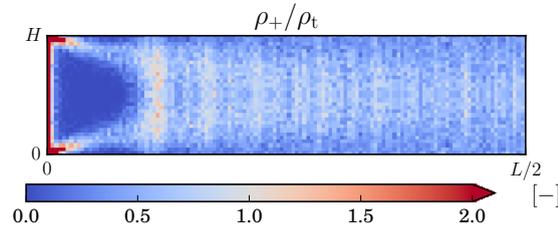


Abbildung 5.4: Der Ensemblemittelwert der positiven Versetzungsdichte ρ_+ aus $m = 200$ diskreten Simulationen von $n = 400$ positiven Versetzungen. Das Ergebnis ist entlang der x - und der y -Achse symmetrisiert und bezüglich der mittleren Versetzungsdichte ρ_t normalisiert. Es wird nur die Hälfte des Gebietes $[0, L/2]$ dargestellt.

Für die kontinuierliche Theorie wird eine homogene Anfangsverteilung

$$\rho = \kappa = \frac{n}{LH} \quad (5.2)$$

angenommen. Abbildung 5.5 zeigt die Ergebnisse des Ensemblemittelwertes aus Abbildung 5.4 (linke Spalte) und der kontinuierlichen Theorie (rechte Spalte) für unterschiedliche Auflösung $h_* = h_k$ wobei $h_k = 2^{-k}H$ mit $k = 2, 3, 4$ gewählt ist. Das Vergrößern des Ensemblemittelwertes ρ_+ zeigt, dass die Ausdehnung der Versetzungswand mit der Auflösung des Systems korreliert und dass die versetzungsfreie Zone verschmiert. Die kontinuierliche Theorie zeigt ein ähnliches Verhalten bzgl. der Versetzungswand am Rand. Die Breite der versetzungsfreien Zone des kontinuierlichen Systems ist nahezu unabhängig von der Auflösung h_* und wird um die Breite der Versetzungswand am Rand verschoben.

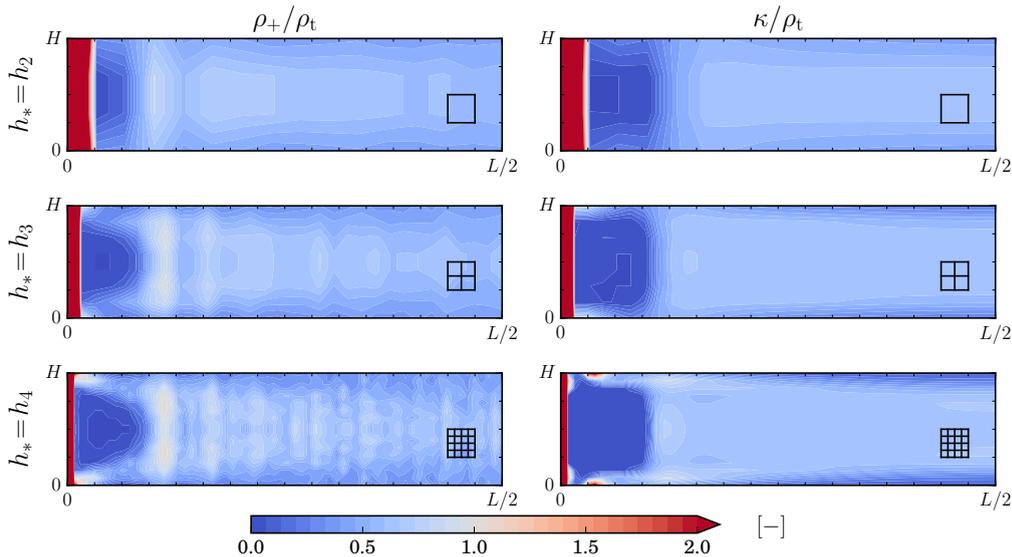


Abbildung 5.5: Vergleich des Ensemblemittelwertes ρ_+ (linke Spalte) mit der relaxierten Versetzungsdichte κ des kontinuierlichen Systems (rechte Spalte) für unterschiedliche Auflösungen $h_* = h_k$ für $h_k = 2^{-k}H$ mit $k = 2, 3, 4$.

Prinzipiell werden die Charakteristika der diskreten Simulationen unabhängig von der Auflösung h_* reproduziert: eine Versetzungswand am Rand, die versetzungsfreie Zone und der homogene Bereich in der Mitte des Gebiets.

Um ein genaueres Verständnis über den Fehler der Formulierung der internen Spannung zu erhalten, wird der Residuumsfluss des Ensemblemittelwertes ρ_+ bzgl. des Konstitutivgesetzes des kontinuierlichen Systems (Gleichung (3.28)) berechnet.

Die Residuums geschwindigkeit

$$v_{\text{residuum}}(\rho_+) = bB^{-1}\tau_{\text{res}}(\bar{\rho}_+) \quad (5.3)$$

wird als die Versetzungsgeschwindigkeit definiert, die das Konstitutivgesetz aus dem Ensemblemittelwert ρ_+ der diskreten Simulationen berechnet. Da der Ensemblemittelwert den relaxierten Zustand des Systems beschreibt, kann die Residuums geschwindigkeit als der Fehler des homogenisierten Konstitutivgesetzes interpretiert werden. Da der Einfluss dieses Fehlers von der Verteilung der Versetzungsdichte abhängt, wird aus der Residuums geschwindigkeit der Residuumsfluss

$$f_{\text{residuum}}(\rho_+) = \frac{\rho_+ v_{\text{residuum}}(\rho_+)}{\max |f_{\text{init}}(\rho_t)|} \quad (5.4)$$

berechnet. Der Residuumsfluss ist auf den maximalen Anfangsfluss f_{init} normalisiert. Abbildung 5.6 zeigt den Residuumsfluss abhängig von der Auflösung des Systems. Der Fehler am Übergang von der versetzungsfreien Zone zum homogenen Bereich in der Mitte wird mit zunehmender Auflösung kleiner und der Fehler an der Versetzungswand am Rand

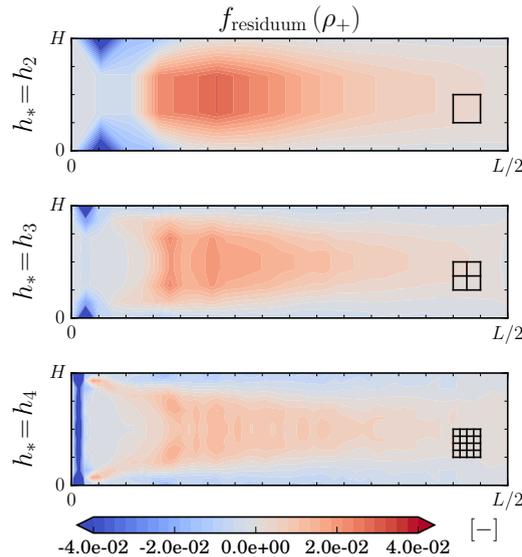


Abbildung 5.6: Der Fehler der Formulierung der internen Spannung gemessen durch den Residuumsfluss f_{residuum} des Ensemblemittelwertes ρ_+ für unterschiedliche Auflösungen bzgl. des Konstitutivgesetzes in Gleichung (3.28)).

nimmt zu. Insgesamt bleibt der Fehler in der Mitte des Gebietes unabhängig von der Auflösung zwischen 2% und 3%. Der Fehler am Rand nimmt für höhere Auflösungen von 24% für h_4 auf 8% für h_2 ab.

h_*	$\ \tau_{\text{nfc}}^c\ /\ \tau_{\text{res}}(t_0)\ $	n_{sp}	$\ \tau_{\text{nfc}}^d\ /\ \tau_{\text{res}}(t_0)\ $
h_2	2.6 %	3	13.8 %
h_3	1.8 %	5	11.2 %
h_4	1.1 %	9	5.4 %

Tabelle 5.1.: Anteil der Nahfeldkorrekturen τ_{nfc}^c und τ_{nfc}^d an der Relaxierung der Anfangsspannung $\tau_{\text{res}}(t_0)$ abhängig von der Auflösung h_* und der Anzahl der Gleitebenen n_{sp} .

Um den Unterschied zwischen der quasi-kontinuierlichen und der kontinuierlichen Theorie hervorzuheben, wird der Anteil der Nahfeldkorrekturen τ_{nfc}^d und τ_{nfc}^c an der Relaxierung des jeweiligen Systems abhängig von der Auflösung bzw. der Anzahl der Gleitebenen untersucht. Tabelle 5.1 zeigt die Ergebnisse bzgl. der Norm

$$\|\tau\| := \int_{\Omega_{\text{SP}}} |\tau(\mathbf{x})| d\mathbf{x}. \quad (5.5)$$

Je größer die Auflösung des kontinuierlichen Systems und je mehr Gleitebenen im quasi-kontinuierlichen System zu finden sind, desto kleiner wird der Beitrag der Nahfeldkorrekturen.

Nicht-polarisierte Dichte

Um die Kontinuumstheorie für den Fall einer nicht-polarisierten Dichte anwenden zu können, muss eine Formulierung zur Bildung von Dipolen berücksichtigt werden. Dickel et al. (2014) schlagen dazu eine Unterteilung der Gesamtversetzungsdichte in einen Anteil bestehend aus statistisch gespeicherten und geometrisch notwendigen Versetzungen und einen Anteil bestehend aus Dipolen vor. Aus dem Modell der freien Weglängen ergibt sich die Bildungsrate der Dipoldichte als

$$\partial_t \rho_{\text{dipol}} = \frac{\mu |\mathbf{b}|^2}{4\pi B(1-\nu)} (\rho^2 - \kappa^2). \quad (5.6)$$

Die vollständige Mikrostruktur ist durch $\{\rho, \kappa, \rho_{\text{dipol}}\}$ gegeben, wobei das Gleichungssystem

$$\partial_t \rho = -\partial_1 (\kappa v) - \partial_t \rho_{\text{dipol}} \quad (5.7)$$

$$\partial_t \kappa = -\partial_1 (\rho v). \quad (5.8)$$

die Dipolbildungsrate berücksichtigt. Dieser Ansatz basiert auf der Annahme von immobilen Dipolen und berücksichtigt nicht deren Aufbrechen. Jeweils $n/2$ positive und negative

Versetzungen werden zufällig auf dem Gebiet $L \times H$ mit $L = H/16$ verteilt. Für die kontinuierliche Theorie ist die Anfangsbedingung durch

$$\kappa = 0, \quad \rho = n/LH \quad \text{und} \quad \rho_{\text{dipol}} = 0 \quad (5.9)$$

gegeben. Das Gebiet ist in ein unendliches elastisches Medium eingebettet und der Rand des Gebietes ist undurchlässig für Versetzungen. Die Anzahl der Versetzungen $n = 8, 16, 32$ wird entsprechend mit der externen Spannung $\tau_{\text{ext}} = 5.97 \mu b/L, 11.94 \mu b/L$ und $23.88 \mu b/L$ variiert, so dass eine Verdopplung der Anzahl der Versetzungen einer Verdopplung der externen Spannung entspricht. Die externe Spannung

$$\tau_{\text{ext}} = \frac{n \mu b}{2(1 - \nu)L} \quad (5.10)$$

ist so gewählt, dass n Versetzungen auf einer diskreten Gleitebene einen doppelten Versetzungsaufstau bilden (Hirth und Lothe, 1982).

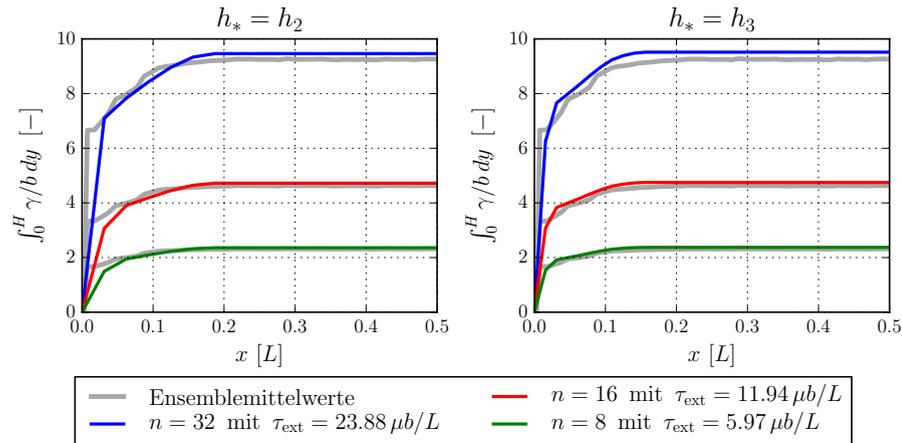


Abbildung 5.7: Die akkumulierte plastische Dehnung entlang der Gleitebene des kontinuierlichen Systems im Vergleich zu Ensemblemittelwerten aus Dickel et al. (2014) für unterschiedliche Auflösungen h_* .

Abbildung 5.7 zeigt die akkumulierte plastische Verzerrung integriert über die Höhe des Gebietes als die Anzahl der abscherenden Versetzungen. Die Dehnungsprofile der Ensemblemittelwerte skalieren linear mit der Anzahl der Versetzungen und der externen Spannung. Innerhalb des Gebietes ergibt sich ein Fehler zwischen den Ensemblemittelwerten und der kontinuierlichen Theorie von 2% unabhängig von h_* . Am Rand des Systems ist der Verlauf des Gradienten (entspricht hier dem mittleren Versetzungsaufstau) durch die Auflösung des kontinuierlichen Systems beschränkt (vgl. Abbildung 5.7 für $h_* = h_2$ und $h_* = h_3$). Die mittlere Versetzungsaufstaulänge ist $0.15 L$.

5.1.3. Homogenisierte Gleitebenen unterhalb des Kontinuumslimits

Die Anzahl der Versetzungen des betrachteten Systems in Kapitel 5.1.1 und 5.1.2 ist so gewählt, dass sich die Simulationen näherungsweise im Kontinuumslimit befinden (vgl. Kapitel 5.4). In diesem Abschnitt wird der Einfluss der Anzahl der Versetzungen für $n < 400$ Versetzungen untersucht. Das Setup entspricht dem der kontinuierlichen Theorie für polarisierte Dichten in Kapitel 5.1.2.

Zur Modellierung eines kontinuierlichen Systems (vgl. Abbildung 3.1.1 (II)) und zur Charakterisierung des Einflusses der Anzahl der Versetzungen auf die Modellierung einer Kontinuumsformulierung werden zwei Ansätze untersucht. Die Formulierung der Nahfeldkorrektur

$$v_{(\text{II.a})} = bB^{-1} (\tau_{\text{es}} + \tau_{\text{nfc}}^c), \quad (5.11)$$

beschrieben in Gleichung (3.27) und im Folgenden bezeichnet als Model (II.a), wird verglichen mit der Rückspannungsformulierung von Groma et al. (2003)

$$v_{(\text{II.b})} = bB^{-1} (\tau_{\text{es}} + \tau_{\text{b}}) \quad (5.12)$$

mit der Rückspannung τ_{b} für $D = 0.8$ (Gleichung (2.38)), bezeichnet als Model (II.b). Der Wert für D ist für den Fall eines unendlichen Systems bestimmt und es gilt $\alpha = 0$, da $\tau_{\text{ext}} = 0$ ist (Groma et al., 2003). Der Unterschied der beiden Formulierungen hängt von der Anzahl der Versetzungen in einem gegebenen Mittelungsvolumen ab. Ist mehr als eine Versetzung in einem Mittelungsvolumen enthalten, so entspricht die Nahfeldkorrektur τ_{nfc}^c der Rückspannung τ_{b} mit einem Koeffizienten von $D = 1.047$. Falls weniger als eine Versetzung in einem Mittelungsvolumen enthalten ist, geht die Nahfeldkorrektur τ_{nfc}^c von einer homogenisierten Darstellung der Gleitebenen in eine diskrete Darstellung von Gleitebenen über. Die Nahfeldkorrektur τ_{nfc}^c entspricht dann einer numerischen Korrektur der Eigendehnungsformulierung, die das Spannungsfeld diskreter Gleitebenen beschreibt (vgl. Kapitel 3.1).

Zur Validierung der Konstitutivgesetze der Kontinuumsformulierungen, werden zunächst Ensemblemittelwerte aus diskreten Versetzungsdynamiksimulationen berechnet. Die Ensemblemittelwerte unterscheiden sich neben der Anzahl der Versetzungen n in der Anzahl der Simulationen m , wobei m so gewählt wird, dass $m \cdot n = 2 \cdot 10^4$ ist. Das führt dazu, dass alle Ensemblemittelwerten aus der gleichen Anzahl an Datenpunkten $n \cdot m$ berechnet werden. Die Ensemblemittelwerte werden genutzt, um den Residuumsfluss f_{residuum} der resultierenden Versetzungsdichten, wie in Gleichung (5.4) definiert, bzgl. der beiden Konstitutivgesetze zu vergleichen. Die Gleichung des Residuumsflusses vereinfacht sich zu

$$f_{\text{residuum}}(\rho_+, \tau_{\text{lokal}}) = \frac{\rho_+}{\rho_{\text{t}}} \frac{\tau_{\text{es}}(\rho_+) + \tau_{\text{lokal}}(\rho_+)}{\max |\tau_{\text{es}}(\rho_{\text{t}})|} \quad (5.13)$$

wobei τ_{lokal} ein Platzhalter für τ_{nfc}^c bzw. τ_{b} ist. In Abbildung 5.8 wird der Residuumsfluss der beiden Konstitutivgesetze (linke Spalte $\tau_{\text{lokal}} = \tau_{\text{nfc}}^c$ und rechte Spalte $\tau_{\text{lokal}} = \tau_{\text{b}}$) für $n = 400$ Versetzungen im Kontinuumslimit für unterschiedliche Auflösungen des Systems mit $h_k = 2^{-k}H$ verglichen.

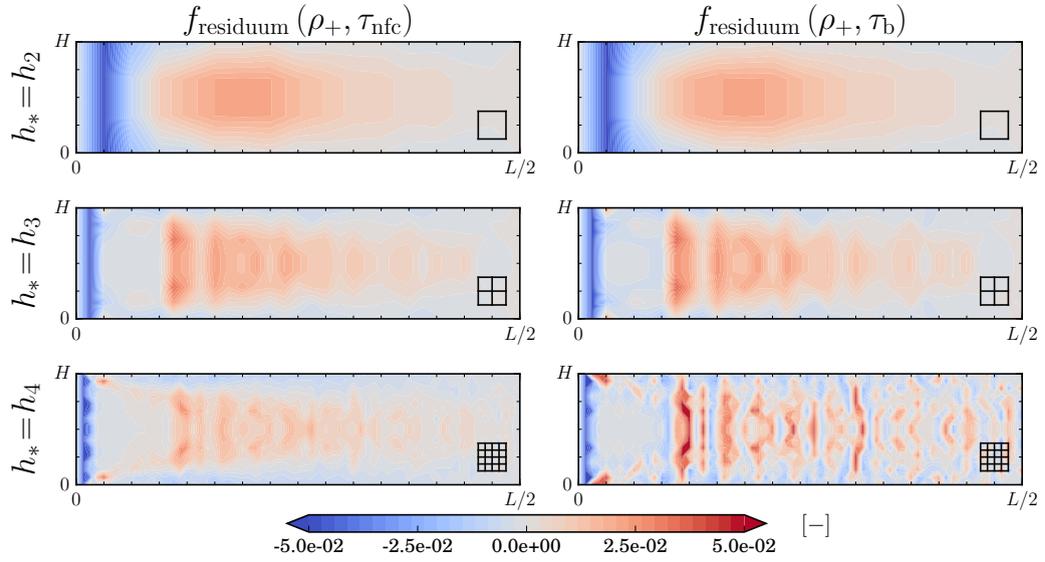


Abbildung 5.8: Der Vergleich von Konstitutivgesetz (II.a) mit Nahfeldkorrektur τ_{nfc}^c (linke Spalte) mit dem Konstitutivgesetz (II.b) mit Rückspannung τ_b (rechte Spalte) durch den Residuumsfluss des Ensemblemittelwertes für $n = 400$ für unterschiedliche Auflösung $h_* = h_k = 2^{-k}H$ für $k = 2, 3, 4$ (vgl. Abbildung 5.6). Die Gittergröße ist jeweils in der unteren rechten Ecke dargestellt.

Für $k = 2$ und 3 ist der Residuumsfluss der beiden Modelle nahezu identisch. Für $k = 4$ tritt eine Fluktuation des Residuumsflusses in Modell (II.b) auf. Für das Modell (II.a) ist das Maximum des Residuumsfluss innerhalb des Gebietes unabhängig von der Auflösung

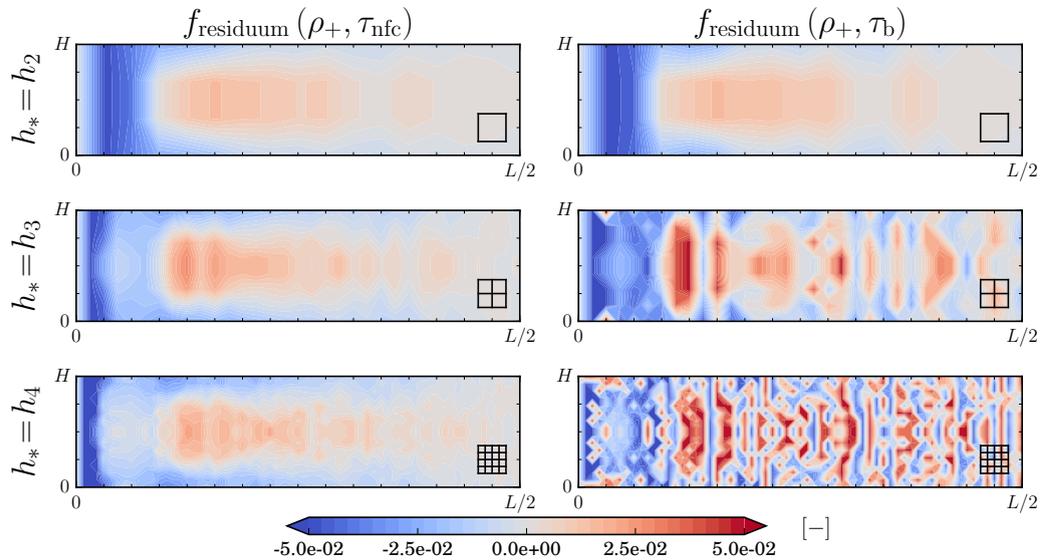
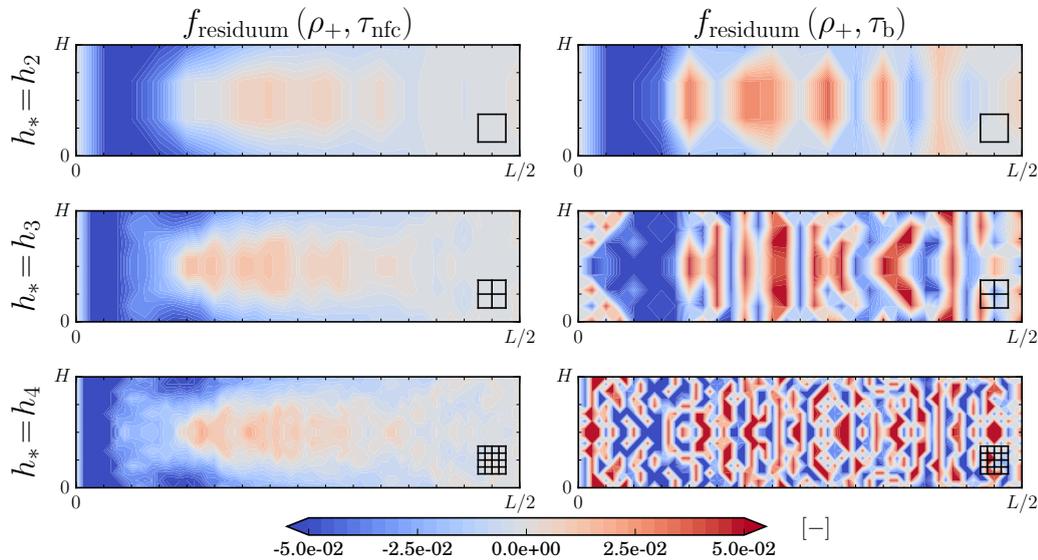


Abbildung 5.9: Wie Abbildung 5.8 für $n = 100$ Versetzungen.

Abbildung 5.10: Wie Abbildung 5.8 für $n = 25$.

des Systems. Abbildung 5.9 und 5.10 zeigen die gleichen Ergebnisse für $n = 100$ und $n = 25$ Versetzungen. Für $n = 100$ findet sich für $h_* = h_2$ für beide Modelle ein ähnlicher Residuumsfluss, während für $h_* < h_2$ Fluktuationen des Residuumsflusses von Modell (II.b) abhängig von der Auflösung h_* sichtbar werden. Für $n = 25$ zeigt sich dieser Effekt für alle untersuchten Auflösungen des Systems.

Insgesamt lässt sich beobachten, dass der Residuumsfluss der Nahfeldkorrektur (II.a) innerhalb des Gebietes unabhängig von der Auflösung und der Anzahl der Versetzungen ist. Für den Residuumsfluss der Rückspannungsformulierung (II.b) gilt, dass dieser mit abnehmender Anzahl von Versetzungen n und zunehmender Auflösung h_* stärker werdende Fluktuationen aufweist. Im Bereich der versetzungsfreien Zone am Rand nimmt der Residuumsfluss mit abnehmender Anzahl der Versetzungen für beide Modelle zu.

h_*	$n = 400$	$n = 100$	$n = 25$
h_2	1.56	0.39	0.098
h_3	0.39	0.098	0.024
h_4	0.098	0.024	0.006

Tabelle 5.2.: Die mittlere Anzahl der Versetzung pro Mittelungsvolumen für die Anfangsverteilung von n Versetzungen mit einer Systemauflösung von h_* .

Um die Fluktuation des Residuumsflusses der Rückspannungsformulierung (II.b) verstehen zu können, wird die mittlere Anzahl der Versetzungen abhängig von der Auflösung des Systems verglichen (Tabelle 5.2). Die Ergebnisse zeigen einen Zusammenhang zwischen der mittleren Anzahl der Versetzungen pro Mittelungsvolumen und der Fluktuation des Residuumsflusses der Rückspannungsformulierung (II.b): für eine mittlere Anzahl von weniger als 0.39 Versetzungen pro Mittelungsvolumen werden Fluktuationen sichtbar.

5.1.4. Eigendehnungsformulierung geneigter Gleitebenen

Bei der bisherigen Verwendung der Eigendehnungsformulierung, hat die Orientierung der Diskretisierung mit der kristallographischen Orientierung übereingestimmt. Für eine beliebige Orientierung der Diskretisierung bzgl. der kristallographischen Orientierung ergibt sich im Allgemeinen ein effektiver Gradient der plastischen Dehnung innerhalb der Gleitebene, der nicht von geometrisch notwendigen Versetzungen verursacht wird. Lemarchand et al. (2001) schlagen für eine allgemeine Orientierung der Gleitsysteme eine passende Projektion der Eigendehnung auf das zugrundeliegende Gitter vor. Um eine homogenisierte Eigendehnung zu erhalten, wird die Homogenisierungsgröße größer als die Auflösung des Systems gewählt. Jamond et al. (2016) untersuchen die Homogenisierung abhängig von verschiedenen Implementierungen einer Finiten-Elemente-Methode. Der numerische Fehler der Projektion der Eigendehnung tritt in Bereichen auf, in denen die plastische Dehnung einen Gradienten innerhalb der Gleitebenen induziert, der nicht durch geometrisch notwendige Versetzungen verursacht ist. Der Gradient wird durch eine nicht konforme Approximation der plastischen Dehnung durch die Diskretisierung verursacht.

Im Allgemeinen kann die projizierte Eigendehnung nicht durch die Diskretisierung der Finiten-Elemente-Methode abbildet werden und es wird ein Fehler unbekannter Größe induziert. Dieser Fehler wird umso kleiner, je glatter die Approximation der Eigendehnung senkrecht zur Gleitebene gewählt wird (siehe Jamond et al., 2016). Für die Entwicklung einer physikalischen Kontinuumstheorie ist dies keine sinnvolle Grundlage, da der Grad der Lokalisierung höchstens durch die Auflösung des Systems nach unten beschränkt sein sollte.

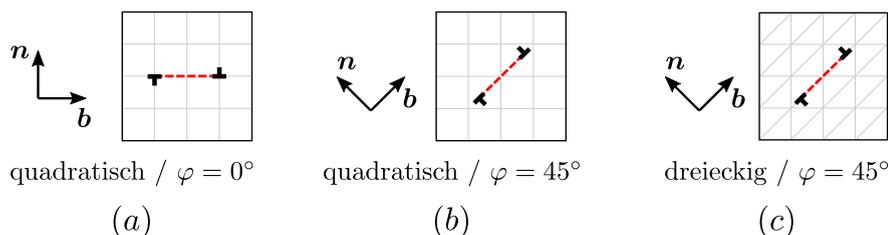


Abbildung 5.11: Drei verschiedene Fälle für die Modellierung der Eigendehnungsformulierung. (a) und (c) sind so gewählt, dass mindestens eine Kante der gewählten Elemente senkrecht zur Gleitebenennormalen orientiert ist.

Aus diesem Grund wird im Folgenden das Problem der Modellierung geneigter Gleitebenen auf unterschiedlichen Gittern untersucht. Der einfachste Fall einer starken Lokalisierung sind zwei von einer Quelle emittierte Versetzungen, die jeweils eine Strecke $d/2$ auf der gleichen Gleitebene zurückgelegt haben. In Abbildung 5.11 werden 3 Fälle unterschieden. φ beschreibt den Neigungswinkel des Gleitsystems und "quadratisch" bzw. "dreieckig" bezieht sich auf die Art der Elemente.

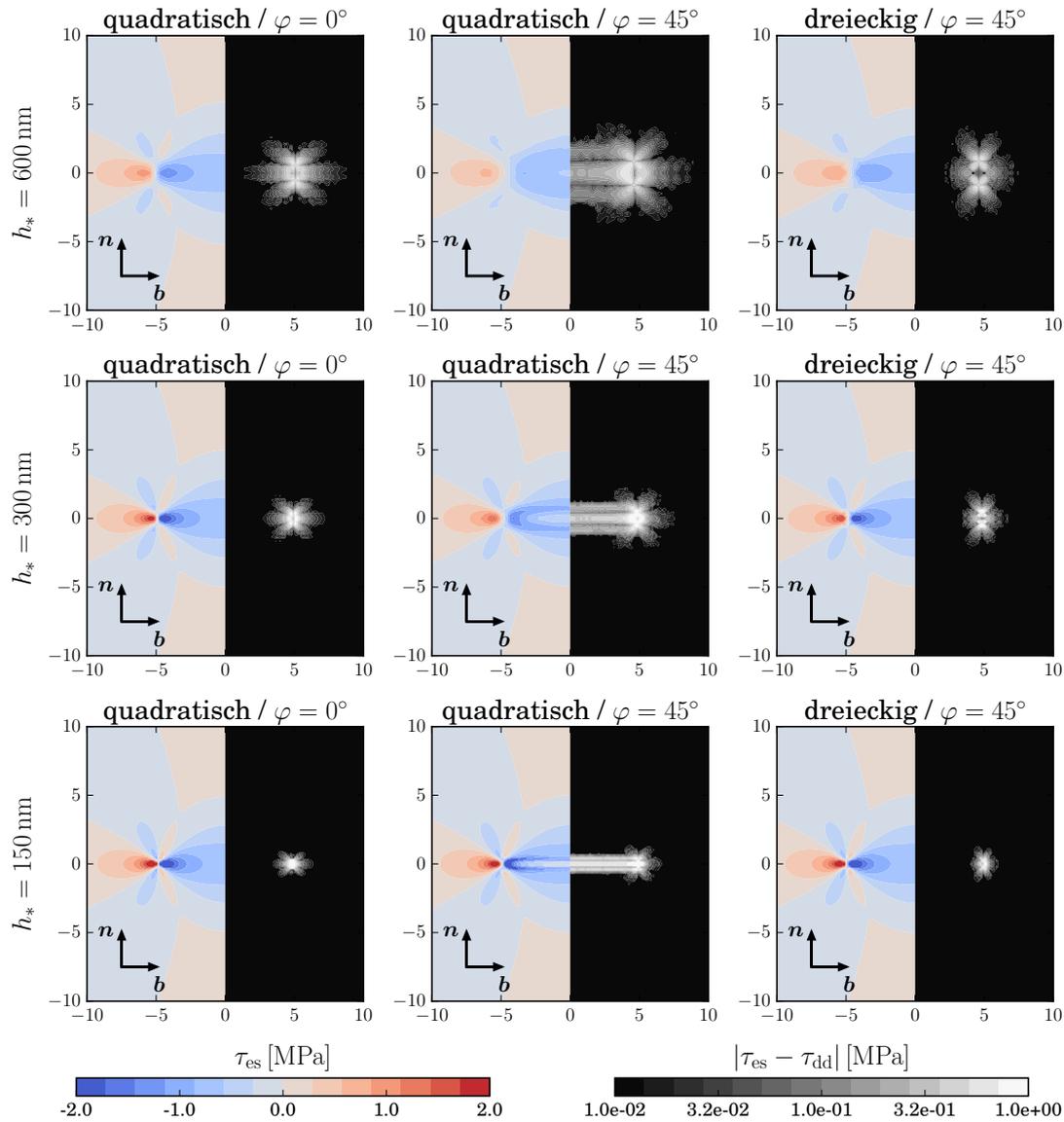


Abbildung 5.12: Jeweils die linke Abbildungshälfte zeigt das resultierende Spannungsfeld der unterschiedlichen Modellierungen aus Abbildung 5.11 in Farbe und die rechte Abbildungshälfte den Fehler des Spannungsfeldes in Graustufen mit logarithmischer Skala. Der Fehler wird mittels der Analogie zwischen einer Stufenversetzung und einem Disklinationsdipol definiert als der Fehler zwischen dem resultierenden Spannungsfeld der Eigendehnungsformulierung und dem Spannungsfeld eines Disklinationsdipols (vgl. Appendix A). Die Systemauflösung wird mit $h_* = 150, 300$ und 600 nm variiert.

Fall (a) beschreibt den Aufbau, der in Abschnitt 5.1 verwendet wurde - die Diskretisierung ist am Gleitsystem ausgerichtet. Fall (b) beschreibt die gleiche Diskretisierung mit einem geneigten Gleitsystem für $\varphi = 45^\circ$. Fall (c) beschreibt eine geneigte Gleitebene mit $\varphi = 45^\circ$ mit einer Diskretisierung bestehend aus Dreiecken. Diese ist so gewählt, dass eine Elementkante jedes Dreieckes senkrecht zur Gleitebenennormalen ausgerichtet ist. Im Folgenden wird Fall (a) und (c) als konforme Diskretisierung bezeichnet und Fall (b) als nicht-konform.

Abbildung 5.12 zeigt das resultierende Spannungsfeld der unterschiedlichen Modellierungen in Farbe und den Fehler des Spannungsfeldes in Graustufen mit logarithmischer Skala. Der Fehler wird mittels der Analogie zwischen einer Stufenversetzung und einem Disklinationsdipol definiert als der Fehler zwischen dem resultierenden Spannungsfeld der Eigenformulierung und dem Spannungsfeld eines Disklinationsdipols (vgl. Appendix A). Da das Spannungsfeld in diesem Fall symmetrisch ist, wird jeweils nur die Hälfte des Systems gezeigt. Zusätzlich wird die Systemauflösung mit $h_* = 150, 300$ und 600 nm variiert. Das Spannungsfeld des Disklinationsdipols wird durch die Dipolhöhe beeinflusst, die entsprechend der Auflösung des Systems gewählt ist. Die Ergebnisse der konformen Diskretisierungen weisen entlang des abgescherten Bereichs, also bei konstanter plastischer Dehnung, keinen Fehler auf, während die nicht-konforme Diskretisierung einen Fehler, wie bereites von Jamond et al. (2016) beobachtet, aufweist. Der Vollständigkeit halber ist der relative Fehler in Anhang B abgebildet.

Für die folgenden Simulationen des Quellmodells und der Mikrobiegung wird eine konforme Diskretisierung gewählt, sodass eine Lokalisierung in der Größenordnung der Systemauflösung korrekt abgebildet werden kann. Da für die gewählte kristallographische Orientierung in Kapitel 5.3 zwei Gleitsysteme modelliert werden, muss in jedem Zeitschritt je ein elastisches Problem pro Gleitsystem gelöst werden.

5.2. Quellmechanismus

Zur Validierung des in Kapitel 3.2 eingeführten homogenisierten Quellmechanismus, wird ein Zugversuch mit einem um 45° geneigten Gleitsystem durchgeführt. Abbildung 5.13 zeigt den Simulationsaufbau. Es werden Simulationen einer diskreten Quellverteilung mit einer diskreten Quelle in der Mitte des Balkens und Simulationen einer homogenen Quellverteilung verglichen. Das Ziel ist es, zum einen, die obere Grenze der globalen Quellaktivierungsrate (Gleichung (3.35)) zu validieren und zum anderen, den Übergang von diskreten Quellen hin zu einer homogenen Quellverteilung zu untersuchen. Diese beiden Konfigurationen beschreiben die Extremfälle, die es für die Beschreibung einer versetzungs-basierten Kontinuumstheorie zu berücksichtigen gilt.

Die Oberflächen in Zugrichtung sind undurchlässig für Versetzungen und die Oberflächen parallel zur Zugrichtung werden entweder als offen oder als undurchlässig für Versetzungen modelliert. Die gewählten Materialparameter sind durch $L = 4H$, $E = 72.7$ GPa, $\nu = 0.347$, $b = 0.286$ nm und $\varphi = 45^\circ$ gegeben. Die Höhe H des Balkens wird variiert. Der linke Rand ist in x -Richtung fixiert und die neutrale Faser des Balkens am linken Rand ist zusätzlich in y -Richtung fixiert. Es wird eine Dehnrate von $\dot{\epsilon}_{\text{ext}} = 5 \cdot 10^{-3} \mu\text{s}^{-1}$ aufgeprägt.

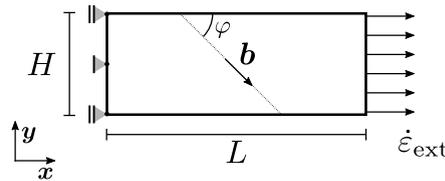


Abbildung 5.13: Simulationsaufbau zur Validierung des homogenisierten Quellmechanismus.

Um den Quellmechanismus zu validieren, werden keine Versetzungsreaktionen und keine Versetzungswechselwirkungen außer der Eigendehnungsformulierung τ_{es} und der Nahfeldkorrektur τ_{nfc}^c berücksichtigt. Im Fall einer diskreten Quelle wird die Nahfeldkorrektur τ_{nfc}^d gewählt.

5.2.1. Diskrete Quellverteilung

Die Ergebnisse der Simulationen mit dem homogenisierten Quellmodell für eine diskrete Quelle werden mit Ergebnissen eines diskreten Quellmodells verglichen. Für das diskrete Quellmodell wird beim Überschreiten der kritischen Spannung ein positive und eine negative Versetzung emittiert (es ist keine Produktionsrate vorgeschrieben). Die Produktionsrate ergibt sich ausschließlich aus den Spannungswechselwirkungen. Aufgrund der Auflösung sind diese Ergebnisse vergleichbar mit Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik. Die kritische Schubspannung wird als $\tau_{\text{krit}} = 60$ MPa festgelegt. Aus Gleichung (3.35) des homogenisierten Quellmodell errechnet sich eine maximale globale Quellaktivierungsrate

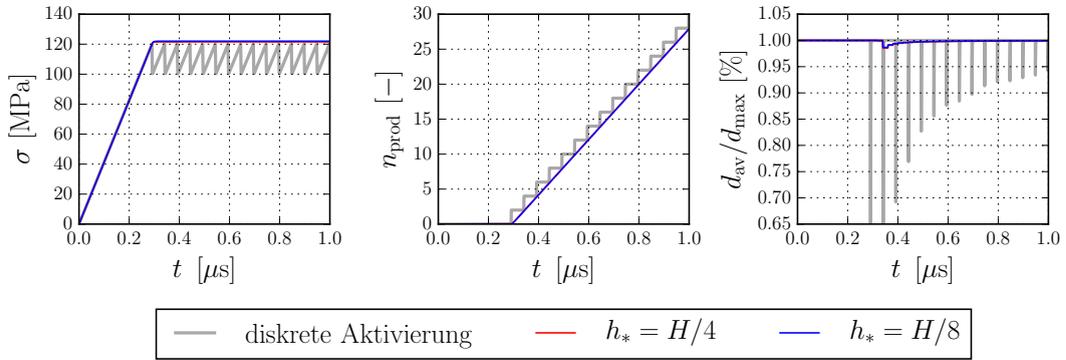


Abbildung 5.14: Die Simulationsergebnisse des homogenisierten Quellmodells mit einer diskreten Quelle in der Mitte des Systems mit offenen Rändern parallel zur Zugrichtung. Die Auflösung h_* des Systems wird variiert und mit einer Simulation des diskreten Quellmodells verglichen.

von $\dot{\xi}_{\text{prod}} = 19.78 \mu\text{s}^{-1}$ für $H = 0.2 \mu\text{m}$ für $d_{\text{av}} = d_{\text{max}}$, wobei d_{max} der halben maximalen Gleitebenenlänge entspricht. Abbildung 5.14 zeigt die Normalspannung σ , die Anzahl der produzierten Versetzungen n_{prod} und die normierte mittlere Weglänge der Versetzungen $d_{\text{av}}/d_{\text{max}}$ für den Fall von offenen Rändern. Für die Ergebnisse des diskreten Quellmodells werden zwischen $t = 0.5 \mu\text{s}$ und $1 \mu\text{s}$ 10 Quellaktivierungen beobachtet. Das entspricht ungefähr der vorhergesagten Produktionsrate von $\dot{\xi}_{\text{prod}} = 19.78 \mu\text{s}^{-1}$. Die mittlere Weglänge ist für das homogenisierte Quellmodell nahezu konstant und spiegelt das vollständige Abscheren des Balkens wider.

Für undurchlässige Ränder ist eine Verfestigung mit abnehmender Auflösung des Systems zu beobachten (Abbildung 5.15). Dazu tragen zwei Aspekte bei: zum einen nimmt die mittlere Weglänge von ungefähr 80% auf 76% ab und zum anderen verringert sich die Anzahl der produzierten Versetzungen um ungefähr 30%.

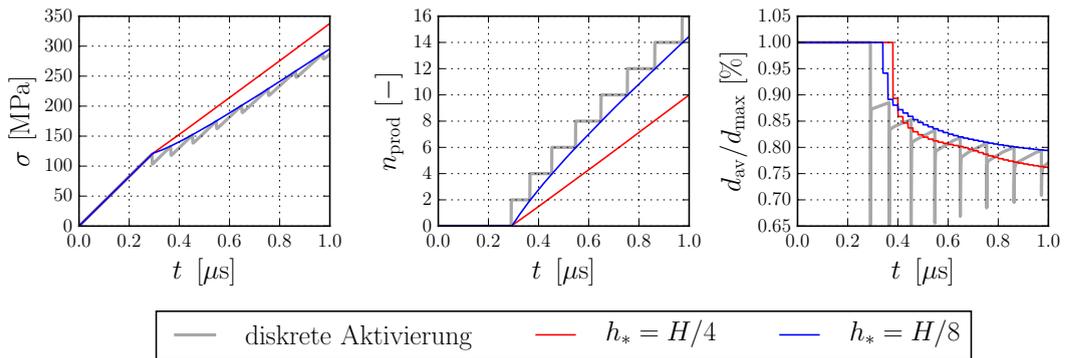


Abbildung 5.15: Wie Abbildung 5.14, aber für undurchlässige Ränder.

5.2.2. Homogene Quellverteilung

Für den beschriebenen Simulationsaufbau wird jetzt eine homogene Quellverteilung angenommen, so dass in jedem Mittelungsvolumen Versetzungsdichte produziert werden kann. Die Abmessung des Systems sind durch $H = 0.25 \mu\text{m}$ gegeben. Für die Simulationen mit offenen Rändern parallel zur Zugrichtung, werden 2 unterschiedliche Verteilungen der Quelle berücksichtigt.

Für den ersten Aufbau werden Quellen überall außer im letzten Element an den Rändern in Zugrichtung verteilt. Der zweite Aufbau ist so gewählt, dass alle produzierten Versetzungen ohne an einen undurchdringlichen Rand zu stoßen das System verlassen können. Die Ergebnisse des zweiten Aufbaus sind durch die gestrichelten Linien und die Ergebnisse des erste Aufbaus durch eine durchgezogene Linien in Abbildung 5.16 abgebildet.

Die produzierte Dichte ρ_{prod} und die mittleren Weglänge d_{av} der Versetzungen unterscheiden sich um ungefähr 5,5% zwischen den unterschiedlichen Quellverteilungen bei einer

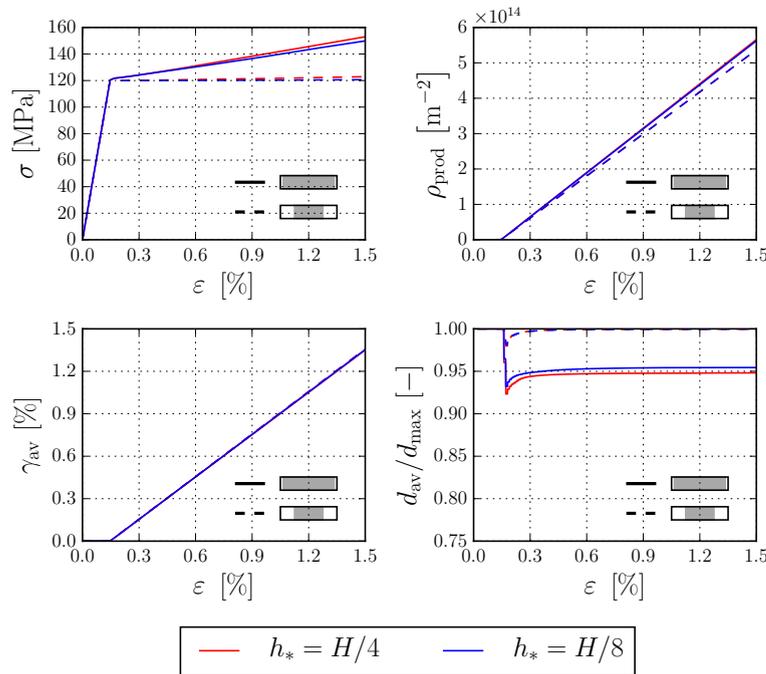


Abbildung 5.16: Die Ergebnisse der Normalspannung σ , der akkumulierten Dichteproduktion ρ_{prod} , der mittleren plastischen Dehnung γ_{av} und der normalisierten Weglänge der Versetzungen $d_{\text{av}}/d_{\text{max}}$ für die Simulationen mit homogener Quellverteilung und offenen Rändern parallel zur Zugrichtung. Zwei Fälle werden unterschieden: eine homogene Verteilung überall bis auf die letzte Elementreihe an den Rändern in Zugrichtung (durchgezogene Linien) und eine homogene Verteilung auf den mittleren $0.5L$ des Systems, so dass alle produzierten Versetzungen das System verlassen können (gestrichelte Linien). Die Auflösung h^* des Systems wird variiert.

Gesamtdehnung von $\varepsilon = 1.5\%$. Für den ersten Aufbau ist eine Verfestigung bei gleicher mittlerer plastischer Dehnung γ_{av} zu beobachten.

Die Ergebnisse des gleichen Systems mit undurchlässigen Rändern sind in Abbildung 5.17 dargestellt. Es wird eine homogene Quellverteilung bis die letzte Elementreihe an den Rändern in Zugrichtung für unterschiedliche Auflösungen h^* des Systems untersucht. Bei größerer Auflösung zeigt sich makroskopisch eine größere Verfestigung. Dabei beträgt die Differenz der produzierten Dichte ρ_{prod} ungefähr $3.1 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$, der mittleren plastischen Dehnung γ_{av} ungefähr 0.07% und der Weglänge d_{av} der Versetzungen ungefähr 5.3% für eine Gesamtdehnung von $\varepsilon = 1.5\%$. Für die gröbere Auflösung $h_* = H/4$ ist bei ungefähr 0.7% Dehnung ein Übergang von einem höheren Verfestigungsmodul zu einem niedrigeren Verfestigungsmodul zu beobachten.

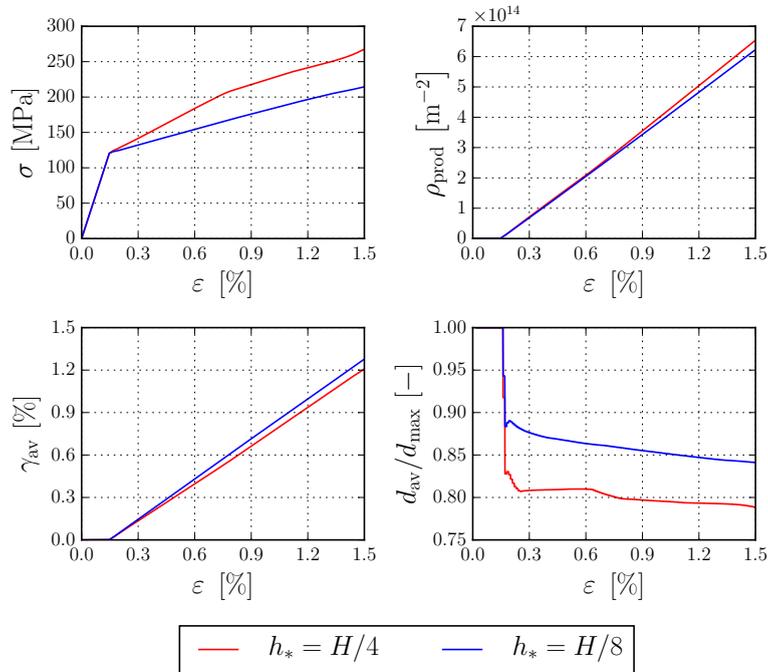


Abbildung 5.17: Wie Abbildung 5.16, aber mit undurchdringlichen Rändern und einer homogenen Quellverteilung bis auf in die letzte Elementreihe an den Rändern in Zugrichtung.

5.2.3. Größeneffekt

Für das oben beschriebene System mit undurchdringlichen Rändern und einer homogenen Quellverteilung wird der Einfluss der Größe des Systems für eine konstante Auflösung $h^* = konst.$ untersucht. Die Größe wird für $H = 0.25 \mu\text{m}$, $0.5 \mu\text{m}$ und $1 \mu\text{m}$ variiert. Der resultierende Größeneffekt der Verfestigung ist in Abbildung 5.18 dargestellt. In Tabelle 5.3 sind die Werte der Normalspannung σ , der produzierten Versetzungsdichte ρ_{prod} , der mittleren plastischen Dehnung γ_{av} und der normalisierten Weglänge der Versetzungen

d_{av}/d_{max} für eine Gesamtdehnung von $\varepsilon = 1.5\%$ gegeben. Aus der mittleren Weglänge d_{av} lässt sich der Abstand

$$\tilde{d} = \frac{H}{2 \sin \varphi} \left(1 - \frac{d_{av}}{d_{max}} \right) \quad (5.14)$$

des Schwerpunktes des Versetzungsaufstaus vom Rand des Gebietes abschätzen. \tilde{d} wird mit zunehmender Systemgröße größer. Es ist zu beobachten, dass die mittlere plastische Dehnung γ_{av} ähnlich ist, während die Anzahl der produzierten Versetzungen, wie für solche Konfigurationen erwartet, näherungsweise mit der Größe des Systems skaliert. Für das System mit $H = 0.25 \mu\text{m}$ lässt sich das gleiche Verhalten wie in Abbildung 5.17 beobachten.

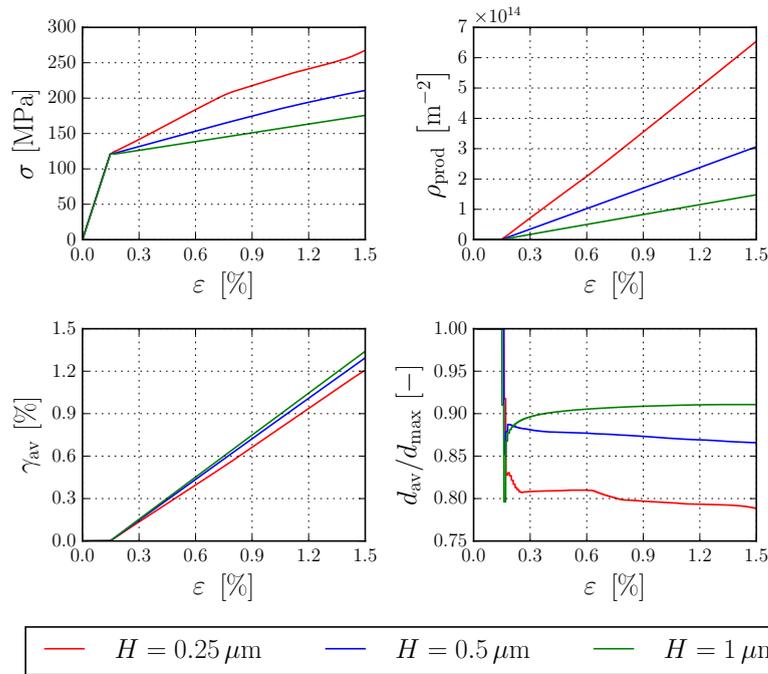


Abbildung 5.18: Wie Abbildung 5.17, aber für eine konstant Auflösung $h^* = 62.5 \text{ nm}$ und unterschiedliche Größen des Systems für $H = 0.25 \mu\text{m}$, $0.5 \mu\text{m}$ und $1 \mu\text{m}$.

H [μm]	σ [MPa]	ρ_{prod} [m^{-2}]	γ_{av} [%]	d_{av}/d_{max} [%]	\tilde{d} [nm]
0.25	267.6	$6.54 \cdot 10^{14}$	1.21	78.8	37.5
0.5	210.9	$3.06 \cdot 10^{14}$	1.29	86.6	47.4
1	175.6	$1.48 \cdot 10^{14}$	1.34	91.1	62.9

Tabelle 5.3.: Die Ergebnisse aus Abbildung 5.18 für $\varepsilon = 1.5\%$.

5.3. Balkenbiegung

Das in dieser Arbeit entwickelte Quellmodell wird für eine allgemeine Formulierung (siehe Abbildung 3.1 (III)) anhand des Biegens von Balken mit einer Länge zwischen 1.5 und 4.5 μm untersucht. Es wird ein quantitativer Vergleich mit Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik vorgenommen¹. Das Ziel ist es zum einen, den Einfluss des Quellmodells und der Quellverteilung zu untersuchen und zum anderen Größeneffekte zu reproduzieren, die im Fall der reinen Biegung und der Biegung eines Kragbalkens sowohl in Experimenten als auch in Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik zu beobachten sind (Haque und Saif, 2003, Motz et al., 2005, 2008, Motz und Dunstan, 2012).

Um mit einer 2-dimensionalen Theorie eine sinnvolle Approximation beschreiben zu können, wird eine spezielle kristallographische Orientierung gewählt. Die kristallographische Orientierung in Abbildung 5.19 beschreibt zwei Gleitsystempaare, die jeweils symmetrisch zum 2-dimensionalen Schnitt durch das System angeordnet sind (Abbildung 5.19 (a) und Abbildung 5.19 (b)). Beide Gleitsystempaare werden durch ein effektives Gleitsystem

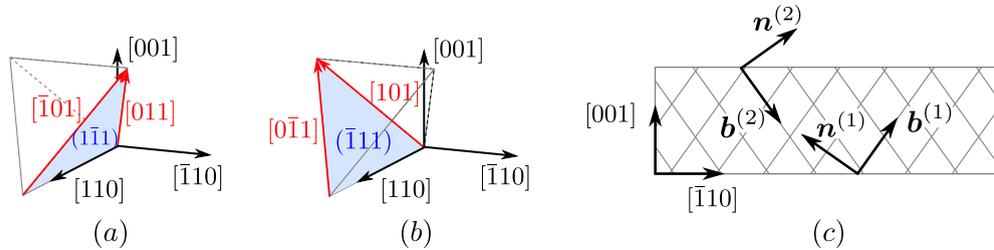


Abbildung 5.19: Die kristallographische Orientierung, die es aufgrund der enthaltenen Symmetrien ermöglicht, eine effektive 2-dimensionale Beschreibung des Systems darzustellen. Dabei werden 8 Gleitsysteme vernachlässigt, auf denen für den Fall der Biegung, ein Schmidfaktor von 0 resultiert.

$\{\mathbf{b}^{(i)}, \mathbf{n}^{(i)}\}$ für $i = 1, 2$ mit einen Neigungswinkel von $\varphi = \pm 54.7^\circ$ ersetzt (siehe Abbildung 5.19 (c)). Aus der Projektion auf den 2-dimensionalen Schnitt ergibt sich ein Burgersvektor von $|\mathbf{b}^{(i)}| = \sqrt{3}b/2$. Für den Fall der Biegung erfahren die restlichen 8 Gleitsysteme einen Schmidfaktor von 0 und können somit bei der Modellierung vernachlässigt werden (vgl. Anhang C). Zusätzlich wird angenommen, dass keine Wechselwirkung und keine Reaktionen zwischen Versetzungen auf den aktiven und den passiven Gleitsystemen stattfinden. In allen Simulationen werden Materialparameter für Aluminium gewählt (Elastizitätsmodul $E = 72.67 \text{ GPa}$, Querkontraktionszahl $\nu = 0.347$, Länge des Burgersvektor $b = 0.286 \text{ nm}$ und der Dämpfungskoeffizient $B = 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$).

5.3.1. Parameter des Quellmodells

Im Folgenden werden zwei Fälle für das Modellieren des homogenisierten Quellmodells untersucht und im Folgenden mit (Q1) bzw. (Q2) bezeichnet:

¹ Die Simulationen sind mit 3-dimensionaler diskreter Versetzungsdynamik von Markus Stricker aus der Arbeitsgruppe von Daniel Weygand durchgeführt worden (KIT Karlsruhe, 2016, unveröffentlicht).

- (Q1) Eine diskrete, zufällige Verteilung von Quellen, wobei die kritische Quellspannung τ_{krit} und das globale Maß für $\dot{\xi}_{\text{prod}}$ aus diskreten Versetzungsdynamiksimulationen bestimmt werden. Das lokale Maß wird durch das elastische Inkrement bestimmt (vgl. Kapitel 3.2).
- (Q2) Eine homogene Verteilung von Quellen mit dem, für den Fall der Biegung hergeleiteten, homogenisierten Quellmodell. Die Abschätzung der globalen Quellaktivierungsrate $\dot{\xi}_{\text{prod}}$ basiert auf dem Dehnungsgradienten und der daraus abgeleiteten Anzahl geometrisch notwendiger Versetzungen (vgl. Kapitel 3.2). Die kritische Quellspannung τ_{krit} wird wie die Quellaktivierungsrate aus dem Modell der kritischen Dicke hergeleitet (Frank und van der Merwe, 1949, Dunstan und Bushby, 2004, Motz und Dunstan, 2012).

Das Ziel ist es, den Übergang von einer diskreten Quellverteilung in eine homogene Quellverteilung mit einer kontinuierlichen Versetzungsdichteproduktion zu charakterisieren.

Bestimmung der Parameter aus Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik

Die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen sind durch das normalisierte Biegemoment M_B [MPa] und die Entwicklung der Gesamtdichte ρ_t [m^{-2}] für den Fall der reinen Biegung und der Biegung eines Kragbalkens gegeben. Es werden jeweils 4 Balken unterschiedlicher Größe für $H = 0.5 \mu\text{m}$, $0.75 \mu\text{m}$, $1 \mu\text{m}$ und $1.5 \mu\text{m}$ untersucht. Der detaillierte Aufbau der Simulationen ist in Abschnitt 5.3.2 und 5.3.3 beschrieben.

Das normalisierte Biegemoment berechnet sich aus

$$M_B = \frac{1}{H^2 T} \int_{-H/2}^{H/2} y \int_0^T \sigma_{xx}(y, z) dz dy \quad (5.15)$$

und für den ebenen Dehnungszustand aufgrund der verhinderten Querdehnung in z -Richtung aus

$$M_B = \frac{1 - \nu^2}{H^2} \int_{-H/2}^{H/2} y \sigma_{xx}(y) dy. \quad (5.16)$$

T beschreibt die Tiefe des Balkens der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen. Das Biegemoment des ebenen Dehnungszustands ist bzgl. der "Einheitstiefe" und der Poisson Zahl ν gegeben. Das kritische Biegemoment $M_{\text{krit,d}}$ wird als $R_{p0.1}$ abgelesen (siehe Abbildungen C.6 und C.7). Unter Annahme eines homogenen Spannungsgradienten im elastischen Fall, ergibt sich die kritische Schubspannung τ_{krit} aus

$$\tau_{\text{krit}} = 5M_B(\mathbf{n} \cdot \mathbf{x})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{x})/|\mathbf{b}| \quad (5.17)$$

für die reine Biegung und aus

$$\tau_{\text{krit}} = 10M_B(\mathbf{n} \cdot \mathbf{x})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{x})/|\mathbf{b}| \quad (5.18)$$

für die Biegung eines Kragbalkens. Dabei wird angenommen, dass Quellen im äußeren Sechstel des Balkens aktiviert werden und das mittlere Moment beim Biegen eines Kragbalkens halb so groß ist, wie das Biegemoment an der Einspannung.

Für die Dichteproduktion wird angenommen, dass sich alle produzierten Versetzungen am Spannungsgradienten ausrichten, d.h. sich gerade Versetzungen parallel zur neutralen Faser und senkrecht zur Längsachse des Systems ausbilden. Daher kann durch Integration über den ganzen Balken Ω aus der produzierten Dichte eine Anzahl an produzierten Versetzungen

$$n_{\text{prod,d}} = \frac{1}{T} \int_{\Omega} \rho_{\text{t}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (5.19)$$

berechnet werden. Weiter wird angenommen, dass ausschließlich Versetzungen eines Vorzeichens im System erhalten bleiben, während die entgegengesetzt orientierte Versetzung das System an der Oberfläche verlässt. Dadurch entspricht die globale Produktionsrate der Quellaktivierungsrate

$$\dot{\xi}_{\text{prod}} = \dot{n}_{\text{prod,d}}. \quad (5.20)$$

Tabellen 5.4 und 5.5 listen die gemessenen und berechneten Größen für den Fall der reinen Biegung und der Biegung eines Kragbalkens auf.

H [μm]	$M_{\text{krit,d}}$ [MPa]	$\dot{n}_{\text{prod,d}}$ [μs^{-1}]	τ_{krit} [MPa]	$\dot{\xi}_{\text{prod}}$ [μs^{-1}]
0.5	67.5	40	156.8	40
0.75	55.0	60	129.0	60
1.0	30.6	100	71.15	100
1.5	21.6	185	50.16	185

Tabelle 5.4.: Das kritische Biegemoment $M_{\text{krit,d}}$ und die approximierte Produktionsrate $\dot{n}_{\text{prod,d}}$ aus den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen der reinen Biegung und den daraus berechneten Werten für die kritische Quellspannung τ_{krit} und die globale Quellaktivierungsrate $\dot{\xi}_{\text{prod}}$. Das Bestimmen der Parameter ist in Abbildung C.6 veranschaulicht.

H [μm]	$M_{\text{krit,d}}$ [MPa]	$\dot{n}_{\text{prod,d}}$ [μs^{-1}]	τ_{krit} [MPa]	$\dot{\xi}_{\text{prod}}$ [μs^{-1}]
0.5	53.0	10	246.3	10
0.75	19.5	17	90.7	17
1.0	16.5	23.5	76.7	23.5
1.5	12.2	35	56.7	35

Tabelle 5.5.: Wie Tabelle 5.4, aber für die Simulationen der Biegung eines Kragbalkens. Das Bestimmen der Parameter ist in Abbildung C.7 veranschaulicht.

Fließspannung des homogenisierten Quellmodells

Aus dem Modell der kritischen Dicke lässt sich eine Fließspannung für das Einsetzen plastischer Verformung abhängig von der Größe des Systems herleiten (Mozt und Dunstan, 2012). Aus dem kritischen Dehnungsintegral (Gleichung (3.47)) und unter der Annahme eines konstanten Spannungsgradienten über den Querschnitt des Balkens für den elastischen Fall ergibt sich aus der Bedingung $I = I_{\text{krit}}$ die kritische Normalspannung

$$\sigma_{\text{krit}} = \frac{2E I_{\text{krit}}}{H} \quad (5.21)$$

für das Einsetzen der plastischen Verformung. Die Fließspannung

$$\tau_{\text{krit}} = \sigma_{\text{krit}} \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}) \cdot (\mathbf{b}^{(i)} \cdot \mathbf{x}) / |\mathbf{b}^{(i)}| \quad (5.22)$$

berechnet sich aus der Projektion der kritischen Normalspannung σ_{krit} auf das i -te Gleitsystem. In Tabelle 5.6 sind die Werte der kritischen Schubspannung aus dem homogenisierten Quellmodell gegeben.

H [μm]	τ_{krit} [MPa]
0.5	156.8
0.75	104.5
1.0	78.4
1.5	52.3

Tabelle 5.6.: Die kritischen Schubspannungen berechnet aus dem homogenisierten Quellmodell abhängig von der Höhe des Balkens.

Auflösung und Zeitschrittweite

Für die Simulationen der Mikrobiegung wird, soweit nicht anders spezifiziert, eine Auflösung von $h_* = H/8$ gewählt. Aus der Courant-Friedrich-Lewy Bedingung kann zu einer gegebenen maximalen Geschwindigkeit eine obere Schranke

$$\Delta \tilde{t} \leq c \frac{h_*}{v_{\text{max}}} \quad (5.23)$$

für den (Sub-)Zeitschritt $\Delta \tilde{t}$ der Finite-Volumen Simulationen bestimmt werden ($c < 1$). Der Zeitschritt der Finite-Volumen Simulationen wird mit $\Delta \tilde{t} = 10^{-5} \mu\text{s}$ gewählt und der Zeitschritt zur Berechnung des Spannungsinkrementes und der Quellaktivierung mit $\Delta t = 10^{-4} \mu\text{s}$.

5.3.2. Reine Biegung

Für den Fall der reinen Biegung wird an den Enden des Balkens ein Biegemoment in Form eines homogenen Dehnungsgradienten (Abbildung 5.20) in Balkenrichtung aufgebracht und beide Enden mit undurchlässigen Randbedingungen modelliert (Abbildung 5.20). Dabei wird, über die Simulationsdauer von $t_{\text{sim}} = 2.5 \mu\text{s}$, eine Dehnrate von $\dot{\epsilon}_{\text{ext}} = 5 \cdot 10^{-3} \mu\text{s}^{-1}$ an der Oberfläche der Balkens aufgebracht. Am linken Rand wird zusätzlich der mittlere Knoten in y -Richtung fixiert.

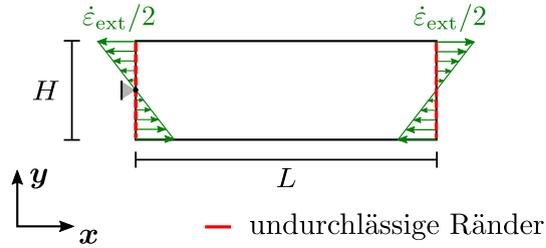


Abbildung 5.20: Der Simulationsaufbau für den Fall der reinen Biegung. Das Biegemoment wird so aufgeprägt, dass an der Oberfläche eine Dehnrate von $\dot{\epsilon}_{\text{ext}}$ beschrieben wird. Am linken Rand wird der mittlere Knoten in y -Richtung fixiert und die Längenänderung des Balkens aufgrund von plastischer Verformung wird über eine dynamische Längenänderung des Balkens berücksichtigt, so dass die mittlere Normalspannung 0 beträgt.

Es wird der Größeneffekt für Balken mit einem Seitenverhältnis von $L = 3H$ und einer Höhe von $H = 0.5 \mu\text{m}$, $0.75 \mu\text{m}$, $1 \mu\text{m}$ und $1.5 \mu\text{m}$ untersucht. Die Simulationen werden mit Ergebnissen der diskreten Versetzungsdynamik validiert. Für die Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik und des kontinuierlichen Systems mit diskreter Quellverteilung (Q1) werden jeweils 3 Simulationen durchgeführt. Es wird eine dynamische Längenänderung des Balkens berücksichtigt, so dass die mittlere Normalspannung $\sigma_N = 0 \text{ MPa}$ beträgt. Für die Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik wird aus einer Quelledichte ρ_s eine Anzahl an Quellen n_s und eine mittlere Quelllänge l_s bestimmt. Die mittlere Quelllänge l_s berechnet sich aus

$$l_s = \frac{3}{2\sqrt{\rho_s}} \quad (5.24)$$

und die Anzahl der Quelle n_s durch

$$n_s = \frac{1}{l_s} \int_{\Omega} \rho_s d\mathbf{x}. \quad (5.25)$$

Für eine Quelledichte von $\rho_s = 2.4 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ ergeben sich für die verwendete Kontinuumstheorie entsprechend $n_s = 4, 16, 40$ und 132 Quellen pro Gleitsystem für die Balken mit einer Höhe von $H = 0.5 \mu\text{m}$, $0.75 \mu\text{m}$, $1 \mu\text{m}$ und $1.5 \mu\text{m}$. Die mittlere Quelllänge beträgt $l_s = 306.2 \text{ nm}$. Für das Quellmodell mit diskreter Quellverteilung (Q1) werden die

Werte der kritischen Quellspannung und die Quellaktivierungsrate aus den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen bestimmt (Tabelle 5.4). Wie in Abbildung C.6 dargestellt, wird die kritische Quellspannung bei 0.1% plastischer Dehnung ($R_{p0,1}$) der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen bestimmt und gemittelt. Die Quellaktivierungsrate wird durch die Produktionsrate der Gesamtdichte approximiert. Für das Quellmodell (Q2) sind diese Werte implizit durch das homogenisierte Modell gegeben (Tabelle 5.6).

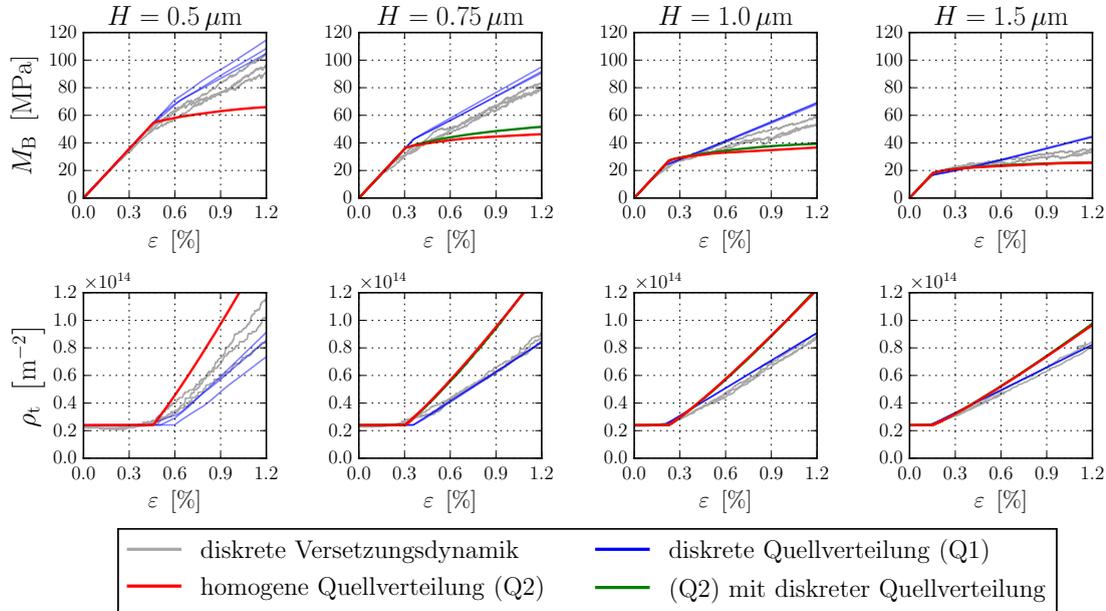


Abbildung 5.21: Vergleich des Einflusses der Balkengröße der reinen Biegung für die Quellmodelle (Q1) (blau), (Q2) mit homogener Quellverteilung (rot) und (Q2) mit diskreter Quellverteilung (grün) mit Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik (grau). Die obere Reihe zeigt das normalisierte Biegemoment und die untere Reihe die entsprechende Entwicklung der Versetzungsdichte. Für die Simulationen mit diskreter Quellverteilung (Q1) und die diskrete Versetzungsdynamik sind jeweils 3 Simulationen mit unterschiedlichen Quellverteilungen dargestellt.

Abbildung 5.21 zeigt die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamik mit grauen, die Ergebnisse des Quellmodells mit diskreter Quellverteilung (Q1) mit blauen und das homogenisierte Quellmodell (Q2) mit roten Linien. Zusätzlich sind Simulationen für das homogenisierte Quellmodell (Q2) mit einer diskreten Quellverteilung mit grünen Linien dargestellt.

Die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamik zeigen einen Größeneffekt in der Fließspannung und der Verfestigung. Die Gesamtversetzungsdichte bei $\epsilon = 1.2\%$ Gesamtdehnung ist nahezu unabhängig von der Systemgröße bei ungefähr $\rho_t = 9 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$. Für den Balken mit $H = 0.5 \mu\text{m}$ gibt es starke Abweichungen zwischen den einzelnen Simulationen,

während die größeren Balken nur einen geringen Einfluss der einzelnen Simulationen aufweisen. Die Gesamtdichte zeigt einen nicht-linearen Verlauf, der in einen linearen Verlauf übergeht. Die Verfestigung der Balken mit $H = 0.5 \mu\text{m}$ und $0.75 \mu\text{m}$ ist näherungsweise linear, während die Balken mit $H = 1 \mu\text{m}$ und $1.5 \mu\text{m}$ einen nicht-linearen Verlauf zeigen.

Die Versetzungsdichteproduktion des Quellmodells mit diskreter Quellverteilung (Q1) entsprechen den Ergebnissen der diskreten Versetzungsdynamik bis auf den Balken mit $H = 0.5 \mu\text{m}$. Für den kleinsten Balken zeigen sich Unterschiede für die Versetzungsdichteproduktion abhängig von den einzelnen Simulationen. Das resultierende Biegemoment beschreibt für alle Balken einen linearen Verlauf, welcher für die Simulationen für $H = 0.5 \mu\text{m}$ und $0.75 \mu\text{m}$ mit der diskreten Versetzungsdynamik übereinstimmt. Für die Balken mit $H = 1 \mu\text{m}$ und $1.5 \mu\text{m}$ kann der nicht-lineare Verlauf des Biegemomentes der diskreten Versetzungsdynamik nicht reproduziert werden.

Das homogenisierte Quellmodell mit homogener Quellverteilung (Q2) beschreibt den Größeneffekt der Fließspannung ähnlich wie die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamik. Für alle Balken ist eine ähnliche Verfestigung zu beobachten und die Versetzungsdichteproduktion der unterschiedlichen Balken skaliert invers mit der Systemgröße. Der Verlauf des Biegemomentes für das Quellmodell (Q2) ist nicht-linear und je größer der Balken, desto kleiner der Fehler des homogenisierten Quellmodells. Um den Einfluss der homogenen Quellverteilung zu charakterisieren, wird das homogenisierte Quellmodell (Q2) mit einer diskreten Quellverteilung für $H \geq 0.75 \mu\text{m}$ verglichen (Abbildung 5.21 grün). Dabei ist zu beobachten, dass bei gleicher Versetzungsdichteproduktion ein Größeneffekt der Verfestigung zu beobachten ist. Der Größeneffekt aufgrund der Versetzungsdichteproduktion auf diskreten Gleitebenen reicht nicht aus, um den Größeneffekt der diskreten Versetzungsdynamik zu reproduzieren.

Um den Unterschied der Quellverteilungen qualitativ zu charakterisieren, werden die Dehnungsprofile so wie das Versetzungsdichteprofil der Simulationen mit diskreter Quellverteilung (Q1) und mit homogener Quellverteilung (Q2) verglichen. In Abbildung 5.22 ist das Profil einer äquivalenten von Mises'schen Vergleichsdehnung

$$\varepsilon_{\text{vm}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \left\| \sum_i \gamma^{(i)} \mathbf{M}^{(i)} \right\| \quad (5.26)$$

gegeben. $\| \cdot \|$ bezeichnet die Norm der Tensoren 2. Ordnung. In der rechten Spalte ist das Profil der produzierten Versetzungen über die Balkenhöhe dargestellt und wird mit dem Profil des Mittelwertes aller diskreten Versetzungsdynamiksimulationen verglichen. Die produzierte Dichte ρ_{prod} ist auf die Anfangsdichte ρ_0 normalisiert und entlang des Balkens gemittelt.

Die Dehnungsprofile der diskreten Quellverteilung (Q1) unterscheiden sich durch die Anzahl der aktiven Quellen und somit durch die Lokalisierung der produzierten Versetzungsdichte. Für größere Balken wird das Dehnungsprofil homogener und nähert sich dem Dehnungsprofil der homogenen Quellverteilung (Q2) an. Das Dehnungsprofil der homogenen

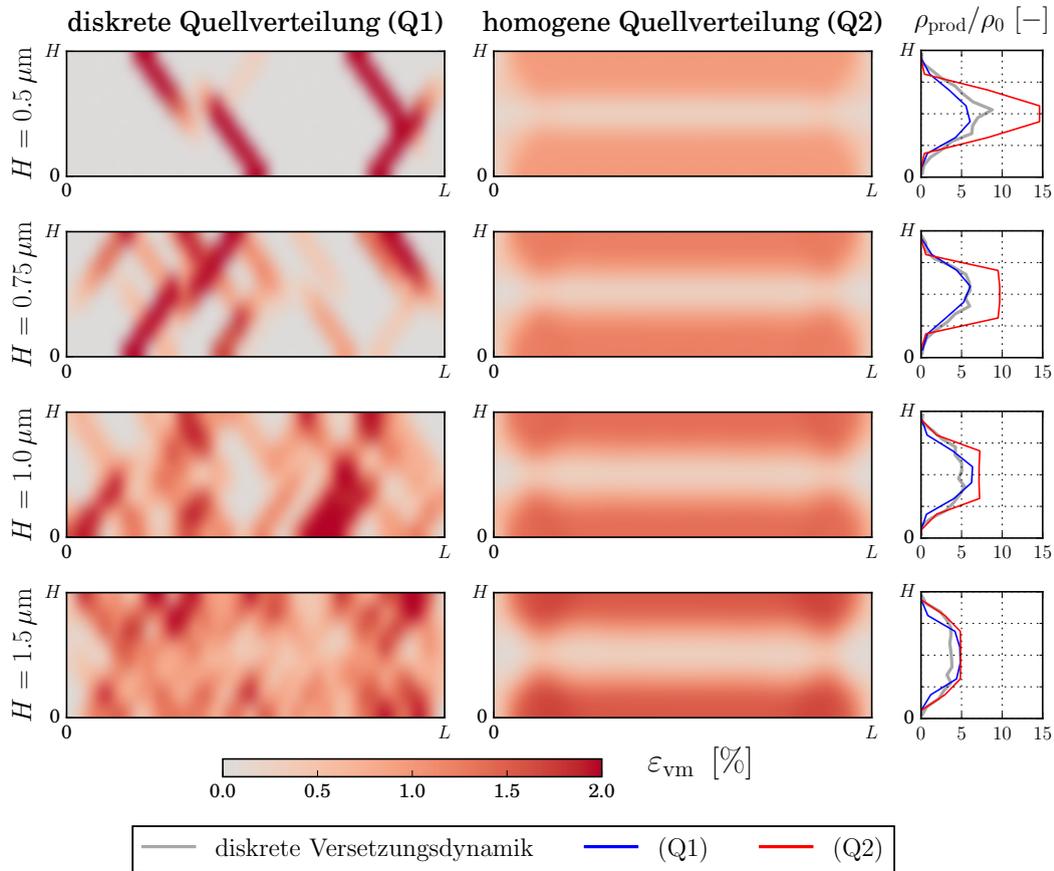


Abbildung 5.22: Das Dehnungsprofil einer Simulation mit diskreter Quellverteilung (Q1) und des homogenisierten Quellmodells (Q2) für die Vergleichsdehnung ε_{vm} . In der rechten Spalte ist das Profil der produzierten Versetzungsdichte über die Balkenhöhe als Mittelwert der diskreten Versetzungsdynamiksimulation und der Quellmodelle (Q1) und (Q2) dargestellt. Die Dichte ist auf die Anfangsdichte ρ_0 normalisiert und entlang des Balkens gemittelt.

Quellverteilung (Q2) bildet für größere Balken einen größeren linearen Dehnungsgradienten um die neutrale Faser aus, der am besten anhand der konstanten Versetzungsdichte um die neutrale Faser zu beobachten ist.

Die Versetzungsdichteprofile der Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik weisen einen Bereich mit konstanter Dichte um die neutrale Faser aus. Je kleiner der Balken, desto kleiner der Bereich mit konstanter Dichte um die neutrale Faser und desto höher die Versetzungsdichte an der neutralen Faser. Der Vergleich der Profile der Versetzungsdichte der diskreten Versetzungsdynamik und der diskreten Quellverteilung (Q1) zeigen für $H \leq 0.75 \mu\text{m}$ eine gute Übereinstimmung. Für die beiden großen Balken mit $H \geq 1 \mu\text{m}$ ist zu beobachten, dass die Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik im Vergleich zu den Simulationen mit diskreter Quellverteilung (Q1) einen größeren Bereich mit einer

näherungsweise konstanten Versetzungsdichte aufweisen. Im Gegensatz dazu zeigen die Simulationen mit der homogenen Quellverteilung (Q2) ein ähnlich ausgeprägtes Plateau im Versetzungsdichteprofil, welches allerdings betragsmäßig vom Versetzungsdichteprofil der diskreten Simulationen abweicht. Die Abweichung nimmt mit zunehmender Balkengröße ab. Der maximale Wert der Versetzungsdichte an der neutralen Faser skaliert für die Ergebnisse mit homogener Quellverteilung (Q2) invers mit der Balkengröße.

Netzabhängigkeit

In Kapitel 5.2 wird in Abbildung 5.17 eine Netzabhängigkeit der Lösung in einem endlichen System beobachtet. Im Folgenden wird der Einfluss des Netzes sowohl für das Quellmodell (Q1) mit diskreter Quellverteilung als auch für das Quellmodell (Q2) mit homogener Quellverteilung untersucht.

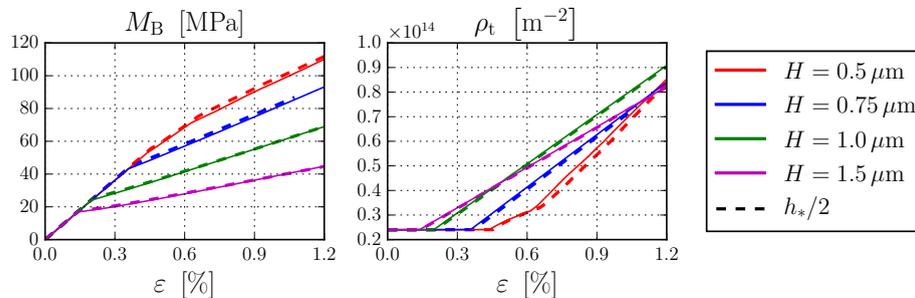


Abbildung 5.23: Untersuchung der Netzabhängigkeit für das Quellmodell (Q1) mit einer diskreten Quellverteilung. Es werden jeweils die Ergebnisse einer identischen Quellverteilungen für die Auflösung $h_* = H/8$ (durchgezogen) und $h_* = H/16$ (gestrichelt, bezeichnet mit $h_*/2$) dargestellt.

In Abbildung 5.23 wird für eine identische Quellverteilung je eine Simulation mit der Auflösung $h_* = H/8$ (durchgezogene Linie) und eine Simulation mit der Auflösung $h_* = H/16$ (gestrichelte Linie, bezeichnet mit $h_*/2$) durchgeführt. Für den kleinsten Balken $H = 0.5 \mu\text{m}$ ergibt sich eine Abweichung, aber es wird keine Netzabhängigkeit für das Quellmodell (Q1) mit einer diskreten Quellverteilung beobachtet.

Für das Quellmodell (Q2) mit einer homogenen Quellverteilung wird der Einfluss des Vergrößerns der Auflösung des Systems untersucht. Abbildung 5.24 zeigt die Ergebnisse für eine Auflösung von $h_* = H/8$ (durchgezogene Linie) und $h_* = H/4$ (gestrichelte Linie, bezeichnet mit $2h_*$). Die Ergebnisse des Biegemomentes und der Dichte zeigen eine gute Übereinstimmung, bis zu einer bestimmten Gesamtdehnung. Dieser Punkt variiert abhängig von der Größe des Balkens. Für die Auflösung $h_* = H/4$ und die Balken mit $H = 0.5 \mu\text{m}$, $0.75 \mu\text{m}$, $1.0 \mu\text{m}$ und $1.5 \mu\text{m}$ lassen sich die Punkte der Abweichung durch 1%, 0.7%, 0.55% und 0.45% abschätzen (in Abbildung 5.24 durch ein Kreuz markiert).

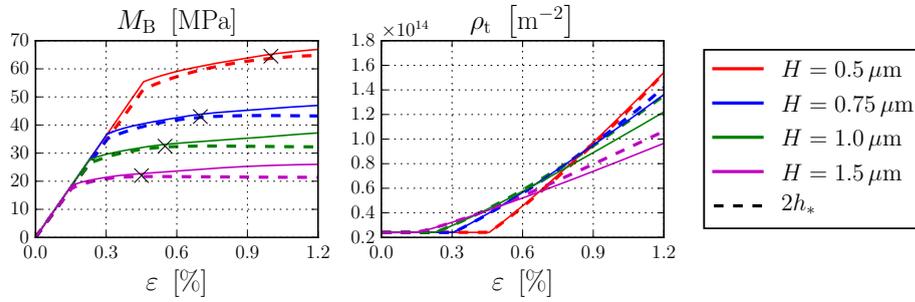


Abbildung 5.24: Untersuchung der Netzabhängigkeit für das Quellmodell (Q2) mit einer homogenen Quellverteilung. Es werden die Ergebnisse für die Auflösung $h_* = H/8$ (durchgezogen) und $h_* = H/4$ (gestrichelt, bezeichnet mit $2h_*$) dargestellt. Mit einem Kreuz ist der Punkt abgeschätzt, ab dem die Ergebnisse voneinander abweichen.

5.3.3. Biegung eines Kragbalkens

Der Simulationsaufbau der Biegung eines Kragbalkens ist in Abbildung 5.25 dargestellt. Die Balken mit einem Seitenverhältnis von $L = 3H$ für $H = 0.5 \mu\text{m}$, $0.75 \mu\text{m}$, $1.0 \mu\text{m}$ und $1.5 \mu\text{m}$ werden am freien Ende mit einer Dehnrate von $\dot{\epsilon}_{\text{ext}} = 5 \cdot 10^{-3} \mu\text{s}^{-1}$ bezogen auf die Balkenlänge über die Simulationsdauer von $t_{\text{sim}} = 5 \mu\text{s}$ durch eine Verschiebungsrandbedingung nach unten gedrückt. Für die Simulationen mit diskreter Quellverteilung (Q1) und der diskreten Versetzungsdynamik werden jeweils 3 Simulationen durchgeführt. Das Ziel ist es, den Größeneffekt, der aus den Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik beobachtet wird, mit der Kontinuumstheorie zu reproduzieren und das homogenisierte Quellmodell zu untersuchen. Die Quelledichte ist analog zum Fall der reinen Biegung mit $\rho_s = 2.4 \cdot 10^{13} \text{m}^{-2}$

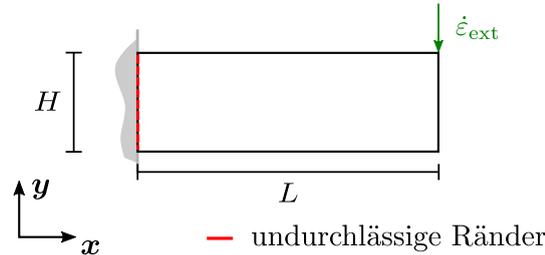


Abbildung 5.25: Der Simulationsaufbau für den Fall des Biegens eines Kragbalkens. Das freie Ende des Balkens wird mit einer Dehnrate von $\dot{\epsilon}_{\text{ext}}$ nach unten bewegt.

gewählt. Daraus ergibt sich für die verwendete Kontinuumstheorie $n_s = 4, 16, 40$ und 132 Quellen pro Gleitsystem entsprechend der Höhe von $H = 0.5 \mu\text{m}$, $0.75 \mu\text{m}$, $1 \mu\text{m}$ und $1.5 \mu\text{m}$. Die mittlere Quelllänge beträgt $l_s = 306.2 \text{nm}$. Für das Quellmodell mit diskreter Quellverteilung (Q1) werden die Werte der kritischen Quellspannung aus den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen bestimmt (Tabelle 5.5). Für das Quellmodell (Q2) sind diese implizit durch das homogenisierte Modell gegeben (Tabelle 5.6).

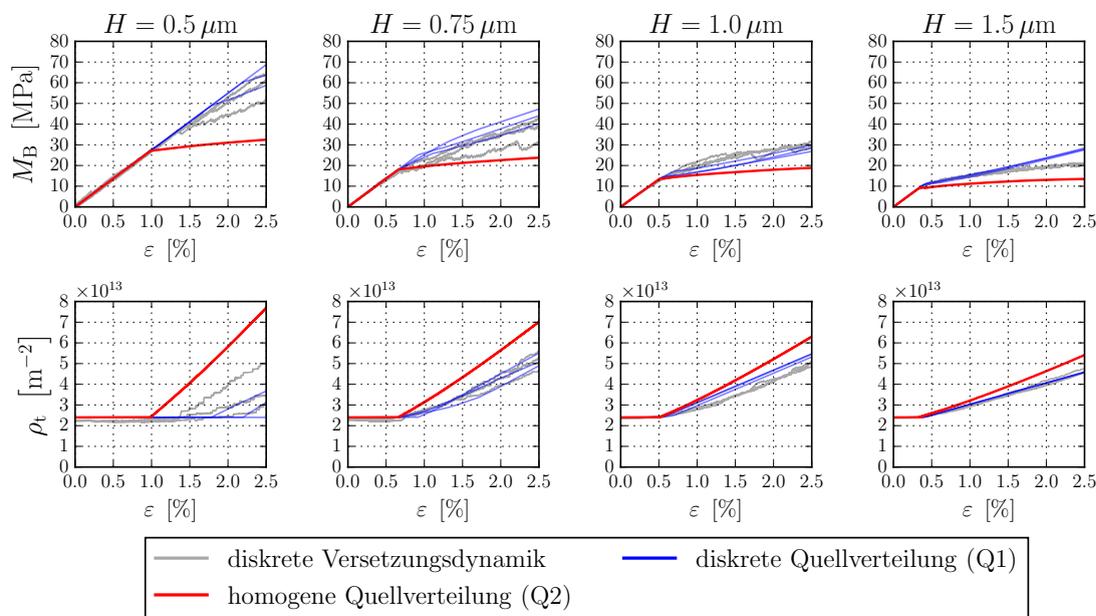


Abbildung 5.26: Vergleich des Einflusses der Balkengröße der Biegung eines Kragbalkens für die Quellmodelle (Q1) (blau) und (Q2) mit homogener Quellverteilung (rot) mit Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik (grau). Die obere Reihe zeigt das normalisierte Biegemoment und die untere Reihe die entsprechende Entwicklung der Versetzungsdichte. Für die Simulationen mit diskreter Quellverteilung (Q1) und die diskrete Versetzungsdynamik sind jeweils 3 Simulationen mit unterschiedlichen Quellverteilungen dargestellt.

Die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamik in Abbildung 5.26 sind qualitativ ähnlich zu denen der reinen Biegung, wobei eine größere Streuung der Ergebnisse der kleinen Balken $H \leq 0.75 \mu\text{m}$ zu beobachten ist. Der Vergleich der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen mit dem Quellmodell (Q1) mit diskreter Quellverteilung zeigt einen ähnlichen Verlauf der Versetzungsdichte und eine lineare Verfestigung, die besonders für die Balken mit $H \geq 1.0 \mu\text{m}$ von den Ergebnissen der diskreten Versetzungsdynamik abweichen.

Der Vergleich zwischen den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen und dem homogenisierten Quellmodell (Q2) mit homogener Quellverteilung zeigt, dass das homogenisierte Quellmodell den Größeneffekt der Fließspannung auch für den Fall der Biegung eines Kragbalkens vorhersagen kann. Das homogenisierte Quellmodell (Q2) zeigt keinen Größeneffekt in der Verfestigung des Biegemoments.

Um den Einfluss der Verteilung der Versetzungen besser charakterisieren zu können, wird das Dehnungsprofil und das Versetzungsdichteprofil in Abbildung 5.27 wie für den Fall der reinen Biegung untersucht. Zusätzlich wird das Profil der produzierten Versetzungsdichte entlang des Balkens untersucht (siehe Abbildung 5.28).

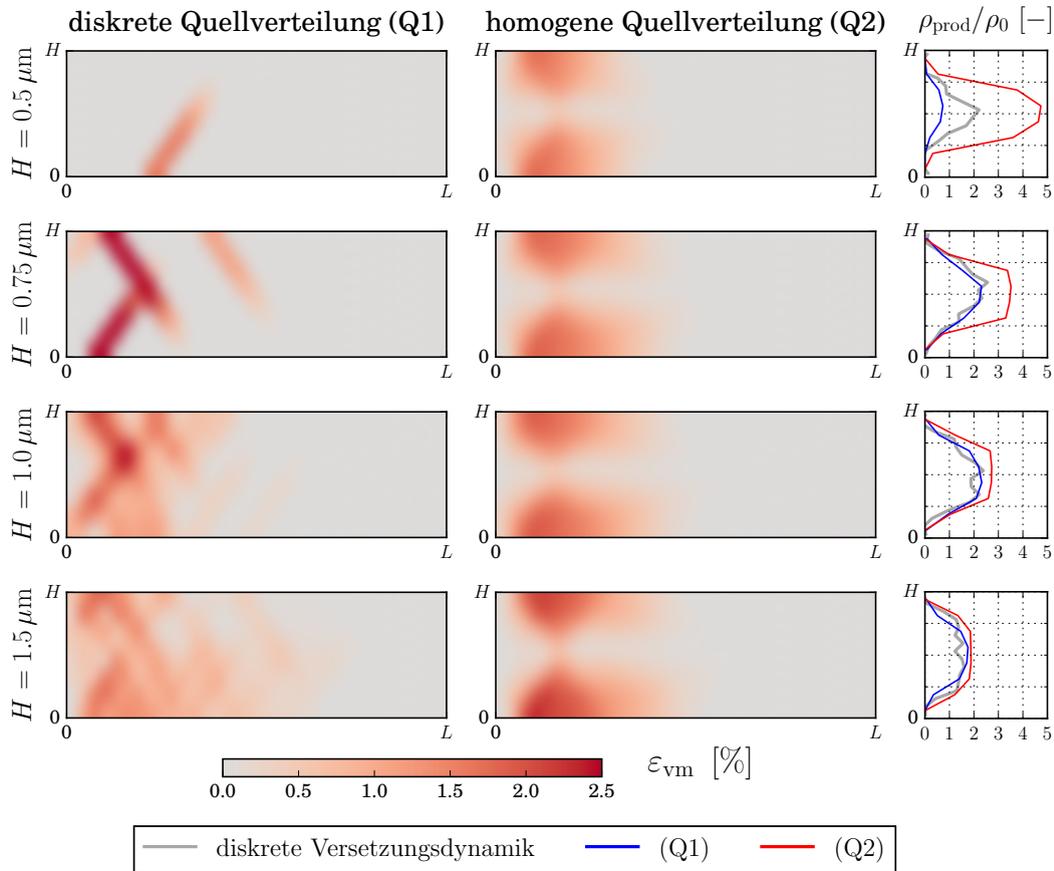


Abbildung 5.27: Das Dehnungsprofil und das Profil der produzierten Versetzungsdichte wie in Abbildung 5.22, aber für den Fall der Biegung eines Kragbalkens.

Aus Abbildung 5.27 lässt sich der Unterschied des Dehnungsprofils einer diskreten und einer homogenen Quellverteilung analysieren. Wie für den Fall der reinen Biegung ist eine äquivalente von Mises'sche Vergleichsdehnung ε_{vm} (Gleichung (5.26)) dargestellt. Es findet eine Lokalisierung der plastischen Dehnung in der Nähe der Einspannung des Balkens statt. Das Quellmodell (Q1) mit diskreter Quellverteilung zeigt eine Ausbreitung der plastischen Dehnung mit zunehmender Balkengröße. Der Vergleich des Profils der produzierten Versetzungsdichte über den Balkenquerschnitt der diskreten Versetzungsdynamik und der diskreten Quellverteilung zeigt eine gute Übereinstimmung. Mit zunehmender Balkengröße wird eine konstante Versetzungsdichte um die neutrale Faser beobachtet und für den kleinsten Balken eine stärkere Lokalisierung der Versetzungsdichte um die neutrale Faser. Das homogenisierte Quellmodell (Q2) mit homogener Quellverteilung skaliert wie im Fall der reinen Biegung invers mit der Systemgröße.

Der Vergleich des Profils der produzierten Versetzungsdichte entlang des Balkens ist in Abbildung 5.28 für den Mittelwert der Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik und des Quellmodells (Q1) sowie das Profil der Simulationen mit dem Quellmodell (Q2) dargestellt. Die Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik weisen produzierte Ver-

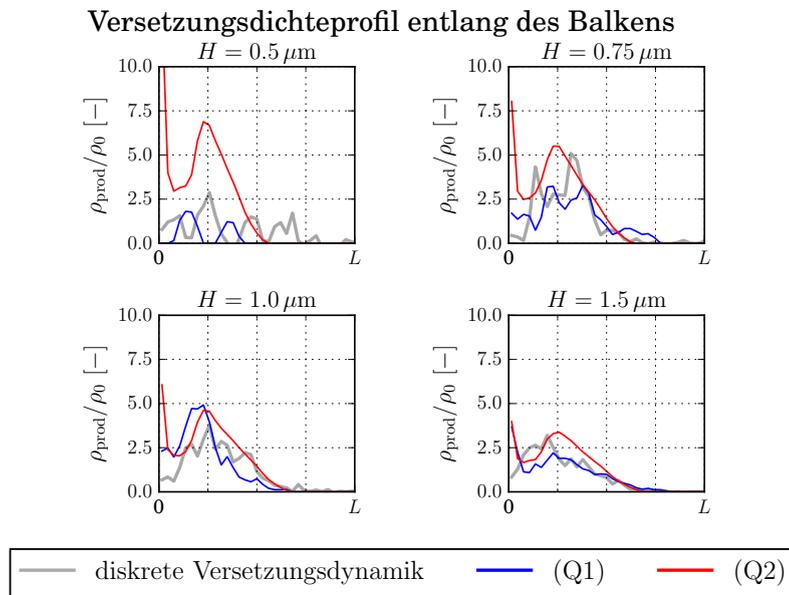


Abbildung 5.28: Der Vergleich der Profile der produzierten Versetzungen entlang des Kragbalkens für den Mittelwert der Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik, des Quellmodell (Q1) mit diskreter Quellverteilung und das Profil für das Quellmodell (Q2) mit homogener Quellverteilung.

setzungsdichte für $H \geq 0.75 \mu\text{m}$ bis zu $5/8$ der Balkenlänge L auf. Für den kleinsten Balken ist eine Versetzungsdichte über $3/4$ des Balkens zu beobachten. Bis auf den kleinsten Balken, zeigen die Profile des Quellmodells (Q1) mit diskreter Quellverteilung eine gute Übereinstimmung. Die Profile des Quellmodell (Q2) mit homogener Quellverteilung skalieren invers mit der Balkengröße und es ist ein Versetzungsaufstau an der Einspannung des Balkens zu beobachten. Mit zunehmender Balkengröße stimmen die Profile der diskreten Versetzungsdynamik und der beiden Quellmodelle überein.

5.4. Kontinuumslimit

In diesem Abschnitt wird untersucht, ob das Kontinuumslimit im Sinne von Kapitel 4 mit den dort eingeführten Maßen nachgewiesen werden kann. Dazu werden Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik auf einem beschränkten Gebiet $[0, L] \times [0, H]$ durchgeführt. Beschränktes Gebiet bedeutet, dass Versetzungen mittels undurchlässiger Ränder eingeschlossen werden und das ganze Gebiet in einem unendlichen elastischen Medium eingebettet ist. Für das System mit nicht-polarisierter Dichte werden $2n$ zufällig verteilte Versetzungen ohne anliegende externe Spannung ($\tau_{\text{ext}} = 0$) relaxiert. Das explizite Euler Verfahren wird zur Diskretisierung der Evolutionsgleichung $\partial_t x_i = s_i v_i$ für $i = 1, \dots, 2n$ verwendet, wobei x_i die x -Koordinate der Versetzung, s_i das Vorzeichen der Versetzung und v_i die Versetzungsgeschwindigkeit in Gleitrichtung aus Gleichung (2.2) beschreibt. Aufgrund der Struktur des Gleichungssystems für ein einzelnes Gleitsystem sind die relaxierten Zustände unabhängig vom Schermodul μ , der Poissonzahl ν , dem Betrag des Burgersvektors \mathbf{b} und dem Reibungswiderstand B . Durch die Skalierungseigenschaften von Versetzungssystemen sind die relaxierten Zustände bei gleichbleibender Anzahl von Versetzungen zudem unabhängig von der absoluten Größe des Systems L . Daraus folgt, dass einzig das Seitenverhältnis L/H und die Anzahl der Versetzungen $2n$ eine Rolle für die Unterscheidung der Ergebnisse spielen. Es werden Simulationsreihen für die gleiche Anzahl von positiven und negativen Versetzungen (nicht-polarisierte Dichte) und einem Seitenverhältnis von $L/H = 8$ berechnet.

Die Definition des relaxierten Zustandes der diskreten Versetzungsdynamik ist ein wichtiger Aspekt für die Berechnung der Korrelationsfunktionen, da diese den Zustand des Gleichgewichtes beschreiben. In der Praxis hat es sich als sinnvoll erwiesen, keine absolute Grenze für die Definition des relaxierten Zustandes zu setzen. Im Allgemeinen lässt sich keine monotone Konvergenz der resultierenden Versetzungsgeschwindigkeiten beobachten, sodass ein definierter relaxierter Zustand im weiteren Verlauf nicht unbedingt Bestand haben muss. Im Folgenden wird ein "schwaches" Kriterium für den relaxierten Zustand eines Systems definiert und in Anhang D werden die Residuumschwindigkeiten der einzelnen Simulationen mit dem statistischen Fehler aus Gleichung (4.8) verglichen. Die Simulationen werden als konvergiert deklariert, sobald die mittlere Geschwindigkeit $\bar{v} := 1/2n \sum_{i=1}^{2n} |v_i|$ und die maximale Geschwindigkeit $v_{\text{max}} := \max_i \{|v_i|\}$ folgende Bedingungen erfüllen:

$$\bar{v}(t) < c_1 \cdot \bar{v}(t = 0) \quad (5.27)$$

$$v_{\text{max}}(t) < c_2 \cdot \bar{v}(t). \quad (5.28)$$

Damit wird sichergestellt, dass das Niveau der Geschwindigkeit signifikant gefallen ist und die Abweichung der maximalen Versetzungsgeschwindigkeit im Vergleich zur mittleren Geschwindigkeit klein ist. Die Koeffizienten c_1 und c_2 sind in Tabelle 5.7 aufgelistet. Sie werden abhängig von der Anzahl der Versetzungen gewählt, da im Allgemeinen ein kleinerer mittlerer Versetzungsabstand eine größere mittlere Geschwindigkeit \bar{v} einer homogenen Verteilung von Versetzungen verursacht.

n	c_1	c_2
25, 50	$1.0 \cdot 10^{-3}$	5
100	$5.0 \cdot 10^{-4}$	5
200	$2.5 \cdot 10^{-4}$	5
400, 800	$1.0 \cdot 10^{-4}$	5

Tabelle 5.7.: Koeffizienten der Konvergenz der Relaxierung der diskreten Versetzungsdynamik abhängig von der Anzahl der Versetzungen n .

Die relativen Korrelationsfunktionen werden, wie in Gleichung (4.3) beschrieben, aus den Ensemblemittelwerten der unterschiedlichen Simulationsreihen berechnet. Es wird ein polares Gitter mit einer äquidistanten Diskretisierung von $\Delta\varphi = 2\pi/120$ für den Winkel φ und $\Delta r = (r_1 - r_0)/40$ für die Diskretisierung des Radius r gewählt. $r_0 = 0.01$ ist so gewählt, dass der minimale Abstand zwischen Versetzungen in allen Simulationen größer als r_0 ist. Zaiser et al. (2001) haben gezeigt, dass die Korrelationsfunktionen hinreichend schnell konvergieren und eine physikalische Reichweite r_{phys} für $r_{\text{phys}} \leq 6$ aufweisen, wobei r_{phys} mit dem mittleren Versetzungsabstand $\rho_t^{-1/2}$ normiert ist. Daher wird $r_1 = 6$ gewählt. Eine Diskussion über die Reichweite der Korrelationsfunktion wird in Anhand F angeregt.

Berechnung der Winkelkorrelationsfunktion

Um zu verdeutlichen, wie die Normalisierung der 2-Partikeldichtefunktion zur Berechnung der Korrelationsfunktionen nach Gleichung (4.3) beiträgt, wird die Korrelationsfunktion einer zufälligen homogenen Verteilung von Versetzungen untersucht. Aus Gleichung (4.1) lassen sich die Verläufe der gemittelten 1-Partikeldichtefunktion ρ_1^h einer homogenen Verteilung

$$\varphi = 0^\circ : \quad \rho_1^h(\mathbf{x}(r, 0^\circ)) = 1 - \frac{r\rho_t^{-1/2}}{L} \quad (5.29)$$

$$\varphi = 45^\circ : \quad \rho_1^h(\mathbf{x}(r, 45^\circ)) = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{2}r \left(\frac{1}{L} + \frac{1}{H} \right) \rho_t^{-1/2} + \frac{1}{2LH} \left(r\rho_t^{-1/2} \right)^2 \quad (5.30)$$

$$\varphi = 90^\circ : \quad \rho_1^h(\mathbf{x}(r, 90^\circ)) = 1 - \frac{r\rho_t^{-1/2}}{H} \quad (5.31)$$

zu gegebenem Winkel φ abhängig vom Radius r analytisch herleiten. In Abbildung 5.29 ist die gemittelte 1-Partikeldichtefunktion ρ_1^h dargestellt und in Abbildung 5.30 (links) werden die normierten Verläufe von ρ_1^h und der 2-Partikeldichtefunktion ρ_2 für $\varphi = 0^\circ, 45^\circ$ und 90° für $0 \leq r \leq 6$ verglichen. Die gemittelte 1-Partikeldichtefunktion ρ_1^h beschreibt den Abfall der 2-Partikeldichtefunktion für $r \rightarrow 6$, sodass die aus Gleichung (4.3) berechnete Korrelationsfunktion der homogenen Korrelationsfunktion $d_{\text{homogen}} \equiv 0$ entspricht (Abbildung 5.30 rechts).

Um einen grundsätzlichen Fehler der Berechnung der Winkelkorrelationsfunktion aus Gleichung (4.4) auszuschließen, wird die Winkelkorrelationsfunktion über 50 Realisierungen

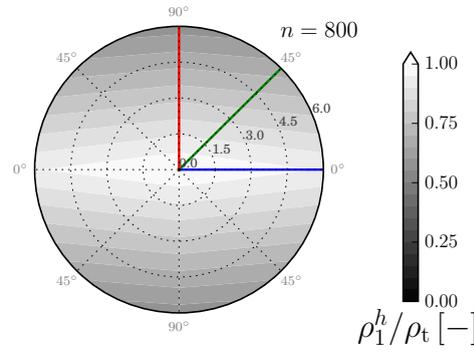


Abbildung 5.29: Die gemittelten 1-Partikeldichtefunktion ρ_1^h für $0 \leq r \leq 6$. Die blaue, grüne und rote Linie bezeichnen entsprechend den Verlauf für $\varphi = 0^\circ, 45^\circ$ und 90° (vgl. Gleichungen (5.29) bis (5.31)).

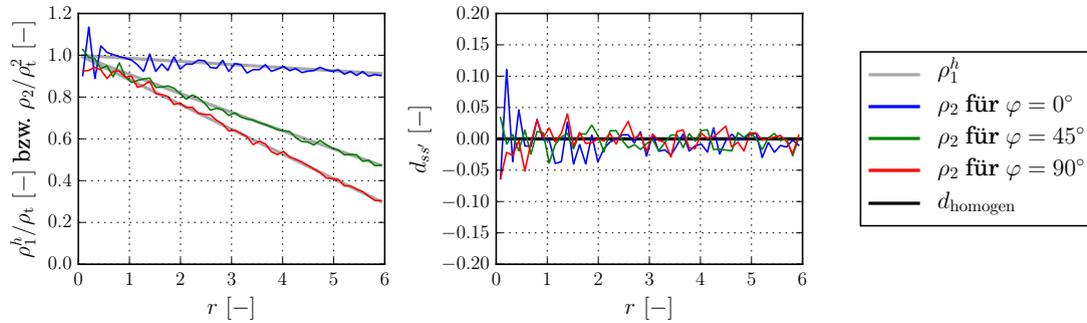


Abbildung 5.30: Der normalisierte Verlauf der gemittelten 1-Partikeldichtefunktion ρ_1^h (Gleichungen (5.29) bis (5.31)) und der 2-Partikeldichtefunktion ρ_2 von 50 Realisierungen einer homogenen Verteilung von $n = 800$ Versetzungen für $0 \leq r \leq 6$ und $\varphi = 0^\circ, 45^\circ$ und 90° (links) und der daraus resultierende Verlauf der Korrelationsfunktion im Vergleich zur homogenen Korrelationsfunktion $d_{\text{homogen}} \equiv 0$ (rechts).

von jeweils $n = 800$ zufällig homogen verteilten Versetzungen für verschiedene Radien untersucht. Für die Winkelkorrelationsfunktionen der homogenen Verteilung gilt näherungsweise $d_{ss'}^\varphi = 0$ unabhängig vom Winkel φ (Abbildung 5.31). Ein systematischer Fehler aufgrund der Berechnung der Winkelkorrelationsfunktion lässt sich damit ausschließen. Allerdings wird mit zunehmendem maximalen Radius r_1 ein zunehmendes Rauschen in der Winkelkorrelationsfunktion beobachtet.

Wie in Kapitel 4.3 beschrieben, wird die Charakterisierung des Kontinuumslimits in drei Aspekte aufgeteilt: die Invarianz der Korrelationsfunktionen bzgl. der Anzahl der Versetzungen, die Abhängigkeit von der Anfangsbedingungen und der Einfluss des endlichen Gebiets.

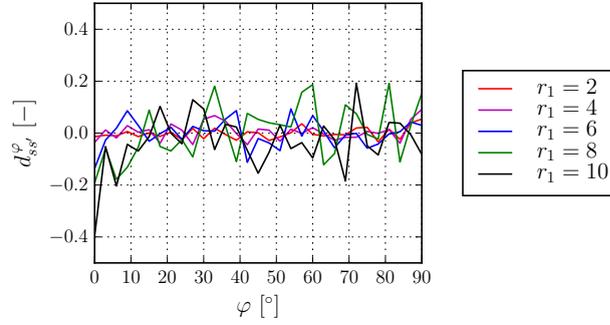


Abbildung 5.31: Die Winkelkorrelationsfunktionen einer homogenen Verteilung von $n = 800$ Versetzungen berechnet für unterschiedliche Radien r_1 und jeweils 50 Realisierungen.

5.4.1. Kontinuumslimit für polarisierte Dichten

Die in Abbildung 4.1 dargestellte heuristische Analyse des Kontinuumslimits für polarisierte Dichten zeigt für eine zunehmende Anzahl von Versetzungen einen zunehmenden Einfluss des Randes des beschränkten Systems. Es bildet sich eine starke Versetzungswand am Rand, die sich für $n \geq 400$ Versetzungen als regelmäßig Struktur manifestiert. Im Folgenden wird der Einfluss des Randes deswegen als struktureller Einfluss und dessen Sichtbarkeit in den Ensemblemittelwerten als Strukturbildung bezeichnet. Um den strukturellen Einfluss zu charakterisieren, wird die Korrelationsfunktion für $n = 25$ und 800 positive Versetzungen untersucht.

Anders als in Kapitel 2.2.2 eingeführt, wird die Korrelationsfunktion in Abbildung 5.32 für den absoluten Radius dargestellt, der mit der absoluten Systemgröße normiert ist. Da die Berechnung der Korrelationsfunktion eine homogene Verteilung von Versetzungen voraussetzt, muss das untersuchte Gebiet der polarisierten Versetzungsdichte eingeschränkt werden. Es werden die inneren 80% des Systems gewählt, so dass das betrachtete Gebiet auf $\Omega_{\text{eff}} = [0.1L, 0.9L] \times [0.1H, 0.9H]$ verkleinert wird. Dadurch ergibt sich für die beiden untersuchten Fälle eine effektive Anzahl von Versetzungen auf Ω_{eff} von $n_{\text{eff}} = 9$ und $n_{\text{eff}} = 309$. Der absolute Radius ist mit $H_{\text{eff}} = 0.8H$ normiert und die Ergebnisse sind symmetrisiert. In Abbildung 5.32 lässt sich der strukturelle Einfluss auf die berechneten Korrelationsfunktionen beobachten. Erstaunlicherweise zeigt sich dieser Einfluss unabhängig von der Anzahl der Versetzungen, obwohl eine Strukturbildung in Abbildung 2.2.2 nur für $n \geq 400$ zu beobachten ist. Der mittlere Versetzungsabstand $\rho_t^{-1/2}$ ist durch die türkise Linie gekennzeichnet und der strukturelle Einfluss auf die Korrelationsfunktion wird ab einem Abstand von ungefähr $1.5\rho_t^{-1/2}$ sichtbar.

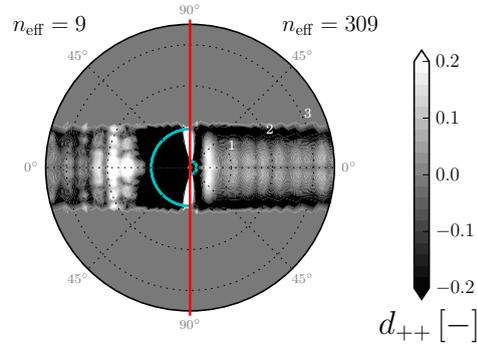


Abbildung 5.32: Korrelationsfunktionen d_{++} der polarisierten Dichte für $n = 25$ und 800 Versetzungen. Die effektive Anzahl der Versetzungen auf Ω_{eff} ist $n_{\text{eff}} = 9$ und 309 . Die Ergebnisse sind symmetrisiert und jede Hälfte zeigt das Ergebnis für den Radius $0 \leq r \leq 3.5$, der mit der absoluten Systemgröße H_{eff} normiert ist. Der mittlere Versetzungsabstand $\rho_t^{-1/2}$ ist in Türkis eingezeichnet.

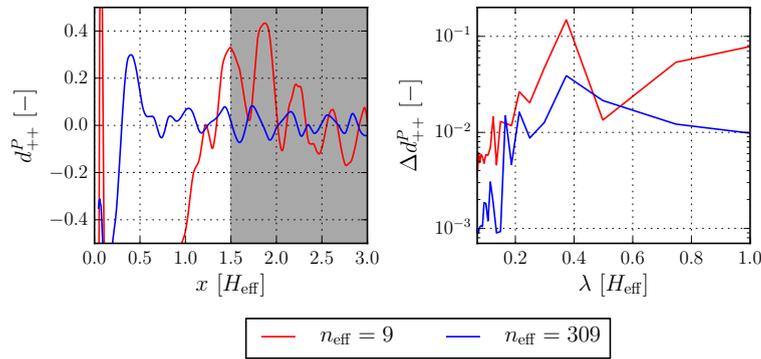


Abbildung 5.33: Die projizierte Korrelationsfunktionen d_{++}^P aus Gleichung (5.32) und die entsprechende Fourier Transformierte der projizierten Korrelationsfunktion aus dem grauen Bereich.

Um den strukturellen Einfluss der beiden Konfigurationen vergleichen zu können, wird die Korrelationsfunktion d_{++} in x -Richtung ($\varphi = 0^\circ$) projiziert. Die projizierte Korrelationsfunktion

$$d_{++}^P(x) = \frac{1}{y_0} \int_0^{y_0} d_{++}(\mathbf{r}(x, y)) dy \quad (5.32)$$

wird durch Integration in y -Richtung ($\varphi = 90^\circ$) berechnet. Abbildung 5.33 (links) stellt die resultierende Korrelationsfunktion für $y_0 = 0.25H_{\text{eff}}$ dar. Da der strukturelle Einfluss für $n_{\text{eff}} = 9$ nur für $x > 1.5H_{\text{eff}}$ beobachtet wird, wird die Fouriertransformierte der projizierten Korrelationsfunktion auf $[1.5H_{\text{eff}}, 3.0H_{\text{eff}}]$ bestimmt. Das Ergebnis der Fouriertransformation in Abbildung 5.33 (rechts) bildet die Wellenlänge gegen die Amplitude ab. Beide Fälle resultieren in einer ähnlichen Signatur mit einer (lokalen) maximalen Amplitude für

$\lambda_{\text{strukt}} = 0.374 H_{\text{eff}}$, wobei die Amplitude unterschiedlich ist. Für $n_{\text{eff}} = 9$ wird zusätzlich eine große Amplitude für eine Wellenlänge in Größenordnung von $1.5 H_{\text{eff}}$ gefunden. Die Wellenlänge $\lambda_{\text{strukt}} = 0.374 H_{\text{eff}}$ charakterisiert den strukturellen Einfluss, da diese unabhängig von der Anzahl der Versetzungen n_{eff} als Einfluss auf die Korrelationsfunktion beobachtet wird.

Abbildung 5.32 weist eine Korrelation kleiner -0.2 im Bereich des oberen und unteren Randes des Gebietes auf. Daraus lässt sich folgern, dass die Verteilung der Versetzungen deutlich von der homogenen Verteilung abweicht und somit nicht mit der relativen 1-Partikeldichtefunktion in Gleichung (4.1) korrigiert werden kann. Da der Berechnung der Korrelationsfunktion die Annahme einer homogenen Verteilung zugrunde liegt, findet eine weitere Analyse des Kontinuumslimit für den Fall polarisierter Dichten nicht statt. Auf die Ergebnisse des strukturellen Einflusses hat die Verletzung der Annahme einer homogenen Verteilung keine Auswirkung.

5.4.2. Kontinuumslimit für nicht-polarisierte Dichten

Die Simulationsreihen der nicht-polarisierten Dichten werden über jeweils $n = 25, 50, 100, 200, 400$ und 800 positive und negative Versetzungen, also einer Gesamtanzahl von $2n$ Versetzungen, für das beschränkte Gebiet Ω mit dem Seitenverhältnis $L/H = 8$ erstellt. Der Umfang der Simulationsreihen ist durch $n \cdot \bar{m}_S(n) = 4.56 \cdot 10^4$ festgelegt, sodass die maximale Anzahl an Simulationen zu einer gegebenen Anzahl von Versetzungen n durch $\bar{m}_S(n) = 4.56 \cdot 10^4/n$ gegeben ist.

Einfluss des Randes

Für polarisierte Dichten wird eine ausgeprägte Strukturbildung in den Ensemblemittelwerten der 1-Partikeldichtefunktionen mit zunehmender Anzahl an Versetzungen beobachtet (Abbildung 4.1). Abbildung 5.34 zeigt die Ensemblemittelwerte der 1-Partikeldichtefunktionen der Gesamtdichte für den Fall der nicht-polarisierten Dichten für $n = 25, 100, 400$ und 800 Versetzungen auf dem beschränkten Gebiet $\Omega = [0, L] \times [0, L/8]$. Die Ensemblemittelwerte sind mit der mittleren Anzahl der Versetzungen ρ_t normalisiert und die Anzahl der Simulationen $\bar{m}_S(n)$ jeder Simulationsreihe ist so gewählt, dass die Gesamtanzahl der Versetzungen $n \cdot \bar{m}_S(n) = 4.56 \cdot 10^4$ ist. Die Ergebnisse sind entlang der x - und der y -Achse symmetrisiert und jeder Quadrant zeigt das Ergebnis einer Simulationsreihe mit einer Auflösung von $h_* = H/32$. Die Ergebnisse der nicht-polarisierten Dichte zeigen keinen strukturellen Einfluss und beschreiben eine nahezu homogene Versetzungsdichte.

Abbildung 5.35 zeigt die zugehörigen Korrelationsfunktionen für $n = 25$ und 800 Versetzungen und den entsprechenden mittleren Versetzungsabstand in türkis. Wie für den Fall der polarisierten Dichte, werden die Korrelationsfunktionen hier bezogen auf den absoluten Radius, der auf die Systemgröße normiert ist, bestimmt. Es ist zu beobachten, dass für den Fall der nicht-polarisierten Dichte kein struktureller Einfluss auf die Korrelationsfunktion sichtbar wird.

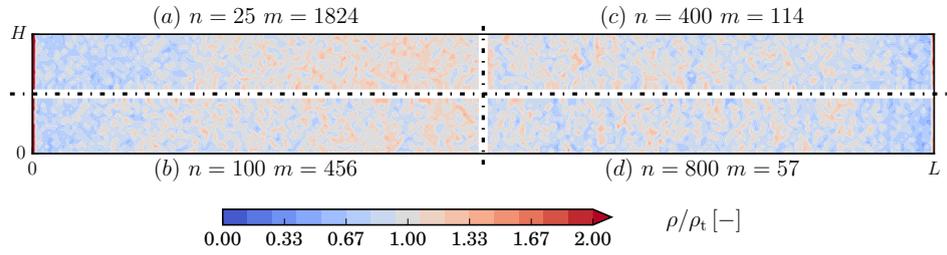


Abbildung 5.34: Die Ensemblemittelwerte der relaxierten 1-Partikeldichtefunktion ($\rho_+ + \rho_-$) für $n = 25, 100, 400$ und 800 Versetzungen auf dem beschränkten Gebiet $\Omega = [0, L] \times [0, L/8]$. Die Ensemblemittelwerte sind auf die mittlere Versetzungsdichte ρ_t normalisiert und die maximale Anzahl der Simulationen $\bar{m}_S(n)$ jeder Simulationsreihe ist so gewählt, dass die Gesamtanzahl der Versetzungen $n \cdot \bar{m}_S(n) = 4.56 \cdot 10^4$ ist. Die Ergebnisse sind entlang der x - und der y -Achse symmetrisiert und jeder Quadrant zeigt das Ergebnis einer Simulationsreihe mit einer Auflösung von $h_* = H/32$.

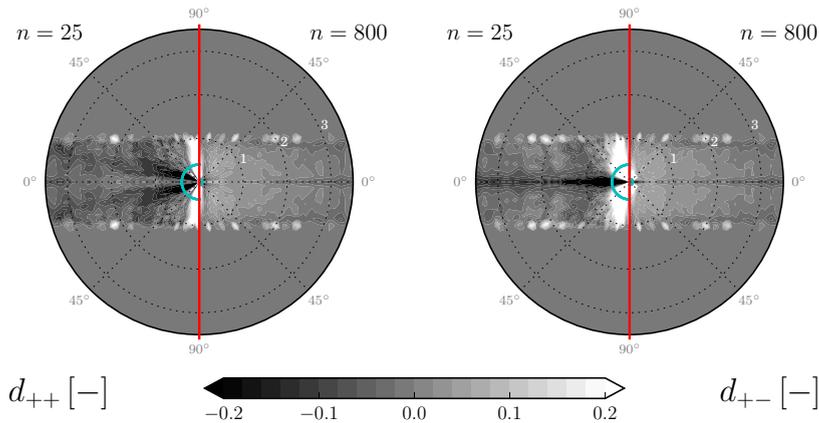


Abbildung 5.35: Wie Abbildung 5.32, aber für den Korrelationsfunktionen d_{++} und d_{+-} der nicht-polarisierten Dichte für $n = 25$ und 800 Versetzungen.

Der Einfluss der Anzahl der Versetzungen

Abbildung 5.36 zeigt den Einfluss der Anzahl der Versetzungen auf die Korrelationsfunktionen d_{++} und d_{+-} für nicht-polarisierte Dichten auf einem beschränkten Gebiet mit $L/H = 8$. Die Korrelationsfunktionen sind für $\varphi = 90^\circ$ durch die Höhe des Systems beschränkt, wobei das Verhältnis der Höhe zum mittleren Versetzungsabstand für $n = 25$ durch $H/\rho_t^{-1/2} = 2.5$ und für $n = 100$ durch $H/\rho_t^{-1/2} = 5$ gegeben ist.

Die Korrelationsfunktion d_{++} für Versetzungen mit gleichem Vorzeichen, wird durch die Korrelation für $\varphi = 90^\circ$ dominiert. Dies entspricht der Anordnung von positiven Versetzungen in Versetzungswänden. Die Korrelationsfunktion d_{+-} , die die Korrelation von Versetzungen mit entgegengesetztem Vorzeichen beschreibt, weist die stärkste Korrelation

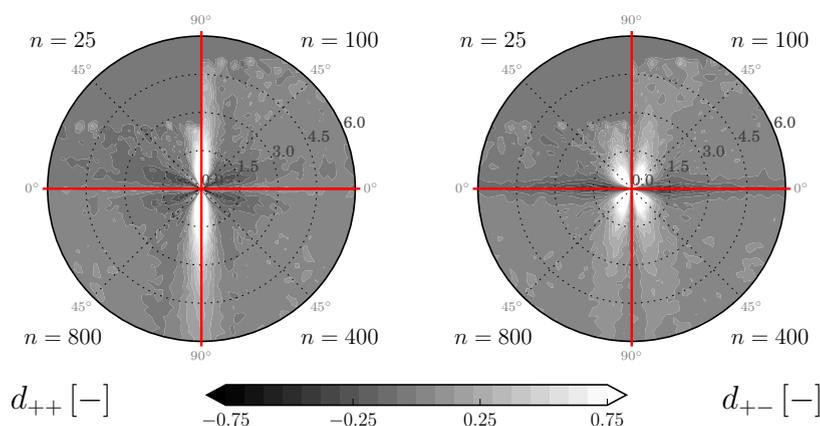


Abbildung 5.36: Korrelationsfunktionen d_{++} und d_{+-} der nicht-polarisierten Dichte für $n = 25, 100, 400$ und 800 Versetzungen. Die Ergebnisse sind symmetrisiert und jeder Quadrant zeigt das Ergebnis einer Simulationsreihe für $0.01 \leq r \leq 6$.

für $\varphi = 45^\circ$ auf, wobei mit zunehmendem Abstand der Versetzungen für $r \rightarrow 6$ die maximale Korrelation in Richtung $\varphi \approx 75^\circ$ tendiert.

Die zugehörigen Winkelkorrelationsfunktionen in Abbildung 5.37 zeigen die Konvergenz der Korrelationsfunktionen für eine zunehmende Anzahl von Versetzungen. Für $n \geq 100$ lässt sich qualitativ kein Unterschied der Winkelkorrelationsfunktionen erkennen. Für die Winkelkorrelationsfunktionen d_{++}^φ ist mit zunehmender Anzahl der Versetzungen für $n \geq 100$ eine leichte Zunahme der Korrelation für $80^\circ \leq \varphi \leq 90^\circ$ zu beobachten. Für die Winkelkorrelationsfunktionen d_{+-}^φ ist mit zunehmender Anzahl der Versetzungen eine zunehmende Korrelation für $70^\circ \leq \varphi \leq 80^\circ$ zu beobachten.

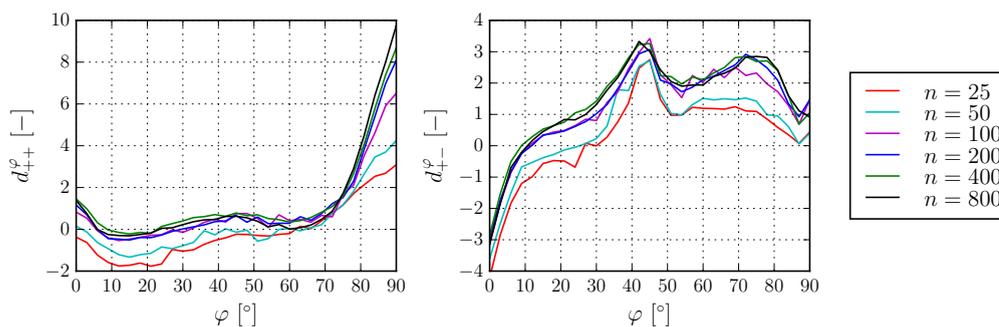


Abbildung 5.37: Die Winkelkorrelationsfunktionen d_{++}^φ und d_{+-}^φ der Korrelationsfunktionen aus Abbildung 5.36 für $n = 25, 50, 100, 200, 400$ und 800 Versetzungen.

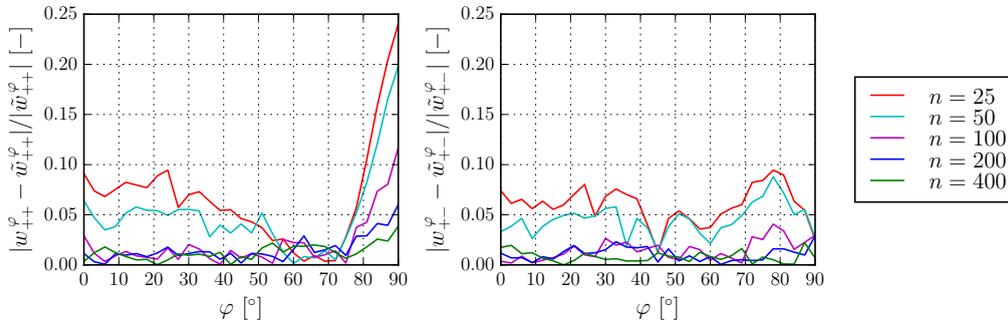


Abbildung 5.38: Der Verlauf des relativen Fehlers $|w_{ss'}^\varphi - \tilde{w}_{ss'}^\varphi|/|\tilde{w}_{ss'}^\varphi|$ abhängig von der Anzahl der Versetzungen n bezogen auf $\tilde{w}_{ss'}^\varphi$ für $n = 800$ Versetzungen.

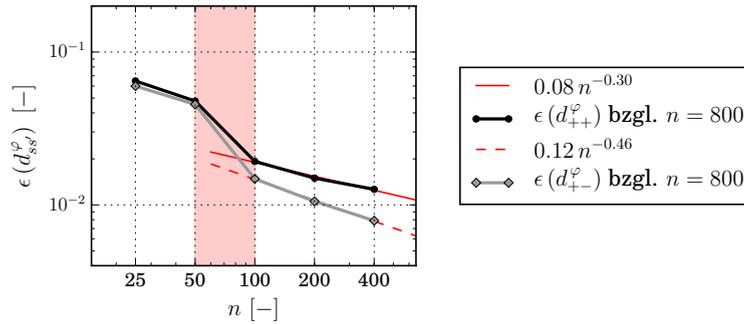


Abbildung 5.39: Der relative Fehler abhängig von der Anzahl der Versetzungen n wird bezogen auf die Winkelkorrelationsfunktion für $n = 800$ berechnet. Die roten Geraden sind die entsprechenden Approximationen des relativen Fehlers durch ein Potenzgesetz.

Um den relativen Fehler der Winkelkorrelationen zu untersuchen, wird der Quotient

$$\frac{|w_{ss'}^\varphi - \tilde{w}_{ss'}^\varphi|}{|\tilde{w}_{ss'}^\varphi|} \quad (5.33)$$

bezüglich der Gewichtsfunktion $\tilde{w}_{ss'}^\varphi$ für $n = 800$ Versetzungen berechnet und in Abbildung 5.38 für $n = 25, 50, 100, 200$ und 400 dargestellt. Die Gewichtsfunktion $w_{ss'}^\varphi$ ist in Gleichung (4.6) definiert. Die Ergebnisse zeigen, dass $n \cdot m$ ausreichend groß ist, damit $w_{ss'}^\varphi(\varphi) > 0$ unabhängig von n und φ gilt. Für $n \geq 100$ ist der größte Fehler der Korrelationsfunktion d_{++}^φ für $80^\circ \leq \varphi \leq 90^\circ$ und der größte Fehler der Korrelationsfunktion d_{+-}^φ für $70^\circ \leq \varphi \leq 80^\circ$ zu finden. In beiden Fällen ist der relative Fehler für $0^\circ \leq \varphi \leq 70^\circ$ unabhängig von n näherungsweise gleich groß und es scheint, dass der Fehler der Winkelkorrelationsfunktionen hauptsächlich durch ein Rauschen dominiert ist.

Der mittlere relative Fehler der Winkelkorrelationsfunktionen d_{++}^φ und d_{+-}^φ ist in Abbildung 5.39 dargestellt und wird bzgl. der jeweiligen Winkelkorrelationsfunktion für $n = 800$ Versetzungen berechnet. Für $n \geq 100$ lässt sich der relative Fehler der Winkelkorrelationsfunktionen jeweils durch ein Potenzgesetz abhängig von der Anzahl der Versetzungen n

approximieren. Für die Winkelkorrelationsfunktion d_{++}^{φ} konvergiert der Fehler mit einem Exponenten von -0.30 bezüglich der Anzahl der Versetzungen und für die Winkelkorrelationsfunktion d_{+-}^{φ} konvergiert der Fehler mit einem Exponenten von -0.46 bezüglich der Anzahl der Versetzungen. Im Bereich von $50 < n < 100$ wird ein starkes Abfallen des relativen Fehlers beobachtet. Da die Korrelationsfunktionen für $n < 100$ durch die Höhe der Lamelle begrenzt sind ($5\rho_t^{-1/2} > H$), wird der Fokus für die Auswertung des Kontinuumslimit auf den Bereich mit $n \geq 100$ gelegt.

Grenzwert des Kontinuumslimits

Um einen konkreten Wert für das Kontinuumslimit zu ermitteln, wird wie in Kapitel 4.3 definiert, der mittlere relative Fehler im Verhältnis zum statistischen Fehler charakterisiert. Zur Berechnung des statistischen Fehlers werden jeweils paarweise disjunkte Ensemblemittelwerte für $n \cdot m = \text{konst.}$ miteinander verglichen, damit die Anzahl der Datenpunkte, die den Ensemblemittelwerten zugrunde liegen, in allen Fällen gleich ist. Die Ensemblemittelwerte werden zufällig aus allen Simulationen gezogen, sodass für jeden Wert des statistischen Fehlers 100 und für jeden relativen Fehler 200 Paare verglichen werden. Da der relative Fehler in Abbildung 5.39 einen Sprung zwischen $n = 50$ und 100 aufweist, werden der relative Fehler und der statistische Fehler zum einen im Bereich R_1 für $n < 100$ und zum anderen im Bereich R_2 für $n \geq 100$ jeweils durch ein Potenzgesetz approximiert. Die Gesamtanzahl der Versetzungen $n \cdot m$ wird variiert und das Kontinuumslimit n_{KL} wird aus dem Schnittpunkt der Potenzgesetze der Approximation des relativen Fehlers und dem statistischen Fehler im Bereich R_2 berechnet.

Abbildungen 5.40 und 5.41 zeigen die Ergebnisse für den relativen Fehler und den statistischen Fehler der Winkelkorrelationsfunktion d_{++}^{φ} und d_{+-}^{φ} jeweils für unterschiedliche $n \cdot m$ (Abbildungen **A** bis **E**). Der mittlere statistische Fehler lässt sich durch ein Potenzgesetz bzgl. $n \cdot m$ approximieren und konvergiert in beiden Fällen mit einem Exponenten von ungefähr -0.5 .

Da für die bestimmten Werte für das Kontinuumslimit n_{KL} kein Fehler angegeben werden kann, wird die Analyse aus Abbildungen 5.40 und 5.41 insgesamt drei mal wiederholt. In Abbildung 5.42 wird der mittlere statistische Fehler abhängig von $n \cdot m$ dargestellt. Dieser wurde zu gegebenem $n \cdot m$ sowohl über den Bereich R_2 als auch über drei verschiedenen Realisierungen der beschriebenen Analyse gemittelt. Des Weiteren sind die Ergebnisse für das Kontinuumslimit n_{KL} abhängig von $n \cdot m$ für alle drei Realisierungen abgebildet. Die linke Spalte zeigt die Ergebnisse für d_{++}^{φ} und die rechte Spalte für d_{+-}^{φ} . Die Werte für das Kontinuumslimit liegen für die Winkelkorrelationsfunktion d_{++}^{φ} zwischen $336 \leq n_{\text{KL}} \leq 622$ und für die Winkelkorrelationsfunktion d_{+-}^{φ} zwischen $234 \leq n_{\text{KL}} \leq 408$. Das Kontinuumslimit schwankt zwischen den verschiedenen Realisierungen um ± 75 Versetzungen. Für die Winkelkorrelationsfunktion d_{++}^{φ} nimmt das Kontinuumslimit mit $n \cdot m \rightarrow 1.6 \cdot 10^4$ zu und für d_{+-}^{φ} ab.

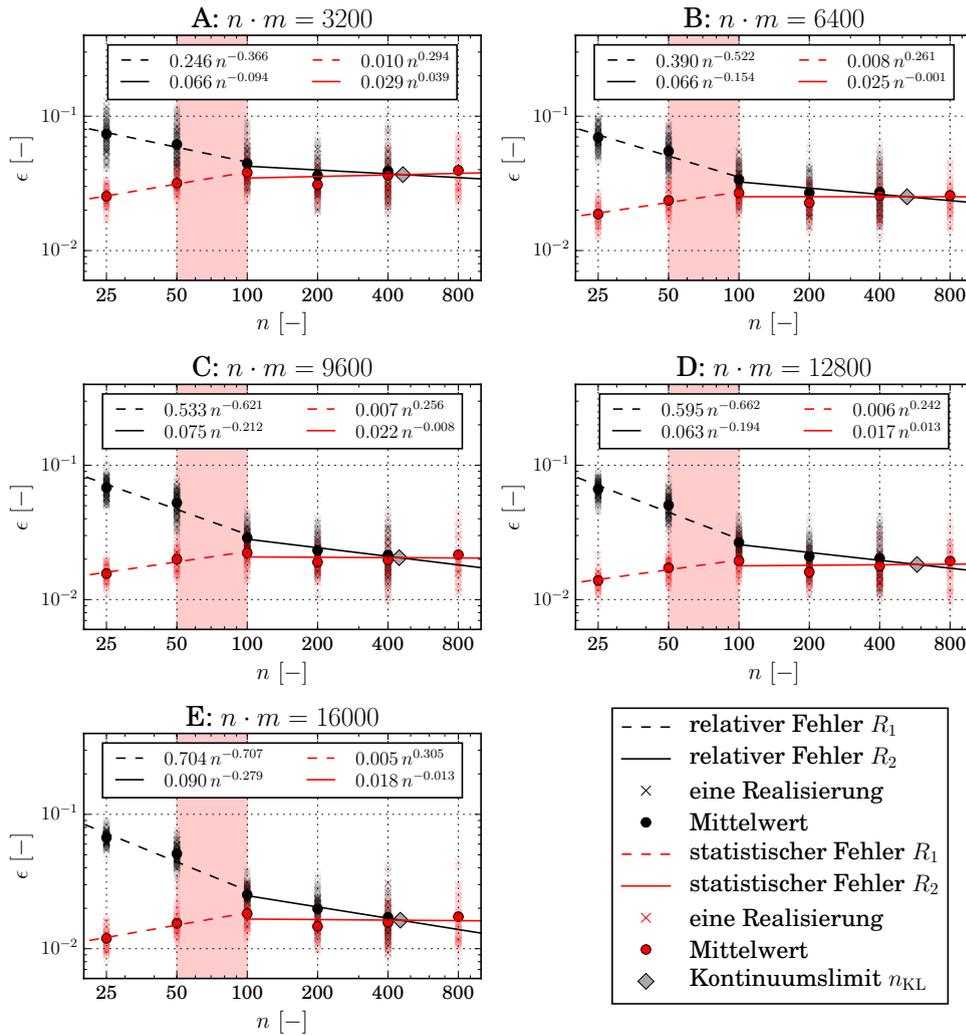
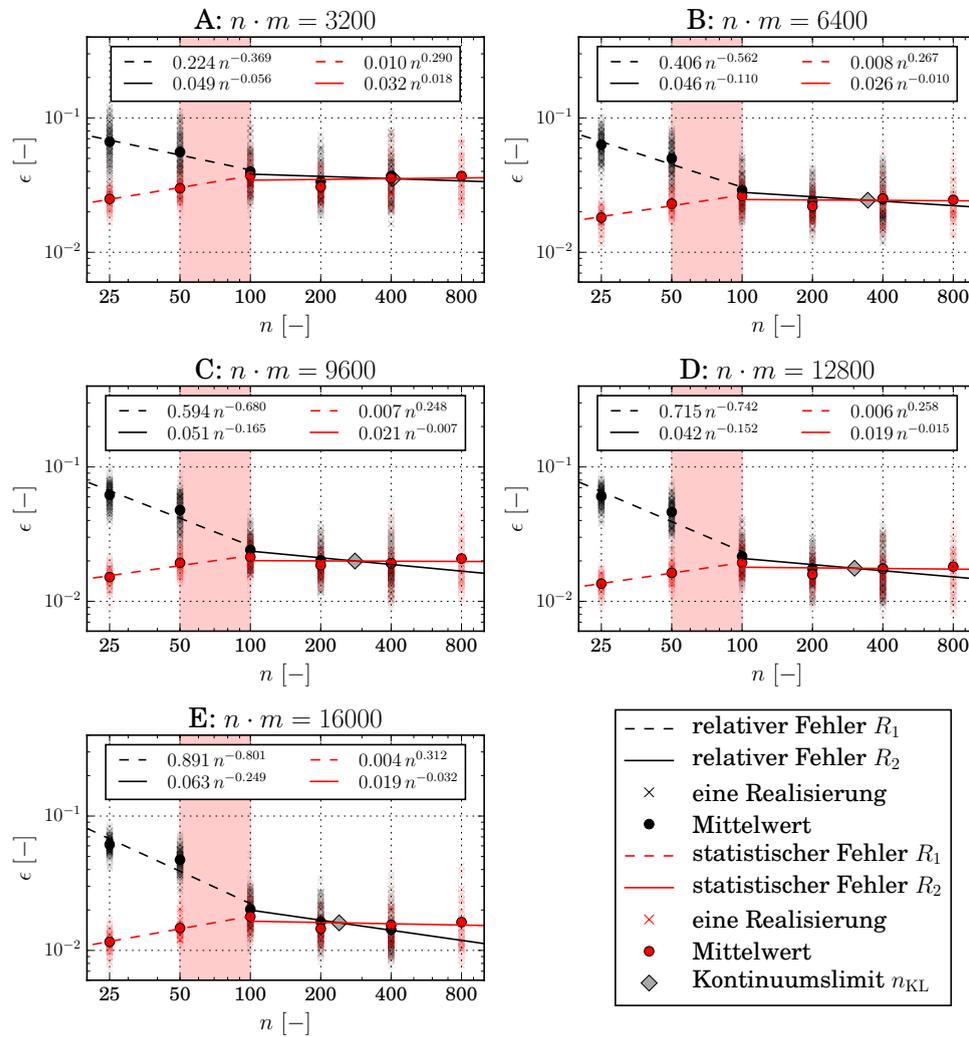


Abbildung 5.40: Abbildungen **A** bis **E** zeigen die Ergebnisse der Auswertung des relativen und des statistischen Fehlers der Winkelkorrelationsfunktion d_{++}^φ . Der relative und der statistische Fehler sind jeweils durch ein Potenzgesetz für den Bereich R_1 mit $n < 100$ und für den Bereich R_2 mit $n \geq 100$ approximiert. Das Kontinuumslimit n_{KL} wird durch den Schnittpunkt der Potenzgesetze des relativen und statistischen Fehlers in Bereich R_2 approximiert.

Abbildung 5.41: Wie Abbildung 5.40, aber für die Winkelkorrelationsfunktion d_{+-}^φ .

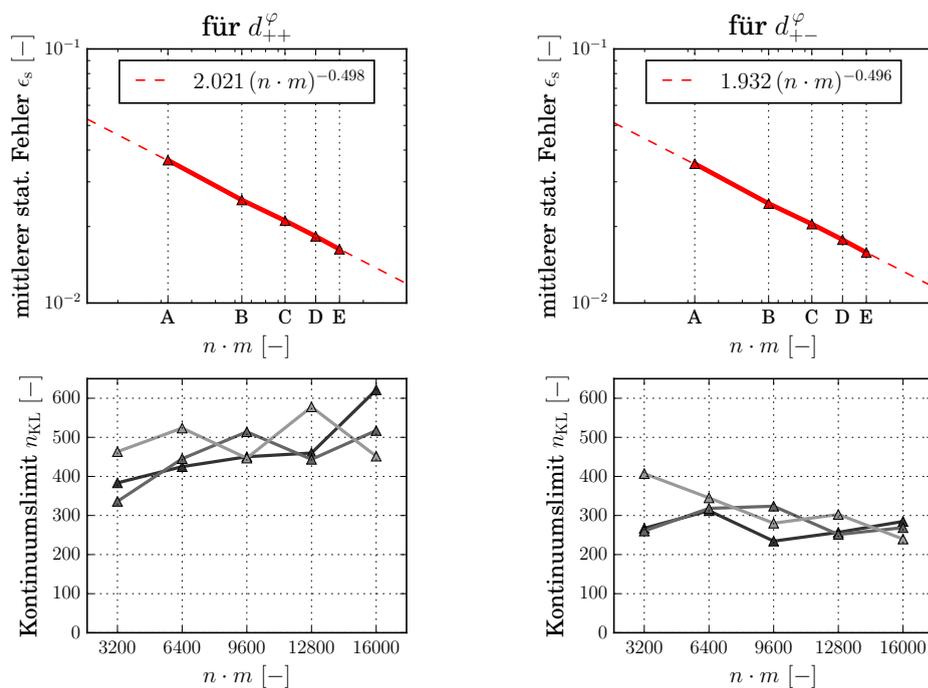


Abbildung 5.42: Vergleich des mittleren statistischen Fehlers und das berechnete Kontinuumslimit für die Fälle **A-E** aus Abbildungen 5.40 und 5.41 für drei unterschiedliche Realisierungen der Fehleranalyse.

(**A**: $n \cdot m = 3200$, **B**: $n \cdot m = 6400$, **C**: $n \cdot m = 9600$, **D**: $n \cdot m = 12800$, **E**: $n \cdot m = 16000$)

Grenzwert des Kontinuumslimits für $r_1 = 3$

In der Annahme, dass die Bereichsgrenze zwischen den Bereichen R_1 und R_2 durch den maximalen Radius bestimmt wird, wird die Analyse des Grenzwert des Kontinuumslimits für $r_1 = 3$ wiederholt. Mit dieser Wahl sollte sich der Übergang der beiden Bereich auf ungefähr $n \approx 36$ verringern. Abbildungen 5.43 bis 5.45 entsprechen den Abbildungen 5.40 bis 5.42, wobei ausschließlich der maximale Radius $r_1 = 3$ verändert wurde.

Die Ergebnisse des relativen und statistischen Fehlers in Abbildung 5.40 und 5.41 zeigen, dass sich die Bereichsgrenze entgegen der Annahme nicht verschoben hat. Wie für die Ergebnisse mit $r_1 = 6$ findet sich ein markanter Knick bei $n = 100$ Versetzungen.

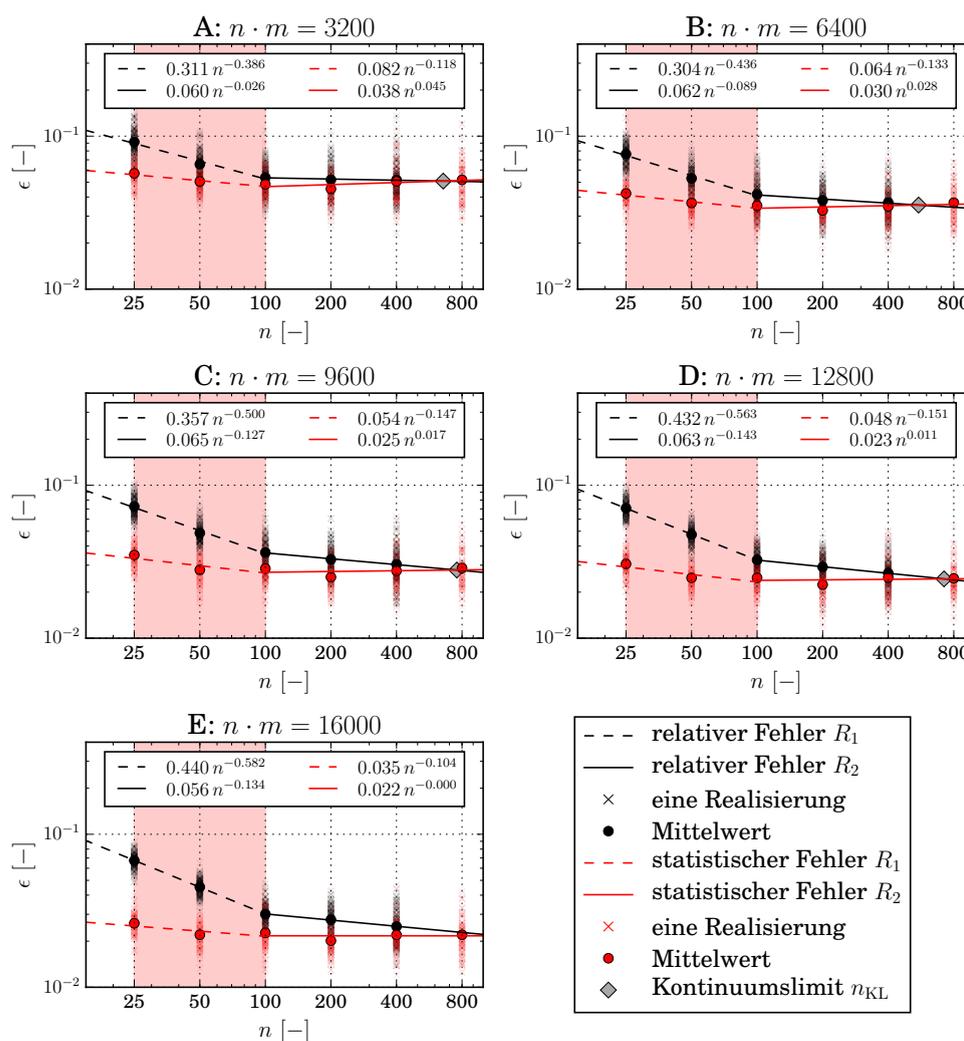


Abbildung 5.43: Wie Abbildung 5.40 für d_{++}^φ mit $r_1 = 3$.

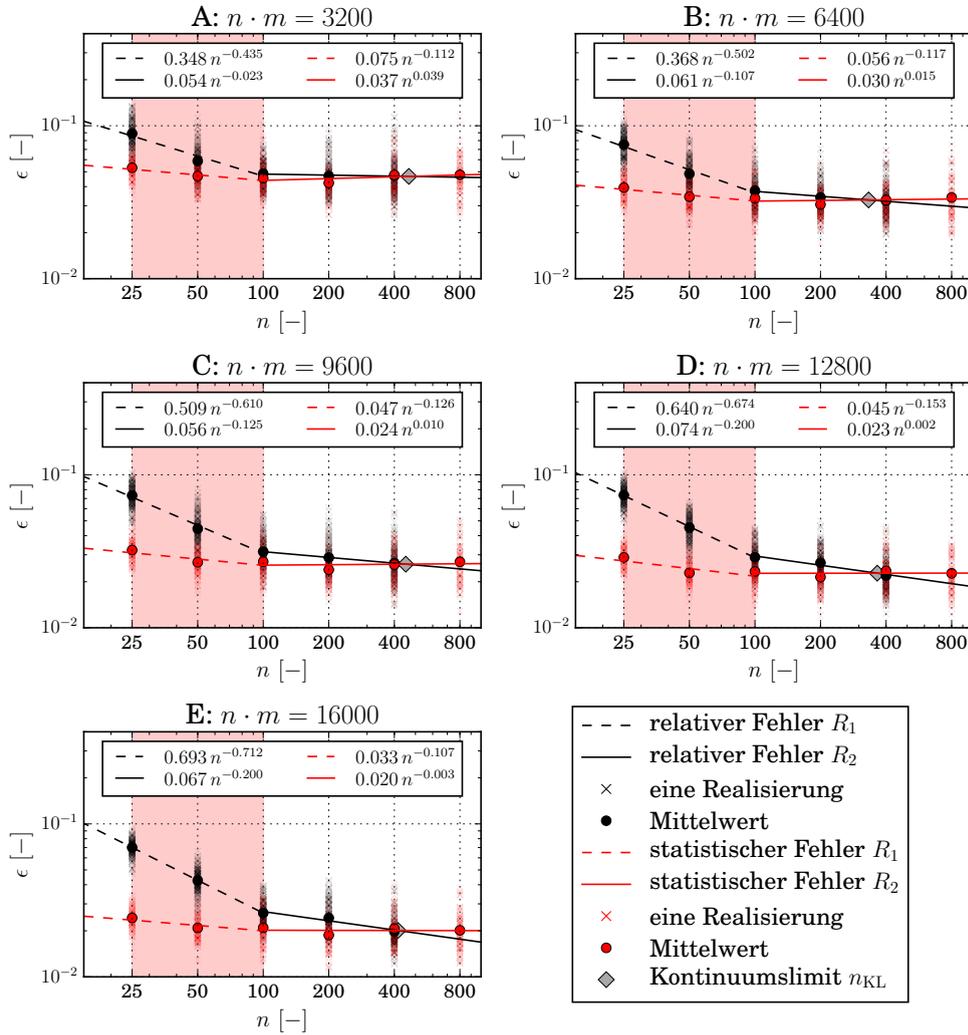


Abbildung 5.44: Wie Abbildung 5.41 für d_{+-}^φ mit $r_1 = 3$.

Das aus diesen Ergebnissen berechnete Kontinuumslimit in Abbildung 5.45 zeigt ein ähnliches Verhalten wie für den Fall mit $r_1 = 6$, wobei die Werte des Kontinuumslimits n_{KL} für d_{++}^φ ungefähr um einen Faktor 2 und die Werte für d_{+-}^φ ungefähr um einen Faktor 1.3 größer sind.

Abbildung 5.46 zeigt die Winkelkorrelationsfunktionen für $r_1 = 3$. Für $n < 100$ Versetzungen werden die Korrelationsfunktionen für $r \leq 3$ durch das beschränkte System beeinflusst. Der Verlauf des relativen Fehlers $|w_{ss'}^\varphi - \tilde{w}_{ss'}^\varphi|/|\tilde{w}_{ss'}^\varphi|$ in Abbildung 5.47 zeigt das gleiche Verhalten wie für den Fall mit $r_1 = 6$: Bis $n = 100$ ist eine Konvergenz der Winkelkorrelationsfunktionen zu beobachten und für $n \geq 100$ konvergieren nur noch die "starke" Korrelationen ($\varphi \approx 90^\circ$ für d_{++}^φ und $\varphi \approx 45^\circ$ für d_{+-}^φ). Alle anderen Bereich sind für $n \geq 100$ hauptsächlich durch das Rauschen der Winkelkorrelationsfunktionen dominiert.

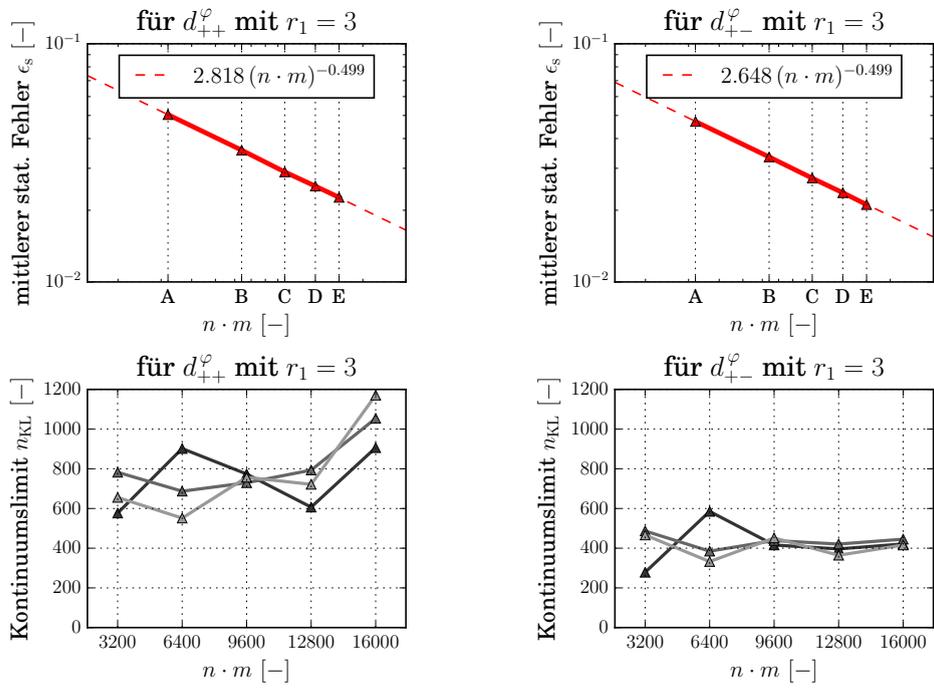


Abbildung 5.45: Wie Abbildung 5.42 mit $r_1 = 3$ bezogen auf die Analysen in Abbildungen 5.43 und 5.44.

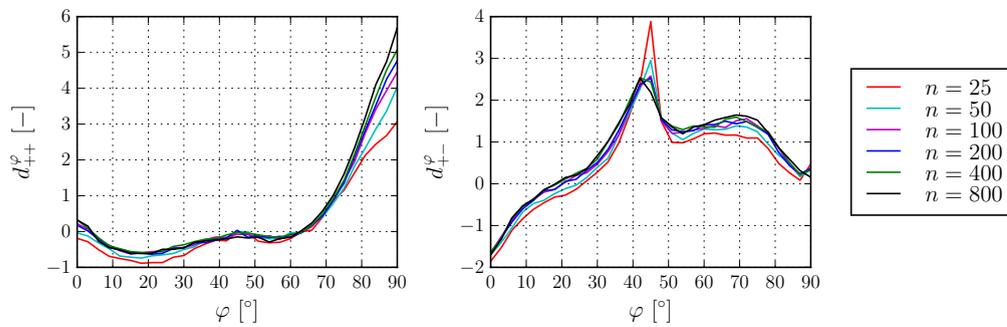


Abbildung 5.46: Wie Abbildung 5.37 für $r_1 = 3$.

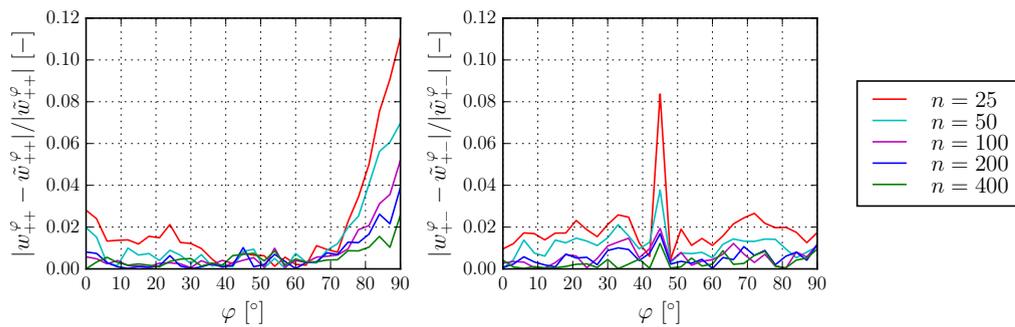


Abbildung 5.47: Wie Abbildung 5.38 für $r_1 = 3$.

Einfluss der Anzahl der Simulationen

Der Einfluss der Anzahl der Simulationen wird durch den relativen Fehler zwischen den Winkelkorrelationsfunktionen unterschiedlicher Ensemblemittelwerte berechnet. Dazu werden paarweise disjunkte Mengen über $m = 1, 2, 4, 8, 16$ und $\bar{m}_S(n)$ Simulationen zufällig aus allen vorhandenen Simulationen zu jeder Anzahl n an Versetzungen ausgewählt. Aus den Winkelkorrelationsfunktionen der zufällig gruppierten Simulationen wird der relative Fehler bzgl. der Winkelkorrelationsfunktion der $\bar{m}_S(n)$ Simulationen bestimmt. Dieser Vorgang wird für jede Anzahl an Versetzungen 100 mal wiederholt. Dabei ist die Referenz so gewählt, dass $\bar{m}_S(n) = 2 \cdot 10^4/n$ ist.

Abbildung 5.48 zeigt das Ergebnis jeder einzelnen Realisierung des relativen Fehlers (mit einem Kreuz gekennzeichnet) und dem entsprechenden Mittelwert (mit einem Kreis gekennzeichnet). Die Analyse ist für $n = 25, 100, 200, 400$ und 800 Versetzungen und die Winkelkorrelationsfunktionen d_{++}^φ und d_{+-}^φ durchgeführt. Die untere Grenze des relativen Fehlers wird durch den statistischen Fehler beschrieben. Aus Abbildungen 5.40 und 5.41 ergibt sich der statistische Fehler für $n \cdot m = 2 \cdot 10^4$ zu 1.51% für d_{++}^φ und zu 1.46% für d_{+-}^φ . Für $n \geq 100$ lässt sich der relative Fehler durch ein Potenzgesetz approximieren und konvergiert für $n \cdot m \rightarrow 2 \cdot 10^4$ gegen die untere Schranke, also den statistischen Fehler für $n \cdot m = 2 \cdot 10^4$. Das Potenzgesetz ist abhängig von der Gesamtanzahl der berücksichtigten Versetzungen $n \cdot m$ und konvergiert mit einem Exponenten von -0.49 .

In Anhang E sind die Korrelations- und Winkelkorrelationsfunktionen für jeweils eine Realisierung mit $n = 25, 100, 400$ und 800 Versetzungen zu je $m = 1, 4, 8$ und $2 \cdot 10^4/n$ Simulationen abgebildet.

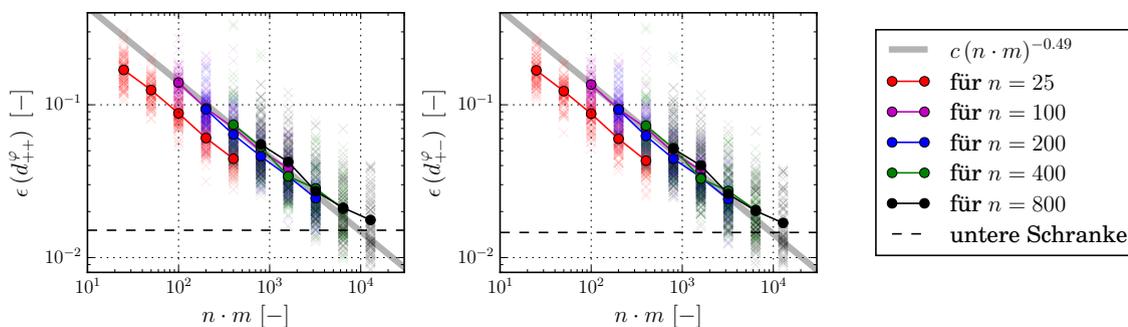


Abbildung 5.48: Der relative Fehler für eine unterschiedliche Anzahl von Simulationen abhängig von der Anzahl an Versetzungen. Die Kreuze markieren das Ergebnis einzelner Realisierungen des relativen Fehlers und die Kreise markieren den Mittelwert der jeweils 100 Realisierungen. Die untere Schranke wird durch den statistischen Fehler der Referenz mit $n \cdot m = 2 \cdot 10^4$ beschrieben. Als Referenz ist die Steigung -0.49 eingezeichnet.

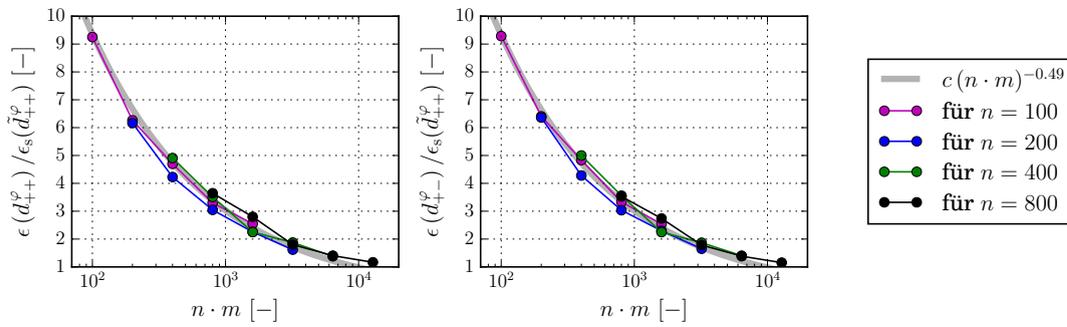


Abbildung 5.49: Die Mittelwerte des relative Fehler aus Abbildung 5.48 für $n = 100, 200, 400$ und 800 Versetzungen normiert durch den statistischen Fehler aus Abbildungen 5.40 und 5.41 für $n \cdot m = 2 \cdot 10^4$.

In Abbildung 5.49 sind die Mittelwerte des relativen Fehlers für $n = 100, 200, 400$ und 800 Versetzungen normiert durch den statistischen Fehler für d_{++}^{φ} und d_{+-}^{φ} dargestellt. Für $m = 1$ und $n = 100, 200, 400$ und 800 ergibt sich ein Verhältnis aus relativem Fehler zu statistischem Fehler von $9.3, 6.4, 5.0$ und 3.7 . Der relative Fehler für $n = 400$ Versetzungen und $m = 4$ Simulationen ist nur um ein 2.25 faches höher als der statistische Fehler für $n = 400$ Versetzungen und $m = 50$ Simulationen.

6. Diskussion

6.1. Homogenisierung der Wechselwirkung von Versetzungen

Der erste Schritt zur Homogenisierung der Wechselwirkungen ist das Homogenisieren von diskreten Versetzungen innerhalb diskreter Gleitebenen (siehe Abbildung 2.3 (c) bzw. Gleichung (2.11)). Für eine Kontinuumstheorie muss das singuläre Problem, die Darstellung von Sprüngen im Verschiebungsfeld senkrecht zur Gleitebene, regularisiert werden. Mittels der Eigendehnungsformulierung (siehe Kapitel 2.4) lässt sich eine geeignete numerische Formulierung aufstellen, falls die Auflösung des Systems dem minimalen Versetzungsabstand entspricht (Lemarchand et al., 2001). In Kapitel 3.1.2 wird mit der Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ eine numerische Korrektur der Eigendehnungsformulierung bei reduzierter Auflösung hergeleitet (siehe Gleichung (3.5)).

In Abbildung 5.2 wird das Relaxieren von Versetzungen gleichen Vorzeichens ohne externe Spannungen für homogene Versetzungskonfigurationen mit einer unterschiedlichen Anzahl n_{sp} von diskreten Gleitebenen für die Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ untersucht. Es zeigt sich, dass die Struktur des Versetzungsaufstaus auf den unterschiedlichen Gleitebenen korrekt reproduziert wird. Wie bereits von Lemarchand et al. (2001) beschrieben, werden die Wechselwirkungen, bei ausreichender Auflösung der einzelnen Versetzungen, vollständig durch die Eigendehnungsformulierung abgebildet. Da in den Simulationen zu Abbildung 5.2 die Auflösung $h_* = H/8$ größer als der minimale Versetzungsabstand $d_{\text{min}} \rightarrow 0$ im Versetzungsaufstau ist, ermöglicht die Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ das Reproduzieren des Versetzungsaufstaus innerhalb der Gleitebene.

Der Übergang zu homogenisierten Gleitebenen entspricht einem Grenzwertprozess für $n_{\text{sp}} \rightarrow \infty$. Mit zunehmender Anzahl n_{sp} von diskreten Gleitebenen, wird in Abbildung 5.2 die Bildung einer versetzungsfreien Zone auf der mittleren Gleitebene und die Verkürzung

der Länge des Versetzungsaufstaus beobachtet. Im Grenzfall von beliebig vielen Gleitebenen ordnen sich die Versetzungen, wie in den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen in Abbildung 5.4 zu erkennen ist, in der energetisch günstigen Konfiguration von Versetzungswänden an. Das zeigt sich zum einen an den starken Versetzungswänden an den senkrecht zur Gleitebene stehenden äußeren Rändern und zum anderen an den deutlich schwächer ausgeprägten, aber häufiger vorkommenden, Ansammlungen von vertikal zueinander ausgerichteten Versetzungen innerhalb des Gebiets.

Homogenisierte Gleitebenen

Der zweite Schritt zur Homogenisierung der Wechselwirkung von Versetzungen ist das Homogenisieren der Darstellung diskreter Gleitebenen. Dabei werden einzelne Gleitebenen nicht mehr aufgelöst und es wird angenommen, dass sich Versetzungen gleichen Vorzeichens lokal in Form von Versetzungswänden anordnen. Aus dieser Annahme wird die Nahfeldkorrektur τ_{nfc}^c in Gleichung (3.27) hergeleitet und ein Konstitutivgesetz (Gleichung (3.28)) formuliert. Die Höhe der Versetzungswände stimmt lokal mit der Auflösung des Systems h_* überein. Durch eine sinnvolle Wahl des Abstands der Versetzungen in den Versetzungswänden (vgl. Gleichung (3.26)), wird ein kontinuierlicher Übergang zwischen der Darstellung diskreter und homogenisierter Gleitebenen möglich (vgl. Gleichung (3.27)).

Die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen werden in Abbildung 5.5 mit Ergebnissen der kontinuierlichen Theorie für unterschiedliche Auflösungen des Systems verglichen. Dabei lassen sich die Charakteristika der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen, eine Versetzungswand an den Rändern der Gleitebenen gefolgt von einer versetzungsfreien Zone und einer homogenen Versetzungsdichte in der Mitte des Gebiets, unabhängig von der Auflösung des Systems reproduzieren. Die Ausdehnung der Versetzungswand an den Rändern der Gleitebenen der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen liegt bei ungefähr 140 nm. Für $h_* = h_4$ ist die Übereinstimmung mit dem Ensemblemittelwert der diskreten Versetzungsdynamiksimulation gut, da die Versetzungswand am Rand vollständig aufgelöst wird und die Größe und Lage der versetzungsfreien Zone für $h_* = h_4$ korrekt reproduziert wird. Beim Vergrößern des kontinuierlichen Systems mit $h_* > h_4$, kann die Versetzungswand nicht mehr vollständig aufgelöst werden und das daraus resultierende "Verschmieren" der Versetzungswand verschiebt die versetzungsfreie Zone um die Breite der verschmierten Versetzungswand in Richtung der Mitte des Gebiets. Diese "Verschmierung" lässt sich als eine Begrenzung des Gradienten der Versetzungsdichte am Rand interpretieren, wobei die Größe der versetzungsfreien Zone unabhängig von der Auflösung ist¹.

¹ Die Größe der versetzungsfreien Zone wird durch das Gleichgewicht der Versetzungswand am Rand und den gebildeten Versetzungswänden innerhalb des Gebietes bestimmt. Da die Höhe und die Anzahl der Versetzungen in den Versetzungswänden nicht gleich ist, lässt sich die Größe der versetzungsfreien Zone nicht analytisch berechnen.

Aus Abbildung 5.5 lässt sich eine wichtige Beobachtung über das Mitteln von diskreten Versetzungsdynamiksimulationen machen. Der Vergleich der diskreten Versetzungsdynamiksimulation mit der Versetzungsdichtetheorie für $h_* = h_2$ zeigt einen entscheidenden Unterschied: während das Vergrößern der Auflösung der Versetzungsdichtetheorie zum Verschieben der versetzungsfreien Zone bei gleichbleibender Größe führt, verursacht das Vergrößern der Mittelung der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen ein effektives Schrumpfen der versetzungsfreien Zone. Das eingeführte Fehlermaß des Residuumsflusses in Gleichung (5.4) angewendet auf die Ensemblemittelwerte der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen in Abbildung 5.6 macht den Effekt des Vergrößerns bzgl. des formulierten Konstitutivgesetzes aus Gleichung (3.28) sichtbar. Der Fehler am Rand wird durch das Verschmieren der Versetzungswand verursacht und breitet sich mit abnehmender Auflösung weiter in der versetzungsfreien Zone aus. Der Fehler im Bereich der homogenen Versetzungsverteilung in der Mitte des Gebietes für Auflösung $h_* = h_4$ verdeutlicht die Eigenschaft der Versetzungsdichtetheorie, lokale Fluktuationen der Versetzungsdichte zu glätten.

Es bleibt festzuhalten, dass die formulierte Versetzungsdichtetheorie die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen unabhängig von der Auflösung des Systems sinnvoll approximiert. Beim Vergleich von diskreten Versetzungsdynamiksimulationen und Ergebnissen einer Versetzungsdichtetheorie muss beim Mitteln die Auflösung des Systems berücksichtigt werden. Ein aussagekräftiger Vergleich kann nur bei ausreichender Auflösung der wichtigsten strukturellen Einflussfaktoren, in diesem Fall die Auflösung der Versetzungswand, geschehen.

Für den Fall einer nicht-polarisierten Versetzungsdichte, die einer homogenen Scherung ausgesetzt wird, können die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamik reproduziert werden (vgl. Abbildung 5.7). Das Dehnungsprofil skaliert mit der Anzahl der Versetzungen und der externen Scherspannung. Dabei lässt sich wie für den Fall der polarisierten Dichte beobachten, dass die Auflösung des Gradienten am Rand durch die Auflösung des Systems beschränkt ist. Für die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse ist entscheidend, dass die dominierenden Wechselwirkungen, in diesem Fall die Dipolbildung, durch die Formulierung von Dickel et al. (2014) in Gleichung (5.6) in der kontinuierlichen Theorie richtig abgebildet werden.

Es bleibt festzuhalten, dass eine allgemeine Darstellung mittels der kontinuierlichen Theorie möglich ist, die Auflösung von Details hingegen von der Auflösung des Systems abhängig ist.

Übergang zwischen diskreten und homogenisierten Gleitebenen

Um den Unterschied zwischen der Nahfeldkorrektur für diskrete Gleitebenen $\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ und der Nahfeldkorrektur für homogenisierte Gleitebenen $\tau_{\text{nfc}}^{\text{c}}$ charakterisieren zu können, wird der

relative Anteil der Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ zur Relaxierung des Systems mit diskreten Gleitebenen mit dem Anteil der Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{c}}$ zur Relaxierung des kontinuierlichen Systems verglichen. Tabelle 5.1 offenbart, dass eine zunehmende Anzahl an Gleitebenen mit einer Abnahme des Einflusses der Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ einhergeht. Dieser Effekt entspricht der Beobachtung, dass sich Versetzungen mit einer zunehmenden Anzahl an Gleitebenen vermehrt vertikal anordnen und so durch ihre Konfiguration zur Relaxation des Systems beitragen. Für das kontinuierliche System wird der Einfluss der Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{c}}$ mit abnehmender Auflösung größer. Dies entspricht der Tatsache, dass mit abnehmender Auflösung ein zunehmender Anteil der Interaktionen durch die Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{c}}$ abgebildet wird. Bei gleicher Auflösung $h_* = h_4$ unterscheidet sich der Einfluss von $\tau_{\text{nfc}}^{\text{d}}$ und $\tau_{\text{nfc}}^{\text{c}}$ um einen Faktor 5.

Um den Übergang zwischen der Darstellung diskreter und homogenisierter Gleitebenen zu untersuchen, wird das formulierte Konstitutivgesetz (II.a) mit dem Konstitutiv (II.b) nach Groma et al. (2003) (siehe Gleichung (5.12)) verglichen. Dieser Vergleich wird gewählt, da die Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{c}}$ und die Rückspannungsformulierung τ_{b} von Groma et al. (2003) für den Fall von mehr als einer Versetzung pro Mittelungsvolumen bis auf einen Faktor übereinstimmen und die Formulierung der Nahfeldkorrektur $\tau_{\text{nfc}}^{\text{c}}$ im Falle von weniger als einer Versetzung pro Mittelungsvolumen zur Darstellung diskreter Gleitebenen übergeht. Um den Einfluss der Anzahl der Versetzungen sichtbar zu machen, wird die Anzahl der Versetzungen reduziert und die Residuumsflüsse beider Konstitutivgesetze für $n = 400, 100$ und 25 Versetzungen in Abbildungen 5.8, 5.9 und 5.10 verglichen.

Im Bereich der versetzungsfreien Zone fällt auf, dass ein zunehmender Residuumsfluss mit abnehmender Anzahl von Versetzungen zu beobachten ist. Der Einfluss der Anzahl der Versetzungen wird in der Diskussion zu den Ergebnissen des Kontinuumslimits aufgegriffen und entsprechend in Abschnitt 6.3 diskutiert. An dieser Stelle ist ausschließlich der Vergleich der beiden Theorien ausschlaggebend. Für das formulierte Konstitutivgesetz (II.a) ist zu beobachten, dass der Fehler in einer ähnlichen Größenordnung bleibt und mit abnehmender Auflösung für $n = \textit{konst.}$ im Bereich der versetzungsfreien Zone zunimmt. Für die Rückspannungsformulierung (II.b) tritt mit zunehmender Auflösung eine starke Fluktuation des Residuumsflusses auf. Der Vergleich des Residuumsflusses von Konstitutivgesetz (II.a) und der Rückspannungsformulierung (II.b) zeigt, dass diese Fluktuationen auftreten, wenn die mittlere Anzahl von Versetzungen pro Mittelungsvolumen kleiner als 0.39 ist (vgl. Tabelle 5.2). Prinzipiell lässt sich aus dieser Beobachtung keine Schlussfolgerung über die Richtigkeit der Ergebnisse des Konstitutivgesetzes (II.a) folgern. Allerdings verdeutlicht sie die Wichtigkeit der Modellierung des Übergangs von diskreter zu kontinuierlicher Darstellung, da das Konstitutivgesetz nach Groma et al. (2003) seine Allgemeingültigkeit verliert, wenn die mittlere Anzahl von Versetzungen kleiner als 0.39 Versetzungen pro Mittelungsvolumen ist.

Allgemeine Darstellung der Wechselwirkung von Versetzungen

Die bisher diskutierten Systeme sind ausnahmslos quasi 1-dimensionale Systeme. Für das Modellieren der Balkenbiegung werden zwei zueinander geneigte Gleitsysteme in einer 2-dimensionalen Darstellung untersucht.

Um den Einfluss der Diskretisierung der Eigendehnungsformulierung auf die Approximation der inneren Spannung τ_{int} (vgl. Kapitel 2.4 und Gleichung (2.34)) für geneigte Gleitsysteme zu charakterisieren, werden konforme und nicht-konforme Diskretisierungen miteinander verglichen (siehe Abbildung 5.11). Eine konforme Diskretisierung zeichnet sich dadurch aus, dass Kanten der Diskretisierung parallel zur Gleitrichtung orientiert sind. Abbildung 5.12 zeigt, dass nicht-konforme Diskretisierungen im Fall von starker Lokalisierung der plastischen Dehnung einen Fehler im resultierenden Spannungsfeld induzieren, da die nicht-konforme Diskretisierung künstliche Gradienten der plastischen Dehnung erzeugt, sodass auch eine ursprünglich konstante plastische Dehnung eine innere Spannung verursacht. Dieser Fehler kann zwar durch Glätten der Gradienten klein gehalten werden (Jamond et al., 2016), allerdings lässt sich der Einfluss einer solchen Glättung nur schwer nachvollziehen. Für eine sinnvolle Implementierung der Versetzungsdichtetheorie, welche eine Lokalisierung unabhängig von der Auflösung des Systems erlaubt, muss eine konforme Diskretisierung gewählt werden.

Für den Einfluss der gewählten Diskretisierung im Fall der Balkenbiegung wird zwischen einer diskreten und einer homogenen Quellverteilungen unterschieden. Für den Fall einer diskreten Quellverteilung (Q1) zeigt Abbildung 5.23, dass die inneren Spannungen unabhängig von der Auflösung des Systems konsistente Ergebnisse liefern. Im Fall des homogenisierten Quellmodells mit homogener Quellverteilung (Q2) hängt die Vorhersage der Quellaktivierungsrate von der Darstellung der Normaldehnung an der Balkenoberfläche und dem Gradienten der Normaldehnung senkrecht zur Balkenoberfläche ab. Mit zunehmender Verformung lokalisiert die elastische Dehnung über dem Balkenquerschnitt an der Balkenoberfläche. Abbildung 5.24 zeigt, dass das Vergrößern des Systems keinen Einfluss auf die Ergebnisse hat, so lange der Gradient der Normaldehnung aufgelöst wird. Abhängig von der Auflösung des Systems variiert der Punkt, ab dem eine Abhängigkeit der Auflösung sichtbar wird. Dieser Einfluss sollte zusätzlich über ein Kriterium abgesichert werden, welches z.B. die Länge des Versetzungsaufstaus an der neutralen Faser im Vergleich zur Diskretisierung am Rand abbildet. Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse des homogenisierten Quellmodells im Detail diskutiert.

6.2. Homogenisierung des Quellmechanismus

Das homogenisierte Quellmodell basiert auf der Idee, fehlende Informationen, aufgrund des Homogenisierens des Systems in Ort und Zeit, mit Informationen aus der makroskopischen Belastung und Maßen für den Zustand des Systems zu ersetzen. Mit den Ergebnissen des

Zugversuchs in Kapitel 5.2 und der Biegung in Kapitel 5.3 wird die obere Schranke für die globale Quellaktivierungsrate und der Übergang von einer diskreten zu einer homogenen Quellverteilung untersucht. Es wird der Einfluss der Diskretisierung untersucht, wobei der Zeitschritt Δt aufgrund der Abmessung und der Auflösung des Systems (siehe Abschnitt 5.3.1) ähnlich dem Zeitschritt der diskreten Versetzungsdynamik mit $\Delta t < t_{\text{char}}$ ist (vgl. Kapitel 3.2).

Quellmodell im Zugversuch

Der Zugversuch wird für durchlässige und undurchlässige Ränder durchgeführt, wobei an den Ränder senkrecht zur Zugrichtung eine Verschiebungsrandbedingung aufgebracht und diese Ränder in beiden Fällen als undurchlässig modelliert werden (siehe Abbildung 5.13). Abhängig von der Quellverteilung können sich an den geschlossenen Rändern Versetzungsaufstaus bilden, welche eine Verfestigung des Systems verursachen.

Der Zugversuch ohne Versetzungsaufstau dient dazu, den Grenzfall der globalen oberen Schranke der Quellaktivierungsrate des homogenisierten Quellmodells (Gleichung (3.35)) zu validieren. Der Fall einer diskreten Quelle mit durchlässigen Rändern wird mit einer diskreten Quellaktivierung, also dem Emittieren einer ganzen Versetzung beim Überschreiten der kritischen Spannung, validiert, welche sich aufgrund der Auflösung als Näherung einer diskreten Versetzungsdynamiksimulationen interpretieren lässt. Sowohl der Zugversuch mit durchlässigen Rändern und einer diskreten Quelle (Abbildung 5.14) als auch der Zugversuch mit durchlässigen Rändern und einer homogenen Verteilung in der Mitte des Gebietes (Abbildung 5.16 gestrichelt) zeigt, dass das homogenisierte Quellmodell die obere Schranke der Quellaktivierungsrate richtig vorhersagt und makroskopisch ideal-plastisches Materialverhalten zu beobachten ist. Diese Ergebnisse lassen sich unabhängig von der Auflösung des Systems reproduzieren. In diskreten Versetzungsdynamiksimulationen ist die obere Schranke der Quellaktivierungsrate nicht explizit bekannt und ergibt sich aus der zeitlichen und räumlichen Auflösung der einzelnen Quellaktivierungen und deren Beitrag zum Relaxieren des Systems. Da diese Information in einem homogenisierten System nicht aufgelöst wird, ist das Reproduzieren des ideal-plastischen Materialverhaltens die Grundlage zur Bestimmung der Quellaktivierungsrate des homogenisierten Quellmodells.

Im Zugversuch mit Versetzungsaufstau lässt sich der Einfluss des Versetzungsaufstaus auf die Verfestigung des Systems beobachten. Sowohl der Zugversuch mit undurchlässigen Rändern und einer diskreten Quelle (siehe Abbildung 5.15) als auch der Zugversuch mit undurchlässigen Rändern und einer homogene Quellverteilung (siehe Abbildung 5.17) zeigt eine Netzabhängigkeit der Verfestigung des Systems. Die Grundlage für die Reproduzierbarkeit der Verfestigung ist die Reproduzierbarkeit des Versetzungsaufstaus. Die Ergebnisse der Wechselwirkungen von Versetzungen in Kapitel 5.1 zeigen, dass der Versetzungsaufstau von der Versetzungsdichtetheorie mit Nahfeldkorrektur in einem unendlichen Medium reproduziert wird. Im Gegensatz dazu ist der Zugversuch nicht in ein unendliches

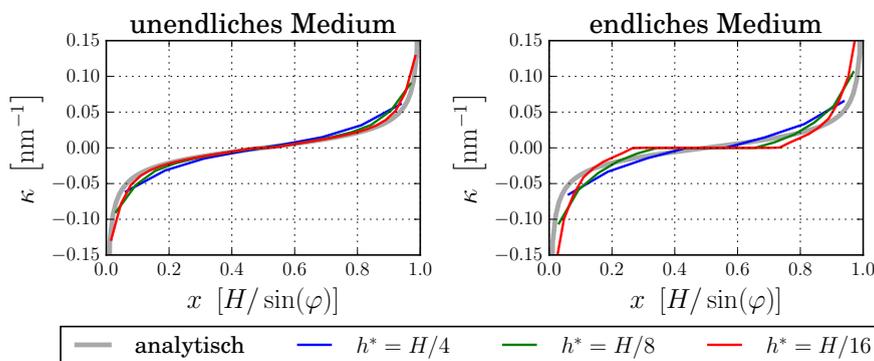


Abbildung 6.1: Untersuchung des Versetzungsaufstaus für die Eigendehnungsformulierung eines geeigneten Systems. Das Gebiet $L \times H$ ist eingebettet in ein unendliches Medium (links) und freistehend als endliches Gebiet modelliert (rechts). κ beschreibt die Liniendichte entlang der Gleitebene.

Medium eingebettet. In Abbildung 6.1 wird der doppelte Versetzungsaufstau in einem unendlichen Medium mit dem Versetzungsaufstau in einem endlichen Medium verglichen. Es sind $n = 10$ Versetzungen auf einer diskreten Gleitebene verteilt und mit einer effektiven Schubspannung von $\tau_{\text{ext}} = 167.5$ MPa belastet, die so gewählt ist, dass alle Versetzungen im unendlichen Medium zu geometrisch notwendigen Versetzungen werden und die Länge des Versetzungsaufstaus der Länge der Gleitebene $H/\sin(\varphi)$ entsprechen sollte. Das Gebiet hat die Größe $L \times H$ und der Neigungswinkel des Systems ist $\varphi = 45^\circ$. Die Ergebnisse im unendlichen Medium sind unabhängig von der Auflösung des Systems und stimmen mit der analytischen Lösung von Hirth und Lothe (1982)

$$\kappa_{\text{ana}}(x) = \frac{2(1-\nu)\tau_{\text{ext}}}{\mu b} \frac{x + H/2 \sin \varphi}{\sqrt{(H/2 \sin \varphi)^2 - (x + H/2 \sin \varphi)^2}} \quad (6.1)$$

näherungsweise überein. Für die Ergebnisse im endlichen Medium ist zu beobachten, dass die Länge des Versetzungsaufstaus mit der Auflösung des Systems variiert. Je größer die Auflösung desto kürzer die Länge des Versetzungsaufstaus². Diese Beobachtung stimmt mit der beobachteten Zunahme der Verfestigung mit abnehmender Auflösung in Abbildungen 5.15 und 5.17 überein, da bei geringerer Auflösung ein längerer Versetzungsaufstau vorliegt und somit eine größere Rückspannung auf die Quelle wirkt.

Trotz der beobachteten Netzabhängigkeit lässt sich bei gleicher Auflösung $h^* = \text{konst.}$ der Einfluss der Systemgröße vergleichen. Abbildung 5.18 zeigt den Größeneffekt, bei dem das kleinste System die größte Verfestigung und das größte System die kleinste Verfestigung aufweist. Da die produzierte Versetzungsdichte entgegengesetzt zur Systemgröße skaliert

² Der Rand des endlichen Mediums induziert Bildkräfte, welche notwendig sind, um die Randbedingung an freien Rändern zu erfüllen. Die Ergebnisse in Abbildung 6.1 lassen vermuten, dass die Bildkräfte für unterschiedliche Auflösungen unterschiedlich abgebildet werden. Um den Einfluss der Bildkräfte richtig auflösen zu können, muss das Homogenisieren der Bildkräfte berücksichtigt werden.

und in allen Fällen eine ähnliche plastische Dehnung verursacht, verhält sich dieses System aufgrund der fehlenden Wechselwirkungen wie ein quasi 1-dimensionales System.

Das homogenisierte Quellmodell eignet sich dazu die obere Schranke der Quellaktivierungsrate zu bestimmen, die eine sinnvolle Grundlage für ein homogenisiertes Quellmodell bildet. Allerdings ist eine quantitative Validierung des Verfestigungsverhaltens der Versetzungsdichtetheorie und dem homogenisierten Quellmodell mit diskreten Versetzungsdynamiksimulationen in 2 Dimensionen schwierig, da keine geeignete Vereinfachung eines allgemeinen 3-dimensionalen Versetzungssystem für den Fall der Zugbelastung existiert. Ein Aspekt für den das homogenisierte Quellmodell im Zugversuch keine Antwort bietet, ist der Einfluss der Systemgröße auf die makroskopische Fließspannung. Im Folgenden wird das homogenisierte Quellmodell in der Biegung anhand von diskreten Versetzungsdynamiksimulationen validiert. Dabei sind drei wesentliche Voraussetzungen erfüllt: es lässt sich eine sinnvolle Vereinfachung eines 3-dimensionalen Versetzungssystems in 2 Dimensionen formulieren, der Versetzungsaufstau befindet sich innerhalb des Systems, sodass zu erwarten ist, dass der Einfluss der Bildkräfte vernachlässigbar ist und das homogenisierte Quellmodell in der Biegung berücksichtigt die Abhängigkeit der Fließspannung von der Systemgröße.

Quellmodell in der Biegung

Der Einfluss der Systemgröße auf die makroskopische Fließspannung wird implizit aus dem homogenisierten Quellmodell der Biegung abgeleitet (siehe Gleichungen (5.21) und (5.22)). Um deren Genauigkeit zu überprüfen, werden die vorhergesagten Werte mit der gemittelten kritischen Schubspannung aus jeweils drei diskreten Versetzungsdynamiksimulationen für die reine Biegung und das Biegen eines Kragbalkens in Abbildung 6.2 verglichen (siehe Appendix C und Tabellen 5.4 und 5.5). Die Vorhersage aus dem homogenisierten Quellmodell liefert eine gute Näherung an die gemittelten Werte für $h \geq 1 \mu\text{m}$ mit einer maximalen

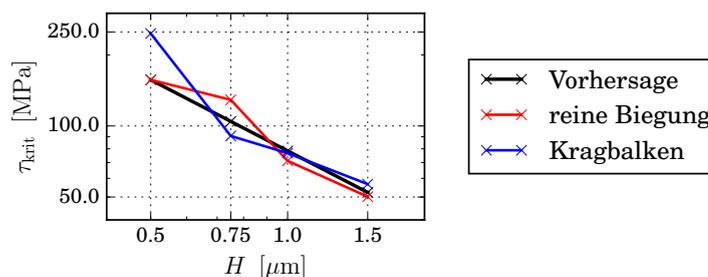


Abbildung 6.2: Doppeltlogarithmischer Vergleich der Werte der kritischen Schubspannung τ_{krit} aus der Vorhersage des homogenisierten Quellmodells (Tabelle 5.6) mit den gemittelten Werten aus den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen für die reine Biegung und die Biegung eines Kragbalkens (siehe Appendix C und Tabellen 5.4 und 5.5).

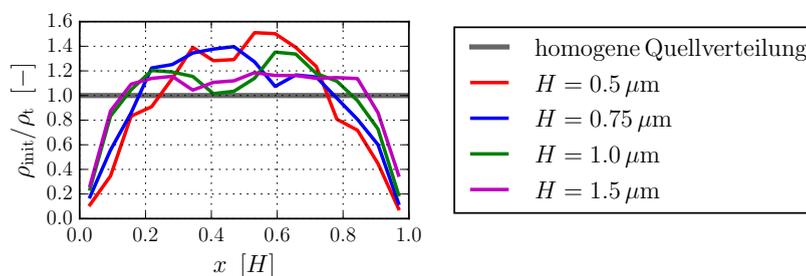


Abbildung 6.3: Das Profil der Anfangsverteilung der Frank-Read Quellen der diskreten Versetzungsdynamik gemittelt über alle Simulationen für unterschiedliche Balkengrößen H (in Farbe). Die Anfangsbedingungen der Versetzungsdichte der reinen Biegung und der Biegung eines Kragbalkens unterscheiden sich prinzipiell nicht. Es wird die Gesamtdichte, also die Versetzungsdichte aller passiven und aktiven Gleitsysteme, über die Balkenhöhe betrachtet und mit der homogenen Verteilung der Kontinuumstheorie verglichen (grau).

Abweichung von 9.3%. Im Allgemeinen ist die makroskopische Fließspannung abhängig von der Lage der Quellen. Im Fall der reinen Biegung wirkt die größte Spannung an der Balkenoberfläche und ein Verschieben der Quellen Richtung neutraler Achse würde eine effektive Erhöhung der makroskopischen Fließspannung verursachen. Für die Biegung eines Kragbalkens tritt dieser Effekt zusätzlich in Balkenlängsachse auf, da die größte Spannung an der Balkenoberfläche an der Einspannung des Balkens vorherrscht. Für kleinere Balken wird eine kleinere Anzahl von Quellen zufällig im System platziert, sodass die Wahrscheinlichkeit steigt, dass keine Quelle nahe der Oberfläche bzw. nahe der Einspannung und der Oberfläche platziert ist und somit die makroskopische Fließspannung effektiv erhöht ist. Dieser Effekt verursacht eine Abweichung von der vorhergesagten Fließspannung und hat im Fall der Biegung eines Kragbalkens einen deutlich größeren Einfluss.

Für die Kontinuumstheorie wird eine homogene Verteilung von Quellen angenommen, obwohl die Anfangsverteilung der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen zum Rand hin abfallen (Abbildung 6.3). Der Grund dafür ist der Algorithmus zur Verteilung von Quellen in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen, wobei sich die Anfangsbedingungen der Versetzungsdichte der reinen Biegung und der Biegung eines Kragbalkens nicht unterscheiden. Es werden zufällig der Ursprung und die Orientierung einer Quelle in der Gleitebene gewählt, wobei diese nur gültig sind, wenn die resultierende Quelle vollständig im Balken enthalten ist. Umso näher die Quelle an der Balkenoberfläche liegt, desto stärker ist ihre Orientierung eingeschränkt. Insgesamt werden an der Oberfläche weniger Quellen platziert, wobei diese stärker an der Oberfläche, also parallel zur Oberfläche, ausgerichtet sind. Aus diesem Grund können auch im kleinsten Balken Quellen aktiviert werden, obwohl das Verhältnis von Systemhöhe H zu Quelllänge l_s nur ungefähr 1.66 beträgt. Es zeigt sich, dass Quellen, die parallel zur Oberfläche orientiert sind und nahe an der Oberfläche liegen,

auch bei einem Abstand von kleiner $0.5l_s$ zum Versetzungsaufstau aktiviert werden können. Diese Beobachtung ist insofern interessant, da für das Homogenisieren von Quellmodellen häufig angenommen wird, dass eine aktivierte Quelle einen geschlossenen Versetzungsring emittiert (Van der Giessen und Needleman, 1995, Benzerga et al., 2004, Benzerga, 2008, Shishvan et al., 2008, Zhu et al., 2014). Für das in dieser Arbeit eingeführte homogenisierte Quellmodell wird diese Annahme nicht getroffen.

Um das homogenisierte Quellmodell und den Übergang von einer diskreten Quellverteilung zu einer homogenen Quellverteilung zu charakterisieren, werden für die reine Biegung (siehe Abb. 5.20) und das Biegen eines Kragbalkens (siehe Abb. 5.25) jeweils zwei Modelle mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen verglichen: das Quellmodell (Q1) mit diskreter Quellverteilung, dessen Parameter aus den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen gemittelt werden (vgl. Appendix C), und das homogenisierte Quellmodell (Q2) mit homogener Quellverteilung, welches aus dem Modell der kritischen Dicke abgeleitet wird (vgl. Kapitel 3.2). Der Unterschied zwischen dem Quellmodell (Q2) für die reine Biegung und für das Biegen eines Kragbalkens ist, dass das kritische Dehnungsintegral, aufgrund des linearen Verlaufs des Biegemomentes beim rein elastischen Biegen eines Kragbalkens, als halb so groß angenommen wird (siehe Kapitel 3.2).

Aus dem Verlauf des Biegemomentes in Abbildungen 5.21 und 5.26 lässt sich ein Größeneffekt der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen beobachten. Mit zunehmender Balkengröße nehmen die makroskopische Fließspannung und die einsetzende Verfestigung ab. Die Streuung des Biegemomentenverlaufs aus verschiedenen Simulationen ist für den kleinsten Balken am größten und nimmt mit zunehmender Balkengröße ab. Insgesamt ist die beobachtete Streuung für das Biegen eines Kragbalkens größer, da nicht nur die vertikale Verteilung der Quellen eine Rolle spielt, sondern auch die horizontale Verteilung. Die Gesamtversetzungsdichte vermehrt sich mit einer näherungsweise konstanten Produktionsrate, während das Biegemoment mit zunehmender Dehnung einen nicht-linearen Verlauf aufweist.

Das Quellmodell (Q1) mit diskreter Quellverteilung zeigt anfänglich (für $H = 1.0 \mu\text{m}$ bis 0.5% und für $H = 1.5 \mu\text{m}$ bis 0.3% Dehnung in Abbildung 5.21) eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen der diskreten Versetzungsdynamik, kann aber darüber hinaus dem nicht-linearen Verlauf des Biegemomentes für $H = 1.0 \mu\text{m}$ und $H = 1.5 \mu\text{m}$ nicht folgen. Mit Modell (Q1) werden Wechselwirkungen nur dann abgebildet, wenn sie durch die Eigendehnungsformulierung aufgelöst werden. Das Quellmodell (Q2) bildet den nicht-linearen Verlauf des Biegemomentes ab, wobei die resultierende Verfestigung keinen Größeneffekt aufweist. Aufgrund der homogenen Dichte entlang des Balkens bildet die Eigendehnungsformulierung keinerlei Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Versetzungsaufstaus ab. Lediglich das Relaxieren des Gradienten senkrecht zum Balken wird durch die Eigendehnungsformulierung abgebildet. Mit zunehmender Balkengröße nähert sich der Verlauf des Biegemomentes des Quellmodells (Q2) dem Verlauf der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen an.

Die Profile der plastischen Dehnung und der gemittelten Versetzungsdichte senkrecht zum Balken in Abbildungen 5.22 und 5.27 zeigen, dass die diskreten Versetzungsdynamiksimulationen mit zunehmender Balkengröße ein Plateau im Versetzungsdichteprofil um die neutrale Faser ausbilden. Dieses Plateau entspricht der Versetzungsdichte, die notwendig ist, um den anliegenden Dehnungsgradienten zu relaxieren. Für das Biegen der Kragbalken zeigt das Profil der gemittelten Versetzungsdichte entlang des Balkens in Abbildung 5.28, dass eine Lokalisierung der Versetzungsdichte mit einem Abstand von $0.25L$ von der Einspannung statt findet. Für $H = 0.5 \mu\text{m}$ ergibt sich aufgrund der Mittelung über die zufällige Verteilung von einer sehr kleinen Anzahl von Quellen eine fast homogene Verteilung der Dichte entlang des Balkens. Umso größer der Balken desto mehr Quellen werden im System verteilt und damit die Lokalisierung in der Nähe der Einspannung abgebildet.

Das von Quellmodell (Q1) produzierte Versetzungsdichteprofil stellt eine gute Näherung an die diskreten Versetzungsdynamiksimulationen dar, wobei das Plateau des Balkens mit $H = 1.5 \mu\text{m}$ überschätzt wird. Es zeigt sich, dass für die diskreten Versetzungsdynamiksimulationen eine niedrigere Dichte ausreicht, um den gleichen Dehnungsgradienten zu relaxieren. Es ist interessant zu beobachten, dass dieses Plateau für die Balken mit $H \leq 0.75 \mu\text{m}$ nicht bzw. nur sehr schwach zu beobachten ist. Da sich auf verschiedenen Gleitebenen aufgrund der Wechselwirkungen unterschiedlich lange Versetzungsaufstaus ausbilden, zeigt das gemittelte Profil kein Plateau. Für die größten Balken werden diese Wechselwirkungen aufgrund der gleichmäßigeren Versetzungsdichte nicht abgebildet und somit wird das Plateau im gemittelten Profil sichtbar. Für das Quellmodell (Q2) fehlen aufgrund der homogenen Versetzungsdichte auch für kleine Balken die Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Gleitebenen. Da für alle Balken zu viel Versetzungsdichte produziert wird, bildet sich bereits ab einer Balkengröße von $H \geq 0.75 \mu\text{m}$ das vollständige Plateau aus. Die produzierte Versetzungsdichte für den Fall der reinen Biegung skaliert invers mit der Balkengröße und somit entspricht dieses Modell aufgrund fehlender Wechselwirkungen und Reaktionsmechanismen einem quasi 1-dimensionalen System.

Das Profil der gemittelten Versetzungsdichte senkrecht zum Balken ist für beide Belastungsarten ähnlich, aber für den Fall des Biegens eines Kragbalkens lokalisiert die plastische Dehnung an der Einspannung und verursacht ein Abknicken des Balken. Das Dichteprofil entlang des Kragbalkens aus Abbildung 5.28 zeigt ebenfalls, dass sich die Ergebnisse des homogenen Quellmodells den Ergebnissen der diskreten Versetzungsdynamik mit zunehmender Balkengröße annähern.

Sowohl Quellmodell (Q1) als auch Quellmodell (Q2) sind wichtig, um die zugrundeliegenden Mechanismen zu verstehen. Durch die diskrete Quellverteilung von Modell (Q1) zeigt sich, dass besonders für kleine Balken die Wechselwirkungen zwischen den Versetzungsaufstaus einen großen Einfluss auf das Verfestigungsverhalten haben. Für kleine Balken und zu Beginn der Belastung wird das Biegemoment zum Teil durch die inneren Spannungen des Systems relaxiert. Das homogenisierte Quellmodell (Q2) mit homogener Verteilung verliert die Auflösung der inneren Spannungen und kann den Spannungsgradienten ausschließlich durch die Anordnung von geometrisch notwendigen Versetzungen relaxieren.

Abbildung 6.4 zeigt den Vergleich zwischen einer diskreten und einer homogenen Quellverteilung für das homogenisierte Quellmodell (Q2) im Fall der reinen Biegung. Es verdeutlicht dieses Verhalten, da für Balken mit $H \leq 1 \mu\text{m}$ mit einer diskreten Quellverteilung ein stärkeres Verfestigungsverhalten bei gleicher produzierter Dichte zu beobachten ist. Da sich die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamik mit zunehmender Balkengröße dem Verhalten von Quellmodell (Q2) annähern, lässt sich daraus folgern, dass dieses Verhalten charakteristisch für großer Balken ist. Aufgrund der fehlenden Wechselwirkungen und Versetzungsreaktionen zwischen Gleitsystemen der Kontinuumstheorie lässt sich keine quantitative Validierung vornehmen.

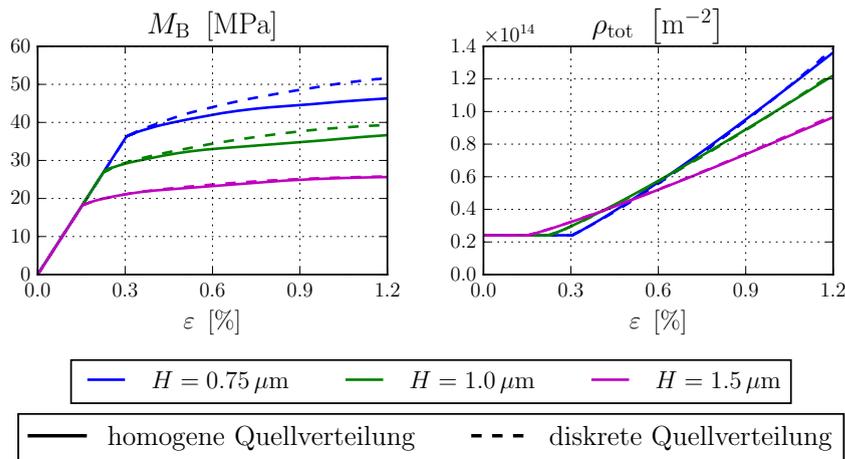


Abbildung 6.4: Der Vergleich zwischen einer diskreten und einer homogenen Quellverteilung für das Quellmodell (Q2) im Fall der reinen Biegung mit unterschiedlichen Balkenabmessungen.

Für eine abschließende Charakterisierung des homogenisierten Quellmodells, wird die Netzabhängigkeit untersucht. Abbildung 5.24 zeigt den Einfluss des Vergrößerns der Diskretisierung. Abhängig von der Balkengröße lässt sich ein Punkt beobachten, ab dem die Ergebnisse der größeren Auflösung von den ursprünglichen Ergebnissen abweichen und ein Entfestigen bzw. ideal-plastisches Verhalten zu beobachten ist. Bis zu diesem Punkt sind die Ergebnisse netzunabhängig. Ab diesem Punkt kann der Gradient am Rand nicht mehr richtig abgebildet werden, weil der Versetzungsaufstau an der neutralen Faser in das letzte Element an der Oberfläche hineinragt. Damit wird der Dehnungsgradient an der Oberfläche verfälscht und die Quellaktivierungsrate, die direkt aus dem Gradienten an der Oberfläche berechnet wird (vgl. Abbildung 3.5), liefert keine sinnvollen Ergebnisse. Im Gegensatz zu den Ergebnissen im Zugversuch wird keine Netzabhängigkeit aufgrund von Bildkräften des endlichen Systems beobachtet, da sich die Gradienten an der neutralen Faser in der Mitte des Balkens und nicht an der Oberfläche des Systems bilden. Es bleibt festzuhalten, dass das Quellmodell Q2 netzunabhängige Ergebnisse liefert, solange der Versetzungsaufstau nicht in das letzte Element an der Balkenoberfläche hineinragt.

Aufgrund der Systemabmessungen der Mikrobalken und der gewählten Auflösung, ist der Simulationszeitschritt Δt nach oben beschränkt und kleiner als die charakteristische Zeit t_{char} (vgl. Kapitel 3.2). Für die Herleitung des Quellmodell wird implizit angenommen, dass produzierte Versetzungen den Dehnungs- bzw. Spannungsgradienten sofort relaxieren. Allerdings werden die Versetzungen nahe der Balkenoberfläche produziert und müssen sich bis zum Versetzungsaufstau an der neutralen Faser bewegen. Die Ergebnisse in Abschnitt 5.3 zeigen, dass diese Näherung für $\Delta t < t_{\text{char}}$ ausreichend gut abgebildet wird.

Im Allgemeinen müssen für eine quantitative Validierung, z.B. mit Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik, alle physikalischen Zusammenhänge im kontinuierlichen System vollständig abgebildet sein. Die Herausforderung besteht darin, die einzelnen Aspekte so gut wie möglich voneinander zu trennen, damit eine schrittweise Validierung durchgeführt werden kann. Für die Modellierung ist es interessant zu wissen, ab welchem Punkt eine Annahme einer homogenen Quellverteilung, die Entwicklung der plastischen Dehnung ausreichend gut beschreiben kann. Diese Fragestellung steht im Mittelpunkt der Diskussion des Kontinuumslimit.

6.3. Kontinuumslimit

Bevor die Ergebnisse des Kontinuumslimits diskutiert werden, wird das Konzept des Kontinuumslimit noch einmal im Kontext des Quellmodells der Biegung und der Wechselwirkung von Versetzungen motiviert. Anschließend werden die beobachteten physikalischen Eigenschaften und die Untersuchung des Kontinuumslimit von 2-dimensionalen Versetzungsdynamiksimulationen mit einem Gleitsystem diskutiert.

Kontinuumslimit im Kontext der bisherigen Ergebnisse

Für die Ergebnisse der reinen Biegung ist zu beobachten, dass sich die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen den Ergebnissen des homogenen Quellmodells mit einer homogenen Quellverteilung annähern (Abbildung 5.21). Dabei fällt auf, dass die Ergebnisse des homogenen Quellmodells mit einer homogenen Quellverteilung in der vorgestellten Variante keinen Größeneffekt bzgl. der Verfestigung des Systems induzieren. Das spricht dafür, dass dieses Modell so nur in einem Bereich gültig sein kann, in dem nahezu kein Größeneffekt auftritt. Anderenfalls muss die Annahme einer homogenen Quelldichte verworfen werden und die Wechselwirkungen explizit modelliert werden. Mit dem Ähnlichkeitsprinzip lässt sich die zunehmende Balkengröße bei gleicher Quelldichte näherungsweise in eine zunehmende Quelldichte bei gleicher Balkengröße übersetzen³. Dabei ist die Anzahl der Quellen die Invariante der Skalierung des Systems und es stellt sich die Frage,

³ Das Ähnlichkeitsprinzip (*"principle of similitude"*) besagt, dass Versetzungssysteme unter bestimmten Voraussetzungen skalierungsinvariant sind (Kuhlmann-Wilsdorf, 1962). Formal ist das Ähnlichkeitsprinzip nicht auf beliebige 3-dimensionale Versetzungssimulationen anwendbar, da nicht alle Eigenschaften durch das Ähnlichkeitsprinzip abgebildet werden können (Zaiser und Sandfeld, 2014).

ab welcher Anzahl von (aktiven) Quellen, ein System konsistent durch eine "homogene" Quelledichte modelliert werden kann.

Diese Fragestellung lässt sich analog für die Wechselwirkung von Versetzungen formulieren. Eine allgemeine Versetzungsdichtetheorie scheitert an der Stelle, an der das diskrete Verhalten einer einzelnen Versetzung modelliert werden muss. Das lässt sich anschaulich erklären, in dem man sich bewusst macht, dass eine Versetzungsdichtetheorie nicht grundsätzlich zwischen einer Versetzung und dem Bruchteil einer Versetzung in einem Mittelvolumen unterscheiden kann. In beiden Fällen wird Diffusion dafür sorgen, dass eine abstoßende Wechselwirkung stattfindet, stellt aber im Fall einer einzelnen Versetzung ein Widerspruch zum Verhalten einer diskreten Versetzung dar. Daraus lässt sich ableiten, dass eine Versetzungsdichtetheorie dazu geeignet ist, Simulationen "nahe" am Kontinuumslimit zu modellieren. Je weiter Simulationen vom Kontinuumslimit entfernt sind, desto größer ist der Aufwand, um die physikalischen Grundlagen des "diskreten Verhaltens" von Versetzungen zu homogenisieren, da unterschiedliche Details eine Rolle spielen können, die in einer homogenen Darstellung vernachlässigbar wären. Für die Untersuchung des Kontinuumslimit stellt sich die Frage, wie viele Versetzungen notwendig sind, um konsistent von einer homogenen Versetzungsdichte sprechen zu können (vgl. Kapitel 4).

Physikalische Eigenschaften der Korrelationsfunktionen

In Abbildung 6.5 wird beobachtet, dass die maximale Korrelation der Winkelkorrelationsfunktion d_{+-} für den Winkel $\varphi \approx 45^\circ$ zum Radius $r \leq 1$ zu einem Winkel zwischen 75° und 80° für den Radius $r \geq 1$ übergeht (vgl. Abbildung 5.36). Dieser Effekt lässt sich anschaulich durch die idealisierte Anordnung der Versetzungen in Versetzungswänden mit alternierenden Vorzeichen beschreiben. Diese Konfiguration führt zu einer starken Korrelation gleicher Versetzungen für $\varphi = 90^\circ$ über größere Abstände und zu einer starken kurzreichweitigen Korrelation ungleicher Versetzungen für $\varphi = 45^\circ$. Mit zunehmendem Abstand wird die entgegengesetzt orientierte Versetzungswand sichtbar, was dazu führt, dass

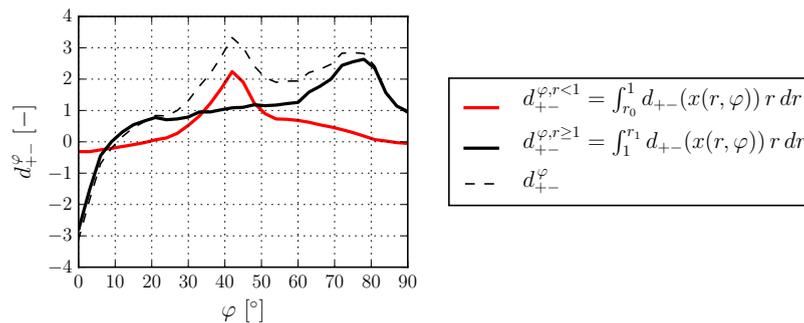


Abbildung 6.5: Die Winkelkorrelationsfunktionen d_{+-}^{φ} der Korrelationsfunktionen aus Abbildung 5.36 für $n = 800$ Versetzungen im Vergleich zu der Zerlegung der Winkelkorrelation in $d_{+-}^{\varphi, r < 1}$ für $r_0 < r < 1$ und $d_{+-}^{\varphi, r \ge 1}$ für $1 < r < r_1$.

die maximale Korrelation entgegengesetzt orientierter Versetzungen mit zunehmendem Abstand gegen $\varphi = 80^\circ$ tendiert. Das bedeutet, dass kurzreichweitige Wechselwirkungen für $r < 1$ durch die Konfiguration von Versetzungswänden propagiert werden und sich in einem System veränderte Wechselwirkungen mit einer größeren Reichweite ausbilden können, ähnlich wie es von Roy et al. (2008) beschrieben wurde. Die von Groma et al. (2003) untersuchten Winkelkorrelationen in einem periodischen System zeigen diese Veränderung der charakteristischen Wechselwirkungen nicht, da sich in einem periodischen System im Allgemeinen nur sehr kurzreichweitige Wechselwirkungen ausbilden und somit deren Propagation nicht in gleichem Maße statt findet.

Kontinuumslimit für 2-dimensionale Versetzungsdynamiksimulationen mit Einfachgleiten

In Kapitel 4.3 werden 3 Kriterien herausgearbeitet, die für die Charakterisierung des Kontinuumslimits notwendig sind:

1. Die Ergebnisse verschiedener Simulationen müssen zusätzlich zu dem Ähnlichkeitsprinzip mit der Anzahl der Versetzungen skalierbar sein.
2. Das Ergebnis einer einzelnen Simulation darf nur schwach von einer konkreten Realisierung der Anfangsbedingungen abhängen.
3. Der Einfluss einer einzelnen Versetzung des Systems muss im Verhältnis zum Einfluss der Struktur klein sein.

Diese 3 Kriterien hängen von der Systembelastung und der genauen Ausgestaltung des Systems ab. Erfüllt ein gegebenes System alle Bedingungen, so lassen sich die Anforderungen an dessen Modellierung stark reduziert und die Simulationsergebnisse im Rahmen des Kontinuumslimits verallgemeinern. Diese Kriterien werden mittels der Korrelationsfunktionen der Versetzungssysteme überprüft. Anhand der Ensemblemittelwerte der 1-Partikeldichtefunktion der polarisierten Dichte, wird postuliert, dass das Kontinuumslimit im gewählten System für $400 \leq n_{\text{KL}} \leq 800$ erreicht wird, da sich die 1-Partikeldichtefunktionen für $n = 400$ und 800 Versetzungen in Abbildung 4.1 ähneln⁴.

Die Untersuchung des Einflusses der Anzahl der Versetzungen (Kriterium 1) zeigt, dass eine strenge Definition des Kontinuumslimits n_{KL} nicht plausibel ist. Die in Kapitel 4.3 formulierte Vorgehensweise zur Bestimmung des Kontinuumslimits, lässt keine asymptotische Bewertung des Kontinuumslimits für $n \cdot m \rightarrow \infty$ zu (siehe Abbildung 5.42). Für d_{+-}^φ scheint das Kontinuumslimit für $n \cdot m \rightarrow \infty$ kleiner zu werden, aber für d_{++}^φ ist das Gegenteil der Fall. Für den untersuchten Bereich für $n \cdot m \leq 1.6 \cdot 10^4$ lässt sich eine obere Grenze n_{KL} bestimmen, welche aber keine befriedigende Antwort für das Kontinuumslimit an sich

⁴ Im weiteren Verlauf der Diskussion wird offensichtlich, dass eine "starke" Charakterisierung der Kontinuumslimits anhand der Ergebnisse dieser Arbeit nicht möglich ist und dessen "Erreichen" immer von der gewählten Fehlertoleranz abhängt.

liefert. Der Unterschied zwischen dem Kontinuumslimit $n_{\text{KL}} = 622$ für d_{++}^{φ} und $n_{\text{KL}} = 408$ für d_{+-}^{φ} verdeutlicht, dass diese Definition der Kontinuumslimits von der Fehlertoleranz abhängig ist und keine starke Definition des Kontinuumslimits gefunden wird. Aus dem in Abbildung 5.39 beobachteten Knick im Verlauf des relativen Fehlers lässt sich vermuten, dass dieser mit der Beschränkung der Korrelationsfunktion durch das endliche Gebiet zusammenhängt, da für $n < 144$ die Reichweite der Korrelationsfunktion die Abmessung des Gebietes überschreitet $6\rho^{-0.5} \geq H$. Um diese Vermutung zu validieren wird die in Abbildung 5.42 gezeigte Analyse in Abbildung 5.45 mit einem Radius von $r_1 = 3$ wiederholt, obwohl dadurch die physikalische Reichweite künstlich beschränkt wird. Obwohl mit dieser Vermutung der Einfluss des Abschneidens für einen Radius $r_1 = 3$ für $n \leq 36$ zu finden sein sollte, verändert sich das charakteristische Verhalten des relativen Fehlers in Abbildungen 5.43 und 5.44 im Vergleich zu Abbildungen 5.40 und 5.41 für $r_1 = 6$ nicht. Wird die Anzahl der Versetzungen verändert, lassen sich für $n > 100$ ausschließlich Veränderungen beobachten, die im Bereich des statistischen Fehlers liegen, wo hingegen für $n \leq 100$ größere Veränderungen anhand des relativen Fehlers zu beobachten sind. Dieses Verhalten ist letztlich genau das Verhalten, was als Kontinuumslimit charakterisiert werden soll. Es bleibt festzuhalten, dass das Charakterisieren des Kontinuumslimits nur in einer schwachen Form als eine Annäherung an das Kontinuumslimit unter gewissen Annahmen, wie z.B. einer Fehlertoleranz, gefunden werden kann. Für die Simulation eines dynamischen Systems spielt die Wahl der Fehlertoleranz für das Kontinuumslimit eine untergeordnete Rolle, da dynamische Simulationen nur in Ausnahmefällen gleichgewichtsnah getrieben werden, die berechneten Korrelationsfunktionen hingegen dem statischen Gleichgewicht des Systems entsprechen⁵. Das Gleichgewicht weicht in einem sich dynamisch entwickelnden System im Allgemeinen vom statischen Gleichgewicht ab, wie von Ispánovity et al. (2008) für die Entwicklung der Korrelationsfunktion während des Relaxierens gezeigt wurde.

Der Einfluss der Anzahl der Simulationen (Kriterium 2) wird in Abbildung 5.48 untersucht. Selbst wenige Simulationen für eine kleine Anzahl von Versetzungen scheinen einen verhältnismäßig kleinen relativen Fehler im Verhältnis zum statistischen Fehler der Referenz mit $n \cdot m = 2 \cdot 10^4$ zu induzieren. Für $m = 1$ und $n = 100$ entspricht der relative Fehler dem 9.3-fachen des statistischen Fehlers der Referenz. Formal ist zu erwarten, dass das Verhältnis aus dem relativen Fehler für $m = 1$ und dem statistischen Fehler ϵ_s divergiert, wenn für die Referenz \bar{m}_s gegen unendlich geht und damit der statistische Fehler ϵ gegen 0. Mit dieser Eigenschaft eignet sich das Fehlermaß nicht, um den Einfluss einzelner Realisierungen messbar zu machen.

Für Kriterium 3 wird der Einfluss des beschränkten Gebietes auf die Korrelationsfunktionen gemessen. Für den Fall der homogenen nicht-polarisierten Versetzungsdichte in Abbildung 5.34 lässt sich kein struktureller Einfluss auf die Korrelationsfunktionen messen (Abbildung 5.35). Eine homogene nicht-polarisierte Versetzungsdichte ohne externe

⁵ Die Homogenisierung der Versetzungsdynamik nach Groma et al. (2003) macht sich zur Nutze, dass die inneren Kräfte des Systems bestrebt sind das statische Gleichgewicht zu erreichen. Daher werden die relaxierten Korrelationsfunktionen für die Berechnung der inneren Kräfte des Systems verwendet.

Belastung relaxiert lokal in eine homogene Verteilung von Versetzungsdipolen. Da Versetzungsdipole eine geringe Reichweite haben, bildet sich keine Polarisierung am Rand aus. Im Gegensatz dazu zeigt die polarisierte Versetzungsdichte in Abbildung 4.1 einen Einfluss des Randes, der von der Anzahl der Versetzungen abhängig ist. Der Einfluss des Randes ist in der Korrelationsfunktion in Abbildung 5.32 sichtbar und mittels einer Fouriertransformation in Abbildung 5.33 messbar. In Abbildung 5.33 (rechts) ist ein Maximum jeweils für eine Wellenlänge $\lambda_{\text{strukt}} = 0.374H_{\text{eff}}$ zu beobachten. Daraus folgt, dass der strukturelle Einfluss eine absolute Längenskala induziert, welche mit der relativen Längenskala des mittleren Versetzungsabstands $\rho^{-1/2}$ konkurriert. Im Kontinuumslimit wird erwartet, dass der strukturelle Einfluss dominiert, da dieser eine absolute Längenskala induziert und somit die geforderten Skalierungseigenschaften (Kriterium 1) erfüllt. Ist Kriterium 3 erfüllt und die relative Längenskala $\rho^{-1/2} < \lambda_{\text{strukt}}$ klein, dann sind Kriterium 1 und Kriterium 2 automatisch erfüllt, da der strukturelle Einfluss und nicht der Einfluss der Versetzungen das System dominiert.

Insgesamt lässt sich das Verhältnis der absoluten Längenskala zur relativen Längenskala

$$\frac{H}{\rho_t^{-1/2}} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\lambda_{\text{strukt}}}{\rho_t^{-1/2}} \quad (6.2)$$

als die wichtige Größe zur Charakterisierung des Kontinuumslimits identifizieren. Zum einen muss $H/\rho_t^{-1/2} > r_{\text{eff}}$ gelten, damit die effektive Reichweite der Korrelationsfunktionen nicht künstlich durch das System beschränkt wird und zum anderen muss $\lambda_{\text{strukt}}/\rho_t^{-1/2} > 1$ gelten. Für die Simulationen in Abbildung 5.32 gilt $H/\rho_t^{-1/2} = 10$ und $\lambda_{\text{strukt}}/\rho_t^{-1/2} \approx 3.0$. Siehe Anhang F für eine Diskussion der physikalischen Reichweite.

Damit kann festgehalten werden, dass unter den beobachteten Situationen für Kriterium 1 mit einem Seitenverhältnis von $L/H = 8$ das Kontinuumslimit ungefähr für $n_{\text{KL}} \approx 100$ Versetzungen erreicht wird. Kriterium 1 ist erfüllt, falls Kriterium 3 ausreichend erfüllt ist. Mit Kriterium 3 wird der Einfluss der Korrelationen vernachlässigbar klein gegenüber dem strukturellen Einfluss. Für zukünftige Untersuchungen zur Bestimmung des Kontinuumslimits muss der strukturelle Einfluss und das Verhältnis zum mittleren Versetzungsabstand genauer charakterisiert werden.

Für Informationen über die Modellierung von physikalischen Kontinuumsstheorien unterhalb des Kontinuumslimits, sind Kriterium 1 und Kriterium 2 wichtig. Mit der Definition der effektiven Reichweite r_{eff} wird versucht, das Festlegen eines konkreten Fehlerniveaus zu vermeiden. Der statistische Einfluss für die Berechnung der Korrelationsfunktionen lässt sich nicht ohne weiteres herausfiltern und die genaue Definition des Kontinuumslimits hängt von der gewählten Toleranz ab. Die Wahl der Toleranzen hängen letztlich davon ab, in welchem Kontext das Kontinuumslimit betrachtet werden soll. Zur Charakterisierung diskreter Versetzungsdynamiksimulationen muss eine sehr genaue Anforderung an den Fehler gestellt werden. Für die Homogenisierung der Informationen der Korrelationsfunktionen z.B. nach Groma et al. (2003), die den Korrelationen durch Integration einen skalaren Wert

zuweisen, reicht eine weniger genaue Anforderung an den Fehler aus. Nichtsdestotrotz können die Ergebnisse und Schlussfolgerungen für die Modellierung von Kontinuumstheorien verwendet werden, wobei eine Charakterisierung der Korrelationen in 3 Dimensionen eine weitaus größere Herausforderung hinsichtlich der auftretenden Komplexität und dem Rechenaufwand darstellt.

7. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde eine versetzungs-basierte Kontinuumstheorie durch Homogenisierung der zugrundeliegenden physikalischen Mechanismen, basierend auf einer Versetzungsdichtetheorie zur Beschreibung der Kinematik der Versetzungen, formuliert. In diesem Zusammenhang beschreibt das Homogenisieren das Vergrößern der Auflösung des Systems unter Erhaltung der zugrunde liegenden physikalischen Zusammenhänge. Die untersuchten Mechanismen sind Versetzungswechselwirkungen von 2-dimensionalen Einfachgleitsystemen und die Versetzungsdichteproduktion.

Ausgangspunkt der Homogenisierung der Versetzungswechselwirkungen war eine Eigendehnungsformulierung, welche eine vollständige Auflösung der Spannungen erreicht, falls die Auflösung des Systems kleiner als der minimale Versetzungsabstand ist. Im ersten Schritt wurde die numerische Auflösung durch das Homogenisieren innerhalb diskreter Gleitebenen (quasi-kontinuierlich) und im zweiten Schritt zusätzlich durch das Homogenisieren der quasi-kontinuierlichen Beschreibung senkrecht zu den Gleitebenen (kontinuierlich) vergrößert. In beiden Fällen konnte ein zusätzlicher Beitrag zum resultierenden Spannungsfeld, als eine lokale Korrektur für das Vergrößern der Eigendehnungsformulierung, hergeleitet werden. Für die quasi-kontinuierliche Beschreibung des Systems entspricht die Korrektur der Eigendehnungsformulierung dem Fehler, der aufgrund der Regularisierung des ursprünglich singulären Problems entsteht. Die Korrektur der quasi-kontinuierlichen Beschreibung ist proportional zur Systemauflösung und dem Gradienten der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte. Sie beschreibt die Spannungswechselwirkungen innerhalb eines Versetzungsaufstaus, der nicht durch die vergrößerte Eigendehnungsformulierung abgebildet wird. Simulationen der quasi-kontinuierlichen Formulierung haben gezeigt, dass die Ergebnisse diskreter Versetzungsdynamiksimulationen reproduziert werden. Mit zunehmender Anzahl der Gleitebenen ist eine zunehmende vertikale Ausrichtung der Versetzungen zu beobachten. Das Ziel des Homogenisierens der quasi-kontinuierlichen Formulierung war es, das Wissen über die vertikale Ausrichtung als Versetzungswände für die kontinuierliche Formulierung zu nutzen. Die resultierende Korrektur der kontinuierlichen Formu-

lierung ist proportional zum Gradienten der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte und anti-proportional zur mittleren Versetzungsdichte des entsprechenden Mittlungsvolumen. Durch letzteren Zusammenhang wird die Reichweite der Versetzungen charakterisiert, wobei eine zunehmende Dichte einer Abnahme der Reichweite entspricht. Vergleiche mit diskreten Versetzungsdynamiksimulationen haben gezeigt, dass wichtige Charakteristika unabhängig von der Systemauflösung reproduziert werden. Das formulierte Konstitutivgesetz ermöglicht es, einen kontinuierlichen Übergang von diskreten Gleitebenen hin zu einer kontinuierlichen Darstellung abzubilden. Dadurch konnte der Einfluss der Unschärfe weniger Versetzungen im Vergleich zu Ensembles von Versetzungen untersucht, und die Notwendigkeit der Modellierung des Einflusses diskreter Versetzungen bei kleinen Systemabmessungen bzw. einer kleinen Anzahl an Versetzungen gezeigt, werden.

Das homogenisierte Quellmodell basiert auf der Idee, die fehlende räumliche und zeitliche Auflösung durch Maße des Systemzustands zu beschreiben, welche den Mechanismus zur Relaxation des Systems charakterisieren. Das homogenisierte Quellmodell für den Fall in dem das Abscheren die Relaxation des Systems bestimmt, definiert eine Obergrenze für die Versetzungsdichteproduktion zur Beschreibung von makroskopisch ideal-plastischer Verformung. Das Maß zur Bestimmung der zu produzierenden Versetzungsdichte basiert auf dem mittleren zurückgelegten Weg / abgescherten Fläche. Da sich mit einer 2-dimensionalen Formulierung kein realistisches 3-dimensionales System darstellen lässt, wurden an dieser Stelle keine Vergleiche mit diskreten Versetzungsdynamiksimulationen angestellt. Allerdings haben die Ergebnisse gezeigt, dass eine Homogenisierung der Bildkräfte notwendig ist. Für den Fall des Biegens wurde das Quellmodell aus dem Modell der kritischen Dicke abgeleitet, welches berücksichtigt, dass Biegung nicht durch Abscheren sondern durch, von geometrisch notwendigen Versetzungen induzierte, plastische Krümmung relaxiert wird. Die daraus bestimmte Versetzungsdichteproduktion und kritische Schubspannung zur Quellaktivierung eignen sich, um für den Fall einer homogenen Quellverteilung in einem ausreichend großen Balken die nicht-lineare Entwicklung der Versetzungsdichte und der Spannung abzubilden. Abweichungen der Ergebnisse von denen diskreter Versetzungsdynamiksimulationen lassen sich überwiegend durch die vernachlässigten Wechselwirkungen und Reaktionen zwischen unterschiedlichen Gleitsystemen und speziell durch die zur Vereinfachung der Modellierung vernachlässigten passiven Gleitsysteme erklären.

Aus den Untersuchungen der Homogenisierung der Wechselwirkungen und der Versetzungsdichteproduktion ergab sich die Frage, unter welchen Bedingungen eine homogenisierte Formulierung als allgemeingültige Versetzungsdichtetheorie formuliert und angewendet werden kann. Aus diesem Grund wurde im zweiten Teil dieser Arbeit ein Ansatz präsentiert, mit dem die Verallgemeinerbarkeit einer Kontinuumstheorie definiert und die Grenzen der Anwendbarkeit untersucht werden kann. Dabei geht es konkret um die Fragestellung unter welchen Umständen ein Parametersatz eines Modells für verschiedene Arten von Simulationen und verschiedene Systemgrößen seine Gültigkeit behält und somit mit einem Parametersatz eine Menge von unterschiedlichen Simulationen (z.B. unterschiedliche Belastungsfälle oder variierende Versetzungsdichten) durchgeführt werden kann.

Zu diesem Zweck wurde der Begriff des *Kontinuumslimits* formal definiert und die Möglichkeit einer Charakterisierung diskreter Versetzungsdynamiksimulationen anhand von Paarkorrelationen in 2 Dimensionen untersucht. Die darauf aufbauenden Analysen haben drei entscheidende Kriterien untersucht: den Einfluss der Anzahl der Versetzungen, der Anzahl der Simulationen und den strukturellen Einfluss. Um das Kontinuumslimit anhand des Einflusses der Anzahl der Versetzungen oder des strukturellen Einflusses im System eindeutig zu charakterisieren, muss eine Toleranz festgelegt werden, die letztlich vom Kontext der Untersuchung abhängt. U.a. ist für die Auswertung von diskreten Versetzungsdynamiksimulationen eine geringe Toleranz notwendig, während für die Herleitung einer Kontinuumstheorie durch radiale Integration der Korrelationsfunktionen eine größere Toleranz ausreichend sein kann. Für den Einfluss der Anzahl der Simulationen lässt sich aus den Ergebnissen keine Aussage über das Kontinuumslimit treffen, da der statistische Einfluss mit zunehmender Anzahl an Versetzungen abnimmt und lediglich die Konvergenz von Ensemblemittelwerten mit zunehmender Anzahl von Versetzungen oder Simulationen widerspiegelt. Eine wichtige Erkenntnis der Definition des Kontinuumslimits bezieht sich auf die Invarianz von Versetzungssystemen. In der Literatur wird häufig davon gesprochen, dass das Verhalten von Versetzungssystemen invariant unter Skalierung des mittleren Versetzungsabstandes ist. Dabei wird aber nicht berücksichtigt, dass der mittlere Versetzungsabstand (in 2 Dimensionen) sowohl durch die Anzahl der Versetzungen als auch durch die Systemgröße verändert werden kann. Wenn das Kontinuumslimit nicht erreicht ist, gilt die Invarianz a priori nur bei gleicher Anzahl von Versetzungen. Dieses Verhalten ist für das Verständnis von Systemen mit einer kleinen Anzahl an Versetzungen entscheidend und verdeutlicht den Zusammenhang des Kontinuumslimits mit der Verallgemeinerbarkeit von Kontinuumstheorien.

Für zukünftige Untersuchungen ist die Problemstellung der Charakterisierung des Kontinuumslimits aus den beschriebenen Gründen von großem Interesse, um Kontinuumstheorien auf ein möglichst breites Fundament stellen zu können. Die Frage wird sein, ob sich Versetzungskorrelationen in 3 Dimensionen besser dazu eignen, um eine Antwort auf die Frage nach der Charakterisierung des Kontinuumslimits zu geben. Zusätzliche Herausforderungen sind dadurch gegeben, dass sich die Invarianz von Versetzungssimulationen nicht eins zu eins auf 3 Dimensionen übertragen lässt und sich die Komplexität der zu untersuchenden Korrelationen deutlich erhöht. Für die mechanismusbasierte Homogenisierung kann festgehalten werden, dass sich die formulierten Quellmodelle äquivalent in 3 Dimensionen übertragen lassen, während sich die Mechanismen der Versetzungswechselwirkungen in 3 Dimensionen grundlegend ändern. Somit muss das Konstitutivgesetz für die Versetzungsgeschwindigkeit für einen mechanismusbasierten Ansatz in 3 Dimensionen bzgl. der Mechanismen in Versetzungsnetzwerken hergeleitet werden.

Anhang

A. Disklinationen und Versetzungen

Definition

Erstmalig wurden Versetzungen und Disklinationen von Volterra (1907) als Liniendefekte in elastischen Zylindern dargestellt. Versetzungen beschreiben den translatorischen Freiheitsgrad zweier nicht deformierter, gegeneinander verschobener Flächen. Die verschobenen Flächen sind durch Versetzungslinien abgegrenzt und der Betrag und die Richtung der relativen Verschiebung wird durch den Burgersvektor \mathbf{b} beschrieben (Abbildung A.1 (a)). Disklinationen beschreiben den rotatorischen Freiheitsgrad zweier gegeneinander verdrehter Flächen. Die relative Verdrehung wird durch den Frankvektor $\boldsymbol{\omega}$ beschrieben (Abbildung A.1 (b)). Insgesamt erhält man dadurch 3 Darstellungen einer Versetzung und 3 Darstellungen einer Disklination.

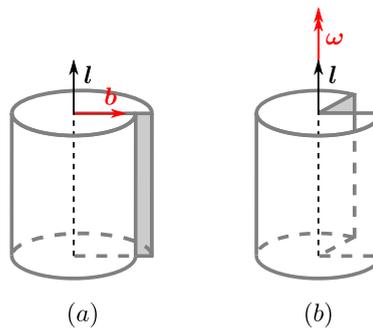


Abbildung A.1: Darstellung einer Versetzung (a) und einer Disklination (b) in einem linear-elastischen Zylinder. Die Versetzung wird durch den Burgersvektor \mathbf{b} und die Disklination durch den Frankvektor $\boldsymbol{\omega}$ charakterisiert.

In dieser Arbeit liegt der Fokus auf der vereinfachten 2-dimensionalen Darstellung von Versetzungen. Diese Darstellung wird über den ebenen Dehnungszustand erreicht. Mit einem ebenen Dehnungszustand können ausschließlich Versetzungen, deren Burgersvektor \mathbf{b} senkrecht zur Linienrichtung \mathbf{l} ist, dargestellt werden. Diese Versetzungen nennt man Stufenversetzungen. Abbildung A.1 (a) stellt das Versetzungsgleiten dar, da der Burgersvektor in der abgescherten Ebene enthalten ist. Die Versetzungslinie bewegt sich beim

Versetzungsgleiten in Richtung des Burgersvektors \mathbf{b} . Wenn der Burgersvektor \mathbf{b} senkrecht zur abgescherten Ebene liegt, dann wird Versetzungsklettern beschrieben. Beim Versetzungsklettern bewegen sich die Versetzungen senkrecht zum Burgersvektor \mathbf{b} und zur Linienrichtung \mathbf{l} . Für Disklinationen gilt, dass der Frankvektor parallel zur Linienrichtung liegen muss, damit ein ebener Spannungszustand beschrieben wird. Diese Disklinationen werden als Keildisklinationen bezeichnet (englisch: wedge disclination).

Der Disklinationsdipol

Eine negative (Keil-) Disklination $-\omega$ entspricht dem Einfügen eines Keils mit Winkel ω in den elastischen Zylinder (Abbildung A.2 (a)). Dieser Keil kann analog durch eingefügte Halbebenen dargestellt werden (Abbildung A.2 (b)). Eine eingeschobene Halbebene entspricht einer positiven Stufenversetzung. Daraus folgt, dass ein Disklinationsdipol durch eine endliche Versetzungswand bestehend aus Stufenversetzungen beschrieben werden kann. Eine positive Disklination wird durch Entfernen von Halbebenen beschrieben.

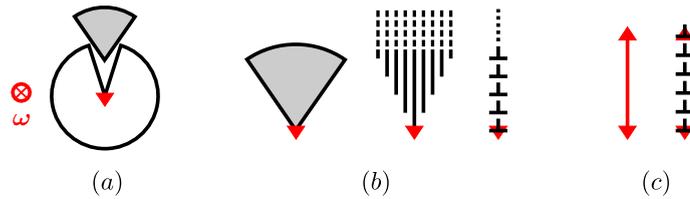


Abbildung A.2: Darstellung einer negativen Disklination als eingefügter Keil mit Winkel ω (bezeichnet mit $-\omega$) (a), welcher auch über eingeschobene Halbebenen dargestellt werden kann (b). Eine eingeschobene Halbebene entspricht einer Stufenversetzung. Die Analogie eines Disklinationsdipols mit einer endlichen Stufenversetzungswand (c).

Aus der Darstellung eines Disklinationsdipols als endliche Versetzungswand wird offensichtlich, dass ein Disklinationsdipol eine Approximation einer einzelnen Versetzung darstellt, wenn der Burgersvektor der Versetzungswand dem Burgersvektor einer einzelnen Stufenversetzung entspricht und die Dipollänge gegen 0 geht (Eshelby, 1966). Das Spannungsfeld einer positiven Disklination mit Winkel ω ist durch

$$\sigma_{xz}^{(w^+)}(x, z) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)2d} \frac{xz}{x^2 + z^2}. \quad (\text{A.1})$$

gegeben, wobei der Betrag des Burgersvektors b und der Winkel ω die Länge $d = b/2\omega$ beschreiben (für $\omega \ll 1$). Das Spannungsfeld ist rotationssymmetrisch im Ursprung der Disklination. Das Spannungsfeld des Disklinationsdipols (dd) mit Dipollänge $2d$ ist durch

$$\tau_{\text{dd}}(x, z) = \sigma_{xz}^{(w^+)}(x, z + d) + \sigma_{xz}^{(w^-)}(x, z - d) \quad (\text{A.2})$$

gegeben. Entlang $z = 0$ wird das Spannungsfeld vereinfacht durch

$$\tau_{\text{dd}}(x, 0) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x}{x^2 + d^2}. \quad (\text{A.3})$$

beschrieben.

Der Disklinationsdipol und die Analogie zur Eigendehnungsformulierung

Die Eigendehnungsformulierung basiert auf einer senkrecht zur Gleitrichtung homogenisierten Versetzungsdichte, was im Fall einer stückweise konstanten Approximation, einer gleichmäßigen Verteilung der Versetzungsdichte über die Homogenisierungslänge h_* entspricht. Aus dieser Konstruktion wird klar, dass die Eigendehnungsformulierung "0. Ordnung" das kontinuierliche Analogon einer endlichen Versetzungswand ist. Die Versetzungswand lässt sich wiederum durch einen Disklinationsdipol der Länge h_* beschreiben.

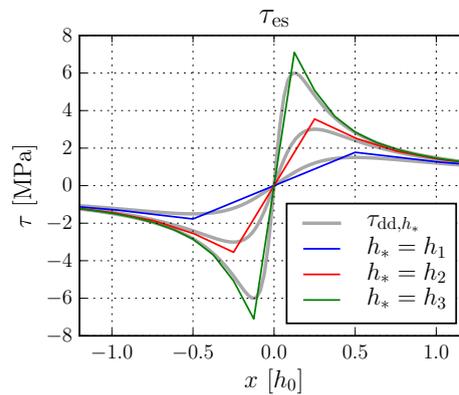


Abbildung A.3: Vergleich der numerischen Lösung der Eigendehnungsformulierung τ_{es} mit dem Spannungsfeld des Disklinationsdipols τ_{dd,h_*} für $h_* = 2^{-k}h_0$ mit $k = 1, 2, 3$ und $h_0 = 1.25 \mu\text{m}$.

Abbildung A.3 zeigt die Übereinstimmung des Spannungsfelds des Disklinationsdipols mit unterschiedlichen Dipollängen h_* mit der numerischen Lösung der Eigendehnungsformulierung τ_{es} entlang $z = 0$ (vgl. Gleichung (2.48)). Die Homogenisierungs- bzw. Dipollänge wird für $h_* = 2^{-k}h_0$ mit $k = 1, 2, 3$ variiert.

B. Eigendehnungsformulierung geneigter Gleitsysteme

In Abschnitt 5.1.4 wird der Einfluss der Art der Diskretisierung des Problems geneigter Gleitebenen untersucht. Abbildung 5.11 zeigt die beiden Varianten der geneigten Approximation (quadratisch, dreieckig für $\varphi = 45^\circ$) und die horizontal ausgerichtete Referenz (quadratisch mit $\varphi = 0^\circ$). Um das Ergebnis zu vervollständigen wird hier zusätzlich zum absoluten Fehler (siehe Abbildung 5.12) der relative Fehler der numerischen Lösungen im Vergleich zum Spannungsfeld des Disklinationsdipols gegeben. Abbildung B.4 zeigt, dass der relative Fehler (Darstellung in Graustufen, logarithmisch) in der rechten und linken Spalte unterhalb von 10% liegt außer in Regionen in denen das Spannungsfeld des Disklinationsdipols gegen 0 geht.

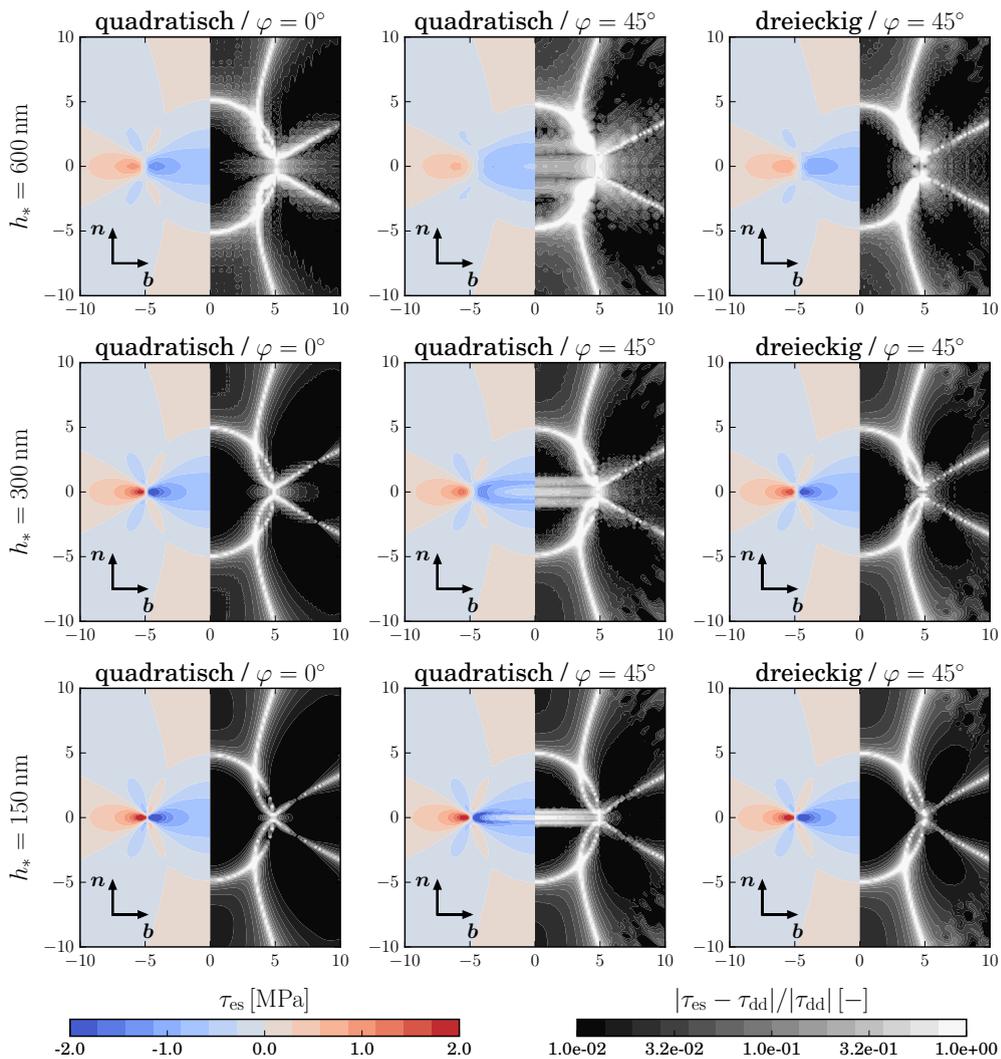


Abbildung B.4: Wie Abbildung 5.12 wobei statt dem absoluten Fehler der relative Fehler logarithmisch in Graustufen abgebildet ist.

C. Auswertungen der Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik

Die Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamik sind in Abbildung 5.21 für die reine Biegung und in Abbildung 5.26 für die Biegung eines Kragbalkens gegeben. Im folgenden Abschnitt wird die Annahme über die Entwicklung der Versetzungsdichte der aktiven und der passiven Gleitsysteme überprüft.

Aktive und passive Gleitsysteme

Für die Modellierung der kristallographischen Orientierung in Abschnitt 5.3 wurde angenommen, dass die Gleitsysteme mit einem Schmid Faktor von 0 (passive Gleitsysteme) keine Entwicklung der Versetzungsdichte aufweisen. Abbildung C.5 zeigt, dass nahezu keine Versetzungsdichteproduktion auf den passiven Gleitsysteme stattfindet.

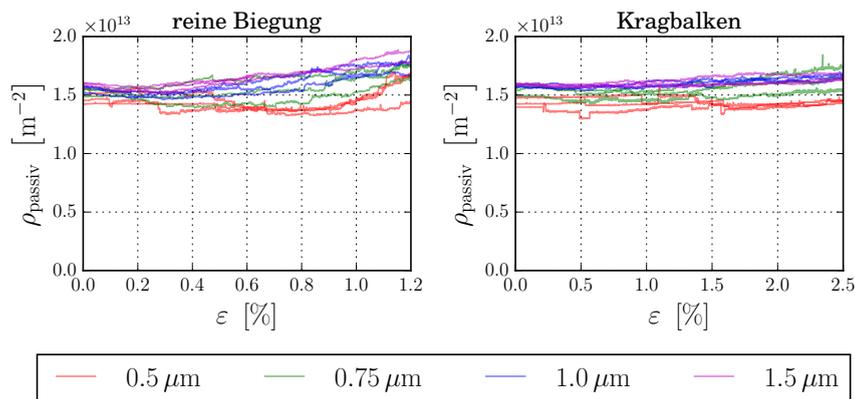


Abbildung C.5: Entwicklung der Versetzungsdichte der passiven Gleitsysteme für die reine Biegung (links) und die Biegung eines Kragbalkens (rechts).

Parameter des Quellmodells aus den Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik

Das Bestimmen des kritischen Biegemomentes $M_{\text{krit,d}}$ und die Quellaktivierungsrate von $\dot{n}_{\text{prod,d}}$ aus den Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik ist in Abbildung C.6 für die reine Biegung und in Abbildung C.7 für die Biegung eines Kragbalkens abgebildet. Das kritische Biegemoment wird als $R_{p0.1}$ abgelesen und als Mittelwert der drei Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik berechnet. Die Rate der Versetzungsdichteproduktion wird aus der Steigung der Entwicklung der Anzahl der Versetzungen n bestimmt. Dafür wird angenommen, dass sich produzierte Versetzungen im Spannungsgradienten ausrichten

und gerade Versetzungen parallel zur neutralen Faser und senkrecht zur Längsachse des Systems ausbilden. Die berechneten Parameter sind in den Tabellen 5.4 und 5.5 aufgelistet.

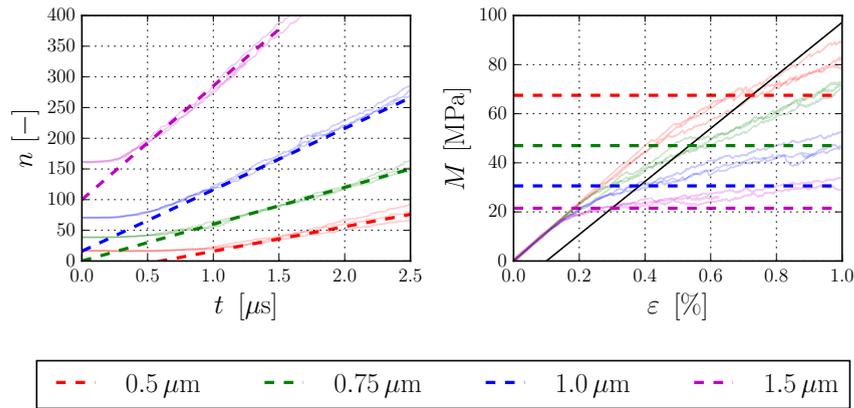


Abbildung C.6: Berechnung des kritischen Biegemomentes $M_{\text{krit,d}}$ und Quellaktivierungsrate von $\dot{n}_{\text{prod,d}}$ der reinen Biegung aus den Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik.

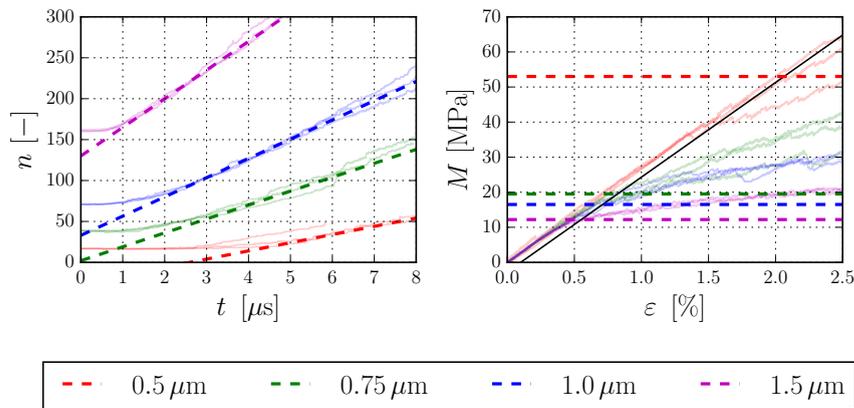


Abbildung C.7: Berechnung des kritischen Biegemomentes $M_{\text{krit,d}}$ und Quellaktivierungsrate von $\dot{n}_{\text{prod,d}}$ der Biegung eines Kragbalkens aus den Simulationen der diskreten Versetzungsdynamik.

D. Konvergenz der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen

In Abbildung D.8 (links) sind die mittleren Residuumschwindigkeiten der einzelnen Versetzungsdynamiksimulationen abhängig von der Anzahl der Versetzungen n in einem Boxplot¹ dargestellt. Dabei wird die mittlere Residuumschwindigkeit mit dem mittleren Versetzungsabstand $\rho^{-1/2}$ normiert. Es zeigt sich, dass aufgrund der gewählten "schwachen" Kriterien für das Erreichen des relaxierten Zustands in Kapitel 5.4, ein ähnlicher aber keine identische mittlere Residuumschwindigkeit erreicht wird.

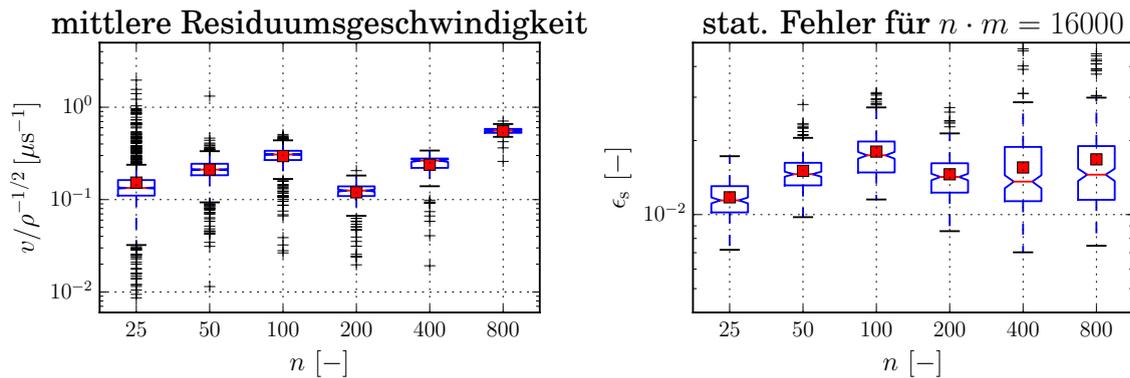


Abbildung D.8: Vergleich der Boxplots¹ der mittleren Residuumschwindigkeit und des statistischen Fehlers für $n \cdot m = 16000$ für eine unterschiedliche Anzahl an Versetzungen.

Abbildung D.8 (rechts) zeigt den Boxplot¹ des statistischen Fehlers für $n \cdot m = 16000$ aus Abbildungen 5.40 und 5.41. Der Vergleich der Boxplots der mittleren Residuumschwindigkeit und des statistischen Fehlers zeigt, dass die berechneten Mittelwerte einem ähnlichen Trend folgen. Zwischen $n = 25$ und $n = 100$ steigt der Mittelwert an, zwischen $n = 100$ und $n = 200$ fällt er wieder ab und steigt zwischen $n = 200$ und $n = 800$ wieder an. Diese Beobachtung verdeutlicht, dass zwischen dem Mittelwert der mittleren Residuumschwindigkeiten und dem statistischen Fehler ein schwacher Zusammenhang besteht.

¹ Ein Boxplot dient der Visualisierung der Verteilung eines Datensatzes. Der horizontale rote Strich markiert den Median und das rote Quadrat markiert den Mittelwert. Die blaue Box markiert die Grenze des oberen bzw. des unteren Quartils und die beiden schwarzen horizontalen Striche stellen die Grenze der Datenpunkte dar, die maximal das 1.5-fache des Interquartilsabstands unter bzw. über den Quartilen liegen. Datenpunkte, die außerhalb dieser Grenzen liegen sind durch ein schwarzes Kreuz markiert.

E. Weitere Ergebnisse zur Charakterisierung des Kontinuumslimits

Abbildungen E.9 und E.10 sind eine Ergänzung zu den Ergebnissen in Kapitel 5.4.2.

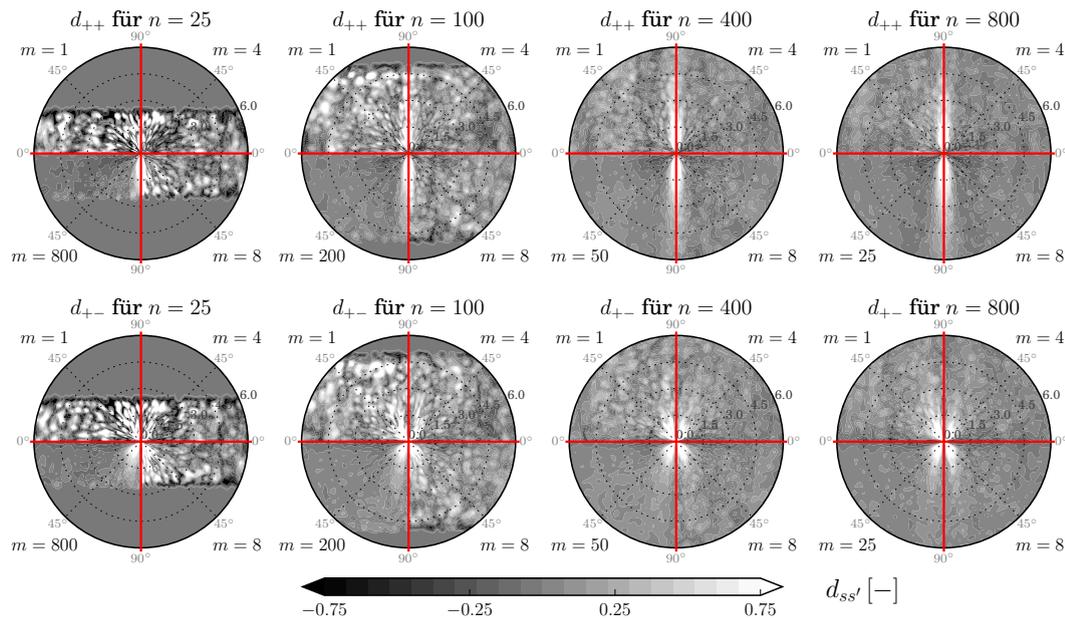


Abbildung E.9: Die Korrelationsfunktionen d_{++} und d_{+-} der nicht-polarisierten Dichte für $n = 25, 100, 400$ und 800 Versetzungen für eine unterschiedliche Anzahl an Simulationen.

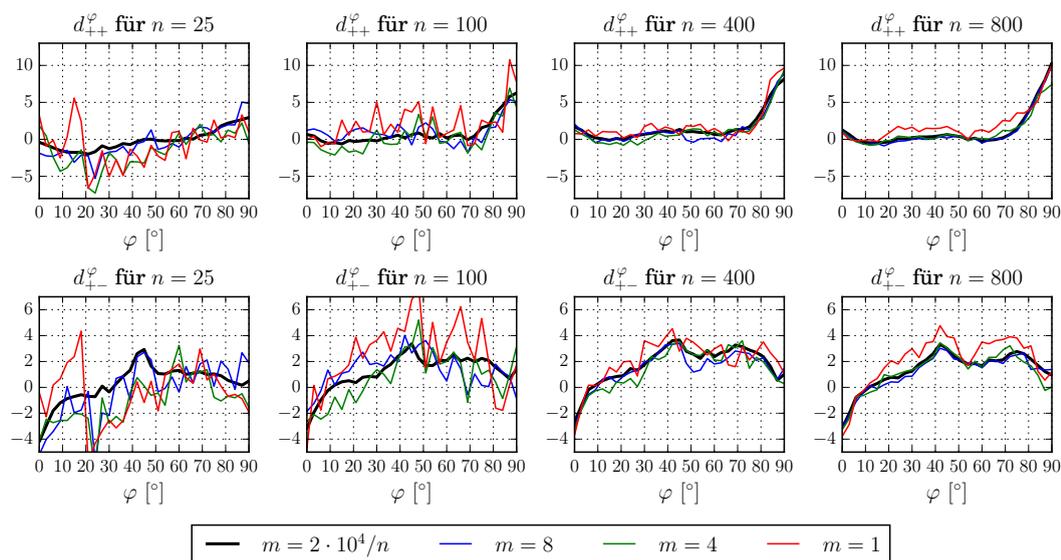


Abbildung E.10: Die Winkelkorrelationsfunktionen der in Abbildung E.9 abgebildeten Korrelationsfunktionen.

F. Reichweite der Korrelationsfunktionen

Die physikalische Reichweite r_{phys} der Korrelationsfunktionen wird formal durch

$$r_{\text{phys}} := \min \left\{ r \in (0, \infty) \mid \forall \Delta r > 0 : \int_0^{2\pi} \int_r^{r+\Delta r} d_{ss'}(\mathbf{x}(r, \varphi)) r dr d\varphi = 0 \right\} \quad (\text{F.4})$$

definiert. Zaiser et al. (2001) haben gezeigt, dass die "stärkste" Korrelation, welche durch die Korrelation zwischen Versetzungen gleichen Vorzeichens für $\varphi = 90^\circ$ beschrieben wird, exponentiell abfällt für $r \rightarrow \infty$.

Abbildung F.11 zeigt den Einfluss der Wahl des maximalen Radius r_1 auf die berechneten Winkelkorrelationsfunktionen der nicht-polarisierten Dichte für $n = 800$ Versetzungen. Ab einem Radius von $4 \leq r_1 \leq 6$ ist näherungsweise eine gleichmäßige Zunahme der Winkelkorrelationsfunktion zu beobachten. Dieses Verhalten weist darauf hin, dass die hier berechneten Korrelationsfunktionen nicht ausreichend schnell gegen 0 für $r \rightarrow \infty$ konvergieren, um die Annahme einer kurzen Reichweite formal zu rechtfertigen. Auf der anderen Seite reicht schon eine kleine konstante Verschiebung der Korrelationsfunktionen aus, um diesen Effekt zu produzieren.

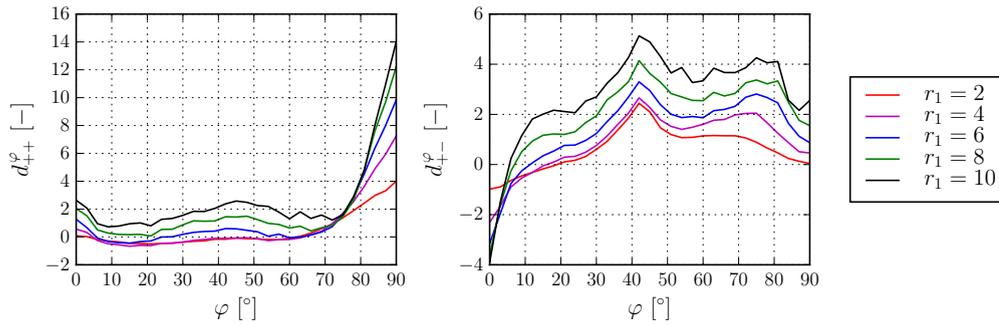


Abbildung F.11: Die Winkelkorrelationsfunktionen der nicht-polarisierten Dichte für $n = 800$ Versetzungen berechnet für unterschiedliche maximale Radien r_1 . Eine detaillierte Diskussion der Winkelkorrelationsfunktionen ist in Abschnitt 5.4.2 gegeben.

Zaiser et al. (2001) untersuchen die physikalische Reichweite nur visuell anhand des Verlaufs der Korrelationsfunktion d_{++} für $\varphi = 90^\circ$. Dabei bleibt die Frage unbeantwortet, ob die Korrelationsfunktionen auch nach einem Maß wie in Gleichung (F.4) konvergieren. Die numerisch berechneten Werte der Korrelationsfunktion von Zaiser et al. (2001) scheinen für einen Radius $r > 4$ tendenziell über der approximierten, exponentiell abfallenden, Funktion zu liegen.

Groma et al. (2003) berechnen Winkelkorrelationsfunktionen basierend auf den Ergebnissen von Zaiser et al. (2001) ohne eine weitere Diskussion der physikalische Reichweite r_{phys} . Es soll darauf hingewiesen werden, dass die von Groma et al. (2003) berechneten Winkelkorrelationsfunktionen nicht durch die Ergebnisse dieser Arbeit reproduziert werden. Ein

möglicher Unterschied ist die Definition der Winkelkorrelationsfunktionen. In Groma et al. (2003) ist die radiale Integration durch

$$d_{ss'}^{\varphi}(\varphi) = \int_{r_0}^{r_1} d_{ss'}(\mathbf{x}(r, \varphi)) dr \quad (\text{F.5})$$

definiert. Vergleiche dazu Gleichung (4.4) mit der radialen Integration über $r dr$. Zudem wird in den Arbeiten von Zaiser et al. (2001) und Groma et al. (2003) das Spannungsfeld einer Stufenversetzung in einem periodischen System gescreent, d.h. die Versetzungen im System haben a priori ein kurzreichweitiges Spannungsfeld.

Trotz der fehlenden Konvergenz der Korrelationsfunktionen bzgl. r_1 wird der maximale Radius für die berechneten Winkelkorrelationen in dieser Arbeit mit $r_1 = 6$ gewählt. In Abbildung F.11 ist zu sehen, dass die berechneten Korrelationsfunktionen für $r_1 > 4$ näherungsweise um einen konstanten Wert nach oben verschoben sind und daher vermutet werden kann, dass alle Details durch die Winkelkorrelationsfunktion für $r_1 = 6$ abgebildet werden.

Literaturverzeichnis

- A. Acharya und A. Roy. Size effects and idealized dislocation microstructure at small scales: Predictions of a phenomenological model of mesoscopic field dislocation mechanics: Part i. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54(8):1687–1710, 2006.
- 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, 2004.
- E. Arzt. Size effects in materials due to microstructural and dimensional constraints: a comparative review. *Acta Materialia*, 46(16):5611–5626, 1998.
- M. Ashby. The deformation of plastically non-homogeneous materials. *Philosophical Magazine*, 21:399–424, 1970.
- W. Bangerth, R. Hartmann, und G. Kanschat. deal.II – a general purpose object oriented finite element library. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 33(4):24/1–24/27, 2007.
- A. Benzerga. An analysis of exhaustion hardening in micron-scale plasticity. *International Journal of Plasticity*, 24(7):1128–1157, 2008.
- A. A. Benzerga, Y. Bréchet, A. Needleman, und E. V. der Giessen. Incorporating three-dimensional mechanisms into two-dimensional dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 12(1):159, 2004.
- B. A. Bilby, R. Bullough, und E. Smith. Continuous distributions of dislocations: A new application of the methods of non-riemannian geometry. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 231(1185):263–273, 1955.
- E. Bitzek und P. Gumbsch. Atomistic study of drag, surface and inertial effects on edge dislocations in face-centered cubic metals. *Materials Science and Engineering: A*, 387-389:11–15, 2004.
- E. Bitzek und P. Gumbsch. Dynamic aspects of dislocation motion: atomistic simulations. *Materials Science and Engineering: A*, 400-401(0):40–44, 2005.

- V. Bulatov und W. Cai. *Computer Simulations of Dislocations*. Oxford Series on Materials Modelling Series. OUP Oxford, 2006.
- V. Bulatov, F. F. Abraham, L. Kubin, B. Devincre, und S. Yip. Connecting atomistic and mesoscale simulations of crystal plasticity. *Nature*, 391(6668):669–672, 1998.
- V. V. Bulatov und W. Cai. Nodal effects in dislocation mobility. *Physical Review Letters*, 89(11):115501, 2002.
- W. Cai und V. V. Bulatov. Mobility laws in dislocation dynamics simulations. *Materials Science and Engineering: A*, 387-389:277–281, 2004.
- W. Cai, V. V. Bulatov, J. Chang, J. Li, und S. Yip. Periodic image effects in dislocation modelling. *Philosophical Magazine*, 83(5):539–567, 2003.
- H. Cleveringa, E. V. D. Giessen, und A. Needleman. Comparison of discrete dislocation and continuum plasticity predictions for a composite material. *Acta Materialia*, 45(8):3163–3179, 1997.
- F. F. Csikor, I. Groma, T. Hochrainer, D. Weygand, und M. Zaiser. On the range of 3d dislocation pair correlations. *arXiv:0812.0918*, 2008.
- J. Deng und A. El-Azab. Dislocation pair correlations from dislocation dynamics simulations. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 14(1):295–307, 2007.
- B. Devincre, L. Kubin, und T. Hoc. Physical analyses of crystal plasticity by dd simulations. *Scripta Materialia*, 54(5):741–746, 2006.
- D. Dickel, K. Schulz, S. Schmitt, und P. Gumbsch. Dipole formation and yielding in a two-dimensional continuum dislocation model. *Physical Review B*, 90:094118, 2014.
- D. J. Dunstan und A. J. Bushby. Theory of deformation in small volumes of material. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 460(2050):2781–2796, 2004.
- A. El-Azab. Statistical mechanics treatment of the evolution of dislocation distributions in single crystals. *Physical Review B*, 61(18):11956–11966, 2000.
- A. El-Azab, J. Deng, und M. Tang. Statistical characterization of dislocation ensembles. *Philosophical Magazine*, 87(8-9):1201–1223, 2007.
- J. Eshelby. A simple derivation of the elastic field of an edge dislocation. *British Journal of Applied Physics*, 17(9):1131, 1966.
- N. Fleck, G. Muller, M. Ashby, und J. Hutchinson. Strain gradient plasticity: theory and experiment. *Acta Metallurgica et Materialia*, 42(2):475–487, 1994.

- N. A. Fleck und J. W. Hutchinson. A phenomenological theory for strain gradient effects in plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(12):1825–1857, 1993.
- P. Franciosi, M. Berveiller, und A. Zaoui. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metallurgica*, 28(3):273–283, 1980.
- F. C. Frank und J. H. van der Merwe. One-dimensional dislocations. ii. misfitting monolayers and oriented overgrowth. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 198(1053):216–225, 1949.
- H. Gao und Y. Huang. Geometrically necessary dislocation and size-dependent plasticity. *Scripta Materialia*, 48(2):113–118, 2003.
- D. Gómez-García, B. Devincere, und L. Kubin. Forest hardening and boundary conditions in 2-d simulations of dislocations dynamics. volume 578, page 131. Cambridge University Press, 1999.
- I. Groma. Link between the microscopic and mesoscopic length-scale description of the collective behavior of dislocations. *Physical Review B*, 56(10):5807–5813, 1997.
- I. Groma, F. Csikor, und M. Zaiser. Spatial correlations and higher-order gradient terms in a continuum description of dislocation dynamics. *Acta Materialia*, 51(5):1271–1281, 2003.
- I. Groma, G. Györgyi, und B. Kocsis. Debye screening of dislocations. *Physical Review Letters*, 96:165503, 2006.
- I. Groma, Z. Vándrus, und P. D. Ispánovity. Scale-free phase field theory of dislocations. *Physical Review Letters*, 114:015503, 2015.
- R. Gröger und V. Vitek. Multiscale modeling of plastic deformation of molybdenum and tungsten. iii. effects of temperature and plastic strain rate. *Acta Materialia*, 56(19):5426–5439, 2008.
- M. E. Gurtin. A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(1):5–32, 2002.
- M. Haque und M. Saif. Strain gradient effect in nanoscale thin films. *Acta Materialia*, 51(11):3053–3061, 2003.
- J. Hirth und J. Lothe. *Theory of Dislocations*. Krieger Publishing Company, 1982.
- T. Hochrainer. *Evolving systems of curved dislocations: mathematical foundations of a statistical theory*. Shaker, 2006.
- T. Hochrainer. Multipole expansion of continuum dislocations dynamics in terms of alignment tensors. *Philosophical Magazine*, 95(12):1321–1367, 2015.

- T. Hochrainer. Thermodynamically consistent continuum dislocation dynamics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 88:12–22, 2016.
- 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.
- P. D. Ispánovity, I. Groma, und G. Györgyi. Evolution of the correlation functions in two-dimensional dislocation systems. *Physical Review B*, 78:024119, 2008.
- O. Jamond, R. Gatti, A. Roos, und B. Devincre. Consistent formulation for the discrete-continuous model: Improving complex dislocation dynamics simulations. *International Journal of Plasticity*, 80:19–37, 2016.
- U. Kocks und R. Scattergood. Elastic interactions between dislocations in a finite body. *Acta Metallurgica*, 17(9):1161–1168, 1969.
- K. Kondo. On the geometrical and physical foundations of the theory of yielding. In *Proc. 2nd Japan Nat. Congr. Applied Mechanics*, volume 2, pages 41–47, 1952.
- M. Kooiman, M. Hütter, und M. Geers. Microscopically derived free energy of dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 78:186 – 209, 2015.
- A. M. Kosevich. *Dislocations in solids*, volume 1, pages 33–142. North Holland, Amsterdam, 1979.
- E. Kröner. *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*. Springer-Verlag, Berlin, 1958.
- E. Kröner. Initial studies of a plasticity theory based upon statistical mechanics. *Inelastic behavior of solids*, pages 137–148, 1969.
- L. Kubin. *Dislocations, mesoscale simulations and plastic flow*, volume 5. Oxford University Press, 2013.
- D. Kuhlmann-Wilsdorf. A new theory of work hardening. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 224(5):1047, 1962.
- C. Lemarchand, B. Devincre, und L. Kubin. Homogenization method for a discrete-continuum simulation of dislocation dynamics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9):1969–1982, 2001.

- S. Limkumnerd und E. Van der Giessen. Statistical approach to dislocation dynamics: From dislocation correlations to a multiple-slip continuum theory of plasticity. *Physical Review B*, 77:184111, 2008.
- 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.
- M. Monavari, M. Zaiser, und S. Sandfeld. Comparison of closure approximations for continuous dislocation dynamics. In *Symposium KK – Dislocation Plasticity*, volume 1651 of *MRS Online Proceedings Library*, 2014.
- M. Monavari, S. Sandfeld, und M. Zaiser. Continuum representation of systems of dislocation lines: A general method for deriving closed-form evolution equations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 95:575–601, 2016.
- J. A. Moriarty, V. Vitek, V. V. Bulatov, und S. Yip. Atomistic simulations of dislocations and defects. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 9(2):99–132, 2002.
- C. Motz und D. Dunstan. Observation of the critical thickness phenomenon in dislocation dynamics simulation of microbeam bending. *Acta Materialia*, 60(4):1603–1609, 2012.
- C. Motz, T. Schöberl, und R. Pippan. Mechanical properties of micro-sized copper bending beams machined by the focused ion beam technique. *Acta Materialia*, 53(15):4269–4279, 2005.
- C. Motz, D. Weygand, J. Senger, und P. Gumbsch. Micro-bending tests: A comparison between three-dimensional discrete dislocation dynamics simulations and experiments. *Acta Materialia*, 56(9):1942–1955, 2008.
- T. Mura. *Micromechanics of defects in solids*. Mechanics of elastic and inelastic solids. Nijhoff, Dordrecht [u.a.], 2., rev. ed. edition, 1987.
- A. Needleman und E. V. der Giessen. Discrete dislocation and continuum descriptions of plastic flow. *Materials Science and Engineering: A*, 309-310:1–13, 2001.
- W. D. Nix und H. Gao. Indentation size effects in crystalline materials: A law for strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(3):411–425, 1998.
- J. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1(2):153–162, 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 & Materials Society*, 66(10):2108–2120, 2014.
- S. Raj und G. Pharr. A compilation and analysis of data for the stress dependence of the subgrain size. *Materials Science and Engineering*, 81(0):217–237, 1986.

- 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*, 71:333–348, 2014.
- A. Roy, R. Peerlings, M. Geers, und Y. Kasyanyuk. Continuum modeling of dislocation interactions: Why discreteness matters? *Materials Science and Engineering: A*, 486(1-2): 653–661, 2008.
- S. Sandfeld und G. Po. Microstructural comparison of the kinematics of discrete and continuum dislocations models. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23(8):085003, 2015.
- S. Sandfeld, M. Monavari, und M. Zaiser. From systems of discrete dislocations to a continuous field description: stresses and averaging aspects. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 21(8):085006, 2013.
- M. Sauzay und L. Kubin. Scaling laws for dislocation microstructures in monotonic and cyclic deformation of fcc metals. *Progress in Materials Science*, 56(6):725–784, 2011.
- K. Schulz, D. Dickel, S. Schmitt, S. Sandfeld, D. Weygand, und P. Gumbsch. Analysis of dislocation pile-ups using a dislocation-based continuum theory. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 22(2):025008, 2014.
- 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, 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.
- V. B. Shenoy, R. V. Kukta, und R. Phillips. Mesoscopic analysis of structure and strength of dislocation junctions in fcc metals. *Physical Review Letters*, 84:1491–1494, 2000.
- S. S. Shishvan, S. Mohammadi, und M. Rahimian. A dislocation-dynamics-based derivation of the frank–read source characteristics for discrete dislocation plasticity. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 16(7):075002, 2008.
- G. I. Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. part i. theoretical. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 145(855):362–387, 1934.
- N. Thompson. Dislocation nodes in face-centred cubic lattices. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 66(6):481, 1953.
- M. D. Uchic, D. M. Dimiduk, J. N. Florando, und W. D. Nix. Sample dimensions influence strength and crystal plasticity. *Science*, 305(5686):986–989, 2004.

- 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.
- V. Vitek, M. Mrovec, und J. Bassani. Influence of non-glide stresses on plastic flow: from atomistic to continuum modeling. *Materials Science and Engineering: A*, 365(1-2):31–37, 2004. Multiscale Materials Modelling.
- V. Volterra. Sur l'équilibre des corps élastiques multiplement connexes. *Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure*, 24:401–517, 1907.
- D. Weygand und P. Gumbsch. Study of dislocation reactions and rearrangements under different loading conditions. *Materials Science and Engineering: A*, 400-401:158–161, 2005.
- D. Weygand, L. H. Friedman, E. van der Giessen, und A. Needleman. Aspects of boundary-value problem solutions with three-dimensional dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 10:437–468, 2002.
- S. Yefimov und E. van der Giessen. Multiple slip in a strain-gradient plasticity model motivated by a statistical-mechanics description of dislocations. *International Journal of Solids and Structures*, 42(11-12):3375–3394, 2005.
- S. Yefimov, E. van der Giessen, und I. Groma. Bending of a single crystal: discrete dislocation and nonlocal crystal plasticity simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 12(6):1069, 2004.
- M. Zaiser. Local density approximation for the energy functional of three-dimensional dislocation systems. *Physical Review B*, 92:174120, 2015.
- M. Zaiser und T. Hochrainer. Some steps towards a continuum representation of 3d dislocation systems. *Scripta Materialia*, 54(5):717–721, 2006.
- 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.
- M. Zaiser, M.-C. Miguel, und I. Groma. Statistical dynamics of dislocation systems: The influence of dislocation-dislocation correlations. *Physical Review B*, 64:224102, 2001.
- M. Zaiser, N. Nikitas, T. Hochrainer, und E. C. Aifantis. Modelling size effects using 3d density-based dislocation dynamics. *Philosophical Magazine*, 87(8-9):1283–1306, 2007.
- Y. Zhu, H. Wang, X. Zhu, und Y. Xiang. A continuum model for dislocation dynamics incorporating frank–read sources and hall–petch relation in two dimensions. *International Journal of Plasticity*, 60:19–39, 2014.