# Untersuchung von charakteristischen Versetzungsstrukturen und Versetzungstransportprozessen in Reibkontakten mit Versetzungsdynamik-Simulationen

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

genehmigte
**Dissertation**
von

M.Sc. Johanna Gagel

| | |
|---|---|
| Tag der mündlichen Prüfung: | 04.09.2018 |
| Hauptreferent: | Prof. Dr. rer. nat. Peter Gumbsch |
| Korreferent: | Prof. Dr. rer. nat. Oliver Kraft |

# Kurzfassung

Plastische Verformung beeinflusst die Eigenschaften eines Reibkontaktes. Es ist daher wichtig, grundlegende Versetzungsmechanismen in Reibkontakten zu verstehen. In dieser Arbeit wird der Bildungsmechanismus von prismatischen Versetzungsstrukturen unter einer einzelnen Asperität und der Versetzungstransport unter einer fahrenden Asperität mit dreidimensionalen Versetzungsdynamik-Simulationen im kubisch flächenzentrierten Metall untersucht.

Die Ergebnisse zeigen, dass sich unter Indentierung je nach Kristallorientierung und je nach Orientierung des Burgersvektors aus einer Versetzungsquelle verschiedene prismatische Versetzungsstrukturen ausbilden. Der Bildungsmechanismus ist durch deterministisches bzw. stochastisches Quergleiten von Versetzungen geprägt, welches mit dem aufgelösten Spannungsfeld des Indenters und Versetzungsinteraktionen erklärt werden kann.

In einem Gleitkontakt werden Versetzungen durch eine fahrende Asperität in ursprünglich versetzungsfreie Bereiche transportiert. Die Simulationen zeigen, dass für die Transportlänge die Kristallorientierung, der Burgersvektor der Versetzung und die Fahrtrichtung der Asperität entscheidend sind. Es wird ein Modell entwickelt, um jene Gleitsysteme zu identifizieren, auf denen Versetzungen mittransportiert werden. Dabei spielt die Gleitebenenorientierung und das aufgelöste Schubspannungsfeld des Indenters eine zentrale Rolle.

# Abstract

Plastic deformation influences the properties of tribological contacts. Therefore, it is important to understand the underlying dislocation mechanisms in tribological contacts. This work focuses on the formation mechanism of prismatic dislocation structures below an asperity and dislocation transport during sliding. Three dimensional Discrete Dislocation Dynamics simulations are conducted for a cubic face centered metal.

The results show, that several kinds of prismatic dislocation structures are formed during indentation, depending on the crystal orientation and the orientation of the Burgers vector of the dislocation source. The mechanism is characterised by deterministic or statistical cross slip, which can be explained with the resolved shear stress due to the indenter and dislocation interactions.

In a sliding contact, dislocations are transported by an indenter tip into initially dislocation-free volume. The simulations show, that crystal orientation, Burgers vector orientation and sliding

direction of the asperity determine the length of dislocation transport. A model is developed to identify those glide systems, on which dislocations are transported. Glide plane orientation and resolved shear stress of the tip are shown to be decisive.

# Veröffentlichungen

Gagel, J.; Weygand, D.; Gumbsch, P. Discrete Dislocation Dynamics simulations of dislocation transport during sliding. 2018. Acta Materialia, 156, 215-227.

Gagel, J.; Weygand, D.; Gumbsch, P. Formation of extended prismatic dislocation structures under indentation. 2016. Acta Materialia, 111 (1), 399-406

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

# Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand am Institut für Angewandte Materialien — Computational Materials Science am Karlsruher Institut für Technologie und wurde durch die Deutsche Telekom Stiftung mit dem Doktorandenstipendium T-14-14 gefördert.

Bei Professor Peter Gumbsch möchte ich mich für das Ermöglichen der Bearbeitung der vorliegenden Arbeit, wertvolle fachliche Diskussionen, sowie Unterstützung und Förderung herzlich bedanken.

Professor Oliver Kraft danke ich sehr für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Korreferats.

Bei Dr. Daniel Weygand möchte ich mich für seine Betreuung mit wertvollen fachlichen Diskussionen und sein stets „offenes Ohr“ bedanken.

Professor Lars Pastewka, Dr. Ruth Schwaiger und Dr. Christian Greiner danke ich für die große Hilfsbereitschaft bei Fragen zu Ihrem Fachgebiet weiterzuhelfen.

Bei der Deutschen Telekom Stiftung möchte ich mich herzlich für das großzügige Doktoranden-Stipendium bedanken. Ich konnte frei und flexibel mein Thema bearbeiten und der Austausch mit den anderen Stipendiaten sowie die Workshops nicht fachbezogener Natur haben mich sehr inspiriert.

Dr. Katrin Schulz danke ich sehr für Tipps, Förderung und Unterstützung seit Beginn meiner Zeit am Institut.

Bei allen Kollegen möchte ich mich für das sehr angenehme und stets hilfsbereite Miteinander bedanken, insbesondere aber bei Sarah Becker, Andrea Doer und meinen Zimmerkollegen Dr. Kinshuk Srivastava, Dr. Till Junge, Michael Schober, Taymour Achkar und Kolja Zoller.

# Inhaltsverzeichnis

**Kurzfassung** **iii**

**Symbolverzeichnis** **xi**

**1 Einleitung** **1**

**2 Plastizität im Reibkontakt** **3**
2.1 Prismatische Versetzungsstrukturen . . . . . 3
2.2 Versetzungstransport . . . . . 8

**3 Simulationsmethodik** **11**
3.1 Diskrete Versetzungsdynamik . . . . . 11
3.2 Setup . . . . . 14

**4 Ergebnisse** **17**
4.1 Prismatische Versetzungsstrukturen unter Indentierung . . . . . 17
4.1.1 Perfekt prismatische Versetzungen . . . . . 17
4.1.2 Helixförmige prismatische Versetzungen . . . . . 20
4.1.3 V-förmige prismatische Versetzungen . . . . . 22
4.1.4 U-förmige prismatische Versetzungen . . . . . 24
4.1.5 Wechselwirkung prismatischer Strukturen . . . . . 25
4.2 Versetzungstransport im Gleitkontakt . . . . . 27
4.2.1 Gleitsysteme auf denen Versetzungen transportiert werden . . . . . 27
4.2.2 Quergleiten . . . . . 32
4.2.3 Reibung . . . . . 35
4.2.4 Transport in nicht versetzungsfreie Bereiche . . . . . 36
4.2.5 Transportlänge . . . . . 37

**5 Diskussion** **41**
5.1 Bildungsmechanismus prismatischer Versetzungsstrukturen . . . . . 41
5.1.1 Kristallographie . . . . . 41
5.1.2 Belastungsveränderungen . . . . . 48
5.1.3 Anfängliche Versetzungsstruktur . . . . . 55
5.2 Versetzungstransport . . . . . 59
5.2.1 Bedingungen für Versetzungstransport . . . . . 59
5.2.2 Transportlänge . . . . . 64
5.2.3 Reversibilität . . . . . 68
5.2.4 Oberflächentopographie . . . . . 69

**6 Zusammenfassung und Ausblick** **71**

**A Spannungskomponenten im Hertzschen Kontakt** **I**

**B Gleitsystem-Nomenklatur** **IX**

**C Mikrostrukturentwicklung bei Versetzungstransport** **XI**

**D Versetzungsdichteentwicklung bei Versetzungstransport** **XIX**
D1 Reibungsfreier Kontakt ohne Versetzungsquergleiten . . . . . XIX
D2 Reibungsfreier Kontakt mit Versetzungsquergleiten . . . . . XXIII
D3 Reibungsbehafteter Kontakt ohne Versetzungsquergleiten . . . . . XXVI

**E Oberflächentopographie bei Versetzungstransport** **XXIX**

**F Transportlänge** **XXXIII**

**G Projizierte aufgelöste Schubspannung** **XXXV**

**Literaturverzeichnis** **XXXIX**

# Symbolverzeichnis

Skalarwertige Größen werden in Klein- oder Großbuchstaben angegeben, vektorwertige Größen mit Kleinbuchstaben und einem übergestellten Pfeil, und tensorwertige Größen mit einem Makron.

Indentierungsrichtungen, Gleitebenen und Burgersvektoren werden im Kristallkoordinatensystem angegeben.

| **Abkürzung** | **Bedeutung** |
|---|---|
| Abb. | Abbildung |
| Bsp. | Beispiel |
| DDD | Discrete Dislocation Dynamics – Diskrete Versetzungsdynamik |
| FEM | Finite Element Methode |
| Gl. | Gleichung |
| kfz | kubisch flächenzentriert |
| Ref. | Referenz |
| Tab. | Tabelle |

| **Operator** | **Beschreibung** |
|---|---|
| $sp(\cdot)$ | Spur eines Tensors |

| **Buchstabe** | **Einheit** | **Beschreibung** |
|---|---|---|
| $a$ | $m$ | Gitterkonstante |
| $B$ | $Pas$ | Reibungskoeffizient für Versetzungsgleiten |
| $\vec{b}$ | $m$ | Burgersvektor |
| $b$ | $m$ | Norm des Burgersvektors |
| $\varepsilon_{ij}$ | - | Tensorkomponenten des infinitesimalen Verzerrungstensors zweiter Stufe |
| $E_L$ | $N$ | Linienenergie pro Einheitslänge |
| $F_0$ | $N$ | Indentervorkraft |
| $F$ | $N$ | Indenterkraft |
| $\dot{F}$ | $Ns^{-1}$ | Indenterkraftrate |
| $\vec{f}_{PK}$ | $N/m$ | Vektorwertige Peach-Köhler-Kraft |
| $F_{PK}$ | $N/m$ | Skalare, aufgelöste Peach-Köhler-Kraft in der Gleitebene |
| $G$ | $Pa$ | Schubmodul |
| $\overline{I}$ | - | Einheitstensor zweiter Stufe |
| $L$ | $m$ | Länge einer Versetzungsquelle |

| | | |
|---|---|---|
| $L_m$ | $m$ | Mittlere Länge von Versetzungsquellen |
| $m$ | $kgm^{-1}$ | Effektive Versetzungsmasse pro Einheitslänge |
| $\vec{n}$ | - | Normierte Gleitebenennormale |
| $\nu$ | - | Querkontraktionszahl |
| $\phi$ | $^\circ$ | Winkel zwischen Burgersvektor und Versetzungslinie |
| $p_{max}$ | $Pa$ | Maximaler Hertzscher Druck $\frac{3}{2}\frac{F}{\pi r_k^2}$ |
| $R$ | $m$ | Indenterradius |
| $r$ | $m$ | Abstand zur Indenterspitze auf der Oberfläche |
| $r_k$ | $m$ | Kontaktradius |
| $\rho$ | $m^{-2}$ | Versetzungsdichte |
| $\overline{\sigma}$ | $Pa$ | Spannungstensor zweiter Stufe |
| $\overline{\sigma}^{dev}$ | $Pa$ | Deviatorischer Anteil von $\overline{\sigma}$ mit $\overline{\sigma} - sp(\overline{\sigma})\overline{I}$ |
| $\sigma_{ij}$ | $Pa$ | Tensorkomponenten von $\overline{\sigma}$ |
| $\sigma_v$ | $Pa$ | Mises-Vergleichsspannung $\sqrt{\frac{3}{2}\sigma_{ij}^{dev}\sigma_{ij}^{dev}}$ |
| $\tau_a$ | $Pa$ | Aufgelöste Schubspannung in der Gleitebene in Richtung des Burgersvektors |
| $\tau_{max}$ | $Pa$ | Maximale Schubspannung |
| $\tau_r$ | $Pa$ | Kritische Spannung für Versetzungsgleiten bei Mischkristallverfestigung |
| $u$ | $m$ | Verschiebung |
| $u_{max}$ | $m$ | Maximale Tiefe der Indenterspitze |
| $w$ | $m$ | Breite eines einzelnen Versetzungsrings |

# 1 Einleitung

Schon in frühen Hochkulturen wie im alten Ägypten oder in Mesopotamien und wurde gezielt die Reibung beim Transport von schweren Gegenständen reduziert — indem der Sand oder das Holz vor Transportschlitten angefeuchtet wurde [1, 2] (Abb. 1.1).

**Abb. 1.1:** Beim „Transport einer Sitzstatue des Ti zum Grabe“ schüttet eine Person eine Flüssigkeit (roter Kreis) vor den Transportschlitten. Wandmalerei im Grab des Ti, ca. 2700 v.C. Mit Genehmigung der UB Leipzig [Hist.Afr.19-gf:2] [3]

Auch rund 5000 Jahre später ist die Tribologie immer noch ein aktuelles Forschungsthema: Gesellschaftliche Ziele wie Kosteneffizienz und Umweltschutz erfordern eine Reduktion von Materialverschleiß (hinsichtlich Wartungsintervallen und Materialeinsatz) und Energieeinsatz in Reibkontakten [4–6]. Zahlreiche Anwendungen finden sich überall dort, wo Oberflächen mit unterschiedlicher Relativgeschwindigkeit im Kontakt miteinander stehen — beispielsweise im Automobilsektor (z.B. Getriebe, Kupplungen, Lager, Reifen [6, 7]), in der Luft- und Raumfahrt (z.B. Schaufel-Scheibe-Verbindungen in Triebwerken [8], Reaktionsräder, Drehvorrichtungen für Solarmodule oder Antennensysteme unter extremen Umgebungsbedingungen und speziellen Anforderungen an Wartung [9–11]), in der Industrie (z.B. Führungen in Werkzeugmaschinen, Zerspanungsprozesse [12]), im Freizeitsektor (z.B. Ski [13]) oder im medizinischen Sektor (z.B. künstliche Gelenke [14, 15]). Die gegenwärtige Miniaturisierung rückt nun auch mikro- und nano-tribologische Kontakte immer stärker in den Blickwinkel, z.B. in magnetischen Speichern (Relativbewegung zwischen Lese-/Schreibkopf und magnetischem Medium) [7, 12] oder in mikro-elektromechanischen Systemen [7, 12, 16]. Die Eigenschaften eines Reibkontaktes können beispielsweise durch ausgewählte Materialkombinationen [17], Oberflächenstrukturierungen [18–20], Wärmebehandlungen [21, 22], Beschichtungen [17, 23], Schmierung [17], mechanische Oberflächenbehandlung [24] oder Opferbleche [25] verändert werden. Mit einem Verständnis von der Reibung und dem Verschleiß zu Grunde liegenden Mechanismen können Eigenschaften von Reibkontakten gezielt ausgelegt und eingestellt werden.

In Reibkontakten herrscht ein komplexes Zusammenspiel aus plastischer Deformation, Adhäsion, Furchung und Abrieb, welche wiederum von zahlreichen Material- und Belastungsparametern beeinflusst werden [12]. An der Oberfläche bildet sich eine vom Grundmaterial veränderte Zone aus, die auch als „dritter Körper“ bezeichnet wird [26]. Tribologische Belastung verändert die Mikrostruktur von Reibkontakten [27, 28] und die Mikrostruktur beeinflusst die Reibeigenschaften des Kontaktes [21, 22, 29]. Die anfängliche Plastizität in einem makroskopischen Kontakt erfolgt an einzelnen Stellen in einem mikroskopischen Kontakt [16]. Das Verständnis von den tribologischen Prozessen auf der mikroskopischen Skala ist daher Voraussetzung, um auch Prozesse und Eigenschaften des makroskopische Kontaktes verstehen zu können.

Ziel dieser Arbeit ist es, ein Verständnis für ausgewählte, grundlegende versetzungsbasierte plastische Prozesse auf mikroskopischer Skala im Frühstadium des Reibkontaktes zu entwickeln. Unter Last verformt sich das Metall zuerst rein elastisch, bis dann plastische Verformung einsetzt. Versetzungsbasierte Prozesse in Reibkontakten umfassen beispielsweise (i) Versetzungsnukleation, (ii) Versetzungsmultiplikation aus bereits vor der Belastung im Kristall vorhandenen Versetzungen, (iii) konservative und nicht konservative Versetzungsbewegung, und (iv) Versetzungswechselwirkungen. Die Belastung in einem Reibkontakt ist eine Kombination von Asperitäten, die in die Oberfläche indentieren, und die auf der Oberfläche fahren. Um die kombinierte Belastung verstehen zu können, müssen die Aspekte „Indentierung“ und „Fahrende Asperität“ zuerst getrennt voneinander betrachtet werden. Es stellt sich die Frage, wie sich einzelne oder mehrere Versetzungen unter solch einer indentierenden Asperität oder einer fahrenden Asperität verhalten. In dieser Arbeit soll, unter Ausschluss homogener Versetzungsnukleation, sowohl die Ausbildung von prismatischen Versetzungsstrukturen aus einer einzelnen Versetzungsquelle unter Indentierung, als auch der Versetzungstransport unter einer fahrenden Asperität analysiert werden.

Experimentell ist das Frühstadium der plastischen Verformung nur schwer zugänglich. Klassische Kontinuumstheorien eignen sich für diese Untersuchung nicht, da diese Methodik auf große, homogene Volumen zugeschnitten ist und auf der Homogenisierung der Mikrostruktur basiert. Molekulardynamik-Simulationen implizieren kurze Simulationszeiten aufgrund der Verfolgung atomarer Schwingungsvorgänge. Für die Simulationen dieser Arbeit wird daher die geeignetere Methode der Diskreten Versetzungsdynamik verwendet. Diese vereint die Möglichkeit, sowohl im Vergleich zur Molekulardynamik plastische Prozesse in größere Proben über längere Zeiten zu simulieren, als auch gleichzeitig im Vergleich zu den klassischen Kontinuumsmodellen die relevante Mikrostruktur zu berücksichtigen.

# 2 Plastizität im Reibkontakt

Der plastischen Deformation wird eine wichtige Rolle für die Eigenschaften des Reibkontaktes zugeordnet, insbesondere hinsichtlich Reibung und Verschleiß [22, 30–32]. Beispielsweise existieren Modelle zur Kopplung von Reibungskoeffizient und plastischer Deformation, wie z.B. in Referenz [29, 33]. Die Anisotropie des Reibungskoeffizienten je nach Fahrtrichtung der Asperität auf der Oberfläche [34–36] wird auf die Deformation des Kristalls zurückgeführt [37]. Ebenfalls wird die Größenabhängigkeit des Reibungskoeffizienten je nach bi- und unidirektionaler Bewegung des Indenters in Verbindung mit der plastischen Deformation und dem Bauschinger-Effekt gebracht [38].

Reib- und Indentierungskontakte werden unter verschiedenen Aspekten untersucht, beispielsweise Ausbildung spezieller Versetzungsstrukturen wie prismatischer Versetzungen [39] oder der „Trace-line“ [27], Versetzungsnukleation [40, 41], den Indentierungs-Größeneffekt [42], Gitterrotationen [43, 44], Reibungskoeffizient und Härte je nach Kristallographie und Kratzrichtung [35], oder der Auswirkung einer Vielzahl von Asperitäten [45, 46].

In dieser Arbeit werden zwei Versetzungsmechanismen im Reibkontakt analysiert: Die Bildung von prismatischen Versetzungsstrukturen unter einem Indenter (Kap. 2.1) und der Versetzungstransport unter einer fahrenden Asperität (Kap. 2.2) im kubisch flächenzentrierten Metall.

## 2.1 Prismatische Versetzungsstrukturen

Prismatische Versetzungen sind dadurch gekennzeichnet, dass der Burgersvektor nicht in der Ebene enthalten ist, welche durch die (geschlossene) Versetzungslinie definiert ist [47]. Abbildung 2.1 zeigt schematisch eine perfekt prismatische Versetzung im Vergleich zu einer „klassischen“ Versetzung mit einem Burgersvektor in der Gleitebene. Eine prismatische Versetzung gleitet parallel zur Richtung des Burgersvektors ohne dabei ihre Größe zu verändern [47]. Die Bildung von prismatischen Versetzungsstrukturen in kubisch flächenzentrierten Metallen wird unter verschiedenen tribologischen Belastungen beobachtet:

(i) Indentierung [48–50],

(ii) Rollen über eine elektropolierte Oberfläche [51],

(iii) Rollen über einer Oberfläche mit feinen, abrasiven Partikeln [49] und

(iv) Kratzen [52, 53].

Die Nukleation von prismatischen Versetzungen unter Indentierung wird auch in den Zusammenhang mit „Pop-ins“ gebracht [54], die sich als Verschiebungssprünge in kraftgesteuerten [55]

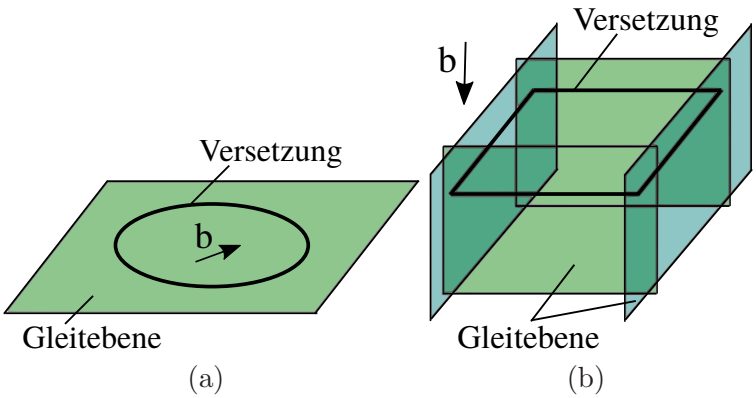



**Abb. 2.1:** Schematische Darstellung (a) Versetzung (b) Prismatische Versetzung

bzw. als Last-Verschiebungsabfälle in verschiebungsgesteuerten [56–58] Versuchsdurchführungen äußern. Plastizität bereits vor dem Pop-in wurde jedoch experimentell nachgewiesen [59] und simulativ beobachtet [60]. Dies deutet darauf hin, dass der erste Pop-in einem heterogenen Prozess zugeordnet werden kann, wie der Aktivierung einer Versetzungsquelle [61]. In Molekulardynamik-Simulationen werden den Last-Verschiebungsabfällen das Ablösen von prismatischen Versetzungen von einem Versetzungsnetzwerk zugeordnet [56].

In kubisch flächenzentrierten (kfz) Metallen bilden sich prismatischen Versetzungsstrukturen in unterschiedlichen Formen aus:

(i) Perfekt prismatische Versetzungen [48, 57, 62–64][1],

(ii) Helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen [62],

(iii) V-förmige Versetzungen [67, 68] und

(iv) U-förmige prismatische Versetzungen — entweder innerhalb von sogenannten Versetzungsrosetten [39, 49, 50, 69] oder vereinzelt auftretend [53].

Perfekt prismatische Versetzungen, helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen und geradlinige Versetzungssegmente werden unter Indentierung seitlich aus einer Zone mit hoher, immobiler Versetzungsdichte emittiert [62]. Die Bildung dieser Versetzungsstrukturen erfolgt nicht permanent von Beginn der Indentierung an, sondern erst in einem fortgeschrittenen Stadium bei höheren Spannungen [62]. Die kristallographische Orientierung spielt für die Bildung der prismatischen Versetzungsstrukturen im Vergleich zu Indentergeometrie und Oberflächenrauigkeit eine übergeordnete Rolle, da die Auswahl der Emissionsrichtungen nach dem höchsten Schmid-Faktor erfolgt [62]. Die prismatischen Versetzungen gleiten in kfz Kristallen entlang von $\langle 110 \rangle$-Gleitrichtungen, wobei der Abstand der Versetzungen vergleichbar zu ihren Durchmessern ist [62]. Diese prismatischen Versetzungen weisen eine rhombusartige Form auf [62]. Die Ecken des Rhombus können leicht gebogen vorliegen, insbesondere an der Ecke mit dem 70.53° Winkel [62], welcher durch den Schnittwinkel zwischen zwei Gleitebenenfamilien festgelegt ist.

[1] Perfekt prismatische Versetzungen werden ebenfalls in kubisch raumzentrierten [56, 65] und hexagonalen dichtest gepackten Kristall [66] und im hexagonalen Wurtzit-Kristall [58] beobachtet.

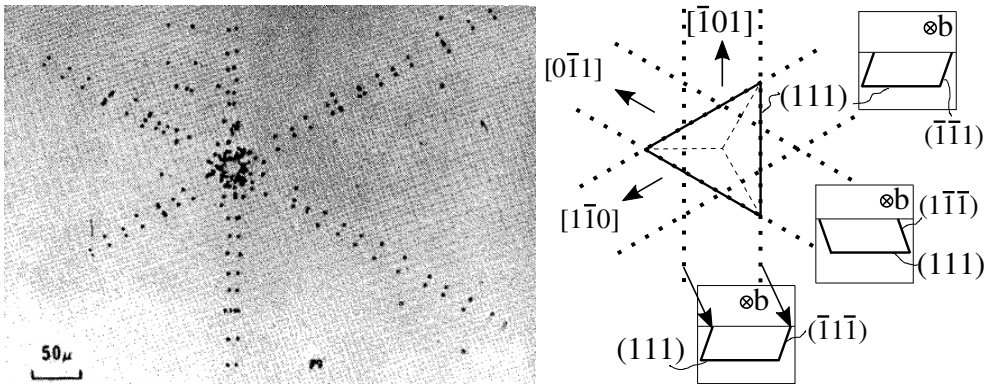
V-förmige prismatische Versetzungen bilden sich im anfänglichen Stadium der plastischen Verformung unter Indentierung auf {001}-Au-Oberflächen [68] und durch Kratzen auf {001}-Cu-Oberflächen [67] aus. Diese v-förmigen prismatischen Versetzungen gleiten auf {111}-Gleitebenen in ⟨110⟩-Gleitrichtungen [67, 68]. Sie können sich in vier Shockley-Partialversetzungen mit einer „stair rod"-Versetzung aufspalten [67, 68]. Die Nukleation einzelner v-förmiger prismatischer Versetzungen bewirkt atomares „Stick-Slip" Verhalten [67]. Werden mehrere Versetzungen bei größeren Indentierungstiefen auf einmal nukleiert, so ist kein atomares Stick-Slip Verhalten mehr erkennbar [67].

Versetzungsrosetten bilden sich in kfz Kristallen unter Indentierung auf {111}-Oberflächen als Struktur parallel zu der Oberfläche aus, z.B. in Ag [49, 70], Au [50] und Cu [51, 69]. Voraussetzung für die Bildung von Versetzungsrosetten ist eine anfänglich relative geringe Versetzungsdichte in der Größenordnung von $10^7 m^{-2}$ in Cu [39, 69] bzw. $10^8 m^{-2}$ in Ag [49, 71]. Außerdem werden Versetzungsrosetten nur innerhalb eines bestimmten Belastungsbereiches beobachtet [70, 71]. Unter höheren Lasten bildet sich ein hemisphärischer Deformationsbereich aus — die Versetzungen liegen lokalisiert um den Indentereindruck vor, anstatt sich weiter nach außen auszubreiten — und Versetzungsrosetten sind nicht mehr abgegrenzt erkennbar [71]. Dies kann als Änderung im Deformationsmechanismus interpretiert werden [71]. Abbildung 2.2 zeigt eine Versetzungsrosette auf einer angeätzten (111)-Cu-Oberfläche nach Indentierung und die zugehörige schematische Darstellung. In kfz Kristallen bestehen Versetzungsrosetten aus sechs Armen, die sich entlang von ⟨110⟩-Gleitrichtungen erstrecken [39][2]. Jeder Arm der Versetzungsrosette setzt sich aus einer Reihe von prismatischen Versetzungen zusammen, welche von der Zone mit der hohen Versetzungsdichte ausgehen [49, 69] (Abb. 2.2(b)). Diese prismatischen Versetzungen verschieben Material in ⟨110⟩-Gleitrichtungen. In Richtung des jeweiligen Burgersvektor der prismatischen Versetzungen gesehen, weisen diese eine „u-Form" auf (Abb. 2.2(b)). Die „u-förmigen" Versetzungslinien enden an der Oberfläche, wo sie mit je zwei Ätzgrübchen sichtbar gemacht werden können. Die beiden Versetzungsarme der u-förmigen prismatischen Versetzung, welche an der Oberfläche enden, sind zwei Stufenversetzungen mit entgegengesetztem Vorzeichen [49] (Abb. 2.2(b)).

Die sechs Rosettenarme sind im Vergleich zur Dimension der Zone mit der hohen Versetzungsdichte relativ lang — sowohl im Bezug auf die Größe der Struktur auf der Oberfläche (Abb. 2.2(a)), als auch im Bezug auf die Tiefe der Struktur [71][3]. Die Armlänge $l$ der Versetzungsrosette wird mit größerer Indenterkraft $F$ mit einem wurzelförmigen Zusammenhang $l \sim \sqrt{F}$ [70] und unter Relaxation [75] länger. Bislang ist der Bildungsmechanismus von Versetzungsrosetten unverstanden. Für eine entkoppelte Bildung der einzelnen Rosettenarme sprechen folgende Eigenschaften der Versetzungsrosette:

[2] Auch in anderen Kristallstrukturen entstehen unter Indentierung Versetzungsrosetten. Beispielsweise entstehen in GaN mit (hexagonaler) Wurtzit-Gitterstruktur ebenfalls sechsarmige Versetzungsrosetten, die aus prismatischen Versetzungen bestehen [58]. In $SrTiO_3$ [72] mit (orthorhombischer) Perowskit-Struktur und MgO [73] mit (kubischer) Natriumchlorid-Struktur entstehen achtarmige Versetzungsrosetten, die aus prismatischen Versetzungen auf 90° bzw. 45° geneigten Gleitebenen mit Stufen- bzw. Schraubencharakter bestehen.

[3] Es gibt experimentelle Hinweise darauf, dass im Anfangsstadium der Indentierung Versetzungen in die Tiefe des Kristalls emittiert werden [75]: Zum einen wird bei Entlastung vor Rosettenbildung ein bleibender Eindruck auf der Oberfläche beobachtet [70]. Auch können Diskrepanzen zwischen der beobachteten Anzahl der prismatischen Versetzungen auf der Oberfläche und dem totalen verschobenen Materialvolumen auftreten [71]. An Spannungskonzentrationen können sogar im Inneren des Kristall 12-armige Versetzungsrosetten entstehen [76].




(a) (b)

**Abb. 2.2:** (a) Versetzungsrosette. Gedruckt aus Ref. [39] mit Erlaubnis von AIP Publishing. (b) Schematische Darstellung von (a). Aus Ref. [74]; angelehnt an Ref. [49]

(i) Die einzelnen Rosettenarme können unterschiedlich lang sein [71].

(ii) Einzelne Arme von Versetzungsrosetten können vollständig fehlen [76].

(iii) Die Breite der Versetzungen innerhalb eines Rosettenarmes ist ähnlich. Zwischen verschiedenen Rosettenarmen kann die Breite aber durchaus abweichen (Abb. 2.2(a)).

(iv) Einzelne Rosettenarme können an Subkorngrenzen [49, 51] oder angrenzenden Versetzungsrosetten bzw. Spannungskonzentrationen [49] enden.

Für die Entstehung von perfekt prismatischen Versetzungen werden verschiedene Mechanismen vorgeschlagen:

(i) Zwillingsbildung und Umwandlung in eine Versetzung, die im kubisch raumzentrierten Kristall ausbaucht, quergleitet und in einem „Lasso-Mechanismus“ eine perfekt prismatische Versetzung hinterlässt [65]. Ein ähnlicher Mechanismus wird ebenfalls sowohl im kubisch raumzentrierten Kristall [56], als auch hexagonalen Kristall [58, 66] beobachtet.

(ii) Bildung von zwei Versetzungen im hexagonalen Kristall, welche quergleiten und eine „Nest-Versetzung“ bilden [58]. Durch zweifache Annihilation bei den Schraubensegmenten entsteht dann eine prismatische Versetzung mit Stufencharakter [58].

(iii) Homogen [48, 63, 77, 78] oder an Oberflächenstufen [57] nukleierte Versetzungen reagieren miteinander zu prismatischen Versetzungen. Auf Molekulardynamik-Ebene ist eine Möglichkeit der Bildung von prismatischen Versetzungen die Entstehung von homogen nukleierten Defekten, die sich in einen Stapelfehlertetraeder umwandeln, aus welchem einzelne, prismatische Partialversetzungen emittiert werden [78]. Allgemein können durch homogene Nukleierungsprozesse und sukzessives Versetzungsgleiten Oberflächenvorsprünge an der Oberfläche entstehen, welche Spannungskonzentrationen hervorrufen und so anschließende heterogene Versetzungsnukleation bewirken können [63]. Bei der Nukleation an Oberflächenstufen können sich Versetzungshalbringe ausbilden [57]. Diese expandieren und reagieren miteinander zu einer „flügelartigen“, dreifach-symmetrischen Defektstruktur, welche sesshaft und stabil ist [57]. Unter höherer Last wird die Defektstruktur unter Bildung von drei prismatischen Versetzungen aufgetrennt [57]. Mit fortschreitender

Indentierungstiefe wird die Defektstruktur größer und so auch die Größe der emittierten prismatischen Versetzungen [57]. Im Verlauf der Indentierung entsteht ein komplexes Versetzungsnetzwerk, aus welchem prismatische Versetzungen emittiert werden [48, 56, 77].

Auf derartigen Beobachtungen basierend werden in Diskreten Versetzungsdynamik-Codes Nukleationskriterien für perfekt prismatische Versetzungen verwendet [48, 79]. Dabei werden bei jedem Nukleationsprozess im kfz Metall perfekt prismatische Versetzungen mit $\langle 110 \rangle$-Burgersvektoren erzeugt, deren Radius proportional zum Kontaktradius ist [79]. In einem anderen Modell werden koaxiale, runde, prismatische Versetzungen mit einem Burgersvektor senkrecht zur Oberfläche verwendet, um die Materialverschiebung unter der Indenterspitze zu akkommodieren [55, 80]. Letztere Modellvorstellung wird in der Gradientenplastizität verwendet, um bei Indentierung die Härte-Tiefe Abhängigkeit im Mikrometerregime zu modellieren und den Indentierungs-Größeneffekts abzubilden [80].

Verschiedene Bildungsmechanismen von prismatischen Versetzungsstrukturen wurden in Molekulardynamik-Simulationen beobachtet. Dennoch ist die Ursache für die Bildung solch spezieller prismatischer Versetzungsstrukturen und deren unterschiedliche Ausprägungen ungeklärt. In dieser Arbeit wird die Entstehung von prismatischen Versetzungsstrukturen im kfz Metall aus einer Versetzungsquelle — unter Ausschluss homogener Versetzungsnukleation — untersucht.

## 2.2 Versetzungstransport

Versetzungen sind linienförmige Punktdefekte im Kristall, deren Gleitbewegung das Abscheren des Kristalls und damit plastische Verformung verursacht. Versetzungen gleiten auf, für das Kristallgitter spezifischen, Gleitebenen und sind durch spezifische Burgersvektoren charakterisiert. Im kubisch flächenzentrierten Kristall sind die Gleitebenen $\{111\}$-Ebenen und die Burgersvektoren vom Typ $\langle 110 \rangle$. Eine Versetzung kann einem Gleitsystem zugeordnet werden, welches durch eine Gleitebene und einen Burgersvektor charakterisiert ist.

Aufgrund äußerer Belastung eines Bauteils und der Wechselwirkung von Versetzungen untereinander — oder mit anderen Gitterdefekten — wirkt auf eine Versetzung eine Kraft. Die Peach-Köhler-Kraft $\vec{f}_{PK}$, welche senkrecht auf die Versetzungslinie wirkt, ist die treibende Kraft für Versetzungsbewegung. Diese lässt sich mit dem lokal wirkenden Spannungsfeld $\overline{\sigma}$, dem Burgersvektor $\vec{b}$ und dem Tangentenvektor $\vec{dl}$ der Versetzungslinie berechnen zu [81]

$$\vec{f}_{PK} = \overline{\sigma}\vec{b} \times \vec{dl} \tag{2.1}$$

Diese Kraft kann in zwei Komponenten, in der Gleitebene und senkrecht dazu, zerlegt werden, welche das Gleiten bzw. Klettern der Versetzung verursachen. Die „aufgelöste“ Peach-Köhler-Kraft $F_{PK}$ in der Gleitebene lässt sich mit dem totalen Spannungsfeld $\overline{\sigma}$, dem Burgersvektor $\vec{b}$ und dem Normalenvektor der Gleitebene $\vec{n}$ berechnen [81]

$$F_{PK} = (\overline{\sigma}\vec{n}) \cdot \vec{b} \tag{2.2}$$

Durch Versetzungsgleiten wird ein Kristall abgeschert. Die plastische Dehnung $\varepsilon_{pl}$ in einem Volumen $V$ lässt sich mit der von der Versetzung überstrichenen Fläche $A$, dem Burgersvektor $\vec{b}$ und dem Normalenvektor der Gleitebene $\vec{n}$ berechnen [82]

$$\varepsilon_{pl,ij} = \frac{A}{2V}\left(b_i n_j + b_j n_i\right) \tag{2.3}$$

Je größer die überstrichene Fläche ist, desto größer ist die plastische Dehnung. Die Länge der zurückgelegten Strecke der Versetzung kann in einem reinen Einzelkristall durch den Rand der Probe, Wechselwirkungen mit anderen Versetzungen oder durch das äußere Spannungsfeld —Abfall der Spannungsintensität oder Aufstau an der neutralen Faser [83, 84] — begrenzt werden[4]. Für Zug-, Druck-, Biegung- und Torsionsbelastungen verändert sich bei konstanter Kraft bzw. konstantem Moment (unter Ausschluss von Kriechen) in etwa das Volumen nicht, in welchem das Versetzungsgleiten stattfindet. Fährt dahingegen ein Indenter mit konstanter Kraft über eine Probe, so bewegt sich das Spannungsfeld mit dem Indenter mit und das lokale Spannungsfeld verändert sich. Versetzungen, deren Gleiten im Spannungsfeld eines „statischen“ Indenters mit konstanter Kraft durch den Abfall der Spannungsintensität seitlich des Indenters begrenzt ist, können sich mit dem fahrenden Indenter mitbewegen. Gleiten Versetzungen innerhalb dieses Spannungsfeld, so können Versetzungen über längere Strecken mit dem Indenter gleiten — sie werden „transportiert“. Werden Versetzungen über große Strecken transportiert, so überstreichen sie damit große Flächen im Kristall und erzeugen dabei plastische

[4] Allgemeiner kann das Gleiten der Versetzung beispielsweise durch Wechselwirkung mit Punktdefekten, Korngrenzen, Ausscheidungen oder Dispersionen gehemmt werden [47, 81, 85].

Verformung (Gl. 2.3). Es ist daher wichtig, den Versetzungstransport beurteilen zu können. Die Beurteilung der plastischen Deformation im Reibkontakt aufgrund von Versetzungstransport ist besonders im Frühstadium der Deformation im Reibkontakt wichtig, in welchem, vorausgehend zu einer möglichen Rekristallisation [86–88], noch grobe Körner vorliegen, die weitreichenden Transport erlauben.

Im Zugversuch lassen sich mit dem Schmid-Faktor die Gleitsysteme mit der größten aufgelösten Schubspannung identifizieren, welche zuerst aktiviert werden. Für einen Zugversuch lässt sich Gleichung (2.2) vereinfachen zu

$$\tau_a = \cos\phi \cos\lambda \frac{F}{A} \tag{2.4}$$

wobei $F$ die Zugkraft, $A$ die Querschnittfläche der Probe, $\phi$ der Winkel zwischen der Zugachse und der Normalen der Gleitebene, und $\lambda$ der Winkel zwischen der Zugachse und dem Burgersvektor ist [47, 54]. Die Größe $\cos\phi\cos\lambda$ wird als Schmid-Faktor bezeichnet und nimmt Werte im Bereich $0 \leq S \leq 0.5$ an. Gleitsysteme mit einem großen Schmid-Faktor werden zuerst aktiviert. Unter einem sphärischen Indenter liegt jedoch ein inhomogenen Spannungsfeld vor. Die Spannungskomponenten im Hertzschen Kontakt sind im Anhang in Abbildungen A1-A7 dargestellt. Die Schmid-Faktoren bzw. die Vereinfachung von Gleichung (2.2) zu Gleichung (2.4) kann für das inhomogene Spannungsfeld nicht verwendet werden, um jene Gleitsysteme zu identifizieren, auf welchen Versetzungen gleiten bzw. transportiert werden. Außerdem wird erwartet, dass die Fahrtrichtung des Indenters eine wichtige Rolle für die plastische Deformation spielt. Folglich sollte die Fahrtrichtung des Indenters in das Kriterium eingehen. Es wird ein Kriterium benötigt, mit welchem die Gleitsysteme in einem Reibkontakt identifiziert werden können, auf welchen Versetzungstransport erwartet wird.

Beim experimentellen Kratzen auf (111)-$\alpha$Cu-Al-Oberflächen konnten aktive Gleitsysteme über charakteristische Oberflächenlinien identifiziert werden, je nach $[\bar{2}11]$, $[2\bar{1}\bar{1}]$ oder $[\bar{1}10]$-Kratzrichtung [89, 90]. Jedoch sind keine systematischen Untersuchungen zum reinen Versetzungstransport unter Ausschluss von Versetzungsnukleation in der Literatur zu finden. Klassische Kontinuumsplastizitäts- oder Kristallplastizitätsmodelle können keinen reinen Versetzungstransport abbilden, da überall dort plastische Dehnung entsteht, wo kritische Spannungen erreicht werden. Der Versetzungstransport kann jedoch mit Diskreten Versetzungsdynamik-(DDD) oder der Molekulardynamik-Simulationen untersucht werden. Bisherige, zweidimensionale DDD-Simulationen mit Stufenversetzungen zeigen, dass plastische Verformung die Eigenschaften eines Reibkontaktes beeinflusst [91, 92]. Beispielsweise kann Versetzungsgleiten unter einer rechteckigen Asperität das Einsetzen der Asperitätsbewegung verhindern oder verzögern [92]. Andere DDD-Simulationen zeigen, dass unter einer rechteckigen Asperität die Reibspannung von der Kontaktfläche abhängen kann [91]. Es fehlen jedoch systematische DDD-Simulationen zum Versetzungstransport. Atomistische Simulationen zeigen, dass Kristallorientierung und Fahrtrichtungen der Asperität die plastische Deformation beeinflusst [35, 93–95]. Beispielsweise werden bei einem Fahren auf einer (111)-Oberfläche vorwiegend Versetzungen mit einem Burgersvektor parallel zur Gleitrichtung beobachtet [52]. Die Abgrenzung zwischen Versetzungstransport und Versetzungsnukleation ist jedoch in den Molekulardynamik-Simulationen aufgrund hohen Spannungen im Kristall durch hohe aufgebrachte Belastungen schwierig.

In der vorliegenden Arbeit wird mit Diskreten Versetzungsdynamik Simulationen der Fragestellung nachgegangen, wie und unter welchen Bedingungen Versetzungen im Reibkontakt transportiert werden.

# 3 Simulationsmethodik

## 3.1 Diskrete Versetzungsdynamik

**Überblick** Für die Simulationen dieser Arbeit wird die Diskrete Versetzungsdynamik Methode verwendet. Die Diskrete Versetzungsdynamik (DDD) ist eine mesoskopische Methode. In dieser Methode werden Versetzungen — Träger der plastischen Verformung — als diskrete Linien in einem elastischen Kontinuum modelliert und ein Konstitutivgesetz für die Bewegung von Versetzungen eingeführt. DDD-Simulationen erlauben es, anfängliche Plastizität zu untersuchen, Plastizität in kleinen Bauteilen zu erforschen und Versetzungsmechanismen zu analysieren.

Der erste dreidimensionale DDD-Code wurde in den 90-er Jahren entwickelt [54]. Inzwischen existieren verschiedene Codes mit unterschiedlichen Implementierungen und Schwerpunkten der Ausrichtung, wie zum Beispiel MDDP (Multiscale Dislocation Dynamics Plasticity), microMegas, ParaDiS (Parallel Dislocation Simulator) PDD (Parametric Dislocation Dynamics), Tridis und der Versetzungscode von Weygand [54].

**Verwendeter Code** In dieser Arbeit wird der dreidimensionale DDD-Code von Weygand nach Referenz [96] und [97] verwendet. Die Versetzungen werden als diskrete Linien mit Knoten und geraden Segmenten in einem elastischen Kontinuum modelliert.

Analytische Spannungs- und Verschiebungsfelder von Versetzungen sind nur im unendlichen Raum bekannt. In Proben mit endlichen Dimensionen werden daher Korrekturfelder über die Randbedingungen vorgegeben. Dies wird durch den Superpositionsansatz nach Van der Giessen [98] gelöst. Das linear elastische, isotrope Problem mit den Randbedingungen wird mit der Finiten Element Methode (FEM) gelöst. Die Kräfte, die auf eine Versetzung wirken, berechnen sich dann durch die Superposition der aufsummierten Spannung aller Versetzungen im Festkörper und der Spannungen aufgrund der Randbedingungen (Ansatz nach Ref. [98]). Die totalen Spannungen, Verschiebungen und Dehnungen ergeben sich zu

$$\sigma_{ij} = \tilde{\sigma}_{ij} + \hat{\sigma}_{ij}, \qquad u_{ij} = \tilde{u}_{ij} + \hat{u}_{ij}, \qquad \varepsilon_{ij} = \tilde{\varepsilon}_{ij} + \hat{\varepsilon}_{ij} \tag{3.1}$$

wobei mit $(\tilde{\cdot})$ die Versetzungsfelder in einem unendlichen Medium und mit $(\hat{\cdot})$ die elastischen Felder der FEM bezeichnet sind.

Die treibende Kraft für die Versetzungsbewegung, die Peach-Köhler-Kraft $\vec{f}_{PK}$, ist durch Gleichung (2.1) gegeben. Bei den folgenden Simulationen unter Raumtemperatur ist Klettern vernachlässigbar. Die „aufgelöste“ Peach-Köhler-Kraft $F_{PK}$ in der Gleitebene, welche das Gleiten von Versetzungen verursacht, ist durch Gleichung (2.2) gegeben. Als Konstitutivgesetz für die

Bewegung der Versetzung im kubisch flächenzentrierten Kristall wird ein viskoses Gesetz mit einem zusätzlichen Trägheitsterm der Versetzung nach Referenz [99] in der Form

$$m\dot{v} + Bv = F_{PK} \tag{3.2}$$

verwendet, mit der effektiven Versetzungsmasse $m$ pro Einheitslänge, dem Reibungskoeffizient $B$ aufgrund von Wechselwirkung der Versetzungen mit Phononen und Elektronen, der Geschwindigkeit $v$ und der Gleitkomponente der Peach-Köhler-Kraft in der Gleitebene $F_{PK}$.

Für die Transportsimulationen wird zusätzlich eine kritische Reibspannung $\tau_r$ berücksichtigt, die Mischkristallverfestigung repräsentieren soll. Die Reibspannung reduziert die aufgelöste Schubspannung um den Wert $\tau_r$; bei Spannungen unterhalb $\tau_r$ findet kein Versetzungsgleiten statt.

Die Versetzungen können beim Gleiten durch das Medium mit anderen Versetzungen wechselwirken. Versetzungsreaktionen können in Form von Lomer-Reaktion, gleitfähiger Reaktion, Hirth-Reaktion oder kollinearer Reaktion auftreten. Eine Versetzungsreaktion wird eingegangen, wenn die Linienenergie der resultierenden Versetzung geringer ist, als die der einzelnen Versetzungen. Das Quergleiten von Schraubensegmenten wird mit einem statistischen Modell nach Referenz [100] beschrieben. Die Quergleitwahrscheinlichkeit $P$ pro Zeitschritt ist gegeben durch

$$P = A\frac{l}{l_0}\delta t \cdot \exp\left(-\frac{V(|\tau| - \tau_{III})}{kT}\right) \tag{3.3}$$

mit einem numerischen Koeffizienten $A$, der Länge des Schraubensegmentes $l$, einer Normierungslänge $l_0$, dem Zeitschritt $\delta t$, dem Aktivierungsvolumen für Quergleiten $V$, der aufgelösten Schubspannung in der Quergleitebene $\tau$, der kritischen aufgelösten Schubspannung $\tau_{III}$, welche den Bereich III der Verfestigung kontrolliert, der Boltzmann Konstante $k$ und der absoluten Temperatur $T$ [100]. Das Quergleiten erfolgt in den Simulationen dieser Arbeit nur wenn die aufgelöste Schubspannung auf der Quergleitebene die aufgelöste Schubspannung auf der Gleitebene um mindestens 10% übersteigt.

Für weitere Details der Implementierung des DDD-Codes sei auf Referenz [96] und [97] verwiesen.

**Kontaktmodellierung** Für die Simulation der Indentierung und der fahrenden Asperität wird der bestehende DDD-Code angepasst, indem der Kontakt als Hertzscher Kontakt[1] modelliert wird. Die Annahmen des Hertzschen Kontakts lauten: (i) Eine kleine Kontaktfläche relativ zu den Körperabmessungen, (ii) eine kleine Kontaktfläche relativ zu den Krümmungen der Körper, (iii) reibungsfreie Oberflächen, und (iv) die Körper im Kontakt können als elastischer Halbräume gesehen werden [101]. Die Annahmen (i)-(ii) treffen auf die Simulationen in dieser Arbeit zu. Für kleine Dehnungen lässt sich der Fall zweier elastischer Kugeln im Kontakt (Annahme (iv)) auf einen Kontakt einer starren Kugel mit einem elastischen Halbraum abbilden. Für reibungsbehaftete Kontakte kann die Lösung für den reibungsfreien Hertzschen Kontakt mit der Lösung für den Tangentialkontakt superponiert werden [101] (siehe Ref. [102]).

[1] Die Spannungskomponenten im Herztschen Kontakt sind im Anhang A in ausgewählten Schnittebenen dargestellt.

In der vorliegenden Arbeit drückt ein starrer Indenter mit sphärischer Spitze auf eine elastische Probe. Im DDD-Code werden für die „Indentierungssimulationen“ und die „Simulationen mit der fahrenden Asperität“ zwei verschiedene Implementierungen des Hertzschen Kontaktes verwendet.

In den Indentierungssimulationen wird der Oberflächendruck $p(r)$

$$p(r) = \begin{cases} -\frac{3}{2}\frac{F}{\pi r_k^2}\sqrt{1-\frac{r^2}{r_k^2}} & ,|r| \leq r_k \\ 0 & ,|r| > r_k \end{cases} \tag{3.4}$$

über Knotenkräfte innerhalb des Kontaktradius

$$r_k = \sqrt[3]{\frac{3}{8}\frac{FR}{G}(1-\nu)} \tag{3.5}$$

aufgebracht. Dabei ist $r$ der Abstand zur Indenterspitze auf der Oberfläche, $F$ die Indenterkraft, $R$ der Indenterradius, $G$ der Schubmodul und $\nu$ die Querkontraktionszahl [101]. Der maximale Druck $p_{max}$ beträgt

$$p_{max} = \frac{3}{2}\frac{F}{\pi r_k^2} \tag{3.6}$$

Die Kraftkomponente $F_A$ in Indentierungsrichtung auf jeden Finite Element-Knoten A auf der Oberfläche innerhalb der Kontaktfläche wird durch Gauß-Integration auf dem betroffenen Oberflächenelement mit

$$F_A = \int_S N_A p(r) dS \tag{3.7}$$

berechnet. Dabei wird eine quadratische Formfunktion $N_A$ verwendet, die auf der Oberfläche S auf den Integrationspunkten ausgewertet wird [74]. Die maximale Verschiebung der Indenterspitze $u_{max}$ in Indentierungsrichtung beträgt [101]

$$u_{max} = \sqrt[3]{\frac{9}{16}\frac{F^2}{RE^2}(1-\nu^2)^2} \tag{3.8}$$

Die maximale Schubspannung im Kristall liegt für eine Querkontraktionszahl $\nu = 0.3$ auf der Indentierungsachse $y$ in der Tiefe $y \approx 0.5 r_k$ vor.

Um größere Probenvolumen simulieren zu können, wird in den Simulationen der fahrenden Asperität die analytische Lösung nach Referenz [102] verwendet. Es werden die Spannungen der analytischen Lösung ausgewertet, sodass ein virtueller Indenter mit sphärischer Spitze in die Probe drückt. Das gesamte Spannungsfeld ist dann durch die Spannungen der Randbedingungen, die Spannungen der Versetzungen und die Spannungen aus der analytischen Lösung des Hertzschen Kontaktes gegeben. Die analytische Spannung durch elastische Indentierung wird auf den Segmentmitten der Versetzungen ausgewertet. Die Knotenkräfte werden durch Integration der Peach-Köhler-Kräfte auf den Segmenten berechnet, welche zu dem jeweiligen Knoten gehören. Durch geeignet kleine Diskretisierung der Versetzungslinien können die Beiträge aufgrund Indentierung auf einem Segment als konstant angenommen werden. Das Vorgehen erlaubt eine gröbere Diskretisierung des Finite Element Netzes gegenüber der oben beschriebenen Variante, bei welcher die Indenterlast über Knotenkräfte des Finite Element Netzes aufgebracht wird. Durch die gröbere Diskretisierung kann die Rechendauer für das größere Probenvolumen

reduziert werden. Die Bildkräfte der Versetzungen werden durch das gröbere Finite Element Netz vernachlässigt. Für reibungsbehaftete Kontakte wird der reibungsfreie Hertzsche Kontakt mit der Lösung für den Tangentialkontakt nach Referenz [102] überlagert[2].

## 3.2 Setup

### Indentierung

Abbildung 3.1 zeigt schematisch das Setup für Indentierung. Ein Indenter mit sphärischer Spitze presst mit einer Vorkraft $F_0$ und einer Kraftrate $\dot{F}$ auf die $xz$-Oberfläche der Probe. Die Last wird über Knotenkräfte innerhalb des Kontaktradius auf die Oberfläche aufgebracht. Die Probenabmessung beträgt $3\mu m \times 3\mu m \times 3\mu m$ bzw. $4.8\mu m \times 1.2\mu m \times 2.4\mu m$. Dabei sind die Proben mit $64 \times 64 \times 64$ bzw. mit $128 \times 32 \times 64$ Finiten Elementen diskretisiert. Die Abweichung der rein elastischen Kraft-Verschiebungskurve von der Hertzschen Referenzkurve beträgt bei einer Diskretisierung mit $64 \times 64 \times 64$ Elementen und den gewählten Parametern (siehe unten) bei einer Indenterkraft $F = 150\mu N$ und einem Indenterradius $R = 1\mu m$ weniger als 1%. Die Verschiebungen am Boden der Probe sind Null. Alle anderen Oberflächen der Probe sind frei und somit durchlässig für Versetzungen.

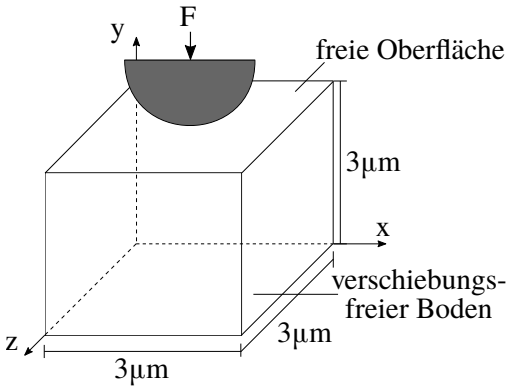



**Abb. 3.1:** Setup Indentierung

Zu Beginn der Simulation befindet sich eine einzelne Frank-Read-Quelle nahe der Indenterspitze in der Probe.

Die gewählten Parameter beschreiben Indentierung in kubisch flächenzentriertes, isotropes Aluminium: Indenterradius $R = 1\mu m$; Kraftrate $\dot{F}_1 = 82N/s$ oder $\dot{F}_2 = 163N/s$; Gitterkonstante $a = 4.04 \cdot 10^{-10}m$; Schubmodul $G = 27GPa$; Querkontraktionszahl $\nu = 0.347$; effektive Versetzungsmasse $m = 1.1 \cdot 10^{-16}kgm^{-1}$; viskoser Reibungskoeffizient für Versetzungsbewegung $B = 10^{-4}Pas$ und anfängliche Länge der Frank-Read-Quelle $L = 270a = 109nm$, welche zu einer Aktivierungsspannung von $\tau = \frac{Gb}{L} = 70MPa$ führt.

Falls nicht weiter spezifiziert, werden für die Indentierungssimulationen die kleineren Probenabmessung und die Kraftrate $\dot{F}_1$ verwendet.

[2] Vielen Dank an Prof. Lars Pastewka für den Hinweis auf einen Tippfehler in Referenz [102] auf S.55 unter dem Abschnitt „(b) Tangential load“ in der $\sigma_x$-Komponente. Der Term $\frac{x^2z^2}{3}$ in der 2. Zeile sollte $\frac{x^2z^2}{S}$ lauten.

## Fahrende Asperität

In Abbildung 3.2 ist schematisch das Setup für eine „fahrende Asperität“ dargestellt. Der Gleitkontakt besteht aus einer sphärische Indenterspitze, welche in $x$-Richtung über die $xz$-Oberfläche eines Einzelkristalls fährt. Dabei übt der Indenter eine konstante Kraft in negative $y$-Richtung aus. Die Abmessung des Einzelkristalls beträgt $10.5\mu m \times 3.4\mu m \times 6.9\mu m$. Der Einzelkristall ist auf allen Seiten in ein elastisches Medium eingebettet, was einem Einzelkristall in einem Polykristall entsprechen soll. Die Verschiebungen am Boden des elastischen Mediums sind Null. Die seitlichen Flächen des elastischen Mediums und die $xz$-Oberfläche des Einzelkristalls sind frei. Die Versetzungen können den Einzelkristall an der Oberfläche verlassen.

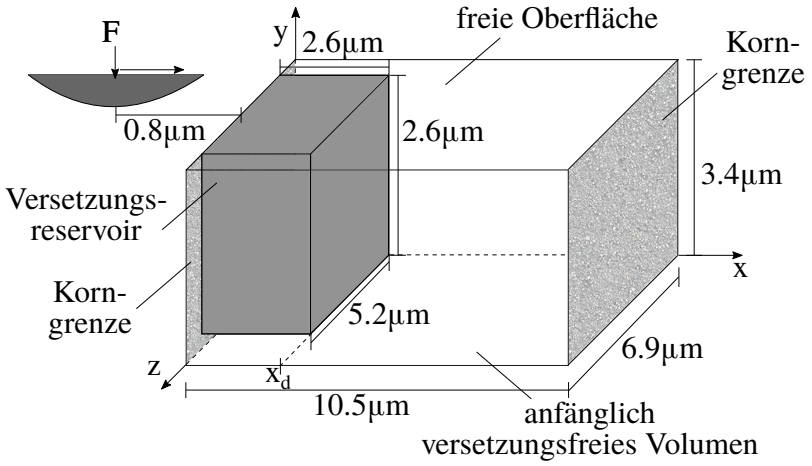



**Abb. 3.2:** Setup Gleitkontakt. Größe des Indenters nicht proportional. [103]

Die anfängliche Versetzungsstruktur besteht aus Frank-Read-Quellen, welche entweder auf das Versetzungsreservoir beschränkt sind (Abb. 3.2) oder im kompletten Einzelkristall verteilt sind. Im ersteren Fall können die Versetzungen, die aus den Versetzungsquellen entstehen, ungehindert in den anfänglich versetzungsfreien Teil des Einzelkristalls gleiten (Abb. 3.2). In jeder Simulation werden die Versetzungsquellen hinsichtlich Länge, Orientierung, Position, Burgersvektor und Gleitebene statistisch verteilt. Die Länge der Versetzungsquellen beträgt bis zu $\pm 10\%$ der mittleren Quelllänge $L_m$. Die Frank-Read-Quellen sind entweder auf einer Gleitebenenfamilie oder auf allen vier Gleitebenenfamilien des kubisch flächenzentrierten Kristalls verteilt.

Die gewählten Parameter beschreiben das Fahren einer sphärischen Asperität auf einem kubisch flächenzentrierten, isotropen Aluminium-Einzelkristall: Materialparameter wie im Indentierungssetup; Indenterkraft $F = 400\mu N$; Indenterkraftrate $\dot{F} = 0$; Indenterradius $R = 120\mu m$; Indentergeschwindigkeit $v_x = 12ms^{-1}$; Reibungskoeffizient des Kontaktes $\mu = 0$ oder $\mu = 0.25$ ; kritische Reibspannung für Mischkristallverfestigung $\tau_r = 10MPa$ nach Referenz [104]; mittlere Länge der Frank-Read-Quellen $L_m = 0.5\mu m$; anfängliche Versetzungsdichte im Versetzungsreservoir $\rho_1 = 2.5 \cdot 10^{12}m^{-2}$ oder $\rho_2 = 5 \cdot 10^{12}m^{-2}$ – entsprechend einer anfänglichen Dichte von $\rho_1 = 1.4 \cdot 10^{12}m^{-2}$ oder $\rho_2 = 2.8 \cdot 10^{12}m^{-2}$ im Teilbereich des Einzelkristalls $x < x_d$ (Abb. 3.2).

Die gewählten Parameter führen im elastischen Medium zu einem maximalen Hertzschen Druck $p_{max} \approx 330MPa$ und einer maximalen Schubspannung $\tau_{max} \approx 100MPa$, einem Kontaktradius $r_k \approx 760nm$ und einer Eindringtiefe des Indenters $u_{max} \approx 4.8nm$.

# 4 Ergebnisse

## 4.1 Prismatische Versetzungsstrukturen unter Indentierung

Die Indentierungssimulationen werden wie in Kapitel 3 beschrieben mit einem dreidimensionalen Diskreten Versetzungsdynamik-Code durchgeführt.

### 4.1.1 Perfekt prismatische Versetzungen

**Indentierung in $[1\bar{1}0]$-Kristallrichtung**

**Reine Indentierung** Perfekt prismatische Versetzungen bilden sich unter Indentierung in $[1\bar{1}0]$-Kristallrichtung wiederholt aus einer Versetzungsquelle mit einem Burgersvektor $\vec{b}$ parallel zur Indentierungsachse. Abbildung 4.1 zeigt die zugehörige Entwicklung der Versetzungsstruktur. Für ein Video der Bildung der perfekt prismatischen Versetzungen sei auf Referenz [74] verwiesen. Jede prismatische Versetzung wird durch eine Kombination aus Gleiten und Quergleiten gebildet: Eine Frank-Read-Quelle mit einer anfänglichen Länge von $109nm$ befindet sich auf einer (111)-Gleitebene in einer Tiefe von $126nm$ in einem Abstand von $320nm$ zur Indentierungsachse. Die Frank-Read-Quelle baucht aus (Abb. 4.1(a)) und die Versetzung gleitet in zwei Bereichen auf $(\overline{1}\overline{1}1)$-Gleitebenen quer (Abb. 4.1(b)). Die quergeglittenen Versetzungssegmente gleiten ein weiteres Mal quer – zurück auf eine (111)-Gleitebene (Abb. 4.1(c)). Diese zweifach quergeglittenen Versetzungssegmente treffen mit entgegengesetzter Linienorientierung aufeinander und löschen sich unter Bildung einer perfekt prismatischen Versetzung aus (Abb. 4.1(d)). In Richtung des Burgersvektors gesehen, haben diese perfekt prismatischen Versetzungen eine Rautenform (Abb. 4.1(f)). Unter Erhöhung der Indenterkraft bilden sich weitere prismatische Versetzungen (Abb. 4.1(e)). Dabei bleibt unabhängig von der Indenterkraft die Größe der prismatischen Versetzungsringe näherungsweise gleich (Abb. 4.1(e)). In Abbildung 4.1(e) erreicht die Indenterspitze eine Tiefe von $u_{max} = 17nm$. Der Mechanismus wird für Kraftraten im Bereich $[0.2\dot{F}..10\dot{F}]$ mit $\dot{F} = 82Ns^{-1}$ beobachtet. Treffen sich die zweifach quergeglittenen Versetzungsarme nicht auf der selben Gleitebene, so können sich diese nicht annihilieren und helixförmige prismatische Versetzungen entstehen. In Abbildung 4.1(e) sind solche helixförmigen prismatischen Versetzungen im oberen Bereich zu sehen. Unter höheren Kraftraten ist die Bildung von helixförmigen prismatischen Versetzungen tendenziell erhöht.

In Abbildung 4.2 ist das Verschiebungsfeld durch reines Versetzungsgleiten ohne das Indenterfeld direkt unter der Indenterspitze abgebildet. Die Abbildung zeigt den unverformten Zustand der Probe. Es ist zu erkennen, dass die prismatischen Versetzungen Material parallel zum Burgersvektor in die Tiefe verschieben.

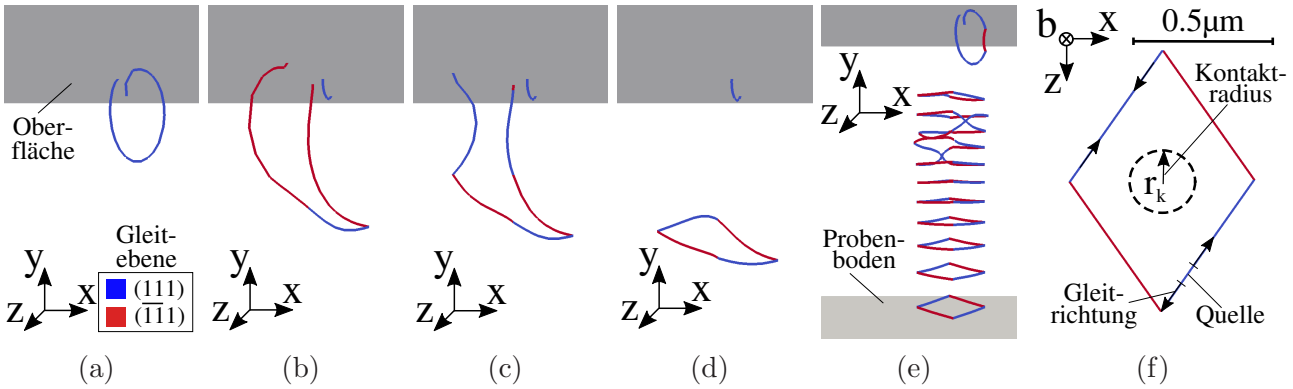



**Abb. 4.1:** Entstehung perfekt prismatischer Versetzungen (a) Aktivierung der Versetzungsquelle ($F = 173\mu N$) (b,c) Quergleitprozesse ($F = 174\mu N$) (d) Perfekt prismatischer Versetzung ($F = 174\mu N$) (e) Mehrere perfekt prismatische Versetzungen ($F = 186\mu N$) (f) Aufsicht von (d), $r_k \approx 0.23\mu m$ [74]

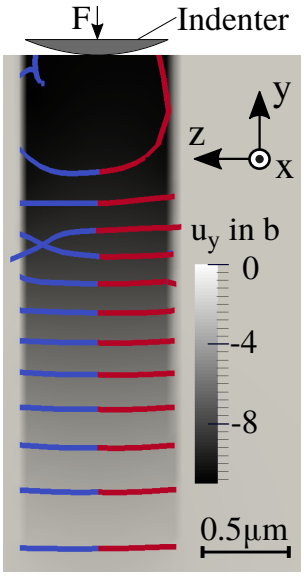



**Abb. 4.2:** Verschiebung $u_y$ in der Einheit Burgersvektor $b$ zu Abb. 4.1(e). Indentergröße nicht proportional.

**Kritische Spannungsüberhöhung für Quergleiten** Bisher erfolgte das stochastische Quergleiten perfekter Versetzungen in den Simulationen nur, wenn die aufgelöste Schubspannung auf der Quergleitebene die aufgelöste Schubspannung auf der Gleitebene um mindestens 10% überstieg (Kap. 3.1). Wird stochastisches Quergleiten erst bei einer Überhöhung von 70% zugelassen, so bilden sich weiterhin perfekt prismatische Versetzungen aus (Abb. 4.3). Alle anderen Parameter der Versetzungsquelle und des Indenters sind identisch zu dem vorigen Setup. Im Vergleich zu vorher sind die prismatischen Versetzungen größer und der Mittelpunkt der Versetzungen liegt nicht mehr auf der Indentierungsachse (Abb. 4.3). Der Bildungsmechanismus bleibt weiterhin ähnlich. Jedoch treffen sich die zweifach quergeglittenen Versetzungsarme nun verstärkt nicht mehr direkt auf der selben (111)-Gleitebene. Perfekt prismatische Versetzungen bilden sich dennoch aus, indem ein Versetzungsarm in der Nähe des anderen weitere Male quergleitet (oberer, horizontaler Pfeil in Abbildung 4.3(a)). Bei gleicher Kraftrate wie

im vorigen Setup emittiert die Versetzungsquelle bereits weitere Versetzungen, bevor die Bildung der perfekt prismatischen Versetzung aus der davor emittierten Versetzung abgeschlossen ist. Nach mehrfacher Versetzungsemission beginnen die Versetzungen an verschiedenen Stellen querzugleiten, wodurch die Größe der prismatischen Versetzungsringe variiert (Abb. 4.3(b)).

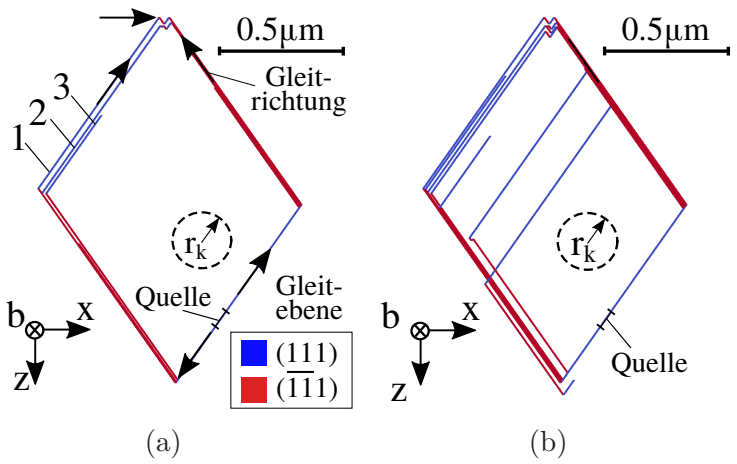



**Abb. 4.3:** Entstehung perfekt prismatischer Versetzungen (a) Versetzungen $1-3$ haben sich nacheinander ausgebildet ($F = 180\mu N$) (b) Quergleiten an verschiedenen Stellen ($F = 189\mu N$, $r_k \approx 120nm$)

**Indentierung überlagert mit lateraler Bewegung** Die Indentierung in $[1\bar{1}0]$-Kristallrichtung wird nun ab einer Indenterkraft $F = 178\mu N$ mit einer lateralen Bewegung des Indenters auf der Oberfläche überlagert. Die Indentergeschwindigkeit beträgt $v_x = 0.5ms^{-1}$. Alle anderen Parameter der Versetzungsquelle und des Indenters sind identisch zu dem vorigen Setup „reine Indentierung“. Es bilden sich weiterhin mehrere perfekt prismatische Versetzungen aus einer Frank-Read-Quelle aus. Wie in Abbildung 4.4 zu erkennen, wird die Größe der Versetzungsringe dabei sukzessiv größer bzw. kleiner während der Indenter in negative bzw. positive $x$-Richtung fährt. Es entstehen wiederholt prismatische Versetzungen, bis der Indenter einen Abstand erreicht, bei welchem die Versetzungsquelle nicht mehr aktiviert wird.

### Indentierung in $[\overline{111}]$-Kristallrichtung

Unter reiner Indentierung auf einer (111)-Oberfläche bilden sich perfekt prismatische Versetzungen aus einer Versetzungsquelle, welche sich im Inneren des Kristalls befindet und einen Burgersvektor parallel zur Oberfläche aufweist. Abbildung 4.5 zeigt die zugehörige Entwicklung der Versetzungsstruktur. Für ein Video der Bildung der perfekt prismatischen Versetzungen sei auf Referenz [74] verwiesen. Bei dieser Simulation werden die größeren Probenabmessung $4.8\mu m \times 1.2\mu m \times 2.4\mu m$ und die größere Kraftrate $\dot{F}_2 = 163Ns^{-1}$ (Kap. 3.2) verwendet. Die Bildung der prismatischen Versetzungen erfolgt im Inneren des Kristalls aus einer Frank-Read-Quelle, welche sich mit einer anfänglichen Länge von $109nm$ sich in $442nm$ Tiefe in einem Abstand von $707nm$ zur Indentierungsachse befindet. Der Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[\bar{1}01]$ ist parallel zur Oberfläche und zur globalen $x$-Achse (Abb. 4.5). Unter Belastung werden mehrere

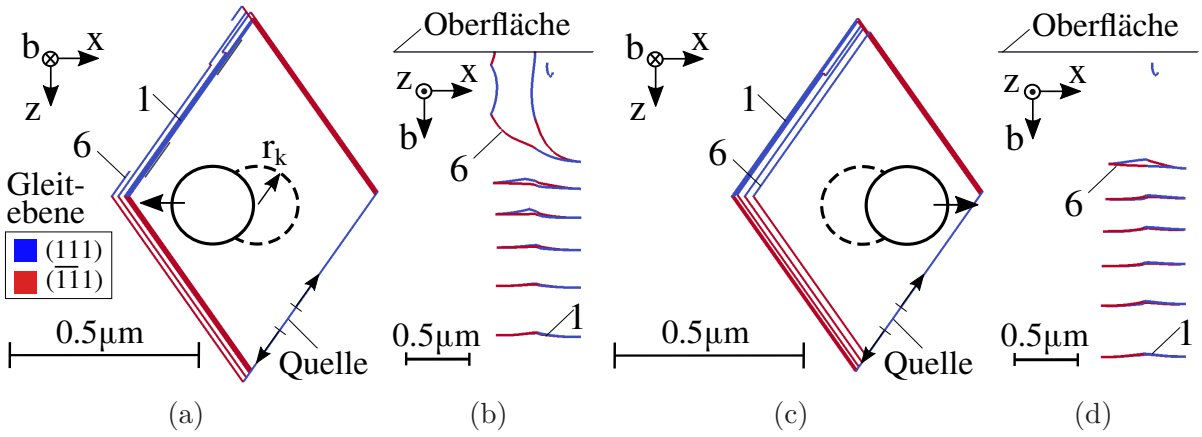



**Abb. 4.4:** Prismatische Versetzungen bei lateraler Indenterbewegung (a) Laterale Bewegung in negative $x$-Richtung ($F = 183\mu N$, $r_k \approx 119nm$) (b) Seitliche Ansicht von (a). (c) Laterale Bewegung in positive $x$-Richtung ($F = 183\mu N$, $r_k \approx 119nm$) (d) Seitliche Ansicht von (c)

Versetzungen gebildet, die innerhalb schmaler Bereiche quergleiten (Abb. 4.5(a)). Die Versetzungen, die von der anfänglichen (111)-Gleitebene auf $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebenen quergleiten, gleiten in Richtung der Oberfläche, stauen sich dann aber in einer Tiefe von ca. $0.15\mu m$ auf (erkennbar in der seitlichen Ansicht in Abb. 4.6). Perfekt prismatische Versetzungen bilden sich aus, indem im inneren Bereich eine Versetzung von einer $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebene zurück auf eine (111)-Gleitebene quergleitet (Pfeil in Abb. 4.5(a)). Dieser zweifach quergeglittene Versetzungsarm wird über Versetzungsreaktionen sukzessiv „nach außen durchgegeben“ (Pfeil in Abb. 4.5(b)). Der „durchgegebene“ Versetzungsarm schließt dann eine Versetzung zu einer perfekt prismatischen Versetzung (Pfeil in Abb. 4.5(c)). Dabei erreicht die Indenterspitze eine Tiefe von $u_{max} = 49nm$ und der Kontaktradius beträgt $r_k = 234nm$. Die prismatischen Versetzungen weisen in seitlicher Ansicht einen „Kippwinkel“ relativ zu einer vertikalen Linie auf (Abb. 4.6). Dieser ändert sich in Entfernung zur Indenterspitze (Vergleich Abb. 4.6(a,b)). Vereinzelt bilden sich u-förmig prismatische Versetzungen (Abb. 4.5(c), Abb. 4.6(a)). Die prismatischen Versetzungen gleiten parallel zu dem Burgersvektor ohne dabei ihre Größe zu verändern.

Abbildung 4.7 zeigt das Verschiebungsfeld durch reines Versetzungsgleiten ohne das Indenterfeld unterhalb der Indenterspitze parallel zu dem Burgersvektor. Die prismatischen Versetzungen transportieren Material von der Indenterspitze weg.

### 4.1.2 Helixförmige prismatische Versetzungen

Helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen entstehen unter Indentierung in [010]-Kristallrichtung aus einer Versetzungsquelle mit einem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[01\bar{1}]$. Abbildung 4.8 zeigt die Entwicklung der Versetzungsstruktur unter Indentierung. Für ein Video der Bildung der helixförmigen prismatischen Versetzungsstruktur sei auf Referenz [74] verwiesen. Diese helixförmigen prismatischen Strukturen mit langen Segmenten bilden sich durch eine Kombination aus Gleiten und Quergleiten aus (Abb. 4.8(a-c)). Eine Frank-Read-Quelle mit einer anfänglichen Länge von $109nm$ befindet sich auf einer (111)-Gleitebene in einer Tiefe von $450nm$ im Abstand von $130nm$ zur Indentierungsachse. Die Quelle emittiert Versetzungen, die zunächst nur

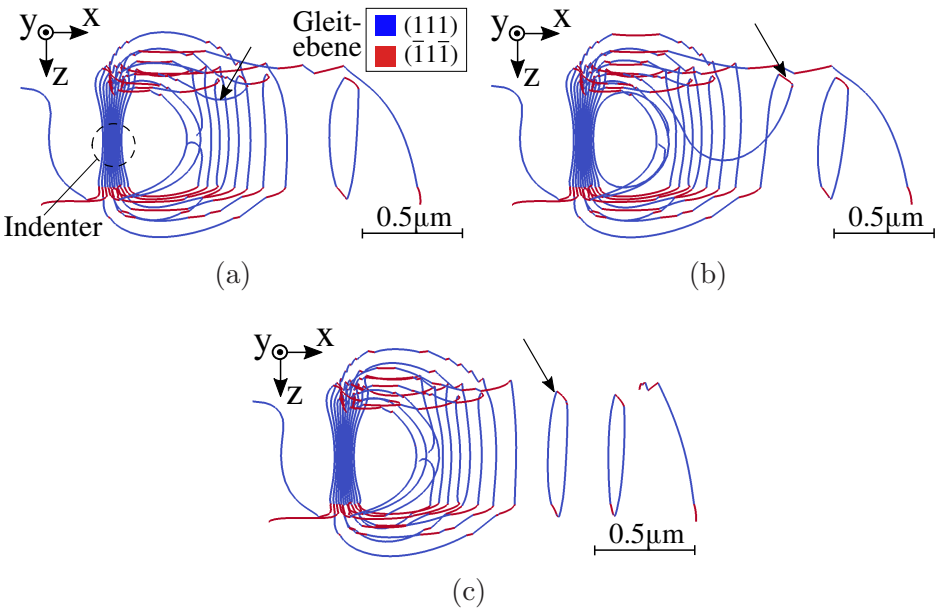



**Abb. 4.5:** Perfekt prismatische Versetzungen. Indentergröße nicht proportional. Die Pfeile zeigen (a) eine Versetzung, welche quergleitet ($F = 1357\mu N$), (b) „nach außen durchgegeben“ wird ($F = 1377\mu N$) und (c) eine prismatische Versetzung bildet ($F = 1394\mu N$) [74]

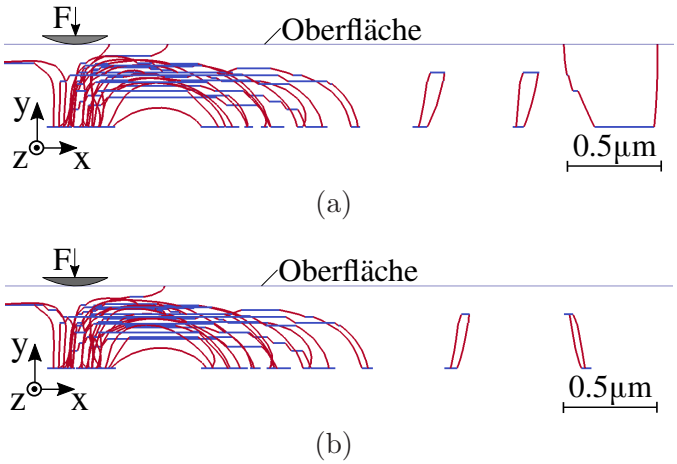
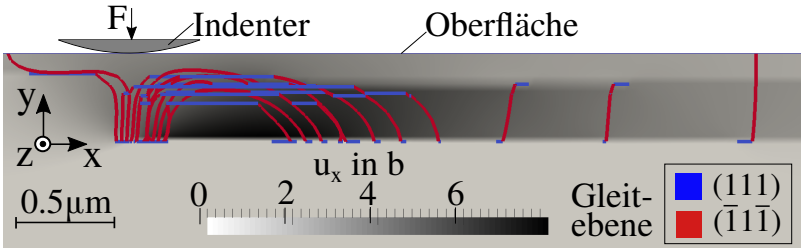


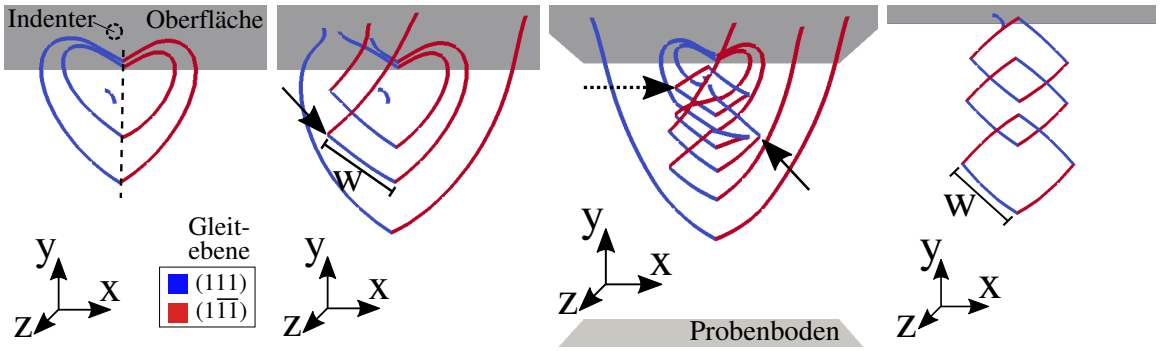

**Abb. 4.6:** (a) Seitliche Ansicht von Abb. 4.5(c) (b) Änderung des Kippwinkels der vorderen prismatischen Versetzung ($F = 1417\mu N$). Indentergröße nicht proportional.

einmal entlang der gestrichelten Linie in Abbildung 4.8(a) auf $(1\overline{1}\overline{1})$-Gleitebenen quergleiten. Der Burgersvektor der Versetzungen $\vec{b} = \frac{a}{2}[01\overline{1}]$ ist parallel zu der gestrichelten Linie in Abbildung 4.8(a). Nach mehrfacher Versetzungsemission gleiten die vorher emittierten Versetzungen weitere Male quer und bilden helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen (Abb. 4.8(b,c)). Die vollen Pfeile in Abbildung 4.8(b,c) zeigen die Stellen, an denen die zusätzlichen Quergleitprozesse stattfinden. Die Indenterspitze erreicht eine Tiefe von $u_{max} = 11nm$ und es liegt eine maximale Schubspannung $\tau_{max} \approx 1.6GPa$ vor. Versetzungen, die nur einfach quergeglitten sind, enden als lange Segmente an der Oberfläche (Abb. 4.8(c)). Vereinzelt entstehen perfekt prismatische Versetzungen (gestrichelter Pfeil in Abb. 4.8(c)).




(a)

**Abb. 4.7:** Verschiebung $u_x$ in Einheit Burgersvektor $b$ zu Abb. 4.6(a)) direkt unterhalb der Indenterspitze. Indentergröße nicht proportional.




(a) (b) (c) (d)

**Abb. 4.8:** Entstehung helixförmiger prismatischer Versetzungsstrukturen. Indentergröße nicht proportional. (a) Quergleiten ($F = 93\mu N$) (b) Weiteres Quergleiten ($F = 100\mu N$, $w = 467nm$) (c) Helixförmige Versetzungen und lange Segmente ($F = 108\mu N$) (d) Perfekt prismatische Versetzungen ($F = 307\mu N$, $w = 328nm$) [74]

Befindet sich eine Versetzungsquelle mit gleicher Länge, Orientierung und Burgersvektor an einer anderen Stelle im Kristall — in $443nm$ Tiefe und in einem Abstand von $378nm$ zur Indentierungsachse — so können sich aus dieser Versetzungsquelle in dieser kristallographischen Orientierung auch perfekt prismatische Versetzungen ausbilden (Abb. 4.8(d)).

Helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen entstehen ebenfalls, wenn ein achtfach größerer Indenterradius $R = 8\mu m$, die gleichen Kraftrate $\dot{F} = 82N/s$ und eine vierfache Startkraft $F_0 = 327\mu N$ als Parameter gewählt wird. Alle anderen Eigenschaften wie z.B. die Position der Versetzungsquelle sind analog zu Abbildung 4.8. Abbildung 4.9 zeigt die zugehörige Versetzungsstruktur. Im Vergleich zu Abbildung 4.8 ist die Breite der prismatischen Versetzungsringe in Abbildung 4.9 erhöht.

### 4.1.3 V-förmige prismatische Versetzungen

V-förmige prismatische Versetzungen entstehen unter Indentierung in $[0\bar{1}0]$-Kristallrichtung aus einer Versetzungsquelle mit einem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[101]$ parallel zu der Oberfläche. Abbildung 4.10 zeigt die zugehörige Entwicklung der Versetzungsstruktur. Eine Frank-Read-Quelle mit einer anfänglichen Länge von $161nm$ befindet sich auf einer $(\overline{1}\overline{1}1)$-Gleitebene in einer Tiefe

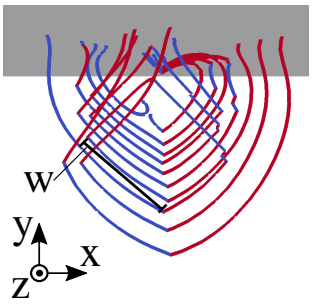
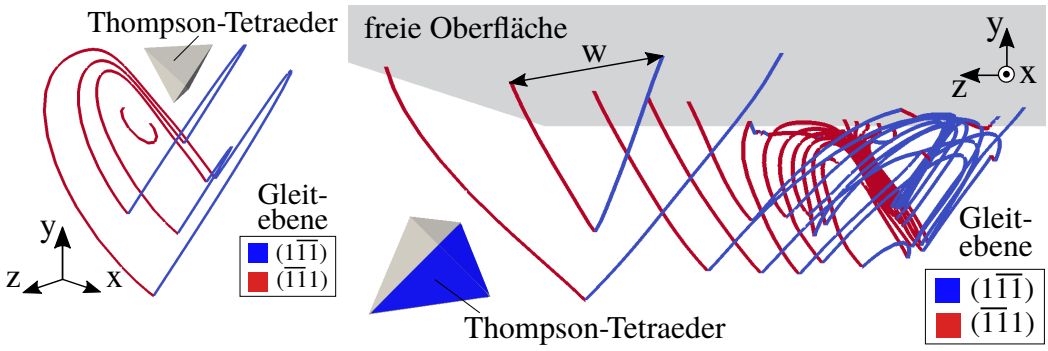



**Abb. 4.9:** Helixförmige prismatische Versetzungsstruktur ($F = 328\mu N$, $w = 530nm$)

von $302nm$ in einem Abstand von $289nm$ zur Indentierungsachse. Unter Indentierung emittiert die Frank-Read-Quelle wiederholt Versetzungen, die einmal auf $(1\overline{1}\overline{1})$-Gleitebenen quergleiten (Abb. 4.10(a)). Die Versetzungen gleiten anschließend an die Oberfläche und werden dabei in je zwei Versetzungen aufgespalten (Abb. 4.10(b)). Die Indenterspitze erreicht eine Tiefe von $u_{max} = 23nm$. In Richtung des Burgersvektors gesehen, haben diese Versetzungen eine „v-Form“.




(a) (b)

**Abb. 4.10:** Entstehung v-förmiger prismatischer Versetzungsstrukturen (a) Quergleiten ($F = 223\mu N$) (b) V-förmige prismatische Versetzungen ($F = 403\mu N$, $w = 0.69\mu m$)

Abbildung 4.11 zeigt das Verschiebungsfeld durch reines Versetzungsgleiten ohne das Indenterfeld unterhalb der Indenterspitze. Die v-förmigen Versetzungen verschieben Material parallel zum Burgersvektor von der Indenterspitze weg.

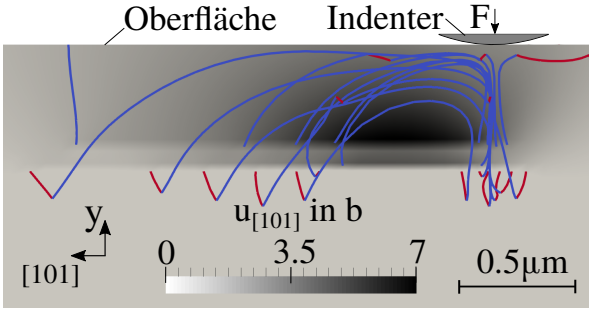



**Abb. 4.11:** Verschiebung $u_{[101]}$ parallel zu dem Burgersvektor in der Einheit Burgersvektor $b$ zu Abb. 4.10(b)

### 4.1.4 U-förmige prismatische Versetzungen

U-förmige prismatische Versetzungen entstehen unter Indentierung auf einer (111)-Oberfläche aus einer Versetzungsquelle, welche sich nahe der Oberfläche befindet und einen Burgersvektor parallel zur Oberfläche besitzt. Abbildung 4.12 zeigt die zugehörige Entwicklung der Versetzungsstruktur. Für ein Video der Bildung der u-förmigen prismatischen Versetzungen sei auf Referenz [74] verwiesen. Für diese Simulationen wird die Kraftrate $\dot{F}_2 = 163Ns^{-1}$ und die Probendimensionen $4.8\mu m \times 1.2\mu m \times 2.4\mu m$ (Kap. 3.2) verwendet. Eine Frank-Read-Quelle mit einer anfänglichen Länge von $109nm$ befindet sich auf einer (111)-Gleitebene in einer Tiefe von $438nm$ in einem Abstand von $242nm$ zur Indentierungsachse. Der Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[\bar{1}01]$ der Frank-Read-Quelle ist parallel zur Oberfläche und parallel zur $x$-Achse in Abbildung 4.12. Unter Indentierung emittiert die Quelle mehrere Versetzungen. In einem späteren Belastungsstadium gleiten manche dieser emittierten Versetzungen von der (111)-Gleitebene auf $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebenen quer (Abb. 4.12(a)). Die quergeglittenen Versetzungsarme erreichen die Oberfläche und jeder Versetzungsring spaltet sich in zwei Versetzungen auf. Diese zwei Versetzungen gleiten aufgrund entgegengesetzter Linienorientierung in entgegengesetzte Richtungen (Abb. 4.12(a,b)). In Richtung des Burgersvektors gesehen haben die Versetzungen auf der einen Seite des Indenters eine „u-Form“. Diese u-förmigen Versetzungen gleiten von dem Indenter weg, während sich die anderen Versetzungen unterhalb der Indenterspitze aufstauen (Abb. 4.12(a,b)). Die Indenterspitze erreicht eine Tiefe von $u_{max} = 35nm$ und der Kontaktradius beträgt $r_k = 194nm$. Unter Entlastung annihilieren sich die Versetzungen im inneren Bereich unter hohen Rückspannungen des Versetzungsaufstaus, während sich im äußeren Bereich weitere u-förmige prismatische Versetzungen ausbilden (Abb. 4.12(c,d)). Die äußeren u-förmigen prismatischen Versetzungen gleiten weiter von dem Indenter weg, bis sie in einiger Entfernung zu der Indenterspitze stehen bleiben.

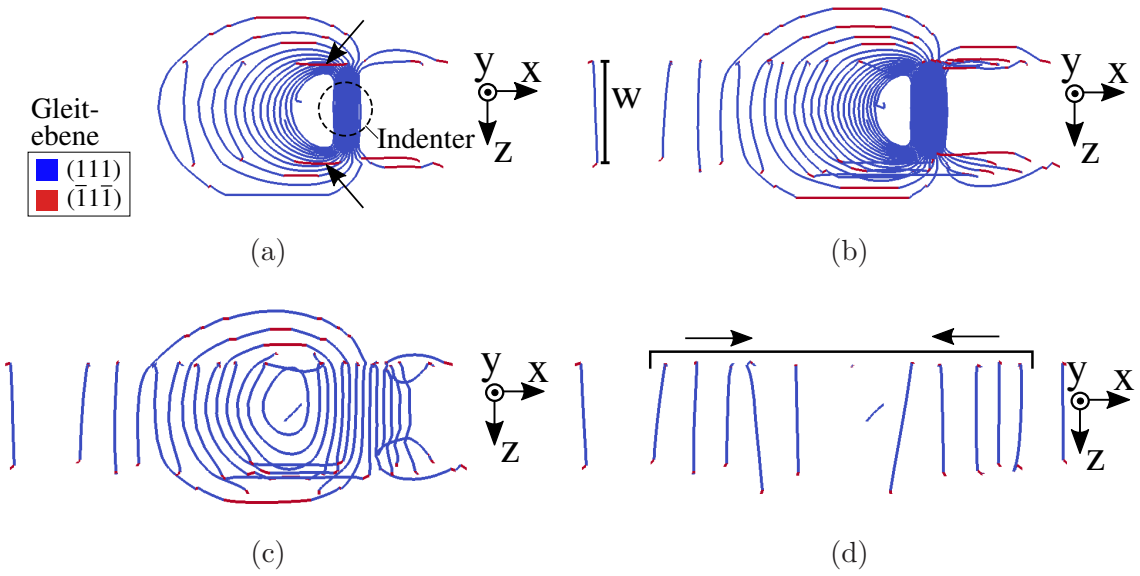



**Abb. 4.12:** Entstehung u-förmiger prismatischer Versetzungen. Indentergröße nicht proportional. (a) Quergleiten (Pfeile) ($F = 678\mu N$) (b) U-förmige prismatische Versetzungen ($F = 793\mu N$, $w = 450nm$) (c,d) Relaxation ($F = 0$) [74]

### 4.1.5 Wechselwirkung prismatischer Strukturen

In den bisherigen Simulationen wurden Versetzungsstrukturen unterhalb eines Indenters untersucht. Für zwei ausgewählte Fälle wird die Wechselwirkungen zweier solcher prismatischer Versetzungsstrukturen untersucht.

**V-förmige prismatische Versetzungsstrukturen** Abbildung 4.13(a,b) zeigt, wie sich unter zwei Indentern aus zwei Versetzungsquellen v-förmige prismatische Versetzungen ausbilden, welche sich aufeinander zu bewegen. Die Versetzungsquellen befinden sich in einem Abstand von $0.12\mu m$ zur Oberfläche. Die Burgersvektoren der beiden Versetzungsquellen sind parallel zu der [101]-Richtung und der $[\bar{1}01]$-Richtung im globalen Koordinatensystem. Die Probenabmessung beträgt $3.2\mu m \times 1.6\mu m \times 3.2\mu m$. Beide Indenter haben die gleiche Startkraft $F_0 = 16\mu N$ und die gleiche Kraftrate $\dot{F} = 82N/s$. Abbildungen 4.13(c,d) zeigen, wie die v-förmigen prismatischen Versetzungen aufeinander treffen und ohne miteinander zu reagieren durcheinander durch laufen.

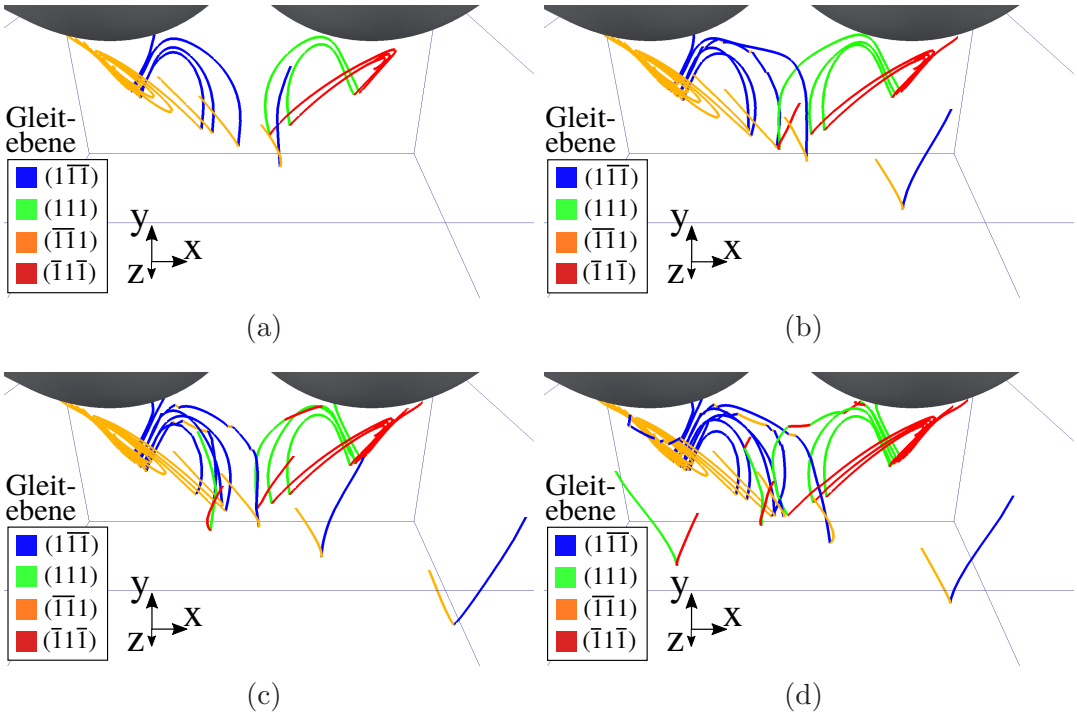



**Abb. 4.13:** V-förmige prismatische Versetzungen aus zwei Versetzungsquellen. Indentergröße nicht proportional. (a) $F = 190\mu N$ (b) $F = 223\mu N$ (c) $F = 247\mu N$ (d) $F = 271\mu N$

**Perfekt prismatische Versetzungsstrukturen** Abbildung 4.14 zeigt, wie sich unter Indentierung auf einer (111)-Oberfläche perfekt prismatische Versetzungen unter zwei Indentern ausbilden. Die Versetzungsquellen befinden sich in einem Abstand von $0.12\mu m$ zur Oberfläche. Die Burgersvektoren der beiden Versetzungsquellen sind parallel zu der [110]- und der [011]-Kristallrichtung. Die Kraftrate der Indenter I und II beträgt $\dot{F}_{I,II} = 16N/s$. Zunächst bilden sich zwei separate perfekt prismatische Versetzungsstrukturen aus (Abb. 4.14(a)). Zwei

perfekt prismatische Versetzungen treffen aufeinander und reagieren miteinander unter Bildung einer Lomer-Versetzung (Abb. 4.14(b)). Nachfolgende Versetzungen stauen sich hinter der Lomer-Versetzung auf. Unter Erhöhung der Indenterkräfte emittieren die Versetzungsquellen trotz Rückspannung auf die Quelle weitere prismatische Versetzungen, bis schließlich perfekt prismatische Versetzungen aus der Schneidzone emittiert werden und in die Tiefe des Kristalls gleiten (Abb. 4.14(c,d)).

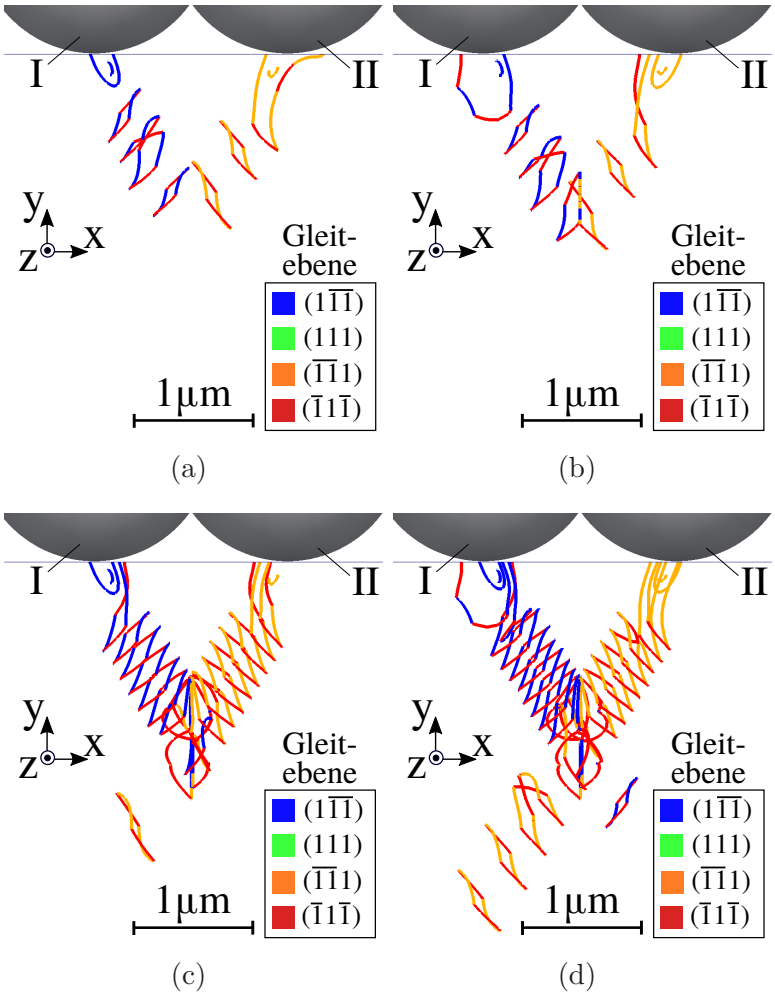



**Abb. 4.14:** (a) Prismatische Versetzungsstrukturen ($F_I \approx 72\mu N$, $F_{II} \approx 77\mu N$) (b) Bildung einer Lomer-Versetzung (c,d) Versetzungsaufstau und Emittierung prismatischer Versetzungen aus der Schneidzone ($F_{I(c)} \approx 82\mu N$, $F_{II,(c)} \approx 87\mu N$)

## 4.2 Versetzungstransport im Gleitkontakt

Zur Untersuchung des Versetzungstransportes werden Simulationen mit einem dreidimensionalen Diskreten Versetzungsdynamik-Code und einem Setup wie in Kapitel 3 beschrieben durchgeführt. Eine sphärische Indenterspitze fährt über die Oberfläche eines Einzelkristalls. Im Folgenden wird die Gleitsystem-Nomenklatur in Anhang B verwendet.

### 4.2.1 Gleitsysteme auf denen Versetzungen transportiert werden

Für verschiedene Kristallorientierungen und Indenterfahrtrichtungen wird untersucht, auf welchen Gleitsystemen Versetzungen aus einem Versetzungsreservoir in ein versetzungsfreies Volumen transportiert werden. Tabelle 4.1 listet die Bezeichnungen für die Setups auf. Der Setupname spiegelt die kristallographische Eindrucksrichtung wieder. Der Index $(\cdot)_{par}$ markiert, dass einer der sechs Burgersvektoren parallel zur Fahrtrichtung des Indenters ist. Alle Richtungen in Tabelle 4.1 sind im Kristallkoordinatensystem angegeben. Abbildungen C1-C6 im Anhang zeigen die Orientierung der Thompson-Tetraeder für die Setups aus Tabelle 4.1. Zunächst ist das Quergleiten von Versetzungen nicht zugelassen und der Kontakt ist reibungslos. Als Übersicht sind für die Setups aus Tabelle 4.1 im Anhang die Versetzungsstrukturen zu verschiedenen Belastungszeitschritten (Anhang C), die Versetzungsdichten je Gleitsystem über die Zeit (Anhang D) und die Oberflächentopographien zu verschiedenen Zeitpunkten (Anhang E) abgebildet.

**Tabelle 4.1:** Setupnamen

| Setup | Eindrucksrichtung (negative $y$-Achse) | Fahrtrichtung ($x$-Achse) |
|---|---|---|
| 111 | $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ | $[\bar{2}11]$ |
| $111_{par}$ | $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ | $[\bar{1}01]$ |
| 110 | $[\bar{1}10]$ | $[00\bar{1}]$ |
| $110_{par}$ | $[\bar{1}10]$ | $[\bar{1}\bar{1}0]$ |
| 010 | $[0\bar{1}0]$ | $[100]$ |
| $010_{par}$ | $[0\bar{1}0]$ | $[101]$ |

Während der Indenter oberhalb des Versetzungsreservoirs fährt, steigt bei allen Kristallorientierungen die Versetzungsdichte im Versetzungsreservoir an. Je nach Kristallorientierung und je nach Indenterfahrtrichtung gleiten Versetzungen mit dem fahrenden Indenter aus dem Versetzungsreservoir in das anfänglich versetzungsfreie Volumen — die Versetzungen werden „transportiert“ — und der Kristall wird plastisch verformt. Tabelle 4.2 zeigt eine Übersicht, bei welchen Setups Versetzungstransport bis an die Korngrenze erfolgt. Dies entspricht einer Distanz von etwa $8\mu m$ (Abb. 3.2). In Simulationen mit Setup 111, Setup $111_{par}$, Setup $110_{par}$ oder Setup $010_{par}$ gleiten die Versetzungen bis an die Korngrenze. Versetzungen, die beim Entlasten zurückgleiten, können bei der nächsten Indenterfahrt erneut transportiert werden. Bei mehreren Indenterfahrten werden prinzipiell Versetzungen auf den gleichen Gleitsystemen transportiert.

| Setup | Transport bis an die Korngrenze |
|---|---|
| 111 | ✓ |
| $111_{par}$ | ✓ |
| 110 | - |
| $110_{par}$ | ✓ |
| 010 | - |
| $010_{par}$ | ✓ |

**Tabelle 4.2:** Versetzungstransport je nach Setup

### Setups, bei denen kein Burgersvektor parallel zur Fahrtrichtung ist

Bei jenen Setups, bei denen keiner der sechs Burgersvektoren parallel zu der Fahrtrichtung der Indenters ist, können sowohl Versetzungen bis an die Korngrenze transportiert werden (Setup 111) als auch räumlich begrenzter Versetzungstransport vorliegen (Setup 110 und Setup 010).

**Setup (111)** Abbildung 4.15 zeigt für Setup 111 aus Tabelle 4.1 exemplarisch die Versetzungsstruktur während der ersten Indenterfahrt. Die Versetzungen sind entsprechend der Gleitebenenfamilie gefärbt, auf welcher sie sich befinden. Es ist zu erkennen, dass Versetzungen auf (111)-Gleitebenen parallel zur Oberfläche bis an die Korngrenze transportiert werden. Der Bereich des Versetzungstransports erstreckt sich bis zu einer Tiefe von circa $1\mu m$ im Kristall. Für die Entwicklung der Mikrostruktur während mehreren Indenterfahrten sei auf Anhang C und das Video in Referenz [103] verwiesen.

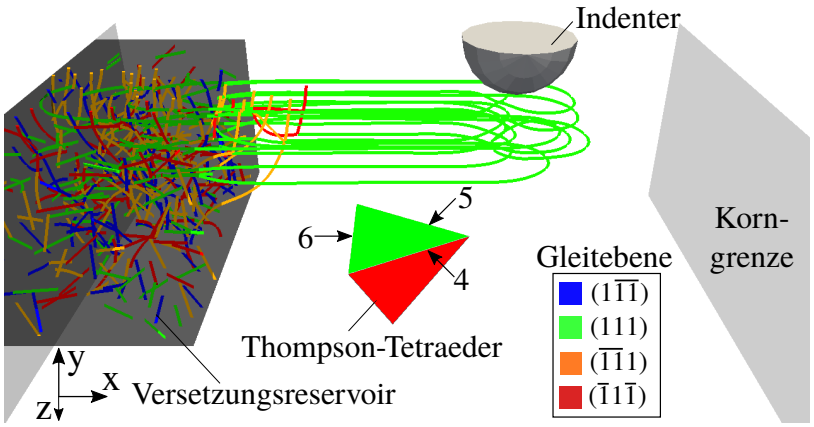
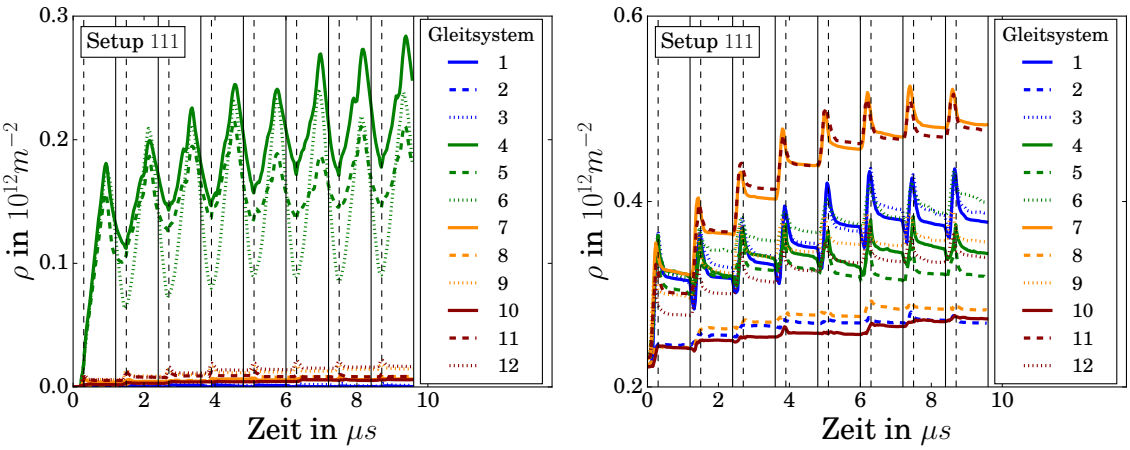



**Abb. 4.15:** Setup 111: Versetzungsstruktur

Wird die Versetzungsstruktur nach einer Indenterfahrt vollständig relaxiert, so gleiten einzelne, unter Last langezogene Versetzungen auf den (111)-Gleitebenen zurück, während ein Teil der Versetzungen stabil bleibt.

Abbildung 4.16 zeigt die Entwicklung der Versetzungsdichte auf jedem Gleitsystem für acht Indenterfahrten. Eine folgende Indenterfahrt beginnt, bevor die Versetzungsstruktur vollständig relaxiert ist. Jede Kurve ist die Mittelung aus 16 statistisch gleichwertigen Simulationen. Wie in Abbildung 4.16(a) zu erkennen, werden Versetzungen mit allen drei Burgersvektororientierungen auf den (111)-Gleitebenen außerhalb des Versetzungsreservoirs transportiert (Gleitsys-

teme 4 – 6). Die Pfeile auf die Kanten des Thompson-Tetraeders in Abbildung 4.15 zeigen die Burgersvektororientierung der Gleitsysteme 4 – 6. Innerhalb des Versetzungsreservoirs steigt die Versetzungsdichte auf allen Gleitsystemen nur innerhalb jenem Zeitraum an, in welchem abhängig von der Position des Indenters eine kritische Spannung im Versetzungsreservoir erreicht werden (Abb. 4.16(b)). Beginnt die nächste Indenterfahrt bevor die Versetzungsstruktur vollständig relaxiert ist, so werden die Versetzungen, welche eine Teilstrecke zurückgeglitten sind, erneut mittransportiert. Die Versetzungsdichte oszilliert mit wiederholter Be- und Entlastung (Abb 4.16(a)). Der Dichteverlauf jener Versetzungen auf (111)-Gleitebenen mit einem Burgersvektor senkrecht zur Fahrtrichtung (Gleitsystem 6) oszilliert pro Zyklus stärker, als der Dichteverlauf jener Versetzungen auf (111)-Gleitebenen mit zur Fahrtrichtung geneigten Burgersvektoren (Gleitsysteme 4 und 5). Wie in Abbildung 4.16(a) zu erkennen steigt mit der Anzahl der Indenterfahrten zunächst der Wert an, um den die Versetzungsdichte oszilliert. Tendenziell stabilisiert sich dieser Wert nach acht Indenterfahrten.




(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. 4.16:** Setup 111: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ je Gleitsystem mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt [103]

**Setup (110) und Setup (010)** In Setup 110 und Setup 010 findet räumlich begrenzter Transport außerhalb des Versetzungsreservoirs statt. Es werden keine Versetzungen bis an die Korngrenze transportiert. Die Versetzungsdichte außerhalb des Versetzungsreservoirs steigt jedoch tendenziell, wenn auch geringfügig, mit der Zeit an. Teilweise bilden Versetzungen, die für kurze Strecken transportiert werden, Bereiche außerhalb des Versetzungsreservoirs aus, welche mit weiteren Indenterfahrten größer werden. Für die Mikrostruktur während der Indenterfahrten sei auf die Videos in Referenz [103] verwiesen. Für die Entwicklung der Mikrostruktur, die Entwicklung der Versetzungsdichte mit der Zeit und die Oberflächentopographie sei auf Anhang C (Abb. C3 und Abb. C5), Anhang D (Abb. D4 und Abb. D6) und Anhang E (Abb. D3 und Abb. D5) verwiesen.

### Setups mit einem Burgersvektor parallel zur Fahrtrichtung

Wird ausgehend von Setup 111, Setup 110 und Setup 010 die Indenterfahrtrichtung derart geändert, dass einer der sechs Burgersvektoren parallel zur Fahrtrichtung ist, werden Versetzungen auf zusätzlichen Gleitsystemen und bis an die Korngrenze transportiert. Zusätzliche Gleitebenen für den Transport sind Gleitebenen, welche einen Burgersvektor parallel zur Fahrtrichtung enthalten.

**Setup $111_{\mathbf{par}}$** In Setup $111_{par}$ werden im Vergleich zu Setup 111 zusätzlich zu den Versetzungen auf (111)-Gleitebenen parallel zur Oberfläche, auch Versetzungen auf $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebenen bis an die Korngrenze transportiert. Abbildung 4.17 zeigt eine exemplarische Versetzungsstruktur während der ersten Indenterfahrt. Die Pfeile auf die Kanten des Thompson-Tetraeders zeigen die Burgersvektororientierung der Gleitsysteme $4-6$, 11 und 12, auf denen Versetzungen transportiert werden.

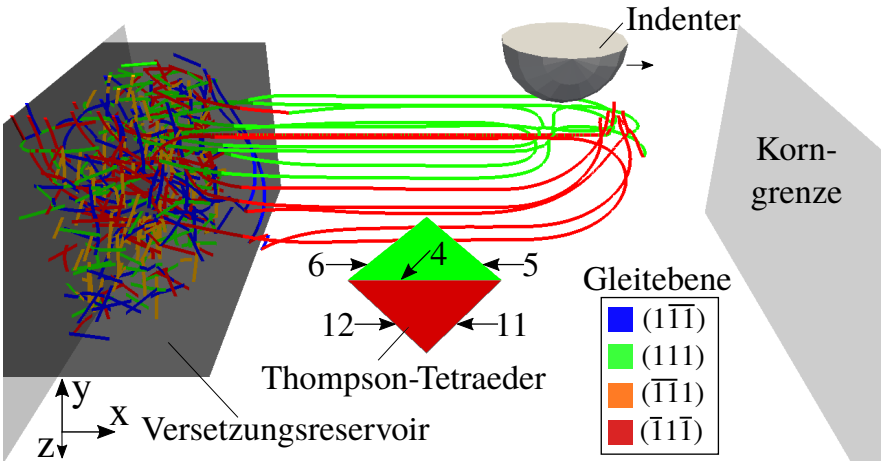
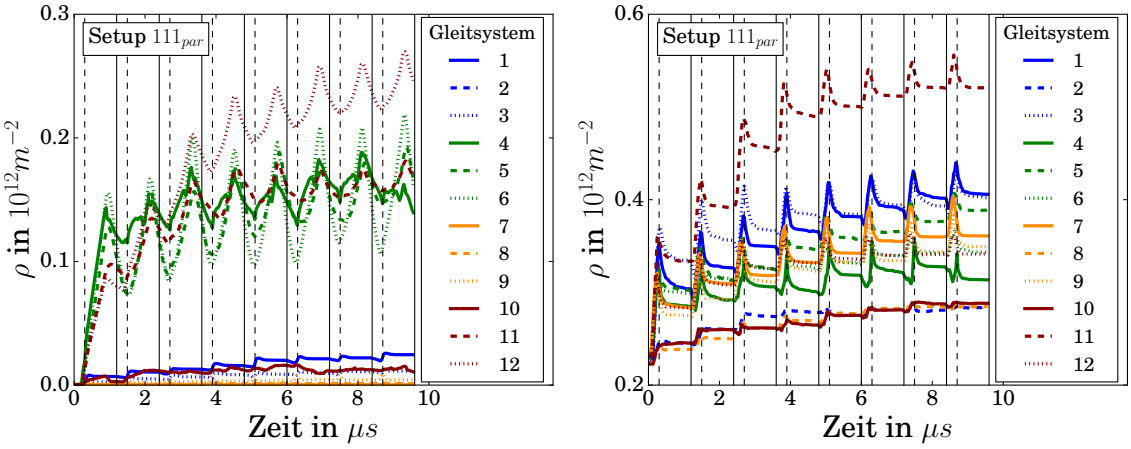



**Abb. 4.17:** Setup $111_{par}$: Versetzungsstruktur

Aus dem Verlauf der Versetzungsdichte mit der Zeit in Abbildung 4.18(a) ist ersichtlich, dass auf den (111)-Gleitebenen Versetzungen mit allen drei Burgersvektororientierungen transportiert werden (Gleitsysteme $4-6$). Die Versetzungsdichte von Versetzungen auf den (111)-Gleitebenen mit einem Burgersvektor parallel zur Fahrtrichtung (Gleitsystem 4) oszilliert weniger, als die Versetzungsdichte von Versetzungen auf (111)-Gleitebenen mit einem schräg zur Fahrtrichtung orientierten Burgersvektor (Gleitsysteme 5 und 6). Auf den zur Oberfläche geneigten $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebenen werden nur Versetzungen auf dem Gleitsystem 11 und dem Gleitsystem 12 transportiert, nicht aber auf dem Gleitsystem 10. Dabei dominiert in Abbildung 4.18(a) die Versetzungsdichte auf Gleitsystem 12 gegenüber der Versetzungsdichte auf Gleitsystem 11. Die Burgersvektoren der beiden Gleitsysteme 11 und 12 sind für diese Kristallorientierung bei reiner Indentierung geometrisch symmetrisch (Burgersvektororientierung siehe Abb. 4.17). Wird das Vorzeichen der Fahrtrichtung des Indenters umgedreht, so dominieren nun Versetzungen auf Gleitsystem 11 die Dichte gegenüber Versetzungen auf Gleitsystem 12 (Anhang Abb. D3). Der Bereich des Versetzungstransports auf den schräg zu der Oberfläche orientierten $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebenen erstreckt sich bis zu einer Tiefe von circa $2\mu m$ im Kristall. Abbildung 4.18(b) zeigt den Verlauf der Versetzungsdichte mit der Zeit innerhalb des Versetzungsreservoirs. Es

ist zu erkennen, dass die Versetzungsdichte in dem Zeitraum ansteigt, in welchem der Indenter sich oberhalb bzw. nahe des Versetzungsreservoirs befindet. Die Versetzungsdichte erhöht sich dabei auf allen Gleitsystemen, wobei sich die Höhe der Versetzungsdichte je Gleitsystem unterscheidet.



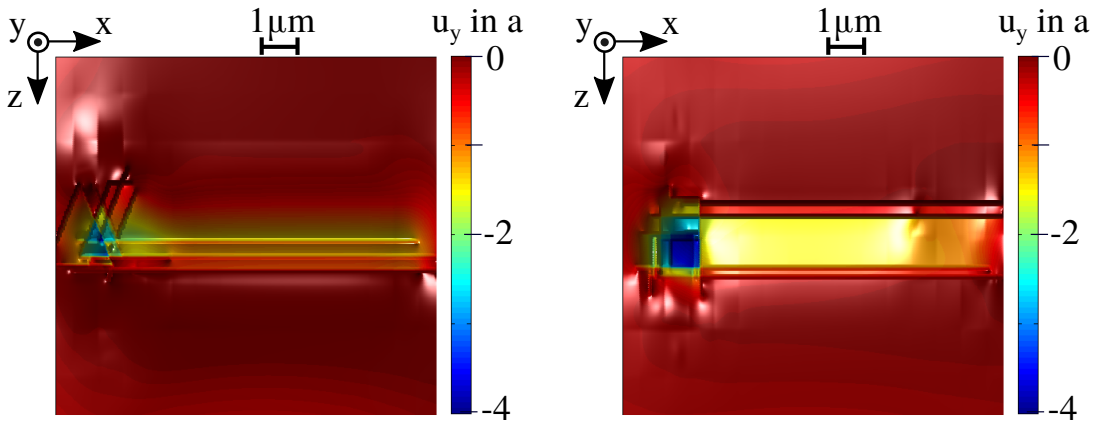

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. 4.18:** Setup $111_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt [103]

Die unterschiedliche plastische Verformung im und außerhalb des Versetzungsreservoirs macht sich auch an der Oberfläche bemerkbar. Abbildung 4.19(a) zeigt für Setup $111_{par}$ die Oberflächentopographie nach einer Indenterfahrt im vollständig relaxierten Zustand, welche durch Versetzungsgleiten entstanden ist. Die sichtbaren Gleitlinien sind Schnittkanten aus Gleitebenen, auf welchen Versetzungen an die Oberfläche geglitten sind, mit der Oberfläche. In Abbildung 4.19(a) sind außerhalb des Versetzungsreservoirs charakteristische horizontale Gleitlinien aufgrund der transportierten Versetzungen auf $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebenen erkennbar. Diese sind asymmetrisch relativ zu der Fahrtlinie des Indenters. Versetzungstransport auf (111)-Gleitebenen parallel zu der Oberfläche ist in der Oberflächentopographie in Abbildung 4.19(a) nicht sichtbar, da die Versetzungen keinen Burgersvektoranteil senkrecht zur Oberfläche aufweisen. Innerhalb des Versetzungsreservoirs sind Gleitlinien von den zur Oberfläche geneigten Gleitebenen zu erkennen — und damit auch die Orientierung des Thompson-Tetraeders.

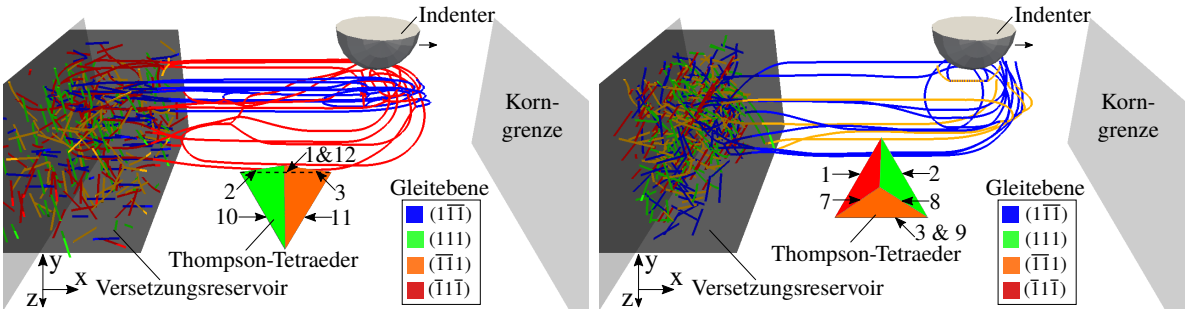
**Setup $110_{par}$ und Setup $010_{par}$** Abbildung 4.20 zeigt exemplarisch Versetzungsstrukturen während der ersten Indenterfahrt für Setup $110_{par}$ und Setup $010_{par}$. Es ist zu erkennen, dass in Setup $110_{par}$ Versetzungen auf $(1\bar{1}\bar{1})$- und $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebenen und in Setup $010_{par}$ Versetzungen auf $(1\bar{1}\bar{1})$- und $(\bar{1}\bar{1}1)$-Gleitebenen transportiert werden. Die Pfeile auf die Kanten des Thompson-Tetraeders zeigen die Burgersvektororientierung von Gleitsystemen, auf denen Versetzungen transportiert werden. Für Setup $110_{par}$ und Setup $010_{par}$ wird Versetzungstransport bis an die Korngrenze bis zu einer Tiefe von circa $1.7\mu m$ bzw. circa $1.8\mu m$ beobachtet.

Wird die Versetzungsstruktur nach einer Indenterfahrt relaxiert, so gleitet ein Teil der Versetzungen wieder zurück und ein Teil der Versetzungen bleibt im ehemals versetzungsfreien Bereich zurück. Nach der Relaxation bleibt außerhalb des Versetzungsreservoirs eine Ober-




(a) Setup $111_{par}$ (b) Setup $010_{par}$

**Abb. 4.19:** Oberflächentopographie. Die Verschiebung $u_y$ der Oberfläche in Eindrucksrichtung ist in der Einheit Gitterkonstante $a$ angegeben.




(a) Setup $110_{par}$ (b) Setup $010_{par}$

**Abb. 4.20:** Versetzungsstruktur [103]

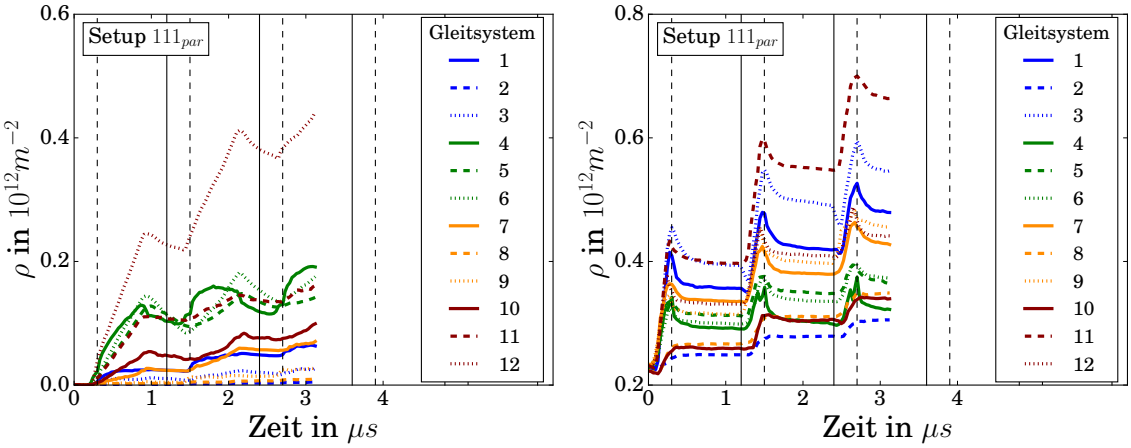
flächentopographie zurück, welche charakteristisch für das Setup ist. Abbildung 4.19(b) zeigt dies exemplarisch für Setup $010_{par}$.

Die horizontale Linien in Abbildung 4.19(b) sind Schnittkanten aus Oberfläche und den zwei Gleitebenen, auf denen Versetzungen transportiert werden und auf denen Versetzungen an die Oberfläche gleiten. Außerhalb des Reservoirs entsteht eine Vertiefung, welche symmetrisch zu der Indenterfahrtlinie ist. Für die Oberflächentopographie in Setup $110_{par}$ sei auf den Anhang verwiesen (Abb. D4).

### 4.2.2 Quergleiten

Um die Auswirkung des Quergleitens auf den Versetzungstransport zu beurteilen, werden die Simulationen aus Kapitel 4.2.1 mit den selben anfänglichen Versetzungsstrukturen erneut durchgeführt. Im Unterschied dazu ist das Quergleiten von Versetzungen nun zugelassen. Der Kontakt ist reibungslos.

Der Vergleich der Entwicklungen der Versetzungsdichte mit der Zeit für Simulationen mit und ohne Quergleiten in Abbildungen D1, D2, D4-D13 im Anhang lässt erkennen, dass sich die Verläufe ähneln. Ist Quergleiten zugelassen, so ist die Versetzungsdichte im Allgemeinen in und außerhalb des Versetzungsreservoirs gegenüber Simulationen ohne Quergleiten erhöht. Der Vergleich für Setup $111_{par}$ von Abbildung 4.18 mit Abbildung 4.21 zeigt beispielsweise, dass die Versetzungsdichte nach einer Indenterfahrt (erste volle, vertikale Linie) innerhalb des Versetzungsreservoirs um etwa 10% und außerhalb des Versetzungsreservoirs um etwa 30% erhöht ist. Die Versetzungsnetzwerke außerhalb des Versetzungsreservoirs sind teilweise ähnlich (z.B. Setup 111) oder auch komplexer (z.B. Setup $111_{par}$, Setup $010_{par}$) als ohne Quergleiten: Es treten lokale Quergleitprozesse auf und es finden mehr Reaktionen zwischen Versetzungen statt, die z.B. zu langen Lomer-Reaktionen führen.




(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. 4.21:** Setup $111_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ je Gleitsystem - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt [103]

Bei den untersuchten Kristallorientierungen in Tabelle 4.1 werden bei den Simulationen mit Quergleiten Versetzungen auf den gleichen Gleitsystemen transportiert wie in Kapitel 4.2.1 bei den Simulationen ohne Quergleiten (Vergleich der Abb. D1, D2, D4-D13 im Anhang). Lediglich in Setup 110 werden mit Hilfe von Quergleitprozessen Versetzungen auf vier zusätzlichen Gleitsystemen bis an die Korngrenze transportiert. In Abbildung 4.22 ist exemplarisch eine Versetzungsstruktur während der ersten Indenterfahrt abgebildet. Die Versetzungen I und II mit den Burgersvektoren $\vec{b}_I = \frac{a}{2}[101]$ und $\vec{b}_{II} = \frac{a}{2}[01\bar{1}]$ werden auf den (111)- und $(1\bar{1}\bar{1})$-Gleitebenen (Gleitsysteme 3 und 9) bzw. auf den $(\bar{1}\bar{1}1)$- und $(\bar{1}\bar{1}1)$-Gleitebenen (Gleitsysteme 2 und 6) transportiert. Die „treppenförmigen“ Versetzungsarme entstehen unabhängig voneinander und werden in einer näherungsweise konstanten Tiefe von $1.2\mu m$ zur Oberfläche abgelegt. Bei reiner Indentierung in $\langle 110 \rangle$-Kristallrichtung sind vier Burgersvektoren zur Oberfläche geneigt und geometrisch symmetrisch. Diese Orientierung dieser Burgersvektoren ist in Abbildung 4.22 mit vollen bzw. gestrichelten Linien dargestellt. Unter einer fahrenden Asperität werden jedoch nur Versetzungen transportiert, welche den Kristall in Fahrtrichtung in die Tiefe scheren (Versetzungen mit Burgersvektoren parallel zu den vollen Linien in Abb. 4.22). Versetzungen auf den Gleitsystemen 7 & 11 und den Gleitsystemen 4 & 10 werden nicht transportiert (Versetzungen mit Burgersvektoren parallel zu den gestrichelte Linien

im Thompson-Tetraeder in Abb. 4.22). Für den gemittelten Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem von je 16 statistisch äquivalente Simulationen mit Setup 110 sei auf den Anhang verwiesen (Abb. D10).

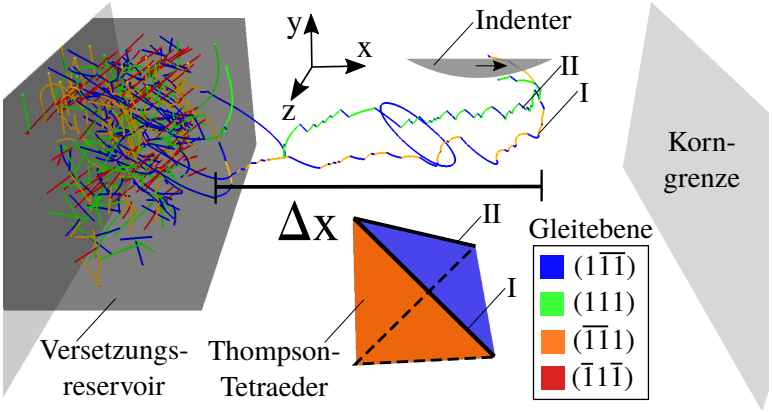



**Abb. 4.22:** Setup 110: Versetzungsstruktur

Abbildung 4.23 zeigt die zugehörige Oberflächentopographie zur Abbildung 4.22. Die Burgersvektoren der transportierten Versetzungen haben einen Anteil senkrecht zur Oberfläche, sodass die Quergleitprozesse auf der Oberfläche abgebildet werden. Versetzungen I und II aus Abbildung 4.22 verursachen die Gleitlinien I und II auf der Oberfläche in Abbildung 4.23.

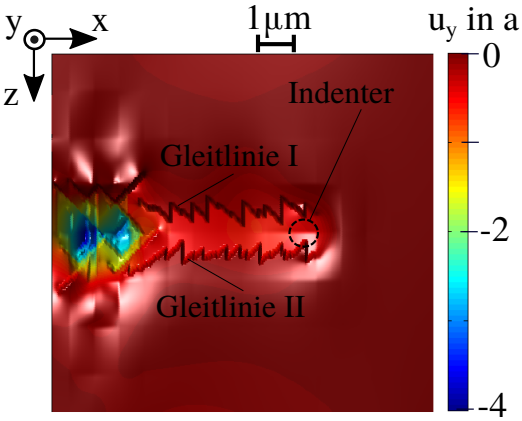


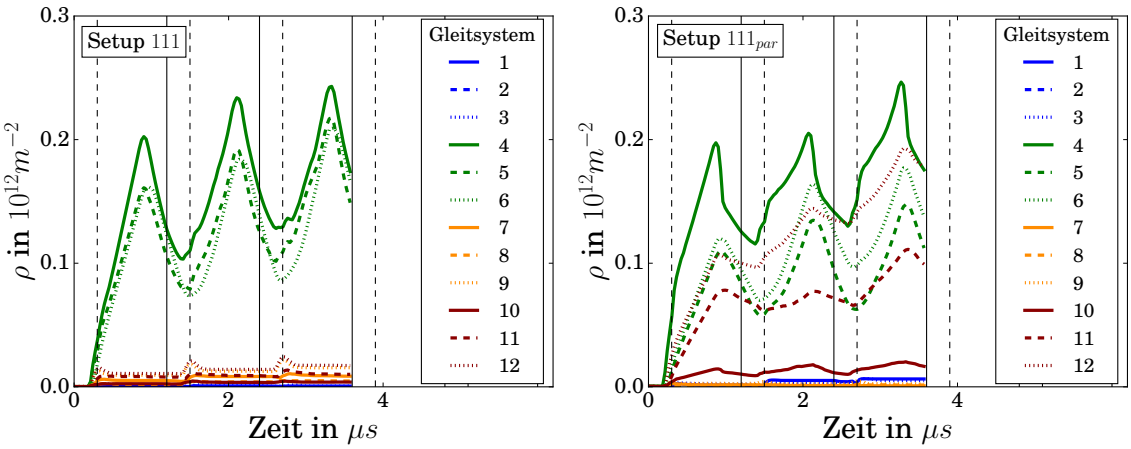

**Abb. 4.23:** Oberflächentopographie zu Abb. 4.22. Verschiebung $u_y$ der Oberfläche in Eindrucksrichtung durch Versetzungsgleiten (ohne Indenterfeld) in der Einheit Gitterkonstante $a$. Indentergröße nicht proportional.

Bei allen anderen Setups aus Tabelle 4.1 werden keine Versetzungen auf zusätzlichen Gleitsystemen transportiert, auch wenn dies rein geometrisch möglich wäre. Beispielsweise könnten rein geometrisch betrachtet in Setup 111 Versetzungen mit dem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[011]$ durch Quergleitprozesse zwischen den ($\overline{1}\overline{1}$1)- und ($\overline{1}$1$\overline{1}$)-Gleitebenen mit dem Indenter transportiert werden. Die Versetzungen mit dem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[011]$ gleiten in den Simulationen jedoch stets in entgegengesetzte Richtung zur Fahrtrichtung des Indenters quer und folgen nicht der Indenterspitze.

### 4.2.3 Reibung

Bisher wurde der Versetzungstransport unter einer Asperität untersucht, welche reibungslos über die Oberfläche gefahren ist. Um die Auswirkung des Reibungskoeffizienten auf den Versetzungstransport zu beurteilen, werden die Simulationen aus Kapitel 4.2.1 mit Setup 111, $111_{par}$, 110 und $110_{par}$ mit den selben anfänglichen Versetzungsstrukturen erneut durchgeführt. Im Unterschied dazu beträgt der Reibungskoeffizient im Reibkontakt $\mu = 0.25$. Quergleiten ist nicht zugelassen.

Abbildung 4.24 zeigt den Verlauf der Versetzungsdichte mit der Zeit für Setup 111 und $111_{par}$ für drei Indenterfahrten. Jede Kurve ist die Mittelung aus 16 statistisch äquivalenten Simulationen. Für die Entwicklung der Versetzungsdichte mit der Zeit von Setup 110 und $110_{par}$ sei auf den Anhang verwiesen (Abb. D16 und Abb. D17). Es ist zu erkennen, dass der Transport von Versetzungen auf den gleichen Gleitsystemen wie im reibungslosen Kontakt stattfindet. Die Mikrostruktur und die Oberflächentopographie für die Simulationen mit Reibungskoeffizient ist ähnlich zu den Simulationen des reibungslosen Kontakts. Im Vergleich zu Abbildung 4.16(a), Abbildung 4.18(a), Abbildung D4(a) und Abbildung D5(a) ist die Versetzungsdichte im reibungsbehafteten Kontakt jedoch erhöht. In Setup 111 sind die Oszillationen der Versetzungsdichte auf den Gleitsystemen 4−6 im reibungsbehafteten Kontakt ähnlicher als im reibungslosen Kontakt (Vergleich Abb. 4.24(a) mit Abb. 4.16(a)). In Setup $111_{par}$ ist die Versetzungsdichte auf Gleitsystem 4, mit dem Burgersvektor parallel zu der Gleitrichtung, im Vergleich zu der Versetzungsdichte auf den anderen Gleitsystemen besonders erhöht. Ebenfalls ist in Setup $110_{par}$ die Versetzungsdichte insbesondere auf Gleitsystem 3 und 10 erhöht (Abb. D17). Bei reiner Indentierung in $[\bar{1}10]$-Richtung (Eindrucksrichtung von Setup $110_{par}$) sind die Burgersvektoren von den Gleitsystemen 2,3,10 und 11 geometrisch symmetrisch. Die Orientierung dieser Burgersvektoren ist in Abbildung 4.20(a) eingezeichnet. Unter der fahrenden Asperität ist die Versetzungsdichte jener Versetzungen erhöht, welche den Kristall in Fahrtrichtung der Asperität in die Tiefe scheren (Gleitsystem 3 und 10). Versetzungen auf Gleitsystem 2 und Gleitsystem 11 scheren den Kristall in die Tiefe entgegengesetzt der Fahrtrichtung der Asperität ab.



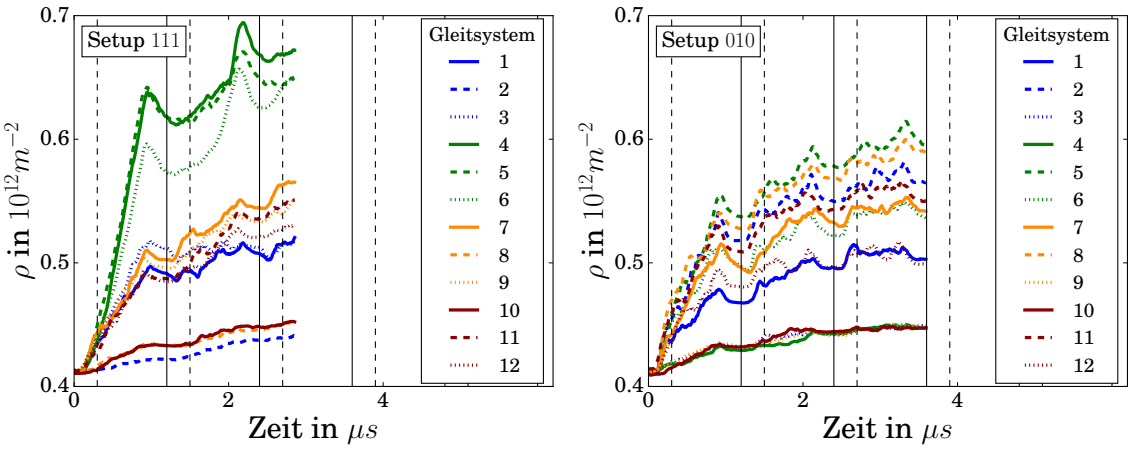

(a) Setup 111 (b) Setup $111_{par}$

**Abb. 4.24:** Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ je Gleitsystem mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt

### 4.2.4 Transport in nicht versetzungsfreie Bereiche

Bisher waren die Setups so gestaltet, dass Transport in versetzungsfreie Bereiche beobachtet werden konnte. Bei den folgenden Simulationen ist eine anfängliche Versetzungsstruktur bestehend aus Frank-Read-Quellen im gesamten Einzelkristall gleichmäßig verteilt. Es werden Setup 111 und Setup 010 untersucht. Die anfängliche Versetzungsdichte im Einzelkristall beträgt $\rho_1 = 2.5 \cdot 10^{12} m^{-2}$. Es werden die gleichen Parameter wie in Kapitel 4.2.1 verwendet. Quergleiten ist nicht zugelassen. Der Kontakt ist reibungslos.

**Setup (111)** Abbildung 4.25(a) zeigt die Entwicklung der Versetzungsdichte mit der Zeit für Setup 111. Jede Kurve ist die Mittelung aus 10 statistisch gleichwertigen Simulationen. Die Versetzungsdichte steigt auf allen Gleitsystemen an, wobei die Kurven in drei Bereichen angeordnet sind: Die Versetzungen auf Gleitebenen parallel zur Oberfläche die Versetzungsdichte dominieren (Gleitsysteme $4-6$). Die Versetzungsdichte auf den Gleitsystem 2, Gleitsystem 8 und Gleitsystem 10 ist am geringsten. Es handelt sich dabei um Versetzungen, welche einen zur Oberfläche parallelen Burgersvektoren haben und auf zur Oberfläche geneigten Gleitebenen gleiten. Alle anderen Kurven verlaufen im mittleren Bereich. Der Anstieg der Versetzungsdichte auf Gleitebenen parallel zur Oberfläche ist während der ersten Indenterfahrt fast doppelt so groß, wie für Versetzungsdichte auf anderen Gleitsystemen (Abb. 4.25(a)). Die Versetzungsdichte sinkt — insbesondere auf den Gleitebenen parallel zur Oberfläche — ab, wenn der Indenter sich der Korngrenze nähert, um dann bei der nächsten Indenterfahrt wieder anzusteigen (Abb. 4.25(a)).

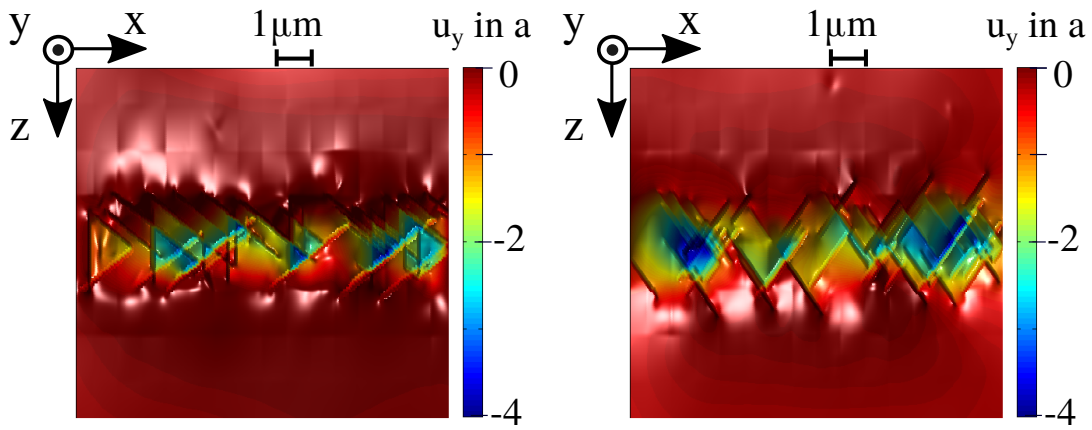



(a) Setup 111 (b) Setup 010

**Abb. 4.25:** Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ je Gleitsystem mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt

An der Oberfläche bleibt nach einer Indenterfahrt und vollständiger Relaxierung durch Versetzungsgleiten eine charakteristische Topographie wie exemplarisch in Abbildung 4.26(a) dargestellt zurück. Die Breite des Eindrucks auf der Oberfläche entlang der Indenterfahrtrichtung ist in etwa konstant und in etwa symmetrisch um die Indenterfahrtachse. Entlang der gesam-

ten Probe sind Gleitlinien von Versetzungen erkennbar, welche auf den drei zur Oberfläche geneigten Gleitebenen zur Oberfläche geglitten sind.




(a) Setup 111 (b) Setup 010

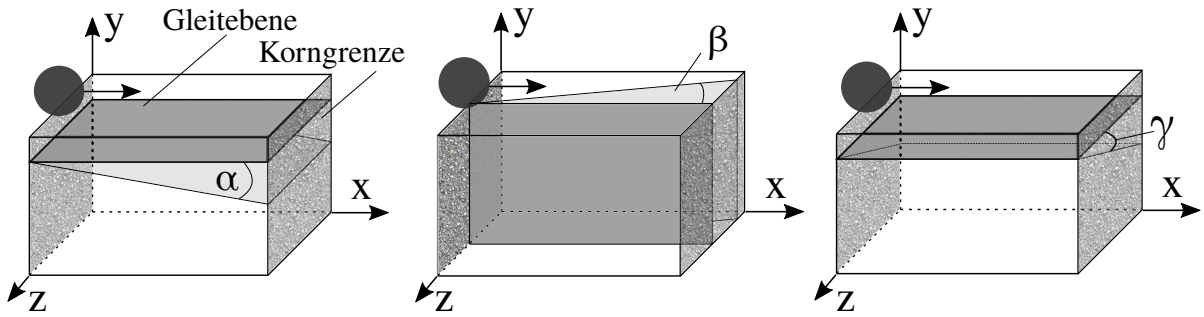
**Abb. 4.26:** Oberflächentopographie. Verschiebung $u_y$ der Oberfläche in Eindrucksrichtung in der Einheit Gitterkonstante $a$.

**Setup (010)** In Setup 010 steigt die Versetzungsdichte in Abbildung 4.25(b) auf allen Gleitsystemen mit jeder Indenterfahrt an. Dabei gibt es keine Gleitsysteme, auf denen die Versetzungsdichte klar abgegrenzt dominiert. Die Versetzungsdichte auf den Gleitsystemen 3,4,9 und 10 ist am in Abbildung 4.25(b) am kleinsten. Die Versetzungen auf diesen vier Gleitsystemen haben einen Burgersvektor senkrecht zu der Indentierungsachse bzw. parallel zu der Oberfläche. Am Ende einer Indenterfahrt sinkt die Versetzungsdichte auf allen Gleitsystemen tendenziell nur geringfügig ab (Abb. 4.25(b)). Die Zone, in welcher Versetzungen gleiten, ist circa $2\mu m$ tief, wobei die Tiefe entlang der Fahrtrichtung des Indenters leicht variiert. Wird die Probe nach einer Indenterfahrt vollständig relaxiert, bildet sich eine charakteristische Oberflächentopographie aus, wie beispielsweise in Abbildung 4.26(b) dargestellt. Es sind die charakteristischen Gleitlinien aus den Schnittkanten von den vier Gleitebenen mit der Oberfläche zu erkennen.

### 4.2.5 Transportlänge

Im Kapitel 4.2.1 wurde beobachtet, dass abhängig von der Kristallorientierung und der Indenterfahrtrichtung Versetzungen unterschiedlich weit transportiert werden. Im Folgenden soll systematisch untersucht werden, wie die Orientierung der Gleitebene und die Orientierung des Burgersvektors die Transportlänge bestimmen. Bei diesen Simulationen werden Versetzungsquellen statistisch auf einer Gleitebenenfamilie im Versetzungsreservoir verteilt (Kap. 3.2). Wechselwirkungen mit Versetzungen von anderen Gleitebenen beeinflussen daher nicht die Transportlänge. Das Quergleiten von Versetzungen ist nicht zugelassen. Der Kontakt ist reibungslos. Abbildung 4.27 zeigt schematisch die Setups für die Messung der Transportlänge. Versetzungsquellen sind jeweils nur auf der eingezeichneten Gleitebenenfamilie verteilt. Diese Gleitebenen werden

sukzessiv verkippt. Für die Winkel $\alpha$ und die Winkel $\gamma$ werden je Verkippung zwei verschiedene kristallographische Orientierungen hinsichtlich der Orientierungen der Burgersvektoren auf der Gleitebene untersucht. Im ersten Fall wird, ausgehend von einer $xz$-Gleitebene parallel zur Oberfläche, die Gleitebene sukzessiv um die $z$-Achse mit dem Winkel $\alpha$ verkippt (Abb. 4.27(a)). Der Winkel $\alpha = 0°$ entspricht dem Setup 111 und dem Setup $111_{par}$, bei denen Versetzungsquellen nur auf den (111)-Gleitebenen verteilt sind. Ebenfalls untersucht wird die Verkippung einer $xy$-Gleitebene um die $y$-Achse mit dem Winkel $\beta$ (Abb. 4.27(b)). Der Winkel $\beta = 0°$ wird als Setup $121_{par}$ bezeichnet, bei dem eine Eindrucksrichtung in $[\overline{121}]$-Kristallrichtung und eine $[\overline{1}01]$-Indenterfahrtrichtung vorliegt. Versetzungsquellen befinden sich nur auf den $(\overline{1}1\overline{1})$-Gleitebenen. Als dritten Fall wird die Verkippung einer $xz$-Gleitebene um die $x$-Achse mit dem Winkel $\gamma$ (Abb. 4.27(c)) untersucht[1]. Der Winkel $\gamma = 0°$ entspricht dem Setup 111 und dem Setup $111_{par}$, bei denen Versetzungsquellen nur auf den (111)-Gleitebenen verteilt sind.




(a) Winkel $\alpha$ (b) Winkel $\beta$ (c) Winkel $\gamma$

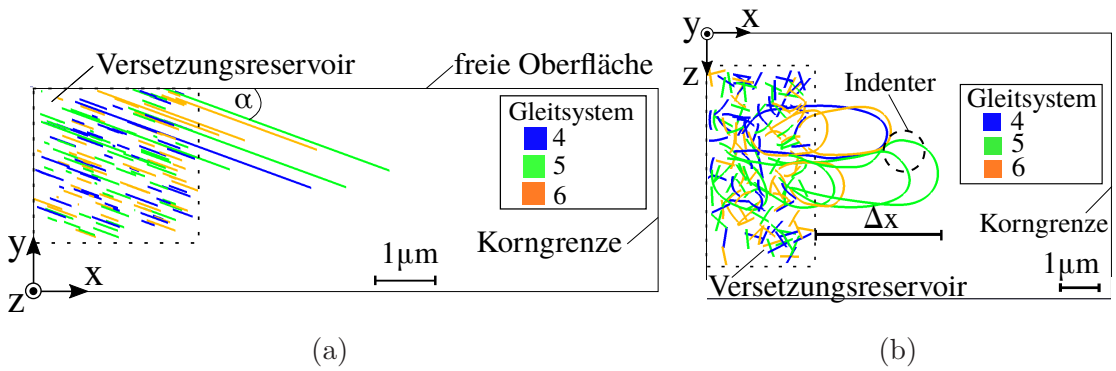
**Abb. 4.27:** Definition der Winkel $\alpha$, $\beta$ und $\gamma$ [103]

Abbildung 4.28 zeigt für $\alpha = -20°$ wie die Transportlänge $\Delta x$ anhand der transportierten Versetzungsstruktur bezüglich des Versetzungsreservoirs gemessen wird. Dabei entspricht $\alpha = 0°$ Setup 111 — der Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[01\overline{1}]$ von Gleitsystem 6 ist parallel zur $z$-Achse. Die Farbgebung in Abbildung 4.28 weicht von der Gleitsystem-Nomenklatur im Anhang B ab. Für die maximale Transportlänge $\Delta x$ je nach Gleitsystem, Gleitebenenverkippung und Burgersvektororientierung wird das Maximum aus je 30 statistisch äquivalenten Simulationen verwendet.

Abbildung 4.29 zeigt die maximal gemessene Transportlänge für verschiedene Gleitebenenorientierungen und Burgersvektororientierungen mit den Setups aus Abbildung 4.27. Sind die Winkel $\alpha$, $\beta$ und $\gamma$ Null, so werden alle Versetzungen bis an die Korngrenze transportiert — mit einer Ausnahme: Für alle Winkel $\beta$ werden Versetzungen mit einem Burgersvektor parallel zur Fahrtrichtung überhaupt nicht transportiert (Gleitsystem 10 in Abb. 4.29(b)). Werden die Gleitebenen um den Winkel $\alpha$ und $\beta$ sukzessiv verkippt, bleibt die Transportlänge zuerst konstant und wird dann kürzer (Abb. 4.29(a,b)). Dahingegen bleibt die Transportlänge für alle Winkel $\gamma$ konstant (Abb. 4.29(c)). Nur für Winkel $\gamma \in [\approx 70°..90°]$ werden Versetzungen mit einem Burgersvektor parallel zu der Fahrtrichtung des Indenters nicht mehr transportiert (Gleitsystem 4, Abb. 4.29(c)). Der Fall $\gamma = 90°$ entspricht dem Fall $\beta = 0°$.

Werden die Gleitebenen im mathematisch entgegengesetzten Sinn verkippt ($\alpha > 0°$, $\beta < 0°$), wird ein ähnlicher Zusammenhang zwischen der Transportlänge und den Winkeln $\alpha$ und $\beta$

[1] Im dreidimensionalem Raum sind maximal zwei Winkel der normierten Gleitebenennormalen voneinander unabhängig. Als spezielle Kombination aus $\alpha$ und $\beta$ wird der Winkel $\gamma$ trotzdem separat betrachtet.

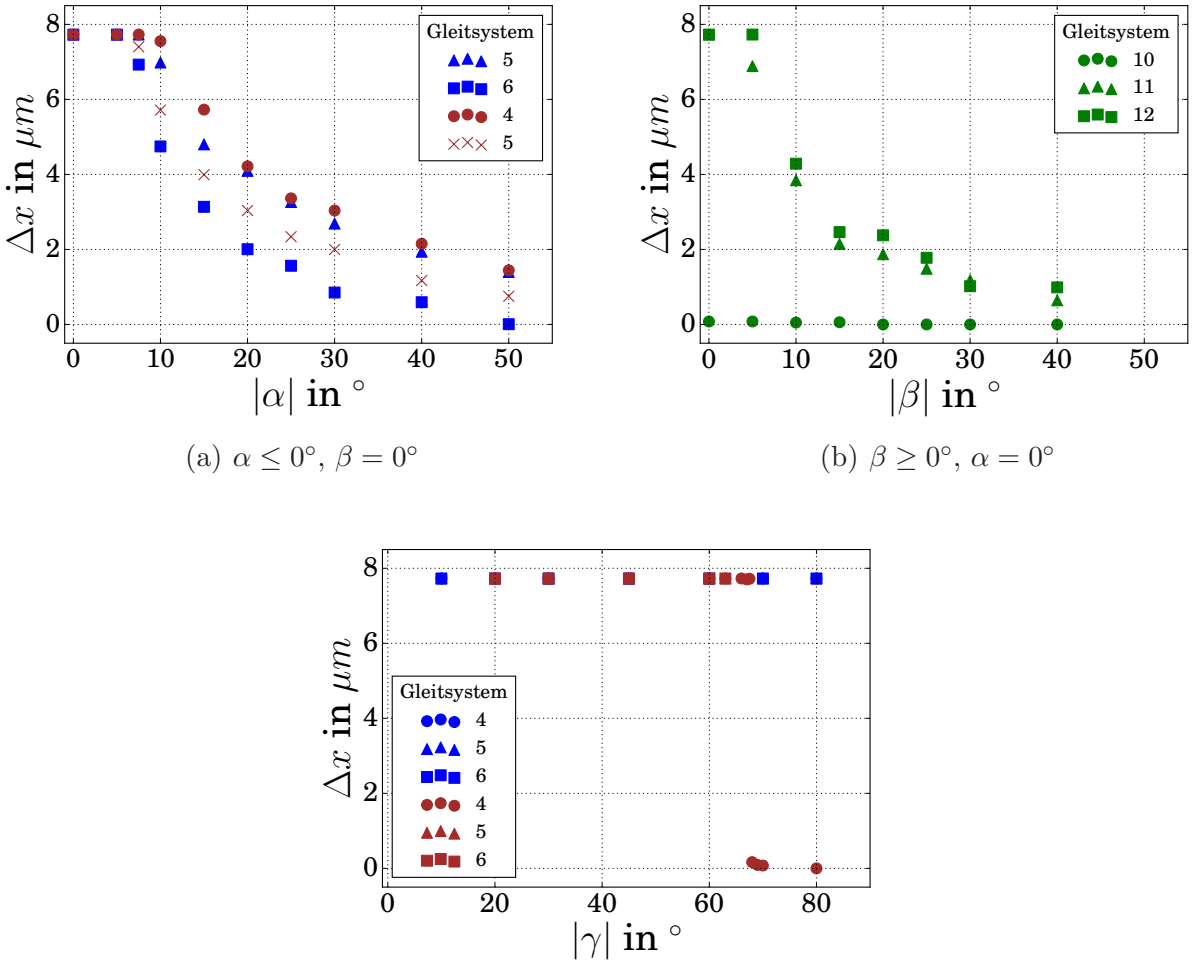



(a) (b)

**Abb. 4.28:** (a) Versetzungsstruktur für $\alpha = -20°$ (b) Aufsicht von (a). Indentergröße nicht proportional. [103]

gemessen (Abb. F1). Sind die Gleitebenen mit dem Winkel $\alpha > 0°$ in Richtung der Oberfläche verkippt, so ist die Transportlänge jedoch tendenziell kürzer im Vergleich zu $\alpha < 0°$ (Vergleich Abb. 4.29(a) und Abb. F1(a)).

Abbildung 4.29(a,b) ist zu entnehmen, dass sich für Gleitebenenverkippungen mit den Winkeln $\alpha$ oder $\beta$ die Transportlänge je nach Orientierung des Burgersvektors unterscheidet.




(a) $\alpha \leq 0°$, $\beta = 0°$

(b) $\beta \geq 0°$, $\alpha = 0°$

(c) $\gamma \leq 0°$

**Abb. 4.29:** Maximale Transportlänge $\Delta x$ (a) Blaue und rote Symbole beziehen sich auf Setup 111 und Setup $111_{par}$ und entsprechend geneigten Gleitebenen (b) Grüne Symbole beziehen sich auf Setup $121_{par}$ und entsprechend geneigten Gleitebenen (c) Blaue und rote Symbole beziehen sich auf Setup 111 und Setup $111_{par}$ und entsprechend geneigten Gleitebenen [103]

# 5 Diskussion

## 5.1 Bildungsmechanismus prismatischer Versetzungsstrukturen

Die Diskreten Versetzungsdynamik-Simulationen in Kapitel 4.1 zeigen, dass unter Indentierung aus einer Frank-Read-Quelle verschiedene Formen von prismatischen Versetzungsstrukturen entstehen. Die Versetzungsstrukturen entstehen durch mehrfache Quergleitprozesse an bestimmten Stellen im Kristall relativ zu der Indenterspitze. Das Spannungsfeld des Indenters, die Kristallographie des Metalls, der Burgersvektor der Versetzung und die Versetzungsinteraktionen bestimmen zusammen der Bildungsprozess. Der Bildungsprozess wird unter folgenden Fragestellungen diskutiert:

- Warum bilden sich deterministisch solch spezielle Versetzungsstrukturen aus?
- Warum ist die Größe der Versetzungsringe innerhalb von prismatischen Strukturen näherungsweise konstant?
- Was verursacht die unterschiedlichen Ausprägungen von prismatischen Strukturen?
- Wie ist die Stabilität des Ausbildungsmechanismus hinsichtlich Belastungsveränderungen und anfänglicher Versetzungsstruktur zu bewerten?

### 5.1.1 Kristallographie

Das Spannungsfeld des Indenters bestimmt — zusammen mit den Spannungsfeldern von anderen Versetzungen — das Gleiten von Versetzungen. Das deterministische Quergleiten, welches zur Bildung von prismatischen Versetzungen mit konstanter Größe führt, ist mit den Eigenschaften des Spannungsfeldes des Indenters und den starken Spannungsgradienten erklärbar. Die Kristallographie des Metalls und der Burgersvektor einer Versetzungsquelle spielen im Bildungsprozess prismatischer Versetzungsstrukturen eine übergeordnete Rolle. Sie bestimmen zusammen das aufgelöste Schubspannungsfeld[1] des Indenters und damit, ob sich eine prismatische Struktur ausbilden kann und legen zudem die Form der prismatischen Struktur fest. Für beliebige Kristallorientierung kann mit dem aufgelösten Schubspannungsfeld bzw. mit dem Verhältnis der involvierten Peach-Köhler-Kräfte auf den Gleitebenen eine mögliche Ausbildung von prismatischen Strukturen beurteilt werden. Die Kristallographie und die Burgersvektororientierung gehen über die Gleitebenennormale $\vec{n}$ und den Burgersvektor $\vec{b}$ in die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft $F_{PK} = (\overline{\sigma}\vec{n}) \cdot \vec{b}$ ein. In den Diskreten Versetzungsdynamik-Simulationen (DDD) in

[1] Mit „aufgelöster“ Schubspannung wird die Schubspannung bezeichnet, welche in der Gleitebene in Richtung des Burgersvektors wirkt und das Gleiten der Versetzung bestimmt.

Kapitel 4.1 kann das stochastische Quergleiten von Versetzungen nur dann erfolgen, wenn die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf der einen Gleitebene die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf der Quergleitebene um mindestens einen kritischen Wert übersteigt (Kap. 3.1). Ob Quergleiten zu erwarten ist, lässt sich mit der Größe

$$\frac{|F_{PK1}| - |F_{PK2}|}{\max\left(|F_{PK1,2}|\right)} \tag{5.1}$$

beurteilen. Die Größe in Gleichung (5.1) wird in dieser vorliegenden Arbeit für die Erklärung der Bildung von Versetzungsstrukturen in kubisch flächenzentrierten Kristallen verwendet. Es ist plausibel, dass analog auch prismatische Versetzungsstrukturen in kubisch raumzentrierten (Bsp. Ref. [56, 65]) oder hexagonalen (Bsp. Ref. [58, 66]) Gitterstrukturen erklärt werden können, da lediglich die Kristallographie und die Orientierung des Burgersvektors berücksichtigt werden muss.

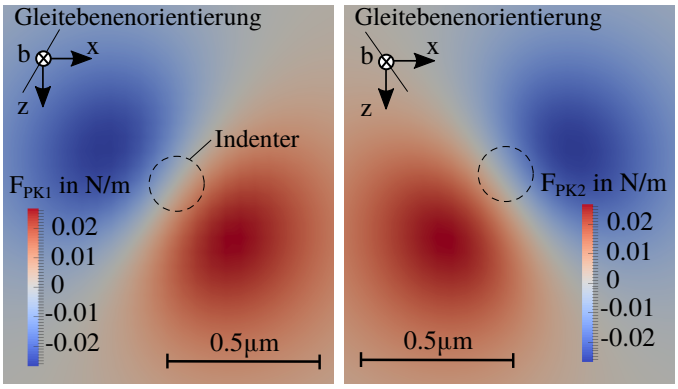
Je nach Kristallorientierung und Burgersvektororientierung der Versetzungsquelle bilden sich unter Indentierung in den DDD-Simulationen dieser Arbeit in einem kubisch flächenzentrierten Kristall perfekt prismatische Versetzungen (Kap. 4.1.1), helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen mit langen Segmenten (Kap. 4.1.2), v-förmige prismatische Versetzungen (Kap. 4.1.3) oder u-förmige prismatische Versetzungen (Kap. 4.1.4) aus. Das aufgelöste Schubspannungsfeld unterscheidet sich abhängig von Kristallographie und Burgersvektor der Versetzungsquelle in der Anzahl und Lage der Quergleitzonen. Im Allgemeinen ist ein asymmetrisches Spannungsfeld zu erwarten. Einen Sonderfall stellt das antisymmetrische Spannungsfeld bei Indentierung in ⟨110⟩-Richtung und einem parallelen Burgersvektor der Versetzungsquelle (Abb. 5.1) dar.

Im Folgenden werden die Bildungsmechanismen für helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen, v-förmige und u-förmige prismatische Versetzungen anhand des aufgelösten Spannungsfeldes erläutert.

**Perfekt prismatische Versetzungen** Unter Indentierung in ⟨110⟩-Richtung entstehen aus einer Versetzungsquelle mit einem Burgersvektor parallel zur Indentierungsrichtung perfekt prismatische Versetzungen (Kap. 4.1.1). Diese perfekt prismatischen Versetzungen entstehen durch Aktivierung der Versetzungsquelle, Gleiten der emittierten Versetzung, mehrfaches Quergleiten in geometrisch wohldefinierten Zonen und das Reagieren der Versetzung mit sich selbst (Abb. 4.1). Der Mechanismus ähnelt dem kürzlich beschrieben „Lasso-Mechanismus“ in Molekulardynamik-Simulationen [65]. Die Ursache dieser speziellen Versetzungsbewegung wurde in Referenz [65] nicht erklärt. Die vorliegende Arbeit zeigt, dass das Gleiten und deterministische Quergleiten der Versetzung mit dem Spannungsfeld des Indenters und mit der Annahme zum Quergleiten nach Gleichung 5.1 erklärt werden kann. Abbildung 5.1 zeigt für Indentierung in $[1\bar{1}0]$-Kristallrichtung und einen dazu parallelen Burgersvektor das Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft nach Gleichung (2.2) durch das Indenterspannungsfeld auf den zwei dazugehörigen Gleitebenenfamilien[2]. Die Projektion erfolgt auf eine Ebene normal zum Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[\bar{1}10]$ in einer Tiefe von $0.5\mu m$ zur Oberfläche. Ein bezüglich der Indentierungsachse

[2]Das Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft unterscheidet sich von dem aufgelösten Schubspannungsfeld lediglich in der Einheit. Die Peach-Köhler-Kraft erhält man durch Multiplikation der aufgelösten Schubspannung $\tau_a$ in der Gleitebene in Richtung des Burgersvektors mit dem Betrag des Burgersvektor $b$ mit $F_{PK} = \tau_a \cdot b$.

antisymmetrisches Feld der Peach-Köhler-Kraft liegt vor; mit je einem Minimum und Maximum auf beiden Seiten des Indenters. Die Peach-Köhler-Kraft in Abbildung 5.1 wirkt senkrecht auf die Versetzungslinien und ist eine Kraft pro Längeneinheit.




(a) (111)-Gleitebenen (b) $(\overline{1}11)$-Gleitebenen

**Abb. 5.1:** Aufgelöste Peach-Köhler-Kraft $F_{PK}$ aufgrund des Indenterspannungsfelds ($F = 186\mu N$). Indentergröße nicht proportional. [74]

Das stochastische Quergleiten einer Schraubenversetzung erfolgt in den DDD-Simulationen in Kapitel 4.1 nur, wenn die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft $F_{PK} = (\overline{\sigma}\vec{n}) \cdot \vec{b}$ auf der Quergleitebene die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf der ursprünglichen Gleitebene um mindestens 10% übersteigt. Abbildung 5.2 zeigt mit dem Verhältnis der aufgelösten Peach-Köhler-Kräfte nach Gleichung (5.1) die Bereiche, in welchen die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft der einen Gleitebenenfamilie die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf der anderen Gleitebenenfamilie übersteigt. Schematisch überlagert ist die Versetzungsstruktur aus Abbildung 4.1(f). Die Pfeile in Abbildung 5.2 zeigen ausgehend von der Versetzungsquelle die Gleitrichtung der Versetzung an, analog zu Abbildung 4.1. Quergleiten der Versetzung erfolgt innerhalb geometrisch wohldefinierten Übergangszonen — von einem Quadranten in den anderen. Aufgrund der in diesem Falle starken Spannungsgradienten erfolgt das Quergleiten deterministisch in räumlich kleinen Zonen. Mögliche Quergleitpunkte befinden sich auf der Schnittgeraden zwischen Gleitebene und Quergleitzone. Die Größe der prismatischen Versetzungen wird während des Entstehungsprozesses durch die relative Position von Versetzungsquelle und Indenterspitze bestimmt. Als Konsequenz emittiert eine Versetzungsquelle bei einer fixen (lateralen) Indenterposition Versetzungsringe mit etwa konstanter Größe. Umgekehrt sind prismatische Versetzungen mit gleicher Achse und gleicher Größe wahrscheinlich aus der selben Versetzungsquelle entstanden.

In Experimenten wurden rhombusförmige prismatische Versetzungen mit abgerundeten Ecken beobachtet [62]. In den DDD-Simulationen in Kapitel 4.1.1 wurden in einer Ecke des später rhombusförmigen Versetzungsrings mehrfache Quergleitprozesse beobachtet, welche zu einer eher „abgerundeten“ Form anstatt einer spitzen Form des Versetzungsrings führen (Abb. 4.3). Prinzipiell müssen sich bei dem Bildungsmechanismus die beiden quergeglittenen Versetzungsarme nicht exakt auf der selben Gleitebene zur Auslöschung treffen. Die Ecke des Rhombus kann auch durch mehrfache Quergleitprozesse — aufgrund der gegenseitigen Anziehung der entgegengesetzt orientierten Schraubenversetzungen — geschlossen werden. Diese Quergleitprozesse können daher der Grund für die abgerundeten Form der Versetzungsringe sein, welche experimentell beobachtet wurde.

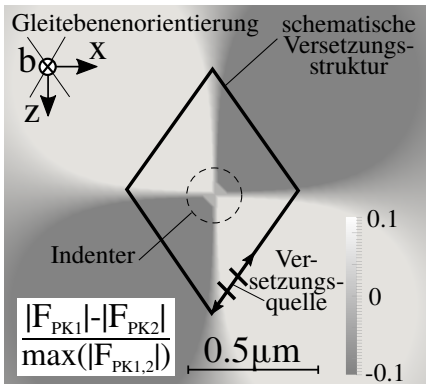
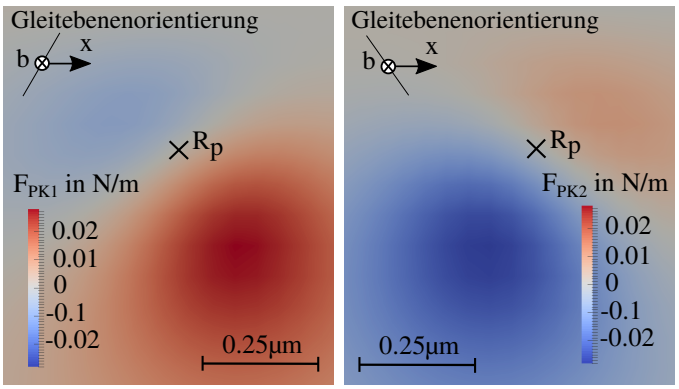



**Abb. 5.2:** Quergleitbereiche (nach Abb. 5.1). Indentergröße nicht proportional. [74]

Die prismatische Versetzung wird nahe der Quelle gebildet. Einmal gebildet, liegt die prismatische Versetzung in nahezu reiner Stufenorientierung vor und gleitet nicht mehr quer. Gleitet die prismatische Versetzung weiter in den Kristall von der Indenterspitze weg, so werden die Indenterspannungen geringer und die Form und Größe der prismatischen Versetzung bleibt erhalten. Nachfolgende prismatische Versetzungen stoßen sich aufgrund gleicher Linienorientierung ab, sodass die prismatischen Versetzungen weiter in den Kristall getrieben werden und Tiefen erreichen, in denen die Indenterspannung vernachlässigbar klein wird.

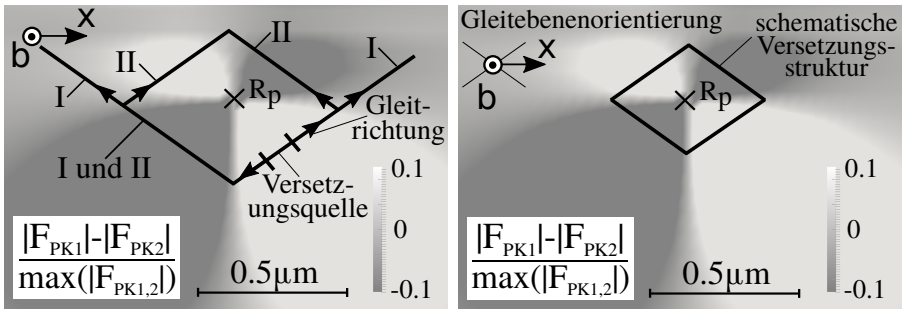
**Helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen** Die Diskreten Versetzungsdynamik-Simulationen in Kapitel 4.1.2 zeigen, dass helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen in einem asymmetrischen aufgelöstem Schubspannungsfeld bzw. asymmetrischen Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft entstehen. In Abbildung 5.3 ist ein solches asymmetrisches Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft dargestellt, welches bei Indentierung in [010]-Richtung (negative $y$-Richtung) und einem zur Oberfläche geneigten Burgersvektor $\frac{a}{2}[01\bar{1}]$ der Versetzungsquelle vorliegt. Die Projektion erfolgt auf eine Ebene normal zum Burgersvektor $\vec{b}$ im Abstand von $0.4\mu m$ von der Indenterspitze. Abbildung 5.4 zeigt mit dem Verhältnis der aufgelösten Peach-Köhler-Kräfte die Bereiche, in welchen die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf der einen Gleitebenenfamilie die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf anderen Gleitebenenfamilie übersteigt. Dieses Feld der Peach-Köhler-Kraft weist stellenweise kleinere Spannungsgradienten auf und damit größere Quergleitzonen, als im antisymmetrischen Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft in Abbildung 5.2. Im Quergleitbereich mit kleineren Spannungsgradienten spielen die Versetzungswechselwirkungen eine wichtigere Rolle und das Quergleiten ist stochastischer geprägt als im antisymmetrischen Feld der Peach-Köhler-Kraft. Die Quergleitzone in Abbildung 5.4 ist im mittleren, unteren Bereich schmaler, als die Quergleitzonen im linken und rechten mittleren Bereich in Abbildung 5.4. In Abbildung 5.4(a) sind schematisch die Versetzungen I und II eingezeichnet, welche beide aus der gleichen Versetzungsquelle entstanden sind. Im schmalen Quergleitbereich gleiten die Versetzungen stets quer (Versetzung I und II in Abb. 5.4(a), Vergleich mit Abb. 4.8(a)). Nur einmal quergeglittene Versetzungen bewirken die Entstehung von langen, geraden Versetzungssegmenten (Versetzung I in Abb. 5.4(a), Vergleich mit den langen Segmenten in Abb. 4.8(b)). Nachfolgende Versetzungen gleiten in den breiten Quergleitzonen einfacher quer, da die abstoßende Wechselwirkung Versetzungen gleicher Linienrichtung das Quergleiten begünstigt (Versetzung II in Abb. 5.4(a), Vergleich mit Abb. 4.8(b,c)). Die mehrfach quergeglittenen Versetzungsarme einer Versetzung „verpassen“ sich häufig — nur

selten entstehen perfekt prismatische Versetzungen (gestrichelter Pfeil in Abb. 4.8(c)). Stattdessen, treffen mehrfach quergeglittene Versetzungsarme zweier unterschiedlicher Versetzungen aufeinander, wodurch helixförmige prismatische Versetzungen entstehen (Abb. 4.8(b,c)). Die Versetzungsinteraktionen und das stochastische Quergleiten führen zu einer leicht variierender Größe der Versetzungsringe innerhalb der Versetzungsstruktur.




(a) (111)-Gleitebenen (b) $(1\bar{1}\bar{1})$-Gleitebenen

**Abb. 5.3:** Aufgelöste Peach-Köhler-Kraft $F_{PK}$ aufgrund des Indenterspannungsfelds $(F = 108\mu N)$ [74]



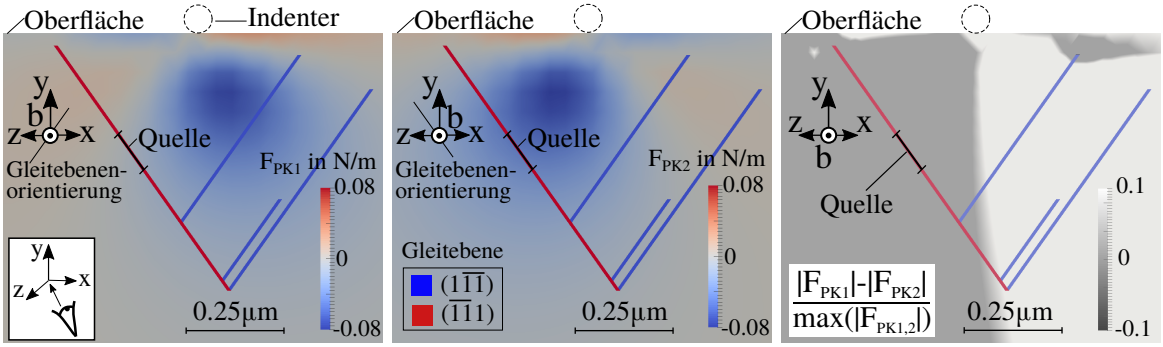

(a) (b)

**Abb. 5.4:** Quergleitbereiche (nach Abb. 5.3) (a) Helixförmige Versetzungsstruktur mit geraden Segmenten (b) Perfekt prismatische Versetzung [74]

Aber auch in einem asymmetrischen Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft können perfekt prismatische Versetzungsstrukturen entstehen: Nahe des Referenzpunktes $R_p$ in Abbildung 5.3 und Abbildung 5.4 ist das Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft quasi symmetrisch und die Quergleitzonen kleiner, sodass aus Versetzungsquellen nahe des Referenzpunktes perfekt prismatische Versetzungen durch deterministisches Quergleiten entstehen (Abb. 4.8(d), 5.4(b)).

Es sollte bemerkt werden, dass die Bildung prismatischer Versetzungsstrukturen während des Gleitens der Versetzungen erfolgt und nicht in einer diskreten Ebene — daher muss das Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft (z.B. Abb. 5.3) und die Quergleitzonen (z.B. Abb. 5.4) korrekterweise stets zusammen und zusätzlich über das Entstehungsvolumen der Versetzungsstruktur — über die Tiefe hinweg — gelesen werden.

**V-förmige prismatische Versetzungen** Die v-förmigen prismatischen Versetzungen in Abbildung 4.10 entstehen in einem Feld aufgelösten Peach-Köhler-Kraft, welches einmaliges Quergleiten bewirkt. Abbildung 5.5(a,b) zeigt das Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft, welches bei Indentierung in [010]-Kristallrichtung und einer Versetzungsquelle mit dem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[101]$ parallel zur Oberfläche vorliegt. Die Projektion erfolgt auf eine Ebene normal zu dem Burgersvektor im Abstand von $290m$ zur Indentierungsachse. Überlagert ist die Versetzungsstruktur aus Abbildung 4.10. In Abbildung 5.5(c) sind die Bereiche zu erkennen, in welchen die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf der einen Gleitebenenfamilie die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf der anderen Gleitebenenfamilie übersteigt. Der Vorzeichenwechsel im Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft nahe der Oberfläche rechts oben in Abbildung 5.5(c) verschwindet mit Abstand zur Indenterspitze und bewirkt, dass die Versetzungen nicht direkt an die Oberfläche gleiten und sich zeitweilig unterhalb der Oberfläche aufstauen. Erst mit Abstand zur Versetzungsquelle bzw. Indenterspitze gleiten die Versetzungen an die Oberfläche, wo sie sich in zwei v-förmige Versetzungen aufspalten (Abb. 4.10).




(a) (1$\overline{1}\overline{1}$)-Gleitebenen (b) ($\overline{1}\overline{1}$1)-Gleitebenen (c)

**Abb. 5.5:** (a,b) Aufgelöste Peach-Köhler-Kraft $F_{PK}$ aufgrund des Indenterspannungsfelds ($F = 223\mu N$). Projizierte Indentergröße nicht proportional. (c) Quergleitbereiche (nach (a,b))

In Molekulardynamik-Simulationen werden ähnliche v-förmige prismatische Versetzungsstrukturen beobachtet [67, 68]. Mit dem Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft in Abbildung 5.5 aufgrund des Indenterspannungsfelds kann die Bildung solcher v-förmigen prismatischen Versetzungsstrukturen erklärt werden. In Experimenten könnten die v-förmigen Versetzungen als Ätzgrübchen auf der Oberfläche sichtbar gemacht werden, die als Zweier-Paare ausgehend von der Indenterspitzenposition parallel zum Burgersvektor angeordnet sind.

**Versetzungsrosetten** In Experimenten wurden unter Indentierung auf {111}-Oberflächen Versetzungsrosetten beobachtet, deren sechs Arme sich in Richtung der drei Burgersvektoren parallel zu der Oberfläche erstrecken (Kap. 2.1). Für die entkoppelte Bildung der Rosettenarme spricht, dass (i) einzelne Rosettenarme fehlen können [76], (ii) die sechs Arme nicht gleich lang und breit sind [49, 51, 71], (iii) aber die Größe der Versetzungsringe innerhalb eines Armes konstant ist (Abb. 2.2). Die DDD-Simulationen in Kapitel 4.1.4 zeigen, dass aus einer oberflächennahen Versetzungsquelle eine Versetzungsstruktur gebildet wird, welche mit folgenden drei Eigenschaften einem einzelnen Arm einer Versetzungsrosette in Abbildung 2.2 ähnelt:

(i) Der (Rosetten-) Arm besteht aus u-förmigen prismatischen Versetzungen.

(ii) Der „Arm“ ist in Richtung des Burgersvektors relativ ausgedehnt.

(iii) Die u-förmigen Versetzungsringe haben innerhalb des Armes eine etwa konstante Größe.

Es ist plausibel, dass Versetzungsrosetten prinzipiell aus sechs separaten Versetzungsquellen mit dem in Kapitel 4.1.4 beobachteten Bildungsmechanismus entstehen können. Die Eigenschaften dieser Versetzungsquellen und die Versetzungswechselwirkungen von prismatischen Strukturen mit anderen Versetzungen — gegebenenfalls ebenfalls prismatischer Natur — werden in Kapitel 5.1.3 diskutiert.

Die Wechselwirkungen der Versetzungen innerhalb eines Rosettenarmes miteinander bewirken die relativ große Ausdehnung der prismatischen Versetzungsstruktur. Zuerst werden die u-förmigen prismatischen Versetzungen durch das Indenterspannungsfeld abgestoßen, bis bei größeren Entfernungen das Spannungsfeld des Indenters kleiner wird und die abstoßende Wirkung zwischen Versetzungen gleicher Linienorientierung auf etwa gleicher Gleitebene zum Tragen kommt. Diese abstoßende Wirkung der Versetzungen untereinander bewirkt folgende drei Eigenschaften:

(i) Die Rosettenarme weisen eine relativ große Ausdehnung auf.

(ii) Die Struktur breitet sich bei Entlastung weiter aus.

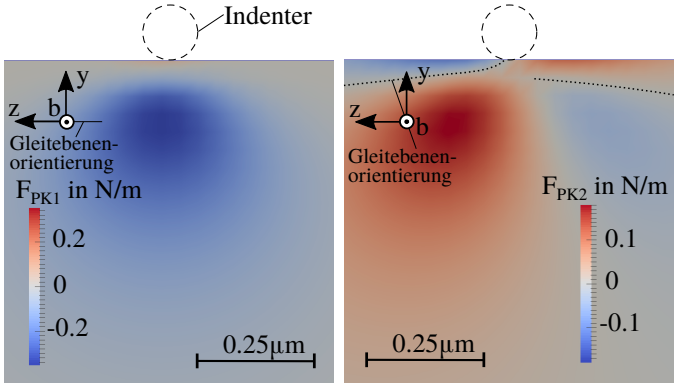
(iii) Bei Entlastung ist die Struktur relativ stabil.

Die Ausbildung dieser spezielle Versetzungsstruktur kann analog zu den Ausbildung anderer prismatischer Strukturen mit Hilfe des Spannungsfeldes erklärt werden. Das Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft bei Indentierung in $[\overline{1}\overline{1}1]$-Richtung (negative $y$-Richtung) und für den Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[\overline{1}01]$ parallel zur Oberfläche ist in Abbildung 5.6 dargestellt. Die Projektion erfolgt auf eine Ebene normal zum Burgersvektor $\vec{b}$ im Abstand von $0.24\mu m$ zur Indentierungsachse. Das Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft ist für die (111)-Gleitebenenfamilie auf einer Seite des Indenters (entlang der $x$-Achse) mit einem Vorzeichenwechsel entlang der Indentierungsachse gekennzeichnet (Abb. 5.6(a)). Das Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft der $(\overline{1}1\overline{1})$-Gleitebenenfamilie auf einer Seite des Indenters (entlang der $x$-Achse) weist einen Vorzeichenwechsel entlang der Tiefe und einen Vorzeichenwechsel entlang der $z$-Achse auf (Abb. 5.6(b)). Die Lage des Vorzeichenwechsels (entlang der $y$-Achse) auf beiden Gleitebenenfamilien verschiebt sich mit Entfernung von der Indenterspitze in die Tiefe[34]. Wird eine Versetzungsquelle auf einer (111)-Gleitebene aktiviert, so gleiten emittierte Versetzungen unter stochastischen Schwankungen an zwei Stellen bzw. innerhalb zweier Bereiche quer (Pfeile in Abb. 4.12(a)). Als Konsequenz emittiert die Quelle eine quasi konstante Größe der Versetzungsringe. Je nach Tiefe der Gleitebene der Versetzungsquelle, relativ zu der lokalen Tiefe des Vorzeichenwechsels auf den $(\overline{1}1\overline{1})$-Gleitebenen entlang der $y$-Richtung in Abbildung 5.6(b) kommt es zu zwei Szenarien: Befindet sich die Versetzungsquelle auf einer (111)-Gleitebene unterhalb des Vorzeichenwechsels auf den $(\overline{1}1\overline{1})$-Gleitebenen, so stauen sich die quergeglittenen Versetzungsarme auf $(\overline{1}1\overline{1})$-Gleitebenen an diesem Vorzeichenwechsel auf und geschlossene prismatische Versetzungen entstehen (Abb. 4.5). Befindet sich die Versetzungsquelle oberhalb des

[3] Sichtbar wird dieser Vorzeichenwechsel im Spannungsfeld durch das Ändern des „Kippwinkels“ von prismatischen Versetzungen je nach Abstand zu dem Indenter in Abbildung 4.6.

[4] Zusätzlich weisen beide Felder einen Vorzeichenwechsel entlang der $x$-Achse auf.

Vorzeichenwechsels, erreichen die quergeglittenen Versetzungsarme die Oberfläche und bilden u-förmige prismatische Versetzungen aus (Abb. 4.12)[5].




(a) (111)-Gleitebenen (b) $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebenen

**Abb. 5.6:** Aufgelöste Peach-Köhler-Kraft $F_{PK}$ aufgrund des Indenterspannungsfeld ($F = 793\mu N$). Indentergröße nicht proportional. [74]

Die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft im globalen Koordinatensystem für die Gleitebenennormale $\vec{n} = (0, n_2, n_3)$ (im Kristallkoordinatensystem ist dies die $(\bar{1}1\bar{1})$-Gleitebene) und für den Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[1, 0, 0]$ (im Kristallkoordinatensystem ist dies der Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[\bar{1}01]$) beträgt

$$F_{PK} = (\overline{\sigma}\vec{n}) \cdot \vec{b} = \frac{a}{2}\left(\sigma_{xy} n_2 + \sigma_{xz} n_3\right) \tag{5.2}$$

Der Versetzungsaufstau im Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft wird durch den Vorzeichenwechsel in der — bei Indentierung in $y$-Richtung — $\sigma_{xz}$-Komponente über der Tiefe verursacht. In Abbildung A5 und Abbildung A6 im Anhang ist der Vorzeichenwechsel dargestellt. Es ist denkbar, dass dieser Vorzeichenwechsel in tribologischen Kontakten einen Versetzungsaufstau bewirken kann. Die Tiefe der Vorzeichenwechsels ist abhängig von der Querkontraktionszahl — der Vorzeichenwechsel verschiebt sich mit größerer Querkontraktionszahl zur Oberfläche hin und verschwindet für inkompressible Materialien (siehe analytische Lösung des Spannungsfeldes im Hertzschen Kontakt in Ref. [102]). Solch ein Vorzeichenwechsel im Spannungsfeld wird in Referenz [27] als Ursache für die Bildung eines planaren Versetzungsnetzwerkes oder einer planaren Schicht aus Versetzungen in einem tribologischen Kontakt vermutet.

### 5.1.2 Belastungsveränderungen

**Stabilität des Bildungsmechanismus unter lateraler Bewegung des Indenters** Der Bildungsmechanismus perfekt prismatischer Versetzungen in Kapitel 4.1.1 ist gegenüber lateralen Verschiebungen der Indenterspitze relativ stabil — wenn auch unter Größenänderung der prismatischen Versetzungen. Im Prinzip sind eine sich eine lateral bewegende Indenterspitze und eine feste Position der Versetzungsquelle mit einer festen Indenterspitze und variierenden

[5] Die beiden Versetzungsquellen liegen zwar in unterschiedlichen Tiefen im Kristall, aber im gleichen Vorzeichenwechselbereich der (111)-Gleitebenenfamilie wie in Abbildung 5.6(a).

Positionen der Versetzungsquelle identisch. Daher spricht die Stabilität des Bildungsmechanismus unter lateraler Bewegung der Indenterspitze dafür, dass die Position der Versetzungsquelle für den Bildungsmechanismus prismatischer Versetzungsstrukturen eine untergeordnete Rolle spielt.

Rasterkraftmikroskope werden nicht nur für das Abrastern von Oberflächen verwendet, sondern auch für Nanoindentierungs- und Kratz-Experimente [7, 62]. Dabei wird die Kraft über eine Indenterspitze aufgebracht, die an einem einseitig eingespannten Träger befestigt ist [7, 62]. Verschiebt sich die Indenterspitze — z.B. durch Kombination aus Indentieren-Entlasten-Indentieren oder durch Kratzen — so ändert sich die relative Position der Indenterspitze und der Versetzungsquelle im Kristall. Die DDD-Simulationen in Abbildung 4.4 zeigen, dass die laterale Bewegung des Indenters zu einer Änderung der Größe der Versetzungsringe führt. Dabei bestimmt bei fester Quellposition die Fahrtrichtung der Indenterspitze auf der Oberfläche, ob die Größe der Versetzungsringe zu- oder abnimmt: Angelehnt an Abbildung 5.2, zeigt Abbildung 5.7 schematisch, wie sich die Quergleitzonen durch die Bewegung des Indenters verschieben. Bewegt sich der Indenter in Abbildung 5.7 in negative $x$-Richtung bzw. positive $x$-Richtung, so gleiten Versetzungen bei dieser spezifischen Position der Versetzungsquelle zu einem späteren bzw. früheren Zeitpunkt quer und es entstehen größere bzw. kleinere prismatische Versetzungen. Fährt die Indenterspitze beim Kratzen mit einer konstanten Geschwindigkeit (unidirektional) über die Oberfläche des Kristalls, so vergrößert oder verkleinert sich dabei die Größe der prismatischen Versetzungen aus einer Versetzungsquelle stetig. Die relative Position von Versetzungsquelle zu der Indenterspitze und die Fahrtrichtung bestimmt, ob die Versetzungsringe dabei größer oder kleiner werden. Diese Überlegungen lassen sich besonders einfach für das symmetrische Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft bei Indentierung parallel zu dem Burgersvektor einer Versetzungsquelle in Abbildung 5.7 nachvollziehen; lassen sich jedoch auch auf andere Felder wie z.B. in Abbildung 5.4 und Abbildung 5.5(c) übertragen. Ein Sonderfall liegt bei den v-förmigen prismatischen Versetzungen vor: Nur eine Verschiebung der Indenterspitze auf der Oberfläche und senkrecht zu dem Burgersvektor führt zu einer Größenänderung der prismatischen Versetzungsringe aus einer Versetzungsquelle. Eine Verschiebung des Indenters auf der Oberfläche und parallel zu dem Burgersvektor verändert die Spannung auf die Versetzungsquelle; sie verändert jedoch nicht die relative Lage der Quergleitzonen in Abbildung 5.5 zu der Versetzungsquelle.

Beim Kratzen ist die Bildung von prismatischen Versetzungen aus einer einzelnen Versetzungsquelle nur für begrenzte Zeitspannen zu erwarten: Eine Versetzungsquelle emittiert nur in dem Zeitraum Versetzungen, in welchem ihre kritische Aktivierungsspannung erreicht wird. Mit größeren Entfernungen des Indenters zu einer Versetzungsquelle wird die kritische Aktivierungsspannung der Versetzungsquelle unterschritten und die Versetzungsquelle wird nicht mehr aktiviert. Dies bedeutet aber auch, dass die Bildung einer prismatischen Versetzung nur bei geeignet kleiner Indentergeschwindigkeit zu erwarten ist. In den DDD-Simulationen wurde die Bildung von prismatischen Versetzungen bei einer lateralen Indentergeschwindigkeit von $0.5m/s$ beobachtet (Kapitel 4.1.1).

Die perfekt prismatischen Versetzungen, die unter Indentierung in $\langle 110 \rangle$-Richtung entstehen, gleiten in Richtung des Burgersvektors in die Tiefe des Kristalls und gleiten nicht in Richtung der lateralen Indenterbewegung mit (siehe Abb. 4.4) — sie werden also nicht mittransportiert. Es ist jedoch durchaus denkbar, dass andere Versetzungen mit dem Spannungsfeld des Indenters mitgleiten — z.B. vor der Indenterspitze her getrieben werden. Die Voraussetzungen für diesen Versetzungstransport mit der Indenterspitze werden in Kapitel 5.2 diskutiert.

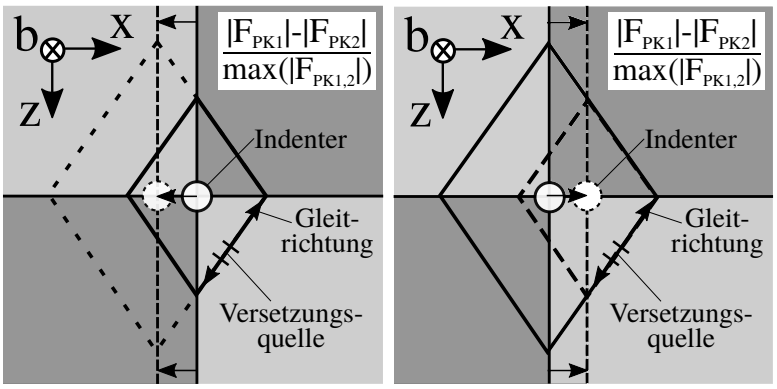



**Abb. 5.7:** Verschiebung der „Quergleitlinien“ durch laterale Bewegung des Indenters —— Ursprüngliche Versetzungsstruktur - - - Versetzungsstruktur für verschobene Indenterspitzenposition

**Stabilität des Bildungsmechanismus unter Lastveränderungen** In Experimenten und Simulationen werden unterschiedliche Indenterradien, Startkräfte und Kraftraten verwendet; auch kann es in Experimenten beim Ansteuern der Normalkraft mittels Piezoelement zur Über- oder Untersteuerung kommen. Daher stellt sich die Frage, wie die Stabilität des Bildungsprozesses bei Lastveränderungen zu beurteilen ist.

In einem symmetrischen Feld der aufgelösten Peach-Köhler-Kraft wie in Abbildung 5.2 beeinflussen Indenterkraft und -radius die Minimal- und Maximalwerte der Spannungen, jedoch nicht das Verhältnis der Spannungen auf den beiden Gleitebenenfamilien. Folglich ändern sich für ein symmetrisches Kraftfeld die Lage der Quergleitzonen in Abbildung 5.2 nicht und die Größe der perfekt prismatischen Versetzungen bleibt folglich über einen Lastbereich konstant. Dies ist beispielsweise in Abbildung 4.1(e) zu erkennen.

Versetzungsquellen werden jedoch nur in einem Bereich im Kristall aktiviert, in welchem die kritische Aktivierungsspannung erreicht wird. Indenterkraft und -radius beeinflussen die Lage und Form dieses Bereiches, da sie die maximalen Spannungen und die Form des Spannungsfeldes bestimmen. Im Hertzschen Kontakt ist der Kontaktradius $r_k$ nach Gleichung 3.5 proportional zu der dritten Wurzel aus Indenterkraft $F$ und Indenterradius $R$. Mit größerem Kontaktradius sind die Höhenlinien gleicher Spannungen breiter und die maximalen Spannungen treten tiefer im Kristall auf. Der Verlauf der maximalen Schubspannung $\tau_{max} = \frac{1}{2}|\sigma_{yy} - \sigma_{xx}|$ und der Verlauf Normalspannungen $\sigma_{xx} = \sigma_{zz}$ und $\sigma_{yy}$ entlang der Indentierungsachse ist in Abbildung 5.8 dargestellt. Die Spannungen sind auf den maximalen Druck $p_{max}$ und die Koordinatenachse auf den Kontaktradius $r_k$ normiert. Die analytischen Spannungen werden nach Referenz [105] berechnet. Die maximale Schubspannung tritt für eine Querkontraktionszahl $\nu = 0.347$ (Wert für Aluminium, Kap. 3.2) etwa in der Tiefe des halben Kontaktradius auf (Abb. 5.8).

Abbildung 5.9 zeigt die auf den maximalen Druck $p_{max}$ normierte Mises-Vergleichsspannung unterhalb der Indenterspitze für Indentierung parallel zu der $y$-Achse und für eine Querkontraktionszahl $\nu = 0.347$. Die Mises-Vergleichsspannung wird nach der analytische Lösung in einem Hertzschen Kontakt nach Referenz [102] berechnet. Der maximale Druck $p_{max}$ im Hertzschen Kontakt ist nach Gleichung 3.6 proportional zu der Indenterkraft $F$ und invers proportional

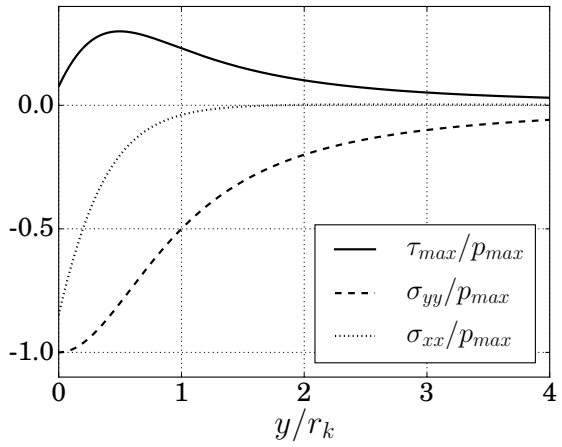



**Abb. 5.8:** Verlauf der maximalen Schubspannung $\tau_{max}$ und der Normalspannungen $\sigma_{xx} = \sigma_{zz}$ und $\sigma_{yy}$ entlang der Indentierungsachse $y$ ($x = z = 0$)

zu dem Kontaktradius $r_k$ im Quadrat. Wird der maximale Druck kleiner, so ist die Mises-Vergleichsspannung in gleicher Tiefe im Kristall kleiner. Mit größerer Indenterkraft wird unter konstantem Indenterradius sowohl der Kontaktradius als auch der maximale Druck größer; mit größerem Indenterradius wird unter konstanter Indenterkraft der Kontaktradius größer und der maximale Druck kleiner. Lastveränderungen können daher bewirken, dass einzelne Versetzungsquellen, welche bereits vor der Indentierung existieren, nicht mehr aktiviert werden oder auch mit einer höheren Rate aktiviert werden.

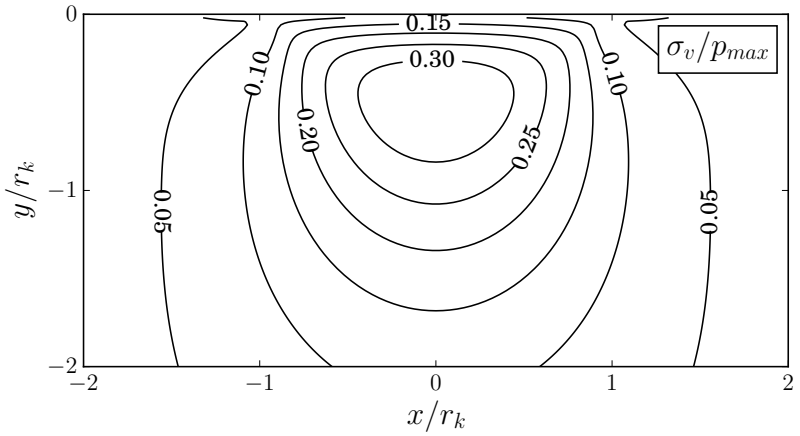


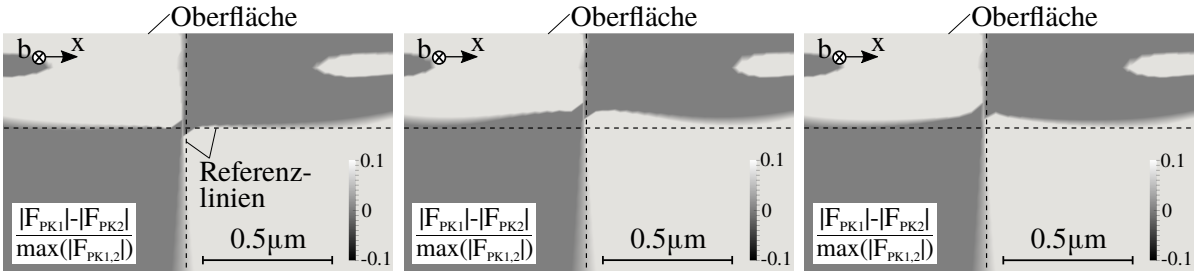

**Abb. 5.9:** Normierte Mises-Vergleichsspannung $\sigma_v$ unterhalb der Indenterspitze ($z = 0$)

Ist das Spannungsfeld, bei gleichen Spannungs-Höhenlinien, räumlich ausgedehnter, so steigt die Wahrscheinlichkeit, dass mehrere Versetzungsquellen im Kristall aktiviert werden. Die Versetzungsquelle bzw. deren prismatische Versetzungsstruktur wird daher bei höheren Spannungen und, bei gleichen Spannungs-Höhenlinien, räumlich ausgedehnten Spannungsfeldern eher mit anderen Versetzungen wechselwirken. Die Auswirkung von Versetzungen im Kristall auf den Bildungsmechanismus prismatischer Versetzungsstrukturen wird in Kapitel 5.1.3 diskutiert.

Wie schon diskutiert handelt es sich bei der Bildung der prismatischen Versetzungen um einen zeitlichen Prozess. In ersten DDD-Simulationen in Kapitel 4.1.1 wird beobachtet, dass die

Kraftrate den Bildungsprozess prismatischer Versetzung beeinflussen kann. In den Simulationen mit Indentierung in [110]-Richtung und einer Versetzungsquelle mit einem dazu parallelen Burgersvektor entstehen perfekt prismatische Versetzungen. Wird die Kraftrate erhöht, so ist eine Tendenz zu helixförmigen prismatischen Versetzungen zu beobachten. Die Versetzungsquelle wird in diesen Simulationen mit höherer Kraftrate wieder aktiviert, bevor die davor emittierte Versetzung den Bildungsprozess zur perfekten prismatischen Versetzung abgeschlossen hat. Die neu emittierte Versetzung wechselwirkt mit der bzw. den davor emittierten Versetzung(en). Die separate Ausbildung von perfekt prismatischen Versetzungen ist dann nicht mehr zwingend gegeben, was sich in diesem Fall in einer Tendenz zur Bildung von helixförmigen prismatischen Versetzungen bemerkbar macht.

Die Überlegungen für ein antisymmetrisches Kraftfeld lassen sich weitgehend auch auf ein asymmetrisches Kraftfeld übertragen. Bei einem asymmetrischen Kraftfeld verschieben sich jedoch zusätzlich bei Belastungsänderungen (Indenterkraft und Indenterradius) die Quergleitlinien. Dadurch kann sich die Größe der prismatischen Strukturen verändern (Vergleich Abb. 4.8(b,c) mit Abb. 4.9). Die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft ist eine Kombination aus unterschiedlich gewichteten Spannungskomponenten des Spannungsfeldes durch den Indenter. Abbildung 5.10 zeigt beispielhaft die unterschiedliche Lage der Quergleitbereiche bei verschiedene Lastfällen für Indentierung in [010]-Kristallrichtung und einen Burgersvektor $b = \frac{a}{2}[01\bar{1}]$ (analog zu Abb. 4.8). Die Projektion erfolgt auf eine Ebene normal zu der Burgersvektorrichtung durch einen Punkt in einem Abstand von $4\mu m$ zur Indenterspitze. Es ist zu erkennen, dass sich bei Lastveränderungen die Quergleitlinien tendenziell verschieben. Die charakteristische Geometrie der Quergleitbereiche in Abbildung 5.10 bleibt jedoch erhalten. Die Ausbildung prismatischer Versetzungsstrukturen ist folglich nicht an einen speziellen Indenterradius und eine spezielle Indenterkraft gekoppelt. Die Position der Versetzungsquelle und das Spannungsfeld müssen lediglich geeignet sein. Für diese Hypothese spricht, dass prismatische Versetzungsstrukturen in Experimenten [49, 62, 69] oder Simulationen [53, 65, 66, 68, 77] auch unter verschiedenen Indenterkräften und Indenterradien beobachtet werden.




(a) $F = 300\mu N$, $R = 1\mu m$ (b) $F = 300\mu N$, $R = 8\mu m$ (c) $F = 1200\mu N$, $R = 1\mu m$

**Abb. 5.10:** Bereiche, in denen die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf der einen Gleitebenenfamilie die aufgelöste Peach-Köhler-Kraft auf der anderen Gleitebenenfamilie übersteigt

**Stabilität des Bildungsmechanismus für verschiedene Indentergeometrien** In den Diskrete Versetzungsdynamik-Simulationen in Kapitel 4.1 wurde eine sphärische Indenterspitze verwendet. Es stellt sich die Frage, ob sich prismatische Versetzungsstrukturen auch unter anderen Indentergeometrien ausbilden können. Die lokalen Deformationen unterhalb des Kontakts

hängt von der Geometrie der Indenterspitze ab [106]. Je größer der Abstand zu der Krafteinleitungsstelle ist, desto weniger wichtig wird die Art der Krafteinleitung und die Spannungsfelder bei unterschiedlicher Krafteinleitung — durch unterschiedliche Indentergeometrien — werden in größerer Entfernung immer ähnlicher (Prinzip von St. Venant) [106, 107]. Die prismatischen Versetzungsstrukturen in den DDD-Simulationen in Kapitel 4.1 bilden sich jedoch nahe der Indenterspitze und nahe der Oberfläche aus. Unterschiedliche Indentergeometrien führen zu unterschiedlichen Druckverteilungen auf der Oberfläche. Abbildung 5.11 zeigt die Druckverläufe für eine sphärische Form, eine spitze kegelförmige Form und eine zylindrische Indenterspitzenform. Die zugehörigen Gleichungen wurden Referenz [106] entnommen. Die Spannungskomponente $\sigma_{yy}$ ist auf den mittleren Kontaktdruck $p_m$ normiert, welcher durch das Verhältnis von Indenterkraft $F$ zu projizierter Kontaktfläche gegeben ist [106]. Für eine sphärische oder zylindrische Indenterspitze gilt $p_m = F/\left(\pi r_k^2\right)$ [106]. Bei der kegelförmigen Indenterspitze hängt der mittlere Kontaktdruck nur von dem Kegel-Halbwinkel $\alpha$ ab, ist daher unabhängig von der Indenterkraft und lautet $p_m = E/\left(2\tan\left(\alpha\right)\left(1-\nu\right)\right)$ [106]. Es ist zu erkennen, dass die Druckverläufe aufgrund sphärischer und kegelförmiger Indenterspitze ähnlich verlaufen und am Rand der Kontaktfläche Null werden. Im Unterschied ergeben sich für einen Kegel logarithmische Druckverläufe an der Oberfläche, welche unter der Indenterspitze singulär werden [101, 105]. Bei einer flachen zylindrischen Indenterspitze führt die scharfe Kante zu singulären Spannungen am Rand des Zylinders [106].

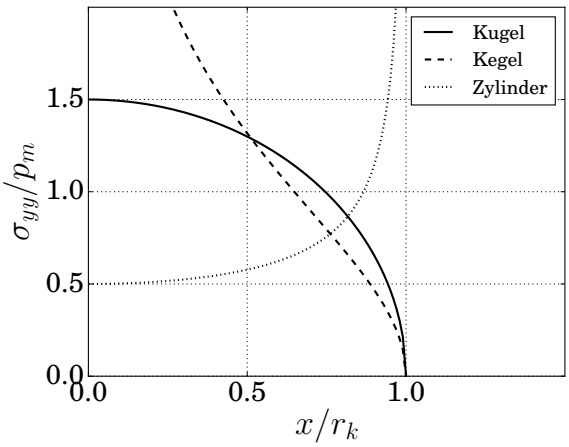



**Abb. 5.11:** Druckverteilung $\sigma_{yy}$ auf der Oberfläche für verschiedene Indentergeometrien, normiert auf den mittleren Druck $p_m$

In Nanoindentierungs-Experimenten werden meist Indenter sphärischer Form oder pyramidialer Form — Berkovich, Vickers, Knoop oder CubeCorner — verwendet [107]. Es hat sich etabliert, pyramidische Indenter bei der Analyse von Nanoindentierungs-Experimenten als spitz zulaufenden kegelförmige Indenter zu betrachten. Hierfür wird ein äquivalenter Kegelwinkel berechnet, sodass sich eine gleiche Kontaktfläche-Tiefen-Beziehung für die Indentierung ergeben würde [107]. Für Berkovich und Vickers Indenter beträgt dieser äquivalente Kegel-Halbwinkel $\alpha = 70.3°$ [107]. Auch wenn es Kontaktlösungen für pyramidische Indenter gibt, so wird die Konversion generell durchgeführt [107].

Die Form reale Indenterspitzen weicht im Experiment von der idealen Form ab [107]. Beispielsweise weisen Berkovich-Indenter in der Realität eine verrundete Spitze mit einem Radius in der Größenordnung von $100nm$ auf [107]. Neu- und hochwertige Spitzen können auch anfänglich

kleinere Radien aufweisen. Abbildung 5.12 zeigt schematisch die Geometrie einer sphärischen Indenterspitze mit dem Radius $R$, die Geometrie einer konischen Indenterspitze mit dem Halbwinkel $\alpha$ und die Tiefe $u_t$, bis zu der ein reiner Kugelkontakt vorliegt. Aus reinen geometrischen Beziehungen ergibt sich

$$\sin\alpha = \frac{R - u_t}{R} \tag{5.3}$$

und aus daraus

$$u_t = R\,(1 - \sin\alpha) \tag{5.4}$$

Für eine konische Indenterspitze mit dem Halbwinkel $\alpha = 70.3°$, dem äquivalente Kegelwinkel für Berkovich- und Vickers-Indenter, ergibt sich ein Verhältnis von $u_t/R \approx 0.06$. Für kleine Verhältnisse von Eindringtiefe $u_t$ zu Indenterradius $R$ im Bereich $u_t/R < 0.06$ kann der Kontakt als Kugelkontakt gesehen werden, für Verhältnisse $u_t/R \gg 0.06$ als spitzer Kontakt [107]. Im Bereich dazwischen liegt ein Bereich vor, indem die Spitzenform eine Mischung aus Kugel und Kegel ist [107]. Als Abschätzung ergibt sich für eine verrundete Berkovich- oder Vickers-Indenterspitze mit dem Radius $R = 100nm$ ein rein sphärischer Kontakt bis zu einer elastischen Eindringtiefe $u_t \approx 6nm$, bis anschließend der Übergangsbereich mit gemischter Spitzenform einsetzt.

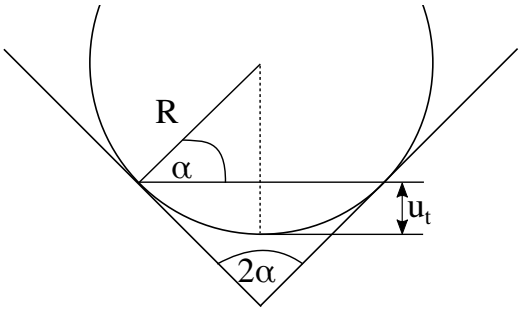



**Abb. 5.12:** Sphärische und kegelförmige Indenterspitze und mit Übergangstiefe $u_t$. Angelehnt an Ref. [107]

Für größere Indentierungstiefen können die Verläufe der Spannungsfelder unter den Indenterspitzen verglichen werden. Die Spannungsfelder in Referenz [107] von von sphärischer Indenterspitze und kegelförmiger Indenterspitze verlaufen ähnlich; auch im Bereich direkt unter der Indenterspitze.

Details in der Ausbildung prismatischer Versetzungsstrukturen unter verschiedenen Indentergeometrien lassen sich mit nur weiterer Untersuchung mit verschiedenen Indenterspitzen klären — unter Betrachtung der aufgelösten Schubspannung auf den Gleitebenen in Richtung des Burgersvektors und damit unter Betrachtung der Quergleitzonen. In Referenz [62] wurden unter Indentierung mit einer drei-seitigen Diamantspitze in Nickel — mit einem Spitzenwinkel von circa 95°, einer Indenterkraft von circa $50\mu N$ und einer Spitzenrundung $R < 50nm$ — prismatische Versetzungsstrukturen beobachtet und die Rolle der Indentergeometrie gegenüber der Kristallographie als weniger wichtig eingestuft. Die Ergebnisse in Ref. [62] liefern einen Hinweis darauf, dass die Ausbildung prismatischer Versetzungsstrukturen auch unter Indenterspitzen anderer Form als des sphärischen Indenters möglich ist.

**Oberflächenrauigkeit — Benachbarte Asperitäten** Bisher wurde die Bildung von prismatischen Strukturen unter einer einzelnen Asperität betrachtet. In Reibkontakten haben beide Kontaktflächen eine Oberflächenrauigkeit, welche für theoretische Betrachtungen auf einen Kontaktpartner abgebildet werden kann. Der Abstand dieser Asperitäten ist für die Ausbildung prismatischer Strukturen relevant. Bei großen Abständen sind die Spannungsfelder durch eindrückende Asperitäten räumlich voneinander getrennt und es können sich an separaten Stellen prismatische Strukturen ausbilden oder allgemeiner Versetzungen entstehen und gleiten. Die Wechselwirkung prismatischer Versetzungsstrukturen miteinander bzw. generell mit anderen Versetzungen wird in Kapitel 5.1.3 diskutiert. Wird der Abstand zwischen Asperitäten verringert, überlagern sich die Spannungsfelder durch die eindrückenden Asperitäten und das aufgelöste Schubspannungsfeld mit den Quergleitzonen muss neu beurteilt werden. Im theoretischen Extremfall fallen die Asperitäten zusammen, sodass sie wieder als eine einzelne Asperität angesehen werden können.

### 5.1.3 Anfängliche Versetzungsstruktur

**Typ der Versetzungsquelle** Prismatische Versetzungsstrukturen können aus unterschiedlichen Versetzungsquellen entstehen, wie z.B. aus Frank-Read-Quellen [74], durch eine Versetzung mit dem „Lasso-Mechanismus“ [56, 58, 65, 66], aus einem Versetzungsnetzwerk [48, 66, 77] oder als Reaktionsprodukt von nukleierten Versetzungen [48, 57, 63, 77, 78].

Der beobachtete Bildungsmechanismus mit Frank-Read-Quellen in Kapitel 4.1 ist gegenüber Parametervariationen der DDD-Simulation relativ robust, wie z.B. Veränderung von der Länge oder der Position der Versetzungsquelle. Beispielsweise ist die Position der Quelle bezüglich der „Quergleitquadranten“ in Abbildung 5.2 nicht ausschlaggebend (siehe Argumentation in Kapitel 5.1.2). Die Bildung der prismatischen Versetzungsstruktur erfolgt, solange eine Versetzungsquelle einen (quergleitfähigen) Schraubencharakter ausbilden kann und die Versetzungsquelle bei gegebener Spannung eine kritische Aktivierungslänge aufweist. Der in den DDD-Simulationen beobachtete Bildungsmechanismus lässt sich folglich durchaus auch auf allgemeinere Versetzungsquellen übertragen. Beispielsweise könnten Rosettenarme, wie in Abbildung 2.2 abgebildet, aus nukleierten Versetzungen entstehen. Je die Hälfte der gebildeten u-förmigen Versetzungen bildet oberflächennah einen Rosettenarm aus und die andere Hälfte der u-förmigen Versetzungen bildet mit Versetzungen aus anderen Rosettenarmen die Zone mit der hohen Versetzungsdichte. Eine andere Möglichkeit wäre, dass zuerst eine Zone hoher Versetzungsdichte unter der Indenterspitze entsteht, bestehend aus einem Versetzungsnetzwerk, aus welchem dann über geeignete Versetzungsquellen Rosettenarme gebildet werden können. Falls keine geeignete Quelle zur Verfügung steht, wird der Rosettenarm nicht ausgebildet. Der Quelltyp — ob Frank-Read-Quelle, gepinnte Versetzung in einem Netzwerk, Reaktionsprodukt aus Versetzungen etc. — spielt für die Bildung von prismatischen Strukturen eine untergeordnete Rolle. Entscheidend ist das aufgelöste Schubspannungsfeld des Indenters, welches durch die Kristallographie und die Orientierung des Burgersvektors der Versetzungsquelle festgelegt wird. Der Quelltyp bzw. die Quelllänge spielt für den Bildungsmechanismus hinsichtlich der Aktivierungsrate und die Anzahl möglicher Versetzungsemissionen eine Rolle, welche wiederum Versetzungswechselwirkungen bei der Bildung beeinflussen.

**Partialversetzungen — Stapelfehlerenergie** Prismatische Strukturen werden in unterschiedlichen Metallen mit kubisch flächenzentrierter Gitterstruktur beobachtet, welche sich durch ihre Stapelfehlerenergie unterscheiden. In realen Kristallen können sich perfekte Versetzungen unter Reduzierung der Linienenergie in je zwei Shockley-Partialversetzungen aufspalten, wodurch ein Stapelfehler gebildet wird. Die Aufspaltweite dieser Partialversetzungen ist abhängig von der Stapelfehlerenergie, der äußeren Spannung und der Interaktion der zwei Partialversetzungen miteinander [81]. Da nur Schraubenversetzungen quergleiten können, erfordert das Quergleiten nach dem Friedel-Escaig Modell das „Wieder-Einschnüren“ der Partialversetzungen [81]. Das Quergleiten von Versetzungen ist einfacher, je größer die Stapelfehlerenergie und somit je kleiner die Aufspaltweite der Partialversetzungen ist. Daraus folgt, dass für kubisch flächenzentrierte Metalle mit einer kleinen Stapelfehlerenergie das Quergleiten erst bei höheren Spannungen auf der Quergleitebene erfolgt. Da das Quergleiten eine wichtige Rolle bei der Bildung von prismatischen Strukturen spielt, beeinflusst folglich die Stapelfehlerenergie des Metalls den Bildungsmechanismus. Daher stellt sich die Frage, wie das Aufspalten in Partialversetzungen die Bildung der prismatischen Strukturen beeinflusst. In dieser Arbeit wurden mit dem DDD-Code perfekte Versetzungen simuliert. Der Einfluss der Stapelfehlerenergie kann jedoch mit Erhöhung der kritischen Schubspannungsüberhöhung zwischen Gleitebene und Quergleitebene eingeschätzt werden.

Die Simulationen in Kapitel 4.1 zeigen, dass bei einem bezüglich der Indentierungsachse antisymmetrischen Feld der Peach-Köhler-Kraft (Indentierung in ⟨110⟩-Richtung und eine Versetzungsquelle mit einem Burgersvektor parallel zu der Indentierungsachse) bei kleinerer Stapelfehlerenergie die prismatischen Versetzungen größer werden, und dass sich der Mittelpunkt der prismatischen Versetzungen zu einer asymmetrischen Lage relativ zur Indenterspitze verschiebt (Abb. 4.3). Bei größerer Aufspaltweite der Partialversetzungen ist der Quergleitbereich breiter, da für das Quergleiten eine größere aufgelöste Schubspannung auf der Quergleitebene benötigt wird. In Abbildung 5.13 ist, angelehnt an Abbildung 5.1, schematisch die prismatische Versetzungsstrukturen für eine verschwindend kleinen Quergleitbereich und einen breiten Quergleitbereich dargestellt. Bei einem verschwindend kleinen Quergleitbereich gleiten die Versetzung an den Symmetrieachsen in Abbildung 5.13 quer. Der Mittelpunkt der prismatischen Versetzungsringe liegt auf der Indentierungsachse. Ist der Quergleitbereich breiter, gleiten die Versetzungen aus einer Versetzungsquelle später quer, wodurch sich die Größe und der Mittelpunkt der prismatischen Versetzungsstruktur wie in Abbildung 5.13 dargestellt ändert.

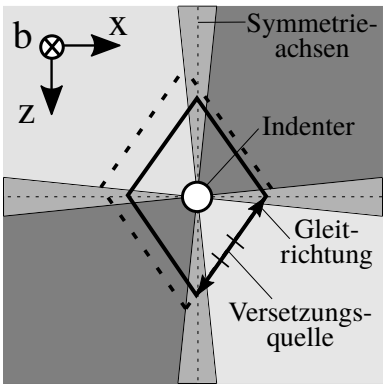



**Abb. 5.13:** Schematische Darstellung Breite der Quergleitbereiche —— Ursprüngliche Versetzungsstruktur - - - Versetzungsstruktur bei größerer Aufspaltweite der Partialversetzungen

Wenn größere Spannungsüberhöhungen zum Quergleiten benötigt werden, dauert der Bildungsprozess der einzelnen prismatischen Versetzungen tendenziell länger, da die Triebkraft für das Versetzungsgleiten auf der ursprünglichen Gleitebene in der Quergleitzone geringer ist und die Versetzungen somit länger durch die größere Quergleitzone gleiten. Im Extremfall reicht die Triebkraft im Quergleitbereich auf der ursprünglichen Gleitebene für weiteres Versetzungsgleiten nicht aus, bevor die kritische Schubspannungsüberhöhung auf der Quergleitebene erreicht wird. In diesem Fall bleibt die Versetzung im Quergleitbereich „stehen“. Aufgrund der geringeren Triebkraft für Versetzungsgleiten im Quergleitbereich kann es vorkommen, dass die Versetzungsringe noch nicht geschlossen sind, bevor die Versetzungsquelle erneut aktiviert wird. Damit kann erklärt werden, wieso die Versetzungen in Abbildung 4.3 nach mehrfacher Quellaktivierung an unterschiedlichen Stellen im Kraftfeld quergleiten: Die neu emittierten Versetzungen wechselwirken mit den vorigen Versetzungen, welche noch nicht als geschlossene, perfekt prismatische Versetzungsringe vorliegen. Die abstoßende Wechselwirkung von Versetzungen mit in der Nähe sich befindenden anderen Versetzungen gleicher Linienorientierung kann das Quergleiten fördern. Dadurch können sowohl unterschiedliche Größen der prismatischen Versetzungsringe auftreten als auch eine Tendenz zu helixförmigen prismatischen Versetzungsstrukturen. Ist für bestimmte Kristallographien der Spannungsgradient klein, so wird Quergleiten bei kleinen Stapelfehlerenergien unwahrscheinlicher und somit auch die Ausbildung prismatischer Strukturen.

Bei asymmetrischen Kraftfeldern mit schwachen Spannungsgradienten wird das Quergleiten für große Aufspaltweiten der Partialversetzungen noch schwieriger, wodurch die Bildungswahrscheinlichkeit sinkt.

Folglich bilden sich prismatische Versetzungsstrukturen in Metallen prinzipiell auch mit unterschiedlichen Aufspaltweiten von Partialversetzungen aus. Bei kleiner Stapelfehlerenergie bzw. größerer Aufspaltweite der Partialversetzungen bilden sich tendenziell weniger und relativ zur Indenterspitze asymmetrischere prismatische Versetzungsstrukturen aus.

**Wechselwirkung prismatischer Versetzungsstrukturen mit anderen Versetzungen**
Die Häufigkeit der Versetzungswechselwirkungen von prismatischen Strukturen mit anderen Versetzungen — gegebenenfalls ebenfalls prismatischer Natur — wird durch die anfängliche Versetzungsdichte bzw. durch die Anzahl der Asperitäten im Kontakt (Kap. 5.1.2) beeinflusst. Versetzungsrosetten in Proben aus Kupfer oder Silber werden beispielsweise nur bei kleinen anfänglichen Versetzungsdichten in der Größenordnung von $10^7..10^8 m^{-2}$ beobachtet [39, 49, 69, 71]. Je höher die anfängliche Versetzungsdichte (oder die Anzahl der Asperitäten), desto größer ist die Wahrscheinlichkeit für Versetzungswechselwirkungen. Wechselwirken prismatische Strukturen untereinander oder, genereller, mit anderen Versetzungen, so können drei verschiedene Szenarien entstehen:

(i) Die Ausbildung der prismatischen Struktur kann gestoppt werden.

(ii) Die Ausbreitung kann ungehindert fortgesetzt werden.

(iii) Als Reaktionsprodukt können andere gleitfähige Versetzungen entstehen.

Das Stoppen prismatischer Strukturen erfolgt, durch einen Aufstau der Versetzungen, z.B. wenn nicht gleitfähige Versetzungen an der Schnittstelle entstehen. Beispielsweise wird in Experimenten beobachtet, dass einzelne Rosettenarme an anderen Rosettenarmen gestoppt werden [49].

Durch den Rückstau auf die Versetzungsquelle werden keine weiteren prismatischen Versetzungen emittiert und die Ausbreitung der Struktur verhindert.

Die Diskreten Versetzungsdynamik-Simulationen in Kapitel 4.1.5 zeigen, dass sich prismatische Strukturen prinzipiell auch weiter ungehindert ausbilden können. Entweder gleiten die Versetzungen ohne Wechselwirkungen ungehindert „durcheinander durch“ (Abb. 4.13) oder die Versetzungen reagieren miteinander und aus dem Reaktionsprodukt entstehen weiterhin prismatischer Strukturen (Abb. 4.14). Im letzteren Fall entstehen Rückspannungen auf die Versetzungsquellen. Diese erlauben weitere Quellaktivierungen nur unter ausreichender Erhöhung der Belastung. Schwache Reaktionen wie z.B. die Hirth Reaktion werden die Ausbildung kaum beeinflussen. Bei stärkeren Reaktionen wie z.B. der Lomer-Reaktion, können unter ausreichend höheren Spannungen wieder prismatische Versetzungen herausgelöst werden (Abb. 4.14(c,d)) oder auch die Lomer-Reaktion aufgelöst werden.

Folglich liegt die optimale anfängliche Versetzungsdichte für die ungestörte Ausbildung von prismatischen Strukturen in einem Intervall: Einerseits müssen genügend potenzielle Versetzungsquellen zur Verfügung stehen, oder sich durch Reaktionen Versetzungsquellen ausbilden können. Andererseits treten bei höherer Versetzungsdichte dann verstärkt Versetzungswechselwirkungen auf, welche die Wahrscheinlichkeit der ungestörten Ausbildung prismatischer Strukturen herabsenken.

## 5.2 Versetzungstransport

Die Diskreten Versetzungsdynamik-Simulationen in Kapitel 4.2 zeigen, dass in einem Reibkontakt mit einem kubisch flächenzentrierten Metall Versetzungen nur auf bestimmten Gleitsystemen mit der Indenterspitze in anfänglich versetzungsfreie Bereiche transportiert werden. Folgen dieser Selektion sind:

(i) Es sollte prinzipiell zwischen Bereichen unterschieden werden können, in denen Nukleation stattfindet und Bereichen, in die nur Versetzungen hineintransportiert werden.

(ii) Je nach Ausprägung des Versetzungstransports verformen sich kubisch flächenzentrierte Kristalle im Reibkontakt unterschiedlich stark.

In diesem Zusammenhang werden folgende Fragestellungen diskutiert:

- Bei welchen kristallographischen Orientierungen und Gleitrichtungen der Asperität ist der Versetzungstransport besonders ausgeprägt?
- Auf welchen Gleitsystemen werden Versetzungen transportiert?
- Wie weit werden Versetzungen transportiert?

### 5.2.1 Bedingungen für Versetzungstransport

Der Versetzungstransport unterscheidet sich je nach Kristallorientierung und Indenterfahrtrichtung. Bei gleicher kristallographischer Orientierung kann die Fahrtrichtung der Asperität über die Stärke des Versetzungstransportes entscheiden. Beispielsweise bestimmt bei Indentierung in $\langle 010 \rangle$-Richtung bzw. $\langle 110 \rangle$-Richtung ein Winkelunterschied von 45° (Setup 010 und Setup $010_{par}$) bzw. 90° (Setup 010 und Setup $010_{par}$) der Fahrtrichtung, ob kaum Versetzungstransport vorliegt, oder Versetzungstransport bis an die Korngrenze — verbunden mit relativ starker plastischer Verformung im ehemals versetzungsfreien Bereich. Ist eine Gleitebenenfamilie parallel zu der Oberfläche, so werden unabhängig von der Fahrtrichtung des Indenters Versetzungen auf diesen Gleitebenen bis an die Korngrenze transportiert (z.B. Setup 111 und Setup $111_{par}$). Prinzipiell ist der Versetzungstransport stärker ausgeprägt wenn die Fahrtrichtung des Indenters parallel zu einem Burgersvektor ausgerichtet ist. Beispielsweise ist eine besonders ausgeprägte Entwicklung der Versetzungsdichte in Setup $110_{par}$ und Setup $010_{par}$ zu beobachten, bei denen je zwei Gleitebenen schrägt zu der Oberfläche geneigt sind und einen Burgersvektor parallel zu der Fahrtrichtung des Indenters enthalten. Zwei Bedingungen sind maßgebend dafür, welche Versetzungen auf welchen Gleitsystemen transportiert werden:

(i) Die Versetzungen müssen rein geometrisch auf ihren Gleitebenen der Indenterspitze folgen können.

(ii) Das aufgelöste Schubspannungsfeld muss eine treibende Kraft bereitstellen.

Quergleitprozesse und Reibungskoeffizienten beeinflussen diese beiden Bedingungen. Quergleitprozesse erweitern die geometrischen Möglichkeiten von Versetzungen, der Indenterspitze zu folgen. Der Reibungskoeffizient des Reibkontaktes verändert das aufgelöste Schubspannungsfeld des Indenters und somit die treibende Kraft für Versetzungsgleiten.

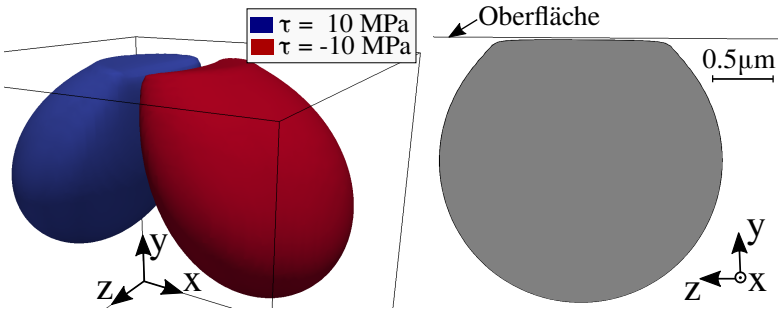
**Gleitebenenorientierung** Versetzungen können theoretisch unbegrenzt auf jenen Gleitebenen transportiert werden, welche die Fahrtrichtung des Indenters enthalten — beispielsweise auf Gleitebenen, die parallel zu der Oberfläche sind. Steht die Gleitebene senkrecht zur Fahrtrichtung des Indenters, können Versetzungen überhaupt nicht der Indenterspitze folgen. In den Fällen dazwischen kann die Versetzung geometrisch begrenzt weit transportiert werden. Diesen Zusammenhang lässt sich mit dem Faktor $f$ beschreiben

$$f = 1 - |\vec{x} \cdot \vec{n}| \tag{5.5}$$

mit dem Normalenvektor $\vec{n}$ der Gleitebene und der Fahrtrichtung $\vec{x}$ des Indenters. Der Faktor $f$ nimmt Werte zwischen Null (geometrisch kein Transport möglich) und Eins (geometrisch unbegrenzter Transport) ein.

Rein geometrisch gesehen müssten demnach Versetzungen unabhängig von deren Burgersvektororientierung auf der gleichen Gleitebenenfamilie gleich weit transportiert werden. Die DDD-Simulationen zeigen jedoch, dass auf einer Gleitebenenfamilie nicht zwingend alle Versetzungen transportiert werden müssen (Bsp. Abb. 4.29(b)). Daher ist für die Beurteilung des Versetzungstransportes zusätzlich noch ein Spannungs-Kriterium erforderlich.

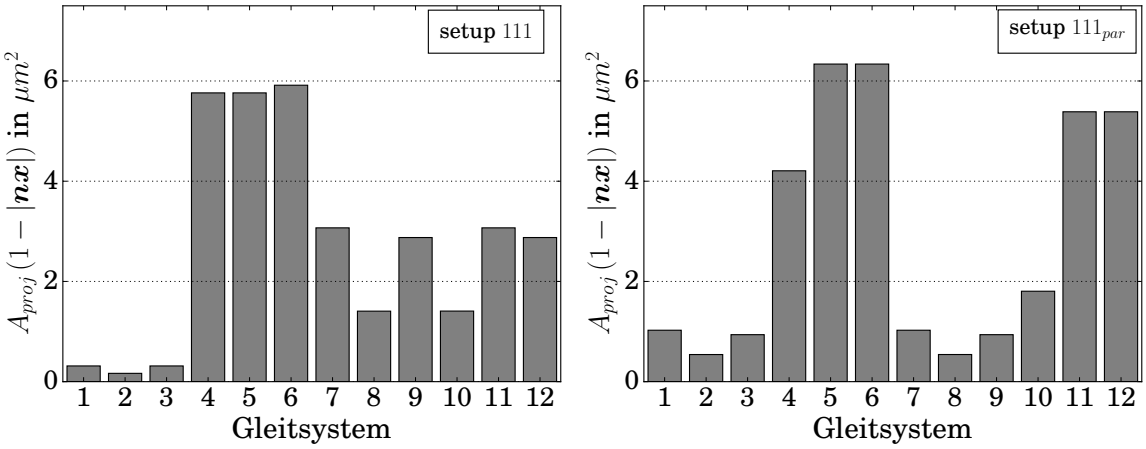
**Aufgelöstes Schubspannungsfeld** Das aufgelöste Schubspannungsfeld bestimmt die treibende Kraft für Versetzungsgleiten. Ein mögliches Maß zur Beurteilung des Versetzungstransports ist die Querschnittsfläche aus der projizierten aufgelösten Schubspannung auf eine Ebene senkrecht zur Indenterfahrtrichtung. Bewegt sich der Indenter um eine Strecke $\Delta x$ über den Kristall, so können Versetzungen innerhalb jenes Volumen gleiten, welches durch die Länge $\Delta x$ und dieser Querschnittfläche definiert ist. Für die Beurteilung der Querschnittsfläche werden Isospannungsflächen auf eine Ebene senkrecht zur Fahrtrichtung des Indenters projiziert. Wenn man annimmt, dass Versetzungen bei aufgelösten Schubspannungen unterhalb der kritischen Reibspannung $\tau_r$ nicht gleiten (Kap. 3), dann erscheint es sinnvoll, den Wert $\tau_{iso} = \tau_r$ für die Isospannungsflächen zu wählen. In Abbildung 5.14 ist das Vorgehen anhand des Beispiels für ein Gleitsystem mit einer Gleitebene parallel zur $xz$-Oberfläche und einem Burgersvektor parallel zur Fahrtrichtung des Indenters ($x$-Achse) dargestellt. Die Projektion der Isospannungsflächen in Abbildung 5.14(b) wird im Folgenden auch als „geometrischer Querschnitt“ bezeichnet.




(a) (b)

**Abb. 5.14:** (a) Isospannungsflächen $\tau_{iso} = \tau_r = 10MPa$. Die Kantenlängen des Kubus betragen $4\mu m$. (b) Projektion der Isospannungsflächen aus (a) [103]

**Kombinierte Kriterien** Für die Kombination des Geometrie- und Spannungs-Kriteriums wird die Größe der Querschnittsfläche aus der projizierten aufgelösten Schubspannung mit dem Faktor $f = 1 - |\vec{n} \cdot \vec{x}|$ nach Gleichung (5.5) multipliziert. Abbildung 5.15 zeigt für Setup 111 und Setup $111_{par}$ aus Tabelle 4.1 die Größe dieser Querschnittsfläche multipliziert mit Faktor $f$. Überlappende Flächen werden dabei einfach gezählt. Für die Gleitsystem-Nomenklatur sei auf Anhang B verwiesen. Versetzungen auf jenen Gleitebenen, welche in Abbildung 5.15 die größten Querschnittsflächen aufweisen, werden auch in den DDD-Simulationen besonders gut transportiert (Vergleich mit Abb. 4.16(a) und Abb. 4.18(a)). Dies ist ebenfalls für alle anderen Kristallographien und Indenterfahrtrichtungen in Tabelle 4.1 zutreffend (Vergleich Abb. D1, D2, D4-D7 mit Abb. G1-G6).




(a) Setup 111 (b) Setup $111_{par}$

**Abb. 5.15:** Größe der Querschnitte $A_{proj}$ je nach Gleitsystem aus projizierter aufgelöster Isoschubspannungsoberfläche $\tau_{iso} = 10MPa$ multipliziert mit Faktor $f$ [103]

Das kombinierte Kriterium eignet sich folglich, um jene Gleitsysteme zu identifizieren, auf denen Versetzungen transportiert werden. Folgende Einschränkungen gelten:

(i) Das Kriterium berücksichtigt die Größe des Querschnittes, jedoch nicht die Form des Querschnittes. Natürlich ist der Transport schwieriger, je verzweigter und komplexer die Form des Querschnittes ist.

(ii) Das Vorzeichen der Fahrtrichtung wird ebenfalls nicht in dem kombiniertem Kriterium berücksichtigt. Auch wenn zwei Burgersvektoren bei reiner Indentierung geometrisch symmetrisch sind — und somit auch das aufgelöste Schubspannungsfeld rotationssymmetrisch ist — so bestimmt im Reibkontakt das Vorzeichen der Indenterfahrtrichtung auf welchem Gleitsystem die Versetzungsdichte dominiert (Vergleich der Gleitsysteme 11 und 12 in Abb. 4.18(a) und Abb. D3(a)). Gegenüber der reinen Indentierung ist unter einem fahrenden Indenter die Ausbreitungsrichtung der Versetzungsstruktur relevant — Versetzungen, welche länger im sich bewegenden Spannungsfeld bleiben, können größere Strukturen ausbilden. Hat der Burgersvektor einen Anteil in Indentierungsrichtung und entgegengesetzt der Fahrtrichtung, so bilden sich in den DDD-Simulationen Versetzungsstrukturen aus, welche sich entgegengesetzt zur Indenterfahrtrichtung ausbreiten. Folglich gleiten diese Versetzungen weniger weit. Im anderen Fall scheren die Versetzungen den Kristall mit

der Fahrtrichtung in die Tiefe ab, die Versetzungen gleiten in größere Tiefen und werden somit auch länger transportiert. Ein weiteres Beispiel hierfür sind die Versetzungen in Setup 110, welche durch Quergleitprozesse transportiert werden: Obwohl vier Burgersvektoren bei reiner Indentierung geometrisch symmetrisch sind, werden im Reibkontakt nur Versetzungen mit zwei spezifischen Burgersvektoren transportiert (Abb. 4.22). Die Fahrtrichtung des Indenters bricht die Symmetrie, welche bei reiner Indentierung vorliegt, und führt zu Bevorzugung bestimmter Burgersvektoren.

(iii) Es stellt sich die Frage nach der Definition eines Schwellwertes in Abbildung 5.15, bei welchem Versetzungen noch transportiert werden. Im Allgemeinen ist die Größe des geometrischen Querschnittes von Indenterkraft und Indenterradius abhängig. Die Werte stellen Anhaltspunkte dar und sollten im Vergleich zu den Werten auf den anderen Gleitsystemen gelesen werden. Beispielsweise ist für Setup 111 und Setup $111_{par}$ ein Schwellwert von etwa der Hälfte des maximalen Wertes in Abbildung 5.15 passend zu den Beobachtungen aus den DDD-Simulationen mit den Parametern aus Kapitel 3.2.

Es sollte bemerkt werden, dass sich die Größe der geometrischen Querschnitte mit Indenterkraft, Indenterradius und Wert der Isospannungsfläche verändert. Die analytischen Spannungen skalieren mit dem maximalen Hertzschen Druck (Gl. (3.6)) und dem Kontaktradius (Gl. (3.5)) (Abb. A1-A7). Die aufgelöste Schubspannung ist eine Kombination unterschiedlich gewichteter Spannungskomponenten des Hertzschen Kontaktes — bestimmt durch den Burgersvektor und der Normalen der Gleitebene. Da sich die Form und Lage der Isospannungsflächen mit Indenterkraft, Indenterradius und Wert der Isospannungsfläche verändern kann, kann sich prinzipiell auch das Verhältnis der Größe des geometrischen Querschnittes aus projizierten Isospannungsflächen der aufgelösten Schubspannung von zwei Gleitsystemen je nach Indenterkraft, Indenterradius und Wert der Isospannungsfläche unterscheiden.

**Quergleiten** Quergleitprozesse erweitern die Möglichkeiten von Versetzungen geometrisch der Indenterspitze zu folgen, sodass Versetzungen auf zusätzlichen Gleitsystemen transportiert werden können. Durch mehrfaches Quergleiten zwischen zwei Gleitebenen können sich treppenartige Versetzungsstrukturen nahe der Oberfläche ausbilden (Bsp. Abb. 4.22). Bei den untersuchten Setups aus Tabelle 4.1 ist der Anteil von zusätzlichen Gleitsystemen, auf denen Versetzungen transportiert werden, jedoch gering. Dies ist aus dem Vergleich der Abbildung D1, D2, D4 bis D7 mit Abbildung D8 bis D13 ersichtlich. In vielen Fällen ist das aufgelöste Schubspannungsfeld nicht geeignet, auch wenn rein geometrisch Transport durch die Kombination zweier Gleitebenenfamilien möglich wäre. Beispielsweise wäre in Setup 111 der Transport von Versetzungen mit den schräg zu der Oberfläche orientierten Burgersvektoren $\vec{b} = \frac{a}{2}[011]$, $\vec{b} = \frac{a}{2}[110]$ und $\vec{b} = \frac{a}{2}[101]$ denkbar. Die DDD-Simulationen zeigen jedoch, dass diese nicht transportiert werden (Abb. D8(a)). Zum Beispiel gleiten Versetzungen mit Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}[011]$ zwar quer, jedoch stets entgegengesetzt zur Fahrtrichtung des Indenters.

Quergleitprozesse machen sich zusätzlich dadurch bemerkbar, dass die Versetzungsdichte im Versetzungsreservoir und außerhalb des Versetzungsreservoirs tendenziell erhöht ist. Erhöhte Versetzungsdichte (im Versetzungsreservoir) kann prinzipiell dazu führen, dass mehr Versetzungen auf geeigneten Gleitsystemen zum Transport zur Verfügung stehen. Andererseits kann aufgrund von Versetzungswechselwirkungen der Transport aus dem Versetzungsreservoir hinaus erschwert werden.

**Reibungskoeffizient** Der Reibungskoeffizient des Reibkontaktes beeinflusst die treibende Kraft für Versetzungsgleiten über das aufgelöste Schubspannungsfeld des Hertzschen Kontakts. Für einen reibungslosen Hertzschen Kontakt liegt bei einer Querkontraktionszahl $\nu = 0.347$ (Materialverhalten von Aluminium, Kap. 3.2) das Maximum der Schubspannung unterhalb der Indenterspitze bei $y \approx 0.5r_k$ einen halben Kontaktradius in der Tiefe (Abb. 5.8). Die auf den maximalen Hertzschen Druck normierte Mises-Vergleichsspannung für den Hertzschen Kontakt überlagert mit einem Tangentialkontakt nach Referenz [102] ist in Abbildung 5.16 für eine Querkontraktionszahl $\nu = 0.347$ und einen Reibungskoeffizienten $\mu = 0.5$ dargestellt. Für reibungsbehaftete Reibkontakte $\mu \neq 0$ verschiebt sich der Bereich der maximalen Mises-Vergleichsspannung in Richtung Oberfläche und es treten höhere Spannungen auf [102, 108] (Vergleich Abb. 5.9 und Abb. 5.16). Gleichzeitig bildet sich ein zweiter Bereich maximaler Spannungen aus, welcher sich an der Oberfläche bei $x = -r_k$ befindet [102, 108] (Abb. 5.16). Ab einem Reibungskoeffizienten $\mu \approx 0.27$ sind die Spannungen in dieser zweiten Zone größer, als in der Zone unterhalb der Oberfläche [108]. Größere Reibungskoeffizienten verursachen zusätzliche Druckspannungen vor dem Kontakt und zusätzliche Zugspannungen hinter dem Kontakt bei $x = -r_k$ [102, 108].

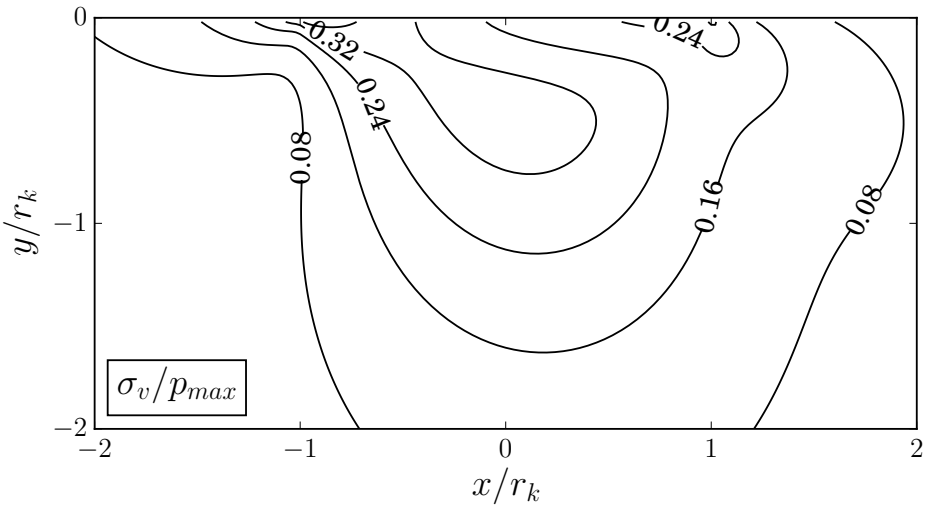



**Abb. 5.16:** Normierte Mises-Vergleichsspannung unterhalb der Indenterspitze ($z = 0$)

Als Folge der Veränderungen des Spannungsfelds durch den Reibungskoeffizienten können folgende drei Szenarien auftreten:

(i) Der Versetzungstransport wird aufgrund höherer Spannungen tendenziell einfacher.

(ii) Der Bereich, in dem Transport stattfindet, verschiebt sich Richtung Oberfläche.

(iii) An der Oberfläche tritt verstärkt Versetzungsnukleation auf und die relative Rolle der Oberfläche in den plastischen Prozessen im Reibkontakt wird größer.

Erste Untersuchungen zum Versetzungstransport in einem reibungsbehafteten Reibkontakt zeigen, dass ähnliche Mikrostrukturen und ähnliche Oberflächentopographien wie im reibungslosen Kontakt entstehen. Der Reibungskoeffizient kann die Versetzungsdichten je Gleitsystem unterschiedlich stark fördern (Setup $111_{par}$: Vergleich Abbildung D2 mit Abbildung D15 und Setup $110_{par}$: Vergleich Abbildung D5 mit Abbildung D17). Allerdings zeigt sich kein Einfluss

auf die Anzahl oder den Typ der Gleitsysteme, auf denen Versetzungen transportiert werden. Dies ist aus dem Vergleich der Abbildungen D1, D2, D4, D5 mit Abbildungen D14-D17 ersichtlich. Kristallographie und Indenterfahrtrichtung spielen daher vermutlich eine größere Rolle, als der Reibungskoeffizient. Andere Kristallorientierungen sollten jedoch noch daraufhin untersucht werden, um die Hypothese zu stützen.

### 5.2.2 Transportlänge

Die DDD-Simulationen in der vorliegenden Arbeit zeigen, dass die Transportlänge von Versetzungen sowohl von der Gleitebenenorientierung als auch von der Orientierung des Burgersvektors abhängen (Abb. 4.29).

**Gleitebenenorientierung** Enthält die Gleitebene die Fahrtrichtung des Indenters, so können Versetzungen rein geometrisch betrachtet unendlich weit transportiert werden. Je stärker die Gleitebene geneigt ist, desto früher gleitet die Versetzung in die Tiefe des Kristalls, wo die Indenterspannungen kleiner werden bis die Versetzung nicht mehr mittransportiert wird. Für allgemeine Gleitebenenorientierung sind für die Transportlänge $\Delta x$ Gleitebenenrotationen um die Indentierungsachse und um eine Achse senkrecht zur Indentierungsachse und Fahrtrichtung (Winkel $\alpha$ und $\beta$ in Abb. 4.27(a,b)) und deren Kombinationen relevant. Rotationen der Gleitebene um die Achse der Fahrtrichtung (Winkel $\gamma$ als spezielle Kombination aus den Winkeln $\alpha$ und $\beta$ in Abb. 4.27(c)) verändern die Transportlänge nicht — abgesehen von bestimmten Burgersvektororientierungen (siehe Abb. 4.29(c)), was durch eine fehlende Triebkraft mit dem aufgelösten Spannungsfeld erklärbar ist.

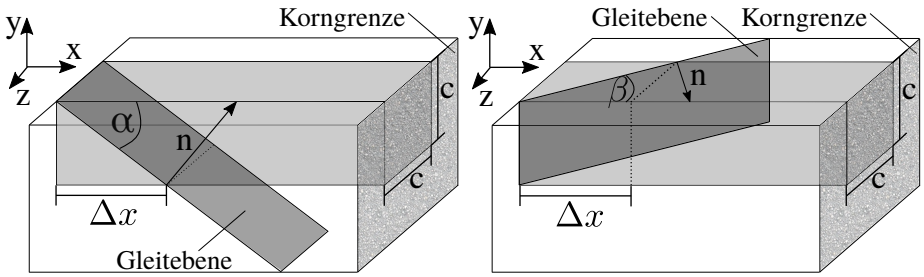
Generell ist die maximal mögliche Transportlänge durch die maximale $x$-Koordinate der Schnittlinie von Gleitebene und des geometrischen Querschnittes gegeben, welcher entlang der $x$-Achse gestreckt ist. Abbildung 5.17 zeigt schematisch die maximal mögliche Transportlänge für einen geometrischen Querschnitt quadratischer Form. Die geometrischen Querschnitte, wie beispielsweise in Abbildung 5.14(b), sind für allgemeine kristallographische Orientierungen in der Regel komplex. Wird der Querschnitt in Abbildung 5.14(b) mit einem quadratischen Querschnitt mit der Abmessung $c$ approximiert, so ergibt sich für Gleitebenenorientierungen mit dem Winkel $\alpha$ mit $\beta = 0°$ oder den Winkel $\beta$ mit $\alpha = 0°$ die Transportlänge $\Delta x$ aus geometrischen Beziehungen zu

$$\Delta x = min\left(x_K, \frac{c\sqrt{1-(\vec{x}\vec{n})^2}}{|\vec{x}\vec{n}|}\right) \tag{5.6}$$

mit der Fahrtrichtung $\vec{x}$ des Indenters, der Gleitebenennormalen $\vec{n}$ und einem Transport begrenzenden Hindernis $x_K$, wie zum Beispiel die Kornlänge.

Für Setup 111 und Setup $111_{par}$ streuen die Datenpunkte in Abbildung 4.29(a) um die Funktion $\Delta x$ nach Gleichung (5.6), wenn die Konstante $c$ das 1.5-fache des Kontaktradius $r_k$ beträgt (Abb. 5.18). Jedoch ist nicht überprüft, ob der Wert für die Konstante $c$ für andere Indenterkräfte und -radien erhalten bleibt und daher gegebenenfalls eine physikalische Bedeutung hat.

Für Gleitebenenverkippungen mit dem Winkel $\alpha$ muss das Vorzeichen des Winkels unterschieden werden. Sind die Gleitebenen in Indenterfahrtrichtung in Richtung Oberfläche verkippt, so




(a) Winkel $\alpha$ (b) Winkel $\beta$

**Abb. 5.17:** Maximalen Transportlänge $\Delta x$ bei rechteckigen Querschnitt

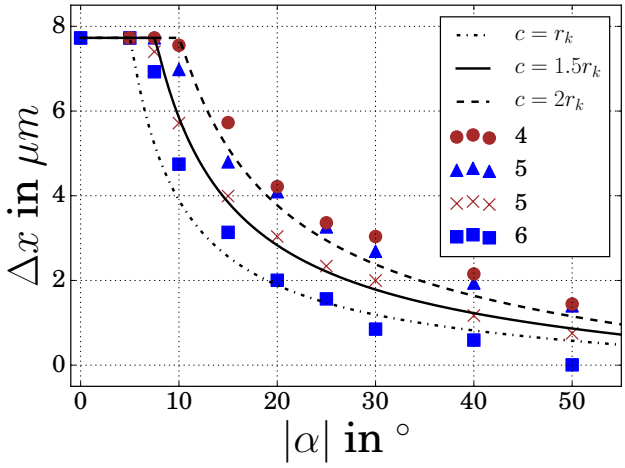



**Abb. 5.18:** Wie Abb. 4.29(a) mit der Funktion der Transportlänge $\Delta x$ nach Gl. (5.6)

gleiten transportierte Versetzungen an die Oberfläche. In diesem Fall ist der Transport durch die Oberfläche „beschränkt“ wodurch kürzere Transportlängen erreicht werden können, als wenn Versetzungen in die Tiefe des Kristalls gleiten.

**Korngröße** Korngrenzen stellen Barrieren für Versetzungstransport dar und verkleinern die Transportlänge. In feinkörnigen Metallen ist somit die plastische Verformung durch Versetzungstransport geringer. Typischer Weise bilden sich in Reibkontakten in einem späteren Deformationsstadium nanokristalline Oberflächenschichten aus [86, 87][6]. Kleinere Körner können — bis inverses Hall-Petch-Verhalten einsetzt — wiederum zu einer Reduktion des Reibungskoeffizienten und Reduktion von Verschleiß führen, was auf ansteigende Härte [88, 110] und Änderung im Verschleißmechanismus (Übergang von Delamination und Adhäsion zu Abrasion und Oxidation) zurückgeführt wird [111]. Versetzungstransport wird daher erwartungsgemäß im anfänglichen Deformationsstadium des Reibkontaktes eine größere Rolle spielen, als nach der Rekristallisation.

[6]Es kann jedoch ebenfalls Kornvergröberung im Zusammenhang mit der Reorientierung von Körnern zu Erhöhung der Deformierbarkeit auftreten [109].

**Burgersvektororientierung — Linienenergie** Je nach Orientierung des Burgersvektors werden Versetzungen unterschiedlich weit transportiert und sind unterschiedlich stabil bei Entlastung. Dies kann dazu führen, dass Versetzungen mit bestimmten Burgersvektoren einfacher in einem Versetzungsnetzwerk gespeichert werden können. Beispielsweise oszilliert die Versetzungsdichte auf Gleitebenen parallel zu der Oberfläche umso weniger, je mehr der Burgersvektor parallel zu der Fahrtrichtung des Indenters ist (Abb. 4.16(a), Abb. 4.18(a)). Die Rolle der Burgersvektororientierung lässt sich mit der Linienenergie erklären. Bei dem Transport von Versetzungen entstehen oft lang gestreckte Versetzungsstrukturen wie schematisch in Abbildung 5.19 dargestellt (nach Abb. 4.15 und Abb. 4.28). Die Peach-Köhler-Kraft $F_{PK}$ wirkt auf die Versetzung mit dem Burgersvektor $\vec{b}$ und der Weite $w$ und verlängert die Versetzung um $\Delta x$. Wird eine Versetzung mit solch einer Form um $\Delta x$ länger, so wird eine zusätzliche Versetzungslinie der Länge $2\Delta x$ gebildet (Abb. 5.19). Die Linienenergie pro Einheitslänge $E_L$ [81] der zusätzlichen Versetzungssegmente

$$E_L(\phi) = \frac{1}{1-\nu}\frac{Gb^2}{2}\left(1-\nu\cos^2(\phi)\right) \tag{5.7}$$

mit der Querkontraktionszahl $\nu$ und dem Schubmodul $G$, hängt von dem Versetzungscharakter ab. Der Winkel $\phi$ beschreibt die Orientierung des Burgersvektors bezüglich der Versetzungslinie. Die zusätzliche innere gespeicherte Energie durch die Verlängerung dieser Versetzung beträgt $2E_L(\phi)\Delta x$. In einem elastischem Körper entspricht die zusätzliche innere gespeicherte Energie der extern verrichteten Arbeit $F_{PK}w\Delta x$ mit

$$2E_L\left(\phi\right)\Delta x = F_{PK}w\Delta x \tag{5.8}$$

mit der Peach-Köhler-Kraft $F_{PK}$ und der Breite $w$ der Versetzung (Abb. 5.19). Für reine Schrauben- bzw. Stufenorientierung gilt $\phi = 0°$ bzw. $\phi = 90°$ Aus Gleichung (5.8) folgt, dass bei gleicher Transportweite $\Delta x$ eine größere Peach-Köhler-Kraft benötigt wird, um die Versetzung um zusätzliche Stufensegmente zu verlängern, anstatt um Schraubensegmente. Abbildung 5.20 zeigt die maximale Transportlänge abhängig von der Gleitebenenverkippung mit dem Winkel $\alpha$ aus Abbildung 4.29(a) normiert auf Stufencharakter: Wird die Transportlänge mit dem Faktor $1-\nu\cos^2(\phi)$ multipliziert, so streuen die Werte weniger. Die Symbole für die Gleitsysteme sind aus Abbildung 4.29(a) übernommen worden. Abweichend davon ist anstatt der Gleitsystemnummer der Winkel $\phi$, wie in Abbildung 5.19 definiert, aufgetragen.

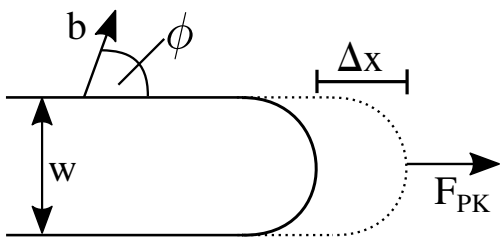



**Abb. 5.19:** Geometrie einer transportierten Versetzung [103]

Eine mögliche zusätzliche Normierung der Transportlänge in Abbildung 5.20 ist die Linienspannung: Hat der gebogene Teil der langezogenen Versetzung in Abbildung 5.19 Stufencharakter anstatt Schraubencharakter, so ist die Rückstellkraft aufgrund der Linienspannung geringer

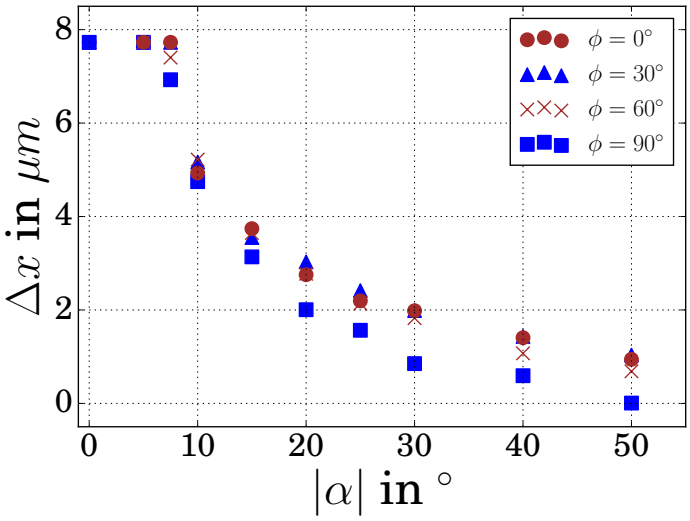



**Abb. 5.20:** Wie Abb. 4.29(a), multipliziert mit Faktor $1 - \nu \cos^2(\phi)$ [103]

und es erfolgt bei gleicher Kraft längerer Transport: Die Linienspannung einer gemischten Versetzung ist durch [81]

$$T(\phi) = E_L(\phi) + \frac{\partial^2 E_L(\phi)}{\partial \phi^2} \tag{5.9}$$

gegeben. Dabei ist $E_L$ die Linienenergie und $\phi$ der Winkel zwischen Burgersvektor und Linienorientierung (Abb. 5.19). Das Einsetzen des Terms für die Linienenergie $E_L$ nach Gleichung (5.7) führt zu [81]

$$T(\phi) = E_L(\phi)\left(1 - \nu \cos^2\phi + 2\nu \cos 2\phi\right) \tag{5.10}$$

Als Materialparameter geht in die Linienspannung die Querkontraktionszahl ein. Für eine Querkontraktionszahl $\nu = 0.347$ (Materialverhalten von Aluminium, siehe Kap. 3.2), ist die Linienspannung einer Schraubenversetzung größer als die Linienspannung einer Stufenversetzung. Hat der vordere, gebogene Teil der langezogenen Versetzung Stufencharakter, so sind kleinere Radien $r_L$ möglich, bei zugleich konstanter Versetzungsbreite $w$ und konstanter Peach-Köhler-Kraft. Dies bedeutet, dass Versetzungen weiter transportiert werden können, wenn der vordere, gebogene Teil der langezogenen Versetzung Stufencharakter hat. Die Streuung der Datenpunkte in Abbildung 5.20 würde daher geringer, wenn die Linienspannung berücksichtigt wird.

**Reibungskoeffizient** Da im Hertzschen Kontakt bei gleicher Belastung mit größerem Reibungskoeffizient die maximale Mises-Vergleichsspannung steigt ([102, 108]), könnte argumentiert werden, dass dann die Transportlänge der Versetzungen prinzipiell erhöht sein muss. Erste DDD-Simulationen zeigen jedoch, dass die Querschnittsfläche des aufgelöste Schubspannungsfeld für den einzelnen Fall betrachtet werden muss, um eine Aussage über die Transportlänge zu treffen: In Simulationen mit Gleitebenenverkippungen um den Winkel $\alpha$ kann, abhängig von der Burgersvektororientierung, die Transportlänge vergrößert oder verkleinert werden (siehe Abb. F2 im Anhang). Unter einem Reibungskoeffizienten von $\mu = 0.5$ werden, im Vergleich zu $\mu = 0$, Versetzungen mit einem Burgersvektor senkrecht bzw. parallel zur Fahrtrichtung weiter bzw. kürzer transportiert (Abb. F2). Anscheinend verändert der Reibungskoeffizient die einzelnen Komponenten des Spannungstensors unterschiedlich stark — da die Burgersvektororientierung und die Gleitebenennormale die Kombination der Spannungskomponenten

im aufgelösten Spannungsfeld bestimmt, kann sich das aufgelöste Schubspannungsfeld durch den Reibungskoeffizienten unterschiedlich verändern. Für diese Hypothese spricht, dass Versetzungsdichten auf einzelnen Gleitsystemen durch einen Reibungskoeffizienten unterschiedlich stark gefördert werden können. Erste DDD-Simulationen zeigen, dass die Versetzungsdichte besonders auf jenen Gleitsystemen erhöht ist, auf denen Versetzungen den Kristall in Fahrtrichtung abscheren. Der Einfluss des Reibungskoeffizienten auf die Transportlänge auf einzelnen Gleitsystemen sollte detaillierter untersucht werden.

**Aktive Zone** Analog zur Transportlänge kann auch die Transporttiefe, als „aktive Versetzungszone“ bestimmt werden. Sie ist ein Maß dafür, wie schnell Versetzungen aus dem Spannungsfeld des Indenters hinaus in die Tiefe gleiten. Die Tiefe der aktiven Versetzungszone kann abhängig von der Belastung, Kristallographie und Fahrtrichtung bestimmt werden und wäre mit Experimenten abgleichbar. DDD-Simulationen zeigen, dass sich je nach Kristallographie und Fahrtrichtung die Tiefe der aktiven Zone unterscheidet. Auch können bei gleicher Kristallorientierung und Indenterfahrtrichtung deutliche Unterschiede zwischen den Gleitsystemen auftreten.

### 5.2.3 Reversibilität

Für die Charakterisierung des Versetzungstransportes ist nicht nur die Transportlänge, die Anzahl und Art der Gleitsysteme relevant, auf denen Versetzungen transportiert werden, sondern auch die Stabilität der transportierten Versetzungsstruktur und somit der Anteil der bleibenden plastischen Deformation durch Transport. Dies ist insbesondere für klassische Kontinuumsplastizitätsmodelle relevant, die intrinsisch keinen Versetzungstransport abbilden können. Die DDD-Simulationen in Kapitel 4.2 zeigen, dass der Versetzungstransport einen relativ großen Anteil der plastischen Verformung im anfänglich versetzungsfreien Bereich tragen kann. Dieser Anteil ist von der anfänglichen Versetzungsdichte im Kristall abhängig. Bei einer sehr kleinen Versetzungsdichte wird die plastische Deformation, unter Ausschluss von Nukleation und bei geeigneter kristallographischer Orientierung und Indenterfahrtrichtung, hauptsächlich durch Versetzungstransport getragen. Diese transportierte Versetzungsstruktur wird jedoch nicht durch andere Versetzungen stabilisiert, und ist daher bei Entlastung teilweise reversibel. Im anderen Extremfall liegt eine große anfängliche Versetzungsdichte im gesamten Kristall vor oder Versetzungen können überall nukleiert werden. Sowohl die schon vor der Belastung im Kristall vorhandenen Versetzungen, als auch die nukleierten Versetzungen wirken als Hindernisse und schränken somit den Versetzungstransport ein. Gleichzeitig stabilisieren sie jedoch die transportierten Versetzungen. Zugleich stellen die, vor der Belastung im Kristall bereits vorhandenen, Versetzungen oder die nukleierten Versetzungen Quellen für neue transportierbare Versetzungen dar. Bei sehr großen Versetzungsdichten wird erwartet, dass die Transportlänge stark eingeschränkt wird.

Noch stärkere Auswirkungen wird die Versetzungsdichte in einem Reibkontakt mit zyklisch bidirektionaler Indenterfahrtrichtung spielen, da das Indenterspannungsfeld die aufgebaute Versetzungsstruktur wieder in die entgegengesetzte Richtung transportiert.

Die Indentergeschwindigkeit wirkt sich auf die Reversibilität aus, indem Versetzungsstrukturen bei kleine Indentergeschwindigkeit mehr Zeit haben, sich zu vervielfachen, weiter in die Tiefe zu

gleiten und ein stabiles Netzwerk auszubilden. Auf die Transportlänge in Indenterfahrtrichtung wirkt sich die Indentergeschwindigkeit nicht aus — bis auf den Sonderfall, dass die Versetzungen der Indenterspitze beispielsweise in Form von Quergleitprozessen zeitlich nicht folgen können.

### 5.2.4 Oberflächentopographie

Eine meist leicht zugängliche Untersuchungsgröße in Experimenten ist die Oberflächentopographie eines Reibkontaktes. Beispielsweise werden Materialaufhäufungen vor der Indenterspitze oder auf der Seite der Indenterspitze beobachtet [7]. Die DDD-Simulationen in Kapitel 4.2 können diese Materialaufhäufungen nicht vollständig erklären. Die DDD-Simulationen zeigen jedoch, dass in Kristallen mit anfänglicher kleiner Versetzungsdichte der Versetzungstransport die plastische Verformung maßgeblich beeinflussen kann. In diesem Fall bilden sich Oberflächentopographien aus, die charakteristisch für die Gleitsysteme sind, auf welchen Versetzungen transportiert werden. Je nach Kristallorientierung und Indenterfahrtrichtung können sich charakteristische Vertiefungen auf der Oberfläche ausbilden, die symmetrisch (Bsp. Setup $010_{par}$, Abb. 4.19(b)) oder asymmetrisch (Bsp. Setup $111_{par}$, Abb. 4.19(a)) zu der Indenterfahrtlinie sein können. Umgekehrt lässt sich von der Oberflächentopographie beispielsweise auf die Indenterfahrtrichtung schließen. Sind keine Riefen auf der Oberfläche zu erkennen, so kann es sein, dass Versetzungen transportiert wurden, welche den Kristall nur in Fahrtrichtung abscheren (Setup 111) oder das keine Versetzungen transportiert wurden (Bsp. Setup 010 und Setup 110). Andere Einflüsse auf die Oberflächentopographie wie die Versetzungsnukleation an der Oberfläche wurde in den DDD-Simulationen nicht berücksichtigt. Ist der Anteil des Versetzungstransportes an der gesamten plastischen Verformung ausgeprägt, so kann jedoch mit dem Versetzungstransport ein Teil der zurückbleibenden Oberflächentopographie erklärt werden.

# 6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden mit dreidimensionalen Diskreten Versetzungsdynamik-Simulationen zwei ausgewählte Versetzungsmechanismen in kubisch flächenzentrierten Metallen in Reibkontakten untersucht: Der Bildungsmechanismus von prismatischen Versetzungsstrukturen unter einem Indenter mit sphärischer Spitze und der Versetzungstransport in anfänglich versetzungsfreie Bereiche unter einer fahrenden Asperität mit sphärischer Spitze.

**Prismatische Versetzungsstrukturen** Unter Indentierung können sich aus einer Frank-Read-Quelle perfekt prismatische Versetzungen, helixförmige prismatische Versetzungsstrukturen, v-förmige prismatische Versetzungen oder u-förmige prismatische Versetzungen ausbilden. Die Bildung ist durch deterministisches bzw. stochastisches Quergleiten von Versetzungen geprägt, welches durch das aufgelöste Spannungsfeld des Indenters und die Versetzungsinteraktionen erklärt werden kann.

Die Kristallorientierung und die Burgersvektororientierung der Versetzungsquelle spielen für den Bildungsmechanismus eine übergeordnete Rolle, da sie das aufgelöste Spannungsfeld, damit die Quergleitprozesse und somit die Ausprägung der prismatischen Versetzungsstrukturen bestimmen. Die vorgestellte Spannungsfeldanalyse liefert eine Erklärung für die Bildung von prismatischen Strukturen, wie sie in Experimenten und verschiedenen Simulationen beobachtet werden und kann auch auf andere Gitterstrukturen angewendet werden. Der Bildungsmechanismus lässt sich ebenfalls von der Frank-Read-Quelle auf allgemeine Versetzungsquellen übertragen. Relevant ist lediglich, dass die Versetzungsquelle einen quergleitfähigen Schraubencharakter ausbilden kann und bei gegebener Spannung eine kritische Aktivierungslänge aufweist.

Die Größe der prismatischen Versetzungen wird hauptsächlich durch die relative Position von der Versetzungsquelle und der Indenterspitze bestimmt. Dadurch lässt sich die etwa konstante Größe der Versetzungsringe innerhalb einer prismatischen Versetzungsstruktur erklären. Der Bildungsmechanismus ist stabil gegenüber Belastungsveränderungen, wie z.B. überlagerten lateralen Indenterbewegungen oder Veränderungen der Indenterkraft und -radius. Wird die Indentierung mit einer zusätzlichen lateralen Bewegung überlagert, bilden sich weiterhin prismatische Versetzungsstrukturen aus — sofern die laterale Geschwindigkeit ausreichend klein ist. In diesem Falle verändert sich die Größe der prismatischen Strukturen, da sich die relative Position von Versetzungsquelle und Indenterspitze ändert. Für den Sonderfall eines symmetrischen, aufgelösten Spannungsfelds verändern Indenterkraft und -radius nicht die Größe der perfekten prismatischen Versetzungen. Jedoch verändern sich für andere Belastungsparameter die maximalen Spannungen und die Form und Größe der Bereiche hoher Spannungen und damit Bereiche, in denen Versetzungsquellen aktiviert werden. Die prismatischen Versetzungsstrukturen wechselwirken mit anderen Versetzungen bzw. prismatischen Strukturen, wodurch die Ausbildung sowohl gestoppt als auch ungehindert fortgesetzt werden kann. Für die ungestörte

Ausbildung prismatischer Versetzungsstrukturen ist eine kleine anfängliche Versetzungsdichte förderlich.

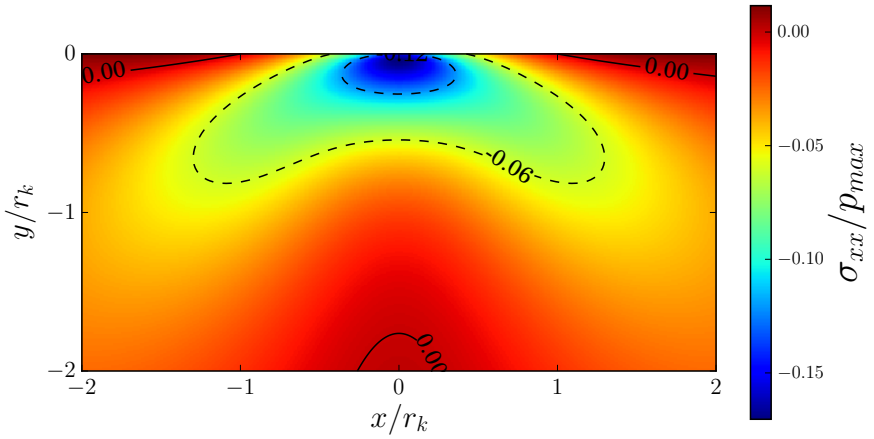
In dieser Arbeit wurden prismatische Versetzungsstrukturen unter ⟨111⟩, ⟨110⟩ und ⟨010⟩-Kristallorientierungen untersucht. In tribologischen Kontakten liegen meistens verschieden und beliebig orientierte Kristalle vor. Die Ausbildung von prismatischen Strukturen ist vermutlich nicht an hohe Kristallsymmetrien gebunden – ein Beispiel für prismatische Versetzungsstrukturen bei niedriger Kristallsymmetrie ist in Referenz [62] gegeben. Bislang sind in der Literatur jedoch keine weiteren Beispiele gegeben. Daher sollte überprüft werden werden, ob sich prismatische Versetzungsstrukturen auch in Kristallen ausbilden, die ausgehend von hohen Kristallorientierungen „verkippt“ werden. Damit kann beurteilt werden, ob in allgemeinen tribologischen Kontakten die Ausbildung prismatischer Versetzungsstrukturen zu erwarten ist.

**Versetzungstransport** Unter einer fahrenden Asperität werden je nach Kristallorientierung und Fahrtrichtung der Asperität Versetzungen auf ausgewählten Gleitsystemen mit dem Spannungsfeld mittransportiert. Bei gleicher kristallographischer Orientierung kann die Fahrtrichtung der Asperität auf der Oberfläche des Kristalls entscheiden, ob kein bzw. kaum Versetzungstransport vorliegt, oder Versetzungstransport bis an die Korngrenze — verbunden mit relativ großer plastischer Verformung. Für den Versetzungstransport auf einzelnen Gleitsystemen sind zwei Kriterien relevant: (i) Die Gleitebene muss relativ zur Eindruckachse und zu der Fahrtrichtung geeignet orientiert sein, um geometrisch den Transport zu ermöglichen. (ii) Zusätzlich muss das aufgelöste Spannungsfeld Triebkräfte für den Transport bereitstellen, welches durch die Kristallographie des Kristalls und der Burgersvektororientierung bestimmt wird. Prinzipiell ist der Versetzungstransport stärker ausgeprägt, wenn die Fahrtrichtung des Indenters parallel zu einem Burgersvektor ausgerichtet ist. In dieser Arbeit wurde ein Modell entwickelt, um jene Gleitsysteme zu identifizieren, auf welchen Versetzungen transportiert werden können. Dabei spielt die Größe des Querschnitts eine Rolle, welcher sich durch die Projektion der Isospannungsflächen der aufgelösten Schubspannung auf eine Ebene senkrecht zu der Fahrtrichtung ergibt. Prinzipiell erhöhen Quergleitprozesse die geometrischen Möglichkeiten für Versetzungen, der fahrenden Indenterspitze zu folgen. Der Anteil der zusätzlichen Gleitsysteme, auf denen Versetzungen transportiert wurden, war bei den untersuchten Kristallorientierungen und Indenterfahrtrichtungen jedoch gering. Ebenfalls wurde in dieser Arbeit die Transportlänge von Versetzungen untersucht. Auf gleicher Gleitebene beeinflusst die Burgersvektororientierung die Transportlänge, was mit der Linienenergie von Versetzungen erklärt werden kann. Der Reibungskoeffizient des Reibkontaktes verändert die maximalen Spannungen und die Form des Spannungsfeldes, wodurch die Transportlänge von Versetzungen verringert oder vergrößert werden kann. Es werden jedoch Mikrostrukturen und Oberflächentopographien beobachtet, welche ähnlich zu den Simulationen des reibungslosen Kontakts sind. Je nach anfänglicher Versetzungsdichte und Belastungsparametern, bildet sich eine mehr und weniger reversible Versetzungsstruktur aus und der Anteil plastischer Verformung durch Versetzungstransport an der gesamten plastischen Verformung ist unterschiedlich groß. Der Versetzungstransport führt zu Oberflächentopographien, welche charakteristisch für die Gleitsysteme sind, auf denen Versetzungen transportiert werden. Die Topographien, welche durch transportierte Versetzungen verursacht werden, können durch symmetrische, asymmetrische oder fehlende Vertiefungen geprägt sein.

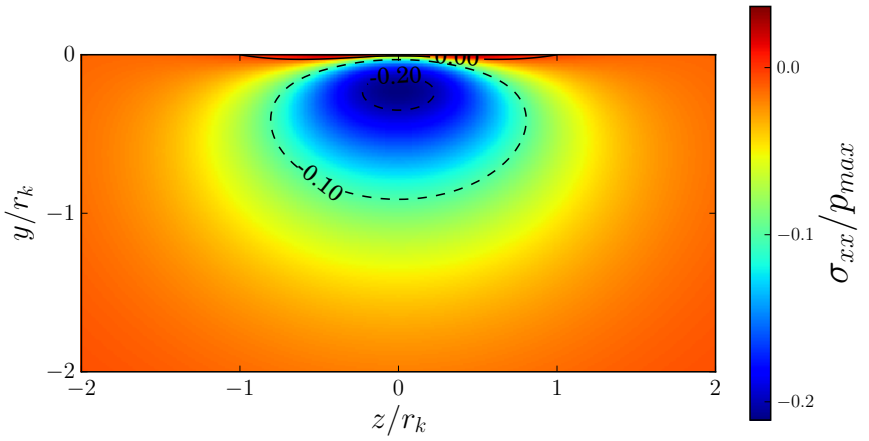
Als Fortführung der Untersuchungen des Versetzungstransports können weitere Analysen durchgeführt werden, wie z.B. der Energiedissipation je nach kristallographischer Orientierung oder der Gitterrotationen hinsichtlich einer Vorzugsrichtung der Verformung aufgrund der Fahrtrichtung des Indenters. Vergleiche von Experimenten und Simulationen in der Literatur zeigen, dass bei Simulationen von Gitterrotationen durch Indentierung die Kristallographie mit den Gleitsystemen berücksichtigt werden muss und ein reines Fließkriterium nach Mises nicht ausreichend ist, um die verschiedenen Zonen der Rotation inklusive Rotations-Richtungswechsel darzustellen [43]. Missorientierungen im Reibkontakt der Diskrete Versetzungsdynamik-Simulationen können berechnet werden und mit experimentellen EBSD-Untersuchungen (Electron Backscatter Diffraction – Elektronenrückstreubeugung) abgeglichen werden.

# A Spannungskomponenten im Hertzschen Kontakt

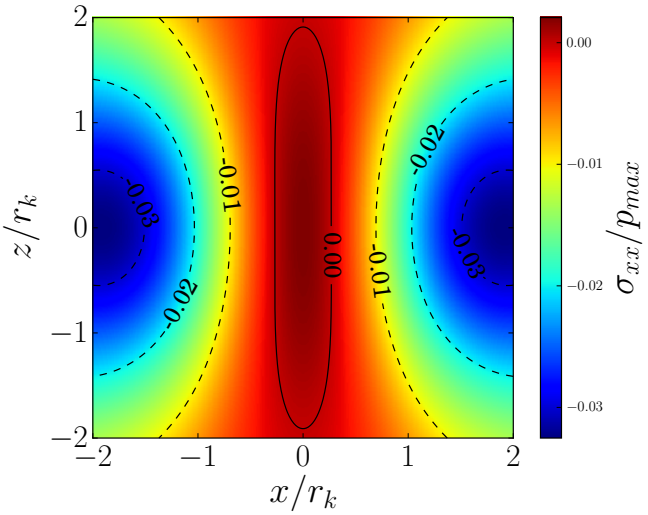
Abbildungen A1-A7 zeigen die Spannungskomponenten im Hertzschen Kontakt für ausgewählte Schnittebenen. Die Spannungskomponenten werden nach der analytischen Lösung des Hertzschen Kontaktes in Referenz [102] berechnet. Die Querkontraktionszahl beträgt $\nu = 0.347$ um Materialverhalten von Aluminium zu beschreiben (Kap. 3.2). Die Indentierung erfolgt auf der $xz$-Oberfläche in negative $y$-Richtung. Die Spannungen sind auf den maximalen Hertzschen Druck $p_{max}$ nach Gleichung (3.6) und die Achsen auf den Kontaktradius $r_k$ nach Gleichung (3.5) normiert.




(a) Schnittebene bei $z = r_k$

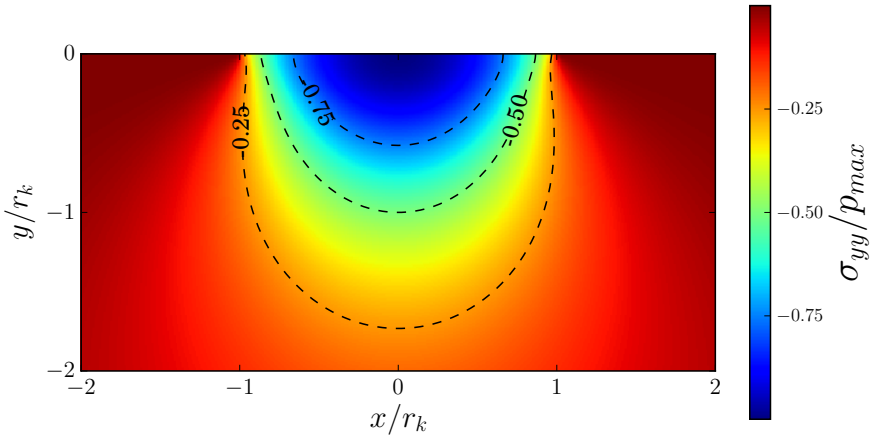



(b) Schnittebene bei $x = r_k$

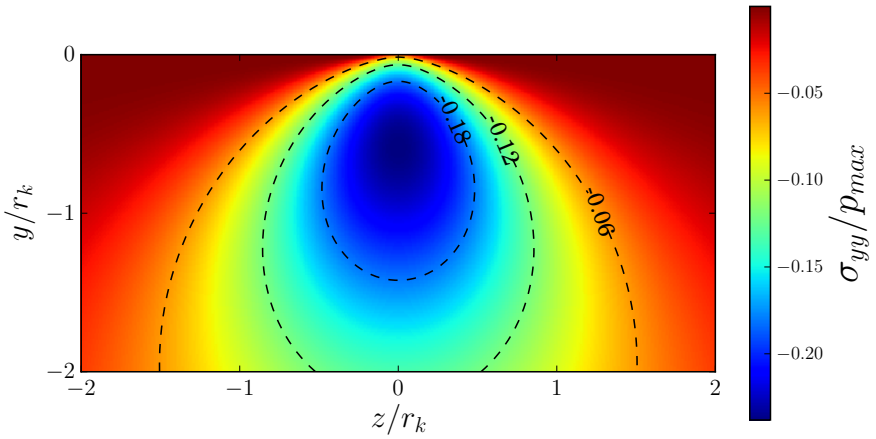



(c) Schnittebene bei $y = -2r_k$

**Abb. A1:** Spannungskomponente $\sigma_{xx}$

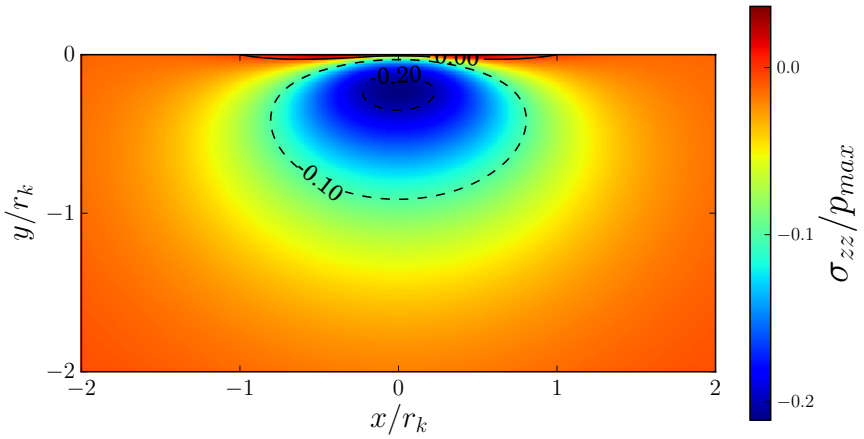



(a) Schnittebene unter der Indenterspitze ($z = 0$)

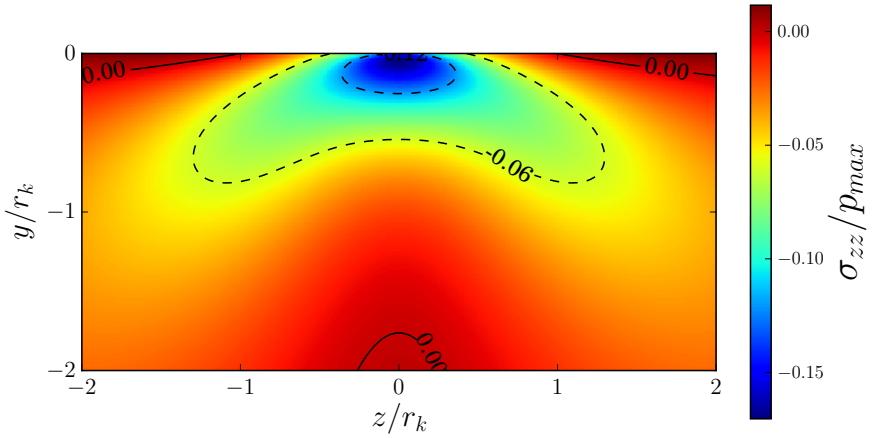



(b) Schnittebene bei $x = r_k$

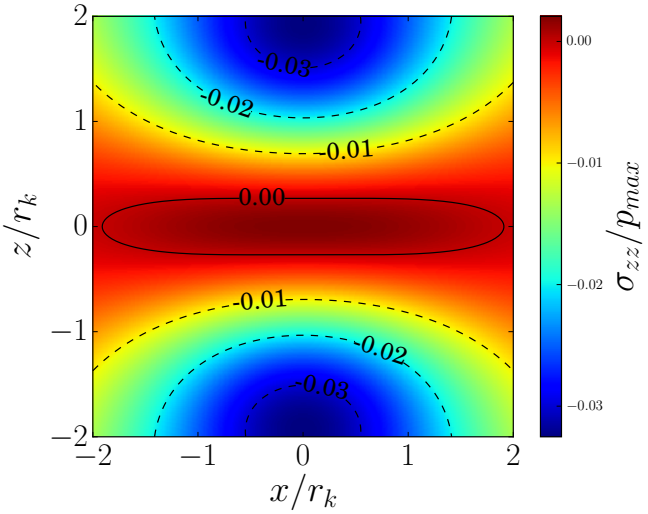
**Abb. A2:** Spannungskomponente $\sigma_{yy}$




(a) Schnittebene bei $z = r_k$

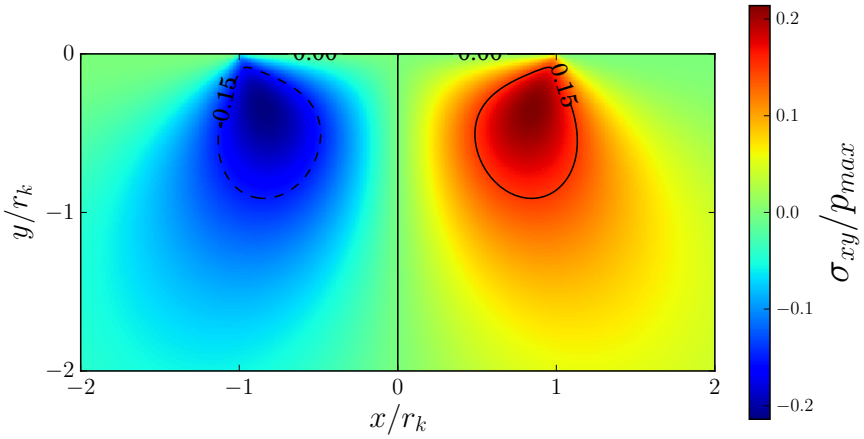



(b) Schnittebene bei $x = r_k$

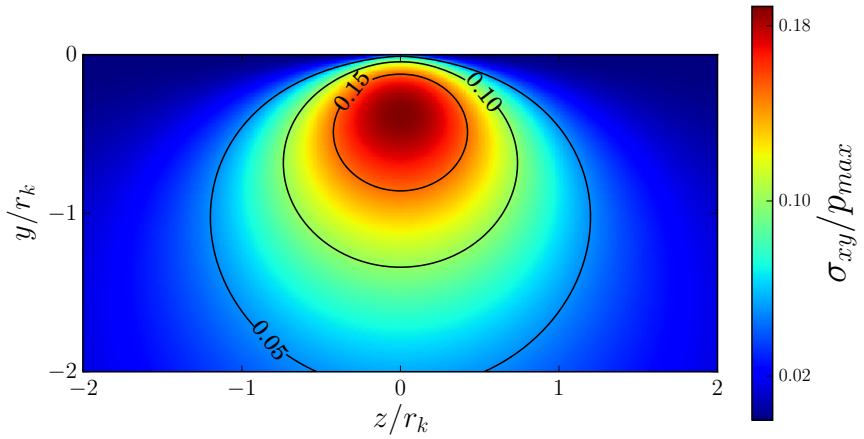



(c) Schnittebene bei $y = -2r_k$

**Abb. A3:** Spannungskomponente $\sigma_{zz}$

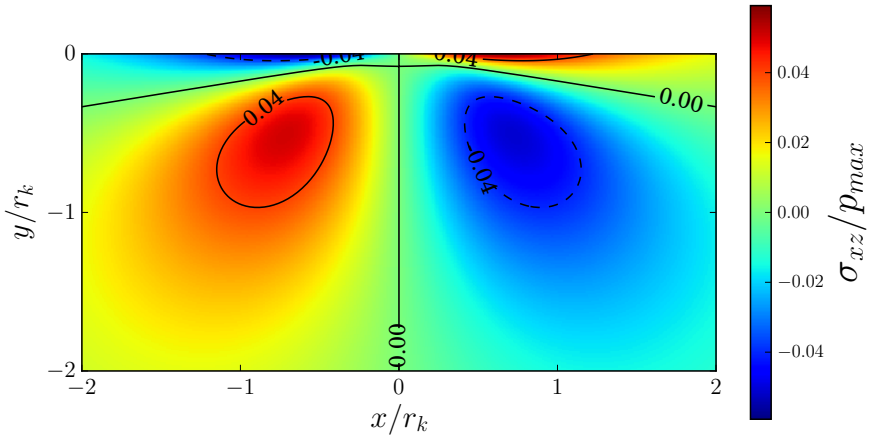



(a) Schnittebene unter der Indenterspitze ($z = 0$)

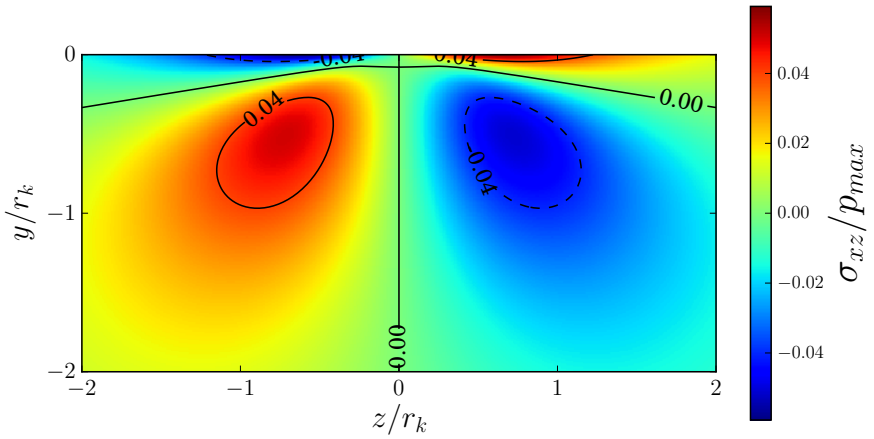



(b) Schnittebene bei $x = r_k$

**Abb. A4:** Spannungskomponente $\sigma_{xy}$

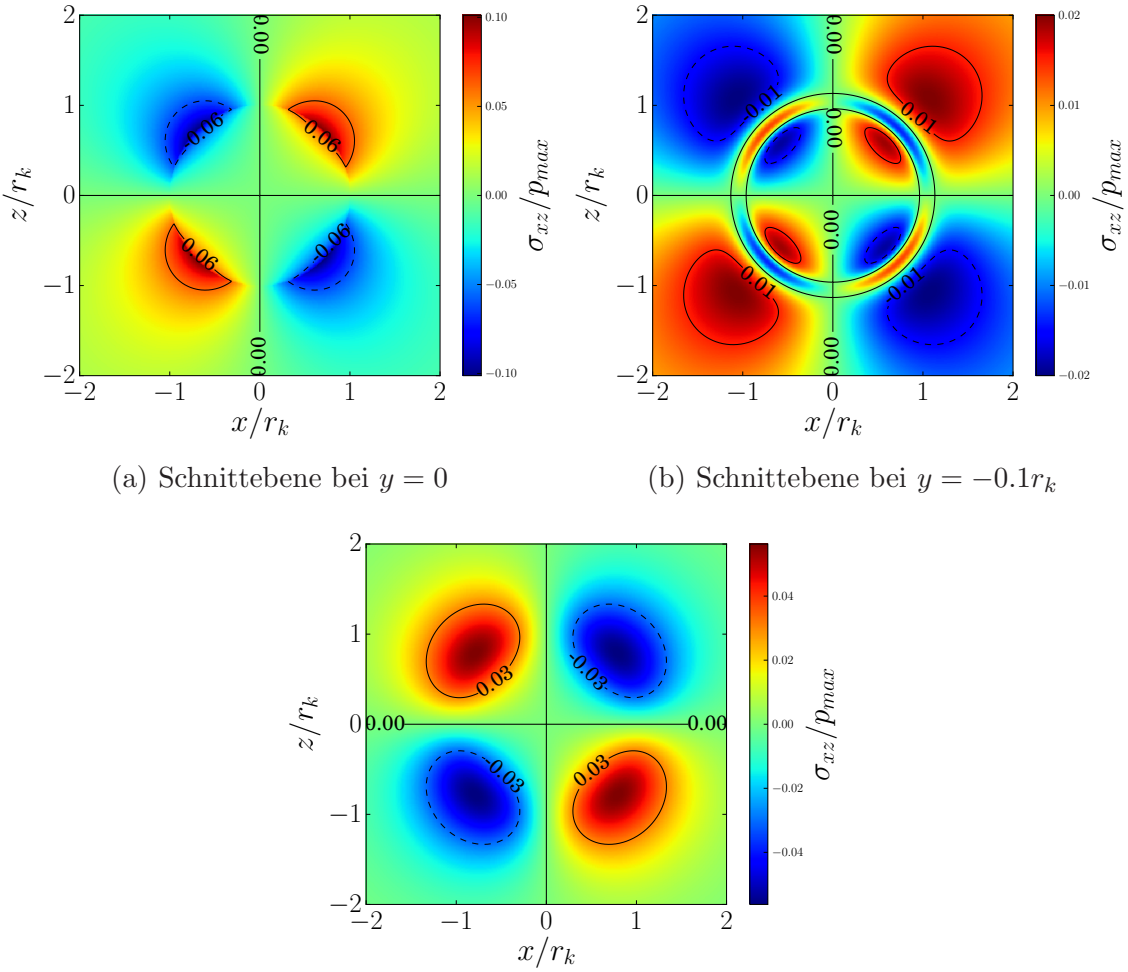



(a) Schnittebene bei $z = r_k$




(b) Schnittebene bei $x = r_k$

**Abb. A5:** Spannungskomponente $\sigma_{xz}$

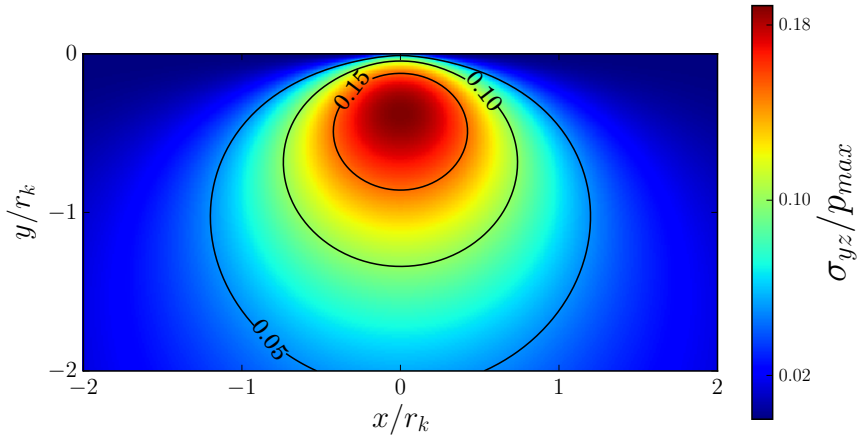



(a) Schnittebene bei $y = 0$

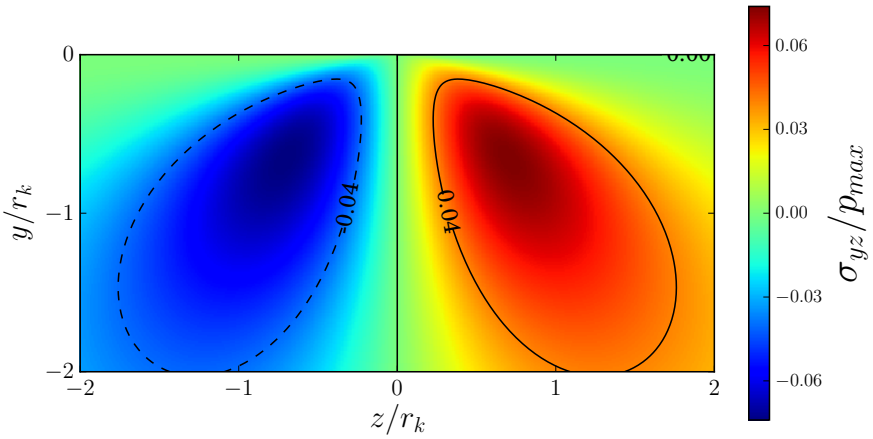
(b) Schnittebene bei $y = -0.1r_k$

(c) Schnittebene bei $y = -0.5r_k$

**Abb. A6:** Spannungskomponente $\sigma_{xz}$




(a) Schnittebene bei $z = r_k$




(b) Schnittebene bei $x = r_k$

**Abb. A7:** Spannungskomponente $\sigma_{yz}$

# B Gleitsystem-Nomenklatur

Tabelle B1 listet die Gleitebene und den Burgersvektor je nach Nummer des Gleitsystems auf. Die Gleitebenennormalen und die Richtung der Burgersvektoren sind im Kristallkoordinatensystem angegeben. Als Übersicht sind die Gleitebenen und Burgersvektoren im Thompson-Tetraeder im kubisch flächenzentrierten Kristall in Abbildung B1 dargestellt. Die Symbole > zeigen in Richtung der Kristallrichtungen an.

**Tabelle B1:** Nomenklatur für die Nummerierung der Gleitsysteme

| Gleitsystem | Gleitebene | Burgersvektorrichtung |
|---|---|---|
| 1 | $(1\bar{1}\bar{1})$ | $[110]$ |
| 2 | | $[01\bar{1}]$ |
| 3 | | $[101]$ |
| 4 | $(111)$ | $[\bar{1}01]$ |
| 5 | | $[\bar{1}10]$ |
| 6 | | $[01\bar{1}]$ |
| 7 | $(\bar{1}\bar{1}1)$ | $[011]$ |
| 8 | | $[\bar{1}10]$ |
| 9 | | $[101]$ |
| 10 | $(\bar{1}1\bar{1})$ | $[\bar{1}01]$ |
| 11 | | $[011]$ |
| 12 | | $[110]$ |

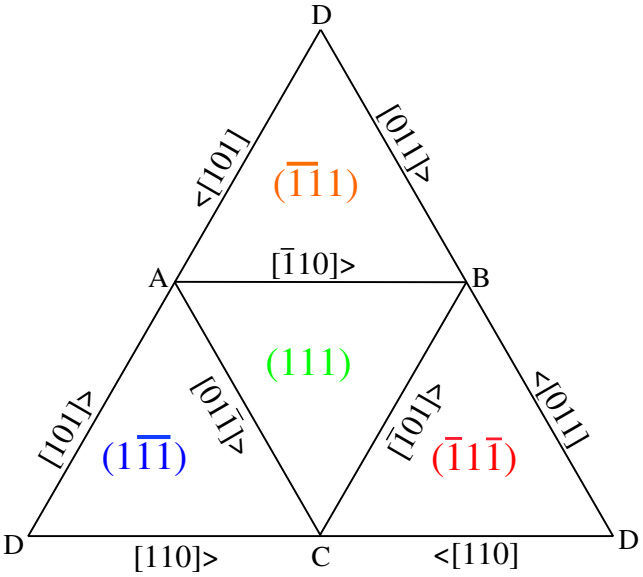
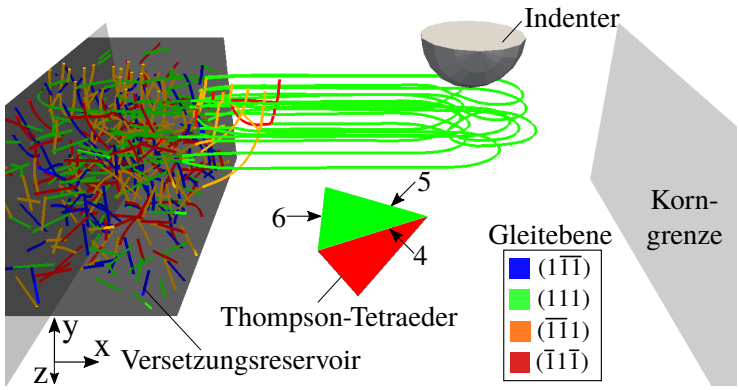


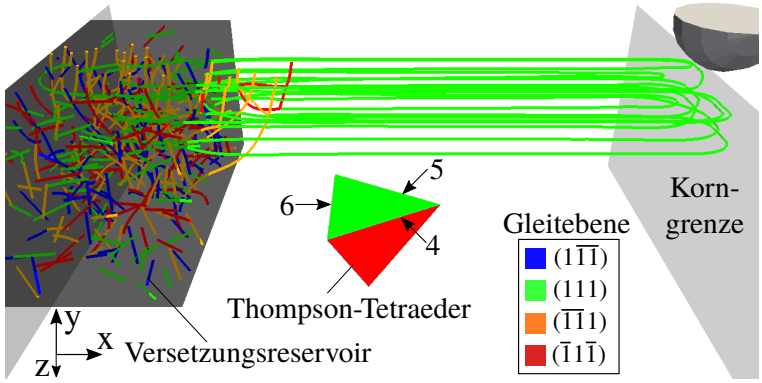

**Abb. B1:** Thompson-Tetraeder

# C Mikrostrukturentwicklung bei Versetzungstransport

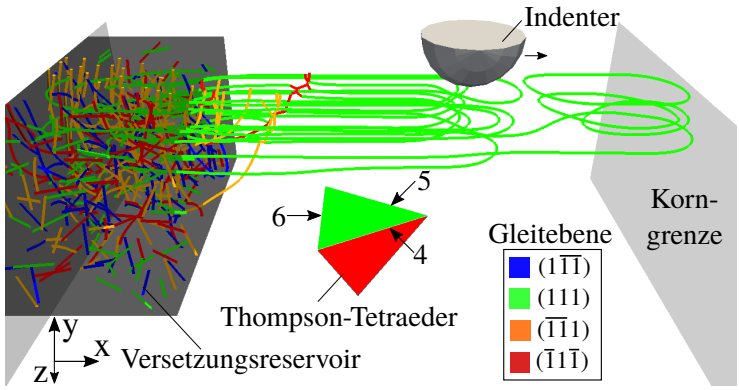
Abbildungen C1-C6 zeigen die Mikrostrukturentwicklung für die Setups aus Tabelle 4.1 während eine Asperität reibungsfrei unidirektional über die Oberfläche eines kubisch flächenzentrierten Einzelkristalls fährt (Kap. 3.2). Das Quergleiten von Versetzungen ist nicht zugelassen. Die Farbgebung der Versetzung entspricht der Zugehörigkeit nach Gleitebene. Die Orientierung der Gleitebenen und die Orientierung der Burgersvektoren je nach Setup ist anhand der verschieden orientierten Thompson-Tetraeder in den Abbildungen erkennbar. Die Pfeile auf die Kanten des Thompson-Tetraeders zeigen die Burgersvektororientierung von Gleitsystemen, auf denen Versetzungen transportiert werden. Für die Gleitsystem-Nomenklatur sei auf Anhang B verwiesen. Zusätzliche Videos der Entwicklung der Mikrostruktur sind in Referenz [103] zu finden.




(a) Erste Indenterfahrt

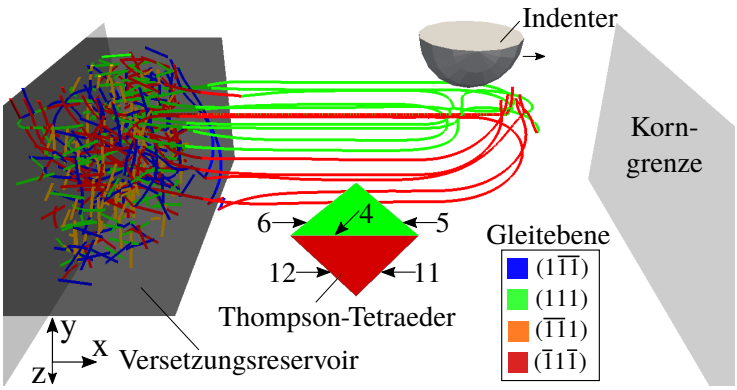



(b) Erste Indenterfahrt

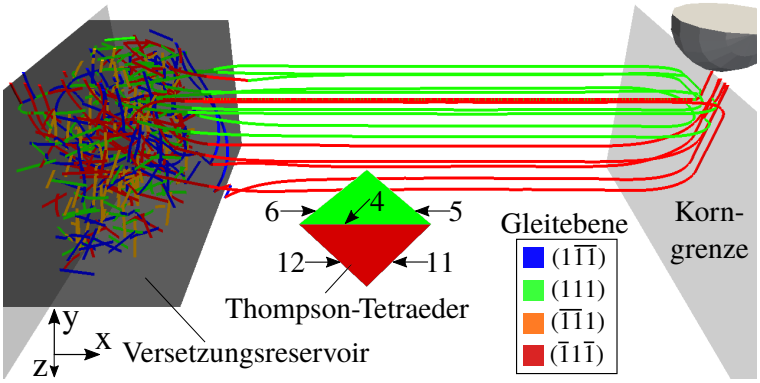



(c) Zweite Indenterfahrt

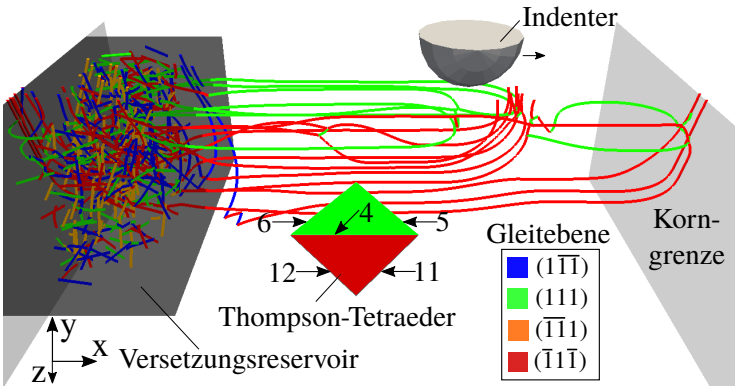
**Abb. C1:** Setup 111: Versetzungsstruktur zu verschiedenen Zeitpunkten




(a) Erste Indenterfahrt

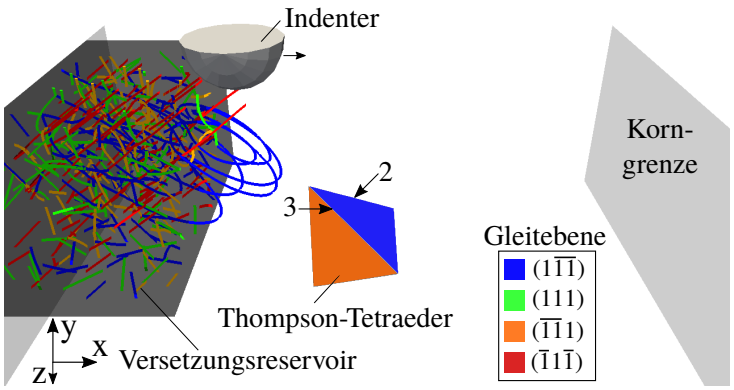



(b) Erste Indenterfahrt

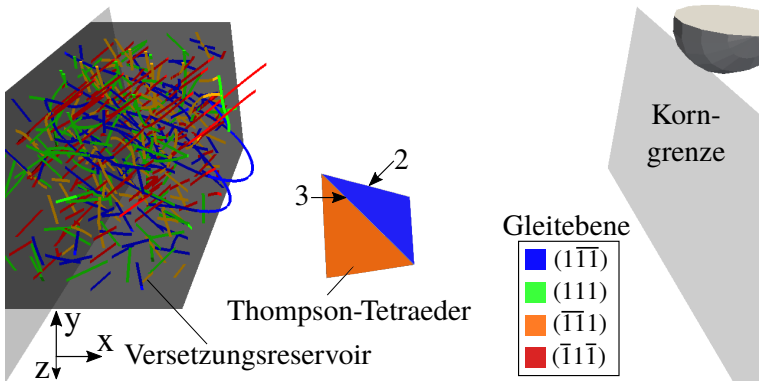



(c) Zweite Indenterfahrt

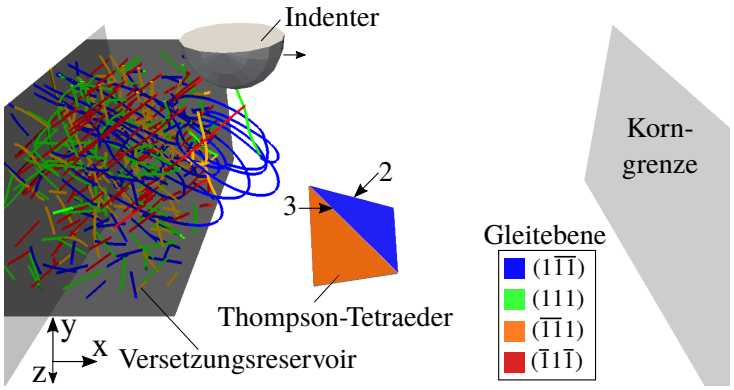
**Abb. C2:** Setup $111_{par}$: Versetzungsstruktur zu verschiedenen Zeitpunkten




(a) Erste Indenterfahrt

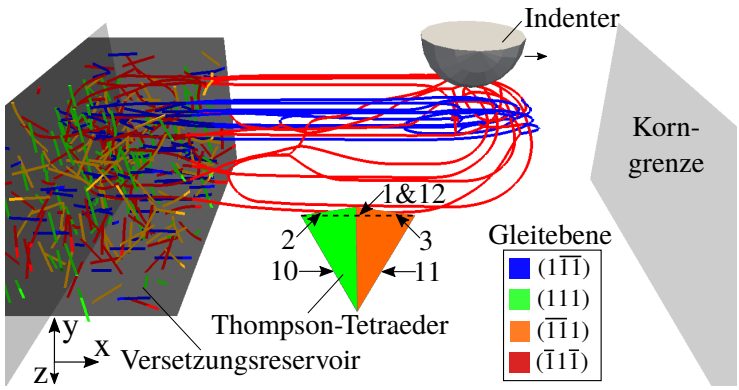



(b) Erste Indenterfahrt

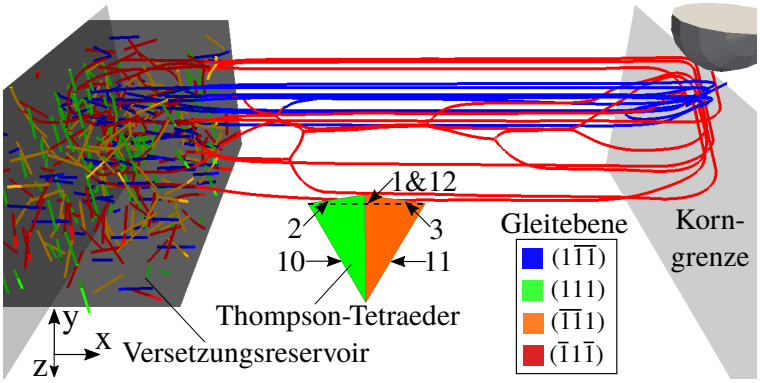



(c) Zweite Indenterfahrt

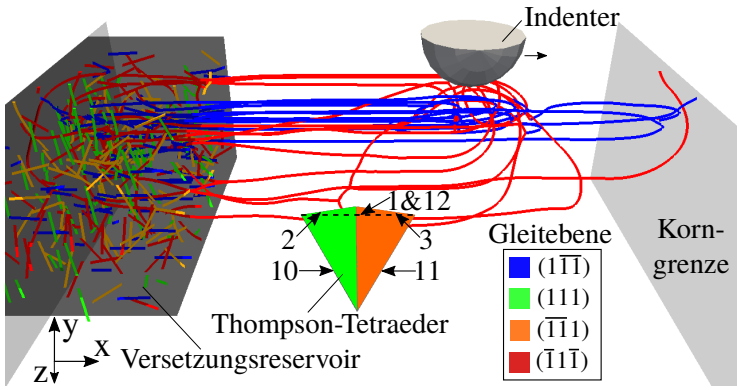
**Abb. C3:** Setup 110: Versetzungsstruktur zu verschiedenen Zeitpunkten




(a) Erste Indenterfahrt

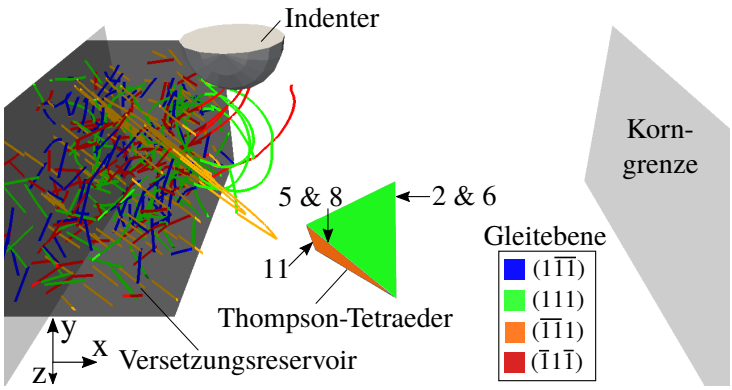



(b) Erste Indenterfahrt

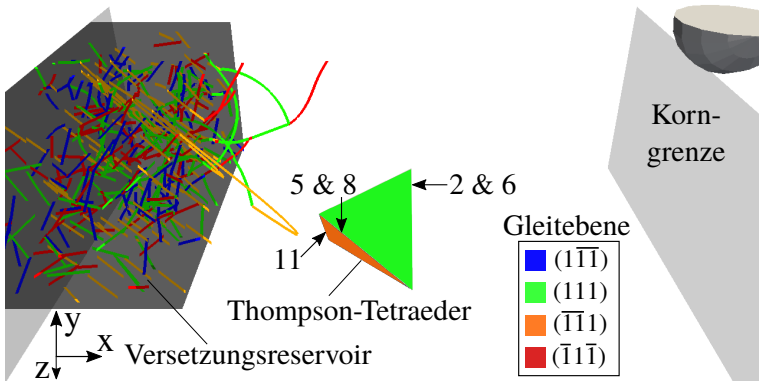



(c) Zweite Indenterfahrt

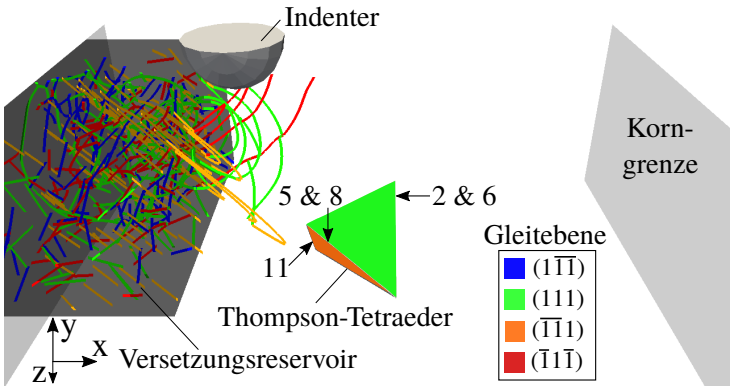
**Abb. C4:** Setup $110_{par}$: Versetzungsstruktur zu verschiedenen Zeitpunkten




(a) Erste Indenterfahrt

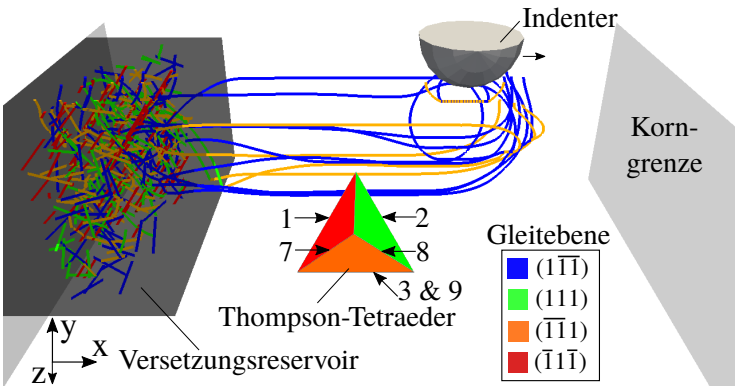



(b) Erste Indenterfahrt

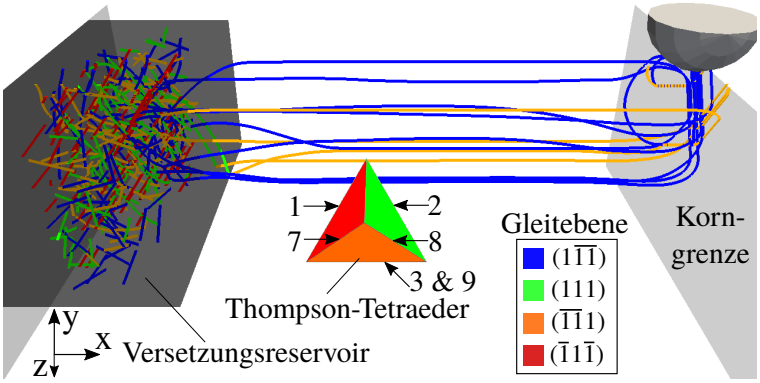



(c) Zweite Indenterfahrt

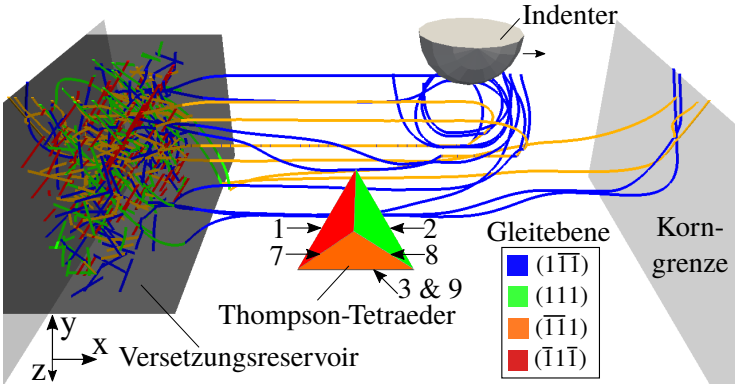
**Abb. C5:** Setup 010: Versetzungsstruktur zu verschiedenen Zeitpunkten




(a) Erste Indenterfahrt




(b) Erste Indenterfahrt



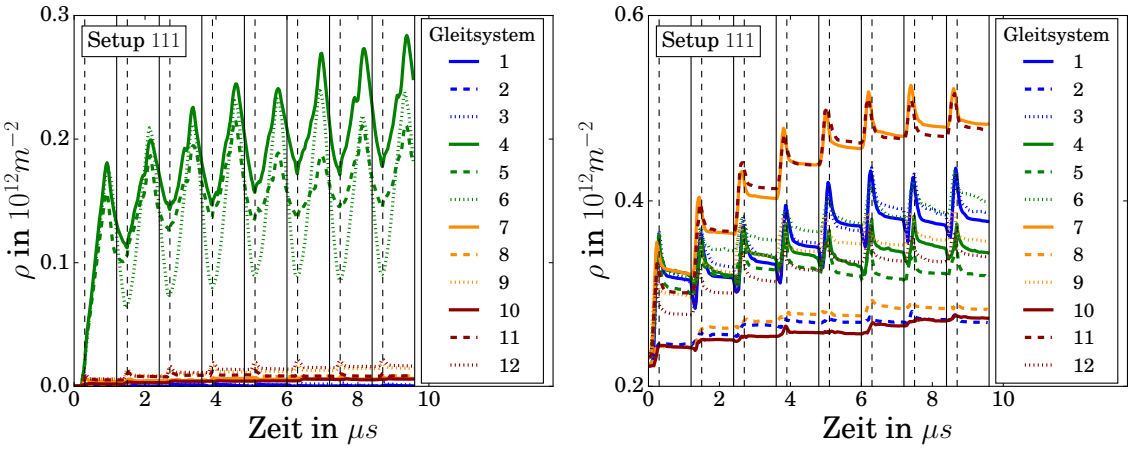

(c) Zweite Indenterfahrt

**Abb. C6:** Setup $010_{par}$: Versetzungsstruktur zu verschiedenen Zeitpunkten

# D Versetzungsdichteentwicklung bei Versetzungstransport

Abbildungen D1-D17 zeigen die Entwicklung der Versetzungsdichte auf allen Gleitsystemen für die Setups aus Tabelle 4.1 während eine Asperität unidirektional über die Oberfläche eines kubisch flächenzentrierten Einzelkristalls fährt (Kap. 3.2). Jede Kurve ist die Mittelung aus 16 statistisch gleichwertigen Simulationen, bei denen die Anfangsstruktur statistisch variiert ist (Kap. 3.2). Es wird die Gleitsystem-Nomenklatur in Anhang B verwendet. Die Farbgebung der Gleitsysteme in den Diagrammen entspricht der Zugehörigkeit nach Gleitebene, analog zu der Farbgebung in Tabelle B1. Die Abbildungen D1-D17 zeigen die Entwicklung der Versetzungsdichte für verschiedene Kombinationen aus reibungslosen oder reibungsbehafteten Kontakten, bei denen Quergleiten zugelassen oder unterdrückt wird. In den reibungsbehafteten Kontakten beträgt der Reibungskoeffizient $\mu = 0.25$.

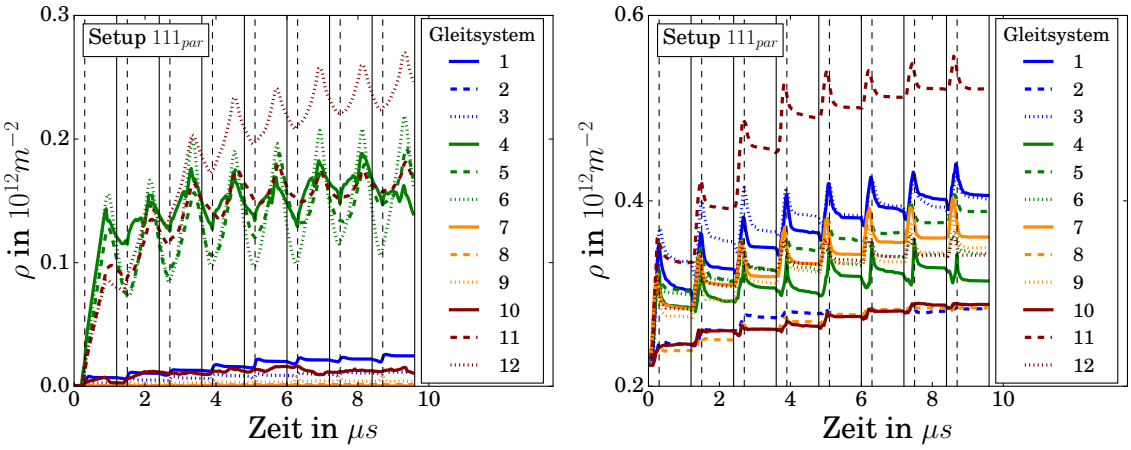
## D1 Reibungsfreier Kontakt ohne Versetzungsquergleiten




(a) Außerhalb des Reservoirs

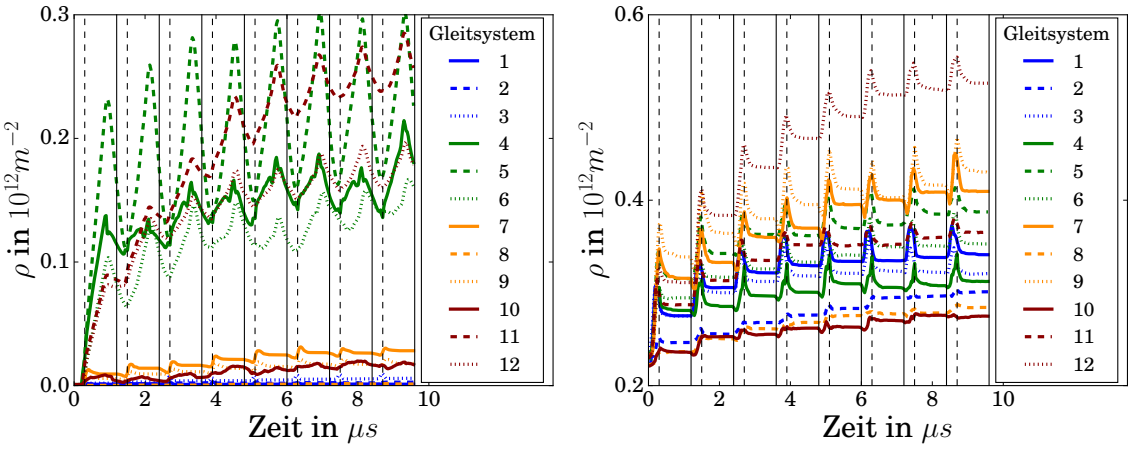
(b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D1:** Setup 111: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt



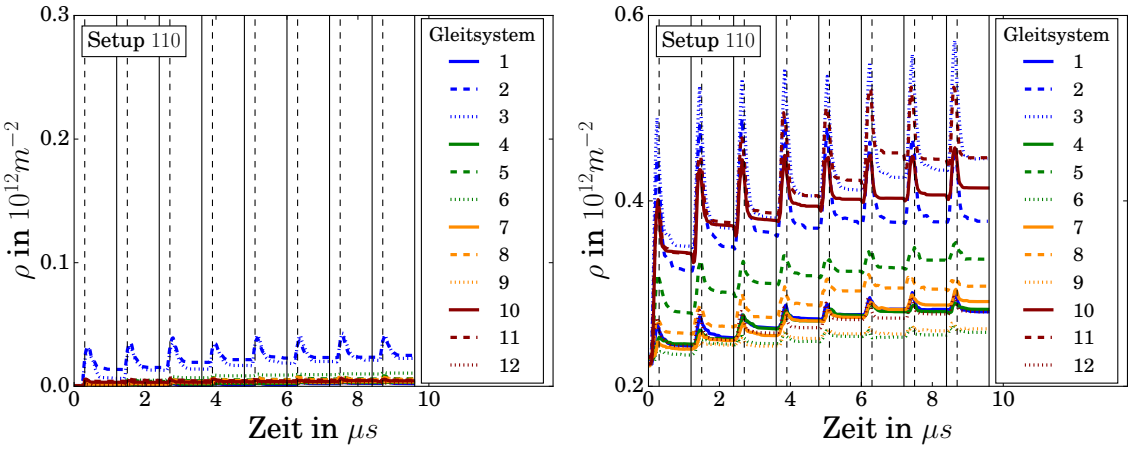

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D2:** Setup $111_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt



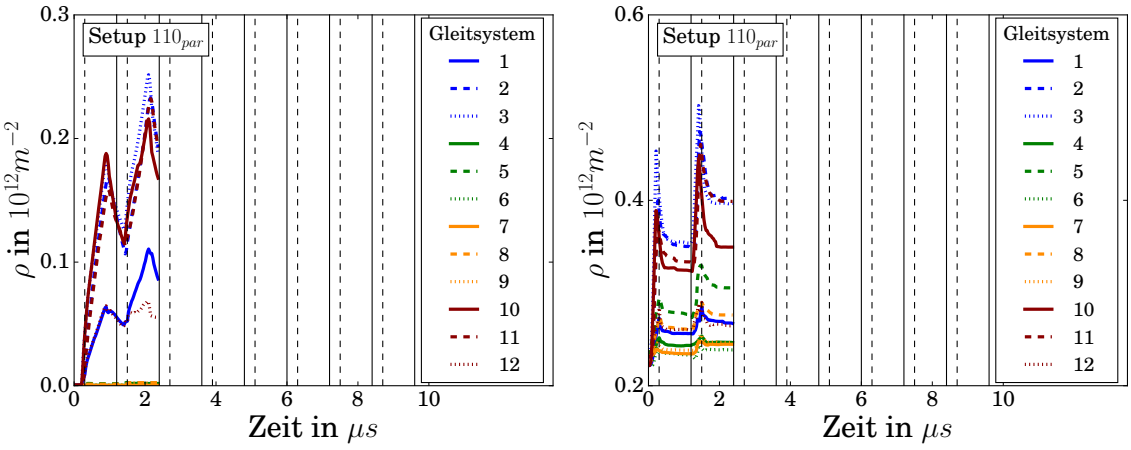

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D3:** Wie Setup $111_{par}$, aber mit umgekehrten Vorzeichen der Fahrrichtung: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt



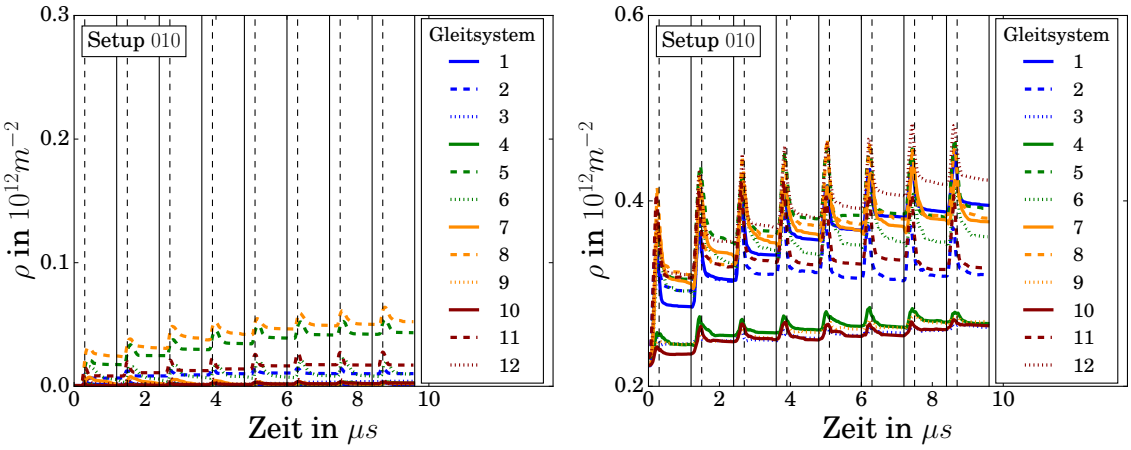

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D4:** Setup 110: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt



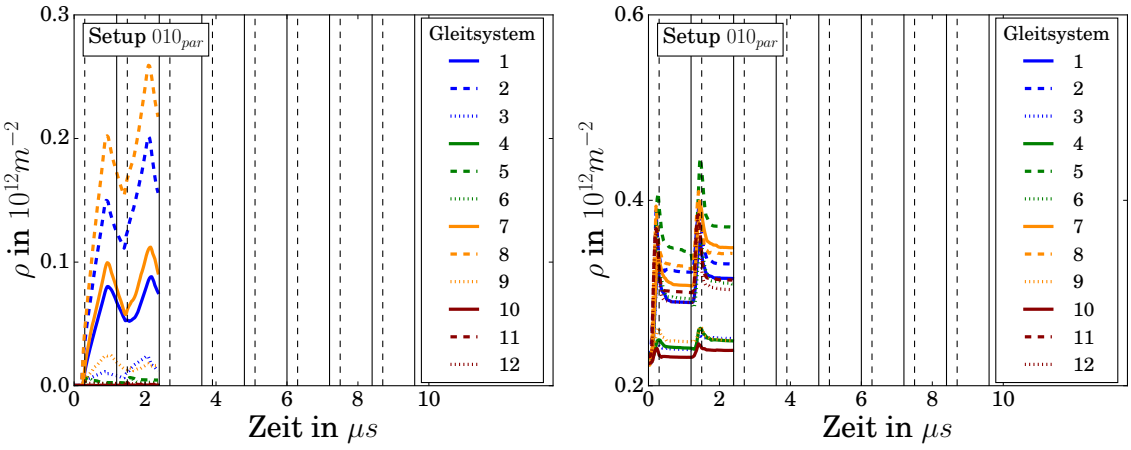

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D5:** Setup $110_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt




(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

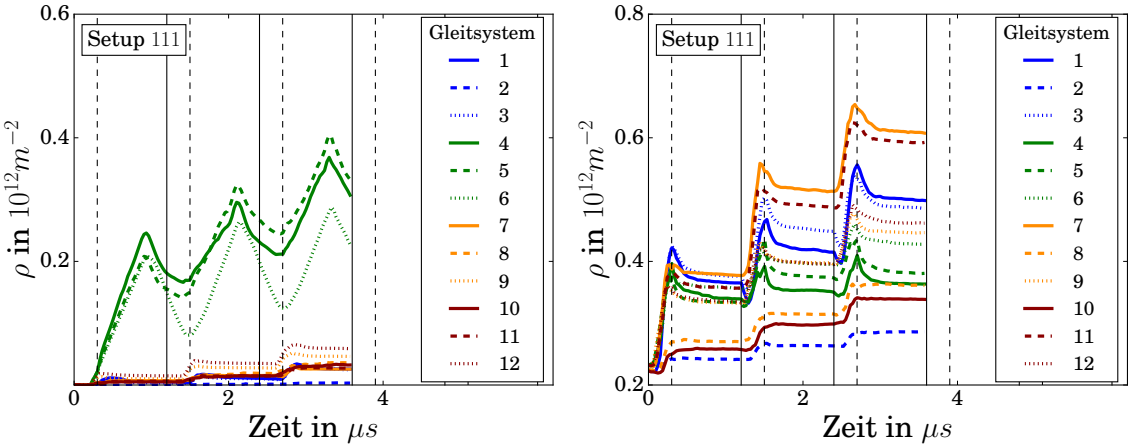
**Abb. D6:** Setup 010: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt




(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

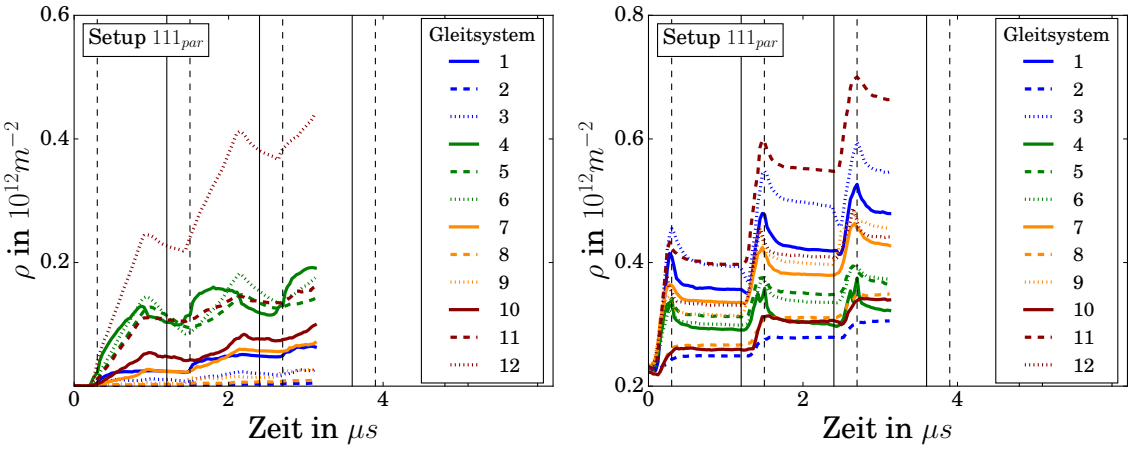
**Abb. D7:** Setup $010_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt

# D2 Reibungsfreier Kontakt mit Versetzungsquergleiten



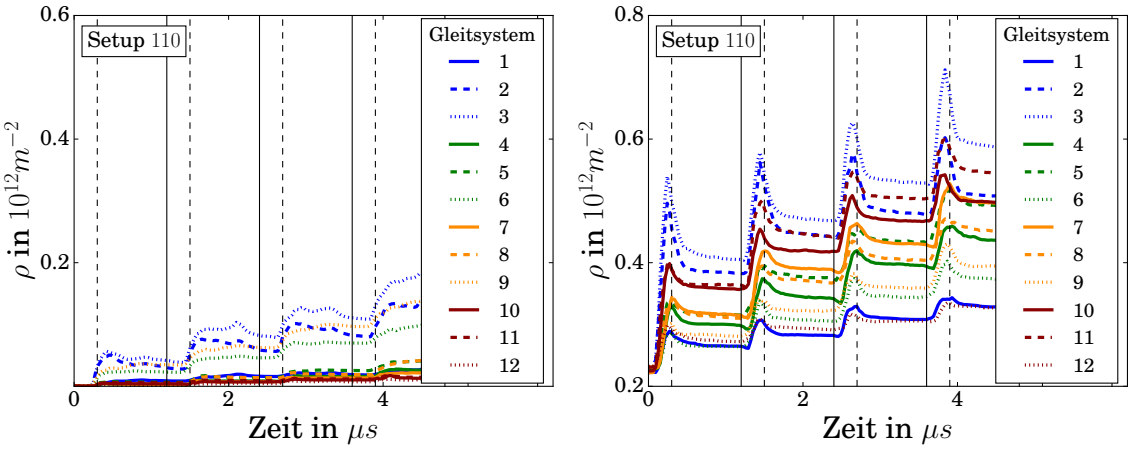

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D8:** Setup 111: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt



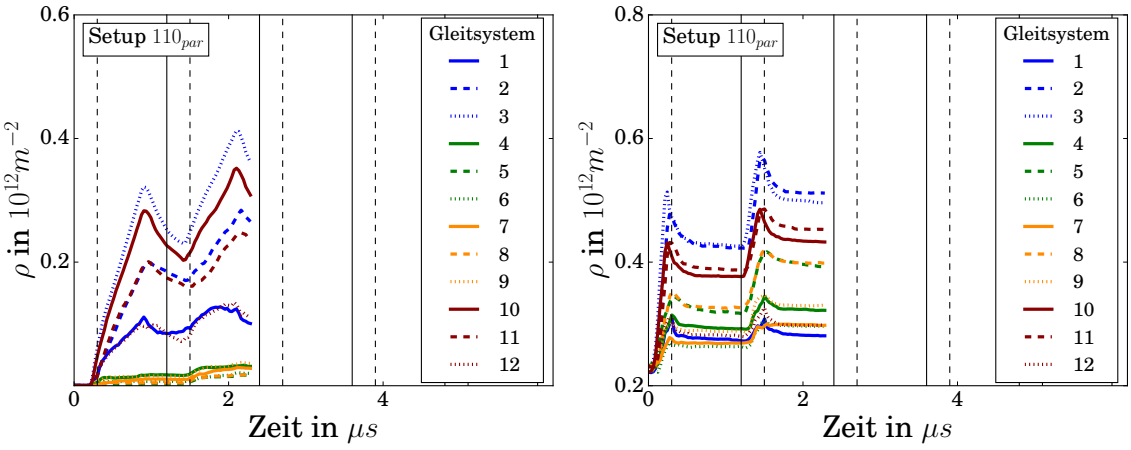

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D9:** Setup $111_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt



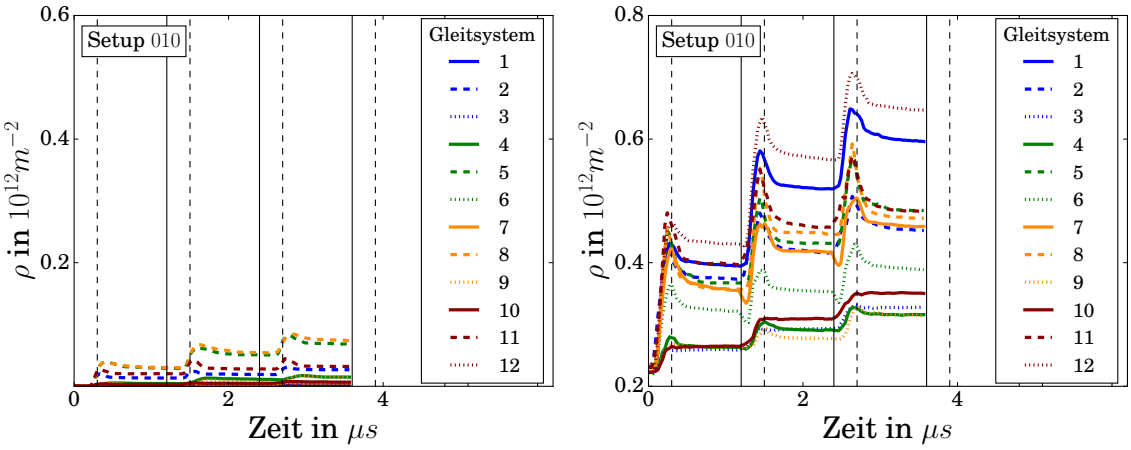

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D10:** Setup 110: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt



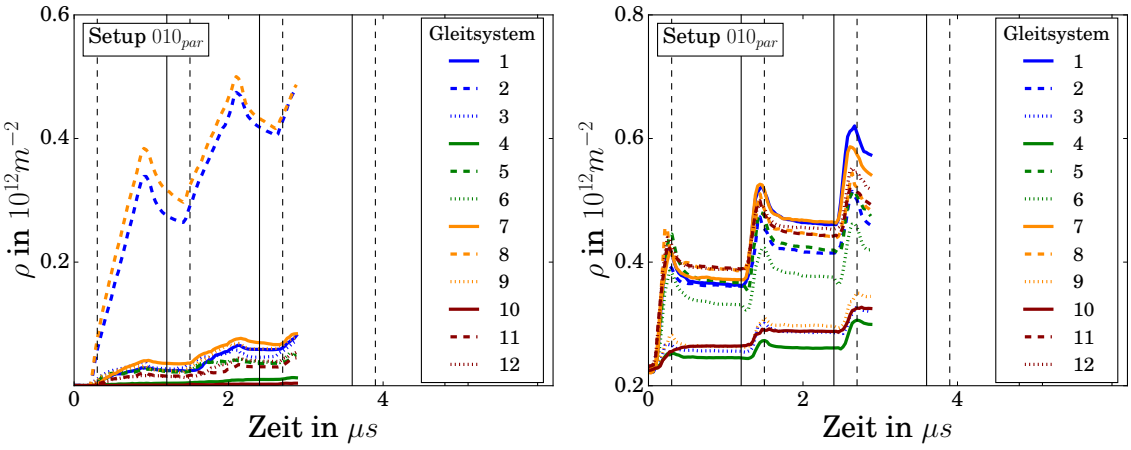

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D11:** Setup $110_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt




(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

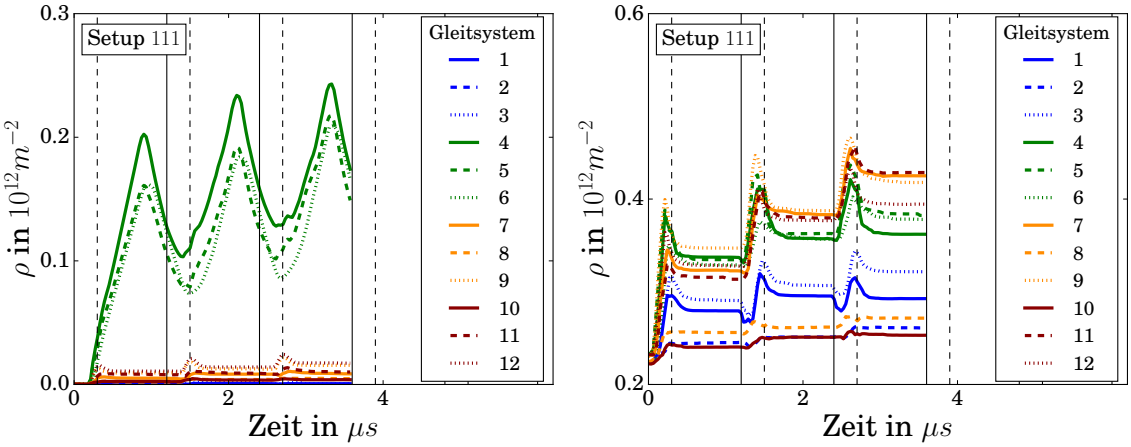
**Abb. D12:** Setup 010: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt




(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

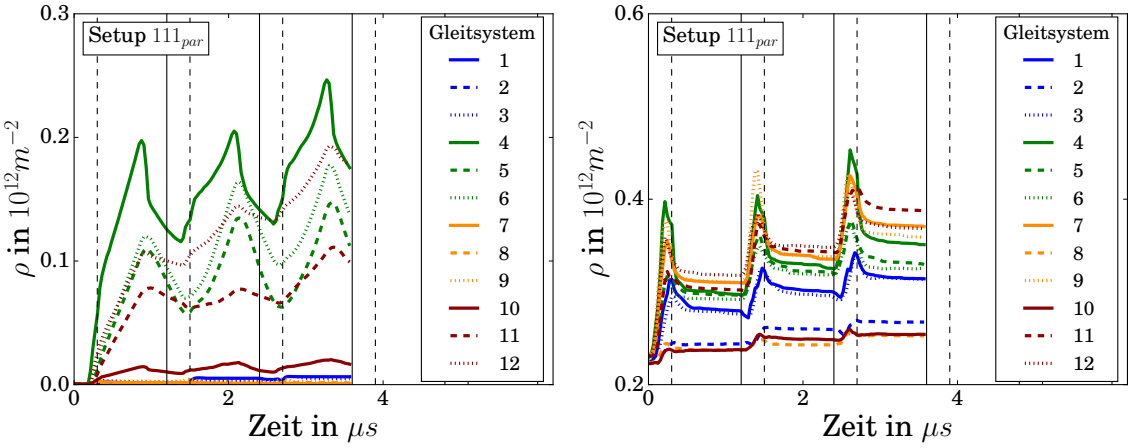
**Abb. D13:** Setup $010_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt

# D3 Reibungsbehafteter Kontakt ohne Versetzungsquergleiten



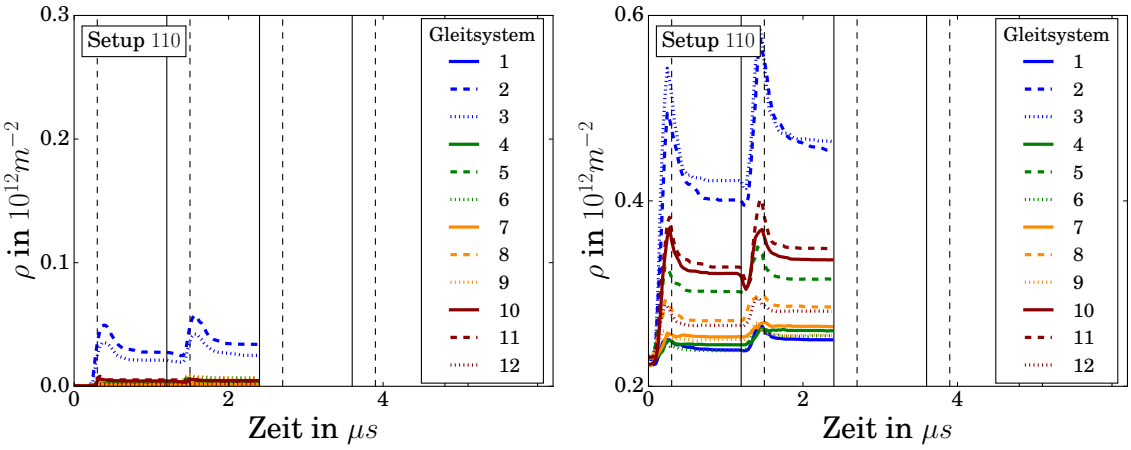

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D14:** Setup 111: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt



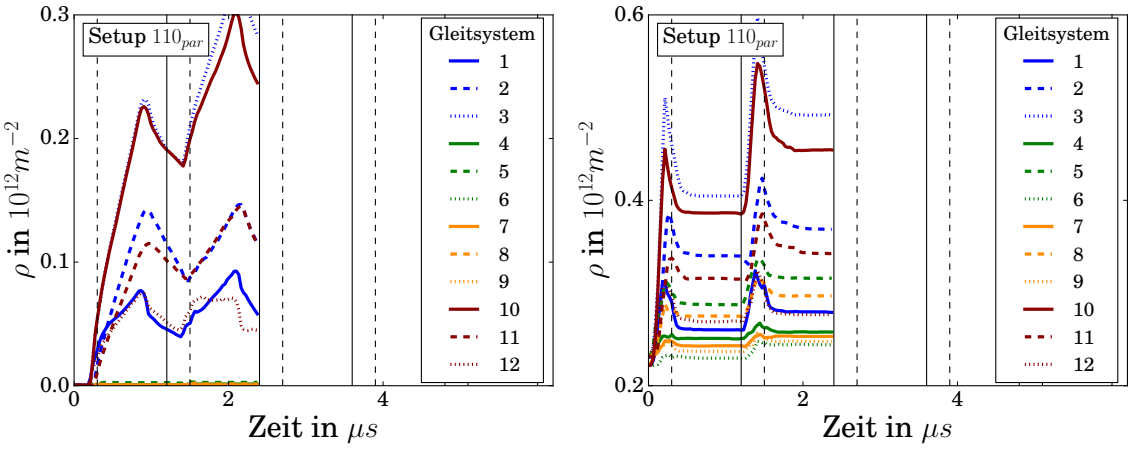

(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D15:** Setup $111_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt




(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D16:** Setup 110: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt




(a) Außerhalb des Reservoirs (b) Innerhalb des Reservoirs

**Abb. D17:** Setup $110_{par}$: Entwicklung der Versetzungsdichte $\rho$ mit der Zeit - - - Indenter verlässt das Versetzungsreservoir —— Beginn einer neuen Indenterfahrt

# E Oberflächentopographie bei Versetzungstransport

In den Abbildungen D1-D6 sind die Oberflächentopographie zu den Setups in Tabelle 4.1 zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt, wenn eine Asperität reibungsfrei über die Oberfläche eines Einzelkristalls fährt (Kap. 3.2). Das Quergleiten von Versetzungen ist nicht zugelassen. Alle Abbildungen zeigen die Probe ohne elastische Einbettung. Die Verschiebung $u_y$ der Oberfläche in Eindrucksrichtung aufgrund von Versetzungsgleiten ohne das Indenterfeld ist in der Einheit Gitterkonstante $a$ angegeben. In den Simulationen werden die Proben teilweise aber nicht vollständig relaxiert, bevor die nächste Indenterfahrt beginnt. Mit einem „teilrelaxierten“ Zustand ist daher der Zeitpunkt direkt vor der nächsten Indenterfahrt gemeint, bei dem der vorige Indenter sich nicht mehr auf der Probe befindet. Dieser Zeitpunkt entspricht einer vollen Linie in den Versetzungsdichte-Zeit-Diagrammen.

Die Topographien in Abbildungen D1-D6 gehören zu den Versetzungsdichte-Zeit-Diagrammen in Abbildung D1, Abbildung D2 und den Abbildungen D4-D7. Die Asperität fährt in der Mitte der Probe in Richtung der positiven $x$-Achse über ein räumlich begrenztes Versetzungsreservoir und anschließend in einen anfänglich versetzungsfreien Bereich.

Abweichend dazu zeigen Abbildung D7 und Abbildung D8 die Oberflächentopographien für Setup 111 und Setup 010, bei denen eine anfängliche Versetzungsdichte im kompletten Einzelkristall vorliegt. Die zugehörigen Versetzungsdichte-Zeit-Diagramme sind in Abbildung 4.25 dargestellt.

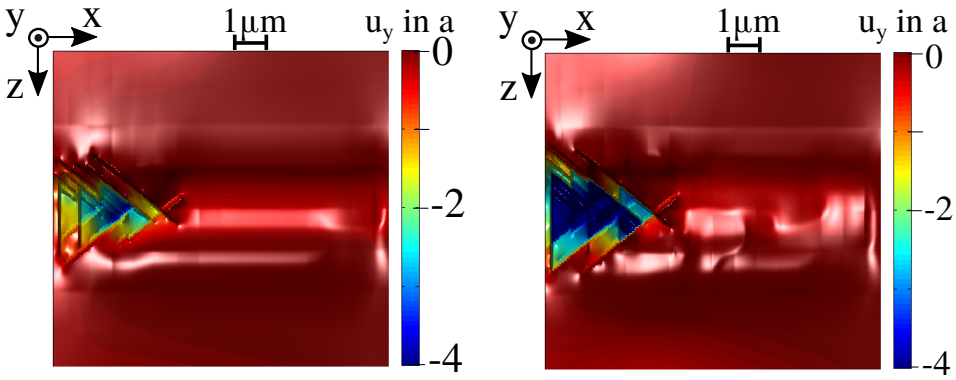



**Abb. D1:** Setup 111: Oberflächentopographie im teilrelaxierten Zustand nach (a) einer Indenterfahrt (b) acht Indenterfahrten

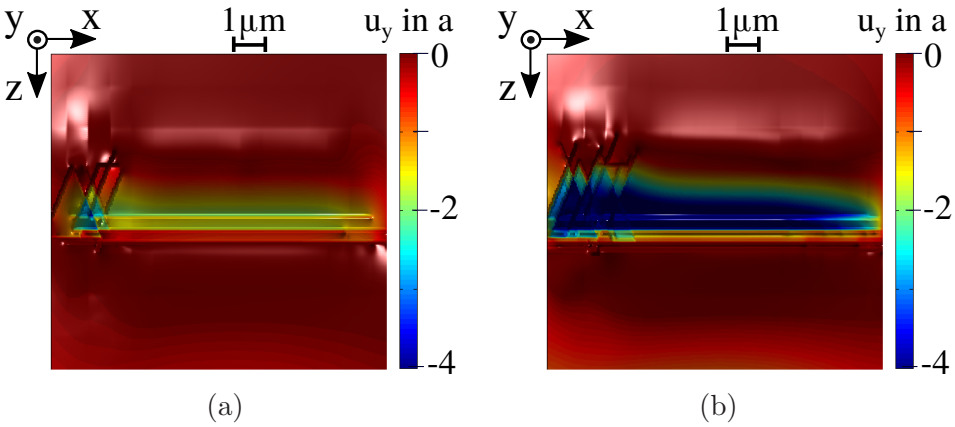



**Abb. D2:** Setup $111_{par}$: Oberflächentopographie im teilrelaxierten Zustand nach (a) einer Indenterfahrt (b) acht Indenterfahrten

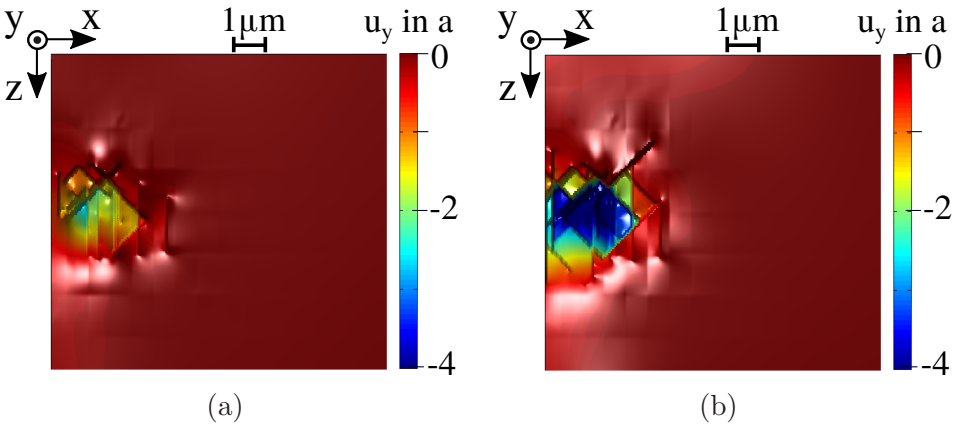



**Abb. D3:** Setup 110: Oberflächentopographie im teilrelaxierten Zustand nach (a) einer Indenterfahrt (b) acht Indenterfahrten

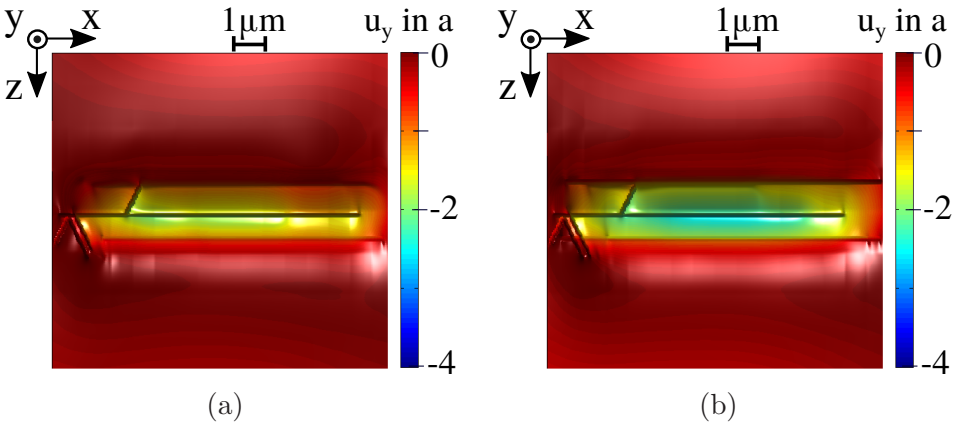



**Abb. D4:** Setup $110_{par}$: Oberflächentopographie im teilrelaxierten Zustand nach (a) einer Indenterfahrt (b) zwei Indenterfahrten

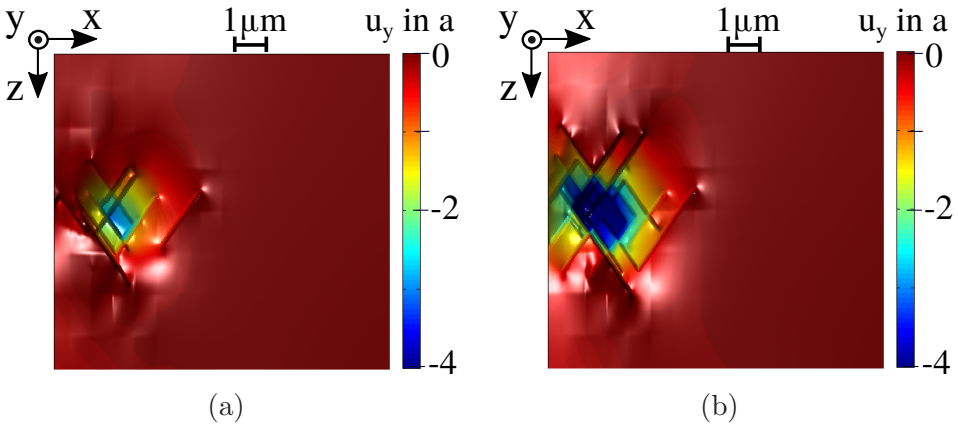



**Abb. D5:** Setup 010: Oberflächentopographie im teilrelaxierten Zustand nach (a) einer Indenterfahrt (b) acht Indenterfahrten

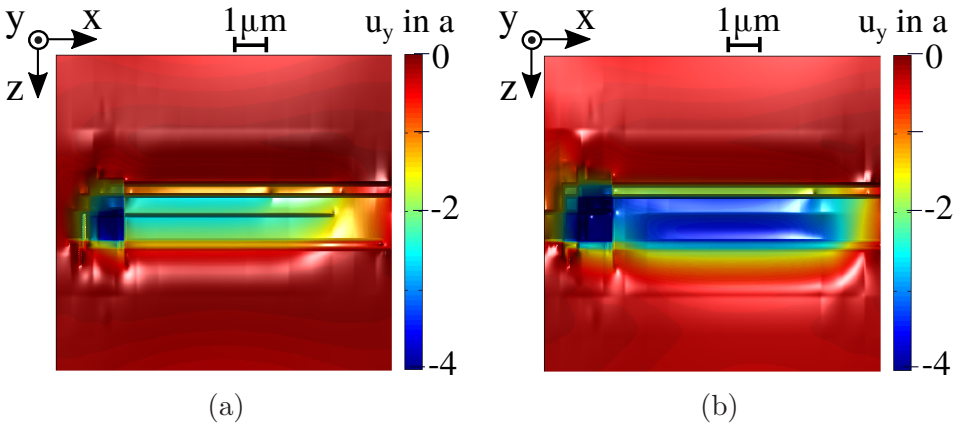



**Abb. D6:** Setup $010_{par}$: Oberflächentopographie im teilrelaxierten Zustand nach (a) einer Indenterfahrt (b) zwei Indenterfahrten

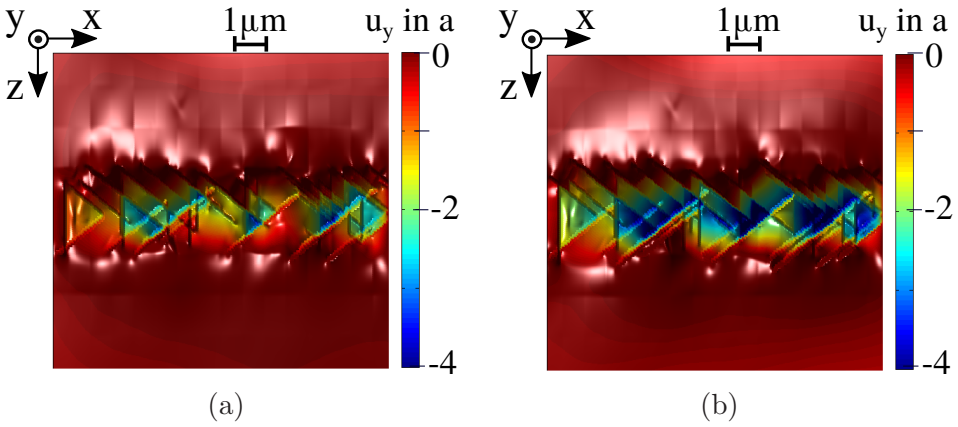



**Abb. D7:** Setup 111 mit anfänglicher Versetzungsdichte in der kompletten Probe: Oberflächentopographie im teilrelaxierten Zustand nach (a) einer Indenterfahrt (b) zwei Indenterfahrten

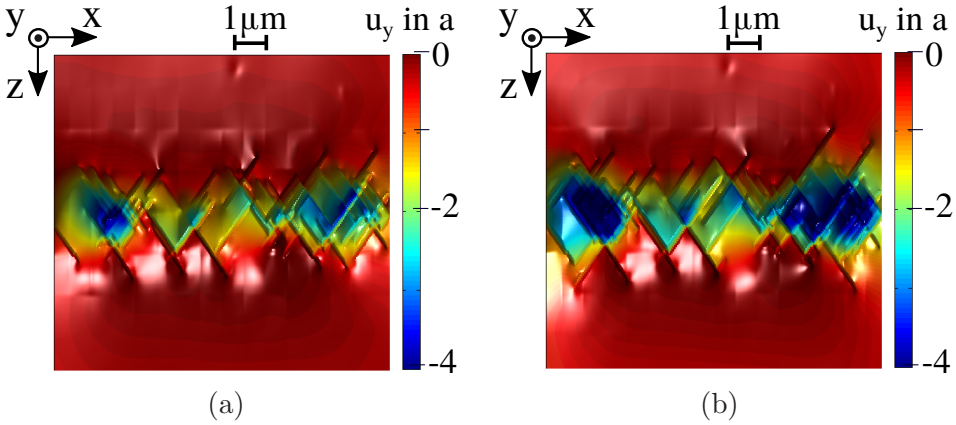
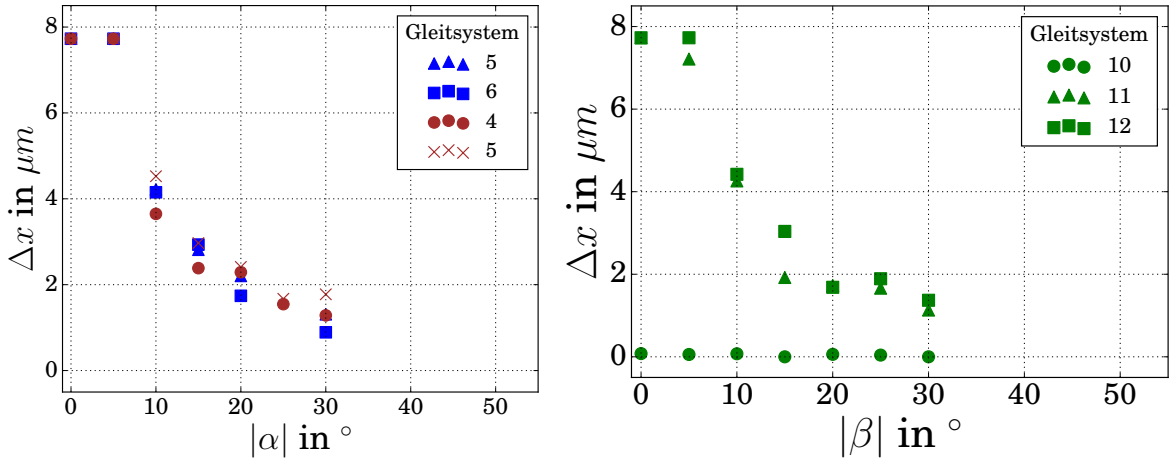



**Abb. D8:** Setup 010 mit anfänglicher Versetzungsdichte in der kompletten Probe: Oberflächentopographie im teilrelaxierten Zustand nach (a) einer Indenterfahrt (b) zwei Indenterfahrten

# F Transportlänge

Abbildung F1 und Abbildung F2 zeigen die maximale Transportlänge $\Delta x$ von Versetzungen auf verschiedenen Gleitsystemen, wenn eine Asperität über die Oberfläche eines kubisch flächenzentrierten Einzelkristalls fährt (Kap. 3.2). Dabei wird die Orientierung der Gleitebene und die Orientierung des Burgersvektors untersucht. Jeder Punkt ist das Maximum von 30 statistisch äquivalenten Simulationen. Es wird die Gleitsystem-Nomenklatur in Anhang B mit einer abweichenden Farbgebung verwendet. Der Winkel $\alpha$ und $\beta$ sind in Abbildung 4.27 definiert, der Winkel $\phi$ in Abbildung 5.19. Für das Setup sei auf Kapitel 4.2.5 verwiesen.




(a) $\alpha \geq 0°$ (b) $\beta \leq 0°$

**Abb. F1:** Maximale Transportlänge $\Delta x$

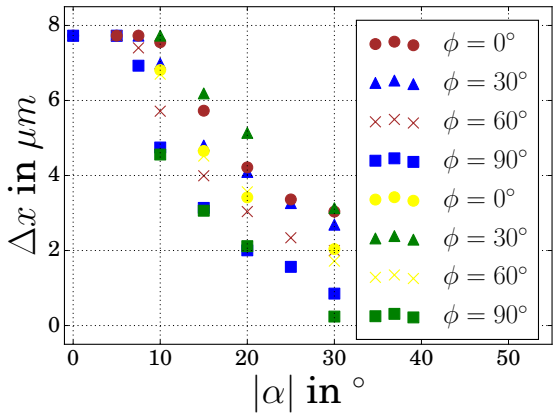
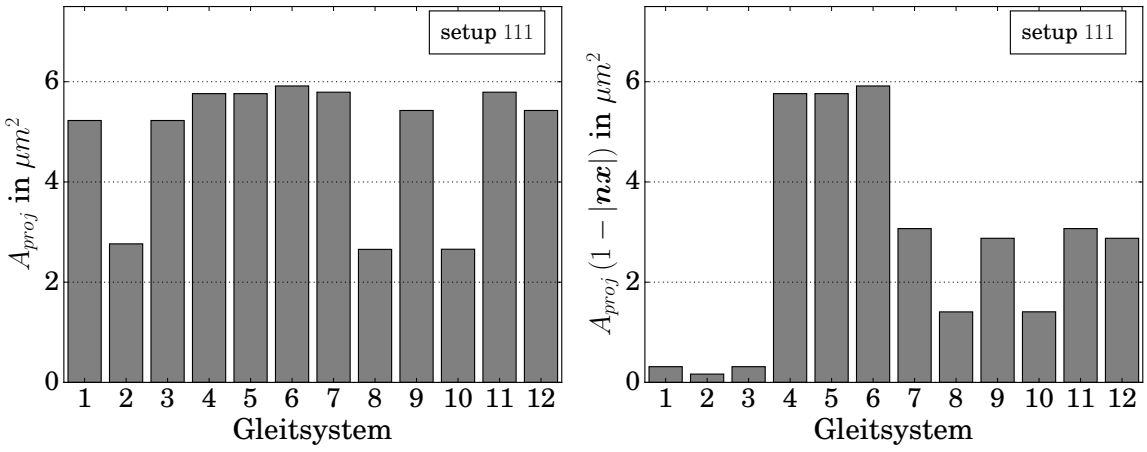



**Abb. F2:** Maximale Transportlänge $\Delta x$. Rote und blaue Symbole: Reibungskoeffizienten $\mu = 0$. Gelbe und grüne Symbole: Reibungskoeffizient $\mu = 0.5$

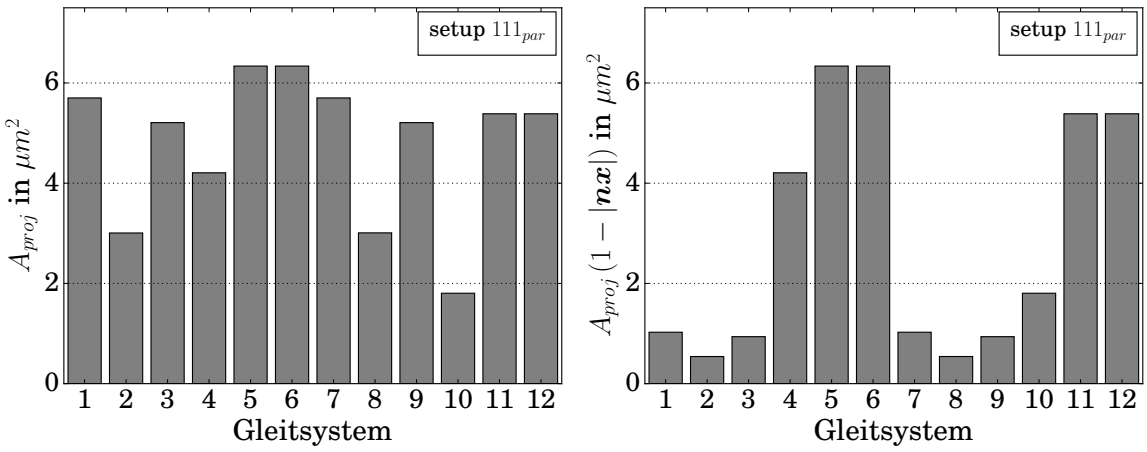
# G Projizierte aufgelöste Schubspannung

Abbildungen G1(a)-G5(a) zeigen für die Setups aus Tabelle 4.1 die Größe des geometrischen Querschnittes $A_{proj}$, welcher durch Projektion der aufgelösten Schubspannung mit Isospannungsflächen $\tau_{iso} = 10MPa$ auf eine Ebene senkrecht zur Fahrtrichtung des Indenters entsteht (Kap. 5.2). In Abbildungen G1(b)-G5(b) ist die Größe des geometrischen Querschnittes aus Abbildungen G1(a)-G5(a) multipliziert mit dem Faktor $f = 1 - |\vec{n} \cdot \vec{x}|$ nach Gleichung (5.5) dargestellt. Für die Gleitsystem-Nomenklatur sei auf Anhang B verwiesen.



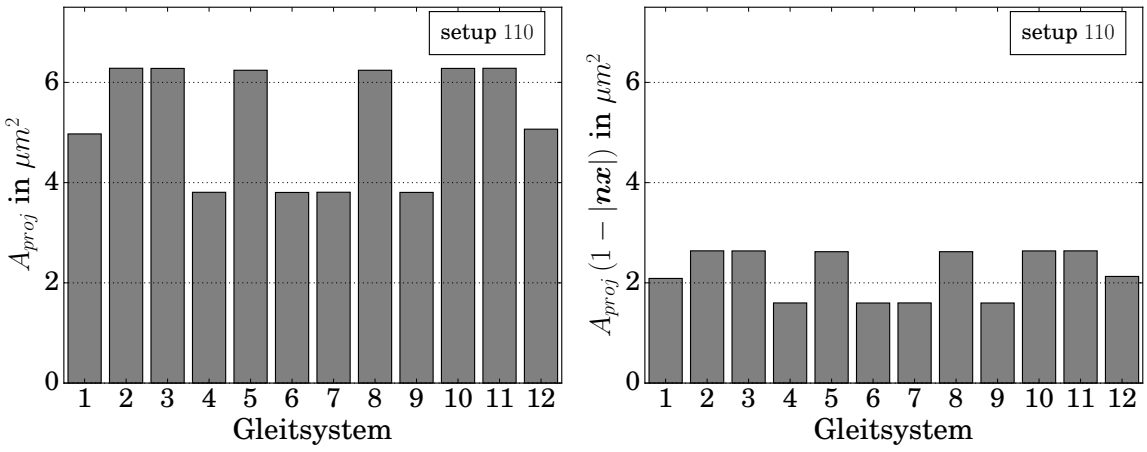

(a) (b)

**Abb. G1:** Setup 111 (a) Größe des geometrischen Querschnittes $A_{proj}$ je Gleitsystem. (b) $A_{proj}$ aus (a) multipliziert mit dem Faktor $f$



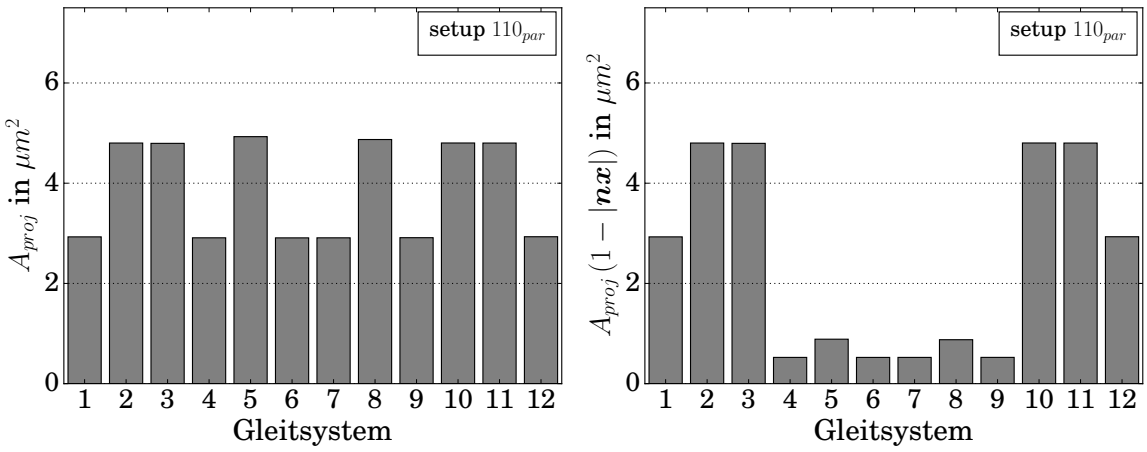

(a) (b)

**Abb. G2:** Setup $111_{par}$ (a) Größe des geometrischen Querschnittes $A_{proj}$ je Gleitsystem. (b) $A_{proj}$ aus (a) multipliziert mit dem Faktor $f$



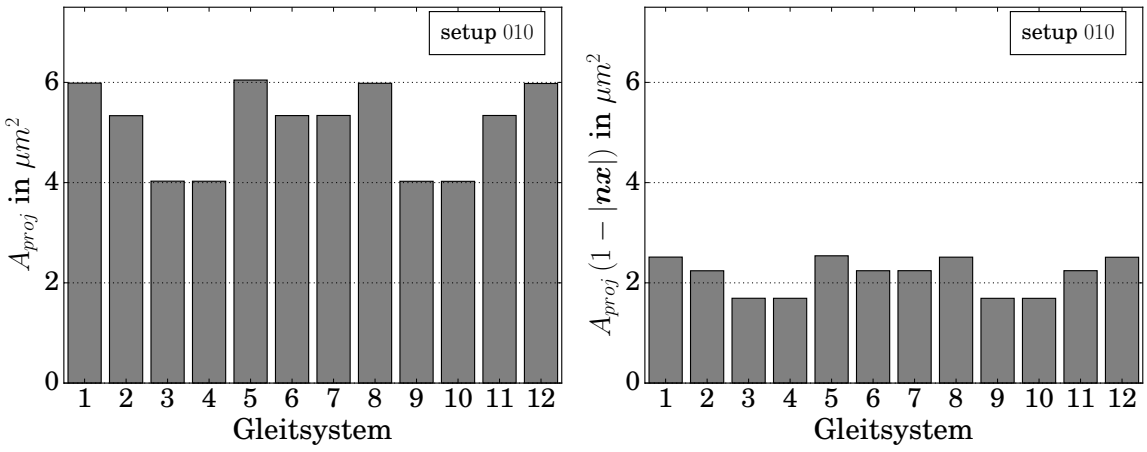

(a) (b)

**Abb. G3:** Setup 110 (a) Größe des geometrischen Querschnittes $A_{proj}$ je Gleitsystem. (b) $A_{proj}$ aus (a) multipliziert mit dem Faktor $f$



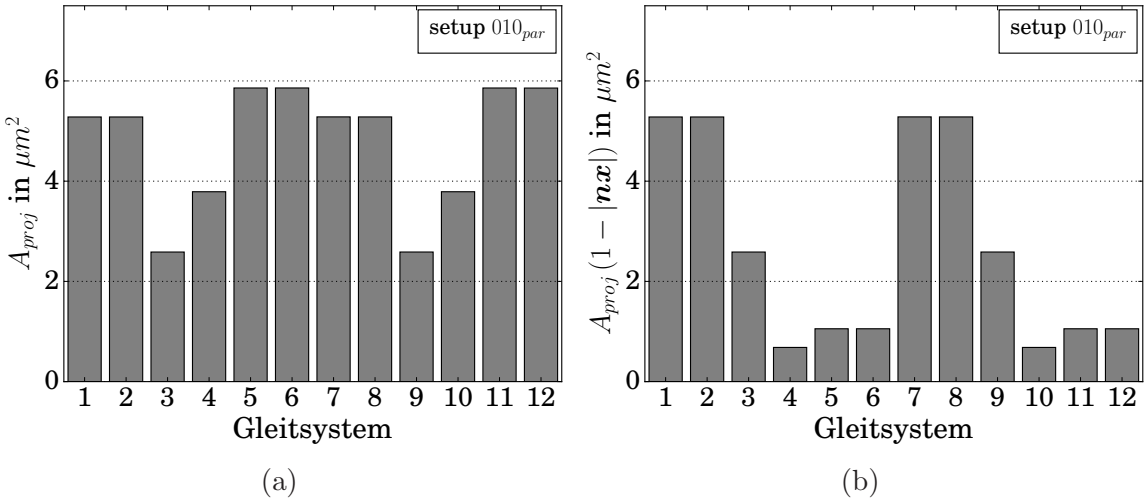

(a) (b)

**Abb. G4:** Setup $110_{par}$ (a) Größe des geometrischen Querschnittes $A_{proj}$ je Gleitsystem. (b) $A_{proj}$ aus (a) multipliziert mit dem Faktor $f$



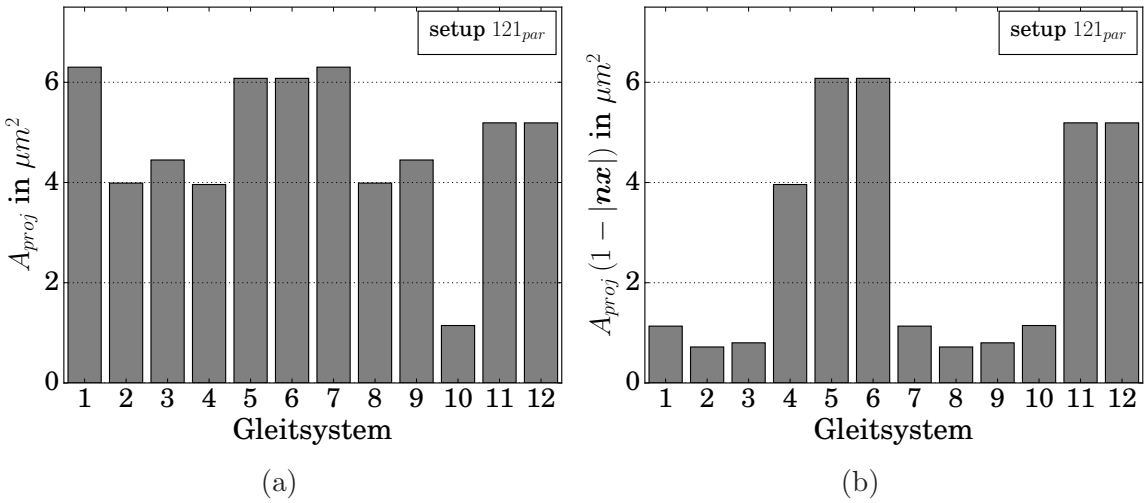

(a) (b)

**Abb. G5:** Setup 010 (a) Größe des geometrischen Querschnittes $A_{proj}$ je Gleitsystem. (b) $A_{proj}$ aus (a) multipliziert mit dem Faktor $f$




(a) (b)

**Abb. G6:** Setup $010_{par}$ (a) Größe des geometrischen Querschnittes $A_{proj}$ je Gleitsystem. (b) $A_{proj}$ aus (a) multipliziert mit dem Faktor $f$




(a) (b)

**Abb. G7:** Indentierung in $[\overline{121}]$-Richtung und $[\bar{1}01]$-Fahrtrichtung des Indenters. (a) Größe des geometrischen Querschnittes $A_{proj}$ je Gleitsystem. (b) $A_{proj}$ aus (a) multipliziert mit dem Faktor $f$

# Literaturverzeichnis

[1] Dowson, D., 1979. History of tribology. Longman, London, 1. Ausg.

[2] Fall, A., Weber, B., Pakpour, M., Lenoir, N., Shahidzadeh, N., Fiscina, J., Wagner, C., Bonn, D., 2014. Sliding friction on wet and dry sand. Physical review letters, 112(17), 175502.

[3] Steindorff, G., Sieglin, E. v., 1913. Das Grab des Ti. In Veröffentlichungen der Ernst von Sieglin Expedition in Ägypten, Bd. 2.

[4] Bartz, W. J., 1988. Energieeinsparung durch tribologische Maßnahmen, Handbuch der Tribologie und Schmierungstechnik, Bd. 2. expert verlag, Ehningen bei Böblingen.

[5] Dake, L., Russel, J., Debrodt, D., 1986. A review of doe ecut tribology surveys. Journal of tribology, 108(4), 497–501.

[6] Holmberg, K., Andersson, P., Erdemir, A., 2012. Global energy consumption due to friction in passenger cars. Tribology International, 47, 221–234.

[7] Bhushan, B. H. (Hrsg.), 2008. Nanotribology and nanomechanics: an introduction. Springer, Berlin, 2. Ausg.

[8] Chakravarty, S., Andrews, R., Painaik, P., Koul, A., 1995. The effect of surface modification on fretting fatigue in Ti alloy turbine components. Journal of the Minerals, Metals and Materials Society, 47(4), 31–35.

[9] Fleischauer, P. D., Hilton, M. R., 1988. Assessment of the Tribological Requirements of Advanced Spacecraft Mechanisms. MRS Online Proceedings Library Archive, 140.

[10] Jones Jr, W. R., Jansen, M. J., 2000. Space tribology. NASA Technical Reports Server, NASA/TM-2000-209924, E-12163, NAS 1.15:209924, 1–40.

[11] Wyn-Roberts, D., 1990. New frontiers for space tribology. Tribology International, 23(2), 149–155.

[12] Czichos, H. H., Habig, K.-H. H. (Hrsg.), 2015. Tribologie-Handbuch: Tribometrie, Tribomaterialien, Tribotechnik. Springer Vieweg, Wiesbaden, 4. Ausg.

[13] Scherge, M., Böttcher, R., Richter, M., Gurgel, U., 2013. High-speed ice friction experiments under lab conditions: on the influence of speed and normal force. ISRN Tribology.

[14] Büscher, R., Täger, G., Dudzinski, W., Gleising, B., Wimmer, M., Fischer, A., 2005. Subsurface microstructure of metal-on-metal hip joints and its relationship to wear particle generation. Journal of Biomedical Materials Research Part B: Applied Biomaterials, 72(1), 206–214.

[15] Walker, P., Gold, B., 1971. The tribology (friction, lubrication and wear) of all-metal artificial hip joints. Wear, 17(4), 285–299.

[16] Stoyanov, P., Chromik, R. R., 2017. Scaling effects on materials tribology: From macro to micro scale. Materials, 10(5), 550.

[17] Wen, S., Huang, P., 2012. Principles of tribology. John Wiley & Sons.

[18] Amanov, A., Cho, I., Pyoun, Y., Lee, C., Park, I., 2012. Micro-dimpled surface by ultrasonic nanocrystal surface modification and its tribological effects. Wear, 286, 136–144.

[19] Braun, D., Greiner, C., Schneider, J., Gumbsch, P., 2014. Efficiency of laser surface texturing in the reduction of friction under mixed lubrication. Tribology international, 77, 142–147.

[20] Greiner, C., Schäfer, M., 2015. Bio-inspired scale-like surface textures and their tribological properties. Bioinspiration & biomimetics, 10(4), 044001.

[21] Linsler, D., Schlarb, T., Weingaertner, T., Scherge, M., 2015. Influence of subsurface microstructure on the running-in of an AlSi alloy. Wear, 332, 926–931.

[22] Shakhvorostov, D., Jian, L., Nold, E., Beuchle, G., Scherge, M., 2007. Influence of Cu grain size on running-in related phenomena. Tribology Letters, 28(3), 307–318.

[23] Fu, Y., Wei, J., Batchelor, A. W., 2000. Some considerations on the mitigation of fretting damage by the application of surface-modification technologies. Journal of Materials Processing Technology, 99(1), 231–245.

[24] Fu, Y., Loh, N. L., Batchelor, A. W., Liu, D., Zhu, X., He, J., Xu, K., 1998. Improvement in fretting wear and fatigue resistance of Ti–6Al–4V by application of several surface treatments and coatings. Surface and Coatings Technology, 106(2), 193–197.

[25] Herzner, F. C., Juenger, J. A., Wayte, P., 1992. Turbine blade wear protection system with multilayer shim. US Patent 5,160,243.

[26] Godet, M., 1990. Third-bodies in tribology. Wear, 136(1), 29–45.

[27] Greiner, C., Liu, Z., Strassberger, L., Gumbsch, P., 2016. Sequence of stages in the microstructure evolution in copper under mild reciprocating tribological loading. ACS applied materials & interfaces, 8(24), 15809–15819.

[28] Luo, Z.-P., Zhang, G.-P., Schwaiger, R., 2015. Microstructural vortex formation during cyclic sliding of Cu/Au multilayers. Scripta Materialia, 107, 67–70.

[29] Rigney, D., Hirth, J., 1979. Plastic deformation and sliding friction of metals. Wear, 53(2), 345–370.

[30] Bowden, F. P., Tabor, D., 2008. The friction and lubrication of solids. Oxford classic textsOxford classic texts in the physical sciences. Clarendon Pr., Oxford.

[31] Rigney, D., 2000. Transfer, mixing and associated chemical and mechanical processes during the sliding of ductile materials. Wear, 245(1), 1–9.

[32] Rigney, D., Glaeser, W., 1978. The significance of near surface microstructure in the wear process. Wear, 46(1), 241–250.

[33] Heilmann, P., Rigney, D., 1981. An energy-based model of friction and its application to coated systems. Wear, 72(2), 195–217.

[34] Ko, J., Gellman, A., 2000. Friction anisotropy at Ni (100)/Ni (100) interfaces. Langmuir, 16(22), 8343–8351.

[35] Komanduri, R., Chandrasekaran, N., Raff, L., 2000. MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum. Wear, 240(1), 113–143.

[36] Tsuya, Y., 1969. The anisotropy of the coefficient of friction and plastic deformation in copper single crystals. Wear, 14(5), 309–322.

[37] Mancinelli, C. M., Gellman, A. J., 2004. Friction anisotropy at Pd (100)/Pd (100) interfaces. Langmuir, 20(5), 1680–1687.

[38] Harea, E., Lapsker, I., Laikhtman, A., Rapoport, L., 2013. Bauschinger's effect and dislocation structure under friction of LiF single crystals. Tribology Letters, 52(2), 205–212.

[39] Miura, Y., 1972. Punched-out dislocation rosettes in low-dislocation-density copper. Journal of Applied Physics, 43(6), 2917–2918.

[40] Gao, Y., Ruestes, C. J., Urbassek, H. M., 2014. Nanoindentation and nanoscratching of iron: Atomistic simulation of dislocation generation and reactions. Computational Materials Science, 90, 232–240.

[41] Gerberich, W., Nelson, J., Lilleodden, E., Anderson, P., Wyrobek, J., 1996. Indentation induced dislocation nucleation: The initial yield point. Acta Materialia, 44(9), 3585–3598.

[42] Pharr, G. M., Herbert, E. G., Gao, Y., 2010. The indentation size effect: a critical examination of experimental observations and mechanistic interpretations. Annual Review of Materials Research, 40, 271–292.

[43] Zaafarani, N., Raabe, D., Singh, R., Roters, F., Zaefferer, S., 2006. Three-dimensional investigation of the texture and microstructure below a nanoindent in a Cu single crystal using 3D EBSD and crystal plasticity finite element simulations. Acta Materialia, 54(7), 1863–1876.

[44] Zhang, Y., Gao, Y., Nicola, L., 2014. Lattice rotation caused by wedge indentation of a single crystal: Dislocation dynamics compared to crystal plasticity simulations. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 68, 267–279.

[45] Nicola, L., Bower, A. F., Kim, K.-S., Needleman, A., Van Der Giessen, E., 2008. Multi-asperity contact: A comparison between discrete dislocation and crystal plasticity predictions. Philosophical Magazine, 88(30-32), 3713–3729.

[46] Sun, F., Van der Giessen, E., Nicola, L., 2015. Interaction between neighboring asperities during flattening: A discrete dislocation plasticity analysis. Mechanics of Materials, 90, 157–165.

[47] Hull, D., Bacon, D. J., 2011. Introduction to dislocations. Butterworth-Heinemann, Amsterdam, 5. Ausg.

[48] Chang, H.-J., Fivel, M., Rodney, D., Verdier, M., 2010. Multiscale modelling of indentation in fcc metals: From atomic to continuum. Comptes Rendus Physique, 11(3), 285–292.

[49] Chen, C. C., Hendrickson, A. A., 1971. Dislocation etch pits in silver. Journal of Applied Physics, 42(6), 2208–2215.

[50] Hashimoto, S., Miura, S., Kubo, T., 1976. Dislocation etch pits in gold. Journal of Materials Science, 11(8), 1501–1508.

[51] Livingston, J. D., 1960. Etch pits at dislocations in copper. Journal of Applied Physics, 31(6), 1071–1076.

[52] Jun, S., Lee, Y., Kim, S. Y., Im, S., 2004. Large-scale molecular dynamics simulations of Al (111) nanoscratching. Nanotechnology, 15(9), 1169.

[53] Zhang, J. J., Sun, T., Hartmaier, A., Yan, Y. D., 2012. Atomistic simulation of the influence of nanomachining-induced deformation on subsequent nanoindentation. Computational Materials Science, 59, 14–21.

[54] Kubin, L. P., 2013. Dislocations, mesoscale simulations and plastic flow. Oxford series on materials modelling 5. Oxford University Press, Oxford, 1. Ausg.

[55] Gouldstone, A., Koh, H.-J., Zeng, K.-Y., Giannakopoulos, A. E., Suresh, S., 2000. Discrete and continuous deformation during nanoindentation of thin films. Acta Materialia, 48(9), 2277–2295.

[56] Kositski, R., Mordehai, D., 2015. Depinning-controlled plastic deformation during nanoindentation of BCC iron thin films and nanoparticles. Acta Materialia, 90, 370–379.

[57] Shin, C., Osetsky, Y. N., Stoller, R. E., 2012. Dislocation nucleation and defect formation in copper by stepped spherical indenter. Philosophical Magazine, 92(25-27), 3158–3171.

[58] Xiang, H., Li, H., Fu, T., Huang, C., Peng, X., 2017. Formation of prismatic loops in AlN and GaN under nanoindentation. Acta Materialia, 138, 131–139.

[59] Minor, A. M., Syed Asif, S., Shan, Z., Stach, E. A., Cyrankowski, E., Wyrobek, T., Warren, O., 2006. A new view of the onset of plasticity during the nanoindentation of aluminium. Nature materials, 5(9), 697–702.

[60] Knap, J., Ortiz, M., 2003. Effect of indenter-radius size on au (001) nanoindentation. Physical Review Letters, 90(22), 226102.

[61] Schuh, C. A., 2006. Nanoindentation studies of materials. Materials Today, 9(5), 32–40.

[62] Graça, S., Carvalho, P. A., Colaço, R., 2011. Dislocation structures in nanoindented ductile metals—a transmission electron microscopy direct observation. Journal of Physics D: Applied Physics, 44(33), 335402.

[63] Li, J., Van Vliet, K. J., Zhu, T., Yip, S., Suresh, S., 2002. Atomistic mechanisms governing elastic limit and incipient plasticity in crystals. Nature, 418(6895), 307–310.

[64] Minor, A. M., Morris Jr, J. W., Stach, E. A., 2001. Quantitative in situ nanoindentation in an electron microscope. Applied Physics Letters, 79(11), 1625–1627.

[65] Remington, T., Ruestes, C., Bringa, E., Remington, B., Lu, C., Kad, B., Meyers, M., 2014. Plastic deformation in nanoindentation of tantalum: A new mechanism for prismatic loop formation. Acta Materialia, 78, 378–393.

[66] Alhafez, I. A., Ruestes, C. J., Gao, Y., Urbassek, H. M., 2015. Nanoindentation of hcp metals: a comparative simulation study of the evolution of dislocation networks. Nanotechnology, 27(4), 045706.

[67] Cho, M., Kim, S., Lim, D.-S., Jang, H., 2005. Atomic scale stick-slip caused by dislocation nucleation and propagation during scratching of a Cu substrate with a nanoindenter: a molecular dynamics simulation. Wear, 259(7), 1392–1399.

[68] de la Fuente, O. R., Zimmerman, J., Gonzalez, M., De la Figuera, J., Hamilton, J., Pai, W. W., Rojo, J., 2002. Dislocation emission around nanoindentations on a (001)-fcc metal surface studied by scanning tunneling microscopy and atomistic simulations. Physical review letters, 88(3), 036101.

[69] Miura, Y., Nakamura, H., Kaieda, H., 1976. Prismatic Dislocation Loops in Copper Revealed by X-Ray Topography. Transactions of the Japan Institute of Metals, 17(12), 793–798.

[70] Pharr, G. M., Oliver, W. C., 1989. Nanoindentation of silver-relations between hardness and dislocation structure. Journal of Materials Research, 4(01), 94–101.

[71] Chen, C. C., Hendrickson, A. A., 1973. Microhardness phenomena in silver. The science of hardness testing and its research applications : based on papers presented at a symposium of the American Society for Metals October 18 - 20, 1971, 274–289.

[72] Javaid, F., Stukowski, A., Durst, K., 2017. 3D dislocation structure evolution in strontium titanate: Spherical indentation experiments and MD simulations. Journal of the American Ceramic Society, 100(3), 1134–1145.

[73] Keh, A. S., 1960. Dislocations in indented magnesium oxide crystals. Journal of Applied Physics, 31(9), 1538–1545.

[74] Gagel, J., Weygand, D., Gumbsch, P., 2016. Formation of extended prismatic dislocation structures under indentation. Acta Materialia, 111, 399–406.

[75] Nabarro, F. R. N. H., Hirth, J. P. H. (Hrsg.), 2004. Dislocations in solids, Bd. 12. North-Holland Publ., Amsterdam, 1. Ausg.

[76] Bertocci, U., Bertocci, C., Young Jr, F. W., 1969. Study of certain strain centers in copper crystals by etch-pit and X-Ray techniques. Journal of Applied Physics, 40(4), 1674–1680.

[77] Gao, Y., Ruestes, C. J., Tramontina, D. R., Urbassek, H. M., 2015. Comparative simulation study of the structure of the plastic zone produced by nanoindentation. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 75, 58–75.

[78] Lee, Y., Park, J. Y., Kim, S. Y., Jun, S., Im, S., 2005. Atomistic simulations of incipient plasticity under Al (111) nanoindentation. Mechanics of Materials, 37(10), 1035–1048.

[79] Fivel, M. C., Robertson, C. F., Canova, G. R., Boulanger, L., 1998. Three-dimensional modeling of indent-induced plastic zone at a mesoscale. Acta materialia, 46(17), 6183–6194.

[80] Nix, W. D., Gao, H., 1998. Indentation size effects in crystalline materials: a law for strain gradient plasticity. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 46(3), 411–425.

[81] Cai, W., Nix, W. D., 2016. Imperfections in Crystalline Solids. MRS - Cambridge materials fundamentals. Cambridge University Press, Cambridge.

[82] Bulatov, V. V., Cai, W., 2006. Computer simulations of dislocations. Oxford series on materials modelling. Oxford Univ. Press, Oxford.

[83] Motz, C., Weygand, D., Senger, J., Gumbsch, P., 2008. Micro-bending tests: A comparison between three-dimensional discrete dislocation dynamics simulations and experiments. Acta Materialia, 56(9), 1942–1955.

[84] Stricker, M., Ziemann, M., Walter, M., Gruber, P., Weygand, D., 2018. Dislocation microstructre in the strain gradient of torsion loading.

[85] Gottstein, G., 2014. Materialwissenschaft und Werkstofftechnik: Physikalische Grundlagen. Springer-LehrbuchSpringerLink: Bücher. Springer Vieweg, Berlin, Heidelberg, 4. Ausg.

[86] Bill, R. C., Wisander, D., 1977. Recrystallization as a controlling process in the wear of some fcc metals. Wear, 41(2), 351–363.

[87] Sawyer, W. G., Argibay, N., Burris, D. L., Krick, B. A., 2014. Mechanistic studies in friction and wear of bulk materials. Annual Review of Materials Research, 44, 395–427.

[88] Schuh, C., Nieh, T., Yamasaki, T., 2002. Hall–petch breakdown manifested in abrasive wear resistance of nanocrystalline nickel. Scripta Materialia, 46(10), 735–740.

[89] Kobayashi, S., Harada, T., Miura, S., 1994. Deformation mechanism in $\alpha$-Cu-Al single crystals with a spherical indentor. Journal of materials science, 29(1), 26–32.

[90] Kobayashi, S., Suzaki, H., 2000. Deformation in $\alpha$-Cu-Al single crystals due to impact scratch. Materials science research international, 6(2), 74–79.

[91] Deshpande, V., Balint, D., Needleman, A., Van der Giessen, E., 2006. Size effects in single asperity frictional contacts. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 15(1), S97.

[92] Sun, F., van der Giessen, E., Nicola, L., 2016. Dry frictional contact of metal asperities: A dislocation dynamics analysis. Acta Materialia, 109, 162–169.

[93] Mulliah, D., Christopher, D., Kenny, S., Smith, R., 2003. Nanoscratching of silver (100) with a diamond tip. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 202, 294–299.

[94] Sun, K., Fang, L., Yan, Z., Sun, J., 2013. Atomistic scale tribological behaviors in nanograined and single crystal copper systems. Wear, 303(1), 191–201.

[95] Li, J., Fang, Q., Liu, Y., Zhang, L., 2015. Scratching of copper with rough surfaces conducted by diamond tip simulated using molecular dynamics. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 77(5-8), 1057–1070.

[96] Weygand, D., Friedman, L. H., Van der Giessen, E., Needleman, A., 2001. Discrete dislocation modeling in three-dimensional confined volumes. Materials Science and Engineering: A, 309, 420–424.

[97] Weygand, D., Senger, J., Motz, C., Augustin, W., Heuveline, V., Gumbsch, P., 2009. High performance computing and discrete dislocation dynamics: Plasticity of micrometer sized specimens. In High Performance Computing in Science and Engineering'08, 507–523. Springer.

[98] Van der Giessen, E., Needleman, A., 1995. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 3(5), 689.

[99] Bitzek, E., Gumbsch, P., 2004. Atomistic study of drag, surface and inertial effects on edge dislocations in face-centered cubic metals. Materials Science and Engineering: A, 387, 11–15.

[100] Kubin, L. P., Canova, G., Condat, M., Devincre, B., Pontikis, V., Bréchet, Y., 1992. Dislocation microstructures and plastic flow: a 3D simulation. Solid State Phenomena, 23, 455–472.

[101] Johnson, K. L., 2001. Contact mechanics. Cambridge Univ. Press, Cambridge.

[102] Hamilton, G., 1983. Explicit equations for the stresses beneath a sliding spherical contact. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science, 197(1), 53–59.

[103] Gagel, J., Weygand, D., Gumbsch, P., 2018, eingereicht. Simulation of dislocation transport during frictionless sliding. Acta Materialia.

[104] Ryen, Ø., Holmedal, B., Nijs, O., Nes, E., Sjölander, E., Ekström, H.-E., 2006. Strengthening mechanisms in solid solution aluminum alloys. Metallurgical and Materials Transactions A, 37(6), 1999–2006.

[105] Popov, V. L. (Hrsg.), 2009. Kontaktmechanik und Reibung: Ein Lehr- und Anwendungsbuch von der Nanotribologie bis zur numerischen Simulation. Springer, Berlin, Heidelberg.

[106] Fischer-Cripps, A. C., 2007. Introduction to contact mechanics. Mechanical engineering series. Springer, New York, NY, 2 Ausg.

[107] Fischer-Cripps, A. C., 2002. Nanoindentation. Mechanical engineering series. Springer, New York [u.a.].

[108] Hamilton, G., Goodman, L., 1966. The stress field created by a circular sliding contact. Journal of Applied Mechanics, 33(2), 371–376.

[109] Romero, P. A., Järvi, T. T., Beckmann, N., Mrovec, M., Moseler, M., 2014. Coarse graining and localized plasticity between sliding nanocrystalline metals. Physical review letters, 113(3), 036101.

[110] Mishra, R., Basu, B., Balasubramaniam, R., 2004. Effect of grain size on the tribological behavior of nanocrystalline nickel. Materials Science and Engineering: A, 373(1), 370–373.

[111] Wang, L., Gao, Y., Xu, T., Xue, Q., 2006. A comparative study on the tribological behavior of nanocrystalline nickel and cobalt coatings correlated with grain size and phase structure. Materials Chemistry and Physics, 99(1), 96–103.