

Entwicklung einer Kontinuumsbeschreibung für die Versetzungsmobilität in Versetzungnetzwerken

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

genehmigte
Dissertation

von

M.Sc. Markus Sudmanns

Tag der mündlichen Prüfung:	05. November 2019
Referent:	Prof. Dr. Peter Gumbsch
Korreferent:	Prof. Dr. Bob Svendsen Dr.-Ing. Katrin Schulz



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

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Angewandte Materialien – Computational Materials Science (IAM-CMS) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) im Rahmen der DFG Forschergruppe FOR1650 *dislocation based plasticity*.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Peter Gumbsch für die Möglichkeit zur Promotion, für wertvolle Anregungen, sowie für die stetige Unterstützung. Ich bin sehr dankbar dafür, dass ich an seinem Institut ein inspirierendes Umfeld erleben durfte, dass von tiefgreifenden wissenschaftlichen Diskussionen und viel Freiheit im Rahmen der Durchführung der Arbeit geprägt war.

Bei Prof. Dr. Bob Svendsen bedanke ich mich hiermit für die Übernahme des Korreferats und sein Interesse an meiner Arbeit.

Mein Dank gilt weiterhin Dr. Katrin Schulz für die Übernahme des zweiten Korreferats. Viel wichtiger ist aber mein besonderer Dank dafür, dass sie während der gesamten Zeit für Diskussionen und Gespräche verschiedenster Natur zur Verfügung stand. Ihre stetige Unterstützung und ihre motivierende Art trägt einen maßgeblichen Anteil am Gelingen dieser Arbeit. In den letzten Jahren hat sie mich, meine Arbeitsweise und mein Verständnis von Wissenschaft entscheidend geprägt.

Ich möchte mich auch bei einigen Kollegen für die Unterstützung und Zusammenarbeit bedanken, welche wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen

haben, darunter Dr. Markus Stricker, Dr. Severin Schmitt, Dr. Lydia Wagner, Dr. Daniel Weygand und Prof. Dr. Thomas Hochrainer. Weiterhin bedanke ich mich bei meinen Bürokollegen Kolja Zoller und Taymour El-Achkar, sowie bei allen weiteren Kollegen und Freunden für die gemeinsame Zeit, die durch Spielabende und Stammtische auch ihren Weg in den außeruniversitären Bereich gefunden hat.

Ich bedanke mich hiermit auch bei der Systemadministratorin Yiyue Li für die technische Unterstützung und bei unserem Sekretariat mit Andrea Doer für die administrative Unterstützung.

Ein besonderer Dank gilt auch meinen Eltern und meinem Bruder für den Rückhalt und die stetige Unterstützung. Die Wochenenden am Bodensee boten insbesondere in stressigen Zeiten eine angenehme Möglichkeit zur Erholung.

Karlsruhe, im September 2019

Markus Sudmanns

Kurzfassung

Eine physikalisch begründete dreidimensionale Kontinuumsformulierung der plastischen Verformung von Metallen benötigt neben einer kinematischen Beschreibung der Bewegung gekrümmter Versetzungslinien eine adäquate Homogenisierung der Versetzungswechselwirkungen. Insbesondere die Beschreibung von Versetzungsnetzwerken erfordert eine Verbindung der gleitsystemgebundenen Versetzungsbewegung mit der gleitsystemübergreifenden Ausprägung der Interaktion und Reaktion von Versetzungen. Basierend auf Beobachtungen in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen wird ein Modell der Mobilität von Versetzungsnetzwerken entwickelt, das neben der Versetzungsbewegung und Versetzungsinteraktion auch explizite Versetzungsreaktionen, sowie Quergleiten berücksichtigt. Neben der Versetzungsmultiplikation haben die berücksichtigten Mechanismen auch eine Stabilisierung von Versetzungen zur Folge. Vereinfachte Beispiele zeigen, dass die Homogenisierung zugrundeliegender physikalischer Mechanismen zu einem Anstieg der Versetzungsdichte auf unbelasteten Gleitsystemen, sowie zu einer gleitsystemübergreifenden Limitierung der Versetzungsbewegung führt. Anhand von Vergleichen mit Ergebnissen diskreter Versetzungsdynamiksimulationen wird deutlich, dass das Modell im Gegensatz zu existierenden Formulierungen in der Lage ist die Mobilität von Versetzungsnetzwerken adäquat zu reproduzieren. Damit wird die Verfestigung als eine Folge der Evolution von Versetzungsnetzwerken erreicht, welche wiederum aus einem Zusammenspiel aus plastischer Scherung, Versetzungsmultiplikation und Limitierung von Versetzungsbewegung entsteht.

Abstract

A physically motivated three-dimensional continuum theory of the plastic deformation of metals requires and an adequate homogenization of the dislocation interactions along with the description of the motion of curved dislocation lines. In particular for the description of dislocation networks a connection of the slip-system-based dislocation movement and the interaction and reaction of dislocations across slip systems is necessary. Based on observations in Discrete Dislocation Dynamics simulations, a model of the mobility of dislocation networks is developed, which in addition to dislocation motion and dislocation interaction explicitly considers dislocation reactions as well as cross-slip. The considered dislocation mechanisms result in dislocation multiplication and stabilization of dislocations. Simplified examples show that the homogenization of underlying physical mechanisms lead to an increase in dislocation density on unloaded slip systems, as well as to a limitation of dislocation mobility across slip systems. Comparisons with results of Discrete Dislocation Dynamics simulations show that the model is able to adequately reproduce the mobility of dislocation networks in contrast to existing formulations. As a result, strain hardening is achieved as a consequence of the evolution of dislocation networks, which in turn is based on an interplay of plastic shear, dislocation multiplication and limitation of dislocation motion.

Veröffentlichungen

K. Schulz und M. Sudmanns. A mechanism-based homogenization strategy for the determination of flow stress and strain hardening. *PAMM*, 17(1):107–110, 2017

M. Sudmanns und K. Schulz. Discussion of crack initiation in metal matrix composites. In *Proceedings of the 7th GACM Colloquium on Computational Mechanics for Young Scientists from Academia and Industry, Stuttgart, Germany, 11th - 13th October 2017*. Ed.: M. von Scheven, pages 296–299. Institute for Structural Mechanics, University of Stuttgart, 2017

K. Schulz, M. Sudmanns, und P. Gumbsch. Dislocation-density based description of the deformation of a composite material. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 25(6):064003, 2017

M. Sudmanns, P. Gumbsch, und K. Schulz. Plastic flow and dislocation strengthening in a dislocation density based formulation of plasticity. *Computational Materials Science*, 151:317–327, 2018

M. Stricker, M. Sudmanns, K. Schulz, T. Hochrainer, und D. Weygand. Dislocation multiplication in stage II deformation of fcc multi-slip single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 119:319–333, 2018

K. Schulz und M. Sudmanns. Mesoscale Simulation of Dislocation Microstructures at Internal Interfaces. In W. E. Nagel, D. H. Kröner, und M. M. Resch, editors, *High Performance Computing in Science and Engineering ' 18*, pages 115–129. Springer International Publishing, Cham, 2019

M. Sudmanns, M. Stricker, D. Weygand, T. Hochrainer, und K. Schulz. Dislocation multiplication by cross-slip and glissile reaction in a dislocation based continuum formulation of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 132:103695, 2019

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	iii
Abstract	v
1. Einleitung	1
1.1. Motivation	1
1.2. Stand der Forschung	2
1.3. Gliederung	5
2. Grundlagen zur versetzungsbasierten Plastizität und deren Modellierung	7
2.1. Versetzungen und Versetzungssysteme	10
2.2. Modellierung von Versetzungssystemen	16
2.3. Continuum Dislocation Dynamics (CDD)	23
3. Modellierung der Versetzungsmobilität	33
3.1. Versetzungsbewegung auf einem Gleitsystem	34
3.2. Versetzungsinteraktion	37
3.3. Versetzungsreaktionen	43
4. Versetzungsnetzwerke im Kontinuum	51
4.1. Charakterisierung von Versetzungsnetzwerken	51
4.2. Versetzungsmultiplikation	54
4.2.1. Multiplikation aufgrund von gleitfähigen Reaktionen	55
4.2.2. Multiplikation aufgrund von Quergleiten	59

4.3.	Versetzungsnetze	63
4.3.1.	Lomer und kollineare Reaktionen in Versetzungsnetzen	64
4.3.2.	Evolution von Versetzungsnetzen	68
4.4.	CDD für Versetzungsnetze	72
5.	Ergebnisse	75
5.1.	Versetzunginteraktion	75
5.1.1.	Zwei schneidende Gleitsysteme	76
5.1.2.	Kfz Einkristall mit allen Gleitsystemen	80
5.2.	Versetzungsmultiplikation durch gleitfähige Reaktionen und Quergleiten	84
5.2.1.	Gleitfähige Reaktionen in einem vereinfachten System	84
5.2.2.	Quergleiten in einem vereinfachten System	88
5.2.3.	Kfz Einkristall mit allen Gleitsystemen im Vergleich mit DDD	90
5.3.	Stabilisierung von Versetzungsnetzen	95
5.3.1.	Lomer Reaktionen in einem vereinfachten System	96
5.3.2.	Kollineare Reaktionen in einem vereinfachten System	100
5.4.	Versetzungsmultiplikation und Netzwerkmobilität	102
5.4.1.	Lomer Reaktionen in Zusammenspiel mit Versetzungsmultiplikation	102
5.4.2.	Kfz Einkristall mit allen Gleitsystemen im Vergleich mit DDD	106
6.	Diskussion	113
6.1.	Versetzungsdichte und Plastizität	113
6.2.	Versetzunginteraktion über Spannungsterme	116

6.3. Mobilität von Versetzungsnetzwerken	123
6.3.1. Versetzungsreaktionen im Kontinuum	123
6.3.2. Multiplikationsmechanismen im Kontinuum	125
6.3.3. Stabilisierung von Versetzungsbewegung	132
6.3.4. Zusammenspiel der Mechanismen	138
6.4. Versetzungsnetzwerke im nichtlokal - lokal Übergangsbereich	145
7. Zusammenfassung und Ausblick	151
A. Versetzungsinteraktion in phänomenologischen Modellen	157
B. Weitere Untersuchungen zu Einflüssen auf Versetzungsmultiplikation	159
B.1. Einfluss der Anfangsbedingungen auf Versetzungsmultiplikation	159
B.2. Einfluss der Reaktionsparameter der gleitfähigen Reaktion	160
C. Einfluss der Interaktionsspannung auf die Evolution von Versetzungnetzwerken	165
Literaturverzeichnis	169

Abbildungsverzeichnis

2.1.	Skizze einer geschlossenen Versetzung.	11
2.2.	Matrix der Versetzungsreaktionen.	14
3.1.	Kontourplot der Versetzungsdichte für eine homogene Ausbreitung einer geschlossenen Versetzung.	36
3.2.	Kontourplot der Interaktion zweier kreisförmiger Versetzungen in der Ebene.	38
3.3.	Skizze der Systemkonfiguration für die Lomer und die kollineare Orientierung der Gleitsysteme.	40
3.4.	Vergleich der Verteilung der Versetzungsdichte auf dem primären Gleitsystem.	42
3.5.	Skizze der Bildung einer Versetzungsreaktion zwischen zwei schneidenden Versetzungslinien.	44
3.6.	Reaktion zwischen zwei geraden Versetzungslinien auf zwei verschiedenen Gleitsystemen unter Generierung einer Versetzung auf einem dritten Gleitsystem.	48
4.1.	Skizze der berücksichtigten Versetzungsmechanismen.	54
4.2.	Konfiguration der neu generierten Versetzungen.	56
4.3.	Skizze des quergleitfähigen Anteils einer geschlossenen Versetzung.	61
4.4.	Schematische Darstellung von Lomer Reaktionen.	70
5.1.	Systemgeometrie und Belastungsrichtung der reduzierten Konfiguration.	77

5.2. Vergleich der Spannungs-Dehnungs Kurven für zwei repräsentative Gleitsysteme.	77
5.3. Evolution der plastischen Scherung je Gleitsystem.	79
5.4. Systemgeometrie und Belastungsrichtung der hochsymmetrischen Kristallorientierung.	80
5.5. Radial - logarithmische Darstellung der Versetzungsdichteverteilung auf den Gleitsystemen.	81
5.6. Wie Abbildung 5.5, aber mit einer gedrehten Kristallorientierung.	82
5.7. Schematische Übersicht der Konfiguration der drei Gleitsysteme für die gleitfähigen Reaktionen.	85
5.8. Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit gleitfähigen Reaktionen.	86
5.9. Verlauf der mittleren Krümmungsdichte und plastischen Scherung je Gleitsystem mit gleitfähigen Reaktionen.	87
5.10. Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit Quergleiten.	89
5.11. Systemgeometrie entsprechend [Sudmanns et al., 2019] für den Vergleich zwischen CDD und DDD.	90
5.12. Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem beschränkt auf gleitfähige Reaktionen.	91
5.13. Wie Abbildung 5.12, aber mit gleitfähigen Reaktionen und Quergleiten.	93
5.14. Lokale Verteilung der Versetzungsdichte in der CDD Simulation in einem dreidimensionalen Kontourplot im Vergleich zu DDD.	94
5.15. Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit dem Multiplikationsmodell im Vergleich zu einer gleitsystembasierten Anwendung der Theorie nach Kocks und Mecking.	95
5.16. Schematische Übersicht der Konfiguration der zwei Gleitsysteme für die Lomer Reaktionen.	96
5.17. Verlauf der Versetzungsdichten und der plastischen Scherung.	97
5.18. Wie Abbildung 5.17 aber für eine Variation der initialen mobilen Versetzungsdichte.	99

5.19. Schematische Übersicht der Konfiguration der zwei Gleitsysteme für kollineare Reaktionen.	100
5.20. Verlauf der plastischen Scherung für eine Variation der Schubspannung mit kollinearen Reaktionen.	101
5.21. Verlauf der plastischen Scherung mit kollinearen Reaktionen sowie der Vergleich mit der analytischen Funktion $\gamma(1)\sqrt{\rho}$	101
5.22. Schematische Übersicht der Konfiguration der drei Gleitsysteme mit gleitfähigen und Lomer Reaktionen.	103
5.23. Verlauf der Versetzungsdichten für gleitfähige und Lomer Reaktionen.	104
5.24. Wie Abbildung 5.23(a) nur mit einer zusätzlichen Interaktionsspannung.	105
5.25. Verlauf der Krümmungsdichte und der plastischen Scherung. . . .	105
5.26. Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit allen berücksichtigten Versetzungsmechanismen.	108
5.27. Totale Versetzungsdichte im Vergleich mit diskreter Versetzungsdynamik.	108
5.28. Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit allen berücksichtigten Versetzungsmechanismen und Einfluss der Reaktionsparameter für eine lokale Formulierung.	109
5.29. Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit allen berücksichtigten Versetzungsmechanismen und Mittlerer Versetzungsfluss und Produktion von Versetzungsdichte im Anfangsbereich der nichtlokalen Simulation	110
6.1. Visualisierung der Gleitsysteme für die hochsymmetrische und die um 4° rotierte Kristallorientierung	120
6.2. Verlauf des Anteils der stabilen Lomer Reaktionen.	134
6.3. Evolution der Anteile der Versetzungsdichte für zwei verschiedene Reaktionskonstanten	141

6.4.	Aufteilung der Versetzungsdichten je Gleitsystem aus Abbildung 5.26(b) und 5.29(a).	146
6.5.	Visualisierung der Abmessung der generierten Versetzung im Verhältnis zu der Diskretisierung des Systems.	149
A.1.	Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem (GS) mit einem phänomenologischen Modell nach Kocks und Mecking . . .	158
B.1.	Wie Abbildung 5.13, aber mit einer Krümmungsdichte von $\rho^\xi = \rho^\xi / (1 \mu\text{m})$ im Ausgangszustand.	160
B.2.	Wie in Abbildung 5.13(a), aber mit $C_{\text{gleit}} = 0.032$ und $C_{\text{red}} = \frac{\pi}{4}$.	161
C.1.	Versetzungsdichte je Gleitsystem und Spannungs-Dehnungs Kurven für zwei verschiedene Interaktionsspannungsterme. . . .	166

Tabellenverzeichnis

2.1. Werte der Interaktionsmatrix	29
4.1. Überblick über die Beiträge zur Dichteerhöhung und Dichteverringerng durch die berücksichtigten Versetzungsmeehanismen.	73
B.1. Evolution der Versetzungsdichte auf aktiven und inaktiven Gleitsystemen gemittelt über ein Volumen mit der Hälfte der Kantenlänge des Gesamtsystems bis zu einer Dehnung von 0.1 %. Vergleich zweier Parametersätze.	162

Abkürzungen und Symbole

Abkürzungen

CDD	Continuum Dislocation Dynamics
SSD	statistisch verteilte Versetzungen
GND	geometrisch notwendige Versetzungen
kfz	kubisch flächenzentriert
GS	Gleitsystem

Symbole

G	Schubmodul
E	Elastizitätsmodul
ν	Querkontraktionszahl
B	Dämpfungskoeffizient
b	Burgers Vektor
b	Betrag des Burgers Vektors
l	Linienvektor

E_{el}	elastische Energie der Versetzungslinie
ξ	Gleitsystemindex
ζ	Gleitsystemindex
τ	Schubspannung
τ_{cr}^{ξ}	kritische Schubspannung nach G.I. Taylor
$\tau_{cr,mat}^{\xi}$	kritische Schubspannung nach „Franciosi“
ρ	Versetzungsdichte
ρ^{ξ}	Versetzungsdichte auf Gleitsystem ξ
α	Interaktionsfaktor
$a^{\xi\zeta}$	Interaktionsmatrix der Gleitsysteme
σ	Spannungstensor
γ	plastische Scherung
d^{ξ}	Richtung der Abgleitung auf Gleitsystem ξ
m^{ξ}	Gleitebenennormale des Gleitsystems ξ
L	mittlerer Versetzungsabstand
L^{ξ}	mittlerer Versetzungsabstand auf Gleitsystem ξ
v	Versetzungsgeschwindigkeit
ε	Dehnung
ε_{el}	elastische Dehnung
ε_{pl}	plastische Dehnung

τ^ξ	projizierte Schubspannung auf Gleitsystem ξ
τ_{ext}^ξ	externe Schubspannungskomponente auf Gleitsystem ξ
τ_{int}^ξ	interne Schubspannungskomponente auf Gleitsystem ξ
τ_{eff}^ξ	effektive Schubspannung auf Gleitsystem ξ
τ_{fl}^ξ	Fließpannung auf Gleitsystem ξ
M^ξ	Projektionsoperator auf Gleitsystem ξ
α	Versetzungsdichtetensor
κ	Vektor der geometrisch notwendigen Versetzungen
q	Krümmungsdichte
φ	Winkel
A	Alignment Tensor
Θ	Heaviside Funktion
reakt	Index für Versetzungsreaktionen
ρ_{reakt}	Dichte der Versetzungsreaktionen
ρ_{quer}	Dichte der quergeglittenen Versetzungen
q_{reakt}	Reduktion der Krümmungsdichte durch Versetzungsreaktionen
q_{quer}	Reduktion der Krümmungsdichte durch Quergleiten
$\bar{\rho}$	Dichte der generierten Versetzungen durch gleitfähige Reaktionen oder Quergleiten
\bar{q}	generierte Krümmungsdichte durch gleitfähige Reaktionen oder Quergleiten

C	allgemeiner Skalierungsfaktor
C_{reakt}	allgemeiner Skalierungsfaktor für Versetzungsreaktionen
C_{netz}	Skalierungsfaktor für das Ausbauchen einer generierten Versetzung
C_k	Skalierungsfaktor für die Reduktion der Krümmungsdichte
l	Länge des Ausbauchens einer generierten Versetzung
P	Quergleitwahrscheinlichkeit
$\tilde{\rho}$	Dichte der quergleitfähigen Schraubenversetzungen
$\tilde{\kappa}$	Dichte der quergleitfähigen geometrisch notwendigen Schraubenversetzungen
ρ_M	mobile Versetzungsdichte
ρ_{net}	Dichte der unbeweglichen Versetzungen im Netzwerk
ρ_{lomer}	Dichte der Lomer Reaktionen
ρ_S	stabilisierte Versetzungsdichte
β_{reakt}	Anteil der stabilen Versetzungsreaktionen
$\hat{\rho}$	Dichte der durch das Auflösen von Lomer Reaktionen remobilisierten Versetzungen
$\tau_{\text{cr,lomer}}$	kritische Schubspannung zur Auflösung von Lomer Reaktionen
$L_{\text{cr,lomer}}$	kritischer Versetzungsabstand zur Auflösung von Lomer Reaktionen
V	Volumen

1. Einleitung

1.1. Motivation

Die Entwicklung moderner Werkstoffe ist durch das Bestreben geprägt, die Mikrostruktur gezielt zu beeinflussen und auf die konkrete Anwendung in Bauteilen anpassen zu können. Für diesen Ansatz ist eine Vorhersage der mikrostrukturellen Prozesse notwendig, welche wiederum die Kenntnis der zugrundeliegenden physikalischen Mechanismen erfordert. In technischen Anwendungen ist die Möglichkeit einer solchen physikalisch basierten Vorhersage beispielsweise für eine Miniaturisierung von Bauteilen, aber auch für das Verständnis mikrostruktureller Vorgänge interessant. Metalle als einer der wichtigsten Konstruktionswerkstoffe zeichnen sich dadurch aus, dass die Bewegung von Versetzung auf der Mikroskala makroskopisch beobachtbare Vorgänge, wie plastische Deformation, oder Materialermüdung hervorruft. Das Überbrücken dieser Größenordnungen stellt sich allerdings im Hinblick auf die Modellierung als eine Herausforderung dar, insbesondere da mechanische Eigenschaften, wie z.B. die Festigkeit bei Längenskalen im μm -Bereich größenabhängig sind [Arzt, 1998]. Zur Beschreibung solcher Größeneffekte wurden phänomenologische Kontinuumstheorien entwickelt, die auf einer empirischen Beschreibung der beobachteten Effekte basieren [Aifantis, 1987, Fleck und Hutchinson, 1997, Gurtin und Reddy, 2014]. Diese Theorien bilden allerdings nicht die zugrundeliegenden physikalischen Zusammenhänge ab und eignen sich daher nicht für eine Modellierung der skalenüberbrückenden Mechanismen. Für eine Vorhersage des Materialverhaltens sind vielmehr Materialmodelle notwendig, die auf dem Verständnis der

mikrostrukturellen Vorgänge basieren und die physikalischen Zusammenhänge in eine kontinuierliche Beschreibung überführen.

Mit der Methode der diskreten Versetzungsdynamik lässt sich ein detailliertes Verständnis über physikalische Zusammenhänge gewinnen [Bulatov und Cai, 2006, Po et al., 2014, Weygand et al., 2002, Zhou et al., 2010]. Dies wird dadurch erreicht, dass Versetzungslinien in diskreter Form beschrieben werden und damit die Evolution der Mikrostruktur als ein Ergebnis der Simulation erlangt werden kann. Der Vorteil der diskreten Formulierung führt allerdings zu einer Limitierung hinsichtlich der nötigen Rechenleistung und der Skalierbarkeit auf größere Strukturen. Die Lücke zwischen der diskreten Versetzungsdynamik und den phänomenologischen Kontinuumstheorien wird durch versetzungsbaasierte Kontinuumstheorien geschlossen, die als Zustandsvariablen physikalische Größen, wie z.B. die Versetzungsdichte berücksichtigen und deren Evolution in Form von Differentialgleichungen beschreiben. Diese Theorien werden mit dem Ziel entwickelt, die plastische Verformung als eine Konsequenz aus den physikalischen Mechanismen abzubilden ohne dabei die numerische Effizienz einer kontinuierlichen Formulierung zu verlieren.

1.2. Stand der Forschung

Die Entwicklung einer tensoriellen Beschreibung des Versetzungssystems in Form von Versetzungsdichtetensoren geht auf Arbeiten von [Bilby et al., 1955, Kondo, 1952, Kröner, 1958, Nye, 1953] zurück. Insbesondere der Versetzungsdichtetensor nach [Kröner, 1958, Nye, 1953] wurde von [Fleck et al., 1994] zur Beschreibung geometrisch notwendiger Versetzungen herangezogen. Von [Groma, 1997] wurde mittels statistischer Mechanik eine Beschreibung für Versetzungssysteme entwickelt, die allerdings auf zweidimensionale Systeme gerader Stufenversetzungen beschränkt ist. Dieser Ansatz mündete in die Entwicklung einer versetzungsbasierten Plastizitätstheorie gerader Stufenversetzungen [Groma et al., 2003, Zaiser et al., 2001]. Diese Theorie zeigt für

Beispiele mit Versetzungsaufstau eine sehr genaue Reproduktion der Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamik [Schulz et al., 2014] und wurde zur Berücksichtigung interner Spannungsterme [Schmitt et al., 2015], Versetzungsdipole [Schulz et al., 2017] und Versetzungsproduktion durch Frank-Reed Quellen [Schmitt et al., 2019, Yefimov et al., 2004] weiterentwickelt.

Für die Übertragung der zweidimensionalen Ansätze in eine dreidimensionale Theorie wurde von [Kosevich, 1979] ein zusätzlicher Parameter zur Unterscheidung der Linienorientierung eingeführt und von [El-Azab, 2000] durch die statistische Mechanik gekrümmter Versetzungslinien unter Berücksichtigung der Versetzungsgeschwindigkeit verallgemeinert. Diese Ansätze mündeten in die Entwicklung einer kinematisch abgeschlossenen Versetzungsdichtetheorie durch [Hochrainer, 2007], welche durch einen höherdimensionalen Versetzungsdichtetensor zusammenhängende Versetzungslinien, sowie die Veränderung der Linienlänge der Versetzungen aufgrund deren Krümmung beschreibt. Es erfolgte von [Hochrainer, 2015, Hochrainer et al., 2014] eine Vereinfachung dieser Theorie durch die Überführung in handhabbare Größen, sowie von [Monavari et al., 2016] eine Weiterentwicklung zur Berücksichtigung allgemeiner Linienorientierungen. Diese Theorie bietet das kinematische Fundament der Formulierung einer Kristallplastizität, welche auf der Bewegung geschlossener, gekrümmter Versetzungen in dreidimensionalen Systemen basiert. Abgesehen von der Versetzungsdichte als Kontinuumsvariable für die Beschreibung der Versetzungslinienlänge beinhaltet die Theorie die *Krümmungsdichte* als eine zusätzliche Variable, die die mittlere Änderung der Linienorientierung entlang der Versetzungslinie beschreibt.

Der kinematischen Formulierung der Versetzungsbewegung steht die Notwendigkeit von Konstitutivgesetzen für die Versetzungsmobilität gegenüber, wodurch basierend auf dem gegebenen Versetzungszustand eine resultierende plastische Abscherung ermittelt werden kann. Eine Ansatz über Spannungsterme umfasst einerseits die Beschreibung der Wechselwirkung langreichweitiger Spannungsfelder der Versetzungen [Lemarchand et al., 2001, Sandfeld et al., 2013, Schmitt et al., 2015]. Zum anderen kann eine kurzreichweitige Interaktion

innerhalb eines Mittelungsvolumens über Spannungsterme abgebildet werden, die die lokale Fließspannung mit der Versetzungsdichte auf allen Gleitsystemen in Beziehung setzt [Franciosi et al., 1980, Kocks und Mecking, 2003, Taylor, 1934a,b]. Insbesondere der letztgenannte Ansatz enthält in der Regel mit diskreten Versetzungsdynamiksimulationen bestimmte Parameter, die die Stärke der Interaktion beschreiben [Devincre et al., 2006, Madec et al., 2002].

Die Gemeinsamkeit der Herangehensweisen über Spannungsterme ist, dass diese die Versetzungsbewegung je Gleitsystem modifizieren, oder gar vollständig zum Stillstand bringen. Allerdings zeigen Beobachtungen in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker und Weygand, 2015, Stricker et al., 2018, Zbib et al., 2000] und experimentellen Untersuchungen [Basinski und Basinski, 1979, Livingston, 1962, Pande und Hazzledine, 1971a, Steeds, 1966] die Ausprägung von Versetzungsnetzwerken, in denen Versetzungen über mehrere Gleitsysteme miteinander verbunden sind. Dies hat insbesondere Auswirkung auf die Beschreibung von Versetzungsreaktionen, die einerseits neue Versetzungen erzeugen können, andererseits aber auch die Ausbreitung von Versetzungen behindern können. Ein gemeinsames Merkmal aller Reaktionen ist, dass sie das Zusammenspiel mehrerer Gleitsysteme beinhalten. Diese Mechanismen werden bislang durch eine Modifikation der an das Gleitsystem gebundenen Versetzungsmobilität beschrieben. Insbesondere die Erzeugung neuer Versetzungen, die *Versetzungsmultiplikation*, wird in Kontinuumstheorien bisher durch eine gleitsystembasierte Anwendung der phänomenologischen Kocks-Mecking [Kocks und Mecking, 2003] Theorie beschrieben [Kubin et al., 2008b, Li et al., 2014, Ma und Roters, 2004], oder mit dem Hintergrund einer Frank-Read Quelle [Frank und Read, 1950] hergeleitet [Monavari und Zaiser, 2018, Zhu et al., 2014].

Das Ziel dieser Arbeit besteht darin, den Übergang einer versetzungs-basierten Kontinuumsformulierung von einer zweidimensionalen Betrachtung der Versetzungsmobilität in eine Kombination aus dreidimensionaler Versetzungsinteraktion und gleitsystembasierter Versetzungsbewegung zu entwickeln.

Es werden die Auswirkungen von klassischen Mobilitätsgesetzen zur Nachbildung von Versetzungsinteraktionen in dreidimensionalen Systemen aufgezeigt. Weiterhin wird die bisherige Formulierung der gleitsystembasierten Versetzungsausbreitung durch gleitsystemübergreifende Versetzungsinteraktion und der Bildung von Versetzungsreaktionen erweitert, wodurch eine Formulierung der Versetzungsmobilität in Netzwerken ermöglicht wird. Das Ziel ist somit die Beschreibung der Verfestigung als Konsequenz aus der Bildung von Versetzungsnetzwerken, deren Evolution wiederum in einem Zusammenspiel aus Versetzungsinteraktionen und der homogenisierten Beschreibung von Versetzungsreaktionen begründet ist.

1.3. Gliederung

In Kapitel 2 werden die Grundlagen der Beschreibung von Versetzungen und Versetzungssystemen, sowie deren Modellierung eingeführt. Weiterhin dient dieses Kapitel der Klärung von Begrifflichkeiten, sowie der detaillierten Einführung der in dieser Arbeit verwendeten Methode nach [Hochrainer et al., 2014]. In Kapitel 3 erfolgt ausgehend von der Kinematik der gleitsystemgebundenen Versetzungsevolution eine Hinführung auf die Betrachtung schneidender Gleitsysteme im Kontinuum, welche Versetzungsinteraktionen über Spannungsterme und die Bildung von Versetzungsreaktionen beinhaltet. In Kapitel 4 wird das Modell der Versetzungsmobilität in Versetzungsnetzwerken entwickelt und in Kapitel 5 im Anschluss an erweiterte Beispiele zur Versetzungsinteraktion über Spannungsterme untersucht und die Ergebnisse dargestellt. Sowohl die Modellentwicklung, als auch die Untersuchung wird zunächst in die Aspekte *Versetzungsmultiplikation* und *Stabilisierung von Versetzungsbewegung* untergliedert und anschließend zusammengeführt. In Kapitel 6 werden die Ergebnisse mit diskreten Versetzungsdynamiksimulationen verglichen und im Hinblick auf das Wechselspiel zwischen Versetzungsbewegung und gleitsystemübergreifender Versetzungsinteraktion und -reaktion diskutiert. Abschließend werden in

Kapitel 7 die zentralen Erkenntnisse dieser Arbeit zusammengefasst und ein Ausblick auf die sich eröffnenden Fragestellungen und fortführenden Arbeiten gegeben.

Teile dieser Arbeit wurden bereits veröffentlicht. Die Untersuchung der gleitsystemübergreifenden Interaktion über Spannungsterme in Kapitel 5.1 und in Kapitel 3.2 findet sich in [Sudmanns et al., 2018]. Teile von Kapitel 3.3, die Modellbeschreibung der Versetzungsmultiplikation in Kapitel 4.2 und die Untersuchung der Versetzungsmultiplikation durch Querleiten und gleitfähigen Reaktionen in Kapitel 5.2 wurde zuvor in [Sudmanns et al., 2019] veröffentlicht.

2. Grundlagen zur versetzungsbasierten Plastizität und deren Modellierung

Das mechanische Verhalten von Werkstoffen ist durch Vorgänge auf der atomistischen Skala bestimmt. Im Falle von metallischen Werkstoffen sind Versetzungen die wichtigsten Kristalldefekte und verantwortlich für die auf der makroskopischen Skala beobachteten Materialeigenschaften, wie Duktilität, Ermüdung, Verfestigung, oder Reibung. Als Träger der plastischen Verformung sind diese Eigenschaften bestimmt durch die Bewegung und wechselseitigen Interaktion dieser Versetzungen als linienartige Defekte.

Die zentrale Herausforderung für die Beschreibung und Modellierung des mechanischen Verhaltens metallischer Werkstoffe ist dadurch gegeben, dass sich das Zusammenspiel der Versetzungsbewegung als Ursache der plastischen Verformung und deren makroskopisch messbaren Auswirkungen über mehrere Größenordnungen erstreckt. Eine versetzungsbasierte Plastizitätstheorie, die den Anspruch erhebt, Bewegung und Wechselwirkung der Versetzungen homogenisiert und dennoch physikalisch korrekt wiederzugeben, muss auf dem Verständnis der Versetzungsbewegung und -interaktion auf kleineren Skalen fundieren. Zur Gewinnung dieses Verständnisses können Methoden auf verschiedenen Größenordnungen herangezogen werden. Über atomistische Simulationen können Informationen über das Verhalten von einzelnen Versetzungen erlangt werden,

wie z.B. der Ablauf von Versetzungsreaktionen [Rodney und Phillips, 1999, Shenoy et al., 2000, Shin et al., 2001], oder die Mobilität von Versetzungen [Bitzek und Gumbsch, 2004, 2005]. Der Vorteil solcher atomistischer Simulationen ist, dass sich die in dem Kristall gespeicherte Energie als ein Ergebnis aus der Position der einzelnen Atome ergibt, was als Grundlage für die Modellbildung auf höheren Skalen dienen kann [Ortiz et al., 2001]. Das Verständnis der Vorgänge auf der atomistischen Skala erlaubt eine Homogenisierung der Versetzungen als Liniendefekte in der diskreten Versetzungsdynamik (englisch: *Discrete Dislocation Dynamics*, DDD). Diese Methode beruht auf der elastischen Beschreibung der Spannungsfelder der Versetzungen [Hirth und Lothe, 1982, Hull und Bacon, 2011] und erlaubt die Untersuchung des kollektiven und in Teilen stochastischen Verhaltens von Versetzungen [Kubin, 2013, Kubin et al., 1992, Needleman et al., 2006] in Größenordnungen von wenigen μm . Dies beinhaltet z.B. Aussagen über Versetzungsinteraktionen und -reaktionen in Einkristallen [Devincre et al., 2006, 2007, Weygand und Gumbsch, 2005, Zbib et al., 2000], Größeneffekte in Metall-Matrix Kompositwerkstoffen, [Groh et al., 2004, 2005] oder die Versetzungswechselwirkung in komplexen Belastungszuständen, wie Biegung, oder Torsion [Motz et al., 2008, Senger et al., 2011].

Zur Formulierung einer versetzungs-basierten Kontinuumstheorie werden die aus der diskreten Versetzungsdynamik gewonnenen Erkenntnisse in ein System partieller Differentialgleichungen überführt, sodass eine homogenisierte und kontinuierliche Beschreibung der Versetzungsstruktur möglich wird. Durch die Mittelung und Regularisierung der diskreten Versetzungsstruktur ist ein solcher Ansatz allerdings mit einem Verlust an Informationen über den genauen Ort und die Orientierung der Versetzungen verbunden. Die Herausforderung der Entwicklung einer physikalisch basierten Kontinuumstheorie der Versetzungsplastizität besteht deshalb darin, die zentralen Informationen für die zu beschreibenden Phänomene aus den zugrundeliegenden Methoden zu extrahieren und gleichzeitig eine Verringerung der Gesamtkomplexität und insbesondere des Rechenaufwands zu erreichen. Daher besteht ein Zielkonflikt zwischen einer

erwünschten hohen Genauigkeit der physikalischen Beschreibung und einer geringen Modellkomplexität.

Die Entwicklung einer dreidimensionalen versetzungs-basierten Kontinuumstheorie verlangt zum einen eine Beschreibung der Kinematik der Versetzungsbewegung, also die Evolution der Versetzungsdichte als Mittelung über Versetzungsensembles und zum anderen die Abbildung der Interaktionen und Reaktionen zwischen verschiedenen Versetzungen. Im Gegensatz zu der Betrachtung in atomistischen Methoden, z.B. [Salehinia und Bahr, 2014, Veyssi re et al., 2009, Wang et al., 2013], ist die Formulierung der Kinematik der Versetzungsbewegung in Kontinuumstheorien in der Regel gleitsystembasiert, wodurch eine rein planare Ausbreitung der Versetzungen impliziert ist. F r die Kinematik der gemittelten Versetzungsbewegung existieren Beschreibungen in einer zweidimensionalen und auf Stufenversetzungen reduzierten Darstellung [Groma et al., 2003, Zaiser et al., 2001]. Dreidimensionale Darstellungen beruhen entweder auf einer Beschreibung gerader Stufen- und Schraubenversetzungen [Arsenlis und Parks, 2002], oder basieren auf einer Mittelung  ber die Orientierung der Versetzungen [El-Azab, 2000, Hochrainer, 2016, Hochrainer et al., 2007, 2014].

Der Schl ssel f r der Formulierung einer dreidimensionalen versetzungs-basierten Kontinuumstheorie ist die Verbindung der planaren Versetzungsbewegung mit der dreidimensionalen Auspr gung der Interaktionen und Reaktionen von Versetzungen auf mehreren Gleitsystemen, wie sie in diskreten Simulationen beobachtet werden [Alankar et al., 2012b, Devincre et al., 2006, Madec et al., 2002]. Im Folgenden werden die Grundlagen dreidimensionaler Versetzungssysteme beschrieben und dabei insbesondere die in der Arbeit verwendeten Begriffe f r eine versetzungs-basierte Kontinuumstheorie eingef hrt und von der diskreten Betrachtung abgegrenzt. Es werden die Grundlagen der Modellierung von Versetzungen und Versetzungssystemen in der diskreten Versetzungsdynamik, sowie in verschiedenen Kontinuumsformulierungen

beschrieben und kinematischen Grundgleichungen der in dieser Arbeit verwendete Methode (*Continuum Dislocation Dynamics*, CDD) [Hochrainer, 2016, Hochrainer et al., 2007, 2014] eingeführt.

2.1. Versetzungen und Versetzungssysteme

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Betrachtung von Versetzungen und deren Mobilität in dreidimensionalen kubisch-flächenzentrierten (kfz) metallischen Mikrostrukturen. Der Begriff und das Bild einer Versetzung ist zwar seit Jahrzehnten geprägt [Orowan, 1934a,b,c, Polanyi, 1934, Taylor, 1934a,b], ihre Bezeichnung als zählbares Objekt ist in einer dreidimensionalen Betrachtung allerdings nicht mehr einfach mit ihrem Charakter als Defektlinie zu vereinen. Deshalb ist es notwendig Begriffe einzuführen, die sowohl in der diskreten Betrachtungsweise von Versetzungen als Liniendefekte, als auch nach deren Überführung in die Variablen der Kontinuumsstheorie klar verständlich sind und ihre Gültigkeit behalten.

Versetzungen Üblicherweise werden Versetzungen nach ihrem Charakter in *Stufenversetzungen* und *Schraubenversetzungen* unterschieden. Der zentrale Unterschied zwischen dem Stufen- und Schraubencharakter einer Versetzung ist, dass im Falle des Stufencharakters der Linienvektor \mathbf{l} , der entlang der Defektlinie zeigt und der Burgers Vektor \mathbf{b} senkrecht aufeinander liegen, während im Falle des Schraubencharakters beide Vektoren parallel zueinander liegen. In beiden Fällen erfolgt die Abscherung in Richtung des Burgers Vektors. Allerdings erfolgt die Bewegung der Schraubenversetzung orthogonal zum Burgers Vektor und ist physikalisch gesehen nicht an das jeweilige Gleitsystem gebunden.

In einer dreidimensionalen Betrachtung sind Versetzungen gekrümmte Linien, wie in Abbildung 2.1 dargestellt. Ein exakter Stufen- und Schraubencharakter existiert nur an den Punkten auf der Versetzungslinie, an denen die Orientierung des Linienvektors \mathbf{l} und des Burgers Vektors \mathbf{b} genau der

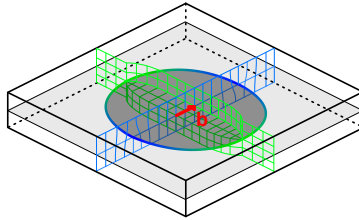


Abbildung 2.1.: Skizze einer geschlossenen Versetzung mit Schraubencharakter (grün) und Stufencharakter (blau), die eine abgescherte Fläche umschließt (grau).

Modellvorstellung entspricht. In allen Zwischenbereichen liegen gemischte Orientierungen vor. Versetzungen, deren Burgers Vektoren aus Gittervektoren bestehen, d.h. aus Vektoren, die die Atompositionen eines perfekten Kristallgitters verbinden, werden als *perfekte Versetzungen* bezeichnet. Im Gegensatz dazu können Partialversetzungen auftreten, die durch Stapelfehler bedingt sind [Hirth und Lothe, 1982]. In dieser Arbeit werden allerdings ausschließlich perfekte Versetzungen betrachtet, die nach ihrer Bewegung einen perfekten Kristall hinterlassen. Die Abscherung des Kristalls erfolgt durch eine Bewegung der Versetzungslinie in der durch den Linienvektor \boldsymbol{l} und dem Burgers Vektor \boldsymbol{b} aufgespannten Ebene, d.h. durch Versetzungsgleiten. Dies wird auch als *konservative Versetzungsbewegung* bezeichnet [Hirth und Lothe, 1982]. Im Folgenden verwenden wir den Begriff *Versetzung* für die Bezeichnung der Abgrenzung dieses abgescherten Bereichs auf einem Gleitsystem. Eine Versetzung ist daher entweder geschlossen, wie in Abbildung 2.1 dargestellt, oder endet an der Oberfläche des Kristalls [Hull und Bacon, 2011]. Im Gegensatz dazu beschreibt der Begriff *Versetzungslinie* die gerichtete Defektlinie. Diese ist immer einer Versetzung zugeordnet und besitzt einen Stufen-, Schrauben-, oder gemischten Charakter, wie er durch die Orientierung von Linienvektor \boldsymbol{l} und Burgers Vektor \boldsymbol{b} gegeben ist [Hull und Bacon, 2011].

Die Versetzung erzeugt durch die Verzerrung des Kristallgitters ein elastisches Spannungsfeld, das durch eine unendliche lange, gerade Versetzungslinie approximiert werden kann [Hull und Bacon, 2011, Volterra, 1907]. Damit werden in zweidimensionalen und auf den Stufencharakter reduzierten Betrachtungen bereits Beschreibungen der Versetzungsplastizität auf diskreter Ebene [Cleveringa et al., 1997, van der Giessen und Needleman, 1995], wie auch auf der Ebene der Kontinuumstheorie [Dickel et al., 2014, Schmitt et al., 2019, Schulz et al., 2014, Yefimov et al., 2004] möglich. In diesen Fällen, können Versetzungen als Durchstoßpunkte auf einer zweidimensionalen Fläche interpretiert werden und sind dadurch zählbare Objekte. Zur Vereinheitlichung der Begrifflichkeiten mit der Modellierung einer dreidimensionalen gleitsystembasierten Plastizitätstheorie ist im Folgenden eine Versetzung und damit der abgescherter Bereich einem bestimmten Gleitsystem zugeordnet. Dieser gleitsystembasierte Ansatz, sowie die begriffliche Trennung zwischen *Versetzung* und *Versetzungslinie* impliziert, dass bei einer *nicht* konservativen Versetzungsbewegung, d.h. einer Bewegung aus der Gleitebene heraus, die Abgrenzung des abgescherter Bereichs nicht zwingend durch eine existierende Versetzungslinie erfolgen muss. In der diskreten Versetzungsdynamik existiert hierfür das Konzept der *virtuellen Versetzungslinie*, was eine gedachte Versetzungslinie mit einem effektiven Burgers Vektor von $\mathbf{b} = 0$ beschreibt [Stricker et al., 2018]. Durch eine solche physikalisch nicht sichtbare Konstruktion stellt eine Versetzung z.B. nach dem Quergleiten weiterhin ein auf dem Gleitsystem geschlossenes Objekt dar, obwohl die Umrandung des abgescherter Bereichs nicht vollständig aus einer *physikalische Versetzungslinie* mit $\mathbf{b} \neq 0$ besteht. Auch einer komplexen Versetzungsstruktur bestehend aus Versetzungsreaktionen und quergeglichenen Versetzungslinien kann durch diese Definition einer Versetzung als zählbares Objekt eine *Anzahl an Versetzungen* zugeordnet werden.

Versetzungssysteme Der planaren, also zweidimensionalen Versetzungsausbreitung steht die wechselseitige Interaktion der Versetzungen sowohl innerhalb eines Gleitsystems, als auch zwischen verschiedenen Gleitsystemen

gegenüber. Solche Wechselwirkungen bilden die Hauptursache für die Verfestigung einkristalliner Metalle [Kubin et al., 2009, Mecking und Kocks, 1981, Zhu et al., 2016]. Interaktionen zwischen Versetzungslinien sind durch deren elastische Spannungsfelder begründet. In einer rein zweidimensionalen Betrachtung kann nur die Dipolbildung gerader Stufenversetzungen beschrieben werden [Reuber et al., 2014, Schulz et al., 2017]. Bereits zur Beschreibung der durch Quergleiten verursachten Annihilation von Schraubenversetzungen ist eine dreidimensionale Betrachtung notwendig, da die Gleitung von Schraubenversetzungen im Gegensatz zu Stufenversetzungen nicht mehr zweidimensional darstellbar ist. Dipolbildung und Annihilation von Schraubenversetzungen findet sich überwiegend in der Einfachgleitphase (Stufe I) der Verformung eines Einkristalls, in der nur wenige Gleitsysteme aktiv sind und daher eine relativ unbegrenzte Versetzungsbewegung möglich ist. Hingegen ist die Mehrfachgleitphase (Stufe II) im Mittel durch eine gleichzeitige Aktivierung mehrerer *nicht* koplanarer Gleitsysteme mit schneidenden Gleitebenen gekennzeichnet [Basinski und Basinski, 1979, Pande und Hazzledine, 1971a,b]. Hierbei findet eine elastische Wechselwirkung statt, zu deren Beschreibung eine dreidimensionale Betrachtung der Gleitsystemorientierung notwendig ist.

In kfz Metallen lassen sich die existierenden Gleitebenen und Gleitsysteme in einem Thompson Tetraeder beschreiben [Thompson, 1953]. Bei einer Anzahl von vier Gleitebenen mit jeweils drei zugeordneten Burgers Vektoren existieren 12 Gleitsysteme von denen jedes mit jedem anderen Gleitsystem interagieren kann. Eine attraktive Wechselwirkung zwischen Versetzungslinien auf zwei schneidenden Gleitsystemen mit Burgers Vektoren \mathbf{b}_1 und \mathbf{b}_2 resultiert in einer Versetzungsreaktion, die als Vereinigung zweier Versetzungslinien unter Bildung eines resultierenden Burgers Vektors \mathbf{b}_3 beschrieben wird. Die Triebkraft für diese Vereinigung ist die Minimierung der im elastischen Spannungsfeld einer Versetzungslinie gespeicherten Energie $E_{el}(\mathbf{b}, l)$. Eine Reaktion

findet demnach statt, wenn durch die Vereinigung der beiden Versetzungslinien die elastische Energie verringert werden kann [Hirth und Lothe, 1982, Hull und Bacon, 2011]:

$$E_{el,3}(b_3, l_3) < E_{el,1}(b_1, l_1) + E_{el,2}(b_2, l_2). \quad (2.1)$$

In kfz Metallen können vier verschiedene Reaktionen unterschieden werden: die Lomer, die kollineare, die Hirth und die gleitfähige Reaktion, wobei die Art der Reaktion durch die beteiligten Burgers Vektoren bestimmt ist [Hirth und Lothe, 1982, Hull und Bacon, 2011]. Die verschiedenen Kombinationen der Versetzungswechselwirkungen und der entstehenden Versetzungsreaktionen können in einer *Interaktionsmatrix* visualisiert werden, wie in Abbildung 2.2 dargestellt.

		111			111			111			111		
		011	101	110	110	101	110	011	101	110	011	101	110
111	011				H	L	G	K	G	G	H	G	L
	101				L	H	G	G	H	L	G	K	G
	110				G	G	K	G	L	H	L	G	H
111	011	H	L	G				H	G	L	K	G	G
	101	L	H	G				G	K	G	G	H	L
	110	G	G	K				L	G	H	G	L	H
111	011	K	G	G	H	G	L				H	L	G
	101	G	H	L	G	K	G				L	H	G
	110	G	L	H	L	G	H				G	G	K
111	011	H	G	L	K	G	G	H	L	G			
	101	G	K	G	G	H	L	L	H	G			
	110	L	G	H	G	L	H	G	G	K			

Abbildung 2.2.: Matrix der Versetzungsreaktionen. G: gleitfähige Reaktion, H: Hirth Reaktion, L: Lomer Reaktion, K: kollineare Reaktion

Von den möglichen Versetzungen führt nur die gleitfähige Reaktion zu einer beweglichen Versetzung auf einem dritten Gleitsystem, das auf einem der beiden reagierenden Gleitebenen liegt [Stricker und Weygand, 2015, Weygand und Gumbsch, 2005]. Die Lomer Reaktion und die Hirth Reaktion ist unbeweglich, da der entstehende Burgers Vektor außerhalb der beiden beteiligten Gleitebenen liegt [Hull und Bacon, 2011]. Die kollineare Reaktion tritt zwischen zwei Gleitsystemen mit gleichem Burgers Vektor auf, wodurch eine Annihilation der beteiligten Versetzungslinien stattfindet. Auf den reagierenden Gleitsystemen verbleiben daher kurze Versetzungssegmente, die über

die beteiligten Gleitsysteme miteinander gekoppelt sind [Devincre et al., 2007, Madec et al., 2003]. In der Interaktionsmatrix wird zudem die Interaktion innerhalb desselben Gleitsystems (in schwarz dargestellt), bzw. zwischen koplanaren Gleitsystemen (in grau dargestellt) berücksichtigt.

Die entstehenden unbeweglichen Versetzungsreaktionen (Lomer und Hirth) bilden als Waldversetzungen Hindernisse für die Ausbreitung von Versetzungen auf allen beteiligten Gleitsystemen. Sie bilden dadurch neben der elastischen Wechselwirkung eine wichtige Ursache der Verfestigung in Einkristallen [Hull und Bacon, 2011]. Weiterhin führen Versetzungsreaktionen zu einer Kopplung der Bewegung der verbleibenden Segmente auf den reagierenden Gleitsystemen [Devincre et al., 2007, Madec et al., 2003]. Die verfestigende Wirkung der Interaktionen und Reaktionen zwischen Versetzungen kann mit einem nach *G.I. Taylor* benannten Zusammenhang zwischen der zur Aktivierung des Gleitsystems ξ notwendigen Schubspannung τ_{cr}^{ξ} und der Versetzungsdichte ρ beschrieben werden [Kocks und Mecking, 2003, Mecking und Kocks, 1981, Taylor, 1934a,b]:

$$\tau_{\text{cr}}^{\xi} = Gb\alpha\sqrt{\rho}. \quad (2.2)$$

Hier bezeichnet G den Schubmodul und b den Betrag des Burgers Vektors. Der Parameter α beschreibt die Stärke aller kombinierten Versetzungsinteraktionen und beträgt nach experimentellen Abschätzungen etwa 0.3 ± 0.1 [Basinski und Basinski, 1979, Livingston, 1962, Neuhaus und Schwink, 1992]. Eine Erweiterung dieser Beziehung berücksichtigt die mit $a^{\xi\zeta}$ bezeichnete Matrix der Versetzungsinteraktionen (Abbildung 2.2) und unterscheidet damit die Stärke der Interaktionen zwischen verschiedenen Gleitsystemen [Franciosi et al., 1980]:

$$\tau_{\text{cr,mat}}^{\xi} = Gb \sqrt{\sum_{\zeta} a^{\xi\zeta} \rho^{\zeta}}. \quad (2.3)$$

Die Stärke der jeweiligen Gleitsystempaarung wird durch die Koeffizienten in der Interaktionsmatrix $a^{\xi\zeta}$ berücksichtigt und mit der Versetzungsdichte

ρ^ζ auf dem Gleitsystem ζ multipliziert. Die Interaktionsmatrix enthält aus Symmetriegründen sechs unabhängige Konstanten, wobei vier davon die Stärke der vier Versetzungsreaktionen abbilden. Die anderen beiden Konstanten repräsentieren die mit *Selbstinteraktion* bezeichnete Wechselwirkung innerhalb eines Gleitsystems ($\xi = \zeta$), oder zwischen koplanaren Gleitsystemen. Die Werte der Konstanten der Interaktionsmatrix wurden durch diskrete Versetzungsdynamiksimulationen bestimmt [Alankar et al., 2012b, Devincere et al., 2006, Madec und Kubin, 2017]. Von allen Reaktionen ist die kollineare Reaktion diejenige mit dem größten Wert in der Interaktionsmatrix. Dies kann dadurch erklärt werden, dass aufgrund der Annihilationsreaktion sehr kurze Versetzungssegmente zurückbleiben, die zur Remobilisierung eine Spannung benötigen, die umgekehrt proportional zu ihrer Länge ist [Madec et al., 2003].

Durch die Betrachtung der verschiedenen Wechselwirkungen ist ersichtlich, dass sich gleitsystembasierte Kontinuumsmodelle in einem Konfliktfeld zwischen der planaren Ausbreitung von Versetzungen - der eigentliche Prozess, der Plastizität verursacht - und den durch gleitsystemübergreifende Versetzungsmechanismen induzierten Verfestigungseffekten bewegen. Deshalb müssen solche Verfestigungseffekte neben der Kinematik der Versetzungsausbreitung innerhalb einer Gleitebene ein Kernaspekt eines versetzungs-basierten Kontinuumsmodells sein, das den Anspruch einer dreidimensionalen Beschreibung der Versetzungsplastizität erhebt.

2.2. Modellierung von Versetzungssystemen

In diesem Kapitel erfolgt die Einführung in verschiedene Methoden der Modellierung von Versetzungssystemen. Angefangen von der diskreten Versetzungsdynamik wird anschließend in verschiedene Ansätze der Kristallplastizität eingeführt, darunter phänomenologische und versetzungs-basierte Modelle. Die

Einführung der Modelle dient dabei hauptsächlich der Abgrenzung verschiedener Modellierungsansätze untereinander, sowie der Darstellung der Besonderheiten der Plastizitätsmodellierung auf verschiedenen Skalen. Weiterhin werden Herausforderungen der Modellierung in Bezug auf die in Kapitel 2.1 erklärten physikalischen Grundlagen der Versetzungsbewegung und -wechselwirkung verdeutlicht.

Diskrete Versetzungsdynamik

Die diskrete Versetzungsdynamik basiert auf einer Einbettung der Versetzungen als diskrete Liniendefekte in ein elastisches Medium. In der dreidimensionalen Beschreibung wird eine Versetzung üblicherweise in Segmente unterteilt, die durch Knoten miteinander verbunden sind [Bulatov und Cai, 2006, Kubin et al., 1992, Po et al., 2014, Weygand et al., 2002, Zhou et al., 2010]. Durch diese diskrete Darstellung ist sowohl der Ort, als auch die Linienrichtung der Versetzungslinie und damit deren Charakter (Stufen-, Schrauben-, oder gemischter Charakter) eindeutig bekannt. Zudem erhält jede Versetzungslinie ein zugehöriges Spannungs- und Verschiebungsfeld. Die Freiheitsgrade der diskretisierten Versetzung sind damit der Ort r_A und die Geschwindigkeit \mathbf{V}_A der einzelnen Knoten [Weygand et al., 2002]. An jedem Knoten der Versetzung wird die Geschwindigkeit basierend auf der Peach-Köhler Kraft

$$\mathbf{F}_{\text{PK}} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{l} \quad (2.4)$$

berechnet. Hier bezeichnet $\boldsymbol{\sigma}$ den Spannungstensor, der durch eine Überlagerung der internen Spannungsfelder der Versetzungen mit der Lösung eines elastischen Randwertproblems berechnet wird. \mathbf{l} ist die Linienrichtung der Versetzung. Der Zusammenhang zwischen der Peach-Köhler Kraft und der Geschwindigkeit wird durch ein vereinfachendes konstitutives Gesetz abgebildet, das einen temperaturabhängigen Reibungswiderstand beinhaltet [Weygand et al., 2002]. Die

Peach-Köhler Kraft F_{PK} ist demnach die Triebkraft für die Versetzungsbewegung. Üblicherweise ist die Versetzungsbewegung in der diskreten Versetzungsdynamik an ein Gleitsystem gebunden, wodurch nur die auf die Gleitebene projizierte Komponente der Peach-Köhler Kraft F_{PK} für die Bewegungsgleichung berücksichtigt wird [Weygand et al., 2002].

Alle nicht konservativen Versetzungsmechanismen und Versetzungsreaktionen werden über die Interaktion der Spannungsfelder der Versetzungssegmente abgebildet. Dadurch enthält der Spannungstensor σ auch Informationen über kurzreichweitige Wechselwirkungen der Versetzungen und beeinflusst dadurch die Peach-Köhler Kraft auf alle umliegenden Knoten. Durch die Berücksichtigung der Spannungsinteraktionen ist die diskrete Versetzungsdynamik in der Lage die Entstehung und Evolution von Versetzungsreaktionen in diskreter Form abzubilden [Stricker und Weygand, 2015, Weygand und Gumbsch, 2005].

Üblicherweise wird auch Quergleiten als ein thermisch aktivierter Prozess berücksichtigt [Hussein et al., 2015, Kubin et al., 1992, Verdier et al., 1998, Weygand et al., 2002, Zhou et al., 2010]. Da nur Schraubenversetzungen quergleiten können, werden die Versetzungssegmente identifiziert, deren Winkel zwischen b und l sich innerhalb $\pm 10^\circ$ der idealen Schraubenorientierung befindet. Dadurch wird die Länge L des potentiell querleitfähigen Schraubensegments bestimmt. Als weiteres Kriterium ist gegeben, dass die auf die Quergleitebene projizierte Peach-Köhler Kraft größer sein muss, als die projizierte Kraft auf die primäre Gleitebene, d.h. die Versetzungsbewegung muss auf der Quergleitebene günstiger sein. Der Eintritt des eigentlichen Quergleitvorgangs, d.h. die Entstehung einer neuen Versetzung auf dem Quergleitsystem, wird probabilistisch durch die Bestimmung eines Wahrscheinlichkeitsterms ermittelt [Verdier et al., 1998]:

$$P(L, \tau) = \frac{\beta L \delta t}{L_0 \delta t_0} \exp\left(\frac{V_{\text{act}}}{kT} (|\tau| - \tau_{\text{III}})\right). \quad (2.5)$$

Hier bezeichnet β eine Normalisierungskonstante, V_{act} das Aktivierungsvolumen, k die Boltzmann Konstante, T die Temperatur, τ die aufgelöste Schubspannung auf dem Quergleitsystem und τ_{III} die Schubspannung bei der die

Stufe III der Verfestigung beginnt. Weiterhin bezeichnen δt den Zeitschritt der Simulation, sowie δt_0 und L_0 Referenzwerte für Zeit und Länge [Kubin et al., 1992, Verdier et al., 1998, Weygand et al., 2002, Zhou et al., 2010].

Die Stärke der diskreten Versetzungsdynamik ist es, die plastische Verformung als ein Ergebnis der Bewegung und wechselseitigen Interaktion von Versetzungen abzubilden und dadurch das kollektive Verhalten von Versetzungssystemen als ein Ergebnis der Simulation untersuchen zu können. Für die Formulierung einer versetzungsbasierten Kontinuumstheorie ermöglicht insbesondere diese Eigenschaft die Formulierung von Mobilitätsgesetzen und Evolutionsgleichung auf Basis einer Homogenisierung der Beobachtungen in der diskreten Versetzungsdynamik.

Plastizitätsmodelle in der Kontinuumstheorie

Im Gegensatz zu der diskreten Versetzungsdynamik können die kollektiven Eigenschaften von Versetzungssystemen in Kontinuumstheorien aufgrund deren homogenisierter Betrachtung nicht als ein Ergebnis der Simulation erhalten werden. Die zentrale Herausforderung für die Formulierung von Kontinuumstheorien besteht darin, die aus der diskreten Versetzungsdynamik, aus Experimenten, oder auch aus atomistischen Simulationen gewonnenen Erkenntnisse in homogenisierte Modelle zu überführen, oder durch empirische Betrachtungsweisen anzunähern. Auf der Kontinuumsebene der Plastizitätsmodellierung existieren verschiedene Ansätze, dieser Herausforderung zu begegnen. Im Folgenden wird daher ein kurzer Überblick über phänomenologische und versetzungsbasierte Modelle der Plastizität gegeben. Für eine umfangreiche Einführung in die Kristallplastizität wird hierbei auf [Roters et al., 2010, 2011] verwiesen.

Phänomenologische Plastizitätsmodelle

Phänomenologische Modelle basieren auf einer empirischen Beschreibung beobachteter Effekte. Die Basis für die Formulierungen bildet in der Regel eine

multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten \mathbf{F} in einen elastischen und einen plastischen Teil (\mathbf{F}_{pl} und \mathbf{F}_{el}):

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\text{el}}\mathbf{F}_{\text{pl}}. \quad (2.6)$$

Für die Beschreibung der plastischen Deformation verwenden diese Modelle in der Regel die kritische Schubspannung τ_{cr}^{ξ} des Gleitsystems ξ als Zustandsvariable [Roters et al., 2011]. Diese ist eine Funktion der totalen Scherung γ und der Scherrate $\partial_t \gamma$

$$\tau_{\text{cr}}^{\xi} = f(\gamma, \partial_t \gamma). \quad (2.7)$$

Die Beschreibung der Scherrate auf den jeweiligen Gleitsystemen erfolgt durch einen Zusammenhang der Art

$$\partial_t \gamma^{\xi} = \partial_t \gamma_0 \left| \frac{\tau^{\xi}}{\tau_c^{\xi}} \right|^{\frac{1}{m}} \text{sgn}(\tau^{\xi}). \quad (2.8)$$

Hier bezeichnet τ^{ξ} die aufgelöste Schubspannung auf dem Gleitsystem ξ , $\partial_t \gamma_0$ und m sind Materialparameter für die Referenzscherrate und die Ratenabhängigkeit der Scherung. Die Verfestigung eines Gleitsystems ξ durch ein Gleitsystem ζ wird durch

$$\partial_t \tau_{\text{cr}}^{\xi} = h^{\xi\zeta} \left| \partial_t \gamma^{\zeta} \right| \quad (2.9)$$

beschrieben, wobei $h^{\xi\zeta}$ die Eigenschaft einer Verfestigungsmatrix einnimmt. Eine detaillierte Herleitung der Gleichungen kann z.B. [Roters et al., 2011] entnommen werden.

Der Nachteil einer solchen Beschreibung ist die alleinige Abhängigkeit des Materialzustands von der kritischen Schubspannung τ_c^{ξ} . Die Dichte von Kristalldefekten, wie z.B. Versetzungen wird nicht berücksichtigt. Insbesondere fehlen dadurch größenabhängige Effekte, wie sie durch Versetzungsbewegung und -interaktion entstehen, sowie eine Beschreibung des Einflusses der Versetzungsdichte auf die Verfestigung [Roters et al., 2011].

Der Zusammenhang zwischen der Versetzungsdichte und der Spannung, die zur Aktivierung eines Gleitsystems nötig ist, wurde bereits durch Taylor beschrieben [Taylor, 1934a,b], siehe auch Gleichung (2.2). Eine darauf basierende Theorie der Kaltverfestigung, d.h. der Erhöhung der Fließspannung mit der Versetzungsdichte, wurde von Kocks und Mecking formuliert [Kocks, 1966, Kocks und Mecking, 2003, Mecking und Kocks, 1981]. Diese Theorie basiert auf der Idee der Akkumulation von Versetzungen nach einer gewissen Abgleitung und kann formal durch eine Rate der Versetzungsakkumulation beschreiben werden [Kocks und Mecking, 2003]:

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{dL}{b dA} = \frac{1}{b\Lambda}. \quad (2.10)$$

Hier bezeichnet dL die Länge der Versetzungen, die nach dem Abscheren der Fläche dA „gespeichert“ werden. Der Parameter Λ wird als „mittlere freie Weglänge“ bezeichnet und wird üblicherweise als proportional zum mittleren Versetzungsabstand angenommen, d.h. $\Lambda \propto 1/\sqrt{\rho}$. Während diese Formulierung die Verfestigungsprozesse in der Stufe II der Verfestigung phänomenologisch zu beschreiben versucht, werden in der nachfolgenden Stufe III insbesondere durch Quergleiten verursachte Relaxationsprozesse beobachtet, die zu einer Abflachung der Spannungs-Dehnungs Kurve führen [Hull und Bacon, 2011, Kocks und Mecking, 2003]. Zur Beschreibung dieses als *dynamische Erholung* bezeichneten Prozesses wird Gleichung (2.10) um einen Term erweitert [Kocks und Mecking, 2003]:

$$d\rho = \frac{d\gamma}{b\Lambda} - d\rho_r. \quad (2.11)$$

Versetzungs-basierte Plastizitätsmodelle

Versetzungs-basierte Modelle verwenden als Zustandsvariablen physikalische Größen, wie z.B. eine kontinuierliche Beschreibung des Versetzungsinhalts in

Form einer Versetzungsdichte und stehen damit im Gegensatz zu phänomenologischen Modellen. Zur Plastizitätsmodellierung auf Basis der Bewegung von Versetzungen wird die Beschreibung der Scherrate als Zustandsvariable aus den phänomenologischen Modellen (Gleichung 2.8) typischerweise durch die *Orowan Gleichung* ersetzt [Li et al., 2014, Ma und Roters, 2004, Ma et al., 2006, Roters et al., 2011, Schmitt et al., 2015, Schulz et al., 2014]:

$$\partial_t \gamma^\xi = \rho^\xi b v^\xi. \quad (2.12)$$

Die Versetzungsdichte ρ^ξ beinhaltet die Träger der plastischen Verformung, die sich mit der mittleren Geschwindigkeit v^ξ auf dem Gleitsystem bewegen. Im Allgemeinen handelt es sich bei ρ^ξ um die totale Versetzungsdichte, d.h. $\rho^\xi = \rho_{\text{tot}}^\xi$. Oftmals wird aber die totale Versetzungsdichte weiter unterteilt in eine *mobile Versetzungsdichte* ρ_{m}^ξ und in eine *immobile Versetzungsdichte* ρ_{im}^ξ , d.h. $\rho^\xi = \rho_{\text{m}}^\xi + \rho_{\text{im}}^\xi$. Hierbei fungiert nur die mobile Versetzungsdichte als Träger der plastischen Verformung (Gleichung 2.12), während die immobile Versetzungsdichte als Waldversetzungen zur Verfestigung beiträgt [Li et al., 2014, Ma und Roters, 2004, Ma et al., 2006, Roters et al., 2011].

Zur vollständigen Beschreibung der Mikrostruktur werden demnach Evolutionsgleichungen für die Versetzungsdichte ρ^ξ , bzw. den Versetzungsdichten ρ_{m}^ξ und ρ_{im}^ξ sowie für die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit v^ξ benötigt. Dabei werden die Evolutionsgleichungen gleitsystembasiert formuliert, d.h. jedes Gleitsystem erhält identische Gleichungen, die in der Regel unabhängig voneinander gelöst werden. Versetzungswechselwirkungen werden dabei häufig über Spannungsterme abgebildet, die die effektive Schubspannung auf dem Gleitsystem τ_{eff}^ξ beeinflussen. Dies geschieht über die Annahme, dass unterhalb einer kritischen Spannung (Gleichung (2.2), oder (2.3)) keine Versetzungsbewegung stattfindet [Li et al., 2014, Ma et al., 2006, Reuber et al., 2014, Roters et al., 2011]. Die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit v^ξ ergibt sich schließlich entweder über die Annahme eines linearen Zusammenhangs mit

der effektiven Schubspannung τ_{eff}^{ξ} [Hochrainer et al., 2014, Schmitt et al., 2015, 2019] zu

$$v^{\xi} = f(\tau_{\text{eff}}^{\xi}), \quad (2.13)$$

oder berücksichtigt zusätzlich thermisch aktivierte Versetzungsbewegung [Li et al., 2014, Ma und Roters, 2004, Ma et al., 2006, Reuber et al., 2014, Roters et al., 2011].

Die Produktion von Versetzungen basiert oftmals auf einer gleitsystembasierten Anwendung des phänomenologischen Modells der Versetzungsakkumulation von Kocks und Mecking [Kocks und Mecking, 2003]. Unter Anwendung von Gleichung (2.10) ergibt sich eine Rate der Versetzungsdichteproduktion auf dem jeweiligen Gleitsystem ξ proportional zur Rate der Abgleitung auf dem selben Gleitsystem zu

$$\partial_t \rho_{\text{prod}}^{\xi} = C \frac{\partial_t \gamma^{\xi}}{b} \sqrt{\rho} = C v^{\xi} \rho^{\xi} \sqrt{\rho} \quad (2.14)$$

mit einem Skalierungsparameter C . Ein solcher, oder ein damit verwandter Ansatz findet sich z.B. in [Kubin et al., 2008a,b, Li et al., 2014, Monavari und Zaiser, 2018, Reuber et al., 2014, Roters et al., 2019].

2.3. Continuum Dislocation Dynamics (CDD)

Die *Continuum Dislocation Dynamics* Theorie nach u.a. [Hochrainer, 2007, Hochrainer et al., 2007, 2014] basiert auf einer Beschreibung des Deformationsverhaltens von kfz Metallen durch gleitsystemgebundene Evolution der Versetzungen als Ursache der plastischen Deformation. Unter der Annahme der linear-elastischen Theorie kleiner Dehnungen kann die multiplikative Zerlegung der Deformationsgradienten (Gleichung 2.6) in eine additive Zerlegung des

Verzerrungstensors $\mathbf{D}\mathbf{u}$ in einen elastischen Teil β_{el} und einen plastischen Teil β_{pl} umgewandelt werden:

$$\mathbf{D}\mathbf{u} = \beta_{\text{el}} + \beta_{\text{pl}}. \quad (2.15)$$

Die Dehnung ist durch den symmetrischen Teil des Verzerrungstensors $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{u}) = \text{sym}(\mathbf{D}\mathbf{u})$ gegeben. Der plastische Teil des Verzerrungstensors, sowie die plastische Dehnung ist durch die plastische Scherung γ^ξ auf den jeweiligen Gleitsysteme $\xi = 1 \dots N$ gegeben:

$$\begin{aligned} \beta_{\text{pl}} = \sum_{\xi=1}^N \gamma^\xi \mathbf{M}^\xi \quad \text{und} \quad \varepsilon_{\text{pl}} = \text{sym}(\beta_{\text{pl}}) = \sum_{\xi=1}^N \gamma^\xi \text{sym}(\mathbf{M}^\xi) \\ \text{mit} \quad \mathbf{M}^\xi = \mathbf{d}^\xi \otimes \mathbf{m}^\xi, \end{aligned} \quad (2.16)$$

wobei $\mathbf{d}^\xi = \frac{1}{b} \mathbf{b}$ die Richtung der Abgleitung und \mathbf{m}^ξ die Gleitebenennormale bezeichnet. Da $\varepsilon = \varepsilon_{\text{el}} + \varepsilon_{\text{pl}}$ beträgt elastische Dehnung

$$\varepsilon_{\text{el}} = \varepsilon_{\text{el}}(\mathbf{u}, \gamma) = \varepsilon(\mathbf{u}) - \varepsilon_{\text{pl}}(\gamma) \quad \text{mit} \quad \gamma = (\gamma^1 \dots \gamma^\xi)^\top \quad (2.17)$$

Der Spannungstensor

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}[\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{el}}] = \mathbb{C}[\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}}] \quad (2.18)$$

beinhaltet das elastische Problem, das mittels einer Finite-Elemente Methode gelöst wird. Die daraus resultierende elastische Spannung dient als Grundlage für die Versetzungsbewegung auf Gleitsystemebene und wird als Schubspannung auf die jeweiligen Gleitsysteme projiziert:

$$\boldsymbol{\tau}^\xi = \boldsymbol{\tau}_{\text{ext}}^\xi + \boldsymbol{\tau}_{\text{int}}^\xi = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{M}^\xi. \quad (2.19)$$

Die aufgelöste Schubspannung $\boldsymbol{\tau}^\xi$ setzt sich aus einer externen Spannungskomponente $\boldsymbol{\tau}_{\text{ext}}^\xi$ aufgrund externer Belastung und Randbedingungen, sowie einer

internen Spannungskomponente τ_{int}^{ξ} zusammen. Die interne Spannungskomponente wird mit einer Eigendehnungsformulierung der Versetzungen berechnet [Lemarchand et al., 2001, Sandfeld et al., 2013, Schmitt et al., 2015] und berücksichtigt daher durch Versetzungen erzeugte Spannungsfelder. Für die Bestimmung der plastische Scherung γ^{ξ} wird die Orowan Gleichung ausgewertet (Gleichung 2.12), die den Zusammenhang zwischen dem Versetzungsfluss $v^{\xi} \rho^{\xi}$ und der plastischen Scherung beschreibt.

Für den *kinematischen Abschluss* der Theorie, d.h. der Evolution der Versetzungsdichte zu gegebener Versetzungsgeschwindigkeit v^{ξ} , werden Evolutionsgleichungen benötigt, die den diskreten Versetzungscharakter entsprechend der Definition in Kapitel 2.1 in eine homogenisierte Kontinuumsbeschreibung überführen. Die kontinuierliche Formulierung einer diskreten Versetzungsstruktur erfolgt über eine Mittelung über eine Menge statistisch äquivalenter Realisierungen und wird als Ensemblemittelwertbildung bezeichnet. Einen Überblick über Ensemblemittelwerte in einer zweidimensionalen Betrachtung bietet [Groma, 1997, Groma et al., 2003, Schulz und Schmitt, 2018, Zaiser et al., 2001], eine dreidimensionalen Betrachtung ist in [El-Azab, 2000, Hochrainer, 2007] zu finden.

Bereits in den 50er Jahren formulierte Kröner und Nye [Kröner, 1958, Nye, 1953] einen Zusammenhang zwischen der mikrostrukturellen Deformation und dem ihr zugeordneten Versetzungsinhalt. Diese *klassische Versetzungsdichtetheorie* basiert auf dem Versetzungsdichtetensor α , der den Versetzungsinhalt eines Burgers-Umlaufs um eine Oberfläche O in Form einer Länge der enthaltenen Burgers Vektoren beschreibt:

$$\int_O \alpha = \mathbf{b}. \quad (2.20)$$

Zudem kann der Versetzungsdichtetensor α auch über eine Beziehung zu der plastischen Verzerrung β_{pl} definiert werden:

$$\alpha = \nabla \times \beta_{\text{pl}}. \quad (2.21)$$

Unter der Annahme einer an das Gleitsystem gebundenen Versetzungsbewegung ergibt sich dadurch die Definition des Vektors der Dichte der *geometrisch notwendige Versetzungen* (englisch: geometrically necessary dislocations, GNDs) z.B. in [Schulz et al., 2019]:

$$\boldsymbol{\kappa}^\xi = -\frac{1}{b} \mathbf{m}^\xi \times \nabla \gamma^\xi. \quad (2.22)$$

Die geometrisch notwendigen Versetzungen bezeichnen diejenigen Versetzungen, die zur Beschreibung der Verzerrung eines Kristallgitter notwendig sind. Bei der systematischen Mittelung diskreter Versetzungsstrukturen ergeben sich abhängig von der Auflösung *statistisch gespeicherte Versetzungen* (englisch: statistically stored dislocations, SSDs). Für die Beschreibung der Verzerrung werden diese Versetzungen zwar nicht benötigt, eine Formulierung, die sie vernachlässigt ist aber nicht in der Lage, die Evolution von allgemeinen Versetzungsstrukturen zu beschreiben.

Die *höherdimensionale Versetzungsdichtetheorie* [Hochrainer et al., 2007] ermöglicht durch die Einführung eines höherdimensionalen Versetzungsdichtentensors $\boldsymbol{\alpha}^{\text{II}}$ die Unterscheidung der Versetzungslinien nach ihrer Orientierung. Als zusätzliche Dimension beschreibt φ den Winkel zwischen dem Burgers Vektor \mathbf{b} und der Linienrichtung \mathbf{l} . Mittels einer Multipolentwicklung und einer Annahme für den Abschluss 1. Ordnung kann eine Vereinfachung des höherdimensionalen Orientierungsraums erhalten werden [Hochrainer, 2015, Hochrainer et al., 2014].

Die Versetzungsmikrostruktur wird in der vereinfachten Theorie nach [Hochrainer et al., 2014] durch die totale Versetzungsdichte ρ^ξ , den Vektor der geometrisch notwendigen Versetzungen $\boldsymbol{\kappa}^\xi = (\boldsymbol{\kappa}_{\text{schraube}}^\xi, \boldsymbol{\kappa}_{\text{stufe}}^\xi, 0)$ und die Krümmungsdichte q^ξ dargestellt. Die letztgenannte Größe beschreibt die lokale Winkeländerung eines Versetzungsensembles in einem Mittelungsvolumen. In einer zweidimensionalen Betrachtung der vereinfachten Theorie, d.h. unter der Annahme eines ebenen Dehnungszustands und einer Reduktion auf gerade

Stufenversetzungen kann die Dichte der positiven und negativen Versetzungen eindeutig berechnet werden:

$$\rho_{+}^{\xi} = \frac{\rho^{\xi} + \kappa_{\text{stufe}}^{\xi}}{2} \quad \text{und} \quad \rho_{-}^{\xi} = \frac{\rho^{\xi} - \kappa_{\text{stufe}}^{\xi}}{2}. \quad (2.23)$$

Die Dichte der SSD und GND Versetzungen beträgt somit im Allgemeinen

$$\rho_{\text{SSD}}^{\xi} = \rho^{\xi} - \|\kappa^{\xi}\| \quad \text{und} \quad \rho_{\text{GND}}^{\xi} = \|\kappa^{\xi}\|. \quad (2.24)$$

In einer dreidimensionalen Betrachtung geht allerdings die Orientierungsinformation von SSD Versetzungen verloren, sodass in diesem Fall eine homogene Linienorientierung angenommen wird. Die Evolution des Versetzungszustands zum Zeitpunkt t wird durch partielle Differentialgleichungen basierend auf einer Beschreibung des Versetzungstransports abgebildet [Hochrainer et al., 2014]:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho^{\xi} &= -\nabla \cdot (v^{\xi} \kappa_{\perp}^{\xi}) + v^{\xi} q^{\xi} \quad \text{mit} \quad \kappa_{\perp}^{\xi} = \kappa^{\xi} \times \mathbf{m}^{\xi} \\ \partial_t \kappa^{\xi} &= \nabla \times (\rho^{\xi} v^{\xi} \mathbf{m}^{\xi}) \\ \partial_t q^{\xi} &= -\nabla \cdot \left(\frac{q^{\xi}}{\rho^{\xi}} \kappa_{\perp}^{\xi} v^{\xi} + \mathbf{A}^{\xi} \nabla v^{\xi} \right) \end{aligned} \quad (2.25)$$

mit

$$\mathbf{A}^{\xi} = \frac{1}{2|\kappa^{\xi}|^2} \left((\rho^{\xi} + \|\kappa^{\xi}\|) \kappa^{\xi} \otimes \kappa^{\xi} + (\rho^{\xi} - \|\kappa^{\xi}\|) \kappa_{\perp}^{\xi} \otimes \kappa_{\perp}^{\xi} \right). \quad (2.26)$$

Der GND-Vektor κ^{ξ} beschreibt hierbei den Überschuss einer Polarisation des Stufen- oder Schraubencharakters. Die Krümmungsdichte q^{ξ} beschreibt in der Verbindung mit der isotropen Versetzungsgeschwindigkeit v^{ξ} einen Quellterm $v^{\xi} q^{\xi}$ in der Evolutionsgleichung der Versetzungsdichte. Dies reproduziert die Produktion von Versetzungslinienlänge aufgrund der Expansion einer geschlossenen Versetzung.

In Bezug auf die Definition und Abgrenzung einer *Versetzung* von der *Versetzungslinie* in Kapitel 2.1, kann das Integral der totalen Versetzungsdichte $\int_V \rho^\xi$ über das Mittelungsvolumen V als Linienlänge der Versetzungen interpretiert werden. Im Gegensatz dazu beschreibt das Integral über die Krümmungsdichte $\int_V q^\xi$ den Winkelinhalt eines Mittelungsvolumens. Wenn alle Versetzungslinien eines Mittelungsvolumens die gleiche Orientierung aufweisen, kann die Krümmungsdichte auch über das Verhältnis von Versetzungsdichte zu Krümmungsradius r^ξ definiert werden:

$$q^\xi = \frac{\rho^\xi}{r^\xi}. \quad (2.27)$$

In diesem Fall kann das Integral

$$\frac{1}{2\pi} \int_V q^\xi dV \quad (2.28)$$

als *Anzahl der Versetzungen* interpretiert werden. Da der Krümmungsradius sowohl positive, als auch negative Werte annehmen kann (d.h. konvexe, oder konkave Krümmung), beschreibt q^ξ nur den Überschuss einer Krümmung. Dadurch ist die Interpretation des Integrals in (Gleichung 2.28) als Anzahl der Versetzungen nicht allgemeingültig.

Für die Schließung der Gleichungen nehmen wir einen linearen Zusammenhang der mittleren Versetzungsgeschwindigkeit v^ξ mit der effektiven Schubspannung τ^ξ an (siehe Gleichung 2.13). Die Superposition der externen Schubspannung τ_{ext}^ξ und der internen Spannungsfelder τ_{int}^ξ durch die Eigendehnungsformulierung in Gleichung (2.19) induziert ein langreichweitiges Spannungsfeld, dessen Genauigkeit von der Auflösung des numerischen Systems abhängig ist. Insbesondere für Probleme mit starken Gradienten in der GND-Dichte und damit in der plastischen Scherung können kurzreichweitige Korrekturspannungen angewendet werden [Schmitt et al., 2015]. Unter Verwendung zusätzlicher Spannungsterme zur Versetzungsinteraktion in der Art, wie sie durch Gleichung

(2.2) oder (2.3) beschrieben werden¹, ergibt sich die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit zu

$$v^{\xi} = \frac{b}{B} \tau_{\text{eff}}^{\xi} = \begin{cases} \left(|\tau^{\xi}| - \tau_{\text{H}}^{\xi} \right) \text{sign} \left(\tau^{\xi} \right) & \text{wenn } |\tau^{\xi}| > \tau_{\text{H}}^{\xi} \\ 0 & \text{wenn } |\tau^{\xi}| \leq \tau_{\text{H}}^{\xi} \end{cases} \quad (2.29)$$

mit dem Dämpfungskoeffizienten B .

Sofern nicht anders gekennzeichnet, wird im Folgenden in Gleichung (2.2) $\alpha = 0.35$ gewählt und für die Interaktionsmatrix $a^{\xi\zeta}$ in Gleichung (2.3) die in Tabelle 2.1 gegebenen Werte verwendet [Kubin et al., 2008a]. Weiterhin sind die Materialparameter aller in dieser Arbeit gezeigten CDD Simulationen durch den Elastizitätsmodul $E = 71.3\text{GPa}$, die Querkontraktionszahl $\nu = 0.347$, den Betrag des Burgers Vektors $b = 0.256\text{nm}$ und den Dämpfungskoeffizienten $B = 1 \times 10^{-4}\text{Pa}\cdot\text{s}$ gegeben.

$a^{\xi\xi}$	a_{kopl}	a_{lomer}	a_{hirth}	a_{gleit}	a_{koll}
0.122	0.122	0.122	0.07	0.137	0.625

Tabelle 2.1.: Werte der in Abbildung 2.2 visualisierten Interaktionsmatrix in Gleichung (2.3) nach [Kubin et al., 2008a].

Der Interaktionsterm τ_{H}^{ξ} in Gleichung (2.29) kann als lokale Fließspannung interpretiert werden, wodurch Versetzungsinteraktionen zwischen Gleitsystemen mit einem Mobilitätsgesetz für die planare Versetzungsbewegung berücksichtigt werden können. Für eine adäquate Bestimmung der Versetzungsgeschwindigkeit bzw. einer Rate der plastischen Abscherung aus einer gegebenen Mikrostruktur wird allerdings ein Kenntnis der physikalischen Mechanismen und deren Homogenisierung benötigt. Dies erfordert, wie in Kapitel 2.1 beschrieben,

¹ Es gilt daher entweder $\tau_{\text{H}}^{\xi} = \tau_{\text{cr}}^{\xi}$, oder $\tau_{\text{H}}^{\xi} = \tau_{\text{cr,mat}}^{\xi}$.

insbesondere die Verbindung der planaren Versetzungsbewegung mit der dreidimensionalen Ausprägung der Versetzungswechselwirkungen und -Reaktionen. Dies ist der Inhalt der folgenden Kapitel.

Numerische Umsetzung der Theorie Das Gleichungssystem, das die Evolution der Mikrostruktur beschreibt (Gleichung 2.25 und 2.26) ist in einer numerischen Formulierung unter Verwendung des Finite-Elemente Codes M++ [Wieners, 2005, 2010] basierend auf einem parallelisierten Mehrgitterverfahren implementiert. Im Folgenden werden nur die wichtigsten Aspekte der Implementierung beschreiben. Für eine umfangreiche Einführung wird auf [Schulz et al., 2016, 2019] verwiesen.

Das Gleichungssystem der Versetzungsdichten und der Krümmungsdichte (Gleichung 2.25) wird in ein lineares Gleichungssystem für (ρ^ξ, κ^ξ) und in eine lineare Transportgleichung für q^ξ aufgeteilt und in separaten Transportproblemen gelöst. Dadurch ergibt sich für (ρ^ξ, κ^ξ) das Gleichungssystem

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho^\xi \\ \kappa^\xi \end{pmatrix} + \nabla \cdot \mathbf{F}^\xi \begin{pmatrix} \rho^\xi \\ \kappa^\xi \end{pmatrix} = \mathbf{G}^\xi \quad (2.30)$$

mit der Funktion des Versetzungsflusses \mathbf{F}^ξ :

$$\mathbf{F}^\xi \begin{pmatrix} \rho^\xi \\ \kappa^\xi \end{pmatrix} = v^\xi \begin{pmatrix} (l^\xi \otimes d^\xi - d^\xi \otimes l^\xi) \cdot \kappa^\xi \\ (d^\xi \otimes l^\xi - l^\xi \otimes d^\xi) \rho^\xi \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

und dem Quellterm \mathbf{G}^ξ :

$$\mathbf{G}^\xi = \begin{pmatrix} v^\xi q^\xi \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Im Falle von geschlossenen Randbedingungen (in der Arbeit nicht betrachtet), wird angenommen, dass Versetzungen nicht über die Grenzen transportiert werden, d.h.

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^\xi \begin{pmatrix} \rho^\xi \\ \boldsymbol{\kappa}^\xi \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad (2.33)$$

wobei \mathbf{n} der Normalenvektor der Oberfläche bezeichnet. Für offene Randbedingungen gilt

$$v^\xi \left(|\mathbf{n} \times \mathbf{m}^\xi| \rho^\xi + (\mathbf{n} \times \mathbf{m}^\xi) \cdot \boldsymbol{\kappa}^\xi \right) = 0, \quad (2.34)$$

d.h. Versetzungen verlassen das Volumen in Richtung der Oberflächennormalen \mathbf{n} . Für eine gegebene Versetzungsgeschwindigkeit gilt für die Evolutionsgleichung der Krümmungsdichte

$$\begin{aligned} \partial_t q^\xi + \nabla \cdot \mathbf{f}^\xi(q^\xi) &= g^\xi \quad \text{mit} \quad \mathbf{f}^\xi(q^\xi) = \frac{q^\xi}{\rho^\xi} \boldsymbol{\kappa}_\perp^\xi v^\xi \\ \text{und} \quad g^\xi &= -\nabla \cdot \mathbf{A}^\xi \nabla v^\xi \end{aligned} \quad (2.35)$$

unter Verwendung von Gleichung (2.26). Für die Zeitdiskretisierung werden die separierten Teile des Gleichungssystems durch ein Splittingverfahren nach [Strang, 1968] unter Verwendung der impliziten Mittelpunkregel gekoppelt. Dabei wird das Gleichungssystem mit einer GMRES Methode [Saad und Schultz, 1986] mit fixen Zeitschritten gelöst. Für die räumliche Diskretisierung der Evolutionsgleichungen (2.30) und (2.35) wird eine diskontinuierliche Galerkin Methode mit upwind flux verwendet. Alle in dieser Arbeit untersuchten Systeme sind mit tetragonalen Elementen diskretisiert, wobei eine lineare Ansatzfunktion für das linear elastische Finite-Elemente Problem verwendet wird.

3. Modellierung der Versetzungsmobilität

Dieses Kapitel dient zur Verdeutlichung der physikalischen Mechanismen, sowie deren Homogenisierung in einer versetzungsbasierten Kontinuums-
theorie zur dreidimensionalen Beschreibung der Versetzungsmobilität und
-wechselwirkungen am Beispiel der CDD, wie in Kapitel 2.3 vorgestellt. Kapitel
2.1 verdeutlicht das Wechselspiel zwischen der planaren Versetzungsbewegung
zur Abscherung der Kristallebenen und der Wechselwirkung von Versetzungen
auf verschiedenen Gleitsystemen als ein Kernaspekt der Verfestigung in der
Mehrfachgleitphase (Stufe II). Im Gegensatz dazu beschreiben versetzungsbasierte
Kontinuumsmodelle Versetzungsinteraktionen und -Reaktionen in
der Regel in Form von Mobilitätsgesetzen, die nur die gleitsystembasierte
Versetzungsbewegung beeinflussen (Kapitel 2.2). Dadurch kann insbesondere
die Ausprägung von Versetzungsreaktionen als gleitsystem-koppelnde Mechanismen
nicht berücksichtigt werden. Für eine Formulierung, die die planare
Versetzungsbewegung mit den gleitsystemübergreifenden Versetzungsmechanismen
in Einklang bringt, wird im Folgenden das Zusammenspiel dreier Aspekte
berücksichtigt:

1. Die gleitsystemgebundene, planare und damit konservative Versetzungsbewegung. Dieser Mechanismus führt zur Abscherung des Kristalls auf Gleitebenen und erzeugt damit plastische Verformung.
2. Versetzungsinteraktionen innerhalb eines Gleitsystems, sowie zwischen verschiedenen Gleitsystemen. Diese Interaktionen sind im Wesentlichen

durch elastische Spannungsfelder verursacht und können zu einer Einschränkung der planaren Versetzungsbewegung durch Bildung von Dipolen, oder durch die Hinderniswirkung von unbeweglichen Versetzungsreaktionen, wie Lomer oder Hirth Reaktionen führen.

3. Die Bildung von Versetzungsreaktionen und Quergleiten. Zusätzlich zur Beeinflussung der planaren Versetzungsbewegung sind diese Mechanismen dadurch gekennzeichnet, dass durch sie entweder Versetzungen auf anderen Gleitsystemen *generiert* werden (z.B. bei gleitfähigen Reaktionen, oder Quergleiten), oder die Versetzungslinienlänge, d.h. die Menge der Träger der plastischen Verformung reduziert wird (z.B. bei Lomer- und Hirth Reaktionen, oder kollinearer Annihilation).

Die folgenden Kapitel verdeutlichen Ansätze zur Erweiterung einer gleitsystembasierten Plastizitätsformulierung, um dreidimensionale und gleitsystemübergreifende Versetzungsmechanismen zu berücksichtigen. Hierfür ist eine Darstellung des Übergangs von der rein planaren Versetzungsausbreitung (3.1), über die Berücksichtigung von Versetzungsinteraktionen innerhalb und zwischen Gleitsystemen (3.2) bis hin zur Beschreibung von Versetzungsreaktionen im Kontinuum (3.3) notwendig.

3.1. Versetzungsbewegung auf einem Gleitsystem

Die Abscherung des Kristalls auf Gleitebenen wird in der CDD Theorie und in anderen versetzungsbasierten Kontinuumstheorien durch eine Evolutionsgleichung der plastischen Scherung abgebildet (Gleichung 2.12) [Hochrainer et al., 2014, Li et al., 2014, Ma und Roters, 2004, Reuber et al., 2014]. Diese Evolutionsgleichung ist eine Funktion der Versetzungsdichte ρ^{ξ} und der Versetzungsgeschwindigkeit v^{ξ} , wodurch ein Versetzungsfluss $\rho^{\xi} v^{\xi}$ mit $v^{\xi} > 0$ zu einer Abscherung der Kristallebenen führt. Dies gilt sowohl für SSD, als auch für

GND Dichten, da die Versetzungsdichte ρ^{ξ} nicht zwischen den Orientierungen unterscheidet (Gleichung 2.24). Eine existierende GND Dichte ist allerdings mit einem Gradienten in der räumlichen Verteilung der plastischen Scherung verbunden (Gleichung 2.22) und führt dadurch zu einer Ausbildung eines internen Spannungsfelds, wie durch Gleichung (2.17 - 2.19) beschrieben.

Wie in Kapitel 2.1 erklärt, wird in dieser Arbeit zwischen den Begriffen *Versetzung* und *Versetzungslinie* unterschieden. Während mit *Versetzung* die Abgrenzung des abgescherten Bereichs in seiner Gesamtheit bezeichnet wird, beschreibt die *Versetzungslinie* die Eigenschaft einer Versetzung als gerichtete Defektlinie. Diese Unterscheidung hat neben der Terminologie auch die konkrete Auswirkung, dass in der CDD Theorie eine Erhöhung der Linienlänge, d.h. der Versetzungsdichte, durch die Expansion einer Versetzung unter Konservierung des Winkelinhalts im Mittelungsvolumen erfolgt. Das bedeutet, dass im Fall $v^{\xi} > 0$ für die *Änderung* der integrierten Versetzungsdichte und Krümmungsdichte

$$\partial_t \int_V \rho^{\xi} dV > 0 \quad \text{und} \quad \partial_t \int_V q^{\xi} dV = 0 \quad (3.1)$$

gilt, wenn $q^{\xi} > 0$, d.h. wenn die mittlere Krümmung aller im Mittelungsvolumen vorhandenen Versetzungslinien positiv ist. Dies ist durch den Quellterm $q^{\xi} v^{\xi}$ in der Evolutionsgleichung (2.25) verursacht und gilt solange Versetzungen das System nicht verlassen.

Diese Eigenschaft kann durch eine Betrachtung der Expansion einer idealen, kreisförmigen Versetzung verdeutlicht werden. Abbildung 3.1 zeigt das Ergebnis einer Simulation einer solchen idealen Konfiguration, bei der die Belastung durch eine konstante externe Schubspannung von $\tau_{\text{ext}}^{\xi} = 20 \text{ MPa}$ erfolgt (Gleichung 2.19). Zusätzlich zu τ_{ext}^{ξ} wirkt die interne Schubspannung τ_{int}^{ξ} aufgrund des durch die Versetzung induzierten Spannungsfelds. Im Sinne der Klarheit gilt in dieser Simulation $\tau_{\text{fl}}^{\xi} = 0$ (Gleichung 2.29). Die Richtung der Gleitebennormale ist [001] und die Richtung des Burgers Vektors ist [100] unter Verwendung des Koordinatensystems [XYZ]. Die Initialverteilung der

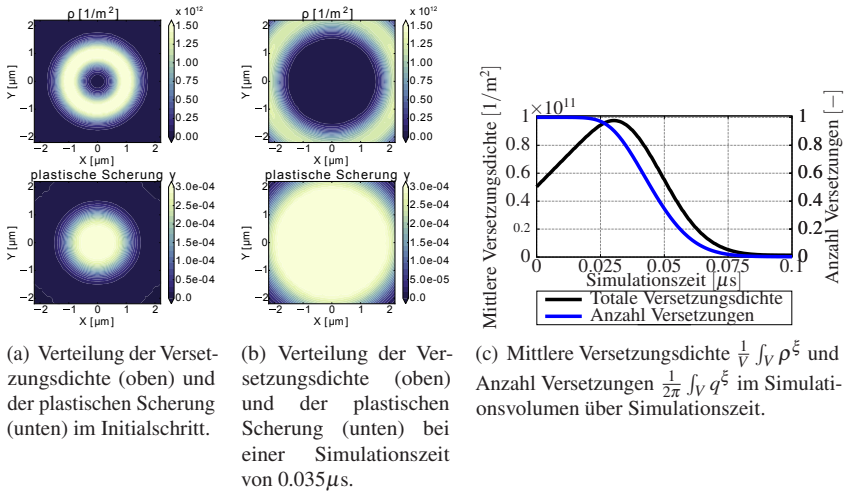


Abbildung 3.1.: Kontourplot der Versetzungsdichte und der plastischen Scherung auf dem Gleitsystem (a, b) und Evolution der mittleren Versetzungsdichte, sowie der Anzahl der Versetzungen im Simulationvolumen (c) für eine homogene Ausbreitung einer geschlossenen Versetzung.

Versetzungsdichte und der plastischen Scherung (Abbildung 3.1(a)) wird als eine geschlossene kreisförmige Versetzung mit einem Radius von $1\mu\text{m}$ durch eine bivariate Normalverteilung der Dichte senkrecht zur Linienrichtung beschrieben. Der Mittelpunkt der kreisförmigen Versetzung befindet sich in der Mitte eines Simulationvolumens mit den Abmessungen $4.4 \times 4.4 \times 4.4\mu\text{m}$, für das ein linear-elastisches Materialverhalten angenommen wird. Da in diesem Beispiel $\rho^\xi = \|\kappa^\xi\|$ gilt, beschreibt die Dichteverteilung in Abbildung 3.1(a) die in Abbildung 2.1 skizzierte Konfiguration (siehe auch Gleichung 2.22). Unter der angelegten Schubspannung expandiert die Versetzung und damit die Abgrenzung der abgescherten Fläche radial in Richtung der offenen Grenzen des Simulationvolumens und verlässt dieses ab einer Simulationszeit von etwa $0.03\mu\text{s}$, wie in Abbildung 3.1(b) dargestellt. Zusätzlich führt das interne Spannungsfeld zu einer leichten Aufweitung der Normalverteilung und damit

zu einer leichten Abflachung des Gradienten zwischen dem abgescherten und dem nicht abgescherten Bereich. Der Verlauf der mittleren Versetzungsdichte $\frac{1}{V} \int_V \rho^\xi$, d.h. der Linienlänge, und der Anzahl an Versetzungen $\frac{1}{2\pi} \int_V q^\xi$ im Simulationsvolumen V ist in Abbildung 3.1(c) dargestellt. Es ist zu sehen, dass die Linienlänge der Versetzung bis zum Verlassen des Simulationsvolumens linear ansteigt. Dies ist analytisch leicht durch den linearen Zusammenhang eines Kreisumfangs ($2\pi r$) mit dem Radius r für eine Konstante Versetzungsgeschwindigkeit nachzuvollziehen. Im Gegensatz dazu bleibt der Winkelinhalt bis zum Verlassen des Simulationsvolumens nahezu konstant.

Die in Abbildung 3.1 dargestellte Simulation verdeutlicht die planare Ausbreitung einer Versetzung im Sinne einer Vergrößerung des abgescherten Bereichs auf dem Gleitsystem unter Verlängerung der Umrandung des abgescherten Bereichs, d.h. der Linienlänge der Versetzung. In der kinematischen Formulierung wird dies durch die Kopplung von Versetzungsdichte und Krümmungsdichte über den Quellterm $v^\xi q^\xi$ in der Evolutionsgleichung der Versetzungsdichte erreicht (Gleichung 2.25). Die Versetzungsbewegung, sowie die Erhöhung der Linienlänge einer Versetzung ist somit an das Gleitsystem gebunden. Eine Generierung neuer Versetzungen auf anderen Gleitsystemen, wie es z.B. durch gleitfähige Reaktionen und Quergleiten beobachtet wird, kann durch diesen rein kinematischen Mechanismus nicht abgebildet werden.

3.2. Versetzungsinteraktion

Die wechselseitige Interaktion der Versetzungen über ihre Spannungsfelder wird über eine Eigendehnungsformulierung der plastischen Verzerrung berücksichtigt [Lemarchand et al., 2001, Sandfeld et al., 2013]. Diese Formulierung basiert auf einer Betrachtung der elastischen Spannungen, die für eine Deformation entsprechend der plastischen Dehnung notwendig wäre, die durch die kombinierte Versetzungsbewegung auf allen Gleitsystemen im Mittelungsvolumen (Gleichung 2.16) verursacht wird. Das so erhaltene Spannungsfeld ist

proportional zu dem Gradienten der plastischen Scherung und somit nur durch eine existierende GND-Dichte abzubilden, wie auch anhand Gleichung (2.22) verständlich ist.

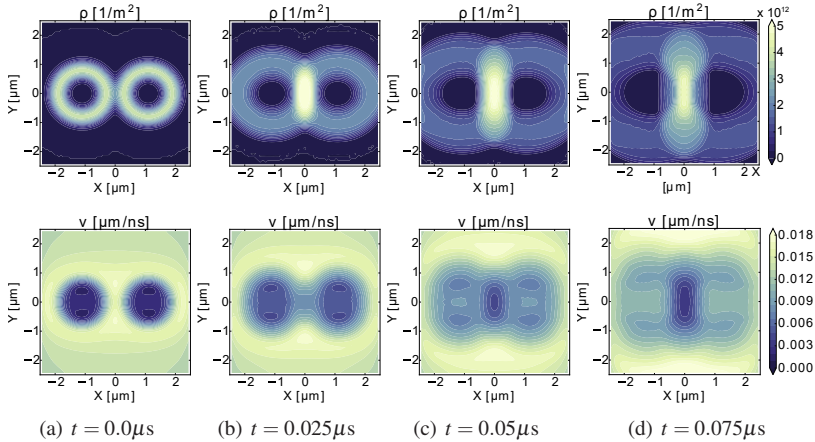


Abbildung 3.2.: Kontourplot der Interaktion zweier kreisförmiger Versetzungen in der Ebene unter einer angelegten externen Schubspannung von $\tau_{ext}^{\xi} = 5 \text{ MPa}$. Gezeigt ist die Verteilung der Versetzungsdichte (a - d, oben) und der Versetzungsgeschwindigkeit (a - d) vier verschiedenen Simulationszeiten t .

In der in Abbildung 3.1 gezeigten Simulation führt die interne Spannung im Bereich des existierenden Gradienten in der plastischen Scherung zu einer leichten Aufweitung der Normalverteilung der Versetzungsdichte. In GND-dominierten Versetzungskonfigurationen wirken somit langreichweitige Spannungsfelder, durch die Versetzungen mit sich selbst, aber auch miteinander interagieren können. Zur Verdeutlichung zeigt Abbildung 3.2 eine Simulation der Interaktion zweier Versetzungen innerhalb eines Gleitsystems unter einer angelegten externen Schubspannung von $\tau_{ext}^{\xi} = 5 \text{ MPa}$, wobei sich deren Ausbreitungswege überlappen. Die initiale Verteilung der Versetzungsdichte (Abbildung 3.2(a) oben) führt zu einer Versetzungsgeschwindigkeit, die innerhalb des abgescherten Bereichs deutlich geringer ist als außerhalb, wie in Abbildung 3.2(a) unten zu sehen

ist¹. Dies führt zu einer deutlichen Aufweitung der Versetzungsdichteverteilung (Abbildung 3.2(b)-(d) oben). Im mittleren Bereich des Simulationsvolumens stehen sich Versetzungslinien mit positivem und negativem Stufencharakter gegenüber, was zu anziehenden Spannungen führt.² Dadurch ist dort bei Simulationsbeginn eine höhere Geschwindigkeit zu beobachten, die sich im Laufe der Simulation im Bereich der Überschneidung der beiden Versetzungslinien stark verringert (Abbildung 3.2(b)-(d) unten). Dies resultiert in einer Akkumulation der Versetzungsdichte in der Mitte des Simulationsvolumens und damit in einer Behinderung der Versetzungsausbreitung (Abbildung 3.2(d) oben).

Interaktion zwischen Gleitsystemen über interne Spannungsfelder Interne Spannungsfelder von Versetzungen sind aufgrund der Projektion der Spannungen auf die verschiedenen Gleitsysteme (Gleichung 2.19) auch außerhalb des eigenen Gleitsystems sichtbar. Dies kann durch eine Betrachtung der Versetzungsinteraktion zwischen zwei schneidenden Gleitsystemen verdeutlicht werden. Hierzu werden zwei verschiedene Gleitsystemkonfigurationen untersucht, die sich durch die gegenseitige Ausrichtung ihrer Burgers Vektoren unterscheiden: (I.) Eine Konfiguration, die Lomer Reaktionen ermöglicht mit den Gleitsystemen $(111)\langle\bar{1}01\rangle$, $(\bar{1}\bar{1}1)\langle 011\rangle$ (Abbildung 3.3(a)) und (II.) eine Konfiguration, die kollineare Reaktionen ermöglicht mit den Gleitsystemen $(111)\langle 0\bar{1}1\rangle$, $(\bar{1}11)\langle 0\bar{1}1\rangle$ (Abbildung 3.3(b)).

Auf beiden Gleitsystemen wird die Verteilung der Versetzungsdichte auf eine Gleitlamelle mit einer Dicke von $2\mu\text{m}$ normal zur Gleitebene beschränkt. Die Versetzungsdichte ist innerhalb dieser Gleitlamellen homogen als Versetzungen mit Radius von $2\mu\text{m}$ verteilt. Die entsprechende Versetzungsdichte

¹ Zur besseren Verdeutlichung der Versetzungsinteraktion ist die angelegte Schubspannung in diesem Fall deutlich geringer, als in Kapitel 3.1. Die gezeigte Konfiguration würde physikalisch gesehen zu einer Annihilation der sich schneidenden Versetzungslinien führen. Eine solcher Vorgang ist allerdings auch durch die Interaktion der Spannungsfelder verursacht und wird hier vorerst nicht betrachtet.

² Die beiden Versetzungen befinden sich in diesem Beispiel auf der gleichen Höhe. Die Ausprägung des Geschwindigkeitsfelds ist allerdings dreidimensional, sodass auch Versetzungen auf unterschiedlicher Höhe miteinander interagieren.

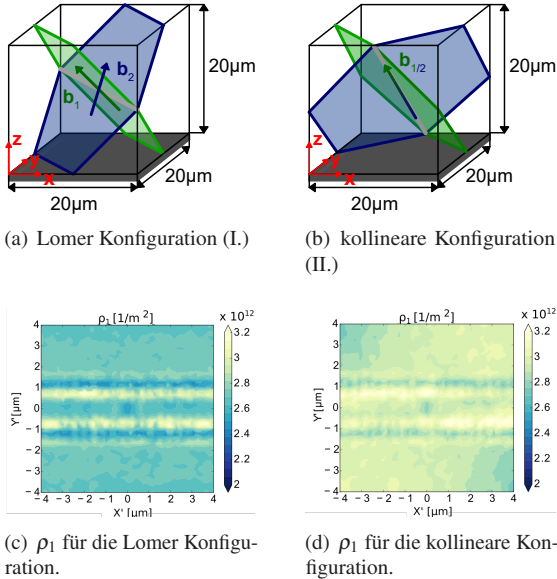


Abbildung 3.3.: Skizze der Systemkonfiguration für die Lomer (a) und die kollineare (b) Orientierung der Gleitsysteme (für die Beschreibung siehe Text). (c) und (d): Konturplot der Versetzungsdichte auf dem primären Gleitsystem ρ_1 für beide Konfigurationen mit internem Spannungsfeld in einem gleitsystem-basierten Koordinatensystem. X' zeigt entlang der gemeinsamen Schnittlinie der Gleitsysteme. Aus [Sudmanns et al., 2018].

ist $\rho_1 = \rho_2 = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$, wobei ρ_1 und ρ_2 die totale Versetzungsdichte auf dem primären und dem sekundären Gleitsystem bezeichnet. Aufgrund der Überschneidung der Gleitlamellen existiert ein Bereich entlang der Schnittlinie mit $\rho_{\text{tot}} = \rho_1 + \rho_2$. Durch die homogene Verteilung der Versetzungen gilt zu Beginn der Simulation $\rho^\xi = \rho_{\text{SSD}}^\xi$. Dies impliziert ein spannungsfreies System im Ausgangszustand, wodurch eine GND-Dichte und damit ein internes Spannungsfeld kann erst durch Versetzungsinteraktion entstehen.³ Die Belastung der beiden Gleitsysteme erfolgt durch ein homogenes externes Spannungsfeld mit $\tau_{\text{ext}}^\xi = 10$

³ Es gelten offene Grenzen für den Versetzungsfluss und $\tau_{\text{II}}^\xi = 0$.

MPa. Die Abbildungen 3.3(c) und (d) zeigen die resultierende Versetzungsdichteverteilung auf den primären Gleitsystemen ξ^1 in einem Gleitsystem-basierten Koordinatensystem mit $-4\mu\text{m} \leq X' < 4\mu\text{m}$ und $-4\mu\text{m} \leq Y' < 4\mu\text{m}$, wobei X' in Richtung der gemeinsamen Schnittlinie der Gleitlamellen zeigt. Es ist zu sehen, dass in beiden Konfigurationen ein Aufstau der Versetzungsdichte stattfindet, welcher durch eine Interaktion des sich aufbauenden internen Spannungsfelds verursacht ist. Dieses Spannungsfeld resultiert aus der Abscherung der Gleitlamellen, wodurch eine Heterogenität in der Dichteverteilung an den Übergangsbereichen der Überschneidung der beiden Gleitlamellen bei $Y' \approx \pm 1\mu\text{m}$ zu beobachten ist. Der Unterschied in der Dichteverteilung zwischen Abbildung 3.3(c) und (d) ist durch die unterschiedliche Orientierung zwischen Burgers Vektor und Schnittlinie zu erklären.

Aufgrund der Proportionalität des internen Spannungsfelds mit dem Gradienten der plastischen Scherung ist mit dieser Methode keine Berücksichtigung der Versetzungsinteraktion in SSD Konfigurationen und innerhalb eines Mittelungsvolumens möglich. Dies ist daran erkennbar, dass innerhalb des Überschneidungsbereichs der Gleitlamellen in Abbildung 3.3(c) die gleiche Versetzungsdichte vorherrscht, als außerhalb des Überschneidungsbereichs. In diesem Bereich findet also keine Interaktion zwischen ρ_1 und ρ_2 statt.

Spannungsterme zur Versetzungsinteraktion Eine Möglichkeit, um Versetzungsinteraktionen in Konfigurationen ohne vorherrschendes internes Spannungsfeld zu berücksichtigen, besteht in der Anwendung von Interaktionsspannungstermen nach „Taylor“ (Gleichung 2.2), oder „Franciosi“ (Gleichung 2.3). Die beiden Terme unterscheiden sich dadurch, dass sie entweder die Stärke aller Versetzungsinteraktionen in einen gemeinsamen Parameter α vereinen, oder alle Gleitsystemkombinationen in Form einer Matrix individuell gewichten. In beiden Fällen besteht eine Abhängigkeit der Versetzungsgeschwindigkeit von der Versetzungsdichte auf *allen* Gleitsystemen, siehe Gleichung (2.25).

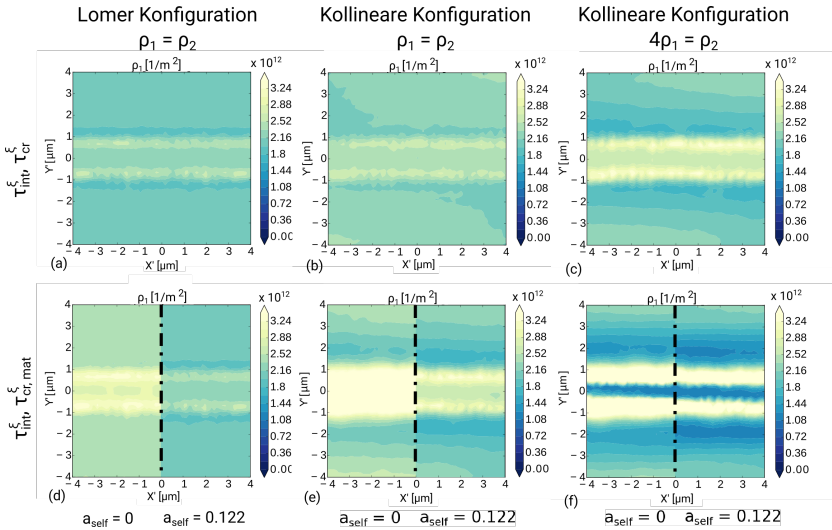


Abbildung 3.4.: Vergleich der Verteilung der Versetzungsdichte auf dem primären Gleitsystem ρ_1 mit den Konfigurationen in Abbildung 3.3(a, b) unter Anwendung der Interaktionsspannung nach „Taylor“ (a - c) und „Franciosi“ (d - f) mit $a^{\xi\xi} = 0$ (d - f, links) und $a^{\xi\xi} = 0.122$ (d - f, rechts). Gezeigt ist die Lomer und die kollineare Konfiguration mit einer Anfangsdichte von $\rho_1 = \rho_2 = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ (a, d und b, e), sowie die kollineare Konfiguration mit $4\rho_1 = \rho_2 = 4 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ (c, f). Aus [Sudmanns et al., 2018].

Eine Anwendung der Interaktionsspannungsterme in einer analog zu der Betrachtung in Abbildung 3.3 untersuchten Gleitsystemkonfiguration führt innerhalb des Überschneidungsbereichs der Lamellen aufgrund der dort höheren Gesamtdichte zu einer geringeren Versetzungsgeschwindigkeit, als außerhalb. Mit der Verwendung des Interaktionsspannungsterms nach „Taylor“ (τ_{cr}^{ξ}) ist dadurch eine deutlichere Dichteakkumulation an beiden Seiten der schneidenden Gleitlamelle erkennbar (Abbildung 3.4 (oben)). Die Dichteevolution ist allerdings qualitativ ähnlich zu Abbildung 3.3(c, d) und qualitativ unabhängig von der Gleitsystemorientierung. Erst mit einer unterschiedlichen Gewichtung einzelner Versetzungsinteraktionen durch die Interaktionsmatrix ($\tau_{cr,mat}^{\xi}$, siehe Abbildung 2.2, sowie Tabelle 2.1) ist eine Trennung der Selbstinteraktion der

Versetzungsdichte ($a^{\xi\xi}$) von der Interaktion zwischen Gleitsystemen möglich, wie in Abbildung 3.4 (unten) dargestellt ist. Der Einfluss der starken kollinearen Interaktion (a_{koll} , Tabelle 2.1) zeigt sich daran, dass diese insbesondere in der heterogenen Dichtekonfiguration ($\rho_2 = 4\rho_1$) eine Dichteentwicklung innerhalb des Überschneidungsbereichs der Lamellen nahezu unterbindet, wie anhand der geringen Versetzungsdichte bei $Y' \approx 0$ in Abbildung 3.4(f) zu sehen ist.

Die in Abbildung 3.4 gezeigte Simulation ist durch eine Interaktion diskreter Gleitlamellen und daher durch eine signifikante GND-Dichte im Interaktionsbereich geprägt. Insbesondere in Konfigurationen mit einem hohen SSD-Dichteanteil ist die Wirkung der Interaktionsspannungsterme als kurzreichweitige Spannungen aufgrund der verschwindenden langreichweitigen Spannungen besonders relevant. Eine Betrachtung solcher Konfigurationen erfolgt in Kapitel 5.1.

Die Anwendung der Interaktionsspannungen (Gleichungen 2.2 oder 2.3) als lokale Fließspannung in der CDD (Gleichung 2.29) und in anderen Kontinuumstheorien (Kapitel 2.2) bietet die Möglichkeit, kurzreichweitige Versetzungsinteraktionen zwischen Gleitsystemen in Form eines Mobilitätsgesetzes zu berücksichtigen. Aufgrund der skalaren Versetzungsdichte und Versetzungsgeschwindigkeit in der CDD führt dies allerdings dazu, dass sich entweder die totale Versetzungsdichte mit einer geringeren Geschwindigkeit bewegt, oder der Versetzungsfluss vollständig unterbunden wird, wie z.B. in Abbildung 3.4(f). In Verbindung mit gleitsystembasierten Quelltermen für die Versetzungsdichte, wie Gleichung (2.25), oder (2.14) fehlt dieser Formulierung weiterhin eine mechanismusbasierte Beschreibung von Versetzungsreaktionen. Die Formulierung eines solchen Modells ist Inhalt der nachfolgenden Kapitel.

3.3. Versetzungsreaktionen

Der in Kapitel 3.1 beschriebene Mechanismus führt zu einer gleitsystemgebundenen Versetzungsbewegung, die im allgemeinen Fall mit einer Erhöhung der

Versetzungslinienlänge verbunden ist. Durch eine Berücksichtigung interner Spannungsfelder und kurzreichweitiger Interaktionsspannungen können Versetzungsinteraktionen innerhalb und zwischen Gleitsystemen berücksichtigt werden (Kapitel 3.2). Obwohl Versetzungswechselwirkungen somit gleitsystemübergreifend wirken, erlaubt die Formulierung über Mobilitätsgesetze nur eine Beeinflussung der planaren Versetzungsbewegung über eine Modifikation des Versetzungsflusses (Gleichung 2.29). Dies gilt nicht nur für die CDD, sondern auch für andere Kontinuumstheorien, z.B. [Arsenlis und Parks, 2002, Li et al., 2014], sofern diese auf einer ähnlichen gleitsystembasierten Beschreibung von Mobilitätsgesetzen beruhen.

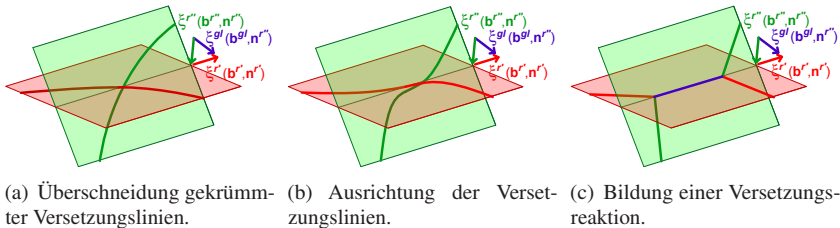


Abbildung 3.5.: Skizze der Bildung einer Versetzungsreaktion zwischen zwei schneidenden Versetzungslinien auf den Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ mit Burgers Vektor b^ξ und der Gleitebenennormale n^ξ (a). Die Spannungsfelder führen zu einer Ausrichtung der Versetzungslinien entlang der gemeinsamen Schnittlinie der Gleitebenen (b) und zu der Bildung einer Versetzungsreaktion (c). Im Falle der gleitfähigen Reaktion liegt die erzeugte Versetzungslinie auf dem Gleitsystem ξ^{sl} in einer der ursprünglichen Ebenen (in diesem Beispiel $n^{r''}$). Aus [Sudmanns et al., 2019].

Im Gegensatz zu der gleitsystembasierten Beschreibung besteht ein wesentlicher Bestandteil der in der Mehrfachgleitphase (Stufe II) beobachteten Versetzungsmechanismen in der Bildung von Versetzungsreaktionen und deren Einfluss auf die Verfestigung, siehe Kapitel 2.1. In Abbildung 3.5 ist beispielhaft der Ablauf einer Versetzungsreaktion skizziert, wie er in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen beobachtet wird [Stricker und Weygand, 2015, Weygand und Gumbsch, 2005, Zbib et al., 2000]. Die Reaktionspartner bestehen aus zwei Versetzungslinien mit überschneidenden Ausbreitungswegen

auf den Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ (Abbildung 3.5(a)), die sich aufgrund der elastischen Wechselwirkung entlang der gemeinsamen Schnittlinie der Gleitebenen ausrichten (Abbildung 3.5(b)) und schließlich miteinander reagieren und ein Reaktionsprodukt bilden (ξ^{gl} , Abbildung 3.5(c)). Dabei ist die im allgemeinen vorhandene Krümmung der Versetzungslinien in den Endpunkten der gebildeten Reaktion konzentriert und unterbindet eine weitere Ausbreitung der konstituierenden Versetzungen [Stricker et al., 2018], vgl. die Abbildungen 3.5(a) und (c). Der Reaktionsmechanismus führt im Falle der gleitfähigen Reaktion zu einer beweglichen Versetzung auf einem dritten Gleitsystem ξ^{gl} , im Falle der Lomer und Hirth Reaktion zu einer unbeweglichen Versetzung, die sich die beiden reagierenden Gleitsysteme $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ teilen und im Falle der kollinearen Reaktion zu einer Annihilation der reagierenden Versetzungslinien. Im Folgenden werden für den Allgemeinfall die Gleichungen hergeleitet, die zu einer homogenisierten Beschreibung von Versetzungsreaktionen in einer gleitsystembasierten Theorie führen.

Der wesentliche Aspekt der Homogenisierung ist die Formulierung einer Kollisionsfrequenz ν^ξ zwischen Versetzungen auf einem primären Gleitsystem ξ und einem schneidenden Gleitsystem ζ . Basierend auf der Argumentation in [Ma und Roters, 2004] wurden in [Roters et al., 2019, Stricker und Weygand, 2015] Kopplungsterme für die Versetzungsdichte auf verschiedenen Gleitsystemen vorgeschlagen, die in dieser Arbeit berücksichtigt werden. Für die Kollisionsfrequenz gilt daher:

$$\nu^\xi = \frac{|v^\xi|}{L^\xi} \quad \text{mit} \quad \xi, \zeta = r', r'' \quad \text{und} \quad \xi \neq \zeta \quad (3.2)$$

unter der Annahme des mittleren Versetzungsabstands auf dem schneidenden Gleitsystem

$$L^\zeta \propto \frac{1}{\sqrt{\rho^\zeta}}. \quad (3.3)$$

Da jede Versetzungslinie sowohl als primäre, als auch als schneidende Versetzung wirken kann, gilt für die Produktionsrate von Versetzungsreaktionen

$$\partial_t \rho_{\text{reakt}} \propto \rho^\xi \nu^\xi + \rho^\zeta \nu^\zeta \quad \text{mit} \quad \xi, \zeta = r', r'' \quad \text{und} \quad \xi \neq \zeta \quad (3.4)$$

und mit Gleichung (3.3)

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{\text{reakt}} = C_{\text{reakt}} \left(\rho^\xi |v^\xi| \sqrt{\rho^\zeta} + \rho^\zeta |v^\zeta| \sqrt{\rho^\xi} \right) \quad \text{mit} \quad \xi, \zeta = r', r'' \\ \text{und} \quad \xi \neq \zeta. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Hierbei ist der Index $(\)_{\text{reakt}}$ ein Laufindex für verschiedene Reaktionsmechanismen, d.h. $(\)_{\text{reakt}} = (\)_{\text{gleit}}, (\)_{\text{lomer}}, (\)_{\text{koll}}$. Die Konstante C_{reakt} beschreibt die effektive Länge der Versetzungsreaktion und enthält den Betrag des Burgers Vektors. Die Größenordnung von C_{reakt} wurde für gleitfähige Reaktionen (d.h. $C_{\text{reakt}} = C_{\text{gleit}}$) durch diskrete Versetzungsdynamiksimulationen bestimmt [Roters et al., 2019, Stricker und Weygand, 2015]. Der Term ρ_{reakt} beschreibt in allgemeiner Form die Dichte der entstehenden Versetzungsreaktionen. Die Dichte ρ_{reakt} ist im Allgemeinen nicht an ein Gleitsystem gebunden und enthält daher kein Gleitsystemindex. Die gleitfähige Reaktion führt zu einer Entstehung von Versetzungsdichte auf dem Gleitsystem ξ^{gl} , d.h. $\partial_t \rho_{\text{reakt}} = \partial_t \rho_{\text{reakt}}^{gl}$, während die Lomer Reaktion zu einer unbeweglichen Versetzung führt und die kollineare Reaktion eine Annihilation der Versetzungslinien zur Folge hat. Zudem ist zu beachten, dass der Versetzungsfluss beider reagierender Gleitsysteme berücksichtigt wird. Da nur auf einem Gleitsystem ein Versetzungsfluss vorhanden sein muss, aber beide Gleitsysteme an der Reaktion beteiligt sind, beschreibt die Gleichung (3.5) eine Kopplung der Versetzungsmobilität zweier Gleitsysteme. Dies steht im Gegensatz zu Formulierungen, die Versetzungsreaktionen durch einen Ansatz ähnlich zu Gleichung (2.14) berücksichtigen, wie z.B. [Li et al., 2014, Ma und Roters, 2004, Monavari und Zaiser, 2018]. Diese Formulierungen beschreiben die Erhöhung der Versetzungsdichte proportional zur plastischen

Scherung des selben Gleitsystems, wodurch schneidende Gleitsysteme nur durch eine Annahme des mittleren Versetzungsabstands berücksichtigt werden.

Die Versetzungsreaktion, wie sie durch Gleichung (3.5) beschrieben ist, geschieht auf Kosten von *physikalischer* Versetzungslinienlänge auf den reagierenden Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$. Das in der diskreten Versetzungsdynamik hierfür verwendete Konzept der Umwandlung in eine *virtuelle* Versetzungslinie [Stricker et al., 2018] existiert in der CDD nicht. Daher wird in der homogenisierten Beschreibung eine Annihilationsrate der Versetzungsdichte auf den reagierenden Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ eingeführt:

$$\partial_t \rho_{\text{reakt}}^{\xi} = -\partial_t \rho_{\text{reakt}} \quad \text{mit} \quad \xi = r', r'' \quad (3.6)$$

Im Sinne der Definition (Kapitel 2.1) impliziert ein solcher Prozess, dass trotz der Reduktion von Linienlänge die konstituierenden Versetzungen auf den Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ in ihrer Gesamtheit als Begrenzung der abgescherten Fläche weiterhin existieren.

Eine einfache Simulation am Beispiel der gleitfähigen Reaktion, mit der die Wirkung der Reaktionsgleichungen (3.5) und (3.6) verdeutlicht werden kann, ist in Abbildung 3.6 zu sehen. Zum besseren Verständnis ist in diesem Beispiel die komplette Versetzungsdichte im Mittelungsvolumen des jeweiligen Gleitsystems an der Reaktion beteiligt, d.h. es gilt $\rho_{\text{reakt}}^{\xi} = \rho^{\xi}$. Im Ausgangszustand (Abbildung 3.6(a)) liegen zwei gerade, in Form einer bivariaten Normalverteilung der Versetzungsdichte beschriebenen Stufenversetzungen auf zwei verschiedenen Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$. Diese bewegen sich unter einer angelegten externen Schubspannung von $\tau_{\text{ext}}^{\xi} = 15 \text{ MPa}$ in Richtung der Systemmitte und reagieren unter Bildung neuer Versetzungsdichte auf dem Gleitsystem ξ^{gl} , auf dem vereinfachend $v^{\xi} = 0$ angenommen wird (Abbildung 3.6(b - d)). Der Verlauf der gemittelten Versetzungsdichten auf den drei Gleitsystemen in Abbildung 3.6(e) zeigt eine Erhöhung der Versetzungsdichte auf dem Gleitsystem ξ^{gl} proportional zur Abnahme der Dichte auf den Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$, wie es durch die Gleichungen (3.5) und (3.6) zu erwarten ist.

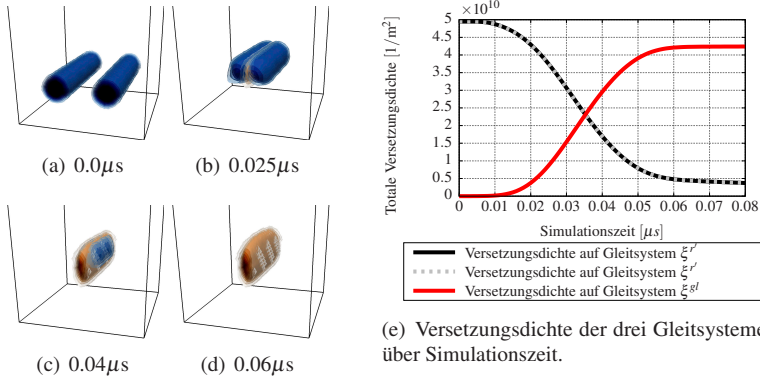


Abbildung 3.6.: Reaktion zwischen zwei geraden Versetzungslinien auf zwei verschiedenen Gleitsystemen unter Generierung einer Versetzung auf einem dritten Gleitsystem, auf dem vereinfachend $v^{\xi} = 0$ angenommen wird. (a - d) zeigt die Versetzungsdichte auf den reagierenden Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ (in blau) und die entstehende Versetzungsdichte auf dem Gleitsystem ξ^{gl} (in orange) zu verschiedenen Zeitpunkten. (e) zeigt die mittlere totale Versetzungsdichte aller drei Gleitsysteme über der Simulationszeit.

Die in Abbildung 3.6 gezeigte Simulation ist ein Beispiel, das speziell darauf zugeschnitten ist, die Reaktionsbildung als Kopplungsmechanismus zwischen Gleitsystemen in einer gleitsystembasierten Dichteformulierung zu verdeutlichen. Das Ziel einer kontinuierlichen Theorie ist allerdings nicht eine Auflösung des diskreten Vorgangs, sondern eine homogenisierte Beschreibung der Auswirkungen der Reaktionsbildung auf die Mobilität der Versetzungen. Im allgemeinen Fall und in allen anderen in dieser Arbeit gezeigten Rechnungen wird deshalb angenommen, dass nur eine statistische Anzahl an Versetzungen im Mittelungsvolumen an der Reaktion beteiligt ist, d.h. in der Regel ist $\rho_{\text{reakt}}^{\xi} \neq \rho^{\xi}$.

Die Evolutionsgleichungen der Versetzungsreaktionen (Gleichungen 3.5 und 3.6) dienen als Kopplungsterme zwischen Versetzungsdichten auf verschiedenen Gleitsystemen und bilden das Grundgerüst für eine mechanismusbasierte

Beschreibung der Versetzungsplastizität in der Mehrfachgleitphase der Einkristallverformung. Damit können neben der Versetzungswechselwirkung über Spannungsterme (Kapitel 3.2) auch Mechanismen berücksichtigt werden, die mit einer auf das Gleitsystem beschränkten Beschreibung, wie sie z.B. durch die Gleichungen (2.25) oder (2.10) bedingt sind, nicht abgebildet werden. Diese Mechanismen beinhalten die *Generierung* einer neuen Versetzung auf einem dritten Gleitsystem durch eine gleitfähige Reaktion, die temporäre *Immobilisierung* zweier Versetzungen durch eine Lomer Reaktion, oder die *Annihilation* zweier Versetzungslinien durch die kollineare Reaktion. Eine detaillierte Herleitung der Evolutionsgleichungen für diese Reaktionen als Spezialfälle der Gleichungen (3.5) und (3.6) basierend auf Beobachtungen in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen erfolgt im folgenden Kapitel 4.

4. Versetzungsnetzwerke im Kontinuum

Der Kopplungsmechanismus zwischen Gleitsystemen in Kapitel 3.3 zeigt eine homogenisierte Formulierung von Versetzungsreaktionen, die deren gleitsystemübergreifende Auswirkungen berücksichtigt. Versetzungen auf anderen Gleitsystemen werden damit nicht nur als Hindernis für die Versetzungsausbreitung betrachtet, sondern dienen als potentielle Reaktionspartner. In diesem Kapitel wird darauf aufbauend ein Modell der Versetzungsmultiplikation, sowie der Mobilität in Versetzungsnetzwerken formuliert. Als Grundlage dafür werden zu Beginn die charakteristischen Eigenschaften von Versetzungsnetzwerken beschrieben, deren Berücksichtigung für die Homogenisierung in einer kontinuierlichen Beschreibung notwendig sind.

4.1. Charakterisierung von Versetzungsnetzwerken

Die Bildung von Versetzungsnetzwerken wurde bereits in den 60er Jahren als die wichtigste Ursache der Verfestigung in der Mehrfachgleitphase (Stufe II) der Einkristallverformung identifiziert und beschrieben [Basinski und Basinski, 1979, Livingston, 1962, Pande und Hazzledine, 1971b, Steeds, 1966]. Ein zentrales Charakteristikum ist dabei die Interaktion und Reaktion von Versetzungen über mehrere Gleitsysteme hinweg. Daraus bildet sich ein relativ gleichförmiges und stabiles Netzwerk aus Versetzungen, das durch die Verknüpfung

verschiedener Versetzungsreaktionen und Quergleitvorgänge gekennzeichnet ist [Basinski und Basinski, 1979, Pande und Hazzledine, 1971b].

Ein Vorteil der diskreten Versetzungsdynamik ist, wie in Kapitel 2.2 beschrieben, die Möglichkeit, Versetzungsreaktionen in diskreter Form abzubilden und nachzuverfolgen. Dies ermöglicht die Untersuchung der kollektiven Eigenschaften von Versetzungsreaktionen in Versetzungsnetzwerken [Alankar et al., 2012b, Madec und Kubin, 2017, Madec et al., 2002, Stricker und Weygand, 2015, Stricker et al., 2018]. Insbesondere neueste Untersuchungen erlauben ein tieferes Verständnis der Mobilität von Versetzungsnetzwerken durch eine Herausarbeitung deren zentraler Charakteristiken. Die in [Stricker et al., 2018] durchgeführten Untersuchungen lassen die Ausbildung eines sich kontinuierlich verdichtenden, relativ homogenen und stabilen Netzwerks erkennen. Zudem wurde beobachtet, dass Kaskaden aus Multiplikationsmechanismen weitere Versetzungsreaktionen hervorrufen, die trotz ihres lokalen Charakters das komplette Simulationsvolumen erfassen können. Die Modellbeschreibung in diesem Kapitel basiert weitestgehend auf den Untersuchungen in [Stricker et al., 2018], weshalb zum besseren Verständnis der nachfolgenden Modellierung die wichtigsten Ergebnisse kurz zusammengefasst werden:

- I. Neue Versetzungen werden durch Quergleiten und gleitfähige Reaktionen produziert. Beide Mechanismen führen zu einer Generierung neuer Versetzungen auf anderen Gleitsystemen durch ein Zusammenspiel verschiedener Gleitsysteme. Die Erhöhung der Anzahl der Versetzungen (vgl. Kapitel 2.1) korreliert dabei mit der Erhöhung der Versetzungsdichte.
- II. Eine generierte Versetzung zeigt eine begrenzte Ausbreitung, bevor der größte Teil ihrer Linienlänge annihiliert, oder an anderen Mechanismen beteiligt ist. Zur Fortführung der Plastizität ist eine kontinuierliche Multiplikation, d.h. eine Generierung neuer Versetzungen notwendig. Die Entstehung einer vollständig geschlossenen Versetzung, wie es durch den Frank-Read Mechanismus [Frank und Read, 1950] beschrieben ist, wird nicht beobachtet.

- III. Das entstehende Versetzungsnetzwerk ist im Wesentlichen stationär und besteht aus relativ geraden Versetzungssegmenten, die die Endpunkte verschiedener Versetzungsreaktionen verknüpfen. Die Krümmung innerhalb des Netzwerks ist dabei in diesen Endpunkten konzentriert.
- IV. Die Abstände innerhalb des Versetzungsnetzwerks korrelieren zwar im Mittel mit dem mittleren Versetzungsabstand, allerdings beträgt die Streuung mehrere Größenordnungen. Dadurch sind Multiplikationsvorgänge, wie auch die Ausbreitungswege einzelner Versetzungen sehr heterogen.

Die bestehenden gleitsystembasierten Ansätze, wie sie in den Kapiteln 2 und 3 vorgestellt wurden, stehen in Kontrast zu den genannten Beobachtungen. Insbesondere die gleitsystembasierte Anwendung eines auf der Theorie von Kocks und Mecking [Kocks und Mecking, 2003] aufbauenden Multiplikationsmodells widerspricht der Beobachtung (I.), da ein solches Modell auf einer Selbstreplikation der Versetzungsdichte beruht (Gleichung 2.14). Auch die im Allgemeinen unbegrenzte Ausbreitung einer gekrümmten Versetzung in der CDD, wie in Kapitel 3.1 beschreiben, steht im Kontrast zu der Beobachtung (II.) und (III.). Eine Anwendung von Interaktionsspannungstermen nach Gleichung (2.29) führt entweder nur zu einer Verlangsamung, oder zu einer vollständigen Unterbindung der Versetzungsbewegung und kann daher die Beobachtung (II.), (III.) und (IV.) nicht abbilden.

Um die genannten Beobachtungen zu berücksichtigen, muss ein versetzungsbasiertes Modell im Wesentlichen zwei konkurrierende Mechanismen berücksichtigen: (a.) die Generierung neuer Versetzungen, die eine weitere plastische Verformung erlauben und (b.) die Limitierung der Ausbreitung einer einzelnen Versetzung und damit die Begrenzung der Plastizität, die durch eine einzelne Versetzung erzeugt wird. Im Folgenden wird ein Modell präsentiert, das diese Mechanismen basierend auf den Beobachtungen in [Stricker et al., 2018] als Spezialfall des allgemeinen Reaktionsmechanismus in Kapitel 3.3, sowie durch Quergleiten berücksichtigt. Die Aufteilung der berücksichtigten Mechanismen ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

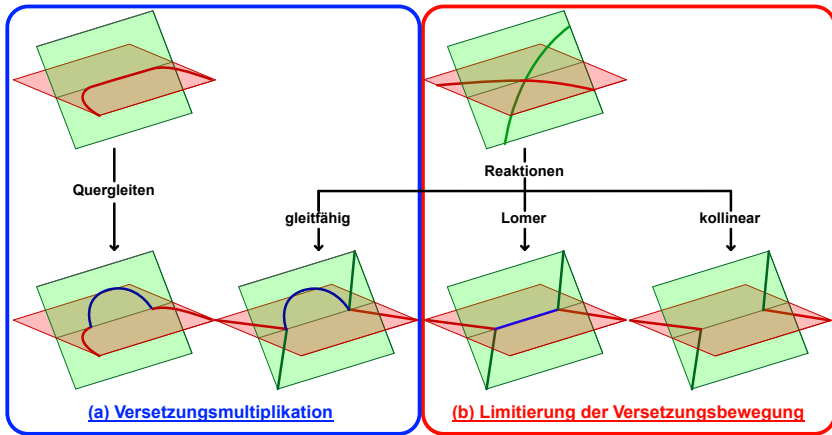


Abbildung 4.1.: Skizze der berücksichtigten Versetzungsmechanismen mit den Teilaspekten Versetzungsmultiplikation (a) und Limitierung der Versetzungsbewegung (b).

Die beiden konkurrierenden Mechanismen (a und b) werden als Teilaspekte des Modells betrachtet: (a) Eine Formulierung für die Versetzungsmultiplikation durch Quergleiten und gleitfähige Reaktionen; (b) Eine Formulierung der Netzwerkmobilität unter Berücksichtigung von Lomer und kollinearen Reaktionen, die die Verfestigung des Versetzungsnetzwerks durch eine Streuung der Ausbreitungswege der Versetzungen beschreibt. Hirth Reaktionen werden hier nicht explizit berücksichtigt, da sie in den zugrundeliegenden Versetzungsdynamiksimulationen nur sehr vereinzelt beobachtet wurden [Stricker et al., 2018]. Im Allgemeinen kann eine homogenisierte Beschreibung von Hirth Reaktionen allerdings analog zu Lomer Reaktionen erfolgen.

4.2. Versetzungsmultiplikation

In der diskreten Versetzungsdynamik geschieht der Vorgang der Versetzungsmultiplikation durch die Generierung einer neuen Versetzung auf einem neuen Gleitsystem in Folge einer gleitfähigen Reaktion oder eines Quergleitvorgangs

und deren anschließendem Ausbauchen unter Spannung. Dieser Vorgang ist schematisch in Abbildung 4.1(a) dargestellt. Zur Verdeutlichung der homogenisierten Beschreibung dieses Vorgangs in der CDD ist im Folgenden der Begriff der *Versetzungsmultiplikation* für die Generierung einer neuen Versetzung im Sinne der Definition in Kapitel 2.1 reserviert. Zusätzlich zur Erhöhung der Linienlänge benötigt dieser Mechanismus demnach eine Erhöhung des Winkelinhalts, d.h. der Krümmungsdichte q^{ξ} und ergänzt daher die in Kapitel 3.1 betrachtete Expansion einer existierenden Versetzung. Die Modellbeschreibung der folgenden zwei Kapitel folgt dabei weitestgehend [Sudmanns et al., 2019].

4.2.1. Multiplikation aufgrund von gleitfähigen Reaktionen

Die gleitfähige Reaktion ist in kfz Metallen die Reaktion mit der höchsten Anzahl an möglichen Gleitsystemkombinationen, wie aus der Interaktionsmatrix in Abbildung 2.2 deutlich wird. Als ein Spezialfall des in Kapitel 3.3 hergeleiteten allgemeinen Zusammenhangs unterscheidet sich die gleitfähige Reaktion von anderen Reaktionen dadurch, dass auf einem dritten Gleitsystem ξ^{gl} eine bewegliche Versetzung erzeugt wird, beschrieben durch Gleichung (3.5). Um dies zu verdeutlichen, wird für diesen Fall der in Kapitel 3.3 verallgemeinerte Index $(\)_{\text{reakt}}$ durch $(\)_{\text{gleit}}^{gl}$ ersetzt, d.h. $\partial_t \rho_{\text{reakt}} = \partial_t \rho_{\text{gleit}}^{gl}$.

In der diskreten Versetzungsdynamik kann die erzeugte Versetzungslinie auf dem Gleitsystem ξ^{gl} nach einer Reaktion zwischen Versetzungslinien auf den Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ unter einer anliegenden Schubspannung ausbauchen und somit expandieren [Stricker et al., 2018]. Ohne ausreichende Spannung verbleibt die generierte Versetzung in der Regel als gerade Linie an ihrem Entstehungsort. Das Ausbauchen impliziert die Erzeugung von Krümmung und Linienlänge im Anschluss an die Reaktion. Die meisten der erzeugten Versetzungen zeigen eine Bewegung der gemeinsamen Endknoten der Reaktion entlang der Schnittlinie der beteiligten Gleitebenen, was die für die Bewegung der

Versetzungslinie erforderliche Spannung stark reduziert [Stricker et al., 2018]. Da in der CDD keine Formulierung einer *kinematischen* Kopplung der Versetzungsbewegung auf verschiedenen Gleitsystemen existiert, ist eine adäquate Beschreibung des *Prozesses* des Ausbauchens nicht möglich. Zur Vereinfachung wird im Kontinuum deshalb eine Versetzung mit der entsprechenden Krümmung und Linienlänge nach dem Ausbauchen generiert. Hierfür wird in Übereinstimmung mit [Stricker et al., 2018] angenommen, dass der mittlere Abstand zwischen den Endpunkten der Reaktion, d.h. die Länge des Ausbauchens l , mit dem mittleren Versetzungsabstand skaliert,

$$l = \frac{1}{\sqrt{\rho}}. \quad (4.1)$$

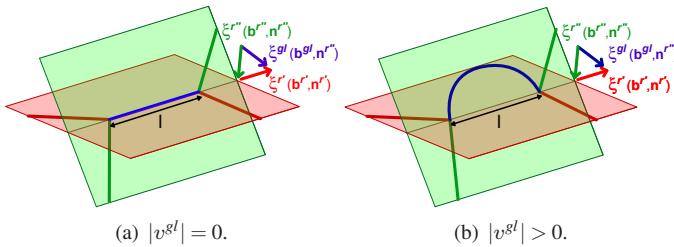


Abbildung 4.2.: Konfiguration der neu generierten Versetzungen auf dem Gleitsystem ξ^{gl} für $|v^{gl}| = 0$ (a) und $|v^{gl}| > 0$ (b). Zur Beschreibung der Gleitsysteme, siehe Abbildung 3.5. Aus [Sudmanns et al., 2019].

Die möglichen Versetzungskonfigurationen, die im Kontinuum durch eine gleitfähige Reaktion auf dem Gleitsystem ξ^{gl} unter Einbeziehung der Länge des Ausbauchens generiert werden sind in Abbildung 4.2 dargestellt. Im Falle einer verschwindenden Versetzungsgeschwindigkeit auf Gleitsystem ξ^{gl} wird Versetzungsdichte, d.h. Linienlänge, aber keine Krümmungsdichte erzeugt (Abbildung 4.2(a)). Bei einer Geschwindigkeit ungleich null, was im Allgemeinen unter Belastung der Fall ist, wird angenommen, dass die gleitfähige Reaktion eine neue Versetzung mit der durch das Ausbauchen gegebenen Linienlänge und

Krümmung erzeugt (Abbildung 4.2(b)). Mit dieser Unterscheidung wird der Beitrag des Ausbauchens zur auf dem Gleitsystem ξ^{gl} generierten Versetzungsdichte und Krümmungsdichte mit $\bar{\rho}_{\text{gleit}}^{\xi}$ bzw. $\bar{q}_{\text{gleit}}^{\xi}$ bezeichnet. Im Fall $v^{\xi} = 0$ gilt daher $\partial_t \bar{\rho}_{\text{gleit}}^{\xi} = \partial_t \rho_{\text{gleit}}^{\xi}$ und $\partial_t \bar{q}_{\text{gleit}}^{\xi} = 0$. Jeder andere Fall, d.h. $v^{\xi} \neq 0$, resultiert in einer Generierung von Versetzungsdichte und Krümmungsdichte proportional zu dem mittleren Versetzungsabstand (Gleichung 4.1). Da die Versetzung nur in eine Richtung ausbauchen kann, wird die Linienlänge eines Halbkreises mit dem Umfang $\frac{\pi}{2}l$ als oberes Limit der Produktion von Versetzungsdichte angenommen. In [Stricker et al., 2018] wird beobachtet, dass die meisten generierten Versetzungen durch das Netzwerk immobilisiert werden, oder aufgrund der gekoppelten Bewegung der Endknoten der Reaktion keinen vollständigen Halbkreis ausbilden. In dieser Arbeit werden deshalb die Effekte des Versetzungsnetzwerks, die zur Limitierung des Ausbauchens führen über einen Parameter C_{netz} berücksichtigt.¹ Mit Gleichung (3.5) und den genannten Annahmen ergibt sich die Rate der Generierung von Versetzungsdichte unter Berücksichtigung des Ausbauchens zu

$$\partial_t \bar{\rho}_{\text{gleit}}^{gl} = \begin{cases} C_{\text{netz}} \frac{\pi}{2} \partial_t \rho_{\text{gleit}}^{gl} & \text{wenn } |v^{gl}| > 0 \\ \partial_t \rho_{\text{gleit}}^{gl} & \text{wenn } |v^{gl}| = 0. \end{cases} \quad (4.2)$$

Der mittlere Radius der generierten Versetzung kann mit Gleichung (2.27) durch den Zusammenhang $l/2 = \partial_t \bar{\rho}_{\text{gleit}}^{gl} / \partial_t \bar{q}_{\text{gleit}}^{gl}$ beschrieben werden. Damit ergibt sich die Rate der Krümmungsdichteproduktion zu

$$\partial_t \bar{q}_{\text{gleit}}^{gl} = \text{sign}(v^{gl}) C_{\text{netz}} \pi \partial_t \rho_{\text{gleit}}^{gl} \sqrt{\bar{\rho}}. \quad (4.3)$$

Da bei $v^{gl} < 0$ eine Versetzungsexpansion durch negative Krümmungsdichte verursacht wird (siehe Gleichung 2.25) gilt in diesem Fall $\partial_t \bar{q}_{\text{gleit}}^{gl} < 0$. Im

¹ Analog zur Argumentation für Gleichung (4.1) gilt, dass die kinematische Formulierung der CDD keine über Gleitsysteme gekoppelte Bewegung einzelner Versetzungssegmente berücksichtigt.

Folgendes wird $C_{\text{netz}} = 1$ angenommen, was bedeutet, dass sich die ausbauchende Versetzung unter einer wirkenden Schubspannung zur Hälfte des mittleren Versetzungsabstands ausdehnt.²

Der Prozess einer gleitfähigen Versetzungsreaktion führt damit in der homogenisierten Formulierung zu einer Produktion von Versetzungslinienlänge auf dem Gleitsystem ξ^{gl} *unabhängig* von der Expansion einer existierenden Versetzung, wie es in Kapitel 3.1 beschrieben ist. Durch die Generierung von Versetzungsdichte *und* Krümmungsdichte führt das Multiplikationsmodell nicht nur zu einer Erhöhung der Linienlänge auf dem Gleitsystem ξ^{gl} , sondern generiert auch neue Versetzungen im Sinne der Definition in Kapitel 2.1. Diese neuen Versetzungen bewegen sich entsprechend der kinematischen Formulierung der CDD und generieren Linienlänge aufgrund ihrer Expansion, wie in Kapitel 3.1 beschrieben.

Die Versetzungsmultiplikation durch gleitfähige Reaktionen geschieht in der diskreten Versetzungsdynamik auf Kosten von *physikalischer* Linienlänge auf den reagierenden Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$, wie in Kapitel 2.1 und 3.3 beschrieben. Dies wird hier durch eine Annihilationsrate auf den reagierenden Gleitsystemen berücksichtigt, siehe Gleichung (3.6) für $(\)_{\text{reakt}} = (\)_{\text{gleit}}$. Da in der CDD Theorie die Versetzungsdichte in einem Mittelungsvolumen einen durch die Krümmungsdichte q^{ξ} gegebenen Winkelinhalt enthält (siehe Gleichung 2.25), führt eine Abnahme der Versetzungsdichte auch zu einer proportionalen Abnahme der Krümmungsdichte. Zusätzlich dazu führt, wie in Kapitel 4.1 dargelegt, eine Versetzungsreaktion zu einer Konzentration der Krümmung der Versetzungslinie in den Endpunkten der Reaktion, wodurch eine weitere Expansion der Versetzung in der Regel unterbunden wird [Stricker et al., 2018]. Das Versetzungsnetzwerk besteht dadurch weitestgehend aus geraden Versetzungslinien. In der CDD führt eine existierende Krümmungsdichte allerdings immer zu einer Produktion von Linienlänge, wenn $|v|^{\xi} > 0$, siehe Gleichung (3.1). Aus diesem Grund kann der immobilisierende Effekt einer Versetzungsreaktion

² Eine Berücksichtigung der gekoppelten Bewegung der Endknoten ergäbe $C_{\text{netz}} < 1$.

auf die konstituierenden Versetzungen auf den Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ nur abgebildet werden, indem die Annahme getroffen wird, dass die Krümmungsdichte nicht weiter zu dem Quellterm $v^\xi q^\xi$ in der Evolutionsgleichung (2.25) beiträgt. Dies kann als Reduktion des „Potentials“ für die Produktion von Linielänge durch Versetzungsexpansion interpretiert werden und ist ein weiterer Beitrag zur Reduktion von Krümmungsdichte auf den reagierenden Gleitsystemen. Im Allgemeinen hängt die Ausprägung dieses Beitrags von der Art des Multiplikationsmechanismus (Quergleiten, oder gleitfähige Reaktionen) und der Versetzungskonfiguration ab. Dies wird durch einen Skalierungsfaktor C_k berücksichtigt. Die Formulierung der Reduktion von Krümmungsdichte beträgt unter der Annahme einer Proportionalität zur Reduktion der Versetzungsdichte (Gleichung 3.6)

$$\partial_t q_{\text{gleit}}^\xi = -C_k \frac{\partial_t \rho_{\text{gleit}}^{gl}}{\rho^\xi} q^\xi \quad \text{mit} \quad \xi = r', r'', \quad (4.4)$$

wobei die Versetzungsdichte und Krümmungsdichte im Mittelungsvolumen zum Zeitpunkt der Reaktion durch ρ^ξ , bzw. q^ξ gegeben sind. Die Gleichung (4.4) enthält damit zwei Beiträge: (1.) Einen Beitrag durch die Reduktion der Linielänge (die blaue Linie in Abbildung 3.5(c)) und (2.) einen Beitrag durch die Reduktion des „Potentials“ zur Versetzungsexpansion (gerade Linien in Abbildung 3.5(c)). Sofern nicht anders gekennzeichnet, wird im Folgenden angenommen, dass sich beide Beiträge linear addieren und gleichwertig proportional zur Reduktion der Linielänge sind, d.h. $C_k = 2$.

4.2.2. Multiplikation aufgrund von Quergleiten

Zusätzlich zur gleitfähigen Reaktion wird Quergleiten als ein weiterer Multiplikationsmechanismus berücksichtigt. Dieser impliziert die Generierung einer Versetzung auf dem Quergleitsystem ξ^{cs} basierend auf dem Vergleich der Schubspannung zwischen dem primären Gleitsystem ξ^P und dem Quergleitsystem

ξ^{cs} . Auf Basis der kinematischen Formulierung von [Arsenlis und Parks, 2002] existieren bereits Modelle, die Quergleiten in Form einer Evolution des Anteils der Schraubenversetzungen berücksichtigen, z.B. [Alankar et al., 2012a, Leung et al., 2015]. Das im Folgenden präsentierte Modell orientiert sich allerdings an dem in der diskreten Versetzungsdynamik verwendeten Modell, das in Kapitel 2.2 vorgestellt wurde.

Die Kontinuumsformulierung kann im Gegensatz zu der diskreten Versetzungsdynamik kurzreichweitige Spannungsinteraktionen nicht direkt auflösen. Deshalb wird hier die Annahme getroffen, dass für das Stattfinden von Quergleiten der Betrag der aufgelösten Schubspannung $|\tau_{\text{eff}}^{\xi}|$ (siehe Gleichung 2.29) auf dem Quergleitsystem ξ^{cs} gleich, oder größer als die Schubspannung auf dem primären Gleitsystem ξ^P sein muss, d.h. $|\tau_{\text{eff}}^{cs}| \geq |\tau_{\text{eff}}^P|$. Zudem wenden wir die Bedingung an, dass Quergleiten nur stattfinden kann, wenn die Schubspannung auf beiden beteiligten Gleitsystemen $\neq 0$ ist ($\tau_{\text{eff}}^P, \tau_{\text{eff}}^{cs} \neq 0$) und berücksichtigen die thermisch aktivierte Quergleitwahrscheinlich $P(L^P, \tau_{\text{eff}}^{cs})$ aus Gleichung (2.5)³. Die verwendeten Parameter werden analog zu den zugrundeliegenden diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018, Weygand et al., 2002] gewählt: Die Normalisierungskonstante $\beta = 10^5$, das Aktivierungsvolumen $V_{\text{act}} = 300b^3$, die Referenzschubspannung $\tau_{\text{III}} = 5\text{MPa}$, die Temperatur $T = 293\text{K}$, sowie die Referenzwerte für die Länge $L_0 = 1\mu\text{m}$ und die Zeit $\delta t_0 = 1\text{s}$. Die beiden letztgenannten Parameter beziehen sich auf die Länge der Schraubenversetzung, bzw. die für das Quergleiten benötigte Zeit.

Analog zu [Weygand et al., 2002] wird hier angenommen, dass Versetzungslinien, die innerhalb $\Delta\varphi = \pm 10^\circ$ der idealen Schraubenorientierung liegen, potentiell quergleiten können. Dies ist in Abbildung 4.3 anhand einer vereinfachten, kreisförmigen Versetzung skizziert. Um aus dieser Annahme den entsprechenden Anteil der Versetzungsdichte zu bestimmen, sind Annahmen darüber nötig, wie die Orientierungen der Versetzungslinien in dem Mittelungsvolumen

³ τ_{eff}^{ξ} wird in Gleichung (2.5) als τ bezeichnet.

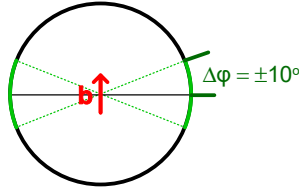


Abbildung 4.3.: Skizze des quergleitfähigen Anteils einer geschlossenen Versetzung (in grün dargestellt).

verteilt sind. Wie in Kapitel 2.3 erklärt wird, gilt in der hier verwendeten vereinfachten CDD Theorie [Hochrainer et al., 2014] eine homogene Verteilung aller Linienorientierungen für die Dichte der SSD-Versetzungen, d.h. $\rho^p - \|\kappa^p\|$, siehe Gleichung (2.24). Dadurch ist $1/9$ der SSD-Dichte quergleitfähig.⁴ Für die GND-Dichte $\|\kappa^p\|$ gilt die Annahme, dass diese quergleitfähig ist, sobald ihre Orientierung innerhalb $\Delta\varphi = \pm 10^\circ$ der positiven bzw. negativen Schraubenorientierung liegt. Der Wert von $\cos(\Delta\varphi)$ ist durch $\frac{|\tilde{\kappa}^p|}{\|\kappa^p\|}$ gegeben, wobei mit $\tilde{\kappa}^p$ die Schraubenkomponente des GND-Vektors bezeichnet wird. Die Quergleitfähigkeit der GND-Dichte wird durch die Auswertung der Heaviside-Funktion $\Theta\left(\frac{|\tilde{\kappa}^p|}{\|\kappa^p\|} - \cos\left(\frac{\pi}{18}\right)\right)$ ermittelt. Multipliziert mit $\|\kappa^p\|$, ergibt sich die Menge der quergleitfähigen GND-Dichte damit zu $\|\kappa^p\|$, wenn die GND-Orientierung innerhalb $\Delta\varphi = \pm 10^\circ$ der Schraubenorientierung liegt und 0 bei anderer Orientierung. Unter Berücksichtigung des Beitrags der SSD und der GND-Dichte ergibt sich dann die Gesamtdichte der quergleitfähigen Versetzungen auf dem Gleitsystem ξ^p zu

$$\tilde{\rho}^p = \frac{1}{9}(\rho^p - \|\kappa^p\|) + \|\kappa^p\| \Theta\left(\frac{|\tilde{\kappa}^p|}{\|\kappa^p\|} - \cos\left(\frac{\pi}{18}\right)\right). \quad (4.5)$$

⁴ 20° je positiver und negativer Schraubenorientierung.

Die gemittelte Länge aller quergleitfähigen Versetzungslinien L^p ergibt sich unter Berücksichtigung von deren mittlerem Radius r^p mit Gleichung (2.27) zu

$$L^p = \min \left\{ \frac{2 \cdot 10^\circ}{360^\circ} 2\pi r^p; L \right\}, \quad (4.6)$$

wobei die gemittelte Länge auf den mittleren Versetzungsabstand $L = 1/\sqrt{\bar{\rho}}$ begrenzt ist. Mit dem Wahrscheinlichkeitsterm (Gleichung 2.5) ergibt sich die Quergleitrate der Versetzungsdichte auf das Gleitsystem ξ^{cs} zu

$$\partial_t \rho_{\text{quer}}^{cs} = \bar{\rho}^p \frac{P(L^p, \tau_{\text{eff}}^{cs})}{\Delta t} \quad \text{bzw.} \quad \partial_t \rho_{\text{quer}}^p = -\partial_t \rho_{\text{quer}}^{cs}, \quad (4.7)$$

wobei auf Gleitsystem ξ^p eine Dichtereduktion stattfindet. Δt bezeichnet den Zeitschritt der Simulation. Für die Dichte der GND-Versetzungen wird angenommen, dass diese ihre Orientierung nach dem Quergleitvorgang beibehalten, wodurch ein ähnlicher Zusammenhang gilt, wie für die totale Versetzungsdichte:

$$\partial_t \tilde{\kappa}_{\text{quer}}^{cs} = \begin{cases} \frac{P^p(L^p, \tau_{\text{eff}}^{\xi})}{\Delta t} \|\kappa^p\| \Theta \left(\frac{|\tilde{\kappa}^p|}{\|\kappa^p\|} - \cos \left(\frac{\pi}{18} \right) \right) & \text{wenn } \tilde{\kappa}^p > 0 \\ -\frac{P^p(L^p, \tau_{\text{eff}}^{\xi})}{\Delta t} \|\kappa^p\| \Theta \left(\frac{|\tilde{\kappa}^p|}{\|\kappa^p\|} - \cos \left(\frac{\pi}{18} \right) \right) & \text{wenn } \tilde{\kappa}^p < 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

$$\partial_t \tilde{\kappa}_{\text{quer}}^p = -\partial_t \tilde{\kappa}_{\text{quer}}^{cs}.$$

Die Berücksichtigung der Krümmungsdichte erfolgt hier analog zu der gleitfähigen Reaktion (Gleichung 4.4). Auch für das Ausbauchen der generierten Versetzung wird der in Kapitel 4.2.1 hergeleitete Zusammenhang verwendet, wodurch sich die Rate der Generierung von Versetzungsdichte $\partial_t \bar{\rho}_{\text{quer}}^{cs}$, bzw. Krümmungsdichte $\partial_t \bar{q}_{\text{quer}}^{cs}$ analog zu Gleichung (4.2) und (4.3) ergibt:

$$\partial_t \bar{\rho}_{\text{quer}}^{cs} = \frac{\pi}{2} \partial_t \rho_{\text{quer}}^{cs} \quad (4.9)$$

bzw.

$$\partial_t \bar{q}_{\text{quer}}^{cs} = \text{sign}(v^{cs}) \pi \partial_t \rho_{\text{quer}}^{cs} \sqrt{\bar{\rho}}. \quad (4.10)$$

Da die in diesem Kapitel hergeleiteten Gleichungen auch für die umgekehrte Reihenfolge des primären Gleitsystems und des Quergleitsystems gilt, ist die Rate der Generierung von Versetzungsdichte in Konfigurationen mit gleicher Schubspannung und Versetzungsdichte auf beiden Gleitsystemen gleich.

4.3. Versetzungsnetzwerke

Wie in Kapitel 4.1 dargelegt, besteht ein ausgeprägtes Merkmal von Versetzungsnetzwerken in einer enormen Streuung der Geschwindigkeiten und Ausbreitungswege einzelner Versetzungen. Nach ihrer Entstehung legen generierte Versetzungen nur kurze Wege zurück, bevor ihre weitere Ausbreitung durch das Versetzungsnetzwerk verhindert wird. Neben der Generierung neuer Versetzungen verursachen Versetzungsreaktionen somit auch die Stabilisierung von Versetzungen im Netzwerk. In einer Kontinuumsformulierung, die eine homogenisierte Beschreibung dieser Effekte zum Ziel hat, kann das gleitsystemübergreifende Zusammenspiel aus Generierung und Stabilisierung von Versetzungen nicht durch eine Formulierung beschrieben werden, die die Limitierung der plastischen Abscherung (Gleichung 2.12) auf Basis einer skalaren Versetzungsdichte und Versetzungsgeschwindigkeit beschreibt. In diesem Kapitel wird daher die Verfestigung als Konsequenz einer gleitsystemübergreifenden Beeinflussung der Versetzungsdichte beschrieben, die die plastische Abscherung durch Berücksichtigung stabiler Versetzungsreaktionen begrenzt. In gleitsystembasierten Beschreibungen existiert ein solcher Ansatz zur Formulierung der Evolution von Versetzungsdipolen [Dickel et al., 2014, Reuber et al., 2014, Schulz et al., 2017]. In diesem Kapitel wird analog dazu zum einen eine Annihilation von Versetzungslinien durch die kollineare Reaktion und zum anderen eine Stabilisierung von Versetzungslinien in Lomer Reaktionen berücksichtigt, siehe Abbildung 4.1(b). Die Formulierung der Evolutionsgleichungen als Spezialfälle des in Kapitel 3.3 hergeleiteten Zusammenhangs ist Inhalt dieses Kapitels.

4.3.1. Lomer und kollineare Reaktionen in Versetzungsnetzwerken

Zur Beschreibung der Limitierung der Plastizität durch das Versetzungsnetzwerk wird die totale Versetzungsdichte ρ^ξ eines Gleitsystems ξ in eine *mobile Versetzungsdichte* ρ_M^ξ , die sich mit der Geschwindigkeit v^ξ bewegt und in eine *Netzwerkversetzungsdichte* ρ_{net}^ξ , die nicht zur plastischen Abscherung beiträgt, aufgespalten:

$$\rho^\xi = \rho_M^\xi + \rho_{\text{net}}^\xi. \quad (4.11)$$

Die Rate der plastischen Scherung aus Gleichung (2.12) ändert sich damit zu:

$$\partial_t \gamma^\xi = \rho_M^\xi b v^\xi. \quad (4.12)$$

Die Netzwerkversetzungsdichte ρ_{net}^ξ besteht weiterhin aus zwei Teilen: (1.) Einer Dichte der Lomer Reaktionen ρ_{lomer}^ξ , d.h. der Linienlänge von Endpunkt zu Endpunkt der Reaktion. Diese Dichte ist auf beide reagierenden Gleitsystemen aufgeteilt (visualisiert durch die blaue Linie in Abbildung 4.1(b)). (2.) Eine *stabilisierte Versetzungsdichte* ρ_S^ξ , welche die Dichte der auf den reagierenden Gleitsystemen verbleibenden Versetzungslinien beschreibt (visualisiert durch die roten und grünen Linien in Abbildung 4.1(b)). Es wird angenommen, dass eine stabile Lomer Reaktion zu einer weitestgehenden Stabilisierung dieser Versetzungslinien führt. Dadurch ergibt sich

$$\rho_{\text{net}}^\xi = 0.5 \rho_{\text{lomer}}^\xi + \rho_S^\xi, \quad (4.13)$$

wobei der Faktor 0.5 durch die Aufteilung der Lomer Reaktion auf beide an der Reaktion beteiligten Gleitsysteme bedingt ist. Kollineare Reaktionen führen zu einer Reduktion der totalen Versetzungsdichte, aber nicht zwingend zu einer Stabilisierung der beteiligten Versetzungen. Dies ist vergleichbar mit gleitfähigen

Reaktionen und Quergleiten, bei denen die Bewegung der verbleibenden Versetzungslinien auf den beiden reagierenden Gleitsystemen miteinander gekoppelt ist. Es wird daher angenommen, dass von allen berücksichtigten Versetzungsmechanismen (siehe Abbildung 4.1) nur die Lomer Reaktion, sowie die Stabilisierung der anhängenden Versetzungslinien zu der Netzwerkversetzungsdichte ρ_{net}^{ξ} beiträgt. Die stabilisierte Versetzungsdichte ρ_S^{ξ} ist allerdings ebenso wie die mobile Versetzungsdichte ρ_M^{ξ} möglicher Partner für *alle* berücksichtigten Versetzungsreaktionen. Daraus ergibt sich eine Erweiterung der allgemeinen Formulierung der Reaktionsgleichung (3.5) unter Berücksichtigung der Gleichungen (4.11) und (4.13) und des mittleren Abstands $L^{\zeta} = 1/\sqrt{\rho_M^{\zeta} + \rho_S^{\zeta}}$ der möglichen Reaktionspartner auf dem schneidenden Gleitsystem ζ zu

$$\partial_t \rho_{\text{reakt}} = C_{\text{reakt}} \left(\rho_M^{\xi} |v^{\xi}| \sqrt{\rho_M^{\zeta} + \rho_S^{\zeta}} + \rho_M^{\zeta} |v^{\zeta}| \sqrt{\rho_M^{\xi} + \rho_S^{\xi}} \right) \quad (4.14)$$

mit $\xi, \zeta = r', r''$ und $\xi \neq \zeta$.

Hier und im Folgenden bezeichnet der Index $(\)_{\text{reakt}}$ ein Laufindex für verschiedene Reaktionsmechanismen, d.h. $(\)_{\text{reakt}} = (\)_{\text{gleit}}, (\)_{\text{lomer}}, (\)_{\text{koll}}$. Analog zu Gleichung 3.5 ist ρ_{reakt} im Allgemeinen nicht an ein Gleitsystem gebunden und enthält daher keinen Gleitsystemindex.

Die Gleichung (4.14) beschreibt die Linienlänge der reagierenden Versetzungen auf beiden Gleitsystemen. Die Stabilität einer Reaktion wird im Folgenden durch den Anteil der stabilen Reaktionen beschrieben, $\eta_{\text{reakt}}^{\xi}$. Der Prozess einer Reaktionsbildung wird für die gleitfähige und für die kollineare Reaktion als irreversibel angenommen, d.h. $\eta_{\text{gleit}}^{\xi} = \eta_{\text{koll}}^{\xi} = 1$. Die Lomer Reaktion hingegen kann ab einer kritischen Schubspannung $\tau_{\text{cr, lomer}}$, die von der Länge der anhängenden Versetzungslinien abhängt, wieder aufgelöst werden [Rodney und Phillips, 1999, Shin et al., 2001]. Dadurch entstehen wieder zwei getrennte und mobile Versetzungslinien. Es gilt also $\eta_{\text{lomer}}^{\xi} = f(\tau^{\xi}, \rho^{\xi})$ im Intervall $[0, 1]$, d.h. es wird angenommen, dass eine durch Gleichung (4.14) beschriebene Kollision zweier Versetzungen auf zwei Gleitsystemen nicht zu

einer stabilen Lomer Reaktion führt, wenn $|\tau^\xi| > \tau_{\text{cr,lomer}}$. Da diese Bedingung teilweise den Beitrag der Lomer Reaktion zur lokalen Fließspannung (Gleichung 2.29) ersetzt, bezeichnet τ^ξ die projizierte Schubspannung, Gleichung (2.19). Dieser Ansatz ist an die Begrenzung eines stabilen Bereich von Versetzungsdipolen durch eine kritische Spannung angelehnt [Dickel et al., 2014, Reuber et al., 2014, Schulz et al., 2017]. Eine detaillierte Herleitung von η_{lomer}^ξ erfolgt in Kapitel 4.3.2.

Die Aufteilung der totalen Versetzungsdichte (Gleichung 4.11) impliziert, dass der Beitrag der Reduktion der Versetzungsdichte auf den reagierenden Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ (Gleichung 3.6) ebenfalls auf den Anteil der mobilen Versetzungsdichte ρ_M^ξ und der stabilisierten Versetzungsdichte ρ_S^ξ aufgeteilt werden muss. Dies kann dadurch verdeutlicht werden, dass die mobile Versetzungsdichte des *schneidenden* Gleitsystems ρ_M^ξ die Versetzungsdichten des *primären* Gleitsystems ρ_M^ξ und ρ_S^ξ nur um ihren relativen Anteil $\rho_M^\xi / (\rho_M^\xi + \rho_S^\xi)$, bzw. $\rho_S^\xi / (\rho_M^\xi + \rho_S^\xi)$ reduzieren. Die mobile und stabilisierte Versetzungsdichte, welche durch die Entstehung einer Reaktion reduziert wird (gekennzeichnet durch den Index $(\)_{\text{M,reakt}}$ und $(\)_{\text{S,reakt}}$), ergibt sich daher zu ⁵

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{\text{M,reakt}}^\xi &= -\eta_{\text{reakt}}^\xi C_{\text{reakt}} \left(\rho_M^\xi |v^\xi| \sqrt{\rho_M^\xi + \rho_S^\xi} \right. \\ &\quad \left. + \rho_M^\xi |v^\xi| \sqrt{\rho_M^\xi + \rho_S^\xi} \frac{\rho_M^\xi}{\rho_M^\xi + \rho_S^\xi} \right) \end{aligned} \quad (4.15)$$

und

$$\partial_t \rho_{\text{S,reakt}}^\xi = -\eta_{\text{reakt}}^\xi C_{\text{reakt}} \left(\rho_M^\xi |v^\xi| \sqrt{\rho_M^\xi + \rho_S^\xi} \frac{\rho_S^\xi}{\rho_M^\xi + \rho_S^\xi} \right)$$

mit $\xi, \zeta = r', r''$ und $\xi \neq \zeta$.

⁵ Die mobile Versetzungsdichte des *schneidenden* Gleitsystems ρ_M^ζ reagiert sowohl mit ρ_M^ξ , als auch mit ρ_S^ξ , d.h. der summierte Dichteverlust durch ρ_M^ξ und ρ_S^ξ muss dem Gesamtverlust durch die Reaktion auf Gleitsystem ξ entsprechen.

Die Summe beider Beiträge entspricht dabei der negativen Produktionsrate der Dichte der Versetzungsreaktionen ρ_{reakt} (Gleichung 4.14) multipliziert mit dem Anteil der stabilen Reaktionen $\eta_{\text{reakt}}^{\xi}$ (vgl. auch Gleichung (3.6)):

$$\eta_{\text{reakt}}^{\xi} \partial_t \rho_{\text{reakt}} = - \left(\partial_t \rho_{\text{M,reakt}}^{\xi} + \partial_t \rho_{\text{S,reakt}}^{\xi} \right) \quad \text{mit} \quad \xi = r', r'' \quad (4.16)$$

Im Anschluss an die entstehende Reaktion (Gleichung 3.6) finden abhängig von der betrachteten Gleitsystempaarung (durch die Interaktionsmatrix in Abbildung 2.2 visualisiert) verschiedene Mechanismen statt. Für gleitfähige Reaktionen gelten weiterhin die in Kapitel 4.2.1 hergeleiteten Gleichungen, wodurch sich eine Erhöhung der *mobilen* Versetzungsdichte auf einem dritten beteiligten Gleitsystem ξ^{gl} ergibt, d.h. $\partial_t \rho_{\text{gleit}} = \partial_t \rho_{\text{gleit}}^{gl}$, siehe auch Gleichung (4.2). Kollineare Reaktionen führen zu einer Annihilation der Versetzungslinien, wodurch die Gleichung (4.14) für $(\)_{\text{reakt}} = (\)_{\text{koll}}$ eine Annihilationsrate bezeichnet. Lomer Reaktionen führen unter Berücksichtigung des stabilen Anteils $\eta_{\text{lomer}}^{\xi}$ zu einer unbeweglichen Versetzungsreaktion, wodurch sich für die Dichte der Lomer Reaktionen auf den jeweiligen Gleitsystemen ξ

$$\partial_t \rho_{\text{lomer}}^{\xi} = \eta_{\text{lomer}}^{\xi} \partial_t \rho_{\text{lomer}} \quad \text{mit} \quad \xi = r', r'' \quad (4.17)$$

ergibt. Hierbei stammt ρ_{lomer} aus Gleichung (4.14) mit $(\)_{\text{reakt}} = (\)_{\text{lomer}}$. Die Lomer Reaktion wird von beiden reagierenden Gleitsystemen geteilt, siehe Gleichung (4.13).

Die stabilisierte Versetzungsdichte ρ_{S}^{ξ} beschreibt die Linienlänge der Versetzungen, die durch eine entstehende Lomer Reaktion stabilisiert werden, aber nicht Teil der Reaktion selbst sind. Anschaulich kann dies durch die an den Endpunkten der Reaktion anhängenden Versetzungslinien beschrieben werden (grüne und rote Linien in Abbildung 4.1(b)). Es wird daher angenommen, dass eine Erhöhung dieser Dichte durch eine Stabilisierung der ursprünglich mobilen, an der Reaktion beteiligten Versetzungen geschieht, wobei bereits stabilisierte Versetzungen unberührt bleiben. Die Erhöhung der stabilisierten

Versetzungsdichte ist daher umgekehrt Proportional zur Reduktion der mobilen Versetzungsdichte durch Lomer Reaktionen (beschrieben durch $\partial_t \rho_{M, \text{reakt}}^\xi$ in Gleichung 4.15). Für den Fall $\partial_t \rho_{M, \text{lomer}}^\xi < 0$ gilt daher

$$\partial_t \rho_S^\xi = -\partial_t \rho_{M, \text{lomer}}^\xi \quad \text{mit} \quad \xi = r', r'' \quad (4.18)$$

In Analogie zu der Aufspaltung der Versetzungsdichte (Gleichung 4.11) existiert auch für die Krümmungsdichte ein Anteil, der nicht zur Ausbreitung der Versetzung beiträgt. Dieser Ansatz wurde bereits für die gleitfähige Reaktion in Kapitel 4.2.1 verfolgt. Die Konzentration der Krümmung in die Endknoten von Versetzungsreaktionen wird deshalb auch für Lomer und kollineare Reaktionen entsprechend Gleichung (4.4) berücksichtigt, wobei diese Gleichung für die Lomer Reaktion mit dem Anteil der stabilen Reaktionen η_{lomer}^ξ multipliziert wird.

4.3.2. Evolution von Versetzungsnetzwerken

Die Lomer Reaktion ist eine unbewegliche Reaktion, die sich allerdings wieder auflösen kann, wenn die Schubspannung auf einem beteiligten Gleitsystem die kritische Spannung $\tau_{\text{cr, lomer}}$ überschreitet. Physikalisch gesehen kann die Reaktion auch durch Spannungsinteraktion anderer, d.h. nicht an der Reaktion beteiligter Versetzung mit den an der Reaktion anhängenden Versetzungslinien aufgelöst werden. Abgesehen von der Berücksichtigung langreichweitiger Spannungsfelder (siehe Kapitel 3.2) wird dieser Prozess allerdings aus Gründen der Vereinfachung in dieser Arbeit nicht explizit modelliert. Bereits bei der Reaktionsbildung (Kapitel 4.3.1) wird durch den Parameter $\eta_{\text{lomer}}^\xi = f(\tau^\xi, \rho^\xi)$ berücksichtigt, dass bei $|\tau^\xi| > \tau_{\text{cr, lomer}}$ keine stabile Lomer Reaktion zustande kommt. Durch analytische Überlegungen basierend auf der Linienspannung [Schoeck und Frydman, 1972, Shin et al., 2001] bzw. durch molekulardynamische und diskrete Versetzungsdynamiksimulationen [Alankar et al., 2012b,

Madec und Kubin, 2017, Rodney und Phillips, 1999, Shenoy et al., 2000] kann die kritischen Spannung durch

$$\tau_{\text{cr,lomer}} = 0.5Gb \frac{1}{L_{\text{lomer}}} \quad (4.19)$$

approximiert werden. Hier bezeichnet L_{lomer} die Länge der Versetzungslinien, die durch die Endpunkte der Reaktion stabilisiert sind, d.h. der Versetzungsarme, wie in Abbildung 4.1(b) dargestellt.

Für die mittlere Länge der Versetzungsarme gilt die Annahme des mittleren Versetzungsabstands auf allen⁶ Gleitsystemen $L_{\text{lomer}} = L \propto 1/\sqrt{\sum_{\xi} \rho^{\xi}}$. Eine Annahme dieses mittleren Versetzungsabstands für *alle* Lomer Reaktionen in Mittelungsvolumen würde ein Auflösen aller Reaktionen zur selben Zeit bedeuten, sobald $|\tau^{\xi}| > \tau_{\text{cr,lomer}}$. Zur Abbildung des Einflusses der Streuung der Ausbreitungswege der einzelnen Versetzungen auf die Stärke des Versetzungsnetzwerks (siehe Kapitel 4.1 und [Stricker et al., 2018]) wird deshalb angenommen, dass durch diese Streuung eine Verteilung des Versetzungsabstands innerhalb eines Mittelungsvolumens über einen gewissen Bereich zustande kommt. Dadurch existiert auf beiden reagierenden Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$ bereits zum Zeitpunkt der Reaktionsbildung eine maximale (L_{max}) und eine minimale Länge (L_{min}) der Versetzungsarme, bzw. eine damit verbundene maximale und minimale kritische Schubspannung, τ_{max} bzw. τ_{min} , siehe Gleichung (4.19). Dadurch gilt $L_{\text{min}} < L = 1/\sqrt{\sum_{\xi} \rho^{\xi}} < L_{\text{max}}$. Zur Verdeutlichung ist in Abbildung 4.4(a) die Versetzungsconfiguration für L_{min} bzw. L_{max} skizziert. Durch das Verhältnis zwischen kritischer Spannung und Länge der Versetzungslinie (Gleichung 4.19) existiert eine *Stärkenverteilung* der Lomer Reaktionen. Die Abbildung 4.4(b) zeigt schematisch die Längenverteilung der Versetzungsarme für den allgemeinen Fall einer unterschiedlichen Schubspannung auf den

⁶ Die Länge der betreffenden Versetzungslinie ist im Allgemeinen durch Versetzungen auf allen Gleitsystemen begrenzt.

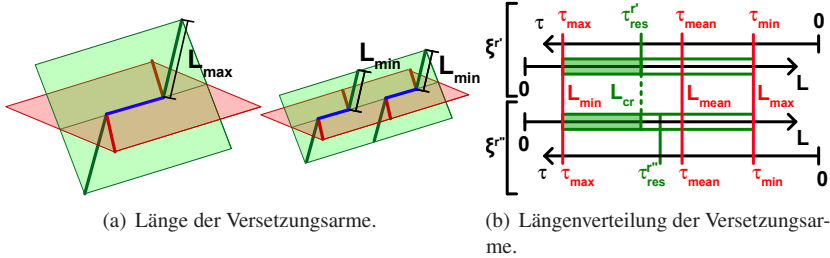


Abbildung 4.4.: Schematische Darstellung von Lomer Reaktionen mit einer maximalen und einer minimalen Länge der Versetzungsarme (L_{\min} und L_{\max}) (a) und des stabilen Längenbereichs auf den Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$, innerhalb dessen stabile Lomer Reaktionen existieren können, visualisiert durch den grünen Bereich (b).

reagierenden Gleitsystemen $\xi^{r'}$ und $\xi^{r''}$. Die Länge der Versetzungsarme der schwächsten Reaktion ist gegeben durch

$$L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} = 0.5Gb \frac{1}{|\tau^{\xi}|} \quad \text{mit} \quad \xi = r', r'' \quad (4.20)$$

Hier bezeichnet τ^{ξ} die auf das Gleitsystem ξ projizierte Schubspannung, Gleichung (2.19). Der Bereich, in dem stabile Lomer Reaktionen existieren können liegt daher zwischen L_{\min} und $L_{\text{cr,lomer}}^{\xi}$, visualisiert durch den grün schraffierten Bereich in Abbildung 4.4(b). Es wird vereinfachend eine lineare Verteilungsfunktion für die Versetzungsdichte angenommen, wodurch die Linienlänge, d.h. die Stärke der Lomer Reaktionen zu jedem Zeitpunkt über den stabilen Bereich (zwischen L_{\min} und $L_{\text{cr,lomer}}^{\xi}$) homogen verteilt ist. Da durch die Lomer Reaktion die beteiligten Versetzungen auf beiden Gleitsystemen gekoppelt sind, gilt $L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} = \min \{L_{\text{cr,lomer}}^{r'}, L_{\text{cr,lomer}}^{r''}\}$, d.h. die Stabilität einer Lomer Reaktion ist

durch das jeweilige Gleitsystem mit der höchsten projizierten Schubspannung bestimmt. Für den Anteil der stabilen Lomer Reaktionen gilt daher

$$\eta_{\text{lomer}}^{\xi} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} \geq L_{\text{max}} \\ \frac{L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} - L_{\text{min}}}{L_{\text{max}} - L_{\text{min}}} & \text{wenn } L_{\text{min}} < L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} < L_{\text{max}} \\ 0 & \text{wenn } L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} \leq L_{\text{min}}. \end{cases} \quad (4.21)$$

L_{min} , bzw. L_{max} wird in dieser Arbeit basierend auf der Streuung der Ausbreitungswege bzw. der Nukleationsradien von Multiplikationseffekten innerhalb des Versetzungsnetzwerks [Stricker et al., 2018] zu $L_{\text{min}} = 0.1L$ und $L_{\text{max}} = 2L$ gewählt, wobei L den mittleren Versetzungsabstand bezeichnet.

Durch die kritische Länge $L_{\text{cr,lomer}}^{\xi}$ ist demnach die schwächste Lomer Reaktion gegeben, wodurch ein Anstieg der projizierten Schubspannung zu einer Reduktion des Anteils der stabilen Lomer Reaktionen führt, d.h. $\partial_t L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} < 0$, wenn $L_{\text{min}} < L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} < L_{\text{max}}$. Physikalisch bedeutet dies eine Auflösung bereits gebildeter Lomer Reaktionen. Anstatt einer expliziten Modellierung des *Prozesses* der Auflösung wird in der Kontinuumstheorie die Umkehrung der Bildung von Reaktionen (Kapitel 3.3) angenommen. Dies bedeutet die Umwandlung des durch $|\partial_t L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} / (L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} - L_{\text{min}})|$ definierten Anteils der Dichte der Lomer Reaktionen (bezeichnet durch $\hat{\rho}_{\text{lomer}}^{\xi}$) und der stabilisierten Versetzungsdichte (bezeichnet durch $\hat{\rho}_S^{\xi}$) in mobile Versetzungsdichte $\hat{\rho}_M^{\xi}$. Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}_{\text{lomer}}^{\xi} &= \frac{\partial_t L_{\text{cr,lomer}}^{\xi}}{L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} - L_{\text{min}}} \rho_{\text{lomer}}^{\xi}, & \partial_t \hat{\rho}_S^{\xi} &= \frac{\partial_t L_{\text{cr,lomer}}^{\xi}}{L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} - L_{\text{min}}} \rho_S^{\xi} \\ \text{und} \quad \partial_t \hat{\rho}_M^{\xi} &= -\frac{\partial_t L_{\text{cr,lomer}}^{\xi}}{L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} - L_{\text{min}}} \left(\rho_{\text{lomer}}^{\xi} + \rho_S^{\xi} \right) \\ \text{mit } \xi &= r', r'' & \text{wenn } \partial_t L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} &< 0. \end{aligned} \quad (4.22)$$

4.4. CDD für Versetzungsnetzwerke

In der Zusammenfassung der in Kapitel 4.2 und 4.3 beschriebenen Mechanismen ergeben sich als Erweiterung der Evolutionsgleichungen (2.25) zusätzliche Terme als *Quelle* und *Senke* für mobile Versetzungsdichte. Für die Evolution des Versetzungsnetzwerks wird die *Netzwerkversetzungsdichte* ρ_{net}^ξ als eine weitere unabhängige interne Variable geführt. Die Zusammenführung aller in Kapitel 4.2 und 4.3 hergeleiteten Gleichungen ergibt sich unter Berücksichtigung der Aufspaltung der totalen Versetzungsdichte (Gleichung 4.11) und der kinematischen Formulierung der Versetzungsbewegung (Gleichung 2.25) zu

$$\begin{aligned}
 \partial_t \rho_M^\xi &= -\nabla \cdot (v^\xi \cdot \kappa_\perp^\xi) + v^\xi q^\xi + \partial_t \bar{\rho}_M^\xi + \partial_t \hat{\rho}_M^\xi + \partial_t \rho_{M,\text{lomer}}^\xi \\
 &\quad + \partial_t \rho_{M,\text{reakt}}^\xi + \partial_t \rho_{M,\text{quer}}^\xi \\
 \partial_t \kappa^\xi &= \nabla \times (\rho_M^\xi v^\xi \mathbf{m}^\xi) + \partial_t \kappa_{\text{quer}}^\xi \\
 \partial_t \rho_{\text{net}}^\xi &= 0.5 \partial_t \rho_{\text{lomer}}^\xi - \partial_t \rho_{M,\text{lomer}}^\xi + \partial_t \hat{\rho}_{\text{net}}^\xi + \partial_t \rho_{S,\text{reakt}}^\xi \\
 \partial_t q^\xi &= -\nabla \cdot \left(\frac{q^\xi}{\rho_M^\xi} \kappa_\perp^\xi v^\xi + \mathbf{A}^\xi \nabla v^\xi \right) + \partial_t \bar{q}^\xi + \partial_t q_{\text{reakt}}^\xi + \partial_t q_{\text{quer}}^\xi.
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

Mit $\kappa_{\text{quer}}^\xi = (\bar{\kappa}_{\text{quer}}^\xi, 0, 0)$. Die Beiträge der Versetzungsmultiplikation durch gleitfähige Reaktionen und Quergleiten zur Generierung neuer Versetzungen werden zu einer Erhöhung der *mobilen Versetzungsdichte* $\partial_t \bar{\rho}_M^\xi = \partial_t \bar{\rho}_{M,\text{gleit}}^\xi + \partial_t \bar{\rho}_{M,\text{quer}}^\xi$ (Gleichungen 4.2 und 4.9) und der Krümmungsdichte $\partial_t \bar{q}^\xi = \partial_t \bar{q}_{\text{gleit}}^\xi + \partial_t \bar{q}_{\text{quer}}^\xi$ (Gleichungen 4.3 und 4.10) zusammengefasst. Die Bildung und Auflösung von Lomer Reaktionen werden als Prozesse betrachtet, die Versetzungen nicht annihilieren, oder generieren, sondern Versetzungslinienlänge zwischen der mobilen Versetzungsdichte ρ_M^ξ und der Netzwerkversetzungsdichte ρ_{net}^ξ übertragen. Die *Bildung* von Lomer Reaktion erhöht die *Netzwerkversetzungsdichte* um $0.5 \partial_t \rho_{\text{lomer}}^\xi$ und $\partial_t \rho_{M,\text{lomer}}^\xi$. Der umgekehrte Prozess beschreibt die *Auflösung* von Lomer Reaktionen, welcher die *mobile Versetzungsdichte* um $\partial_t \hat{\rho}_M^\xi$ erhöht und die Netzwerkversetzungsdichte proportional um $\partial_t \hat{\rho}_{\text{net}}^\xi = \partial_t \hat{\rho}_{\text{lomer}}^\xi + \partial_t \hat{\rho}_S^\xi$

verringert (Gleichungen 4.22). Alle Versetzungsreaktionen und Quergleiten führen zu einer *Reduktion* von mobiler Versetzungsdichte auf den reagierenden Gleitsystemen durch $\partial_t \rho_{M, \text{reakt}}^\xi$ (Gleichung 3.6 bzw. 4.15), $\partial_t \rho_{M, \text{quer}}^\xi$ (Gleichung 4.7) und $\partial_t \rho_{S, \text{reakt}}^\xi$ (Gleichung 4.15). Die Konzentration der Versetzungskrümmung in den Endknoten von Versetzungsreaktionen wird in $\partial_t q_{\text{reakt}}^\xi$ (Gleichung 4.4) zusammengefasst. Ein Überblick über die Beiträge zur Dichteerhöhung und Dichteverringering auf dem Gleitsystem ξ durch die berücksichtigten Versetzungsreaktionen und Quergleiten ist in Tabelle 4.1 gegeben. Hierbei ergibt sich der Faktor 2 vor $\partial_t \rho_{M, \text{lomer}}^\xi$ aus der Annahme der Stabilisierung mobiler Versetzungen durch Lomer Reaktionen, siehe Gleichung (4.18).

	Dichteerhöhung	Dichteverringering
ρ_M^ξ	$\partial_t \bar{\rho}_M^\xi =$ $\partial_t \bar{\rho}_{M, \text{gleit}}^\xi + \partial_t \bar{\rho}_{M, \text{quer}}^\xi$ $\partial_t \hat{\rho}_M^\xi$	$\partial_t \rho_{M, \text{reakt}}^\xi =$ $\partial_t \rho_{M, \text{gleit}}^\xi + 2\partial_t \rho_{M, \text{lomer}}^\xi + \partial_t \rho_{M, \text{koll}}^\xi$ $\partial_t \rho_{M, \text{quer}}^\xi$
ρ_{net}^ξ	$0.5\partial_t \rho_{\text{lomer}}^\xi$ $\partial_t \rho_{M, \text{lomer}}^\xi$	$\partial_t \hat{\rho}_{\text{lomer}}^\xi$ $\partial_t \hat{\rho}_S^\xi$ $\partial_t \rho_{S, \text{reakt}}^\xi =$ $\partial_t \rho_{S, \text{gleit}}^\xi + \partial_t \rho_{S, \text{lomer}}^\xi + \partial_t \rho_{S, \text{koll}}^\xi$
q^ξ	$\partial_t \bar{q}^\xi = \partial_t \bar{q}_{\text{gleit}}^\xi + \partial_t \bar{q}_{\text{quer}}^\xi$	$\partial_t q_{\text{reakt}}^\xi = \partial_t q_{\text{gleit}}^\xi + \partial_t q_{\text{lomer}}^\xi + \partial_t q_{\text{koll}}^\xi$ $\partial_t q_{\text{quer}}^\xi$

Tabelle 4.1.: Überblick über die Beiträge zur Dichteerhöhung und Dichteverringering durch die berücksichtigten Versetzungsmechanismen.

Die Einführung einer kritischen Spannung zum Auflösen und Remobilisieren von Lomer Reaktionen (Gleichung (4.19), bzw. (4.20)) hat eine ähnliche Wirkung, wie eine lokale Fließspannung, da sie im Wesentlichen die Rate der Abscherung skaliert. In der Konsequenz ersetzt dieser Mechanismus den Koeffizienten a_{lomer} der Lomer-Gleitsystempaarung in der Interaktionsmatrix

$a^{\xi\zeta}$ (siehe Abbildung 2.2 und Tabelle 2.1). Unter der Annahme, dass existierende Lomer Reaktionen eine Hinderniswirkung für Versetzungen auf *allen* Gleitsystemen haben (siehe auch Kapitel 2.1), kann ein vereinfachter Interaktionsspannungsterm beschrieben werden durch

$$\tau_{\text{cr,lomer}}^{\xi} = Gb \sqrt{\bar{a}_{\text{lomer}} \sum_{\xi} \rho_{\text{lomer}}^{\xi}}. \quad (4.24)$$

Hierbei gilt $\bar{a}_{\text{lomer}} = 0.5a_{\text{lomer}}$ mit a_{lomer} aus Tabelle 2.1, da die Dichte der Lomer Reaktionen $\rho_{\text{lomer}}^{\xi}$ von den beiden Gleitsystemen der jeweiligen Paarung geteilt wird, siehe Gleichung (4.13). Wird eine verfestigende Wirkung der gekoppelten Bewegung von Versetzungen durch alle Reaktionen, sowie Selbstinteraktion berücksichtigt, erweitert sich Gleichung (4.24) vergleichbar mit Gleichung (2.3) zu

$$\tau_{\text{cr,mat}}^{\xi} = Gb \sqrt{\sum_{\xi} (a^{\xi\zeta} (\rho_{\text{M}}^{\xi} + \rho_{\text{S}}^{\xi}) + \bar{a}_{\text{lomer}} \rho_{\text{lomer}}^{\xi})}. \quad (4.25)$$

Mit einer Anfangsverteilung bestehend aus $\rho_{\text{lomer}}^{\xi}$ und ρ_{S}^{ξ} mit der Annahme $L_{\text{min}} = 0.1L$ und $L_{\text{max}} = 2L$ kann ein stabiles Versetzungsnetzwerk als Ausgangskonfiguration modelliert werden. In der Konsequenz wird die Relaxation des Systems, bzw. die Verfestigung maßgeblich durch eine Veränderung der Menge der mobilen Versetzungen kontrolliert.

5. Ergebnisse

Die in Kapitel 2.1 und 3 motivierten Fragestellungen erfordern eine Untersuchung des Zusammenspiels zwischen Gleitsystemen für den Allgemeinfall der wechselseitigen Interaktion aller 12 Gleitsysteme des kfz Kristallgitters. Die Aspekte der Versetzungsinteraktion, Versetzungsmultiplikation und der Evolution von Versetzungsnetzwerken werden zuerst unabhängig voneinander analysiert und anschließend für eine gemeinsame Betrachtung zusammengeführt. Den gewählten Systemkonfigurationen und Randbedingungen liegt die Grundidee einer gezielten Untersuchung der Mechanismen bei gleichzeitiger Reduktion der Systemkomplexität und des Einflusses der Randbedingungen zugrunde. Soweit nicht anders gekennzeichnet, werden die in Kapitel 2.3 gegebenen Materialparameter und Faktoren der Interaktionsspannungsterme verwendet.

5.1. Versetzungsinteraktion

In der gegenwärtigen Kontinuumsformulierung verschwindet der Gradient der plastischen Scherung in Konfigurationen, in denen ausschließlich SSD-Versetzungsdichte vorliegt. Anstatt durch langreichweitige Spannungsfelder, wird die Versetzungsinteraktion dann durch kurzreichweitige Spannungsterme beschrieben. Dafür wird, wie in Kapitel 3.2 bereits für eine GND-dominierte Konfiguration beschrieben, eine gleitsystembasierte Anwendung der Interaktionsspannungsterme nach „Taylor“ (τ_{cr}^{ξ}), oder nach „Franciosi“ ($\tau_{cr,mat}^{\xi}$) herangezogen, siehe auch Gleichung (2.29).

Den beiden Interaktionsspannungstermen liegt ein unterschiedlicher Grad der Homogenisierung der Versetzungsmechanismen zugrunde, entweder durch einen gemittelten Faktor α (bei τ_{cr}^{ξ}), oder durch die Anwendung einer Interaktionsmatrix $\alpha^{\xi\zeta}$ (bei $\tau_{\text{cr.mat}}^{\xi}$, siehe auch Abbildung 2.2). In diesem Kapitel werden die Auswirkungen dieser Homogenisierungsansätze auf die Dichteverteilung, sowie die Verfestigung in Systemen mit unterschiedlich heterogener Dichte- und Spannungsverteilung zwischen Gleitsystemen zuerst in vereinfachten Systemen und anschließend in einem kfz Einkristall untersucht. Die Untersuchung folgt weitestgehend [Sudmanns et al., 2018]. Zur Vereinfachung wird die in Kapitel 2.3 eingeführte und in Kapitel 3.2 betrachtete Formulierung der CDD verwendet.

5.1.1. Zwei schneidende Gleitsysteme

Zur zielgerichteten Untersuchung des Einflusses einzelner Versetzungsreaktionen auf die Evolution der Versetzungsdichte und der Fließspannung werden die beiden in Kapitel 3.2 untersuchten Gleitsystemkonfigurationen (Abbildung 3.3(a) und 3.3(b)) in Systeme mit homogen verteilter initialer SSD-Versetzungsdichte überführt. Wie in Kapitel 3.2 beträgt die Versetzungsdichte auf beiden Gleitsystemen $\rho_1 = \rho_2 = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$. Diese besteht in dem homogenen System allerdings aus Versetzungen mit einem Radius von $2 \mu\text{m}$, die homogen über das komplette System verteilt sind. Eine Erhöhung der Versetzungsdichte erfolgt daher durch die Expansion der Versetzungen und ist durch Gleichung 3.1 beschrieben. Die Belastung erfolgt durch eine konstante Dehnrates von $\dot{\epsilon} = 1000 \text{ s}^{-1}$ in Richtung der z-Achse, wie in Abbildung 5.1(a) bzw. (b) dargestellt.

Durch die symmetrische Anordnung ist die aufgelöste Schubspannung auf beiden Gleitsystemen gleich. Die Versetzungsdichte kann das Simulationsvolumen an den äußeren Systemgrenzen verlassen. Um den Einfluss durch die Randbedingungen möglichst gering zu halten, wird die Untersuchung der

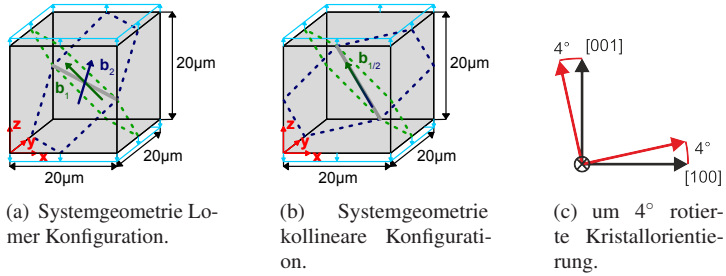


Abbildung 5.1.: Systemgeometrie und Belastungsrichtung der auf zwei repräsentative Gleitsysteme reduzierten, homogenisierten Lomer (a) und kollinearen (b) Konfiguration und Visualisierung der um 4° rotierten Kristallorientierung um die [010]-Richtung (b).

internen Variablen auf einen Bereich im Inneren des Simulationsvolumens mit 1/4 der äußeren Kantenlänge beschränkt. Die Belastung des Systems mit

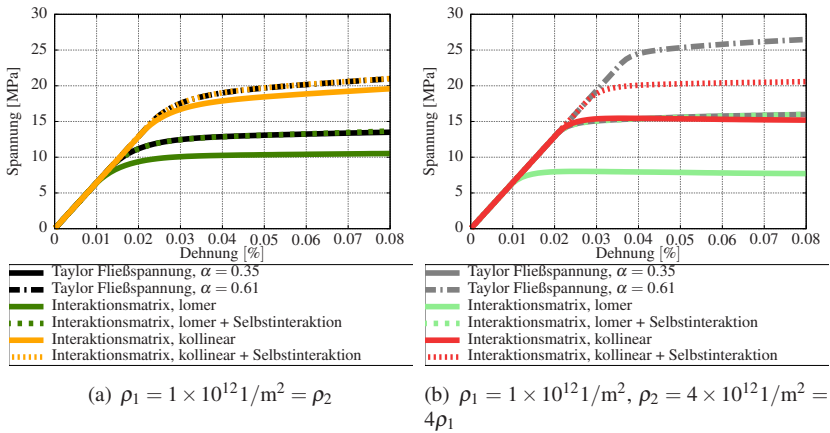


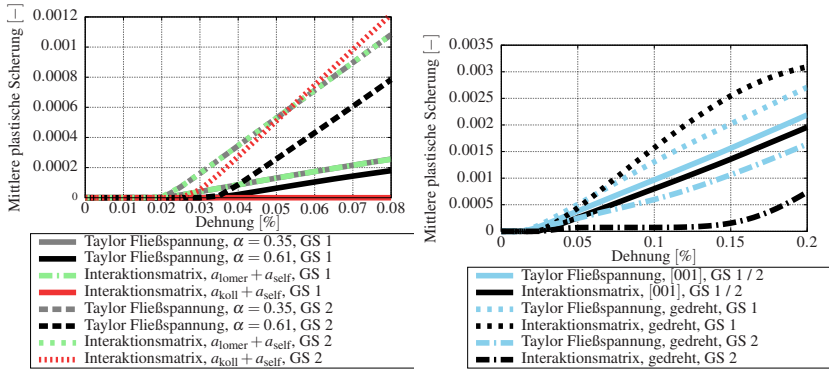
Abbildung 5.2.: Vergleich der Spannungs-Dehnungs Kurven für das System mit zwei repräsentativen Gleitsystemen in Lomer und in kollinearer Konfiguration für $\rho_1 = \rho_2$ (a) und für $4\rho_1 = \rho_2$ (b) für beide Interaktionsspannungsterme. Die Selbstinteraktion bezeichnet die Diagonalkomponente der Interaktionsmatrix, d.h. $\alpha^{\xi\xi}$. Aus [Sudmanns et al., 2018].

einer Dehnrate resultiert in einer Spannungs-Dehnungs Kurve mit einem ausgeprägten elastischen Bereich, der nach Überschreiten der Fließspannung in eine plastische Deformation übergeht, siehe Abbildung 5.2(a).

Unter Verwendung der Interaktionsmatrix ist insbesondere für die Lomer-Konfiguration ein deutlicher Einfluss der Selbstinteraktion, d.h. der Diagonalkomponenten ($a^{\xi\xi}$), auf die Fließspannung zu beobachten (Abbildung 5.2(a) grüne Kurven). Die Spannungs-Dehnungs Kurve für die Lomer-Konfiguration unter Berücksichtigung der Selbstinteraktion ist identisch zu der Kurve der Taylor-Formulierung mit $\alpha = 0.35$. Anhand der Abweichung der Kurven für die Lomer und die kollineare Konfiguration (grüne und gelbe Kurven) ist ersichtlich, dass die Taylor-Formulierung nicht in der Lage ist, die unterschiedlichen Stärken der Lomer und der kollinearen Reaktion mit dem gleichen Parameter zu erfassen. Allerdings kann das Verhalten der Interaktionsmatrix in der kollinearen Konfiguration durch die Taylor-Formulierung mit einem Parameter von $\alpha = 0.61$ reproduziert werden, wie in Abbildung 5.2(a) dargestellt.

Bei Erhöhung der initialen Versetzungsdichte auf einem Gleitsystem ($4\rho_1 = \rho_2$) wird eine Heterogenität innerhalb des Systems erzeugt, siehe Abbildung 5.2(b). Da die angenommenen Interaktionsparameter für die Lomer Reaktion und der Selbstinteraktion identisch sind ($\sqrt{a_{\text{lomer}}} = \sqrt{a^{\xi\xi}} \approx 0.349$, siehe Tabelle 2.1), sind die Spannungs-Dehnungs Kurven für die Lomer-Konfiguration mit Selbstinteraktion und für die Taylor-Formulierung ($\alpha = 0.35$) weiterhin identisch. Während die Taylor Formulierung mit einem Parameter von $\alpha = 0.61$ in der homogenen Dichtekonfiguration das Verhalten der Interaktionsmatrix in der kollinearen Konfiguration reproduzieren kann (Abbildung 5.2(a) gelbe Kurven), wird die Fließspannung in Abbildung 5.2(b) im Vergleich zu der Formulierung mit Interaktionmatrix (rote Kurven) überschätzt. Letztere kann durch die einzelne Gewichtung der Mechanismen unterschiedliche Werte für beide Gleitsysteme annehmen und führt zu einer geringeren Fließspannung.

Abbildung 5.3(a) zeigt die Evolution der mittleren plastischen Scherung je Gleitsystem (Gleichung 2.12) über der Dehnung für die heterogene Konfiguration der Versetzungsdichte ($4\rho_1 = \rho_2$, zugehörige Spannungs-Dehnungs Kurven



(a) $4\rho_1 = \rho_2$, Zugrichtung in $[001]$ hochsymmetrische Kristallorientierung, vgl. auch Fig. 5.2(b). (b) $\rho_1 = \rho_2$, Kristallorientierung um 4° gedreht im Vergleich zur $[001]$ Orientierung.

Abbildung 5.3.: Evolution der plastischen Scherung je Gleitsystem (GS) für die Lomer- und die kollineare Konfiguration mit $4\rho_1 = \rho_2$ (a) und für die kollineare Konfiguration mit $\rho_1 = \rho_2$ und einer um 4° um die $[010]$ -Achse gedrehten Kristallorientierung, siehe Abbildung 5.1(b). Aus [Sudmanns et al., 2018].

in Abbildung 5.2(b)). Für die Taylor-Formulierung wird bei einer Erhöhung des Parameters α von 0.35 auf 0.61 eine parallele Verschiebung der plastischen Scherung zu höheren Dehnungen beobachtet, ohne den Verlauf beider Gleitsysteme qualitativ zu verändern (Abbildung 5.3(a) graue und schwarze Kurven). Im Gegensatz dazu ist bei Verwendung des kollinearen Parameters in der Interaktionsmatrix eine Konzentration der plastischen Abscherung auf das Gleitsystem mit der höheren initialen Versetzungsdichte zu beobachten (rote Kurven). Eine gleichzeitige Aktivierung beider kollineareren Gleitsysteme wird weitestgehend unterbunden.

Ein ähnliches Verhalten kann beobachtet werden, wenn anstatt einer unterschiedlichen Dichte eine unterschiedliche Schubspannung auf den Gleitsystemen angenommen wird. Dies kann z.B. durch eine Rotation der Kristallorientierung um 4° um die $[010]$ -Achse erreicht werden, wie in Abbildung 5.1(b) dargestellt. Dadurch wird eine Heterogenität in der Spannungsverteilung durch leicht unterschiedliche Schmid-Faktoren auf den Gleitsystemen induziert. Die

resultierende Evolution der plastischen Scherung im Vergleich zu der idealen $[001]$ Orientierung ist in Abbildung 5.3(b) dargestellt. In der $[001]$ Orientierung entwickelt sich die plastische Scherung nahezu identisch für beide Formulierungen (durchgezogene Kurven). In der rotierten Orientierung unter Verwendung des Taylor-Terms wird eine Aufspaltung der Evolution beider Gleitsysteme entsprechend den Schmid-Faktoren beobachtet (blau gestrichelte Kurven). Im Gegensatz dazu führt der kollineare Parameter in der Interaktionsmatrix zu einer Unterbindung der plastischen Scherung auf dem Gleitsystem mit dem geringeren Schmid-Faktor bis zu einer Dehnung von 0.15% (schwarz gestrichelte Kurven). Für höhere Dehnungen wird eine Sättigung der plastischen Scherung beobachtet, da Versetzungsdichte das System verlässt.

5.1.2. Kfz Einkristall mit allen Gleitsystemen

Zur Untersuchung des Zusammenspiels aller aktiven und inaktiven Gleitsysteme des kfz Kristallgitters wird die Untersuchung beider Fließspannungsterme, bzw. Homogenisierungsansätze, auf alle 12 Gleitsysteme erweitert. Hierbei wird die Belastungsrichtung und -geschwindigkeit aus Kapitel 5.1.1 beibehalten, siehe Abbildung 5.4(a).

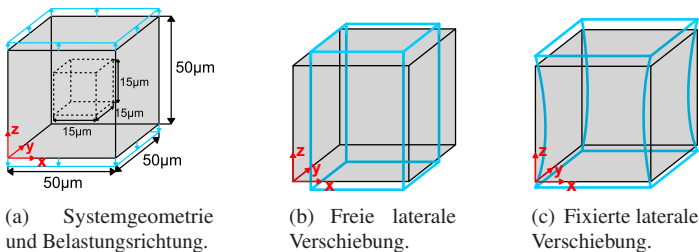


Abbildung 5.4.: Systemgeometrie und Belastungsrichtung der hochsymmetrischen $[001]$ Kristallorientierung (mit den $[xyz]$ -Koordinaten übereinstimmend) mit 12 Gleitsystemen (a), sowie eine (stark überzeichnete) Visualisierung der Verzerrung der Geometrie mit freier (b) und fixierter (c) lateraler Verschiebung der Dichrichtlet-Flächen (Z -normalen).

Da hier allerdings Dehnungen bis 0.6% betrachtet werden, wird eine größere Systemabmessung berücksichtigt. Um zu verhindern, dass Versetzungsdichte das Volumen vollständig verlässt, wird zudem ein Produktionsterm für Versetzungsdichte entsprechend eines Kocks-Mecking Ansatzes [Kocks und Mecking, 2003] verwendet (Gleichung 2.14 mit $C = 0.05$). Eine initiale totale Versetzungsdichte von $\rho_{\text{tot}} = \sum_{\xi} \rho^{\xi} = 1.75 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$ ist gleichmäßig über alle Gleitsysteme verteilt. Die hier verwendete [001] Kristallorientierung (mit den $[xyz]$ -Koordinaten in Abbildung 5.4(a) übereinstimmend) ist bei der gegebenen Belastung dadurch gekennzeichnet, dass sowohl das primäre, als auch das jeweilige Quergleitsystem durch den maximalen Schmid-Faktor belastet sind. Dadurch ist eine Untersuchung des Einflusses des hohen kollinearen Parameters in der Interaktionsmatrix möglich (siehe Tabelle 2.1).

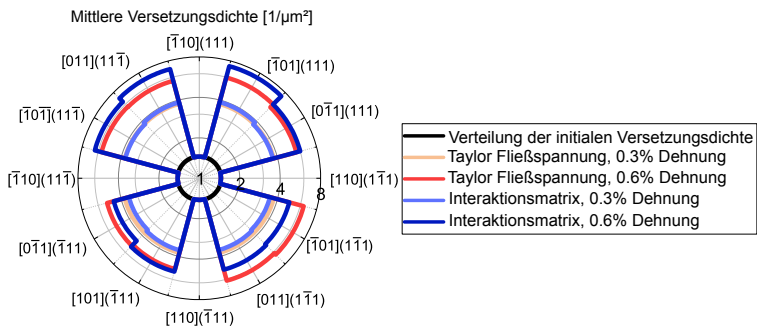


Abbildung 5.5.: Radial - logarithmische Darstellung der Versetzungsdichteverteilung auf den Gleitsystemen für zwei verschiedene Dehnungen in einer hochsymmetrischen [001] Kristallorientierung mit einer homogenen initialen Versetzungsdichteverteilung auf den Gleitsystemen. Aus [Sudmanns et al., 2018].

Für eine hochsymmetrische [001] Kristallorientierung existieren acht Gleitsysteme mit dem gleichen Schmid-Faktor von 0.41 (im Folgenden als *aktive Gleitsysteme* bezeichnet), während vier Gleitsysteme unbelastet sind (im Folgenden als *inaktive Gleitsysteme* bezeichnet). Abbildung 5.5 zeigt die gemittelte Versetzungsdichte je Gleitsystem für Dehnungen von 0.3% und 0.6% für die hochsymmetrische Kristallorientierung. Es ist zu sehen, dass auf den vier

inaktiven Gleitsystemen keine Dichteevolution stattfindet, während die Versetzungsdichte auf den acht aktiven Gleitsystemen für 0.3% Dehnung mit beiden Formulierungen nahezu identisch ist. Bei 0.6% Dehnung ist bei Verwendung der Interaktionsmatrix ein etwas größerer Unterschied zwischen Gleitsystemen erkennbar.

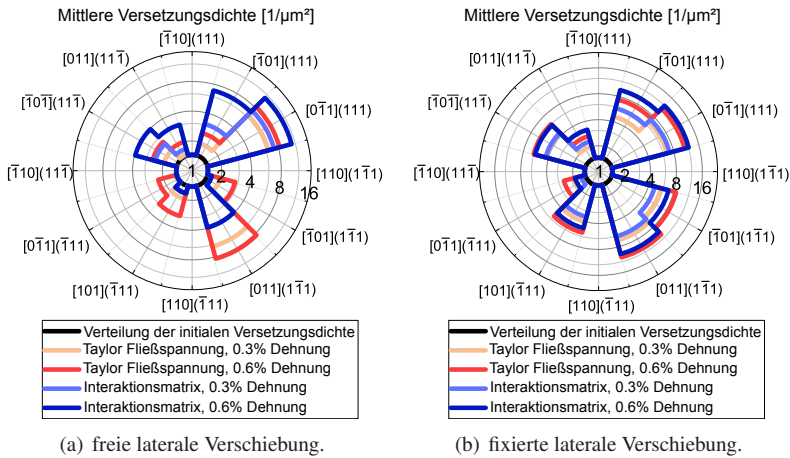


Abbildung 5.6.: Wie Abbildung 5.5, aber mit einer um 4° um die $[010]$ -Achse gedrehten Kristallorientierung und freier (a), sowie fixierter lateraler Verschiebung und Kontraktion der Dirichlet-Flächen. Aus [Sudmanns et al., 2018].

Eine Rotation der Kristallorientierung um die $[010]$ -Achse (Abbildung 5.1(b)) führt zu einer Variation der Schmid-Faktoren auf den acht aktiven Gleitsystemen zwischen 0.3779 und 0.4347. Zwei der vier aktiven kollinearen Gleitsystempaare besitzen nun einen unterschiedlichen Schmid-Faktor. Dadurch wird eine Heterogenität in der initialen Spannungsverteilung zwischen den Gleitsystemen erzeugt. In der ersten Untersuchung der rotierten Kristallorientierung wird eine seitliche Verschiebung der Dirichlet-Flächen und damit eine höhere elastische Flexibilität erlaubt, siehe Abbildung 5.4(b). Im Vergleich zur hochsymmetrischen Kristallorientierung (Abbildung 5.5) ist die mittlere Dichteverteilung

zwischen den Gleitsystemen für beide Formulierungen sehr heterogen, wie in Abbildung 5.6(a) dargestellt.

Die Taylor Formulierung zeigt eine Dichteentwicklung entsprechend den projizierten Schubspannungen, siehe Gleichung (2.19). Unabhängig von der Kristallorientierung ist die Dichteentwicklung für Gleitsysteme mit dem gleichen Schmid-Faktor nahezu identisch. Im Gegensatz dazu zeigt die Formulierung mit der Interaktionsmatrix eine starke Wechselwirkung der kollinearen Gleitsysteme. Drei der Gleitsysteme, auf denen mit der Taylor Formulierung eine Dichteentwicklung stattfindet, bleiben nun deaktiviert. Ein weiteres Gleitsystem zeigt keine weitere Evolution nach 0.3 % Dehnung. Auffallend ist zudem, dass sich keines der vier Gleitsysteme, auf denen bei 0.6 % Dehnung weitere Dichteentwicklung stattfindet, einen gemeinsamen Burgers Vektor besitzt.

Durch eine Fixierung der seitlichen Verschiebung der Dirichlet-Flächen kann eine rein einachsige Zugbelastung erzwungen werden, wie in Abbildung 5.4(c) visualisiert. In Abbildung 5.6(b) ist zu sehen, dass die steiferen Randbedingungen bereits mit der Taylor Formulierung zu einer geringeren Konzentration der Scherung auf einzelne Gleitsysteme führen. Weiterhin zeigt die resultierende Dichtevertelung auf den Gleitsystemen im Vergleich zu der flexibleren Konfiguration einen sehr geringen Unterschied zwischen beiden Formulierungen, siehe Abbildung 5.6(b). Dies veranschaulicht den Einfluss der Steifigkeit des Systems auf die induzierten Spannungen auf allen Gleitsystemen. Bei erlaubter seitlicher Verschiebung führt bereits die leichte Verdrehung der Kristallorientierung um 4° zu einer Deformation quer zur Zugrichtung und daher zu einer verstärkten Relaxation des Systems entlang dominanter Gleitebenen. Eine solche transversale Deformation wird durch die Fixierung der seitlichen Verschiebung unterbunden.

5.2. Versetzungsmultiplikation durch gleitfähige Reaktionen und Quergleiten

Dieses Kapitel schließt argumentativ an die in Kapitel 4.1 beschriebenen Beobachtungen in Bezug auf die Evolution von Versetzungsnetzwerken in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018] an. Die Formulierung der Versetzungsmultiplikation durch gleitfähige Reaktionen und Quergleiten in Kapitel 4.2 wird zuerst in einem vereinfachten System untersucht und anschließend mit Ergebnissen aus [Stricker et al., 2018] verglichen. Für die Untersuchung wird daher das Gleichungssystem (4.23) verwendet, wobei vorerst alle mit Lomer- und kollinearen Reaktionen zusammenhängenden Terme vernachlässigt werden. Es gilt unter anderem $\rho^{\xi} = \rho_M^{\xi}$ und $\rho_{\text{net}}^{\xi} = 0$. Da vorerst nur gemittelte Größen betrachtet werden, wird die Verfestigung aufgrund ansteigender Versetzungsdichte durch den Interaktionsspannungsterm nach „Taylor“ (Gleichung (2.29) mit Gleichung (2.2)) abgebildet. Die Untersuchung der Ergebnisse in diesem Kapitel folgt dabei weitestgehend [Sudmanns et al., 2019].

5.2.1. Gleitfähige Reaktionen in einem vereinfachten System

Die erste Untersuchung beschränkt sich auf gleitfähige Reaktionen, die in Kapitel 4.2.1 auf Basis der allgemeinen Betrachtung in Kapitel 3.3 für die Kontinuumsbeschreibung hergeleitet werden. Zur einfacheren Verdeutlichung der Auswirkungen der hergeleiteten Gleichungen werden für das hier betrachtete vereinfachte System alle Transportterme des Gleichungssystems (4.23) vernachlässigt. Dadurch verschwinden alle Ortsableitungen, wodurch ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen und damit ein vollständig homogenes System erhalten wird. Physikalisch gesehen reproduziert dies eine Systemkonfiguration, bei denen Versetzungen das System nicht verlassen können. Es wird

eine aus drei Gleitsystemen bestehende Konfiguration betrachtet, die drei Paare für gleitfähige Reaktionen beinhaltet, wie in Abbildung 5.7 visualisiert.

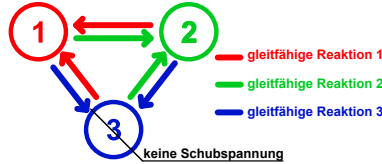


Abbildung 5.7.: Schematische Übersicht der Konfiguration der drei Gleitsysteme $\xi = 1, 2, 3$ mit den entsprechenden gleitfähigen Reaktionen. Aus [Sudmanns et al., 2019].

Auf zwei Gleitsystemen ($\xi = 1$ und $\xi = 2$) wirkt jeweils eine konstante externe Schubspannung von $\tau_{1,\text{ext}} = \tau_{2,\text{ext}} = 15 \text{ MPa}$. Auf dem Gleitsystem $\xi = 3$ gilt $\tau_{3,\text{ext}} = 0$, wodurch aktive und inaktive Gleitsysteme reproduziert werden, wie z.B. in Kapitel 5.1.2 beschrieben. Die initiale Versetzungsdichte auf den aktiven Gleitsystemen beträgt $\rho_1 = \rho_2 = 3 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ und auf dem inaktiven Gleitsystem $\rho_3 = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$. Weiterhin gilt $\kappa^\xi = 0$ und $q^\xi = 0$. Die initiale Konfiguration besteht damit aus Versetzungen, deren mittlere Krümmung verschwindet, wodurch ein initialer Dichteanstieg aufgrund der Expansion existierender Versetzungen, wie z.B. in Kapitel 3.1 ausgeschlossen wird. Für die Konstante in der Reaktionsgleichung (3.5) gilt $C_{\text{gleit}} = 0.064$, ähnlich zu [Roters et al., 2019].

In der gewählten Konfiguration dient die Versetzungsdichte auf Gleitsystem 3 als passiver Reaktionspartner, der trotz der verschwindenden Versetzungsgeschwindigkeit entsprechend Gleichung (3.5) zu der Evolution der totalen Versetzungsdichte beiträgt. Dies ist anhand des Verlaufs der Versetzungsdichte je Gleitsystem über der Simulationszeit erkennbar, dargestellt in Abbildung 5.8(a). Die gleitfähigen Reaktionen zwischen allen drei Gleitsystemen führt zu einem Anstieg der Versetzungsdichte der aktiven, sowie des inaktiven Gleitsystems bis zu einer Sättigung nach etwa $0.4 \mu\text{s}$. Auf den beiden aktiven Gleitsystemen ist direkt zu Beginn der Simulation eine leichte Abnahme der Versetzungsdichte zu sehen. Die Abflachung des Dichteverlaufs gegen Ende der Simulation ist durch

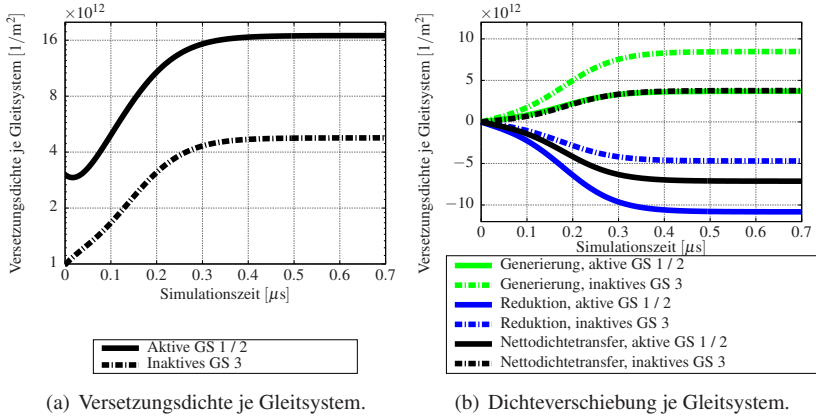


Abbildung 5.8.: Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem (GS) mit gleitfähigen Reaktionen (a) und der Beitrag der gleitfähigen Reaktion zur Generierung und Reduktion der Versetzungsdichte je Gleitsystem (GS) (b). Zusätzlich ist der Nettodichtetransfer aufgetragen. Aus [Sudmanns et al., 2019].

den Anstieg der Interaktionsspannung (Gleichung 2.2) mit der Versetzungsdichte verursacht, wodurch alle Gleitsysteme inaktiv werden.

Für eine weitere Analyse werden die Beiträge der einzelnen Terme der gleitfähigen Reaktion zu der Evolutionsgleichung der Versetzungsdichte (Gleichung 4.23) in Abbildung 5.8(b) separat für die aktiven Gleitsysteme 1 und 2 und für das inaktive Gleitsystem 3 betrachtet. Jedes Gleitsystem ist an zwei verschiedenen Reaktionen beteiligt, wie in Abbildung 5.7 verdeutlicht wird: Zum einen trägt jedes Gleitsystem zu einer Reduktion von Versetzungsdichte bei ($\partial_t \rho_{\text{gleit}}^\xi$ aus Gleichung (3.6)); Zum anderen wird neue Versetzungsdichte durch die Reaktion zweier Gleitsysteme generiert, wodurch ein Anstieg der Versetzungsdichte zustande kommen kann ($\partial_t \bar{\rho}_{\text{gleit}}^\xi$ aus Gleichung (4.2)). Die Zusammenfassung beider Beiträge beschreibt einen Nettodichtetransfer zwischen den drei beteiligten Gleitsystemen. Dabei ist die Integration der Raten über die Simulationszeit durch $\rho_{\text{gleit}}^\xi = \int_t \partial_t \rho_{\text{gleit}}^\xi dt$ und $\bar{\rho}_{\text{gleit}}^\xi = \int_t \partial_t \bar{\rho}_{\text{gleit}}^\xi dt$ gegeben. Erwartungsgemäß ist die Reduktion der Versetzungsdichte (ρ_{gleit}^ξ) stets

negativ, während die Generierung von Versetzungsdichte ($\bar{\rho}_{\text{gleit}}^{\xi}$) stets positiv ist. Aufgrund der Reaktion beider aktiver Gleitsysteme (siehe die mit „gleitfähige Reaktion 3“ bezeichnete Reaktion in Abbildung 5.7) übersteigt auf dem inaktiven Gleitsystem der Beitrag der Generierung die Reduktion von Versetzungsdichte. Dies führt zu einem Nettodichtetransfer, der dem beobachteten Anstieg der Versetzungsdichte auf dem inaktiven Gleitsystem entspricht (Abbildung 5.8(a)). Im Gegensatz dazu übersteigt auf den aktiven Gleitsystemen die Dichtereduktion die Generierung neuer Versetzungen, welche durch die Reaktion des inaktiven mit dem zweiten aktiven Gleitsystem verursacht ist (die mit „1“, bzw. „2“ bezeichnete Reaktion in Abbildung 5.7). Die daraus resultierende Nettodichtereduktion ist leicht durch eine Betrachtung der Reaktionsgleichung (3.5) zu verstehen: Ein Summand verschwindet bei einer Beteiligung eines inaktiven Gleitsystems. Der leichte Abfall der Versetzungsdichte zu Beginn der Simulation in Abbildung 5.8(a) ist durch dieses Verhalten in Verbindung mit den gewählten Anfangsbedingungen zu verstehen.

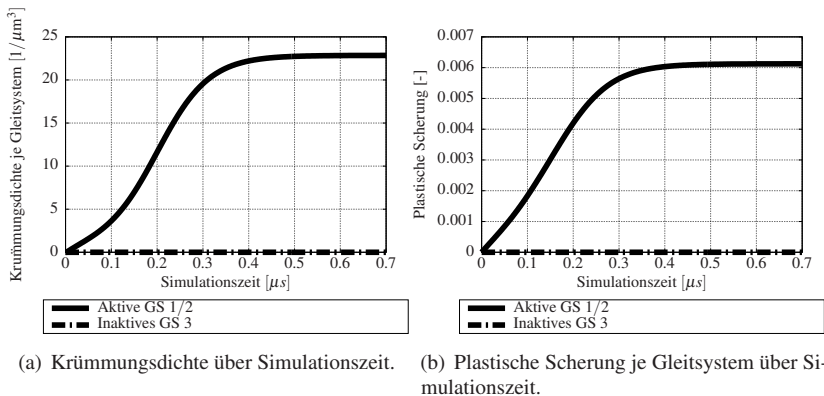


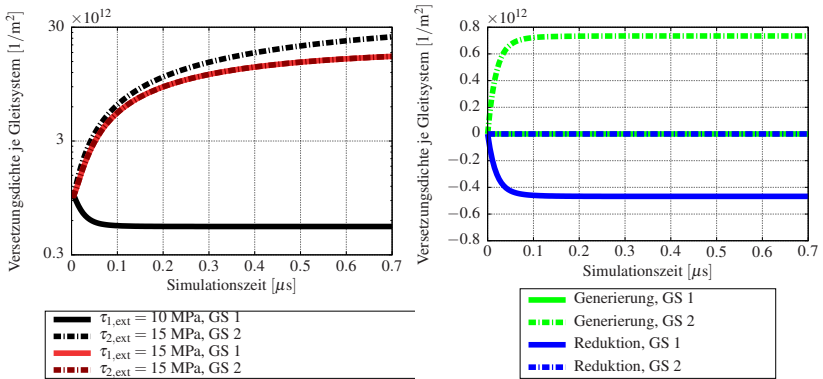
Abbildung 5.9: Verlauf der mittleren Krümmungsdichte je Gleitsystem (GS) mit gleitfähigen Reaktionen (a) und der mittleren plastischen Scherung je Gleitsystem (GS) (b).

Eine Generierung neuer Versetzungen auf den aktiven Gleitsystemen ist immer mit einer Erzeugung von Krümmungsdichte verbunden (Gleichung 4.3). Der Verlauf der mittleren Krümmungsdichte über der Simulationszeit (Abbildung 5.9(a)) zeigt auf den aktiven Gleitsystemen einen Anstieg der Krümmungsdichte, der allerdings synchron mit der Versetzungsdichte konvergiert. Das Erreichen, bzw. Überschreiten der Fließspannung (Abbildung 5.8(a)) führt zu einem Verschwinden des Versetzungsflusses (Gleichung 2.29) und damit zu einer Sättigung der plastischen Scherung, wie in Abbildung 5.9(b) dargestellt.

5.2.2. Quergleiten in einem vereinfachten System

Für die Untersuchung des Quergleitmechanismus entsprechend der Herleitung in Kapitel 4.2.2, wird vorerst die in Kapitel 5.2.1 betrachtete gleitfähige Reaktion vernachlässigt. Es wird allerdings weiterhin ein rein lokales Kontinuumsmo-
dell verwendet, wodurch sich das Gleichungssystem (4.23) auf gewöhnliche Differentialgleichungen reduziert. Die betrachtete Systemkonfiguration besteht aus zwei Gleitsystemen ($\xi = 1$ und $\xi = 2$), die zwei verschiedenen Spannungskonfigurationen ausgesetzt sind: (i) Auf beiden Gleitsystemen wirkt die gleiche konstante Schubspannung von $\tau_{1,\text{ext}} = \tau_{2,\text{ext}} = 15 \text{ MPa}$ und (ii) auf beiden Gleitsystemen wirken unterschiedliche Schubspannungen von $\tau_{1,\text{ext}} = 10 \text{ MPa}$ und $\tau_{2,\text{ext}} = 15 \text{ MPa}$. In beiden Konfigurationen gilt initial eine homogene Versetzungsdichte von $\rho_1 = \rho_2 = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$, sowie $\kappa^\xi = 0$ und $q^\xi = 0$.

Durch die symmetrische Formulierung der Evolutionsgleichungen für das Quergleiten in Bezug auf das primäre Gleitsystem und das Quergleitsystem (Gleichungen 4.5 - 4.10) resultiert eine symmetrische Quergleitaktivierung bei gleicher Versetzungsdichte und Schubspannung auf beiden Gleitsystemen. Abbildung 5.10(a) zeigt die Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem. Es ist zu sehen, dass bei gleicher Schubspannung ein identischer Dichteanstieg auf beiden Gleitsystemen stattfindet. Im Gegensatz zu gleitfähigen Reaktionen kann durch Quergleiten keine Abnahme der Versetzungsdichte stattfinden, da bei dem



(a) Dichte je Gleitsystem über Simulationszeit. (b) Dichteverschiebung je Gleitsystem über Simulationszeit.

Abbildung 5.10.: Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem (GS) mit Quergleiten (a) und der Beitrag des Quergleitens zur Generierung, bzw. Reduktion der Versetzungsdichte je Gleitsystem (GS) für eine ungleiche Spannungsverteilung (b). Aus [Sudmanns et al., 2019].

unteren Grenzfall einer reinen Dichteübertragung die totale Versetzungsdichte vor und nach dem Quergleitprozess konstant bleibt.

Bei einer ungleichen Spannungsverteilung auf beiden Gleitsystemen, d.h. $\tau_{1,\text{ext}} = 10 \text{ MPa}$ und $\tau_{2,\text{ext}} = 15 \text{ MPa}$, ist nur auf dem Gleitsystem mit der höheren Schubspannung ($\xi = 2$) ein signifikanter Anstieg der Versetzungsdichte zu beobachten. Im Gegensatz dazu wird die Versetzungsdichte auf Gleitsystem $\xi = 1$ reduziert. Der Beitrag des Quergleitprozesses zur Generierung ($\hat{\rho}_{\text{quer}}^{\xi}$) und zur Reduktion der Versetzungsdichte (ρ_{quer}^{ξ}) nach Gleichung (4.9) und (4.7) ist in Abbildung 5.10(b) dargestellt. Daran ist zu sehen, dass im Falle einer ungleichen Spannungsverteilung auf beiden Quergleitebenen der Quergleitprozess, wie er hier modelliert wird, zu einer Verschiebung der Generierung von Versetzungsdichte in Richtung des Gleitsystems mit der höheren Schubspannung führt.

5.2.3. Kfz Einkristall mit allen Gleitsystemen im Vergleich mit DDD

Für den Vergleich des in Kapitel 4.2 präsentierten Multiplikationsmodells mit diskreten Versetzungsdynamiksimulationen aus [Stricker et al., 2018], wird das Modell auf ein kubisches System, dargestellt in Abbildung 5.11, mit einer Abmessung von $5 \times 5 \times 5 \mu\text{m}$ und 12 kfz Gleitsystemen angewendet.

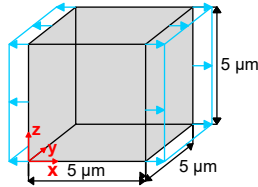


Abbildung 5.11.: Systemgeometrie entsprechend [Sudmanns et al., 2019] für den Vergleich zwischen CDD und den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen aus [Stricker et al., 2018].

Das System ist entsprechend der Konfiguration in [Stricker et al., 2018] mit einer konstanten Dehnrate von 5000s^{-1} belastet, die Verschiebungskontrolliert in x-Richtung aufgeprägt wird. Die Richtungen der Kristallorientierung entspricht dabei den Koordinatenachsen, d.h. es handelt sich um eine hochsymmetrische Orientierung. Die Seitenflächen sind spannungsfrei und Versetzungen können das Volumen an allen Oberflächen verlassen. Analog zur Untersuchung in Kapitel 5.1.2 existieren acht aktive und vier inaktive Gleitsysteme, wobei auf den inaktiven Gleitsystemen die Bedingung $v^{\xi} = 0$ gilt, um Versetzungsbewegung und Quergleitaktivität aufgrund von Spannungskonzentrationen zu verhindern. Zur zielgerichteten Untersuchung wird damit sichergestellt, dass alle Versetzungsaktivität auf inaktiven Gleitsystemen nur durch Multiplikationsmechanismen auftreten.

In der diskreten Versetzungsdynamiksimulation besteht die Ausgangskonfiguration aus einem relaxierten Versetzungsnetzwerk, wodurch in der Mitte des Systems eine höhere Versetzungsdichte vorherrscht, als im Bereich der

Oberflächen [Stricker et al., 2018]. Nur durch Berücksichtigung von Versetzungsmultiplikation, d.h. ohne die in Kapitel 4.3 beschriebenen Mechanismen, ist keine Neubildung eines stabilen Versetzungsnetzwerks im Kontinuum möglich. Dennoch wird die Charakteristik eines dichteren Versetzungsnetzwerks in der Mitte des Systems durch eine Verteilungsfunktion auf Basis der Gaußschen Normalverteilung mit einem abfallenden Gradienten der Versetzungsdichte in Richtung der Oberflächen reproduziert. Mit einem Mittelwert von $\pm 2.15 \mu\text{m}$ und einer Standardabweichung von 0.3 wird eine initiale Versetzungsdichte von $\rho^\xi = 1.6 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ je Gleitsystem in der Mitte des System zu nahe null an den Oberflächen verteilt. Dadurch beträgt die mittlere Versetzungsdichte je Gleitsystem etwa $\rho^\xi \approx 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ und die totale Versetzungsdichte etwa $\rho_{\text{tot}} = \sum_\xi \rho^\xi \approx 1.19 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$. Weiterhin gilt für die Anfangsbedingung $\kappa^\xi = 0$ und $q^\xi = 0$, sowie C_{gleit} aus Kapitel 5.2.1.

In einer ersten Untersuchung des Systemverhaltens für 12 kfz Gleitsysteme wird Quergleiten vernachlässigt, sodass nur gleitfähige Reaktionen, wie

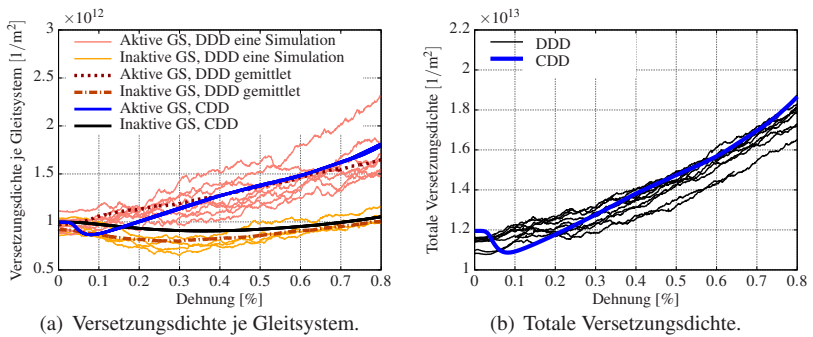


Abbildung 5.12.: Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem beschränkt auf gleitfähige Reaktionen im Vergleich zu einer und zu einer Mittelung aus 10 statistisch äquivalenten diskreten Versetzungsdynamiksimulationen aus [Stricker et al., 2018] für aktive und inaktive Gleitsysteme (a). (b): Totale Versetzungsdichte summiert über alle Gleitsysteme im Vergleich zu 10 diskreten Versetzungsdynamiksimulationen. Die CDD Ergebnisse in (a) sind für jedes Gleitsystem individuell dargestellt, wobei die jeweiligen Kurven für aktive und inaktive Gleitsysteme übereinstimmen. Aus [Sudmanns et al., 2019].

sie in Kapitel 4.2.1 für das Kontinuumsmodell beschrieben werden, zur Versetzungsmultiplikation beitragen. In Abbildung 5.12(a) ist die Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem für die aktiven und die inaktiven Gleitsysteme im Vergleich mit diskreten Versetzungsdynamiksimulationen aus [Stricker et al., 2018], für die ebenfalls nur gleitfähige Reaktionen berücksichtigt werden, dargestellt. Die Ergebnisse zeigen, dass die gleitfähigen Reaktionen auf allen aktiven Gleitsystemen zu einem deutlich stärkeren Anstieg der Versetzungsdichte führen, als auf den inaktiven Gleitsystemen. Im Gegensatz zu CDD zeigt die Evolution der Versetzungsdichte bei den diskreten Simulationen leichte Abweichungen zwischen einzelnen symmetrischen Gleitsystemen, die durch die statistischen Effekte des Versetzungsnetzwerks begründet sind. Zu Beginn der CDD Simulation ist eine Abnahme der Versetzungsdichte zu beobachten. Im weiteren Verlauf folgt der Verlauf der Versetzungsdichte in der CDD Simulation allerdings der diskreten Simulation.

Die Abbildung 5.12(b) zeigt die Evolution der totalen Versetzungsdichte in einem Vergleich mit 10 statistisch äquivalenten diskreten Versetzungsdynamiksimulationen aus [Stricker et al., 2018]. Abgesehen von der initialen Abnahme der Versetzungsdichte zeigt das Kontinuumsmodell eine Dichteevolution, die mit den diskreten Simulationen im Mittel relativ genau übereinstimmt. Die totale Versetzungsdichte zeigt einen Anstieg um etwa 50% bis zu einer Dehnung von 0.8%.

In einer zweiten Untersuchung werden gleitfähige Reaktionen und Quergleiten kombiniert. Abbildung 5.13 zeigt die Evolution der Versetzungsdichte auf den individuellen Gleitsystemen, sowie die totale Versetzungsdichte im Vergleich zu den diskreten Simulationen. Der Vergleich zeigt, dass die Evolution der Versetzungsdichte auf aktiven, wie auf inaktiven Gleitsystemen für den gegebenen Lastbereich im Bereich der diskreten Simulationen liegt. Insbesondere ist ein signifikanter Anstieg der Versetzungsdichte auf inaktiven Gleitsystemen zu beobachten. Allerdings zeigt die Versetzungsdichte in der diskreten Simulation nahezu einen linearen Verlauf, während in der CDD Simulation auf aktiven, wie auf inaktiven Gleitsystemen ein nichtlineares Verhalten zu beobachten ist. Der

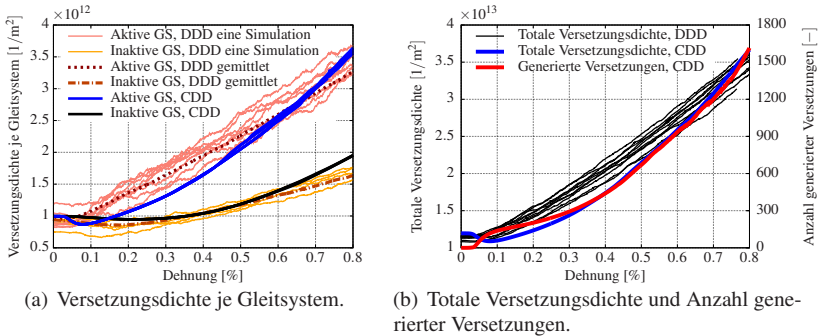


Abbildung 5.13.: Wie Abbildung 5.12, aber mit gleitfähigen Reaktionen und Quergleiten. In (b) ist zusätzlich die Anzahl generierter Versetzungen als Volumenintegral über die Krümmungsdichte (Gleichung 2.28) gezeigt. Aus [Sudmanns et al., 2019].

Dichteanstieg zu Beginn der Simulation wird in der CDD unterschätzt, nach etwa 0.4 % Dehnung allerdings überschätzt.

Analog zu Abbildung 5.12(b) zeigt Abbildung 5.13(b) einen Vergleich der Evolution der totalen Versetzungsdichte mit 10 statistisch äquivalenten diskreten Versetzungsdynamiksimulationen. Zusätzlich ist der Verlauf der Anzahl der generierten Versetzungen abgebildet (siehe Gleichung 2.28). Dieser Vergleich dient der Verbindung des Dichteanstiegs mit dem Anstieg der Anzahl der Versetzungen im Gegensatz zur Expansion existierender Versetzungen. Der Verlauf der totalen Versetzungsdichte zeigt in etwa einen Anstieg um einen Faktor 3 bis zu einer Dehnung von 0.8 %, vergleichbar mit den Ergebnissen der diskreten Simulationen. Weiterhin ist nach 0.1 % Dehnung eine Korrelation des Anstiegs der generierten Versetzungen mit der totalen Versetzungsdichte zu beobachten. Der Anstieg um einen Faktor 10 ist hier deutlich größer, als der Anstieg der totalen Versetzungsdichte. Der Verlauf ist im Gegensatz zu den diskreten Simulationen allerdings deutlich nichtlinear, wobei nach überschreiten der Fließspannung ein leichter Abfall der Versetzungsdichte zu beobachten ist. Diese initiale Dichtereduktion (Abbildung 5.13 und analog in 5.12) ist durch Versetzungsfluss durch die äußeren Systemgrenzen bedingt, was die Evolution

der Versetzungsdichte im Anfangsstadium der Simulation dominiert. In Anhang B.2 wird der Einfluss des Dichteverlusts auf den reagierenden Gleitsystemen durch die gleitfähige Reaktion (Gleichung 3.6) näher untersucht. Eine initiale Dichtereduktion wird bei der Wahl einer Ausgangskonfiguration mit $q^{\xi} > 0$ nicht beobachtet, wie in Anhang B.1 genauer beschrieben.

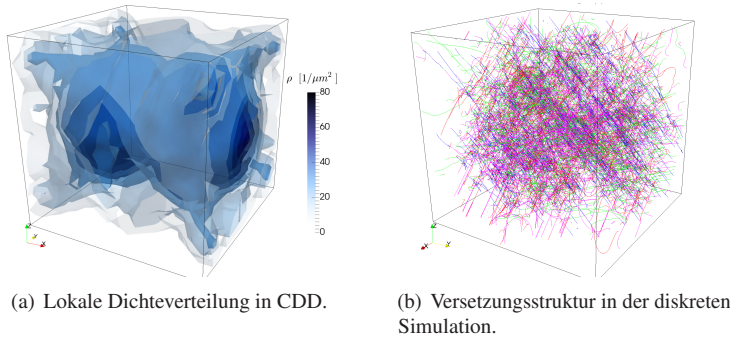


Abbildung 5.14.: Lokale Verteilung der Versetzungsdichte in der CDD Simulation in einem dreidimensionalen Kontourplot (a) und in der diskreten Versetzungsdynamiksimulation [Stricker et al., 2018] (b) bei einer Dehnung von 0.7%.

Die lokale Verteilung der Versetzungsdichte in der CDD Simulation für eine Dehnung von 0.7% ist in Abbildung 5.14(a) als dreidimensionaler Kontourplot dargestellt. Der Vergleich der Dichteverteilung mit der diskreten Versetzungsdynamiksimulation (Abbildung 5.14(b)) zeigt eine qualitativ ähnliche Verteilung: Die Versetzungsdichte ist im mittleren Bereich des Systems konzentriert und verringert sich in Richtung der Oberflächen.

Mit einer gleitsystembasierten Anwendung der von Kocks und Mecking eingeführten Theorie [Kocks und Mecking, 2003], wie sie in der Literatur zu finden ist [Kubin et al., 2008a,b, Li et al., 2014, Monavari und Zaiser, 2018, Reuber et al., 2014, Roters et al., 2019], wird eine Versetzungsmultiplikation ohne explizite Einbeziehung der physikalischen Mechanismen beschrieben. In Anhang A ist die Anwendung dieses Ansatzes durch einen Produktionsterm

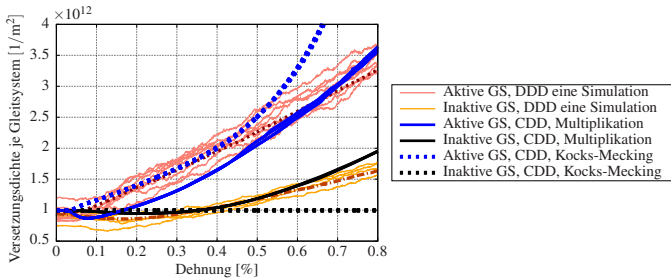


Abbildung 5.15.: Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem über der Dehnung. Vergleich der Ergebnisse mit Quergleiten und gleitfähigen Reaktionen (Abbildung 5.13(a)) und einer gleitsystembasierten Anwendung der Theorie nach Kocks und Mecking (Abbildung A.1).

entsprechend Gleichung (2.14) in der CDD näher ausgeführt. Der Vergleich der Dichteevolution je Gleitsystem für den gleitsystembasierten Ansatz (Abbildung A.1) mit dem Multiplikationsmodell (Abbildung 5.13(a)) ist in Abbildung 5.15 dargestellt. Mit dem gleitsystembasierten Ansatz zeigt sich erwartungsgemäß nur auf aktiven Gleitsystemen ein Dichteanstieg, während die Versetzungsdichte auf inaktiven Gleitsystemen bis zum Ende der Simulation ihren Ausgangswert behält.

5.3. Stabilisierung von Versetzungsnetzwerken

Für ein besseres Verständnis des in Kapitel 4.3 auf Basis der Beobachtungen in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen hergeleiteten Modells der Netzwerkmobilität werden in diesem Kapitel aufgeschlüsselt auf die einzelnen Mechanismen vereinfachte Systeme untersucht, analog zu Kapitel 4.2.1 und 4.2.2. Dabei stehen die in Kapitel 4.3 beschriebenen Mechanismen (Lomer und kollineare Reaktionen) im Fokus, wodurch die in Kapitel 5.2 untersuchten Multiplikationsmechanismen vorerst vernachlässigt werden. Unter Berücksichtigung von Lomer Reaktionen gilt daher im Allgemeinen $\rho^{\xi} \neq \rho_M^{\xi}$, $\rho_{\text{net}}^{\xi} \neq 0$,

sowie für die Produktionsterme zur Generierung neuer Versetzungen $\partial_t \bar{\rho}_M^\xi = 0$ und $\partial_t \bar{q}_M^\xi = 0$, siehe Tabelle 4.1. Für die Evolution des Versetzungssystems gilt daher die modifizierte Gleichung 4.23. Im Sinne der Komplexitätsreduzierung wird für die Untersuchung der vereinfachten Systeme auf die Anwendung eines zusätzlichen Interaktionsspannungsterms verzichtet, d.h. es gilt $\tau_{\text{H}}^\xi = 0$ in Gleichung (2.29).

5.3.1. Lomer Reaktionen in einem vereinfachten System

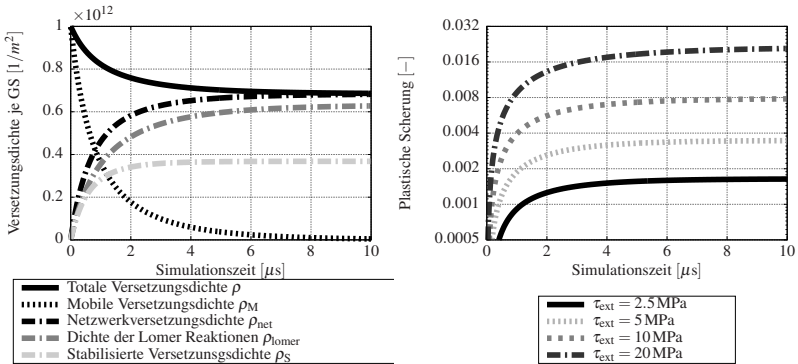
In einer ersten Untersuchung erfolgt eine Beschränkung auf Lomer Reaktionen, wodurch alle mit kollinearen Reaktionen zusammenhängenden Terme in den Gleichungen 4.23 verschwinden. Zudem werden analog zu Kapitel 5.2.1 und 5.2.2 alle Transportterme vernachlässigt, wodurch sich das Gleichungssystem 4.23 zu einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen reduziert. Zur Vereinfachung gilt die Annahme, dass sich bei gleicher Kollisionsrate der Versetzungslinien auf reagierenden Gleitsystemen die Linienlänge der gebildeten Lomer Reaktion nicht von der gleitfähigen Reaktion unterscheidet. Daher wird für die Konstante in der Reaktionsgleichung (4.14) analog zu Kapitel 5.2 $C_{\text{Lomer}} = 0.064$ gewählt. Die untersuchte Systemkonfiguration besteht aus zwei Gleitsystemen, die als Gleitsystempaar Lomer Reaktionen bilden können, wie in Abbildung 5.16 dargestellt.



Abbildung 5.16.: Schematische Übersicht der Konfiguration der zwei Gleitsysteme $\xi = 1, 2$ für die Lomer Reaktionen.

Die Ausgangskonfiguration für diese Untersuchung besteht auf beiden Gleitsystemen aus einer homogen verteilten SSD-Dichte, die vollständig als mobile Versetzungsdichte vorliegt, d.h. für die Initialdichte ρ_{init}^ξ gilt $\rho^\xi = \rho_M^\xi$. Aufgrund der vernachlässigten Versetzungsmultiplikation wird weiterhin angenommen,

dass die mittlere Krümmung zu allen Zeitpunkten verschwindet, d.h. es gilt generell $q^{\xi} = 0$. Sowohl in der Ausgangskonfiguration, als auch nach der Bildung von Reaktionen bestehen die verbliebenen mobilen Versetzungen daher aus geraden Versetzungslinien.



(a) Verlauf der Versetzungsdichten.

(b) Verlauf der plastischen Scherung.

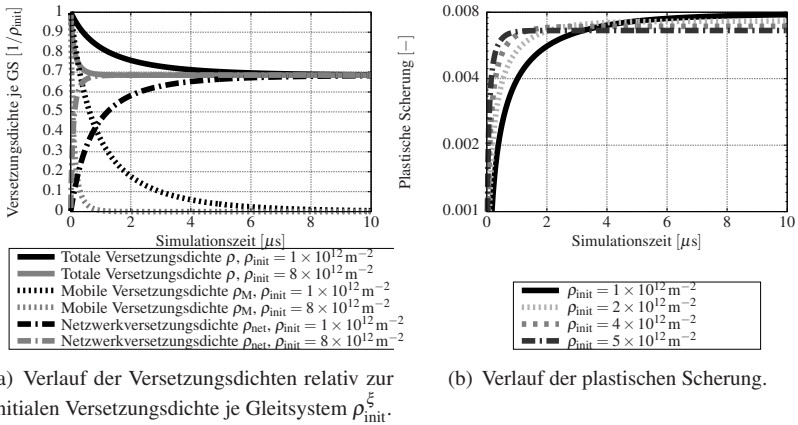
Abbildung 5.17.: Verlauf der Versetzungsdichten zur Beschreibung des Versetzungsnetzwerks (Gleichungen 4.11 und 4.13) für eine konstante Schubspannung von $\tau_{ext} = 10$ MPa (a) und der plastischen Scherung (b) je Gleitsystem über der Simulationszeit für eine Variation der Schubspannung τ_{ext} bei einer initialen mobilen Versetzungsdichte von $\rho_{init}^{\xi} = \rho_M^{\xi} = 1 \times 10^{12} m^{-2}$ je Gleitsystem.

Der Verlauf aller beteiligten Versetzungsdichten (totale Versetzungsdichte ρ^{ξ} , mobile Versetzungsdichte ρ_M^{ξ} , Netzwerkversetzungsdichte ρ_{net}^{ξ} , stabilisierte Versetzungsdichte ρ_S^{ξ} und die Dichte der Lomer Reaktionen ρ_{lomer}^{ξ}) für eine Initialdichte von $\rho_{init}^{\xi} = 1 \times 10^{12} m^{-2}$ unter einer anliegenden Schubspannung von $\tau_{ext}^{\xi} = 10$ MPa auf beiden Gleitsystemen ist in Abbildung 5.17(a) dargestellt. Es ist zu sehen, dass sich die mobile Versetzungsdichte kontinuierlich verringert, während die Netzwerkversetzungsdichte kontinuierlich ansteigt, bis letztere am Ende der Simulation gegen den Wert der totalen Versetzungsdichte konvergiert. Die totale Versetzungsdichte sinkt im Laufe der Simulation auf etwa 2/3 ihres Ausgangswertes, da eine Lomer Reaktion immer von zwei Gleitsystemen

geteilt wird, siehe Gleichung 4.13. Der dadurch bedingte Faktor 0.5 wird allerdings erst bei der Berechnung der Netzwerkversetzungsdichte berücksichtigt. Diese setzt sich aus der Dichte der Lomer Reaktionen und der stabilisierten Versetzungsdichte zusammen, siehe Gleichung (4.13). Der in Abbildung 5.17(a) gezeigte Verlauf der Dichte der Lomer Reaktionen ist daher ein Produkt der Kopplung beider Gleitsysteme. Der Verlauf der stabilisierten Versetzungsdichte liegt unterhalb der Dichte der Lomer Reaktionen, da die von der Lomer Reaktion stabilisierten Versetzungen als Reaktionspartner für weitere Reaktionen dienen können, siehe Gleichung (4.14) bzw. (4.17).

Abbildung 5.17(b) zeigt Verläufe der plastischen Scherung (Gleichung 4.12) für verschiedene konstante Schubspannungen. In allen Fällen ist eine Abflachung des Verlaufs zu beobachten, wobei für eine höhere anliegende Schubspannung eine höhere plastische Scherung erreicht wird. Die am Ende der Simulation erreichte nahezu konvergierte Scherung skaliert in etwa linear mit der anliegenden Schubspannung, da diese im Verhältnis τ^{-1} Eingang in die kritische Länge $L_{\text{cr,lomer}}^{\xi}$ (Gleichung 4.20), bzw. entsprechend in den Anteil der stabilen Lomer Reaktionen $\eta_{\text{lomer}}^{\xi}$ (Gleichung 4.21) findet. Letzterer Anteil beschreibt den Anteil der Lomer Reaktionen, der nach der Begegnung der beteiligten Versetzungslinien als stabile Reaktion verbleibt und damit zu einer Stabilisierung des Netzwerks führt, siehe Gleichung (4.17) und Abbildung 4.4(b).

Der Verlauf der beteiligten Versetzungsdichten im Vergleich zu einer höheren initialen Versetzungsdichte von $\rho_{\text{init}}^{\xi} = 8 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ bei einer konstanten Schubspannung von $\tau_{\text{ext}} = 10 \text{ MPa}$ auf beiden Gleitsystemen ist in Abbildung 5.18(a) dargestellt. Der Verlauf ist dabei als Verhältnis zur initialen Versetzungsdichte ρ_{init}^{ξ} aufgetragen. Bei der höheren initialen Versetzungsdichte ist eine deutliche schnellere Umwandlung der mobilen Versetzungsdichte in ein stabiles Netzwerk, beschrieben durch die Netzwerkversetzungsdichte, zu beobachten.



(a) Verlauf der Versetzungsdichten relativ zur initialen Versetzungsdichte je Gleitsystem ρ_{init}^{ξ} .

(b) Verlauf der plastischen Scherung.

Abbildung 5.18.: Wie Abbildung 5.17 aber für eine Variation der initialen mobilen Versetzungsdichte für eine konstante Schubspannung von $\tau_{\text{ext}} = 10 \text{ MPa}$.

Der konvergierte Zustand, insbesondere der relative Anteil der beteiligten Versetzungsdichten ist allerdings unabhängig von der gewählten initialen Versetzungsdichte. Es gilt daher nicht nur $\eta_{\text{lomer}}^{\xi} \propto \tau^{-1}$ (Abbildung 5.17), sondern auch $\eta_{\text{lomer}}^{\xi} \propto \sqrt{\rho}$, siehe Gleichung (4.21). Konsequenterweise ist die plastische Scherung am Ende der Simulation nahezu unabhängig von der initial gewählten mobilen Versetzungsdichte. Der leichte Unterschied in der erreichten plastischen Scherung kommt durch die Tatsache zustande, dass die minimale Länge L_{min} in Gleichung (4.21) ebenso wie die maximale Länge L_{max} mit der Versetzungsdichte skaliert. Der Zähler von $\eta_{\text{lomer}}^{\xi}$ ist daher durch die Differenz $L_{\text{cr,lomer}}^{\xi} - L_{\text{min}}$ von der Versetzungsdichte abhängig. Ein deutlicher Unterschied im Verlauf für verschiedene initiale Versetzungsdichten zeigt sich vor allem in der Evolution der plastischen Scherung. Analog zu Abbildung 5.18(a) ist für eine höhere initiale Versetzungsdichte ist eine schnellere Konvergenz zu beobachten.

5.3.2. Kollineare Reaktionen in einem vereinfachten System

Die zweite Untersuchung beschränkt sich auf kollineare Reaktionen, wodurch vorerst alle mit Lomer Reaktionen zusammenhängende Terme vernachlässigt werden. Es gilt daher grundsätzlich $\rho^\xi = \rho_M^\xi$ und $\rho_{\text{net}}^\xi = 0$. Die Formulierung der kollinearen Reaktion in Kapitel 4.3.1 (Gleichung 4.14 mit $(\)_{\text{reakt}} = (\)_{\text{koll}}$) führt zu einer Dichtereduktion auf beiden Gleitsystemen (Gleichung 4.15 mit $(\)_{\text{reakt}} = (\)_{\text{koll}}$), siehe auch Tabelle 4.1. Ohne Berücksichtigung weiterer Versetzungsreaktionen reduziert sich das Gleichungssystem (4.23) damit auf die Beschreibung einer Versetzungsannihilation. Zur Vereinfachung gilt analog zu Kapitel 5.3.1 für die Konstante in der Reaktionsgleichung (4.14) $C_{\text{koll}} = 0.064$.



Abbildung 5.19.: Schematische Übersicht der Configuration der zwei Gleitsysteme $\xi = 1, 2$ kollineare Reaktionen.

Die untersuchte Konfiguration besteht aus zwei Gleitsystemen, die als Gleitsystempaar kollineare Reaktionen bilden können, wie in Abbildung 5.19 visualisiert. Physikalisch gesehen, teilen sich beide Gleitsysteme einen Burgers Vektor. Da in dem vorliegenden, künstlichen System die Untersuchung des Modells in einem möglichst einfachen System im Vordergrund steht, wird allerdings auf die Nachbildung einer physikalischen Gleitsystemkonfiguration verzichtet.

Der Verlauf der plastischen Scherung für eine initiale Versetzungsdichte von $\rho_{\text{init}}^\xi = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ auf beiden Gleitsystemen und verschiedenen konstanten Schubspannungen ist in Abbildung 5.20 dargestellt. Es wird beobachtet, dass sich die plastische Scherung für verschiedene Schubspannungen einem ähnlichen Wert annähert. Aufgrund der Annahme in Kapitel 4.3.1, dass kollineare Reaktionen im Gegensatz zu Lomer Reaktionen immer eine Annihilation von Versetzungslinien zur Folge hat, gilt $\eta_{\text{koll}}^\xi = 1$. Daher beinhaltet die Reaktionsrate (Gleichung 3.5) für kollineare Reaktionen über die Beschreibung

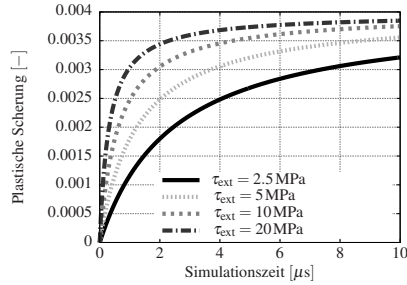
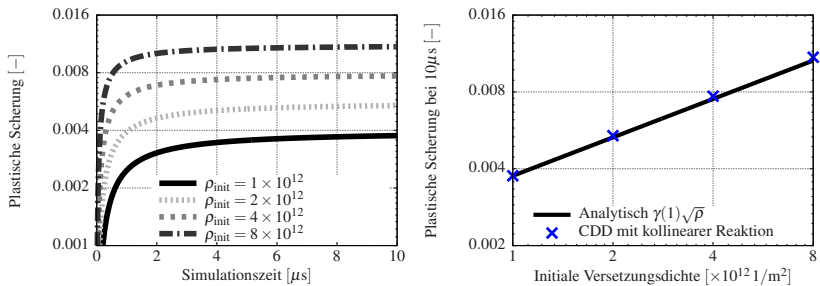


Abbildung 5.20.: Verlauf der plastischen Scherung mit kollinearen Reaktionen für verschiedene Schubspannungen mit einer initialen Versetzungsdichte von $\rho_{init} = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$.

der Versetzungsgeschwindigkeit (Gleichung 2.29) eine direkte Spannungsabhängigkeit, welche die höhere Rate der plastischen Abscherung bei höherer Schubspannung (Gleichung 4.12) kompensiert.

Für eine Variation der initialen Versetzungsdichte bei einer gegebenen Schubspannung von $\tau_{ext} = 10 \text{ MPa}$ ist hingegen eine höhere plastische Scherung



(a) Verlauf der plastischen Scherung für eine Variation der initialen Versetzungsdichte.

(b) Plastische Scherung über initialer Versetzungsdichte.

Abbildung 5.21.: Verlauf der plastischen Scherung mit kollinearen Reaktionen für verschiedene initiale Versetzungsdichten mit einer konstante Schubspannung von $\tau_{ext} = 10 \text{ MPa}$ (a), sowie die plastische Scherung bei einer Simulationszeit von $10 \mu \text{ s}$ für vier untersuchte initiale Versetzungsdichten im Vergleich zu einer Darstellung der analytischen Funktion $\gamma(1)\sqrt{\rho}$ (b). Hier bezeichnet $\gamma(1)$ die nach $10 \mu \text{ s}$ erreichte plastische Scherung für eine initiale Versetzungsdichte von $\rho_{init} = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$.

mit höherer initialer Versetzungsdichte zu beobachten, wie in Abbildung 5.21(a) dargestellt. Die maximal erreichten Scherung ist dabei proportional zu $\sqrt{\rho}$, wie durch den Vergleich der plastischen Scherung bei einer Simulationszeit von $10\mu\text{s}$ mit der analytischen Funktion $\gamma(1)\sqrt{\rho}$ deutlich wird, dargestellt in Abbildung 5.21(b). Der Faktor $\gamma(1)$ bezeichnet hier die plastische Scherung nach $10\mu\text{s}$ für eine initiale Versetzungsdichte von $\rho_{\text{init}}^{\xi} = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ und skaliert den Ausgangspunkt der Betrachtung.

5.4. Versetzungsmultiplikation und Netzwerkmobilität

In diesem Kapitel wird das in Kapitel 4.1 beschriebene Zusammenspiel der Teilaspekte (a) *Versetzungsmultiplikation* und (b) *Limitierung der Versetzungsbewegung* durch das Versetzungsnetzwerk untersucht, siehe auch Abbildung 4.1. Die Zusammenführung der beiden Aspekte erfolgt dabei mit dem Ziel einer Reproduktion der in Kapitel 4.1 beschriebenen Beobachtungen zur Versetzungsmobilität in Netzwerken durch das Gesamtmodell aus Kapitel 4. Analog zu Kapitel 5.2 erfolgt zu Beginn eine Untersuchung des Zusammenspiels aus gleitfähigen und Lomer Reaktionen in einem vereinfachten System, bevor das Gesamtmodell anschließend in einem hochsymmetrischen kfz Einkristall mit Ergebnissen aus [Stricker et al., 2018] verglichen wird.

5.4.1. Lomer Reaktionen in Zusammenspiel mit Versetzungsmultiplikation

Für eine erste Untersuchung des Zusammenspiels aus Versetzungsmultiplikation und Evolution des Versetzungsnetzwerks wird die Gleitsystemkonfiguration aus Kapitel 4.2.1 verwendet. Diese Konfiguration beinhaltet neben den drei

Gleitsystempaaren für gleitfähige Reaktionen nun auch drei Paare aus Lomer Reaktionen, wie in Abbildung 5.22 visualisiert.



Abbildung 5.22.: Schematische Übersicht der Konfiguration der drei Gleitsysteme $\xi = 1, 2, 3$ gleitfähigen und Lomer Reaktionen im Zusammenspiel.

Analog zu Kapitel 5.2.1 wirkt auf den Gleitsystemen $\xi = 1$ und $\xi = 2$ eine konstante externe Schubspannung von $\tau_{1,\text{ext}} = \tau_{2,\text{ext}} = 15 \text{ MPa}$, sowie Spannungsfreiheit auf Gleitsystem $\xi = 3$. Da hier nicht der Dichtetransfer aufgrund von gleitfähigen Reaktionen im Vordergrund steht, sondern das Zusammenspiel aus Versetzungsmultiplikation und Stabilisierung von Versetzungen, gilt nun vereinfachend eine einheitliche initiale Versetzungsdichte von $\rho_{\text{init}}^{\xi} = \rho^{\xi} = \rho_{\text{M}}^{\xi} = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ mit $q^{\xi} = 0$ auf allen Gleitsystemen. Weiterhin werden alle Transportterme in dem Gleichungssystem (4.23) vernachlässigt, wodurch im Folgenden generell $\|\kappa^{\xi}\| = 0$ gilt. Weiterhin gilt vereinfachend $C_{\text{gleit}} = C_{\text{lomer}} = 0.064$.

Zu Beginn wird eine Simulation ohne eine zusätzliche Interaktionsspannung betrachtet, d.h. es gilt $v^{\xi} = \frac{b}{B} \tau_{\text{ext}}^{\xi}$, siehe Gleichung (2.29). Der Verlauf der Versetzungsdichten zur Beschreibung der Evolution des Versetzungsnetzwerks (totale Versetzungsdichte ρ^{ξ} mit ihrer Aufteilung in die mobile Versetzungsdichte ρ_{M}^{ξ} und Netzwerkversetzungsdichte ρ_{net}^{ξ}) ist in Abbildung 5.23(a) dargestellt. Die totale Versetzungsdichte auf den aktiven Gleitsystemen zeigt einen Anstieg bis auf ein zehnfaches ihres Ausgangswertes, bevor der Verlauf in eine Horizontale übergeht. Auch auf den inaktiven Gleitsystemen erhöht sich die totale Versetzungsdichte aufgrund von gleitfähigen Reaktionen und beträgt am Ende der Simulation etwa die Hälfte der Dichte auf den aktiven Gleitsystemen. Die mobile Versetzungsdichte zeigt auf aktiven, als auch auf inaktiven Gleitsystemen

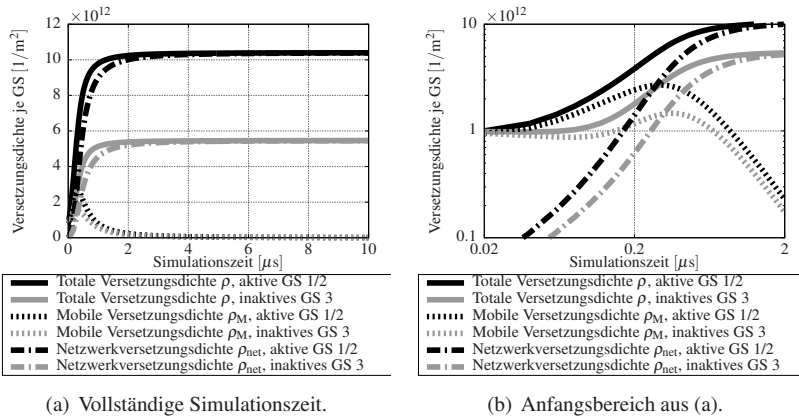


Abbildung 5.23.: Verlauf der Versetzungsdichten zur Beschreibung des Versetzungsnetzwerks (Gleichungen 4.11 und 4.13) je Gleitsystem (GS) mit Lomer und gleitfähigen Reaktionen ohne einer zusätzlichen Interaktionsspannung über die vollständige Simulationszeit (a) und der Anfangsbereich der Simulation in einem doppelt-logarithmischen Darstellung (b).

zu Beginn der Simulation einen leichten Anstieg, bevor sie ab einer Simulationszeit von etwa $2 \mu\text{s}$ allmählich verschwindet, siehe den Anfangsbereich der Simulation in Abbildung 5.23(b). Die totale Versetzungsdichte besteht dann nahezu vollständig aus Netzwerkversetzungsdichte, d.h. aus Versetzungen, die durch Lomer Reaktionen stabilisiert wurden, oder Teil einer solchen Reaktion sind.

Da in diesem vereinfachten Beispiel Lomer Reaktionen signifikant zur totalen Versetzungsdichte beitragen, bietet es sich an, die Hinderniswirkung der gebildeten Reaktionen auf verbleibende mobile Versetzungen zu berücksichtigen. Wie in Kapitel 4.4 beschrieben, erfolgt dies durch eine modifizierte Interaktionsspannung, siehe Gleichung (4.25). Zur Vereinfachung wird hier nur der Beitrag der Lomer Reaktionen betrachtet, d.h. es gilt $a^{\xi\xi} = 0$. Damit gilt Gleichung (4.24), wobei für a_{Lomer} der in Tabelle 2.1 genannte Wert gilt. Der Verlauf der Versetzungsdichten für diesen Fall (Abbildung 5.24) unterscheidet

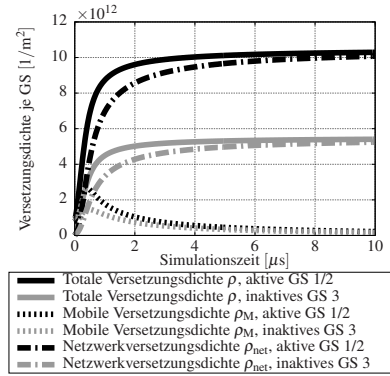
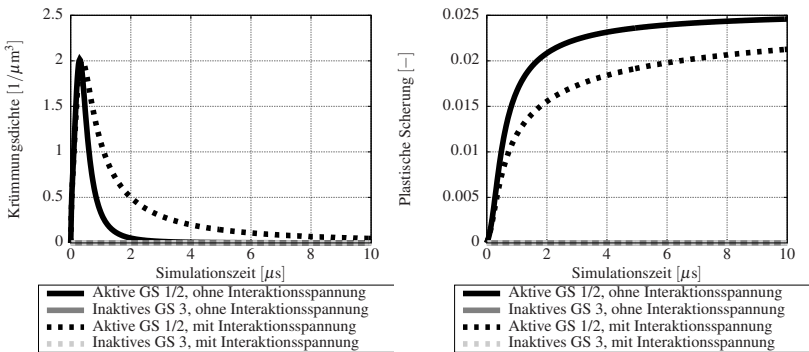


Abbildung 5.24.: Wie Abbildung 5.23(a) nur mit einer zusätzlichen Interaktionsspannung von

$$\tau_{cr, \text{loimer}}^{\xi} = Gb\sqrt{a_{\text{loimer}} \sum_{\xi} \rho_{\text{loimer}}^{\xi}} \quad (\text{Gleichung 4.24}).$$

sich qualitativ nicht von der Rechnung ohne zusätzliche Interaktionsspannung. Lediglich die Evolution und anschließende Konvergenz der verschiedenen Versetzungsdichten ist verzögert.



(a) Krümmungsdichte.

(b) Plastische Scherung.

Abbildung 5.25.: Verlauf der Krümmungsdichte (a) und der plastischen Scherung (b) je Gleitsystem im Vergleich mit und ohne einer zusätzlichen Interaktionsspannung.

Die Evolution der Krümmungsdichte im Vergleich mit und ohne zusätzliche Interaktionsspannung ist in Abbildung 5.25(a) dargestellt. Nach einem initialen Anstieg auf aktiven Gleitsystemen, bedingt durch die Generierung neuer Versetzungen durch gleitfähige Reaktionen, ist proportional zur Evolution der mobilen Versetzungsdichte (Abbildung 5.23) eine Verringerung der Krümmungsdichte bis zu einem nahezu vollständigen Verschwinden zu beobachten. Dabei ist die Verringerung nach dem initialen Anstieg mit Verwendung der zusätzlichen Interaktionsspannung verzögert. Auf inaktiven Gleitsystemen ist die Krümmungsdichte stets null. Für den Verlauf der plastischen Scherung (Abbildung 5.25(b)) wird auf aktiven Gleitsystemen nach einem initialen Anstieg eine Abflachung beobachtet, die allerdings bis zum Ende der Simulation nicht vollständig in eine Horizontale übergeht. Die Kurve mit zusätzlicher Interaktionsspannung verläuft für einen Großteil der Simulationszeit stets unterhalb der Kurve ohne Interaktionsspannung. Zu beachten ist allerdings, dass zu Beginn der Simulation mangels existierender Lomer Reaktionen keine signifikante Abweichung beider Kurven vorliegt. Auf inaktiven Gleitsystemen erfolgt keine Abscherung.

5.4.2. Kfz Einkristall mit allen Gleitsystemen im Vergleich mit DDD

Die Untersuchung des Gesamtmodells bestehend aus gleitfähigen, Lomer, kollinearen Reaktionen, sowie Quergleiten erfolgt mit dem Ziel der Reproduktion der Ergebnisse der diskreten Versetzungsdynamiksimulation [Stricker et al., 2018] unter Berücksichtigung der Evolution von Versetzungsnetzwerken. Der Systemaufbau und der Belastungszustand ist analog zu Kapitel 5.2.3. Die Hinderniswirkung des Versetzungsnetzwerks auf die mobile Versetzungsdichte wird über einen Interaktionsspannungsterm nach Gleichung (4.25) abgebildet. In Anhang C ist die Untersuchung des Einflusses solcher Spannungsterme in der gegebenen Konfiguration auf den Verlauf der Versetzungsdichte

und die Verfestigung näher ausgeführt. Die initiale Versetzungsconfiguration reproduziert ein stabiles Versetzungsnetzwerk und wird durch eine Verteilung aus einer Dichte der Lomer Reaktionen ($\rho_{\text{lomer}}^{\xi}$) und stabilisierter Versetzungsdichte (ρ_{S}^{ξ}) approximiert. Für die Anfangsdichte gilt je Gleitsystem $\rho_{\text{lomer}}^{\xi} = 0.55 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ und $\rho_{\text{S}}^{\xi} = 0.55 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ und damit eine totale Versetzungsdichte von $\rho_{\text{tot}} = \sum_{\xi} \rho_{\text{net}}^{\xi} = \sum_{\xi} (0.5\rho_{\text{lomer}}^{\xi} + \rho_{\text{S}}^{\xi}) \approx 1 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$. Weiterhin gilt als Anfangsbedingung $\rho_{\text{M}}^{\xi} = 0$ und $q^{\xi} = 0$. Die Stärke des initialen Versetzungsnetzwerks ist dabei durch $L_{\text{min}} = 0.1/\sqrt{\sum_{\xi} \rho^{\xi}}$ und $L_{\text{max}} = 2/\sqrt{\sum_{\xi} \rho^{\xi}}$ gegeben, siehe Gleichung (4.21).

Im Folgenden liegt der Fokus zum einen auf dem Vergleich mit der diskreten Versetzungsdynamik und anderen in der Untersuchung des Einflusses der Reaktionsparameter, sowie des Versetzungsflusses. Für eine Reduktion der Systemkomplexität werden zu Beginn alle Flussterme des Gleichungssystems (4.23) vernachlässigt. Die Reaktionskonstanten C_{gleit} , C_{lomer} und C_{koll} in Gleichung (4.14) werden vereinfachend zu C_{reakt} zusammengefasst und zwischen $C_{\text{reakt}} = 0.032$ und $C_{\text{reakt}} = 0.064$ variiert. Für $C_{\text{reakt}} = 0.032$ ist der Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem im Vergleich zu diskreten Versetzungsdynamiksimulationen¹ aus [Stricker et al., 2018] in Abbildung 5.26(a) gegeben. Es ist zu sehen, dass der in den diskreten Simulation beobachtete Anstieg der Versetzungsdichte durch die lokale CDD Simulation nahezu ohne signifikante Abweichungen abgebildet wird. Die Anfangsversetzungsdichte bestehend aus ρ_{net}^{ξ} reduziert sich nach Überschreiten der Fließgrenze zu Gunsten der mobilen Versetzungsdichte ρ_{M}^{ξ} , wie in Abbildung 5.26(b) zu sehen ist. Hierfür ist ein Auflösen der Lomer Reaktionen notwendig. Aufgrund der Gewichtung der Dichte der Lomer Reaktionen mit einem Faktor 0.5 (siehe Gleichung 4.13), führt dieser Vorgang zu einem kurzen, überproportional starken Anstieg der Versetzungsdichte, siehe Abbildung 5.26(a) und 5.26(b). Nach der initialen Mobilisierung steigt die mobile Versetzungsdichte und die Netzwerkversetzungsdichte auf aktiven, wie auf inaktiven Gleitsystemen linear und gleichmäßig an. Ebenso zeigt

¹ Identisch zu Abbildung 5.13(a)

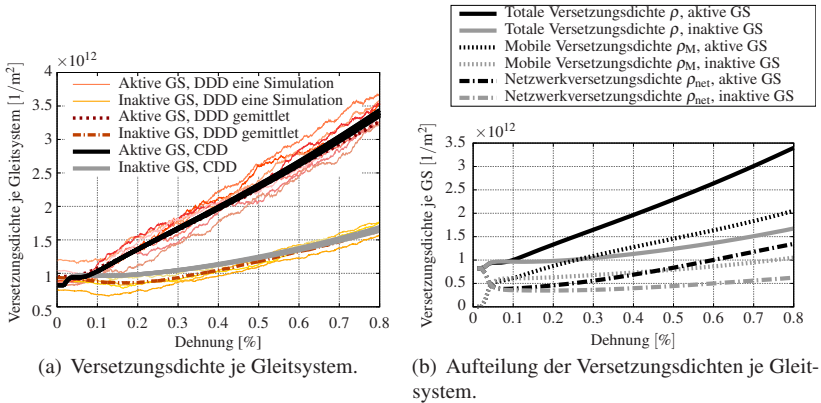


Abbildung 5.26.: Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit allen berücksichtigten Versetzungsmechanismen, wie in Abbildung 4.1 dargestellt, im Vergleich zu einer und zu einer Mittelung aus 10 statistisch äquivalenten diskreten Versetzungsdynamiksimulationen aus [Stricker et al., 2018] für aktive und inaktive Gleitsysteme (a), sowie der Verlauf der mobilen Versetzungsdichte und der Netzwerkversetzungsdichte (b).

der Verlauf der totalen Versetzungsdichte einen relativ linearen Anstieg, der sehr nahe an der Vorhersage der diskreten Simulationen liegt, wie in Abbildung 5.27 gezeigt.

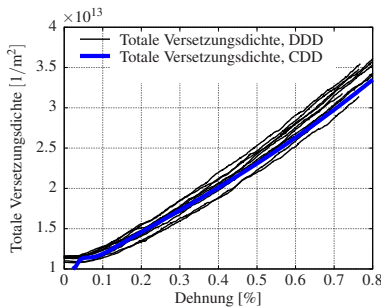


Abbildung 5.27.: Evolution der totalen Versetzungsdichte im Vergleich zu 10 diskreten Versetzungsdynamiksimulationen.

Es kann allerdings gezeigt werden, dass diese Beobachtung deutlich von der Wahl der Reaktionskonstanten abhängig ist. Der Vergleich der Dichteverläufe je Gleitsystem für Reaktionskonstanten von $C_{\text{reakt}} = 0.064$ ist im Vergleich zu der CDD Simulation aus Abbildung 5.26(a) in Abbildung 5.28(a) dargestellt.

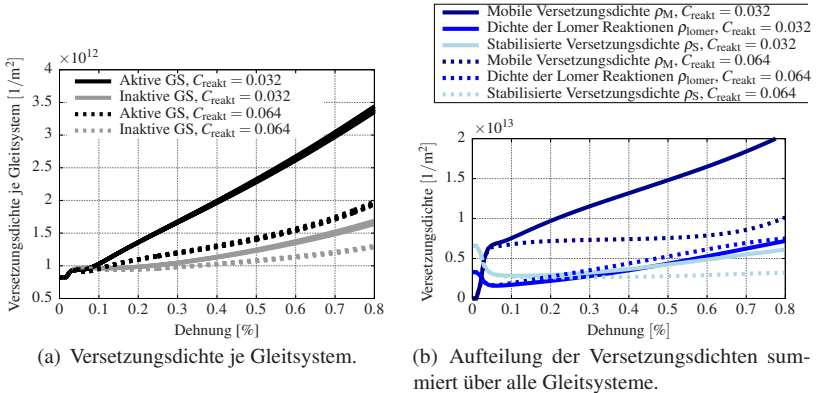
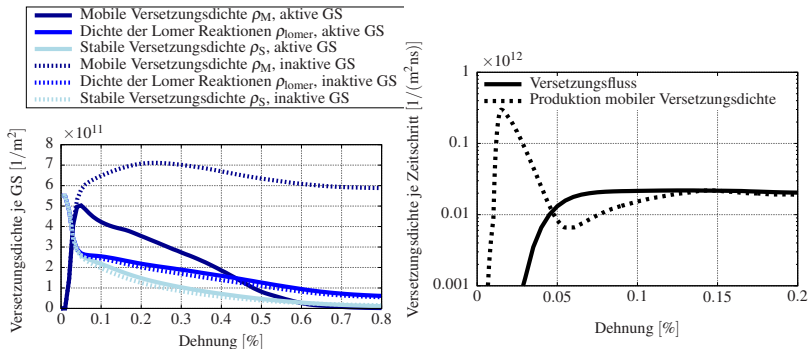


Abbildung 5.28.: Evolution der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit allen berücksichtigten Versetzungsmechanismen für Reaktionskonstante $C_{\text{reakt}} = 0.032$ und $C_{\text{reakt}} = 0.064$ (a), sowie der Verlauf der mobilen Versetzungsdichte, der Dichte der Lomer Reaktionen und der stabilisierten Versetzungsdichte summiert über alle 12 Gleitsysteme für eine lokale Formulierung (b).

Es ist zu sehen, dass insbesondere der Anstieg der Versetzungsdichte auf den aktiven Gleitsystemen für beide Reaktionskonstanten signifikant voneinander abweicht. Zur näheren Untersuchung dieser Beobachtung ist der Verlauf der beteiligten Versetzungsdichten ρ_M^ξ , ρ_{lomer}^ξ und ρ_S^ξ für beide Reaktionskonstanten in Abbildung 5.28(b) summiert über alle Gleitsysteme aufgetragen. Während für $C_{\text{reakt}} = 0.032$ alle beteiligten Versetzungsdichten nach einer Dehnung von etwa 0.05% mit vergleichbarer Steigung ansteigen, ist mit $C_{\text{reakt}} = 0.064$ für ρ_M^ξ und ρ_S^ξ bis zum Ende der Simulation ein nahezu horizontaler Verlauf erkennbar. Nur die Dichte der Lomer Reaktionen ρ_{lomer}^ξ zeigt einen nahezu linearen Anstieg, der sich am Ende der Simulation fast dem Wert der mobilen Versetzungsdichte ρ_M^ξ annähert.

Für die Untersuchung des Zusammenwirkens der Versetzungsreaktionen mit dem Versetzungsfluss werden Reaktionsparameter von $C_{\text{reakt}} = 0.032$ verwendet (analog zu Abbildung 5.26) und alle Flussterme im Gleichungssystem (4.23) berücksichtigt. In Abbildung 5.29(a) sind die Verläufe der beteiligten Versetzungsdichten je Gleitsystem für $C_{\text{reakt}} = 0.032$ getrennt für aktive und inaktive Gleitsysteme dargestellt.



(a) Aufteilung der Versetzungsdichten je Gleitsystem.

(b) Mittlerer Versetzungsfluss und Produktion von Versetzungsdichte je Zeitschritt im Anfangsbereich der Simulation.

Abbildung 5.29.: Aufteilung der Versetzungsdichten je Gleitsystem für eine nichtlokale Formulierung mit $C_{\text{reakt}} = 0.032$ (a). Mittlerer Versetzungsfluss ($\partial_t \rho_F$, Gleichung 5.2) und Produktion von mobiler Versetzungsdichte ($\partial_t \rho_Q$, Gleichung 5.1) je Zeitschritt summiert über alle aktiven Gleitsysteme im Anfangsbereich der Simulation (b).

Im Unterschied zu Abbildung 5.28(b) wird die Dichte der Lomer Reaktionen in diesem Fall, wie durch Gleichung (4.17) vorgegeben, den jeweiligen Gleitsystemen zugewiesen. Es ist zu sehen, dass die mobile Versetzungsdichte zu Beginn der Simulation stark ansteigt und dann auf den aktiven Gleitsystemen ab einer Dehnung von etwa 0.05% kontinuierlich fast bis zum Verschwinden abfällt. Auf den inaktiven Gleitsystemen zeigt sich hingegen ein relativ horizontaler Verlauf der mobilen Versetzungsdichte. Die Dichte der Lomer Reaktionen und die stabilisierte Versetzungsdichte zeigt im Zuge der initialen Mobilisierung des Versetzungsnetzwerks einen abrupten Abfall, der auf aktiven und auf inaktiven

Gleitsystemen in einen langsamen Rückgang übergeht. Auffallend ist zudem, dass die stabilisierte Versetzungsdichte nach einer Dehnung von etwa 0.05 % deutlich schneller absinkt, als die Dichte der Lomer Reaktionen.

Für eine Untersuchung des Zusammenspiels zwischen den Versetzungsmechanismen und dem Versetzungsfluss in Bezug auf die Dichteentwicklung kann die Evolutionsgleichung der mobilen Versetzungsdichte des Gleichungssystems (4.23) näher betrachtet werden. Insbesondere bietet es sich an, die Terme der Evolutionsgleichung, die Versetzungsdichte *innerhalb* eines Elementvolumen erhöhen, oder verringern, getrennt von den *Transporttermen*, die existierende Versetzungsdichte über Elementgrenzen transportieren, zu betrachten. Die Versetzungsdichte, die *innerhalb* eines Elementvolumens erhöht, oder verringert wird, wird durch die Summe aller Quellterme (Generierung abzüglich Reduktion von Linienlänge) ausgewertet und mit ρ_Q bezeichnet:

$$\partial_t \rho_Q = \sum_{\xi}^{N_{\text{akt}}} \left(v^{\xi} q^{\xi} + \partial_t \hat{\rho}_M^{\xi} + \partial_t \hat{\rho}_M^{\xi} + \partial_t \rho_{M,\text{reakt}}^{\xi} + \partial_t \rho_{M,\text{quer}}^{\xi} \right), \quad (5.1)$$

wobei N_{akt} die Anzahl aktiver Gleitsysteme bezeichnet. Die Versetzungsdichte, die das Elementvolumen V über *Versetzungstransport* verlässt, wird hingegen über das Integral des Versetzungsflusses über alle Seitenflächen A des Elementvolumens ausgewertet und mit ρ_F bezeichnet:

$$\partial_t \rho_F = \frac{1}{V} \sum_{\xi}^{N_{\text{akt}}} \int_A v^{\xi} \kappa_{\perp}^{\xi} dA \quad (5.2)$$

Abbildung 5.29(b) zeigt das Mittel des Versetzungsflusses im Vergleich zu dem Mittel der Produktion von Versetzungsdichte aller Elemente des Gesamtvolumens je Zeitschritt für den Anfangsbereich der in Abbildung 5.29(a) gezeigten Simulation. Es ist zu sehen, dass zu Beginn der Evolution ein deutlicher Überschuss an Produktion von mobiler Versetzungsdichte vorherrscht, nach einer Dehnung von 0.05 % allerdings der Versetzungsfluss die Dichteproduktion übersteigt.

6. Diskussion

In diesem Kapitel werden die in Kapitel 5 beschriebenen Simulationsergebnisse im Vergleich zu der diskreten Versetzungsdynamik diskutiert, sowie mit experimentellen Beobachtungen in Zusammenhang gesetzt. In Kapitel 6.1 erfolgt zunächst auf Basis von Kapitel 3 eine Diskussion der Homogenisierung diskreter Versetzungsevolution mittels Kontinuumsvariablen im Kontrast zur gleitsystemgebundenen Versetzungsbewegung. Im Anschluss erfolgt in Kapitel 6.2 eine Untersuchung der gleitsystemübergreifenden Versetzungsinteraktion mittels Mobilitätsgesetzen. In Kapitel 6.3 werden als Hinführung zur Mobilität von Versetzungsnetzwerken zunächst die Implikationen von Versetzungsreaktionen auf eine gleitsystemgebundene Kontinuumsformulierung diskutiert. Anschließend wird der Aspekt der Versetzungsmultiplikation, sowie die Stabilisierung von Versetzungsbewegung durch Netzwerke näher untersucht. Die entwickelten Kontinuumsmodelle werden dabei mit diskreten Versetzungsdynamiksimulationen verglichen und die Unterschiede zu bestehenden versetzungsbasierten Ansätzen, die der Theorie von Kocks und Mecking [Kocks und Mecking, 2003] folgen, diskutiert. Abschließend erfolgt in Kapitel 6.4 eine weiterführende Diskussion der Modellierung von Versetzungsnetzwerken im Übergangsbereich zwischen lokaler und nichtlokaler Kontinuumsformulierung.

6.1. Versetzungsdichte und Plastizität

In Kapitel 3 werden die Implikationen der mechanistischen Modellierung gleitsystemübergreifender Versetzungsmechanismen auf eine gleitsystemgebundene

Formulierung der Versetzungsbewegung und der plastischen Scherung beschrieben und untersucht. Die Bewegung der Versetzung, ihre Expansion und damit die Erhöhung der Versetzungsdichte ist an das jeweilige Gleitsystem gebunden. In der Konsequenz ist auch die Plastizität, d.h. die durch Orowans Gleichung (2.12) beschriebene Abscherung der Kristallebenen, gleitsystemgebunden. Aus numerischer Betrachtungsweise bedingt dies eine Formulierung von Evolutionsgleichungen der internen Variablen, die für alle Gleitsysteme individuell vorgenommen werden (Gleichungssystem 2.25). Weiterhin erfordert der gleitsystembasierte Ansatz eine konzeptionelle Überführung des Liniencharakters von Versetzungen in Kontinuumsvariablen, die für jedes Gleitsystem als interne Variablen geführt werden. Die Versetzungen können dabei in Netzwerken über mehrere Gleitsysteme miteinander verknüpft sein [Basinski und Basinski, 1979, Pande und Hazzledine, 1971a,b, Stricker et al., 2018]. Dies erklärt die terminologische und konzeptionelle Trennung der *Versetzungslinie* von der *Versetzung* (Kapitel 2.3). Die kinematische Formulierung der Versetzungsbewegung in der CDD nach [Hochrainer et al., 2014] hat hierbei die Eigenschaft, dieser terminologischen Trennung einer gekrümmten Versetzung in ein zählbares Objekt und in eine gerichtete Defektlinie entsprechende Kontinuumsvariablen zuzuweisen. Während die Versetzungsdichte ρ^{ξ} in integraler Form der Linienlänge entspricht, kann die Krümmungsdichte q^{ξ} in integraler Form im Verhältnis zu 2π bei gleichem Liniensinn aller Versetzungslinien als Anzahl der Versetzungen interpretiert werden, siehe Gleichung (2.28). Die Verbindung zur plastischen Abscherung besteht darin, dass die Versetzung die Umrandung des abgesicherten Bereichs definiert und in ihrer Eigenschaft als Versetzungslinie dieser Umrandung eine Richtung, eine Orientierung und eine Linienlänge zuweist. Die Kinematik der CDD beschreibt die Versetzungsbewegung in Kombination mit der Verlängerung der Umrandung des abgesicherten Bereichs. Die Formulierung stellt damit die Verbindung zur Definition und terminologischen Trennung von Versetzung und Versetzungslinie in Kapitel 2.1 her, siehe auch Gleichung (3.1). Die beobachtete Erhöhung der Linienlänge, d.h. Versetzungsdichte, im Zuge der Versetzungsexpansion in Abbildung 3.1 ist demnach kein Mechanismus,

der durch eine Art der Versetzungsinteraktion zustande kommt, sondern eine notwendige Konsequenz aus der Bewegung der Versetzungslinie selbst.

Für die Beschreibung einer konservativen Versetzungsbewegung erscheint die planare Expansion geschlossener Versetzungen und die damit verbundene Abscherung konzeptionell vernünftig. Physikalisch gesehen kann die Evolution einer Versetzung allerdings durch verschiedene gleitsystemübergreifende Mechanismen bedingt sein. In der Stufe II der Einkristallverformung stellen Versetzungsreaktionen und Quergleiten hierbei die wichtigsten Mechanismen dar. Alle diese Mechanismen haben gemein, dass sie konzeptionell die Versetzung in ihrer Gesamtheit intakt lassen, während ein Teil ihrer Linienlänge durch Versetzungsmultiplikation, oder Annihilationsmechanismen beeinflusst wird. Dies wird insbesondere in den zugrundeliegenden diskreten Versetzungsdynamiksimulationen aus [Stricker et al., 2018] deutlich. Diese zeigen bei einem Zugversuch in einer hochsymmetrischen [100] Kristallorientierung einen signifikanten Anstieg der Versetzungsdichte auf den vier inaktiven Gleitsystemen, wie z.B. in Abbildung 5.13(a) zu sehen ist. Dieser Anstieg ist durch gleitfähige Reaktionen begründet, die auf Kosten von Versetzungslinienlänge zweier Gleitsysteme eine neue Versetzung generieren. Die Versetzungen auf den inaktiven Gleitsystemen dienen hierbei als Partner für weitere Versetzungsreaktionen, die z.B. in ihrer Ausprägung als gleitfähige Reaktion neue Versetzungen auf aktiven Gleitsystemen generieren. Das in Kapitel 4.2 präsentierte Multiplikationsmodell bildet den Prozess der Generierung einer neuen Versetzung durch die Produktion von Krümmungsdichte q^{ξ} zusätzlich zur Versetzungsdichte ρ^{ξ} ab. Die verwendete Bezeichnung *Versetzungsmultiplikation* verdeutlicht die Abgrenzung zur Expansion einer existierenden Versetzung und steht im Einklang mit den zugrundeliegenden diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018]. Die Relevanz der Unterscheidung zwischen der Generierung von Versetzungen im Gegensatz zur Produktion von Versetzungslinienlänge wird durch die Betrachtung des vereinfachten Systems mit gleitfähigen Reaktionen deutlich (Kapitel 5.2.1): Die durch Versetzungsmultiplikation erzeugte Krümmungsdichte (Abbildung 5.9) induziert ihrerseits eine Produktion von Versetzungsdichte

durch Versetzungsexpansion (Abbildung 5.8, siehe auch Abbildung 3.1). Dadurch erhöht sich die gemittelte Versetzungsdichte auf den aktiven Gleitsystemen trotz des Nettodichtetransfers in Richtung des inaktiven Gleitsystems. In Übereinstimmung mit dem Konzept der konservativen Versetzungsbewegung ist die plastische Verformung daher weiterhin an das jeweilige Gleitsystem gebunden, jedoch bilden gleitsystemübergreifende Versetzungsmechanismen die Grundlage für diesen Mechanismus. Die terminologische und konzeptionelle Trennung der Versetzung als Begrenzung der abgesicherten Fläche in der Gesamtheit im Gegensatz zur Versetzungslinie bildet daher die Grundlage für die mechanistische Beschreibung der betrachteten Versetzungsmechanismen.

6.2. Versetzungsinteraktion über Spannungsterme

Die Abgrenzung des abgesicherten Bereichs führt bei der Betrachtung einer einzelnen Versetzung zu einem Sprung in dem plastischen Verschiebungsfeld. Dieser Sprung wird über ein Mittelungsvolumen homogenisiert und reproduziert dadurch das Spannungsfeld von Stufen- und Schraubenversetzungen. Für Stufenversetzungen wurde gezeigt, dass das resultierende interne Spannungsfeld abhängig von der Systemauflösung die analytische Lösung des Spannungsfelds einer geraden Stufenversetzung abbilden kann [Schmitt et al., 2015]. Das interne Spannungsfeld wird über die Projektionsmatrix M^{ξ} (Gleichung 2.19) auf die verschiedenen Gleitsysteme projiziert und beeinflusst dadurch die Versetzungsgeschwindigkeit (Gleichung 2.29). Bereits bei der beobachteten Expansion einer einzelnen Versetzung ist eine Aufweitung der Anfangsverteilung der Versetzungsdichte und damit eine Interaktion der Versetzung mit ihrem eigenen Spannungsfeld erkennbar (Abbildung 3.1). Bei einer planaren Interaktion zweier Versetzungen (Abbildung 3.2) treffen Versetzungslinien in der Mitte des Systems aufeinander, wodurch die jeweiligen Spannungsfelder miteinander

interagieren. Da sich in dem gewählten Beispiel Versetzungslinien positiver und negativer Orientierung gegenüber stehen, führt eine Überschneidung beider Versetzungen zu einer Reduktion der elastischen Energie und daher zu einer Reduktion der Geschwindigkeit. Aus diesem Grund ist eine Akkumulation eines Teils der Versetzungsdichte zu beobachten. Der homogenisierte Ansatz der Kontinuumsmechanik wird bereits in diesem einfachen Beispiel besonders deutlich: im Allgemeinen ist nicht die vollständige Versetzungsdichte von den berücksichtigten Mechanismen betroffen. Die ursprünglich kreisförmigen Versetzungen werden vermischt, sie verlieren ihre Form und ihre diskrete Ausprägung. Daraus wird ersichtlich, dass die Kontinuumsvariablen ρ^{ξ} und q^{ξ} in ihrer integralen Form zwar die Linienlänge und die Anzahl der Versetzungen beschreiben können, letztere beiden Begriffe in der CDD aber nicht in diskreter Form zu verstehen sind.

Gleitsystemübergreifende Versetzungsinteraktion Für eine Untersuchung der gleitsystemübergreifenden Interaktion der Spannungsfelder wird eine Systemkonfiguration verwendet, die aus zwei schneidenden Gleitlamellen besteht, siehe Abbildung 3.3(a) und (b). Die plastische Abscherung erfolgt auf einem Gleitsystem je Gleitlamelle, wobei die Gleitebenennormale mit der Normalen der Lamelle übereinstimmt. Unter der Annahme, dass auf beiden Gleitsystemen eine Abscherung stattfindet, verursacht diese Konfiguration am Überschneidungsbereich beider Gleitlamellen eine inhomogene plastische Deformation der Volumenelemente. Die Projektion der Spannungsfelder auf beide Gleitsysteme führt bei dieser Konfiguration zu einer sichtbaren Interaktion der Versetzungsdichten entlang der Inhomogenität (Abbildung 3.3(c) und (d)). Im Überschneidungsbereich beider Lamellen liegt die Versetzungsdichte als homogen verteilte SSD-Dichte vor. Nach Gleichung (2.22) verschwindet dann der Gradient der plastischen Scherung, woraus kein internes Spannungsfeld resultiert. Eine gleitsystemübergreifende Interaktion durch langreichweitige Spannungsfelder ist demnach nur durch einen Gradienten der plastischen Scherung verursacht.

Durch die Anwendung einer dichteabhängigen Interaktionsspannung nach „Taylor“ (Gleichung 2.2), oder nach „Franciosi“ (Gleichung 2.3) kann die gleitsystemübergreifende Interaktion aller Versetzungen innerhalb eines Mittelungsvolumens unabhängig von der vorliegenden Konfiguration berücksichtigt werden. Ein solcher Interaktionsterm wirkt als kurzreichweitige Spannung, die die Versetzungsgeschwindigkeit proportional zu $\sqrt{\rho}$ verringert, siehe Gleichung (2.29). In der einfachsten Form als „Taylor“ - Formulierung werden alle Gleitsystemkombinationen in einem gemeinsamen Parameter vereint und daher nicht die Stärke verschiedener Gleitsystempaarungen unterschieden. Für die untersuchte Systemkonfiguration in Abbildung 3.3(a) führt die Vereinigung aller Interaktionen dazu, dass qualitativ und quantitativ kein signifikanter Unterschied zwischen einer Gleitsystemkonfiguration in Lomer-Orientierung und in kollinearer Orientierung besteht (Abbildung 3.4(a) und (b)). Ein deutlicher Einfluss der schneidenden Gleitlamelle wird nur bei einer vorhandenen Heterogenität in der Verteilung der Versetzungsdichte beobachtet. Die Verwendung einer Interaktionsmatrix erlaubt hingegen die Trennung der verschiedenen Mechanismen durch verschiedene Interaktionskoeffizienten für entsprechende Gleitsystempaarungen (siehe Tabelle 2.1). Hierbei wird die starke kollineare Gleitsystempaarung durch einen Interaktionskoeffizienten berücksichtigt, der deutlich vom Durchschnittswert nach oben abweicht. Dies hat zur Folge, dass die Gleitsysteminteraktion im Falle der kollinearen Orientierung einen signifikanten Einfluss auf das Systemverhalten besitzt (Abbildung 3.4(d) und (f)). In allen untersuchten Fällen besteht die Interaktion zwischen beiden Gleitsystemen darin, dass die Versetzungsbewegung durch die zweite Gleitlamelle behindert, oder vollständig unterbunden wird, wodurch ein Aufstau der Versetzungsdichte entsteht.

Um den Einfluss durch langreichweitige Spannungsfelder zu minimieren, wird die initiale Versetzungsdichte vollständig über das System verteilt (Abbildung 5.1). Um reale Belastungszustände zu simulieren, wird das System durch eine konstante Dehnrates belastet. Die daraus resultierenden Spannungs-Dehnungs Kurven (Abbildung 5.2) zeigen in allen untersuchten Konfigurationen einen elastischen Bereich, gefolgt von einer plastischen Deformation

nach Überschreiten der Fließgrenze. Zusätzlich zu ihrer Wirkung als lokale Fließspannung bestimmen die Interaktionsspannungsterme im Geschwindigkeitsgesetz (Gleichung 2.29) in diesem Fall auch die globale¹ Fließgrenze. Diese Fließgrenze ist für verschiedene Gleitsystemkonfigurationen bzw. daraus resultierende Interaktionsmechanismen signifikant unterschiedlich (Abbildung 5.2). In Übereinstimmung mit den Beobachtungen aus der Interaktion zweier Gleitlamellen (Abbildung 3.4) wird unter Verwendung der Interaktionsmatrix ein geringerer Einfluss der Selbstinteraktion in kollinearer Gleitsystemorientierung beobachtet. Beide Formulierungen der Interaktionsspannung sind in Bezug auf den Verlauf der Spannungs-Dehnungs Kurven äquivalent, wenn ein adäquater Interaktionsparameter für die Taylor Formulierung gewählt wird (Abbildung 5.2(a)). Dennoch wird die Vereinfachung des mittleren Interaktionsparameters in der Taylor Formulierung offensichtlich, sobald die Versetzungsdichte auf einem Gleitsystem erhöht wird: Da die Interaktionsspannung für alle Gleitsysteme identisch ist, wird das Systemverhalten durch Selbstinteraktion dominiert (Abbildung 5.2(b)). Im Gegensatz dazu erlaubt die Trennung der Mechanismen in der Interaktionsmatrix einen asymmetrischen Gleitwiderstand auf beiden Gleitsystemen. In der kollinearen Gleitsystemkonfiguration hat dies eine vollständige Unterbindung der plastischen Scherung auf dem Gleitsystem mit der geringeren Versetzungsdichte (primäres Gleitsystem) zur Folge, wie in Abbildung 5.3(a) zu sehen ist. Eine entsprechende Erklärung kann für die Variation der Schmid-Faktoren auf beiden Gleitsystemen durch eine Rotation der Kristallorientierung (Abbildung 5.3(b)) gegeben werden. Die Beobachtungen führen zur Schlussfolgerung, dass die Trennung der Mechanismen in der Formulierung der Interaktionsmatrix zu einer Unterbindung der simultanen Aktivierung beider Gleitsystem durch die kollineare Versetzungsreaktion führen kann. Ein solcher Mechanismus wird auch in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen beobachtet [Devincre et al., 2007].

¹ Das bedeutet eine makroskopisch z.B. in einem Zugversuch messbare Fließspannung.

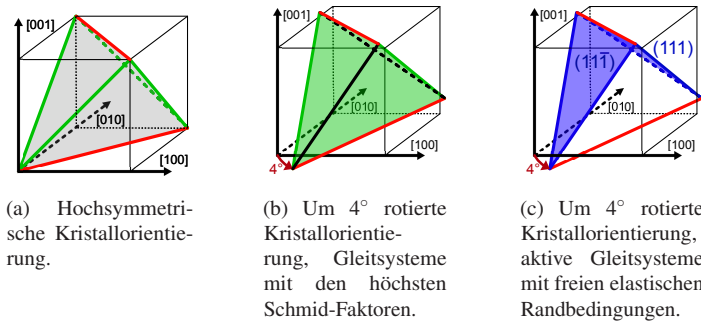


Abbildung 6.1.: Visualisierung der aktiven (in grün dargestellt) und inaktiven (in rot dargestellt) Gleitsysteme für die hochsymmetrische Kristallorientierung (a), Visualisierung der Gleitsysteme mit dem maximalen Schmid-Faktor (grün) in der um 4° rotierten Kristallorientierung (b) und Visualisierung der aktiven Gleitsysteme (blau) für den Fall mit freier transversaler Verschiebung (c).

Eine Erweiterung der Untersuchung auf alle 12 kfz Gleitsysteme zeigt in einer hochsymmetrischen $[001]$ Kristallorientierung einen vergleichbaren Dichteanstieg auf den acht aktiven Gleitsystemen für beide Formulierungen (Abbildung 5.5). Da alle aktiven Gleitsysteme den gleichen Schmid-Faktor haben (siehe die Visualisierung in Abbildung 6.1(a)) entspricht dies auch der Erwartung. Daher kann geschlossen werden, dass in einer solchen idealisierten Konfiguration eine Mittelung aller Interaktionsmechanismen nach Gleichung (2.2) eine vernünftige Vereinfachung darstellt. Bei einer Rotation der Kristallorientierung um 4° besitzen hingegen zwei Gleitsysteme den höchsten Schmid-Faktor, wie in Abbildung 6.1(b) dargestellt. Die unterschiedlichen Auswirkungen auf beide Formulierungen unter Verwendung von elastischen Randbedingungen, die eine transversale Verschiebung der Z-Oberflächen erlauben (Abbildung 5.6(a)), ist durch den kollinearen Interaktionskoeffizienten in der Interaktionsmatrix zu erklären: Die starke Wechselwirkung kollinearere Gleitsysteme führt zu einer Konzentration der Dichteentwicklung auf vier Gleitsysteme, von denen keines den gleichen Burgers Vektor besitzt. Dies ist in Abbildung 6.1(c) visualisiert und verhält sich analog zu der reduzierten Konfiguration mit zwei Gleitsystemen in

Abbildung 5.1(b). Die Auswirkung beider Formulierungen wird allerdings durch die elastische Steifigkeit des Systems beeinflusst, wie anhand einer Fixierung der transversalen Verschiebung der Z-Oberflächen gezeigt werden kann. Im Vergleich zu einer freien transversalen Verschiebung wird hier eine sehr ähnliche Dichteverteilung für beide Formulierungen der Interaktionsspannung beobachtet, dargestellt in Abbildung 5.6(b). Die steifen Randbedingungen erzwingen demnach auch bei einer um 4° rotierten Kristallorientierung eine uniaxiale Verschiebung der belasteten Oberflächen und damit hohe Schubspannungen auf den aktiven Gleitsystemen. Hingegen wird bei einer transversalen elastischen Flexibilität ein Abbau der aufgebrachten Belastung durch eine plastische Deformation entlang dominanter Gleitsysteme ermöglicht.

Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Auswahl eines der kollinearen Gleitsysteme in heterogenen Dichte- oder Spannungsconfigurationen als dominantes Gleitsystem eine generelle Eigenschaft der Formulierung von Mobilitätsgesetzen entsprechend Gleichung (2.29) unter der Verwendung einer Interaktionsmatrix nach Gleichung (2.3) ist. Diese Schlussfolgerung wird durch ähnliche Untersuchungen mit einem versetzungsbasierten Kontinuumsmodell in [Wang et al., 2018] bestätigt. Die hier beobachtete Instabilität der $[001]$ kfz Kristallorientierung, sowie die Erklärung durch eine starke kollineare Interaktion, die die simultane Aktivierung kollinearere Gleitsysteme unterbinden kann, steht im Einklang mit experimentellen Untersuchungen [Takeuchi, 1976], sowie diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Devincre et al., 2007, 2008].

Zusammenspiel mit der Modellierung von Versetzungsreaktionen Eine grundsätzliche Eigenschaft der gleitsystemübergreifenden Versetzungsinteraktion über kurzreichweitige Spannungsterme ist, dass letztere die Versetzungsgeschwindigkeit entsprechend der Dichtekonfiguration auf verschiedenen Gleitsystemen skalieren. Unter Verwendung einer skalaren Versetzungsdichte und Versetzungsgeschwindigkeit im Mittelungsvolumen kann konzeptionell keine Aufspaltung der Versetzungsmobilität vorgenommen werden. Stabile Versetzungsconfigurationen, wie sie z.B. in Versetzungsnetzwerken existieren

(siehe Kapitel 4.1), werden daher nur implizit dadurch berücksichtigt, dass sich die Rate der plastischen Abscherung (Gleichung 2.12) verringert. Dies wird anhand der plastischen Scherung je Gleitsystem in der Untersuchung der gleitfähigen Reaktion deutlich, dargestellt in Abbildung 5.9(b). Die Sätturierung der plastischen Scherung erfolgt durch den Anstieg der Fließspannung mit der Versetzungsdichte, bis die Fließspannung den Wert der externen Schubspannung erreicht. Würde die Versetzungsdichte nicht, oder nicht ausreichend ansteigen, würde sich keine stabile Systemkonfiguration einstellen. In der kombinierten Betrachtung der gleitfähigen Reaktion und der Evolution von Versetzungsnetzwerken (Kapitel 5.4.1) wird die Verfestigung hingegen durch eine Bildung von stabilen Versetzungsstrukturen abgebildet, wie in Abbildung 5.23 dargestellt. Durch die stetige Reduktion mobiler Versetzungsdichte stellt sich unter konstanter Schubspannung unweigerlich ein stabiler Systemzustand ein, der unabhängig von einer zusätzlich wirkenden Interaktionsspannung erreicht wird. Bei allen Reaktionen werden allerdings in der Realität die reagierenden Versetzungslinien auf den beteiligten Gleitsystemen miteinander gekoppelt und behindern sich dadurch gegenseitig in ihrer Bewegung. Insbesondere der Verfestigungseffekt der kollinearen Reaktion wird durch eine Verkürzung und Kopplung der Versetzungslinien auf kollinearen Gleitsystemen erklärt [Devincre et al., 2007, Madec et al., 2003]. Die kinematische Abbildung eines solchen Mechanismus ist mit der derzeitigen Formulierung der CDD nicht möglich, da diese keine Bewegung einzelner Versetzungssegmente erlaubt. Stattdessen wird eine durch Kopplung von Versetzungslinien, sowie durch die Interaktion mobiler Versetzungen mit Lomer Reaktionen verursachte Verfestigung durch einen modifizierten Interaktionsspannungsterm berücksichtigt, siehe Gleichung (4.24) und (4.25). Dies ist insbesondere für die Untersuchung des Zusammenspiels aller berücksichtigten Versetzungsmechanismen in der Simulation mit 12 kfz Gleitsysteme unter einer konstanten Dehnrates (Abbildung 5.26) von Relevanz. Der Vergleich des Einflusses der modifizierten Interaktionsspannungsterme (Gleichungen 4.24 und 4.25) im Anhang C zeigt, dass die Vernachlässigung der Interaktionen zwischen Gleitsystempaarungen zu einer

leichten Entfestigung führt, siehe Abbildung C.1(b). Dies hat allerdings keinen signifikanten Einfluss auf die Evolution der Versetzungsdichte (Abbildung C.1(a)), was bereits aus der Betrachtung des vereinfachten Systems in Kapitel 5.4.1 deutlich wird.

6.3. Mobilität von Versetzungsnetzwerken

6.3.1. Versetzungsreaktionen im Kontinuum

Der Begriff *Mobilität von Versetzungsnetzwerken*, wie er in dieser Arbeit verwendet wird, beschreibt die Entstehung und Evolution von gleitsystemübergreifenden Verknüpfungen durch Versetzungsreaktionen, sowie die dadurch bedingte Auswirkung auf die Mobilität von Versetzungen auf allen Gleitsystemen. Letztere beinhaltet zum einen die Immobilisierung von Versetzungen, oder die Behinderung ihrer Ausbreitung, sowie zum anderen einen Anstieg der Versetzungsdichte auf sekundären Gleitsystemen. Solche Mechanismen werden in der Stufe II der Verformung in experimentellen Untersuchungen verschiedener kfz-Metalle [Basinski und Basinski, 1979, Livingston, 1962, Pande und Hazzledine, 1971b, Steeds, 1966], sowie in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018, Zbib et al., 2000] beobachtet.

Das in dieser Arbeit präsentierte Modell der Versetzungsnetzwerke auf Kontinuumsebene beschränkt sich auf die Beschreibung von Versetzungsreaktionen und Quergleiten, sowie die dadurch bedingte Beeinflussung der nicht direkt an den Reaktionen beteiligten Versetzungen. Die Formulierung ist vollständig deterministisch, wodurch statistische Effekte, wie sie durch Quergleiten, oder einer starken Streuung der Ausbreitungswege einzelner Versetzungen entstehen, nicht berücksichtigt werden können. Dennoch werden die genannten Mechanismen in einer homogenisierten Form beschrieben (siehe Kapitel 4.2.2 und 4.3.2) und damit deren gemittelter Einfluss auf die Evolution der plastischen Scherung berücksichtigt. Die Streuung der Versetzungsabstände innerhalb des

Netzwerks wird als ein Mechanismus interpretiert, der die Spannungen zur Mobilisierung des Netzwerks, d.h. der lokalen Fließspannung, über einen definierten Bereich verteilt, siehe Gleichung (4.21). Dies steht in Analogie zu zweidimensionalen Beschreibungen von Versetzungsdipolen gerader Stufenversetzungen [Reuber et al., 2014, Schulz et al., 2017]. Im Gegensatz zu einer Formulierung der Fließspannung proportional zu $\sqrt{\rho}$ (z.B. Gleichung (2.2), oder Gleichung (2.3)) ergibt sich die Fließspannung aus der Abstraktion des Versetzungsnetzwerks. Durch eine Initialisierung der Simulation mit Netzwerkversetzungsdichte ρ_{net}^{ξ} , d.h. Versetzungsdichte, die als Lomer Reaktionen mit stabilisierten Versetzungslinien vorliegt, kann eine Fließspannung als Konsequenz aus einer vorgegebenen Verteilung der Versetzungsabstände innerhalb des Netzwerks modelliert werden, wie z.B. in Abbildung 5.26. Eine solche Anfangsstruktur abstrahiert das relaxierte Versetzungsnetzwerk aus den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018] bestehend aus geraden Versetzungslinien, die Endpunkte von Reaktionen verbinden durch eine Versetzungsdichte, deren Mobilität durch eine Stärkenverteilung von Lomer Reaktionen definiert ist.

Die durch Versetzungsreaktionen und Quergleiten induzierte Verknüpfung verschiedener Gleitsysteme wird durch Kopplungsterme in den Evolutionsgleichungen der Versetzungsdichte und Krümmungsdichte (Gleichung 4.23) reproduziert. Im Falle von Versetzungsreaktionen entsteht eine Dichte der Versetzungsreaktionen ρ_{reakt} durch sich überschneidende Versetzungsbewegung auf beiden beteiligten Gleitsystemen, siehe Gleichung (3.5). Die Dichte ρ_{reakt} ist nicht an eines der ursprünglichen Gleitsysteme gebunden und ist daher die zentrale Variable der Gleitsystemkopplung. Die Ausprägung der Reaktion als gleitfähige, Lomer, oder kollineare Reaktion ist durch die konkrete Gleitsystempaarung entsprechend der Interaktionsmatrix (Abbildung 2.2) gegeben. In Bezug auf die Auswirkung auf die reagierenden Gleitsysteme ist die Modellierung aller explizit berücksichtigten Reaktion daher konzeptionell identisch. Der entscheidende Unterschied besteht allerdings in der durch die Reaktion

verursachten Mechanismen, welche physikalisch gesehen durch die Vektorsumme der reagierenden Burgers Vektoren gegeben ist, siehe hierzu Kapitel 2.1. In diskreten Versetzungssimulationen und in Experimenten wird beobachtet, dass das entstehende Versetzungsnetzwerk maßgeblich aus kurzen, geraden Versetzungssegmenten besteht [Basinski und Basinski, 1979, Pande und Hazzledine, 1971b, Stricker et al., 2018]. Die Information über die mittlere Krümmung einer Versetzung - oder genauer: die lokale Winkeländerung - ist in der CDD in der Krümmungsdichte q^{ξ} enthalten. Wie aus Abbildung 3.1 und Gleichung 3.1 hervorgeht, kann die Krümmungsdichte auch als Potenzial einer Versetzung zur Expansion interpretiert werden. Die Krümmung einer Versetzungslinie, die in den Endpunkten der Reaktion konzentriert ist, kann allerdings durch die existierende CDD Kinematik nicht abgebildet werden. Die durch Gleichung 4.4 beschriebene Reduktion der Krümmungsdichte ist daher als eine Abstraktion des Mechanismus zu verstehen, der eine gekrümmte Versetzungslinie nach ihrer Beteiligung an einer Versetzungsreaktion, oder an Quergleiteffekten begradigt und stabilisiert. Dieser Mechanismus hindert die Versetzung an ihrer weiteren Ausbreitung und führt daher zu einer Stabilisierung des Netzwerks.

Die explizit berücksichtigten Versetzungsmechanismen werden entsprechend ihrer Fähigkeit eine neue Versetzung zu generieren in die Aspekte *Versetzungsmultiplikation* und *Stabilisierung von Versetzungsbewegung* unterteilt. Für eine zielgerichtete Diskussion wird im Folgenden der Einfluss der Versetzungsmultiplikation auf die Versetzungsmobilität in Netzwerken getrennt von den stabilisierenden Mechanismen diskutiert und in Kapitel 6.3.4 zusammengeführt.

6.3.2. Multiplikationsmechanismen im Kontinuum

Das präsentierte Kontinuumsmodell der Versetzungsmultiplikation (Kapitel 4.2) beschränkt sich auf die homogenisierte Beschreibung von gleitfähigen Reaktionen und Quergleiten. Es werden weder stochastische Mechanismen berücksichtigt, wie sie in der diskreten Versetzungsdynamik inhärent durch das

verwendete Quergleitmodell bedingt sind [Verdier et al., 1998, Weygand et al., 2002], noch werden die Multiplikationsmechanismen als *Prozess* abgebildet. Die gleitfähige Reaktion und das Quergleiten werden im präsentierten Modell vielmehr dadurch abstrahiert, dass basierend auf dem Versetzungsfluss im gegebenen Zeitschritt die Versetzungsdichte und Krümmungsdichte auf einem neuen Gleitsystem erhöht wird. Übertragen auf ein physikalisches Bild entspricht dies einer spontanen Generierung einer neuen Versetzung mit einer gegebenen Krümmung auf einem neuen Gleitsystem. Der Einfluss einer ansteigenden Versetzungsdichte auf die Verfestigung wird für die Untersuchung der Versetzungsmultiplikation durch einen Interaktionsspannungsterm abgebildet. Hierfür wird die Formulierung nach Taylor (Gleichung 2.2) verwendet, da entsprechend der Untersuchung in Kapitel 5.1.2 die Verwendung eines gemittelten Parameters eine vernünftige Vereinfachung in der hier untersuchten hochsymmetrischen Kristallorientierung darstellt (siehe auch Kapitel 6.2).

Gleitfähige Reaktionen Die Ergebnisse des vereinfachten Systems mit gleitfähigen Reaktionen (Abbildung 5.8 und 5.9) zeigen, dass das Zusammenspiel der drei an der Reaktion beteiligten Gleitsysteme zu einem Anstieg der Versetzungsdichte auf aktiven und auf inaktiven Gleitsystemen führt. Die erhöhte Versetzungsdichte auf dem inaktiven Gleitsystem dient hierbei als Reaktionspartner für gleitfähige Reaktionen in Richtung der aktiven Gleitsysteme. Diese Reaktionen führen zur Generierung neuer Versetzungen auf aktiven Gleitsystemen, welche durch ihre Expansion Versetzungslinienlänge produzieren. Die Evolution der Versetzungsdichte aller Gleitsysteme ist daher miteinander gekoppelt. Da Versetzungsreaktionen auf den reagierenden Gleitsystemen mit einem Verlust an Linienlänge verbunden sind, wird der Anstieg der Versetzungsdichte durch die anschließende Expansion der generierten Versetzungen getragen, siehe Abbildung 5.8(a).

Obwohl diese Systemkonfiguration künstlich ist und keiner realen Kristallstruktur entspricht, ist das Modell in der Lage, zwei wichtige Beobachtungen aus diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018] zu erfassen:

(1.) Versetzungsmultiplikation beinhaltet die Generierung von Versetzungen als ein Ergebnis des Zusammenspiels verschiedener Gleitsysteme und (2.) Versetzungsdichte wird auf inaktive Gleitsysteme übertragen, siehe Punkt I. in Kapitel 4.1. Auch in Experimenten wurde eine erhöhte Versetzungsdichte auf sekundären Gleitsystemen beobachtet [Pande und Hazzledine, 1971b, Steeds, 1966], was die Erkenntnis (2.) weiter bestätigt. Die ansteigende Versetzungsdichte auf den inaktiven Gleitsystemen dient hierbei nicht nur als möglicher Partner für weitere Multiplikationsmechanismen, sondern trägt auch zu anderen Versetzungsreaktionen bei. In der Konsequenz sind inaktive Gleitsysteme nur im Sinne einer verschwindenden Versetzungsgeschwindigkeit „inaktiv“. Sie tragen durch den Anstieg der Versetzungsdichte allerdings zur Verfestigung und damit zu einer Begrenzung des Dichteanstiegs auf aktiven Gleitsystemen bei, wie in Abbildung 5.8(a) und 5.9 deutlich wird. Abgesehen von dem Einfluss auf die Verfestigung ist zu erwarten, dass eine erhöhte Versetzungsdichte auf inaktiven Gleitsystemen das Systemverhalten bei einer signifikanten Spannungsänderung auf inaktiven Gleitsystemen beeinflussen kann. Dies kann z.B. durch eine Rotation der Kristallorientierung, wie in Abbildung 5.3(b) und 5.6(a), durch eine Veränderung der Belastungsrichtung, oder auch durch Einflüsse eines heterogenen Materialverhaltens zustande kommen. Beispielsweise kann eine Änderung der Zugachse dazu führen, dass bislang inaktive Gleitsysteme, wie z.B. in der hochsymmetrischen Kristallorientierung in Abbildung 6.1(a), aktiviert werden und daher einen signifikanten Einfluss auf die Verformung besitzen.

Quergleiten Im Gegensatz zu den gleitfähigen Reaktionen, führt der Quergleitmechanismus, wie er in Kapitel 4.2.2 eingeführt wurde, nicht zu einer Reduktion der Gesamtdichte. Die Generierung einer neuen Versetzung auf dem Quergleitsystem führt grundsätzlich zu einer Erhöhung der Gesamtdichte. Dies erklärt den signifikanten Dichteanstieg (Abbildung 5.10(a)) trotz einem im Vergleich zu den gleitfähigen Reaktionen deutlich geringeren Dichtetransfer zwischen den Gleitsystemen (Abbildung 5.10(b)). Der identische Dichteanstieg auf beiden Gleitsystemen für den Fall der gleichen Schubspannung kann

als Doppelquergleiten interpretiert werden, welcher nach jedem individuellen Quergleitvorgang eine neue Versetzung generiert. Bei einer unterschiedlichen Schubspannung auf beiden Gleitsystemen findet Multiplikation ausschließlich auf dem Gleitsystem mit der höheren Schubspannung statt. Das Quergleitmodell ist daher konzeptionell sehr nah an dem in der diskreten Versetzungsdynamik beobachteten Quergleitprozess. Insbesondere die Tatsache, dass sich bereits bei einem geringen Spannungsunterschied zwischen Gleitsystemen die Versetzungsmultiplikation auf ein Gleitsystem beschränkt ist ein idealisierter Grenzfall, der den Einfluss der konkreten Versetzungskonfiguration auf Quergleitvorgänge nicht berücksichtigt. In der in dieser Arbeit untersuchten hochsymmetrischen Kristallorientierung sind im Mittel keine signifikanten Spannungsunterschiede zwischen den Quergleitsystemen zu erwarten. Das präsentierte Quergleitmodell ist in dieser Form daher als eine Vereinfachung zu betrachten, die speziell auf das Zusammenspiel mit gleitfähigen Reaktionen in der gegebenen Untersuchung zugeschnitten ist. Dennoch besteht ein Fortschritt gegenüber bestehenden Modellen, in denen Quergleitprozesse in Form einer Evolution des Anteils der Schraubenversetzungen berücksichtigt werden, z.B. [Alankar et al., 2012a, Leung et al., 2015], darin, dass in dem präsentierten Modell der Prozess des Quergleitens zur Generierung neuer Versetzungen führt.

Vergleich mit diskreter Versetzungsdynamik Werden alle 12 kfz Gleitsysteme in einer hochsymmetrischen Kristallorientierung berücksichtigt, zeigt sich ein jeweils gleichförmiger Dichteanstieg auf aktiven und inaktiven Gleitsystemen. Dies ist dadurch begründet, dass sich der Dichtetransfer zwischen aktiven Gleitsystemen ausgleicht (Abbildung 5.8(b)). Der Anstieg der Versetzungsdichte auf den aktiven und inaktiven Gleitsystemen, sowie der Anstieg der totalen Versetzungsdichte werden im Vergleich mit der diskreten Versetzungsdynamiksimulation gut erfasst, wie in Abbildung 5.12 dargestellt. Der leichte Abfall der Versetzungsdichte nach dem Überschreiten der Fließspannung wird auch beobachtet, wenn ein Annihilationseffekt der Gleichungen für die gleitfähige Reaktion (Gleichungen 4.2 und 3.6) ausgeschlossen wird,

wie in Anhang B.2 gezeigt. Der initiale Dichteabfall kann dadurch erklärt werden, dass Versetzungsdichte in der Anfangsphase der Simulation das Volumen verlässt. Im Gegensatz zu den diskreten Simulationen kann das Kontinuumsmodell keine Versetzungskrümmung aus einer *gegebenen* Anfangskonfiguration erzeugen und somit z.B. das Ausbauchen existierender gleitfähiger Reaktionen nicht explizit abbilden. Eine Anfangsbedingung von $q^{\xi} > 0$ könnte zwar als eine Konfiguration *nach* dem Ausbauchen interpretiert werden und zeigt in der entsprechenden Simulation auch einen kontinuierlichen Dichteanstieg (Abbildung B.1 im Anhang). Allerdings erscheint eine Anfangsbedingung von $q^{\xi} = 0$ am ehesten dazu geeignet, das relaxierte Versetzungsnetzwerk der diskreten Simulation, das im Wesentlichen aus stückweise geraden Versetzungslinien besteht, zu reproduzieren. Desweiteren würde eine Anfangsbedingung von $q^{\xi} > 0$ bei einer Umkehrung der Belastungsrichtung aufgrund des Zusammenhangs $q^{\xi} v^{\xi}$ zu einer Schrumpfung von Versetzungen führen. Zur Vermeidung des initialen Dichteabfalls ist demnach zum einen die Reproduktion eines stabilen Versetzungsnetzwerks notwendig (wie in Kapitel 4.3 beschrieben und in Kapitel 5.3 untersucht), zum anderen eine kinematische Formulierung gekoppelter Versetzungssegmente, durch deren Bewegung Krümmung erzeugt werden kann. Desweiteren könnte eine Ensemblemittelung mehrerer diskreter Anfangskonfigurationen zu einer genaueren Beschreibung der lokalen Verteilung der initialen Versetzungsdichte führen. Auf inaktiven Gleitsystemen wird die Versetzungsbeziehung unterbunden, da Randbedingungen die lokale Versetzungsgeschwindigkeit trotz eines verschwindenden Schmid-Faktors beeinflussen können. Daher kann die Entwicklung der Versetzungsdichte auf inaktiven Gleitsystemen als ein Produkt gleitfähiger Reaktionen interpretiert werden. Der Vergleich der Ergebnisse in Abbildung 5.12 mit den Ergebnissen des vereinfachten Systems in Abbildung 5.8 führt zu folgender Schlussfolgerung: Der kombinierte Einfluss aller 48 Gleitsystemkombinationen der gleitfähigen Reaktion führt zu einem Anstieg der Versetzungsdichte auf inaktiven Gleitsystemen, wobei dieser Anstieg durch die Versetzungsevolution auf aktiven Gleitsystemen bedingt ist. Das komplexe Zusammenspiel der Versetzungsdichten und Geschwindigkeiten

auf verschiedenen Gleitsystemen führt zu unterschiedlichen Reaktionsraten, je nachdem ob ein inaktives Gleitsystem an der Reaktion beteiligt ist, oder nicht.

Die Berücksichtigung von Versetzungsmultiplikation durch Quergleiten führt zu einem zusätzlichen Anstieg der Versetzungsdichte auf aktiven und auf inaktiven Gleitsystemen. Dieses Systemverhalten entspricht der Beobachtung in der diskreten Versetzungsdynamik (Abbildung 5.13). Die CDD Simulationen und die diskreten Simulationen unterscheiden sich dabei von den Ergebnissen in Abbildung 5.12 nur durch das zusätzlich wirkende Quergleitmodell. Die Dichteverläufe verdeutlichen die gleitsystemübergreifende Charakteristik des Modells, die den Dichteanstieg auf allen Gleitsystemen miteinander koppelt. Obwohl auf den inaktiven Gleitsystemen ein Einfluss der Versetzungsexpansion ausgeschlossen wurde, wird im Vergleich zu den Simulationen ohne Quergleiten (Abbildung 5.12) ein signifikanter Dichteanstieg beobachtet. Dies ist dadurch zu erklären, dass der stärkere Dichteanstieg auf aktiven Gleitsystemen zu einer höheren Rate an gleitfähigen Reaktionen in Richtung der inaktiven Gleitsysteme führt. In [Hussein et al., 2015] wird eine Erhöhung der Anzahl von Versetzungsreaktionen durch Quergleiten beobachtet, was das Modellverhalten weiter bestätigt.

Die in Abbildung 5.13(b) beobachtete Korrelation zwischen der totalen Versetzungsdichte und der Anzahl generierter Versetzungen entspricht den Beobachtungen aus [Stricker et al., 2018]. Die Anzahl generierter Versetzungen erhöht sich ab 0.1% bis zum Ende der Simulation etwa um den Faktor 10, während die totale Versetzungsdichte nur um den Faktor 3 ansteigt. Wie bereits aus Abbildung 3.2 deutlich wird, ist ein diskreter Versetzungscharakter in der CDD nur im Idealfall vorhanden (siehe auch die Diskussion in Kapitel 6.1 und 6.2). In der hier untersuchten Konfiguration ist ein solcher diskreter Charakter nicht mehr gegeben, da die in Endpunkten von Reaktionen konzentrierte Versetzungskrümmung über eine Reduktion der Krümmungsdichte q^{ξ} abgebildet wird. Ein quantitativer Vergleich der Anzahl der Versetzungen mit den diskreten Simulationen ist hier daher nicht möglich. Dennoch kann aus dem Verhältnis zwischen Versetzungsdichte und Krümmungsdichte in Abbildung 5.13(b) ein

mittlerer Anstieg der Versetzungskrümmung abgeleitet werden. Dies bietet die Basis für die Formulierung eines sich verdichtenden Versetzungsnetzwerks. Es wird allerdings beobachtet, dass der Anstieg der Versetzungsdichte gegen Ende der Simulation überschätzt wird. Dieses Verhalten deutet darauf hin, dass durch die noch fehlenden Stabilisations- und Annihilationsmechanismen die Quellterme in der Evolutionsgleichung (5.4) überschätzt werden.

Aus der Untersuchung der Multiplikationsmechanismen in Kapitel 5.2 kann geschlussfolgert werden, dass das präsentierte Kontinuumsmodell der Versetzungsmultiplikation zentrale Beobachtungen aus den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018] abbilden kann: (1.) Der Mechanismus der Versetzungsmultiplikation erfolgt durch ein Zusammenspiel aller Gleitsysteme und (2.) der resultierende Dichteanstieg ist im Wesentlichen durch die Generierung neuer Versetzungen begründet (siehe auch Punkt I. in Kapitel 4.1). Diese Schlussfolgerung kann aufgrund der Fähigkeit des Modells getroffen werden, neue Versetzungsdichte und Krümmungsdichte durch eine Kopplung verschiedener Gleitsysteme zu generieren. Im Vergleich zu existierenden Modellen, z.B. [Kubin et al., 2008a,b, Ma et al., 2006, Monavari und Zaiser, 2018, Reuber et al., 2014], ist der Prozess der Multiplikation unabhängig von der plastischen Scherung des eigenen Gleitsystems. Dadurch wird eine Selbstreplikation, d.h. eine Selbstmultiplikation der Versetzungsdichte des eigenen Gleitsystems verhindert. Der Dichteverlauf zeigt eine physikalisch basierte Reproduktion der Beobachtungen in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018] und entspricht qualitativ auch Beschreibungen in experimentellen Untersuchungen [Basinski und Basinski, 1979, Pande und Hazzledine, 1971b, Steeds, 1966]. Dies wäre mit existierenden gleitsystembasierten Varianten der Theorie von Kocks und Mecking [Kocks und Mecking, 2003] nicht möglich. Ein Ansatz nach Kocks und Mecking kann in der CDD durch einen Produktionsterm für Versetzungsdichte analog zu Gleichung (2.14) beschrieben werden, wie in Anhang A näher ausgeführt. Der Vergleich mit den Ergebnissen des präsentierten Multiplikationsmodells (Abbildung 5.15) zeigt, dass der Dichteanstieg auf inaktiven Gleitsystemen nicht reproduziert werden kann. Dies ist durch das

fehlende Zusammenspiels mehrerer Gleitsysteme in der gleitsystembasierten Anwendung der Theorie von Kocks und Mecking bedingt. Inaktive Gleitsysteme tragen dadurch in dem untersuchten System nicht, oder nur sehr eingeschränkt zur Evolution der Versetzungsstruktur bei, was im Widerspruch zu den bereits genannten Beobachtungen steht.

6.3.3. Stabilisierung von Versetzungsbewegung

In diesem Kapitel werden die stabilisierenden Versetzungsreaktionen (Lomer und kollineare Reaktionen) unter Vernachlässigung von Versetzungsmultiplikation diskutiert. Analog zum Modell der Versetzungsmultiplikation beschränkt sich das Modell der stabilisierenden Mechanismen in Versetzungsnetzwerken auf eine homogenisierte Beschreibung der Reaktionen. In diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018], wie auch in experimentellen Untersuchungen [Basinski und Basinski, 1979, Pande und Hazzledine, 1971b] wird beobachtet, dass Lomer Reaktionen zur Bildung einer relativ stabilen Versetzungsstruktur führen, während kollineare Reaktion eine Annihilation zweier Versetzungslinien zur Folge haben. Aus der Heterogenität der Multiplikationsmechanismen entsteht ein Versetzungsnetzwerk, das durch eine starke Streuung der Ausbreitungswege einzelner Versetzungen gekennzeichnet ist [Stricker et al., 2018].

Lomer Reaktionen Für ein Kontinuumsmodell stellt sich die Frage, welche Aspekte einer heterogenen Versetzungsaktivität sinnvoll umzusetzen sind und welchen Einfluss diese Mechanismen auf eine homogenisierte Betrachtung der Plastizität haben. Im Hinblick auf die deterministische Sichtweise des Kontinuumsmodells ist die Einführung stochastischer Terme nicht vernünftig und vermutlich nicht ohne eine erhebliche Erhöhung der Systemkomplexität möglich. Das in Kapitel 4.3 präsentierte Modell greift daher mit der Aufteilung in eine *mobile Versetzungsdichte* ρ_M und in eine *Netzwerkversetzungsdichte* ρ_{net} bestehende Ansätze, z.B von [Li et al., 2014, Reuber et al., 2014] auf,

formuliert diese aber in Form von physikalischen, gleitsystemübergreifenden Versetzungsreaktionen. Die Netzwerkversetzungsdichte wird weiter unterteilt in eine Dichte von Lomer Reaktionen ρ_{lomer} und in stabilisierte Versetzungsdichte ρ_S , welche die Dichte der an der Lomer Reaktion anhängenden Versetzungslinien beschreibt. In dem vereinfachten System mit zwei Gleitsystemen (Abbildung 5.17(a)) äußert sich diese Formulierung in einer kontinuierlichen Abnahme der Dichte der mobilen Versetzungen ρ_M , welche in die Netzwerkversetzungsdichte ρ_{net} transformiert wird. Die Annahme, dass die stabilisierte Versetzungsdichte ρ_S (der reaktionsfähige Anteil von ρ_{net}) weiterhin als Reaktionspartner zur Verfügung steht, führt dazu, dass ρ_S weniger stark ansteigt, als die Dichte der Lomer Reaktionen ρ_{lomer} . Letztere ist mit einem Faktor von 0.5 beiden reagierenden Gleitsystemen gleichermaßen zugeordnet und beschreibt daher die Kopplung der Gleitsysteme durch die Lomer Reaktion. Dadurch ist die Abnahme der Gesamtdichte durch Lomer Reaktionen (Abbildung 5.17(a)) zu erklären. Der stabilisierende Versetzungsmechanismus erstreckt sich daher über beide beteiligte Gleitsysteme. Die Unbeweglichkeit von ρ_S ist allerdings als ein Grenzfall zu sehen, der die Lomer Reaktionen in der Homogenisierung als statische, aber auflösbare Objekte beschreibt. Eine Bewegung der Reaktion entlang der gemeinsamen Schnittlinie der Gleitebenen ist daher nicht abbildbar und könnte z.B. in heterogenen Versetzungsanordnungen eine zu starke Vereinfachung darstellen.

Die Beobachtungen in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen lassen darauf schließen, dass eine Verfestigung durch eine Verdichtung des Versetzungsnetzwerks und der daraus folgenden Begrenzung des mittleren Ausbreitungsweges der Versetzungen zustande kommt. Das präsentierte Modell berücksichtigt eine Streuung der Spannungen zur Mobilisierung des Netzwerks in Form einer Streuung der kritischen Schubspannungen zur Auflösung von Lomer Reaktionen $\tau_{\text{cr,lomer}}^{\xi}$, siehe Gleichung (4.19). Die Spannung $\tau_{\text{cr,lomer}}^{\xi}$ definiert daher die Schubspannung oberhalb derer keine stabile Lomer Reaktion existieren kann. Dies skaliert den Anteil der stabilen Lomer Reaktionen $\eta_{\text{lomer}}^{\xi}$, siehe Gleichung (4.21). Der Verlauf der plastischen Scherung bei variiert

Schubspannung (Abbildung 5.17(b)) zeigt in allen Fällen eine Horizontale, welche durch die sich verringernde mobile Versetzungsdichte verursacht ist, siehe Abbildung 5.17(a). Die erreichte plastische Scherung skaliert in etwa linear mit der anliegenden Schubspannung. Dies ist dadurch zu erklären, dass die lineare Spannungsabhängigkeit der Versetzungsgeschwindigkeit durch die nahezu antiproportionale Spannungsabhängigkeit des Anteils der stabilen Lomer Reaktionen kompensiert wird. Dadurch ist die Bildungsrate der Lomer Reaktionen (Gleichung 4.14) für $L_{cr,lomer}^{\xi} \gg L_{min}$ unabhängig von der anliegenden Spannung. Physikalisch bedeutet dies, dass sich Versetzungslinien aufgrund der höheren Versetzungsgeschwindigkeit zwar häufiger begegnen, aber seltener *stabile* Lomer Reaktionen bilden. Eine leichte Nichtlinearität kommt durch die Annahme eines minimalen Versetzungsabstandes $L_{min} = 0.1L$ als ein Bruchteil des mittleren Versetzungsabstandes $L = 1/\sqrt{\sum_{\xi} \rho^{\xi}} = 1/\sqrt{\rho}$ zustande. Diese Annahme ist an die ermittelten minimalen Radien der generierten Versetzungen in [Stricker et al., 2018] angelehnt und soll insbesondere einen unphysikalischen Versetzungsabstand von $L_{min} = 0$ verhindern.

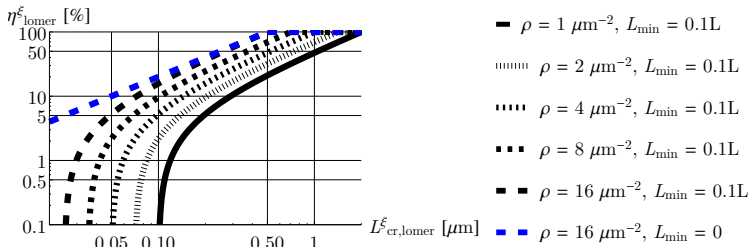


Abbildung 6.2.: Verlauf des Anteils der stabilen Lomer Reaktionen η_{lomer}^{ξ} über $L_{cr,lomer}^{\xi}$ für verschiedene totale Versetzungsdichten mit der Annahme eines minimalen Versetzungsabstandes von $L_{min} = 0.1/\sqrt{\sum_{\xi} \rho^{\xi}} = 0.1L$. Zusätzlich ist der Verlauf von η_{lomer}^{ξ} für eine totale Versetzungsdichte von $\rho = 16 \mu m^{-2}$ mit $L_{min} = 0$ dargestellt.

Abbildung 6.2 zeigt den Verlauf des Anteils der stabilen Lomer Reaktionen $\eta_{lomer}^{\xi} = f(\tau^{\xi}, \rho)$ (Gleichung 4.21) über $L_{cr,lomer}^{\xi} = 0.5Gb/\tau^{\xi}$ für verschiedene totale Versetzungsdichten ρ . Für eine totale Versetzungsdichte von $\rho = 16 \mu m^{-2}$

zeigt der Verlauf mit $L_{\min} = 0$ für hohe Spannungen eine deutliche Abweichung von dem Verlauf mit $L_{\min} = 0.1L$, wobei L der mittlere Versetzungsabstand ist. In der Konsequenz verringert sich mit $L_{\min} = 0.1L$ der Anteil der stabilen Lomer Reaktionen bei $L_{\text{cr,Lomer}}^{\xi} \approx L_{\min}$, was zu einem Anstieg der Rate der plastischen Abscherung ($\partial_t \gamma$) führt.

Diese Erklärung gilt auch für den leichten Unterschied in der erreichten plastischen Scherung bei einer Variation der initialen Versetzungsdichte unter einer konstanten externen Schubspannung von $\tau_{\text{ext}} = 10 \text{ MPa}$, siehe Abbildung 5.18(b). In diesem Fall verschiebt sich L_{\min} und L_{\max} proportional zum mittleren Versetzungsabstand $L = 1/\sqrt{\rho}$ bei gleichbleibender Spannung. Eine ansteigende Versetzungsdichte führt damit zu einem ansteigenden Anteil der stabilen Lomer Reaktionen, siehe Abbildung 6.2. Dies hat eine signifikant schnelleren Umwandlung mobiler Versetzungsdichte in Netzwerkversetzungsdichte zur Folge, wie in Abbildung 5.18(a) zu sehen. Die Interpretation kann mit Hilfe einer analytischen Überlegung durchgeführt werden. Die plastische Scherung γ kann nach [Hull und Bacon, 2011] durch einen Zusammenhang zwischen der mittleren überstrichenden Fläche \bar{A} und der Anzahl an Versetzungen pro Volumen n beschrieben werden:

$$\gamma = bn\bar{A}. \quad (6.1)$$

Durch diesen Zusammenhang kann leicht abgeleitet werden, dass eine gleichbleibende plastische Scherung bei höherer Versetzungsdichte eine geringere mittlere überstrichene Fläche \bar{A} impliziert. Das in Abbildung 5.18 beobachtete Modellverhalten kann demnach als eine Verfestigung durch ein sich ausbildendes Versetzungsnetzwerk interpretiert werden, bei dem eine höhere Versetzungsdichte eine geringere abgescherte Fläche der individuellen Versetzung zur Folge hat. Dies ist in Übereinstimmung mit den Beobachtungen in den diskreten Simulationen [Stricker et al., 2018].

Kollineare Reaktionen Im Gegensatz zu dem Modell der Lomer Reaktionen ist das Modell der kollinearen Reaktionen weniger komplex, da letzterem keine Annahme einer stabilen Versetzungsstruktur zugrunde liegt. Die homogenisierte Formulierung der kollinearen Reaktionen beschränkt sich auf eine Beschreibung der Reduktion der Versetzungsdichte und Krümmungsdichte durch eine Annihilation zweier Versetzungslinien auf kollinearen Gleitsystemen. In dem vereinfachten System mit zwei Gleitsystemen führt die kontinuierliche Reduktion der mobilen Versetzungsdichte durch die kollineare Reaktion zu einer Abflachung des Verlaufs der akkumulierten plastischen Scherung, siehe Abbildung 5.20 und 5.21. Da für die kollineare Reaktion angenommen wird, dass jede Begegnung kollinearer Versetzungslinien zu einer Annihilation führt, d.h. $\eta_{\text{koll}}^{\xi} = 1$, enthält die Reaktionsgleichung (4.14) eine direkte Spannungsabhängigkeit. Diese wird allerdings durch die zusätzliche Spannungsabhängigkeit der Rate der plastischen Abscherung kompensiert, wodurch eine Variation der Schubspannung keinen entscheidenden Einfluss auf die erreichte plastische Scherung am Ende der Simulation hat (Abbildung 5.20). Hingegen ist die maximal erreichte Schubspannung proportional zu $\sqrt{\bar{\rho}}$, was durch die Berücksichtigung des mittleren Versetzungsabstands in der Reaktionsrate in der Form $1/L = \sqrt{\bar{\rho}_M + \bar{\rho}_S}$ verursacht ist (Abbildung 5.21). Die homogenisierte Formulierung der kollinearen Reaktion beschreibt also ähnlich der Lomer Reaktion in erster Linie einen Mechanismus, der die Versetzungsbewegung gleitsystemübergreifend limitiert.

Schlussfolgerungen und Vergleich mit bestehenden Kontinuumstheorien Für die Untersuchung der stabilisierenden Versetzungsmechanismen in Kapitel 5.3 kann geschlossen werden, dass das in Kapitel 4.3 präsentierte Kontinuumsmodell der Lomer und kollinearen Reaktionen zentrale Beobachtungen aus der diskreten Versetzungsdynamik reproduzieren kann: (1.) Die Bewegung einzelner Versetzungen ist im Versetzungsnetzwerk begrenzt, da ein erheblicher Teil der Linienlänge an Versetzungsreaktionen beteiligt ist. (2.) Die Versetzungsabstände innerhalb des Versetzungsnetzwerks erstrecken sich

über mehrere Größenordnungen, siehe auch Punkt II. und IV. in Kapitel 4.1. Der wesentliche Fortschritt der präsentierten Formulierung gegenüber bestehenden Kontinuumsmodellen, die eine Art der Immobilisierung mobiler Versetzungen berücksichtigen, z.B. [Kubin et al., 2008a, Li et al., 2014], besteht in der gleitsystemübergreifenden Stabilisierung von Versetzungsbewegung entsprechend der konkreten Gleitsystempaarung. Dadurch werden die dreidimensionalen Eigenschaften von Versetzungsnetzwerken in eine Kontinuumsbeschreibung überführt. Im Gegensatz dazu verbleiben die bisherigen Modelle in der Regel bei zweidimensionalen, d.h. gleitsystemgebundenen Formulierungen, nach denen entsprechend der Theorie von Kocks und Mecking die Versetzungsbewegung durch eine „mittlere freie Weglänge“ [Kocks und Mecking, 2003] begrenzt wird. Das Modellverhalten der Lomer Reaktionen ist allerdings durch einige Annahmen gekennzeichnet, die zur Homogenisierung der Beobachtungen in [Stricker et al., 2018] getroffen wurden:

- i. Die entstehende Netzwerkversetzungsdichte ρ_{net}^{ξ} ist innerhalb der berücksichtigten Streuung der Versetzungsabstände, d.h. zwischen L_{min} und L_{max} , homogen verteilt, wodurch die Kollisionswahrscheinlichkeit mobiler Versetzungen mit der stabilisierten Versetzungsdichte ρ_{S}^{ξ} (der reaktionsfähige Anteil von ρ_{net}^{ξ}) gleich groß ist.
- ii. Die Begrenzung der Streuung der Versetzungsabstände ist an die in [Stricker et al., 2018] gemessene Streuung der Radien der generierten Versetzungen angelehnt. Allerdings weisen auch die Ausbreitungswege der Versetzungen eine ähnliche Streuung auf.
- iii. Entstehende Versetzungsabstände $> L_{\text{cr,Lomer}}^{\xi}$ bilden keine Lomer Reaktionen. Ein Einfluss dieser als instabil angenommenen Lomer Reaktionen auf die Verfestigung wird daher vernachlässigt.

Insbesondere die für Annahme i. und ii. gewählten Parameter wurden für den Zweck einer direkten Reproduktion der Beobachtungen aus [Stricker et al.,

2018] gewählt und sind daher für die hier durchgeführte Untersuchung angepasst. Die Schlussfolgerung ist allerdings in soweit allgemeingültig, als dass das präsentierte Modell auch qualitativ die Komplexität der gleitsystemübergreifenden Versetzungsmechanismen entsprechend den Beobachtungen beschreiben kann.

6.3.4. Zusammenspiel der Mechanismen

In der Untersuchung in Kapitel 5.4 werden die Mechanismen, die bisher getrennt voneinander betrachtet wurden zusammengeführt. Insbesondere impliziert dies die Kombination der *Multiplikationsmechanismen* mit den *stabilisierenden* Mechanismen der Versetzungsnetzwerke. Die konzeptionelle Trennung des Begriffs *Versetzung* von der *Versetzungslinie* bedeutet auch in der Zusammenfassung aller Mechanismen die Generierung neuer Versetzungen durch Multiplikation und die Beeinflussung deren Linienlänge durch nachfolgende Reaktionen. Diese beinhalten die Verlängerung (durch Expansion), oder die Verkürzung (durch Beteiligung an Versetzungsreaktionen) der Linienlänge. Diese Mechanismen werden in der CDD allerdings nur in homogenisierter Form repräsentiert.

Lomer und gleitfähige Reaktionen Für das vereinfachte System mit drei Gleitsystemen unter Berücksichtigung von Lomer und gleitfähigen Reaktionen bedeutet die Kopplung dieser beiden Mechanismen eine Erhöhung der Versetzungsdichte durch Multiplikation, wobei die Dichte aufgrund der sich bildenden Lomer Reaktionen stabilisiert wird, siehe Abbildung 5.23(a). Die Erhöhung der Versetzungsdichte führt zu einer Verringerung der Versetzungsabstände innerhalb des Netzwerks. Dadurch wird eine Limitierung der Versetzungsausbreitung im Sinne einer Begrenzung des Beitrags einer einzelnen Versetzung zur Plastizität erreicht, wie auch aus Abbildung 5.18 deutlich wird. Der Verlauf der totalen Versetzungsdichte in Abbildung 5.23 ist qualitativ vergleichbar mit einem Fließspannungs-basierten Ansatz (Abbildung 5.8). Durch die homogenisierte Beschreibung des Versetzungsnetzwerks wird allerdings

eine gleitsystemübergreifende Limitierung der Versetzungsbewegung erreicht. Dadurch können Versetzungsaktivitäten gleitsystemübergreifend beeinflusst werden. So erhöht sich auch die Netzwerkdicke auf den inaktiven Gleitsysteme, deren Evolution (Erhöhung oder Verringerung) ausschließlich durch Lomer Reaktionen aktiver Gleitsysteme mit inaktiven Gleitsystemen verursacht ist. An dieser Stelle ist zu beachten, dass der Begriff *mobile Versetzungsdichte* die *Möglichkeit* einer Versetzung zur Ausbreitung charakterisiert, nicht aber deren tatsächliche Mobilität. Auf inaktiven Gleitsystemen existiert daher trotz der verschwindenden Versetzungsgeschwindigkeit eine mobile Versetzungsdichte. Weiterhin verschwindet die Krümmungsdichte im Laufe des Relaxationsprozesses, wie in Abbildung 5.25(a) dargestellt. Dies reproduziert die in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen beobachtete Versetzungsstruktur, in der die Versetzungskrümmung in Endpunkten von Versetzungsreaktionen konzentriert ist [Stricker et al., 2018]. Auch darin unterscheidet sich die Kombination der Versetzungsmultiplikation mit der Versetzungsstabilisierung von dem Fließspannungs-basierten Ansatz. Mit letzterem steigt die Krümmungsdichte monoton und konvergiert auf einen Wert > 0 , siehe Abbildung 5.9(a). Die daraus resultierende Versetzungskonfiguration beschreibt einen physikalisch schwer zu interpretierenden Zustand, der einerseits gekrümmte Versetzungslinien enthält, andererseits aber durch das Erreichen der Fließspannung spannungsfrei ist. In diesem Sinne ist die Interpretation der konvergierten Versetzungskonfiguration in Abbildung 5.23 bzw. 5.25 konzeptionell näher an einer Struktur von Versetzungsnetzwerken, die aus geraden Versetzungssegmenten besteht. Bereits aus der Untersuchung dieses vereinfachten Systems kann daher geschlossen werden, dass die Kopplung der Gleitsysteme durch Lomer und gleitfähige Reaktionen zentrale Beobachtungen der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen reproduzieren kann: (1.) Die Ausbreitung der durch Multiplikationsmechanismen generierten Versetzungen ist durch deren Beteiligung an weiteren Versetzungsreaktionen begrenzt (siehe Punkt II. in Kapitel 4.1); (2.) Das entstehende Versetzungsnetzwerk besteht aus geraden Versetzungslinien, deren Krümmung

in den Endpunkten von Versetzungsreaktionen konzentriert ist (siehe Punkt III. in Kapitel 4.1).

Zusammenspiel aller Mechanismen in 12 Gleitsystemen Der Anteil der stabilen Lomer Reaktionen $\eta_{\text{lomer}}^{\xi}$ (Gleichung 4.21) bestimmt zum einen die Stabilität der gebildeten Lomer Reaktion (siehe Gleichung 4.14), zum anderen führt die mit $\eta_{\text{lomer}}^{\xi}$ verknüpfte kritische Schubspannung $\tau_{\text{cr,lomer}}^{\xi}$ bei einer Spannungserhöhung zu einer Remobilisierung der stabilen Versetzungsstruktur. Dies impliziert eine Umwandlung der Dichte der Lomer Reaktionen $\rho_{\text{lomer}}^{\xi}$ und der stabilisierten Versetzungsdichte ρ_{S}^{ξ} in mobile Versetzungsdichte ρ_{M}^{ξ} , siehe Gleichungen (4.22). Die Möglichkeit der Remobilisierung der stabilen Versetzungsstruktur erlaubt die Formulierung einer Anfangsbedingung, die aus einem relaxierten Versetzungsnetzwerk besteht. Die Mobilität dieses Versetzungsnetzwerks ist dabei durch die Stärkenverteilung der Lomer Reaktionen (L_{min} und L_{max}) getragen. Dieser Mechanismus verursacht das Systemverhalten im Anfangsbereich der Simulation mit 12 kfz Gleitsystemen, siehe Abbildung 5.26. Die totale Versetzungsdichte teilt sich nach Überschreiten der Fließspannung gleichmäßig in mobile Versetzungsdichte und Netzwerkversetzungsdichte. Die Fließspannung ist dabei durch die schwächste Lomer Reaktion (L_{max}) gekennzeichnet. Ein initialer Dichteabfall, wie in Abbildung 5.13 sichtbar, kann hier nicht eintreten, da in der lokalen Simulation Versetzungslinien das System nicht verlassen können. Der leicht verstärkte Anstieg der Versetzungsdichte direkt nach Überschreiten der Fließspannung ist zudem durch das Aufspalten der Lomer Reaktion in zwei mobile Versetzungslinien erklärbar, wie durch Gleichung (4.13) beschrieben. Die Tatsache, dass ein solcher Dichteanstieg in der diskreten Simulation nicht beobachtet wird, deutet darauf hin, dass die Gewichtung der Lomer Reaktion mit dem Faktor 0.5 ein unteres Limit darstellt. Es wäre denkbar, dass durch eine geometrische Betrachtung der Reaktionsbildung eine genauere Beschreibung des Reaktionsprozesses möglich wird.

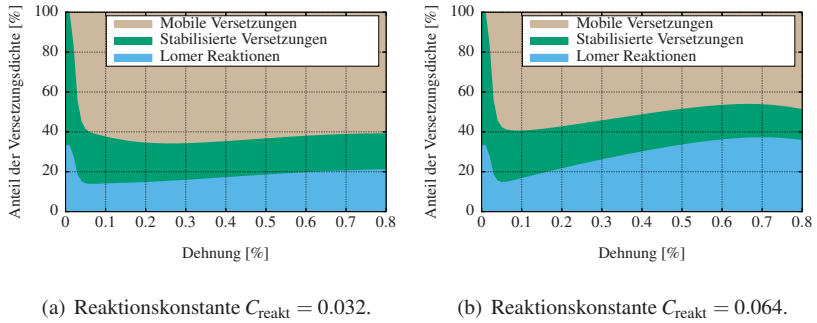


Abbildung 6.3.: Evolution der Anteile der mobilen Versetzungsdichte ρ_M , stabilisierten Versetzungsdichte ρ_S und der Dichte der Lomer Reaktionen ρ_{Lomer} aus Abbildung 5.28(b) an der Gesamtdichte ρ summiert über alle Gleitsysteme für eine Reaktionskonstanten von $C_{\text{reakt}} = 0.032$ (a) und $C_{\text{reakt}} = 0.064$.

Der Mechanismus der Remobilisierung erlaubt eine dynamische Bildung und wieder-aufbrechen von Lomer Reaktionen bei einer Spannungserhöhung. Dabei ist das Systemverhalten in der Simulation mit 12 kfz Gleitsystemen durch ein komplexes Zusammenspiel aller Gleitsysteme und der berücksichtigten Versetzungsmechanismen (gleitfähige, Lomer, kollineare Reaktion und Quergleiten) gekennzeichnet. Bei einer entsprechenden Wahl der Reaktionsparameter C_{reakt} ist unter Vernachlässigung von Versetzungstransport über Elementgrenzen hinweg ein Anstieg der Versetzungsdichte zu beobachten, der die mittlere Dichteevolution der diskreten Simulation nahezu direkt abbildet, siehe Abbildung 5.26. Abbildung 6.3(a) zeigt die Evolution der Anteile der Versetzungsdichten aller Gleitsysteme an der totalen Versetzungsdichte (aus Abbildung 5.26(b) berechnet) für $C_{\text{reakt}} = 0.032$. Es ist zu sehen, dass nach der initialen Mobilisierungsphase der relative Anteil aller Versetzungsdichten nahezu konstant bleibt. Dies deutet auf ein stabiles Zusammenspiel aller berücksichtigten Versetzungsmechanismen hin und reproduziert im Mittel die in der diskreten Versetzungsdynamik beobachteten Kaskaden aus Versetzungsmultiplikation und Stabilisierung von Versetzungsbewegung [Stricker et al., 2018]. Da in der

lokalen Simulation Versetzungsdichte das Mittelungsvolumen nicht verlassen kann, ist allerdings der durch solche Kaskaden entstehende nichtlokale Charakter von Versetzungsnetzwerken nicht abbildbar. Es wird zudem beobachtet, dass der Reaktionsparameter C_{reakt} bei einer Variation innerhalb der durch diskrete Versetzungsdynamiksimulationen [Roters et al., 2019, Stricker und Weygand, 2015] bestimmten Größenordnung das Systemverhalten maßgeblich beeinflusst. Aus Abbildung 5.28 und 6.3(b) wird deutlich, dass eine Wahl von $C_{\text{reakt}} = 0.064$ zu einem Verhalten führt, das den Anteil der mobilen Versetzungsdichte über den Großteil des Belastungsbereichs hinweg kontinuierlich reduziert, siehe Abbildung 6.3(b). Im Gegensatz dazu wird der Verlauf der Dichte der Lomer Reaktionen nahezu nicht beeinflusst, siehe Abbildung 5.28(b). Dieses Verhalten kann durch zwei Modellannahmen erklärt werden: (1.) Die stabilisierte Versetzungsdichte ρ_S ist innerhalb der Streuung der Versetzungsabstände homogen verteilt, wodurch die Kollisionswahrscheinlichkeit mobiler Versetzungen über den kompletten Stabilitätsbereich hinweg gleich ist. (2.) Die Rate des Dichteverlusts auf beiden reagierenden Gleitsystemen durch Versetzungsreaktionen ist gleich der Produktionsrate von Versetzungsreaktionen (siehe Gleichung (3.6), bzw. (4.15)). Insbesondere letztere Annahme beschreibt ein oberes Limit der Dichtereduktion, welches in einer homogenisierten Betrachtung von Versetzungsreaktionen nicht generell zutreffend ist. Für die Dichtereduktion durch Reaktionen kann daher ein Korrekturfaktor eingeführt werden, wie in Anhang B.2 für gleitfähige Reaktionen beschrieben. Eine analoge Überlegung lässt sich auch für Lomer und kollineare Reaktionen durchführen.

Diese Erklärung kann auch für das Verhalten der nichtlinearen Formulierung (Abbildung 5.29) gegeben werden, die trotz identischer Parameter deutlich von der lokalen Simulation abweicht. Darüber hinaus muss für eine stabile Dichteevolution in der nichtlokalen Formulierung der Dichteverlust durch Annihilationseffekte, oder Versetzungstransport mit der Dichteproduktion im Gleichgewicht stehen. Wird innerhalb eines Mittelungsvolumens nicht ausreichend mobile Versetzungsdichte produziert (durch Multiplikationsmechanismen, Expansion generierter Versetzungen, oder Remobilisierung von Lomer

Reaktionen), um den Dichteverlust zu kompensieren, ist die Dichteentwicklung negativ. Nach einer anfänglichen Dichteproduktion ist das Systemverhalten der nichtlokalen Simulation durch Versetzungsfluss, bzw. durch Reduktion von Versetzungslinienlänge dominiert (Abbildung 5.29(b)). Dadurch ist der Einfluss der Versetzungsmultiplikation zu gering, um eine stabil ansteigende Versetzungsdichte hervorzurufen. Eine Abhilfe könnte durch eine Überarbeitung der oben genannten Annahmen geschaffen werden, insbesondere im Hinblick auf den Dichteverlust durch Versetzungsreaktionen auf den reagierenden Gleitsystemen.

Bewertung und Vergleich mit bestehenden Ansätzen Für eine Bewertung des Zusammenspiels der berücksichtigten Versetzungsmechanismen bestehend aus gleitfähigen, Lomer, kollinearen Reaktionen und Quergleiten kann über die bereits in Kapitel 6.3.2 und 6.3.3 getroffene Schlussfolgerungen hinausgehend folgendes festgehalten werden: Die Berücksichtigung der gleitsystemübergreifenden Versetzungsmechanismen erweitert den bestehenden gleitsystembasierten Ansatz um dreidimensionale Aspekte von Versetzungsnetzwerken. Als zentraler Mechanismus kann das Zusammenspiel mehrerer Gleitsysteme identifiziert werden, welches einerseits neue Versetzungen generiert, andererseits aber auch deren unbegrenzte Ausbreitung unterbinden kann. Diese Gleitsystemkopplung kann als der wichtigste Fortschritt des Modells gegenüber bestehenden Kontinuumsmodellen, die die Plastizität rein gleitsystemgebunden betrachten, festgehalten werden, z.B. [Kubin et al., 2008a, Li et al., 2014, Ma und Roters, 2004]. Das in dieser Arbeit präsentierte und diskutierte Modell trennt die gleitsystemgebundene Abscherung, also der Mechanismus, der plastische Verformung verursacht, von gleitsystemübergreifenden Mechanismen, die die *Rate* dieser Abscherung verändern. Die Mobilität des Versetzungsnetzwerks wird zudem durch eine Streuung von Versetzungsabständen beschrieben, wie sie aus diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018] hervorgehen. Dadurch wird die Bedeutung des *mittleren* Versetzungsabstands als beschreibende Variable abgeschwächt und durch einen Spannungsbereich ersetzt, der die Stärke des Versetzungsnetzwerks beschreibt.

Die Stärke des Versetzungsnetzwerks wird im Wesentlichen durch die Lomer Reaktion als *explizit* formulierte Versetzungsreaktion getragen. Die Kopplung von Versetzungslinien auf verschiedenen Gleitsystemen durch die verbleibenden gleitsystemübergreifenden Mechanismen wird nur in Form eines Interaktionsterms berücksichtigt. Die Formulierung ist daher stark auf Lomer Reaktionen fokussiert und könnte durch eine kinematische Formulierung gekoppelter Versetzungssegmente ergänzt werden. Die Untersuchung in Kapitel 5.2 - 5.4 wird mit dem Ziel verfolgt, das in der Kontinuumstheorie umgesetzte Modell mit Beobachtungen von gleitsystemübergreifenden Mechanismen in der diskreten Versetzungsdynamik abzugleichen. Der Vergleich in Kapitel 5.2.3 und 5.4.2 erfolgt in einer idealisierten, hochsymmetrischen Kristallorientierung. Die untersuchten Systeme sind als Modellsysteme zu verstehen, die auf eine möglichst homogene und gleichförmige Versetzungsevolution auf aktiven Gleitsystemen ausgelegt sind. Versetzungsmechanismen, die in der Einfachgleitphase der Einkristallverformung (Stufe I) eine Rolle spielen, wie z.B. Dipolbildung und die Annihilation von Schraubenversetzungen, wurden in dieser Arbeit nicht explizit betrachtet. Zur Beschreibung dieser Mechanismen erscheint eine erweiterte Betrachtung von Stufen- und Schraubenversetzungen in SSD-Konfigurationen als notwendig, wie z.B. in [Monavari et al., 2016] beschrieben. Dies ist durch die hier verwendete kinematische Formulierung nach Gleichung (2.25) nicht gegeben. Reale Verformungsvorgänge sind zudem oftmals instabil, wodurch auch in hochsymmetrischen Kristallorientierungen selten alle Gleitsysteme gleichzeitig am gleichen Ort aktiv sind [Kocks und Mecking, 2003, Madec et al., 2003]. Diesbezüglich zeigt die Untersuchung in Kapitel 5.1.2, dass die Versetzungsinteraktion über Spannungsterme eine physikalisch nachvollziehbare Abbildung der mittleren Dichteevolution in nicht hochsymmetrischen Kristallorientierungen erlaubt. In Experimenten und in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen wird allerdings die Bildung von Zellstrukturen beobachtet, welche die Versetzungsmikrostruktur in der Stufe II der Einkristallverformung auszeichnet [Basinski und Basinski, 1979, Kocks und Mecking, 2003, Madec et al., 2002,

Pande und Hazzledine, 1971b]. Die Untersuchung solcher heterogener Strukturen auf der Ebene der Kontinuumstheorie ist Gegenstand aktueller Forschung, z.B. in [Groma et al., 2016, Wu et al., 2018], steht allerdings nicht im Fokus der vorliegenden Arbeit. In diesem Sinne sind die Untersuchungen in dieser Arbeit als Modellversuche zu sehen, die Formulierungen für die Übertragung gleitsystemübergreifender Versetzungsmechanismen in eine Kontinuumstheorie präsentieren. Die Kontinuumsbeschreibung erhebt aber keinen Anspruch auf eine vollständigen Abbildung des Mikrostrukturverhaltens in der Stufe II der Einkristallverformung.

6.4. Versetzungsnetzwerke im Übergangsbereich zwischen lokaler und nichtlokaler Formulierung

Eines der zentralen Erkenntnisse aus [Stricker et al., 2018] ist die Tatsache, dass sich Versetzungen nach ihrer Generierung nur begrenzt ausbreiten bevor sie an weiteren Reaktionen oder Quergleitmechanismen beteiligt sind. Die einzelnen Multiplikationsereignisse, wie auch die Ausbreitung der generierten Versetzungen sind lokale Phänomene. Dennoch kann eine einzelne Versetzung mehrere Reaktionen auslösen, wodurch eine Kaskade an Versetzungsreaktionen stattfindet, die sich über weite Teile des Systems erstrecken kann. Die beobachteten Mechanismen beschreiben daher einerseits zeitlich begrenzte und örtlich lokalisierte Ereignisse, die andererseits aber nichtlokale Auswirkungen haben können. Zudem werden mehrere Gleitsysteme miteinander verbunden. Der Transport von Versetzungslinien über große Teile des Systems kommt daher nicht maßgeblich durch individuelle Mobilität zustande, sondern ist vielmehr durch die kollektive Interaktion und Reaktion der Versetzungen bedingt.

Der Mechanismus des Versetzungstransports in Netzwerken unterscheidet sich konzeptionell von der Art und Weise, wie Versetzungstransport in versetzungs-basierten Kontinuumstheorien üblicherweise beschrieben und verstanden wird. Insbesondere die kinematische Formulierung der CDD ist von der Idee getragen, dass Versetzungstransport durch die Bewegung individueller Versetzungslinien über weite Teile des Systems stattfindet, siehe Kapitel 2.3 und 3.1. Der konzeptionelle Widerspruch zwischen der gleitsystembasierten Beschreibung des Versetzungstransports und den kaskadenartigen Effekten in Versetzungs-netzwerken konnte in der vorliegenden Arbeit durch eine Modellierung von gleitsystemübergreifenden Versetzungsmechanismen zum Teil aufgelöst werden. Die berücksichtigten Versetzungsreaktionen und das Quergleiten modifizieren die Versetzungskonfiguration im gegebenen Zeitschritt, verändern aber nicht die zugrundeliegende Konzeption des Versetzungstransports.

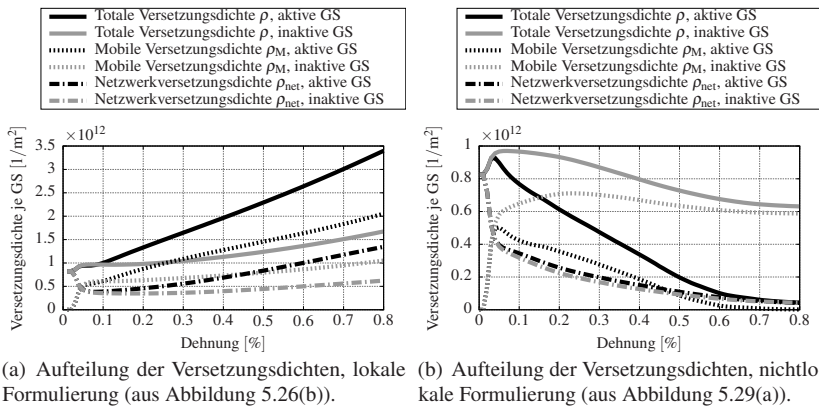


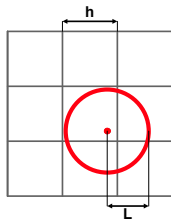
Abbildung 6.4.: Aufteilung der Versetzungsdichten je Gleitsystem mit der lokalen Formulierung aus Abbildung 5.26(b) für aktive und inaktive Gleitsysteme (a) und mit der nichtlokalen Formulierung aus Abbildung 5.29(a) mit Kurven für die totale Versetzungsdichte auf aktiven und inaktiven Gleitsystemen (b).

Abbildung 6.4 zeigt die Aufteilung der Versetzungsdichten für die lokale Formulierung aus Abbildung 5.26(b) und für die nichtlokale Formulierung aus

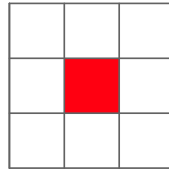
Abbildung 5.29(a) (ergänzt um Kurven für die totale Versetzungsdichte). Die zusammenfassende Betrachtung der Ergebnisse der lokalen Formulierung (Abbildung 6.4(a)), der nichtlokalen Formulierung (Abbildung 6.4(b)) und der Beobachtungen aus [Stricker et al., 2018] eröffnet die Frage, unter welchen Bedingungen der Versetzungstransport in einer Beschreibung der Mobilität von Versetzungsnetzwerken durch einen *Flussterms* für die Versetzungsdichte beschrieben werden muss. Der in der diskreten Simulation beobachtete Anstieg der Versetzungsdichte kann zwar durch das Kontinuumsmodell in der lokalen Formulierung im Mittel sehr genau abgebildet werden (Abbildung 5.26), es findet allerdings kein Versetzungstransport über Elementgrenzen hinweg statt. Die zugrundeliegenden physikalischen Mechanismen werden zwar durch Versetzungsbewegung hervorgerufen, diese Versetzungsbewegung wird aber numerisch nicht in Form eines Versetzungstransports über Elementgrenzen abgebildet. Der Einfluss von Versetzungskaskaden auf das Systemverhalten beschränkt sich in der lokalen Formulierung daher auf die gemittelte Versetzungsdichte und das gleichförmige Zusammenspiel aus Multiplikation und Stabilisierung (Abbildung 6.4(a), bzw. 6.3(a)). Die Generierung einer neuen Versetzung aufgrund Multiplikationsmechanismen geschieht in der Formulierung des Kontinuumsmodells nur innerhalb des betreffenden Volumenelements ohne Berücksichtigung der Abmessungen der generierten Versetzung. Diese Annahme kann als vernünftig gelten, solange die Abmessungen des Mittelungsvolumens größer sind, als der mittlere Versetzungsabstand. Dennoch kann auch unter dieser Bedingung davon ausgegangen werden, dass Versetzungen, die z.B. nahe den Elementgrenzen generiert werden, in anliegende Elemente transportiert und dort an weiteren Reaktionen beteiligt werden. Es ist denkbar, dass eine nichtlokale Auswirkung der Reaktionskaskaden auch durch eine geometrische Abschätzung abgebildet werden kann, die die lokalen Abmessungen der generierten Versetzungen mit den Abmessungen des Volumenelements ins Verhältnis setzt. Abbildung 6.5 zeigt in einer vereinfachenden Visualisierung die Abmessung L einer an einer zufällig gewählten Position innerhalb des zentralen Volumenelements generierten

Versetzung im Verhältnis zu der Kantenlänge h des quadratischen Volumenelements (a und d). Die Homogenisierung des Multiplikationsmechanismus in der lokalen und in der nichtlokalen Formulierung des Kontinuumsmodells nach Kapitel 4 beeinflusst nur das eigene Volumenelement ohne Berücksichtigung der Diskretisierung (b und e). Durch die Annahme einer Proportionalität zum mittleren Versetzungsabstand als Skalierung für die Abmessung der generierten Versetzungen, könnte bereits die Generierung von Versetzungsdichte in mehreren angrenzenden Volumenelementen erfolgen (c und f). Die Multiplikationsmechanismen sind damit nicht auf ein Volumenelement begrenzt, sondern erhöhen je nach Verhältnis zwischen örtlicher Diskretisierung und mittlerem Versetzungsabstand die Versetzungsdichte in angrenzenden Volumenelementen. Eine solche vereinfachte Beschreibung würde einen Versetzungstransport über Grenzen des eigenen Volumenelements hinaus ohne eine numerisch und rechnerisch aufwändige Formulierung des Versetzungsflusses entsprechend Gleichung (2.25) berücksichtigen.

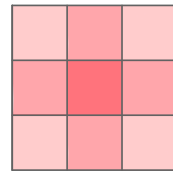
Für die Beantwortung der Frage hinsichtlich der Notwendigkeit eines Flussterms in den Evolutionsgleichungen der Versetzungsdichte ist eine genauere Untersuchung des Versetzungstransports in der Evolution von Versetzungsnetzwerken notwendig. Insbesondere ist es denkbar, dass der Transport von Versetzungen über weite Teile des Systems für die Bildung von Zellstrukturen deutlich relevanter ist, als in den hier untersuchten Systemen. Diese Frage kann allerdings auf der Ebene der Kontinuumstheorie, d.h. auf der *Modellierungsebene*, nicht beantwortet werden, sondern erfordern Untersuchungen auf der Ebene der diskreten Versetzungen.



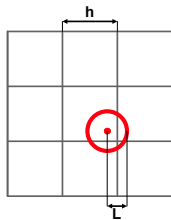
(a) Innerhalb des zentralen Element an einer zufälligen Position generierten Versetzung, $2L > h$.



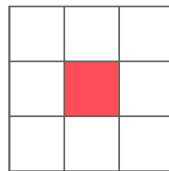
(b) Homogenisierung ohne Versetzungstransport, $2L > h$.



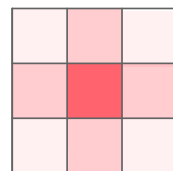
(c) Homogenisierung mit Versetzungstransport, $2L > h$.



(d) Innerhalb des zentralen Element an einer zufälligen Position generierten Versetzung, $2L < h$.



(e) Homogenisierung ohne Versetzungstransport, $2L < h$.



(f) Homogenisierung mit Versetzungstransport, $2L < h$.

Abbildung 6.5.: Visualisierung der Abmessung L einer an einer zufällig gewählten Position innerhalb des zentralen Volumenelements durch einen Multiplikationsmechanismus generierten Versetzung (vereinfachend kreisförmig dargestellt) im Verhältnis zu der Diskretisierung des Systems, beschrieben durch die Kantenlänge h der (quadratischen) Volumenelemente für $2L > h$ (a) und $2L < h$ (d). Homogenisierung einer Verteilung aus an zufälliger Position generierten Versetzungen ohne (b und e) und mit Berücksichtigung der Diskretisierung des Systems für $2L > h$ (c) und $2L < h$ (f).

7. Zusammenfassung und Ausblick

Auf Basis konkreter Beobachtungen in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen und Beschreibungen der Mikrostruktur, die durch experimentelle Untersuchungen erlangt wurde, konnte in dieser Arbeit eine Kontinuumsformulierung der Versetzungsmobilität in Versetzungsnetzwerken entwickelt werden. Die Verfestigung ergibt sich dadurch aus der Bildung von Versetzungsnetzwerken, deren Evolution wiederum in einem Zusammenspiel aus gleitsystemgebundener Versetzungsbewegung, Versetzungsinteraktion über Spannungsterme und der homogenisierten Beschreibung von Versetzungsreaktionen begründet ist.

Die Beschreibung der Bewegung gekrümmter Versetzungslinien über Kontinuumsvariablen impliziert durch die kinematische Formulierung eine Erhöhung der abgescherten Fläche der Versetzung unter Verlängerung ihrer Umrandung, d.h. der Linienlänge der Versetzung. Die daraus folgende Rate der plastischen Abscherung je Gleitsystem kann durch Versetzungsinteraktionen über Spannungsterme modifiziert werden. Die Abbildung kurzreichweitiger Interaktionen innerhalb eines Mittelungsvolumens über Interaktionsspannungsterme skaliert die lokale Fließspannung mit der Versetzungsdichte auf allen Gleitsystemen. Die Berücksichtigung der Stärke der individuellen Gleitsystempaarung erlaubt dabei eine Konzentration der Verformung auf dominanten Gleitsystemen, was vergleichbar ist mit Beobachtungen in der diskreten Versetzungsdynamik. Insbesondere in der kollinearen Gleitsystempaarung erfolgt in Konfigurationen mit heterogener Spannungs-, oder Versetzungsdichteverteilung eine Unterbindung der simultanen Gleitsystemaktivierung. Diese Spannungsterme dienen

somit der Formulierung von Mobilitätsgesetzen für die gleitsystembasierte Versetzungsbewegung.

Die Motivation für die Entwicklung einer Kontinuumsbeschreibung der Versetzungsmobilität in Netzwerken bestand in der Homogenisierung von Versetzungsreaktionen im Zuge des Übergangs zu einer Formulierung, die schneidende Gleitsysteme beinhaltet. Zudem stellen Beobachtungen in diskreten Versetzungsdynamiksimulationen und experimentellen Untersuchungen die Konzeption bestehender gleitsystembasierter Kontinuumstheorien insbesondere im Hinblick auf Versetzungsmultiplikation in Frage. Aus diesem Grund wurde eine Kontinuumsbeschreibung entwickelt, die gleitfähige, Lomer, kollineare Reaktionen und Quergleiten im Form von Quell und Senktermen für mobile Versetzungsdichte auf Basis einer Gleitsystemkopplung abbildet. Der zentrale Mechanismus ist dabei das Zusammenspiel mehrerer Gleitsysteme, welcher einerseits neue Versetzungen generiert (Versetzungsmultiplikation), andererseits aber auch deren unbegrenzte Ausbreitung unterbinden kann (Stabilisierung von Versetzungsbewegung). Die Untersuchung des Aspekts der Versetzungsmultiplikation durch Quergleiten und gleitfähige Reaktionen ergibt, dass die Generierung neuer Versetzungen durch das Zusammenspiel mehrerer Gleitsysteme, sowie die resultierende Erhöhung der Versetzungsdichte auf inaktiven Gleitsystemen im Einklang mit Beobachtungen in der diskreten Versetzungsdynamik stehen. Die Stabilisierung der Versetzungsbewegung wird insbesondere durch die Umwandlung mobiler Versetzungsdichte in Netzwerkversetzungsdichte erreicht. Letztere besteht aus Lomer Reaktionen und von Lomer Reaktionen stabilisierten Versetzungen. Die Mobilität des entstehenden Versetzungsnetzwerks ist durch eine Stärkenverteilung der Lomer Reaktionen gekennzeichnet. Dadurch wird eine lokale Fließspannung beschrieben, die über einen definierten Bereich verteilt wird und mit der Versetzungsdichte skaliert. Die Untersuchungen in vereinfachten Konfigurationen zeigen entsprechend der Beobachtung in der diskreten Versetzungsdynamik die Reproduktion eines Versetzungsnetzwerks, das sich stetig verdichtet, aber dennoch variierende Versetzungsabstände aufweist. Die gleitfähigen, Lomer, kollinearen Reaktionen sowie Quergleiten

zeigen unter Vernachlässigung des Versetzungstransports über Elementgrenzen ein stabiles Zusammenspiel zwischen Versetzungsmultiplikation und den stabilisierenden Mechanismen. Allerdings wird deutlich, dass einige Modellannahmen zur Begrenzung der Versetzungsausbreitung ein oberes Limit beschreiben, das nicht generell zutreffend ist. Dies äußert sich zum einen in einem deutlichen Einfluss des Reaktionsparameters, der die Reaktionsrate mit der entstehenden Versetzungsdichte, d.h. Länge der entstehenden Reaktion, skaliert und zum anderen in einem gänzlich unterschiedlichen Verlauf der Versetzungsdichte mit und ohne Berücksichtigung des Versetzungstransports über Elementgrenzen.

Insbesondere in Bezug auf das Modellverhalten in nichtlokalen Kontinuumsformulierungen können weitere Arbeiten abgeleitet werden. Das in dieser Arbeit entwickelte Kontinuumsmodell zeigt grundsätzliche Übereinstimmung mit Beobachtungen in diskreten Simulationen. Es bietet sich allerdings an, die Wahl einiger Modellparameter durch geometrische Überlegungen zu überprüfen, oder gar die Parameter selbst durch kinematische Beschreibungen zu ersetzen. Insbesondere bietet sich hierfür eine kinematische Formulierung von Versetzungssegmenten an, die über Gleitsysteme gekoppelt sind. Als vorbereitende Arbeit sollte der Einfluss des Versetzungstransports auf die Evolution von Versetzungsnetzwerken in der diskreten Versetzungsdynamik näher untersucht werden. Da sich die Formulierung in dieser Arbeit auf Mehrfachgleiten beschränkt, könnte weiterhin eine explizite Berücksichtigung von Versetzungsmechanismen, die in der Einfachgleitung relevant werden, wie z.B. Dipolbildung und Annihilation von Schraubenversetzungen, eine umfassendere Kontinuumsbeschreibung der Einkristallverformung bieten.

Anhang

A. Versetzungsinteraktion in phänomenologischen Modellen

Eine Produktion von Versetzungsdichte entsprechend einer gleitsystembasierten Anwendung der Theorie von Kocks und Mecking (siehe [Kocks und Mecking, 2003, Mecking und Kocks, 1981]) kann in einer Kontinuumstheorie durch die Verwendung eines Produktionsterms nach Gleichung (2.14) erfolgen. Unter Vernachlässigung der Krümmungsdichte aus Gründen der Verdeutlichung ergibt sich die Evolutionsgleichung der Versetzungsdichte zu

$$\begin{aligned} \partial_t \rho^\xi &= -\nabla \cdot (v^\xi \kappa_\perp^\xi) + C v^\xi \rho^\xi \sqrt{\sum_{\xi=1}^N \rho^\xi} \quad \text{mit} \quad \kappa_\perp^\xi = \kappa^\xi \times \mathbf{m}^\xi \\ \partial_t \kappa^\xi &= \nabla \times (\rho^\xi v^\xi \mathbf{m}^\xi) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

mit der Anzahl der Gleitsysteme N unter Verwendung von Gleichung (2.14). Die Produktion von Versetzungsdichte in dieser Formulierung ist daher proportional zur Versetzungsgeschwindigkeit v^ξ und der Versetzungsdichte ρ^ξ des eigenen Gleitsystems. Dies ist konzeptionell vergleichbar mit Ansätzen in der Literatur [Kubin et al., 2008a,b, Li et al., 2014, Monavari und Zaiser, 2018, Reuber et al., 2014, Roters et al., 2019].

Abbildung A.1 zeigt den Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem für eine Anwendung von Gleichung (A.1) mit $C = 0.2$ in der in Kapitel 5.2.3

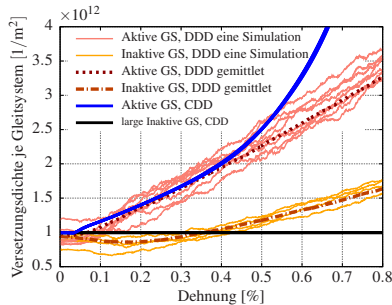


Abbildung A.1.: Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem (GS) mit einem phänomenologischen Modell nach Kocks und Mecking [Kocks und Mecking, 2003] für das in Abbildung 5.11 System im Vergleich zu diskreten Versetzungsdynamiksimulationen (DDD) aus [Stricker et al., 2018].

beschriebenen Systemkonfiguration. Auf den inaktiven Gleitsystemen gilt daher auch hier $v^{\xi} = 0$. Die Versetzungsdichte der Kontinuumsimulation zeigt auf den aktiven Gleitsystemen bis zu einer Dehnung von etwa 0.4 % einen nahezu linearen Anstieg, der relativ gut mit dem Dichteanstieg der diskreten Simulation übereinstimmt. Nach etwa 0.4 % Dehnung zeigt sich allerdings eine deutliche Überschätzung des Dichteanstiegs auf den aktiven Gleitsystemen. Auf den inaktiven Gleitsystemen ist hingegen keine Versetzungsevolution zu beobachten, während die diskrete Simulation einen deutlichen Dichteanstieg vorhersagt.

B. Weitere Untersuchungen zu Einflüssen auf Versetzungsmultiplikation

B.1. Einfluss der Anfangsbedingungen auf Versetzungsmultiplikation

Um den Einfluss der Versetzungskonfiguration im Ausgangszustand auf das Verhalten der Versetzungsmultiplikation zu untersuchen, wird eine initiale Versetzungskonfiguration bestehend aus Versetzungen mit einem Radius von $1\ \mu\text{m}$ gewählt. Es wird angenommen, dass alle Versetzungen den gleichen Liniensinn haben, woraus im Gegensatz zu Kapitel 5.2 eine initiale Krümmungsdichte von $q^{\xi} = \rho^{\xi} / (1\ \mu\text{m})$ resultiert. Direkt nach Überschreiten der Fließgrenze findet deshalb die in Kapitel 3.1 beschriebene Versetzungsexpansion statt. Analog zu der in Abbildung 5.13 gezeigten Simulation werden gleitfähige Reaktionen und Quergleiten kombiniert. Der Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem, sowie die totale Versetzungsdichte und die Anzahl generierter Versetzungen sind im Vergleich zu diskreten Versetzungsdynamiksimulationen in Abbildung B.1 dargestellt. Aufgrund der positiven Krümmungsdichte im Ausgangszustand zeit sich ein kontinuierlicher Anstieg der Versetzungsdichte nach überschreiten der Fließspannung, der zu Beginn der Simulation mit den diskreten Simulationen im Mittel übereinstimmt. Nach einer Dehnung von 0.4 % ist eine Überschätzung des Dichteanstiegs durch die CDD Simulation auf aktiven und auf inaktiven Gleitsystemen zu beobachten, wie in Abbildung B.1(a) dargestellt. Auch die

totale Versetzungsdichte zeigt in der CDD Simulation einen kontinuierlichen Anstieg, der mit dem Anstieg der Anzahl generierter Versetzungen korreliert (Abbildung B.1(b)). Analog zur Messung der Versetzungsdichte je Gleitsysteme ist nach einer Dehnung von 0.4% eine Überschätzung des Dichteanstiegs im Vergleich zu den diskreten Versetzungsdynamiksimulationen zu beobachten.

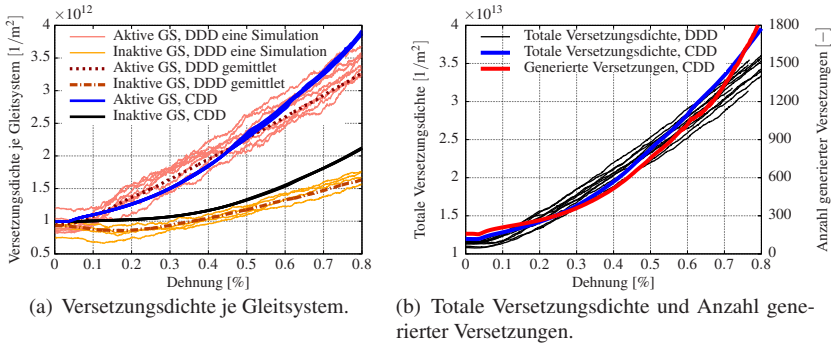


Abbildung B.1.: Wie Abbildung 5.13, aber mit einer Krümmungsdichte von $q^\xi = \rho^\xi / (1 \mu\text{m})$ im Ausgangszustand, was Versetzungen mit einem Radius von $1 \mu\text{m}$ repräsentiert.

B.2. Einfluss der Reaktionsparameter der gleitfähigen Reaktion auf Versetzungsmultiplikation

Dieses Kapitel dient der Untersuchung des Dichteverlustes durch die Wahl der Parameter in dem Modell der gleitfähigen Reaktion. Das Modell ist in Kapitel 3.3 und 4.2.1 beschrieben und enthält eine Reduktion der Versetzungsdichte auf den reagierenden Gleitsystemen (Gleichung 3.6). Durch eine Einführung eines Parameters C_{red} kann die Reduktion der Versetzungsdichte auf den reagierenden Gleitsystemen $\xi r'$ und $\xi r''$ mit der Versetzungsdichte, die durch die gleitfähige

Reaktion erzeugt wird, skaliert werden. Dadurch erweitert sich Gleichung (3.6) zu

$$\partial_t \rho_{\text{reakt}}^{\xi} = -C_{\text{red}} \partial_t \rho_{\text{reakt}} \quad \text{mit} \quad \xi = r', r'' \quad (\text{B.1})$$

Wenn für die Wahl der Parameter C_{netz} in Gleichung (4.2) und C_{red} die Bedingung $C_{\text{red}} > \frac{\pi}{4} C_{\text{netz}}$ gilt, führt der Prozess der gleitfähigen Reaktion zu einer Reduktion von Versetzungsdichte, die durch Expansion der generierten Versetzungen überwunden werden muss. Im Gegensatz zu den in Kapitel 5.2.3 gezeigten Ergebnissen, werden hier deshalb die Parameter zu $C_{\text{red}} = \frac{\pi}{4} C_{\text{netz}}$ mit $C_{\text{netz}} = 1$ gewählt. Für diesen Grenzfall hebt sich die Dichtereduzierung und Dichteproduktion durch die Kombination der Gleichungen (3.6) und (4.2) auf, so dass es keine Gesamtänderung der Versetzungsdichte durch die Reaktion gibt. Die Konfiguration der Simulation wird wie in Kapitel 5.2.3 beschrieben unter Berücksichtigung von Quergleiten und gleitfähigen Reaktionen verwendet. Für die Skalierung der Produktion von Versetzungsdichte wird der Parameter C_{gleit} in Gleichung (3.5) zu $C_{\text{gleit}} = 0.032$ gewählt. Dies ermöglicht einen Anstieg der Versetzungsdichte je Gleitsystem im Bereich der diskreten Versetzungsdynamiksimulationen, wie in Abbildung B.2 gezeigt. Wie in Abbildung 5.13(a) ist zu Beginn der Simulation eine leichte Reduktion der Versetzungsdichte auf aktiven Gleitsystemen zu beobachten. Weiterhin wird der Anstieg der Versetzungsdichte nach einer Dehnung von 0.4% überschätzt.

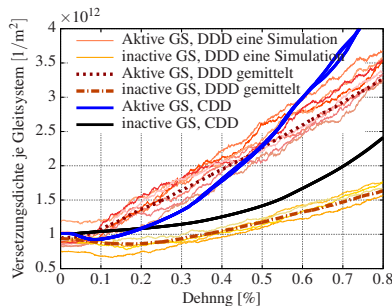


Abbildung B.2.: Wie in Abbildung 5.13(a), aber mit $C_{\text{gleit}} = 0.032$ und $C_{\text{red}} = \frac{\pi}{4}$, siehe Gleichung (B.1).

Um den Beitrag des Prozesses der gleitfähigen Reaktion detailliert zu betrachten, wird die gemittelte Versetzungsdichte im inneren Teil des Systems, gegeben durch ein Volumen mit der Hälfte der Kantenlänge des Gesamtsystems, untersucht. Wie im Kapitel 5.2.3 erläutert, ist die anfängliche Versetzungsdichte in diesem Bereich relativ homogen verteilt. Die Minimierung der Auswirkungen der Systemgrenzen dient hierbei der Untersuchung des Beitrag der Multiplikationsmechanismen zur Veränderung der Evolution der Versetzungsdichte. Der Vergleich der Dichteentwicklung für die beiden Parameter (gemäß Abbildung B.2 und Abbildung 5.13(a)) bis zu einer Dehnung von 0.1% ist in der Tabelle B.1 enthalten. Es ist zu sehen, dass für die Parameter in Abbildung B.2

Dehnung [%]	Mittlere Versetzungsdichte [$1/\mu\text{m}^2$]			
	$C_{\text{gleit}} = 0.032, C_{\text{red}} = \pi/4$		$C_{\text{gleit}} = 0.064, C_{\text{red}} = 1$	
	aktive GS	inaktive GS	aktive GS	inaktive GS
0	1.60	1.60	1.60	1.60
0.02	1.60	1.60	1.60	1.60
0.04	1.60	1.61	1.58	1.60
0.06	1.65	1.63	1.62	1.60
0.08	1.80	1.66	1.82	1.61
0.1	1.97	1.69	2.04	1.63

Tabelle B.1.: Evolution der Versetzungsdichte auf aktiven und inaktiven Gleitsystemen gemittelt über ein Volumen mit der Hälfte der Kantenlänge des Gesamtsystems bis zu einer Dehnung von 0.1%. Vergleich zwei verschiedener Parametersätze $C_{\text{gleit}} = 0.032, C_{\text{red}} = \frac{\pi}{4}$ (Abbildung B.2) and $C_{\text{gleit}} = 0.064, C_{\text{red}} = 1$ (Abbildung 5.13(a)).

die Versetzungsdichte im ausgewerteten Volumen auf aktiven und inaktiven Gleitsystemen stabil bleibt, bis aufgrund der Multiplikationsmechanismen ein Dichteanstieg beobachtet wird. Für die Parameter in Abbildung 5.13(a) wird auf aktiven Gleitsystemen vor dem Anstieg ein minimaler Abfall der Versetzungsdichte beobachtet.

Für die weitere Analyse des in Abbildung B.2 beobachteten Dichteabfalls kann die Versetzungsdichte, die das Simulationsvolumen verlässt, durch eine Messung des Versetzungsflusses durch die Außenflächen des Systems auf allen Gleitsystemen bewertet werden. Die Versetzungsdichte, die das System verlässt, beträgt $0.22 \times 10^{12} \text{ 1/m}^2$ bis zu einer Dehnung von 0.1 %. Dies bestätigt, dass der Dichteabfall durch den Einfluss der Systemgrenzen auf den Versetzungsfluss verursacht wird.

C. Einfluss der Interaktionsspannung auf die Evolution von Versetzungsnetzwerken

Die Interaktionsspannungsterme nach Gleichung (2.2) und (2.3) wirken in der Formulierung des Mobilitätsgesetzes (Gleichung 2.29) als lokale Fließspannung, die Versetzungsinteraktionen zwischen Gleitsystemen berücksichtigt. Da die Modellierung der Netzwerkmobilität in Kapitel 4.3 mit der kritischen Spannung zur Re-Mobilisierung von Lomer Reaktionen (Gleichung 4.19) bereits eine lokale Fließspannung enthält, ersetzt dieser Mechanismus den Lomer-Koeffizienten in der Interaktionsmatrix $a^{\xi\zeta}$. Die Hinderniswirkung existierender Lomer Reaktionen auf die Evolution mobiler Versetzungen wird über eine als $\tau_{\text{cr,lomer}}^{\xi}$ bezeichnete Interaktionsspannung berücksichtigt, welche die Dichte der Lomer Reaktionen $\rho_{\text{lomer}}^{\xi}$ auf allen Gleitsystemen enthält (Gleichung 4.24). Zusätzlich dazu kann die Interaktionsmatrix $a^{\xi\zeta}$ über einen Interaktionsspannungsterm nach Gleichung (4.25) berücksichtigt werden (als $\tau_{\text{cr,mat}}^{\xi}$ bezeichnet). Dieser Spannungsterm basiert auf der Formulierung nach [Franciosi et al., 1980], berücksichtigt aber die Hinderniswirkung existierender Lomer Reaktionen analog zu $\tau_{\text{cr,lomer}}^{\xi}$. Die Interaktionsmatrix $a^{\xi\zeta}$ reproduziert in diesem Fall die verfestigende Wirkung der kinematischen Kopplung der Versetzungslinien auf der jeweiligen Gleitsystempaarung, welche durch die Versetzungsreaktionen verursacht ist.

Im Folgenden wird der Einfluss der Interaktionsmatrix in den Interaktionsspannungstermen $\tau_{cr,lomer}^{\xi}$ und $\tau_{cr,mat}^{\xi}$ untersucht. Hierfür wird die in Kapitel 5.4.2 beschriebene Systemkonfiguration verwendet, wobei zur Vereinfachung die Flussterme des Gleichungssystems (4.23) vernachlässigt werden. Abbildung C.1(a) zeigt den Verlauf der Versetzungsdichte je Gleitsystem mit und ohne Formulierung der Interaktionsmatrix ($\tau_{cr,mat}^{\xi}$, bzw. $\tau_{cr,lomer}^{\xi}$) im Vergleich zu einem Mittel von 10 statistisch äquivalenten diskreten Versetzungsdynamiksimulationen.

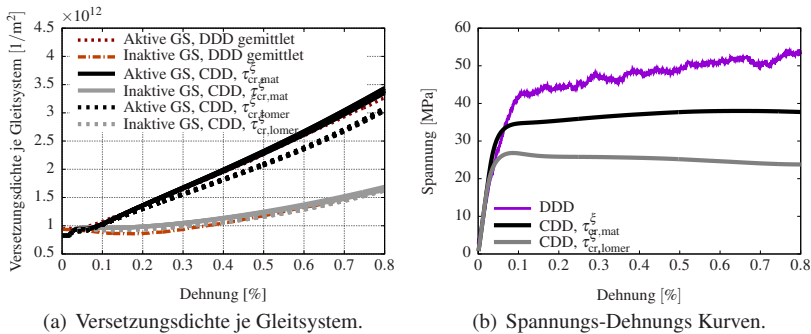


Abbildung C.1.: Versetzungsdichte je Gleitsystem mit einer Interaktionsspannung nach Gleichung (4.24) und nach Gleichung (4.25) im Vergleich zu einem Mittel von 10 statistisch äquivalenten diskreten Versetzungsdynamiksimulationen [Stricker et al., 2018] für aktive und inaktive Gleitsysteme (a), sowie die entsprechenden Spannungs-Dehnungs Kurven im Vergleich zu einer diskreten Versetzungsdynamiksimulation (b).

Es ist zu sehen, dass die Verläufe der Versetzungsdichten für beide Formulierungen der Interaktionsspannung nicht signifikant voneinander abweichen. Allerdings zeigen sich Unterschiede im Verlauf der Spannungs-Dehnungs Kurve, wie in Abbildung C.1(b) dargestellt. Die Spannungs-Dehnungs-Kurve mit der vereinfachten Interaktionsspannung, die nur Lomer Reaktionen berücksichtigt ($\tau_{cr,lomer}^{\xi}$) verläuft deutlich unterhalb der Kurve mit zusätzlicher Berücksichtigung der Interaktionsmatrix ($\tau_{cr,mat}^{\xi}$). Zudem ist mit $\tau_{cr,lomer}^{\xi}$ eine leichte

Entfestigung zu beobachten. Beide Kurven verlaufen allerdings unterhalb der Spannungs-Dehnungs-Kurve der diskreten Versetzungsdynamiksimulation.

Literaturverzeichnis

- E. C. Aifantis. The physics of plastic deformation. *International Journal of Plasticity*, 3(3):211–247, 1987.
- A. Alankar, D. P. Field, und H. M. Zbib. Explicit incorporation of cross-slip in a dislocation density-based crystal plasticity model. *Philosophical Magazine*, 92(24):3084–3100, 2012a.
- A. Alankar, I. N. Mastorakos, D. P. Field, und H. M. Zbib. Determination of Dislocation Interaction Strengths Using Discrete Dislocation Dynamics of Curved Dislocations. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 134(2):021018–021018–4, 2012b.
- A. Arsenlis und D. M. Parks. Modeling the evolution of crystallographic dislocation density in crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(9):1979–2009, 2002.
- E. Arzt. Size effects in materials due to microstructural and dimensional constraints: a comparative review. *Acta Materialia*, 46(16):5611 – 5626, 1998.
- S. J. Basinski und Z. S. Basinski. Plastic Deformation and Work Hardening. In F. R. N. Nabarro, editor, *Dislocations in Solids*, volume 4, pages 261–362. North-Holland Publishing, 1979.
- B. A. Bilby, R. Bullough, und E. Smith. Continuous distributions of dislocations: a new application of the methods of non-riemannian geometry. *Proceedings*

- of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 231(1185):263–273, 1955.
- E. Bitzek und P. Gumbsch. Atomistic study of drag, surface and inertial effects on edge dislocations in face-centered cubic metals. *Materials Science and Engineering: A*, 387–389(0):11–15, 2004.
- E. Bitzek und P. Gumbsch. Dynamic aspects of dislocation motion: atomistic simulations. *Materials Science and Engineering: A*, 400–401(0):40–44, 2005.
- V. V. Bulatov und W. Cai. *Computer simulations of dislocations*. Oxford series on materials modelling. Oxford University Press, Oxford, New York, 2006.
- H. H. M. Cleveringa, E. V. D. Giessen, und A. Needleman. Comparison of discrete dislocation and continuum plasticity predictions for a composite material. *Acta Materialia*, 45(8):3163 – 3179, 1997.
- B. Devincere, L. P. Kubin, und T. Hoc. Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations. *Scripta Materialia*, 54(5):741 – 746, 2006.
- B. Devincere, L. P. Kubin, und T. Hoc. Collinear superjogs and the low-stress response of fcc crystals. *Scripta Materialia*, 57(10):905 – 908, 2007.
- B. Devincere, T. Hoc, und L. P. Kubin. Dislocation Mean Free Paths and Strain Hardening of Crystals. *Science*, 320(5884):1745–1748, 2008.
- D. Dickel, K. Schulz, S. Schmitt, und P. Gumbsch. Dipole formation and yielding in a two-dimensional continuum dislocation model. *Physical Review B*, 90(9):094118, 2014.
- A. El-Azab. Statistical mechanics treatment of the evolution of dislocation distributions in single crystals. *Physical Review B*, 61(18):11956–11966, 2000.

- N. Fleck, G. Muller, M. Ashby, und J. Hutchinson. Strain gradient plasticity: theory and experiment. *Acta Metallurgica et materialia*, 42(2):475–487, 1994.
- N. A. Fleck und J. W. Hutchinson. Strain Gradient Plasticity. volume 33 of *Advances in Applied Mechanics*, pages 295 – 361. Elsevier, 1997.
- P. Franciosi, M. Berveiller, und A. Zaoui. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metallurgica*, 28(3):273–283, 1980.
- F. C. Frank und W. T. Read. Multiplication Processes for Slow Moving Dislocations. *Physical Review*, 79(4):722–723, 1950.
- S. Groh, B. Devincere, F. Feyel, L. P. Kubin, A. Roos, und J.-L. Chaboche. Discrete-continuum modeling of metal matrix composites plasticity. In *IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength*, pages 235–244. Springer, Dordrecht, 2004.
- S. Groh, B. Devincere, L. P. Kubin, A. Roos, F. Feyel, und J.-L. Chaboche. Size effects in metal matrix composites. *Materials Science and Engineering: A*, 400–401:279 – 282, 2005.
- I. Groma. Link between the microscopic and mesoscopic length-scale description of the collective behavior of dislocations. *Physical Review B*, 56(10): 5807–5813, 1997.
- I. Groma, F. F. Csikor, und M. Zaiser. Spatial correlations and higher-order gradient terms in a continuum description of dislocation dynamics. *Acta Materialia*, 51(5):1271 – 1281, 2003.
- I. Groma, M. Zaiser, und P. D. Ispánovity. Dislocation patterning in a two-dimensional continuum theory of dislocations. *Physical Review B*, 93(21): 214110, 2016.

- M. E. Gurtin und B. D. Reddy. Gradient single-crystal plasticity within a Mises–Hill framework based on a new formulation of self- and latent-hardening. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 68:134–160, 2014.
- J. P. Hirth und J. Lothe. *Theory of dislocations*. Wiley, New York, 1982.
- T. Hochrainer. *Evolving systems of curved dislocations: Mathematical foundations of a statistical theory*. PhD thesis, Universität Karlsruhe (TH), 2007.
- T. Hochrainer. Multipole expansion of continuum dislocations dynamics in terms of alignment tensors. *Philosophical Magazine*, 95(12):1321–1367, 2015.
- T. Hochrainer. Thermodynamically consistent continuum dislocation dynamics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 88:12–22, 2016.
- T. Hochrainer, M. Zaiser, und P. Gumbsch. A three-dimensional continuum theory of dislocation systems: kinematics and mean-field formulation. *Philosophical Magazine*, 87(8):1261–1282, 2007.
- T. Hochrainer, S. Sandfeld, M. Zaiser, und P. Gumbsch. Continuum dislocation dynamics: Towards a physical theory of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 63:167 – 178, 2014.
- D. Hull und D. J. Bacon. *Introduction to dislocations*. Butterworth Heinemann, Amsterdam, 2011.
- A. M. Hussein, S. I. Rao, M. D. Uchic, D. M. Dimiduk, und J. A. El-Awady. Microstructurally based cross-slip mechanisms and their effects on dislocation microstructure evolution in fcc crystals. *Acta Materialia*, 85:180–190, 2015.
- U. F. Kocks. A statistical theory of flow stress and work-hardening. *Philosophical Magazine*, 13(123):541–566, 1966.
- U. F. Kocks und H. Mecking. Physics and phenomenology of strain hardening: The FCC case. *Progress in materials science*, 48(3):171–273, 2003.

- K. Kondo. On the geometrical and physical foundations of the theory of yielding. In *Proc. 2nd Japan Nat. Congr. Applied Mechanics*, volume 2, pages 41–47, 1952.
- A. Kosevich. Crystal dislocations and the theory of elasticity. *Dislocations in Solids.*, 1:33–141, 1979.
- E. Kröner. *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*, volume 5. Springer, Berlin, 1958.
- L. P. Kubin. *Dislocations, mesoscale simulations and plastic flow*. Oxford series on materials modelling ; 5. Oxford University Press, Oxford, 1. ed. edition, 2013.
- L. P. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincere, V. Pontikis, and Y. Bréchet. Dislocation microstructures and plastic flow: A 3d simulation. *Solid State Phenomena*, 23-24:455–472, 1992.
- L. P. Kubin, B. Devincere, and T. Hoc. Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals. *Acta Materialia*, 56(20):6040 – 6049, 2008a.
- L. P. Kubin, B. Devincere, and T. Hoc. Toward a physical model for strain hardening in fcc crystals. *Materials Science and Engineering: A*, 483:19–24, 2008b.
- L. P. Kubin, B. Devincere, and T. Hoc. The deformation stage II of face-centered cubic crystals: Fifty years of investigations. *International Journal of Materials Research*, 100(10):1411–1419, 2009.
- C. Lemarchand, B. Devincere, and L. P. Kubin. Homogenization method for a discrete-continuum simulation of dislocation dynamics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9):1969 – 1982, 2001.

- H. Leung, P. Leung, B. Cheng, und A. Ngan. A new dislocation-density-function dynamics scheme for computational crystal plasticity by explicit consideration of dislocation elastic interactions. *International Journal of Plasticity*, 67:1–25, 2015.
- D. Li, H. Zbib, X. Sun, und M. Khaleel. Predicting plastic flow and irradiation hardening of iron single crystal with mechanism-based continuum dislocation dynamics. *International Journal of Plasticity*, 52:3–17, 2014.
- J. D. Livingston. The density and distribution of dislocations in deformed copper crystals. *Acta Metallurgica*, 10(3):229–239, 1962.
- A. Ma und F. Roters. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals. *Acta Materialia*, 52(12):3603–3612, 2004.
- A. Ma, F. Roters, und D. Raabe. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations. *Acta Materialia*, 54(8):2169–2179, 2006.
- R. Madec und L. P. Kubin. Dislocation strengthening in FCC metals and in BCC metals at high temperatures. *Acta Materialia*, 126:166–173, 2017.
- R. Madec, B. Devincre, und L. P. Kubin. From dislocation junctions to forest hardening. *Physical review letters*, 89(25):255508, 2002.
- R. Madec, B. Devincre, L. Kubin, T. Hoc, und D. Rodney. The Role of Collinear Interaction in Dislocation-Induced Hardening. *Science*, 301(5641):1879–1882, 2003.
- H. Mecking und U. F. Kocks. Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metallurgica*, 29(11):1865–1875, 1981.
- M. Monavari und M. Zaiser. Annihilation and sources in continuum dislocation dynamics. *Materials Theory*, 2(1):3, 2018.

- M. Monavari, S. Sandfeld, und M. Zaiser. Continuum representation of systems of dislocation lines: A general method for deriving closed-form evolution equations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 95:575–601, 2016.
- C. Motz, D. Weygand, J. Senger, und P. Gumbsch. Micro-bending tests: A comparison between three-dimensional discrete dislocation dynamics simulations and experiments. *Acta Materialia*, 56(9):1942 – 1955, 2008.
- A. Needleman, E. V. der Giessen, und V. Deshpande. Statistical aspects of discrete dislocation plasticity. *Scripta Materialia*, 54(5):729–733, 2006.
- R. Neuhaus und C. Schwink. On the flow stress of [100]- and [111]-oriented Cu-Mn single crystals: A transmission electron microscopy study. *Philosophical Magazine A*, 65(6):1463–1484, 1992.
- J. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1(2):153–162, 1953.
- E. Orowan. Zur Kristallplastizität. I. *Zeitschrift für Physik*, 89(9-10):605–613, 1934a.
- E. Orowan. Zur Kristallplastizität. II. *Zeitschrift für Physik*, 89(9-10):614–633, 1934b.
- E. Orowan. Zur Kristallplastizität. III. *Zeitschrift für Physik*, 89(9-10):634–659, 1934c.
- M. Ortiz, A. Cuitiño, J. Knap, und M. Koslowski. Mixed Atomistic–Continuum Models of Material Behavior: The Art of Transcending Atomistics and Informing Continua. *MRS Bulletin*, 26(3):216–221, 2001.
- C. S. Pande und P. M. Hazzledine. Dislocation arrays in Cu-Al alloys. I. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 24(191):1039–1057, 1971a.

- C. S. Pande und P. M. Hazzledine. Dislocation arrays in Cu-Al alloys. II. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 24(192):1393–1410, 1971b.
- G. Po, M. Mohamed, T. Crosby, C. Erel, A. El-Azab, und N. Ghoniem. Recent Progress in Discrete Dislocation Dynamics and Its Applications to Micro Plasticity. *Journal of the Minerals, Metals and Materials society*, 66(10): 2108–2120, 2014.
- M. Polanyi. über eine Art Gitterstörung, die einen Kristall plastisch machen könnte. *Zeitschrift für Physik*, 89(9-10):660–664, 1934.
- C. Reuber, P. Eisenlohr, F. Roters, und D. Raabe. Dislocation density distribution around an indent in single-crystalline nickel: Comparing nonlocal crystal plasticity finite-element predictions with experiments. *Acta materialia*, 71: 333–348, 2014.
- D. Rodney und R. Phillips. Structure and Strength of Dislocation Junctions: An Atomic Level Analysis. *Physical Review Letters*, 82(8):1704–1707, 1999.
- F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D. D. Tjahjanto, T. R. Bieler, und D. Raabe. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*, 58(4):1152–1211, 2010.
- F. Roters, P. Eisenlohr, T. Bieler, und D. Raabe. *Crystal Plasticity Finite Element Methods: in Materials Science and Engineering*. Wiley, Weinheim, 2011.
- F. Roters, M. Diehl, P. Shanthraj, P. Eisenlohr, C. Reuber, S. L. Wong, T. Maiti, A. Ebrahimi, T. Hochrainer, H.-O. Fabritius, et al. Damask—the düsseldorf advanced material simulation kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale. *Computational Materials Science*, 158:420–478, 2019.

- Y. Saad und M. Schultz. GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 7(3):856–869, 1986.
- I. Salehinia und D. F. Bahr. Crystal orientation effect on dislocation nucleation and multiplication in FCC single crystal under uniaxial loading. *International Journal of Plasticity*, 52:133–146, 2014.
- S. Sandfeld, M. Monavari, und M. Zaiser. From systems of discrete dislocations to a continuous field description: stresses and averaging aspects. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 21(8):085006, 2013.
- S. Schmitt, P. Gumbsch, und K. Schulz. Internal stresses in a homogenized representation of dislocation microstructures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 84:528–544, 2015.
- S. Schmitt, M. Stricker, P. Gumbsch, und K. Schulz. A mechanism-based homogenization of a dislocation source model for bending. *Acta Materialia*, 164:663–672, 2019.
- G. Schoeck und R. Frydman. The Contribution of the Dislocation Forest to the Flow Stress. *physica status solidi (b)*, 53(2):661–673, 1972.
- K. Schulz und S. Schmitt. Discrete-continuum transition: a discussion of the continuum limit. *Technische Mechanik*, 38(1):126–134, 2018.
- K. Schulz und M. Sudmanns. A mechanism-based homogenization strategy for the determination of flow stress and strain hardening. *PAMM*, 17(1):107–110, 2017.
- K. Schulz und M. Sudmanns. Mesoscale Simulation of Dislocation Microstructures at Internal Interfaces. In W. E. Nagel, D. H. Kröner, und M. M. Resch, editors, *High Performance Computing in Science and Engineering '18*, pages 115–129. Springer International Publishing, Cham, 2019.

- K. Schulz, D. Dickel, S. Schmitt, S. Sandfeld, D. Weygand, und P. Gumbsch. Analysis of dislocation pile-ups using a dislocation-based continuum theory. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 22(2): 025008, 2014.
- K. Schulz, L. Wagner, und C. Wieners. A mesoscale approach for dislocation density motion using a Runge-Kutta discontinuous Galerkin method. *PAMM*, 16(1):403–404, 2016.
- K. Schulz, M. Sudmanns, und P. Gumbsch. Dislocation-density based description of the deformation of a composite material. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 25(6):064003, 2017.
- K. Schulz, L. Wagner, und C. Wieners. A mesoscale continuum approach of dislocation dynamics and the approximation by a runge-kutta discontinuous galerkin method. *International Journal of Plasticity*, 120:248 – 261, 2019.
- J. Senger, D. Weygand, O. Kraft, und P. Gumbsch. Dislocation microstructure evolution in cyclically twisted microsamples: A discrete dislocation dynamics simulation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 19(7):074004, 2011.
- V. B. Shenoy, R. V. Kukta, und R. Phillips. Mesoscopic Analysis of Structure and Strength of Dislocation Junctions in fcc Metals. *Physical Review Letters*, 84(7):1491–1494, 2000.
- C. S. Shin, M. C. Fivel, D. Rodney, R. Phillips, V. B. Shenoy, und L. Dupuy. Formation and strength of dislocation junctions in FCC metals : A study by dislocation dynamics and atomistic simulations. *Le Journal de Physique IV*, 11(PR5):Pr5–19–Pr5–26, 2001.
- J. W. Steeds. Dislocation arrangement in copper single crystals as a function of strain. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 292(1430):343–373, 1966.

- G. Strang. On the Construction and Comparison of Difference Schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3):506–517, 1968.
- M. Stricker und D. Weygand. Dislocation multiplication mechanisms – Glissile junctions and their role on the plastic deformation at the microscale. *Acta Materialia*, 99:130–139, 2015.
- M. Stricker, M. Sudmanns, K. Schulz, T. Hochrainer, und D. Weygand. Dislocation multiplication in stage II deformation of fcc multi-slip single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 119:319–333, 2018.
- M. Sudmanns und K. Schulz. Discussion of crack initiation in metal matrix composites. In *Proceedings of the 7th GACM Colloquium on Computational Mechanics for Young Scientists from Academia and Industry, Stuttgart, Germany, 11th - 13th October 2017*. Ed.: M. von Scheven, pages 296–299. Institute for Structural Mechanics, University of Stuttgart, 2017.
- M. Sudmanns, P. Gumbsch, und K. Schulz. Plastic flow and dislocation strengthening in a dislocation density based formulation of plasticity. *Computational Materials Science*, 151:317–327, 2018.
- M. Sudmanns, M. Stricker, D. Weygand, T. Hochrainer, und K. Schulz. Dislocation multiplication by cross-slip and glissile reaction in a dislocation based continuum formulation of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 132:103695, 2019.
- T. Takeuchi. Orientation Dependence of Work Hardening of Copper Single Crystals near the [001] Axis. *Journal of the Physical Society of Japan*, 40(3): 741–746, 1976.
- G. I. Taylor. The Mechanism of Plastic Deformation of Crystals. Part II. Comparison with Observations. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 145(855): 388–404, 1934a.

- G. I. Taylor. The Mechanism of Plastic Deformation of Crystals. Part I. Theoretical. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 145(855):362–387, 1934b.
- N. Thompson. Dislocation Nodes in Face-Centred Cubic Lattices. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 66(6):481–492, 1953.
- E. van der Giessen und A. Needleman. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 3(5):689–735, 1995.
- M. Verdier, M. Fivel, und I. Groma. Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals: Principles and applications. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 6(6):755, 1998.
- P. Veyssi re, H. Wang, D. S. Xu, und Y. L. Chiu. Local dislocation reactions, self-organization and hardening in single slip. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 3(1):012018, 2009.
- V. Volterra. Sur l’ quilibre des corps  lastiques multiplement connexes. In *Annales scientifiques de l’Ecole Normale superieure*, volume 24, pages 401–517. Elsevier, 1907.
- D. Wang, M. Diehl, F. Roters, und D. Raabe. On the role of the collinear dislocation interaction in deformation patterning and laminate formation in single crystal plasticity. *Mechanics of Materials*, 125:70–79, 2018.
- H. Wang, D. S. Xu, D. Rodney, P. Veyssi re, und R. Yang. Atomistic investigation of the annihilation of non-screw dislocation dipoles in Al, Cu, Ni and γ -TiAl. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 21(2):025002, 2013.
- D. Weygand und P. Gumbsch. Study of dislocation reactions and rearrangements under different loading conditions. *Materials Science and Engineering: A*, 400-401:158–161, 2005.

- D. Weygand, L. H. Friedman, E. V. d. Giessen, und A. Needleman. Aspects of boundary-value problem solutions with three-dimensional dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 10(4):437, 2002.
- C. Wieners. Distributed Point Objects. A New Concept for Parallel Finite Elements. In T. J. Barth, M. Griebel, D. E. Keyes, R. M. Nieminen, D. Roose, T. Schlick, R. Kornhuber, R. Hoppe, J. Périaux, O. Pironneau, O. Widlund, und J. Xu, editors, *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering*, volume 40, pages 175–182. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 2005.
- C. Wieners. A geometric data structure for parallel finite elements and the application to multigrid methods with block smoothing. *Computing and Visualization in Science*, 13(4):161–175, 2010.
- R. Wu, D. Tüzes, P. D. Ispánovity, I. Groma, T. Hochrainer, und M. Zaiser. Instability of dislocation fluxes in a single slip: Deterministic and stochastic models of dislocation patterning. *Physical Review B*, 98(5):054110, 2018.
- S. Yefimov, I. Groma, und E. v. d. Giessen. A comparison of a statistical-mechanics based plasticity model with discrete dislocation plasticity calculations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(2):279 – 300, 2004.
- M. Zaiser, M.-C. Miguel, und I. Groma. Statistical dynamics of dislocation systems: The influence of dislocation-dislocation correlations. *Physical Review B*, 64:224102, 2001.
- H. M. Zbib, T. Díaz de la Rubia, M. Rhee, und J. P. Hirth. 3d dislocation dynamics: stress–strain behavior and hardening mechanisms in fcc and bcc metals. *Journal of Nuclear Materials*, 276(1):154–165, 2000.
- C. Zhou, S. B. Biner, und R. LeSar. Discrete dislocation dynamics simulations of plasticity at small scales. *Acta Materialia*, 58(5):1565–1577, 2010.

- Y. Zhu, H. Wang, X. Zhu, und Y. Xiang. A continuum model for dislocation dynamics incorporating Frank–Read sources and Hall–Petch relation in two dimensions. *International Journal of Plasticity*, 60:19–39, 2014.
- Y. Zhu, Y. Xiang, und K. Schulz. The role of dislocation pile-up in flow stress determination and strain hardening. *Scripta Materialia*, 116:53 – 56, 2016.