

# **Analyse von Gleitsysteminteraktionen und deren Auswirkungen auf die Versetzungskonfigurationen in Mikrosystemen**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTORS DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)

von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des  
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)  
angenommene

DISSERTATION

von

M.Sc. Kolja Zoller

Tag der mündlichen Prüfung: 15.11.2022

Hauptreferentin: Prof. PD. Dr.-Ing. Katrin Schulz

Korreferent: Prof. Dr. mont. Christoph Kirchlechner



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 im Rahmen meiner Forschung als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Angewandte Materialien – Zuverlässigkeit und Mikrostruktur (IAM-ZM) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT).

Mein besonderer Dank gilt Prof. PD. Dr.-Ing. Katrin Schulz für die stetige Unterstützung und weiterführenden Diskussionen sowie die Integration in nationale und internationale Forschungsprojekte (u. a. der DFG Forschergruppe FOR1650 *dislocation based plasticity*).

Des Weiteren bedanke ich mich bei Prof. Dr. mont. Christoph Kirchlechner für die Übernahme des Korreferats und seinem Interesse an meiner Forschung.

Zudem möchte ich mich bei Prof. Dr. rer. nat. Peter Gumbsch für die Möglichkeit bedanken, meinen Interessen am Institut nachzugehen, sowie für das wertvolle Feedback im Rahmen der Institutsvorträge.

Ich bedanke mich bei Dr. Daniel Weygand, Dr. Péter Dusán Ispánovity, Dr. Szilvia Kalácska, Dr. Patric Gruber, Balduin Katzer, Julia Bermuth, Jakob Bach und Daniel Betsche für die gute und konstruktive Zusammenarbeit.

Ich möchte mich bei meinen Kollegen für die freundliche und produktive Arbeitsatmosphäre sowie für die vielseitigen Gespräche bedanken. Die schnelle und zuverlässige Unterstützung im Bereich der IT-Infrastruktur von Yiyue Li und im administrativen Bereich von Andrea Doer habe ich sehr geschätzt.

Mein weitere Dank gilt all jenen, die mit ihren Anregungen und Anmerkungen mir bei der Ausarbeitung dieser Arbeit geholfen haben.

Zu guter Letzt möchte ich mich bei meiner Familie für den erholsamen Ausgleich insbesondere in den stressigen Phasen während dem Verfassen meiner Dissertation bedanken.

Karlsruhe, September 2022

Kolja Zoller



# Kurzfassung

Im Zuge der Miniaturisierung von Bauteilen stößt die Anwendung von mechanischen Komponenten in den Bereich der Mikroskala vor. In diesem Bereich unterscheidet sich das plastische Verformungsverhalten metallischer Mikrosysteme aufgrund von sogenannten Größeneffekten von dem bekannten Verhalten makroskopischer Bauteilkomponenten. Zur Gewährleistung der Zuverlässigkeit der Mikrosysteme ist ein tiefgreifendes Verständnis für die Mikrostrukturevolution von elementarer Bedeutung, wobei die genauen Auswirkungen der auftretenden Gleitsysteminteraktionen bisher größtenteils unbekannt sind.

Im Rahmen dieser Arbeit wird eine mechanismusbasierte Kontinuumsformulierung der Kristallplastizität weiterentwickelt sowie datengetriebene Analysemethoden und theoretische Systemanalysen eingesetzt, um direkte Einblicke in die Interaktionen von Gleitsystemaktivitäten und deren Auswirkungen auf die Versetzungskonfigurationen in einkristallinen, kubisch-flächenzentrierten Metallen unter verschiedenen Belastungen zu erhalten. Hierbei lässt sich eine Klassifikation der Gleitsysteme vornehmen, wobei sich die einzelnen Gleitsystemgruppen bezüglich ihrer Aktivitäten, Spannungsrelaxationsmechanismen sowie Versetzungskonfigurationen unterscheiden. Die beobachtete Akkumulation von sogenannter geometrisch notwendiger Versetzungsdichte lässt sich in homogenen Spannungsfeldern auf den inaktiven Gleitsystemen und in inhomogenen Spannungsfeldern auf den aktiven Gleitsystemen lokalisieren, wobei sich die Stabilisierung der Versetzungsdichten in den Systemen auf die jeweiligen Spannungskonfigurationen und die Bildung von Versetzungsnetzwerken zurückführen lässt. Der interne Versetzungsaufstau induziert dabei einen Größeneffekt, sofern der Einfluss interner Spannungen verglichen zum externen Spannungsfeld ausreichend groß ist. Folglich vertieft diese Arbeit signifikant das Verständnis für die Gleitsysteminteraktionen bzw. für das Materialverhalten der Mikrosysteme im Allgemeinen.



# Abstract

In the course of structural component miniaturization, the application of mechanical components expand to the microscale. At the microscale, the plastic deformation of metallic microsystems differs from the known behavior of macroscopic components due to so-called size effects. To ensure the reliability of microsystems, an in-depth understanding of microstructure evolution is fundamental, whereby the specific effects of the occurring slip system interactionen are mostly unknown.

In this work, a mechanism based continuum formulation of crystal plasticity is enhanced as well as data-driven analysis methods and theoretical system analyses are applied to different microsystems. The results gained provide direct insight into the interactions of slip system activities and their effects on dislocation configurations in single-crystalline face-centered cubic metals under different loads. A classification of the slip systems can be derived, whereby the individual slip system groups differ with respect to their activities, stress relaxation mechanisms, and dislocation configurations. The observed accumulation of so-called geometrically necessary dislocation density can be located in homogeneous stress fields on the inactive slip systems and in inhomogeneous stress fields on the active slip systems. The stabilization of the dislocation densities in the systems can be attributed to the respective stress configurations and the formation of dislocation networks. The internal dislocation pile-ups induce a size effect, if the influence of internal stresses is sufficiently large compared to the external stress field. Consequently, this work significantly increases the understanding of the slip system interactions and of the material behavior of microsystems in general.



# Veröffentlichungen

## Wissenschaftliche Artikel in Peer-Review Journalen

K. Zoller und K. Schulz. Analysis of single crystalline microwires under torsion using a dislocation-based continuum formulation. *Acta Materialia*, 191:198–210, 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.03.057>

K. Zoller, S. Kalácska, P. D. Ispánovity, und K. Schulz. Microstructure evolution of compressed micropillars investigated by in situ HR-EBSD analysis and dislocation density simulations. *Comptes Rendus. Physique*, 22(S3):267–293, 2021. URL <https://doi.org/10.5802/crphys.55>

B. Katzer, K. Zoller, D. Weygand, und K. Schulz. Identification of dislocation reaction kinetics in complex dislocation networks for continuum modeling using data-driven methods. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 168:105042, 2022. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2022.105042>

J. Bach, K. Zoller, H. Trittenbach, K. Schulz, und K. Böhm. An empirical evaluation of constrained feature selection. *SN Computer Science*, 3(6):1–25, 2022. URL <https://doi.org/10.1007/s42979-022-01338-z>

K. Zoller, P. Gruber, M. Ziemann, A. Görtz, P. Gumbsch, und K. Schulz. Classification of slip system interaction in microwires under torsion. *Computational Materials Science*, 216:111839, 2023. URL <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111839>

## Proceeding Papers

K. Zoller und K. Schulz. A bottom-up continuum approach of crystal plasticity for the analysis of fcc microwires under torsion. *PAMM*, 2019, 19(1):e201900032, a. URL <https://doi.org/10.1002/pamm.201900032>

K. Zoller und K. Schulz. Analysis of microwire torsion using a nonlocal dislocation based plasticity formulation. In *Proceedings of 8th GACM Colloquium on Computational Mechanics: For Young Scientists From Academia and Industry August 28th–30th, 2019 University of Kassel, Germany*, pages 47–49. 2019, kassel university press GmbH, b. URL <http://doi.org//10.17170/kobra-202007161457>



# Inhaltsverzeichnis

<b>Kurzfassung</b>	<b>v</b>
<b>Abstract</b>	<b>vii</b>
<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Motivation . . . . .	1
1.2. Stand der Forschung . . . . .	2
<b>2. Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1. Versetzungen und Versetzungskonfigurationen . . . . .	7
2.2. Versetzungsquell- und Reaktionsmechanismen . . . . .	10
2.3. Homogenisierung von Versetzungsgrößen . . . . .	12
<b>3. Methoden</b>	<b>15</b>
3.1. Versetzungsdynamik im Kontinuum . . . . .	15
3.2. Homogenisiertes Versetzungsquellmodell . . . . .	22
3.3. Homogenisiertes Versetzungsreaktionsmodell . . . . .	27
3.4. Numerische Umsetzung . . . . .	32
3.5. Datengetriebene Analysemethoden . . . . .	33
<b>4. Systeme und Systemanalysen</b>	<b>37</b>
4.1. Mikropillar unter Druckbelastung . . . . .	38
4.2. Mikrokragarm unter Biegebelastung . . . . .	40
4.3. Mikrodrähte unter Torsionsbelastung . . . . .	43
<b>5. Ergebnisse der Mikrostrukturentwicklung</b>	<b>49</b>
5.1. Aktivierung der Gleitsysteme . . . . .	50
5.1.1. Lokale Versetzungsquellaktivität . . . . .	50
5.1.2. Übergang der Versetzungsproduktion zur -multiplikation . . . . .	51
5.2. Einfluss der Gleitsystemaktivität auf Versetzungsnetzwerkcharakteristiken .	53
5.2.1. Identifikation von Versetzungsreaktionskonstanten . . . . .	54
5.2.2. Identifikation der Versetzungslängen von Lomerarmen . . . . .	58

5.3.	Gleitsystembeteiligung und Versetzungscharakter der Versetzungsdichte . . .	60
5.3.1.	Homogenes Normalspannungsfeld – Mikropillar unter Druckbelastung	60
5.3.2.	Inhomogenes Normalspannungsfeld – Mikrokragarm unter Biegebelastung . . . . .	63
5.3.3.	Inhomogenes Schubspannungsfeld – Mikrodraht unter Torsionsbelastung . . . . .	66
5.4.	Zusammenhang zwischen Gleitsystemaktivität und kristalliner Missorientierung	70
5.5.	Größeneffekte induziert durch Versetzungsaufstaus . . . . .	73
<b>6.</b>	<b>Diskussion</b>	<b>77</b>
6.1.	Aktivierungen der Gleitsysteme . . . . .	77
6.2.	Einfluss der Gleitsystemaktivitäten auf die Versetzungskonfiguration . . . .	81
6.2.1.	Versetzungsnetzwerkcharakteristiken . . . . .	81
6.2.2.	Zusammensetzung der GND-Dichte . . . . .	85
6.3.	Missorientierung als Indikator der Gleitsystemaktivitäten . . . . .	94
6.4.	Größeneffekte induziert durch Versetzungsaufstaus . . . . .	97
<b>7.</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>99</b>
<b>A.</b>	<b>Appendix</b>	<b>I</b>
A.1.	Berechnung verwendeter Größen . . . . .	I
A.1.1.	Missorientierung basierend auf dem Feld des Verschiebungsgradienten	I
A.1.2.	Torsionsmoment und Dichteverlauf mittels der <i>Critical Thickness Theory</i> . . . . .	II
A.2.	Versetzungs-multiplikationskriterium . . . . .	III
A.3.	Einfluss der Systemgrenzen und geometrischen Imperfektionen . . . . .	VII
A.3.1.	Modellierung der festen Einspannung eines Mikrokragarms . . . . .	VII
A.3.2.	Einfluss geometrischer Imperfektionen in Mikropillars unter Druckbelastung . . . . .	IX
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>XIII</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1. Darstellung relevanter Größen des Schmid-Faktors und der plastischen Deformation durch Abscherprozesse . . . . .	8
2.2. Darstellung einer dreidimensionalen Versetzungslinien und von durch <i>GND</i> verformte Kontinua . . . . .	9
2.3. Darstellung von geometrisch notwendigen Versetzungen und einer Kleinwinkeldrehgrenze . . . . .	10
2.4. Schematische Darstellung der in dieser Arbeit berücksichtigten Veretzungsquellen und Versetzungsreaktionen . . . . .	12
2.5. Schematische Darstellung der Homogenisierung von Versetzungsstrukturen . .	14
3.1. Freiheitsgrade der <i>CDD</i> -Formulierung . . . . .	18
3.2. Definition der zwölf Gleitsystemen und deren Wechselwirkung entsprechend der Reaktionmatrix . . . . .	19
3.3. Arbeitsablauf zur Datenanalyse von Versetzungsnetzwerken . . . . .	33
4.1. Systembeschreibung des Mikropillars unter Druckbelastung . . . . .	39
4.2. Systembeschreibung des Mikrokragarms unter Biegebelastung . . . . .	40
4.3. Interaktion der Gleitsystemaktivitäten infolge der Normalspannungen des Kragarms . . . . .	42
4.4. Interaktion der Gleitsystemaktivitäten infolge der Schubspannungen des Kragarms	42
4.5. Systembeschreibung des Mikrodrahtes unter Torsionsbelastung . . . . .	43
4.6. Räumliche Orientierung der Gleitsysteme und der jeweiligen spannungsfreien Linien in den Mikrodrähten unter Torsionsbelastung . . . . .	44
4.7. Interaktion der Gleitsystemaktivitäten infolge der Torsionsspannungen des Mikrodrahtes . . . . .	46
4.8. Spannungsrelaxationsmechanismen mittels plastischer Verformung . . . . .	47
4.9. Richtungen der Rotationsachsen der infolge der Gleitsystemaktivitäten resultierenden Missorientierung für die verschiedenen Gleitsystemgruppen . . . . .	48
5.1. Mikrostrukturevolution infolge einer lokalen Versetzungsquellaktivität auf dem Gleitsystem B4 im Torsionsdraht . . . . .	51

---

5.2. Mikrostrukturevolution infolge einer lokalen Versetzungsquellaktivität auf Gleitsystem B5 im Torsionsdraht . . . . .	51
5.3. Bedeutung der Versetzungsproduktion verglichen zur -multiplikation für ausgewählte Systeme . . . . .	53
5.4. Versetzungsreaktionskonstanten sowie die dazugehörigen Vorhersagegüten für die unterschiedlichen Kristallorientierungen . . . . .	55
5.5. Darstellung der Reaktionskoeffizienten über die Vorhersagegüte unter Visualisierung der Klassifikation der Gleitsystempaarungen anhand der Schmid-Faktoren der involvierten Gleitsysteme . . . . .	57
5.6. Vorhersage der Raten der Versetzungsreaktionsdichten für Lomer-Reaktionen zwischen aktiven und inaktiven Gleitsystemen. . . . .	58
5.7. Histogramme zu den Versetzungslängen-Verteilungen der Lomerarme . . . . .	59
5.8. Beschreibung Abbildungsverzeichnis . . . . .	59
5.9. Experimentelle Ergebnisse (Oberflächenaufnahmen, GND-Dichte und dominanter Burgersvektor) für einen Mikropillar unter Druckbelastung . . . . .	61
5.10. Plastische Scherung und totale Versetzungsdichte im Mikropillar unter Druckbelastung . . . . .	62
5.11. Einzelbeiträge der Gleitsysteme zu verschiedenen Versetzungsdichten im Mikropillar unter Druckbelastung . . . . .	63
5.12. Evolution des Biegemomentes sowie der plastischen Scherungen und <i>GND</i> -Dichten für den Mikrokragarm . . . . .	64
5.13. Versetzungscharakter der <i>GND</i> -Dichte für den Mikrokragarm . . . . .	65
5.14. Räumliche Verteilung der <i>GND</i> -Dichte für den Mikrokragarm . . . . .	65
5.15. Räumliche Versetzungsstruktur und -charakter im Versetzungsaufstau für einen Mikrodraht . . . . .	67
5.16. Verlauf des Torsionsmomentes und der totalen Versetzungsdichte in den Mikrodrähten . . . . .	68
5.17. Zusammensetzungen der Versetzungsdichten in den Mikrodrähten . . . . .	69
5.18. Missorientierungen und Gleitsystemaktivitäten für die Mikrodrähte mit unterschiedlichen Kristallorientierungen . . . . .	71
5.19. Missorientierung bzgl. des Querschnittszentrums im Experiment und Simulation für den Mikrodraht mit $\langle 100 \rangle$ Orientierung . . . . .	72
5.20. Missorientierung bzgl. des jeweiligen Nachbarn im Experiment und räumliche Verteilung der <i>GND</i> -Dichte in der Simulation für den Mikrodraht mit $\langle 100 \rangle$ Orientierung . . . . .	73
5.21. Größeneffekte bzgl. der räumliche Verteilung der totalen Versetzungsdichte für Mikrodrähte unter Torsionsbelastung . . . . .	75

---

5.22. Größeneffekte bzgl des radialen Verlaufes der totalen Versetzungsdichte und plastischen Dehnung für Mikrodrähte unter Torsionsbelastung . . . . .	75
A.1. Evolution der totalen Versetzungsdichten über die Gesamtdehnung für die Zugversuche des <i>DDD</i> -Datensatzes . . . . .	V
A.2. Einfluss der Modellierung der Einspannung auf die Felder der Spannungskomponenten und der <i>GND</i> -Dichte . . . . .	VIII
A.3. Einfluss der Modellierung der Einspannung auf die Evolution des normierten Biegemomentes . . . . .	IX
A.4. Modellierung geometrischer Imperfektionen eines Mikropillars . . . . .	X
A.5. Einfluss geometrischer Imperfektionen auf die Verformung und den Versetzungsdichtetensors in Mikropillars unter Druck . . . . .	XI



# Tabellenverzeichnis

1.1. Liste mit Beispielen von Experimenten aus der Literatur zu Größeneffekten in Mikrosystemen . . . . .	3
4.1. Materialparameter von Aluminium, Kupfer und Gold . . . . .	38
4.2. Schmid-Faktoren für den Kragarm unter Biegebelastung mit einer $\langle 100 \rangle$ Kristallorientierung . . . . .	42
4.3. Maximale Schmid-Faktoren der Gleitsysteme im Mikrodraht unter Torsionsbelastung . . . . .	44
4.4. Orientierung und Zusammensetzung fiktiver GNDs in den Torsionsdrähten . .	45
4.5. Gleitsystemgruppen für den Mikrodraht unter Torsionsbelastung . . . . .	46
A.1. Schmid-Faktoren und Vergleichswerte für ein Versetzungsmultiplikationskriterium für den <i>DDD</i> -Datensatz . . . . .	IV



# Abkürzungs- und Symbolverzeichnis

## Abkürzungen

**CDD** Continuum Dislocation Dynamics

**CTT** Critical Thickness Theory

**DDD** Discrete Dislocation Dynamics

**EBS** Elektronenrückstreubeugung (englisch: resolution electron backscatter diffraction)

**GND** geometrisch notwendige Versetzung (englisch: geometrically necessary dislocation)

**HR-EBS** hochauflösende Elektronenrückstreubeugung (englisch: high (angular) resolution electron backscatter diffraction)

**kfz** kubisch-flächenzentriert

**KOS** Koordinatensystem (hier: Orthonormalbasis und Rechtssystem)

**MD** Molekulardynamik

**MEMS** Mikro-Elektro-Mechanischen Systeme

**REM** Rasterelektronenmikroskop (englisch: scanning electron microscope - SEM)

**SSD** statistisch gespeicherte Versetzung (englisch: statistically stored dislocation)

**TEM** Transmissionselektronenmikroskop

## Symbole

$\alpha$  materialspezifische Interaktionskonstante in dem Term der Fließspannung

$\alpha$  Versetzungsdichtetensor

$\beta$  Normalisierungskonstante für die Quergleitwahrscheinlichkeit

$\beta^{\text{el}}$  elastischer Anteil des Verschiebungsgradienten

$\beta^{\text{pl}}$  plastischer Anteil des Verschiebungsgradienten

$\epsilon$  infinitesimaler Verzerrungstensor

$\epsilon^{\text{el}}$  elastischer Anteil des infinitesimalen Verzerrungstensors

$\partial_t \epsilon_{\text{gl}}^{\text{el}}$  Norm der globalen elastischen Dehnrate im Prädiktorschritt des Quellmodells

$\epsilon^{\text{ext}}$  externer infinitesimaler Verzerrungstensor

$\epsilon^{\text{MLR}}$  Störgrößen der multiplen linearen Regression

$\epsilon^{\text{pl}}$  plastischer Anteil des infinitesimalen Verzerrungstensors

$\partial_t \epsilon^{\text{pl,exp}}$  global erwarteten plastischen Dehnrate infolge der lokalen Quellaktivitäten

$\partial_t \epsilon_{\text{gl}}^{\text{pl,exp}}$  global erwarteten plastischen Dehnrate infolge der globalen Quellaktivitäten

$\eta^{\text{react}}$  Anteil an stabilen Versetzungsreaktionen bzw. der daraus resultierenden Konfigurationen

$\gamma_s^{\text{exp}}$  global erwarteten plastischen Scherung infolge einer lokalen Quellaktivierung auf dem betrachteten Gleitsystem

$\gamma_s$  plastischen Scherung auf dem betrachteten Gleitsystem

$\kappa_s^{\text{edge}}$  Stufenanteil der *GND*-Dichte des betrachteten Gleitsystems

$\kappa_s$  Vektor der *GND*-Dichte des betrachteten Gleitsystems

$\kappa_s^{\text{screw}}$  Schraubenanteil der *GND*-Dichte des betrachteten Gleitsystems

$\bar{\kappa}_s^{\text{cross}}$  Zunahme der *GND*-Dichte mit Schraubencharakter (bzw. des Vektors der *GND*-Dichte) auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von Quergleitprozessen

$\kappa_s^{\text{cross}}$  Abnahme der *GND*-Dichte mit Schraubencharakter (bzw. des Vektors der *GND*-Dichte) auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von Quergleitprozessen

$\mu$  Schubmodul

$\nu$  Querkontraktionszahl

$\phi$  Winkelkoordinate des Zylinder-KOS

$\phi_s^{\max}$  Winkel des maximalen Schmid-Faktors auf dem betrachteten Gleitsystem

$\phi_{s \rightarrow \bar{s}}$  Kollisionsrate von Versetzungen zweier Gleitsysteme

$\varphi$  Verdrehwinkel der Torsionsbelastung

$\{\psi_{d_s}, \psi_{m_s}\}$  Winkel des Schmid-Faktors

$\bar{\rho}_s^{S,Lomer}$  Stabilisierung von mobiler Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge der Bildung von Lomer-Verbindungen

$\bar{\rho}_s^{M,cross}$  Zunahme der mobilen Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von Quergleitenprozessen

$\bar{\rho}_s^{M,gliss}$  Zunahme der mobilen Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von gleitfähigen Reaktionen

$\bar{\rho}_s^{S,Lomer}$  Immobilisierung von mobiler Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge der Bildung von Lomer-Verbindungen

$\rho_s^{GND}$  geometrisch notwendige Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem

$\hat{\rho}_s^L$  Mobilisierung von stabilisierter Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge dem Aufbrechen von Lomer-Verbindungen

$\hat{\rho}_s^M$  Mobilisierung von stabilisierter Versetzungsdichte und Versetzungsdichte der Lomer-Verbindungen auf dem betrachteten Gleitsystem infolge dem Aufbrechen von Lomer-Verbindungen

$\rho_s^L$  Versetzungsdichte der Lomer-Verbindungen auf dem betrachteten Gleitsystem

$\rho_s^M$  mobile Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem

$\rho_s^{M,cross}$  Abnahme der mobilen Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von Quergleitprozessen

$\rho_s^{M,react}$  Abnahme der mobilen Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von gleitfähigen und kollinearen Reaktionen sowie der Bildung von Lomer-Verbindungen

$\rho_s^{Net}$  Versetzungsnetzwerksdichte auf dem betrachteten Gleitsystem

$\varrho_s^S$  stabilisierten Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem

$\varrho_s^{SSD}$  statistisch gespeicherte Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem

$\varrho_s^{S,react}$  Abnahme der stabilisierten Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von gleitfähigen und kollinearen Reaktionen sowie der Bildung von Lomer-Verbindungen

$\varrho_0^{Tot}$  initiale totale Versetzungsdichte im Gesamtsystem

$\varrho_s^{Tot}$  totale Versetzungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem

$\sigma^{ext}$  externer Spannungstensor

$\sigma$  Cauchy Spannungstensors

$\tau_s^{crit}$  kritischen Spannung für Quellaktivitäten auf dem betrachteten Gleitsystem

$\tau^{CRSS}$  Referenzwert für die kritischen Spannung für Quellaktivitäten (englisch: critical resolved shear stress)

$\partial_t \tau_s^{exp}$  Rate des erwarteten Spannungsanstiegs auf dem betrachteten Gleitsystem

$\tau_{III}$  Schubspannung beim Übergang zu der Stufe III der Verfestigung von *kfz* Metallen

$\partial_t \tau_s^{relax}$  Spannungsrelaxation infolge der bereits lokal existierenden mobilen Versetzungen

$\tau_s^{res}$  Kurznotation für die resultierende Spannung auf dem betrachteten Gleitsystem

$\tau_s$  aufgelösten Schubspannung auf dem betrachteten Gleitsystem

$\tau_s^b$  Rückspannung auf dem betrachteten Gleitsystem (englisch: back stress)

$\Delta \tau_s^{src}$  Spannungsrelaxation einer einzelnen Versetzungsquellaktivität auf dem betrachteten Gleitsystem

$\tau_s^y$  Fließspannung auf dem betrachteten Gleitsystem

$\theta$  Winkel der Missorientierung

$\xi_s^{prod}$  lokalen Versetzungsproduktionsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem

$\xi_{s,cor}^{prod}$  lokalen Versetzungsproduktionsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem nach dem Korrektor-Schritt des Quellmodells

- $A$  Zener-Anisotropiefaktor, Maß für den Unterschied des an- und isotropen Materialverhaltens
- $a$  geometrische Systemgröße, z. B. Kantenlänge oder Durchmesser
- $A_s$  die von den Versetzungen des betrachteten Gleitsystems innerhalb des Mittelungsvolumens abgescherte Fläche
- $A_s^{\text{av,geom}}$  Ansatz für die mittlere abgescherte Fläche pro Versetzung auf dem betrachteten Gleitsystem über die Geometrie
- $A_s^{\text{av,hist}}$  Ansatz für die mittlere abgescherte Fläche pro Versetzung auf dem betrachteten Gleitsystem über die Materialhistorie
- $A_s^{\text{av}}$  mittlere abgescherte Fläche pro Versetzung auf dem betrachteten Gleitsystem
- $\mathbf{A}_s$  Alignment-Tensor des betrachteten Gleitsystems
- $a_{s\bar{s}}$  materialspezifische Interaktionsmatrix in dem Term der Fließspannung
- $B$  materialspezifischen Widerstandskoeffizient der Versetzungsgeschwindigkeit
- $\mathcal{B}$  dreidimensionaler Gebietsraum der Referenzkonfiguration des Kontinuums
- $\partial\mathcal{B}$  Oberfläche des Kontinuums
- $\partial_D\mathcal{B}$  Dirichlet-Rand auf der Oberfläche des Kontinuums
- $\partial_{\text{in}}\mathcal{B}$  Zuflussgrenzfläche auf der Oberfläche des Kontinuums
- $\partial_N\mathcal{B}$  Neumann-Rand auf der Oberfläche des Kontinuums
- $\partial_{\text{out}}\mathcal{B}$  Abflussgrenzfläche auf der Oberfläche des Kontinuums
- $\mathbf{b}_s$  Burgersvektor
- $b_s$  Länge des Burgersvektors des betrachteten Gleitsystems
- $c^{\text{bow-out}}$  Konstante zur Berücksichtigung der Versetzungslängenzunahme beim Ausbauchen der Versetzung
- $\mathbb{C}$  Elastizitätstensors
- $c^{\text{FR}}$  konstanter Vorfaktor zur Approximation der Versetzungsquellenlänge aus der Versetzungsdichte
- $c^{\text{geom}}$  geometrischer Korrekturfaktor in dem Korrektor-Schritt des Quellmodells

$\{C_{1111}, C_{1122}, C_{2323}\}$  charakteristische Komponenten des Elastizitätstensors für eine kubische Symmetrie

$c^{\text{load}}$  Vorfaktor zur Berücksichtigung verschiedener Belastungszustände in der Berechnung der mittleren abgescherten Fläche pro Versetzung

$c^{\text{MLR}}$  Regressionskoeffizienten der multiplen linearen Regression

$c^{\text{multi}}$  Vorfaktor im Multiplikationsmodell für die kritische Spannung beim Ausbauchen der Versetzung

$C^{\text{react}}$  Versetzungsreaktionskonstante

$D$  materialspezifischen Konstante in dem Term der Rückspannung

$\mathbf{d}_s$  Gleitrichtung des betrachteten Gleitsystems

$\mathbf{e}_{l^{sf}}$  Richtungsvektor der spannungsfreien Linie auf dem betrachteten Gleitsystem

$\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$  Basisvektoren des kartesischen Koordinatensystems

$\mathbf{f}_B$  Volumenkraftdichte

$f_{m_s}$  Vergleichswert für das Versetzungsmultiplikationskriterium

$H()$  Heaviside-Funktion, auch Sprungfunktion genannt

$h^{\text{src}}$  Höhe des betrachteten Mittelungsvolumens

$k_B$  Boltzmann-Konstante

$\mathbf{l}$  Versetzungslinienvektor

$\mathbf{l}^{\text{screw}}$  vektorieller Schraubenanteil des Versetzungslinienvektors

$l_s$  Versetzungsquellenlänge auf dem betrachteten Gleitsystem

$\mathbf{l}_s$  Richtung der Versetzungslinie von positiven Stufenversetzungen auf dem betrachteten Gleitsystem

$L^{\text{av}}$  mittlerer Versetzungsabstand im Mittelungsvolumen

$L_s^{\text{crit}}$  kritische Länge der an Lomer-Verbindungen angrenzenden Versetzungssegmente auf dem betrachteten Gleitsystem für das Auflösen der Lomer-Verbindung

$L_{s\bar{s}}^{\text{crit}}$  kritische Länge der an Lomer-Verbindungen angrenzenden Versetzungssegmente auf beiden involvierten Gleitsystemen für das Auflösen der Lomer-Verbindung

- 
- $L_0$  Referenzwert für die Versetzungslänge für die Quergleitwahrscheinlichkeit
- $L_s^{\text{screw}}$  Versetzungssegmentlänge mit Schraubencharakter
- $l_s^{\text{sf}}$  Linienvektor der spannungsfreien Linie auf dem betrachteten Gleitsystem
- $L_{\bar{s}}$  mittlerer Versetzungsabstand auf dem Gleitsystem des Reaktionspartners
- $\mathbf{M}^{\text{el,ext}}$  Richtungstensor der elastischen Dehnrate
- $\mathbf{M}_s$  Schmid-Tensor des betrachteten Gleitsystems
- $m_s$  Schmid-Faktor des betrachteten Gleitsystems
- $\mathbf{m}_s$  Gleitebenennormale des betrachteten Gleitsystems
- $m_s^{\text{max}}$  maximal auftretenden Schmid-Faktor des betrachteten Gleitsystems
- $m^{\text{max}}$  maximal auftretender Schmid-Faktor
- $\tilde{\mathbf{m}}_s$  Vektor, der die Komponenten der Gleitebenennormalen als Absolutwerte enthält
- $n_{a \leftrightarrow a}$  Anzahl an allen Reaktionsbeziehungen zwischen aktiven Gleitsystemen
- $n_{a \leftrightarrow a}^{\text{multi}}$  Anzahl an Multiplikationsbeziehungen zwischen aktiven Gleitsystemen
- $n_s^{\text{initial}}$  Anzahl der bereits ursprünglich im System enthaltenen Versetzungen
- $n^{\text{multi}}$  Anzahl der infolge der Multiplikation entstandenen Versetzungen
- $\mathbf{n}$  Oberflächennormalen des Kontinuums
- $n_s^{\text{prod}}$  Anzahl an bisher produzierten Versetzungen im System
- $n_s^{\text{multi}}$  Anzahl der auf dem betrachteten Gleitsystem infolge der Multiplikation entstandenen Versetzungen
- $P$  thermisch aktivierte Quergleitwahrscheinlichkeit
- $\bar{q}_s^{\text{cross}}$  Zunahme der Krümmungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von Quergleitenprozessen
- $\bar{q}_s^{\text{gliss}}$  Zunahme der Krümmungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von gleitfähigen Reaktionen
- $\bar{q}_s^{\text{prod}}$  Zunahme der Krümmungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von Versetzungsquellmechanismen
- $q_s$  Krümmungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem

- $q_s^{\text{cross}}$  Abnahme der Krümmungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von Quergleitprozessen
- $q_s^{\text{react}}$  Abnahme der Krümmungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von gleitfähigen und kollinearen Reaktionen sowie der Bildung von Lomer-Verbindungen
- $R^2$  Determinationskoeffizient oder auch Bestimmtheitsmaß genannt und ein Maß für die Vorhersagegüte
- $\text{sgn}()$  Signumfunktion, auch Vorzeichenfunktion genannt
- $S$  Anzahl aller betrachteten Gleitsysteme
- $s$  Index zur Angabe des einzelnen, betrachteten Gleitsystems
- $\tilde{s}$  Index zur Angabe eines anderen einzelnen Gleitsystems
- $T$  Temperatur
- $\delta t$  Zeitschrittweite in der Simulation
- $\mathbf{t}_N$  vorgeschriebener Spannungsvektor auf dem Neumann-Rand des Kontinuums
- $t_0$  Referenzwert für die Zeit für die Quergleitwahrscheinlichkeit
- $t$  Versetzungstyp
- $\mathbf{D}\mathbf{u}$  Verschiebungsgradient
- $\mathbf{u}$  Verschiebungen
- $\mathbf{u}_D$  vorgeschriebene Verschiebungen auf dem Dirichlet-Rand des Kontinuums
- $V$  Volumen des betrachteten Kontinuums
- $V^{\text{act}}$  Aktivierungsvolumen für die Quergleitwahrscheinlichkeit
- $v_s$  Versetzungsgeschwindigkeit
- $V^{\text{src}}$  Volumen des betrachteten Mittelungsvolumens
- $\mathbf{x}^{\text{geom}}$  Raumdiagonalen des Quaders, welcher das System vollständig umschließt
- $\mathbf{X}^{\text{MLR}}$  Matrix mit den features der multiplen linearen Regression
- $\{x, y, z\}$  Koordinaten bzgl. des kartesischen Koordinatensystems
- $\mathbf{y}^{\text{MLR}}$  Zielvariablen der multiplen linearen Regression

# 1. Einleitung

## 1.1 Motivation

Im Zuge der Miniaturisierung von Bauteilen stößt die Anwendung von mechanischen Komponenten in immer kleinere Skalen vor und erreicht auf der unteren Mikroskala bereits Größen, die kleiner als der Durchmesser eines menschlichen Haares sind. Hierbei stellt die Mikrosystemtechnik eine der Schlüsseltechnologien des 21. Jahrhunderts dar [Detter und Popovic (2000)] und die damit erzeugten Mikro-Elektro-Mechanischen Systeme (*MEMS*) bedienen einen Multimilliarden Euro schweren Markt mit steigender Tendenz des Marktwertes [Samuel et al. (2020), Wicht und Bouchaud (2005)]. Dies ist unter anderem durch den breiten Anwendungsbereich der *MEMS* begründet.

*MEMS* werden aufgrund ihrer hohen Leistungsdichte bei geringem Gewicht unter anderem in der Medizintechnologie, der Automobilindustrie, der Telekommunikation, der Agrarwirtschaft, der Raumfahrt, der Biotechnologie sowie in Konsumgütern eingesetzt [Samuel et al. (2020), Yurish et al. (2005), Detter und Popovic (2000)] und beeinflussen folglich vielfältige Aspekte des Lebens. Dabei werden die mechanischen Komponenten unterschiedlichen Belastungen ausgesetzt. So werden z. B. Schrauben in neuen Smartphones, Motorwellen mikroskopischer Motoren und Mikrobohrer in der Medizintechnologie u. a. auf Torsion belastet, wohingegen z. B. Mikroschalter im Innenbau des Smartphones sowie Mikrosensoren und -sonden in der Medizintechnologie u. a. als Kragarme konzipiert sind und folglich Biege- und Scherbelastungen unterliegen. Allerdings werden in allen Anwendungsbereichen der *MEMS* höchste Anforderungen an die Zuverlässigkeit der mechanischen Systeme gestellt [Detter und Popovic (2000)].

Im Hinblick auf die kleineren Systemgrößen der metallischen Mikrokomponenten verglichen zu makroskopischen Bauteilkomponenten (Systemgröße  $a > 1$  mm) gewinnen interne Längenskalen der Mikrostruktur sowie Einschränkungen infolge geometrischer Dimensionen zunehmend an Bedeutung und führen zu sogenannten Größeneffekten [Arzt (1998), Geers et al. (2006), Zhu et al. (2008)]. Die Mikrosysteme verhalten sich teilweise anders

als dies von makroskopischen Systemen bereits bekannt ist, wodurch klassische Kontinuumsansätze ungeeignet sind das Verhalten der Mikrosysteme zu beschreiben [Geers et al. (2006)]. Eine beobachtete Zunahme der Festigkeiten bei abnehmenden Systemgrößen („kleiner ist stärker“) lässt sich u. a. auf Effekte in der Mikrostruktur, statistische Effekte, Gradienten-Effekte und Einschränkungen infolge der Interaktion mit Oberflächen und inneren Grenzflächen zurückführen [Geers et al. (2006), Zhu et al. (2008)]. Hierbei ist anzumerken, dass je nach Gegebenheit auch entgegengesetzte Tendenzen auftreten können („kleiner ist schwächer“), z. B. infolge des inversen Hall-Petch Effektes für Korngrößen unterhalb weniger Nanometer [Arzt (1998), Zhu et al. (2008)]. Die genauen Wirkungsbereiche, Ursachen und Zusammenhänge dieser Größeneffekte sind noch unklar. Folglich ist ein tiefgreifendes Verständnis für das resultierende plastische Verformungsverhalten der Metalle und für die zugrunde liegende Evolution der Mikrostruktur von elementarer Bedeutung für die Gewährleistung der Zuverlässigkeit und für die Optimierung der Gestaltung der *MEMS*.

## 1.2 Stand der Forschung

Im Folgenden wird der Fokus der Betrachtungen auf das Verformungsverhalten und die Mikrostrukturentwicklung von kubisch-flächenzentrierten (*kfz*) Metallen gelegt. Eine Zunahme der initialen Fließspannung und der Verfestigungsraten für kleinere Systemgrößen („kleiner ist stärker“) wird in mehreren Experimenten mit Mikrosystemen unter verschiedenen Belastungen beobachtet. Eine Auflistung einiger Experimente ist in Tabelle 1.1 gegeben. Dabei werden u. a. die Einflüsse der Korngröße, der Interaktionen mit der Oberfläche, der Belastungsrate, der Versetzungskonfiguration, des Versetzungsaufstaus und der Limitierung von Versetzungsquellen diskutiert.

Die Bedeutung der Kombination aus Systemgröße und Höhe der Versetzungsdichte im System für die dominierenden Verfestigungsmechanismen wird in El-Awady (2015) thematisiert, wobei diese vom Regime des Versetzungsschwunds („dislocation starvation“) in versetzungsarmen Nanosystemen [Greer et al. (2005)] über die Regime der Aktivitäten einzelner Versetzungsquellen und der Verflechtung beweglicher Versetzungen („single-source strengthening“ und „exhaustion hardening“) [Oh et al. (2009), Shan et al. (2008)] bis zum Regime der durch Waldversetzungen geprägten Verfestigung („forest strengthening“) im versetzungsreichen Vollmaterial reichen [Taylor (1934a,b), Franciosi et al. (1980)].

Im Regime des Versetzungsschwunds ist die Anzahl an Versetzungsquellen im System streng limitiert und die gebildeten Versetzungen verlassen meistens das System an der Oberfläche,

**Tabelle 1.1:** Liste mit Beispielen von Experimenten aus der Literatur zu Größeneffekten in Mikrosystemen aus *kfz* Metallen unter verschiedenen Belastungen. Die Systemgrößen beziehen sich jeweils auf die Probendurchmesser bzw. -dicken.

System und Systemgröße	Belastung	Material	Kristallorientierung	Literaturquelle
Mikropillar (5 – 40 $\mu\text{m}$ )	Druck	Nickel (einkristallin)	nicht hochsymmetrisch (Einfachgleitung)	Uchic et al. (2004)
Mikropillar (1 – 40 $\mu\text{m}$ )	Druck	Nickel (einkristallin)	nicht hochsymmetrisch (Einfachgleitung)	Dimiduk et al. (2005)
Mikropillar (0, 2 – 8 $\mu\text{m}$ )	Druck	Gold (einkristallin)	nicht hochsymmetrisch (Einfachgleitung)	Volkert und Lilleodden (2006)
Mikrokragarm (1 – 7, 5 $\mu\text{m}$ )	Biegung	Kupfer (einkristallin)	hochsymmetrisch $\langle 111 \rangle$	Motz et al. (2005)
Mikrokragarm (0, 7 – 5 $\mu\text{m}$ )	Biegung	Kupfer (einkristallin)	nicht hochsymmetrisch (Einfachgleitung)	Demir et al. (2010)
Mikrokragarm (1 – 5 $\mu\text{m}$ )	Biegung	Kupfer (einkristallin)	(nicht) hochsymmetrisch $\langle 100 \rangle$ & Einfachgleitung	Velayarce et al. (2018)
Mikrodraht (12 – 170 $\mu\text{m}$ )	Torsion	Kupfer (polykristallin)	-	Fleck et al. (1994)
Mikrodraht (18 – 105 $\mu\text{m}$ )	Torsion	Kupfer (polykristallin)	-	Liu et al. (2012)
Mikrodraht (12, 5 – 60 $\mu\text{m}$ )	Torsion	Gold (polykristallin)	-	Chen et al. (2015)

bevor diese mit anderen Versetzungen reagieren. Dies resultiert in einer Lokalisierung der plastischen Verformungen in ausgeprägten Gleitbändern sowie in unregelmäßigen Dehnungssprüngen und stochastischen Spannungs-Dehnungs-Kurven mit zum Teil geringem Verfestigungsverhalten [Dimiduk et al. (2006) und Cui et al. (2014)]. Dagegen stellt das plastische Verformungsverhalten im Vollmaterial meist einen eher gleichmäßigen Prozess dar und wird durch eine hohe Versetzungsdichte im System charakterisiert. Hierbei kommt es zu zahlreichen Reaktionen und Interaktionen zwischen den Versetzungen der verschiedenen Gleitebenen und resultiert in der Bildung komplexer Versetzungsstrukturen. Die sich bildenden internen Längenskalen liegen dabei in der Größenordnung der Inversen der Quadratwurzel der totalen Versetzungsdichte ( $1/\sqrt{\rho^{\text{Tot}}}$ ) [El-Awady (2015)].

Im Rahmen dieser Arbeit wird der Fokus auf den bisher weniger erforschten Übergangsbereich zwischen dem Vollmaterial und dem Regime des Versetzungsschwunds gelegt. In diesem Regime wird während der Verformung eine signifikante Menge an Versetzungsdichte im System erhalten oder aufgebaut, wobei jedoch manche der oben genannten Eigenschaften von Nanosystemen erhalten bleiben.

Eine Zunahme der Versetzungsdichte lässt sich u. a. auf die Aktivitäten von Versetzungsquellen, einschließlich von Frank-Read-Quellen und einarmigen Spiralquellen in Oberflächennähe („truncated sources“) sowie auf die Versetzungsnukleation an der Oberfläche zurückführen. Der jeweilige vorherrschende Mechanismus hängt hierbei u. a. von der Systemgröße und den Belastungsraten ab. In Nanosystemen (mit  $a < 0,2 \mu\text{m}$ ) kommt der Versetzungsnukleation an Oberflächen eine elementare Bedeutung zu, wohingegen deren Einfluss in Mikrosystemen eher gering ausfällt [Jennings et al. (2011), Ryu et al. (2015)]. Die statistische Variation der Längen der Versetzungsquellen wird in Parthasarathy et al. (2007) und El-Awady et al. (2009) untersucht. Eine mögliche Modellierung der Versetzungsquellen in Kontinuumsformulierungen wird in Zhu et al. (2014) und Monavari und Zaiser (2018) basierend auf den zum Durchlaufen des Quellmechanismus benötigten Nukleationszeiten aufgezeigt. Dahingegen vermeidet Schmitt et al. (2019) die Gefahr künstlicher Entfestigung infolge ungeeigneter Parametrisierung bei solchen Ansätzen durch die Betrachtung des Relaxationsvermögens der Quellaktivitäten in Anlehnung an Roters (2003).

Im Zuge der Mikrostrukturevolution kommt es zu Interaktionen und Reaktionen zwischen den Versetzungen der verschiedenen Gleitsysteme in den Mikrosystemen. Die daraus folgenden Behinderungen der Versetzungsbewegung werden in Madec et al. (2003) und Devincre et al. (2006) analysiert. Stricker und Weygand (2015) identifiziert mittels Simulationsanalysen für Systemgrößen auf der unteren Mikroskala einen Übergang der Versetzungsproduktion infolge von Quellaktivitäten zu einer Versetzungsmultiplikation infolge von Versetzungsreaktionen bzw. der gleitfähigen Reaktion. Dies wird in Akhondzadeh et al. (2021) durch Betrachtung koplanarer Reaktionen erweitert, welche vermehrt in der Nähe von gleitfähigen Reaktionen auftreten und zu komplexen Netzwerkstrukturen führen. Die Stabilität von Netzwerkstrukturen bzw. Versetzungsverbindungen wird in Shin et al. (2001) und Rodney und Phillips (1999) betrachtet. Der Ausbildungsgrad stabiler Versetzungsstrukturen im System hängt dabei auch von der Systemgröße ab, wie die experimentellen Untersuchungen von Zhao et al. (2019) mittels Druckversuchen ergaben, in denen der notwendige Durchmesser von Kupfer-Mikropillars zur Bildung von ausgeprägten Versetzungsstrukturen im Bereich der unteren Mikroskala (zwischen  $1 - 3 \mu\text{m}$ ) detektiert wurde.

Des Weiteren wird bei der Analyse der Versetzungskonfigurationen eine Akkumulation von sogenannten geometrisch notwendigen Versetzungen (*GNDs*) in Mikrosystemen sowohl unter homogenen als auch inhomogenen Belastungen beobachtet, die zu Missorientierungen innerhalb des Materials führen. Dies schließt u. a. Druckversuche mit einkristallinem Kupfer mit Zweifachgleit- und Hochsymmetrie-Orientierungen in Maaß et al. (2008) und Kiener et al. (2011) mit ein, wobei Kirchlechner et al. (2011b) eine Diskrepanz zwischen

den Gleitsystemen, auf denen die *GND*-Dichte zu lokalisieren ist, und den Gleitsystemen, deren Aktivitäten Gleitstufen auf der Oberfläche hinterlassen, feststellte. In inhomogenen Spannungsfeldern lässt sich die Akkumulation von *GND*-Dichte auf Versetzungsaufstaus im Inneren der Mikrosysteme zurückführen, wobei diese teilweise in Abhängigkeit von der Kristallorientierung Versetzungsnetzwerke ausbilden. Dies ergaben u. a. die Untersuchungen der Versetzungskonfigurationen von Mikrobalken bzw. -kragarmen unter Biegebelastungen in Motz et al. (2009), Konijnenberg et al. (2015) und Kirchlechner et al. (2015) und von Mikrodrähten unter Torsionsbelastung in Weinberger und Cai (2009, 2010), Ryu et al. (2016), Gravell et al. (2021) und Stricker et al. (2022). Ansätze zur Identifikation der beteiligten Gleitsysteme basierend auf experimentellen Messergebnissen der *GND*-Dichte werden in Kysar et al. (2007) und Ruggles et al. (2016a) verfolgt.

Experimentelle Untersuchungen von Mikrosystemen sind oftmals auf wenige zugängliche Messgrößen und Messbereiche beschränkt. Zu den gängigen geometrischen und mechanischen Messgrößen zählen u. a. die globale Längenänderungen und anliegenden Kräfte. Aus den resultierenden technische Spannungs-Dehnungskurven lassen sich u. a. elastische Eigenschaften (wie der Elastizitätsmodul), die (initiale) Fließspannung und die vermeintliche Verfestigungsrate des untersuchten Metalls als globale Größe bestimmen. Um Aufschlüsse über die zugrunde liegende Mikrostruktur zu erhalten, werden u. a. die Elektronenmikroskopie und die Röntgendiffraktometrie eingesetzt. So liefert die Oberflächentopografie auf Rasterelektronenmikroskop (*REM*)-Aufnahmen Hinweise auf das Verformungsverhalten und auf die an der plastischen Verformung beteiligten Gleitebenen. Auf Transmissionselektronenmikroskop (*TEM*)-Aufnahmen lässt sich in dünnen Proben (typischer Weise  $\ll 50$  nm) die Anordnung der Versetzungslinien erkennen. Mittels Elektronenrückstreubeugung (*EBS*D)- und  $\mu$ Laue-Messungen können die Missorientierungen (bzw. die Orientierung des Kristallgitters) sowie die *GND*-Dichten (bzw. die auf den lokalen Dehnungsgradienten basierenden Komponenten des Versetzungsdichtetensors) in Oberflächennähe (z. B. *EBS*D:  $< 100$  nm) lokal gemessen werden [Dehm et al. (2018)].

Jedoch liefern Experimente keinen vollständigen Einblick in die dreidimensionale Mikrostrukturevolution in Mikrosystemen, zumal weitere Faktoren die Messergebnisse in unbekanntem Ausmaß beeinflussen können. Dies schließt u. a. geometrischen Imperfektionen (Variationen in der Probengeometrie, Versatz und Fehlansrichtungen), lokale Änderungen der Materialeigenschaften infolge von Bearbeitungsverfahren zur Präparation der Proben sowie Reibungen und laterale Restriktionen während der Versuchsdurchführung mit ein [Dehm et al. (2018), Senger et al. (2010), Kirchlechner et al. (2011a)]. Demnach besteht der Bedarf nach einer für ausreichend große Volumina geeigneten numerischen Formulierung, um die Prozesse und Mechanismen der Mikrostrukturevolution im dreidimensionalen

Raum abbilden bzw. analysieren zu können und die Untersuchung von eindeutig definierten Mikrosystemen zu ermöglichen.

Im Rahmen dieser Arbeit werden zur Analyse der Gleitsystemaktivitäten, deren Interaktionen sowie deren Auswirkungen auf die Versetzungskonfiguration, insbesondere auf die Zusammensetzung der Versetzungsdichte, verschiedene einkristalline Mikrosysteme untersucht, einschließlich Mikropillars unter Druckbelastung, Mikrokrägarne unter Biegebelastung und Mikrodrähte unter Torsionsbelastung. Hierbei liefern Simulationen direkte Einblicke in verschiedene Aspekte der Mikrostrukturevolution, die mit Experimenten nur schwer oder gar nicht zugänglich sind. Im Gegensatz zu Simulationen der Molekulardynamik (*MD*) und diskreten Versetzungsdynamik (*DDD*), die aufgrund des numerischen Aufwandes auf kleinere Mikro- und Nanosysteme limitiert sind, unterliegen Kontinuumsformulierungen, bei denen der Rechenaufwand von der gewählten räumlichen Auflösung abhängig ist, nicht solchen Restriktionen. Deshalb wird hier für die Untersuchungen eine physikalisch motivierte, auf homogenisierten Versetzungsdichten basierende Kontinuumsformulierung der Kristallplastizität weiterentwickelt. Darüber hinaus werden datengetriebene Analysemethoden verwendet, um charakteristische Größen in Versetzungsnetzwerken zu bestimmen, und detaillierte theoretische Systemanalysen durchgeführt, um a priori die erwarteten Interaktionen und Zusammenhänge zu identifizieren.

## 2. Grundlagen

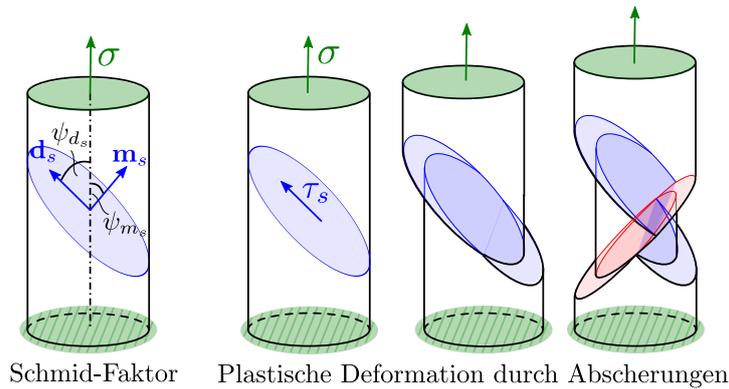
Im Folgenden wird in kurzer Form auf die für diese Arbeit wesentlichen Teilaspekte der Kristallplastizität eingegangen. Für einen umfassenderen Hintergrund sei auf die Literatur verwiesen, unter anderem auf Hirth und Lothe (1982), Hull und Bacon (2011) und Cai und Nix (2016).

### 2.1 Versetzungen und Versetzungskonfigurationen

Bei der plastischen Verformung von *kfz* Metallen nimmt die Bewegung von Versetzungen eine elementare Rolle ein [Taylor (1934b,a), Orowan (1934), Polanyi (1934)], wobei die auf dem jeweiligen Gleitsystem aufgelöste Schubspannung als treibende Größe wirkt. Das betrachtete Gleitsystem  $s$  wird durch dessen Gleitebenennormale  $\mathbf{m}_s$  und deren Gleitrichtung  $\mathbf{d}_s$  charakterisiert. Um aus einer extern anliegenden Zugkraft die aufgelöste Schubspannung  $\tau_s$  des betrachteten Gleitsystems zu erhalten, wird die anliegende Zugspannung  $\sigma$  auf das betrachtete Gleitsystem projiziert [Schmid und Boas (1935)]. Dies motiviert den sogenannten Schmid-Faktor  $m_s$ , welcher das Verhältnis der aufgelösten Schubspannung zur Zugspannung beschreibt und auf den jeweiligen Winkeln  $\{\psi_{d_s}, \psi_{m_s}\}$  zwischen der Zugspannung und der Gleitrichtung bzw. -ebenennormale basiert, siehe Abbildung 2.1. Es gilt:

$$\tau_s = m_s \sigma = (\cos \psi_{d_s} \cos \psi_{m_s}) \sigma \stackrel{\text{hier}}{=} (\mathbf{d}_s \otimes \mathbf{m}_s) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.1)$$

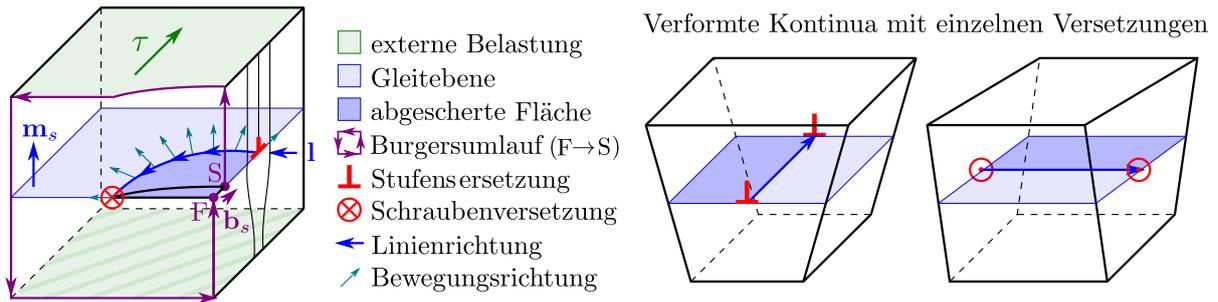
Es sei angemerkt, dass der Schmid-Faktor in seiner ursprünglichen Form lediglich für eine einachsige Zugbelastung definiert ist und dabei Werte im Bereich von  $m_s \in [0; 0,5]$  annimmt, wobei der maximale Schmid-Faktor unter den Winkeln von  $\psi_{d_s} = \psi_{m_s} = 45^\circ$  erreicht wird. Dies ist auch aus dem Mohr'schen Spannungskreis ersichtlich. Erweiterungen bzw. Verallgemeinerungen des Schmid-Faktors für Schubspannungen und mehrachsige Spannungszustände lassen sich u. a. in Kocks (1970) als Matrixform und in Xia et al. (2019) als globaler, auf den Hauptspannungen basierender Vergleichswert finden.



**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellung der relevanten geometrischen Größen und Spannungsgrößen des Schmid-Faktors sowie der plastischen Deformation durch Abscherprozesse. Die externe Belastung (grün) führt zu Aktivitäten zweier Gleitsysteme (blau und rot), wodurch das System eine bleibende Verlängerung bei Abnahme des Durchmessers erfährt. Die Darstellung ist angelehnt an die Abbildungen 2.19 und 8.1 aus [Cai und Nix (2016)].

Das Gleiten von Versetzungen auf ihren Gleitsystemen wird als konservative Versetzungsbewegung (ohne Diffusionsvorgänge) bezeichnet und führt zu Abscherungen im Material [Cai und Nix (2016): Seite 225], wie schematisch in Abbildung 2.1 dargestellt. Hierbei behält das Gleiten von perfekten Versetzungen die ideale Gitterstruktur im Umfeld dieser Liniendefekte bei. Der dazugehörige Burgersvektor entspricht folglich einem kompletten Translationsvektor des Kristallgitters. Im Gegensatz dazu gehen Partialversetzungen mit Stapelfehlern einher, wobei sich perfekte Versetzungen aus energetischen Gründen in Partialversetzungen aufteilen können. Beispielsweise beträgt der Gleichgewichtsabstand zweier Partialversetzungen einer Schraubenversetzung in Gold in der Abwesenheit externer Belastungen ca. 1,2 nm [Cai und Nix (2016): Seite 359]. Im Rahmen dieser Arbeit fokussiert sich die Betrachtung auf perfekte Versetzungen.

Versetzungslinien können nicht innerhalb eines perfekten Kristalls enden. Stattdessen bilden sie geschlossene Ringe oder enden an freien Oberflächen, Versetzungslinien, Korngrenzen oder anderen Defekten des Kristallgitters [Nabarro (1952)]. Die Versetzungslinien besitzen im Allgemeinen einen gekrümmten räumlichen Verlauf und folglich variiert der Versetzungscharakter entlang der Versetzungslinie, siehe Abbildung 2.2. Der jeweilige Schrauben- und Stufencharakter lässt sich durch eine additive Zerlegung in die entsprechenden Anteile bestimmen, wobei der Versetzungslinienvektor  $\mathbf{l}$  bei Schraubenversetzungen parallel zum Burgersvektor  $\mathbf{b}_s$  und bei Stufenversetzungen senkrecht dazu verläuft [Hirth und Lothe (1982): Seite 24]. Der prozentuale Schraubenanteil an der Vektorgröße des Versetzungslinienvektors wird hier zu  $\frac{\|\mathbf{l}^{\text{screw}}\|^2}{\|\mathbf{l}\|^2} = (\mathbf{l} \cdot \frac{1}{b_s} \mathbf{b}_s)^2 \times 100\%$  berechnet, wobei  $b_s$  die Länge des Burgersvektors beschreibt. In dieser Arbeit werden Stufen- bzw. Schraubenversetzungen als positiv bezeichnet ( $\perp$  bzw.  $\odot$ ), sofern der Zusammenhang  $(\mathbf{m}_s \times \mathbf{b}_s) \cdot \mathbf{l} > 0$  bzw.  $\mathbf{b}_s \cdot \mathbf{l} > 0$  zutrifft, andernfalls als negativ ( $\top$  bzw.  $\otimes$ ). Aufgrund der Parallelität von Linien- und

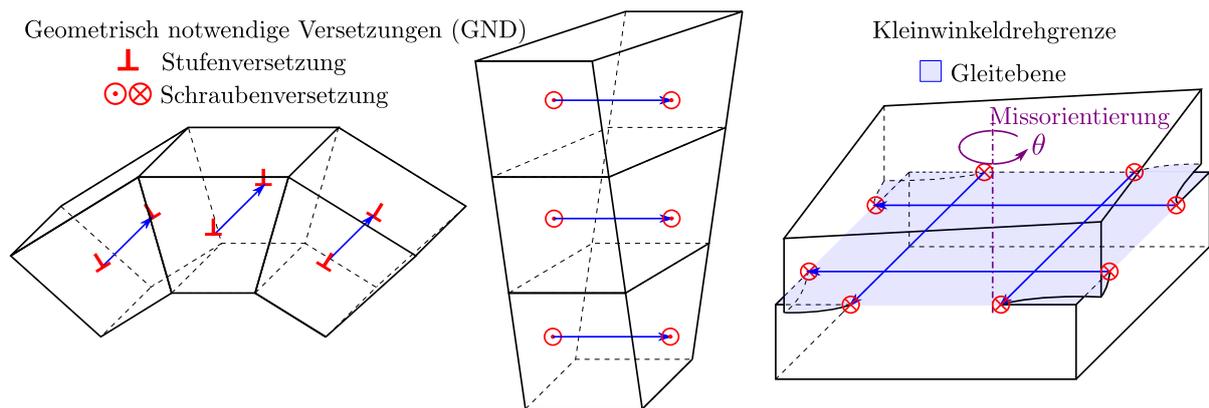


**Abbildung 2.2:** Darstellung einer dreidimensionalen Versetzungslinie, einschließlich ihres Versetzungscharakters und -bewegung, wobei der Burgersvektor sich mittels des Burgersumlaufs bestimmen lässt (links). Zudem sind verformte Kontinua, welche einzelne positive Stufen- und Schraubenversetzungen beinhalten, schematisch abgebildet (rechts). Die Darstellung links ist angelehnt an die Abbildungen 8.19 aus [Cai und Nix (2016)].

Burgersvektor bei Schraubenversetzungen ist deren Gleitsystem nicht eindeutig festgelegt, wodurch Schraubenversetzungen quergleiten können.

Es sei angemerkt, dass in der Literatur keine einheitliche Konvention bzgl. der Konstellation aus Linienvektor und Burgersvektor besteht, wodurch z. B. das Vorzeichen (positiv oder negativ) des Versetzungscharakters abhängig von der gewählten Notation ist [Hirth und Lothe (1982): Seite 22, Lubarda (2019)]. Dies gilt es bei der Interpretation von Beschreibungen der Versetzungskonfigurationen zu beachten. In dieser Arbeit wurde die in Abbildung 2.2 abgebildete Notation im Hinblick auf die Krümmung der Versetzungslinie verwendet. So weist die abgebildete Versetzungslinie, welche sich unter der positiven aufgelösten Schubspannung auf dem Gleitsystem ausbreitet, eine positive Krümmung auf (die Versetzungslinie beschreibt eine Linkskurve). Die geometrische Ausprägung der Versetzung selbst hängt nicht von der gewählten Notation ab. Die eingeschobene Halbebene der Stufenversetzung befindet sich oberhalb der Gleitebene und bei der Schraubenversetzung handelt es sich um eine rechtsgängige Helix.

Die einzelnen Versetzungen führen zu einer Verformung der umgebenden Kontinua, wie in Abbildung 2.2 schematisch abgebildet. Um die in inhomogenen Deformationen, wie z. B. der Biegung eines Balkens, auftretenden Dehnungsgradienten mittels plastischer Deformationen abzubilden, bedarf es der Akkumulation von Versetzungen mit dem gleichen Vorzeichen [Nye (1953), Ashby (1970)], siehe die Akkumulation von positiven Stufen- und Schraubenversetzungen in Abbildung 2.3. Diese werden als *GNDs* oder auch als nicht redundante Versetzungen bezeichnet. Im Gegensatz dazu gleichen sich die Vorzeichen von sogenannten statistisch gespeicherten Versetzungen (*SSDs*) bzw. redundanten Versetzungen innerhalb des betrachteten Volumens gegenseitig aus und deren Stabilisierung im Materialinneren lässt sich auf zufällig auftretende Einfangprozesse zurückführen [Arsenlis und Parks (1999)]. Bei dem Konzept der Unterteilung in *GNDs* und *SSDs* handelt es



**Abbildung 2.3:** Darstellung von geometrisch notwendigen Versetzungen, wobei die Stufenversetzungen zu einer Biegung und die Schraubenversetzungen zu einer Scherung des Systems führen (links). Zudem ist die Bildung einer Kleinwinkeldrehgrenze mittels negativen Schraubenversetzungen schematisch abgebildet (rechts). Die Darstellung rechts ist angelehnt an die Abbildungen 14.9 aus [Cai und Nix (2016)].

sich folglich um eine Gruppenbetrachtung innerhalb eines gewählten Volumens [Gao und Huang (2003)].

Konzentrationen von *GNDs* innerhalb einer entsprechenden Ebene bzw. Region führen zur Bildung von Kleinwinkelkorngrenzen, vgl. die schematische Darstellung einer auf Schraubenversetzungen basierenden Kleinwinkeldrehgrenze in einem tordierten System in Abbildung 2.3. Hierbei weist das Kristallgitter auf den beiden durch die Kleinwinkelkorngrenze getrennten Bereichen eine unterschiedliche Orientierung auf.

## 2.2 Versetzungsquell- und Reaktionsmechanismen

Das Verfestigungsverhalten von *kfz* Einkristallen kann in vier Bereiche unterteilt werden [Nabarro et al. (1964), Mecking (1981)], wobei im Rahmen dieser Arbeit der Fokus auf die Bereiche I und II gelegt wird. Im Bereich I, auch Bereich der Einfachgleitung genannt, weisen die Versetzungen eine große mittlere Weglänge auf, welche sich auf geringe Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Versetzungen zurückführen lässt. Aufgrund der geringen Interaktionen können die im Material vorhandenen Frank-Read-Quellen mehrfach aktiviert werden [Mecking (1981), Kuhlmann-Wilsdorf (2002): Seite 293]. Eine Frank-Read-Quelle beschreibt ein Versetzungssegment mit fixierten Knotenpunkten, das bei ausreichend hoher anliegender Spannung infolge eines Ausbauch- und Annihilationsprozesses zur Produktion eines Versetzungsringes führt und dabei wieder die Anfangskonfiguration annimmt [Frank und Read Jr (1950)]. Die notwendige Quellspannung ist dabei von der

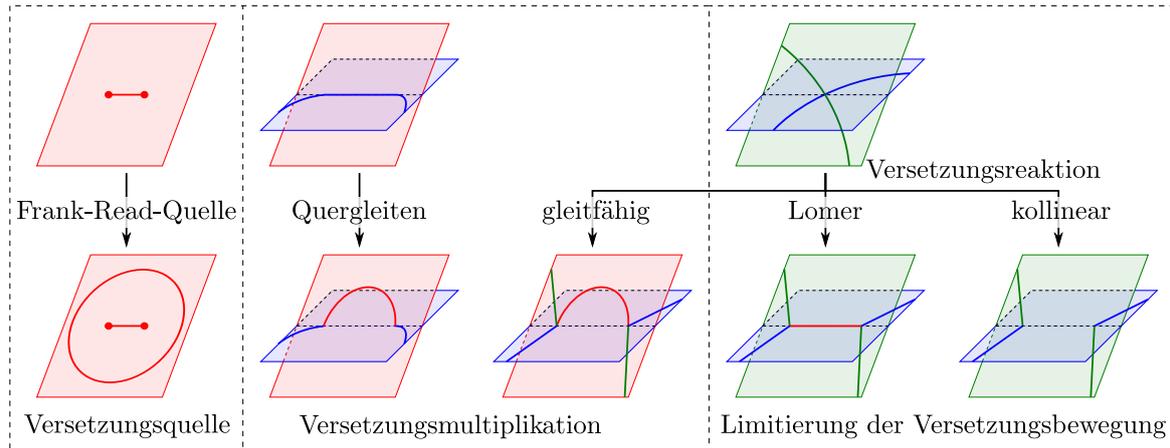
Versetzungslänge der Quelle abhängig, was die Bedeutung von internen Längen für die Mikrostrukturevolution verdeutlicht [Hull und Bacon (2011): Seite 164].

Der Bereich II wird durch die Ausbildung eines Versetzungsnetzwerkes charakterisiert, wobei mehrere Gleitsysteme aktiv sind und vermehrt Interaktionen und Versetzungsreaktionen zwischen den einzelnen Gleitsystemen auftreten [Mecking (1981), Mecking und Kocks (1981), Hirth und Lothe (1982): Seite 792]. Versetzungen induzieren infolge der Gitterverzerrungen Eigenspannungsfelder, die miteinander interagieren. Je nach Versetzungscharakter und räumlicher Anordnung führt dies zu einer Anziehung oder Repulsion zwischen den Versetzungen. Dies wird u. a. anhand der Rückspannung in Versetzungsaufstaus deutlich [Hirth und Lothe (1982): Seite 775].

Beim Aufeinandertreffen von Versetzungen werden abhängig von der Konstellation Versetzungsreaktionen gebildet, wobei die Reduktion der Verzerrungsenergie als Triebkraft wirkt [Hull und Bacon (2011): Seite 150]. Der Burgersvektor des neu gebildeten Versetzungssegments ergibt sich nach der Frank'schen Regel aus der Superposition der Burgersvektoren der reagierenden Versetzungen [Cai und Nix (2016): Seite 224]. In *kfz* Metallen lassen sich vier unterschiedliche Versetzungsreaktionen zwischen Gleitsystemen mit unterschiedlichen Gleitebenen identifizieren: Die kollineare Reaktion, die Lomer-Reaktion, die Hirth-Reaktion und die gleitfähige Reaktion [Saada und Veyssi re (2002): Seite 431, Hull und Bacon (2011): Seite 150]. Eine  bersicht in Matrixform  ber die Zuordnung der Versetzungsreaktionen zu den jeweiligen Gleitsystempaarungen ist in Abbildung 3.2 in Abschnitt 3.1 gegeben.

Die kollineare Reaktion stellt einen Annihilationsprozess zwischen Versetzungen zweier Gleitsysteme mit demselben Burgersvektor und gegens tzlichem Versetzungscharakter dar [Hirth (1961)]. Folglich f hrt die kollineare Reaktion zu einer Limitierung der Versetzungsbewegung. Auch die Lomer- und die Hirth-Reaktionen f hren zu einer Behinderung der Versetzungsbewegung. Jedoch kommt es hierbei nicht zu einer Annihilation, sondern zu der Bildung eines immobilen Versetzungssegments, dessen Burgersvektor au erhalb der Gleitebenen verl uft [Lomer (1951), Cottrell (1952)]. Somit f hren diese Versetzungsreaktionen zu einer Stabilisierung des gebildeten Versetzungsnetzwerkes, welches ein Hindernis f r weitere Versetzungsbewegungen darstellt.

Im Falle der gleitf higen Reaktion befindet sich das neu gebildete Versetzungssegment auf einem der zw lf Gleitsysteme des *kfz* Kristallgitters und tr gt als mobile Versetzung zur plastischen Verformung des Materials bei [Saada und Veyssi re (2002): Seite 433]. Folglich handelt es sich von den vier Versetzungsreaktionen lediglich bei der gleitf higen Reaktion um eine Versetzungsmultiplikation. Es sei angemerkt, dass auch der Quergleitmechanismus zu einer Versetzungsmultiplikation f hrt. Im Gegensatz zur gleitf higen Reaktion basiert das Quergleiten jedoch nicht auf dem Aufeinandertreffen zweier Versetzungen, sondern



**Abbildung 2.4:** Schematische Darstellung der in dieser Arbeit berücksichtigten Versetzungsquellen, Versetzungs-multiplikationsmechanismen und Versetzungsreaktionen, die zu einer Limitierung der Versetzungsbewegung führen. Die Darstellung ist angelehnt an die Abbildungen 4.1 in [Sudmanns (2020)].

resultiert bei entsprechendem Spannungszustand und Temperatur aus der Kristallstruktur selbst [Saada (1991)]. Des Weiteren führt der doppelte Quergleitmechanismus zu einer Versetzungskonfiguration, die analog zu einer Frank-Read-Quelle operieren kann und somit eine Versetzungsquelle darstellt [Koehler (1952), Hirth und Lothe (1982): Seite 755].

In Abbildung 2.4 sind die in dieser Arbeit berücksichtigten Versetzungsquellen und Versetzungsreaktionen schematisch dargestellt. Es ist anzumerken, dass in Analysen von Versetzungsnetzwerken mittels diskreten Versetzungssimulationen ein geringes Auftreten von Hirth-Reaktionen beobachtet wurde [Stricker et al. (2018), Sills et al. (2018)], weshalb die Hirth-Reaktion nicht explizit aufgeführt ist.

## 2.3 Homogenisierung von Versetzungsgrößen

Der plastische Verformungsprozess führt zu bleibenden Strukturveränderungen im Material und umfasst u. a. Formänderungen infolge von Abscherprozessen, die zu Stufen auf der Oberfläche führen, die zugrundeliegenden Versetzungen und die damit einhergehenden inneren elastischen Verzerrungen sowie die durch *GNDs* verursachten Rotationen des Kristallgitters [u. a. Larson et al. (2008)]. Die sich dabei ausbildenden Versetzungsnetzwerke stellen komplexe und stellenweise miteinander verbundene diskrete Versetzungslinien im dreidimensionalen Raum dar.

Für eine bessere Interpretierbarkeit des Mikrostrukturzustandes und zur Beschreibung in Kontinuumsbetrachtungen ist eine Identifikation von charakteristischen Kontinuumsgrößen

notwendig. Hierzu wird eine Homogenisierung der Versetzungsstruktur innerhalb gewählter Mittelungsvolumen durchgeführt, wobei höherdimensionale Räume eine differenzierte Betrachtung verschiedener Versetzungsorientierungen ermöglichen [Hochrainer et al. (2007, 2014)]. Die mit der Homogenisierung einhergehende Reduktion des Informationsgehaltes führt dabei unter anderem zu einer Unschärfe der Kenntnis über die exakte räumliche Lage und der individuellen Orientierung der einzelnen Liniensegmente. Diese Informationen liegen nach der Homogenisierung lediglich für das Ensemble aus Versetzungen innerhalb des Mittelungsvolumens vor.

Die Abscherprozesse werden über die plastischen Scherungen des Kontinuums beschrieben und umfassen die Längen der Translationen bzw. der Burgersvektoren sowie das Verhältnis der durch die Versetzungen abgescherten Fläche zum Mittelungsvolumen. Zwei klassische Größen zur Beschreibung der Versetzungsstruktur sind zum einen die totale Versetzungsdichte und zum anderen der Versetzungsdichtetensor [Hochrainer et al. (2014)]. Die totale Versetzungsdichte gibt als skalare Größe die kumulierte Versetzungslinienlänge pro Einheitsvolumen an, wobei sie typischerweise für durchgeglühte Kristalle in der Größenordnung von  $10^9 - 10^{12} m^{-2}$  liegt und in kaltverformten Metallen Größenordnungen von  $10^{14} - 10^{16} m^{-2}$  erreichen kann [Cai und Nix (2016): Seite 219, Hull und Bacon (2011): Seite 19]. Der auf *GNDs* basierende Versetzungsdichtetensor  $\boldsymbol{\alpha}$  [Kröner und Rieder (1956), Nye (1953), Bilby et al. (1955)] misst als Tensorfeld der zweiten Stufe die Inkompatibilität der plastischen Verformungen bzw. den Gesamt-Burgersvektor aller durch ein beliebig gerichtetes Flächenelement verlaufender Versetzungslinien und ergibt sich zu [Kröner und Rieder (1956), Arsenlis und Parks (1999)]:

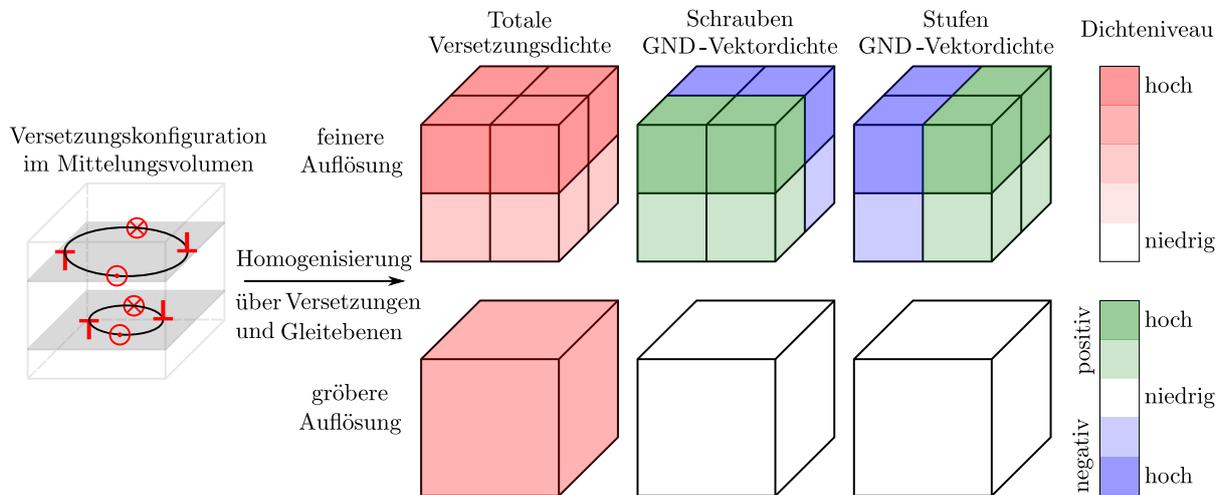
$$\boldsymbol{\alpha} = -rot(\boldsymbol{\beta}^{pl}) = \sum_t \varrho_t^{GND} \mathbf{b}_t \otimes \mathbf{l}_t \quad (2.2)$$

Hierbei beschreibt  $\boldsymbol{\beta}^{pl}$  den plastischen Anteil des Verschiebungsgradienten,  $\{\mathbf{b}_t, \mathbf{l}_t\}$  den Burgersvektor bzw. Linienvektor der verschiedenen Versetzungstypen  $t$  und  $\varrho_t^{GND}$  die entsprechende *GND*-Dichte. Die *GND*-Dichte ist analog zur totalen Versetzungsdichte definiert, berücksichtigt jedoch ausschließlich *GNDs*. Dabei enthält die Hauptdiagonale des Versetzungsdichtetensors die Schraubenanteile und die Nebendiagonalen enthalten die Stufenanteile. Es sei angemerkt, dass in der Literatur verschiedene Rechenvorschriften für die mathematischen Operatoren, wie z. B. den Rotationsoperator, verwendet werden und folglich auf eine konsistente Verwendung entsprechend der gewählten Notation zu achten ist [Das et al. (2018)].

Für jede gegebene Versetzungskonfiguration lässt sich der Versetzungsdichtetensor eindeutig bestimmen. Dahingegen lassen die neun Komponenten eines gegebenen Versetzungsdichtetensors aufgrund der Unterbestimmtheit des Gleichungssystems keinen eindeutigen

Rückschluss auf die zugrundeliegenden *GND*-Dichten der einzelnen Versetzungstypen in *kfz* Metallen zu. Die Beschränkung experimenteller Messungen auf einzelne Flächen führt zudem zu einer Reduktion der bekannten  $\alpha$ -Komponenten und verstärkt somit die Problematik in Experimenten.

Um dennoch Abschätzungen der *GND*-Dichte in Experimenten zu erhalten, bedarf es zusätzlicher Annahmen, wie z. B. die Vernachlässigung der elastischen Verzerrungen oder die Minimierung der totalen Versetzungsdichte bzw. der damit einhergehenden Verzerrungsenergie nach der  $L_1$ -Norm [Arsenlis und Parks (1999), Ruggles et al. (2016a)]. Hierbei ist anzumerken, dass die lineare Korrelation zwischen Versetzungslänge und Verzerrungsenergie aufgrund der Interaktion der Eigenspannungsfelder der Versetzungen nicht notwendigerweise gegeben ist, insbesondere in dichten Versetzungsnetzwerken [Wheeler et al. (2009)]. Des Weiteren kann in Abhängigkeit von der Systemgröße und den Spannungszuständen unter Umständen nicht zwischen den elastischen und plastischen Beiträgen zur Krümmung des Kristallgitters unterschieden werden [Kirchlechner et al. (2012)]. Infolge der Beschränkung der Beiträge zum Versetzungsdichtetensor auf *GNDs*, weist der Versetzungsdichtetensor eine Abhängigkeit von der gewählten Auflösung auf [Jiang et al. (2013), Ruggles et al. (2016b)]. Der Einfluss der Auflösung auf die *GND*-Dichte ist in Abbildung 2.5 schematisch dargestellt.



**Abbildung 2.5:** Schematische Darstellung der Homogenisierung von Versetzungsringen, wobei die Interpretation der Versetzungen als *GNDs* eine Abhängigkeit von der gewählten Auflösung aufweist. Die *GND*-Vektordichte enthält verglichen zur *GND*-Dichte zusätzlich die Information über die Ausrichtung bzw. das Vorzeichen (positiv oder negativ) der Schrauben- und Stufenversetzungen.

## 3. Methoden

Im Folgenden werden die dieser Arbeit zugrunde liegenden Modelle und verwendeten Methoden erklärt und deren elementaren Annahmen und Zusammenhänge dargelegt. Hierbei wird zur Untersuchung des Materialverhaltens einschließlich der Mikrostrukturevolution ein physikalisch motiviertes, auf homogenisierten Versetzungsdichten basierendes Kontinuumsmodell der Kristallplastizität verwendet. Zusätzlich werden datengetriebene Analysemethoden verwendet, um charakteristische Größen in Versetzungsnetzwerken zu bestimmen.

### 3.1 Versetzungsdynamik im Kontinuum

Unter Verwendung eines höherdimensionalen Raums kann eine kinematisch abgeschlossene *Continuum Dislocation Dynamics* (*CDD*)-Formulierung abgeleitet werden, die Informationen über die Orientierungen der Versetzungen bewahrt und die Beschreibung der Bewegung von homogenisierten gekrümmten Versetzungslinien im dreidimensionalen Raum ermöglicht [Hochrainer et al. (2007, 2014), Hochrainer (2015)]. Das in dieser Arbeit verwendete Kontinuumsmodell der Kristallplastizität basiert auf der in Schulz et al. (2019) eingeführten *CDD*-Formulierung, in welcher jedoch analog zu Sudmanns et al. (2020) zwischen mobiler Versetzungsdichte und Versetzungsnetzwerksdichte unterschieden wird. Die Versetzungsproduktion wird durch das in Zoller und Schulz (2020) eingeführte homogenisierte Versetzungsquellmodell abgebildet, welches in Abschnitt 3.2 detaillierter beschrieben wird. Zudem werden sowohl Versetzungsmultiplikationsmechanismen einschließlich dem Quergleiten und der gleitfähigen Reaktion („glissile“-Reaktion) nach Sudmanns et al. (2019) als auch die Versetzungsnetzwerkbildung infolge von Lomer-Reaktionen und Annihilationsprozessen infolge von kollinearen Reaktionen nach Sudmanns et al. (2020) berücksichtigt. Die Modellierung dieser Versetzungsreaktionen wird unter der expliziten Angabe der verglichen zur Literatur verwendeten Erweiterungen in Abschnitt 3.3 beschrieben. Obwohl Teilspekte der verwendeten *CDD*-Formulierung bereits aus der erwähnten Literatur bekannt sind, sollen im Folgenden die zum besseren Verständnis notwendigen Aspekte beschrieben

werden. Dies schließt unter anderem Terme der Spannungsinteraktion, das Versetzungsgeschwindigkeitsgesetz und die Evolutionsgleichungen der Versetzungsmikrostruktur mit ein.

Das verwendete Modell umfasst zwei gekoppelte Probleme. Das sogenannte externe oder auch elastische Problem befasst sich mit der Berechnung des Spannungsfeldes unter einer extern aufgetragenen Belastung für einen gegebenen Mikrostruktur- und plastischen Verformungszustand. Dahingegen befasst sich das sogenannte interne Problem bzw. Mikrostrukturproblem mit der Versetzungsmikrostrukturevolution und der damit verbundenen plastischen Verformung für ein gegebenes Spannungsfeld. Diese beiden Probleme sind somit über die plastische Scherung miteinander gekoppelt und werden im verwendeten Ansatz iterativ nacheinander gelöst, vgl. Abbildung 3.1 im Abschnitt des internen Problems.

### Externes/Elastisches Problem

Zur Beschreibung der elastisch-plastischen Verformungen wird eine additive Zerlegung des Verschiebungsgradienten  $\mathbf{Du}$  in seinen elastischen Anteil  $\beta^{\text{el}}$  und seinen plastischen Anteil  $\beta^{\text{pl}}$  zu Grunde gelegt. Unter der Restriktion auf die Betrachtung kleiner Verschiebungen ( $\|\mathbf{Du}\| \ll 1$ ) kann der infinitesimale Verzerrungstensor  $\boldsymbol{\varepsilon}$  herangezogen werden, welcher den symmetrischen Anteil des Verschiebungsgradienten beschreibt. Dieser wird analog zum Verschiebungsgradienten ebenfalls additiv in seinen elastischen Anteil  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}}$  und seinen plastischen Anteil  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}}$  zerlegt. Zur Beschreibung eines physikalisch linearen Zusammenhangs zwischen den Dehnungen und Spannungen wird das dreidimensionale Hooke'sches Gesetz mit dem Cauchy Spannungstensor  $\boldsymbol{\sigma}$  und dem Elastizitätstensor  $\mathbb{C}$  verwendet. Es sei angemerkt, dass für einkristalline *kfz* Metalle der Elastizitätstensor eine kubische Symmetrie aufweist. Folglich gilt:

$$\mathbf{Du} = \beta^{\text{el}} + \beta^{\text{pl}}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym } \mathbf{Du}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}[\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}}]. \quad (3.1\text{a-c})$$

Die Impulsbilanz liefert für den betrachteten statischen Fall die in dem Kontinuum  $\mathcal{B}$  gültige makroskopische Gleichgewichtsbedingung unter Berücksichtigung einer Volumenkraftdichte  $\mathbf{f}_{\mathcal{B}}$ . Die durch Versetzungen induzierten Eigenspannungsfelder werden mittels Eigendehnungsformulierungen berücksichtigt [Lemarchand et al. (2001), Sandfeld et al. (2013), Schmitt et al. (2015)]. An der Oberfläche des betrachteten Kontinuums  $\partial\mathcal{B}$  werden entweder an den Dirichlet-Rändern  $\partial_{\text{D}}\mathcal{B}$  die Verschiebungen  $\mathbf{u}_{\text{D}}$  oder an den Neumann-Rändern  $\partial_{\text{N}}\mathcal{B}$  der Spannungsvektor  $\mathbf{t}_{\text{N}}$  unter der Verwendung des Lemmas von Cauchy mit der Oberflächennormalen  $\mathbf{n}$  vorgegeben. Es sei angemerkt, dass in *kfz* Metallen die Versetzungswiderstandsmechanismen bei Dehnungsraten größer als  $10^4 \text{ 1/s}$  zur Ratenemp-

findlichkeit der Materialverformung beitragen [Meyers et al. (1986)]. Dies ist z. B. bei der verschiebungsgesteuerten Aufbringung der externen Last zu berücksichtigen. Die beiden Randbedingungstypen sind disjunkt ( $\partial_D \mathcal{B} \cap \partial_N \mathcal{B} = \emptyset$ ) und umschließen den Rand vollständig ( $\partial_D \mathcal{B} \cup \partial_N \mathcal{B} = \partial \mathcal{B}$ ):

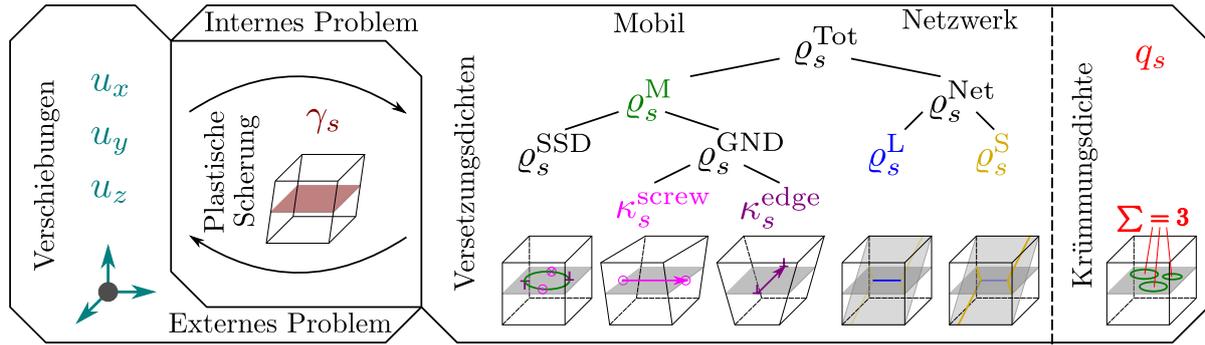
$$-\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f}_B \text{ in } \mathcal{B}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_D \text{ auf } \partial_D \mathcal{B}, \quad \boldsymbol{\sigma}[\mathbf{n}] = \mathbf{t}_N \text{ auf } \partial_N \mathcal{B}. \quad (3.2a-c)$$

Die einzelnen Gleitsysteme  $s \in \{1, \dots, S\}$  des Metalls werden jeweils durch ihre Gleitrichtung  $\mathbf{d}_s = \frac{1}{b_s} \mathbf{b}_s$ , ihre Gleitebenennormale  $\mathbf{m}_s$  und durch die Richtung der Versetzungslinie von positiven Stufenversetzungen  $\mathbf{l}_s = \mathbf{m}_s \times \mathbf{d}_s$  charakterisiert, welche zusammen ein Orthornormalsystem  $\{\mathbf{d}_s, \mathbf{l}_s, \mathbf{m}_s\}$  bilden. Dabei gibt  $S$  die Anzahl der betrachteten Gleitsysteme an, welche sich für kfz Metalle auf  $S = 12$  beläuft (siehe Spezifikation der Gleitsysteme in Abbildung 3.2), wohingegen  $b_s = \|\mathbf{b}_s\|$  die Länge des Burgersvektors  $\mathbf{b}_s$  beschreibt. Es wird angenommen, dass der in Gleichung 3.1a verwendete plastische Anteil des Verschiebungsgradienten nur aus den Versetzungsbewegungen auf diesen einzelnen Gleitsystemen resultiert und sich als das über alle Gleitsysteme aufsummierte Produkt der plastischen Scherung  $\gamma_s$  auf den einzelnen Gleitsystemen mit ihrem jeweiligen Schmid-Tensor  $\mathbf{M}_s$  berechnen lässt. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass die Reihenfolge in der Definition des Schmid-Tensors eine Frage der Konvention darstellt und sowohl die in Gleichung 3.3b angegebene als auch deren transponierte Form in der Literatur verwendet wird. Die zeitliche Evolution der plastischen Scherung auf den einzelnen Gleitsystemen kann mittels der Orowan Gleichung [Orowan (1934)] unter Einbezug der Versetzungsgeschwindigkeit  $v_s$  und der mobilen Versetzungsdichte  $\varrho_s^M$  modelliert werden:

$$\boldsymbol{\beta}^{\text{pl}} = \sum_{s=1}^S \gamma_s \mathbf{M}_s, \quad \mathbf{M}_s = \mathbf{d}_s \otimes \mathbf{m}_s, \quad \partial_t \gamma_s = v_s b_s \varrho_s^M. \quad (3.3a-c)$$

### Internes Problem/Mikrostrukturproblem

Die Versetzungsmikrostruktur auf den einzelnen Gleitsystemen wird über verschiedene Arten von Versetzungsdichten und einer Krümmungsdichte  $q_s$  beschrieben. Das Volumenintegral der Krümmungsdichte kann als die Anzahl der geschlossenen Versetzungsringe innerhalb des Mittelungsvolumens interpretiert werden. In dieser Arbeit bezeichnet der Begriff des Versetzungsringes einen  $2\pi$ -Winkelumlauf der räumlich integrierten Größe der lokalen Richtungsänderungen eines Ensembles von gekrümmten Versetzungslinien in einem Mittelungsvolumen. Folglich stellt eine geschlossene, kreisförmige Versetzungslinie eine mögliche Ausprägung eines Versetzungsringes dar, wobei der Begriff des Versetzungsringes



**Abbildung 3.1:** Darstellung der in der *CDD*-Formulierung verwendeten Größen, wobei die Freiheitsgrade jeweils farbig markiert sind. Die Freiheitsgrade des externen Problems liegen punktuell vor, wohingegen die Freiheitsgrade des internen Problems sich auf ein Mittelungsvolumen beziehen. Übersetzte Abbildung aus [Zoller et al. (2021)].

nicht auf diese Form beschränkt ist. Des Weiteren geben die Versetzungsdichten die jeweiligen aufsummierten Versetzungslängen innerhalb eines Mittelungsvolumens an. Die strukturelle Unterteilung der Versetzungsdichten ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

Hierbei bezieht sich die totale Versetzungsdichte  $\varrho_s^{\text{Tot}}$  auf die Versetzungslänge aller Versetzungen innerhalb des Mittelungsvolumens. Die totale Versetzungsdichte kann additiv in die sogenannte mobile Versetzungsdichte, welche die plastischen Verformungen bewirkt (vgl. Gleichung 3.3c), und die sogenannte Versetzungsnetzwerksdichte  $\varrho_s^{\text{Net}}$ , welche immobil ist und zur Verfestigung des Materials beiträgt, zerlegt werden. Die mobile Versetzungsdichte kann ihrerseits additiv in die *SSD*-Dichte  $\varrho_s^{\text{SSD}}$  und die *GND*-Dichte  $\varrho_s^{\text{GND}} = \|\kappa_s\|$  unterteilt werden:  $\varrho_s^M = \varrho_s^{\text{SSD}} + \varrho_s^{\text{GND}}$ . Dabei stellt der Vektor der *GND*-Dichte  $\kappa_s$  eine vektorielle Größe dar und entspricht der auf das Mittelungsvolumen normierten Summe der Verbindungsvektoren zwischen Eintritts- und Austrittspunkt der Versetzungen des betrachteten Gleitsystems im Mittelungsvolumen. Der Vektor der *GND*-Dichte kann in seinen Schrauben- und Stufenanteil zerlegt werden:  $\kappa_s = \kappa_s^{\text{screw}} \mathbf{d}_s + \kappa_s^{\text{edge}} \mathbf{l}_s$ . Es sei angemerkt, dass in der verwendeten Formulierung der potenziell in der Versetzungsnetzwerksdichte enthaltene *GND*-Charakter nicht identifiziert wird.

Die Versetzungsnetzwerksdichte setzt sich aus der Versetzungsdichte der Lomer-Verbindungen  $\varrho_s^L$ , welche auf der Versetzungslinienlänge zwischen den zwei Endknoten der Lomer-Verbindungen beruht, und der sogenannten stabilisierten Versetzungsdichte  $\varrho_s^S$ , welche auf den Längen von jenen anhängenden Versetzungslinien beruht, die durch deren Nähe zu den Lomer-Verbindungen in dem Versetzungsnetzwerk stabilisiert wurden. Da an der Lomer-Verbindung jeweils zwei Gleitsysteme beteiligt sind, wird die Versetzungsdichte der Lomer-Verbindungen auf die zwei involvierten Gleitsysteme aufgeteilt und resultiert in einem Vorfaktor von 0.5 in der verwendeten Notation zur Berechnung der Versetzungs-

netzwerkdichte:  $\varrho_s^{\text{Net}} = 0.5 \varrho_s^{\text{L}} + \varrho_s^{\text{S}}$ . Folglich lässt sich die totale Versetzungsdichte wie folgt zerlegen:

$$\varrho_s^{\text{Tot}} = \varrho_s^{\text{M}} + \varrho_s^{\text{Net}} = \varrho_s^{\text{SSD}} + \sqrt{(\kappa_s^{\text{screw}})^2 + (\kappa_s^{\text{edge}})^2} + 0.5 \varrho_s^{\text{L}} + \varrho_s^{\text{S}}. \quad (3.4)$$

Die Freiheitsgrade der *CDD*-Formulierung beschreiben den aktuellen, homogenisierten Zustand der Versetzungsmikrostruktur und ihre Evolutionsgleichungen beinhalten sowohl flussbasierte, kinematische Terme als auch Versetzungsreaktionen zwischen den einzelnen Gleitsystemen. Dies kann zu einem Anstieg, zu einem Transfer oder zu einer Reduktion der Versetzungs- und Krümmungsdichten auf den Gleitsystemen führen. Das homogenisierte Versetzungsquellmodell (siehe Abschnitt 3.2) beschreibt die Produktion von neuen Versetzungsringen innerhalb des betrachteten Systems, wohingegen die Modellierung des Quergleitens und der gleitfähigen Reaktion (siehe Abschnitt 3.3) zu einer Versetzungsmultiplikation bereits im System enthaltener Versetzungen führen kann. Dies kann zu komplexen Bewegungspfaden der Versetzungsdichten führen. Die Versetzungsnetzwerkbildung infolge von Lomer-Reaktionen stabilisiert Versetzungsanordnungen und führt folglich typischerweise zu einer Behinderung der Versetzungsbewegung. Diese Lomer-Verbindungen sind reversibel und ein bei entsprechenden Umständen ablaufendes Aufbrechen der Verbindung führt zur Mobilisierung der zuvor stabilisierten Netzwerkonfiguration. Im Gegensatz dazu stellt die kollineare Versetzungsreaktion einen irreversiblen Annihilationsprozess dar. Die zwischen den einzelnen Gleitsystemen ablaufenden Reaktionen sind in der Reaktionsmatrix in Abbildung 3.2 abgebildet.

Gleitebene				Reaktionspartner												Interaktionen zwischen den Gleitsystemen			
A	B	C	D	B2 B4 B5	C1 C3 C5	A2 A3 A6	D1 D4 D6												
$\begin{pmatrix} 1 \\ \bar{1} \\ \bar{1} \\ \bar{1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} \\ \bar{1} \\ \bar{1} \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{1} \\ 1 \\ 1 \\ \bar{1} \end{pmatrix}$	B2	B4	B5	C1	C3	C5	A2	A3	A6	D1	D4	D6	S	P		
				S	P	P	H	L	G	C	G	G	H	G	L	Selbstinteraktion	Koplanar		
				P	S	P	L	H	G	G	H	L	G	C	G	H	Hirth		
				P	P	S	G	G	C	G	L	H	L	G	H	L	Lomer		
				C1	H	L	G	S	P	P	H	G	L	C	G	G	Gleitfähig (gleiche Ebene)		
				C3	L	H	G	P	S	P	G	C	G	G	H	L	Gleitfähig (andere Ebene)		
				C5	G	G	C	P	P	S	L	G	H	G	L	H	Kollinear und Quergleiten		
				A2	C	G	G	H	G	L	S	P	P	H	L	G			
				A3	G	H	L	G	C	G	P	S	P	L	H	G			
				A6	G	L	H	L	G	H	P	P	S	G	G	C			
				D1	H	G	L	C	G	G	H	L	G	S	P	P			
				D4	G	C	G	G	H	L	L	H	G	P	S	P			
				D6	L	G	H	G	L	H	G	G	C	P	P	S			

**Abbildung 3.2:** Angabe der Versetzungsreaktionen zwischen den einzelnen Gleitsystemen durch die symmetrische Reaktionsmatrix. Die unterschiedliche Einfärbung der gleitfähigen Reaktionen erfolgt aus rein visuellen Gründen zur leichteren Identifizierung der involvierten Gleitsysteme. Die Notation der Gleitsysteme entspricht der Schmid-Boas-Notation [Schmid und Boas (1935)] mit Buchstaben für die Gleitebene und Ziffern für die Gleitrichtung. Die Darstellung ist in Anlehnung an die Abbildung 2.3 in [Stricker (2017)].

Um die Information, auf welchem Gleitsystem die infolge der gleitfähigen Reaktion neu gebildete Versetzung entsteht, in die Abbildung mit aufzunehmen, wird für die gleitfähige Reaktion (z. B. unter Beteiligung des betrachteten Gleitsystems B2) aus rein visuellen Gründen unterschieden, ob das neu gebildete Versetzungssegment auf der gleichen Gleitebene wie das betrachtete Gleitsystem liegt (hellrot eingefärbt, z. B. B2 + C5 → B4 oder B2 + D4 → B5, sprich Gleitebene B) oder auf der des Reaktionspartners (dunkelrot eingefärbt, z. B. B2 + A3 → A6 oder B2 + A6 → A3, sprich Gleitebene A). Im Umkehrschluss bedeutet dies, dass eine gleitfähige Reaktion zwischen einem Gleitsystem auf der gleichen Gleitebene wie das betrachtete Gleitsystem und dem Reaktionspartner (ebenfalls hellrot eingefärbt) zu einem Versetzungssegment auf dem betrachteten Gleitsystem führt (z. B. für B2 als betrachtetes Gleitsystem: B4 + C5 → B2 und B5 + D4 → B2).

Die Evolutiongleichungen der Freiheitsgrade des Mikrostrukturproblems lauten:

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho_s^M = & -\nabla \cdot (v_s \boldsymbol{\kappa}_s^\perp) + v_s q_s + (\partial_t \bar{\varrho}_s^{M,\text{gliss}} + \partial_t \bar{\varrho}_s^{M,\text{cross}} + \partial_t \hat{\varrho}_s^M) \\ & - (\partial_t \bar{\varrho}_s^{S,\text{Lomer}} + \partial_t \varrho_s^{M,\text{react}} + \partial_t \varrho_s^{M,\text{cross}}) \end{aligned} \quad (3.5a)$$

$$\partial_t \boldsymbol{\kappa}_s = \nabla \times (\varrho_s^M v_s \mathbf{m}_s) + \partial_t \bar{\boldsymbol{\kappa}}_s^{\text{cross}} - \partial_t \boldsymbol{\kappa}_s^{\text{cross}} \quad (3.5b)$$

$$\partial_t \varrho_s^L = \partial_t \bar{\varrho}_s^{L,\text{Lomer}} - \partial_t \hat{\varrho}_s^L \quad (3.5c)$$

$$\partial_t \varrho_s^S = \partial_t \bar{\varrho}_s^{S,\text{Lomer}} - (\partial_t \hat{\varrho}_s^S + \partial_t \varrho_s^{S,\text{react}}) \quad (3.5d)$$

$$\begin{aligned} \partial_t q_s = & -v_s \nabla \cdot \left( \frac{q_s}{\varrho_s} \boldsymbol{\kappa}_s^\perp \right) - \mathbf{A}_s \cdot \nabla^2 v_s + (\partial_t \bar{q}_s^{\text{gliss}} + \partial_t \bar{q}_s^{\text{cross}} + \partial_t \bar{q}_s^{\text{prod}}) \\ & - (\partial_t q_s^{\text{react}} + \partial_t q_s^{\text{cross}}). \end{aligned} \quad (3.5e)$$

In der verwendeten Notation werden die Terme der Reaktionsbildung mit  $\bar{()}$  gekennzeichnet, wohingegen  $\hat{()}$  die Terme zur Modellierung des Aufbrechens der Lomer-Verbindung ausweist und die Terme  $\{\partial_t \varrho_s^{M,\text{react}}, \partial_t \varrho_s^{S,\text{react}}, \partial_t \varrho_s^{M,\text{cross}}, \partial_t \boldsymbol{\kappa}_s^{\text{cross}}\}$  die Reduktion der Versetzungsdichte auf den reagierenden Gleitsystemen abbildet. Die durch die Nähe zu Lomer-Verbindungen stabilisierte Versetzungsconfiguration wird über  $\partial_t \bar{\varrho}_s^{S,\text{Lomer}}$  abgebildet. Des Weiteren steht  $()^{\text{react}}$  für eine Kurznotation der Versetzungsreaktionen, bei denen Versetzungen von zwei Gleitsystemen miteinander reagieren:  $()^{\text{react}} = ()^{\text{gliss}} + ()^{\text{Lomer}} + ()^{\text{coll}}$ . Es sei angemerkt, dass in der Evolutionsgleichung der mobilen Versetzungsdichte der Term  $-\nabla \cdot (v_s \boldsymbol{\kappa}_s^\perp)$  den Versetzungsfluss modelliert, wohingegen  $v_s q_s$  die Dichtezunahme infolge eines expandierenden Versetzungsringes abbildet. Für eine detaillierte Beschreibung einzelner Terme sei auf die bereits erwähnte Literatur verwiesen.

Unter Verwendung der in Hochrainer et al. (2014) eingeführten Annahme für eine geschlossene Form der Evolutionsgleichung der Krümmungsdichte berechnet sich der Alignment-Tensor  $\mathbf{A}_s$  zu:

$$\mathbf{A}_s = \frac{1}{2} \left( (\varrho_s^M + \|\boldsymbol{\kappa}_s\|) \frac{\boldsymbol{\kappa}_s}{\|\boldsymbol{\kappa}_s\|} \otimes \frac{\boldsymbol{\kappa}_s}{\|\boldsymbol{\kappa}_s\|} + (\varrho_s^M - \|\boldsymbol{\kappa}_s\|) \frac{\boldsymbol{\kappa}_s^\perp}{\|\boldsymbol{\kappa}_s^\perp\|} \otimes \frac{\boldsymbol{\kappa}_s^\perp}{\|\boldsymbol{\kappa}_s^\perp\|} \right), \quad \boldsymbol{\kappa}_s^\perp = \boldsymbol{\kappa}_s \times \mathbf{m}_s. \quad (3.6)$$

Für die Ränder des Mikrostrukturproblems wird die Annahme getroffen, dass Versetzungen das System an deren Oberfläche ungehindert verlassen können und keine neuen Versetzungen über die Oberflächen in das System eintreten. Dieses Verhalten wird mittels einer Robin-Randbedingung für die mobile Versetzungsdichte formuliert. Dahingegen verschwindet die Krümmungsdichte auf den Zuflussgrenzflächen ( $\partial_{\text{in}}\mathcal{B} = \{\mathbf{x} \in \partial\mathcal{B} : \frac{v_s}{\varrho_s^M} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}_s^\perp < 0\}$ ) und wird an den Abflussgrenzflächen ( $\partial_{\text{out}}\mathcal{B} = \partial\mathcal{B} - \partial_{\text{in}}\mathcal{B}$ ) dissipiert. Zu- und Abflussgrenzflächen sind disjunkt ( $\partial_{\text{in}}\mathcal{B} \cap \partial_{\text{out}}\mathcal{B} = \emptyset$ ) und umschließen den Rand vollständig ( $\partial_{\text{in}}\mathcal{B} \cup \partial_{\text{out}}\mathcal{B} = \partial\mathcal{B}$ ). Es gilt:

$$v_s \left( \|\mathbf{n} \times \mathbf{m}_s\| \varrho_s^M + (\mathbf{n} \times \mathbf{m}_s) \cdot \boldsymbol{\kappa}_s \right) = 0 \text{ auf } \partial\mathcal{B}, \quad q_s = 0 \text{ auf } \partial_{\text{in}}\mathcal{B}. \quad (3.7\text{a-b})$$

Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass geschlossene Randflächen, z. B. zur Modellierung von Korngrenzen, in dieser Arbeit nicht betrachtet werden, jedoch die Verhinderung des Versetzungsflusses über die Grenzfläche wie folgt berücksichtigt werden kann:  $\{v_s \mathbf{D}_s[\boldsymbol{\kappa}_s] \cdot \mathbf{n} = 0, v_s \varrho_s^M \mathbf{D}_s[\mathbf{n}] = \mathbf{0}\}$  mit der Kurznotation  $\mathbf{D}_s = (\mathbf{l}_s \otimes \mathbf{d}_s - \mathbf{d}_s \otimes \mathbf{l}_s)$ .

Um das Mikrostrukturproblem geschlossen darzustellen, bedarf es eines Konstitutivgesetzes für die Versetzungsgeschwindigkeit. Für die in dieser Arbeit verwendete Formulierung wird eine isotrope Versetzungsgeschwindigkeit angenommen, d.h. es wird nicht zwischen Stufen- und Schraubencharakter der Versetzungen unterschieden. Hierdurch weisen expandierende Versetzungsringe in einem homogenen Material eine Kreisform auf. Die Versetzungsgeschwindigkeit basiert auf einem materialspezifischen Widerstandskoeffizienten  $B > 0$ , auf der für das betrachtete Gleitsystem aufgelösten Schubspannung  $\tau_s$ , sowie mit der Fließspannung  $\tau_s^y$  und Rückspannung  $\tau_s^b$  auch auf internen Spannungsgrößen. Unter Verwendung der Signumfunktion  $\text{sgn}$ , auch Vorzeichenfunktion genannt, und einer Kurznotation für die resultierende Spannung auf dem betrachteten Gleitsystem  $\tau_s^{\text{res}}$  gilt:

$$v_s = \frac{b_s}{B} \text{sgn}(\tau_s - \tau_s^b) \tau_s^{\text{res}}, \quad \tau_s^{\text{res}} = \max\left\{0, |\tau_s - \tau_s^b| - \tau_s^y\right\}. \quad (3.8\text{a-b})$$

Die aufgelöste Schubspannung auf dem jeweiligen Gleitsystem stellt dabei die mittels des Schmid-Tensors berechnete Projektion des Spannungstensors dar. Es sei darauf hingewiesen, dass der Spannungstensor aus dem externen Problem resultiert und dem Berechnungsansatz in Schulz et al. (2014) folgend bereits die langreichweitigen Eigenspannungsfelder der

Versetzungen enthält. Dahingegen berücksichtigt die Rückspannung die kurzreichweitigen Spannungsinteraktionen zwischen den Versetzungen nach Groma et al. (2003) bzw. Schmitt et al. (2015) und hängt von dem Schubmodul  $\mu$  sowie einer Materialkonstante  $D$  bzw. der Querkontraktionszahl  $\nu$  ab. Es gilt:

$$\tau_s = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{M}_s, \quad \tau_s^b = \frac{D\mu b_s}{\varrho_s^M} \nabla \cdot \boldsymbol{\kappa}_s^\perp, \quad D = \frac{3.29}{2\pi^2(1-\nu)}. \quad (3.9a-c)$$

Die Fließspannung modelliert die Behinderung der Versetzungsbewegung infolge der Versetzungsinteraktion mit sogenannten Waldversetzungen auf den jeweils anderen Gleitsystemen innerhalb des Mittelungsvolumens. Eine Zunahme der Versetzungsdichte und Verdichtung des Versetzungsnetzwerkes resultiert infolge der Zunahme der Interaktionen in einer Verfestigung des Materials. In der Fließspannungs-Formulierung nach Taylor (1934a,b) wird dies unter Verwendung einer materialspezifischen Interaktionskonstanten  $\alpha > 0$  über die Proportionalität der Fließspannung mit der Wurzel der totalen Versetzungsdichte abgebildet. Hierbei ist die Verwendung des isotropen Schubmoduls für hohe Versetzungsdichten, für welche sich die Auswirkungen der elastischen Anisotropie im Mittel ausgleichen, zulässig [Madec et al. (2003)]. Mit der Verwendung der gleichen materialspezifischen Interaktionskonstanten für alle Gleitsysteme wird nicht zwischen dem Interaktionsverhältnis der einzelnen Gleitsysteme unterschieden. Diese Annahme stellt nach den Ergebnissen von Sudmanns et al. (2018) eine vertretbare Annäherung für die Untersuchung von Hochsymmetrie-Kristallorientierungen dar. Einen allgemeineren Ansatz wählt Franciosi et al. (1980) durch die detailliertere Betrachtung der Interaktionsbeziehungen zwischen den einzelnen Gleitsystemen unter Einführung einer materialspezifischen Interaktionsmatrix  $a_{s\tilde{s}} > 0$ . Es sei angemerkt, dass eine Abhängigkeit der materialspezifischen Interaktionsmatrix von der Höhe der Versetzungsdichte in dieser Arbeit nicht berücksichtigt wird, diese jedoch z. B. wie in Devincre et al. (2006) modelliert werden kann. Mit der Notation  $\tilde{s}$  als Summationsindex über alle Gleitsysteme und der Unterscheidung zwischen den verschiedenen Arten der Versetzungsdichte nach Sudmanns et al. (2020), gilt:

$$\tau_s^{y,\text{Taylor}} = \alpha\mu b_s \sqrt{\sum_{\tilde{s}=1}^S \varrho_s^{\text{Tot}}}, \quad \tau_s^{y,\text{Franciosi}} = \mu b_s \sqrt{\sum_{\tilde{s}=1}^S a_{s\tilde{s}} \cdot \begin{cases} (0.5 \varrho_s^L), & \text{für } s \xleftrightarrow{\text{Lomer}} \tilde{s} \\ (\varrho_s^M + \varrho_s^S), & \text{sonst} \end{cases}}. \quad (3.10a-b)$$

## 3.2 Homogenisiertes Versetzungsquellmodell

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit dem in Zoller und Schulz (2020) eingeführten, homogenisierten Versetzungsquellmodell zur Abbildung der Produktion neuer Versetzungen im dreidimensionalen System infolge von Quellaktivitäten. Hierbei wird das Modell derart angepasst, dass die modellierten Versetzungsmultiplikationsprozesse berücksichtigt und die Verformungshistorie des Materials in die Berechnung mit einbezogen werden kann, deren Notwendigkeit in Zoller et al. (2021) diskutiert wird.

Die Grundidee des Modells ist es, die Auswirkung der Quellaktivierungen einschließlich der resultierenden Spannungsrelaxation zu berücksichtigen anstatt den einzelnen Ausbauchprozess im Detail abzubilden. Hierbei wird die Annahme getroffen, dass sich in jedem Mittelungsvolumen mindestens eine Versetzungsquelle befindet. Sobald lokal eine kritische Spannung auf den jeweiligen Gleitsystemen überschritten wird, relaxiert sich der lokale Spannungszustand derart, dass der kritische Zustand wieder erreicht wird. Die kritische Spannung beschreibt die zur Aktivierung der Versetzungsquellen nötige Quellspannung und hängt von dem aktuellem Zustand der Versetzungsmikrostruktur ab. Bei der Versetzungsproduktion infolge von Quellaktivitäten wird dabei das Relaxationsvermögen der bereits im System enthaltenen, mobilen Versetzungen sowie etwaigen neu produzierten Versetzungen berücksichtigt.

Darüberhinaus wird aus dem globalen Materialverhalten ein Limit für die Versetzungsproduktion abgeleitet. Aufgrund der verwendeten nicht-lokalen *CDD*-Formulierung zur Abbildung der Versetzungsbewegung mittels Flusstermen ist die globale anstatt einer rein lokalen Betrachtung notwendig. Hierbei wird das ideal plastische Materialverhalten als obere Schranke herangezogen, wodurch folglich die plastische Scherrate kleiner oder gleich der extern aufgebrachten Dehnrate ist. Die Aktivität der Versetzungsquellen wird im Modell homogenisiert und über einen entsprechenden Produktionsterm der Krümmungsdichte in der Evolutionsgleichung berücksichtigt (siehe  $\partial_t \bar{q}_s^{\text{prod}}$  in Gleichung 3.5e). Dies führt infolge der Mikrostrukturevolution zu expandierenden Versetzungsringen in Form von Versetzungsdichten.

### Formalismus des homogenisierten Versetzungsquellmodells

Die Versetzungsquellen auf den jeweiligen Gleitsystemen werden lokal aktiviert, sofern die lokal anliegende Spannung auf dem Gleitsystem den jeweiligen kritischen Spannungswert  $\tau_s^{\text{crit}}$ , auch Quellspannung genannt, übersteigt. Diese kritische Spannung entspricht nach Hirth und Lothe (1982) der maximalen Versetzungslinienspannung einer Frank-Read-Quelle mit der Versetzungsquellenlänge  $l_s$ .

Aufgrund der fehlenden Information über die exakte Quellenlänge in der Mikrostruktur des Kontinuums wird die mittlere Versetzungslänge des Mittelungsvolumens herangezogen und als den mittleren Versetzungsabstand angenommen. Dieser wird über den mit einem konstanten Vorfaktor  $c^{\text{FR}} > 0$  behafteten Kehrwert der Quadratwurzel der totalen Versetzungsdichte approximiert. Folglich wird in dem Modell der lokale Mikrostrukturzustand für die Quellaktivität berücksichtigt. Für Systeme mit verschwindenden Versetzungsdichten wird ein Referenzwert für die kritische Spannung  $\tau^{\text{CRSS}}$  eingeführt, um in diesen Fällen eine plausible Versetzungsquellenlänge in Bezug auf die Größe des Mittelungsvolumens zu gewährleisten. Der Referenzwert kann aus der Literatur bezogen werden, in der der initiale Fließbeginn für verschiedene Materialien, Orientierungen und Systemabmaße mithilfe von experimentellen, simulativen und analytischen Ansätzen untersucht wurde [Tsagrakis et al. (2003), Parthasarathy et al. (2007), El-Awady et al. (2009), Wu et al. (2016), El-Awady (2015)]. Es gilt:

$$\tau_s^{\text{crit}} = \max \left\{ \frac{\mu b_s}{l_s}, \tau^{\text{CRSS}} \right\}, \quad l_s = c^{\text{FR}} \frac{1}{\sqrt{\sum_{\bar{s}=1}^S \varrho_{\bar{s}}^{\text{Tot}}}} \quad (3.11\text{a-b})$$

Für die Quellaktivitäten im System wird das makroskopisch ideal plastische Materialverhalten als oberes Limit herangezogen. Im Folgenden bezieht sich das Wort „lokal“ auf das Mittelungsvolumen, wohingegen das Wort „global“ sich auf das Gesamtsystem bezieht. Da es sich bei der oberen Schranke um eine globale Größe handelt, bedarf es für ein auf lokalen Raten der Versetzungsproduktion basierendes Modell um eine Abschätzung der globalen Auswirkungen infolge aller lokalen Aktivitäten. Da die lokalen Produktionsraten nicht a priori bekannt sind, wird ein Prädiktor-Korrektor-Verfahren angewendet, um die Einhaltung der oberen Schranke für die Produktionsrate zu gewährleisten. Die lokalen Versetzungsproduktionsraten tragen zur global erwarteten plastischen Dehnrates infolge der globalen Quellaktivitäten  $\partial_t \varepsilon_{\text{gl}}^{\text{pl,exp}}$  bei, welche über den volumetrischen Mittelwert der global erwarteten plastischen Dehnrates infolge der lokalen Quellaktivitäten  $\varepsilon^{\text{pl,exp}}$  berechnet wird. Die globale Quellaktivität ist gemäß der Restriktion durch die Norm der globalen elastischen Dehnrates  $\partial_t \varepsilon_{\text{gl}}^{\text{el}}$  limitiert, welche analog über den volumetrischen Mittelwert der Norm der lokalen elastischen Dehnrates berechnet wird. Die Fokussierung

auf den elastischen Anteil für die obere Schranke im Prädiktorschritt ist deshalb notwendig, um die Spannungsrelaxation infolge der Mikrostrukturevolution einschließlich möglicher Versetzungsmultiplikationsprozesse und die daraus resultierende plastische Verformung zu berücksichtigen. Für das betrachtete Kontinuum mit dem Volumen  $V$  gilt:

$$\frac{1}{V} \iiint_V \partial_t \varepsilon^{\text{pl,exp}} dV = \partial_t \varepsilon_{\text{gl}}^{\text{pl,exp}} \leq \partial_t \varepsilon_{\text{gl}}^{\text{el}} = \frac{1}{V} \iiint_V \|\partial_t \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}}\| dV \quad (3.12)$$

Die Berechnung der global erwarteten plastischen Dehnrates infolge der lokalen Quellaktivitäten erfolgt durch die Bestimmung des Anteils der erwarteten plastischen Verformung in Belastungsrichtung. Hierbei erfolgt die Projektion des plastischen Anteils des Verschiebungsgradienten (siehe Gleichung 3.3a) in die externe Belastungsrichtung durch das Skalarprodukt mit dem Richtungstensor der elastischen Dehnrates  $\mathbf{M}^{\text{el,ext}}$ . Die erwartete plastische Scherrates auf den Gleitsystemen wird über das Produkt zwischen der Rate der lokalen Versetzungsproduktionsdichte  $\partial_t \xi_s^{\text{prod}}$  und der global erwarteten plastischen Scherrates infolge einer lokalen Quellaktivierung auf dem jeweiligen Gleitsystem  $\gamma_s^{\text{exp}}$  berechnet. Es gilt:

$$\partial_t \varepsilon^{\text{pl,exp}} = \sum_{s=1}^S \underbrace{\left| \frac{\partial_t \xi_s^{\text{prod}} \gamma_s^{\text{exp}}}{\partial_t \gamma_s^{\text{exp}}} \mathbf{M}_s \cdot \mathbf{M}^{\text{el,ext}} \right|}_{\text{Schmid-Faktor}}, \quad \mathbf{M}^{\text{el,ext}} = \frac{\partial_t \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}}}{\|\partial_t \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}}\|} \quad (3.13\text{a-b})$$

Die im Prädiktorschritt vorhergesagte Rate der lokalen Versetzungsproduktionsdichte wird lokal über das Verhältnis der Rate des resultierenden Spannungsanstiegs über die Quellspannung hinaus und der Spannungsrelaxation einer einzelnen Versetzungsquellaktivität  $\Delta \tau_s^{\text{src}}$  bestimmt. Dabei erfasst die Rate des resultierenden Spannungsanstiegs die Differenz der Rate des erwarteten Spannungsanstiegs  $\partial_t \tau_s^{\text{exp}}$  und der Spannungsrelaxation infolge der bereits lokal existierenden, mobilen Versetzungen  $\partial_t \tau_s^{\text{relax}}$ . Das Modell bildet Versetzungsquellen und keine -senken ab, weshalb die Produktionsraten nie negativ sind und folglich keine Versetzungsannihilation durch das Quellmodell stattfindet. Die Versetzungsquellen bleiben lokal inaktiv, wenn die auf dem Gleitsystem anliegende Spannung kleiner als die notwendige Quellspannung ist oder wenn die bereits lokal existierende mobile Versetzungsdichte ausreicht, um den Spannungsanstieg zu relaxieren. Unter der Verwendung der Heaviside-Funktion  $H$ , auch Sprungfunktion genannt, gilt für das betrachtete Mittelungsvolumen mit dem Volumen  $V^{\text{src}}$  folgender Zusammenhang:

$$\partial_t \xi_s^{\text{prod}} = \frac{1}{V^{\text{src}}} \cdot \max \left\{ \frac{|\partial_t \tau_s^{\text{exp}}| - |\partial_t \tau_s^{\text{relax}}|}{\Delta \tau_s^{\text{src}}}, 0 \right\} \cdot H(\tau_s^{\text{res}} - \tau_s^{\text{crit}}). \quad (3.14)$$

Die Rate des erwarteten Spannungsanstiegs wird mithilfe des dreidimensionalen Hooke'schen Gesetzes (siehe Gleichung 3.1c) unter Verwendung der totalen Dehnrates und der Projektion auf die Gleitebene (vgl. Gleichung 3.9a) bestimmt. Dahingegen hängt die

Spannungsrelaxation infolge der bereits lokal existierenden, mobilen Versetzungen von der zukünftigen Mikrostrukturevolution ab und ist deshalb zu diesem Zeitpunkt unbekannt. Deshalb wird die Spannungsrelaxation auf Basis der aktuellen Versetzungsmikrostruktur abgeschätzt, indem das eindimensionale Hooke'sche Gesetz unter Verwendung des Schubmoduls (vgl. Gleichung 3.1c) mit der Orowan-Gleichung (siehe Gleichung 3.3c) kombiniert wird. Die Spannungsrelaxation einer einzelnen Versetzungsquellaktivität basiert auf dem Verhältnis des Burgersvektors zu der Höhe des betrachteten Mittelungsvolumens  $h^{\text{src}}$  und ergibt sich zu:

$$\partial_t \tau_s^{\text{exp}} = \mathbb{C}[\partial_t \boldsymbol{\varepsilon}] \cdot \mathbf{M}_s, \quad \partial_t \tau_s^{\text{relax}} = \mu v_s b_s \rho_s^{\text{M}}, \quad \Delta \tau_s^{\text{src}} = \mu \frac{b_s}{h^{\text{src}}} = \text{konst.} \quad (3.15\text{a-c})$$

Die Abschätzung der global erwarteten plastischen Scherung infolge einer lokalen Quellaktivierung auf dem jeweiligen Gleitsystem (vgl. Gleichung 3.13) basiert auf der mittleren abgescherten Fläche pro Versetzung auf den einzelnen Gleitsystemen  $A_s^{\text{av}}$ . Zur Approximation der mittleren abgescherten Fläche werden in dieser Arbeit zwei Ansätze verwendet.

Der Erste ist geometrisch motiviert ( $\rightarrow A_s^{\text{av,geom}}$ ) und nimmt zur Vereinfachung an, dass die mittlere abgescherte Fläche dem mittleren Querschnitt des betrachteten Systems in der Gleitebene entspricht, welcher potenziell durch den expandierenden Versetzungsring abgeschert wird, ehe der Versetzungsring das System über die Oberflächen verlässt. Der mittlere Querschnitt des Systems in der Gleitebene wird über das Verhältnis des Systemvolumens zu der maximalen Distanz zwischen zwei Gleitebenen eines Gleitsystems innerhalb des Systems angenommen. Zur Berücksichtigung verschiedener Belastungszustände wird ein Vorfaktor  $c^{\text{load}} > 0$  eingeführt, um z. B. im Falle eines linearen Spannungsprofils infolge einer Biege- oder Torsionsbelastung zu berücksichtigen, dass aufgrund des Versetzungsaufstaus an der neutralen Achse im Inneren maximal die Hälfte des Querschnitts abgeschert wird (siehe Gleichung 3.18a). Die maximale Distanz zwischen zwei Gleitebenen eines Gleitsystems innerhalb des Systems wird über die Projektion der Raumdiagonalen  $\mathbf{x}^{\text{geom}}$  des Quaders, welcher das System vollständig umschließt (d.h. Länge in x-Richtung, Höhe in y-Richtung und Breite in z-Richtung), auf die Gleitebenennormale berechnet. Um einen positiven Beitrag der einzelnen Komponenten für das Skalarprodukt zu gewährleisten, wird der Vektor  $\tilde{\mathbf{m}} = (|m_x|, |m_y|, |m_z|)^T$  eingeführt, welcher die Komponenten der Gleitebenennormalen als Absolutwerte enthält.

Der zweite Ansatz bezieht die Materialhistorie auf dem Gleitsystem mit ein ( $\rightarrow A_s^{\text{av,hist}}$ ) und basiert auf dem Verhältnis des plastischen Verformungszustandes zu der Anzahl der bereits ursprünglich im System enthaltenen Versetzungen  $n_s^{\text{initial}}$  sowie der Anzahl der produzierten Versetzungen  $n_s^{\text{prod}}$ , welche infolge der Mikrostrukturevolution einschließlich möglicher Versetzungsreaktionen zu diesem plastischen Verformungszustand geführt haben. Die

Bestimmung der produzierten Versetzungsanzahl wird weiter unten (siehe Gleichung 3.19) thematisiert. Es gilt:

$$\gamma_s^{\text{exp}} = \frac{A_s^{\text{av}} b_s}{V}, \quad A_s^{\text{av,geom}} = c^{\text{load}} \frac{V}{\mathbf{x}^{\text{geom}} \cdot \tilde{\mathbf{m}}}, \quad A_s^{\text{av,hist}} = \frac{\iiint \gamma_s dV}{b_s (n_s^{\text{prod}} + n_s^{\text{init}})}. \quad (3.16\text{a-c})$$

Somit kann die Rate der lokalen Versetzungsproduktionsdichte im Prädiktorschritt nach Gleichung 3.14 berechnet werden. Um die Restriktion für die Rate der globalen Versetzungsproduktion einzuhalten (siehe Gleichung 3.2), werden die vorhergesagten lokalen Produktionsraten im Zuge des Korrektorschrittes auf die physikalisch plausiblen Raten der lokalen Versetzungsproduktionsdichte  $\partial_t \xi_{s,\text{cor}}^{\text{prod}}$  für jedes Gleitsystem korrigiert. Dabei wird ein geometrischer Korrekturfaktor  $c^{\text{geom}} > 0$  für die Berechnung des volumetrischen Mittelwertes der Norm der lokalen elastischen Dehnraten eingeführt, welcher, wie in Zoller und Schulz (2020) beschrieben, z. B. für Systeme mit einem kreisförmigen Querschnitt und linearem Dehnungsverlauf über den Radius notwendig ist. Für eine detaillierter Herleitung sei auf den Anhang in Zoller und Schulz (2020) verwiesen. Die Werte ergeben sich zu:

$$\partial_t \xi_{s,\text{cor}}^{\text{prod}} = \min \left\{ 1, \frac{c^{\text{geom}} \partial_t \varepsilon_{\text{gl}}^{\text{el}}}{\partial_t \varepsilon_{\text{gl}}^{\text{pl,exp}}} \right\} \partial_t \xi_s^{\text{prod}} \quad (3.17)$$

$$c^{\text{load}} = \begin{cases} 0.5, & \text{Torsion, Biegung} \\ 1.0, & \text{Scherung, Zug, Druck} \end{cases}, \quad c^{\text{geom}} = \begin{cases} 0.75, & \text{runder Querschnitt und} \\ & \text{Torsion oder Biegung} \\ 1, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.18\text{a-b})$$

Unter der Annahme von geschlossenen Versetzungsringen im Kontinuum kann der Produktionsterm der Krümmungsdichte infolge von Versetzungsquellmechanismen in der Evolutionsgleichung als ein Vielfaches des  $2\pi$ -Winkelumlafes ausgedrückt werden. Durch die Integration der globalen Produktionsraten über die Zeit ergibt sich die Anzahl an bisher produzierten Versetzungsringe im System zu:

$$\partial_t \bar{q}_s^{\text{prod}} = 2\pi \partial_t \xi_{s,\text{cor}}^{\text{prod}}, \quad n_s^{\text{prod}} = \int_t \iiint_V \partial_t \xi_{s,\text{cor}}^{\text{prod}} dV dt. \quad (3.19\text{a-b})$$

Die Zunahme der Krümmungsdichte auf dem betrachteten Gleitsystem infolge von Versetzungsquellmechanismen führt infolge der Mikrostrukturevolution zu expandierenden Versetzungsringen. Dies kann analog zur Bildung eines Versetzungsringes aus einer Frank-Read-Quelle infolge dem Durchlaufen des diskreten Ausbauchprozesses in *DDD* interpretiert werden. Jedoch wird im Kontinuum der Ausbauchprozess der Versetzungsquelle nicht mit abgebildet. Deshalb sei angemerkt, dass der Produktionszeitschritt größer sein muss als

der Zeitschritt, den der Ausbauchprozess benötigt, um einen neuen Versetzungsring zu produzieren (vgl. z. B.  $t^{\text{nuc}} = 2,6 \times 10^{-3} \frac{B}{\mu}$  in Van der Giessen und Needleman (1995)). Die neu produzierten Versetzungen im Kontinuum entwickeln sich gemäß den Evolutionsgleichungen in Abhängigkeit von den lokalen Spannungs- und Mikrostrukturzuständen und können dabei mit den Versetzungen auf den anderen Gleitsystemen reagieren.

### 3.3 Homogenisiertes Versetzungsreaktionsmodell

Dieses Kapitel beschreibt die verwendete Modellierung der Versetzungsmultiplikationsprozesse einschließlich dem Quergleiten und der gleitfähigen Reaktion („glissile“-Reaktion) nach Sudmanns et al. (2019) als auch die Versetzungsnetzwerkbildung infolge von Lomer-Reaktionen und die Annihilationsprozesse infolge von kollinearen Reaktionen nach Sudmanns et al. (2020). Obwohl die Modellformulierungen, abgesehen von den weiter unten beschriebenen Anpassungen, bereits aus der erwähnten Literatur bekannt sind, sollen im Folgenden zur Förderung des Verständnisses und zur Vollständigkeit des Formalismus die wesentlichen Aspekte beschrieben werden. Für eine detaillierte Herleitung der einzelnen Terme sei auf die Literatur verwiesen.

Die Versetzungen auf den Gleitsystemen interagieren miteinander und die dabei potenziell ablaufenden Mechanismen zwischen den einzelnen Gleitsystempaarungen sind in Abbildung 3.2 in Abschnitt 3.1 abgebildet. Das Quergleiten von Schraubenversetzungen beschreibt den Wechsel des Gleitsystems eines Versetzungssegmentes aufgrund des lokalen Spannungsfeldes. Dieser Mechanismus wird in dieser Arbeit über einen Wahrscheinlichkeitsterm analog zu Kubin et al. (1992), Verdier et al. (1998) und Weygand et al. (2002) modelliert und fokussiert sich auf einzelne Versetzungssegmente im Materialinneren. Quergleitmechanismen an der Materialoberfläche oder bei sich schneidenden Versetzungssegmenten, wie in Hussein et al. (2015) thematisiert, werden nicht modelliert.

Im Gegensatz dazu beschreiben die anderen betrachteten Versetzungsreaktionen Mechanismen, die bei dem Aufeinandertreffen zweier Versetzungen unter gewissen Umständen ablaufen. Dies motiviert die Modellierung über eine Kollisionsrate nach Ma und Roters (2004), welche unter anderem in Kubin et al. (2008a), Stricker und Weygand (2015), sowie Roters et al. (2019) verwendet wurde. Eine Abhängigkeit von der genauen Orientierung der beiden Versetzungen auf den einzelnen Gleitsystemen, wie z. B. in Madec et al. (2003) untersucht, wird dabei nicht berücksichtigt. Es sei angemerkt, dass die Kinematik der *CDD*-Formulierung keine gekoppelte Bewegung der Versetzungsdichte von homogenisierten Versetzungsringen, welche sich über mehrer Gleitsysteme erstrecken, abbildet.

In dieser Arbeit wird das in Sudmanns et al. (2020) beschriebene Modell in folgenden zwei Punkten modifiziert:

(I) Das modellierte Ausbauchen von Versetzungssegmenten in den Multiplikationsmechanismen tritt in Analogie zum Quellenmodell nur auf, wenn die resultierende Spannung auf dem jeweiligen Gleitsystem höher ist als die faktorbehaftete kritische Quellenspannung. Der eingeführte Faktor berücksichtigt hierbei, dass die Endpunkte der Versetzungssegmente nicht zwangsläufig fixiert sind und sich deren potenzielle Beweglichkeit im Laufe der Mikrostrukturevolution zu einem Anstieg der Versetzungslänge führen kann. Für verschwindende Werte des Faktors gegen Null würde das Modell in die ursprüngliche Formulierung übergehen, vgl. Gleichung (15) in Sudmanns et al. (2019) oder Gleichung (14) in Sudmanns et al. (2020).

(II) Die Versetzungslängen in Versetzungsnetzwerken weisen eine große Streuung auf, vgl. *DDD*-Datenanalysen in Stricker et al. (2018) und Sills et al. (2018). In dieser Arbeit wird die dabei beobachtete Tendenz der Versetzungslängenverteilung hin zu kleineren Versetzungslängen über eine Rayleigh-Verteilung berücksichtigt, bei der der Erwartungswert der mittleren Versetzungslänge entspricht. Mithilfe einer Approximation der mittleren Versetzungslänge über den Kehrwert der Quadratwurzel der Versetzungsdichte lassen sich die erforderlichen Größen aus der Kontinuumsformulierung extrahieren. Da die Versetzungssegmentlänge u. a. die Stabilität von Lomer-Verbindungen bestimmen [Rodney und Phillips (1999), Shin et al. (2001)], haben sie einen großen Einfluss auf die Versetzungsnetzwerkbildung.

### Formalismus des homogenisierten Quergleitmodells

Das verwendete homogenisierte Quergleitmodell basiert auf der thermisch aktivierten Quergleitwahrscheinlichkeit  $P$  nach Kubin et al. (1992), Verdier et al. (1998) und Weygand et al. (2002), welche von der Versetzungssegmentlänge mit Schraubencharakter  $L_s^{\text{screw}}$  und der resultierenden Spannung auf dem zum betrachtenden Gleitsystem entsprechenden Quergleitsystem abhängig ist:

$$P(L_s^{\text{screw}}, \tau_s^{\text{res}}) = \min \left\{ \beta \frac{L_s^{\text{screw}}}{L_0} \frac{\delta t}{t_0} \exp \left( \frac{V^{\text{act}}}{k_B T} (|\tau_s^{\text{res}}| - \tau_{III}) \right), 1 \right\}. \quad (3.20)$$

Hierbei beschreibt  $\beta$  die Normalisierungskonstante,  $L_0$  und  $t_0$  die jeweiligen Referenzwerte für die Versetzungslänge und die Zeit,  $\delta t$  die Zeitschrittweite in der Simulation,  $V^{\text{act}}$  das Aktivierungsvolumen,  $k_B$  die Boltzmann-Konstante,  $T$  die Temperatur und  $\tau_{III}$  die Schubspannung beim Übergang zu der Stufe III der Verfestigung von *kfz* Metallen. Es sei angemerkt, dass sich die im Formalismus des homogenisierten Quergleitmodells zweifach

auftretende Zeitschrittweite der Simulation später gegenseitig aufhebt und damit keine direkte Abhängigkeit besteht.

Weygand et al. (2002) folgend werden Versetzungslinien, deren Orientierung bis zu  $\pm 10^\circ = \pm \frac{\pi}{18}$  von dem idealen Schraubencharakter abweichen, als gleitfähig modelliert. Für einen kreisförmigen Versetzungsring lässt sich der Radius des Kreises über den Zusammenhang:  $r_s = \varrho_s^M / q_s$  bestimmen. Folglich kann die gleitfähige Versetzungssegmentlänge im Mittelungsvolumen abgeschätzt werden, wobei der mittlere Versetzungsabstand im Mittelungsvolumen  $L^{\text{av}}$  als oberes Limit herangezogen wird. Eine Voraussetzung für das Quergleiten des Versetzungssegments ist, dass die resultierende Spannung auf dem Quergleitsystem größer als die auf dem betrachteten Gleitsystem ist. Das quergeglittene Versetzungssegment kann unter Umständen ausbauchen, sofern die resultierende Spannung einen kritischen Wert übersteigt. Hierzu wird der oben bereits motivierte Vorfaktor für die kritische Spannung einer Frank-Read-Quelle  $c^{\text{multi}}$  eingeführt. Zur Berücksichtigung der Versetzungslängenzunahme beim Ausbauchen der Versetzung wird des Weiteren die Konstante  $c^{\text{bow-out}}$  in den Produktionstermen berücksichtigt. Es gilt:

$$L_s^{\text{screw}} = \min \left\{ \frac{20^\circ}{360^\circ} 2\pi \frac{\varrho_s^M}{q_s}, L^{\text{av}} \right\}, \quad L^{\text{av}} = \frac{1}{\sqrt{\sum_{\bar{s}=1}^S \varrho_{\bar{s}}^{\text{Tot}}}}, \quad (3.21\text{a-b})$$

$$c^{\text{multi}} \in [0, 1], \quad c^{\text{bow-out}} = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, & \tau_s^{\text{res}} \geq c^{\text{multi}} \tau_s^{\text{crit}} \\ 1, & \tau_s^{\text{res}} < c^{\text{multi}} \tau_s^{\text{crit}} \end{cases}. \quad (3.22\text{a-b})$$

Die Terme in den Evolutionsgleichungen ergeben sich zu:

$$-\partial_t \kappa_s^{\text{cross}} = -\kappa_s H \left( \frac{|\kappa_s^{\text{screw}}|}{\varrho_s^{\text{GND}}} - \cos\left(\frac{\pi}{18}\right) \right) \frac{P}{\delta t} H(\tau_{\bar{s}}^{\text{res}} - \tau_s^{\text{res}}) \quad (3.23\text{a})$$

$$-\partial_t \varrho_s^{M,\text{cross}} = - \left( \frac{\varrho_s^{\text{SSD}}}{9} + \varrho_s^{\text{GND}} H \left( \frac{|\kappa_s^{\text{screw}}|}{\varrho_s^{\text{GND}}} - \cos\left(\frac{\pi}{18}\right) \right) \right) \frac{P}{\delta t} H(\tau_{\bar{s}}^{\text{res}} - \tau_s^{\text{res}}) \quad (3.23\text{b})$$

$$-\partial_t q_s^{\text{cross}} = - \underbrace{c^{\text{q,loss}}}_{:=1} \frac{\partial_t \varrho_s^{M,\text{cross}}}{\varrho_s^M} q_s \quad (3.23\text{c})$$

$$\partial_t \bar{\kappa}_s^{\text{cross}} = \text{sgn}(\kappa_{\bar{s}}^{\text{screw}}) \partial_t \kappa_{\bar{s}}^{\text{cross}} c^{\text{bow-out}} \quad (3.23\text{d})$$

$$\partial_t \bar{\varrho}_s^{M,\text{cross}} = \partial_t \varrho_{\bar{s}}^{M,\text{cross}} c^{\text{bow-out}} \quad (3.23\text{e})$$

$$\partial_t \bar{q}_s^{\text{cross}} = \text{sgn}(\tau_s^{\text{res}}) \partial_t \bar{\varrho}_s^{M,\text{cross}} 2\sqrt{\sum_{\bar{s}=1}^S \varrho_{\bar{s}}^M} H(\tau_s^{\text{res}} - c^{\text{multi}} \tau_s^{\text{crit}}). \quad (3.23\text{f})$$

### Formalismus des homogenisierten Versetzungsreaktionsmodells

Das verwendete homogenisierte Versetzungsreaktionsmodell basiert auf einer Kollisionsrate von Versetzungen zweier Gleitsysteme  $\phi_{s \rightarrow \bar{s}}$ , welche über das Verhältnis der Versetzungsgeschwindigkeit zu dem mittleren Versetzungsabstand auf dem Gleitsystem des Reaktionspartners  $L_{\bar{s}}$  bestimmt wird. Die Berücksichtigung, dass das Aufeinandertreffen der Versetzungen von beiden Versetzungen auf den unterschiedlichen Gleitsystemen initiiert werden kann, motiviert die in Stricker und Weygand (2015), Roters et al. (2019) eingeführte Versetzungsreaktionsdichte für das betrachtete Gleitsystem und die betrachtete Reaktionspaarung. Eine Anwendung dieser Formulierung in einer Versetzungsnetzwerkformulierung findet sich in Sudmanns et al. (2020). Dabei wird davon ausgegangen, dass Versetzungssegmente, welche unmittelbar in einer Lomer-Verbindung gebunden sind, nicht an weiteren Versetzungsreaktionen beteiligt sind. Folglich reduziert sich die potentiell reaktive Versetzungsdichte auf die mobile und stabilisierte Versetzungsdichte. Der Zusammenhang lautet:

$$\phi_{s \rightarrow \bar{s}} = \frac{v_s}{L_{\bar{s}}}, \quad (\partial_t \varrho^{M,react} + \partial_t \varrho^{S,react}) \propto \varrho_s^M \phi_{s \rightarrow \bar{s}} + \varrho_{\bar{s}}^M \phi_{\bar{s} \rightarrow s} \quad (3.24a-b)$$

Das jeweilige Verhältnis der Änderung der Versetzungsreaktionsdichte zu der Rate der entsprechenden kollidierenden Versetzungsdichten wird durch die reaktionsabhängige Versetzungsreaktionskonstante  $C^{react}$  beschrieben. Unter Verwendung von  $C^{react}$ , deren Bestimmung und Abhängigkeiten in Unterabschnitt 5.2.1 genauer untersucht wird, ergibt sich die in dieser Arbeit verwendete Versetzungsreaktionsgleichung zu:

$$(\partial_t \varrho^{M,react} + \partial_t \varrho^{S,react}) = C^{react} \left( \frac{1}{b_s} |\partial_t \gamma_s| \sqrt{\varrho_{\bar{s}}^M + \varrho_{\bar{s}}^S} + \frac{1}{b_{\bar{s}}} |\partial_t \gamma_{\bar{s}}| \sqrt{\varrho_s^M + \varrho_s^S} \right) \quad (3.25)$$

Hierbei muss jedoch berücksichtigt werden, dass aufgrund der lokalen Spannungszustände nicht alle aus den Versetzungsreaktionen resultierenden Versetzungsanordnungen auch stabil wären und folglich diese nicht gebildet werden oder reversibel ablaufen. Dies wird über einen Vorfaktor zur Beschreibung des Anteils an stabilen Versetzungsreaktionen  $\eta^{react} \in [0, 1]$  abgebildet. Während die gleitfähigen und die kollinearen Reaktionen als irreversible angenommen werden ( $\eta^{gliss} = \eta^{coll} = 1$ ), wird für die Lomer-Reaktionen der stabile Anteil in Abhängigkeit der lokalen Mikrostruktur und des Spannungszustandes modelliert. Hierbei wird die Stabilität der Lomer-Verbindung über die Mobilität der Lomerarme bestimmt [Rodney und Phillips (1999), Shin et al. (2001)]. Lomerarme bezeichnen jene Versetzungssegmente, welche direkt mit der Lomer-Verbindung verbunden sind.

Dabei hängt die zur Versetzungsbewegung infolge des Ausbauchprozesses notwendige Schubspannung von der Länge der Versetzungssegmente ab. Folglich lässt sich für einen

gegebenen Spannungszustand eine kritische Länge der Lomerarme  $L_s^{\text{crit}}$  auf den einzelnen Gleitsystem bestimmen, oberhalb derer sich die Lomer-Verbindung wieder auflösen würde. Durch die Kopplung beider in der Lomer-Reaktion involvierten Gleitsysteme wird die kritische Länge für die jeweilige Reaktionspaarung  $L_{s\bar{s}}^{\text{crit}}$  herangezogen, wobei das Gleitsystem mit der höheren resultierenden Spannung für die Stabilität der Verbindung ausschlaggebend ist. Durch einen Vergleich mit den im Mittelungsvolumen enthaltenen Veretzungssegmentlängen lässt sich der Anteil an stabilen und instabilen Lomer-Reaktionen bestimmen.

Zur Modellierung der in Versetzungsnetzwerken enthaltenen Streuung der Versetzungslängen mit Tendenz zu kleineren Versetzungslängen (vgl. *DDD*-Datenanalysen in Stricker et al. (2018), Sills et al. (2018)) wird in dieser Arbeit eine Rayleigh-Verteilung für die Versetzungslängen angenommen, deren Erwartungswert der mittleren Versetzungslänge im Mittelungsvolumen entspricht. Der stabile Anteil an Lomer-Reaktionen ergibt sich durch das Einsetzen der kritischen Länge in die Verteilungsfunktion zu:

$$L_s^{\text{crit}} = \frac{\mu b_s}{2} \frac{1}{|\tau_s^{\text{res}}|}, \quad L_{s\bar{s}}^{\text{crit}} = \min \{L_s^{\text{crit}}, L_{\bar{s}}^{\text{crit}}\}, \quad \eta^{\text{Lomer}} = 1 - \exp\left(-\frac{(L_{s\bar{s}}^{\text{crit}})^2}{2(\sqrt{\frac{2}{\pi}} L^{\text{av}})^2}\right) \quad (3.26\text{a-c})$$

Die Reversibilität der Lomer-Verbindung erfordert das Aufbrechen auch für bereits existierende Lomer-Verbindungen zu modellieren. Hierzu wird die Änderung des stabilen Anteils infolge einer Verkürzung der kritischen Länge bzw. Zunahme der resultierenden Spannung auf den Gleitsystemen bestimmt. Die Terme in den Evolutionsgleichungen ergeben sich zu:

$$-\partial_t \varrho_s^{M,\text{react}} = -\eta^{\text{react}} C^{\text{react}} \left( \varrho_s^M |v_{\bar{s}}| \sqrt{\varrho_{\bar{s}}^M + \varrho_{\bar{s}}^S} + \varrho_{\bar{s}}^M |v_s| \sqrt{\varrho_s^M + \varrho_s^S} \frac{\varrho_s^M}{\varrho_s^M + \varrho_s^S} \right) \quad (3.27\text{a})$$

$$-\partial_t \varrho_s^{S,\text{react}} = -\eta^{\text{react}} C^{\text{react}} \left( \varrho_{\bar{s}}^M |v_{\bar{s}}| \sqrt{\varrho_s^M + \varrho_s^S} \frac{\varrho_s^S}{\varrho_s^M + \varrho_s^S} \right) \quad (3.27\text{b})$$

$$-\partial_t q_s^{\text{react}} = -\underbrace{c^{\text{q,loss}}}_{:=1} \frac{\partial_t \varrho_s^{M,\text{react}}}{\varrho_s^M} q_s \quad (3.27\text{c})$$

$$\partial_t \bar{\varrho}_s^{M,\text{gliss}} = c^{\text{bow-out}} (\partial_t \varrho_{\bar{s}}^{M,\text{gliss}} + \partial_t \varrho_{\bar{s}}^{S,\text{gliss}}) \quad (3.27\text{d})$$

$$\partial_t \bar{\varrho}_s^{L,\text{Lomer}} = (\partial_t \varrho_s^{M,\text{Lomer}} + \partial_t \varrho_s^{S,\text{Lomer}}) \quad (3.27\text{e})$$

$$\partial_t \bar{\varrho}_s^{S,\text{Lomer}} = \partial_t \varrho_s^{M,\text{Lomer}} \quad (3.27\text{f})$$

$$\partial_t \bar{\varrho}_s^{\text{gliss}} = \text{sgn}(\tau_s^{\text{res}}) \partial_t \bar{\varrho}_s^{M,\text{gliss}} 2\sqrt{\sum_{\bar{s}=1}^S \varrho_{\bar{s}}^M} H(\tau_s^{\text{res}} - c^{\text{multi}} \tau_s^{\text{crit}}) \quad (3.27\text{g})$$

$$-\partial_t \hat{\varrho}_s^L = -|\partial_t \eta^{\text{Lomer}}| \varrho_s^L H(-\partial_t \eta^{\text{Lomer}}) \quad (3.27\text{h})$$

$$-\partial_t \hat{\varrho}_s^S = -|\partial_t \eta^{\text{Lomer}}| \varrho_s^S H(-\partial_t \eta^{\text{Lomer}}) \quad (3.27\text{i})$$

$$\partial_t \hat{\varrho}_s^M = (\partial_t \hat{\varrho}_s^L + \partial_t \hat{\varrho}_s^S). \quad (3.27\text{j})$$

## 3.4 Numerische Umsetzung

Die CDD-Formulierung wurde in ein zweiskaliges numerisches Framework basierend auf Schulz et al. (2019) implementiert und in eine eigens dafür angepasste Version der parallelen Finite-Elemente-Software M++ [Wieners (2010, 2005)] integriert. Dabei wird ein Finite-Elemente-Ansatz mit je nach System Hexaeder- oder Tetraeder-Elementen und linearen Ansatzfunktionen für die Verschiebungen im externen Problem sowie konstanten Ansatzfunktionen für die Versetzungsdichten und einer impliziten Runge-Kutta diskontinuierlichen Galerkin Methode mit vollem „upwind flux“ im internen Problem verwendet. Vereinfachend, aber als effizient erwiesen, wird dabei die gleiche Vernetzung für beide Skalen verwendet. Zur Lösung der Gleichungssysteme wird eine Block-Jacobi Vorkonditionierung und das GMRES Verfahren [Saad und Schultz (1986)] verwendet. Zur Lösung der gekoppelten Evolutionsgleichungen wird ein Splittingverfahren nach Strang (1968) unter Verwendung der impliziten Mittelpunktsregelung mit konstanten Zeitschritten zur Zeitdiskretisierung eingesetzt.

## 3.5 Datengetriebene Analysemethoden

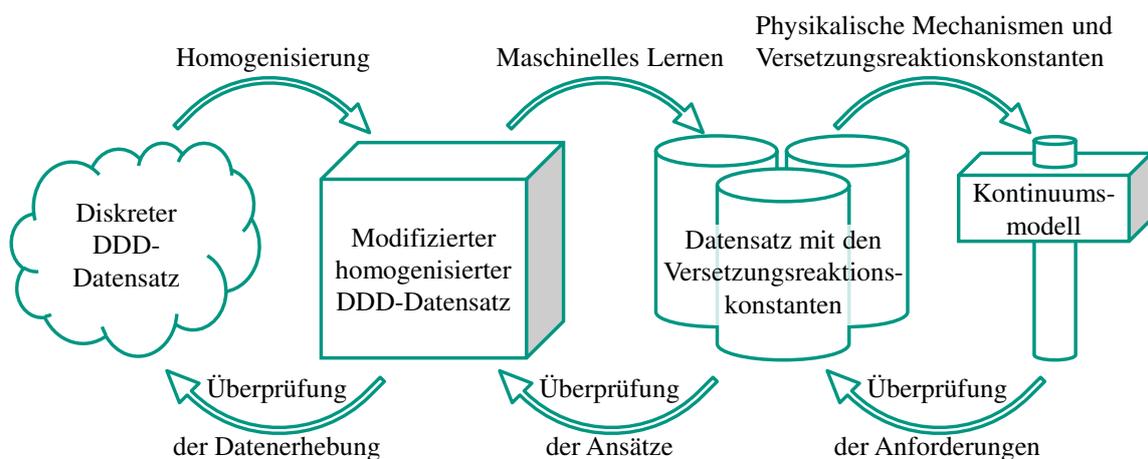
Aufgrund der Zunahme der Größe und des Umfangs von Datensätzen im Bereich der Kristallplastizität, werden Ansätze des maschinellen Lernens zunehmend auf Versetzungsstrukturen angewendet [Bock et al. (2019), Steinberger et al. (2019), Hiemer und Zapperi (2021)]. In dieser Arbeit werden datengetriebene Analysemethoden auf bereits existierende *DDD*-Datensätze zur Identifikation von Versetzungsnetzwerk- und Reaktionscharakteristiken angewendet, um somit einen Wissenstransfer von diskreten Ansätzen zu Kontinuumsformulierungen und die Evaluation von verwendeten Kontinuumsansätzen zu ermöglichen. Das Ziel ist dabei die Ableitung von interpretierbaren, vollständig nachvollziehbaren, datengetriebenen Modellen, welche die fundamentalen physikalischen Mechanismen abbilden.

## Arbeitsablauf

Der verwendete Ablauf ist in Abbildung 3.3 dargestellt und wird in Katzer et al. (2022) detailliert beschrieben. Grundlagen sind *DDD*-Datensätze, in welchen der Mikrostrukturzustand zum jeweiligen Zeitpunkt als räumliche Lage von verschiedenen diskreten Versetzungslinien vorliegt, die untereinander verbunden sein können und komplexe Versetzungsnetzwerkstrukturen bilden. Aus der Bewegung der diskreten Versetzungssegmente unter Beachtung des jeweiligen Burgersvektors resultiert die plastische Verformung des Materials. Auf diesen diskreten *DDD*-Datensatz können deskriptive Datenanalysen angewendet werden, um ein besseres Verständnis für das entstehende Versetzungsnetzwerk zu erhalten, wie z. B. eine Analyse der zeitlichen Evolution der Versetzungslinienlängen während der plastischen Materialdeformation.

Im Zuge einer Homogenisierung des diskreten Datensatzes innerhalb der gewählten Mittlungsvolumina werden die Daten in Kontinuumsgrößen überführt, wie z. B. die Linienlänge der Versetzungen in dem Mittlungsvolumen in die entsprechende Versetzungsdichte. Hierdurch lassen sich die Daten mit den Größen aus Kontinuumsformulierungen vergleichen.

Durch den Einsatz von deduktiven Datenanalysen lassen sich Annahmen der Kontinuumsformulierung überprüfen. Darüberhinaus lassen sich weitere Charakteristiken des Versetzungsnetzwerkes identifizieren, wie z. B. die sogenannten Versetzungsreaktionsdichten mittels der Homogenisierung von diskreten Versetzungsreaktionen und die plastische Scherrate als die homogenisierte von den Versetzungen abgescherte Fläche. Diese Kontinuumsgrößen des homogenisierten *DDD*-Datensatzes werden im Folgenden auch als sogenannte „Features“ bezeichnet und dienen als Grundlage für die Anwendung von



**Abbildung 3.3:** Der iterative Arbeitsablauf zum Wissenstransfer von diskreten Ansätzen zu Kontinuumsformulierungen mittels der Datenanalyse von Versetzungsnetzwerken. Übersetzte Abbildung aus [Zoller et al. (2021)].

maschinellern Lernen zur Vorhersage von charakteristischen Größen wie der Versetzungsreaktionsdichte.

Dabei wird der Datensatz im Zuge des sogenannten „Feature-Engineering“ erweitert, indem mathematische Operatoren auf einzelne Features und deren Kombinationen angewendet und die resultierenden Größen ebenfalls im Datensatz gespeichert werden. Eine Hauptfunktion des Feature-Engineering ist die Umwandlung von nichtlinearen in lineare Modellabhängigkeiten. (Ein konkretes Beispiel anhand der Funktion  $y = \sqrt{x}$  liefern die Features  $x_1 = x$  und  $x_2 = \sqrt{x_1} = \sqrt{x}$ , wobei  $x_2$  mittels Feature-Engineering aus  $x_1$  erzeugt wird. Eine linearer Abhängigkeit besteht hierbei lediglich zwischen  $y$  und der mittels Feature-Engineering erzeugten Größe:  $y \not\propto x_1$ , aber  $y \propto x_2$ .)

Im nächsten Schritt werden Methoden des maschinellen Lernens auf den erweiterten, homogenisierten Datensatz angewendet unter Einbezug der von aus Expertenwissen hergeleiteten Modellgleichungen. In dieser Arbeit ist dies die physikalisch motivierte Formulierung der Versetzungsreaktionsratendichten nach Gleichung 3.25 und die sogenannte multiple lineare Regression als Methode des maschinellen Lernens. Die Wahl der multiplen linearen Regression als verwendete Vorhersagemethode erfolgt mit der Intention, die Modellkomplexität zu reduzieren und ein hohes Maß an Interpretierbarkeit und Nachvollziehbarkeit zu gewährleisten.

Die Methode des maschinellen Lernens validiert die Modellgleichung und liefert die in dieser Arbeit gesuchten Versetzungsreaktionskonstanten, welche die Evolution der Versetzungsreaktionen spezifiziert. Diese können in die *CDD*-Formulierung integriert werden. Es sei angemerkt, dass die einzelnen Arbeitsschritte sorgfältig überprüft werden müssen, um unerwünschte Artefakte zu vermeiden und die Anforderungen und Voraussetzungen des Folgeschrittes zu berücksichtigen. So kann z. B. ein zu klein gewählter Zeitschritt für die Ratengleichung dazu führen, dass das diskrete Verhalten der Versetzungen in der *DDD*-Formulierung keine adäquate Kontinuumsbeschreibung ermöglicht (materialwissenschaftliches Artefakt), oder ein zu groß gewählter Zeitschritt reduziert die Datenmenge zu stark für eine sinnvolle Anwendung von datenwissenschaftlichen Methoden (Artefakt der Datenwissenschaft).

### Multiple lineare Regression

Bei der multiplen linearen Regression werden lineare Modelle in allen Features angenommen. Folglich weist das Modell eine lineare Abhängigkeit der Zielvariablen  $\mathbf{y}^{MLR}$  von den jeweiligen Features, welche in der Matrixform  $\mathbf{X}^{MLR}$  notiert werden, und den Regressionskoeffizienten  $\mathbf{c}^{MLR}$  auf. Zusätzlich werden etwaige Störgrößen, wie z. B. eine zufällige

Streuung der Messergebnisse, über die Addition eines Fehlerterms  $\epsilon^{MLR}$  berücksichtigt. Die Modellgleichung ergibt sich zu:  $\mathbf{y}^{MLR} = \mathbf{X}^{MLR}[\mathbf{c}^{MLR}] + \epsilon^{MLR}$ .

In dieser Arbeit werden die Störgrößen entsprechend ihres Erwartungswertes zu Null gesetzt. Die Zielvariablen sind in dieser Arbeit die Änderungsraten der Versetzungsreaktionsdichten, deren wahren Werte im homogenisierten *DDD*-Datensatz vorliegen. Die Features umfassen die rechte Seite der Gleichung 3.25, wobei die Regressionskoeffizienten die Reaktionskonstanten beinhalten und über die Methode der kleinsten Quadrate abgeschätzt werden. Die Vorhersagequalität des Regressionsmodells wird mittels des Determinationskoeffizienten  $R^2$ , auch Bestimmtheitsmaß genannt, bewertet und liegt unter Berücksichtigung der verschwindenden Störgröße im Intervall  $R^2 \in (-\infty, 1]$ . Hierbei beschreiben niedrige  $R^2$ -Werte eine schlechte Vorhersage und hohe  $R^2$ -Werte eine gute Vorhersage. Die Berechnungsvorschrift für den Determinationskoeffizienten lautet [siehe u. a. Barrett (1974)]:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (y_i - y_i^{MLR})^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}. \quad (3.28)$$

Hierbei bezeichnet  $y_i$  die wahren Werte der Zielvariable,  $y_i^{MLR}$  die geschätzten Werte und  $\bar{y}$  den empirischen Mittelwert der wahren Werte. Für die Vorhersage des Mittelwertes der Zielvariablen ( $y_i^{MLR} = \bar{y}$ ) strebt  $R^2$  folglich gegen Null, wohingegen  $R^2$  für eine exakte Vorhersage ( $y_i^{MLR} = y_i$ ) den Wert 1 annimmt.

## 4. Systeme und Systemanalysen

Im Folgenden werden die betrachteten Systeme beschrieben, einschließlich des Materials, der Kristallorientierung, der Geometrie und der Belastung. Dies beinhaltet Mikropillars unter Druckbelastung, Mikrokrägarms unter Biegebelastung und Mikrodrähte unter Torsionsbelastung. Folglich umfassen die Beanspruchungen je nach betrachtetem System sowohl Normalspannungen, Schubspannungen als auch Kombinationen davon und resultieren in homogenen sowie inhomogenen externen Spannungszuständen im Systemquerschnitt. Um elementare Erkenntnisse a priori über die erwarteten Gleitsystemaktivitäten, deren Interaktion und die voraussichtlich resultierenden *GND*-Typen im vom externen Spannungsfeld induzierten Versetzungsaufstau zu erhalten, werden umfassende Systemanalysen durchgeführt.

### Betrachtete Materialien

Diese Arbeit fokussiert sich auf das Materialverhalten von einkristallinen *kfz* Metallen, insbesondere von Aluminium, Kupfer und Gold. Folglich ist das elastische Materialverhalten im Allgemeinen anisotrop und der Elastizitätstensor (vgl. Gleichung 3.1c) kann unter Ausnutzung der kubischen Symmetrie durch die drei Komponenten  $\{C_{1111}, C_{1122}, C_{2323}\}$  charakterisiert werden. Dabei dient der Zener-Anisotropiefaktor  $A$  als Maß für die Abweichung des mechanischen Verhaltens vom isotropen Sonderfall ( $A = 1$ ). Für niedrige Zener-Anisotropiefaktoren oder polykristalline Mikrostrukturen lässt sich ein isotropes Verhalten annähern [Date und Andrews (1969)], welches u. a. zur Berechnung der internen Spannungsterme angenommen wird (vgl. Gleichung 3.9 und Gleichung 3.10).

Im Zuge dieser Arbeit werden Einkristalle mit unterschiedlichen Kristallorientierungen einschließlich der Hochsymmetrieorientierungen  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  untersucht. Für die initiale Mikrostruktur wird eine totale Versetzungsdichte in der Größenordnung von  $10^{12} - 10^{13} \text{ m}^{-2}$  angesetzt, was einem unverformten bis leicht verformten Material entspricht.

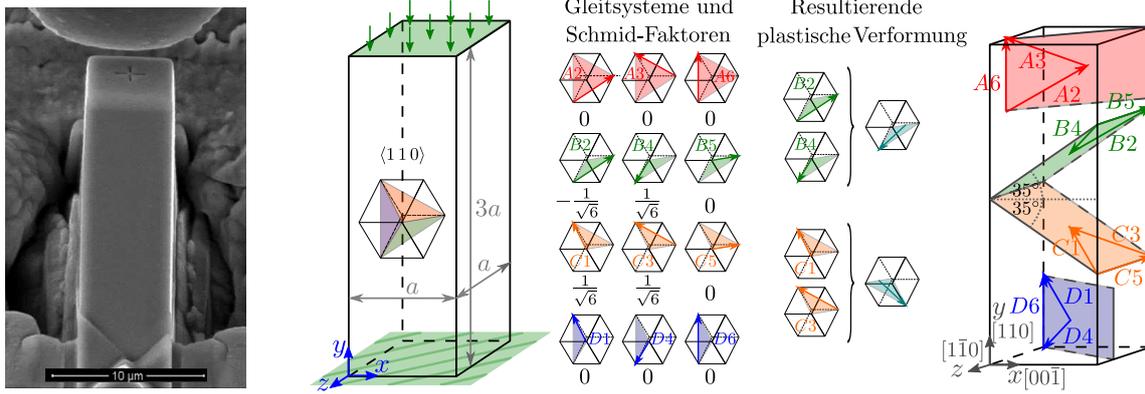
Die verwendeten materialabhängigen Parameter sind in Tabelle 4.1 angegeben. Des Weiteren werden für alle betrachteten *kfz* Metalle die Einträge der Interaktionsmatrix des Fließspannungsterms (siehe  $a_{s\bar{s}}$  in Gleichung 3.10) entsprechend der Erkenntnisse von *DDD*-Simulationen aus der Literatur nach Kubin et al. (2008b) zu  $\{a_{self} = 0,122; a_{copla} = 0,122; a_{hirth} = 0,07; a_{lomer} = 0,122; a_{gliss} = 0,137; a_{coll} = 0,625\}$  oder nach Akhondzadeh et al. (2020) zu  $\{a_{self} = 0,3; a_{copla} = 0,152; a_{hirth} = 0,083; a_{lomer} = 0,326; a_{gliss} = 0,661; a_{coll} = 0,578\}$  gewählt. Der gemittelte Wert nach der Taylor-Formulierung wird Madec et al. (2002) folgend zu  $\alpha = 0,35$  gesetzt. Zur Berechnung der Quergleitwahrscheinlichkeit (siehe Gleichung 3.20) wird die Normalisierungskonstante zu  $\beta = 10^5$  [Weygand et al. (2002)], die jeweiligen Referenzwerte für die Versetzungslänge und die Zeit zu  $L_0 = 10^{-6}$  m und  $t_0 = 10^{-9}$  s [Weygand et al. (2002)], das Aktivierungsvolumen für Kupfer zu  $V_{act} = 300 b_s^3$  [Bonneville et al. (1988), Kubin et al. (1992)] und für Gold zu  $V_{act} = 17,2 b_s^3$  [Saada (1991)] und die Temperatur zur Raumtemperatur  $T = 293,15$  K gewählt. Die Reaktionskonstanten können z. B. Sudmanns et al. (2019) entnommen werden.

**Tabelle 4.1:** Verwendete Materialparameter von Aluminium, Kupfer und Gold. Die Werte für die kubischen Elastizitätstensorkomponenten und die Zener-Anisotropiefaktoren sind aus Rösler et al. (2019) entnommen. Daraus lassen sich der Schubmodul und die Querkontraktionszahl für eine isotrope Betrachtung nach Date und Andrews (1969) ermitteln. Die Länge des Burgersvektors ist in Davey (1925) angegeben, der Widerstandskoeffizient u. a. in Mason und Rosenberg (1966), Kubin et al. (1992), Zhang et al. (2014) und die Schubspannung beim Übergang zur Stufe III in Kubin et al. (1992), Berner (1960).

	$\{C_{1111}, C_{1122}, C_{2323}\} [10^9 \text{ Pa}]$	$A [-]$	$\{\mu, \nu\} [10^9 \text{ Pa}, -]$	$b [10^{-9} \text{ m}]$	$B [\text{Pa s}]$	$\tau^{III} [10^6 \text{ Pa}]$
Al	{108; 61; 29}	1,23	{27; 0,347}	0,286	$10^{-4}$	5
Cu	{168; 121; 75}	3,22	{40; 0,367}	0,254	$5 \times 10^{-5}$	28
Au	{186; 157; 42}	1,89	{24; 0.432}	0,287	$10^{-4}$	10

## 4.1 Mikropillar unter Druckbelastung

Der in dieser Arbeit untersuchte Mikropillar unter einachsiger Druckbelastung aus Zoller et al. (2021) weist wie in Abbildung 4.1 dargestellt einen quadratischen Querschnitt auf und besitzt ein Aspektverhältnis, demnach die Länge (in  $y$ -Richtung des Koordinatensystems (*KOS*)) das dreifache der Kantenlänge  $a$  des Querschnittes beträgt. Die Systemgröße wird zu  $a = 10 \mu\text{m}$  gewählt. Der Pillar ist am unteren Ende fest fixiert ( $\mathbf{u}_D|_{y=0} = \mathbf{0}$ ) und die Belastung wird am oberen Ende weggesteuert mit einer konstanten Dehnrate aufgebracht ( $\mathbf{u}_D|_{y=3a} : \partial_t \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{ext}} = -4 \times 10^3 \frac{1}{s} \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_y = \text{konst}$ ), wobei die Querkontraktion nicht behindert



**Abbildung 4.1:** Darstellung eines realen und modellierten Mikropillars unter einachsiger Druckbelastung, sowie der Orientierung der Gleitsysteme, deren Schmid-Faktoren und die aus den Gleitsystemaktivitäten resultierende plastische Verformung für eine  $\langle 110 \rangle$  Kristallorientierung. Bearbeitete Abbildung aus [Zoller et al. (2021)].

wird. Die Seitenoberflächen werden als spannungsfrei angenommen ( $\mathbf{t}_N = \mathbf{0}$ ). Folglich weist der idealisierte externe Spannungszustand lediglich eine Normalspannungskomponente auf ( $\boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}} = \sigma^{\text{ext}} \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_y$ ) und ist homogen im ganzen System ( $\boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}} \neq \boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}}(x, y, z)$ ). Aufgrund des homogenen Spannungszustandes wird erwartet, dass die mobilen Versetzungen sich nicht im Inneren aufstauen, sondern das System über die Oberflächen verlassen und es somit zu keiner Akkumulation von  $GND$ -Dichte im System kommt [Zoller et al. (2021)].

Für die untersuchte  $\langle 110 \rangle$  Orientierung beträgt der Schmid-Faktor  $m_s = \frac{1}{\sigma^{\text{ext}}} \boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}} \cdot \mathbf{M}_s$  lediglich für vier Gleitsysteme einen Wert ungleich Null:  $\{B2, B4, C1, C3\}$ . Diese vier Gleitsysteme werden in der Mikrostrukturevolution als aktiv erwartet, während die anderen als inaktiv erwartet werden [Zoller et al. (2021)]. Es sei angemerkt, dass das Vorzeichen des Schmid-Faktors von der gewählten Richtung der Gleitebenennormalen und Gleitrichtung abhängig ist und für die Aktivität eines Gleitsystems der Betrag des Schmid-Faktors aussagekräftig ist. Die aus den Gleitsystemaktivitäten resultierenden plastischen Verformungen lassen sich jeweils auf den Gleitebenen nach Gleichung 3.3 zusammenfassen und unter der Annahme einer gleichgroßen Gleitsystemaktivität durch ein nur für die plastische Verformung repräsentatives Gleitsystem veranschaulichen. Es sei darauf hingewiesen, dass infolge der Gleitsystemaktivitäten zur Relaxation der Druckbelastung eine plastische Verformung in  $x$ -Richtung, nicht aber in  $z$ -Richtung für das betrachtete System erwartet wird [Zoller et al. (2021)].

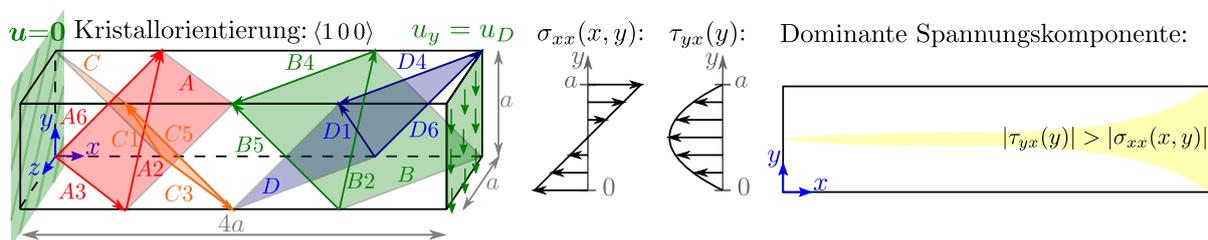
Unter Einbezug der Versetzungsreaktionsmatrix (siehe Abbildung 3.2) lässt sich eine weitere Charakteristik des Systems erkennen. Die Versetzungsreaktionen zwischen den vier aktiven Gleitsystemen beschränken sich auf die Lomer-Reaktionen, Selbstinteraktionen, koplanare sowie Hirth-Reaktionen [Zoller et al. (2021)] und enthalten folglich keine gleitfähigen

Reaktionen und Quergleitmechanismen als Multiplikationsmechanismen. Möglicherweise ablaufende gleitfähige Reaktionen zwischen einem aktiven und inaktiven Gleitsystem führen zur Bildung von neuen Versetzungssegmenten auf inaktiven Gleitsystemen.

## 4.2 Mikrokragarm unter Biegebelastung

Der in dieser Arbeit untersuchte Mikrokragarm unter Biegebelastung weist wie in Abbildung 4.2 dargestellt einen quadratischen Querschnitt auf, wobei die Balkenlänge  $L$  (in  $x$ -Richtung des  $KOS$ ) das vierfache der Kantenlänge  $a$  des Querschnittes beträgt. Die Systemgröße wird zu  $a = 5 \mu\text{m}$  gewählt. Der Balken ist am linken Ende fest fixiert ( $\mathbf{u}_D|_{x=0} = \mathbf{0}$ ) und die Belastung wird am rechten Balkenende weggesteuert mit einer konstanten Verschiebungsrate aufgebracht ( $\partial_t \mathbf{u}_D|_{x=4a} = -10^{-1} \frac{\text{m}}{\text{s}} \mathbf{e}_y = \text{konst}$ ), wobei die Verschiebungen in die anderen Raumrichtungen nicht behindert werden. Die Seitenoberflächen werden als spannungsfrei angenommen ( $\mathbf{t}_N = \mathbf{0}$ ). Aufgrund der Belastung kommt es zu einer Superposition von Normal- und Schubspannungen ( $\boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}} = \sigma^{\text{ext}}(\mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x) + \tau^{\text{ext}}(\mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_x)$ ) und einem inhomogenen Spannungsfeld im System ( $\boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}} = \boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}}(x, y)$ ) inklusive eines Zug- und eines Druckbereichs. Folglich wird ein Versetzungsaufstau an den jeweiligen neutralen Flächen im Inneren des Systems erwartet.

Um den Einfluss der Normalspannungen im Verhältnis zu den Schubspannungen abzuschätzen wird die Bernoulli-Balkentheorie für einen rein elastischen Fall herangezogen. Im Folgenden bezieht sich  $F$  auf jene am rechten Balkenende aufgebrauchte Kraft, die in der Verschiebung  $u_D$  resultiert. Die Schnittkraft  $Q_y$  ist entlang der  $x$ -Achse konstant, wohingegen das Biegemoment  $M_z$  linear entlang der  $x$ -Achse verläuft. Unter Einbezug des



**Abbildung 4.2:** Darstellung des Mikrokragarms unter Biegebelastung einschließlich der Gleitsystemorientierung für die  $\langle 100 \rangle$  Kristallorientierung und des Verlaufs der Spannungskomponenten. Hierbei ist eine schematische Kennzeichnung der Bereiche mit dominanten Schubspannungskomponenten in gelb angegeben.

konstanten axialen Flächenträgheitsmomentes  $I_z = a^4/12$  ergeben sich die Normalspannung  $\sigma_{xx}$  und Schubspannungen  $\tau_{yx}$  bzw.  $\tau_{xy}$  zu:

$$M_z(x) = F(x-4a), \quad \sigma_{xx}(x, y) = -\frac{M_z(x)}{I_z} \left(y - \frac{a}{2}\right), \quad Q_y = -F, \quad \tau_{yx}(y) = \frac{6Q_y}{a^2} \left(\frac{1}{4} - \left(\frac{y}{a} - \frac{1}{2}\right)^2\right). \quad (4.1a-d)$$

Folglich erreicht die Normalspannung ihr Maximum an der Einspannung und dort an der Oberfläche, wohingegen die Schubspannungen ihr Maximum auf halber Höhe des Balkens über die gesamte Länge des Balkens erreichen. Es gilt:

$$|\sigma_{xx}(x, y)|_{max} = 6 \frac{F 4a}{a^3}, \quad |\tau_{yx}(y)|_{max} = \frac{3 F}{2 a^2}, \quad \frac{|\sigma_{xx}|_{max}}{|\tau_{yx}|_{max}} = \frac{4 \cdot 4a}{a} = 16. \quad (4.2a-c)$$

Für das betrachtete System beträgt die maximale Normalspannung das 16-fache der maximalen Schubspannungen. Folglich wird die Normalspannung als die dominante Spannungskomponente für die Mikrostrukturevolution erwartet. Hierbei sei angemerkt, dass sich das Verhältnis der Spannungskomponenten lokal unterscheidet und es Bereiche wie in der Nähe der neutralen Fläche oder dem freien Balkenende gibt, an denen die Schubspannungen die Normalspannung übersteigen.

Für die untersuchte  $\langle 100 \rangle$  Kristallorientierung lassen sich die Schmid-Faktoren für die unterschiedlichen Spannungskomponenten  $\{m_s^{\sigma^{ext}}, m_s^{\tau^{ext}}\}$  bzw. Zug- und Druckbereiche  $\{m_s^{\sigma^{ext}>0}, m_s^{\sigma^{ext}<0}\}$  getrennt voneinander ausrechnen. Deren Werte sind in Tabelle 4.2 angegeben. Da die Werte der Spannungskomponenten sich lokal unterscheiden, gilt dies auch für den gesamten Schmid-Faktor. Unter Einbezug der Schmid-Faktoren lassen sich die Gleitsysteme in drei Gruppen einteilen:  $\{A3, B4, C3, D4\}$  können sowohl die Normal- als auch die Schubspannungen relaxieren, wohingegen  $\{A6, B5, C5, D6\}$  nur die Normalspannungen und  $\{A2, B2, C1, D1\}$  nur die Schubspannungen relaxieren können. Es sei darauf hingewiesen, dass für die erste Gleitsystemgruppe die Triebkraft auf die Versetzungen infolge der Schubspannung die Triebkraft infolge der Normalspannung je nach Zug- oder Druckbereich verstärkt bzw. abschwächt. Damit kommt es bei einem ausreichend großem Einfluss der Schubkomponente zu einer Verlagerung des Versetzungsaufstaus außerhalb der Balkenmitte, wobei die Richtung vom jeweiligen Gleitsystem abhängig ist. Im Gegensatz dazu wird der Versetzungsaufstau der zweiten Gleitsystemgruppe in der Balkenmitte für die gesamte Balkenlänge erwartet und für die dritte Gleitsystemgruppe wird gar kein Versetzungsaufstau erwartet.

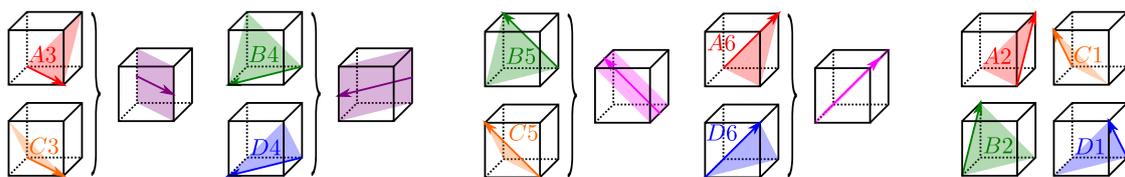
Aufgrund der Dominanz der Normalspannung und der Unabhängigkeit des Spannungsfeldes entlang der Balkentiefe (in z-Richtung des KOS) wird erwartet, dass die jeweilige aufgestaute Versetzung entlang des Burgersvektors 3 (für die Gleitebenen A und C) bzw. 4 (für die Gleitebenen B und D) verläuft (vgl. Abbildung 4.2). Dadurch lassen sich die zu

**Tabelle 4.2:** Schmid-Faktoren für den Kragarm unter Biegebelastung mit einer  $\langle 100 \rangle$  Kristallorientierung in Abhängigkeit von den jeweiligen Spannungskomponenten (Normalspannung:  $m_s^{\sigma^{\text{ext}}}$  und Schubspannung:  $m_s^{\tau^{\text{ext}}}$ ), sowie Zug- und Druckbereiche ( $\{m_s^{\sigma^{\text{ext}} > 0}, m_s^{\sigma^{\text{ext}} < 0}\}$ ).

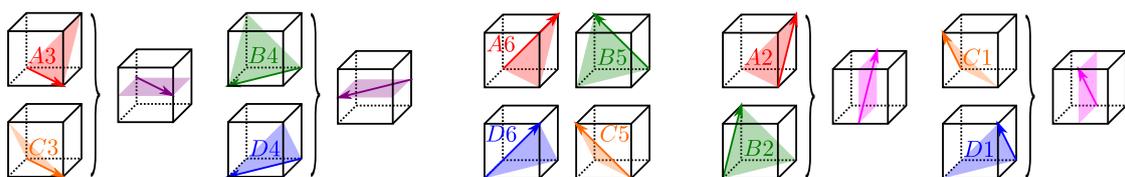
	A3	B4	C3	D4	A6	B5	C5	D6	A2	B2	C1	D1
$m_s^{\sigma^{\text{ext}} > 0}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	0	0	0	0
$m_s^{\sigma^{\text{ext}} < 0}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	0	0	0	0
$m_s^{\tau^{\text{ext}}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	0	0	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$

erwartenden Schrauben- und Stufenanteile der *GND*-Dichte abschätzen, wobei der Schraubenanteil  $(\mathbf{l} \cdot \mathbf{d}_s)^2$  beträgt. Demnach besitzt die *GND*-Dichte für die erste Gleitsystemgruppe  $\{A3, B4, C3, D4\}$  einen reinen Schraubencharakter (z.B. für A3:  $(\mathbf{d}_3 \cdot \mathbf{d}_3)^2 = 100\%$ ), wohingegen sie sich für die zweiten Gleitsystemgruppe  $\{A6, B5, C5, D6\}$  voraussichtlich aus 25% Schrauben- und 75% Stufencharakter zusammensetzt (z.B. für A6:  $(\mathbf{d}_3 \cdot \mathbf{d}_6)^2 = 25\%$ ).

Die aus den Gleitsystemaktivitäten resultierenden plastischen Verformungen lassen sich jeweils bzgl. des gemeinsamen Burgersvektors nach Gleichung 3.3 zusammenfassen und unter der Annahme einer gleichgroßen Gleitsystemaktivität durch ein nur für die plastische Verformung repräsentatives Gleitsystem veranschaulichen. Dies ist für die Gleitsystemaktivitäten infolge der Normalspannung in Abbildung 4.3 und infolge der Schubspannungen in Abbildung 4.4 dargestellt. Als Resultat der Mikrostrukturevolution zur Relaxation der Normalspannungen werden auch plastische Verformungen senkrecht zur Balkenlänge, also sowohl in *y*- als auch in *z*-Richtung, erwartet, wohingegen die zwei Gleitsystemgruppen  $\{A3, B4, C3, D4\}$  und  $\{A2, B2, C1, D1\}$  die Komponenten der aufgebrauchte Scherbelastung unmittelbar relaxieren können.



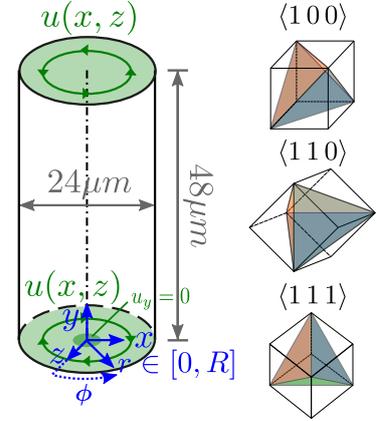
**Abbildung 4.3:** Interaktion der Gleitsystemaktivitäten infolge der Normalspannungen des Kragarms und deren nur für die plastische Verformung repräsentative Gleitsysteme.



**Abbildung 4.4:** Analog zu Abbildung 4.3, jedoch für Schubspannungen.

### 4.3 Mikrodrhte unter Torsionsbelastung

Der in dieser Arbeit untersuchte Mikrodraht unter Torsionsbelastung aus Zoller und Schulz (2020) weist wie in Abbildung 4.5 dargestellt einen runden Querschnitt auf und besitzt ein Aspektverhltnis, demnach die Drahtlnge das vierfache des Drahtradius  $R = a/2$  betrgt. Die Systemgroe wird zu  $a = 24 \mu\text{m}$  gewhlt. Die Torsionsbelastung wird symmetrisch auf der Ober- und Unterseite des Drahtes aufgebracht und erfolgt weggesteuert mit einer konstanten Drehwinkelrate  $\partial_t \varphi = 0.15^\circ \times 10^{-6} \frac{1}{\text{s}} = \text{konst}$  um die Drahtachse (in  $y$ -Richtung des  $KOS$ ). Die Verschiebungen in Richtung der Drahtachse werden nicht behindert, lediglich das Zentrum auf der Unterseite ist fest fixiert, um Starrkrperbewegungen zu vermeiden.



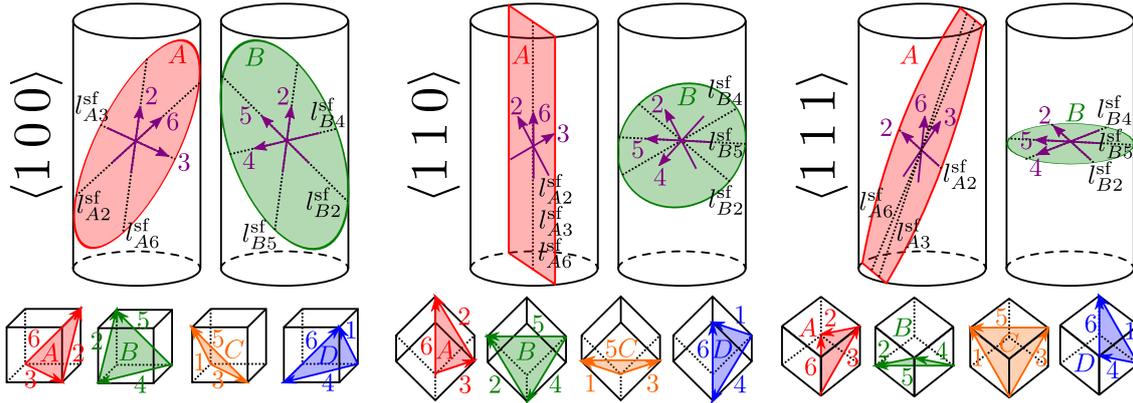
**Abbildung 4.5:** Systembeschreibung des Mikrodrahtes unter Torsionsbelastung.

Folglich ergeben sich die Dirichlet-Randbedingungen unter Verwendung des Einheitstensors  $\mathbf{1}$  und einer Rotationsmatrix  $\mathbf{R}_y(\varphi)$  bzgl. der Drahtachse zu:  $\mathbf{u}_D|_{y=2a} = \left(\mathbf{R}_y\left(\frac{\varphi}{2}\right) - \mathbf{1}\right)[\mathbf{x}]$ ,  $\mathbf{u}_D|_{y=0} = \left(\mathbf{R}_y\left(-\frac{\varphi}{2}\right) - \mathbf{1}\right)[\mathbf{x}]$  und  $\mathbf{u}_D|_{x=0} = \mathbf{0}$ . Die Mantelflche wird als spannungsfrei angenommen ( $\mathbf{t}_N = \mathbf{0}$ ). Die Torsionsbelastung fhrt zu Schubspannungen in Umfangsrichtung im Drahtquerschnitt  $\boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}}(r, \phi) = \tau^{\text{ext}}(r)(\mathbf{e}_\phi \otimes \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_\phi)$ , die im rein elastischen Fall linear von der Mittelachse zur Randoberflche ansteigen ( $\tau^{\text{ext}}(r) = \frac{r}{R} \tau_R^{\text{ext}}$ ). Hierbei beschreibt  $r$  die radiale und  $\phi$  die Winkelkomponente des verwendeten Zylinderkoordinatensystems. Zur Transformation der Zylinderkoordinaten in die kartesischen Koordinaten werden folgende Zusammenhnge verwendet:  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  und  $\mathbf{e}_\phi = \cos \phi \mathbf{e}_x - \sin \phi \mathbf{e}_z$ . Das Spannungsfeld ist somit inhomogen und die beiden Schubspannungskomponenten  $\tau_{xy}$  und  $\tau_{zy}$  weisen im Drahtquerschnitt sowohl eine neutrale Achse als auch unterschiedliche Bereiche mit entgegengesetztem Vorzeichen auf. Folglich wird ein Versetzungsaufstau im Inneren des Systems erwartet, wobei die Orientierung des Aufstaus vom jeweiligen Gleitsystem abhngt [Zoller und Schulz (2020)].

Des Weiteren variieren die Schmid-Faktoren eines einzelnen Gleitsystems lokal ( $m_s = \mathbf{M}_s \cdot 1/\tau^{\text{ext}} \boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}}(x, z)$ ) und knnen lediglich fur die individuelle Betrachtung der einzelnen Spannungskomponenten  $\tau_{xy}$  und  $\tau_{zy}$  als konstante Werte angegeben werden. Zur Abschtzung der Gleitsystemaktivitten wird der jeweilige maximal auftretende Schmid-Faktor  $m_s^{\text{max}}$  herangezogen, der unter dem Winkel  $\phi_s^{\text{max}}$  der Winkelkoordinate auftritt. Die

**Tabelle 4.3:** Maximale Schmid-Faktoren der Gleitsysteme im Mikrodraht unter Torsionsbelastung in Abhängigkeit von der Kristallorientierung. Tabelle entnommen aus [Zoller et al. (2023)].

	B2	B4	B5	C1	C3	C5	A2	A3	A6	D1	D4	D6
$\langle 100 \rangle$ : $m_s^{\max}$	0.4	0.6	0.4	0.4	0.6	0.4	0.4	0.6	0.4	0.4	0.6	0.4
$\langle 110 \rangle$ : $m_s^{\max}$	0.5	0.5	0.8	0.5	0.5	0.8	0.5	0.5	1	0.5	0.5	1
$\langle 111 \rangle$ : $m_s^{\max}$	1	1	1	0.7	0.7	0.3	0.3	0.7	0.7	0.7	0.3	0.7



**Abbildung 4.6:** Räumliche Orientierung der Gleitsysteme und der jeweiligen spannungsfreien Linien in den Mikrodrähten unter Torsionsbelastung. Für eine  $\langle 100 \rangle$  Kristallorientierung verhalten sich die Gleitebenen C und D analog zu A und B. Für die  $\langle 110 \rangle$  Kristallorientierung verhält sich die Gleitebene C analog zu B und die Gleitebene D analog zu A, während sich für eine  $\langle 111 \rangle$  Kristallorientierung die Gleitebenen C und D analog zu A verhalten. Abbildung entnommen aus [Zoller et al. (2023)].

maximalen Schmid-Faktoren der Gleitsysteme sind in Tabelle 4.3 und die dazugehörigen Winkel in Tabelle 4.4 angegeben und berechnen sich zu [Zoller et al. (2023)]:

$$m_s^{\max} = \max_{\phi} \left( \mathbf{M}_s \cdot \frac{1}{\tau^{\text{ext}}} \boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}}(\phi) \right) = \mathbf{M}_s \cdot \left( \cos \phi_s^{\max} (\mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_x) - \sin \phi_s^{\max} (\mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_z + \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_y) \right). \quad (4.3)$$

Darüber hinaus gibt der Winkel  $\phi_s^{\max}$  auch die Orientierung der spannungsfreien Achse auf dem jeweiligen Gleitsystem bzw. dessen Repräsentanten an. An dieser Linie würde sich eine einzelne Versetzung bei einer reinen externen Belastung ohne Wechselwirkungen mit anderen Versetzungen aufstauen. Es sei angemerkt, dass die Wechselwirkungen und Reaktionen mit Versetzungen anderer Gleitsysteme die Position und Orientierung der akkumulierten GNDs im System beeinflussen. Trotzdem soll diese theoretische Betrachtung zur Abschätzung der Zusammenhänge und des Systemverhaltens herangezogen werden.

Die Projektion der spannungsfreien Linie  $\mathbf{l}_s^{sf}$  des jeweiligen Gleitsystems auf den Querschnitt des Drahtes (Ebennormale in y-Richtung) kann über den Richtungsvektor  $\mathbf{e}_{\phi_s^{\max}} = (\cos \phi_s^{\max}, 0, -\sin \phi_s^{\max})^T$  angegeben werden und verläuft durch die Torsionsachse. Zur

**Tabelle 4.4:** Angabe der Winkel, unter denen die maximalen Schmid-Faktoren auf den jeweiligen Gleitsystemen auftreten, sowie der Zusammensetzung fiktiver *GNDs* parallel zu den jeweiligen spannungsfreien Linien auf den einzelnen Gleitebenen. Tabelle entnommen aus [Zoller et al. (2023)].

		B2	B4	B5	C1	C3	C5	A2	A3	A6	D1	D4	D6
$\langle 100 \rangle$	$\phi_s^{max}$	0°	45°	90°	0°	135°	90°	0°	135°	90°	0°	45°	90°
	Schraube	25%	100%	25%	25%	100%	25%	25%	100%	25%	25%	100%	25%
	Stufe	75%	0%	75%	75%	0%	75%	75%	0%	75%	75%	0%	75%
$\langle 110 \rangle$	$\phi_s^{max}$	145°	35°	0°	35°	145°	0°	35°	35°	35°	145°	145°	145°
	Schraube	89%	89%	100%	89%	89%	100%	25%	25%	100%	25%	25%	100%
	Stufe	11%	11%	0%	11%	11%	0%	75%	75%	0%	75%	75%	0%
$\langle 111 \rangle$	$\phi_s^{max}$	120°	60°	0°	104°	76°	0°	120°	44°	16°	136°	60°	164°
	Schraube	100%	100%	100%	68%	68%	100%	100%	68%	68%	68%	100%	68%
	Stufe	0%	0%	0%	32%	32%	0%	0%	32%	32%	32%	0%	32%

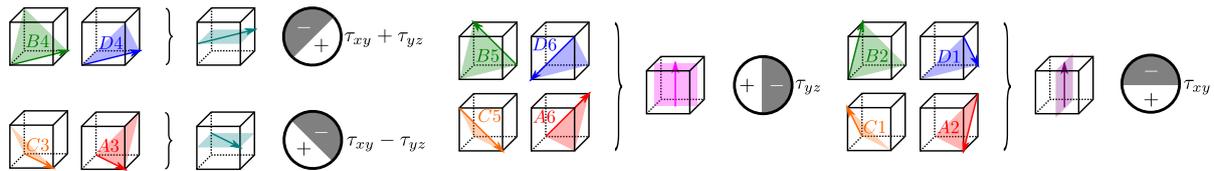
Angabe des Richtungsvektors der spannungsfreien Linie  $\mathbf{e}_{I_s^{sf}}$  auf der jeweiligen Gleitebene, welche ber den Normalenvektor charakterisiert wird, wird die y-Komponente bentigt. Die Berechnung erfolgt mittels den Restriktionen [Zoller et al. (2023)]:  $\mathbf{e}_{I_s^{sf}} \cdot \mathbf{m}_s = 0$  und  $\|\mathbf{e}_{I_s^{sf}}\| = 1$ . Die raumliche Orientierung der einzelnen Gleitsysteme und der jeweiligen spannungsfreien Linien in den Mikrodrahten unter Torsionsbelastung ist in Abbildung 4.6 fur die verschiedenen Kristallorientierungen dargestellt.

Unter Berucksichtigung der Orientierung der Burgersvektoren ergibt sich der Schraubenanteil einer fiktiven GND parallel zur spannungsfreien Linie auf den einzelnen Gleitebenen zu:  $(\mathbf{e}_{I_s^{sf}} \cdot \mathbf{d}_s)^2$ . Die resultierenden Schrauben- und Stufenanteile fur die verschiedenen Gleitsysteme in Abhangigkeit von der Kristallorientierung sind in Tabelle 4.4 aufgelistet. So werden z. B. fur eine  $\langle 100 \rangle$  Kristallorientierung fur das Gleitsystem B4 reine Schraubenversetzungen und fur das Gleitsystem B5 ein Schraubenanteil von 25 % und ein Stufenanteil von 75 % fur die *GNDs* im Versetzungsaufstau vorhergesagt.

Die dazugehorige Berechnung wird im Folgenden beispielhaft fur das Gleitsystem B5 fur eine  $\langle 100 \rangle$  Kristallorientierung detailliert angegeben. Aus  $\phi_{B5}^{max} = 90^\circ$  folgt, dass die auf den Querschnitt des Drahtes projizierte spannungsfreie Linie parallel zur z-Achse verlauft:  $\mathbf{e}_{\phi_{B5}^{max}} = (0, 0, -1)^T$ . Der Richtungsvektor der spannungsfreien Linie ist zunachst unbekannt und wird unter Verwendung zweier Variablen zu  $\mathbf{e}_{I_{B5}^{sf}} = c^{\text{norm}} (0, c_y, -1)^T$  definiert. Aus der Restriktion  $\mathbf{e}_{I_{B5}^{sf}} \cdot \mathbf{m}_{B5} = \frac{c^{\text{norm}}}{\sqrt{2}} (c_y - 1) = 0$  folgt  $c_y = 1$  und aus  $\|\mathbf{e}_{I_{B5}^{sf}}\| = \|c^{\text{norm}} (0, 1, -1)^T\| = 1$  folgt anschlieend  $c^{\text{norm}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ . Der Schraubenanteil einer fiktiven GND parallel zur spannungsfreien Linie auf dem Gleitsystem B5 ergibt sich schlielich zu  $(\mathbf{e}_{I_{B5}^{sf}} \cdot \mathbf{d}_{B5})^2 = (\frac{1}{\sqrt{2}} (0, 1, -1)^T \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (-1, 1, 0)^T)^2 = 25\%$ .

**Tabelle 4.5:** Gleitsystemgruppen basierend auf dem Schmid-Faktor und möglicher Versetzungsreaktionen in Abhängigkeit von der Kristallorientierung. Hierbei wird die Anzahl an Gleitsystemgruppen mit  $\tilde{S}$  und die Gruppe mit den höchsten Schmid-Faktoren als primäre Gleitsystemgruppe bezeichnet. Übersetzte Tabelle aus [Zoller et al. (2023)].

Orientierung	$\tilde{S}$	Primäre Gruppe	Weitere Gleitsystemgruppen
$\langle 100 \rangle$	2	{B4,C3,A3,D4}	{B2,B5,C1,C5,A2,A6,D1,D6}
$\langle 110 \rangle$	4	{A6,D6}	{B5,C5}, {A2,A3,D1,D4}, {B2,B4,C1,C3}
$\langle 111 \rangle$	3	{B2,B4,B5}	{C1,C3,A3,A6,D1,D6}, {C5,A2,D4}

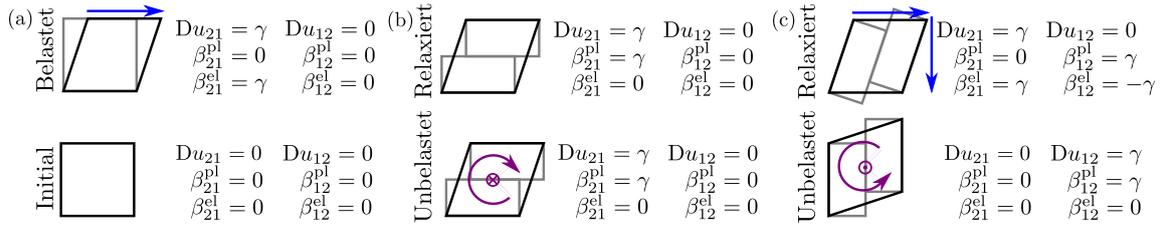


**Abbildung 4.7:** Interaktion der Gleitsystemaktivitäten infolge der lokal variierenden Torsionsspannungskomponenten des Mikrodrahtes und deren repräsentative fiktive Gleitsysteme für die  $\langle 100 \rangle$  Orientierung. Abbildung mit geänderter Anordnung entnommen aus [Zoller und Schulz (2020)].

Eine Klassifizierung der Gleitsysteme in Abhängigkeit von der Kristallorientierung kann auf der Grundlage der Schmid-Faktoren (siehe Tabelle 4.3) unter Berücksichtigung der möglichen Versetzungsreaktion zwischen den einzelnen Gleitsystemen (siehe Abbildung 3.2) vorgenommen werden. Der Einfluss der potentiellen Versetzungsreaktionen auf die Klassifikation wird für die  $\langle 110 \rangle$  Kristallorientierung und die Gleitsysteme A2 und B2 deutlich. Beide Gleitsysteme besitzen denselben Schmid-Faktor, unterscheiden sich aber in ihrer Beziehung zu den Gleitsystemgruppen {A6,D6} und {B5,C5}, welche unterschiedliche Schmid-Faktoren aufweisen. Die resultierenden Gleitsystemgruppen sind in Tabelle 4.5 aufgelistet.

Die aus den Gleitsystemaktivitäten resultierenden plastischen Verformungen lassen sich jeweils nach Gleichung 3.3 zusammenfassen und unter der Annahme einer gleichgroßen Gleitsystemaktivität durch ein nur für die plastische Verformung repräsentatives fiktives Gleitsystem veranschaulichen [Zoller und Schulz (2020)]. Hierbei müssen die lokalen Unterschiede der Gleitsystemaktivitäten beachtet werden, welche sich in den Vorzeichen der lokalen Schmid-Faktoren aufgrund des inhomogenen Spannungsfeldes widerspiegeln. Dies ist in Abbildung 4.7 für die  $\langle 100 \rangle$  Kristallorientierung dargestellt, wobei auch die für die jeweilige Gleitsystemaktivität relevanten Kombinationen der Schubspannungskomponenten und deren Ausprägung im Drahtquerschnitt illustriert sind.

Hierbei wird deutlich, dass die resultierende plastische Verformung der zwei identifizierten Gleitsystemgruppen, welche sich aufgrund des Spannungsfeldes wiederum in



**Abbildung 4.8:** Darstellung der beiden mglichen Spannungsrelaxationsmechanismen mittels plastischer Verformung ((a) $\rightarrow$ (b) und (a) $\rightarrow$ (c) bzw. *Initial*  $\rightarrow$  *Belastet*  $\rightarrow$  *Relaxiert*  $\rightarrow$  *Unbelastet*) und die Auswirkungen auf die bleibende Missorientierung. Die verformte Struktur ist in schwarz, die elastische Verformung durch blaue Pfeile, die plastische Verformung durch graue Linien und die durch die plastische Verformung induzierte Missorientierung durch violette Pfeile dargestellt. bersetzte Abbildung aus [Zoller et al. (2023)].

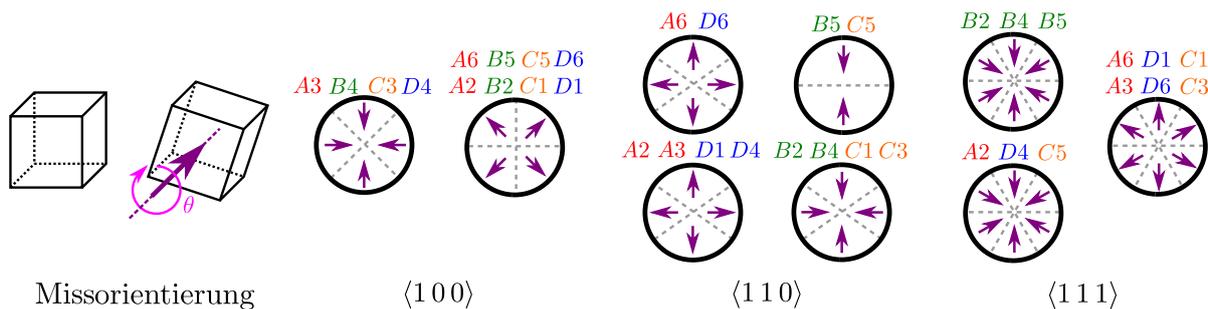
zwei Untergruppen aufteilen lassen, jeweils auf einer unterschiedlich orientierten Ebene stattfindet: {B4,C3,A3,D4} in der zur Belastungsebene parallelen x,z-Ebene und {B2,B5,C1,C5,A2,A6,D1,D6} in der zur Belastungsebene senkrechten y,x- bzw. y,z-Ebene [Zoller und Schulz (2020)]. Die zwei mglichen Schubspannungsrelaxationsmechanismen werden in Abbildung 4.8 fr ein vereinfachtes System thematisiert und deren Auswirkungen auf die bleibende Missorientierung (Berechnung siehe A.1.1 im Appendix) untersucht. Die Schubspannungsrelaxation (*Belastet*  $\rightarrow$  *Relaxiert* in Abbildung 4.8) erfolgt dabei wie folgt [Zoller und Schulz (2020)]:

- (I) Die effektive Gleitsystemaktivitt findet in einer Ebene parallel zur Belastungsebene statt, so dass die elastische Verformung (siehe  $\beta_{21}^{el}$  in (a)) in eine plastische Verformung transformiert wird (siehe  $\beta_{21}^{pl}$  in (b)).
- (II) Die effektive Gleitsystemaktivitt findet in einer Ebene senkrecht zur Belastungsebene statt, so dass ein zustzlicher, elastischer Gegenpart (siehe  $\beta_{12}^{el}$  in (c)) zur Scherbelastung (siehe  $\beta_{21}^{el}$  in (a) und (c)) entsteht. Der schiefsymmetrische Charakter des elastischen Verschiebungsgradienten fhrt zu einer entsprechenden Rotation der Konfiguration. Da der elastische Verzerrungstensor den symmetrischen Teil des elastischen Verschiebungsgradienten beschreibt, heben sich die beiden transponierten Komponenten auf und das Kontinuum ist spannungsfrei.

Nach der Entlastung verbleibt die plastische Verformung des Materials, wobei der schiefsymmetrische Anteil eine Rotation des Materials beschreibt. Wie in Abbildung 4.8 ersichtlich unterscheidet sich die Richtung der Rotationsachse fr die Missorientierung zwischen den beiden Relaxationsmechanismen. Diese zeigt hier fr den Relaxationsmechanismus (I) in die Zeichenebene hinein und fr (II) hinaus. Es sei angemerkt, dass die Richtung auch von der Belastungsrichtung abhngig ist.

Basierend darauf, dass sich, wie oben diskutiert, der resultierende Relaxationsmechanismus zwischen den verschiedenen Gleitsystemgruppen unterscheidet, lässt sich folgende Hypothese ableiten [Zoller et al. (2023)]: Für einen bekannten Belastungszustand lassen sich die jeweils aktiveren Gleitsystemgruppen anhand der Richtung der Rotationsachsen der Missorientierung identifizieren. Es sei angemerkt, dass anhand dieses Kriteriums nicht auf die absolute Gleitsystemaktivität bzw. -inaktivität geschlossen werden kann, sondern lediglich im Vergleich zu den anderen Gleitsystemgruppen. Trotzdem ermöglicht dies, die Gleitsystemaktivitäten abzuschätzen, indem die Richtung der Rotationsachsen in experimentellen Aufbauten gemessen wird.

Somit lassen sich weitere Erkenntnisse über die Mikrostrukturevolution erzielen, die z. B. über die Identifikation der aktiven Gleitebenen mittels der Versetzungsstufen auf *REM*-Aufnahmen hinaus gehen. Abbildung 4.9 gibt einen Überblick über die theoretisch ermittelten Richtungen der Rotationsachsen der infolge der Gleitsystemaktivitäten resultierenden Missorientierung für die verschiedenen Gleitsystemgruppen in Abhängigkeit von der Kristallorientierung für den Mikrodraht unter Torsionsbelastung.



**Abbildung 4.9:** Darstellung der theoretisch ermittelten Richtungen der Rotationsachsen der infolge der Gleitsystemaktivitäten resultierenden Missorientierung für die verschiedenen Gleitsystemgruppen in Abhängigkeit von der Kristallorientierung für den Mikrodraht unter Torsionsbelastung. Bearbeitete Abbildung aus [Zoller et al. (2023)].

## 5. Ergebnisse der Mikrostrukturentwicklung

Im Folgenden werden die im Zuge dieser Arbeit erzielten Ergebnisse zur Mikrostrukturentwicklung dargelegt. Der Fokus der Untersuchungen liegt hierbei auf den Gleitsystemaktivitäten sowie ihren Auswirkungen und gegenseitigen Interaktionen. Die wesentlichen Fragestellungen dieser Untersuchungen lauten:

- Wie werden die Gleitsysteme aktiviert und wie wirken sich die Gleitsystemaktivitäten auf die Zusammensetzung und Konfiguration der Versetzungsdichte, insbesondere der *GND*-Dichte, in den untersuchten Systemen aus?
- In Kapitel 4 wurden Klassifikationen der Gleitsysteme basierend auf den Schmid-Faktoren und möglichen Versetzungsreaktionen für die betrachteten Systeme und Kristallorientierungen theoretisch abgeleitet. Lassen sich diese Klassifikationen der Gleitsysteme in den Simulationen bestätigen?
- Lassen sich Aussagen über die Gleitsystemaktivitäten anhand der auch experimentell messbaren lokalen Missorientierungen im Material treffen?
- Führt der interne Versetzungsaufstau zu einem Größeneffekt?

Zur Klärung der Fragestellungen werden sowohl *CDD*-Simulationen als auch datengetriebene Analysemethoden auf bestehende *DDD*-Datensätze angewendet. Sofern nicht anderweitig angegeben, beziehen sich Kurvenverläufe von extensiven Größen, wie z. B. die Versetzungsanzahl, auf das Gesamtsystem und Kurvenverläufe von intensiven Größen, wie z. B. Versetzungsdichten, werden über das Gesamtsystem gemittelt. Räumliche Verteilungen von Versetzungsdichten im Querschnitt von Mikrodrähten geben die Mikrostruktur auf Höhe der halben Drahtlänge wieder.

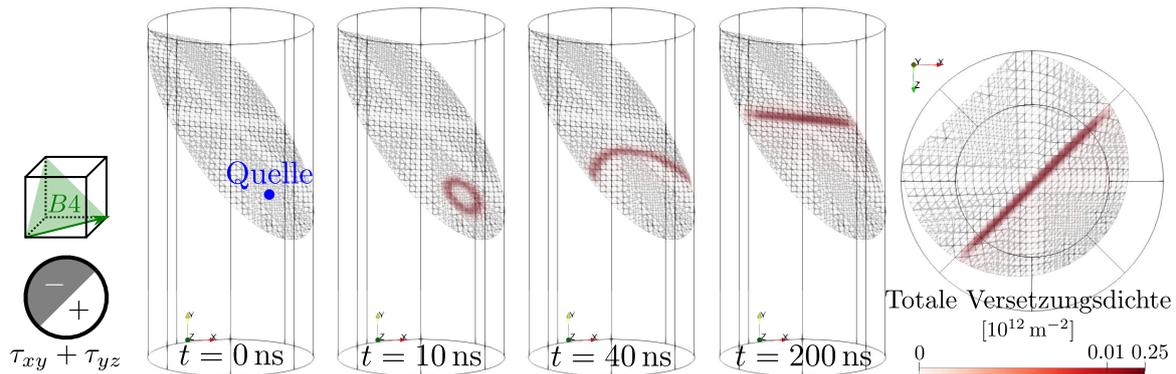
## 5.1 Aktivierung der Gleitsysteme

Im Folgenden wird die Aktivierung der einzelnen Gleitsysteme und die damit verbundene Versetzungsproduktion bzw. -multiplikation genauer betrachtet, welche durch die einhergehende Zunahme der Versetzungsdichte eine elementare Rolle in der Mikrostrukturevolution einnimmt.

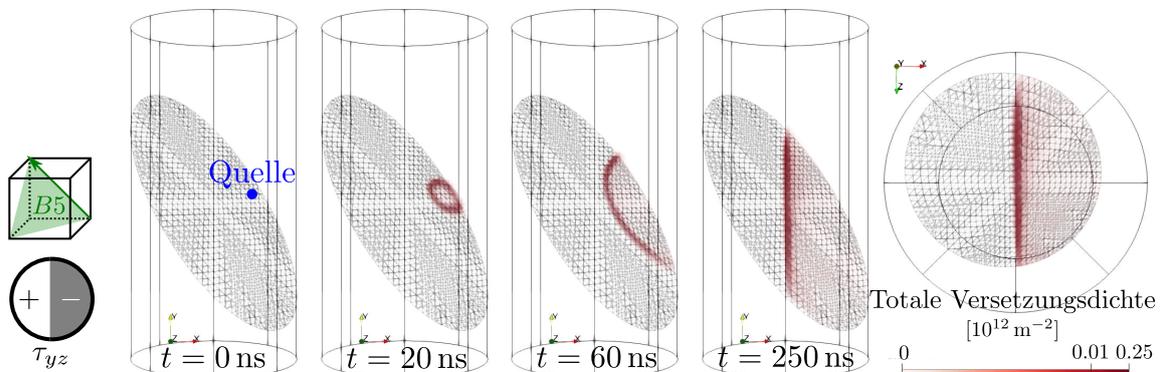
### 5.1.1. Lokale Versetzungsquellaktivität

Zur Erläuterung der Funktionsweise des eingeführten homogenisierten Quellmodells wird die lokale Versetzungsquellaktivität anhand eines  $\langle 100 \rangle$  orientierten Aluminium-Mikrodrahtes unter konstanter Torsionsbelastung untersucht, siehe Abbildung 4.5 (mit  $\phi = 2,4^\circ$ ). Hierzu wird die Mikrostrukturevolution infolge der einmaligen Aktivität einer einzelnen Versetzungsquelle auf einem einzelnen Gleitsystem in einem ansonsten versetzungsfreien System betrachtet. Es sei angemerkt, dass innerhalb des einzelnen Produktionszeitschrittes mehrere Versetzungen infolge der Aktivität der einzelnen Versetzungsquelle in dem Mittelungsvolumen gebildet werden können. Im Zuge der Homogenisierung wird die Bewegung des Ensembles an neu produzierten Versetzungen beschrieben, wobei die Kontinuumsformulierung die Rückspannung und Fließspannung berücksichtigt. Die Untersuchung dieses vereinfachten Systems liefert zudem Aufschluss über die durch das inhomogene Spannungsfeld induzierte Gleichgewichtskonfiguration der Versetzungen auf den jeweiligen Gleitsystemen. Die Ergebnisse dieses Unterabschnittes sind in dem wissenschaftlichen Artikel [Zoller und Schulz (2020)] veröffentlicht.

Wie in Abbildung 5.1 und 5.2 exemplarisch für Vertreter der zwei unterschiedlichen Gleitsystemgruppen, vgl. Tabelle 4.5, dargestellt, führt die Produktion an Krümmungsdichte infolge der Mikrostrukturevolution zu expandierenden Versetzungsringen. Die Versetzungen verlassen das System an der Oberfläche und stauen sich entsprechend der jeweiligen gleitsystemspezifischen neutralen Achse im Inneren des Drahtes auf. Im Vergleich der Gleitsysteme B4 und B5 wird zum einen deutlich, dass die Versetzungsdichte auf dem Gleitsystem B4 eine höhere Versetzungsgeschwindigkeit aufweist und die Gleichgewichtslage früher erreicht, vgl. die angegebenen Zeitpunkte. Zum anderen unterscheidet sich die Anordnung der Versetzungsdichten. Die Versetzungskonfiguration in der Gleichgewichtslage verläuft auf dem Gleitsystem B4 in dem Querschnitt senkrecht zur Torsionsachse und verläuft  $45^\circ$  geneigt zur z-Achse. Es handelt sich folglich um eine reine (negative) Schraubenversetzung, wohingegen die Versetzungskonfiguration auf dem Gleitsystem B5 einen



**Abbildung 5.1:** Evolution der totalen Versetzungsdichte infolge einer einmaligen lokalen Versetzungsquellaktivität auf dem Gleitsystem B4 für den Mikrodraht unter Torsion. Übersetzte Abbildung aus [Zoller und Schulz (2020)].



**Abbildung 5.2:** Analog zu Abbildung 5.1, jedoch für das Gleitsystem B5. Übersetzte Abbildung aus [Zoller und Schulz (2020)].

gemischten Charakter aufweist und nicht in dem Querschnitt senkrecht zur Torsionsachse zu lokalisieren ist.

Es sei angemerkt, dass eine Versetzungsquellaktivität auf der jeweiligen anderen Seite der neutralen Achse zur Produktion einer Krümmungsdichte mit entgegengesetztem Vorzeichen führen würde und folglich die im Zuge der Evolution ebenfalls an der neutralen Achse aufgestauten Versetzungen den gleichen Versetzungstyp wie die entsprechenden betrachteten Fälle besitzen würden, z. B. negative Schraubenversetzungen für das Gleitsystem B4.

### 5.1.2. Übergang der Versetzungsproduktion zur -multiplikation

Im Folgenden soll die Bedeutung der Versetzungsproduktion verglichen zur -multiplikation für die Gleitsystemaktivität in ausgewählten Systemen genauer untersucht werden. Hierbei wird von einer homogenen Verteilung von Versetzungsquellen im gesamten System ausgegangen, die bei entsprechenden Spannungszuständen aktiviert werden können. Aufgrund

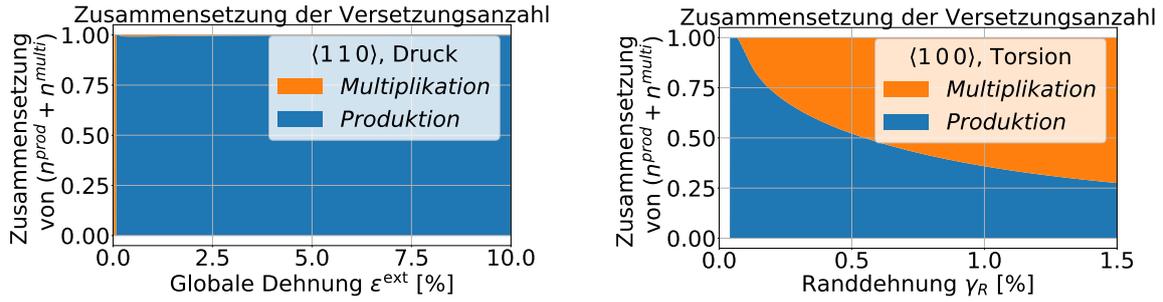
der verwendeten Formulierung, die keine differenzierte Zuteilung der plastischen Scherung bzw. mobilen Versetzungsdichte zu den jeweiligen Mechanismen der Versetzungsentstehung vornimmt, wird hier die Bedeutung der Versetzungsproduktion und -multiplikation über die Anzahl der jeweiligen entstandenen Versetzungsringe abgeschätzt. Die Anzahl der Versetzungsringe bezieht sich auf das Vielfache des  $2\pi$ -Winkelumlaufes der räumlich integrierten Größe der lokalen Richtungsänderungen eines Ensembles von gekrümmten Versetzungslinien in einem Mittelungsvolumen.

Es sei angemerkt, dass der Einfluss der Versetzungsringe auf die plastische Scherung nicht a priori bekannt ist, sondern von der (zukünftigen) Mikrostrukturentwicklung abhängig ist, wodurch z. B. auch die Lokalität der Versetzungsentstehung insbesondere für inhomogene Spannungsfelder einen wichtigen Einfluss haben kann. Dennoch wird im Folgenden die Anzahl der Versetzungsringe bzw. die Krümmungsdichte herangezogen, da diese infolge der Mikrostrukturevolution zu einer Zunahme der (mobilen) Versetzungsdichte führt, siehe Gleichung 3.5a oder Abbildung 5.1. Hierzu wird die Anzahl der auf dem betrachteten Gleitsystem infolge der Multiplikation entstandenen Versetzungen  $n_s^{\text{multi}}$  analog zur Anzahl der auf dem betrachteten Gleitsystem bisher produzierten Versetzungen, vgl.  $n_s^{\text{prod}}$  in Gleichung 3.19b, eingeführt und über alle Gleitsysteme aufsummiert zu einer einzelnen Größe zusammengefasst. Es sei darauf hingewiesen, dass es sich hierbei nicht um Änderungsraten sondern um über die Zeit integrierte Größen handelt, welche jeweils die entstandenen Versetzungsringe vom initialen bis zum aktuellen Zustand berücksichtigen. Es gilt:

$$n^{\text{multi}} = \sum_{s=1}^S n_s^{\text{multi}}, \quad n_s^{\text{multi}} = \frac{1}{2\pi} \int_t \iiint_V (\partial_t \bar{q}_s^{\text{gliss}} - \partial_t q_s^{\text{gliss}}) + (\partial_t \bar{q}_s^{\text{cross}} - \partial_t q_s^{\text{cross}}) dV dt. \quad (5.1a-b)$$

Die Zusammensetzung der infolge der Versetzungsproduktion und -multiplikation entstandenen Versetzungsringe soll im Zuge dieser Arbeit sowohl für einen  $\langle 110 \rangle$  orientierten Kupfer-Mikropillar unter Druckbelastung, siehe Abbildung 4.1, als auch einen  $\langle 100 \rangle$  orientierten Gold-Mikrodraht unter Torsionsbelastung, siehe Abbildung 4.5, untersucht werden. Für weitere Details bzgl. der initialen Mikrostruktur und Belastung sei auf die Unterabschnitte 5.3.1 und 5.3.3 verwiesen.

Hierbei wird, wie in Abbildung 5.3 gezeigt, eine starke Abhängigkeit der Bedeutung der Versetzungsproduktion verglichen mit der -multiplikation von der Kombination aus Kristallorientierung und Belastung deutlich. Für den betrachteten druckbelasteten Mikropillar lassen sich die neuen Versetzungen fast ausschließlich auf die Versetzungsproduktion zurückführen. Dahingegen ist für den betrachteten tordierten Mikrodraht lediglich im Anfangsbereich des elastisch-plastischen Übergangs die Versetzungsproduktion hauptsächlich für den Anstieg der Anzahl von Versetzungsringen verantwortlich. Im Laufe der Belastung



**Abbildung 5.3:** Evolution der Zusammensetzung der infolge der Versetzungsproduktion und -multiplikation entstandenen Versetzungsringe für einen  $\langle 110 \rangle$  orientierten Mikropillar unter Druckbelastung (links) und einen  $\langle 100 \rangle$  orientierten Mikrodraht unter Torsionsbelastung (rechts).

nimmt der Anteil der Versetzungsmultiplikation zu und übersteigt ab einer Randdehnung von  $\gamma_R \approx 0.5\%$  den Anteil der Versetzungsproduktion. Am Ende der betrachteten Belastung ( $\gamma_R \approx 1.5\%$ ) beträgt der Anteil der Versetzungsmultiplikation an den entstandenen Versetzungsringen  $\frac{n^{multi}}{(n^{prod} + n^{multi})} \approx 75\%$ .

## 5.2 Einfluss der Gleitsystemaktivität auf Versetzungsnetzwerkcharakteristiken

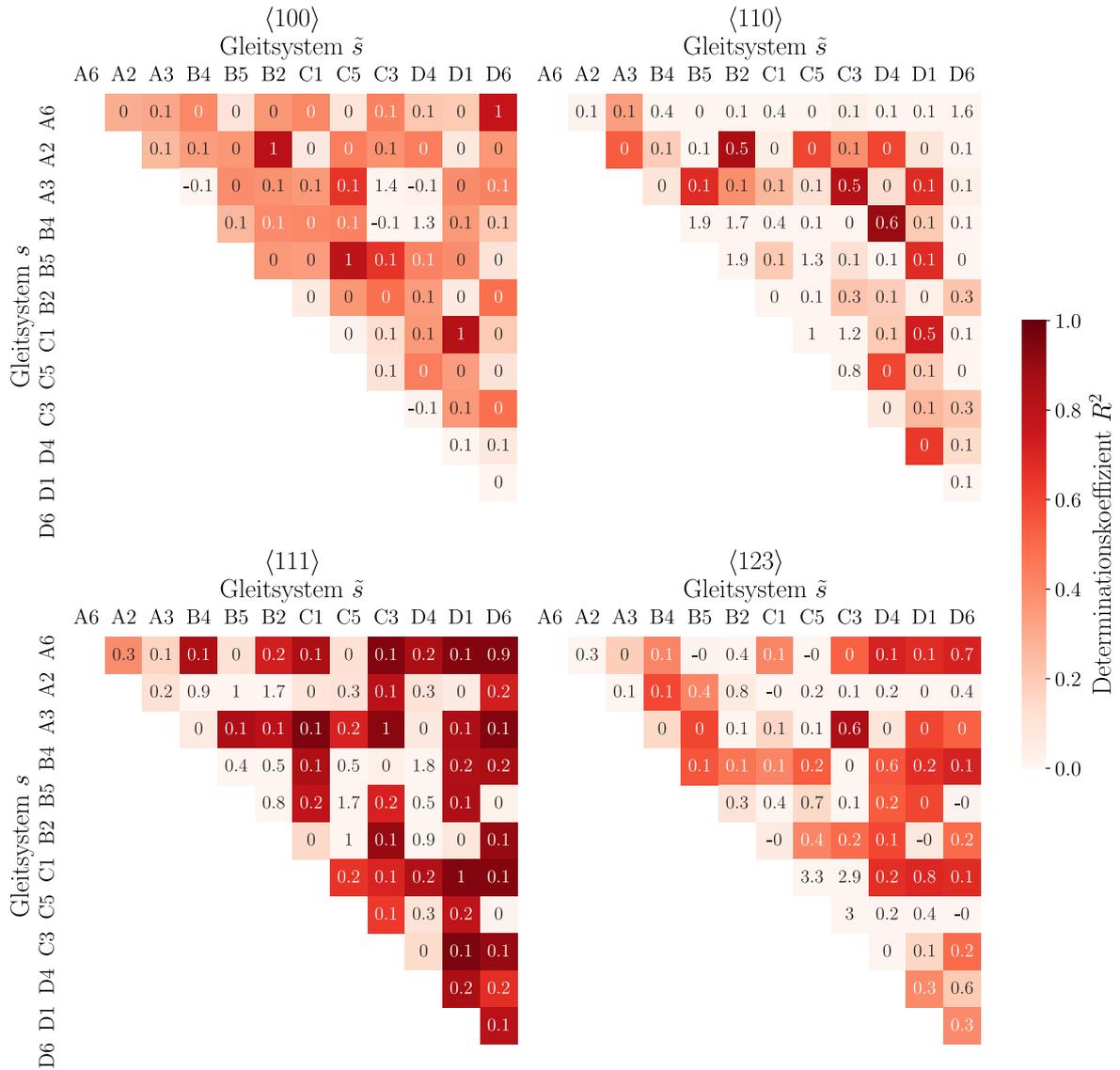
Im vorherigen Kapitel wurde ein u. U. wachsender Einfluss von Versetzungsreaktionen an der Mikrostrukturentwicklung identifiziert, wobei Versetzungsreaktionen im Allgemeinen nicht nur Multiplikationsprozesse sondern auch Prozesse der Annihilation und der Bildung von stabilen Versetzungsnetzwerken umfassen. Hierbei ist die Bedeutung der einzelnen Gleitsystemaktivitäten für das Gesamtverhalten noch ungewiss. Deshalb werden im Folgenden datengetriebene Analysemethoden, siehe Abschnitt 3.5, auf bestehende *DDD*-Datensätze angewendet, um den Einfluss der Gleitsystemaktivität auf charakteristische Versetzungsnetzwerkgrößen zu identifizieren. Der Fokus der Untersuchung liegt dabei zum einen auf der Neubildung von Versetzungsreaktionen, welche über die Versetzungsreaktionsdichten, siehe Gleichung 3.25, beschrieben werden. Zum anderen werden die Längenverteilungen jener Versetzungssegmente analysiert, die unmittelbar mit einer bereits bestehenden Lomer-Verbindung verbunden sind. Diese werden in dieser Arbeit als sogenannte Lomerarme bezeichnet und haben großen Einfluss auf die Stabilität des Versetzungsnetzwerkes, siehe Abschnitt 3.3 bzw. Gleichung 3.26. Die betrachteten *DDD*-Datensätze beschreiben einen Kubus mit der Seitenlänge  $a = 5\ \mu\text{m}$  aus einkristallinem Aluminium unter einachsiger Zugbelastung. Die aufgebrachte Dehnrates beträgt  $\partial_t \epsilon^{ext} = 5 \times 10^3\ 1/s$  und die aufgebrachte Dehnung erreicht Werte bis zu  $\epsilon^{ext} \leq 0,5\%$ . Es werden drei hochsymmetrische Orientierungen,  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$ , sowie eine nicht hochsymmetrische Orientierung,  $\langle 123 \rangle$ ,

mit je sechs unterschiedlichen initialen Mikrostrukturen untersucht, deren Versetzungsdichten im Bereich von  $1,0 - 1,5 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$  liegen. Folglich umfasst der *DDD*-Datensatz insgesamt 24 einzelne Simulationen. Für eine detaillierte Beschreibung der verwendeten *DDD*-Formulierung sei auf Weygand und Gumbsch (2005), Weygand et al. (2002), sowie El-Achkar und Weygand (2019) verwiesen.

### 5.2.1. Identifikation von Versetzungsreaktionskonstanten

In diesem Abschnitt werden die Versetzungsreaktionen, siehe Reaktionsmatrix in Abbildung 3.2, in dem Versetzungsnetzwerk untersucht. Zur besseren Interpretierbarkeit und Übertragbarkeit der Ergebnisse in eine Kontinuumsformulierung wird hierbei der modifizierte, homogenisierte *DDD*-Datensatz, siehe Workflow in Abbildung 3.3, herangezogen, um mittels maschinellen Lernens die Änderungsrate der Versetzungsreaktionsdichte vorherzusagen, siehe Gleichung 3.25. Hierbei stellen die Versetzungsreaktionskonstanten die jeweiligen Regressionskoeffizienten dar und werden für die jeweiligen Reaktionspaarungen in Abhängigkeit von der Kristallorientierung einzeln bestimmt:  $C^{\text{react}} \rightarrow C_{ss}^{\text{react}}$ . Die Ergebnisse dieses Unterabschnittes sind in dem wissenschaftlichen Artikel [Katzner et al. (2022)] veröffentlicht.

Es sei angemerkt, dass aufgrund der Datenstruktur des homogenisierten *DDD*-Datensatzes gewisse Versetzungsreaktionsdichten gruppiert und deren Änderungsrate gemeinsam vorhergesagt werden. Dies gilt zum einen für die gleitfähige Reaktion, bei der die Einzelbeiträge der beiden Reaktionspaarungen an der Versetzungsreaktionsdichte nicht separiert betrachtet werden können. So enthält z. B. die Versetzungsreaktionsdichte infolge der gleitfähigen Reaktion auf dem Gleitsystem B2 sowohl die Versetzungsreaktionsdichte der Gleitsystempaarung {B4,C5} als auch {B5,D4}. Zum anderen gilt dies auch für die Lomer-Reaktion, bei der sich jeweils geschlossene Dreiergruppen finden lassen, die bei der Lomer-Reaktion jeweils paarweise miteinander reagieren, z. B. {B2,C3,D6}. Des Weiteren wird die Selbstinteraktion in dieser Arbeit nicht näher betrachtet. Dahingegen wird der Quergleitmechanismus ebenfalls entsprechend der Gleichung 3.25 untersucht, obwohl dieser nicht auf der Kollision zweier Versetzungen beruht und daher die physikalische Motivation der Modellformulierung nicht direkt gegeben ist. Hierdurch soll u. a. die Sensibilität bei der Interpretation der Ergebnisse geschärft werden. Folglich werden pro Kristallorientierung jeweils 40 Änderungsraten der Versetzungsreaktionsdichten (je 12 infolge der gleitfähigen und koplanaren Reaktion, je 6 infolge der kollinearen Reaktion und des Quergleitmechanismus, sowie 4 infolge der Lomer-Reaktion) vorhergesagt. Zur Bewertung der Vorhersagegüte werden die im homogenisierten *DDD*-Datensatz enthaltenen Versetzungsreaktionsdichten als wahre Werte herangezogen.



**Abbildung 5.4:** Darstellung der ermittelten Versetzungsreaktionskonstanten sowie die dazugehörigen Vorhersagegüten als *Heatmap* für die unterschiedlichen Kristallorientierungen:  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  und  $\langle 123 \rangle$ . Der farbige Hintergrund gibt den Determinationskoeffizienten wieder. Dieser reicht von negativen Werten, welche hier bei  $R^2 = 0$  abgeschnitten wurden, bis  $R^2 = 1$ , wobei weiße Felder eine schlechte Vorhersage und rote Felder eine gute Vorhersage kennzeichnen. Die jeweiligen ermittelten Reaktionskoeffizienten sind in den einzelnen Quadraten angegeben. Übersetzte Abbildung aus [Katzner et al. (2022)].

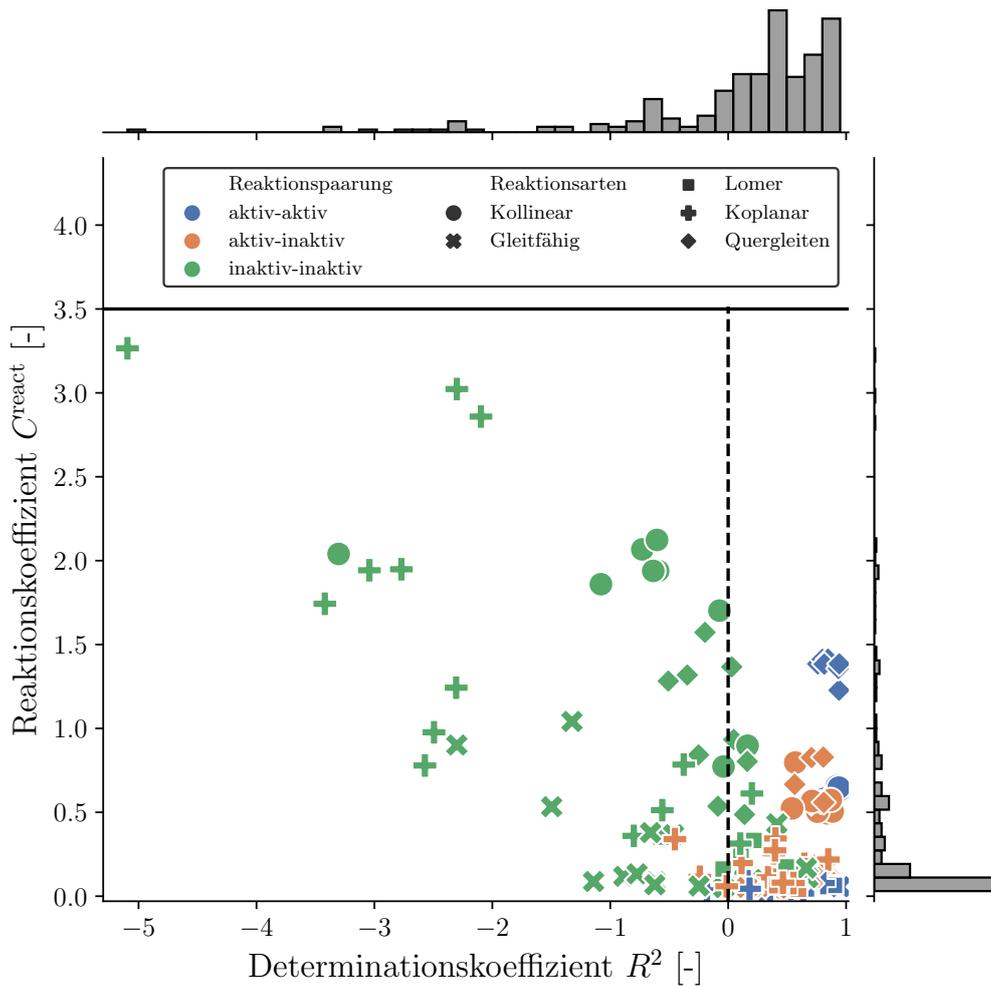
In Abbildung 5.4 sind die ermittelten Versetzungsreaktionskonstanten sowie die dazugehörigen Vorhersagegüten als *Heatmap* für die unterschiedlichen Kristallorientierungen dargestellt, wobei aufgrund der Symmetrie der Reaktionsmatrix lediglich die Hälfte der Einträge dargestellt ist. Die Reaktionskoeffizienten der Hirth-Reaktionen tendieren in allen Orientierungen gegen Null und nehmen damit die kleinsten Werte unter den verschiedenen Reaktionen an. Hierbei deuten die teils negative Reaktionskoeffizienten der Hirth-Reaktionen darauf hin, dass in diesen Fällen mehr existierende Hirth-Verbindungen aufbrechen als neu ausgebildet werden. Aufgrund des seltenen Ereignisses von Hirth-Reaktionen, was konsistent zu Beobachtungen in *DDD*-Simulationen in Stricker et al. (2018) und Sills et al. (2018) ist, werden diese im Folgenden nicht weiter analysiert.

Dahingegen treten die größten Reaktionskoeffizienten in  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  für die kollineare Reaktion und in  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 123 \rangle$  für die koplanare Reaktion auf und erreichen Werte bis zu 3,3. Insgesamt wird eine Streuung sowohl der Werte der Reaktionskoeffizienten als auch der Vorhersagegüte für die einzelnen Reaktionen in allen untersuchten Kristallorientierungen deutlich.

Um mögliche Ursachen der Streuung der Reaktionskoeffizienten und Vorhersagegüte zu untersuchen wird die Hypothese aufgestellt, dass diese nicht zufallsbedingt ist, sondern von der Gleitsystemaktivität der involvierten Gleitsysteme abhängig ist:  $C_{s\bar{s}}^{\text{react}} \rightarrow C_{m_s m_{\bar{s}}}^{\text{react}}$ . Zur Überprüfung der Hypothese wird eine Klassifikation der Gleitsystempaarungen anhand der Schmid-Faktoren vorgenommen, wobei hier Gleitsysteme mit  $m_s \geq 0.25$  als aktiv betrachtet werden. Der Grenzwert wurde derart gewählt, dass für den betrachteten Datensatz ein von der Orientierung unabhängiges Kriterium aufgestellt wird, das auch für die  $\langle 111 \rangle$  Orientierung ( $m_s \in \{0, 0.27\}$ ) eine Unterteilung der Aktivität entsprechend der im *DDD*-Datensatz beobachteten plastischen Scherung auf den Gleitsystemen erlaubt. In Abbildung 5.5 sind die Reaktionskoeffizienten über die Vorhersagegüte aufgetragen, wobei die Klassifizierung durch die Verwendung unterschiedlicher Farben visualisiert ist.

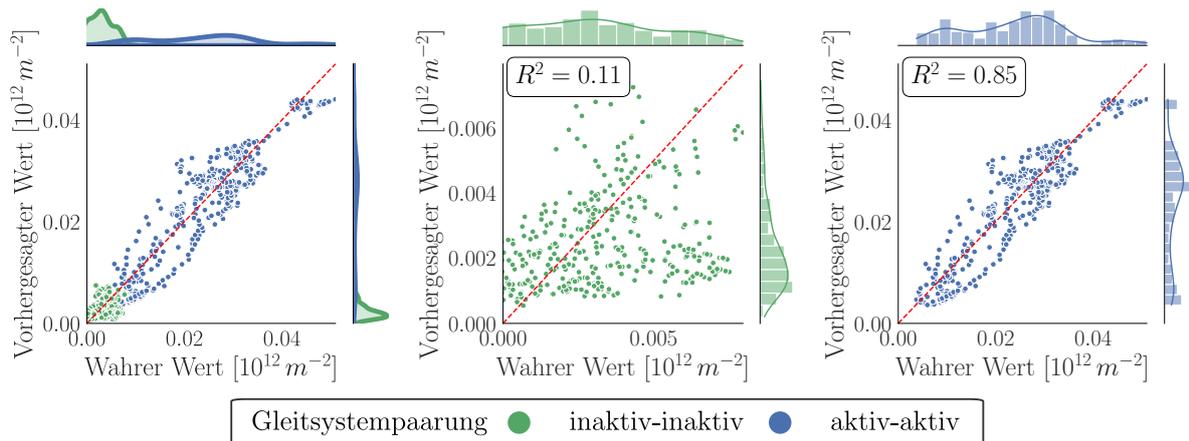
Hierbei ist zu erkennen, dass Reaktionen zwischen inaktiven Gleitsystempaarungen verglichen zu der Beteiligung aktiver Gleitsysteme eine größere Streuung in den Reaktionskoeffizienten und kleinere Determinationskoeffizienten, welche mit einer schlechteren Vorhersagegüte verbunden sind, aufweisen. Zudem nehmen die Reaktionskoeffizienten für inaktiven Gleitsystempaarungen tendenziell höhere Werte an.

Um die Unterschiede zwischen den Aktivitätsklassen genauer zu beleuchten, werden beispielhaft Lomer-Reaktionen für eine  $\langle 111 \rangle$  Orientierung detaillierter betrachtet. Hierzu werden in Abbildung 5.6 die vorhergesagten Raten der Versetzungsreaktionsdichten über den wahren Werten des *DDD*-Datensatzes sowohl für ausgewählte aktive ( $\{A6, B4, C1\}$ , von denen  $\{A6, C1\}$  aktiv sind) als auch inaktive ( $\{A2, C5, D4\}$ ) Gleitsystempaarungen



**Abbildung 5.5:** Darstellung der Reaktionskoeffizienten über die Vorhersagegüte, siehe Abbildung 5.4, unter Visualisierung der Klassifikation der Gleitsystempaarungen anhand der Schmid-Faktoren der involvierten Gleitsysteme. Die Verteilungen der Determinations- und Reaktionskoeffizienten sind jeweils auf der oberen und rechten Achse aufgetragen. Übersetzte Abbildung aus [Katzner et al. (2022)].

aufgetragen. Hier wird zum einen ersichtlich, dass die Raten der Versetzungsreaktionsdichten für die aktive Gleitsystempaarung die der inaktiven um ungefähr eine Größenordnung übersteigt. Zum anderen unterscheiden sich die Güte der Vorhersage stark. Während die aktiven Gleitsystempaarungen einen Determinationskoeffizienten von  $R^2 = 0.85$  aufweisen, liegt dieser bei den inaktiven Gleitsystempaarungen bei  $R^2 = 0.11$  und damit deutlich unterhalb der Vorhersagegüte der aktiven Gleitsystempaarungen. Die anderen Versetzungsreaktionen, wie z. B. die gleitfähigen Reaktionen, verhalten sich ähnlich zu den hier gezeigten Lomer-Reaktionen.

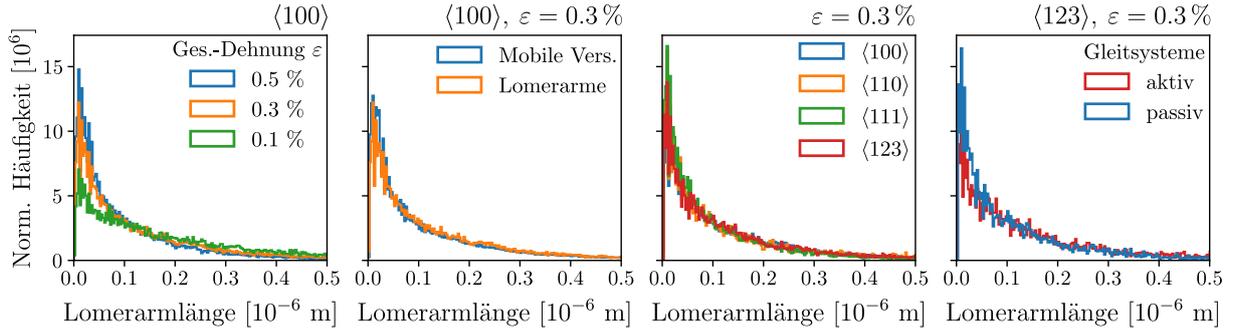


**Abbildung 5.6:** Abbildung der vorhergesagten Raten der Versetzungsreaktionsdichten über die wahren Werte des *DDD*-Datensatzes für Lomer-Reaktionen in einer  $\langle 111 \rangle$  Orientierung zwischen ausgewählten aktiven (blau) und inaktiven Gleitsystemen (grün). Diese werden links gemeinsam abgebildet und in der Mitte bzw. rechts isoliert betrachtet. Die rot gestrichelte Linie gibt die perfekte Vorhersage an. Bearbeitete Abbildung aus [Katzner et al. (2022)].

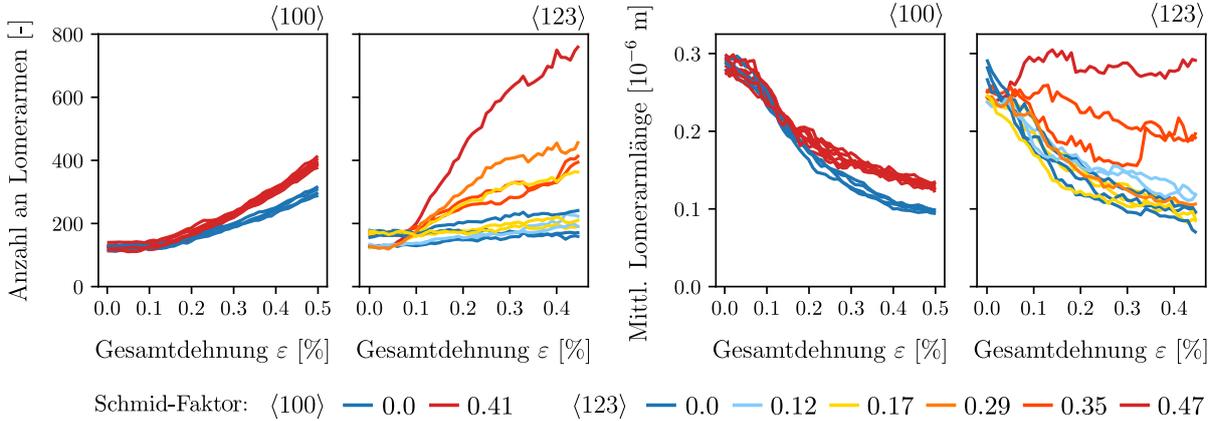
### 5.2.2. Identifikation der Versetzungslängen von Lomerarmen

Nachdem im vorherigen Kapitel u. a. die Neubildung von Lomer-Reaktionen untersucht wurde, widmet sich dieses Kapitel der Stabilität bereits gebildeter Lomer-Verbindungen. Hierzu wird der Fokus auf die Längenverteilung nicht der immobilen Lomer-Verbindung selbst, sondern der Lomerarme gelegt. Grundlage der deskriptiven Datenanalyse bildet hierbei die diskreten *DDD*-Datensätze, siehe Workflow in Abbildung 3.3.

Um Einblicke in die Allgemeingültigkeit und Abhängigkeiten der späteren Untersuchungen zu erhalten, wird im ersten Schritt der Einfluss der Versetzungsart, der Kristallorientierung und der Gleitsystemaktivität auf die Lomerarmlängen untersucht. In Abbildung 5.7 sind die normalisierten Häufigkeiten der im System enthaltenen Versetzungslängen der Lomerarme für ausgewählte Systeme und Zeitpunkte als Histogramme dargestellt. Hierbei lässt sich bereits im Anfangsbereich der Materialverformung ( $\varepsilon = 0,1\%$ ) der  $\langle 100 \rangle$  Orientierung eine Tendenz hin zu kürzeren Lomerarmen kleiner als  $0,1 \mu\text{m}$  erkennen. Im Zuge der Mikrostrukturevolution verstärkt sich diese Ausprägung hin zu kleineren Versetzungslängen, vgl. die Histogramme für  $\varepsilon \in \{0,1; 0,3; 0,5\}$ . Sowohl die Lomerarme, welche ca. 20 – 30 % aller potentiell mobilen Versetzungen darstellen, als auch alle potentiell mobilen Versetzungen weisen eine qualitativ gleiche Längenverteilung auf. Darüber hinaus lässt sich diese qualitative Ausprägung der Längenverteilung bei allen betrachteten Kristallorientierungen und sowohl für aktive als auch inaktive Gleitsysteme der  $\langle 123 \rangle$  Orientierung beobachten. Jedoch weist die normierte Längenverteilung der Lomerarme auf aktiven Gleitsystemen verglichen zu denen auf inaktiven Gleitsystemen weniger kurze Versetzungssegmente auf.



**Abbildung 5.7:** Histogramme zu den Versetzungslängen-Verteilungen der Lomerarme für ausgewählte Systeme und Zeitpunkte unter Differenzierung der Versetzungsart, der Kristallorientierung und Gleitsystemaktivität. Hierbei werden Lomerarmen größer als  $0,5 \mu\text{m}$  aufgrund ihrer geringen Häufigkeit nicht abgebildet. Sofern nicht anders angegeben, beziehen sich die Längenverteilungen auf eine  $\langle 100 \rangle$  Orientierung. Das Histogramm zur Gleitsystemaktivität bezieht sich auf die  $\langle 123 \rangle$  Orientierung.



**Abbildung 5.8:** Evolution der Anzahl der Lomerarme und der mittleren Lomerarmlänge in Abhängigkeit von dem Schmid-Faktor der jeweiligen Gleitsysteme für die  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 123 \rangle$  Orientierung.

Um Aufschluss über den Einfluss der Gleitsystemaktivität auf die Lomerarme zu erhalten, werden die Anzahl an Lomerarmen und die mittlere Lomerarmlänge als charakteristische Größen sowohl für die hochsymmetrische Orientierung  $\langle 100 \rangle$  als auch die nicht-hochsymmetrische Orientierung  $\langle 123 \rangle$  untersucht. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.8 abgebildet. Hierbei lassen sich Unterschiede in Abhängigkeit von der Gleitsystemaktivität feststellen, welche für die  $\langle 123 \rangle$  Orientierung stärker ausgeprägt sind verglichen mit der  $\langle 100 \rangle$  Orientierung. Während die initiale Mikrostruktur auf allen Gleitsystemen eine ähnliche Anzahl an Lomerarmen und mittlere Lomerarmlänge aufweist, nimmt die Anzahl an Lomerarmen im Zuge der Mikrostrukturevolution tendenziell für aktive Gleitsysteme stärker zu als für inaktive und die Verkürzung der mittlere Lomerarmlänge fällt auf aktiven Gleitsystemen geringer aus als auf inaktiven Gleitsystemen. Für die  $\langle 123 \rangle$  Orientierung behält die mittlere Lomerarmlänge auf dem primären Gleitsystem ( $A3$  mit  $m_{A3} = 0.47$ )

nahezu ihre initiale Länge von ungefähr  $0,3\ \mu\text{m}$  bei. In Hinblick auf die Anzahl an Lomerarmen sei angemerkt, dass für die  $\langle 123 \rangle$  Orientierung das primäre Gleitsystem eine Lomer-Verbindung mit den Gleitsystemen  $D1$  ( $m_{D1} = 0.29$ ) und  $B5$  ( $m_{B5} = 0.17$ ) eingehen kann, nicht aber mit den sekundären Gleitsystemen  $A6$  und  $B5$  ( $m_{A6} = m_{B4} = 0.35$ ), siehe Reaktionsmatrix in Abbildung 3.2.

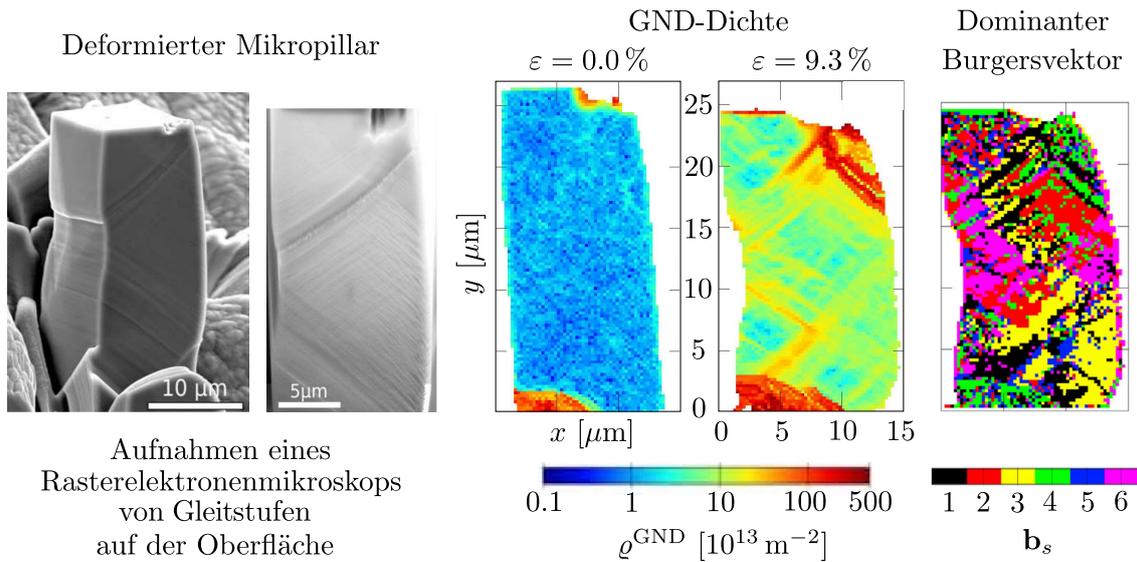
## 5.3 Gleitsystembeteiligung und Versetzungscharakter der Versetzungsdichte

Nachdem im vorherigen Kapitel das stabilisierte Versetzungsnetzwerk und dessen Abhängigkeit von den Gleitsystemaktivitäten analysiert wurde, wird dies im Folgenden durch die Untersuchung der Versetzungsanordnungen von mobilen Versetzungen, welche für die plastische Verformung des Materials verantwortlich sind, komplementiert. Hierbei wird die Mikrostrukturevolution sowohl in homogenen als auch inhomogenen Normal- und Schubspannungsfeldern untersucht. Der Fokus liegt dabei zum einen auf der Identifikation jener Gleitsysteme, auf denen die plastische Verformung infolge der externen Belastung stattfindet, und zum anderen auf der Zusammensetzung und Lokalität der Versetzungsdichte, insbesondere der  $GND$ -Dichte.

### 5.3.1. Homogenes Normalspannungsfeld – Mikropillar unter Druckbelastung

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Mikrostrukturevolution in einem homogenen Normalspannungsfeld anhand eines  $\langle 110 \rangle$  orientierten Kupfer-Mikropillars unter Druckbelastung, siehe Abbildung 4.1. Die Ergebnisse dieses Unterabschnittes sind in dem wissenschaftlichen Artikel [Zoller et al. (2021)] veröffentlicht.

In den experimentellen Untersuchungen von Zoller et al. (2021), siehe Abbildung 5.9, wurden deutliche Gleitstufen auf der Oberfläche beobachtet, deren Orientierungen den Gleitebenen  $B$  und  $C$  entsprechen, vgl. Abbildung 4.1. Die dabei involvierten Gleitsysteme lassen sich anhand von  $REM$ -Aufnahme lediglich für sehr kleine Verformungen identifizieren. Außerdem wurde während der betrachteten Belastung ( $|\varepsilon^{\text{ext}}| \leq 9,3\%$ ) basierend auf in situ  $HR$ - $EBS$ D-Messungen ein Anstieg der  $GND$ -Dichte um ca.  $15 \times 10^{13}\text{m}^{-2}$  festgestellt, obwohl für die homogene Druckbelastung nach den theoretischen Überlegungen, siehe Abschnitt 4.1, keine Akkumulation der  $GND$ -Dichte erwartet wurde. Beim Vergleich der



**Abbildung 5.9:** Experimentelle Ergebnisse für einen Mikropillar unter Druckbelastung: Gleitstufen auf der Oberfläche mittels *REM*-Aufnahmen (links) sowie auf *HR-EBSD*-Messungen basierende Approximation der *GND*-Dichte mittels der  $L_1$ -Methode (Mitte) und Bestimmung des dominanten Burgersvektors mittels Analyse der Einzelkomponenten des  $\alpha$ -Tensors (rechts). Für weitere Details sei auf die Literatur verwiesen. Bearbeitete Darstellung aus [Zoller et al. (2021)].

räumlichen Konfiguration der *GND*-Dichte und den sichtbaren Gleitbändern wird ein Richtungsunterschied erkennbar: Linien mit erhöhter *GND*-Dichte stehen teils senkrecht zu den sichtbaren Gleitbändern. Hierbei sei angemerkt, dass die Gleitstufen auf der Oberfläche auf Versetzungen basieren, die das System bereits verlassen haben, wohingegen die *GND*-Dichte sich auf im System noch enthaltene Versetzungen bezieht.

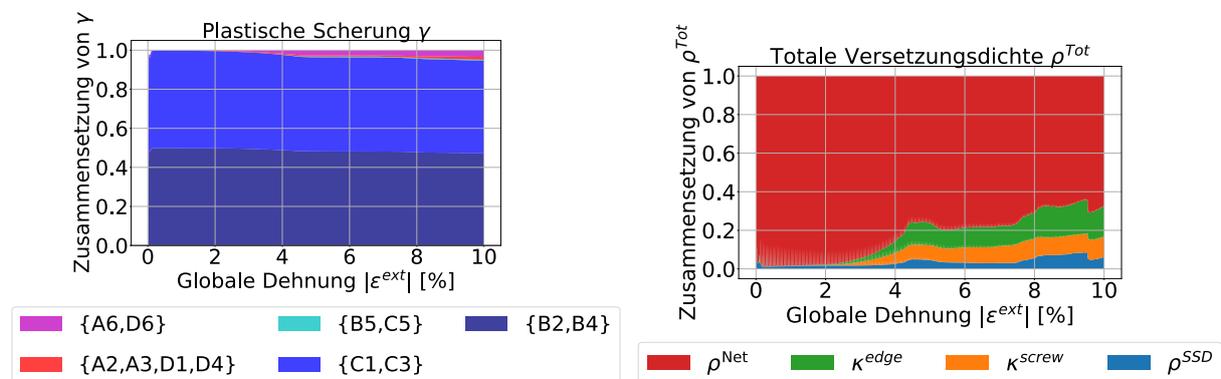
Um einen tieferen Einblick in die Rolle der einzelnen Gleitsysteme zu erhalten, wurde mittels einer Analyse dreier Einzelkomponenten des  $\alpha$ -Tensors aus den in situ *HR-EBSD*-Messungen der dominante Burgersvektor identifiziert, wobei der Ansatz aufgrund der begrenzten Messmöglichkeit (eine Oberfläche von drei Ebenen) lediglich Versetzungen parallel zur  $z$ -Achse berücksichtigt. Zudem liegen nicht zwangsläufig Versetzungen mit dem identifizierten dominanten Burgersvektor im Messbereich vor, da auch Linearkombinationen mehrerer Versetzungen mit entsprechenden Burgersvektoren zu dem gleichen Messergebnis führen können. Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass nach der theoretischen Analyse die Gleitsystemgruppe  $\{B2, B4, C1, C3\}$  als aktiv erwartet wird.

In dem deformierten Mikropillar werden Regionen mit identischen dominanten Burgersvektoren sichtbar, die anisotrope Strukturen mit Vorzugsrichtungen parallel zu den Gleitebenen B und C aufweisen. Hierbei sind jedoch die Regionen mit dominanten Burgersvektoren 1 und 3 meist entlang der Gleitebene B ausgerichtet und umgekehrt verlaufen Regionen mit dominanten Burgersvektoren 2 und 4 meist entlang der Gleitebene C (vgl. hierzu die

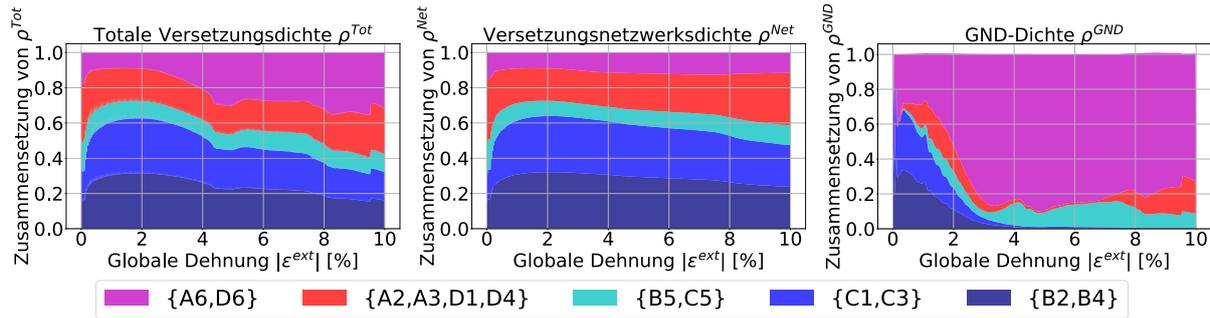
Orientierung der Gleitebenen in Abbildung 4.1 und die Vorzugsrichtungen der Regionen mit identischen dominanten Burgersvektoren in Abbildung 5.9). Darüber hinaus werden Regionen beobachtet, in denen der Burgersvektor 6 dominant ist, obwohl dieser in keinem der aktiv erwarteten Gleitsysteme enthalten ist. Folglich stimmt die Orientierung der jeweiligen Regionen der dominanten Burgersvektoren zwar mit der Orientierung der Gleitebenen überein, aber nicht mit jenen, die den Burgersvektor auch enthalten.

Um Aufschluss über die Hintergründe der experimentellen Beobachtungen zu erhalten, werden im Folgenden *CDD*-Simulationen eingesetzt, die einen direkten, umfassenden und eindeutigen Zugang zur Mikrostrukturevolution ermöglichen. Die initiale Mikrostruktur wird als reine Versetzungsnetzwerksdichte von  $2,4 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$  angenommen, welche sich gleichmäßig im System und über alle Gleitsysteme verteilt. Der Einfluss geometrischer Imperfektionen wird in Unterabschnitt A.3.2 im Appendix diskutiert.

Die infolge der externen Belastung resultierenden plastischen Scherungen auf den einzelnen Gleitsystemen ist in Abbildung 5.10(links) dargestellt. Dabei wird beobachtet, dass die plastische Verformung sich hauptsächlich auf die Gleitsystemgruppe  $\{B2, B4, C1, C3\}$ , welche wie in Abbildung 4.1 angegeben die höchsten Schmid-Faktoren aufweisen, zurückführen lässt. So ist diese Gleitsystemgruppe am Ende der untersuchten Belastung ( $|\varepsilon^{\text{ext}}| = 10\%$ ) für 95% der plastischen Verformung verantwortlich und wird im folgenden als aktive Gleitsystemgruppe bezeichnet. Abbildung 5.10(rechts) zeigt die Evolution der Zusammensetzung der totalen Versetzungsdichte während der Belastung. Hierbei wird entgegen den in Abschnitt 4.1 geäußerten Erwartungen aber in Übereinstimmung zu den experimentellen Ergebnissen eine Akkumulation von *GND*-Dichte im System beobachtet. Die *GND*-Dichte macht für die gewählte Systemauflösung (das Mittelungsvolumen beträgt  $0,244 \mu\text{m}^3$  bzw. die Elementbreite entspricht  $a/16 = 0,625 \mu\text{m}$ ) am Ende der untersuchten Belastung 26% der totalen Versetzungsdichte aus, wohingegen der *SSD*-Dichte Anteil



**Abbildung 5.10:** Evolution der Einzelbeiträge der Gleitsysteme zur plastischen Scherung sowie die Evolution der Zusammensetzung der totalen Versetzungsdichte während des Druckversuchs des  $\langle 110 \rangle$  orientierten Mikropillars. Bearbeitete Abbildung aus [Zoller et al. (2021)].



**Abbildung 5.11:** Evolution der Einzelbeiträge der Gleitsysteme zur totalen Versetzungsdichte, Versetzungsnetzwerksdichte und *GND*-Dichte während des Druckversuchs des  $\langle 110 \rangle$  orientierten Mikropillars. Übersetzte Abbildung aus [Zoller et al. (2021)].

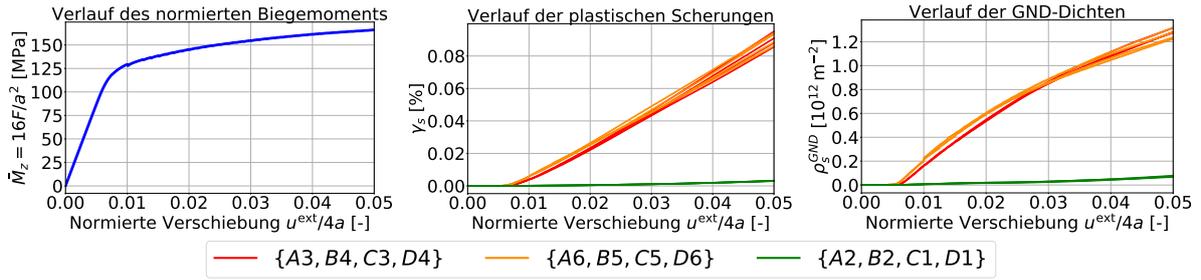
mit 6 % geringer ausfällt. Der verbleibende Anteil von 68 % der totalen Versetzungsdichte besteht aus der Versetzungsnetzwerksdichte.

Der Beitrag der einzelnen Gleitsysteme zu den Versetzungsdichten ist in Abbildung 5.11 abgebildet. Hierbei lassen sich 32 % der totalen Versetzungsdichte auf den vier aktiven Gleitsystemen und die restlichen 68 % auf den acht inaktiven Gleitsystemen lokalisieren. Jedoch lassen sich zwischen den Gleitsystemgruppen Unterschiede in der Zusammensetzung der Versetzungsdichte feststellen. So befindet sich etwa die Hälfte der Versetzungsnetzwerksdichte (48 %) auf den vier aktiven Gleitsystemen, während die *GND*-Dichte fast ausschließlich auf den inaktiven Gleitsystemen akkumuliert wird. Ein signifikanter Anteil der *GND*-Dichte (73 %) befindet sich auf den Gleitsystemen {A6,D6}, deren Gleitebenen sowie Gleitrichtung sich von denen der aktiven Gleitsysteme unterscheiden.

### 5.3.2. Inhomogenes Normalspannungsfeld – Mikrokrugarm unter Biegebelastung

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Mikrostrukturevolution in einem inhomogenen Normalspannungsfeld anhand eines  $\langle 100 \rangle$  orientierten Kupfer-Mikrokrugarms unter Biegebelastung, siehe Abbildung 4.2. Die initiale Mikrostruktur wurde mit einer totalen Versetzungsdichte von  $7,2 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$  angenommen, welche sich gleichmäßig im System und über alle Gleitsysteme verteilt. Das System wird mit einer linear ansteigenden Verschiebung von bis zu  $u^{\text{ext}} \leq 1 \mu\text{m}$  belastet und die Angabe der *GND*-Dichte bezieht sich auf ein Mittelungsvolumen von  $0,016 \mu\text{m}^3$  (bzw. auf eine Elementenbreite von  $0,25 \mu\text{m}$ ).

In Abbildung 5.12 sind sowohl der resultierende, normierte Biegemoment-Verschiebungsverlauf sowie die dazugehörige Evolution der plastischen Scherungen und *GND*-Dichten auf



**Abbildung 5.12:** Verlauf des normierten Biegemoments über die normierte Verschiebung (links) sowie der dazugehörigen plastischen Scherungen (Mitte) und  $GND$ -Dichten (rechts) auf den einzelnen Gleitsystemen für den betrachteten Mikrokrugarm unter Biegebelastung.

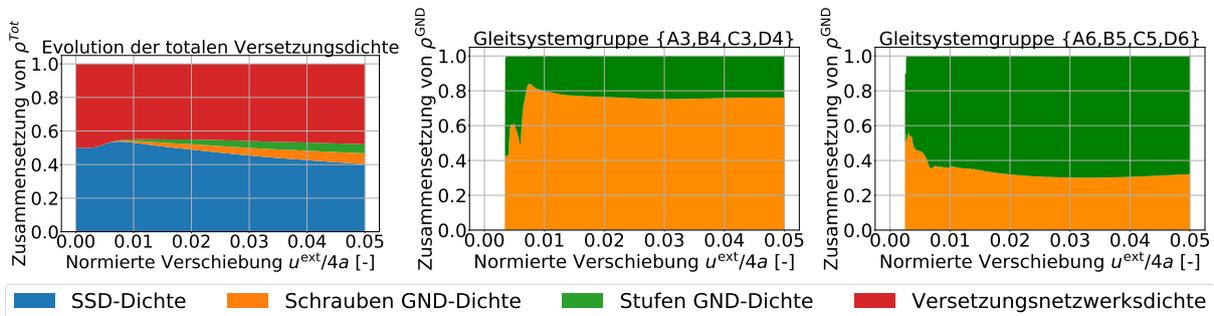
den einzelnen Gleitsystemen dargestellt. Hierbei wurden die Normierungen analog zu u. a. Motz et al. (2005), Demir et al. (2010) und Husser und Bargmann (2017) vorgenommen:  $\bar{M}_z = \frac{4FL}{a^2} = \frac{16F}{a^2}$  und  $\bar{u}^{\text{ext}} = \frac{u^{\text{ext}}}{L} = \frac{u^{\text{ext}}}{4a}$ . Die zur Berechnung des Biegemoments verwendete Kraft lässt sich entsprechend der Gleichung 4.1c über die Schnittkraft berechnen:  $F = -Q_y = -\iint_{A_x} \tau_{yx} dA_x$ . Die Normierung des Biegemoments wird durch ein ideal plastisches Materialverhalten bzw. durch einen betragsmäßig konstanten Spannungsverlauf über die Balkenhöhe motiviert. Die Annahme eines linearen Verlaufs wie im rein elastischen Fall, vgl. Gleichung 4.2a, würde zu 1,5-fachen Werten für das normierte Biegemoment bzw. die approximierete maximale Normalspannung vgl. zu Abbildung 5.12 führen. Die räumliche Ausprägung des Spannungsfeldes ist in Abbildung A.2 im Appendix dargestellt. Der elastisch-plastische Übergang tritt bei einer normierten Verschiebung von  $\bar{u}^{\text{ext}} \approx 0,006$  und einem normierten Biegemoment von  $\bar{M}_z \approx 105$  MPa auf. Das normierte Biegemoment erreicht am Ende der betrachteten Belastung einen Wert von  $\bar{M}_z \approx 165$  MPa.

Sowohl die plastische Verformung als auch die Akkumulation der  $GND$ -Dichte treten fast ausschließlich in den beiden normalspannungsabhängigen Gleitsystemgruppen {A3,B4, C3,D4} und {A6,B5,C5,D6} auf, vgl. Tabelle 4.2. So liegen die plastische Scherung und die  $GND$ -Dichte auf diesen Gleitsystemen am Ende der betrachteten Belastung in Bereichen von  $\gamma_s \in [0,086; 0,096]$  % bzw.  $\rho_s^{\text{GND}} \in [1,22; 1,32] \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$ , wohingegen auf den Gleitsystemen der dritten Gleitsystemgruppe mit  $\gamma_s \approx 0,003$  % bzw.  $\rho_s^{\text{GND}} \in [0,07; 0,08] \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$  um ein bis zwei Größenordnungen kleinere Werte auftreten. Es sei angemerkt, dass sich die angegebenen Größen als Mittelungsgrößen auf das inhomogene Gesamtsystem beziehen und folglich lokal höhere Werte auftreten können, vgl. Abbildung 5.14(links).

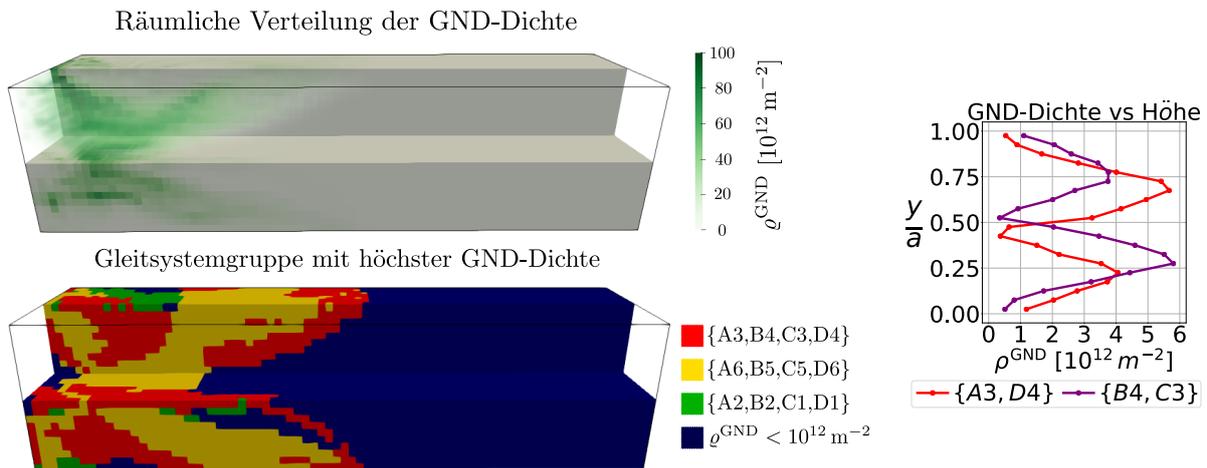
Wie in Abbildung 5.13 dargestellt, steigt der Anteil der  $GND$ -Dichte an der totalen Versetzungsdichte im Zuge der betrachteten Mikrostrukturevolution und beträgt am Ende der Belastung 12 %, wobei die  $GND$ -Dichte jeweils ungefähr zur Hälfte aus Schrauben- (55 %) und Stufencharakter (45 %) besteht. Beim Vergleich der beiden Gleitsystemgruppen werden jedoch Unterschiede deutlich. Die  $GND$ -Dichte in der Gleitsystemgruppe {A3,B4,C3,D4}

weist einen deutlich höheren Anteil von Schraubenversetzungen (76 %) auf, wohingegen in der Gleitsystemgruppe {A6,B5,C5,D6} der Stufencharakter überwiegt (68 %).

In Abbildung 5.14 ist die räumliche Verteilung der *GND*-Dichte abgebildet. Die Akkumulation der *GND*-Dichte lokalisiert sich hauptsächlich auf den Bereich nahe der Einspannung. So lässt sich am Ende der betrachteten Belastung 95 % der *GND*-Dichte dem Bereich  $x/L \leq 0,4$  zuordnen, wobei die *GND*-Verteilung gemittelt über den Querschnitt senkrecht zur Balkenachse ( $\mathbf{n} = \mathbf{e}_x$ ) ihr Maximum bei  $x/L \approx 0,1$  aufweist. In unmittelbarer Nähe zur Einspannung und beim Übergang zum *GND*-freien Bereich am Balkenende ist ein ausgeprägter Versetzungsaufstau entlang von Diagonalen in der  $x, y$ -Ebene zu beobachten, wohingegen er im mittleren Bereich des *GND*-Gebietes in der Nähe der Balkenachse bzw. neutralen Fläche verläuft.



**Abbildung 5.13:** Zusammensetzung der totalen Versetzungsdichte (links) und Versetzungscharakter der *GND*-Dichte für die beiden aktiven Gleitsystemgruppen (rechts).



**Abbildung 5.14:** Räumliche Verteilung der *GND*-Dichte (links oben) sowie Kennzeichnung des jeweiligen Gleitsystems mit der höchsten lokalen *GND*-Dichte (links unten), wobei Elemente mit einer *GND*-Dichte kleiner als  $10^{12} \text{ m}^{-2}$  nicht ausgewertet und blau eingefärbt wurden. Des Weiteren ist die Verteilung der gemittelten *GND*-Dichte über die Balkenhöhe (rechts) für die ausgewählten Gleitsystemuntergruppen {A3,D4} in rot und {B4,C3} in lila dargestellt.

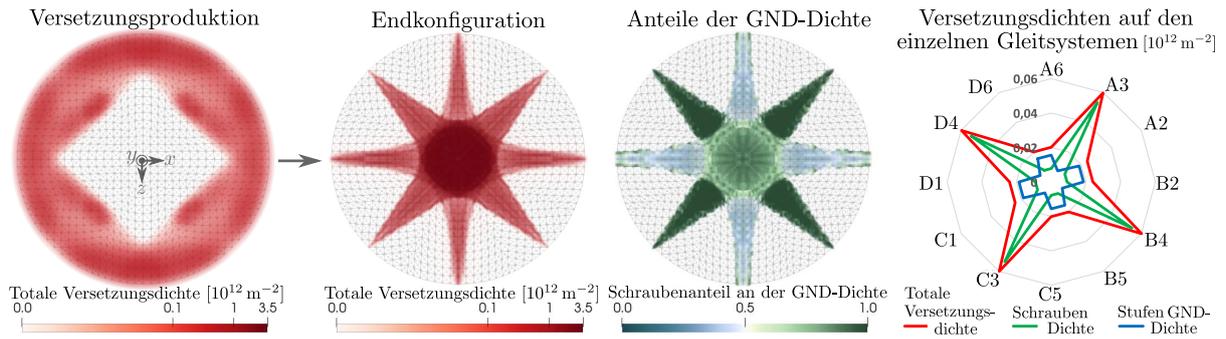
Die *GND*-Dichte in den zwei normalspannungsabhängigen Gleitsystemgruppen  $\{A3, B4, C3, D4\}$  und  $\{A6, B5, C5, D6\}$  weisen für die betrachtete Belastung qualitativ eine ähnliche räumliche Verteilung auf, jedoch lassen sich quantitative Unterschiede feststellen. Die Gleitsystemgruppe  $\{A6, B5, C5, D6\}$  liefert den größten Beitrag in der Diagonalen nahe der Einspannung ausgehend von den oberen und unteren Rändern der festen Einspannung, wohingegen die Gleitsystemgruppe  $\{A3, B4, C3, D4\}$  die höchsten Beiträge zu der *GND*-Dichte in den umgebenden Bereichen aufweist und sich die mobile Versetzungsdichten auf diesen Gleitsystemen im Vergleich zur Gleitsystemgruppe  $\{A6, B5, C5, D6\}$  weiter in Richtung des freien (rechten) Balkenendes bewegt haben. Im Vergleich der Verteilungen der gemittelten *GND*-Dichte über die Balkenhöhen zwischen den Gleitsystemuntergruppen  $\{A3, D4\}$  und  $\{B4, C3\}$  lässt sich eine an der neutralen Fläche gespiegelte, asymmetrische Verteilung erkennen, wobei die *GND*-Dichte für  $\{A3, D4\}$  stärker im Zugbereich und für  $\{B4, C3\}$  stärker im Druckbereich ausgeprägt ist, vgl. das Spannungsfeld in Abbildung A.2 im Appendix.

### 5.3.3. Inhomogenes Schubspannungsfeld – Mikrodraht unter Torsionsbelastung

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Mikrostrukturevolution in einem inhomogenen Schubspannungsfeld anhand von Mikrodrähten unter Torsionsbelastung, siehe Abbildung 4.5.

#### Gleichgewichtskonfiguration unter konstanter Torsionsbelastung

Im ersten Schritt werden die Unterschiede bzgl. den Versetzungskonfigurationen im Versetzungsaufstau auf den einzelnen Gleitsystemen für einen  $\langle 100 \rangle$  orientierten Aluminium-Mikrodraht untersucht. Hierzu wird ein Benchmark-System betrachtet, bei dem die initiale Mikrostruktur ausschließlich aus einer homogenen Verteilung von Versetzungsquellen besteht. Das System wird mit einer konstanten Verdrehung von  $\varphi = 1^\circ$  belastet und anschließend die Mikrostrukturevolution untersucht bis sich in der Endkonfiguration ein Gleichgewichtszustand eingestellt hat. Hierbei werden Versetzungsreaktionen und Multiplikationsmechanismen nicht berücksichtigt, die Versetzungsdichten auf den verschiedenen Gleitsystemen können jedoch über die Spannungsfelder miteinander interagieren. Die Angabe der *GND*-Dichte bezieht sich auf ein Mittelungsvolumen von  $0,016 \mu\text{m}^3$  (bzw. auf eine Elementenbreite der Tetraeder von  $\approx 0,75 \mu\text{m}$ ). Die Ergebnisse dieses Unterabschnittes sind in dem wissenschaftlichen Artikel [Zoller und Schulz (2020)] veröffentlicht.



**Abbildung 5.15:** Räumliche Verteilung der totalen Versetzungsdichte zum frühen Stadium der Versetzungsproduktion (links) und im Gleichgewichtszustand (Mitte links) sowie die Schrauben- und Stufenanteile an der *GND*-Dichte (Mitte rechts) und die Verteilung der Versetzungsdichten auf die einzelnen Gleitsysteme (rechts) in der Endkonfiguration. Übersetzte Abbildung aus [Zoller und Schulz (2020)].

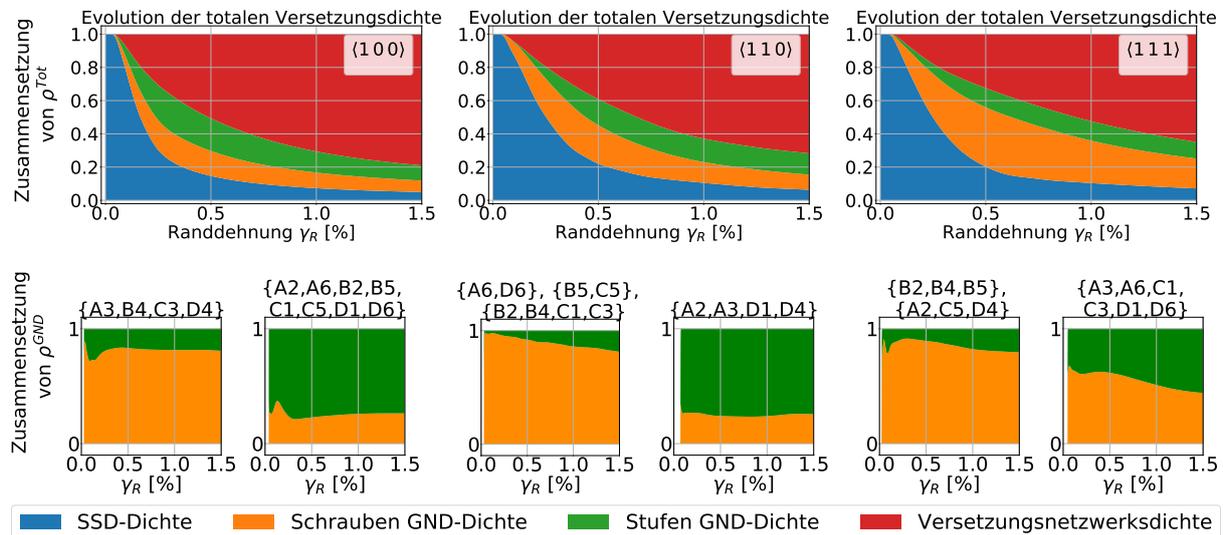
In Abbildung 5.15 ist die räumliche Anordnung der totalen Versetzungsdichte im Querschnitt sowohl unmittelbar nach der Versetzungsproduktion als auch in der Endkonfiguration abgebildet. Des Weiteren ist der Versetzungscharakter der *GND*-Dichte und deren Verteilung auf die einzelnen Gleitsysteme angegeben. Die Versetzungsdichte wird im oberflächennahen Bereich produziert, welcher mit Hinblick auf das lineare Spannungsfeld mit dem Bereich erhöhter aufgelöster Schubspannungen auf den jeweiligen Gleitsystemen korreliert. Im Laufe der Mikrostrukturevolution verlässt ein wesentlicher Teil der Versetzungsdichte das System über die Oberflächen, vgl. die Evolution eines einzelnen Versetzungsringses in Abbildung 5.1, wohingegen die restliche Dichte sich im Inneren aufstaut und eine inhomogene, sternförmige Versetzungsstruktur im Querschnitt ausbildet. Die Strahlen korrelieren dabei mit den spannungsfreien Linien der jeweiligen Gleitsysteme, vgl. Abbildung 4.6.

Die totale Versetzungsdichte lässt sich größtenteils in der Gleitsystemgruppe  $\{A3, B4, C3, D4\}$  lokalisieren. So nimmt für das untersuchte System die Versetzungsproduktionsrate und die daraus resultierende totale Versetzungsdichte auf diesen Gleitsystemen ca. den dreifachen Wert verglichen zu den Gleitsystemen der anderen Gleitsystemgruppe an. Die *GND*-Dichte besteht für das untersuchte System hauptsächlich aus Schraubencharakter ( $\approx 74\%$ ), wobei deren lokaler Charakter stark variiert und dabei von den jeweiligen Gleitsystemen abhängt. So besitzt die *GND*-Dichte auf den Gleitsystemen  $\{A3, B4, C3, D4\}$  fast ausschließlich einen Schraubencharakter, wohingegen für die anderen Gleitsysteme der Stufencharakter überwiegt. Des Weiteren weisen die aufgestauten Versetzungsdichten der beiden Gleitsystemgruppen jeweils eine Kreuzstruktur auf, welche jedoch zueinander um ca.  $45^\circ$  um die Torsionsachse verdreht sind.



es wurde eine höhere Materialverfestigung im elastisch-plastischen Bereich beobachtet. Die experimentell bestimmte Torsionskurve für den gesamten Torsionsdraht mit einer Bambusstruktur aus alternierenden  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Körnern verläuft zwischen den Torsionskurven für die Einkristalle in der Simulation. In allen drei Kristallorientierungen wurde nach einem initialen Bereich ein nahezu linearer Anstieg der totalen Versetzungsdichte beobachtet, wobei für das untersuchte System der Anstieg der totalen Versetzungsdichte in der  $\langle 100 \rangle$  Orientierung bereits bei kleineren Randscherungen einsetzt. Um tiefere Einblicke in die Mikrostrukturevolution zu erhalten, wird im Folgenden die Zusammensetzung der Versetzungsdichten genauer untersucht.

Wie in Abbildung 5.17 dargestellt, kommt es im Zuge der Mikrostrukturevolution in allen Orientierungen zu einer Akkumulation von Versetzungsnetzwerksdichte und  $GND$ -Dichte, wohingegen der Anteil der  $SSD$ -Dichte stetig abnimmt. In der  $GND$ -Dichte treten sowohl Schrauben- als auch Stufencharakter auf. Am Ende der betrachteten Belastung ( $\gamma_R = 1,5\%$ ) weist die  $\langle 100 \rangle$  Orientierung mit 82% den höchsten prozentualen Anteil der Versetzungsnetzwerksdichte an der totalen Versetzungsdichte auf. Dahingegen wird in der  $\langle 111 \rangle$  Orientierung mit 22% der höchste prozentuale Anteil der  $GND$ -Dichte an der totalen Versetzungsdichte beobachtet, wobei der Schraubencharakter mit 13% den größeren Beitrag liefert. In den drei untersuchten Orientierungen liegen der Schrauben- (6 – 13%) und Stufenanteil (8 – 11%) in einer ähnlichen Größenordnung.



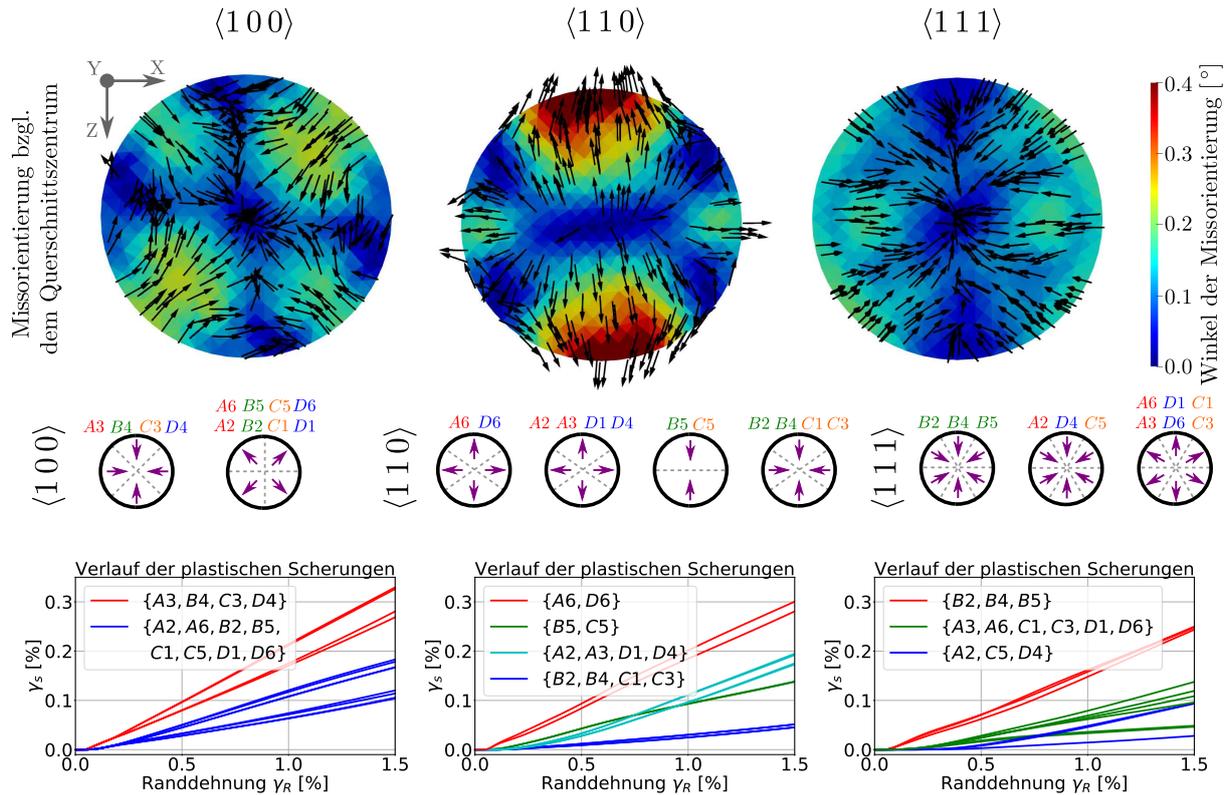
**Abbildung 5.17:** Zusammensetzung sowohl der totalen Versetzungsdichte des jeweiligen Systems (oben) als auch der  $GND$ -Dichte einzelner Gleitsystemgruppen (unten) für die Hochsymmetrie-Orientierungen  $\langle 100 \rangle$  (links),  $\langle 110 \rangle$  (Mitte), und  $\langle 111 \rangle$  (rechts). Übersetzte Abbildung aus [Zoller et al. (2023)].

Jedoch lassen sich für eine Betrachtung der einzelnen Gleitsystemgruppen Unterschiede identifizieren. Je nach betrachteter Gleitsystemgruppe und Kristallorientierung überwiegt entweder der Schrauben- oder Stufencharakter. So weisen z. B. in der  $\langle 100 \rangle$  Orientierung die *GND*-Dichte in der primären Gleitsystemgruppe  $\{A3, B4, C3, D4\}$  hauptsächlich einen Schraubencharakter auf (81%), wohingegen in der anderen Gleitsystemgruppe  $\{A2, A6, B2, B5, C1, C5, D1, D6\}$  der Stufencharakter überwiegt (74%). Der Unterschied zwischen den beiden Anteilen fällt in der Gleitsystemgruppe  $\{A3, A6, C1, C3, D1, D6\}$  in der  $\langle 111 \rangle$  Orientierung am geringsten aus.

## 5.4 Zusammenhang zwischen Gleitsystemaktivität und kristalliner Missorientierung

Die Akkumulation von *GNDs* führen zu Missorientierungen im Material, die sich auch experimentell messen lassen. Im Folgenden wird der Informationsgehalt dieser Missorientierung über die zugrunde liegenden Gleitsystemaktivitäten für dieselben Mikrodrähte mit den hochsymmetrischen Orientierungen unter Torsionsbelastung wie im vorherigen Abschnitt untersucht. Hierbei liefert die Simulation einen direkten Zugang sowohl zu den Gleitsystemaktivitäten als auch zu den daraus resultierenden Missorientierungen. Die Missorientierung wird durch die Kombination von (positiven) Missorientierungswinkel und Richtung der dazugehörigen Rotationsachse charakterisiert, vgl. Abbildung 4.9. Die genaue Berechnung ist in Unterabschnitt A.1.1 im Appendix angegeben. Die Ergebnisse dieses Unterabschnittes sind in dem wissenschaftlichen Artikel [Zoller et al. (2023)] veröffentlicht.

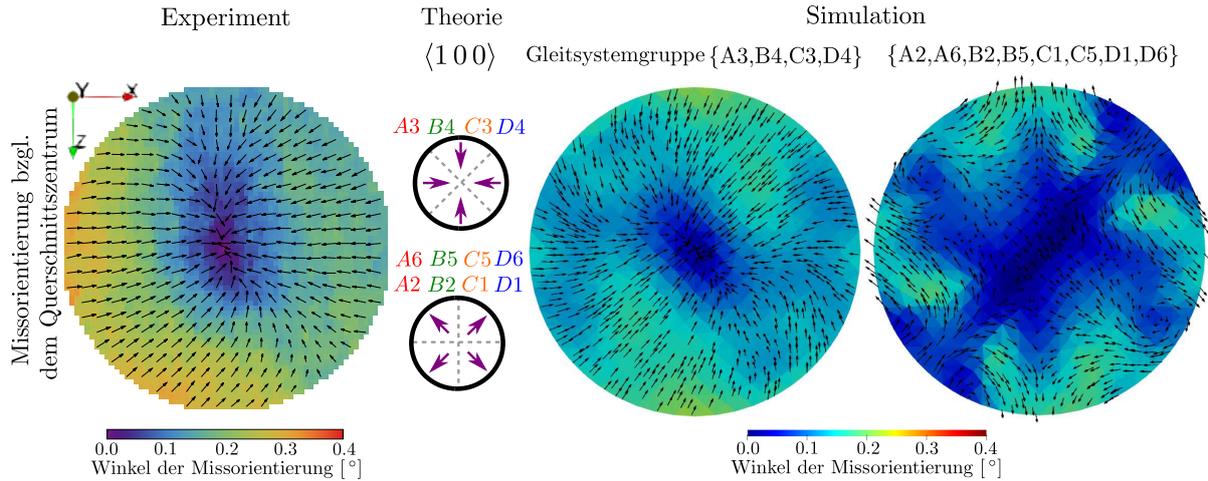
In Abbildung 5.18 sind die resultierenden lokalen Missorientierungen bzgl. des Materials im Querschnittszentrum zum Ende der betrachtenden Belastung ( $\gamma_R = 1,5\%$ ) abgebildet. Des Weiteren sind die in Abbildung 4.9 hergeleiteten theoretischen Überlegungen bzgl. der Richtung der Rotationsachsen infolge der Aktivität der einzelnen Gleitsystemgruppen und die aus der Simulationen bestimmte Evolution der plastischen Scherungen auf den einzelnen Gleitsystemen dargestellt. In allen drei untersuchten Orientierungen werden in der Nähe der Oberfläche größere Missorientierungswinkel beobachtet als in der Nähe der Torsionsachse. Die Rotationsachsen der lokalen Missorientierungen zeigen für die  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Orientierungen in Richtung der Torsionsachse, wohingegen die Rotationsachsen für die  $\langle 110 \rangle$  Orientierung in Richtung der Oberfläche ausgerichtet sind. Somit korreliert die Richtung der lokalen Rotationsachsen in der Simulation mit denen der primären Gleitsystemgruppen aus den theoretischen Überlegungen.



**Abbildung 5.18:** Abbildung der Missorientierung bzgl. dem Querschnittszentrum für die drei untersuchten Hochsymmetrie-Orientierungen  $\langle 100 \rangle$  (links),  $\langle 110 \rangle$  (Mitte) und  $\langle 111 \rangle$  (rechts). Zum leichteren Vergleich sind die Orientierungen der theoretischen Rotationsachsen infolge der Aktivität der Gleitsystemgruppen aus Abbildung 4.9 ebenfalls dargestellt. Zudem ist die Evolution der plastischen Scherungen auf den einzelnen Gleitsystemen angegeben, wobei die einzelnen Gleitsystemgruppen unterschiedlich eingefärbt sind (rot kennzeichnet hierbei den jeweils höchsten Schmid-Faktor und blau den jeweils niedrigsten). Übersetzte Abbildung aus [Zoller et al. (2023)].

In den einzelnen Kristallorientierungen weisen die Gleitsystemgruppen mit den jeweils höchsten Schmid-Faktoren, vgl. Tabelle 4.3, auch die höchsten Gleitsystemaktivitäten bzw. plastische Scherungen auf. So weisen z. B. in der  $\langle 100 \rangle$  Orientierung die Gleitsysteme der primären Gleitsystemgruppe  $\{A3, B4, C3, D4\}$  am Ende der betrachteten Belastung eine ca. doppelt so hohe plastische Scherung auf als die anderen Gleitsysteme. In der  $\langle 110 \rangle$  Orientierung weist die Gleitsystemgruppe  $\{A2, A3, D1, D4\}$ , welche mit  $m_s = 0,5$  einen geringeren Schmid-Faktor als die Gleitsystemgruppe  $\{B5, B6\}$  mit  $m_s = 0,8$  besitzt, am Ende der Belastung eine um bis zu 1.4-fache plastische Scherung vgl. mit der Gleitsystemgruppe  $\{B5, B6\}$  auf.

Im nächsten Schritt werden die obigen Ergebnisse der theoretischen Analyse und der Simulation genutzt, um tiefere Einblicke in experimentelle Beobachtungen zu erhalten, hier exemplarisch für die  $\langle 100 \rangle$  Orientierung aus Ziemann et al. (2015) bzw. Ziemann (2020). Wie in Abbildung 5.19 dargestellt, zeigt die experimentell gemessene lokale Miss-

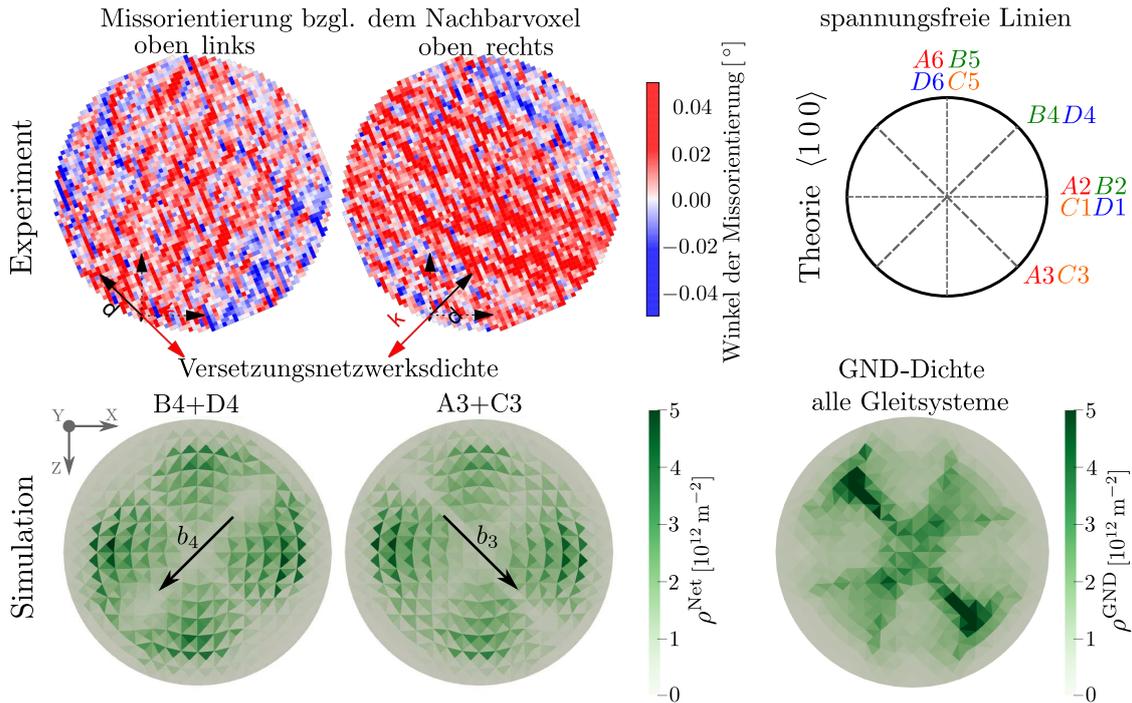


**Abbildung 5.19:** Darstellung der experimentell mittels HR-EBSD Messungen detektierten lokalen Missorientierungen bzgl. des Querschnittszentrums für den  $\langle 100 \rangle$  orientierten Mikrodraht unter Torsionsbelastung mit einer plastischen Randscherung von  $\gamma_{R,pl} \approx 0.8\%$  (links), sowie theoretische Überlegungen (Mitte) und Simulationsergebnisse für eine (totale) Randscherung von  $\gamma_R \approx 1.5\%$ , was hier einer plastischen Randscherung von  $\gamma_{R,pl} \approx 0.7\%$  entspricht (rechts). In den Simulationsergebnissen sind die aus den Gleitsystemaktivitäten resultierenden Missorientierungen für die beiden Gleitsystemgruppen getrennt voneinander ausgewertet. Übersetzte Abbildung aus [Zoller et al. (2023)].

orientierung bzgl. dem Querschnittszentrum in Richtung der Torsionsachse, wobei wie in der Simulation größere Missorientierungswinkel in der Nähe der Oberfläche verglichen zum Querschnittszentrum detektiert werden. Um Aufschluss über die beteiligten Gleitsystemaktivitäten zu erhalten, sind in Abbildung 5.19 sowohl die theoretischen Überlegungen als auch Simulationsergebnisse dargestellt. Die Simulationsergebnisse umfassen die aus den plastischen Scherungen resultierenden Missorientierungen, welche für beide Gleitsystemgruppen getrennt voneinander berechnet wurden. Hierbei zeigen die Rotationsachsen der Missorientierung infolge der Gleitsystemaktivitäten der Gleitsystemgruppe  $\{A3, B4, C3, D4\}$  in Richtung der Torsionsachse, wohingegen die Rotationsachsen der Missorientierung infolge der Gleitsystemaktivitäten der anderen Gleitsystemgruppe in Bereichen mit großen Missorientierungswinkeln größtenteils in Richtung der Oberfläche zeigen.

Wird, wie in Abbildung 5.20 dargestellt, die lokale Missorientierung im Experiment nicht bezüglich des Querschnittszentrums sondern des jeweiligen Nachbarn in  $[101]$  und  $[\bar{1}01]$  Richtungen (entspricht dem oberen oder unteren linken Nachbarn) ausgewertet, offenbart die ex situ HR-EBSD Messung Linien mit hohen lokalen Missorientierungswinkeln innerhalb des Querschnitts. Die Linien verlaufen dabei in  $e_\phi(\phi = \pm 45^\circ)$  Richtung (entspricht der Diagonalen) und sind im jeweiligen Inneren des Querschnittes lokalisiert.

Zum Vergleich sind die theoretisch bestimmten spannungsfreien Linien der jeweiligen Gleitsysteme sowie die räumliche Verteilung der  $GND$ -Dichte und der Versetzungsnetz-



**Abbildung 5.20:** Darstellung der lokalen Missorientierung, die sich im Gegensatz zu Abbildung 5.19 auf den jeweiligen Nachbarn in  $[101]$  und  $[\bar{1}01]$  Richtung bezieht. Zudem sind die theoretisch bestimmten spannungsfreien Linien der einzelnen Gleitsysteme und die räumliche Verteilung der *GND*-Dichte in der Simulation abgebildet. Übersetzte Abbildung aus [Zoller et al. (2023)].

werksdichte der primären Gleitsystemgruppe  $\{A3, B4, C3, D4\}$  in der Simulation ebenfalls abgebildet. Hierbei weisen die spannungsfreien Linien der primären Gleitsystemgruppe, die aufgestaute *GND*-Dichte und die immobile Versetzungsnetzwerksdichte der primären Gleitsystemgruppe in der Simulation die gleiche Orientierung wie die Linien mit erhöhter lokaler Missorientierung im Experiment auf. Bezüglich der Versetzungsnetzwerksdichte lässt sich eine Tendenz der Zunahme der Dichte von der jeweiligen spannungsfreien Linie in orthogonaler Richtung hin zur Oberfläche erkennen, wobei jedoch im Gegensatz dazu der am weitesten von der jeweiligen spannungsfreien Linie entfernte Randbereich eine geringe Versetzungsnetzwerksdichte aufweist.

## 5.5 Größeneffekte induziert durch Versetzungsaufstau

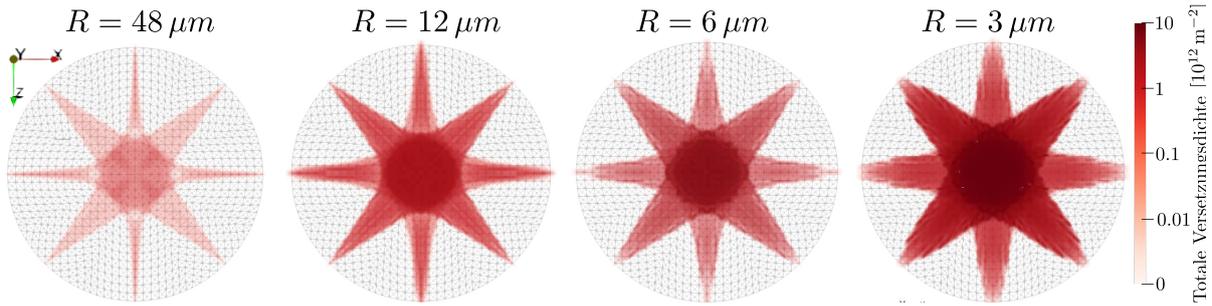
Wie in den vorherigen Abschnitten gezeigt, kommt es in den untersuchten Systemen zu einem Aufstau der *GND*-Dichte, insbesondere in einem inhomogenen Spannungsfeld. Unklar ist jedoch, inwiefern sich die Systemgröße auf den Versetzungsaufstau auswirkt.

Deshalb wird im Folgenden der Einfluss der Systemgröße auf die räumliche Ausdehnung des Versetzungsaufstaus untersucht und ob diese bzw. die Rückspannung der bereits aufgestauten Versetzungen (vgl. Gleichung 3.9b) einen Größeneffekt induziert. Die Ergebnisse dieses Unterabschnittes sind in dem wissenschaftlichen Artikel [Zoller und Schulz (2020)] veröffentlicht.

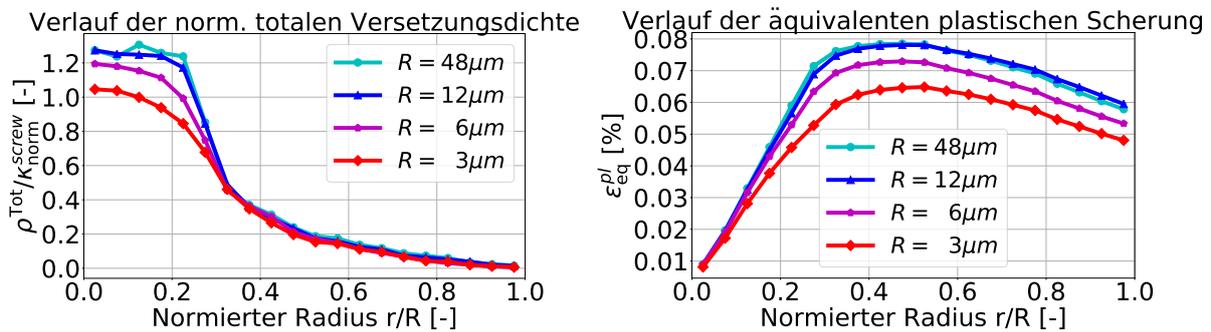
Hierzu werden  $\langle 100 \rangle$  orientierte Aluminium-Mikrodrähte mit verschiedenen Radien  $R \in \{3; 6; 12; 48\} \mu\text{m}$  (aber gleichen Aspektverhältnissen) unter Torsionsbelastung untersucht, siehe Abbildung 4.5. Um den Einfluss des Versetzungsaufstaus auf etwaige Größeneffekte isoliert untersuchen zu können, werden in dieser Untersuchung der Fließbeginn bzw. die Quellspannung, vgl. Gleichung 3.11a, als konstant gewählt und keine Versetzungsreaktionen oder Multiplikationsmechanismen berücksichtigt. Hierdurch wird ausgeschlossen, dass etwaige Änderungen der Ereigniswahrscheinlichkeiten von Versetzungsreaktionen infolge variierender Weglängen die Simulationsergebnisse beeinflussen könnten. Die initiale Mikrostruktur besteht ausschließlich aus einer homogenen Verteilung von Versetzungsquellen und die Versetzungsdichten auf den verschiedenen Gleitsystemen können über die Spannungsfelder miteinander interagieren.

Die Systeme werden mit einer konstanten Verdrehung von  $\varphi = 1^\circ$  belastet. Folglich weisen alle untersuchten Systeme die gleichen Randscherungen auf, wohingegen der Dehnungsgradient für kleinere Drahradien zunimmt. In den Simulationen werden die Systeme mit derselben Anzahl an Elementen vernetzt, wodurch die Auflösung entlang des normierten Radius konstant bleibt. Dies impliziert jedoch, dass die Auflösung entlang der Raumkoordinate  $r$  variiert. Die variierende Auflösung könnte einen Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben, dessen genauen Auswirkungen ungewiss sind. Dies motiviert weiterführende, detaillierte Analysen zum Einfluss der Diskretisierung auf die einzelnen internen Spannungskomponenten für verschiedenen Versetzungsanordnungen, was jedoch den Rahmen dieser Arbeit übersteigt. In dieser Arbeit wird die Annahme getroffen, dass der Einfluss der variierenden Auflösung aufgrund der Berücksichtigung des Korrekturterms der Rückspannung, welcher die kurzreichweitigen Spannungsfelder von unaufgelösten Eigenspannungsfeldern abbildet, vernachlässigt werden kann.

Die sich einstellenden Gleichgewichtskonfigurationen der Mikrostrukturen sind in Abbildung 5.21 abgebildet. Hierbei lässt sich eine sternförmige Anordnung der totalen Versetzungsdichte für alle Mikrodrahradien beobachten. Allerdings nimmt der Wert der Versetzungsdichte mit kleineren Radien zu. Ebenso nimmt auch die Ausdehnung des Versetzungsaufstaus bezogen auf den normierten Radius für kleinere Radien zu, was zu einer Verbreiterung der sternförmigen Dichteformation führt.



**Abbildung 5.21:** Räumliche Verteilung der totalen Versetzungsdichte in der Gleichgewichtskonfiguration im Drahtquerschnitt für Mikrodrähte mit variierenden Radien unter einer konstanten Torsionsbelastung. Übersetzte Abbildung aus [Zoller und Schulz (2020)].



**Abbildung 5.22:** Verlauf der normierten totalen Versetzungsdichte und der äquivalenten plastischen Dehnung über den normierten Radius für Mikrodrähte mit variierenden Radien unter einer konstanten Torsionsbelastung. Übersetzte Abbildung aus [Zoller und Schulz (2020)].

In Abbildung 5.22 ist die räumliche Verteilung sowohl der totalen Versetzungsdichte als auch der äquivalenten plastischen Dehnung über den normierten Radius dargestellt. Zur besseren Vergleichbarkeit wurden die Kurven der totalen Versetzungsdichte mit  $\kappa_{\text{norm}}^{\text{screw}} = 1,93 \frac{\gamma_R}{Rb}$  normiert, wobei der Normierungswert den experimentellen Ergebnissen von *kfz* Polykristallen unter Torsionsbelastung aus Arsenlis und Parks (1999) entnommen wurde. Die äquivalente plastische Dehnung  $\varepsilon_{\text{eq}}^{\text{pl}} = \sqrt{2/3} \|\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}} - 1/3 \text{trace}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}}) \mathbf{1}\|$  berechnet sich analog zur von Mises-Vergleichsspannung und wurde als skalare Vergleichsgröße aufgrund des dreidimensionalen Dehnungszustands herangezogen. Für die untersuchten Systeme weisen die Mikrodrähte mit Radien von  $R = 48 \mu\text{m}$  und  $R = 12 \mu\text{m}$  eine ähnliche normierte Verteilung auf, wohingegen für die Mikrodrähte mit kleineren Radien eine geringere normierte Versetzungsdichte und kleinere normierte Gradienten bzgl. der äquivalenten plastischen Dehnung nahe der Torsionsachse beobachtet wurden. Die resultierenden Torsionsmomente berechnen sich über die Spannungsverteilung und ergeben sich zu  $M_T/R^3 = 123 \text{ MPa}$  für  $R = 48 \mu\text{m}$  bzw. zu  $M_T/R^3 = 134 \text{ MPa}$  für  $R = 3 \mu\text{m}$ .



## 6. Diskussion

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Mikrostruktur unter Einbezug der Systemanalysen und der Literatur diskutiert, wobei der Fokus auf den in Kapitel 5 motivierten Fragestellungen liegt.

### 6.1 Aktivierungen der Gleitsysteme

In den untersuchten Systemen werden jeweils die Gleitsysteme mit den höchsten Schmid-Faktoren zuerst aktiviert und liefern im Zuge der Mikrostrukturevolution den größten Beitrag zur plastischen Verformung, vgl. die Angabe der jeweiligen Schmid-Faktoren mit den Verläufen der plastischen Scherung (Mikropillar: Abbildung 4.1 und Abbildung 5.10, Mikrokrugarm: Tabelle 4.2 und Abbildung 5.12, Mikrodraht: Tabelle 4.3 und Abbildung 5.18). Dieser Zusammenhang ist in Übereinstimmung mit zahlreichen Untersuchungen der Kristallplastizität von *kfz* Metallen (u. a. mit den *DDD*-Simulationen in Akhondzadeh et al. (2020) und Stricker et al. (2022)), bzw. dem Schmid'schen Schubspannungsgesetz für einen orientierungsunabhängigen Referenzwert der kritischen aufgelösten Schubspannung des initialen Fließbeginns ( $\tau^{\text{CRSS}}$ ). Die Unabhängigkeit von  $\tau^{\text{CRSS}}$  von der Kristallorientierung wurde u. a. in den experimentellen Untersuchungen von Zug- und Druckproben unterschiedlicher Systemgrößen aus Aluminium von Wu et al. (2016) beobachtet. Die Übereinstimmung zu den Literaturergebnissen unterstreicht die Plausibilität der in dieser Arbeit erzielten *CDD*-Simulationsergebnissen.

Aufgrund der Hochsymmetrie-Orientierungen, den homogenen initialen Mikrostrukturen und der verwendeten deterministischen *CDD*-Formulierung wird dieser Zusammenhang der primären Gleitsystemaktivität mit den maximalen Schmid-Faktoren auch für variierende Geometriemaße der untersuchten Systeme (Mikropillar:  $a = 10 \mu\text{m}$ , Mikrokrugarm:  $a = 5 \mu\text{m}$ , Mikrodraht:  $a = 24 \mu\text{m}$ ) erwartet. Die Ergebnisse zur Mikrostrukturevolution in dieser Arbeit sind dabei als gemittelter Erwartungswert zu interpretieren. Somit mag es aufgrund von stochastischen Effekten u. U. zu Abweichungen von Einzelbeobachtungen in der Literatur insbesondere für kleinere Geometriemaße kommen, wie z. B. die Untersuchung

der Korrelation zwischen der primären Gleitsystemaktivität und den Schmid-Faktoren mittels Monte-Carlo-Simulationen von  $[3\bar{1}5]$  orientierten Aluminium-Mikropillars mit Durchmessern von 0,8 bis  $6,3\ \mu\text{m}$  von Ng und Ngan (2008) ergab. Hintergrund dafür ist die zufällige Konfiguration der Versetzungsquellen und die damit einhergehende Variation in den Quellspannungen.

Die einzelnen Versetzungsquellen werden lokal aktiviert, sofern eine ausreichend hohe Spannung anliegt. Hierbei ist das verwendete homogenisierte Versetzungsquellmodell in der Lage, die Auswirkungen einzelner Quellaktivierungen – expandierende Versetzungsringe – abzubilden, wie in Abbildung 5.1 und 5.2 für den Mikrodraht unter Torsionsbelastung gezeigt. Es sei darauf hingewiesen, dass die Kontinuumsformulierung nicht auf die Beschreibung diskreter Einzelereignisse abzielt, sondern das homogenisierte Verhalten von Ensembles von Versetzungen in Mittelungsvolumen abbildet. Für eine homogene Verteilung von Versetzungsquellen im System überlagern sich die Quellaktivitäten und führen im Querschnitt des betrachteten Mikrodrahts unter Torsionsbelastung aus Abbildung 5.15 zu einem oberflächennahen Bereich mit aktiven Versetzungsquellen und einem quadratischen, zentrumsnahen Bereich, in dem die jeweiligen lokal projizierten Spannungen kleiner als die notwendigen Quellspannungen sind. Die Grenze zwischen diesen beiden Bereichen verläuft dabei parallel zu den spannungsfreien Linien der primären Gleitsystemgruppe  $\{A3, B4, C3, D4\}$ , wie unter Einbezug der Abbildung 4.6 oder 5.20 zu sehen ist. Die Konsistenz zu den Ergebnissen in *MD*-Simulationen von Nanodrähten aus Gold unter Torsionsbelastung in Weinberger und Cai (2009) bekräftigt die Nützlichkeit des homogenisierte Versetzungsquellmodells, welches die Untersuchung der Quellaktivitäten in (größeren) Mikrosystemen ermöglicht [Zoller und Schulz (2020)].

Im Zuge der Mikrostrukturevolution und der damit verbundenen Versetzungsbewegung kommt es zur Bildung von Versetzungsreaktionen. Hierbei wurden die Einflüsse auf die Versetzungsanzahl infolge der modellierten Versetzungsmultiplikation verglichen zur Versetzungsproduktion in Abbildung 5.3 für einen  $\langle 110 \rangle$  orientierten Kupfer-Mikropillar unter Druckbelastung und einen  $\langle 100 \rangle$  orientierten Gold-Mikrodraht unter Torsionsbelastung untersucht. In beiden Systemen lässt sich anfangs die Neubildung von Versetzungsringen fast ausschließlich auf die Quellaktivitäten zurückführen.

Für den Torsionsdraht gewinnt die Versetzungsmultiplikation mit zunehmender Verformung an Bedeutung, was sich auf die erhöhte Kollisionswahrscheinlichkeit infolge steigender Versetzungsdichten und lokal steigender Versetzungsgeschwindigkeiten zurückführen lässt, und übersteigt schließlich ab einer Randscherung von  $\gamma_R \approx 0,5\%$  die Versetzungsquellaktivitäten. Es sei angemerkt, dass es sich bei der Versetzungsanzahl um eine zeitlich integrale Größe handelt und der Anteil der Versetzungsmultiplikation an der aktuellen

Änderungsrate somit noch höher ausfällt. Der Übergang der Versetzungsproduktion zur -multiplikation ist konsistent zu den in Stricker und Weygand (2015) durchgeführten *DDD*-Simulationen von Aluminium-Mikropillars mit  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  und  $\langle 234 \rangle$  Kristallorientierungen und variierenden Systemgrößen im Bereich von  $0,5 - 2 \mu\text{m}$  unter Zugbelastung bis zu einer Dehnung von  $\varepsilon^{\text{ext}} = 0,5\%$ . Dort wurden die gleitfähigen Reaktionen als wichtiger Mechanismus für die Bildung mobiler Versetzungen identifiziert, die für  $30 - 60\%$  der plastischen Dehnung verantwortlich sind. Demnach bestätigen die Resultate dieser Arbeit den in Stricker und Weygand (2015) beobachteten Übergang der Versetzungsproduktion zur -multiplikation auch für bestimmte größere Mikrosysteme unter inhomogener Belastung. (Als Zusatzinformation: Die unten eingeführte Vergleichsgröße beläuft sich in Stricker und Weygand (2015) auf  $a\sqrt{\rho^{\text{Tot}}} \in [0, 2; 10, 3]$ ).

Um neben der Versetzungsdichte auch den Einfluss variierender Systemgrößen  $a$  und den damit einhergehenden verlängerten maximal zurückgelegten Strecken der Versetzungen auf die Kollisionswahrscheinlichkeit abzubilden, wird Zaiser und Sandfeld (2014) folgend das Verhältnis der makroskopischen Systemgröße zu der internen Längenskala der Versetzungsstrukturen (z. B. zum mittleren Versetzungsabstand) als dimensionslose Größe  $a\sqrt{\rho^{\text{Tot}}}$  herangezogen. Die Berücksichtigung dieses Faktors beim Vergleich zweier Systeme wird durch die unterschiedliche Ausprägung der verschiedenen Verfestigungsmechanismen in den jeweiligen Regimen motiviert, siehe Abschnitt 1.2. Da dieser Faktor während der jeweils betrachteten Mikrostrukturevolution sowohl für den in dieser Arbeit untersuchten Mikropillar als auch für den Mikrodraht in der gleichen Größenordnung liegt (Mikropillar:  $a\sqrt{\rho^{\text{Tot}}} \in [15, 5; 28, 3]$ , Mikrodraht:  $R\sqrt{\rho^{\text{Tot}}} \in [18, 6; 32, 6]$ ), wird davon ausgegangen, dass der Einfluss der Systemgröße beim Vergleich beider Systeme vernachlässigt werden kann.

Im Gegensatz zum tordierten Mikrodraht wird im druckbelasteten Mikropillar kein Übergang zur Versetzungsmultiplikation beobachtet. Dies lässt sich auf die besondere Charakteristik des Systems zurückführen, welche aus der  $\langle 110 \rangle$  Kristallorientierung unter einachsiger Druckbelastung resultiert. Die Versetzungsreaktionen zwischen den vier aktiven Gleitsystemen  $\{B2, B4, C1, C3\}$  beinhalten weder gleitfähige Reaktionen noch können Versetzungen zwischen diesen Gleitsystemen quergleiten. Folglich führen durch aktive Gleitsysteme initiierte gleitfähige Reaktionen zur Bildung von Versetzungssegmenten lediglich auf inaktiven Gleitsystemen, nicht aber auf aktiven Gleitsystemen, welche für die Mikrostrukturevolution eine elementare Rolle einnehmen.

Es sei jedoch explizit darauf hingewiesen, dass dies weder bedeutet, dass die gleitfähigen Reaktionen in diesem System nicht auftreten, noch dass sie hier für die Mikrostrukturevolution vernachlässigbar sind. Die in dieser Arbeit über die Krümmungsdichten herangezogene Größe der Anzahl der Versetzungsringe berücksichtigt entsprechend der Modellierung

keine neu gebildeten geraden Versetzungssegmente, die aufgrund zu geringer Spannungen auf dem jeweiligen Gleitsystem unzureichend ausbauchen, siehe die Heaviside-Funktion in Gleichung 3.27g. Dies ist auf den inaktiven Gleitsystemen der Fall. Die Größe der Versetzungsanzahl erfasst also lediglich die Krümmungsdichte, nicht jedoch die transferierte totale Versetzungsdichte oder die infolge der Mikrostrukturevolution resultierende plastische Verformung.

Darüber hinaus ist die Rolle der infolge der gleitfähigen Reaktionen auf den inaktiven Gleitsystemen abgelegten Versetzungsdichte ungewiss [Katzner et al. (2022)]. Diese Versetzungsdichten können als Reaktionspartner für andere Versetzungsreaktionen fungieren und somit auch Einfluss auf andere Aspekte der Mikrostrukturevolution nehmen. In Stricker und Weygand (2015) wurde für die  $\langle 110 \rangle$  Orientierung der plastische Dehnungsanteil der infolge von gleitfähigen Reaktionen gebildeten Versetzungen mittels einer Approximation (Methode der kleinsten Quadrate) auf 10 – 40 % beziffert, was jedoch mit einer Differenz von ca. 20 % zu den anderen Hochsymmetrie-Orientierungen deutlich geringer ausfällt und demnach den oben beschriebenen qualitativen Unterschied zwischen den beiden Systemen bekräftigt.

Folglich muss bei der Beurteilung der Bedeutung der Versetzungsquellen verglichen zur Versetzungsmultiplikation neben der Höhe der Versetzungsdichte im System und der Systemgröße auch die Kombination der Kristallorientierung und Belastung im Hinblick auf mögliche Versetzungsreaktionen aktiver Gleitsysteme berücksichtigt werden. Demnach empfiehlt es sich eine detaillierte Systemanalyse analog zu Kapitel 4 durchzuführen. Eine Orientierung liefert dabei die Reaktionsmatrix in Abbildung 3.2 unter Kenntnis der anhand des Schmid-Faktors als aktiv erwartenden Gleitsysteme. Hieraus lässt sich z. B. das Verhältnis der Anzahl an Multiplikationsbeziehungen (gleitfähige Reaktion und Quergleiten) zwischen aktiven Gleitsystemen zu der Anzahl an allen Reaktionsbeziehungen zwischen aktiven Gleitsystemen bestimmen (Mikropillar:  $\frac{n_{a \leftrightarrow a}^{\text{multi}}}{n_{a \leftrightarrow a}} = \frac{0}{16} = 0$ , Mikrodraht:  $\frac{n_{a \leftrightarrow a}^{\text{multi}}}{n_{a \leftrightarrow a}} = \frac{4}{16} \approx 0,25$  für die vier primären Gleitsysteme bzw.  $\frac{n_{a \leftrightarrow a}^{\text{multi}}}{n_{a \leftrightarrow a}} = \frac{60}{144} \approx 0,42$  für alle zwölf Gleitsysteme). Je höher das Verhältnis ausfällt, desto größer wird tendenziell der Einfluss der Versetzungsmultiplikation verglichen zu den Versetzungsquellen erwartet, wobei zusätzlich auch die Ereigniswahrscheinlichkeiten der Versetzungsreaktionen berücksichtigt werden muss, siehe u. a. Gleichung 3.20 und 3.25.

## 6.2 Einfluss der Gleitsystemaktivitäten auf die Versetzungsconfiguration

Nachdem im vorherigen Abschnitt die Aktivierung der Gleitsysteme diskutiert wurde, widmet sich der folgende Abschnitt den Auswirkungen der jeweiligen Gleitsystemaktivitäten auf die Versetzungsconfiguration. Im Zuge der in Kapitel 4 durchgeführten Systemanalysen wurde für die betrachteten Systeme a priori Klassifikationen der Gleitsysteme basierend auf den Schmid-Faktoren und möglichen Versetzungsreaktionen für die jeweiligen Kristallorientierungen theoretisch abgeleitet und Unterschiede zwischen den einzelnen Gleitsystemgruppen bezüglich ihrer Aktivität, Relaxationsprinzip sowie Konfiguration und Zusammensetzung der *GND*-Dichte identifiziert.

Diese Klassifikationen der Gleitsysteme konnte in den Simulationen bestätigt werden, siehe u. a. die Verläufe der plastischen Scherung (Mikropillar: Abbildung 5.10, Mikrokragarm: Abbildung 5.12, Mikrodraht: Abbildung 5.18). Die Wichtigkeit der Berücksichtigung möglicher Versetzungsreaktionen für die Gruppierung der Gleitsysteme wird z. B. für den  $\langle 110 \rangle$  orientierten Mikrodraht unter Torsionsbelastung deutlich. So lässt sich im Vergleich der beiden Gleitsystemgruppen  $G1 = \{A2, A3, D1, D4\}$  und  $G2 = \{B2, B4, C1, C3\}$ , welche beide denselben Schmid-Faktor aufweisen, der Unterschied in den plastischen Scherungen am Ende der betrachteten Belastung ( $\gamma_{G1} \approx 4 \gamma_{G2}$ ) neben geometrischen Unterschieden in den Querschnitten der Gleitebenen ( $A_{G1}^{\text{av,geom}} \approx 1,6 A_{G2}^{\text{av,geom}}$ , vgl. Abbildung 4.6) auch auf ihre Beziehungen zur primären Gleitsystemgruppe  $\{A6, D6\}$  zurückführen. Die von der primären Gleitsystemgruppe  $\{A6, D6\}$  initiierten gleitfähigen Reaktionen führen lediglich in der Gleitsystemgruppe  $G1$  zu neuen mobilen Versetzungen, deren Bewegungen das Material plastisch verformen. Folglich muss zur Abschätzung der Aktivität der Gleitsystemgruppe neben dem Schmid-Faktor auch die Reaktionsbeziehungen, insbesondere die Multiplikationsbeziehungen zu der primären Gleitsystemgruppe, berücksichtigt werden [Zoller et al. (2023)].

### 6.2.1. Versetzungsnetzwerkcharakteristiken

Die Materialverfestigung im Stadium II der Verformung von *kfz* Metallen wird üblicherweise auf die Bildung und Auflösung von Versetzungsverbindungen zwischen den einzelnen Gleitsystemen zurückgeführt. Madec et al. (2003) und Devincre et al. (2006) nutzen *DDD*- und atomistische Simulationen, um die Behinderung der Versetzungsbewegung infolge der Interaktionen zwischen den einzelnen Gleitsystemen mittels spezieller, an die einzelnen Untersuchungen angepassten Systemkonfigurationen zu untersuchen. Im

Gegensatz hierzu wird in dieser Arbeit Sudmanns et al. (2020) folgend die Evolution der Versetzungsreaktionen mittels Analysen von *DDD*-Datensätzen mit hochsymmetrischen Orientierungen ausgewertet, bei denen mehrere Gleitsysteme aktiv sind und alle Reaktionen auftreten können. Verglichen zu Sudmanns et al. (2020) enthält der *DDD*-Datensatz verschiedene Kristallorientierungen und nutzt Ratenformulierungen anstatt absoluter Werte zur Erfassung der zum jeweiligen Zeitpunkt ablaufenden Mechanismen und zur besseren Übertragbarkeit der Ergebnisse in Kontinuumsansätze.

Die Analyse ergibt, dass sich die Änderungsraten der Versetzungsreaktionsdichten hauptsächlich auf die Beteiligung aktiver Gleitsysteme zurückführen lassen [Katzner et al. (2022)], siehe hierzu den Unterschied in den Änderungsraten der Versetzungsreaktionsdichten zwischen Gleitsystempaarungen aktiver und inaktiver Gleitsysteme um ungefähr eine Größenordnung in Abbildung 5.6 oder vergleiche die Anzahl an Lomerarmen in Abbildung 5.8. Dies ist konsistent zu dem Framework in Kubin et al. (2008b), in dem die Akkumulation der Versetzungsdichte im Zuge der Mikrostrukturevolution von der Anzahl der aktiven Gleitsysteme abhängig ist und folglich eine Orientierungsabhängigkeit der Materialverfestigung abbildet. Die durch die aktiven Gleitsysteme initiierten Versetzungsreaktionen legen Versetzungsdichten auf den inaktiven Gleitsystemen ab [Katzner et al. (2022)], was auch in den *DDD*-Simulationen von einkristallinem Aluminium mit einer  $\langle 100 \rangle$  Kristallorientierung in Sudmanns et al. (2019) bzw. Kupfer mit variierenden Kristallorientierungen in Akhondzadeh et al. (2020) infolge von gleitfähigen und koplanaren Reaktionen beobachtet wurde. Die Resultate in dieser Arbeit weisen somit diese ablaufende Prozesse auch für weitere Mikrosysteme nach. In wie weit sich stark heterogene Mikrostrukturen (z.B. infolge der Mikrostrukturevolution bei zeitlicher Variation der Belastungsart bzw. -richtung) auf die elementare Rolle der primär aktiven Gleitsysteme bei der Bildung von Versetzungsverbindungen auswirken, bleibt in weiterführenden Untersuchungen zu klären.

In Akhondzadeh et al. (2020) erfolgt eine Differenzierung bzw. Klassifizierung der Gleitsysteme nicht nur anhand ihrer Schmid-Faktoren sondern auch unter Einbezug der Reaktionsbeziehungen zu anderen Gleitsystemen. Fortführend wird in Akhondzadeh et al. (2021) eine empirische Faustregel für die Versetzungsmultiplikation basierend auf dem Schmid-Faktor des betrachteten Gleitsystems und des maximalen auf der betrachteten Gleitebene auftretenden Schmid-Faktors abgeleitet ( $|m_s - 0,5 \max_{\tilde{s} \in \text{Ebene}} m_{\tilde{s}}| > 0,1$ ). Dieses Kriterium umfasst dabei sowohl die Versetzungsmultiplikation durch Versetzungsgleiten („slip-driven multiplication“ für  $m_s > 0,5 \max_{\tilde{s} \in \text{Ebene}} m_{\tilde{s}}$ ) als auch ohne Versetzungsgleiten auf dem betrachteten Gleitsystem („slip-free multiplication“ für  $m_s < 0,5 \max_{\tilde{s} \in \text{Ebene}} m_{\tilde{s}}$ ).

Meiner Einschätzung nach liefert die Kombination der beiden Arten der Versetzungsmultiplikation innerhalb eines Kriterium u. U. uneindeutige Vergleichswerte, die hier zudem abhängig von der jeweiligen Gleitebene sind. Deshalb sollte meiner Ansicht nach das Kriterium für die Versetzungsmultiplikation durch Versetzungsgleiten zu  $\frac{m_s}{m^{max}} > \frac{0,1}{m^{max}} + 0,5 \geq 0,6$  umgeformt werden, wobei  $m^{max} = \max_{\tilde{s}} m_{\tilde{s}}$  den maximal auftretenden Schmid-Faktor im gesamten System bezeichnet. Zudem sollte das Kriterium für Versetzungsmultiplikation ohne Versetzungsgleiten auf dem betrachteten Gleitsystem unter Berücksichtigung aller Multiplikationsreaktionen verallgemeinert werden. Hierbei ist ausschlaggebend, ob eine Multiplikationsreaktionen zwischen zwei aktiven Gleitsystemen existiert, die Versetzungssegmente auf dem betrachteten Gleitsystem ablegen:  $\exists \{\tilde{s}, \hat{s}\} \in \text{aktiv} : (\tilde{s} + \hat{s} \xrightarrow[\text{reaktion}]{\text{Multiplikations-}} s)$ . Die Reaktionsbeziehungen zwischen den individuellen Gleitsystemen können der Reaktionsmatrix in Abbildung 3.2 entnommen werden. Für eine detailliertere Erläuterung und Diskussion der Terme des Versetzungsmultiplikationskriteriums sei auf Abschnitt A.2 im Appendix verwiesen.

Im Zuge der Untersuchungen in dieser Arbeit wurde für die Entstehung von neuen Versetzungssegmenten auf dem betrachteten Gleitsystem nicht der Schmid-Faktor des betrachteten Gleitsystems sondern die Schmid-Faktoren der an der Versetzungsreaktion beteiligten Gleitsystempaarungen als der elementare Indikator identifiziert [Katzner et al. (2022)]. Siehe hierzu u. a. den Einfluss der Aktivität der Gleitsysteme der Reaktionspaarungen auf die Höhe der Versetzungsreaktionsdichten in Abbildung 5.6 oder den Einfluss der Höhe der Schmid-Faktoren der Gleitsysteme möglicher Lomer-Reaktionspaarungen auf die Anzahl an Lomerarmen in Abbildung 5.8, welche mit der Anzahl der Lomer-Verbindungen korreliert. Die höhere Anzahl der Lomerarme auf den Gleitsystemen  $\{D1, B5\}$  verglichen zu  $\{A6, B5\}$  trotz geringerer Schmid-Faktoren ( $m_{B5} = 0.17$  und  $m_{D1} = 0.29$  vgl. zu  $m_{A6} = m_{B4} = 0.35$ ) lässt sich auf die Aktivität des primären Gleitsystems ( $A3$  mit  $m_{A3} = 0.47$ ) und den daraus resultierenden Lomer-Verbindungen mit Versetzungen auf den Gleitsystemen  $\{D1, B5\}$  zurückführen. Hierbei sei angemerkt, dass der Fokus dieses Arbeitsabschnittes auf den Versetzungsverbindungen selbst liegt (und folglich lediglich die Versetzungslinienlänge der Versetzungsverbindung bzw. die Anzahl an Versetzungsverbindungen betrachtet wird), wohingegen Akhondzadeh et al. (2020) die Evolution aller Versetzungen einschließlich etwaiger Ausbauchprozesse näher beleuchtet (und damit zusätzlich die Versetzungslinienlänge der Versetzungsarme an den Versetzungsverbindung sowie die Versetzungslinienlänge der von Versetzungsquellen gebildeten Versetzungen betrachtet).

Bei der Vorhersage der Versetzungsreaktionsdichten wurde eine große Streuung bzgl. der Vorhersagegüte beobachtet, vgl. die große Streuung des Determinationskoeffizientens in den Heatmaps in Abbildung 5.4. Hierbei wird durch eine Gruppierung der Ergebnisse anhand der Schmid-Faktoren der Gleitsystempaarungen, siehe Abbildung 5.5, ein

Zusammenhang mit der Gleitsystemaktivität sichtbar. Die auf das Versetzungsreaktionsmodell, siehe Versetzungsreaktionsgleichung in Gleichung 3.25, angewendete multiple lineare Regression sagt für aktive Gleitsystempaarungen die Zielgröße (Änderungsrate der Versetzungsreaktionsdichten) mit ausreichend hoher Genauigkeit voraus, wohingegen das Versetzungsreaktionsmodell ungeeignet ist, die Reaktionspaarungen inaktiver Gleitsysteme abzubilden [Katzner et al. (2022)], vgl. die hohen  $R^2$ -Werte der Reaktionspaarungen aktiv-aktiv mit den niedrigen  $R^2$ -Werte der Reaktionspaarungen inaktiv-inaktiv in Abbildung 5.5 oder Abbildung 5.6.

Der Unterschied in der Vorhersagegüte lässt sich auf die beobachtete Streuung der vorhergesagten Änderungsrate der Versetzungsreaktionsdichten (ca.  $\pm 10^{10} \text{ m}^{-2}$  in Abbildung 5.6) zurückführen [Katzner et al. (2022)]. Unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Größenordnungen der Zielgrößen (die Raten der Versetzungsreaktionsdichten für die aktive Gleitsystempaarung übertreffen die der inaktiven um ungefähr eine Größenordnung) führt diese Streuung zu unterschiedlich stark ausgeprägten prozentualen Abweichungen. Es sei aber angemerkt, dass die Unterschiede in der Höhe der Reaktionskonstanten (vgl.  $C^{\text{react}}$  in Abbildung 5.5) mit der Tendenz zu höheren Reaktionskonstanten für inaktive Gleitsystempaarungen auf Unterschiede in den zugrunde liegenden Zusammenhängen der physikalischen Mechanismen hindeuten, die sich nicht über die Streuung der Zielgröße erklären lassen.

Eine Streuung weisen auch die Versetzungslängen in den untersuchten Versetzungsnetzwerken auf, wie sich anhand der Histogramme zu den Längen der Lomerarme in Abbildung 5.7 erkennen lässt. Die dabei beobachtete Tendenz zu kurzen Versetzungslängen verstärkt sich im Zuge der Mikrostrukturevolution und ist stimmig zur Verdichtung des Versetzungsnetzwerkes mit zunehmender plastischer Verformung. Die qualitative Längenverteilung der Lomerarme mit der ausgeprägten Tendenz zu kurzen Versetzungslängen wurde in der Literatur auch für andere Arten der Versetzungssegmente beobachtet. Dies schließt die Längenverteilungen aller Versetzungen in *DDD*-Untersuchungen eines  $\langle 100 \rangle$  orientierten Kupferwürfels in Sills et al. (2018) mit ein. Des Weiteren wurde diese Charakteristik auch in den Längenverteilungen von gleitfähigen, Hirth- sowie Lomer-Versetzungsverbindungen in *DDD*-Daten von dünnsschichtigen *kfz* Metallen in Devincre et al. (2006) beobachtet und ist konsistent zu der modellierten Längenverteilung von Frank-Read-Quellen in dünnen Kupferfilmen in Shishvan und Van der Giessen (2010).

Es sei angemerkt, dass in dieser Arbeit speziell die Längenverteilung der Lomerarme, welche eine elementare Bedeutung für die Stabilität der Lomer-Verbindungen und damit für das gesamte Versetzungsnetzwerk einnehmen (siehe Gleichung 3.26c), analysiert wurde und der Fokus sich somit von den oben genannten Untersuchungen unterscheidet.

Jedoch weisen die Lomerarme eine ähnliche Verteilung wie die Gesamtheit der potentiell mobilen Versetzungen auf (siehe Histogramme in Abbildung 5.7), obwohl diese nur 20 – 30 % der Linienlänge aller potentiell mobilen Versetzungen darstellen. Zudem zeigt die Längenverteilung der Lomerarme in Übereinstimmung mit Devincere et al. (2006) in den untersuchten Systemen eine geringe Orientierungsabhängigkeit. Dies deutet darauf hin, dass sich die Erkenntnisse über die Längenverteilungen zwischen den verschiedenen Betrachtungen übertragen lassen.

Hintergrund für die ähnlichen Längenverteilungen könnte die sukzessive Verdichtung des Versetzungsnetzwerkes darstellen. Die dabei auftretende Verkürzung der einzelnen Versetzungssegmente lässt sich nach Sills et al. (2018) mithilfe eines eindimensionalen Poisson-Prozesses modellieren. Unter der Annahme, dass infolge der Versetzungsreaktionen die einzelnen Versetzungssegmente an zufälliger Stelle in zwei kürzere Versetzungssegmente unterteilt werden, wobei die Wahrscheinlichkeit für die Beteiligung in einer Versetzungsreaktion proportional zur Länge des Versetzungssegments ist, entwickelt sich eine entsprechende Exponentialverteilung der Versetzungslängen heraus.

Bei einer differenzierten Betrachtung der Längenverteilung bzw. der mittleren Versetzungslänge in Abbildung 5.8, welche als charakteristische Größe für die Längenverteilung herangezogen wird, wird eine Abhängigkeit von der Gleitsystemaktivität deutlich. So weisen aktivere Gleitsysteme im Zuge der Mikrostrukturevolution längere Versetzungslinien auf, was sich durch die Zunahme der Versetzungslinien infolge von Ausbauchprozessen bei ausreichend hohen anliegenden Spannungen auf den jeweiligen Gleitsystemen erklären lässt. Für die  $\langle 123 \rangle$  Orientierung nimmt die mittlere Versetzungslänge auf dem primären Gleitsystem mit zunehmender plastischer Verformung nicht ab, sondern bleibt ungefähr konstant und steht damit entgegen der Beobachtung für das Gesamtsystem und der erwarteten Entwicklung für ein sich verdichtendes Versetzungsnetzwerk.

Folglich ist zur Beschreibung der Versetzungslängen eine Differenzierung zwischen den Gleitsystemen anhand ihrer Aktivitäten sinnvoll. Des Weiteren stellen die Ergebnisse die qualitative Gültigkeit der in Kontinuumsansätzen verbreiteten Approximation der mittleren Versetzungslänge über den mittleren Versetzungsabstand (welcher wiederum über den Kehrwert der Quadratwurzel der totalen Versetzungsdichte approximiert wird, siehe Gleichung 3.21b), insbesondere für sehr aktive Gleitsysteme in Systemen ohne hochsymmetrische Orientierung infrage. Dies motiviert zukünftige umfassende Studien zu den genauen Gültigkeitsbereichen, Zusammenhängen und Hintergründe.

### 6.2.2. Zusammensetzung der GND-Dichte

Nachdem im vorherigen Abschnitt der Einfluss der Gleitsystemaktivitäten auf Charakteristiken des Versetzungsnetzwerkes diskutiert wurde, widmet sich der folgende Abschnitt dem Einfluss der Gleitsystemaktivitäten auf die Zusammensetzung der mobilen Versetzungsdichte, bzw. speziell der *GND*-Dichte. Die Zusammensetzung der *GND*-Dichte hat einen großen Einfluss auf potentiell ablaufende Mechanismen in der Mikrostruktur, so können z. B. lediglich Schraubenversetzungen quergleiten. Die *GND*-Dichte führt zu einer Verzerrung des Kristallgitters und stellt somit eine Größe dar, die auch experimentell, z. B. mittels *HR-EBSD*-Messungen, bestimmt oder zumindest abgeschätzt werden kann. Jedoch gestaltet sich die Identifizierung der Zusammensetzung der *GND*-Dichte aus experimentellen Daten aufgrund der Limitierung möglicher Messgrößen als schwierig, bzw. begrenzt sich auf Teilaspekte. Die durchgeführten *CDD*-Simulationen ermöglichen einen direkten Zugang zur Mikrostruktur und der Zusammensetzung der Versetzungsdichten.

In allen untersuchten Systemen, die sowohl homogene als auch inhomogene Spannungsfelder mit dominanten Normal- als auch Schubspannungskomponenten umfassen, treten Versetzungen mit sowohl Stufen- als auch Schraubencharakter auf, wobei sich die genauen Zusammensetzungen zwischen den einzelnen Systemen unterscheiden (siehe Zusammensetzung der totalen Versetzungsdichten in Abbildung 5.10, 5.13, 5.15 und 5.17). Folglich handelt es sich bei allen betrachteten Systemen um dreidimensionale Probleme im Raum, die von der Kombination aus Spannungsfeldern und Gleitsystemorientierungen abhängig sind und sich hinsichtlich der Untersuchungen nicht auf zweidimensionale Betrachtungen reduzieren lassen.

#### Homogenes Normalspannungsfeld – Mikropillar unter Druckbelastung

In dem untersuchten  $\langle 110 \rangle$  orientierten Mikropillar unter Druckbelastung findet die plastische Verformung, wie nach der Systemanalyse in Abschnitt 4.1 erwartet, hauptsächlich auf den vier Gleitsystemen mit den höchsten Schmid-Faktoren  $\{B_2, B_4, C_1, C_5\}$  statt, vgl. die jeweiligen Anteile an der plastischen Scherung in der Simulation in Abbildung 5.10 mit den Schmid-Faktoren in Abbildung 4.1. Dies begründet zum einen die im Experiment beobachteten Orientierungen der Gleitstufen auf der Oberfläche parallel zu den Gleitebenen  $\{B, C\}$ , siehe *REM*-Aufnahmen in Abbildung 5.9. Zum anderen erklärt die Superposition der Aktivitäten dieser vier primären Gleitsysteme entsprechend der Abbildung 4.1 die im Experiment beobachtete stärkere Ausbauchung des Mikropillars in x-Richtung als in z-Richtung, betrachte die linke *REM*-Aufnahme in Abbildung 5.9. [Zoller et al. (2021)]

Infolge der Belastung wird sowohl im Experiment als auch in der Simulation eine Akkumulation von  $GND$ -Dichte festgestellt, siehe Abbildung 5.9 und 5.10. Der Anstieg der  $GND$ -Dichte wurde in der Systemanalyse aufgrund des homogenen Spannungsfeldes nicht erwartet, ist aber konsistent zu den in Kiener et al. (2011) durchgeführten in situ  $EBS$ D-Messungen und zweidimensionalen  $DDD$ -Simulationen zur Druckbelastung von einkristallinen Kupfer-Mikropillar mit einer hochsymmetrischen Kristallorientierung und zu den in Maaß et al. (2008) durchgeführten in situ Laue und  $EBS$ D-Messungen zur Druckbelastung von einkristallinen Kupfer-Mikropillar mit einer Doppelgleitorientierung. Folglich stellt der Anstieg der  $GND$ -Dichte ein Charakteristikum des untersuchten Mikrosystems dar. Dies führt zu der Frage, auf welchen Gleitsystemen die  $GND$ -Dichte gebildet wird und wie diese im System stabilisiert wird.

In den Untersuchungen dieser Arbeit konnte gezeigt werden, dass sich die  $GND$ -Dichte für den Mikropillar unter Druckbelastung auf den inaktiven Gleitsystemen, welche nicht primär an der plastischen Verformung beteiligt sind, ansammelt [Zoller et al. (2021)]. Darauf deuten zum einen die in Abbildung 5.9 abgebildeten experimentellen Ergebnisse hin, in denen die Orientierungen der Regionen mit hoher  $GND$ -Dichte teilweise nicht mit den Orientierungen der Gleitstufen auf der Oberfläche übereinstimmen, bzw. die Orientierungen der Regionen der dominanten Burgersvektoren nicht den dazugehörigen Gleitebenen entsprechen. Zum anderen ist dies direkt aus der in Abbildung 5.11 abgebildeten Zusammensetzung der  $GND$ -Dichte in der Simulation ersichtlich. Dieser Zusammenhang deckt sich mit den Beobachtungen von Kirchlechner et al. (2011b) basierend auf der Analyse von in situ  $REM$ -Aufnahmen und ex situ  $\mu$ Laue-Beugungsmessungen für einkristalline Kupferproben mit einer Kantenlänge von  $a = 3 \mu\text{m}$  und einer  $\langle 234 \rangle$  Orientierung unter Zugbelastung, in denen genau ein primäres Gleitsystem mit dem höchsten Schmid-Faktor existiert. Die Resultate in dieser Arbeit weisen somit zum einen die Akkumulation der  $GND$ -Dichte auf inaktiven Gleitsystemen direkt nach und zum anderen bestätigen sie dies auch für eine hochsymmetrischen Kristallorientierung mit Mehrfachgleitung ( $\langle 110 \rangle$ ) und für ein größeres Mikrosystem ( $a = 10 \mu\text{m}$ ).

Die Analyse der lokal dominanten Burgersvektoren in Abbildung 5.9 zeigt verschiedene Regionen der jeweils gemittelten Burgersvektoren. Zusammen mit der experimentell ermittelten Verteilung der  $GND$ -Dichte lassen sich daraus Hinweise auf die Zuordnung der  $GND$ -Dichte zu den einzelnen Gleitsystemen ableiten. Hierbei stimmen die Orientierungen der Regionen nicht mit dem Winkel der Gleitebene des entsprechenden primären Gleitsystems überein, sondern entsprechen dem Winkel der anderen aktiven Gleitebene, vgl. Abbildung 4.1. Ein explizites Beispiel sind die Orientierungen der Regionen mit dem dominanten Burgersvektor 1, die nicht mit dem Winkel der Gleitebene C des Gleitsystems C1 sondern mit der Gleitebene B übereinstimmen. Daraus lässt sich schließen, dass die

*GND*-Dichte, oder zumindest Teile davon, auf anderen inaktiven Gleitsystemen liegen. [Zoller et al. (2021)]

Eine mögliche Erklärung wäre die Überlagerung von *GND*-Dichte auf aktiven und inaktiven Gleitsystemen (z. B. B4 und D6). Gleitfähige Reaktionen zwischen den sich bewegenden Versetzungen auf den aktiven Gleitsystemen (z. B. B4) und den Versetzungen auf den inaktiven Gleitsystemen (z. B. D6) können zu neuen Versetzungen mit den entsprechenden Burgersvektoren führen (hier D1), berücksichtige die Versetzungsreaktionsmatrix in Abbildung 3.2. Allerdings würde die inaktive Gleitebene (hier Gleitebene D) senkrecht im Querschnitt verlaufen. [Zoller et al. (2021)]

Die Evolution der Zusammensetzung der *GND*-Dichte in der Simulation, siehe Abbildung 5.11, weist zu Beginn der Belastung eine gewisse Höhe der *GND*-Dichte auch auf den aktiven Gleitsystemen auf, welche jedoch während der weiteren Mikrostrukturevolution nicht im System erhalten bleibt, sondern das System über die Oberfläche verlassen kann [Zoller et al. (2021)]. Im Gegensatz dazu steigt mit zunehmender Belastung der Anteil der *GND*-Dichte auf den inaktiven Gleitsystemen sowie auch der Anteil der *GND*-Dichte an der totalen Versetzungsdichte im System insgesamt.

Dies lässt sich durch die deutlich geringeren Schmid-Faktoren auf den inaktiven Gleitsystemen, welche für eine ideale einachsige Belastung zu Null werden, erklären. Aufgrund der geringeren aufgelösten Schubspannungen fällt auch die Triebkraft auf die Versetzungen zum Verlassen des Systems deutlich geringer aus. Zusätzlich kann die Versetzungsbewegung durch die vorhandenen Versetzungsnetzwerkstrukturen behindert werden. Folglich kann die *GND*-Dichte auf den inaktiven Gleitsystemen leicht stabilisiert und im System erhalten werden. Es ist anzumerken, dass in der verwendeten *CDD*-Formulierung die *GND*- und *SSD*-Anteile in der Versetzungsnetzwerkdichte nicht separat aufgelöst werden und somit deren möglichen Beiträge zur *GND*-Dichte nicht betrachtet wurden. Folglich wird die *GND*-Dichte unter Umständen unterschätzt. [Zoller et al. (2021)]

### **Inhomogenes Normalspannungsfeld – Mikrokrugarm unter Biegung**

In dem untersuchten  $\langle 100 \rangle$  orientierten Mikrokrugarm kommt es zu einer Überlagerung der inhomogenen Normal- und Schubspannungsfelder. Hierbei konnte in Übereinstimmung mit der theoretischen Systemanalyse, siehe das Verhältnis der maximalen Spannungskomponenten in Gleichung 4.2, das Normalspannungsfeld infolge der Biegebelastung als die dominante Belastung identifiziert werden. Dies ist unter anderem anhand der Größenordnung der Spannungsfelder, siehe Abbildung A.2 im Appendix, ersichtlich und erklärt die beobachtete Akkumulation der *GND*-Dichte infolge eines Versetzungsaufstaus im Inneren des Systems.

Dies bestätigt die Schlussfolgerungen in Konijnenberg et al. (2015) anhand experimenteller Untersuchungen mittels dreidimensionalen *EBS*D-Messungen von einem Mikrokragarm bestehend aus Kupfer mit zwei Körnern, die eine Kristallorientierung nahe der  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Orientierung aufweisen.

Der Versetzungsaufstau infolge der Gleitsystemaktivitäten lässt sich auf den Bereich nahe der festen Einspannung lokalisieren, siehe die räumliche Verteilung der *GND*-Dichte in Abbildung 5.14, und somit nahe der maximalen auftretenden Spannungen im System. Dies ist konsistent u. a. zu den *EBS*D-Messungen von einem einkristallinen Mikrokragarm aus Kupfer in Demir und Raabe (2010) und den *DDD*- und *CDD*-Simulationen eines einkristallinen Mikrokragarms aus Aluminium mit einer Hochsymmetrie-Orientierung in Schmitt et al. (2019). Folglich stellt dies ein Charakteristikum des Systems dar.

Die Gleitsystemaktivitäten lassen sich hauptsächlich auf die zwei bzgl. der Normalspannung sensitiven Gleitsystemgruppen  $G1 = \{A3, B4, C3, D4\}$  und  $G2 = \{A6, B5, C5, D6\}$  zurückführen, vgl. die plastischen Scherungen in Abbildung 5.12, und entsprechen somit der Systemanalyse für eine dominante Biegebelastung, berücksichtige die Schmid-Faktoren in Tabelle 4.2. Auch die *GND*-Dichte lässt sich hauptsächlich auf diesen zwei primär aktiven Gleitsystemgruppen lokalisieren, betrachte die Evolution der *GND*-Dichten in Abbildung 5.12. Dies unterscheidet somit das qualitative Verhalten der Akkumulation der *GND*-Dichte in einem inhomogenen von einem homogenen Normalspannungsfeld.

Die *GND*-Dichte weist hierbei sowohl einen ausgeprägten Stufen- als auch Schraubencharakter auf, siehe die Zusammensetzung der totalen Versetzungsdichte in Abbildung 5.13. Somit unterscheidet sich die vorliegende Mikrostruktur von vereinfachten Darstellungen im zweidimensionalen Raum basierend auf reinen Stufenversetzungen. Dies ist konsistent zu Konijnenberg et al. (2015), die ebenfalls Schraubenversetzungen in beiden untersuchten Körnern detektieren, wobei sich das Verhältnis von Stufen- zu Schraubenversetzungen je nach Kristallorientierung unterscheiden. Konijnenberg et al. (2015) vermuten den Ursprung für den Unterschied in der Aktivierung unterschiedlicher Gleitsysteme aufgrund der unterschiedlichen Kornorientierungen. Der Einfluss der Gleitsystemorientierung auf den Versetzungscharakter konnte in dieser Arbeit dargelegt werden. In Übereinstimmung mit der theoretischen Systemanalyse weisen die beiden aktiven Gleitsystemgruppen einen unterschiedlichen Versetzungscharakter auf, wobei die Gleitsystemgruppe  $G1$  größtenteils einen Schraubencharakter aufweist, wohingegen in der Gleitsystemgruppe  $G2$  der Stufencharakter überwiegt, vgl. die Anteile an den *GND*-Dichten in Abbildung 5.13. Somit lässt sich die Zusammensetzung der *GND*-Dichte auf die Aktivitäten einzelner Gleitsysteme bzw. Gleitsystemgruppen zurückführen.

Obwohl die qualitative räumliche Verteilung der *GND*-Dichte in dem betrachteten System für die betrachtete Belastung beider Gleitsystemgruppen ähnlich sind, so gibt es doch lokale Unterschiede, siehe die Visualisierung der Gleitsystemgruppe mit der lokal höchsten *GND*-Dichte in Abbildung 5.14. So markiert *GND*-Dichte der Gleitsystemgruppe *G1* den Übergang vom Bereich der Versetzungsaufstaus zum Bereich ohne nennenswerte *GND*-Dichte nahe des freien Endes des Kragarms, an dem die Belastung aufgebracht wird. Mögliche Erklärungen sind zum einen, dass aufgrund der Sensitivität von *G1* auch gegenüber Schubspannungen Versetzungen auf diesen Gleitsystemen infolge der zusätzlichen Triebkraft verglichen zu *G2* teilweise weiter ins Material hineinlaufen können. Zum anderen weisen die Versetzungen in der Gleitsystemgruppe *G1* im Gegensatz zu *G2* einen hohen Schraubenanteil auf. Folglich ist anzunehmen, dass die Versetzungen infolge von Quergleitmechanismen den aus den Versetzungsaufstaus resultierenden Rückspannungen nahe der Einspannungen ausweichen und somit weiter in Richtung des freien Endes des Kragarms vordringen. Auswirkungen des Quergleitens von Versetzungen auf deren Aufstauverhalten wurde in Kirchlechner et al. (2015) für einkristalline Mikrokrägarne aus Kupfer mit variierenden Kristallorientierungen unter zyklischer Beanspruchung mittels in situ  $\mu$ Laue-Beugungsmessungen beobachtet. Während Kristallorientierungen, bei denen das Quergleiten der Versetzungen unterbunden ist, ein stationäres Verformungsmuster aufweisen, führen Kristallorientierungen mit einem begünstigten Quergleiten zwischen den aktiven Gleitsystemen zu einer Umverteilung der *GNDs* und infolge dessen zu einer plastischen Irreversibilität.

Außerdem wird in Abbildung 5.14 beobachtet, dass die Gleitsystemgruppe *G2* den größten Beitrag zur *GND*-Dichte in der Diagonalen nahe der festen Einspannung ausgehend von den oberen und unteren Rändern liefert. Dies lässt sich mittels der dort ausgeprägten Schubspannungen infolge der festen Einspannung erklären, siehe das Schubspannungsfeld in Abbildung A.2 im Appendix. Es sei darauf hingewiesen, dass diese Ausprägung kein künstliches Artefakt der speziellen Randbedingung des quaderförmigen Systems in der Simulation darstellt, sondern sich auch für ein System mit erweiterten Systemgrenzen ausbildet, bei dem die feste Einspannung ebenfalls modelliert wird, siehe Unterabschnitt A.3.1 im Appendix. Aufgrund der Sensitivität der Gleitsystemgruppe *G1* bzgl. der Schubspannungen werden die Versetzungen auf den Gleitsystemen von *G1* tendenziell entweder vor dem Bereich aufgestaut oder durch dieses hindurch bewegt. Damit liefert *G2* den höheren Beitrag zur *GND*-Dichte in diesem Bereich. Folglich kann der Einfluss der Schubspannungen auf die lokale Mikrostrukturevolution trotz der Dominanz der Normalspannungen im Gesamtsystem nicht vernachlässigt werden.

Ein Einfluss der Schubspannungen auf die lokalen Gleitsystemaktivitäten lässt sich auch anhand der Verteilung der *GND*-Dichte über die Balkenhöhe innerhalb der Gleitsystem-

gruppe  $G1$  feststellen, siehe Abbildung 5.14. So weist die Untergruppe  $G1a = \{A3, D4\}$  im Zugbereich und  $G1b = \{B4, C3\}$  im Druckbereich des Kragarms eine höhere Aktivität verglichen zu der jeweils anderen Untergruppe auf. Dies ist konsistent zur Systemanalyse und beruht auf der lokalen Verstärkung bzw. Abschwächung der Gleitsystemaktivitäten infolge der Superposition der verschiedenen Spannungskomponenten, vgl. die Vorzeichen der Schmid-Faktoren in Tabelle 4.2.

Es sei angemerkt, dass auch die Orientierungen der Gleitebenen eine Rolle spielen könnten. So verlaufen z. B. die Gleitebenen  $\{B,C\}$  im Zugbereich von der Oberseite in Richtung des freien Endes, wohingegen die Gleitebenen  $\{A,D\}$  von der Oberseite zur festen Einspannung und damit zum Bereich des Versetzungsaufstaus ausgerichtet sind, vgl. die Orientierung der Gleitebenen in Abbildung 4.2. Somit ist ein qualitativer Unterschied zwischen den beiden Untergruppen zu erkennen, jedoch wären die anzunehmenden Auswirkungen gerade entgegengesetzt zur Beobachtung. Aufgrund der besseren Möglichkeit auf den Gleitsystemen  $\{B,C\}$  im Zugbereich dem Versetzungsaufstau auszuweichen, wäre die Vermutung, dass diese Gleitsysteme im Zugbereich auch eine höhere Aktivität aufweisen. Dies ist aber nicht der Fall. Folglich ist anzunehmen, dass der Einfluss der Schubspannungen und nicht die Orientierung der Gleitebenen für die Asymmetrie in der Verteilung der  $GND$ -Dichte über die Balkenhöhe in den Untergruppen verantwortlich ist.

### **Inhomogenes Schubspannungsfeld – Mikrodraht unter Torsionsbelastung**

In den untersuchten Mikrodrähten mit Hochsymmetrieorientierungen kommt es infolge der Torsionsbelastung zu einem inhomogenen Schubspannungsfeld im System. Aufgrund der rotationssymmetrischen Belastung, siehe Systemskizze in Abbildung 4.5, treten im Querschnitt Verformungen in alle Raumrichtungen innerhalb der Ebene auf. Folglich kann die Aktivität eines einzelnen Gleitsystem nicht ausreichen, um die Spannungen zu relaxieren. Hierfür bedarf es der Aktivität mindestens zweier Gleitsysteme oder mehr.

Die für die Kristallorientierung jeweils primäre Gleitsystemgruppe werden zuerst aktiviert, wie bereits in Abschnitt 6.1 diskutiert. Im Zuge der zunehmenden Belastung steigen die vorliegenden Spannungen insbesondere im Randbereich des Torsionsdrahtes an und es werden im Mikrodraht auch nicht primäre Gleitsystemgruppen aktiviert [Zoller und Schulz (2020)], welche Schmid-Faktoren ungleich Null aufweisen, berücksichtige Tabelle 4.3. Die Aktivitäten dieser nicht primären Gleitsystemgruppen liefern einen signifikanten Beitrag zur plastischen Verformung, vgl. die Evolution der plastischen Scherungen in Abbildung 5.18. Dies unterscheidet die Mikrostrukturevolutionen in den untersuchten Mikrodrähten unter Torsionsbelastung von denen in den untersuchten Mikropillars unter

Druckbelastung und Mikrokragarmen unter Biegebelastung. Die Aktivität nicht primärer Gleitsysteme ist konsistent zu den *DDD*-Simulationen von  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  orientierten Mikrodrähten aus Aluminium unter Torsionsbelastung in Stricker et al. (2022).

Aufgrund des linearen Spannungsprofils stauen sich die mobilen Versetzungsdichten in Übereinstimmung mit der Systemanalyse im Inneren des Systems auf und zwar entsprechend der jeweiligen spannungsfreien Linien [Zoller und Schulz (2020)], vgl. die räumliche Verteilung der *GND*-Dichte für die  $\langle 100 \rangle$  Orientierung in Abbildung 5.15 und 5.20 mit der Orientierung der spannungsfreien Linien in Abbildung 4.6 bzw. 5.20. Dies ist konsistent zu den Ergebnissen der Mikrostruktur in Drähten unter Torsionsbelastung sowohl mittels *DDD*-Simulationen von Mikrodrähten aus einkristallinem Kupfer mit einer  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 110 \rangle$  Orientierung in Jones et al. (2016) und zusätzlich mit einer  $\langle 111 \rangle$  Orientierung in Ryu et al. (2016) sowie von Mikrodrähten aus einkristallinem Aluminium mit einer  $\langle 100 \rangle$  Orientierung in Senger et al. (2011) als auch mittels *MD*-Simulationen von Nanodrähten aus einkristallinem Gold und Aluminium mit  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Orientierungen in Weinberger und Cai (2009, 2010). Der innere Versetzungsaufstau entlang der spannungsfreien Linien stellt somit ein Charakteristikum des Systems dar, welches von der in dieser Arbeit verwendeten Kontinuumsformulierung abgebildet und für größere Mikrosysteme nachgewiesen wird (vgl.  $a = 24 \mu\text{m}$  bzw.  $R\sqrt{\rho_0^{\text{Tot}}} = 18.6$  in dieser Arbeit zu  $a \in [5 \text{ nm}; 2 \mu\text{m}]$  bzw.  $R\sqrt{\rho_0^{\text{Tot}}} \in [0, 2; 3, 3]$  in den Untersuchungen der oben genannten Literatur).

Es sei angemerkt, dass für den initial versetzungsfreien Mikrodraht unter konstanter Torsionsbelastung unter Vernachlässigung von Versetzungsreaktionen eine sternförmige Versetzungsstruktur entsprechend der Superposition aller spannungsfreien Linien beobachtet wurde, wohingegen für den initial versetzungsbehafteten Mikrodraht unter zunehmender Torsionsbelastung unter Berücksichtigung von Versetzungsreaktionen sich eine Kreuzstruktur entsprechend der Superposition der spannungsfreien Linien der primären und damit zuerst aktivierten Gleitsystemgruppe entwickelt. Hintergrund könnte die Behinderung der Versetzungsbewegung infolge der Versetzungsdichten auf den anderen Gleitsystemen bzw. infolge des sich bildenden Versetzungsnetzwerkes für den initial versetzungsbehafteten Mikrodraht unter zunehmender Torsionsbelastung sein. Die Ausbildung eines Versetzungsnetzwerkes wird in allen drei untersuchten Kristallorientierungen beobachtet, siehe Abbildung 5.17 und wird auch in den *DDD*-Simulationen zur Torsion von einkristallinen Nanodrähten aus Kupfer in Gravell et al. (2021) sowie in den *DDD*-Simulationen in Stricker et al. (2022) beobachtet. Der genaue Einfluss der Höhe der Werte der Versetzungsdichten, der Versetzungsreaktionen, der Belastung sowie des Materials und der Systemgeometrie auf die räumliche Anordnung der *GND*-Dichte bleibt zu klären.

In allen untersuchten Fällen kommt es jedoch infolge des Versetzungsaufstaus entlang den jeweiligen spannungsfreien Linien der einzelnen Gleitsysteme zu einer Akkumulation von *GND*-Dichte nicht nur im Zentrum nahe der Torsionsachse sondern auch im Randbereich [Zoller und Schulz (2020)]. Hierbei weist die räumliche Verteilung der *GND*-Dichte aufgrund der Hochsymmetrieorientierung entsprechende Achsensymmetrien aber keine Rotationssymmetrie auf. Dies verdeutlicht, dass es sich um ein dreidimensionales Problem handelt. Folglich unterscheiden sich die Ergebnisse von denen der *CTT* in Liu et al. (2018) und der versetzungsbasierten Kontinuumsformulierungen in Kaluza und Le (2011) und Le und Piao (2016), in denen ein künstliches, rotationsymmetrisches Gleitsystem angenommen wird.

Die akkumulierte *GND*-Dichte weist in allen untersuchten Kristallorientierungen sowohl Schrauben- als auch Stufencharakter auf, siehe die Zusammensetzung der totalen Versetzungsdichte in Abbildung 5.17. Hierbei lassen sich zwischen den jeweiligen Gleitsystemgruppen Unterschiede bzgl. des Versetzungscharakter identifizieren, deren qualitative Ausprägung mit den theoretischen Überlegungen anhand fiktiver *GNDs* parallel zu den jeweiligen spannungsfreien Linien übereinstimmen, siehe Abbildung 5.15 und vgl. Tabelle 4.4 mit Abbildung 5.17. In allen untersuchten Kristallorientierungen weisen die primären Gleitsystemgruppen hauptsächlich einen Schraubencharakter auf, wohingegen in manchen anderen Gleitsystemgruppen der Stufencharakter überwiegt. Folglich ergibt sich die Zusammensetzung der *GND*-Dichte im System aus den Aktivitäten der einzelnen Gleitsystemgruppen [Zoller et al. (2023)]. Im Vergleich zwischen den untersuchten Hochsymmetrieorientierungen weist die  $\langle 111 \rangle$  Orientierung den höchsten Schraubenanteil an der *GND*-Dichte im Gesamtsystem auf. Dies lässt sich u. a. darauf zurückführen, dass für alle zwölf Gleitsysteme in der  $\langle 111 \rangle$  Orientierung ein überwiegender Schraubencharakter für die *GND*-Dichte erwartet bzw. beobachtet wird, siehe Tabelle 4.4 bzw. Abbildung 5.17.

Im Vergleich der Kristallorientierungen wird auch ein Unterschied im Zeitpunkt für den Anstieg der totalen Versetzungsdichte festgestellt, siehe Abbildung 5.16. Der hier beobachtete frühere Anstieg der totalen Versetzungsdichte für die  $\langle 100 \rangle$  Orientierung wird auch in den *DDD*-Simulationen in Jones et al. (2016) beobachtet. Hintergrund könnte erstens die Anisotropie der elastischen Eigenschaften (insbesondere des Schubmoduls:  $\frac{\mu_{\langle 100 \rangle}}{\mu_{\langle 111 \rangle}} \approx 2,21$  [Date und Andrews (1969) unter Einbezug der Materialwerte in Tabelle 4.1]) sein, die zu höheren Spannungen für die  $\langle 100 \rangle$  Orientierung führt, und zweitens die höhere Anzahl an Gleitsystemen in der primären Gleitsystemgruppe für die  $\langle 100 \rangle$  Orientierung, vgl. Tabelle 4.5, sowie drittens der vergleichsweise geringere Unterschied in den Schmid-Faktoren zwischen den primären und restlichen Gleitsystemgruppen, vgl. Tabelle 4.3, wodurch die nicht primären Gleitsystemgruppen vergleichsweise früher aktiviert werden. [Zoller et al. (2023)]

Es sei angemerkt, dass in den *DDD*-Simulationen in Stricker et al. (2022) für elastisch isotrop modellierte Aluminium-Mikrodrähte ein früherer Anstieg der totalen Versetzungsdichte für die  $\langle 111 \rangle$  Orientierung verglichen zur  $\langle 100 \rangle$  Orientierung beobachtet wird, was sich u. a. auf die maximalen Schmid-Faktoren zurückführen lässt (vgl. Tabelle 4.3:  $\frac{m_{\langle 100 \rangle}^{\max}}{m_{\langle 111 \rangle}^{\max}} = 0,6$ ) [Zoller et al. (2023)]. Sowohl in Stricker et al. (2022) als auch in dieser Arbeit weisen die totalen Versetzungsdichten einen nahezu linearen Anstieg auf, was die Vergleichbarkeit der beiden Untersuchungen verdeutlicht. Der genaue Einfluss des Materials, der Systemgröße, der Versetzungsreaktionen und der initialen Versetzungsstruktur bleibt zu klären.

Die aus der Versetzungsbewegung resultierenden Torsionskurven in der Simulation sind konsistent zu den experimentellen Messergebnissen. So verläuft die experimentell bestimmte Torsionskurve für den gesamten Torsionsdraht mit einer Bambusstruktur aus alternierenden  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Körnern zwischen den Torsionskurven für die Einkristalle in der Simulation, siehe Abbildung 5.16. Der Torsionsdraht im Experiment kann folglich als eine Reihenschaltung von  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Körnern interpretiert werden [Zoller et al. (2023)]. Es sei angemerkt, dass hierbei Versetzungsinteraktionen mit der Korngrenze und über diese hinweg auftreten [u. a. Kacher et al. (2014), Stricker et al. (2016)].

### 6.3 Missorientierung als Indikator der Gleitsystemaktivitäten

Die Gleitsystemaktivitäten in den untersuchten Mikrodrähten führen zu Missorientierungen im Material. Hierbei wird in der Simulation für alle untersuchten Mikrodrähte eine Zunahme der Missorientierung bzgl. des Querschnittszentrums von der Torsionsachse zur Oberfläche hin beobachtet, siehe Abbildung 5.18. Diese Beobachtung ist konsistent zu den experimentellen Ergebnissen, vgl. die *HR-EBSD*-Messungen in Abbildung 5.19, sowie zu den Laue-Beugungsmessungen in den Experimenten mit den gleichen Mikrodrähten aus Gold mit alternierenden  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Körnern in Ziemann et al. (2015) und zu den Beobachtungen in *DDD*-Simulationen in Stricker et al. (2022). Folglich wird dieses Charakteristikum des Systems von dem in dieser Arbeit verwendeten Kontinuumsformulierung abgebildet. Der qualitative radiale Verlauf der Missorientierung lässt sich auf die erhöhten Gleitsystemaktivitäten im Randbereich des Mikrodrahtes infolge des inhomogenen Spannungsfeldes zurückführen.

Die Unterschiede in den Richtungen der lokalen Rotationsachsen der Missorientierungen zwischen den untersuchten Kristallorientierungen, siehe Abbildung 5.18, lassen sich auf unterschiedliche Relaxationsprinzipien, berücksichtige Abbildung 4.8, der jeweiligen

Gleitsystemgruppen zurückführen. In der  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Orientierung findet die Spannungsrelaxation primär durch die Transformation der elastischen Deformation in plastischen Deformation statt, wohingegen in der  $\langle 110 \rangle$  Orientierung ein elastischer Gegenpart aufgebaut wird [Zoller et al. (2023)]. Dies resultiert aus der Orientierung der primären Gleitsysteme und den damit verbundenen Gleitsystemaktivitäten. In  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  orientierten Einkristallen verlaufen die spannungsfreien Linien, an denen sich die jeweiligen Versetzungsdichten aufstauen, für die primären Gleitsystemgruppen im Querschnitt senkrecht zur Torsionsachse und parallel zur Belastungsebene (Ebenennormale in Richtung der Torsionsachse), wohingegen die spannungsfreien Linien der primären Gleitsystemgruppe in der  $\langle 110 \rangle$  Orientierung parallel zur Torsionsachse verlaufen, siehe Abbildung 4.6 unter Einbezug von Tabelle 4.5. Dies ist konsistent u. a. zu den *DDD*-Simulationen in Gravell et al. (2021) und zu den *MD*-Simulationen in Weinberger und Cai (2009).

Es konnte gezeigt werden, dass auf Basis der theoretischen Überlegungen, vgl. die prinzipiellen Missorientierungen in Abbildung 4.9, die Richtungen der Rotationsachsen der Missorientierungen für einen bekannten Belastungszustand Rückschlüsse über die primär aktiven Gleitsystemgruppen ermöglichen, vgl. Abbildung 5.18. Dies lässt sich auch auf experimentell bestimmte Missorientierungen anwenden, wie in Abbildung 5.19 anhand der Identifikation der Gleitsystemgruppe  $\{A3, B4, C3, D4\}$  als primäre Gleitsystemgruppe für einen  $\langle 100 \rangle$  orientierten Mikrodraht unter Torsionsbelastung gezeigt. [Zoller et al. (2023)]

Die experimentell ex situ beobachteten lokalen Missorientierungen bezogen auf die jeweiligen Nachbarvoxel in Abbildung 5.20 deuten in der  $\langle 100 \rangle$  Orientierung auf die Ausbildung und die Stabilisierung von Kleinwinkeldrehgrenzen bzw. entsprechender Versetzungskonfigurationen hin. Hierbei legt die Orientierung der ausgebildeten Strukturen in Übereinstimmung zu den Simulationsergebnissen eine elementare Rolle der primären Gleitsystemgruppe nahe, welche, wie in Unterabschnitt 6.2.2 diskutiert, hauptsächlich einen Schraubencharakter aufweisen. Dies ist konsistent zu den Ergebnissen in Weinberger und Cai (2009), Gravell et al. (2021) und Stricker et al. (2022), wobei die Resultate in dieser Arbeit diesen Zusammenhang auch für Mikrosysteme mit größeren Abmaßen (vgl. zu den simulierten Mikrodrähten in der genannten Literatur) bestätigen. Die Formation zu einem Versetzungsnetzwerk wirkt sich dabei stabilisierend auf die Versetzungskonfiguration aus. Hierbei lässt sich die tendenziell schwächere Ausprägung der Versetzungsnetzwerksdichten in den am weitesten von der jeweiligen spannungsfreien Linie entfernten Randbereichen auf die dort lokal anliegenden höheren aufgelösten Schubspannungen zurückführen, vgl. die räumliche Verteilung der Versetzungsproduktion in Abbildung 5.15. Die höheren aufgelösten Spannungen könnten dazu führen, dass sich gebildete Versetzungsverbindungen wieder auflösen oder diese nicht ausgebildet werden. [Zoller et al. (2023)]

Es sei angemerkt, dass die im Experiment *ex situ* gemessene Missorientierung auf den Gitterverzerrungen infolge der derzeit im System noch verbliebenen Versetzungen beruht, wohingegen die Missorientierung in der Simulation auf den (schiefsymmetrischen Anteilen der) plastischen Verformungen im Belastungszustand basiert, welche aus den bereits stattgefundenen Versetzungsbewegungen resultieren. Dennoch wird für den untersuchten Mikrodraht von einer Korrelation der beiden Größen ausgegangen, da zum einen die *DDD*-Untersuchungen in Gravell et al. (2021) auf ein stabiles Versetzungsnetzwerk und eine eher geringe plastische Erholung im Entlastungsprozess für die  $\langle 100 \rangle$  Orientierung hindeuten und somit Unterschiede zwischen *in situ* und *ex situ* Messungen der Missorientierung in diesem Fall als klein angenommen werden. Zum anderen ist die *GND*-Dichte infolge des Torsionsspannungsfeldes und den dadurch induzierten internen Versetzungsaufstaus von der Gleitsystemaktivität abhängig, vgl. die *GND*-Dichte auf den einzelnen Gleitsystemen in Abbildung 5.15 unter Berücksichtigung der Gleitsystemgruppierung. Somit kann hier von der *GND*-Dichte auf die Gleitsystemaktivitäten geschlossen werden. Dieser Zusammenhang mag für eine homogene Belastung nicht mehr gegeben sein, da es dort zu einer Akkumulation der *GND*-Dichte auf den inaktiven Gleitsystemen kommt, wie in Unterabschnitt 6.2.2 für den Mikropillar unter Druckbelastung diskutiert. [Zoller et al. (2023)]

Die in dieser Arbeit diskutierte Auswertung der Richtung der Rotationsachsen der Missorientierung bzw. des Relaxationsprinzips kann zusätzlich zu anderen Analyse-Methoden eingesetzt werden, um weitere Informationen über die Mikrostrukturevolution bzw. Gleitsystemaktivitäten zu erhalten. Die Auswertung kann dabei direkt auf die Messergebnisse der Missorientierung angewendet werden, ohne dass weitere Arbeitsschritte nötig sind und liefert dabei Informationen über die Aktivität der Gleitsystemgruppen. Einschränkend gilt jedoch, dass hierfür die Belastung bekannt sein muss und sich lediglich relative und keine absoluten Aktivitäten ableiten lassen. Zudem kann nicht zwischen Gleitsystemgruppen mit dem gleichen Relaxationsprinzip unterschieden werden, bzw. es müssen Annahmen, z. B. anhand der Schmid-Faktoren, getroffen werden, um die wahrscheinlichere Gruppe auszuwählen. [Zoller et al. (2023)]

Der Auswertungsansatz ergänzt z. B. die Analyse der Orientierungen von Gleitstufen auf der Oberfläche mittels *REM*-Aufnahmen, welche Aufschluss über aktive Gleitebenen liefert ohne die jeweils involvierten Gleitsysteme zu offenbaren. Für die Analyse des dominanten Burgersvektors basierend auf dem  $\alpha$ -Tensor, siehe Abbildung 5.9 bzw. Zoller et al. (2021), stehen resultierend aus der Beschränkung der Messung auf eine Fläche lediglich drei der neun  $\alpha$ -Komponenten zur Verfügung und die Analyse liefert nur den dominanten Burgersvektor, nicht aber die dazu gehörige Gleitebene bzw. das Gleitsystem. Zudem ist eine Superposition der Burgersvektoren zu einem anderen Burgersvektor möglich, wodurch die Ergebnisse u. U. uneindeutig sind. [Zoller et al. (2023)]

Kysar et al. (2007) beschränkt sich zur Identifikation der  $GND$ -Dichte auf einzelnen Gleitsystemen in Eindringversuchen in einkristallines Kupfer und Aluminium mittels des auf  $EBS$ D-Messungen basierenden  $\alpha$ -Tensors auf einen ebenen Zustand und die Betrachtung lediglich dreier repräsentativer Gleitsysteme. Im Gegensatz dazu basiert die Auswertung des Relaxationsprinzips in dieser Arbeit auf allen zwölf Gleitsystemen der  $kfz$  Gitterstruktur für ein dreidimensionales System. Der in Ruggles et al. (2016a) verfolgte Ansatz zur Zuteilung der  $GND$ -Dichte auf einzelne Versetzungsarten mittels der Nye-Kröner-Bilby-Methode basierend auf dem durch  $HR$ - $EBS$ D-Messungen ermittelten  $\alpha$ -Tensors für den Eindringversuch in einkristallines Nickel benötigt zwar keine Zusatzinformation über die Belastung, bedarf aber der Lösung eines Minimierungsproblems und der Voraussetzung von gewissen Annahmen um fehlende Informationen bzgl. der neun  $\alpha$ -Komponenten zu kompensieren. Zu den Annahmen zählt unter anderem die Vernachlässigbarkeit des elastischen Dehnungstensors, welche jedoch insbesondere für kleinere Mikrosysteme unter inhomogenen Belastungen unter Umständen nicht zulässig ist [Kirchlechner et al. (2012)].

## 6.4 Größeneffekte induziert durch Versetzungsaufstaus

Die im Randbereich der untersuchten Mikrodrähte gebildete Versetzungsdichte bewegt sich aufgrund des anliegenden Spannungsfeldes ins Innere des Drahtes und führt dabei zu einer plastischen Verformung des Materials und der damit verbundenen Spannungsrelaxation. Folglich wird auch das Kontinuum nahe der Torsionsachse plastisch verformt, siehe Abbildung 5.22, obwohl die dort lokal anliegende Spannung niedriger als die lokale Quellspannung ist. Es ist anzumerken, dass dies ein wichtiges Merkmal der versetzungsflussbasierten Kontinuumsformulierung darstellt, welches mit einer rein lokalen Formulierung nicht abgebildet werden kann [Zoller und Schulz (2020)].

Das inhomogene Spannungsfeld der Torsionsbelastung führt zu einem Versetzungsaufstau im Inneren des Systems, siehe Abbildung 5.21. Hierbei wird im Gleichgewichtszustand der untersuchten Systeme unter konstanter Belastung eine nahezu konstante totale Versetzungsdichte in der Nähe der Torsionsachse beobachtet, siehe Abbildung 5.22, was sich auch nach den versetzungsbasierten Kontinuumsansätzen in Kaluza und Le (2011), Le und Piao (2016) ausbildet. Hierbei ist in den untersuchten Systemen die Höhe der totalen Versetzungsdichte in Zentrumsnähe konsistent zu den experimentellen Ergebnissen zu  $kfz$  Polykristallen unter Torsionsbelastung durch Arsenlis und Parks (1999), in denen der Nye-Faktor (Verhältnis des Produktes aus  $GND$ -Dichte und der Länge des Burgersvektors zum plastischen Dehnungsgradienten) für den Schraubenanteil zu 1,93 bestimmt wird.

Somit kann die empirische Berechnung für eine grobe Abschätzung der Versetzungsdichte in der Mikrodrahtmitte auch für die untersuchten Einkristalle verwendet werden, wenn die äußeren Spannungen über die internen Spannungen dominieren. Der zunehmende Betrag der Versetzungsdichte für kleinere Mikrodrahtradien ( $\kappa_{\text{norm}}^{\text{screw}} \propto 1/R$ ) kann auf die höheren Dehnungsgradienten für kleinere Mikrodrahtradien zurückgeführt werden. [Zoller und Schulz (2020)]

Der Übergang der Höhe der Versetzungsdichten in dem Versetzungsaufstau ist hierbei eher fließend verglichen zu dem vorhergesagten harten Übergang nach der *CTT* in Liu et al. (2018). Dies lässt sich auf den Einfluss der internen Spannungen zurückführen. Die Versetzungsdichte im Versetzungsaufstau befindet sich im Kräftegleichgewicht zwischen dem externen Spannungsfeld, das die Versetzungsdichte ins Systeminnere in Richtung der jeweiligen spannungsfreien Linien treibt, und den Eigenspannungsfeldern bzw. Rückspannungen der *GND*-Dichte, die die Versetzungsdichte in entgegengesetzte Richtung weg vom internen Versetzungsaufstau bewegt. Folglich spielt das Verhältnis der externen und internen Spannungsterme eine elementare Rolle für die räumliche Verteilung der Versetzungen und der damit verbundenen plastischen Verformungen im Bereich des Versetzungsaufstaus [Zoller und Schulz (2020)]. Hieraus resultieren Größeneffekte, wie in Abbildung 5.21 und 5.22 für eine konstante Torsionsbelastung gezeigt.

Durch den Versetzungsaufstau induzierte Größeneffekte werden nur für Mikrodrähte mit Radien kleiner als eine bestimmte geometrische Länge beobachtet - für den betrachteten Fall ist dies ein Radius kleiner als  $12 \mu\text{m}$ . Um die Ausbreitungslänge des Versetzungsaufstaus in kleineren Mikrodrähten zu erklären, können zwei verschiedene Perspektiven herangezogen werden: Wird die gleiche Auflösung entlang der radialen Koordinate  $r$  angenommen, so nimmt die gleiche Ausbreitungslänge des Übergangsbereichs zwischen den unterschiedlichen Höhen der Versetzungsdichten für kleinere Radien des Mikrodrahtes  $R$  größere Teile entlang der normierten Raumkoordinaten  $r/R$  ein. Dieser Effekt verstärkt sich sogar für abnehmende Radien des Mikrodrahtes und führt zu größeren Ausbreitungen des Versetzungsaufstaus über den normierten Radius. Alternativ, unter Annahme der gleichen Auflösung entlang der normierten Raumkoordinaten  $r/R$ , nehmen die internen Spannungen im Vergleich zu den konstanten externen Spannungen für abnehmende Radien des Mikrodrahtes zu, siehe die Proportionalität der Rückspannung infolge des Gradienten  $\tau_s^b \propto 1/R$  in Gleichung 3.9b. Dies führt zu größeren Ausbreitungen des Versetzungsaufstaus über den normierten Radius. [Zoller und Schulz (2020)]

Aufgrund der sternenförmigen Versetzungskonfiguration in den untersuchten Mikrostrukturen wird die plastische Verformung nicht nur in der Nähe der Torsionsachse, sondern teilweise auch in der Nähe der Oberfläche durch den glatteren Verlauf des Versetzungs-

aufstaus beeinflusst. Die Auswirkungen auf das Torsionsmoment in den untersuchten Systemen fallen für die untersuchten Systeme verglichen zu beobachteten Größeneffekten z. B. bzgl. des initialen Fließbeginns in Mikrodrähten u. a. mittels *DDD*-Simulation von einkristallinem Aluminium in Senger et al. (2011) sowie experimentellen Untersuchungen von grobkörnigen Gold in Chen et al. (2015) und von polykristallinem Kupfer in Fleck et al. (1994) eher gering aus. Jedoch wird wie bereits diskutiert eine Zunahme des Effekts für kleinere Radien erwartet. Zudem bleiben die Auswirkungen einer breiten Verteilung der Versetzungsdichte auf andere Aspekte der Mikrostruktur, z. B. auf die Evolution des Versetzungsnetzwerkes infolge von Versetzungsreaktionen, zu klären.



## 7. Zusammenfassung und Ausblick

Zur Analyse der Gleitsystemaktivitäten in *kfz* Metallen, der auftretenden Gleitsysteminteraktionen sowie deren Auswirkungen auf die Versetzungskonfiguration, insbesondere auf die Zusammensetzung der *GND*-Dichte, wurden im Rahmen dieser Arbeit verschiedene einkristalline Mikrosysteme untersucht. Diese umfassen verschiedene geometrische Körper (Mikrowürfel, Mikropillars, Mikrokrägarne und Mikrodrähte) aus verschiedenen *kfz* Metallen (Aluminium, Kupfer und Gold) mit variierenden Hochsymmetrieorientierungen ( $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$ ) und einer nicht hochsymmetrischen Orientierung ( $\langle 123 \rangle$ ) sowohl in homogenen als auch inhomogenen Normal- und Schubspannungsfeldern (Belastungen auf Zug, Druck, Biegung mit Scherung und Torsion).

Hierbei wurde eine physikalisch motivierte, auf homogenisierten Versetzungsdichten basierende Kontinuumsformulierung der Kristallplastizität weiterentwickelt, um mittels Simulationen direkte Einblicke in die Mikrostrukturevolution zu erhalten. Zudem wurden sowohl datengetriebene Analysemethoden verwendet, um charakteristische Größen in Versetzungsnetzwerken aus *DDD*-Simulationen zu bestimmen, als auch detaillierte theoretische Systemanalysen durchgeführt, um a priori die erwarteten Interaktionen und Zusammenhänge zu identifizieren.

Mittels theoretischer Systemanalysen lässt sich eine Klassifikation der Gleitsysteme basierend auf den jeweiligen Schmid-Faktoren und möglichen Versetzungsreaktionen für die jeweiligen Kristallorientierungen und Belastungsarten vornehmen. Die einzelnen Gleitsystemgruppen weisen Unterschiede bezüglich ihrer Aktivität, Spannungsrelaxationsmechanismen sowie Konfiguration und Zusammensetzung der *GND*-Dichte auf. Dies konnte in den Simulationen bestätigt werden.

Die Gleitsystemgruppen mit den höchsten Schmid-Faktoren werden zuerst aktiviert und liefern im Zuge der Mikrostrukturevolution den größten Beitrag zur plastischen Verformung. Der plastischen Verformung liegt die Bewegung mobiler Versetzungen zugrunde, wodurch die Mechanismen zur Erhöhung der mobilen Versetzungsdichte eine elementare Rolle in der Mikrostrukturevolution einnehmen. Bei der Beurteilung der Bedeutung der Versetzungsquellen verglichen zur Versetzungsmultiplikation muss neben der Höhe

der Versetzungsdichte im System und der Systemgröße auch die Kombination der Kristallorientierung und Belastung im Hinblick auf mögliche Versetzungsreaktionen aktiver Gleitsysteme berücksichtigt werden.

Die Bildung von Versetzungsreaktionen lässt sich hauptsächlich auf die Beteiligung aktiver Gleitsysteme zurückführen. Hierbei ist nicht die Aktivität des Gleitsystems, auf dem das Reaktionsprodukt entsteht, sondern die Aktivitäten der in der Reaktion beteiligten Gleitsysteme ausschlaggebend. Ein Einfluss der Gleitsystemaktivität wird auch für die Versetzungslängen (von Lomerarmen) identifiziert, wobei Gleitsysteme mit höheren Schmid-Faktoren tendenziell größere Versetzungslängen aufweisen. Dies könnte auf Ausbauchprozesse zurückzuführen sein. Für den Mikrowürfel mit  $\langle 1\ 2\ 3 \rangle$  Orientierung unter Zugbelastung bleibt die mittlere Versetzungslänge auf dem primären Gleitsystem trotz eines sich verdichtenden Versetzungsnetzwerkes nahezu konstant. Dadurch wird die allgemeine qualitative Gültigkeit der in Kontinuumsansätzen verbreiteten Approximation der mittleren Versetzungslänge über den mittleren Versetzungsabstand (welcher wiederum über den Kehrwert der Quadratwurzel der totalen Versetzungsdichte approximiert wird) insbesondere für sehr aktive Gleitsysteme in Systemen ohne hochsymmetrische Orientierung infrage gestellt.

In allen untersuchten Systemen kam es zu einer Akkumulation von *GND*-Dichte im System, wobei in homogenen Spannungsfeldern (z. B. durch Druckbelastung) die *GND*-Dichte auf den inaktiven Gleitsystemen zu lokalisieren ist und deren Stabilisierung im System mit den geringen Triebkräften auf die Versetzungen insbesondere im Umfeld eines gebildeten Versetzungsnetzwerkes erklärt werden kann. Im Gegensatz dazu stauen sich die Versetzungen in inhomogenen Spannungsfeldern (z. B. infolge von Biege- und Torsionsbelastungen) auf den aktiven Gleitsystemen an den jeweiligen spannungsfreien Linien im Inneren des Systems auf und deren Stabilisierung lässt sich auf das externe Spannungsprofil sowie die Bildung eines Versetzungsnetzwerkes zurückführen.

Sowohl in den untersuchten Normal- als auch Schubspannungsfeldern weist die jeweilige *GND*-Dichte im System ausgeprägte Anteile mit Schrauben- und Stufencharakter auf, wodurch verdeutlicht wird, dass es sich um dreidimensionale Probleme im Raum handelt. Die genaue Zusammensetzung der *GND*-Dichte lässt sich auf das Verhältnis der Aktivitäten der einzelnen Gleitsystemgruppen und deren räumliche Orientierung zum Spannungsfeld zurückführen.

Der interne Versetzungsaufstau in inhomogenen Spannungsfeldern induziert einen Größeneffekt, sofern der Einfluss interner Spannungen verglichen zum externen Spannungsfeld ausreichend groß ist. Ursache ist der Gleichgewichtszustand der Versetzungen im Versetzungsaufstau zwischen externen Kräften, die die Versetzungen ins Systeminnere bewegen,

und internen Kräften infolge der Eigenspannungsfelder bzw. Rückspannungen der aufgestauten Versetzungen, die in die entgegengesetzte Richtung wirken. Hierbei nimmt der Ausdehnungsbereich des Versetzungsaufstaus entlang des normierten Radius für Mikrodrähte unter Torsionsbelastung mit kleineren Radien zu, sofern die Radien kleiner als eine bestimmte geometrische Länge sind (welche durch das Verhältnis der externen und internen Spannungsgrößen beeinflusst wird).

Für experimentelle *HR-EBSD*-Messungen an einem  $\langle 100 \rangle$  orientierten Mikrodraht unter Torsionsbelastung konnte mittels der Simulation gezeigt werden, dass die auf theoretischen Überlegungen basierende Auswertung der Richtung der Rotationsachsen der lokalen Missorientierung Informationen über die primär aktive Gleitsystemgruppe liefert. Hintergrund hierfür sind unterschiedliche Spannungsrelaxationsmechanismen der jeweiligen Gleitsystemgruppen. Die Auswertung kann dabei direkt ohne weitere Arbeitsschritte auf die Messergebnisse angewendet werden, jedoch muss die Belastung bekannt sein und es kann nicht zwischen Gleitsystemgruppen mit dem gleichen Spannungsrelaxationsprinzip unterschieden werden.

Die Ergebnisse dieser Arbeit motivieren fortführende Untersuchungen zur Relevanz und Interaktion verschiedener Ursachen für Größeneffekte, um deren Bedeutung in Mikrosystemen mit variierenden Systemgrößen, Kristallorientierungen und Belastungen zu charakterisieren. Hierbei ermöglichen Simulationen die Analyse verschiedener Kombinationen der Berücksichtigung oder Vernachlässigung einzelner modellierter Mechanismen. Die Untersuchungen sollten für einkristalline Systeme unter anderem die variierenden Ausdehnungsbereiche interner Versetzungsaufstaus infolge interner Spannungsgrößen, die unterschiedliche Ausprägung der jeweiligen Versetzungsreaktionen infolge variierender von den Versetzungen zurückgelegter Wege sowie die Variationen in den Quellspannungen aufgrund unterschiedlicher Versetzungslängen umfassen.

Des Weiteren wäre eine differenzierte Analyse verschiedener Versetzungslängen in Versetzungsnetzwerken sowie deren Evolution und Abhängigkeiten von geometrischen und mikrostrukturellen Größen aufschlussreich, um diese bei der Modellierung in Kontinuumsformulierungen berücksichtigen zu können. Dabei kann an die Arbeit von Devincere et al. (2006) angeknüpft werden, in der die Längen verschiedener Versetzungsverbindungen getrennt voneinander ausgewertet werden. Für die Datenanalyse empfiehlt es sich auf einem umfangreichen Datensatz zu arbeiten, der verschiedene *kfz* Metalle mit hochsymmetrischen und nicht-hochsymmetrischen Kristallorientierungen unter variierenden Belastungen umfasst.

Zudem könnte die Bedeutung der verschiedenen Versetzungsproduktions- und Versetzungsmultiplikationsmechanismen differenzierter betrachtet werden und dabei verschiedene

Einflussfaktoren (wie z. B. die Systemgröße, das Material, die Versetzungskonfigurationen sowie die Belastung und Kristallorientierungen) auf die Ausprägung der verschiedenen Mechanismen genauer beleuchten. Hierbei sind deutliche Unterschiede zwischen der gleitfähigen Reaktion und dem Quergleitmechanismus aufgrund der unterschiedlichen physikalischen Zusammenhänge zu erwarten. Während die gleitfähige Reaktion auf einer Kollisionswahrscheinlichkeit entsprechender Versetzungen beruht, ist die Ereigniswahrscheinlichkeit des Quergleitens vom Spannungsfeld abhängig. Folglich wäre zu erwarten, dass hohe Versetzungsdichten die Kollisionswahrscheinlichkeit erhöhen, wohingegen lokale Versetzungsaufstaus lokale Hindernisse für die Versetzungsbewegung darstellen und zu einem erhöhten Quergleiten führen. Zusätzlich sollten für die Untersuchung zur genaueren Erfassung der ablaufenden Mikrostrukturevolution die berücksichtigten Versetzungsquellen und -reaktionen erweitert werden, z. B. um Versetzungsquellen nahe bzw. an Randflächen wie Oberflächen und Korngrenzen, siehe u. a. Rao et al. (2007), Ryu et al. (2015) und Li et al. (2020), Murr (2016), sowie um koplanare Reaktionen, die nach Akhondzadeh et al. (2021) vermehrt in der Nähe von gleitfähigen Reaktionen auftreten.

# A. Appendix

## A.1 Berechnung verwendeter Größen

### A.1.1. Missorientierung basierend auf dem Feld des Verschiebungsgradienten

Ausgehend vom Verschiebungsfeld bzw. dessen Gradientenfeldes lässt sich die Missorientierung im Material bestimmen [Zoller und Schulz (2020)]. Der infinitesimale Rotationstensor  $\mathbf{W}$  bildet den schief-symmetrischen Anteil des plastischen Verschiebungsgradienten  $\beta^{\text{pl}}$  ab. Hierbei wird der infinitesimale Rotationstensor über den Drehwinkel  $\alpha$  um die normierte Rotationsachse  $\mathbf{n}^{\text{rot}} = (n_x^{\text{rot}} \ n_y^{\text{rot}} \ n_z^{\text{rot}})^T$  charakterisiert und beschreibt die bleibende Rotation von der ursprünglichen in die aktuelle Konfiguration:

$$\mathbf{W} = \text{skw}(\beta^{\text{pl}}) = \alpha \begin{pmatrix} 0 & -n_z^{\text{rot}} & n_y^{\text{rot}} \\ n_z^{\text{rot}} & 0 & -n_x^{\text{rot}} \\ -n_y^{\text{rot}} & n_x^{\text{rot}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha = \|\alpha \mathbf{n}^{\text{rot}}\|. \quad (\text{A.1})$$

Die daraus resultierende Rotationsmatrix ergibt sich zu:

$$\mathbf{R} = \cos(\alpha) \mathbf{1} + (1 - \cos(\alpha)) (\mathbf{n}^{\text{rot}} \otimes \mathbf{n}^{\text{rot}}) + \sin(\alpha) \frac{1}{\alpha} \mathbf{W}^T. \quad (\text{A.2})$$

Die Missorientierung beschreibt die Abweichung der Ausrichtung bezogen auf die Referenzkonfiguration, wie z. B. der initialen Konfiguration oder der aktuellen Konfiguration eines nahezu unverformten Materials. Folglich bilden sowohl die lokale Rotationsmatrix  $\mathbf{R}$  als auch die Rotationsmatrix der Referenzkonfiguration  $\mathbf{R}^{\text{ref}}$  die Basis zur Berechnung des Missorientierungswinkels  $\theta$  zwischen dem betrachteten Kontinuum und dem Referenzkontinuum:

$$\theta = \arccos \left( \frac{\text{trace}(\mathbf{R}^{\text{mis}}) - 1}{2} \right), \quad \mathbf{R}^{\text{mis}} = \mathbf{R}^{\text{ref}} \mathbf{R}^{-1} \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{n}^{\text{mis}} = \frac{1}{2 \sin(\theta)} \begin{pmatrix} R_{yz}^{\text{mis}} - R_{zy}^{\text{mis}} \\ R_{zx}^{\text{mis}} - R_{xz}^{\text{mis}} \\ R_{xy}^{\text{mis}} - R_{yx}^{\text{mis}} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Im Falle, dass die Referenzkonfiguration der initialen Konfiguration entspricht, gelten folgende Zusammenhänge:  $\mathbf{R}^{\text{ref}} = \mathbb{1}$ ,  $\theta = \alpha$  und  $\mathbf{n}^{\text{mis}} = \mathbf{n}^{\text{rot}}$ .

### A.1.2. Torsionsmoment und Dichteverlauf mittels der *Critical Thickness Theory*

Im Folgenden werden die Annahmen und Parameter für den in dieser Arbeit verwendeten *CTT*-Ansatz aufgeführt. Für umfassendere Hintergründe der *CTT* im Kontext der Torsion von Mikrodrähten sei auf die Literatur verwiesen, u. a. auf Dunstan und Bushby (2004), Dunstan (2012) und Liu et al. (2018).

Die kritische aufgelöste Schubspannung für den initialen plastischen Fließbeginn wird zu  $\tau^{\text{CRSS}} \approx 10 \text{ MPa}$  gewählt [Wu et al. (2016)]. Der Einfluss der Kristallorientierung  $\langle c \rangle$  auf den Schubmodul wird nach Date und Andrews (1969) berücksichtigt und ergibt sich für Gold zu:  $\{\mu_{\langle 100 \rangle} = 42 \text{ GPa}, \mu_{\langle 110 \rangle} = 22 \text{ GPa}, \mu_{\langle 111 \rangle} = 19 \text{ GPa}\}$ . Daraus lässt sich die jeweilige kritische Randdehnung für den initialen Fließbeginn  $\gamma_R^{\text{crit}}$  bestimmen. Zudem wird die Kurznotation  $N$  eingeführt, die das Verhältnis der aktuellen zur kritischen Randscherung beschreibt.  $N$  ist nach unten durch den Wert 1 beschränkt, um eine korrekte Berechnung im rein elastischen Regime zu gewährleisten. Die kritische Dicke für die plastische Relaxation des Mikrodrahtes unter Torsionsbelastung wird durch  $(R - r_c)$  beschrieben, wobei  $r_c$  jenen kritischen Wert der radialen Koordinate beschreibt, der den inneren, spannungsfreien Bereich und den äußeren, spannungsbehafteten Bereich voneinander trennt. Die elastische Scherung steigt im äußeren Bereich linear zur Oberfläche hin an, wobei die Steigung identisch zur Steigung der totalen Scherung ist:  $\frac{\gamma_R^{\text{el}}}{(R - r_c)} = \frac{\gamma_R}{R}$ . Den genauen Wert von  $r_c$  in Abhängigkeit von  $\gamma_R$  bzw.  $\gamma_R^{\text{el}}$  lässt sich über die Restriktion ermitteln, dass entsprechend des *CTT*-Ansatzes das Integral der elastischen Scherung über den Radius als konstant angenommen wird, sobald der initiale Fließbeginn erreicht wird [Zoller und Schulz (2020)]:  $\frac{1}{2} R \gamma_R^{\text{crit}} = \frac{1}{2} (R - r_c) \gamma_R^{\text{el}}$ . Unter Verwendung von  $\bar{r}$  als Kurznotation für das Verhältnis der beiden Radien gilt:

$$\gamma_R^{\text{crit}} = \frac{\tau^{\text{CRSS}}}{\mu_{\langle c \rangle} m_{\langle c \rangle}^{\text{max}}}, \quad N = \max\left(\frac{\gamma_R}{\gamma_R^{\text{crit}}}; 1\right), \quad \bar{r} = \frac{r_c}{R} = 1 - \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (\text{A.5a-c})$$

Die Höhe der *GND*-Dichte  $\kappa^{\text{CTT}}$  im spannungsfreien inneren Bereich ( $r < r_c$ ) wird nach Liu et al. (2018) bestimmt. Die totale Versetzungsdichte wird hier als eine Superposition der initialen totalen Versetzungsdichte  $\varrho_0^{\text{Tot}}$  und der für die plastische Verformung verantwortlichen *GND*-Dichte modelliert. Sie ergibt sich zu:

$$\kappa^{\text{CTT}} = 2 \frac{\gamma_R}{Rb}, \quad \varrho^{\text{Tot}} = \varrho_0^{\text{Tot}} + \kappa^{\text{CTT}} \bar{r}^2. \quad (\text{A.6a-b})$$

Die Schubspannung im äußeren Bereich ( $r > r_c$ ) steigt linear zur Oberfläche hin an. Um das resultierende Torsionsmoment zwischen Systemen mit unterschiedlichen Systemgrößen leichter vergleichen zu können, wird das Torsionsmoment zu einer Spannungsgröße normiert. Demnach ergibt sich das normierte Torsionsmoment  $M_t/R^3 = 1/R^3 \iint_A \tau r \, dA$  zu:

$$\frac{M_t}{R^3} = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \mu_{(c)} \gamma_R & , \quad \gamma_R \leq \gamma_R^{\text{crit}} \\ \frac{\pi}{6} \mu_{(c)} \gamma_R (1 - \bar{r})^2 (3 + 2\bar{r} + \bar{r}^2) & , \quad \gamma_R > \gamma_R^{\text{crit}} \end{cases}. \quad (\text{A.7})$$

## A.2 Versetzungsmultiplikationskriterium

Im Folgenden soll die Gültigkeit und Aussagekraft der in Akhondzadeh et al. (2021) eingeführten empirischen Faustregel für die Versetzungsmultiplikation anhand des in dieser Arbeit in Abschnitt 5.2 analysierten *DDD*-Datensatz diskutiert werden. Die jeweiligen betragsmäßigen Schmid-Faktoren und Vergleichswerte für die Versetzungsmultiplikation der in dieser Arbeit betrachteten Systeme sind in Tabelle A.1 aufgelistet und die Evolution der totalen Versetzungsdichte auf den einzelnen Gleitsystemen in Abbildung A.1 dargestellt. Im Folgenden wird angenommen, dass die Schmid-Faktoren positiv sind bzw. den Betrag der vorzeichenbehafteten Schmid-Faktoren beschreiben.

Akhondzadeh et al. (2021) folgend wird ein auf den Schmid-Faktoren basierender Vergleichswert  $f_{m_s} = |m_s - 0,5 \max_{\bar{s} \in \text{Ebene}} m_{\bar{s}}|$  bestimmt, welcher für das Versetzungsmultiplikationskriterium  $f_{m_s} > 0,1$  herangezogen wird. Der Vergleichswert wird nach der Formulierung maximal, wenn entweder das betrachtete Gleitsystem den höchsten Schmid-Faktor der Gleitebene aufweist ( $m_s = \max_{\bar{s} \in \text{Ebene}} m_{\bar{s}}$ ) oder unabhängig von der externen Belastung ist ( $m_s = 0$ ). Das Versetzungsmultiplikationskriterium umfasst dabei, wie in Akhondzadeh et al. (2021) diskutiert, sowohl die Versetzungsmultiplikation durch Versetzungsgleiten („slip-driven multiplication“ für  $m_s > 0,5 \max_{\bar{s} \in \text{Ebene}} m_{\bar{s}}$ ) als auch ohne Versetzungsgleiten auf dem betrachteten Gleitsystem („slip-free multiplication“ für  $m_s < 0,5 \max_{\bar{s} \in \text{Ebene}} m_{\bar{s}}$ ). Letztere wird dabei auf die gleitfähigen und koplanaren Reaktionen zurückgeführt, wobei

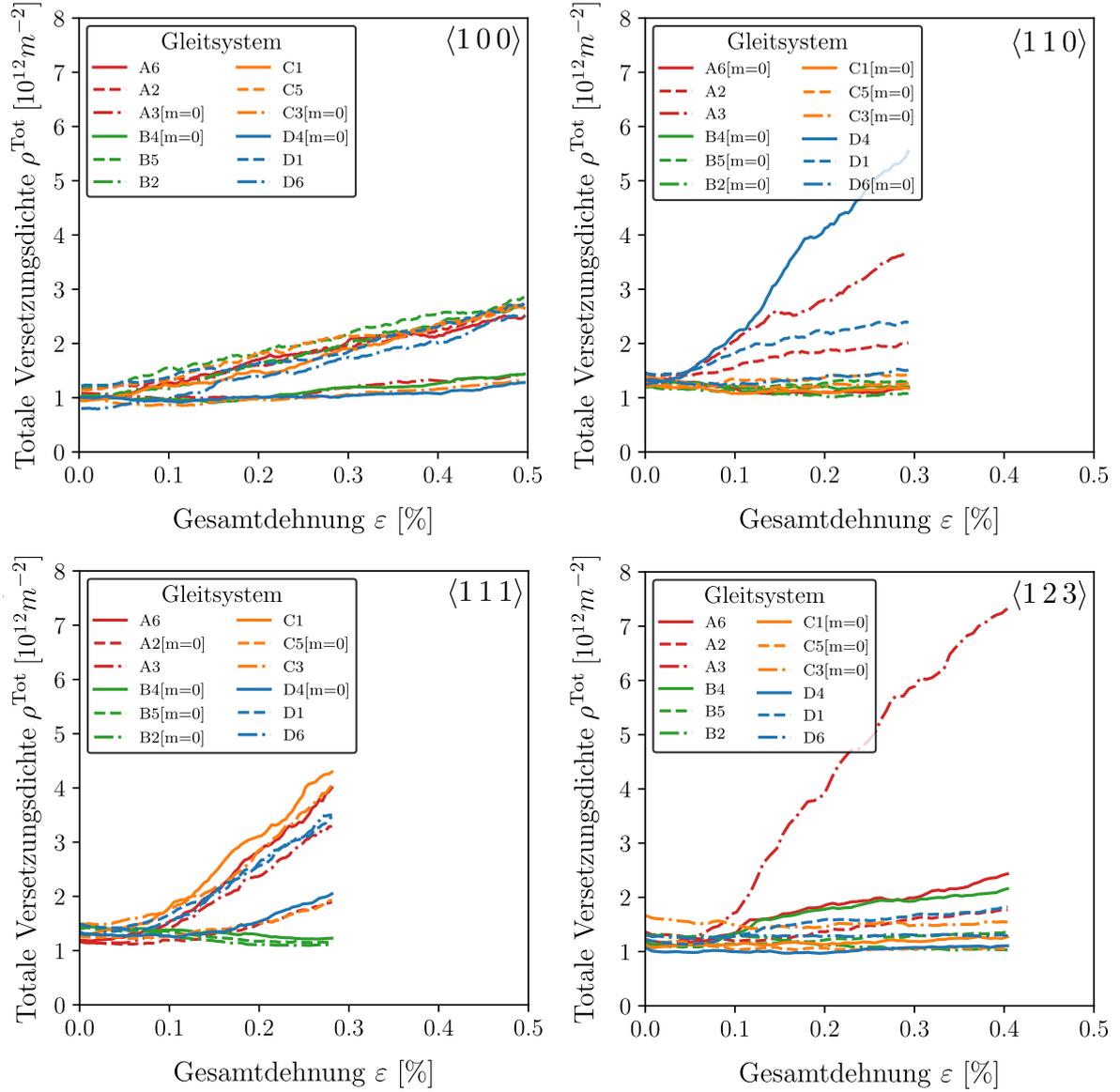
**Tabelle A.1:** Schmid-Faktoren und Vergleichswerte für das Versetzungsmultiplikationskriterium nach Akhondzadeh et al. (2021) für die Systeme des in dieser Arbeit betrachteten *DDD*-Datensatz in Abhängigkeit von der jeweiligen Orientierung.

		A6	A2	A3	B4	B5	B2	C1	C5	C3	D4	D1	D6
$\langle 100 \rangle$	$m_s$	0,41	0,41	0	0	0,41	0,41	0,41	0,41	0	0	0,41	0,41
	$f_{m_s}$	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21
$\langle 110 \rangle$	$m_s$	0	0,41	0,41	0	0	0	0	0	0	0,41	0,41	0
	$f_{m_s}$	0,21	0,21	0,21	0	0	0	0	0	0	0,21	0,21	0,21
$\langle 111 \rangle$	$m_s$	0,27	0	0,27	0	0	0	0,27	0	0,27	0	0,27	0,27
	$f_{m_s}$	0,14	0,14	0,14	0	0	0	0,14	0,14	0,14	0,14	0,14	0,14
$\langle 123 \rangle$	$m_s$	0,35	0,12	0,47	0,35	0,17	0,17	0	0	0	0,12	0,29	0,17
	$f_{m_s}$	0,12	0,12	0,24	0,18	0,01	0,01	0	0	0	0,03	0,15	0,03

die Formulierung des Versetzungsmultiplikationskriterium aufgrund der Beschränkung der Berücksichtigung der Schmid-Faktoren auf Gleitsysteme derselben Gleitebene lediglich im Rahmen der koplanaren Reaktionen interpretiert wird. Für weitere Details sei auf Akhondzadeh et al. (2021) verwiesen.

Meiner Ansicht nach führt die Kombination der beiden Arten der Versetzungsmultiplikation (Versetzungsmultiplikation durch und ohne Versetzungsgleiten auf dem betrachteten Gleitsystem) in der Formulierung des Versetzungsmultiplikationskriterium u. U. zu uneindeutigen Vergleichswerten bzw. kann zu Fehlinterpretationen führen. So weisen z.B. in der  $\langle 100 \rangle$  Orientierung sowohl die aktiven ( $m_s > 0$ ) als auch die inaktiven ( $m_s = 0$ ) Gleitsysteme denselben Vergleichswert auf, jedoch ist der Anstieg der Versetzungsdichte auf den aktiven Gleitsystemen deutlich stärker ausgeprägt, siehe Abbildung A.1. Dieser Zusammenhang trifft auch auf die Gleitsysteme der Gleitebenen  $\{A,C,D\}$  in der  $\langle 111 \rangle$  Orientierung zu. Folglich lässt sich aus der Höhe des Vergleichswert nicht auf die Ausprägung der Versetzungsdichtezunahme schließen.

Aus der Formulierung des Versetzungsmultiplikationskriterium folgt für die Versetzungsmultiplikation durch Versetzungsgleiten (z. B.  $m_s = \max_{\bar{s} \in \text{Ebene}} m_{\bar{s}}$ ), dass das betrachtete Gleitsystem einen Schmid-Faktor von  $m_s > 0,2$  aufweisen muss. Die daraus folgende Gruppierung der Gleitsysteme stimmt mit der in dieser Arbeit in Abschnitt 5.2 vorgenommen Aufteilung der Gleitsysteme in aktive und inaktive Gleitsysteme überein. Jedoch führt der Term zur Berücksichtigung des maximalen Schmid-Faktors der Gleitebene u. U. wiederum zu uneindeutigen Vergleichswerten. So weist z. B. in der  $\langle 123 \rangle$  Orientierung das Gleitsystem D1 einen höheren Vergleichswert als Gleitsystem A6 auf ( $f_{m_{D1}} = 0,15 > f_{m_{A6}} = 0,12$ ), obwohl das Gleitsystem A6 einen höheren Schmid-Faktor besitzt ( $m_{A6} = 0,35 > m_{D1} = 0,29$ )



**Abbildung A.1:** Evolution der totalen Versetzungsdichten über die Gesamtdehnung für die Zugversuche mit  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  und  $\langle 123 \rangle$  Orientierung des in dieser Arbeit untersuchten DDD-Datensatzes.

und die Zunahme der Versetzungsdichte dort stärker ausgeprägt ist, siehe Abbildung A.1. Grund dafür ist, dass sich das primäre Gleitsystem A3 auf der Gleitebene A befindet und somit den Vergleichswert von A6 beeinflusst, aber nicht den von D1.

Im Gegensatz dazu würde das Verhältnis des Schmid-Faktors des betrachteten Gleitsystems zum primären Gleitsystem  $\frac{m_s}{m^{max}}$  eine von den Gleitebenen unabhängige Vergleichsgröße liefern und sollte demnach meiner Einschätzung nach herangezogen werden. Hierbei bezeichnet  $m^{max} = \max_{\tilde{s}} m_{\tilde{s}}$  den maximal auftretenden Schmid-Faktor. Überträgt man das Versetzungsmultiplikationskriterium aus Akhondzadeh et al. (2021) (unter Betrachtung der Gleitebene des primären Gleitsystems) auf den Vergleichswert  $\frac{m_s}{m^{max}}$ , so ergibt sich folgendes Kriterium für die Versetzungsmultiplikation durch Versetzungsgleiten:  $\frac{m_s}{m^{max}} > \frac{0,1}{m^{max}} + 0,5 \geq 0,6$  mit  $m^{max} > 0,2$ . Dieses Kriterium ist konsistent zu dem betrachteten *DDD*-Datensatz.

Darüber hinaus folgt aus der Formulierung des Versetzungsmultiplikationskriterium, dass für die Versetzungsmultiplikation ohne Versetzungsgleiten auf dem betrachteten Gleitsystem (z. B.  $m_s = 0$ ) mindestens ein aktives Gleitsystem auf der gleichen Gleitebene existieren muss ( $\max_{\tilde{s} \in Ebene} m_{\tilde{s}} > 0,2$ ). Dies stellt eine notwendige Bedingung sowohl für die gleitfähige als auch für die koplanare Reaktion dar. Folglich beinhaltet der Vergleichswert  $f_{m_s}$  teilweise die Aktivität der reagierenden Gleitsysteme auch von gleitfähigen Reaktionen. Des Weiteren wird auf den Gleitsystemen auf inaktiven Gleitebenen (z. B.  $\max_{\tilde{s} \in Ebene} m_{\tilde{s}} = 0$ ) keine Versetzungsdichteanstieg erwartet, was mit den *DDD*-Ergebnissen übereinstimmt, siehe Gleitebene B und C in der  $\langle 110 \rangle$  Orientierung, Gleitebene B in der  $\langle 111 \rangle$  Orientierung oder Gleitebene C in der  $\langle 123 \rangle$  Orientierung.

Die Formulierung von  $f_{m_s}$  berücksichtigt lediglich die koplanare Reaktion vollständig und sollte deshalb meiner Einschätzung nach um die gleitfähige Reaktion erweitert bzw. zu Multiplikationsreaktionen verallgemeinert werden. Hierbei ist ausschlaggebend, ob eine Multiplikationsreaktionen zwischen zwei aktiven Gleitsystemen existiert, die Versetzungssegmente auf dem betrachteten Gleitsystem ablegen:  $\exists \{\tilde{s}, \hat{s}\} \in \text{aktiv} : (\tilde{s} + \hat{s} \xrightarrow[\text{reaktion}]{\text{Multiplikations-}} s)$ . Die Reaktionsbeziehungen zwischen den individuellen Gleitsystemen können der Reaktionsmatrix in Abbildung 3.2 entnommen werden. Hierbei muss die Ereigniswahrscheinlichkeit der Versetzungsreaktionen berücksichtigt werden.

In dem betrachteten *DDD*-Datensatz wird in der  $\langle 110 \rangle$  Orientierung für das Gleitsystem A6 kein Anstieg der Versetzungsdichte und für das Gleitsystem D6 lediglich ein leichter Anstieg beobachtet, obwohl nach den koplanaren Reaktionen der aktiven Gleitsysteme dort Versetzungssegmente abgelegt werden können. Folglich tritt in diesem untersuchten System im Gegensatz zur  $\langle 110 \rangle$  Orientierung in Akhondzadeh et al. (2021) keine Versetzungsmultiplikation ohne Versetzungsgleiten auf den betrachteten Gleitsystem auf.

Dies motiviert weiterführende detailliertere Untersuchung der Versetzungsreaktionen für verschiedene Systeme und Versetzungskonfigurationen.

## **A.3 Einfluss der Systemgrenzen und geometrischen Imperfektionen**

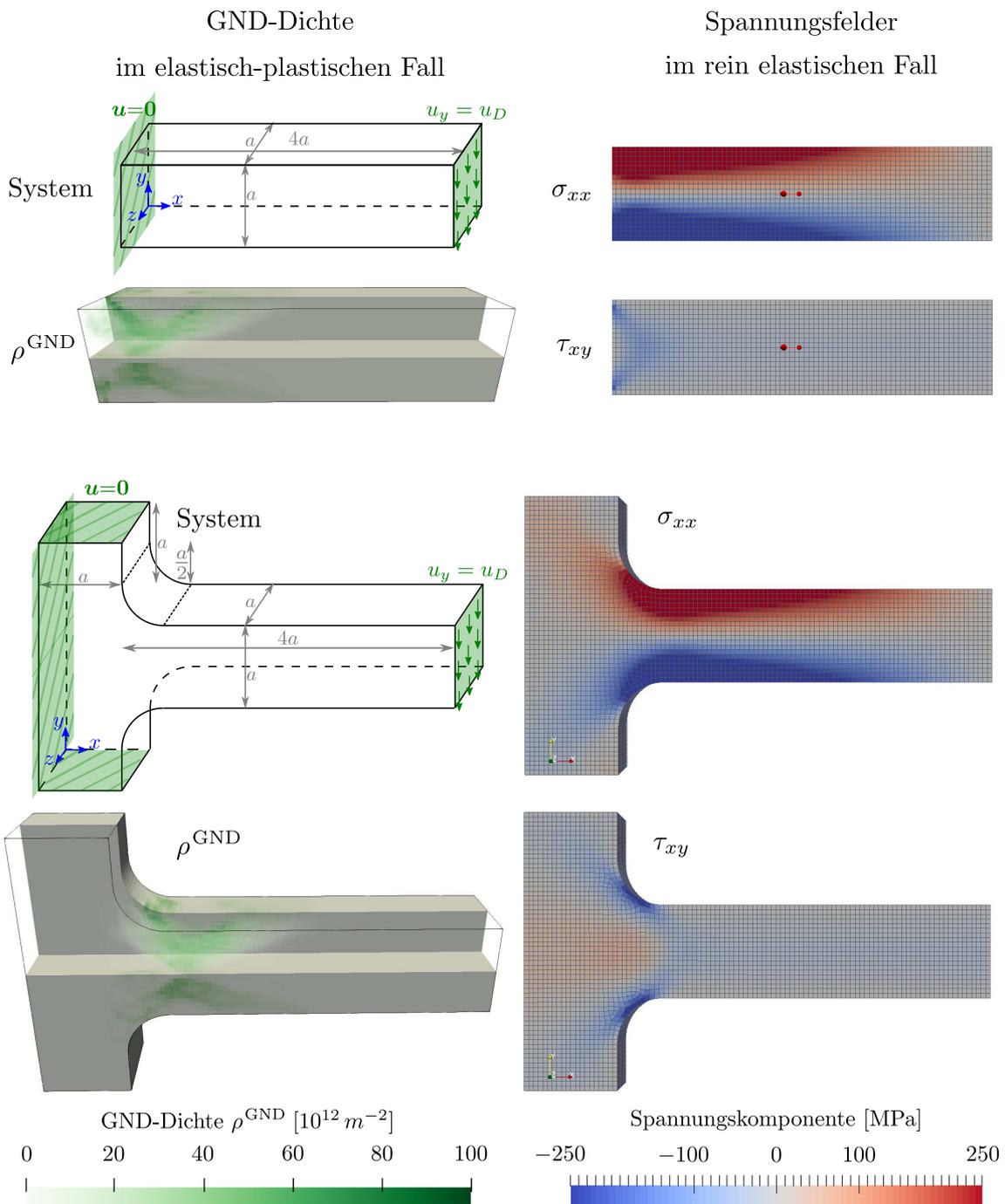
Die Untersuchungsergebnisse von realen Systemen werden durch die Präsenz von Imperfektionen in den Systemen bzw. experimentellen Apparaturen beeinflusst. Die Imperfektionen umfassen nicht nur das Material selbst (z. B. lokale Schwachstellen oder Unterschiede in den initialen Versetzungsstrukturen) sondern unter anderem auch die Geometrie der Probe sowie die Ausrichtung und Lastaufbringung der Apparatur (z. B. führen Versatz und Fehlausrichtungen zu Variationen des lokalen Spannungszustandes) [Dehm et al. (2018), Senger et al. (2010), Kirchlechner et al. (2011a)].

Hierbei ermöglichen Simulationen auf einfache und kontrollierte Weise verschiedene Konfigurationen zu untersuchen und deren Unterschiede zu analysieren. Selbst wenn im Experiment Unklarheit über den Grad der Ausprägung möglicher Imperfektionen besteht, fördern systematische Untersuchungen verschiedener Aspekte mittels Simulationen die Interpretation der Ergebnisse [Zoller et al. (2021)]. Hierbei kommt der Gestaltung der Systemgrenzen eine elementare Bedeutung zu.

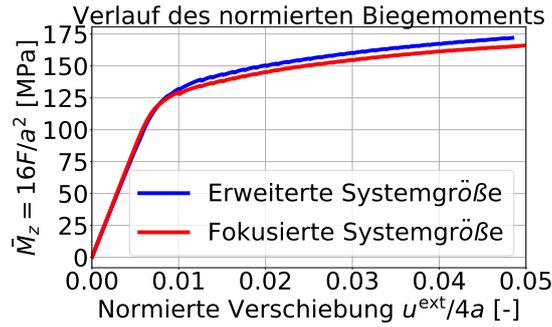
### **A.3.1. Modellierung der festen Einspannung eines Mikrokragens**

Im Folgenden wird die Modellierung der festen Einspannung des Mikrokragens aus Unterabschnitt 5.3.2 näher beleuchtet, um Aufschlüsse über den Einfluss der Systemgröße bzw. Systemgrenzen auf die in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen zu erhalten. Hierzu wird sowohl das quaderförmige System aus Abbildung 4.2, bei dem die Dirichlet-Randbedingung direkt auf der linken Randfläche ( $x = 0$ ) aufgebracht wird, als auch ein erweitertes System, bei dem die Materialverdickung einschließlich der Kerben mit abgebildet werden, untersucht (siehe Abbildung A.2). Beide Systeme werden sowohl für ein rein elastisches als auch elastisch-plastisches Materialverhalten analog zu Unterabschnitt 5.3.2 analysiert.

In Abbildung A.2 sind die resultierenden Spannungsfelder im rein elastischen Fall und die sich ausbildende räumliche Verteilung der  $GND$ -Dichte im elastisch-plastischen Fall abgebildet. Die Spannungskomponenten weisen in beiden Systemen qualitativ einen ähnlichen



**Abbildung A.2:** Darstellung der resultierenden Felder der Normal- und Schubspannungskomponenten  $\sigma_{xx}$  und  $\sigma_{xy}$  im rein elastischen Fall und die sich ausbildende räumliche Verteilung der GND-Dichte im elastisch-plastischen Fall für die zwei Mikrokrackarm-Systeme mit variierender Modellierung der festen Einspannung jeweils für den Belastungszeitpunkt  $u_D/4a = 0,025$ .



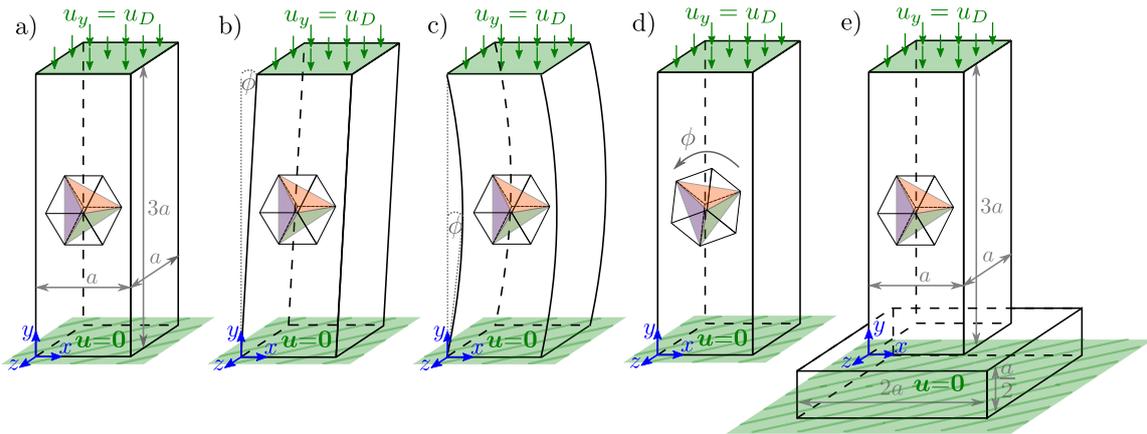
**Abbildung A.3:** Darstellung des Einflusses der Modellierung der Einspannung auf die Evolution des normierten Biegemomentes. Hierbei bezieht sich der Begriff der fokussierten Systemgröße auf den quaderförmigen Mikrokragarm und der Begriff der erweiterten Systemgröße auf das System mit modellierter Materialverdickung.

Verlauf auf. So weisen beide Systeme ausgeprägte Zug- und Druckbereiche auf sowie Spuren mit ausgeprägter negativer Schubspannung nahe der festen Einspannung bzw. Materialverdickung. Hierbei tritt allerdings für das erweiterte System in Nähe der festen Einspannung und auf Höhe der Balkenachse ein Bereich mit positiver Schubspannungskomponente auf, der in dem fokussierten, quaderförmigen System nicht ausgebildet wird.

Die im Zuge der Mikrostrukturevolution entstehende Verteilung der  $GND$ -Dichte weist in beiden Systemen qualitativ eine ähnliche Verteilung auf, wobei für das erweiterte System ein leichter Versatz der Ausprägung in den Bereich ohne Materialverdickung zu erkennen ist. Der aus der Evolution der Versetzungskonfiguration resultierende Biegeverlauf weist einen ähnlichen Verlauf auf, siehe Abbildung A.3. Hierbei könnte die Modellierung der Materialverdickung im erweiterten System zu dem beobachteten leichten Anstieg des normierten Biegemomentes führen, da infolge der Materialverdickung die maximale im System auftretende Spannung bei gleichem Biegemoment geringer ausfällt, vgl. Gleichung 4.1b.

### A.3.2. Einfluss geometrischer Imperfektionen in Mikropillars unter Druckbelastung

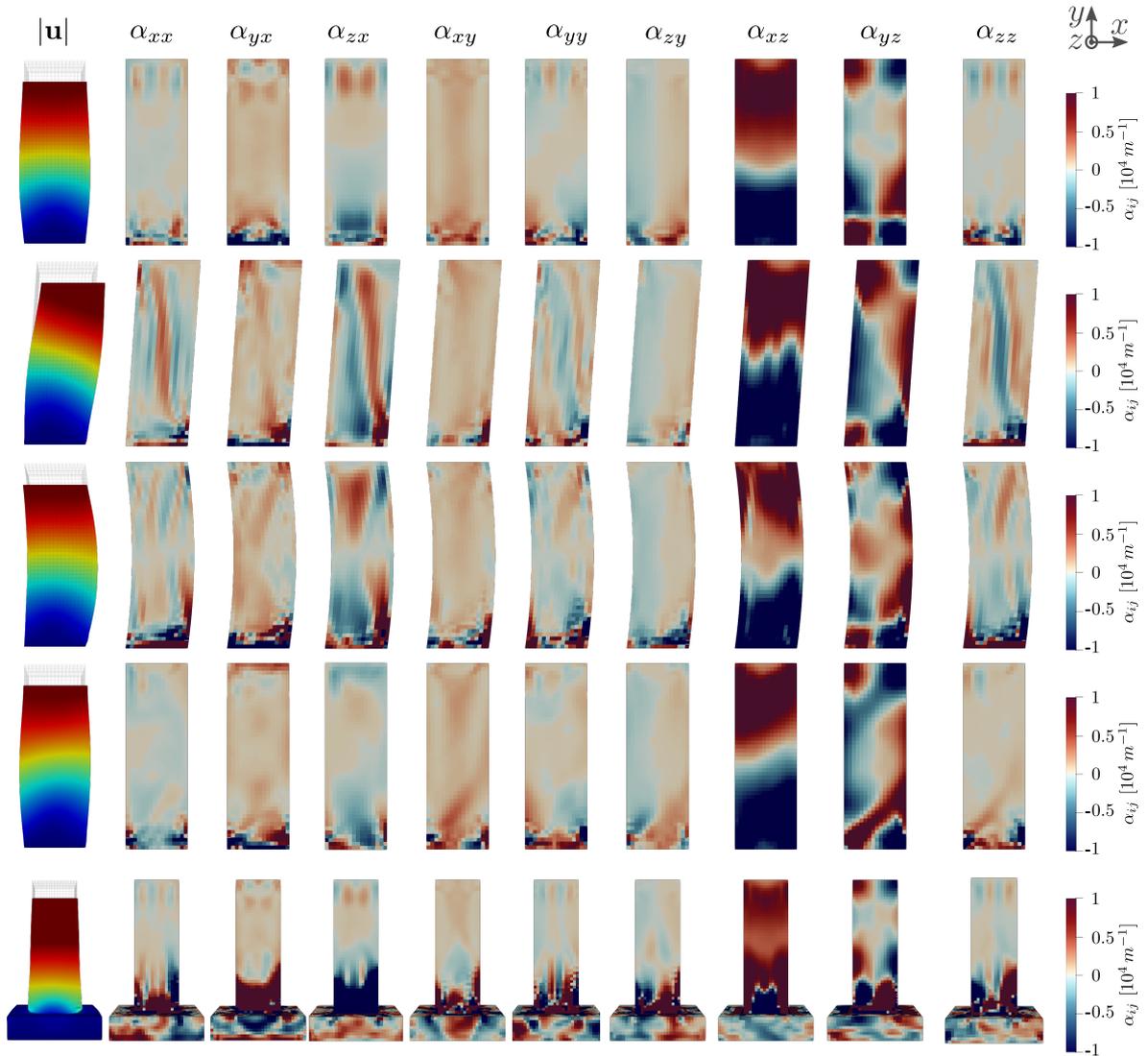
Im Folgenden werden mittels Simulationen die Auswirkungen verschiedener Imperfektionen auf die räumliche Ausprägung des auf der  $GND$ -Dichte basierenden Versetzungsdichtentensors (siehe Gleichung 2.3) analysiert. Ausgehend von einem idealen, geraden Mikropillar als Referenzsystem (System a), werden folgende geometrische Imperfektionen berücksichtigt (vgl. Abbildung A.4): Eine lineare Verschiebung des quadratischen Querschnitts des Mikropillars in  $z$ -Richtung (System b), eine gekrümmte Ausbuchtung des Mikropillars in  $z$ -Richtung (System c) und eine Fehlausrichtung der Kristallorientierung um die  $z$ -Achse (System d). Der linear verschobene und der gekrümmte Mikropillar (Systeme b und c)



**Abbildung A.4:** Modellierung geometrischer Imperfektionen eines Mikropillars. Die Systemgröße wird zu  $a = 6 \mu\text{m}$  gewählt und der Winkel der Fehlausrichtung mit  $\phi = 4^\circ$  angenommen. Abbildung entnommen aus [Zoller et al. (2021)].

weisen dabei den gleichen Versatz in  $z$ -Richtung auf halber Höhe des Mikropillars auf. Zudem wird ein eingebetteter Mikropillar (System e) betrachtet, um den Einfluss der Systemgrenze in Hinblick auf experimentelle Proben zu untersuchen. Es sei dabei angemerkt, dass die scharfe Kerbe im Material des eingebetteten Systems numerisch anspruchsvoll ist und zu Ungenauigkeiten führen kann [Zoller et al. (2021)].

Die Auswirkungen der geometrischen Imperfektionen sowohl auf den deformierten Verformungszustand als auch auf die räumliche Ausprägung des Versetzungsdichtensors sind in Abbildung A.5 abgebildet. Hierbei weisen die  $\alpha_{xz}$  und  $\alpha_{yz}$  Komponenten sowohl die höchsten als auch niedrigsten Werte auf. Dies legt die Schlussfolgerung nahe, dass in experimentellen Untersuchungen, sofern diese auf die Vermessung einer einzigen Oberfläche beschränkt sind, der Fokus auf die  $z$ -Ebene gelegt werden sollte. Die  $\alpha_{xz}$  und  $\alpha_{yz}$  Komponenten weisen in den untersuchten Systemen eine qualitativ ähnliche Verteilung auf, jedoch variieren die Winkel und die Größe der Übergangsbereiche zwischen den einzelnen Systemen. Für den linear verschobenen Mikropillar (System b) wird zudem eine charakteristische Struktur in der  $\alpha_{zz}$  Komponente beobachtet. Folglich würde das Beobachten einer solchen Struktur in experimentellen Messergebnissen Hinweise auf diese Art der geometrischen Imperfektion liefern.



**Abbildung A.5:** Darstellung des Einflusses geometrischer Imperfektionen auf die absolute Verschiebung der verformten Mikropillars (mit einem Skalierungsfaktor von zwei) und auf die räumliche Ausprägung aller neun Komponenten des Versetzungsdichtentensors (jeweils auf die ursprüngliche Form des Mikropillars projiziert) bei einer Druckbelastung von  $\varepsilon_{yy} = -5.7\%$ . Abbildung entnommen aus [Zoller et al. (2021)].



# Literaturverzeichnis

- S. Akhondzadeh, R. B. Sills, N. Bertin, und W. Cai. Dislocation density-based plasticity model from massive discrete dislocation dynamics database. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 145:104152, 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.104152>.
- S. Akhondzadeh, N. Bertin, R. B. Sills, und W. Cai. Slip-free multiplication and complexity of dislocation networks in FCC metals. *Materials Theory*, 5(1), 2021. URL <https://doi.org/10.1186/s41313-020-00024-y>.
- A. Arsenlis und D. Parks. Crystallographic aspects of geometrically-necessary and statistically-stored dislocation density. *Acta materialia*, 47(5):1597–1611, 1999. URL [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00020-8](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00020-8).
- E. Arzt. Size effects in materials due to microstructural and dimensional constraints: a comparative review. *Acta materialia*, 46(16):5611–5626, 1998. URL [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(98\)00231-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(98)00231-6).
- M. Ashby. The deformation of plastically non-homogeneous materials. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 21(170):399–424, 1970. URL <https://doi.org/10.1080/14786437008238426>.
- J. Bach, K. Zoller, H. Trittenbach, K. Schulz, und K. Böhm. An empirical evaluation of constrained feature selection. *SN Computer Science*, 3(6):1–25, 2022. URL <https://doi.org/10.1007/s42979-022-01338-z>.
- J. P. Barrett. The coefficient of determination—some limitations. *The American Statistician*, 28(1):19–20, 1974. URL <https://doi.org/10.1080/00031305.1974.10479056>.
- R. Berner. Die temperatur-und geschwindigkeitsabhängigkeit der verfestigung kubis ch-flächenzentrierter metalleinkristalle. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 15(8):689–706, 1960. URL <https://doi.org/10.1515/zna-1960-0804>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1098/rspa.1955.0171>.
- F. E. Bock, R. C. Aydin, C. J. Cyron, N. Huber, S. R. Kalidindi, und B. Klusemann. A review of the application of machine learning and data mining approaches in continuum materials mechanics. *Frontiers in Materials*, page 110, 2019. URL <https://doi.org/10.3389/fmats.2019.00110>.
- J. Bonneville, B. Escaig, und J. Martin. A study of cross-slip activation parameters in pure copper. *Acta Metallurgica*, 36(8):1989–2002, 1988. URL [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(88\)90301-X](https://doi.org/10.1016/0001-6160(88)90301-X).
- W. Cai und W. D. Nix. *Imperfections in crystalline solids*. Cambridge University Press, 2016.
- Y. Chen, O. Kraft, und M. Walter. Size effects in thin coarse-grained gold microwires under tensile and torsional loading. *Acta Materialia*, 87:78–85, 2015. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.12.034>.
- A. Cottrell. LX. the formation of immobile dislocations during slip. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 43(341):645–647, 1952. URL <https://doi.org/10.1080/14786440608520220>.
- Y. Cui, P. Lin, Z. Liu, und Z. Zhuang. Theoretical and numerical investigations of single arm dislocation source controlled plastic flow in fcc micropillars. *International Journal of Plasticity*, 55:279–292, 2014. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2013.11.011>.
- S. Das, F. Hofmann, und E. Tarleton. Consistent determination of geometrically necessary dislocation density from simulations and experiments. *International Journal of Plasticity*, 109:18–42, 2018. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2018.05.001>.
- E. Date und K. Andrews. Anisotropic and composition effects in the elastic properties of polycrystalline metals. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2(10):1373, 1969. URL <https://doi.org/10.1088/0022-3727/2/10/303>.
- W. P. Davey. Precision measurements of the lattice constants of twelve common metals. *Physical Review*, 25(6):753, 1925. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRev.25.753>.
- G. Dehm, B. N. Jaya, R. Raghavan, und C. Kirchlechner. Overview on micro-and nanomechanical testing: New insights in interface plasticity and fracture at small length scales. *Acta Materialia*, 142:248–282, 2018. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.06.019>.

- E. Demir und D. Raabe. Mechanical and microstructural single-crystal baushinger effects: Observation of reversible plasticity in copper during bending. *Acta Materialia*, 58(18): 6055–6063, 2010. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2010.07.023>.
- E. Demir, D. Raabe, und F. Roters. The mechanical size effect as a mean-field breakdown phenomenon: Example of microscale single crystal beam bending. *Acta Materialia*, 58(5):1876–1886, 2010. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.11.031>.
- H. Detter und G. Popovic. Industrial demands on micromechanical products. In *2000 22nd International Conference on Microelectronics. Proceedings (Cat. No. 00TH8400)*, volume 1, pages 61–67. IEEE, 2000. URL <https://doi.org/10.1109/ICMEL.2000.840531>.
- B. Devincere, L. Kubin, und T. Hoc. Physical analyses of crystal plasticity by dd simulations. *Scripta materialia*, 54(5):741–746, 2006. URL <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2005.10.066>.
- D. Dimiduk, M. Uchic, und T. Parthasarathy. Size-affected single-slip behavior of pure nickel microcrystals. *Acta Materialia*, 53(15):4065–4077, 2005. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.05.023>.
- D. M. Dimiduk, C. Woodward, R. LeSar, und M. D. Uchic. Scale-free intermittent flow in crystal plasticity. *Science*, 312(5777):1188–1190, 2006. URL <https://doi.org/10.1126/science.1123889>.
- D. Dunstan. Critical thickness theory applied to micromechanical testing. *Advanced Engineering Materials*, 14(11):942–947, 2012. URL <https://doi.org/10.1002/adem.201200017>.
- D. J. Dunstan und A. Bushby. Theory of deformation in small volumes of material. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 460(2050):2781–2796, 2004. URL <https://doi.org/10.1098/rspa.2004.1306>.
- T. El-Achkar und D. Weygand. Analysis of dislocation microstructure characteristics of surface grains under cyclic loading by discrete dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 27(5):055004, 2019. URL <https://doi.org/10.1088/1361-651x/ab1b7c>.
- J. A. El-Awady. Unravelling the physics of size-dependent dislocation-mediated plasticity. *Nature communications*, 6(1):1–9, 2015. URL <https://doi.org/10.1038/ncomms6926>.

- J. A. El-Awady, M. Wen, und N. M. Ghoniem. The role of the weakest-link mechanism in controlling the plasticity of micropillars. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(1):32–50, 2009. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2008.10.004>.
- N. Fleck, G. Muller, M. Ashby, und J. Hutchinson. Strain gradient plasticity: theory and experiment. *Acta Metallurgica et materialia*, 42(2):475–487, 1994. URL [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(94\)90502-9](https://doi.org/10.1016/0956-7151(94)90502-9).
- P. Franciosi, M. Berveiller, und A. Zaoui. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metallurgica*, 28(3):273–283, 1980. URL [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(80\)90162-5](https://doi.org/10.1016/0001-6160(80)90162-5).
- F. Frank und W. Read Jr. Multiplication processes for slow moving dislocations. *Physical Review*, 79(4):722, 1950. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRev.79.722>.
- H. Gao und Y. Huang. Geometrically necessary dislocation and size-dependent plasticity. *Scripta Materialia*, 48(2):113–118, 2003. URL [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(02\)00329-9](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(02)00329-9).
- M. G. Geers, W. Brekelmans, und P. Janssen. Size effects in miniaturized polycrystalline fcc samples: strengthening versus weakening. *International Journal of Solids and Structures*, 43(24):7304–7321, 2006. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2006.05.009>.
- J. Gravell, S. Lee, S. Ryu, und I. Ryu. Effect of size and orientation on stability of dislocation networks upon torsion loading and unloading in fcc metallic micropillars. *Acta Materialia*, 214:117010, 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117010>.
- J. R. Greer, W. C. Oliver, und W. D. Nix. Size dependence of mechanical properties of gold at the micron scale in the absence of strain gradients. *Acta Materialia*, 53(6):1821–1830, 2005. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.12.031>.
- I. Groma, F. Csikor, und M. Zaiser. Spatial correlations and higher-order gradient terms in a continuum description of dislocation dynamics. *Acta Materialia*, 51(5):1271–1281, 2003. URL [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(02\)00517-7](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(02)00517-7).
- S. Hiemer und S. Zapperi. From mechanism-based to data-driven approaches in materials science. *Materials Theory*, 5(1):1–9, 2021. URL <https://doi.org/10.1186/s41313-021-00027-3>.
- J. Hirth. On dislocation interactions in the fcc lattice. *Journal of Applied Physics*, 32(4):700–706, 1961. URL <https://doi.org/10.1063/1.1736074>.

- J. P. Hirth und J. Lothe. *Theory of dislocations*. A Wiley-Interscience Publication. Wiley, New York, NY [u.a.], 2. ed. edition, 1982.
- T. Hochrainer. Multipole expansion of continuum dislocations dynamics in terms of alignment tensors. *Philosophical Magazine*, 95(12):1321–1367, 2015. URL <https://doi.org/10.1080/14786435.2015.1026297>.
- T. Hochrainer, M. Zaiser, und P. Gumbsch. A three-dimensional continuum theory of dislocation systems: kinematics and mean-field formulation. *Philosophical Magazine*, 87(8-9):1261–1282, 2007. URL <https://doi.org/10.1080/14786430600930218>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2013.09.012>.
- D. Hull und D. J. Bacon. *Introduction to dislocations*, volume 37. Elsevier, 2011. URL <http://lib.myilibrary.com/detail.asp?id=300616>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.10.067>.
- E. Husser und S. Bargmann. The role of geometrically necessary dislocations in cantilever beam bending experiments of single crystals. *Materials*, 10(3):289, 2017. URL <https://doi.org/10.3390/ma10030289>.
- A. T. Jennings, J. Li, und J. R. Greer. Emergence of strain-rate sensitivity in cu nanopillars: Transition from dislocation multiplication to dislocation nucleation. *Acta Materialia*, 59(14):5627–5637, 2011. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.05.038>.
- J. Jiang, T. Britton, und A. Wilkinson. Measurement of geometrically necessary dislocation density with high resolution electron backscatter diffraction: effects of detector binning and step size. *Ultramicroscopy*, 125:1–9, 2013. URL <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2012.11.003>.
- R. Jones, J. Zimmerman, und G. Po. Comparison of dislocation density tensor fields derived from discrete dislocation dynamics and crystal plasticity simulations of torsion. *arXiv preprint arXiv:1608.04335*, 2016. URL <https://arxiv.org/abs/1608.04335>.
- J. Kacher, B. Eftink, B. Cui, und I. Robertson. Dislocation interactions with grain boundaries. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 18(4):227–243, 2014. URL <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2014.05.004>.

- M. Kaluza und K. Le. On torsion of a single crystal rod. *International Journal of Plasticity*, 27(3):460–469, 2011. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2010.07.003>.
- B. Katzer, K. Zoller, D. Weygand, und K. Schulz. Identification of dislocation reaction kinetics in complex dislocation networks for continuum modeling using data-driven methods. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 168:105042, 2022. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2022.105042>.
- D. Kiener, P. Guruprasad, S. M. Keralavarma, G. Dehm, und A. A. Benzerga. Work hardening in micropillar compression: In situ experiments and modeling. *Acta Materialia*, 59(10):3825–3840, 2011. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.03.003>.
- C. Kirchlechner, J. Keckes, C. Motz, W. Grosinger, M. W. Kapp, J.-S. Micha, O. Ulrich, und G. Dehm. Impact of instrumental constraints and imperfections on the dislocation structure in micron-sized cu compression pillars. *Acta materialia*, 2011, 59(14):5618–5626, a. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.05.037>.
- C. Kirchlechner, D. Kiener, C. Motz, S. Labat, N. Vaxelaire, O. Perroud, J.-S. Micha, O. Ulrich, O. Thomas, G. Dehm, et al. Dislocation storage in single slip-oriented cu micro-tensile samples: new insights via x-ray microdiffraction. *Philosophical Magazine*, 2011, 91(7-9):1256–1264, b. URL <https://doi.org/10.1080/14786431003785639>.
- C. Kirchlechner, W. Grosinger, M. Kapp, P. Imrich, J.-S. Micha, O. Ulrich, J. Keckes, G. Dehm, und C. Motz. Investigation of reversible plasticity in a micron-sized, single crystalline copper bending beam by x-ray  $\mu$  laue diffraction. *Philosophical magazine*, 92(25-27):3231–3242, 2012. URL <https://doi.org/10.1080/14786435.2012.669067>.
- C. Kirchlechner, P. J. Imrich, W. Liegl, J. Pörnbacher, J.-S. Micha, O. Ulrich, und C. Motz. On the reversibility of dislocation slip during small scale low cycle fatigue. *Acta Materialia*, 94:69–77, 2015. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.04.029>.
- U. Kocks. The relation between polycrystal deformation and single-crystal deformation. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1(5):1121–1143, 1970. URL <https://doi.org/10.1007/BF02900224>.
- J. Koehler. The nature of work-hardening. *Physical Review*, 86(1):52, 1952. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRev.86.52>.
- P. J. Konijnenberg, S. Zaefferer, und D. Raabe. Assessment of geometrically necessary dislocation levels derived by 3d ebsd. *Acta Materialia*, 99:402–414, 2015. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.06.051>.

- E. Kröner und G. Rieder. Kontinuumstheorie der versetzungen. *Zeitschrift für Physik*, 145(4):424–429, 1956. URL <https://doi.org/10.1007/BF01338623>.
- L. Kubin, B. Devincre, und T. Hoc. Toward a physical model for strain hardening in fcc crystals. *Materials Science and Engineering: A*, 2008, 483-484:19–24, a. URL <https://doi.org/10.1016/j.msea.2007.01.167>.
- L. Kubin, B. Devincre, und T. Hoc. Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals. *Acta Materialia*, 2008, 56(20):6040–6049, b. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.08.012>.
- L. P. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincre, V. Pontikis, und Y. Bréchet. Dislocation microstructures and plastic flow: a 3d simulation. In *Solid State Phenomena*, volume 23, pages 455–472. Trans Tech Publ, 1992. URL <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.23-24.455>.
- D. Kuhlmann-Wilsdorf. The les theory of solid plasticity. In *Dislocations in solids*, volume 11, pages 211–342. Elsevier, 2002. URL [https://doi.org/10.1016/S1572-4859\(02\)80010-9](https://doi.org/10.1016/S1572-4859(02)80010-9).
- J. W. Kysar, Y. X. Gan, T. L. Morse, X. Chen, und M. E. Jones. High strain gradient plasticity associated with wedge indentation into face-centered cubic single crystals: geometrically necessary dislocation densities. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(7):1554–1573, 2007. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2006.09.009>.
- B. C. Larson, J. Z. Tischler, A. El-Azab, und W. Liu. Dislocation Density Tensor Characterization of Deformation Using 3D X-Ray Microscopy. *J. Eng. Mater. Technol.*, 130(2):021024, 2008. URL <https://doi.org/10.1115/1.2884336>.
- K. C. Le und Y. Piao. Distribution of dislocations in twisted bars. *International Journal of Plasticity*, 83:110–125, 2016. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2016.04.006>.
- C. Lemarchand, B. Devincre, und L. . Homogenization method for a discrete-continuum simulation of dislocation dynamics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9):1969–1982, 2001. URL [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(01\)00026-6](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(01)00026-6).
- J. C. Li, C. Feng, und B. B. Rath. Emission of dislocations from grain boundaries and its role in nanomaterials. *Crystals*, 11(1):41, 2020. URL <https://doi.org/10.3390/cryst11010041>.

- D. Liu, Y. He, X. Tang, H. Ding, P. Hu, und P. Cao. Size effects in the torsion of microscale copper wires: experiment and analysis. *Scripta Materialia*, 66(6):406–409, 2012. URL <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2011.12.003>.
- D. Liu, X. Zhang, Y. Li, und D. Dunstan. Critical thickness phenomenon in single-crystalline wires under torsion. *Acta Materialia*, 150:213–223, 2018. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.03.022>.
- W. Lomer. A dislocation reaction in the face-centred cubic lattice. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 42(334):1327–1331, 1951. URL <https://doi.org/10.1080/14786444108561389>.
- V. A. Lubarda. Dislocation burgers vector and the peach–koehler force: a review. *Journal of Materials Research and Technology*, 8(1):1550–1565, 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2018.08.014>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.04.012>.
- R. Maaß, S. Van Petegem, D. Grolimund, H. Van Swygenhoven, D. Kiener, und G. Dehm. Crystal rotation in cu single crystal micropillars: In situ laue and electron backscatter diffraction. *Applied Physics Letters*, 92(7):071905, 2008. URL <https://doi.org/10.1063/1.2884688>.
- R. Madec, B. Devincre, und L. Kubin. From dislocation junctions to forest hardening. *Physical review letters*, 89(25):255508, 2002. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.255508>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1126/science.1085477>.
- W. P. Mason und A. Rosenberg. Phonon and electron drag coefficients in single-crystal aluminum. *Physical Review*, 151(2):434, 1966. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRev.151.434>.
- H. Mecking. Strain hardening and dynamic recovery. In *Dislocation modelling of physical systems*, pages 197–211. Elsevier, 1981. URL <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-026724-1.50026-1>.

- H. Mecking und U. Kocks. Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta metallurgica*, 29 (11):1865–1875, 1981. URL [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(81\)90112-7](https://doi.org/10.1016/0001-6160(81)90112-7).
- M. A. Meyers, K. P. Staudhammer, und L. E. Murr. *Metallurgical applications of shock-wave and high-strain-rate phenomena*. Dekker New York, 1986.
- M. Monavari und M. Zaiser. Annihilation and sources in continuum dislocation dynamics. *Materials Theory*, 2(1):3, 2018. URL <https://doi.org/10.1186/s41313-018-0010-z>.
- C. Motz, T. Schöberl, und R. Pippan. Mechanical properties of micro-sized copper bending beams machined by the focused ion beam technique. *Acta Materialia*, 53(15):4269–4279, 2005. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.05.036>.
- C. Motz, D. Weygand, J. Senger, und P. Gumbsch. Initial dislocation structures in 3-d discrete dislocation dynamics and their influence on microscale plasticity. *Acta Materialia*, 57(6):1744–1754, 2009. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.12.020>.
- L. Murr. Dislocation ledge sources: dispelling the myth of frank–read source importance. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 47(12):5811–5826, 2016. URL <https://doi.org/10.1007/s11661-015-3286-5>.
- F. R. N. Nabarro. Mathematical theory of stationary dislocations. *Advances in Physics*, 1 (3):269–394, 1952. URL <https://doi.org/10.1080/00018735200101211>.
- F. R. N. Nabarro, Z. S. Basinski, und D. Holt. The plasticity of pure single crystals. *Advances in Physics*, 13(50):193–323, 1964. URL <https://doi.org/10.1080/00018736400101031>.
- K. Ng und A. Ngan. Breakdown of schmid’s law in micropillars. *Scripta Materialia*, 59(7): 796–799, 2008. URL <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2008.06.019>.
- J. F. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1:153–162, 1953. URL [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(53\)90054-6](https://doi.org/10.1016/0001-6160(53)90054-6).
- S. H. Oh, M. Legros, D. Kiener, und G. Dehm. In situ observation of dislocation nucleation and escape in a submicrometre aluminium single crystal. *Nature materials*, 8(2):95–100, 2009. URL <https://doi.org/10.1038/nmat2370>.
- E. Orowan. Zur kristallplastizität. *Zeitschrift für Physik*, 89:605–659, 1934. URL <https://doi.org/10.1007/BF01341479>.
- T. A. Parthasarathy, S. I. Rao, D. M. Dimiduk, M. D. Uchic, und D. R. Trinkle. Contribution to size effect of yield strength from the stochastics of dislocation

- source lengths in finite samples. *Scripta Materialia*, 56(4):313–316, 2007. URL <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2006.09.016>.
- M. Polanyi. Über eine art gitterstörung, die einen kristall plastisch machen könnte. *Zeitschrift für Physik*, 89(9):660–664, 1934. URL <https://doi.org/10.1007/BF01341481>.
- S. I. Rao, D. Dimiduk, M. Tang, M. Uchic, T. Parthasarathy, und C. Woodward. Estimating the strength of single-ended dislocation sources in micron-sized single crystals. *Philosophical Magazine*, 87(30):4777–4794, 2007. URL <https://doi.org/10.1080/14786430701591513>.
- D. Rodney und R. Phillips. Structure and strength of dislocation junctions: An atomic level analysis. *Physical Review Letters*, 82(8):1704, 1999. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.1704>.
- J. Rösler, H. Harders, und M. Bäker. *Mechanisches Verhalten der Werkstoffe*. Springer-Verlag, 2019. URL <https://doi.org/10.1007/978-3-658-26802-2>.
- F. Roters. A new concept for the calculation of the mobile dislocation density in constitutive models of strain hardening. *physica status solidi (b)*, 240(1):68–74, 2003. URL <https://doi.org/10.1002/pssb.200301873>.
- F. Roters, M. Diehl, P. Shanthraj, P. Eisenlohr, C. Reuber, S. Wong, T. Maiti, A. Ebrahimi, T. Hochrainer, H.-O. Fabritius, S. Nikolov, M. Friák, N. Fujita, N. Grilli, K. Janssens, N. Jia, P. Kok, D. Ma, F. Meier, E. Werner, M. Stricker, D. Weygand, und D. Raabe. 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.04.030>.
- T. Ruggles, D. Fullwood, und J. Kysar. Resolving geometrically necessary dislocation density onto individual dislocation types using ebsd-based continuum dislocation microscopy. *International Journal of Plasticity*, 2016, 76:231–243, a. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2015.08.005>.
- T. Ruggles, T. Rampton, A. Khosravani, und D. Fullwood. The effect of length scale on the determination of geometrically necessary dislocations via ebsd continuum dislocation microscopy. *Ultramicroscopy*, 2016, 164:1–10, b. URL <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2016.03.003>.
- I. Ryu, W. Cai, W. D. Nix, und H. Gao. Stochastic behaviors in plastic deformation of face-centered cubic micropillars governed by surface nucleation and truncated source

- operation. *Acta Materialia*, 95:176–183, 2015. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.05.032>.
- I. Ryu, W. Cai, W. D. Nix, und H. Gao. Anisotropic size-dependent plasticity in face-centered cubic micropillars under torsion. *JOM*, 68(1):253–260, 2016. URL <https://doi.org/10.1007/s11837-015-1692-1>.
- Y. Saad und M. H. Schultz. Gmres: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on scientific and statistical computing*, 7(3):856–869, 1986. URL <https://doi.org/10.1137/0907058>.
- G. Saada. Cross-slip and work hardening of fcc crystals. *Materials Science and Engineering: A*, 137:177–183, 1991. URL [https://doi.org/10.1016/0921-5093\(91\)90333-I](https://doi.org/10.1016/0921-5093(91)90333-I).
- G. Saada und P. Veyssi re. Work hardening of face centred cubic crystals. dislocations intersection and cross slip. In *Dislocations in Solids*, volume 11, pages 413–458. Elsevier, 2002. URL [https://doi.org/10.1016/S1572-4859\(02\)80012-2](https://doi.org/10.1016/S1572-4859(02)80012-2).
- J. Samuel, M. B. Jun, O. B. Ozdoganlar, A. Honegger, M. Vogler, und S. G. Kapoor. Micro/meso-scale mechanical machining 2020: A two-decade state-of-the-field review. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 142(11), 2020. URL <https://doi.org/10.1115/1.4047621>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1088/0965-0393/21/8/085006>.
- E. Schmid und W. Boas. *Kristallplastizit t : mit besonderer Ber cksichtigung der Metalle*. Struktur und Eigenschaften der Materie in Einzeldarstellungen ; 17. Springer, Berlin, 1935. URL <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-662-34532-0>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2015.08.012>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.11.013>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1088/0965-0393/22/2/025008>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.05.003>.
- J. Senger, D. Weygand, C. Motz, P. Gumbsch, und O. Kraft. Evolution of mechanical response and dislocation microstructures in small-scale specimens under slightly different loading conditions. *Philosophical magazine*, 90(5):617–628, 2010. URL <https://doi.org/10.1080/14786430903213353>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1088/0965-0393/19/7/074004>.
- Z. Shan, R. K. Mishra, S. S. Asif, O. L. Warren, und A. M. Minor. Mechanical annealing and source-limited deformation in submicrometre-diameter ni crystals. *Nature materials*, 7(2):115–119, 2008. URL <https://doi.org/10.1038/nmat2085>.
- C. Shin, M. Fivel, D. Rodney, R. Phillips, V. 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, 2001. URL <https://doi.org/10.1051/jp4:2001503>.
- S. S. Shishvan und E. Van der Giessen. Distribution of dislocation source length and the size dependent yield strength in freestanding thin films. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58(5):678–695, 2010. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2010.02.011>.
- R. B. Sills, N. Bertin, A. Aghaei, und W. Cai. Dislocation Networks and the Microstructural Origin of Strain Hardening. *Physical Review Letters*, 121(8):085501, 2018. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.085501>.
- D. Steinberger, H. Song, und S. Sandfeld. Machine learning-based classification of dislocation microstructures. *Frontiers in Materials*, 6:141, 2019. URL <https://doi.org/10.3389/fmats.2019.00141>.
- G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM journal on numerical analysis*, 5(3):506–517, 1968. URL <https://doi.org/10.1137/0705041>.

- M. Stricker. *Die Übertragung von mikrostrukturellen Eigenschaften aus der diskreten Versetzungsdynamik in Kontinuumsbeschreibungen*. PhD thesis, 2017. URL <https://doi.org/10.5445/KSP/1000068883>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.07.073>.
- M. Stricker, J. Gagel, S. Schmitt, K. Schulz, D. Weygand, und P. Gumbsch. On slip transmission and grain boundary yielding. *Meccanica*, 51(2):271–278, 2016. URL <https://doi.org/10.1007/s11012-015-0192-2>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2018.07.003>.
- M. Stricker, M. Ziemann, M. Walter, S. M. Weygand, P. A. Gruber, und D. Weygand. Dislocation structure analysis in the strain gradient of torsion loading: a comparison between modelling and experiment. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 30(3):035007, 2022. URL <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ac4d77>.
- M. Sudmanns. *Entwicklung einer Kontinuumsbeschreibung für die Versetzungsmobilität in Versetzungsnetzwerken*. KIT Scientific Publishing, 2020. URL <https://library.oapen.org/handle/20.500.12657/48820>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.04.065>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2019.103695>.
- M. Sudmanns, J. Bach, D. Weygand, und K. Schulz. Data-driven exploration and continuum modeling of dislocation networks. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 28(6):065001, 2020. URL <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ab97ef>.
- 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*, 1934, 145(855):388–404, a. URL <http://www.jstor.org/stable/2935510>.
- 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*, 1934, 145(855):362–387, b. URL <http://www.jstor.org/stable/2935509>.
- I. Tsagrakis, A. Konstantinidis, und E. Aifantis. Strain gradient and wavelet interpretation of size effects in yield and strength. *Mechanics of materials*, 35(8):733–745, 2003. URL [https://doi.org/10.1016/S0167-6636\(02\)00205-3](https://doi.org/10.1016/S0167-6636(02)00205-3).
- M. D. Uchic, D. M. Dimiduk, J. N. Florando, und W. D. Nix. Sample dimensions influence strength and crystal plasticity. *Science*, 305(5686):986–989, 2004. URL <https://doi.org/10.1126/science.1098993>.
- E. Van der Giessen und A. Needleman. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 3(5):689, 1995. URL <https://doi.org/10.1088/0965-0393/3/5/008>.
- J. R. Velayarce, M. Zamanzade, O. T. Abad, und C. Motz. Influence of single and multiple slip conditions and temperature on the size effect in micro bending. *Acta Materialia*, 154:325–333, 2018. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.05.054>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1088/0965-0393/6/6/007>.
- C. A. Volkert und E. T. Lilleodden. Size effects in the deformation of sub-micron au columns. *Philosophical Magazine*, 86(33-35):5567–5579, 2006. URL <https://doi.org/10.1080/14786430600567739>.
- C. R. Weinberger und W. Cai. Orientation-dependent plasticity in metal nanowires under torsion: Twist boundary formation and eshelby twist. *Nano letters*, 10(1):139–142, 2009. URL <https://doi.org/10.1021/nl903041m>.
- C. R. Weinberger und W. Cai. Plasticity of metal wires in torsion: Molecular dynamics and dislocation dynamics simulations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58(7):1011–1025, 2010. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2010.04.010>.

- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.03.102>.
- D. Weygand, L. Friedman, E. Van der Giessen, und A. Needleman. Aspects of boundary-value problem solutions with three-dimensional dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 10(4):437, 2002. URL <https://doi.org/10.1088/0965-0393/10/4/306>.
- J. Wheeler, E. Mariani, S. Piazzolo, D. Prior, P. Trimby, und M. Drury. The weighted burgers vector: a new quantity for constraining dislocation densities and types using electron backscatter diffraction on 2d sections through crystalline materials. *Journal of microscopy*, 233(3):482–494, 2009. URL <https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.2009.03136.x>.
- H. Wicht und J. Bouchaud. Nexus market analysis for mems and microsystems iii 2005-2009. *MST-news, Verlag VDI/VDE Innovation+ Technik GmbH*, 5:33–34, 2005. URL [https://www.academia.edu/download/42770435/Technologies\\_for\\_Smart\\_Toilets20160217-29495-yorsqf.pdf#page=33](https://www.academia.edu/download/42770435/Technologies_for_Smart_Toilets20160217-29495-yorsqf.pdf#page=33).
- C. Wieners. Distributed point objects. a new concept for parallel finite elements. In *Domain decomposition methods in science and engineering*, pages 175–182. Springer, 2005. URL [https://doi.org/10.1007/3-540-26825-1\\_14](https://doi.org/10.1007/3-540-26825-1_14).
- 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. URL <https://doi.org/10.1007/s00791-010-0135-3>.
- J. Wu, W. Tsai, J. Huang, C. Hsieh, und G.-R. Huang. Sample size and orientation effects of single crystal aluminum. *Materials Science and Engineering: A*, 662:296–302, 2016. URL <https://doi.org/10.1016/j.msea.2016.03.076>.
- D. Xia, X. Chen, G. Huang, B. Jiang, A. Tang, H. Yang, S. Gavras, Y. Huang, N. Hort, und F. Pan. Calculation of schmid factor in mg alloys: Influence of stress state. *Scripta Materialia*, 171:31–35, 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.06.014>.
- S. Y. Yurish, N. V. Kirianaki, und I. L. Myshkin. World sensors and mems markets: Analysis and trends. *Sensors & Transducers*, 62(12):456–461, 2005. URL <https://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.406.2007&rep=rep1&type=pdf>.

- M. Zaiser und S. Sandfeld. Scaling properties of dislocation simulations in the similitude regime. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 22(6):065012, 2014. URL <http://dx.doi.org/10.1088/0965-0393/22/6/065012>.
- J. Zhang, Y. Zhang, N. A. Mara, J. Lou, und L. Nicola. Direct nanoimprinting of single crystalline gold: Experiments and dislocation dynamics simulations. *Applied surface science*, 290:301–307, 2014. URL <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.11.072>.
- X. Zhao, J. Wu, Y. Chiu, I. Jones, R. Gu, und A. Ngan. Critical dimension for the dislocation structure in deformed copper micropillars. *Scripta Materialia*, 163:137–141, 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.01.020>.
- T. Zhu, A. Bushby, und D. Dunstan. Materials mechanical size effects: a review. *Materials Technology*, 23(4):193–209, 2008. URL <https://doi.org/10.1179/175355508X376843>.
- 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. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2014.04.013>.
- M. Ziemann. *Versetzungsstrukturen in tordierten Goldmikrodrähten mit einer Bambusstruktur*. PhD thesis, 2020. URL <https://doi.org/10.5445/IR/1000122624>.
- M. Ziemann, Y. Chen, O. Kraft, E. Bayerschen, S. Wulfinghoff, C. Kirchlechner, N. Tamura, T. Böhlke, M. Walter, und P. Gruber. Deformation patterns in cross-sections of twisted bamboo-structured au microwires. *Acta Materialia*, 97:216–222, 2015. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.06.012>.
- K. Zoller und K. Schulz. A bottom-up continuum approach of crystal plasticity for the analysis of fcc microwires under torsion. *PAMM*, 2019, 19(1):e201900032, a. URL <https://doi.org/10.1002/pamm.201900032>.
- K. Zoller und K. Schulz. Analysis of microwire torsion using a nonlocal dislocation based plasticity formulation. In *Proceedings of 8th GACM Colloquium on Computational Mechanics: For Young Scientists From Academia and Industry August 28th–30th, 2019 University of Kassel, Germany*, pages 47–49. 2019, kassel university press GmbH, b. URL <http://doi.org//10.17170/kobra-202007161457>.
- K. Zoller und K. Schulz. Analysis of single crystalline microwires under torsion using a dislocation-based continuum formulation. *Acta Materialia*, 191:198–210, 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.03.057>.

K. Zoller, S. Kalácska, P. D. Ispánovity, und K. Schulz. Microstructure evolution of compressed micropillars investigated by in situ HR-EBSD analysis and dislocation density simulations. *Comptes Rendus. Physique*, 22(S3):267–293, 2021. URL <https://doi.org/10.5802/crphys.55>.

K. Zoller, P. Gruber, M. Ziemann, A. Görtz, P. Gumbsch, und K. Schulz. Classification of slip system interaction in microwires under torsion. *Computational Materials Science*, 216:111839, 2023. URL <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111839>.