
Diese Dissertation ist erschienen als:

HENNING, Mark; VEHOFF, Horst (Hrsg.) u.a.:
*Saarbrücker Reihe Materialwissenschaft und
Werkstofftechnik. Bd. 10: Größeneffekte auf die
mechanischen Eigenschaften — Experiment und
Simulation. Aachen (Germany): Shaker Verlag, 2008.*
– ISBN 978-3-8322-6894-7 – ISSN 1860-8493

Links:

Bestellseite der Dissertation (Buch / PDF):

[http://www.shaker.de/Online-
Gesamtkatalog/Details.asp?ISBN=978-3-8322-6894-7](http://www.shaker.de/Online-Gesamtkatalog/Details.asp?ISBN=978-3-8322-6894-7)

Webseite der Saarbrücker Reihe
Materialwissenschaft und Werkstofftechnik:

[http://www.shaker.de/Online-
Gesamtkatalog/booklist.asp?Reihe=386](http://www.shaker.de/Online-Gesamtkatalog/booklist.asp?Reihe=386)

Webseite des Shaker-Verlages:

<http://www.shaker.de>

Größeneffekte auf die mechanischen Eigenschaften – Experiment und Simulation

Dissertation

zur Erlangung des Grades des Doktors der Ingenieurwissenschaften
der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät III
Chemie, Pharmazie, Bio- und Werkstoffwissenschaften
der Universität des Saarlandes

von

Mark Henning

Saarbrücken
2007

Tag des Kolloquiums: 13. Juli 2007

Dekan: Prof. Dr. Uli Müller

Vorsitzender: Prof. Dr. Walter Arnold, Fraunhofer IZFP Saarbrücken

Berichterstatter: Prof. Dr. Horst Vehoff, Universität des Saarlandes
Prof. Dr. Bob Svendsen, TU Dortmund
Prof. Dr. Gerhard Hirt, RWTH Aachen

Akad. Mitarbeiter: Dr. Flavio Soldera, Universität des Saarlandes

Saarbrücker Reihe

Materialwissenschaft und Werkstofftechnik

Band 10

**Größeneffekte auf die
mechanischen Eigenschaften –
Experiment und Simulation**

Mark Henning

Herausgeber:

Prof. Dr. rer. nat. Horst Vehoff

Prof. Dr. rer. nat. Walter Arnold

Prof. Dr. rer. nat. Ralf Busch

Prof. Dr. rer. nat. Rolf Clasen

Prof. Dr.-Ing. Stefan Diebels

Prof. Dr. rer. nat. Michael Kröning

Prof. Dr.-Ing. Frank Mücklich

Prof. Dr. rer. nat. Wulff Possart

Prof. Dr. rer. nat. Helmut Schmidt

Shaker Verlag
Aachen 2008

In Gedenken an meinen Vater Rainer.

„Komisch. Kaum macht man es richtig, geht es.“
Yüksel Tiryaki am 10.10.2005 in de.soc.recht.misc

Vorwort

Mein Dank gilt insbesondere Herrn Prof. Dr. Horst Vehoff: auf der fachlichen Seite für die Betreuung dieser Arbeit und allgemein für seine Offenheit, für das Miteinander und für viele interessante Diskussionen.

Diese Arbeit entstand im Rahmen des Schwerpunktprogramms „Prozessskalierung“ (SPP 1138) der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG). Den Mitarbeitern der anderen beteiligten Institute möchte ich für die Zusammenarbeit danken. Insbesondere danke ich Holger Justinger, Ralph Schäfer und Norbert Witulski für Freundschaft und Zusammenarbeit. Ferner danke ich Prof. Dr. Bob Svendsen für sein aktives Interesse Experiment und Theorie einander anzunähern und Prof. Dr. Gerhard Hirt für die Unterstützung der institutsübergreifenden Zusammenarbeit.

Mein Dank gilt auch den Mitarbeitern am Institut: Meinen HiWis Jürgen Braun und Manuel del Fabro für fleißige Mitarbeit und duldsames Ertragen meiner Belehrungen, Dr. Michael Marx für die Gelegenheit mal wieder im Bereich Amateurfilm tätig zu sein, Afrooz Barnoush und Nousha Kheradmand für das Näherbringen der iranischen Kultur, Markus Welsch und Wolfgang Schäf für eine selten anzutreffende Mischung aus Ruhe und Chaos, Kerstin Schüler für Wärme und Witz, Simone Schug für grundlegende Einweisungen ins Ballonfl..., ähm, -fahren und Dr. Karsten Durst, der nie eine Rollenspielrunde vorzeitig verließ. Ich danke Frau Ohm für die Aufrechterhaltung der institutionären Ordnung, Andreas Kirsch und Rita Maron für ihre spontane Hilfsbereitschaft, Rolf Kiefer für seine Berichterstattungen von der Heimwerkerfront, Herrn Vogel-Knels als Leiter der Werkstatt sowie Stefan Schmitz und Peter Limbach für ihre Unterstützung beim Entwurf mechanischer Hilfsmittel und deren fabelhafte Realisierung.

Ich danke meinen Freunden, insbesondere Robert Spence für seine Hilfe bezüglich der englischen Sprache, der ganzen Chili-Fraktion für die scharfen Erlebnisse und Stefan Emrich, der unsere Pizza „Inferno Dante“ mittlerweile in die Speisekarte des Canossa aufgenommen hat.

Nicht zuletzt danke ich meiner Familie für ihre Unterstützung, insbesondere meiner Frau Simone für Liebe und Rücksicht.

Saarbrücken, im August 2007

Mark Henning

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	ix
Abbildungsverzeichnis	xv
Tabellenverzeichnis	xix
Kurzzusammenfassung / Abstract	xxi
1. Einleitung	1
1.1. Motivation	1
1.2. Fragestellung	3
1.3. Gliederung der Arbeit	5
2. Größeneffekte im Experiment	7
2.1. Skalierung	7
2.2. Experimentelle Grundlagen	8
2.3. Zug- und Stauchversuch	10
2.4. Biegeversuch	16
2.5. Torsion, Stanzen	18
2.6. Härteprüfung	18
2.7. Andere Versuche zur Blechumformung	19
3. Stand der Technik	21
3.1. Einbringen von Längenskalen	21
3.1.1. Versetzungssimulation	22
3.1.2. Strain Gradient Plasticity	31
3.1.3. Mechanism-based Strain Gradient Plasticity (MSGP)	42
3.1.4. Andere	47
3.2. Abweichung vom idealen Material	49

3.3. Berücksichtigung von Inhomogenitäten	51
3.3.1. Oberflächeneffekte	51
3.3.2. Inhomogenes Volumen	53
4. Zielsetzung und Einordnung der Arbeit	57
5. Verwendete lokale Charakterisierungsmethoden	61
5.1. Allgemeine Problematik	61
5.2. Digitalkamera	64
5.3. Lichtmikroskopie (DIC)	64
5.4. Weißlichtinterferometrie	70
5.5. Elektronenrückstreuung (EBSD)	73
5.6. Orientierungsgradienten-Mapping (OGM)	75
5.6.1. Grundlagen	76
5.6.2. Durchführung	79
5.6.3. Auswertung	79
5.6.4. Abgrenzung zu verwandten Verfahren	81
6. Experimenteller Aufbau und Probenpräparation	85
6.1. Materialwahl	85
6.1.1. Anforderungsprofil	85
6.1.2. Eigenschaften von Fe-3%Si	87
6.2. Probenpräparation	95
6.3. Versuchsapparatur	96
7. Ergebnisse und Diskussion	101
7.1. Modellierung der Fließspannung	101
7.2. Elastische Anisotropie und aktive Gleitsystemklassen	106
7.3. OGM, lokale Verformung und lokale Verfestigung	112
7.3.1. Grundlagen am Beispiel von Fe-3%Si	112
7.3.2. Lokales Verfestigungsverhalten von Cu	132
7.4. Größeneffekte der ausgeprägten Streckgrenze	143
7.5. Abfolge lokaler Fließvorgänge	148
7.6. Fließspannung in Abhängigkeit der Kornstruktur	150
7.7. Statistische Größeneffekte der Fließspannung	151
7.7.1. Modell	151
7.7.2. Simulationsergebnisse	154

7.7.3. Experimentelle Ergebnisse	162
8. Zusammenfassung	167
9. Ausblick	171
9.1. Untersuchung von Mikrotiefziehproben	173
9.2. Weitere Ansätze	177
Anhang	181
A. Korngrößenbestimmung	183
B. Abschätzung der Dehnungsverteilung	187
C. Rechnen mit Orientierungen	193
C.1. Grundlagen	193
C.2. Orientierungsunterschiede	195
C.3. Mittlere Orientierung	196
D. Generierung von gleichmäßigen Orientungsverteilungen	199
E. Berechnung von Taylor-Faktoren	205
E.1. Annahmen des Modells	205
E.2. Mathematische Betrachtung	207
E.3. Optimierte Berechnungsmethoden	213
F. Software	217
G. Variablenverzeichnis	225
G.1. Griechische Variablen	225
G.2. Lateinische Variablen	228
H. Veröffentlichungen im Rahmen dieser Arbeit	231
Literaturverzeichnis	233

Abbildungsverzeichnis

1.1. Tiefgezogene Näpfe	2
3.1. Darstellung von Versetzungslinien in der Simulation	28
3.2. Krümmung aufgrund von n Stufenversetzungen	34
3.3. Geometrie für 2D-Versetzungssimulation einer Schicht	40
3.4. Auswirkung der Oberflächenrauheit auf die Zugkurve bei CuZn37	50
5.1. Automatische FE-Modellgenerierung mittels Python-Skript	65
5.2. Bildmontage und -optimierung für Lichtmikroskop/DIC	67
5.3. Vorgehensweise der Blechdickenmessung mittels Weißlichtinterferometrie	72
6.1. Geometrie der Zugproben	97
6.2. Zugprobenhalterung	98
6.3. Vorversuche zur Haftung der Zugproben in der Halterung	99
6.4. Haftreibung und Gleitreibung	99
7.1. Beispiele für plastische Bänder einer Zugprobe	102
7.2. Lage der Probenscheiben	104
7.3. Beispiel für die Verwendung der a_{ij}	105
7.4. Beispiel eines FE-Netzes für die Gleitbandsimulation	107
7.5. Gleitstufe und Lage der Versetzungsquelle	108
7.6. Vergleich Gleitbandsimulation und Messung	110
7.7. Ausschnittsvergrößerung Korn mit Mehrfachgleitung	111
7.8. Lokale Dehnung von Körnern im schrittweisen Zugversuch	114
7.9. OGM-Messungen im schrittweisen Zugversuch	115
7.10. $\varepsilon_{pl,e}$ einzelner Körnern als Funktion der Korngröße R (I)	116
7.11. $\varepsilon_{pl,e}$ einzelner Körnern als Funktion der Korngröße R (II)	117
7.12. Lokale Kornverformung als Indikator für Dehnungslokalisierung	118

7.13. $\langle \theta \rangle$ als Funktion von $\varepsilon_{pl,22}$	122
7.14. θ_{StdDev} als Funktion von $\varepsilon_{pl,22}$	122
7.15. Mittlere Missorientierungskenngrößen als Funktion von $\varepsilon_{pl,macro}$ für Fe-3%Si	124
7.16. Relative Standardabweichung der Missorientierungskenngrößen	125
7.17. $\langle \Delta\theta_2 \rangle$ und θ_{StdDev} als Funktion von $\varepsilon_{pl,e}$ einzelner Körner (I) .	126
7.18. $\langle \Delta\theta_2 \rangle$ und θ_{StdDev} als Funktion von $\varepsilon_{pl,e}$ einzelner Körner (II)	127
7.19. Modell der Mikrostruktur eines verformten Kornes	128
7.20. $\langle \partial\theta_{StdDev} / \partial \langle \Delta\theta_2 \rangle \rangle$ als Funktion der Korngröße R	131
7.21. Mittlere Missorientierungskenngrößen als Funktion von $\varepsilon_{pl,macro}$ für Cu	133
7.22. $\Delta\theta_2$ für Cu bei $\varepsilon_{pl,macro} = 10 \%$	135
7.23. $\Delta\theta_{Avg}$ für Cu bei $\varepsilon_{pl,macro} = 6.7 \%$ (Ausschnittsvergrößerung).	137
7.24. $\langle \Delta\theta_{Avg} \rangle$ für Cu als Funktion von $\langle R^{-1} \rangle$	139
7.25. Geometrisch bedingte Kornfragmentierung bei plastischer Verformung	141
7.26. Statistisch verteilte Verfestigung bei plastischer Verformung	142
7.27. Längenunterschied zwischen oberer und unterer Streckgrenze	144
7.28. Spannungsabfall zwischen oberer und unterer Streckgrenze	145
7.29. Verhältnis von unterer zu oberer Streckgrenze	146
7.30. Zugfestigkeit in Abhängigkeit von der Korngröße	147
7.31. Abfolge lokaler Fließvorgänge im Zugversuch	149
7.32. Anfängliche Fließspannung im Zugversuch	150
7.33. Geometrie der Mikrostruktur für die Modellierung von Grö- ßeneffekten	152
7.34. Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen $f(\min\{m_{Avg,j}\})$. .	155
7.35. Simulationsergebnisse für texturfrees Material	157
7.36. Textur der experimentell untersuchten Fe-3%Si-Proben . . .	158
7.37. Simulationsergebnisse für texturiertes Material	159
7.38. Simulationsergebnisse der Extremwertbetrachtung	160
7.39. Vergleich des experimentell gemessenen Größeneffekts mit den Modellvorhersagen	162
9.1. Komplexe Probengeometrie, FE-Modell mit Voronoi-Korn- struktur	172

9.2. Tiefziehrunde Fe-3%Si, erster Schritt	174
9.3. Tiefziehrunde Fe-3%Si, zweiter Schritt	175
9.4. Kornstruktur der Cu-Zugprobe	175
9.5. Blechdickenmessung an Cu im Zugversuch	176
9.6. Tiefziehrunde Cu, erster Schritt	178
D.1. Orientierungsverteilung bei gleicher Winkelschrittweite . . .	202
D.2. Gleichmäßige Orientierungsverteilung	202
D.3. Gleichmäßige Orientierungsverteilung mit Dithering	203
E.1. Kompatibilitätsbedingungen von Körnern im Vollmaterial .	206
E.2. Auswirkung von Orientierungsdithering auf Taylor-Faktor- Histogramme	212
F.1. Bildschirmfoto ANG-GrainFinder	218
F.2. Bildschirmfoto ANG-Stitcher	218
F.3. Bildschirmfoto CalcEulerDistance	219
F.4. Bildschirmfoto DefMeasure	220
F.5. Bildschirmfoto LineDetector	221
F.6. Bildschirmfoto PicturePaster	221
F.7. Bildschirmfoto ShowSlipSystems2D	222
F.8. Bildschirmfoto TexturePainter	223

Tabellenverzeichnis

3.1. Deutsche Nomenklatur für Fachbegriffe der Strain Gradient Plasticity	33
5.1. Übersicht Charakterisierungsmethoden und Messgrößen . .	63
7.1. Vergleich OGM- und TEM-Messungen bezüglich statistischer Versetzungen	143
7.2. Einfluss verschiedener Parameter auf s/μ und μ/M	161
E.1. Taylor-Faktoren für verschiedene Kristallsysteme	211
E.2. Benchmark mehrerer Simplex-Varianten zur Taylor-Faktor-Berechnung	216

Kurzzusammenfassung / Abstract

Kurzzusammenfassung In vielen Bereichen, wie zum Beispiel der Elektronik und Medizintechnik, gibt es Bestrebungen zur Miniaturisierung von Bauteilen. Die Eigenschaften des Materials und der Fertigungsprozesse sind jedoch größenabhängig, wobei eine Vielzahl von Mechanismen wechselwirken. Ein Beispiel hierfür betrifft die Änderung der Fließspannung bei Skalierung der Relation Korngröße : Probengröße, was Gegenstand dieser Arbeit ist.

Wenn die Korngröße in die Größenordnung der Probenabmessungen kommt, verformen sich die Proben nicht mehr homogen, sodass eine makroskopische Betrachtung nicht mehr genügt. Das Verformungsgeschehen wird deshalb lokal erfasst, wofür Charakterisierungsmethoden entsprechend weiterentwickelt wurden. Mittels Orientation Gradient Mapping (OGM) können an Zug- und Tiefziehproben signifikante Unterschiede in der mikrostrukturellen Entwicklung zwischen den untersuchten Materialien (Fe-3%Si (krz) und Cu (kfz)) festgestellt werden. Es zeigt sich außerdem eine Zunahme der lokalen Verfestigung mit Abnahme der Korngröße. Die Annahme, dass das Material in der Nähe der Korngrenze stärker verfestigt als im Korninnern, konnte nicht bestätigt werden.

Zur Modellierung des Größeneinflusses auf die anfängliche Fließspannung wird eine effiziente Vorgehensweise vorgeschlagen, welche auf einem einfachen Werkstoffmodell basiert. Damit können die anfängliche Fließspannung und Fließorte in guter Übereinstimmung mit dem Experiment vorhergesagt werden. Die statistische Variante des Modells erlaubt eine Betrachtung des Streuverhaltens und eine Abschätzung des maximal zu erwartenden Größeneffekts. Vergleiche mit Experimenten zeigen eine gute Übereinstimmung.

Abstract Efforts are currently underway in many areas, as for example in electronics or medical technology, to scale down components. The properties of the manufacturing processes and of the materials, however, are size dependent. This is caused by numerous interacting mechanisms. An example for this is the change in yield stress due to the scaling of the relation grain size : specimen size, as is the subject of this work.

If grain size is of the same order as the specimen dimensions, the specimens do not deform homogeneously, so that macroscopical examinations no longer suffice. Thus the characterization of the microstructural development is performed locally. According to those needs, local characterization methods are enhanced. Using Orientation Gradient Mapping (OGM) of tension test and deep drawn specimens, significant differences in the local microstructure of the investigated materials (Fe-3%Si (bcc) and Cu (fcc)) can be revealed. The local hardening was found to increase with decreasing grain size. However, the assumption that hardening near grain boundaries is higher than in the grain interior could not be confirmed.

To predict the size dependency of the initial yield stress, an efficient model is used which is based on a simple material model. With this model, initial yield stress and yield locations can be predicted in agreement with experiments. The statistical variant of the model allows the consideration of scatter and the maximum expectable size effect. Comparisons with experiments show good agreement.

1. Einleitung

1.1. Motivation

Die zunehmenden Bestrebungen zur Miniaturisierung von Komponenten und Systemen führen zu einem erhöhten Bedarf an Mikrobauteilen. Beispiele hierfür sind Zahnräder für Mikrogetriebe und -motoren, medizinische Implantate, miniaturisierte Bauteilgehäuse sowie Komponenten zur Verwendung in der Elektroindustrie (Abb. 1.1). Dabei ergeben sich vorwiegend zwei Probleme: Wie können solche Bauteile effizient hergestellt werden? Wie müssen solche Bauteile dimensioniert werden?

Die für die Produktion von normalgroßen Bauteilen eingesetzten Fertigungsverfahren (zum Beispiel Tiefziehen, Fräsen, Bohren, Drehen) liefern einen hohen Durchsatz, hohe Präzision und eine gute Reproduzierbarkeit der Ergebnisse. Im Vergleich zu speziellen Mikrofertigungsverfahren, wie zum Beispiel lithographisches Ätzen, erlauben die konventionellen Verfahren niedrigere Stückkosten, eine höhere Flexibilität und erfordern weniger umweltbelastende Chemie. Deshalb wird versucht, diese Verfahren auch für die Fertigung von Mikrobauteilen einzusetzen.

Ein Fertigungsprozess kann jedoch nicht einfach herabskaliert werden. Abgesehen von apparativen Herausforderungen, wie zum Beispiel der Handhabung von Mikrobauteilen oder dem Bau einer Mikrotiefziehpresse [1,2], gibt es eine Reihe weiterer Probleme: Sowohl die Prozessparameter, als auch die Materialeigenschaften sind größenabhängig, wobei die Zusammenhänge noch nicht ausreichend bekannt sind. Geeignete Prozessparameter können also nicht vorhergesagt werden, sondern müssen empirisch ermittelt werden; somit ist eine Optimierung der Prozessparameter mit hohem Aufwand verbunden. Fehler und Ungenauigkeiten in der Prozessführung, die bei makroskopischen Bauteilen kaum Einfluss auf das Ergebnis haben, können die Ergebnisse im miniaturisierten Prozess signifikant beeinflussen. Die Prozessführung muss also mit wesentlich höherer Genauigkeit erfolgen. Ebenso

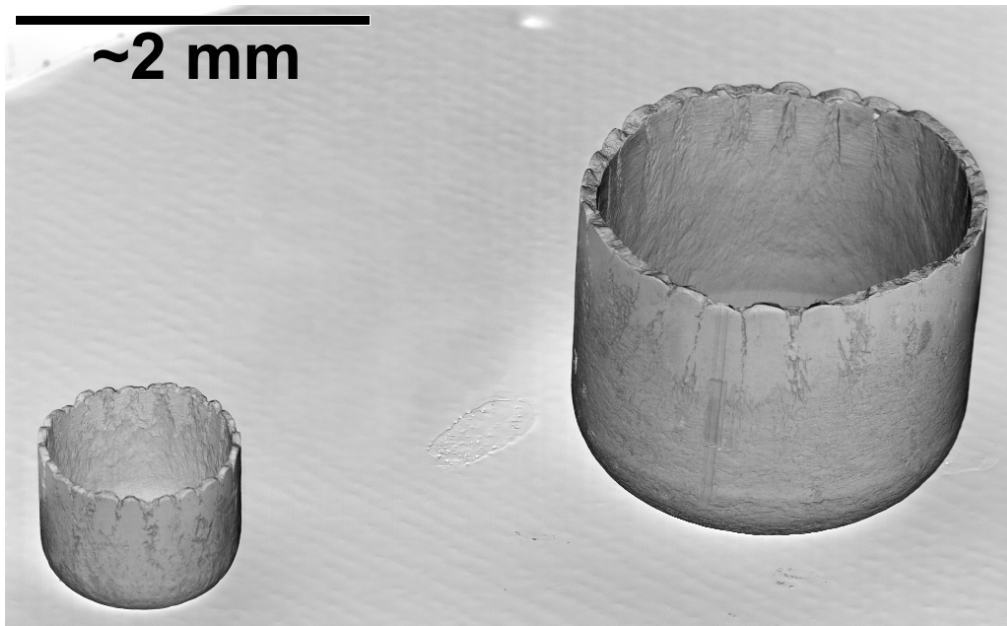


Bild 1.1.: REM-Aufnahme von tiefgezogenen Mini-Näpfen (IBF, RWTH Aachen). Der besseren drucktechnischen Darstellung wegen wurde das Bild invertiert.

wirken sich kleine Unterschiede von Materialcharge zu Materialcharge stärker aus und können eine ständige Neukalibrierung der Prozessparameter erfordern. Selbst die statistischen Schwankungen der Rohlinge innerhalb einer Charge können bereits ausreichen, um zu einer signifikanten Streuung der Eigenschaften des Endprodukts zu führen.

Bei Gestaltung und Dimensionierung eines Bauteils gibt es wie bei der Fertigung besondere Probleme aufgrund der Miniaturisierung. Die Ursache hierfür ist die Größenabhängigkeit der mechanischen Materialeigenschaften, die mit der herkömmlichen Kontinuumsmechanik nicht beschrieben werden kann. Selbst bei einer Prozessführung mit idealer Reproduzierbarkeit in der Bauteilgeometrie verhalten sich die einzelnen Bauteile unter Umständen unterschiedlich – wie sich auch die Rohlinge der gleichen Charge aufgrund statistischer Schwankungen unterschiedlich verhalten können.

Die Größenabhängigkeiten lassen sich also unterteilen in größenabhängige Prozessmechanismen und größenabhängige Materialeigenschaften. Zur Veranschaulichung soll das Verhältnis Oberfläche : Volumen bei einem Blech betrachtet werden. Bei einer selbstähnlichen Verkleinerung des Bauteils steigt dieses Verhältnis an. Die beispielsweise beim Tiefziehen entstehende

Verformungswärme skaliert mit dem Volumen des Bauteils. Das Abführen der Verformungswärme an die Umgebung skaliert jedoch mit der Oberfläche. Da die Fließspannung temperaturabhängig ist, verändert sich somit das plastische Verhalten bei der Umformung [3]. Dies stellt einen größenabhängigen Prozessmechanismus dar. Das fertige Bauteil habe nun eine Oxidschicht, deren Eigenschaften sich vom Grundmaterial stark unterscheidet. Die Dicke der Oxidschicht ist unabhängig von der Bauteilgröße konstant. Das Verhältnis Oxidschichtdicke : Blechdicke ist somit bei kleinen Bauteilen höher, und die Eigenschaften der Oxidschicht machen sich zunehmend bemerkbar. Dies stellt eine größenabhängige Materialeigenschaft dar.

Es gibt eine Reihe von Ansätzen zur Modellierung des größenabhängigen Prozessverhaltens sowie des größenabhängigen Materialverhaltens. Eine geschlossene Betrachtung ist jedoch noch nicht möglich. Bei der Fertigung von Bauteilen überlagern sich die Größeneffekte aufgrund der Prozessskalierung und die Größeneffekte aufgrund der Bauteilskalierung. Das macht es unmöglich, im Experiment sauber zu unterscheiden, inwiefern eine Änderung im Gesamtprozess durch ein verändertes Prozessverhalten oder durch ein verändertes Materialverhalten verursacht wird. Die Modellierung kann also nicht im Detail mit dem Experiment validiert werden. Es ist somit unklar, ob die berücksichtigten Mechanismen vollständig sind und wie stark sie im Einzelnen zum Tragen kommen.

Für ein umfassendes Verständnis der Größeneffekte und für eine gezielte Optimierung von Material und Prozess ist es also notwendig, die zugrundeliegenden Mechanismen detaillierter zu untersuchen. Insbesondere müssen die Mechanismen möglichst einzeln untersucht werden, um Mehrdeutigkeiten aufgrund von Überlagerungen zu vermeiden.

1.2. Fragestellung

Die in der Praxis üblicherweise verwendeten Materialien verfügen über eine komplexe Mikrostruktur. Entsprechend vielfältig sind die Mechanismen, die das Verhalten des Materials bestimmen. Wie auch schon bei der Überlagerung von größenabhängigen Materialeigenschaften und größenabhängigem Prozessverhalten ist es problematisch, wenn im Experiment mehrere unter Umständen unbekannte Mechanismen mit unbekanntem Vorzeichen und

unbekannter Intensität wirken. Aus diesem Grund wurde entschieden, in dieser Arbeit möglichst einfache Materialien zu verwenden: Fe-3%Si (krz) und Cu (kfz).

Bei den Größeneffekten unterscheidet man zwischen Effekten aufgrund absoluter Längen (zum Beispiel die Korngröße) und Effekten aufgrund von Längenverhältnissen (zum Beispiel Verhältnisse mikrostruktureller Längen zur Blechdicke). In der vorliegenden Arbeit wurde der Einfluss des Verhältnisses Korngröße : Probengröße auf die Fließspannung im quasistatischen Zugversuch untersucht. Besonderes Augenmerk wurde darauf gelegt, dass Seiteneffekte (zum Beispiel Änderungen in der Textur aufgrund der Skalierung) möglichst ausgeschlossen werden können.

Das außen an der Probe gemessene plastische Verhalten setzt sich aus einer Vielzahl lokaler Vorgänge zusammen und ist somit eine Art Mittelung über das Probenvolumen. Meist werden in Experimenten und Simulationen lediglich solche Mittelwerte betrachtet.¹ Diese Mittelwerte sagen jedoch nichts über die lokalen Vorgänge aus. Mit dieser Vorgehensweise ist es durchaus möglich, ein Verhalten phänomenologisch nachzubilden. Um das Werkstoffverhalten vorhersagen oder einen Werkstoff gezielt optimieren zu können, bedarf es aber darüber hinaus eines korrekten Verständnisses der zugrundeliegenden lokalen Mechanismen. Dem Grad der lokalen Betrachtung sind jedoch auch Grenzen gesetzt. Sowohl experimentell, als auch in der Simulation ist es derzeit nicht möglich, die Untersuchung eines kompletten Umformvorgangs auf der Ebene einzelner Versetzungen durchzuführen. Ein weiteres Ziel war deshalb, einen geeigneten Kompromiss zwischen Homogenisierung und Detailgrad zu finden. Die experimentelle Charakterisierung und die Modellierung sollten dabei auf vergleichbarem Lokalisierungsgrad aufbauen. Hierfür waren geeignete lokale Charakterisierungs- und Auswertemethoden zu finden, anzupassen, zu verbessern oder auch neu zu entwickeln. Die Probencharakterisierung sollte hierbei auch auf komplexe Probengeometrien anwendbar sein, wie zum Beispiel auf tiefgezogene Näpfe. Zur Überprüfung der Modellierung sollten die Vorhersagen nicht nur mit statistischen Reihenversuchen verifiziert werden. Zusätzlich sollten an einzelnen Proben sowohl globale als auch lokale Vergleiche mit dem Experiment erfolgen.

¹Häufig wird noch zusätzlich über mehrere Proben gemittelt und somit ein Mittelwert aus Mittelwerten betrachtet.

1.3. Gliederung der Arbeit

Alle Theorie nützt nichts, wenn die Realität anderer Meinung ist. In diesem Sinne wird in Kapitel 2 zunächst ein kleiner Literatur-Überblick zu experimentellen Messungen von Größeneffekten gegeben. Um einen Eindruck zu vermitteln, wie komplex und vielfältig dieses Themengebiet ist, werden bewusst Experimente aus verschiedenen Bereichen und zu verschiedenen Materialkenngrößen vorgestellt. Es wird auch kurz auf die zur Erklärung der jeweiligen Messergebnisse herangezogenen Materialmodelle eingegangen, jedoch ohne diese eingehender zu erläutern. Eine detaillierte Darstellung der Modelle wird nachfolgend in Kapitel 3 gegeben, wo ausgehend von der klassischen Kontinuumsmechanik verschiedene Ansätze aus der Literatur vorgestellt werden, um größenabhängiges Verhalten zu modellieren. Vor dem Hintergrund der Ausführungen in diesen beiden Kapiteln werden in Kapitel 4 die Zielsetzung und die dabei auftretenden Problemstellungen der vorliegenden Arbeit konkretisiert und in Bezug auf den Stand der Technik eingeordnet.

Zur lokalen Charakterisierung der Proben wurden zahlreiche Mess- und Auswertemethoden verwendet. Viele der Methoden sind Verbesserungen bereits existierender Verfahren oder wurden neu entwickelt. Im Detail werden sie in Kapitel 5 beschrieben. Das verwendete Probenmaterial und seine Eigenschaften, die Probenpräparation und die experimentelle Vorgehensweise werden in Kapitel 6 erläutert.

In Kapitel 7 werden die Ergebnisse vorgestellt und diskutiert. Da die untersuchten Proben nicht mehr als homogen angesehen werden können, unterscheidet sich die Fließspannung von Probe zu Probe, und die Verformung erfolgt nicht mehr gleichmäßig, sondern in örtlich begrenzten Bereichen. Aus diesem Grund wird hier zunächst ein eigenes Modell vorgestellt, um effizient Fließspannung und -ort einer Zugprobe zu ermitteln. Danach werden Messergebnisse zur Gleitsystemaktivität, zur lokalen Verformung und zur lokalen Verfestigung von Zugproben vorgestellt. Diese Messungen liefern wichtige Materialparameter sowie Aussagen über das lokale Materialverhalten. Die in entsprechenden Experimenten gemessene Abfolge lokaler Fließvorgänge und die Fließspannung werden mit den Vorhersagen des Modells verglichen. Ausgehend von diesen Ergebnissen wird das Modell erweitert, um effizient das statistische Verhalten der Fließ-

spannung als Funktion der relativen Korngröße, der Probengeometrie, der Textur und der aktiven Gleitsysteme zu modellieren. Schließlich werden die Vorhersagen zum Mittelwert- und Streuverhalten anhand statistischer Reihenzugversuche überprüft.

Die Ergebnisse der Arbeit zur Mess- und Auswertemethodik sowie zu Größeneffekten von Fe-3%Si im Zugversuch werden in Kapitel 8 noch einmal kurz zusammengefasst.

Es wurde damit begonnen, das Verhalten von Cu analog zu Fe-3%Si zu untersuchen, erste Ergebnisse sind bereits in Kapitel 7 vorgestellt. Des Weiteren fanden erste lokale Untersuchungen an tiefgezogenen Proben statt. Diese Arbeiten bilden den Beginn des nächsten Projektabschnitts und sind noch nicht abgeschlossen. Aus diesem Grund werden diese Arbeiten sowie erste Ergebnisse in Form eines Ausblicks in Kapitel 9 beschrieben.

Im Anhang wird schließlich auf einige theoretische Grundlagen genauer eingegangen. Des Weiteren ist dort eine Übersicht der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Software zu finden.

2. Größeneffekte im Experiment

Im Folgenden wird ein Literatur-Überblick zu experimentellen Messungen von Größeneffekten gegeben. Die Bandbreite der Möglichkeiten ist dabei enorm. Neben Werkstoff und Belastungsfall gibt es einen großen Spielraum bezüglich der zu skalierenden oder konstant zu haltenden Größen. Ebenso groß ist die Vielfalt an Größen, deren Skalierungsabhängigkeit gemessen werden soll. Auf der anderen Seite ist das Thema Größeneffekte erst in den letzten Jahren zunehmend in den Fokus der Forschung gerückt. Obwohl versucht wurde, die vorgestellten Experimente möglichst gut zu gliedern, ergibt sich noch kein einheitliches Bild; vieles ist noch unklar, und manche Ergebnisse scheinen sich sogar zu widersprechen.

2.1. Skalierung

In Bezug auf die Skalierung von Probengeometrie und Mikrostruktur können die Abmessungen, auf welche Größeneffekte zurückgeführt werden können, im Prinzip in vier Klassen unterteilt werden:

1. Absolute geometrische Abmessungen
2. Relative geometrische Abmessungen, wie zum Beispiel Probendicke : Probenbreite
3. Absolute mikrostrukturelle Abmessungen
4. Relative mikrostrukturelle Abmessungen, wie zum Beispiel Probendicke : Korngröße

Das Zurückführen eines gemessenen Effekts auf eine der vier Klassen ist ohne weiteres nicht eindeutig möglich, da zum Beispiel eine Skalierung der Probengeometrie bei konstanter Korngröße auch immer das Verhältnis Probengeometrie : Korngröße verändert. Aus einer einzelnen Versuchsreihe kann daher häufig nicht auf die Ursache des Effektes geschlossen werden. Deshalb werden Geometrie und Korngröße in vielen Arbeiten getrennt voneinander skaliert. Ein Vergleich der Ergebnisse soll eine eindeutige Aussage über die Ursache des Effektes ermöglichen.

2.2. Experimentelle Grundlagen

Bei der Beurteilung von experimentellen Ergebnissen ist zu beachten, welche Größen vernachlässigt wurden. Von ihnen ist nicht bekannt, inwiefern sie durch die Skalierung mitverändert wurden. Solcherart gemessene Größeneffekte stehen also unter der (meist ungeprüften) Annahme, dass entweder die vernachlässigten Größen nicht signifikant geändert wurden, oder eine Änderung dieser Größen im Rahmen des Experiments keine signifikante Auswirkung auf das Ergebnis hat. Daher wird – soweit es den zitierten Arbeiten zu entnehmen war – bei der Beschreibung der Ergebnisse erwähnt, welche Größen skaliert, konstant gehalten beziehungsweise vernachlässigt wurden. Häufig vernachlässigte Größen sind zum Beispiel:

- **Verformungsgeschwindigkeit:** Die Geschwindigkeit von Versetzungen ist unter Umständen *nicht* proportional zur wirkenden Schubspannung, wie zum Beispiel im Falle von Fe-3%Si [4]. Bei der Modellierung äußert sich diese Dehnratenabhängigkeit in Form einer internen Länge, die in den konstitutiven Gleichungen enthalten ist und somit ein größenabhängiges Verhalten impliziert [5]. Aus diesem Grund ist bei dynamischen Versuchen gemäß der Ähnlichkeitstheorie der Umformtechnik die Zeitskala entsprechend mitzuskalieren, damit die Dehnraten erhalten bleibt [6]. Auf der anderen Seite kann dies die Temperatur des Bauteils beeinflussen: Wegen der geringeren Bauteilgröße ist das Verhältnis Volumen : Oberfläche kleiner. Die im Volumen erzeugte Verformungswärme kann also über eine (relativ gesehen) größere Oberfläche abgegeben werden. Um diesen Effekt der stärkeren Bauteilabkühlung zu neutralisieren, müsste die Zeit für die Umformung

verringert werden. Es ist somit nicht möglich, bei einer Skalierung der Probengeometrie sowohl Dehnrates als auch Temperaturprofil in der Probe zu erhalten.

Bei quasistatischen Versuchen sind die Aspekte der Verformungsgeschwindigkeit und der Probenerwärmung kaum relevant, weswegen in den zitierten Arbeiten meist kleine Dehnraten verwendet werden.

- **Oberflächentopographie:** Die Oberflächenrauheit kann die Reibung zwischen Probe und Werkzeug, und somit das Versuchsergebnis stark beeinflussen. Eine mögliche Ursache hierfür ist die unterschiedliche Ausprägung von geschlossenen und offenen Mikroschmiertaschen bei Flüssigschmierung [7]. Unabhängig von der Reibung kann eine Verringerung der Oberflächenrauheit zum Beispiel zu einer erhöhten Umformbarkeit von Blechen führen [8]. Die absolute Oberflächenrauheit wirkt sich in Abhängigkeit von der Blechdicke unterschiedlich stark auf das Ergebnis aus, weshalb eine Betrachtung relativ zur Blechdicke vorteilhafter erscheint. Insbesondere bei hohen Temperaturen kann die Oberflächenrauheit aber auch durch die Dauer der Glühbehandlung beeinflusst werden, wie zum Beispiel bei der Einstellung unterschiedlicher Korngrößen.
- **Textur:** Die Textur hat einen signifikanten Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften. Bei der Skalierung der Blechdicke kommt es aufgrund des unterschiedlichen Abwalzgrades zu Unterschieden in der Textur. Bei der Skalierung der Korngröße durch Glühbehandlungen gibt es Orientierungen, die in Abhängigkeit von der Lage des Kornes und des lokalen Umformgrades bevorzugt wachsen [9]. Das kann sogar zu einer über die Blechdicke inhomogenen Textur führen [10]. Da aufgrund des orientierungsabhängigen Kornwachstums zwischen Korngröße und Kornorientierung eine Korrelation bestehen kann, ist es von Bedeutung, ob eine Texturmessung korn- oder volumenspezifisch ausgewertet wird [11].

Statt der Textur wird manchmal der Δr -Wert betrachtet. Dieser ist jedoch nur ein unzureichendes Maß und kann eine detaillierte Texturmessung nicht ersetzen.

- **Korngrößenverteilung:** Der häufig verwendete arithmetische Mittelwert der Korngröße ist kein eindeutiges Maß. Dem gleichen Mittelwert können sehr unterschiedliche Korngrößenverteilungsfunktionen zugrundeliegen, bis hin zu bi- oder multimodalen Verteilungen. Die Korngrößenverteilung im Probeninnern kann sich zum Beispiel aufgrund lokaler Unterschiede im Umformgrad deutlich von der Korngrößenverteilung am Probenrand unterscheiden. Zudem werden die mechanischen Eigenschaften nichtlinear von der Korngröße beeinflusst (zum Beispiel Hall-Petch-Effekt), sodass die mechanischen Eigenschaften signifikant von der Korngrößenverteilung beeinflusst werden [12,13].

Neben diesen Variablen sind auch mögliche Toleranzen bei der Probenfertigung zu beachten, wie zum Beispiel fehlende Parallelität gegenüberliegenden Probenflächen (insbesondere bei Stauchproben und Flachzugproben) sowie Kantenverrundungen durch Schleifen oder Ätzen. Mitunter können auch menschliche Faktoren, wie die persönliche Tagesform oder unterschiedliche Vorgehensweisen der jeweiligen Mitarbeiter, Auswirkungen auf die Reproduzierbarkeit der Probenfertigung haben. Eine nähere Betrachtung hierzu ist in [14,15] zu finden.

2.3. Zug- und Stauchversuch

Der quasistatische Zugversuch ist in der Literatur wegen seiner Einfachheit der am häufigsten anzutreffende Versuch. Da makroskopisch eine einachsige Last anliegt, sind die Ergebnisse nur bedingt auf komplexere Umformvorgänge übertragbar, da dort in der Regel makroskopisch mehrachsige Belastungen vorliegen.¹ Eine mögliche Alternative besteht in der Verwendung spezieller Zugprobengeometrien [17]. Allerdings bringen diese zusätzliche Effekte bei der Größenskalierung mit sich: In [18] wurden gekerbte und ungekerbte Rundzugproben aus Stahl (20MnMoNi55) untersucht, wobei die Probengeometrie selbstähnlich skaliert wurde. Die kleinsten Proben

¹Prinzipiell liegen aufgrund der elastischen und plastischen Anisotropie der einzelnen Körner auch beim Zugversuch lokal mehrachsige Spannungszustände vor [16]. Bei den für Umformvorgänge maßgeblichen makroskopischen Kenngrößen zeigt sich im Experiment jedoch ein dominierender Einfluss des makroskopischen Belastungszustandes.

hatte dabei einen Durchmesser von 3 mm und eine Länge von 18 mm, die umlaufende Kerbe hatte einen Radius von 0.3 mm. Die größte Probe war zehnmal so groß, mit zehnmal so großem Kerbradius. Die ungekerbten Rundzugproben zeigten keine signifikante Größenabhängigkeit. Die Zugkurven der kleinen gekerbten Proben lagen höher als die Zugkurven der großen gekerbten Proben.² Dies wird basierend auf der Strain Gradient Plasticity (Kapitel 3.1.2) damit erklärt, dass bei den ungekerbten Proben im Gegensatz zu den gekerbten Proben die Dehngradienten größeninvariant sind.

Wird die Länge von einkristallinen Flachzugproben variiert, verändert sich die lokale Verformung [19]. Die Untersuchung wurde an γ -Fe mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung (austenitische CrNi- und Mn-Stähle), CuNi10Sn6 und NiTi durchgeführt. Die Proben hatten dabei eine Länge von 25 mm bis 125 mm, eine Breite von 5 mm und eine Dicke von 1.6 mm. Bei ausreichend großer Probenlänge läuft die Verformung zunächst als einzelne Welle durch die Probe (Stadium I der Zugkurve: Bereich der Einfachgleitung). Im Stadium II der Zugkurve (lineare Verfestigung) laufen mehrere Verformungswellenfronten durch die Probe. Erst im Stadium III der Zugkurve (parabolische Verfestigung) finden sich stationäre Verformungsbänder und es kommt zur Dehnungslokalisierung. Der Abstand der Wellen nimmt dabei mit abnehmender Probenlänge ab. Mittels Extrapolation wird eine Grenzlänge von circa 16 mm ermittelt, unterhalb der die Wellen anfangen zu überlappen und eine homogenere Verformung resultiert.

In [20] wurden weichgeglühte, einkristalline Cu-Drähte unterschiedlicher Orientierung untersucht, wobei der Durchmesser von 0.35 mm bis 1.1 mm variiert wurde. Dabei wurde kein signifikanter Einfluss der Querschnittsfläche auf die Zugkurve gefunden. In [21] wurden weichgeglühte, polykristalline Cu-Drähte mit einem Durchmesser von 12 μm bis 170 μm untersucht. Dabei variierte die Korngröße von 5 μm bei den dünnen Dräh-

²Da alle Proben aus dem gleichen Ausgangsmaterial gefertigt wurden, können Textur, Korngröße und Korngrößenverteilung als konstant angenommen werden. Die Proben wurden mit vergleichbaren Randbedingungen gefertigt. Es fand jedoch keine Rauheitsmessung statt. Ob die Proben geätzt wurden oder nicht, ist der Arbeit nicht zu entnehmen. Dies könnte wegen einer oberflächennahen Verformungsschicht, wie sie beim Drehen entsteht, relevant sein. Auffallend ist die ungewöhnlich hohe Messunsicherheit. Die gemessenen Änderungen in den Zugkurven bei den ungekerbten Zugproben lagen in der Größenordnung 10 % und werden von den Autoren als typische Streuung bezeichnet.

2. Größeneffekte im Experiment

ten bis 25 μm bei den dicken Drähten.³ Auch hier wurde kein signifikanter Einfluss auf die Zugkurve gefunden. Dies wird damit erklärt, dass die Dehnungsgradienten im Zugversuch größeninvariant sind, und gemäß der Strain Gradient Plasticity ein größeninvariantes Verhalten zu erwarten ist.

Demgegenüber zeigten weichgeglühte Folien aus hochreinem Nickel (2.5 mm breit, 24 mm lang) mit zunehmender Foliendicke eine Zunahme der Fließspannung [22]. Die Foliendicke wurde hierbei von 12.5 μm (Korngröße 31 μm) bis 50 μm (Korngröße 71 μm) variiert.⁴ Als Ursache hierfür wird vermutet, dass die kristallographische Gleitung bei den dünnen Folien weniger stark durch die Korngrenzen behindert ist, als bei den dicken Folien. In [23] wurden Cu-Folien mit einer Dicke von 10 μm bis 250 μm untersucht.⁵ Mit Abnahme der Probendicke konnte eine signifikante Abnahme der Bruchdehnung festgestellt werden; eine Abnahme der Zugfestigkeit war nicht eindeutig nachzuweisen. Die Untersuchung ergab ferner, dass die Probendicke den markanten Faktor darstellt. Probenbreite, Messlänge, Dehnrage, Oberflächenoxidation und Orientierung der Proben in Relation zur Walzrichtung waren im Vergleich dazu vernachlässigbar. Das unterschiedliche Verhalten könnte vielleicht damit zusammenhängen, dass bei den Ni-Folien nur ein Korn, bei den dünnen Cu-Folien immer mindestens zwei Körner über die Foliendicke vorlagen.

An Flachzugproben aus weichgeglühtem Al wurde in [24, 25] bei konstanter mittlerer Korngröße von 141 μm und abnehmender Probendicke eine Abnahme von Streckgrenze und Zugfestigkeit gefunden.⁶ Hierbei galt stets Korngröße < Blechdicke. Die Messlänge betrug 20 mm und war circa 5 mm

³Eventuelle Änderungen in Textur, Oberflächentopographie und Korngrößenverteilung wurden nicht betrachtet. Ein möglicher Einfluss der veränderten Korngröße auf die Fließspannung wurde vernachlässigt.

⁴Die Textur wurde überprüft; es lagen keine signifikanten Abweichungen vor. Es ist nicht zu entnehmen, ob die Proben vor oder nach dem Glühen aus der Ausgangsfolie geschnitten wurden. Bezüglich der Oberflächentopographie der Folien wird keine Aussage getroffen. Die Korngrößenverteilung wurde nicht betrachtet.

⁵Die Proben wurden im weichgeglühten und ungeglühten Zustand untersucht. Textur und Korngröße waren bei allen Proben vergleichbar, wobei die Körner stark gestreckt waren (Kornabmessungen in Blechdickenrichtung etwa 5 μm , in Längsrichtung etwa 100 μm). Die absolute Oberflächenrauheit war bis auf eine Ausnahme ebenfalls vergleichbar; das bedeutet, dass die auf die Foliendicke bezogene Oberflächenrauheit variierte.

⁶Eventuelle Änderungen in Textur, Oberflächentopographie und Korngrößenverteilung wurden nicht betrachtet.

breit⁷, die Dicke variierte von 0.17 mm bis 2 mm. Als Ursache wird eine verringerte Fließspannung von Oberflächenkörnern angenommen.

In [26] ergaben Zugversuche an geglühten Al-Flachzugproben mit einer Dicke von 100 μm bis 340 μm und einer Korngröße von 75 μm bis 480 μm , dass die Fließspannung vom Verhältnis Blechdicke : Korngröße abhängt.⁸ War das Verhältnis kleiner als 1, so veränderte sich die Fließspannung kaum. Mit Zunahme des Verhältnisses bis zu einem Wert von ungefähr 3 nahm die Fließspannung zu. Eine Untersuchung an Al, Cu, Cu-13at%Al und Fe in [27] zeigte einen ähnlichen Einfluss des Verhältnisses Blechdicke : Korngröße, allerdings wurde ab einem materialabhängigen Grenzwert kein weiterer Anstieg der Fließspannung mehr beobachtet.

Bereits bei der Betrachtung dieser Ergebnisse von reinen Metallen mit relativ einfacher Mikrostruktur stellen sich erste Fragen: Wenn die Oberflächenkörner von Al eine verringerte Fließspannung haben – warum ergeben die Untersuchungen von polykristallinen Cu-Drähten im Zugversuch nicht ebenfalls diesen Effekt? Zumal aufgrund der Oxidschicht von Al ein entgegengesetzter Effekt (Zunahme der Fließspannung mit Verkleinerung der Probe wegen der damit einhergehenden Zunahme des Verhältnisses Oberfläche : Volumen, weswegen sich die Oxidschicht zunehmend auf die Fließspannung auswirkt.) zu beobachten ist [28]. Der Effekt der freien Oberflächenkörner müsste bei Cu also eigentlich wesentlich stärker zu beobachten sein als bei Al.

Eine Untersuchung an weichgeglühten, elektropolierten, feinkörnigen Proben aus Al und OFHC⁹ Cu mit systematischer Veränderung von Probengeometrie und Querschnittsfläche ist in [29] zu finden. In drei Versuchsreihen erfolgte zuerst eine selbstähnliche Skalierung der Probengeometrie, danach wurde die Probendicke bei konstanter Probenbreite und Probenlänge variiert. Anschließend wurde bei konstanter Dicke und Länge die Breite der Probe skaliert. Bei einer Abnahme der Probendicke von 6 mm auf 1 mm wurde eine Zunahme der Zugfestigkeit festgestellt. Die Skalierung der anderen Probenabmessungen zeigte keinen Einfluss. Dies wird darauf zurückgeführt, dass bei Unterschreitung einer Blechdicke von circa 2 mm ein

⁷Die Breite wurde anhand der Probenzeichnung in der Arbeit geschätzt, da sie nicht explizit angegeben ist.

⁸Die Textur war bei allen Proben vergleichbar, die Kornstrukturen waren gleichmäßig. Die Oberflächenrauheit kann als gering angesehen werden, da die Proben elektropoliert wurden.

⁹Oxygen-Free High Conductivity

Übergang zum ebenen Spannungszustand stattfindet, der die maßgebliche Ursache ist.

Das größenabhängige Verhalten kann sich durch Zulegen deutlich verändern. Bei einkristallinen Folien aus Fe ist bei einer Foliendicke von weniger als 30 μm eine Abnahme der Fließspannung messbar. Einkristalline Folien aus Fe-3%Si zeigen bei Foliendicken von 2 μm bis 250 μm jedoch keine signifikante Änderung [4]. Die Versetzungsstrukturen bei Folien mit einer Dicke von mindestens 0.3 μm entsprechen denen im Vollmaterial, es ist also kein Oberflächeneinfluss mehr feststellbar [30].

In [31] wird der Einfluss der Querschnittsfläche und der Probendicke bei CuZn36 auf die Zugkurve untersucht.¹⁰ Die Zugkurven von Flachzugproben mit einer Messlänge von 50 mm, einer Dicke von 0.1 mm und einer Breite von 2 mm bis 10 mm lagen innerhalb eines Streubandes von 3 %. Anschließend wurde das Verhältnis Breite : Dicke von 2 mm : 0.1 mm bis 10 mm : 0.5 mm skaliert. Die Proben mit der Blechdicke 0.1 mm zeigten dabei eine signifikant niedrigere Zugkurve als alle anderen Proben.¹¹ Aus den Versuchen wird geschlossen, dass der Parameter Dicke : Korngröße zur Beschreibung des Größeneffekts geeignet ist.

Für weichgeglühtes CuNi18Zn20 und CuZn15 wird bei selbstähnlichem Herunterskalieren der Probengeometrie und bei konstanter Korngröße in [32,33] eine Abnahme der Fließspannung gemessen und auf den Einfluss von Oberflächenkörnern zurückgeführt. Bei einer konstanten Messlänge von 50 mm wurde das Verhältnis Probenbreite : Probendicke von 2 mm : 0.1 mm bis 20 mm : 1 mm verändert. Es wurden mehrere Probengruppen untersucht, die sich in der Korngröße unterschieden (25 μm bis 115 μm).¹² Dieses Modell kann jedoch die Zunahme der Streuung bei kleinen Proben nicht erklären.

¹⁰Textur, Oberflächentopographie und Korngrößenverteilung wurden nicht betrachtet. Die Proben waren nicht weichgeglüht.

¹¹Die Korngröße variierte uneinheitlich von 35 μm bis 70 μm ; die Mikrohärtigkeit lag bei allen Blechen bei $175 \pm 5 \text{ HV}_{100}$, lediglich die Bleche mit der Dicke 0.1 μm zeigten eine geringere Härte von 140 HV_{100} . Diese Abweichungen in der Härte wurden bei der Auswertung allerdings nicht berücksichtigt.

¹²Die Proben wurden mittels LASER geschnitten. Metallographische Untersuchungen zeigten keine signifikante Wärmeeinflusszone. Die Probenränder waren jedoch gezackt und wurden nicht nachbearbeitet. Bei der Wärmebehandlung und beim LASER-Schneiden besteht die Gefahr, dass von der Oberfläche Zn abdampft. Auf diese Problematik wird in der Arbeit nicht eingegangen. Mit Abnahme der Probengröße nahm auch der mittlere r-Wert $\langle r \rangle = \frac{1}{4} (r_0 + 2r_{45} + r_{90})$ ab. Das bedeutet, dass die Dickenabnahme im Vergleich zur Breitenabnahme an Gewicht gewinnt. Die ebene Anisotropie $\Delta r = \frac{1}{2} (r_0 - 2r_{45} + r_{90})$ blieb konstant. Das kann auf eine gleichbleibende Textur hinweisen. Die Messung von $\langle r \rangle$ und Δr fand jedoch nur an Proben aus CuNi18Zn20 mit der Korngröße 25 μm statt. Inwiefern die Ergebnisse auf die anderen

Nimmt die Korngröße im Vergleich zur Probengröße zu, kommt es ferner zu einer zunehmend unregelmäßigen Bruchfläche, da die Mikrostruktur nicht mehr als quasi-homogen angesehen werden kann. Die Einschnürung erfolgt dann lokaler, die Bruchdehnung nimmt ab.

Die Auswirkung einer Veränderung der Kornanzahl in der Querschnittsfläche auf die Zugfestigkeit und die Bruchdehnung wurde in [34] für Sn und Sn-Legierungen untersucht.¹³ Bei Proben aus gewalztem Material stieg die Zugfestigkeit im Bereich von 1 bis etwa 30 Körnern in der Querschnittsfläche stark an, während die Bruchdehnung konstant blieb. Bei weiterer Erhöhung der Kornanzahl stieg die Zugfestigkeit nur noch moderat, die Bruchdehnung jedoch deutlich. Dies wird auf eine Veränderung im Verformungsmechanismus zurückgeführt, da bei der vorliegenden Probengeometrie bei mehr als circa 20–30 Körnern in der Querschnittsfläche Körner auftreten, die vollständig von Material umschlossen, und somit keine Oberflächenkörner mehr sind.

In [35] wurde gezeigt, dass die Korngröße bei Fe-3%Si Auswirkungen auf das Auftreten einer ausgeprägten Streckgrenze hat. Diese trat nur bei kleinen Körnern (20 μm) auf, grobkörnige Proben (Korngröße 170 μm) zeigten keine Streckgrenze. Bei Verringerung der mittleren Korngröße wurde in [36,37] eine Zunahme der Fließspannung gefunden. Dieser Zusammenhang ist auch als Hall-Petch-Effekt bekannt und wird dadurch verursacht, dass Korngrenzen die Versetzungsbewegung behindern. Da neben Korngrenzen auch Phasengrenzen häufig als Versetzungshindernisse wirken, sollten ähnliche Zusammenhänge auch bei mehrphasigen Legierungen zu erwarten sein. In bestimmten Fällen ist jedoch das Gegenteil der Fall. In der Al-Legierung A356 bewirkt eine Verringerung des Dendritenarmabstandes eine Abnahme der Verfestigung, da die Versetzungsbewegung in der Ausscheidung auf einen kleinen Randbereich zur Matrix begrenzt ist, und die Ausscheidungen somit erst ab einer gewissen Größe als Versetzungshindernisse wirken [38].

Im Gegensatz zum Zugversuch spielt bei Stauchversuchen auch die Reibung zwischen Werkzeug und Probe eine markante Rolle. Diese kann von der Größe der Probe und deren Oberflächenbeschaffenheit abhängen. Das

Probengruppen übertragbar sind, ist den Arbeiten nicht zu entnehmen. Aus diesem Grund müssen die Texturen dieser Proben als nicht betrachtet gewertet werden.

¹³Die Probenoberflächen waren poliert. Textur und Korngrößenverteilung wurden nicht betrachtet. Die Korngröße war entlang der Probenlänge aufgrund der Probenherstellung nicht konstant. Das Material wurde vor dem Versuch weichgeglüht.

Hauptproblem besteht darin, dass die Reibung nicht direkt messbar ist. In [39] wurden Zylinderstauchversuche an CuZn15 durchgeführt, wobei die Probenabmessungen Durchmesser : Probenhöhe von 1.5 mm : 1.0 mm selbstähnlich bis 7.2 mm : 4.8 mm skaliert wurde. Die Versuche wurden mit Proben der Korngröße 47 μm und 79 μm durchgeführt.¹⁴ Die Fließkurve nahm dabei mit der Probengröße ab. Eine Ursache hierfür wird nicht genannt. Darüber hinaus wurde bei Zunahme der Korngröße neben einer zunehmend unregelmäßigen Formänderung eine Abnahme der Fließspannung (Hall-Petch) gefunden. Um die Reibkoeffizienten zu untersuchen, wurden Ringstauchversuche mit verschiedenen großen Proben durchgeführt. Die makroskopische Formänderung (Innen- und Außenradius) wurde mit den Ergebnissen von FEM-Simulationen mit verschiedenen Reibkoeffizienten verglichen, um daraus auf die tatsächlich vorliegenden Reibkoeffizienten zu schließen. Die Ergebnisse waren jedoch uneinheitlich: Während beim Vergleich des Außenradius eine Größenabhängigkeit zu erkennen war, lieferte der Vergleich mit dem Innenradius keine eindeutige Tendenz.

In [40] wurden Stauchversuche an Messingzylindern durchgeführt, bei denen das Verhältnis Durchmesser : Höhe selbstähnlich von 5 mm : 7.5 mm bis 2 mm : 3 mm skaliert wurde. Die Korngröße wurde mittels Glühbehandlung von 16 μm bis 74 μm variiert.¹⁵ Auch hier zeigten kleine Proben eine verringerte Fließspannung; auf mögliche Ursachen wird jedoch nicht weiter eingegangen.

2.4. Biegeversuch

3-Punkt-Biegeversuche an weichgeglühten Folien aus hochreinem Nickel ergaben mit zunehmender Foliendicke eine Abnahme des Biegemoments [22] (Zur Erinnerung: Im Zugversuch führte eine Erhöhung der Foliendicke zu einer Erhöhung der Fließspannung; siehe auch Fußnote 4, Seite 12). Die Foliendicke wurde hierbei von 12.5 μm (Korngröße 31 μm) bis 50 μm (Korngröße 71 μm) variiert, die Biegeradien wurden dabei mitskaliert. Dies wird

¹⁴Textur und Korngrößenverteilung wurden nicht betrachtet. Die Oberflächentopographie wurde an den geschliffenen Zylinderenden gemessen und war nahezu konstant. Inwiefern die Zylindermantelfläche poliert und vermessen wurde, ist der Arbeit nicht zu entnehmen.

¹⁵Eventuelle Änderungen in Textur, Korngrößenverteilung und Oberflächenrauheit wurden nicht eingehender betrachtet.

auf größenabhängige Dehngradienten zurückgeführt. Die mit Hilfe der Strain Gradient Plasticity angefittete interne Länge von circa $4\text{ }\mu\text{m}$ ist von ähnlicher Größe wie die interne Länge, die sich aus Torsionsversuchen mit Cu-Drähten ergibt [21].

An Biegeproben aus weichgeglühtem Al mit einer Dicke von 1 mm und einer Breite von 15 mm wurden in [24, 25] 3-Punkt-Biegeversuche durchgeführt (Abstand der äußeren Lastpunkte 20 mm). Die Korngröße wurde von 0.15 mm bis 28 mm skaliert (siehe auch Fußnote 6, Seite 12). Über die Korngröße aufgetragen, zeigten Streckgrenze und maximale Biegekraft einen parabolischen Verlauf mit einem Minimum im Bereich Korngröße $\approx$ Probendicke. Während bei einer Korngröße von 0.56 mm noch keine Streuung feststellbar war, zeigte sich ab einer Korngröße von 1.13 mm eine signifikante Streuung, die bei größeren Körnern zunahm. Die Fließspannungszunahme bei kleinen Körnern wird auf Hall-Petch, sowie eine verringerte Fließspannung von Oberflächenkörnern zurückgeführt. Als Ursache für die Fließspannungszunahme bei großen Körnern wird die verstärkte Ausprägung einer Rekristallisationstextur vermutet.

Beim 3-Punkt-Freibiegen (*Airbending*) von weichgeglühtem CuNi18Zn20 und CuZn15 wird bei selbstähnlicher Skalierung der Probengeometrie und konstanter Korngröße von $25\text{ }\mu\text{m}$ bei kleinen Proben eine Abnahme der maximalen Biegekraft gemessen [32, 33] (siehe auch Fußnote 12, Seite 14). Dabei wurde das Verhältnis Probenbreite : Probendicke von 1 mm : 0.1 mm bis 10 mm : 1 mm skaliert; auch die anderen geometrischen Abmessungen der Biegeapparatur (Radien, Abstand der Lastpunkte, Geschwindigkeit, Maximale Durchbiegung) wurden mitskaliert. Als Ursache wird eine verringerte Fließspannung von Oberflächenkörnern genannt. Bei großen Körnern ($70\text{ }\mu\text{m}$ bei CuNi18Zn20 beziehungsweise $115\text{ }\mu\text{m}$ bei CuZn15) konnte das jedoch nicht bestätigt werden; die maximale Biegekraft stieg bei kleinen Proben sogar an. Als Ursache wird ein verringerter Beitrag von Korngrenzen zur Fließspannung vermutet, jedoch nicht näher ausgeführt (siehe auch [41]). Insbesondere ist nicht ersichtlich, warum dieser Effekt ausbleibt, wenn mit Proben aus dem gleichen Material Zugversuche durchgeführt werden. Die Biegeversuche zeigten bei Verringerung der Probengröße eine Zunahme der Streuung. Wie auch bei den Zylinderstauchversuchen in [39] wurde bei kleinen Proben mit großen Körnern eine zunehmend unregelmäßige Formänderung an der Oberfläche gefunden.

2.5. Torsion, Stanzen

Bei Torsionsversuchen an weichgeglühten, polykristallinen Cu-Drähten wurde der Durchmesser von 12 μm bis 170 μm variiert, wobei sich die Korngröße von 5 μm bei den dünnen Drähten bis 25 μm bei den dicken Drähten änderte [21] (siehe auch Fußnote 3, Seite 12). Bei abnehmendem Durchmesser wurde eine Zunahme der Verfestigung gemessen. Dies wird auf größenabhängige Dehngradienten zurückgeführt. Der Hall-Petch-Effekt wurde hierbei jedoch vernachlässigt.

Dem Torsionsversuch ist das Stanzen (*punching*) entfernt ähnlich, da auch hier primär eine Scherverformung vorliegt. In [32,33] wurden Stanzversuche an weichgeglühtem CuNi18Zn20 und CuZn15 durchgeführt (siehe auch Fußnote 12, Seite 14). Dabei wurde die Scherfestigkeit gemessen. Die untersuchten Korngrößen waren 25 μm und 70 μm (CuNi18Zn20) beziehungsweise 25 μm und 115 μm (CuZn15). Das Verhältnis Probenbreite : Probendicke wurde von 5 mm : 0.1 mm bis 50 mm : 1 mm variiert. Die Stanzgeschwindigkeit und die geometrischen Abmessungen der Stanzapparatur wurden selbstähnlich mitskaliert. Die Scherfestigkeit blieb nahezu konstant und stieg bei kleinen Proben an. Das steht im Widerspruch zum Verlauf der Fließspannung im Zugversuch beziehungsweise der maximalen Biegekraft beim 3-Punkt-Freibiegen, wo tendentiell eine Abnahme bei Verkleinerung der Probengeometrie zu finden war. Als Ursache wird vermutet, dass sich die Verformung beim Stanzen auf einen wesentlich kleineren Probenbereich beschränkt, so dass kein signifikanter Einfluss von Oberflächenkörnern mit verringerter Fließspannung gegeben ist. Die Ausformung der Scherkanengeometrie wird bei kleinen Proben zunehmend unregelmäßiger. Eine vergleichbare Untersuchung an Al führte zu ähnlichen Ergebnissen [25].

2.6. Härteprüfung

In [42] wurden Härteeindrücke in Al (Korngröße 1100 μm) und CuZn30 (Korngröße 60 μm) eingebracht. Dabei wurde die Last (0.1 N bis 3 N) variiert und die Dehnratenabhängigkeit der Härte bestimmt.¹⁶ Mit zunehmender

¹⁶Eine allgemeine Anmerkung zur registrierenden Härteprüfung: Die genaue Eindringtiefe des Indenters in das Material (*sinking-in*) während des Versuchs ist nicht bekannt, da die Ausbildung des Pile-up erst

Last wird eine abnehmende Härte gemessen, bis diese ab Prüflasten von circa 0.1 N (Bereich der Mikrohärte) ein Plateau erreicht. Die Abhängigkeit der Härte von der Verformungsgeschwindigkeit ist bei kleinen Eindringtiefen stärker ausgeprägt. Aus den Messdaten wurde das Aktivierungsvolumen berechnet und mit dem Aktivierungsvolumen verglichen, welches sich aus Zugversuchen ergibt. Aus den Ergebnissen wird geschlossen, dass der Größeneffekt bei der Härteprüfung (*indentation size effect*) auf einen Versetzungsmechanismus zurückzuführen ist.

Ein ähnliches Verhalten wurde in [44] bei der Härteprüfung für Au-beschichtetes Ag gezeigt (Schichtdicke 50 nm). Statt der Prüflast wurde die Eindrucktiefe vorgegeben und im Bereich von 0.1 μm bis 1.8 μm variiert. Die gemessene Härte sank bei Erhöhung der Eindrucktiefe, bei Eindrucktiefen $\gtrsim 1.5 \mu\text{m}$ ändert sie sich aber nur noch wenig. Zur Beschreibung des Effekts wird neben der Strain Gradient Plasticity auch ein geometrisch basiertes Modell verwendet, bei dem das Material in Bereiche unterschiedlicher Festigkeit aufgeteilt wird. Diese Bereiche wurden anhand von TEM-Untersuchungen ermittelt. Beide Modelle sind in der Lage, den beobachteten Größeneffekt zu beschreiben.

Insbesondere die Mikro- und Nanohärteprüfung sind sehr lokale Verfahren. Aus diesem Grund können mikrostrukturelle Heterogenitäten einen signifikanten Einfluss auf das Messergebnis haben. Beispielsweise wurde in [45] gezeigt, dass das Verhältnis Größe des Indents : Korngröße die Messergebnisse signifikant beeinflussen kann, da die Korngrenzen die Ausdehnung der plastischen Zone hemmen.

2.7. Andere Versuche zur Blechumformung

Die Umformgrenzen von verschiedenen Stahlblechen¹⁷ mit einer Blechdicke von 2.5 mm wurden in [46] untersucht. Dabei wurden verschiedene Korngrößen von 8 μm bis 60 μm verwendet.¹⁸ Es zeigte sich, dass aufgrund der später stattfindenden Dehnungslokalisierung Bleche mit kleinen Kör-

nach der Härteprüfung gemessen werden kann. Die Möglichkeiten und Grenzen einer zuverlässigen Auswertung der Last-Eindring-Kurven sind in [43] näher ausgeführt.

¹⁷ST12 (ferritisch; entspricht DIN 1623, Nr. 1.0330) und rostfreier Stahl 321 (austenitisch; entspricht DIN 17440, Nr. 1.4541)

¹⁸Textur, Oberflächentopographie und Korngrößenverteilung wurden dabei nicht betrachtet.

2. Größeneffekte im Experiment

nen höhere Umformlimits aufweisen. Dies ist in Übereinstimmung mit den Ergebnissen in [33], wo im Zugversuch an weichgeglühtem CuNi18Zn20 und CuZn15 bei einer Zunahme des Verhältnisses Korngröße : Blechdicke eine Abnahme von Gleichmaß- und Bruchdehnung gemessen wurde.

In [31] wurde der Einfluss der Blechdicke bei CuZn36 auf die Fließkurve im Bulgetest untersucht (siehe auch Fußnote 10, Seite 14). Die Blechdicke wurde dabei von 0.1 mm bis 0.5 mm skaliert. Wie schon beim Zugversuch zeigten die Proben mit der Blechdicke 0.1 mm eine signifikant niedrigere Fließkurve als alle anderen Proben (siehe auch Fußnote 11, Seite 14). In Analogie dazu wird auch hier das Verhältnis Dicke : Korngröße zur Beschreibung des Größeneffekts herangezogen.

Beim Tiefziehen von Stahl mit geringem Kohlenstoffgehalt (SPCE) wurde in [47] die Abhängigkeit der Tiefziehfähigkeit¹⁹ von Stempeldurchmesser und Blechdicke untersucht. Der Stempeldurchmesser variierte von 0.5 mm bis 40 mm, die Dicke des Bleches von 0.05 mm bis 1 mm.²⁰ Umso größer das Verhältnis Stempeldurchmesser : Blechdicke ist, umso niedriger ist die Tiefziehfähigkeit.

¹⁹Die in der zitierten Arbeit verwendete Tiefziehfähigkeit β eines Bleches ergibt sich aus dem Stempeldurchmesser D_p und dem Durchmesser D_s der größten Blechronden, die vollständig tiefgezogen werden konnten, gemäß $\beta := D_s / D_p$.

²⁰Textur, Oberflächentopographie, mittlere Korngröße und Korngrößenverteilung wurden nicht betrachtet. Die Ergebnisse der Tiefziehversuche wurden mit Hilfe von Zugversuchen normiert. In Anbetracht der Ausführungen zu Beginn von Kapitel 2.3 ist jedoch fraglich, inwiefern der Zugversuch hier ein geeignetes Mittel zur Normierung darstellt.

3. Stand der Technik

Die in der klassischen Mechanik verwendeten konstitutiven Gleichungen beinhalten keine Längenskala und gehen von einem idealen, homogenen Material aus. Das heißt im Einzelnen:

- **Keine Längenskala:** Die gängigen Formeln zur Berechnung der Fließspannung setzen sich zusammen aus Dehnungen, die dimensionslos sind, und Konstanten, die anhand von Versuchen mit makroskopischen Proben ermittelt werden. Es sind also weder geometrische noch mikrostrukturelle Längen enthalten.
- **Ideales Material:** Das Materialverhalten ist unabhängig von der Probenform immer gleich. Eine massive Zugprobe verhält sich wie eine Flachzugprobe.
- **Homogenes Material:** Das Material hat an jeder Stelle der Probe die gleichen Eigenschaften. Es gibt keine Unterschiede von Probe zu Probe; alle Proben verhalten sich gleich.

Um größenabhängiges Materialverhalten zu modellieren, muss mindestens eine dieser drei Annahmen aufgehoben beziehungsweise modifiziert werden. Im Folgenden werden nun die gängigsten Ansätze zur Erweiterung der klassischen Materialbeschreibung vorgestellt. Es wird dabei versucht, eine Klassifizierung der Modelle anhand der modifizierten Annahme vorzunehmen.

3.1. Einbringen von Längenskalen

Durch Einbringen einer Längenskala in die konstitutiven Gleichungen kann größenabhängiges Materialverhalten modelliert werden. Es gibt durchaus mehrere Methoden, eine solche Längenskala einzuführen – die Frage ist

jedoch, welche Längenskalenabhängigkeit die Realität am besten wiedergibt. Eine weitere Frage ist, inwieweit die Modellierung vereinfacht werden kann, sodass die Längenskalenabhängigkeit nach wie vor realitätsnah bleibt, die Rechenzeit für eine Simulation aber noch im akzeptablen Rahmen liegt.

3.1.1. Versetzungssimulation

Plastische Verformung basiert auf der Bewegung von Versetzungen. Aus diesem Grund liegt es nahe, bei der Beschreibung von Mikrobauteilen auf die Modellierung einzelner Versetzungen zurückzugreifen, zumal ihre Eigenschaften bereits seit Jahrzehnten Gegenstand von Untersuchungen und somit sehr gut bekannt sind (siehe zum Beispiel [48]). Des Weiteren kann das Verhalten größerer Gruppen von Versetzungen gezielt untersucht werden. Somit ist im Idealfall eine realitätsgetreue Beschreibung des statistischen Versetzungsverhaltens und seiner Auswirkungen auf die lokalen Werkstoffeigenschaften möglich. Dies kann detaillierte Einsichten in das effektive meso- und makroskopische Werkstoffverhalten ermöglichen. Somit sollte es also möglich sein, das lokale Materialverhalten auf physikalisch fundierter Basis zu beschreiben.

Eines der ersten Hauptprobleme bei der Versetzungssimulation besteht darin, dass analytische Beschreibungen der Verschiebungs- und Spannungsfelder von Versetzungen nur für unendliche oder halbbunendliche Medien bekannt sind. Zur Berechnung wäre es von Vorteil, ein effizientes Verfahren für allgemeine Randwertprobleme zu verwenden, da ansonsten für jeden Einzelfall eine eigene Formulierung gefunden werden muss. Hier bietet sich die FEM an. Da die FEM jedoch mit finiten – also endlichen – Volumina arbeitet, können die analytischen Beschreibungen der Versetzungen nicht ohne weiteres implementiert werden. Eine Lösung des Problems wurde in [49] vorgestellt. Hierbei wird die Simulation für jedes finite Element in folgende Schritte unterteilt:

1. Mit Hilfe der konventionellen linear-elastischen FEM werden im aktuellen Inkrement für die Randbedingungen Verschiebungs- und Spannungsverteilung ($\vec{u}_{S,FE}$ beziehungsweise $T_{S,FE}$) entlang der Elementoberfläche S berechnet.

2. Ausgehend von der momentanen Versetzungskonfiguration im finiten Element werden Verschiebungs- und Spannungsverteilung so berechnet, als wäre das Element ein unendlicher Körper. Somit können für die einzelnen Versetzungen die klassischen analytischen Lösungen verwendet werden. Das Gesamtverschiebungsfeld $\vec{u}_{\text{Disl}}$ beziehungsweise das Gesamtspannungsfeld σ_{Disl} aller Versetzungen im finiten Element ergeben sich dabei aus den Verschiebungs- und Spannungsfeldern $\vec{u}_i$ beziehungsweise σ_i der einzelnen Versetzungen i nach dem Superpositionsprinzip:

$$\vec{u}_{\text{Disl}} = \sum_i \vec{u}_i \quad (3.1)$$

$$\sigma_{\text{Disl}} = \sum_i \sigma_i \quad (3.2)$$

Beschreibt $\vec{v}$ den Verlauf der Flächennormale entlang der Elementoberfläche S , so können Verschiebungs- und Spannungsfeld ($\vec{u}_{S,\text{Disl}}$ beziehungsweise $T_{S,\text{Disl}}$) entlang S ermittelt werden:

$$\vec{u}_{S,\text{Disl}} = \vec{u}_{\text{Disl}} \quad \text{auf } S \quad (3.3)$$

$$T_{S,\text{Disl}} = \vec{v} \sigma_{\text{Disl}} \quad \text{auf } S \quad (3.4)$$

3. Aus der linear-elastischen FEM-Lösung des aktuellen Schritts sind für das Element die Sollverläufe für Verschiebungs- und Spannungsfeld ($\vec{u}_{S,\text{FEM}}$ beziehungsweise $T_{S,\text{FEM}}$) entlang S bekannt. Daraus lassen sich Differenzspannungen und -verschiebungen ermitteln, welche die treibende Kraft für die Versetzungsbewegung in diesem Inkrement darstellen:

$$\Delta \vec{u}_S = \vec{u}_{S,\text{FEM}} - \vec{u}_{S,\text{Disl}} \quad (3.5)$$

$$\Delta \sigma_S = \sigma_{S,\text{FEM}} - \sigma_{S,\text{Disl}} \quad (3.6)$$

4. Mit Hilfe eines Satzes konstitutiver Gleichungen für die Versetzungsbewegung wird aus $\Delta \vec{u}_S$ und $\Delta \sigma_S$ die Veränderung der Versetzungskonfiguration berechnet.
5. Zur Berechnung des nächsten Inkrements wird mit Schritt 1 fortgefahren.

Für eine zweidimensionale Betrachtung von Stufenversetzungen werden in [49] als konstitutive Gleichungen verwendet:

- Eine Gesetz für die Bewegung von Versetzungen:

$$v_i = \frac{\tau_{\text{res},i} b}{B} \quad (3.7)$$

Hierbei ist v_i die Geschwindigkeit der Versetzung i , $\tau_{\text{res},i}$ die wirkende Schubspannung in der Gleitebene, b der Burgersvektor¹ und B eine temperaturabhängige Konstante (*Drag-Koeffizient*).

Die Versetzungen bleiben auf ihren Gleitebenen; Versetzungsklettern wird also vernachlässigt. Da keine Reorientierung des Kristallgitters betrachtet wird, ist die Simulation nur für kleine Dehnungen geeignet.

Gl. (3.7) ist streng genommen nur für kfz-Metalle anwendbar, da bei diesen die Peierls-Spannung vernachlässigbar klein ist. TEM-Untersuchungen der Versetzungsbewegung für krz-Metalle (zum Beispiel in [4, 50]) legen ein Potenzgesetz der Form $v_{\text{edge}} = (\tau_{\text{res}}/\tau^*)^m$ nahe, wobei τ^* und m Materialkonstanten sind. Da diese Gleichung aber die thermische Aktivierung der Versetzungsbewegung in krz nicht berücksichtigt, wird häufig auf eine Gleichung der Form

$$v_i = v^* \exp\left(\frac{-\Delta H(\tau_{\text{res},i})}{k_B T}\right) \quad (3.8)$$

zurückgegriffen [51]. Hierbei ist v^* eine Materialkonstante, ΔH die freie Enthalpie als Funktion der wirkenden Schubspannung, T die absolute Temperatur und k_B die Boltzmann-Konstante. Für ΔH wird dabei zum Beispiel ein generischer Ansatz der Form

$$\Delta H(\tau_{\text{res}}) = \Delta H_0 \left[1 - \left(\frac{\tau_{\text{res}}}{\tau_p} \right)^p \right]^q \quad (3.9)$$

verwendet, wobei ΔH_0 , p und q Fitparameter sind; τ_p ist die Peierls-Spannung.

¹Übrigens stellt der Burgers-Vektor eine absolute Länge in den konstitutiven Gleichungen dar. Simulationen auf Basis von Versetzungen sind somit nicht mehr größeninvariant.

- Ein Gesetz zur Bildung von Versetzungen: In Anlehnung an den Mechanismus der Frank-Read-Quellen werden zu Beginn der Simulation mögliche Quellen zufällig im Element verteilt. Bei Anlegen einer kritischen Nukleationsspannung τ_{nuc} emittiert eine Quelle einen Versetzungsdipol der Länge L_{nuc} . Hierbei ist L_{nuc} der Abstand zwischen den emittierten Versetzungen, in dem die anziehende Spannung zwischen beiden gerade gleich τ_{nuc} ist. Da in der Realität nicht alle Frank-Read-Quellen gleich sind, wird zu Beginn der Simulation für jede Quelle eine individuelle Nukleationsspannung gemäß einer Gaussverteilung zufällig bestimmt.
- Ein Gesetz zur Annihilation von Versetzungen: Zwei Stufenversetzungen mit entgegengesetztem Vorzeichen werden eliminiert, wenn ihr Abstand kleiner als eine kritische Distanz L_e ist.

In der Simulation wurden Stufenversetzungen zweidimensional betrachtet (ebene Dehnung). Ein einzelnes finites Element mit periodischen Randbedingungen wurde entlang der Gleitrichtung geschert. Dabei wurden verschiedene Szenarien untersucht (zum Beispiel bewegliche Versetzungswände, unbewegliche Versetzungswände, Ausscheidung in der Mitte des Elements sowie unterschiedliche Quellendichten). Es zeigte sich bereits bei dieser vereinfachten Betrachtung, dass der Bedarf an Rechenzeit sehr groß ist. Hauptursache hierfür ist die Berechnung der Versetzungswechselwirkungen, die mit N^2 skaliert (N ist die Anzahl der Versetzungen). Des Weiteren muss die Zeit pro Inkrement in jedem Schritt neu bestimmt werden, damit die Zeitpunkte für Versetzungsnukleation und -annihilation möglichst exakt erfasst werden können. Die resultierenden Inkremente sind deshalb sehr klein – für die plastische Dehnung 1 % waren 300 000 Inkremente notwendig.

Eine verbesserte Herangehensweise wurde in [52] für Biegung vorgestellt:

- Bei der Bildung von Pile-ups kommt es aufgrund des geringen Abstands zwischen den Versetzungen zu sehr starken Wechselwirkungen. In der Simulation führen diese Wechselwirkungen dazu, dass sich hochfrequente Schwingungen ausbilden. Diese Schwingungen in der Simulation korrekt abzubilden erfordert ein sehr kleines Zeitinkrement. Da sie für die Simulation aber eigentlich irrelevant sind, werden sie gedämpft, indem für die Versetzungsgeschwindigkeit v_i eine obere Grenze gesetzt wird.

- Es ist nicht wichtig, den Zeitpunkt von Ereignissen korrekt zu ermitteln; kleine Ungenauigkeiten haben keinen signifikanten Einfluss auf das Simulationsergebnis. Somit ist es nicht mehr notwendig, bei jedem Inkrement den Zeitschritt neu zu bestimmen.
- Aufgrund der beiden vorgenannten Gründe kann zu Beginn der Simulation ein konstantes Zeitinkrement gewählt werden, so dass die Anzahl der Inkremente pro Simulation um circa 2 Größenordnungen kleiner ist.
- Bei der zuvor beschriebenen Vorgehensweise erzeugte eine Quelle eine Versetzung, sobald die erforderliche Nukleationsspannung einmalig für kurze Zeit erreicht oder überschritten wurde. Dies ist wenig realistisch, da eine Frank-Read-Quelle nicht beliebig schnell arbeitet; es ist zum Beispiel möglich, dass eine beginnende Ausbauchung stehenbleibt oder sich wieder zurückbildet, weil aufgrund der Bewegung benachbarter Versetzungen die lokale Spannung beeinflusst wird. Aus diesem Grund nukleiert eine Frank-Read-Quelle eine Versetzung erst dann, wenn für eine vorgegebene Mindestzeit die erforderliche Nukleationsspannung anliegt.
- Kleine Ausscheidungen werden als feststehende Versetzungshindernisse berücksichtigt. Hierfür wird an den betreffenden Positionen eine Peierls-Barriere simuliert. Das heißt, dass die Peach-Köhler-Kraft einer Versetzung an dieser Stelle einen Grenzwert überschreiten muss, damit die Versetzung sich weiterbewegt.
- Die Simulationen umfassten bis zu 3 verschiedene Gleitsystemorientierungen.

Mittels Variation der Gleitsysteme, des Gleitebenenabstandes, der Hindernisdichte und der Probengröße (von $12\text{ }\mu\text{m} \times 4\text{ }\mu\text{m}$ bis $48\text{ }\mu\text{m} \times 16\text{ }\mu\text{m}$) wurden mehrere Simulationen durchgeführt. Die Simulation eines Biegeversuchs zeigt Verfestigung sowie einen größenabhängigen Verlauf der Fließspannung – im Gegensatz zu einer vergleichbaren Simulation eines Zugversuchs [53].

Bei der Erweiterung der Versetzungssimulation auf drei Dimensionen sind zahlreiche weitere Aspekte zu beachten, auf welche im Folgenden genauer eingegangen wird:

Die Versetzungen können nicht mehr als gerade Liniendefekte modelliert werden, da sie gekrümmt sind. Somit ist auch die Linienspannung zu berücksichtigen.

Für die Darstellung einer Versetzungslinie gibt es mehrere Möglichkeiten [51,54,55] (Abb. 3.1). Im einfachsten Fall kann sie mit Hilfe von reinen Stufen- und Schraubensegmenten dargestellt werden. Das hat den Vorteil, dass es nur zwei Arten von Segmenten gibt, deren Spannungs- und Verschiebungsfelder einfach zu berechnen sind. Die Segmentlänge bei dieser Darstellung ist b . Es ist zwar auch möglich längere Segmente zu verwenden, jedoch werden die Versetzungslinien dadurch eckiger, was in der Regel wenig realistisch ist. Der Hauptnachteil dieser Darstellung besteht in der hohen Anzahl der Versetzungssegmente, denn wie bei der zweidimensionalen Simulation skaliert auch hier der Rechenaufwand für die Versetzungswechselwirkungen mit N^2 , jedoch ist N hier die Anzahl der Versetzungssegmente. Alternativ können lineare oder gekrümmte Versetzungssegmente mit Mischcharakter verwendet werden; hier werden nur noch die Kräfte an den Knotenpunkten berechnet.² Da die Segmente weder reine Stufen-, noch reine Schraubenversetzungen darstellen, ist eine exakte Berechnung nicht mehr möglich.³ Es ist auch nicht bekannt, wieviele Stufen- und Schraubensegmente durch ein Mischsegment repräsentiert werden, weil das Mischsegment nur eine Näherung ist und der tatsächliche Verlauf – also auch die tatsächliche Krümmung – der Versetzungslinie nicht bekannt ist. Aufgrund der Länge eines Mischsegments genügt es nun nicht mehr, die Wechselwirkungen mit den anderen Segmenten zu berechnen, sondern es muss auch die Eigenspannung des Mischsegments (= die Wechselwirkungen der im Mischsegment enthaltenen Einzelsegmente untereinander) betrachtet werden. Bei dieser Art der Darstellung ist die Anzahl der für die Berechnung der

²Durch die Verschiebung der Knotenpunkte ändern die Segmente Länge und Orientierung. Werden die Segmente zu lang, müssen sie in Subsegmente unterteilt werden, um die Genauigkeit der Simulation zu erhalten.

³Ein Sonderfall wird in [54] gezeigt, bei dem eine Einteilung in Stufen-, Schrauben- und $\pm 60^\circ$ -Segmente vorgenommen wird. Diese Art der Einteilung ist dann hilfreich, wenn die Simulation auf der Modellierung eines Kristallgitters basiert und deswegen keine frei gekrümmten Mischsegmente zulässt.

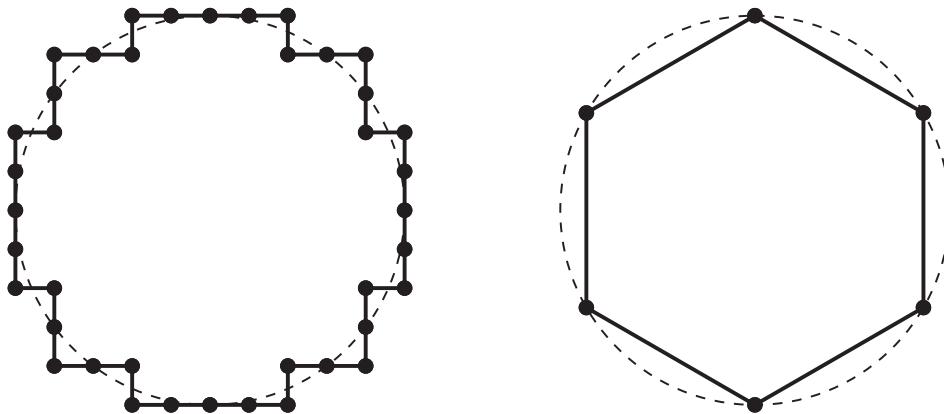


Bild 3.1.: Darstellung einer kreisförmigen Versetzungslinie durch reine Stufen- und Schraubensegmente (*links*), sowie durch lineare Segmente mit Mischcharakter (*rechts*). Die Genauigkeit, mit der das Spannungsfeld modelliert werden kann, hängt dabei sehr stark von der gewählten Segmentlänge ab [56].

Wechselwirkungen zu berücksichtigenden Versetzungssegmente wesentlich geringer, der Rechenaufwand sinkt wegen der Skalierung mit N^2 drastisch.

Eine weitere Verringerung des Rechenaufwands für die Versetzungswechselwirkungen besteht darin, weit entfernte Versetzungssegmente zu Superversetzungen zusammenzufassen; ihre Fernwirkung wird durch äquivalente Monopole und Dipole angenähert. Mit dieser Methode skaliert der Rechenaufwand nur noch mit $N \log N$ [55,57]⁴. Diese näherungsweise Darstellung der langreichweitigen Wechselwirkungen lässt sich damit rechtfertigen, dass das Spannungsfeld einer Versetzung mit $1/r$ (r ist der Abstand von der Versetzung) skaliert und bei großem r für ausreichend kleine Volumenelemente eine lineare Approximation über das Element gute Ergebnisse liefert. Da sich die langreichweitigen Wechselwirkungen mit der Bewegung der weit entfernten Versetzungen nur langsam ändern, müssen diese nicht in jedem Inkrement neu berechnet werden [51].

Im Gegensatz zu den langreichweitigen Wechselwirkungen sind die kurzreichweitigen Wechselwirkungen zwischen Versetzungen möglichst exakt zu modellieren. Vergleichende 3D-Simulationen zeigten, dass sich die langreichweitigen Wechselwirkungen ab einem Abstand von circa $1 \mu\text{m}$ kaum

⁴In der zitierten Arbeit wird als weitere Alternative genannt, die Spannungsfelder der Versetzungen in einem repräsentativen Volumenelement mit Hilfe ausreichend vieler Gausspunkte homogenisiert darzustellen. Es wird dort jedoch nicht näher darauf eingegangen.

auf das Ergebnis auswirken und deren Bedeutung häufig überschätzt wird. Werden die kurzreichweitigen Wechselwirkungen vernachlässigt, so entfällt Versetzungsquergleiten weitestgehend. Quergleiten ist jedoch der Hauptmechanismus, der Irreversibilität der Gleitung bewirkt, da er Waldversetzungen und somit Hindernisse erzeugt. Eine 3D-Simulation in kfz ergab außerdem, dass ohne Quergleiten keine Versetzungsmultiplikation stattfindet, da lokal Einfachgleitung dominiert. Die Simulation ohne kurzreichweitige Wechselwirkungen zeigte deshalb keine Verfestigung, die Versetzungen blieben im Kristall homogen verteilt [54]. Die Häufigkeit von Quergleitprozessen beeinflusst auch maßgeblich die entstehende Mikrostruktur [58].

Die zu Beginn des Kapitels angesprochenen Gleichungen zur analytischen Beschreibung der Spannungs- und Verschiebungsfelder von Versetzungen sind nur für $r > r_0$ genau, wobei r_0 in der Größenordnung mehrerer Burgers-Vektoren liegt. In der Nähe des Versetzungskerns weichen die Formeln jedoch von der Realität ab, im Versetzungskern selbst sind sie sogar singulär. Mit Hilfe der Quantenmechanik können die elastischen Verschiebungen im Kern genauer modelliert werden [59]; die Berechnung hierfür ist aber nur für einfache Fälle durchführbar. Alternativ sind atomare Simulationen geeignet das Verschiebungsfeld zu modellieren, wie zum Beispiel in [60] gezeigt. Diese Berechnungen sind für eine Versetzungssimulation jedoch zu zeitaufwändig. Die Spannungsverhältnisse nahe des Kerns können auch mit Hilfe einer Gaussfunktion angenähert werden. Bei geeigneter Wahl der Funktion geht diese für $r > 5b$ in die klassische linear-elastische Lösung über, sodass keine Sonderfallbehandlung für den kernnahen Bereich nötig ist [61].

Die korrekte Berücksichtigung der kurzreichweitigen Wechselwirkungen alleine genügt nicht, um zum Beispiel Schneidprozesse korrekt zu modellieren. Aus diesen Gründen muss beim Zusammentreffen von Versetzungssegmenten anhand eines Regelwerkes entschieden werden, welche Art von Wechselwirkung stattfindet [51,62].

Die Simulation von kfz-Metallen unterscheidet sich von der Simulation von krz-Metallen beträchtlich [51]: In krz-Metallen gelten unterschiedliche Bewegungsgleichungen für Stufen- und Schraubenversetzungen, da die Schraubenversetzungen im Gegensatz zu Stufenversetzungen aufspalten können. Stufenversetzungen bewegen sich deshalb bei niedrigen Tempera-

turen⁵ um Größenordnungen schneller als Schraubenversetzungen. Da der geschwindigkeitsbegrenzende Faktor die Peierls-Spannung ist, bewegen sich die Versetzungen gleichmäßig schnell. Näherungsweise kann nun die Geschwindigkeit der Stufenversetzungen als unendlich schnell betrachtet werden – bei Aktivierung „springt“ eine Stufenversetzung also sofort zum nächsten Hindernis beziehungsweise verlässt den Kristall. Die Größe des Zeitinkrements kann dann an der Geschwindigkeit der Schraubenversetzungen bemessen werden; die Kinetik der Stufenversetzungen wird nicht näher betrachtet.

Bei kfz-Metallen ist aufgrund der niedrigen Peierls-Spannung die Versetzungsbewegung ruckartig: Die Versetzungen „springen“ von Hindernis zu Hindernis und verharren an jedem Hindernis für eine bestimmte Zeit. In diesem Fall ist jedoch die Versetzungsbewegung zwischen den Hindernissen zu modellieren.⁶ Die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit über längere Strecken ist dabei vergleichbar mit krz-Metallen – während sich das Zeitinkrement bei krz-Metallen aber an diesem Mittelwert bemisst, muss bei kfz-Metallen die wesentlich höhere Geschwindigkeit zwischen Versetzungshindernissen (hierzu zählen neben Ausscheidungen auch die Versetzungen selbst) als Maß herangezogen werden. Im Endeffekt ist das benötigte Zeitinkrement bei kfz-Metallen etwa um den Faktor 10^8 kleiner; das Problem bei der Simulation ist die daraus folgende große Anzahl an Simulationsschritten. Die einzige Möglichkeit, um signifikante Verformungen in angemessener Simulationszeit zu bewerkstelligen, besteht in einer Erhöhung der Verformungsgeschwindigkeit. Hierbei ist jedoch die Gefahr gegeben, dass die Simulation einen hochdynamischen Prozess berechnet, der mit dem quasi-statischen Experiment nur noch wenig gemein hat.

Problematisch ist die Handhabung von Versetzungen, die teilweise das ursprüngliche finite Element verlassen und sich in ein angrenzendes Element bewegen. Damit verwandt ist die Problemstellung, dass Versetzungen die Probe an der Oberfläche verlassen. In diesem Fall werden an der Grenzflä-

⁵Bei Fe-3%Si zum Beispiel ist dies bereits bei Raumtemperatur der Fall [4].

⁶Die Versetzung selbst bildet ja ein bewegliches Hindernis. Würde der freie Weg zwischen Hindernissen nicht modelliert werden, würden die Versetzungen aneinander „vorbeispringen“. Dies kann am einfachsten anhand eines versetzungsfreien Einkristalls verdeutlicht werden: Die Versetzungen würden sofort von der Quelle bis an die Kristallgrenzen springen und den Kristall somit verlassen – es würden sich somit nie Versetzungen innerhalb des Kristalls aufhalten; bereits die Verfestigung eines Einkristalls bei Doppelgleitung könnte somit nicht mehr modelliert werden.

che, dort wo sie von der Versetzungslinie durchstoßen wird, Knotenpunkte generiert, die sich nur entlang der Grenzfläche bewegen können. Die dabei an der Oberfläche erzeugte Stufe kann durch Nachverfolgen der Grenzflächenknotenbewegung rekonstruiert werden [56].

Bei dreidimensionalen Versetzungssimulationen wird in der Regel ein elastisch isotropes Medium vorausgesetzt. In [63] wurde die Abweichung zu elastisch anisotropem Material untersucht. Es zeigt sich im Falle von Mo, dass für bestimmte Spannungskomponenten der maximale Unterschied zwischen isotrop und anisotrop in der Nähe des Versetzungskerns maximal 15 % beträgt und mit zunehmendem Abstand stark abfällt. Kurzreichweitige Wechselwirkungen sollten also elastisch anisotrop gerechnet werden, während für die langreichweitigen Wechselwirkungen die isotrope Näherung genügt.

Aufgrund der über den Burgers-Vektor eingebrachten Längenskala ist das Materialverhalten größenabhängig. Simulationsergebnisse lassen vermuten, dass die Dichte der aktiven Gleitbänder signifikant von der Verteilung der Frank-Read-Quellen beeinflusst wird, sowie von den Seitengrößenverhältnissen der Probe [58]. Eine weitere Ursache für Größeneffekte kann die Versetzungsnukleation und -transmission in Abhängigkeit von der Ausscheidungsgröße sein [38]. Im untersuchten Fall (Al-7%Si) war die Versetzungsbewegung in den Si-Teilchen auf einen kleinen Randbereich zur Al-Matrix begrenzt, weswegen die Ausscheidungen erst ab einer gewissen Größe als Versetzungshindernisse wirkten.

3.1.2. Strain Gradient Plasticity

Bei der klassischen Modellierung hängt der Verlauf der Fließspannung σ_y vom Verlauf der plastischen Dehnung ε_{pl} ab, es ist also $\sigma_y = \sigma_y(\varepsilon_{pl})$. In der Strain Gradient Plasticity hängt die Fließspannung neben der Dehnung auch von Verzerrungsgradienten, also den zweiten Ableitungen des Verschiebungsfeldes $\vec{u}$, ab. Da die ersten Ableitungen der Verschiebung (aus denen sich zum Beispiel ε_{pl} zusammensetzt) dimensionslos sind, hat der Verzerrungsgradient die Einheit m^{-1} , womit die Fließspannung nunmehr eine Längenskala beinhaltet.

Einschub: Nomenklatur

An dieser Stelle jedoch zunächst ein paar Worte zur Nomenklatur. In der englischen Fachliteratur bezeichnen die Begriffe *strain gradient*, *stretch gradient* und *rotation gradient* drei verschiedene Dinge. Da keine deutsche Fachliteratur mit einer Übersetzung für *stretch gradient* gefunden werden konnte, die deutlich von der deutschen Übersetzung von *strain gradient* abgegrenzt werden kann, wird die in Tab. 3.1 gezeigte Nomenklatur verwendet. Auf den Begriff *Dehngradient* wird im Folgenden bewusst verzichtet, da er häufig sehr unspezifisch verwendet wird.

Zur Erklärung der Unterschiede zwischen Verzerrungs-, Formänderungs- und Orientierungsgradient wird zunächst auf den Dehnungstensor ε und den Drehtensor ω zurückgegriffen:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (3.10)$$

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} - u_{j,i}) \quad (3.11)$$

Hierbei bezeichnet $u_{i,j}$ die partielle Ableitung von u_i nach dem j -ten Einheitsvektor. So gilt im kartesischen Koordinatensystem zum Beispiel $u_{i,2} = \partial u_i / \partial y$.

Der Verzerrungsgradient η setzt sich aus allen zweiten partiellen räumlichen Ableitungen der Verschiebung $u_{k,ij}$ zusammen [64]; er ist somit der allgemeine Oberbegriff:

$$\eta_{ijk} = u_{k,ij} \quad (3.12)$$

Der Formänderungsgradient hingegen hängt mit partiellen räumlichen Ableitungen der Dehnung $\varepsilon_{ij,k}$ zusammen. Demgegenüber wird der Orientierungsgradient aus partiellen räumlichen Ableitungen des Drehtensors $\omega_{ij,k}$ ermittelt.

Die Wahl des Begriffes *Formänderungsgradient* ist übrigens an den Begriff *Formänderungsenergie* angelehnt; beide sind unabhängig von einer eventuellen Rotation und berücksichtigen eine

Englisch	Deutsch
Strain Gradient	Verzerrungsgradient
Stretch Gradient	Formänderungsgradient
Rotation Gradient	Orientierungsgradient

Tabelle 3.1.: Deutsche Nomenklatur für Fachbegriffe der Strain Gradient Plasticity.

möglicherweise vorhandene Volumendehnung.⁷ Soll explizit die Volumendehnung ausgeschlossen werden (*incompressible stretch gradient*), so wird in Anlehnung an *Gestaltänderungsenergie* der Begriff *Gestaltänderungsgradient* zur Verwendung vorgeschlagen. Im Rahmen dieser Arbeit geht es jedoch um die Verformung von Metallen. Bei diesen kann in sehr guter Näherung von plastischer Volumenkonstanz ausgegangen werden, weswegen beide Begriffe hier synonym sind.

Gemäß dem Verfestigungsmodell nach Taylor [65] kann die Abhängigkeit der Scherfließspannung τ_y von der mittleren Versetzungsdichte ρ für kfz-Metalle mit der Formel

$$\tau_y \approx \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (3.13)$$

beschrieben werden. Hierbei ist α eine Konstante (der Wert liegt im Bereich 0.2–0.5, für zum Beispiel Cu ist $\alpha \approx 0.33$ [66]), μ ist der Schubmodul, und b ist die Länge eines Burgers-Vektors. Mit zunehmender Verformung steigt die Versetzungsdichte an, und somit steigt auch die Fließspannung.

Der Grundgedanke bei der Strain Gradient Plasticity ist nun folgender: Ein Teil der durch die Verformung erzeugten Versetzungen liegt zufällig verteilt vor oder zum Beispiel in Form von Versetzungsdipolen. Das bedeutet, dass die aus diesen Versetzungen resultierende Nettodehnung nahezu null ist. Diese Versetzungen werden auch als statistische Versetzungen bezeichnet (*statistically stored dislocations* oder *incidentally stored dislocations*;

⁷Der englische Begriff *stretch* wird auch häufig als Vorsilbe *streck-* ins Deutsche übersetzt. Mit dieser Begründung könnte auch die Übersetzung „Streckgradient“ gewählt werden. Der Begriff „Formänderungsenergie“ ist jedoch etabliert und beinhaltet sehr ähnliche Randbedingungen.

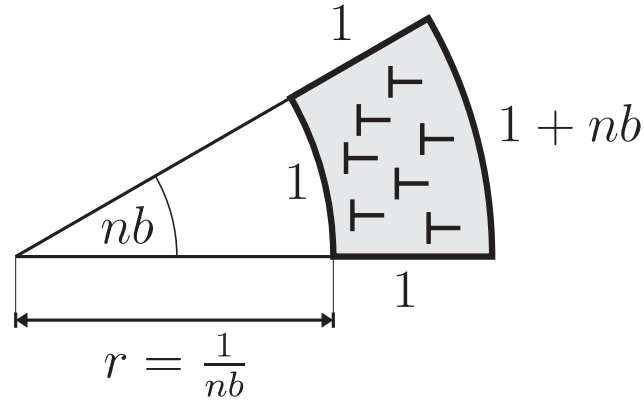


Bild 3.2.: Krümmung aufgrund von n Stufenversetzungen.

Versetzungsdichte ρ_S). Die Formänderung wird von den geometrisch notwendigen Versetzungen erzeugt (*geometrically necessary dislocations, GND*; Versetzungsdichte ρ_G) [67]. Somit gilt für die Gesamtversetzungsdichte $\rho \approx \rho_S + \rho_G$, und die Verfestigung nach Taylor lässt sich schreiben als

$$\tau_y \approx \alpha \mu b \sqrt{\rho_G + \rho_S} \quad (3.14)$$

Es wird nun angenommen, dass sich bei einer Skalierung der Geometrie die Versetzungsdichten ρ_S und ρ_G unterschiedlich verhalten.

Die Betrachtung geometrisch notwendiger Versetzungen führt letzten Endes über die Krümmung zu einer Betrachtung des Verzerrungsgradienten. Um zunächst den Zusammenhang zwischen Versetzungen und Krümmung zu zeigen, wird ein stark vereinfachtes Beispiel verwendet (siehe Abb. 3.2, [68]). Bei einem zweidimensionalen Einheitsselement mit n gleichorientierten Stufenversetzungen mit dem Burgers-Vektor der Länge b ergibt sich als Burgers-Summenvektor nb . Somit folgt für die Krümmung $\kappa = nb$.⁸ Da die Dichte der geometrisch notwendigen Versetzungen im Einheitsselement bekannt ist ($\rho_G = n$, da die Fläche 1 ist), resultiert $\rho_G = \kappa/b$ – also ein direkter Zusammenhang zwischen Versetzungsdichte und Krümmung.

Um nun den Zusammenhang zwischen Krümmung und Verzerrungsgradienten zu zeigen, wird auf eine allgemeinere Darstellung des Krümmungstensors χ zurückgegriffen:

$$\chi_{ij} \equiv \theta_{i,j} \quad (3.15)$$

⁸Die Krümmung κ ist definiert als $\kappa := 1/r$, wobei r der Radius eines Kreises ist, dessen Linie die Krümmung κ hat.

Hierbei ist $\vec{\theta}$ die lokale Materialorientierung relativ zur Ausgangsorientierung vor der Verformung.⁹ Ist $\vec{\theta}$ abhängig vom Ort (mindestens eine der Ableitungen $\theta_{i,j}$ ist ungleich null), so entspricht das einer lokalen Orientierungsänderung, was gleichbedeutend mit einer lokalen Krümmung ist. Es folgt nun wegen $\theta_i = \frac{1}{2}e_{ijk}u_{k,j}$

$$\begin{aligned}\chi_{ij} &= \frac{1}{2}e_{ilk}u_{l,kj} \\ &= e_{ilk}\varepsilon_{jk,l}\end{aligned}\tag{3.16}$$

Die Krümmung hängt also von dem Verzerrungsgradienten ab. Dabei ist $\vec{u}$ der Verschiebungsvektor und e das Levi-Civita-Symbol (auch Permutationssymbol) mit

$$e_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{falls } (i, j, k) \text{ eine gerade Permutation von } (1,2,3) \text{ ist} \\ -1 & \text{falls } (i, j, k) \text{ eine ungerade Permutation von } (1,2,3) \text{ ist} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}\tag{3.17}$$

Der Einfachheit wegen wird in den Modellen häufig nicht der Krümmungstensor verwendet, sondern die skalare Vergleichskrümmung χ_e .¹⁰

$$\chi_e := \sqrt{\frac{2}{3}\chi_{ij}\chi_{ij}}\tag{3.18}$$

Im weiteren Verlauf müssen nun die Abhängigkeiten der Versetzungsdichten ρ_G und ρ_S von der Verformung modelliert werden. Sind die Versetzungsdichten $\rho_{G,\alpha}$ und $\rho_{S,\alpha}$ auf allen Gleitsystemen α lokal bekannt, so kann eindeutig auf das resultierende Verformungsfeld geschlossen werden [68]. Der umgekehrte Weg – das Ableiten der Versetzungsdichten ρ_G und ρ_S oder gar $\rho_{G,\alpha}$ und $\rho_{S,\alpha}$ aus einer vorgegebenen Verformung – ist ohne weiteres nicht eindeutig möglich.

Eine analytische Betrachtung wird in [21] mit Hilfe eines idealisierten Ansatzes für kleine Dehnungen durchgeführt. Für den einachsigen Zugversuch sagt die Strain Gradient Plasticity ein größenunabhängiges Verhalten

⁹Die Richtung des Vektors $\vec{\theta}$ entspricht der Rotationsachse, die Länge entspricht dem Drehwinkel.

¹⁰Der Hintergrund ist im Prinzip der gleiche wie das Ableiten einer Vergleichsformänderung aus dem Dehnungstensor.

voraus, da in diesem Fall keine Verzerrungsgradienten auftreten. Der Zusammenhang zwischen ρ_G und ε_{pl} wird deshalb aufgrund der Proben- und Versuchsgeometrie für die Fälle „Ebene Biegung eines Balkens“ und „Ebene Torsion eines Rundstabes“ beschrieben.¹¹ Dabei wird eine homogene Verformung und eine idealisierte Anordnung der geometrisch notwendigen Versetzungen angenommen. Um den Zusammenhang zwischen ρ_G und χ zu beschreiben, wird auf die Vergleichskrümmung zurückgegriffen und analog zu den zuvor angestellten Überlegungen die Formel

$$\rho_G = \frac{\chi_e}{b} \quad (3.19)$$

verwendet. Der prinzipielle Zusammenhang zwischen ρ_S und der Verformung wird unter Zuhilfenahme von Zugkurven, dem Verfestigungsmodell nach Taylor und der Vergleichsdehnung

$$\varepsilon_{pl,e} := \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\varepsilon_{pl,ij} \varepsilon_{pl,ij}} \quad (3.20)$$

abgeleitet. Dabei ergibt sich näherungsweise für das anfängliche Verhalten von Einkristallen (Stadium I):

$$\rho_S = \frac{\varepsilon_{pl,e}}{\lambda_I b} \quad (3.21)$$

und für das anfängliche Verhalten von Polykristallen (entspricht Stadium II bei Einkristallen):

$$\rho_S = \frac{\varepsilon_{pl,e}^2}{\lambda_{II} b} \quad (3.22)$$

Hierbei sind λ_I und λ_{II} interne Materiallängen – mitunter Fitkonstanten, da sie nicht direkt messbar sind. Die Beschränkung auf kleine Dehnungen rührt übrigens daher, dass Gitterdrehungen nicht berücksichtigt werden und λ_I beziehungsweise λ_{II} sowie der Exponent von $\varepsilon_{pl,e}$ als konstant angenommen werden.

Es gilt nun, dass ρ_S und ρ_G unterschiedlich von der Geometrie abhängen. Dies wird an einem vereinfachten Beispiel der Biegung kurz erläutert: Angenommen, Biegeproben mit unterschiedlichen Dicken D werden gleichartig

¹¹Für den Fall von Mikro- und Nanoindentierung wird eine ähnliche Betrachtung zum Beispiel in [44] angestellt. Eine FEM-Formulierung kann in [69] gefunden werden.

gebogen. Es wird also in allen Fällen die gleiche Krümmung aufgebracht. ρ_G verhält sich demnach für alle Proben gleich. Aus geometrischen Überlegungen ergibt sich für die Dehnung als Funktion des Abstandes y von der neutralen Faser näherungsweise $\varepsilon_{pl,e}(y) = c\kappa y$, wobei c eine Proportionalitätskonstante ist. Somit folgt mit Gl. (3.22) für die Dichte der statistischen Versetzungen

$$\rho_s(y) = \frac{(c\kappa y)^2}{\lambda_{II}b} =: \frac{C\kappa^2 y^2}{b} \quad (3.23)$$

Über eine gesamte Probe gemittelt ergibt sich als mittlere Dichte der statistischen Versetzungen

$$\langle \rho_s \rangle = \frac{1}{D} \int_{-D/2}^{D/2} \frac{C\kappa^2 y^2}{b} dy = \frac{C\kappa^2}{12b} D^2 \quad (3.24)$$

Daraus folgt für die mittlere Scherfließspannung $\langle \tau_y \rangle$ gemäß Gl. (3.13):¹²

$$\begin{aligned} \langle \tau_y \rangle &\approx \alpha \mu b \sqrt{\langle \rho_s \rangle + \rho_G} \\ &= \alpha \mu b \sqrt{\frac{C\kappa^2}{12b} D^2 + \frac{\kappa}{b}} \\ &=: \alpha \mu b \sqrt{\frac{\kappa}{b}} \sqrt{C'\kappa D^2 + 1} \end{aligned} \quad (3.25)$$

Werden nun zwei dicke Biegeproben A und B mit $D_A, D_B \gg \sqrt{1/C'\kappa}$ verglichen, so ergibt sich

$$\frac{\langle \tau_{y,A} \rangle}{\langle \tau_{y,B} \rangle} \approx \frac{D_A}{D_B} \quad (3.26)$$

Im anderen Extremfall $D_A, D_B \ll \sqrt{1/C'\kappa}$ (sehr dünne Biegeproben) ergibt sich

$$\frac{\langle \tau_{y,A} \rangle}{\langle \tau_{y,B} \rangle} \approx 1 \quad (3.27)$$

¹²Es ist klar, dass im Falle der Biegung diese simple Betrachtungsweise von mittlerer Versetzungsdichte sowie die darauf aufbauende Ableitung einer mittleren Scherfließspannung zur Ableitung eines Biegemoments streng genommen nicht korrekt sind. Es geht hier jedoch primär darum, das Prinzip zu verdeutlichen. Deswegen wird auf eine die Erklärung unnötig aufblähende, mechanisch korrekte Darstellung bewusst verzichtet.

Dieses Ergebnis kann jedoch nicht einfach auf andere Biegeversuche verallgemeinert werden. Es hängt maßgeblich davon ab, wie skaliert wird. In [69] wird bei der Betrachtung der Biegung nicht die Krümmung κ konstant gehalten, sondern die normalisierte Krümmung $\kappa D =: \kappa_0$. Wird diese Skalierung auf obige vereinfachte Betrachtung angewendet, ergibt sich Gl. (3.25) zu

$$\langle \tau_y \rangle \approx \alpha \mu b \sqrt{\frac{\kappa_0}{b}} \sqrt{C' \kappa_0 + \frac{1}{D}} \quad (3.28)$$

Werden nun zwei dicke Biegeproben A und B verglichen, so ergibt sich

$$\frac{\langle \tau_{y,A} \rangle}{\langle \tau_{y,B} \rangle} \approx 1 \quad (3.29)$$

Im anderen Extremfall (sehr dünne Biegeproben) ergibt sich

$$\frac{\langle \tau_{y,A} \rangle}{\langle \tau_{y,B} \rangle} \approx \sqrt{\frac{D_B}{D_A}} \quad (3.30)$$

Bei dieser Art des Versuchs werden die Proben also umso fester, je dünner sie sind.

Wie anhand dieser beiden Beispiele gezeigt, ist der Verlauf der mittleren Scherfließspannung nicht mehr unabhängig von der Geometrie. Solange $\rho_S \gg \rho_G$ ist (große Proben) liegt das klassische Verhalten vor. Werden die Proben kleiner, so wird der Übergangsbereich $\rho_S \approx \rho_G$ erreicht oder sogar überschritten ($\rho_S \ll \rho_G$). Dann weicht das Verhalten zunehmend vom klassischen Fall ab. Aktuelle Untersuchungen zeigen, dass die geometrisch notwendigen Versetzungen eine wichtige Rolle in Bezug auf verformungsinduzierte langreichweitige interne Spannungen sowie lokale Missorientierungen spielen; auch dann, wenn sie nur einen kleinen Anteil am gesamten Versetzungsnetzwerk ausmachen [70].

Einschub: Formänderungsgradienten

An dieser Stelle soll kurz darauf hingewiesen werden, dass die Darstellung von Verzerrungsgradienten aufgrund des Krümmungstensors χ nicht vollständig ist, da hiermit nur Orientierungsgradienten erfasst werden. In [71] wurde die Theorie um

die Berücksichtigung von Formänderungsgradienten erweitert, womit neue interne Längenparameter eingeführt wurden.

Zur Veranschaulichung: Torsion enthält reine Orientierungsgradienten; zweidimensionales Porenwachstum kann durch reine Formänderungsgradienten beschrieben werden; Biegung beinhaltet bei genauer Betrachtung beides.

Die Strain Gradient Plasticity ist ein phänomenologisches Modell, mit dem größenabhängige Verfestigungseffekte beschrieben werden können. Somit ist der Größeneffekt sehr stark vom Material und dessen Verfestigungsverhalten abhängig. Ein Material, das wenig verfestigt, zeigt demzufolge im Rahmen der Strain Gradient Plasticity kaum Größeneffekte. Wie zu Beginn des Kapitels erwähnt (siehe Gl. (3.13)), bezieht sich die Betrachtung auf kfz-Metalle. Bei diesen Metallen ist die Reibspannung zwischen Versetzungen und Kristallgitter (Peierls-Spannung) sehr gering, und die Versetzungsbewegung wird primär durch Hindernisse (Ausscheidungen, andere Versetzungen, Grenzflächen) begrenzt. Demzufolge ergibt sich die Fließspannung zum größten Teil aus der Verfestigung. Bei krz-Metallen ist die Peierls-Spannung τ_p jedoch nicht mehr vernachlässigbar. In diesem Fall kann die Verfestigung nach Taylor beschrieben werden mit der Formel

$$\tau_y \approx \alpha \mu b \sqrt{\rho} + \tau_p \quad (3.31)$$

Die Verfestigung hat also nicht mehr zwangsweise den größten Anteil an der Fließspannung. Demzufolge sind Größeneffekte aufgrund geometrisch notwendiger Versetzungen bei krz-Metallen tendentiell weniger stark ausgeprägt.

Auch wenn es den Anschein hat, die in der Strain Gradient Plasticity verwendete interne Länge sei eine Materialkonstante: ihr Wert ist abhängig vom Versuch. Der anhand von Mikrobiegeexperimenten erhaltene Wert ist zum Beispiel wesentlich größer als die interne Länge, die aus Nanoindentierungen gewonnen wird [22].

Ein Problem der Strain Gradient Plasticity besteht ferner darin, dass der Zusammenhang zwischen Verformung und Dichte der statistischen Versetzungen ρ_s nicht exakt bestimmt werden kann. Diesbezügliche Messungen

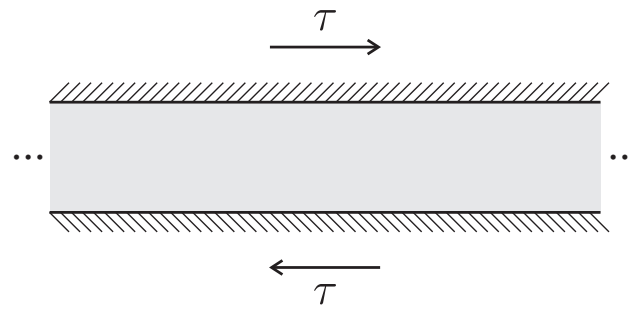


Bild 3.3.: Geometrie einer Versetzungssimulation (2D Stufenversetzungen) einer einkristallinen Schicht nach [73]. Links und rechts werden periodische Randbedingungen angenommen. Es wurden verschiedene Gleitsystemkonfigurationen mit Einfachgleitung und Doppelgleitung untersucht.

liefern zwar Anhaltspunkte, zeigen aber auch eine sehr hohe Streuung [72]. Ein weiterer Schwachpunkt ist die Ableitung der Dichte der geometrisch notwendigen Versetzungen ρ_G aus der Versuchsgeometrie. In [73] wurden zweidimensionale Versetzungssimulationen an einer einfachen Probengeometrie durchgeführt: Eine dünne einkristalline Schicht wurde entlang der Schichtachse (x -Achse) geschert, indem die Oberseite gegen die Unterseite bewegt wurde. Als Randbedingung durften Ober- und Unterseite keine Bewegung senkrecht zur Schichtachse (y -Achse) ausführen, was unter anderem bedeutet, dass Versetzungen den Kristall nicht verlassen können (Abb. 3.3). Das Problem ist kontinuumsmechanisch ohne Verzerrungsgradienten lösbar. Das heißt, für die Abgleitung gilt $\gamma(y) = \gamma_0$, wenn γ_0 die Scherung der Gesamtprobe ist. Die Versetzungssimulation zeigt jedoch die Ausbildung von Randschichten, also $\gamma(y) \neq \text{const.}$ Das entspricht einem Verzerrungsgradienten *ohne* geometrisch notwendige Versetzungen im Sinne der Strain Gradient Plasticity. Hinzu kommt, dass diese Ausbildung der Randschicht nicht nur von γ_0 abhängt, sondern auch von der Gleitgeometrie und vom Material beziehungsweise dessen Peierls-Spannung. Bei der Simulation von Schichten unterschiedlicher Dicke zeigte sich ein größenabhängiges Verhalten sowohl in der anfänglichen Fließspannung als auch in der Verfestigung. Der Verlauf der Verfestigung als Funktion der Schichtdicke wies jedoch keine eindeutige Tendenz auf.

Zwei weitere Kritikpunkte werden in [74] aufgegriffen: Die Strain Gradient Plasticity geht davon aus, dass

1. abnormale Verfestigung stattfindet, sobald $\rho_G \gtrsim \rho_S$
2. beide Arten von Versetzungen in gleichem Maße zur Verfestigung beitragen.

Zu 1: Die Entstehung geometrisch notwendiger Versetzungen wurde für Torsion und Biegung kleiner Proben untersucht. In diesen Fällen haben die resultierenden geometrisch notwendigen Versetzungen die gleiche Orientierung und das gleiche Vorzeichen. Unter der Annahme eines idealen Materials ohne Peierls-Spannung und ohne Ausscheidungen (zum Beispiel reines Cu und reines Ni) würden die Versetzungen nach Wegfall der äußeren Last wieder zurücklaufen; es gäbe dann keine bleibende Verformung. Die geometrisch notwendigen Versetzungen müssen also gepinnt werden. Damit das gelingt, müssen sie sich entweder gegenseitig pinnen oder von anderen Versetzungen (den nicht geometrisch notwendigen) gepinnt werden. Im Falle von Torsion könnte ein gegenseitiges Pinnen durch die Bildung stabiler Drehgrenzen geschehen; diese können durch die geometrisch notwendigen Versetzungen jedoch nicht gebildet werden. Und auch bei Biegung zeigte sich, dass die geometrisch notwendigen Versetzungen, die von der Strain Gradient Plasticity postuliert werden, sich nicht gegenseitig pinnen können. Es sind deshalb ausreichend viele statistische Versetzungen nötig, um die geometrisch notwendigen Versetzungen zu pinnen und am Zurücklaufen zu hindern: Das bedeutet, dass stets mehr statistische als geometrisch notwendige Versetzungen zu erwarten sind; das ist im Widerspruch zur Strain Gradient Plasticity, in der abnormale Verfestigung auf $\rho_G \gtrsim \rho_S$ zurückgeführt wird.

Zu 2: Gängige Verfestigungstheorien gehen von Versetzungen mit zufällig orientierten Burgersvektoren aus. Da die geometrisch notwendigen Versetzungen jedoch ein Vorzugsvorzeichen haben, ist fraglich ob sie wirklich im gleichen Maße zur Verfestigung beitragen wie statistisch verteilte Versetzungen. Einen experimentellen Beleg hierfür gibt es derzeit nicht.

Die beobachteten Größeneffekte können aber auch auf der Basis $\rho_G < \rho_S$ erklärt werden. Das daraus abgeleitete Alternativmodell wird in Kapitel 3.1.4, Seite 47 näher erläutert.

3.1.3. Mechanism-based Strain Gradient Plasticity (MSGP)

Bei der Strain Gradient Plasticity besteht das Problem, dass sie nur für einfache Modellfälle verwendet werden kann: das Verformungsgeschehen muss in Form von Anordnung und Dichte der geometrisch notwendigen Versetzungen vorgegeben werden, um eine Lösung zu erhalten. Eine einfache Anwendung auf allgemeine Problemstellungen (das heißt mit allgemeinen Randbedingungen) ist nicht möglich. Es wurde deshalb in [64,75] eine Erweiterung der Strain Gradient Plasticity vorgestellt, die eine Integration in die FEM ermöglicht. Das hat den Vorteil, dass die FEM „nach außen hin“ für die Einhaltung der Randbedingungen sorgt, während die Strain Gradient Plasticity „nach innen hin“ für eine Berücksichtigung der geometrisch notwendigen Versetzungen sorgt. Da die Eingangsvariablen der Strain Gradient Plasticity (insbesondere ρ_G) nicht mehr vorzugeben sind, sondern sich aufgrund der angenommenen Mechanismen von Versetzungsbewegung und -entstehung während der Verformung selbstkonsistent entwickeln, wurde diese Theorie als *mechanismenbasiert* bezeichnet.

Bei der MSGP wird vom allgemeinen Verzerrungsgradiententensor η beziehungsweise dem allgemeinen effektiven Verzerrungsgradienten η_e ausgegangen:

$$\eta_{ijk} = u_{k,ij} \quad (3.32)$$

$$\eta_e = \rho_G b \quad (3.33)$$

$$= \sqrt{c_1 \eta_{iik} \eta_{jjk} + c_2 \eta_{ijk} \eta_{ijk} + c_3 \eta_{ijk} \eta_{kji}} \quad (3.34)$$

Hierbei sind c_1 , c_2 und c_3 Konstanten, die anhand von theoretischen Überlegungen oder mittels Anfitzen an experimentelle Daten genähert werden können [64].¹³

¹³Die Aufteilung der Verformung in Dehnung und Verzerrungsgradient ist nicht zwingend. In [76] wird zum Beispiel eine Formulierung mit einer effektiven Dehnung ε_{SG} verwendet, die sich aus den Beiträgen von Dehnung, Formänderungsgradient und Orientierungsgradient zusammensetzt. Die gesonderte Betrachtung eines effektiven Verzerrungsgradienten η_e entfällt somit.

Einschub: Die interne Länge in der MSGP

Um die in der Strain Gradient Plasticity eingeführte interne Länge auf einfach messbare Parameter zurückzuführen, wird das Fließgesetz der Strain Gradient Plasticity in leicht abgewandelter Form verwendet. Unter Verwendung der Fließbedingung nach von Mises ergibt sich $\sigma_y = \sqrt{3} \tau_y$, sodass mit Gl. (3.14) und Gl. (3.33) folgt:

$$\sigma_y = \sqrt{3} \alpha \mu b \sqrt{\rho_s + \frac{\eta_e}{b}} \quad (3.35)$$

Unter Verwendung der plastischen Vergleichsdehnung $\varepsilon_{pl,e}$ wird nun definiert

$$\sigma_{y,0} f(\varepsilon_{pl,e}) := \sqrt{3} \alpha \mu b \sqrt{\rho_s} \quad (3.36)$$

sodass am Beginn des plastischen Fließens

$$\sigma_{y,0} = \sigma_y \quad (3.37)$$

$$\varepsilon_{y,e} = \varepsilon_{pl,e} \quad (3.38)$$

$$f(\varepsilon_{y,e}) = 1 \quad (3.39)$$

Gl. (3.35) kann dann umgeschrieben werden zu

$$\sigma_y = \sigma_{y,0} \sqrt{f^2(\varepsilon_{pl,e}) + l \eta_e} \quad (3.40)$$

mit

$$l = 3\alpha^2 \left(\frac{\mu}{\sigma_{y,0}} \right)^2 b \quad (3.41)$$

Die interne Länge der Strain Gradient Plasticity ist mit dieser Darstellung auf messbare Werkstoffkennwerte zurückgeführt worden. Die Gleichung für $f(\varepsilon_{pl,e})$ kann wie zuvor bei der Strain Gradient Plasticity angenähert werden.

Zur Modellierung der Mikrostruktur sind somit alle nötigen Gleichungen vorhanden: Die Fließspannung ergibt sich aus dem phänomenologischen Verfestigungsgesetz $f(\varepsilon_{pl,e})$ (statistische Versetzungen) und dem effektiven Verzerrungsgradienten η_e . Letzterer lässt sich mittels des phänomenologisch angepassten Zusammenhangs in Gl. (3.34) und der Definition in Gl. (3.32) auf das Verschiebungsfeld zurückführen, welches von der FEM geliefert wird. Würde dieses Prinzip jedoch so in die FEM implementiert, ergäben sich einige Nachteile: Wegen η ist ε innerhalb eines finiten Elementes nicht konstant. Genau davon geht Gl. (3.40) jedoch aus und liefert einen konstanten Spannungszustand im Element. Wegen der Beschränkung der Fließspannung auf $\varepsilon_{pl,e}$ und η_e geht auch jede Richtungsabhängigkeit des Verzerrungsgradienten innerhalb des Elementes verloren.

Eine bessere Darstellung kann mit Hilfe eines Multiskalen-Ansatzes erreicht werden. Das finite Element ist dabei auf der Mesoskala angesiedelt und seinerseits in viele Subelemente auf der Mikroskala unterteilt. Die finiten Elemente müssen dabei ausreichend groß sein, damit sie ausreichend viele statistische Versetzungen beinhalten. Ansonsten kann der Ansatz nach Taylor nicht verwendet werden. Auf der anderen Seite müssen sie möglichst klein sein, um Verzerrungsgradienten genau abbilden zu können. Diesen widersprüchlichen Anforderungen kann nur in Form eines Kompromisses begegnet werden. Als Kantenlänge l_ε der finiten Elemente wird deshalb

$$l_\varepsilon = \beta L_y = \frac{\beta}{\sqrt{\rho_{S,y}}} \stackrel{\text{Gl. (3.35)}}{=} \beta \frac{\sqrt{3} \alpha \mu b}{\sigma_{y,0}} = \beta' \frac{\mu b}{\sigma_{y,0}} \quad (3.42)$$

gewählt. L_y ist der mittlere Versetzungsabstand und $\rho_{S,y}$ ist die Dichte der statistischen Versetzungen, jeweils zu Beginn des plastischen Fließens. Die Konstante β liegt im Bereich 1–10, μ ist der Schermodul, b der Burgers-Vektor und $\sigma_{y,0}$ die anfängliche Fließspannung. Nach dem Fließbeginn nimmt der Versetzungsabstand stark ab und ist somit stets kleiner als L_y . Aus diesem Grund liegt diese Abschätzung für l_ε auf der sicheren Seite, denn es befinden sich immer mehrere Versetzungen im Element.

Für l_ε ergeben sich Werte im Bereich 10 nm bis 100 nm. Die finiten Elemente sind damit sehr klein, was zu einer hohen Elementzahl und einer hohen Rechenzeit führt. Im Vergleich zu atomistischen Simulationen und Simulationen von Einzelversetzungen ist die Rechenzeit jedoch gering.

Der nachfolgend skizzierte Ansatz setzt ein inkompressibles Material voraus; elastische Dehnungen werden vernachlässigt.¹⁴ Die Kopplung zwischen Mikro- und Mesoskala geschieht dabei über die volumenspezifische Verformungsarbeit w :

$$w_{\text{micro}} \stackrel{!}{=} w_{\text{meso}} \quad (3.43)$$

$$\Rightarrow \int_{V_{\text{cell}}} \tilde{\sigma}'_{ij} \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} \stackrel{!}{=} \left(\sigma'_{ij} \delta \varepsilon_{ij} + \tau'_{ijk} \delta \eta_{ijk} \right) V_{\text{cell}} \quad (3.44)$$

Hierbei ist $\tilde{\sigma}'_{ij}$ die deviatorische Spannung¹⁵, $\delta \tilde{\varepsilon}_{ij}$ das Dehnungsinkrement auf der Mikroskala mit

$$\tilde{\sigma}'_{ij} = \frac{2\tilde{\varepsilon}_{ij}}{3\tilde{\varepsilon}_e} \tilde{\sigma}_e \quad (3.45)$$

$$\tilde{\varepsilon}_e = \sqrt{\frac{2}{3} \tilde{\varepsilon}_{ij} \tilde{\varepsilon}_{ij}} \quad (3.46)$$

V_{cell} ist das Volumen des betrachteten Elements. Die effektive Spannung auf der Mikroskala $\tilde{\sigma}_e$ ergibt sich aus dem Verfestigungsgesetz nach Taylor, $\tilde{\varepsilon}_e$ ist die Vergleichsdehnung auf der Mikroskala. Die volumenspezifische Arbeit auf der Mesoskala setzt sich zusammen aus der deviatorischen Spannung σ'_{ij} und dem Dehnungsinkrement $\delta \varepsilon_{ij}$. Um darüber hinaus noch die Verformungsarbeit für die Verzerrungsgradienten η zu berechnen, wird ein Tensor τ für die Spannungen höherer Ordnung eingeführt.¹⁶

Um nun zum Beispiel im Rahmen einer expliziten FEM-Rechnung die Spannungen und die Spannungen höherer Ordnung eines finiten Elementes als Folge einer Verformung (ε, η) zu berechnen, wird wie folgt vorgegangen: Für jedes Subelement auf der Mikroskala wird die lokale Dehnung $\tilde{\varepsilon}$ anhand seiner Position $\vec{x}$ ermittelt:

$$\tilde{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_{ij} + \frac{1}{2} (\eta_{kij} + \eta_{kji}) x_k \quad (3.47)$$

$\tilde{\varepsilon}$ wird auf der Mikroskala innerhalb eines Subelementes als konstant angenommen. Damit wird dann die effektive Fließspannung $\tilde{\sigma}_e$ und aus ihr der

¹⁴In [77] erfolgt eine Darstellung unter Berücksichtigung von Volumendehnung und elastischer Dehnung.

¹⁵Der Deviator A' eines Tensors A der 2. Stufe ist $A'_{ij} = A_{ij} - A^H_{ij}$, wobei $A^H_{ij} = \frac{1}{3} \delta_{ij} A_{kk}$ der hydrostatische Anteil ist.

¹⁶In der Literatur wird hierfür auch der Begriff Momentenspannungen (*moment stresses*) verwendet.

mikroskopische Spannungstensor $\tilde{\sigma}$ berechnet. Daraus ergibt sich schließlich für das finite Element:

$$\sigma'_{ij} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \int_{V_{\text{cell}}} \tilde{\sigma}'_{ij} dV \quad (3.48)$$

$$\tau'_{ijk} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \text{Dev} \left[\frac{1}{2} \int_{V_{\text{cell}}} \tilde{\sigma}'_{jk} x_i + \tilde{\sigma}'_{ik} x_j dV \right] \quad (3.49)$$

$\text{Dev}[A]$ bezeichnet den deviatorischen Teil A' von A . Für einen Tensor der 3. Stufe ist dies:

$$A'_{ijk} = A_{ijk} - A_{ijk}^{\text{H}} \quad (3.50)$$

$$A_{ijk}^{\text{H}} = \frac{1}{4} (\delta_{ik} A_{jll} + \delta_{jk} A_{ill}) \quad (3.51)$$

wobei A^{H} der hydrostatische Anteil ist.

In Bezug auf die beschriebene Vorgehensweise gilt wie zuvor schon bei der Strain Gradient Plasticity: wegen der fehlenden Berücksichtigung der Peierls-Spannung in Gl. (3.13) ist das Modell nur auf kfz-Metalle anwendbar. Für die Modellierung von krz-Metallen wird stattdessen Gl. (3.31) verwendet. Bei einer vergleichenden Untersuchung zeigt sich, dass die Verzerrungsgradienten von der Peierls-Spannung so gut wie nicht beeinflusst werden. Die Belastungskurven von krz-Metallen haben prinzipiell den gleichen Verlauf wie die von kfz-Metallen, sind wegen der Peierls-Spannung jedoch zu höheren Spannungen verschoben [78]. Das heißt, dass sich der absolute Beitrag der Verzerrungsgradienten zur Fließspannung kaum ändert – wegen dem absolut gesehen höheren Spannungsniveau ist der relative Beitrag jedoch wesentlich geringer.

Die Berechnungen bei der MSGP sind insbesondere wegen der Berücksichtigung von η und τ wesentlich aufwändiger als konventionelle Plastizitätsmodelle. Das liegt zum einen daran, dass es sich hierbei um Tensoren 3. Stufe handelt, die mit jeweils 27 Komponenten einen höheren Rechenaufwand erfordern als Tensoren 2. Stufe mit nur 9 Komponenten. Des Weiteren sind wegen der Spannungen höherer Ordnung zusätzliche Randbedingungen nötig, wie zum Beispiel Gl. (3.49).

Wird als Maß für den Verzerrungsgradienten

$$\|\nabla \varepsilon_e\| = \sqrt{\frac{2}{3} \nabla_i \varepsilon_e \nabla_i \varepsilon_e} \quad (3.52)$$

verwendet, so kann eine gesonderte Berechnung von η entfallen. Vergleiche an zweidimensionalen Modellfällen zeigen, dass die Ergebnisse trotz dieser Vereinfachung nicht von der MSGP abweichen [69]¹⁷.

In [79] wird schließlich eine Formulierung verwendet, die gänzlich ohne Spannungen höherer Ordnung auskommt, was die Anzahl der zu beachtenden Randbedingungen verringert. Außerdem kann dieses Modell in konventionelle FEM implementiert werden. Ein Vergleich zahlreicher Modellfälle zeigte, dass die Ergebnisse nahezu identisch mit denen der MSGP sind.

Wie die Strain Gradient Plasticity sagt auch die MSGP für den Zugversuch keine Verzerrungsgradienten und somit keinen Größeneffekt im Verfestigungsverhalten voraus. Im Zugversuch kommt es erst nach Einschnürung zu einem mehrachsigen Spannungszustand, der Verzerrungsgradienten erwarten lässt. Die Strain Gradient Plasticity kann hier nicht verwendet werden. Erst mit Hilfe der Weiterentwicklung MSGP ist es möglich geworden, dies durch vergleichende Modellierung von ungekerbten und gekerbten Zugproben zu untersuchen [18].

In der Strain Gradient Plasticity und der MSGP wird nur die Geometrie, nicht jedoch die genaue zugrundeliegende Mikrostruktur modelliert. Insbesondere werden neben der lokalen Kristallorientierung auch die Art der aktiven Gleitsysteme sowie die materialabhängigen Versetzungswechselwirkungsprozesse nicht weiter berücksichtigt. Untersuchungen haben jedoch gezeigt, dass zum Beispiel die lokale Kristallorientierung sowie die Orientierung angrenzender Probenbereiche Auswirkungen auf die lokale Versetzungsdichte hat [80, 81], und dass die Versetzungsdichte nahe der Korngrenze höher ist als im Korninnern [82–84]. Ob die Versetzungen in einem Material quergleiten oder nicht, beeinflusst die lokale Verfestigung signifikant [54]. Diese Effekte und darauf basierendes größenabhängiges Probenverhalten können demnach mit der MSGP nicht erfasst werden.

3.1.4. Andere

Aus den kritischen Überlegungen zur Strain Gradient Plasticity in [74] (Siehe Kapitel 3.1.2, Seite 40) wird ein alternatives Modell abgeleitet: In der Nähe

¹⁷Der Wert der internen Länge wurde hier anhand von Mikrohärteversuchen ermittelt.

der unbelasteten Probenbereiche (Torsionsachse beim Torsionsversuch, neutrale Faser bei der Biegung) gibt es Bereiche mit hoher elastischer Dehnung. Aufgrund der geringen Verformung gibt es hier nur wenige statistische Versetzungen. Ergo können die geometrisch notwendigen Versetzungen nicht ausreichend gepinnt werden. Ihr Drang zum Zurücklaufen führt deshalb zu zusätzlichen rücktreibenden, elastischen Kräften. Umso weniger ein Volumenelement belastet ist, desto weniger plastische, aber desto mehr elastische Verformung gibt es. Eine kleine Probe, bei der dieser elastische Bereich einen signifikanten Teil ausmacht, erscheint deshalb fester als eine große Probe, bei der das sich elastisch verhaltende Volumen relativ gesehen vernachlässigbar klein ist. Wie auch bei der Strain Gradient Plasticity folgt bei diesem Modell für den einachsigen Zugversuch ein größenunabhängiges Verhalten.

Der Gedanke einer zusätzlichen Verfestigung aufgrund geometrisch notwendiger Versetzungen wird in [44] aufgegriffen, um ein geometrisches Modell für Größeneffekte bei der Härteprüfung zu erstellen. Dort, wo der Härteabdruck Kanten aufweist, ist der Verzerrungsgradient besonders stark ausgeprägt. TEM-Aufnahmen zeigen in diesen Bereichen erhöhte Versetzungsdichten. Die Härte setzt sich nun anteilig zusammen aus der erhöhten Festigkeit der Kantenbereiche und der Festigkeit der Bereiche dazwischen. Mit diesem Modell ist es möglich, die beobachtete Größenabhängigkeit bei der Härteprüfung sehr einfach zu beschreiben. Eine Verwendung für allgemeine Verformungsvorgänge ist jedoch nicht möglich.

In [85] wird die Verformung anhand des Gleichgewichts zwischen treibender Kraft (wirkende Schubspannung) und zu überwindender Barriere (Waldversetzungen in Form von starren Hindernissen) modelliert. Für den zweidimensionalen Fall (Versetzungen auf einer Gleitebene) ergibt sich eine Gleichung, wie sie von der Struktur her auch bei Berechnungen von Filtern verwendet wird. Verformung kann demnach so betrachtet werden, als werde eine Flüssigkeit unter Druck durch ein poröses Medium gepresst. Demzufolge sind die Ergebnisse für solche Filter direkt auf das Verformungsverhalten übertragbar. Bei Filtern ist die Relation aus der gesamten Porenfläche und dem mittleren Porendurchmesser ein Maß für den Strömungswiderstand. Analog ergibt sich als charakteristische Länge der Verformung die Relation

aus der freien Gleitfläche¹⁸ zum mittleren Versetzungsabstand. Die Wahrscheinlichkeit, dass Versetzungen einen „weichen“ Weg finden, hängt über diese charakteristische Länge mit der Probengröße zusammen. Es ergibt sich damit ein Größeneffekt in Fließspannung und Verfestigung, der nicht auf Verzerrungsgradienten basiert: Kleine Proben haben eine höhere anfängliche Fließspannung, aber eine geringere Verfestigung, als große Proben.

3.2. Abweichung vom idealen Material

Die nachfolgend erläuterten Modelle haben gemeinsam, dass sie am eigentlichen Formelwerk der klassischen Kontinuumsmechanik nichts Grundlegendes ändern. Sie können somit direkt mit Hilfe konventioneller FEM implementiert werden, da lediglich zusätzliche Aspekte in Betracht gezogen werden, mit deren Hilfe die Materialkennwerte für die Verwendung in der klassischen Kontinuumsmechanik geeignet modifiziert werden.

In der klassischen Kontinuumsmechanik werden Randbedingungen häufig unzureichend berücksichtigt, wie zum Beispiel die Auswirkungen von freien Oberflächen auf die Spannungszustände im Probeninnern. Bei kleinen Proben werden diese Auswirkungen jedoch signifikant. Ein Beispiel hierfür ist der ebene Spannungszustand bei dünnen Blechen, wie er in [29] als Ursache für einen Größeneffekt im Zugversuch gefunden wurde.

Das Umformverhalten wird maßgeblich durch die Oberflächenrauheit beeinflusst. Eine glattere Oberfläche führt zu einem erhöhten Umformvermögen von Blechen [8, 86], sowie zum Beispiel im Falle von CuZn37 zusätzlich zu einer leicht erhöhten Fließspannung (Abb. 3.4).

Bei der Skalierung von Umformprozessen wird die Zeitskala in der Regel nicht mitskaliert. Die Folge davon ist, dass sich die Dehngeschwindigkeiten signifikant ändern. Weist die Fließspannung eine Dehnratenabhängigkeit auf, dann führt dies nicht nur zu einem Größeneffekt, sondern kann auch das lokale plastische Verhalten beeinflussen [5, 87].

Werden Proben- und Prozessgeometrie skaliert, so stellt sich die Frage, wie mit der Mikrostruktur verfahren wird. In Bezug auf die Oberflächenqualität kann zum Beispiel die Korngröße gezielt mitskaliert werden. Unter

¹⁸Die freie Gleitfläche ist im Prinzip die Gesamtfläche der Gleitebene abzüglich der Fläche, die aufgrund von Waldversetzungen ein Hindernis für die Versetzungsbewegung darstellt.

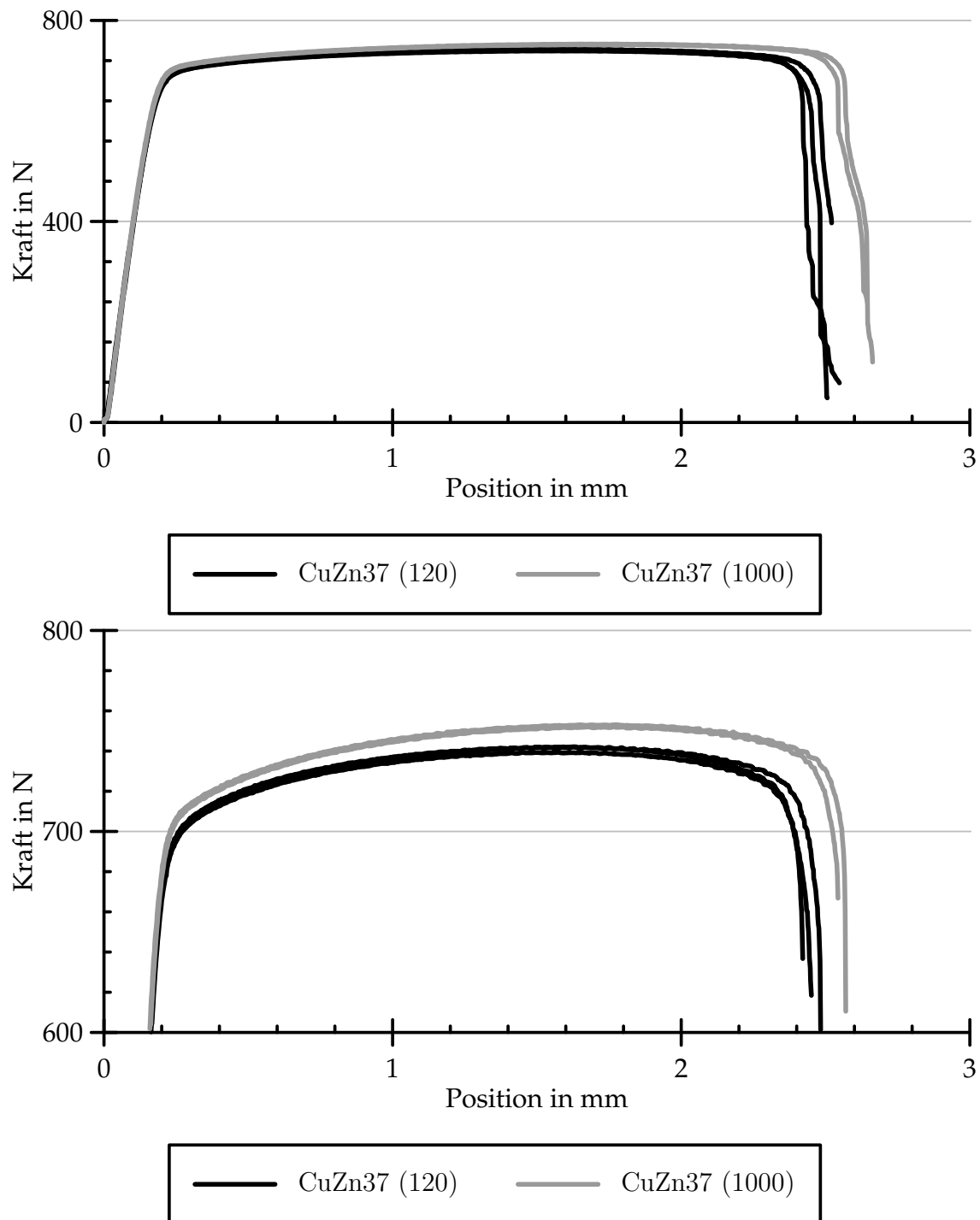


Bild 3.4.: *Oben:* Zugkurven von 5 CuZn37-Blechen mit einer Dicke von circa 0.3 mm und unterschiedlicher Oberflächenrauheit. Alle Bleche wurden mit der Körnung 120 geschliffen, zwei davon anschließend mit der Körnung 1000. *Unten:* Ausschnittsvergrößerung, um den Unterschied in der Fließspannung hervorzuheben.

Umständen ist es auch nicht zu vermeiden, dass das Ausgangsmaterial für die kleinen Proben eine andere Mikrostruktur aufweist. Das kann an den abweichenden Fertigungsparametern des Halbzeugs liegen – ausgehend von einem Blech mit 10 mm Dicke weist ein Blech mit 1 mm Dicke einen anderen Abwalzgrad auf, als ein Blech mit 0.05 mm Dicke. Solche Unterschiede in der Mikrostruktur sind geeignet zu berücksichtigen, zum Beispiel indem die Fließspannung in Abhängigkeit von der Korngröße (Hall-Petch [36,37] oder beginnendes Coble-Kriechen bei ultrafeinkörnigem Material [88]) modelliert werden. Die Korngrößenabhängigkeit der Fließspannung ist mittlerweile für zahlreiche Materialien für Korngrößen von nm bis mm untersucht worden, siehe zum Beispiel [89].

3.3. Berücksichtigung von Inhomogenitäten

Bei makroskopischen Proben mitteln sich Heterogenitäten im Werkstoffverhalten über das Probenvolumen beziehungsweise den Probenquerschnitt heraus. Werden die Proben kleiner, ist dies nicht mehr der Fall: die Heterogenitäten wirken sich dann zunehmend auf das Verhalten der Gesamtprobe aus.

3.3.1. Oberflächeneffekte

Das Verhältnis Probenoberfläche : Probenvolumen wird relevant, wenn das Material in der Nähe der Probenoberfläche andere Eigenschaften hat, als im Probeninneren.¹⁹ Im Falle des Zugversuchs kann dann die Fließspannung σ_y näherungsweise mit

$$\sigma_y = \frac{1}{A} (l_s d_s \sigma_{y,S} + (A - l_s d_s) \sigma_{y,V}) \quad (3.53)$$

berechnet werden.²⁰ Hierbei ist $\sigma_{y,S}$ die Fließspannung der oberflächennahen Region, $\sigma_{y,V}$ die Fließspannung im Probenvolumen, A die Querschnittsfläche der Probe, l_s der Umfang von A und d_s die Dicke der oberflächennahen

¹⁹Experimentelle Ergebnisse, die dies andeuten, sind schon lange bekannt, siehe zum Beispiel [90].

²⁰Die Frage, ob eine Oberfläche als frei oder aufgrund von Kontakt mit dem Umformwerkzeug nicht als frei angesehen werden kann, ist nicht immer so einfach zu beantworten, wie für den Fall des Zugversuchs [91].

Region. Eine mögliche Ursache für ein solches Verhalten kann eine ausgeprägte Oxidschicht auf der Probenoberfläche sein, wie sie zum Beispiel bei Al zu finden ist [28]. Auch eine Passivierungsschicht auf Nitinol, wie sie bei Stents elektrolytisch aufgebracht wird [92], könnte bei ausreichend kleinen Abmessungen solche Effekte bewirken.

Körner verhalten sich an einer freien Oberfläche anders als im Volumen, da sie dort weniger Zwangsbedingungen genügen müssen [16]. Die Verformung an einer freien Oberfläche ist deshalb wesentlich einfacher. Da $l_s(A)$ von der Form der Probe (zum Beispiel flaches Blech oder Rundstab) abhängt, ist auch der Größeneffekt für Proben unterschiedlicher Form verschieden stark ausgeprägt [27]. Damit bei einem Draht beispielsweise weniger als 10 % der Körner Oberflächenkörner sind, muss der Durchmesser mindestens das 30- bis 40-fache des Korndurchmessers betragen [93]. Bei einer Flachzugprobe, deren Breite viel größer als die Dicke ist, genügt es hingegen, wenn die Blechdicke etwa das 15- bis 20-fache des Korndurchmessers beträgt [94]. Der generische Zusammenhang in Gl. (3.53) kann auch dazu verwendet werden, den Beitrag der Oberflächenkörner mittels Anfitten an experimentelle Daten zu ermitteln [24, 32]. Allerdings lassen Texturmessungen über die Blechdicke nach Verformung im biaxialen Zugversuch keinen signifikanten Unterschied zwischen Volumen- und Oberflächenkörnern erkennen [95]. Das legt nahe, dass sich die Verformung der Körner doch nicht so stark unterscheidet.

Eine alternative Ursache besteht in der Wechselwirkung zwischen Versetzungen und freier Oberfläche. Der Hall-Petch-Effekt geht beispielsweise davon aus, dass Versetzungen Korngrenzen nicht überwinden können und sich dort aufstauen. An einer freien Oberfläche gibt es jedoch keine Korngrenzen – vorausgesetzt, dass keine Oxidschichten vorliegen, die eine ähnliche Wirkung auf Versetzungen haben können. Für die Körner an der Probenoberfläche sieht es also in erster Näherung so aus, als hätten sie den doppelten Durchmesser: die Länge des Pile-ups ist doppelt so hoch [96]. In einem verfeinerten Ansatz kann hierzu auch die Relation Korngrenzenfläche des Kornes : Gesamtoberfläche des Kornes betrachtet werden [97]. Aktuelle experimentelle Untersuchungen lassen vermuten, dass für Oberflächenkörner andere Hall-Petch-Parameter gültig sind, als für Körner im Probeninneren [26].

In der Nähe der Probenoberfläche wirken auf Versetzungen zusätzliche Bildkräfte, die dazu führen können, dass die Versetzungsdichte an der Oberfläche geringer ist als im Volumen. Das bedeutet, dass oberflächennahe Regionen weniger stark verfestigen. TEM-Untersuchungen zeigen, dass die Versetzungsanordnung ab einem Abstand von circa $4\text{ }\mu\text{m}$ nicht mehr von der Oberfläche beeinflusst wird [98]. Versetzungssimulationen liefern für kleine Verformungen gänzlich versetzungsfreie Randbereiche [52]. Bei einem Al-Einkristall der Größe $5.7\text{ }\mu\text{m} \times 5.7\text{ }\mu\text{m} \times 5.7\text{ }\mu\text{m}$ bewirken die Bildkräfte laut 3D-Versetzungssimulation eine Verringerung der Spannung um weniger als 10 % [57]. Dieser Unterschied fällt mit Größerwerden der Proben jedoch schnell ab.

In [99] wird die von der plastischen Verformung eines Kornes beeinflusste Umgebung in Abhängigkeit von der Entfernung des Kornes zur Probenoberfläche betrachtet. Wäre ein Teil dieser Umgebung außerhalb der Probe, so wird das Korn plastisch weniger stark gehemmt, als ein Korn inmitten des Vollmaterials. In einer anderen Untersuchung zeigten verschieden dicke Al-Bleche mit vergleichbarer Mikrostruktur deutliche Unterschiede in der Entwicklung der Oberflächenrauheit, obwohl stets mehr als 2 Körner über die Probendicke vorlagen [100]. Beide Untersuchungen legen nahe, dass der Oberflächeneinfluss nicht auf die oberste Kornschicht begrenzt ist.

3.3.2. Inhomogenes Volumen

Neben einer Unterteilung des Probenvolumens in Probeninneres und Bereiche nahe der Oberfläche kann auch das Probeninnere selbst inhomogene Eigenschaften aufweisen. Die plastischen Eigenschaften sind nicht bei allen Körnern gleich. Dies führt zu Unregelmäßigkeiten im Verformungsverhalten, wenn die Anzahl der Körner in der Probe eine gewisse Schwelle unterschreitet [33, 39, 96, 101]. Aus diesem Grund ist zu betrachten, wie das unterschiedliche Verhalten von Körnern modelliert werden kann und welche Mechanismen dem zugrunde liegen.

Da viele Materialien elastisch anisotrop sind, würden sich die Körner wegen der unterschiedlichen Orientierung elastisch unterschiedlich dehnen. Aufgrund der Kompatibilitätszwänge an den Korngrenzen ist dies jedoch nicht möglich, sodass es stattdessen zu zusätzlichen Spannungen im Ma-

terial kommt. Dies kann das Einsetzen lokaler plastischer Fließvorgänge maßgeblich beeinflussen [35, 102].

Aufgrund der Orientierungsunterschiede von Korn zu Korn werden außerdem in jedem Korn andere Gleitsysteme aktiviert. Selbst wenn die Körner keinen Kompatibilitätszwängen unterlägen, würde das die plastische Dehnung des einzelnen Kornes und seine Fließspannung maßgeblich beeinflussen (Schmidtsches Schubspannungsgesetz, [93, 103, 104]). Unter den Annahmen, dass

- sich alle Körner gemäß der außen angelegten Dehnung verformen (die Kompatibilität ist damit automatisch gewährleistet)
- sich genau die Kombination aktiver Gleitsysteme einstellt, für die ein Minimum an Arbeit erforderlich ist

kann aus dem Taylor-Faktor (Anhang E) die Fließspannung eines Kornes sowie anhand der aktiven Gleitsysteme statistische Texturveränderungen oder lokale Gitterdrehungen während der Verformung abgeleitet werden [105].

Die Fließspannung eines Kornes hängt jedoch auch von seiner Größe ab. Der Hall-Petch-Effekt ist derzeit nur in Bezug auf die Relation Global gemessene Fließspannung : mittlere Korngröße experimentell belegt. Eigentlich ist die Formel nicht auf einzelne Körner übertragbar (siehe hierzu Anhang A). Dennoch wird sie auch dazu verwendet, die Fließspannung einzelner Körner zu modellieren [97] sowie die Fließspannung feinkörniger Proben als Funktion der Korngrößenverteilungsfunktion [13].

Selbst nach langem Glühen bei hoher Temperatur beträgt die Versetzungsdichte noch circa $1.4 \times 10^5 \text{ cm}^{-2}$ [50], der mittlere Versetzungsabstand beträgt somit etwa $27 \text{ }\mu\text{m}$ – in Anbetracht der durch die Glühung erzeugte Korngröße von etwa 1 mm sind das immer noch sehr viele Versetzungen pro Korn. Durch Verformung steigt die Versetzungsdichte stark an, und es kommt je nach Material und Umgebungsbedingungen zur Zellbildung oder zu einer gleichmäßigen Versetzungsverteilung [106–109]. In der Praxis verwendetes Material ist in der Regel bereits vorverformt und somit verfestigt. Die vorliegende Versetzungsstruktur führt im Korn zu inhomogenen Eigenschaften. Daraus resultierendes Verhalten kann mit Hilfe konventioneller FEM modelliert werden, indem pro Korn mehrere finite Elemente

verwendet werden, wobei jedem Element leicht abweichende Eigenschaften zugeordnet werden [82].

Der Hall-Petch-Effekt basiert auf der Annahme, dass Korngrenzen Versetzungshindernisse sind und die Versetzungen sich dort aufstauen.²¹ Somit sind die Versetzungsdichte und infolge davon die lokale Verfestigung an der Korngrenze höher als im Korninnern [82–84]. Eine alternative Erklärung ist Mehrfachgleitung in Korngrenzennähe, welche zum Ausgleich der Interkorninkompatibilitäten nötig ist, während im Korninnern lokal Einfachgleitung dominiert [98, 110]. Dies kann berücksichtigt werden, indem für Körner in der Nähe der Korngrenze eine höhere Fließspannung beziehungsweise eine höhere Verfestigung angenommen wird als in der Mitte des Kornes (siehe zum Beispiel [111]). Dieses Modell wird später anhand der experimentellen Ergebnisse dieser Arbeit noch kritisch betrachtet, siehe insbesondere Kapitel 7.3.1 ab Seite 131.

Körner verhalten sich jedoch selbst bei gleicher Orientierung und gleicher Größe unterschiedlich [110]. Der Grund hierfür liegt in den Nachbarschaftsbeziehungen zu den umgebenden Körnern – das plastische Verhalten der Umgebung kann das lokale plastische Verhalten maßgeblich beeinflussen [112]. Des Weiteren können Korngrenzen Versetzungen nahezu ungehindert passieren lassen, sie behindern und sie sogar absorbieren oder emittieren. Auch hier spielt also die Nachbarschaftsbeziehung zwischen den Körnern sowie die Lage der Grenzfläche eine Rolle [81, 113]. Ein geeignetes Modell zur Nachbildung dieses Verhaltens in der Simulation konnte in der Literatur jedoch nicht gefunden werden.

Lokal unterschiedliches Verformungsverhalten ist auch bei Mehrkomponentenwerkstoffen oder mehrphasigen Legierungen zu berücksichtigen. Wie auch bei Körnern, kann dies zum Teil mittels herkömmlicher FEM modelliert werden. Sobald jedoch die Eigenschaften der Phasengrenzfläche modelliert werden sollen oder die Abmessungen der Mikrostruktur sehr klein sind, sind andere Ansätze zu verwenden. Ein Beispiel hierfür ist die Versetzungssimulation [38] (siehe Kapitel 3.1.1).

²¹Es gibt jedoch auch andere Modelle, um die Fließspannungsabhängigkeit von der Korngröße zu erklären [83].

4. Zielsetzung und Einordnung der Arbeit

In der vorliegenden Arbeit werden das lokale Verformungsverhalten und die Auswirkungen des Verhältnisses Korngröße : Probengröße auf die Fließspannung untersucht und modelliert. Verglichen mit anderen Arbeiten zu diesem Thema wird jedoch eine andere Herangehensweise gewählt:

Größeneffekte werden häufig auf Eigenschaften wie mittlere Korngröße und Blechdicke zurückgeführt. Daneben können andere Eigenschaften das Verhalten maßgeblich beeinflussen. Dazu zählen zum Beispiel eine – trotz gleichen Mittelwertes – abweichende Korngrößenverteilung, Veränderungen in der Textur oder die Oberflächenrauheit. Zum Beispiel geht bei Änderung der Blechdicke häufig eine Änderung der Walztextur einher. Diese Abhängigkeiten können zu Verfälschungen oder Scheineffekten führen. Aus solchen experimentellen Ergebnissen kann streng genommen nicht abgeleitet werden, welcher der vielen Mechanismen nun in welchem Maße ursächlich für den Größeneffekt ist.

Das Ziel ist es nun, den Einfluss des Verhältnisses Korngröße : Blechdicke auf die Fließspannung zu untersuchen und den zugrundeliegenden Mechanismus möglichst genau zu identifizieren.

Zur Untersuchung des Größeneffekts wird das Verhältnis Korngröße : Blechdicke so variiert, dass vom kontinuumsähnlichen Fall Korngröße $\ll$ Blechdicke bis zum anderen Extremfall Korngröße $\gg$ Blechdicke (zweidimensionale Kornstruktur, [114]) ein weiter Bereich abgedeckt wird. Die Parameter

- Textur
- Korngrößenverteilung
- Kornform
- Oberflächenrauheit

- Bereits vor dem Versuch bestehende Verfestigung

werden in den meisten Arbeiten nicht oder nur unvollständig berücksichtigt. Um Scheineffekte zu unterdrücken, müssen diese Parameter unabhängig von der gewählten Korngröße bei allen Proben ähnlich sein. Der erste Schritt ist hierbei die Wahl eines Materials mit möglichst einfacher Mikrostruktur, da eine komplexe Mikrostruktur viele Variablen bietet und es somit erschwert, bei einer Skalierung vergleichbare Bedingungen zu schaffen.

Mit einer geeigneten Probenpräparation werden weitere Störgrößen eliminiert. Möglicherweise unvermeidliche Abweichungen in den Probeneigenschaften müssen erfasst werden, damit ihre Auswirkungen auf das Messergebnis abgeschätzt werden können. Hierfür ist eine entsprechend umfassende Charakterisierung jeder einzelnen Probe vorzunehmen.

Fast alle Untersuchungen zu größenabhängigem Verhalten haben gemein, dass sie sich auf ein über die gesamte Probe gemitteltes Verhalten beziehen (zum Beispiel Kraft-Weg-Kurve). Dazu gehören auch Häufigkeitsverteilungen, die aus lokalen Messungen an der Probe erstellt werden, wie zum Beispiel die Textur. Dem liegt die Annahme zugrunde, dass sich die Probe nahezu homogen verhält. Gerade bei Größen- und Mikrostruktureffekten muss diese Annahme jedoch aufgegeben werden; so können zum Beispiel die lokalen Dehnungen doppelt so groß sein wie die global gemessenen [112].

Eine Mittelwertbetrachtung kann dazu führen, dass Effekte und lokale Vorgänge aufgrund von Überlagerungen überhaupt nicht oder falsch erfasst werden. Nur sehr wenige Arbeiten betrachten das lokale Geschehen – und so gut wie nirgendwo wird beides an der gleichen Probe untersucht. Die experimentellen Ergebnisse weisen somit eine Vielzahl von Lücken auf. In dieser Arbeit wird versucht, soviel Informationen wie möglich aus einer Probe zu gewinnen, um ein möglichst allumfassendes Bild über das globale und lokale Geschehen zu erhalten. Hierfür mussten geeignete lokale Charakterisierungs- und Auswerteverfahren gefunden werden.

Was in Bezug auf die experimentelle Messung gesagt wurde, gilt im Prinzip auch für die Modellierung: Viele Modelle betrachten entweder das globale oder das lokale Verhalten. Die globalen Modelle erlauben zwar eine Aussage über das statistische Verhalten (welche sich jedoch meist auf den Mittelwert beschränkt; die Streuung wird selten berücksichtigt), aber keine Aussage über das lokale Verhalten. Aus den Ergebnissen der loka-

len Modelle wiederum können zwar Aussagen über das globale Verhalten gezogen werden, aufgrund der hohen Rechenzeiten sind jedoch nur Einzelfallbetrachtungen praktikabel; ausführliche statistische Betrachtungen sind damit derzeit nicht möglich. Aus dem gleichen Grund scheidet eine Parametervariation zur Werkstoffoptimierung aus. Um ein lokales Modell zur Betrachtung des statistischen Verhaltens verwenden zu können, ist eine geeignete Vereinfachung und Homogenisierung nötig. Hierbei darf der dem Modell zugrunde liegende Mechanismus jedoch nicht verloren gehen.

Eine Modellierung setzt voraus, dass die Probe in möglichst vielen Eigenschaften bekannt ist. Häufig wird hier der Einfluss des Materials, welches den betrachteten Bereich umgibt, unterschätzt [112]: Bei einer feinkörnigen Probe wurden Orientierung und Korngrenzenverlauf an der Oberfläche gemessen. Die darunterliegende Mikrostruktur – und somit ein Großteil der Probe – blieb dabei vollkommen unbekannt. Anhand dieser Daten wurde dann das plastische Verhalten im Zugversuch simuliert. Wurden die äußeren Randbedingungen des Zugversuchs an den Grenzen des modellierten Probenbereiches angelegt, gab es eine große Diskrepanz zwischen Simulation und Experiment. Wurde die am Rande des modellierten Bereichs im Experiment gemessene Verformung als Randbedingung eingebracht, stimmten Simulation und Experiment lokal überein. Das lokale Verhalten wurde also gar nicht von den einzelnen Körnern im simulierten Volumen dominiert, sondern größtenteils von den Körnern, die in den seitlich und im Probeninneren angrenzenden Bereichen lagen.

Die Verifikation der Modelle erfolgt meist anhand globaler Messwerte. Dass ein Modell das globale Verhalten korrekt vorhersagt, bedeutet jedoch noch lange nicht, dass das Verhalten auch lokal korrekt modelliert wird [115]. Die Ursache hierfür liegt in einer mehr oder weniger großen Anzahl von Fitkonstanten, die in den Modellen üblicherweise enthalten sind. Da diese Konstanten häufig gar nicht oder nur unter sehr großem Aufwand gemessen werden können, verbleibt nur die Möglichkeit, das Modell an Messungen anzufitten. Nicht selten wird ein gelungener Fit bereits als Beweis angesehen, dass das Modell richtig ist.

Die lokale Betrachtung ist also wichtig, um Mechanismen zu verstehen und Modelle auf eine gesicherte Grundlage zu stellen. In der Praxis werden jedoch selten komplexe, lokale Modelle benötigt. Faustformeln, wie zum Beispiel die Gleichung für den Hall-Petch-Effekt sind von wesentlich

größerer Bedeutung, da sie einen schnellen Überblick über das zu erwartende Verhalten liefern. In der Fertigungspraxis ist neben dem Mittelwert allerdings auch die Streuung der Eigenschaften wichtig.

Im Idealfall erlaubt ein Modell also sowohl eine möglichst lokale Betrachtung, die Modellierung der Globalantwort einzelner Proben als auch Aussagen über das statistische Probenverhalten (Mittelwert und Streuverhalten) – natürlich in geringer Rechenzeit. Auf allen drei Ebenen ist das Modell anhand des Experiments zu verifizieren. Dies stellt sicher, dass das Modell in Bezug auf den betrachteten Mechanismus verifiziert ist (lokaler Vergleich sowie Vergleich der Globalantwort einzelner Proben) und es auch in der Praxis anwendbar ist (geringe Rechenzeit sowie statistische Betrachtung). Im Hinblick auf das anfängliche Fließverhalten von Zugproben erfüllen das in dieser Arbeit vorgestellte Modell und die experimentelle Vorgehensweise diese Aspekte.

5. Verwendete lokale Charakterisierungsmethoden

5.1. Allgemeine Problematik

Im Rahmen dieser Arbeit kommen zum Teil selbstentwickelte lokale Mess-, Auswerte- und Charakterisierungsmethoden zum Einsatz. Diese stellen einen zentralen Punkt dar, da sie zum Verständnis lokaler Vorgänge, deren Zusammenhang mit globalen Eigenschaften sowie für den Vergleich zwischen Simulation und Experiment wichtig sind. Bei der Auswahl der Methoden sind jedoch einige Aspekte zu beachten:

- **Zerstörungsfreiheit:** Alle Verfahren müssen auch bei mehrfacher Anwendung in der Summe zerstörungsfrei sein. Somit scheiden zum Beispiel Verfahren aus, die bei jedem neuen Messschritt ein Ätzen oder Polieren der Probe erfordern.
- **Auswirkungsfreiheit:** Keines der Verfahren darf dazu führen, dass die mechanischen Eigenschaften der Probe durch die Messung verändert werden. Somit scheiden Messverfahren aus, die beispielsweise für eine automatische Verformungsmessung mittels Bildanalyse das Aufbringen von Strukturen mittels Ätzung oder LASER voraussetzen.
- **Vereinbarkeit:** Die Verfahren müssen in beliebiger Reihenfolge miteinander vereinbar sein, da sie unter Umständen mehrfach auf die gleiche Probe anzuwenden sind. Somit scheiden Messverfahren aus, die beispielsweise das Aufbringen von Lack-, PVD- oder CVD-Schichten voraussetzen (zum Beispiel automatische Verformungsmessung mittels Bildanalyse), wenn daneben eine lokale Orientierungsmessung mittels Elektronenrückstreuung erfolgen soll.

- **Robustheit:** Im Hinblick auf den späteren Einsatz der Verfahren zur Charakterisierung des lokalen Materialverhaltens beim Tiefziehen müssen die Verfahren robust sein. Die Tiefziehversuche erfolgten in Zusammenarbeit mit dem Institut für Bildsame Formgebung der RWTH Aachen. Das heißt, dass die Proben zwischen den Instituten transportiert werden müssen, für Versuche mit Schmierstoffen bestrichen werden, in Reibkontakt mit dem Werkzeug kommen und anschließend gereinigt werden müssen. Beeinflussungen der Oberfläche sind somit nicht auszuschließen. Die verwendeten Verfahren sollten, sofern möglich, auch gegenüber Beeinträchtigungen der Probenoberfläche tolerant sein. Aus diesem Grund scheidet zum Beispiel eine lokale Verformungsmessung anhand der Oberflächenrauheit [116] aus.

Da die lokal untersuchten Proben nicht feinkörnig sind, kann nicht mehr angenommen werden, dass sie sich homogen verhalten. Es gibt somit kein repräsentatives Volumenelement. Folglich genügt es nicht mehr, einen Teilbereich der Probe zu charakterisieren. Um den Größeneffekt aufgrund des Verhältnisses Korngröße : Probengröße von anderen Effekten möglichst ungestört messen zu können, kommen makroskopische Proben zum Einsatz: die Fläche im Bereich der Messlänge hat bei den Zugproben die Abmessungen $10\text{ mm} \times 5\text{ mm}$. Bei einer späteren Modellierung können nun nicht einfach die globalen Randbedingungen des Zugversuchs an den Rand der Messlänge gelegt werden, da das umgebende Probenmaterial zu lokal abweichenden Randbedingungen führen kann [112]. Aus diesem Grund müssen die Proben über die Messlänge hinaus charakterisiert werden, was den Bereich entsprechend vergrößert.

Nahezu alle lokalen Messverfahren sind dazu ausgelegt, kleine Probenbereiche mit niedriger bis hoher Auflösung zu charakterisieren. Bei der Anwendung dieser Verfahren auf große Probenbereiche trifft man deshalb auf Probleme in Bezug auf Abbildungs- und Messgenauigkeit.

In den folgenden Abschnitten werden die verwendeten Verfahren, Lösungsansätze zur Messwerteoptimierung und die damit erfassten Messgrößen kurz erläutert. Eine Übersicht ist in Tab. 5.1 zu finden.

Messgröße	Grundlagen	Verfahren
Gleitbandentstehung		Lichtmikroskop/DIC
Korngeometrie/Korngrößenverteilung	Anhang A	Digitalkamera Lichtmikroskop/DIC Orientierungsmessung (EBSD)
Kornorientierung	Anhang C	Orientierungsmessung (EBSD)
Lokale Verfestigung	Anhang C	Orientierungsgradienten (OGM)
Lokale Verformung (Blechdicke)		Weißlichtinterferometrie
Lokale Verformung (Tripelpunktbewegung)	Anhang B	Lichtmikroskop/DIC
Oberflächenrauheit		Weißlichtinterferometrie
Textur		Orientierungsmessung (EBSD)

Tabelle 5.1.: Übersicht über die Messgrößen und die zur Messung verwendeten Verfahren.

5.2. Digitalkamera

Mit Hilfe einer Digitalkamera mit Makro-Objektiv werden vor und nach den Versuchen Bilder der Proben mit einer Auflösung angefertigt, die in Abhängigkeit von der Ausschnittsgröße $10\text{ }\mu\text{m}/\text{Pixel}$ bis $30\text{ }\mu\text{m}/\text{Pixel}$ beträgt. Aufgrund der Probenpräparation ist auf diesen Bildern bei einer Korngröße von etwa 1 mm die Korngeometrie auch nach dem Bruch der Probe noch so deutlich sichtbar, dass die Lage der Bruchstelle recht genau in Bezug auf die ursprüngliche Korngeometrie ermittelt werden kann. Da bei dieser Korngröße und einer Blechdicke von weniger als 1 mm in der Regel eine nahezu zweidimensionale Kornstruktur vorliegt [114], kann die Korngeometrie mit diesen Aufnahmen vollständig erfasst werden. Somit kann die Korngrößenverteilung ermittelt werden. Auch eine Generierung von FE-Modellen ist anhand dieser Daten möglich.

Um die Erfassung der Korngeometrie zu vereinfachen, wurde im Rahmen dieser Arbeit die Software DEFMEASURE entwickelt. Damit kann der Korngrenzenverlauf direkt in das Probenbild eingezeichnet werden. Im einfachsten Fall werden nur die Korngrenzentrampelpunkte markiert und die Korngrenzensegmente dazwischen als eben angenommen. Mit Hilfe zusätzlicher Stützstellen kann auch die Krümmung der Korngrenzen berücksichtigt werden. Die Geometriedaten können zum Beispiel als Python-Skript für die FEM-Software ABAQUS exportiert werden (Abb. 5.1).

5.3. Lichtmikroskopie (DIC)

Mit Hilfe eines Lichtmikroskops mit DIC¹ werden Unebenheiten der Probenoberfläche abgebildet. Die angeschlossene CCD-Kamera erlaubt dabei in der niedrigsten Vergrößerungsstufe eine Auflösung von etwa $1.5\text{ }\mu\text{m}/\text{Pixel}$. Somit können Oberflächenrauheit, Korngrenzen und Gleitstufen abgebildet werden.²

Streng genommen ergibt sich der Kontrast im DIC aus lokalen Änderungen des Winkels zwischen Oberflächennormale und Lichteinfallsrich-

¹Differential Interference Contrast; auch als Nomarski-Kontrast bekannt.

²Im Falle von Cu sind auch die Zwillingskorngrenzen sichtbar. Für diese gilt im Prinzip das gleiche wie für die Korngrenzen. Da der Schwerpunkt jedoch auf der Fe-3%Si-Legierung liegt, in der es keine Zwillinge gibt, sei dies hier nur am Rande erwähnt.

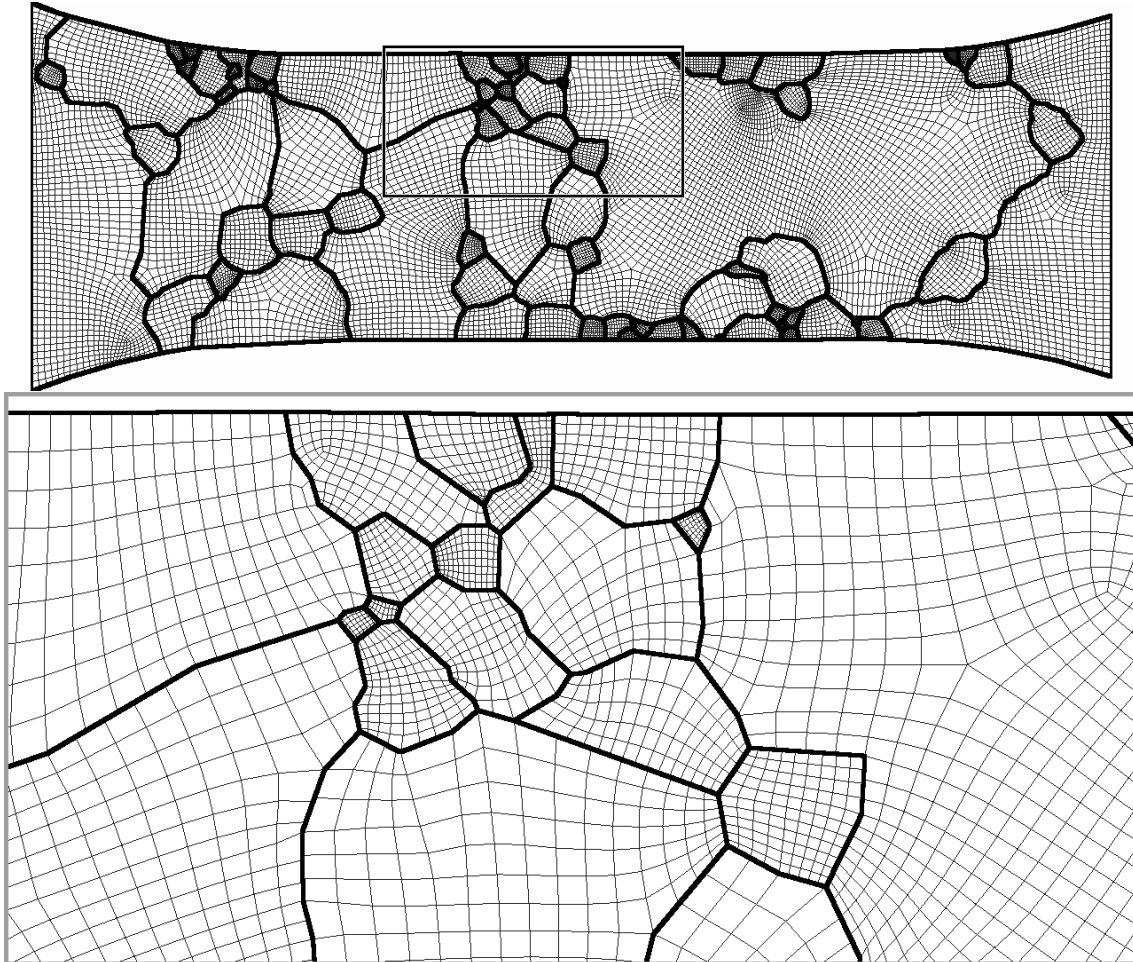


Bild 5.1.: Beispiel eines dreidimensionalen FE-Modells in Draufsicht, welches mit einem von DEFMEASURE automatisch generierten Python-Skript erzeugt wurde (*oben*). In der Ausschnittsvergrößerung (*unten*) ist erkennbar, dass die Größe des FE-Netzes automatisch an die Korngröße angepasst wird.

tung. Das hat allerdings zur Folge, dass bei einem großen betrachteten Probenbereich Farbgebung, Helligkeit und Kontrast stark schwanken. Im vorliegenden Fall hat der zu vermessende Probenbereich Abmessungen von mehr als $12\text{ mm} \times 5\text{ mm}$, welcher in Einzelbildern zu etwa $1\text{ mm} \times 1\text{ mm}$ aufgenommen wird.

Beim Zusammensetzen der Einzelbilder zu einem Gesamtbild sind die Schwankungen in Farbgebung, Helligkeit und Kontrast so stark, dass sie den eigentlichen Kontrast der Probenoberfläche übertreffen, was eine Auswertung der Bilder erschwert. Aus diesem Grund wurden Helligkeits- und Kontrastschwankungen innerhalb der Einzelbilder beseitigt. Die Helligkeit wurde anschließend normalisiert, der Kontrast wurde lokal optimiert.

Da für die Untersuchungen kein automatischer Probentisch zur Verfügung stand, musste die Probe für jede Aufnahme manuell verfahren werden. Somit sind die Abstände zwischen den einzelnen Aufnahmen unterschiedlich und nicht exakt bekannt. Die Einzelbilder müssen für die nachfolgende Bildmontage überlappend aufgenommen werden. Da die Aufnahmen auch für die lokale Verformungsmessung verwendet werden, ist eine möglichst exakte Bildmontage erforderlich. Um diesen Arbeitsschritt qualitativ und zeitlich zu optimieren, wurde das Programm PICTUREPASTER entwickelt. Dies führt sowohl die Helligkeits- und Kontrastkorrekturen vollautomatisch, sowie mittels Korrelationsanalyse die Bildmontage halbautomatisch durch. Nach der Montage mit PICTUREPASTER ergibt sich dann ein einheitliches Bild der Gesamtprobe, bei dem die Oberflächendetails klar hervortreten (Abb. 5.2).

Die exakte Vermessung einer Ausgangsprobe in Bezug auf Lage und Geometrie der Körner wird verwendet für:

- Vergleich der Korngeometrie an Probenober- und -unterseite (Im Hinblick darauf, inwiefern die Kornstruktur von einer idealen zweidimensionalen Kornstruktur abweicht.)
- Ableiten der Korngrößenverteilung
- Bildung eines FE-Modells der Probe mit Hilfe der Software DEFMEASURE, wie in Kapitel 5.2 beschrieben

Um die lokale Verformung einzelner Körner zu untersuchen, werden die Proben schrittweise gezogen. Nach jedem Schritt erfolgt eine Aufnahme der

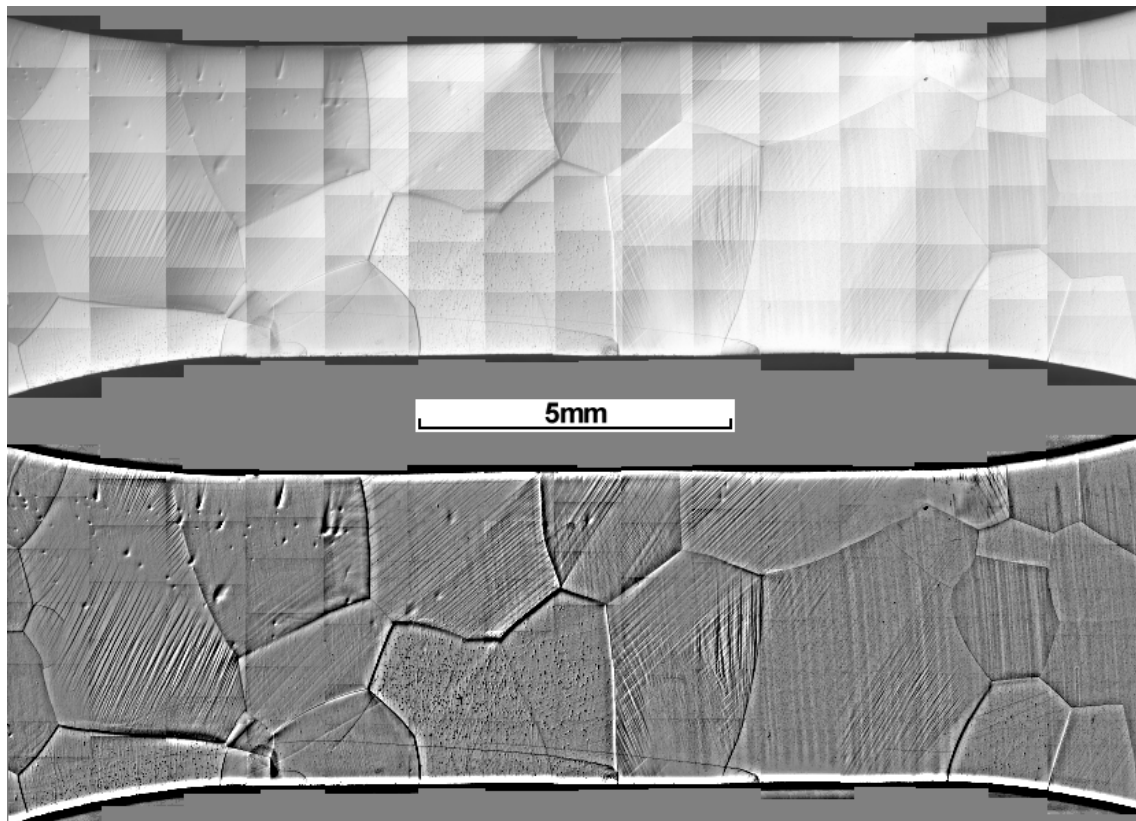


Bild 5.2.: *Oben:* Die zusammengesetzten Aufnahmen zeigen aufgrund der Bildfehler der Einzelaufnahmen eine Kachelstruktur. Gleitlinien und Korngrenzen sind teilweise kaum sichtbar. *Unten:* Nach Beseitigung der Bildfehler und Optimierung der Darstellung werden die relevanten Oberflächenstrukturen der Probe dominant.

Gesamtprobe im Lichtmikroskop. Um nun die Verformung lokal messen zu können, werden auf der Probenoberfläche markante Punkte benötigt, die lokalstationär sind. Lokalstationär bedeutet: Sie bewegen sich mit dem benachbarten Probenumfeld, sind also aus der Sicht dieses Umfeldes stationär. Sie sind nicht stationär auf der Skala der Probe, denn bei der Verformung der Probe verändern sie ihre Position in Bezug auf das Laborkoordinatensystem.

Vor Beginn des Zugversuchs ist die Probenoberfläche im Idealfall völlig sauber und – mit Ausnahme der Korngrenzen – konturlos³. Das Aussehen der Probenoberfläche verändert sich bei der Verformung sehr stark, unter anderem aufgrund der Ausbildung von Gleitstufen. Die bereits im unverformten Zustand nur sehr schwach sichtbaren Konturen gehen dabei mit Ausnahme der Korngrenzen verloren. Eine lokale Verformungsanalyse anhand automatischer Mustererkennung ist deshalb nicht möglich. Es gibt lediglich eine Klasse von Punkten, die markant, lokalstationär und auch bei starker Verformung noch sichtbar sind: Korngrenzentripelpunkte. Mit Hilfe der selbstentwickelten Software DEFMEASURE können die Positionen der Korngrenzentripelpunkte zweier Verformungsstadien zueinander in Relation gesetzt werden. Die Berechnung der lokalen Verformung der einzelnen Körner wird wie in Anhang B beschrieben durchgeführt. Hiermit kann jedoch nur eine über das ganze Korn gemittelte Verformung ermittelt werden. Dehnungsunterschiede innerhalb von Körnern, wie in [105, 116] experimentell gefunden, werden davon nicht erfasst. Deshalb würde eine Analyse der Gleitbandaktivität anhand der lokalen plastischen Dehnung, wie beispielsweise in [110], vermutlich nur bedingt korrekte Ergebnisse liefern.

Einschub: Verformungsmessung mittels Bildkorrelation

Um mittels automatischer Bildkorrelation lokale Verformungen messen zu können, ist eine Oberflächenstruktur nötig, die ausreichend viele und während der Verformung stabile markante Kontraste liefert. Die derzeit gängigen Verfahren sind nicht mit den weitergehenden Erfordernissen dieser Arbeit vereinbar. Ein

³Konturlos bedeutet auch, dass keine sichtbare Oberflächenrauheit vorhanden ist. Diesbezüglich wird der DIC-Kontrast auch für eine qualitative Kontrolle der Oberflächengüte eingesetzt.

Aufbringen einer Pulverschicht, wie aktuell in [117] beschrieben, könnte aber eventuell eine Alternative darstellen. Die Vorgehensweise wäre folgende:

1. Ausgangszustand der Probe charakterisieren.
2. Aufbringen der Pulverschicht und Anfertigen von Aufnahmen der beschichteten Probenoberfläche.
3. Verformungsschritt durchführen.
4. Veränderung der Pulverschicht messen. (Dies liefert das Verformungsinkrementfeld für diesen Schritt.)
5. Pulverschicht beseitigen und Probe charakterisieren.
6. Sollen weitere Verformungsschritte durchgeführt werden, bei Schritt 2 fortfahren.

Hierzu müsste jedoch eine Reihe von Bedingungen erfüllt sein. Als wichtigste wäre zu nennen, dass die Pulverschicht rückstandsfrei und ohne Beschädigung der Probenoberfläche beseitigt werden kann. Bei der Zusammenführung der einzelnen Verformungsinkrementfelder kann außerdem die Fehlerfortpflanzung zu Problemen führen.

Die Orientierung der Gleitstufen ergibt sich aus der Schnittgeraden von Probenoberfläche und Gleitebene. Somit können anhand der sichtbaren Gleitstufen Rückschlüsse auf die lokal aktiven Gleitsysteme gezogen werden. Die Existenz von Gleitstufen hängt jedoch vom Winkel zwischen Probenoberfläche und Gleitrichtung des aktiven Gleitsystems ab. Gleitstufen zeigen somit nur an, welche Gleitsysteme auf jeden Fall aktiv sind. Es können jedoch prinzipiell auch weitere Gleitsysteme aktiv sein, die zu keinen sichtbaren Gleitstufen an der Probenoberfläche führen. Dass ein aktives Gleitsystem überhaupt keine sichtbare Gleitstufe hinterlässt, ist jedoch nur dann der Fall, wenn die Gleitrichtung senkrecht zur Probenoberflächennormale verläuft. Bereits kleine Abweichungen davon führen zu einer zumindest schwach ausgeprägten Gleitstufe. Dies ist ein weiterer Grund, warum die Probenoberfläche möglichst glatt sein muss und eine Bildoptimierung in

Bezug auf Helligkeit und Kontrast nötig ist: nur dann sind selbst schwach ausgeprägte Gleitstufen sichtbar.

Bei fortschreitender Verformung kommt es zu Verfestigung, und die Versetzungen der lokal aktiven Gleitsysteme können sich nicht mehr ungehindert bewegen. Es kommt vermehrt zu Versetzungsklettern und Schneidprozessen zwischen Versetzungen. Die sich daraus ergebende Verformung ist deshalb nicht mehr geordnet und produziert keine klar voneinander trennbaren Gleitstufen mehr. Die Verformung an der Oberfläche führt zu einer zunehmend gleichmäßig verteilten Oberflächenrauheit [116]. Im Vergleich zu den Höhenunterschieden der zuvor erzeugten Gleitstufen beträgt diese Verformung der Oberfläche ein Vielfaches. Anfangs sichtbare Gleitstufen sind bei größerer Verformung deshalb nicht mehr oder nur noch begrenzt erkennbar.

Der zuvor beschriebene Prozess setzt allmählich ein. Hinzu kommen bereits zu Beginn schwache Aktivitäten auf sekundären Gleitsystemen oder gar *Pencil Glide*. Das führt dazu, dass Gleitstufen in der Regel nicht perfekt gerade und somit nicht perfekt parallel verlaufen. Eine manuelle Auswertung führt deshalb zu hohen Unsicherheiten. Im Falle von krz-Metallen gibt es 48 mögliche aktive Gleitsysteme. Der Orientierungsunterschied in den Gleitstufen zweier ähnlich orientierter Gleitsysteme beträgt somit im Schnitt weniger als 4° . Zur Identifizierung des zugrundeliegenden Gleitsystems ist deshalb eine möglichst exakte Auswertung der Gleitstufenorientierung nötig. Hierfür wurde die Software LINEDETECTOR entwickelt, welche eine statistische Auswertung der Orientierungsverteilung unter Zuhilfenahme der Hough-Transformation vornimmt. Die Ergebnisse sind dabei umso besser, desto stärker der Kontrast der Gleitstufen ausgeprägt ist und desto weniger Fremdkontraste im Bild enthalten sind. Durch die saubere Probenoberfläche sowie der eingangs erwähnten Optimierung von Helligkeit und Kontrast bei der Bildmontage ist beides gewährleistet.

5.4. Weißlichtinterferometrie

Mit der Weißlichtinterferometrie kann die Topographie einer Oberfläche vermessen werden. Die maximale Ortsauflösung des Systems beträgt $0.73\ \mu\text{m}$ bei einer Höhenauflösung von $0.5\ \text{nm}$. Bei entsprechend reduzierter Orts-

auflösung (etwa $9\text{ }\mu\text{m}$)⁴ können auch größere Probenbereiche vermessen werden. Da der Probenstisch automatisch angesteuert wird, kann auch ein aus mehreren Einzelmessungen bestehender Bereich charakterisiert werden. Die Software des Systems unterstützt dabei das automatische Zusammen-setzen der Einzelmessungen zu einer Gesamtmessung.

Für eine quantitative Messung der Oberflächenrauheit ist eine hohe Orts-auflösung nötig. Die untersuchten Proben werden deshalb nur an einzelnen Stellen und stichprobenartig charakterisiert. Zusammen mit der Charak-terisierung im DIC-Kontrast (Kapitel 5.3) ist dennoch eine durchgängige Kontrolle der Oberflächengüte gewährleistet.

Es werden Höhenprofile von Probenober- und -unterseite vermessen. Mit der selbstentwickelten Software WLI-TOOLS wird die Messung der Probenunterseite gespiegelt⁵ und mit der Messung der Probenoberseite additiv zusammengeführt. Zur Positionierung wird auf die Mikroskopbil-der des Weißlichtinterferometers zurückgegriffen, in denen der Benutzer zusammengehörende Referenzpunkte auswählt. Hierbei werden auch eine Verdrehung der Messungen zueinander und Ebenenverkipnungen korri-giert. Mit dieser Methode können lokale Blechdickenänderungen gemessen werden (Abb. 5.3).

Bei der lokalen Blechdickenmessung summieren sich Messlücken auf, da das Ergebnisbild nur dort Messwerte enthält, wo *beide* Messungen gültige Messwerte enthalten.

Messlücken haben ihre Ursache darin, dass das Weißlichtinterferometer im Auflichtmodus betrieben wird. Die Probenoberfläche muss also genü-gend Licht reflektieren. Dafür muss sie zum einen sauber sein (= hohe Inten-sität des reflektierten Lichtes), und zum anderen korrekt ausgerichtet sein (= das Licht muss auch in Richtung des Objektivs reflektiert werden). Bei hoher Verformung wird die Probenoberfläche jedoch zunehmend uneben. Es ist deshalb nicht mehr möglich, die Probe so auszurichten, dass die Oberfläche an jeder Probenstelle ausreichend viel Licht zum Objektiv hin reflektiert. Messlücken sind deshalb ab einer gewissen Verformung unvermeidbar. Dies betrifft insbesondere tiefgezogene Näpfe im Bereich des Napfbodens, da der Napfboden sich unter Umständen leicht aufwölbt und auch im Über-gangsbereich zur Napfflanke eine starke Oberflächenkrümmung vorliegt.

⁴Der zu vermessende Bereich wird vom verwendeten System in 320×240 Messpunkte eingeteilt.

⁵Die Höhenwerte bleiben erhalten, lediglich ihre Position wird gespiegelt.

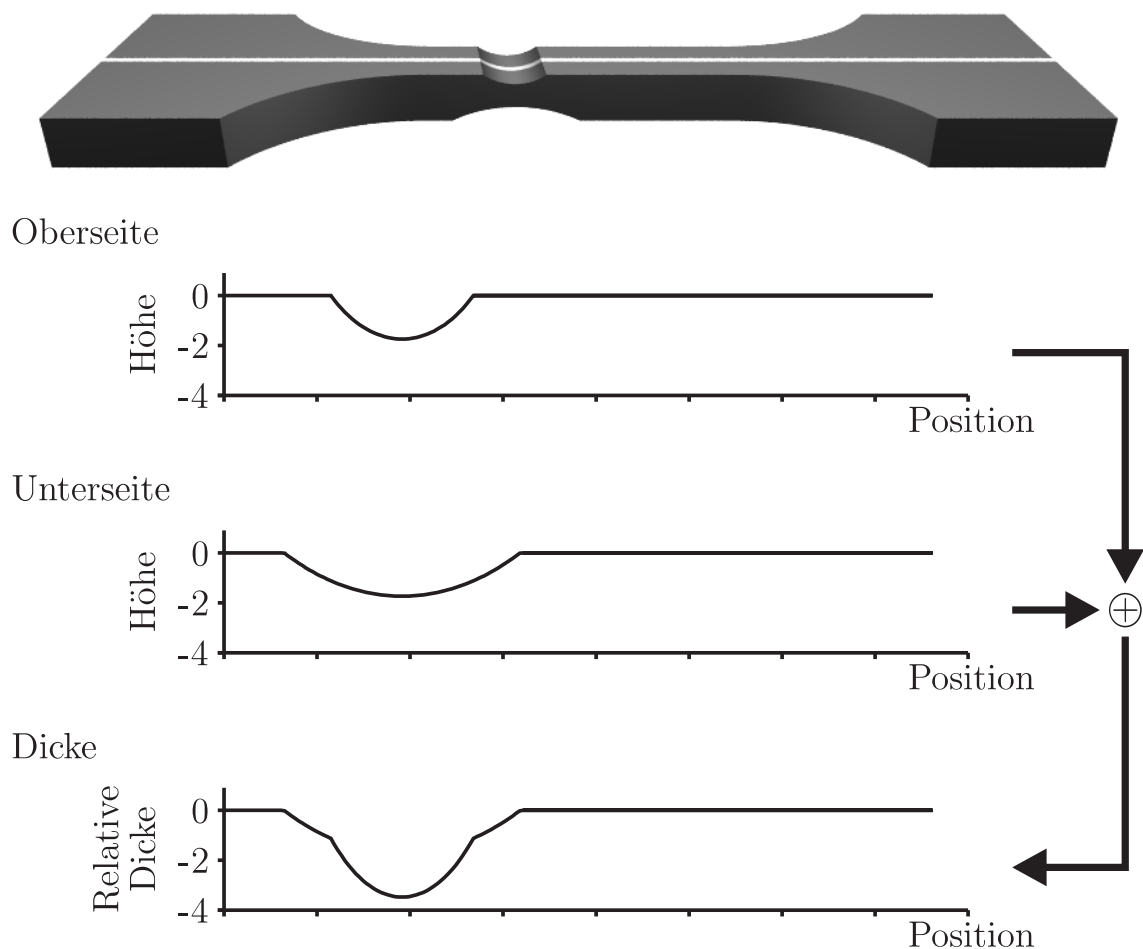


Bild 5.3.: Vorgehensweise der Blechdickenmessung mittels Weißlichtinterferometrie: Oben ist eine Zugprobe skizziert. Der Einfachheit wegen erfolgt die Erklärung anhand einer Messung entlang der weißen Linie. Die beiden Diagramme darunter zeigen die Topographiemessungen an Ober- und Unterseite. Da die Probe zur Messung der Unterseite gewendet werden muss, sind die Messwerte der Unterseite entsprechend zu spiegeln. Die Messungen erfolgen über die Messlänge hinaus bis in Probenbereiche, in denen keine plastische Verformung erwartet wird. Dies liefert ein konstantes Referenzniveau für den Nullpunkt der Höhenmessung. Beide Topographiemessungen werden additiv überlagert. Die sich so ergebende relative Blechdicke weicht um eine Konstante von der wahren Blechdicke ab. Diese Konstante kann durch Blechdickenmessungen an der Probenkante (optisch) oder außerhalb der Messlänge (Mikrometerschraube) ausreichend genau ermittelt werden. Alternativ kann unter der Annahme der Volumenkonstanz bei plastischer Verformung und Sichtbarkeit der Korngrenzen diese Konstante angenähert werden.

Grobkörnige Zugproben zeigen ab einer plastischen Verformung von etwa 5 % bis 10 % die ersten Messlücken.

Um dennoch eine vollständige Messung zu erhalten, werden bei der ersten Messung nicht erfasste Probenbereiche in einer zweiten Messung bei entsprechend gekippter Probe separat nachgemessen. Mit Hilfe der Software WLI-TOOLS werden diese Messungen anschließend eingefügt: Die Software unterstützt die Grobpositionierung anhand der vom Weißlichtinterferometer aufgenommenen Mikroskopbilder. Mit Hilfe einer Regressionsanalyse, die sowohl eine Feinverschiebung als auch die Beseitigung einer eventuellen Ebenenverkipfung vornimmt, werden die Aufnahmen dann sehr genau eingefügt. Dennoch sind die Möglichkeiten des Systems begrenzt: Grobkörnige Zugproben weisen bei einer plastischen Verformung von etwa 20 % die ersten Bereiche auf, die auch mit dieser Methode nicht mehr korrigiert werden können.

5.5. Elektronenrückstreuung (EBSD)

Für die Orientierungsmessungen wird ein EBSD⁶-System verwendet. Hiermit wird die lokale Kristallorientierung mit Hilfe der Elektronenrückstreuung gemessen. Das resultierende Beugungsbild stammt aus oberflächennahen Bereichen der Probe. Dies hat zur Folge, dass eine möglichst saubere Oberfläche benötigt wird. Künstlich von außen in die Oberfläche eingebrachte Verformungen (zum Beispiel durch Schleifen) müssen vermieden werden.

Die Ortsauflösung des verwendeten Systems erreicht bis zu 1 μm , die Winkelauflösung bis zu 0.5° , was einem typischen Wert entspricht [118].⁷ Zwei ähnlich orientierte Gleitsysteme unterscheiden sich unter Umständen nur um wenige Grad; 0.5° ist also relativ ungenau. Die Genauigkeit

⁶Electron backscatter diffraction; Stellenweise ist auch die Bezeichnung OIM für Orientation Imaging Microscopy anzutreffen. Hierbei handelt es sich jedoch um eine Markenbezeichnung.

⁷Die Messzeit skaliert mit der Anzahl der Messpunkte, ist also umgekehrt proportional zum Quadrat des Messpunkteabstands. Unter idealen Voraussetzungen sind bei dem verwendeten System maximal 10 Messpunkte/s möglich. Amorphe Oxidschichten oder Ablagerungen auf der Oberfläche senken jedoch die Intensität der Beugungsbilder; lokale Verformung führt zu Unschärfe [119]. Das verringerte Signal-Rausch-Verhältnis kann teilweise kompensiert werden, indem mehrere Einzelbilder überlagert werden. Die Geschwindigkeit des Systems kann dann auf bis zu 1 Messpunkt/s sinken. Unschärfe kann damit jedoch nicht verringert werden.

der Orientierungsbestimmung hängt maßgeblich vom Rauschen und der Auflösung der CCD-Kamera ab sowie von den bildverarbeitenden nachgeschalteten Hardwarekomponenten. Umso höher die Auflösung der CCD-Kamera ist, desto besser ist die Winkelauflösung des Systems und desto höher sind die Rechenzeiten pro Bild. Eine Verbesserung der Winkelauflösung bei moderater Rechenzeit kann auch softwareseitig erreicht werden, indem die grafische Auflösung mit Hilfe von Subpixeln künstlich erhöht wird, was die Lagebestimmung der Kikuchi-Bänder verbessert. Damit ist eine Verbesserung der Winkelauflösung auf bis zu 0.02° möglich [120]. Dieses Verfahren hat jedoch noch keinen Eingang in die Standard-Software gefunden, und es existiert dort keine dokumentierte Schnittstelle, um ein solches Verfahren effizient selbst nachzurüsten. Eine weitere Möglichkeit, die real existierende Orientierung besser anzunähern, besteht darin, aus allen Punktmessungen innerhalb eines Kornes eine mittlere Orientierung zu bilden (siehe Anhang C).

Gängige EBSD-Systeme sind dafür ausgelegt, bei hohen Vergrößerungen – also auf kleinen Flächen – zu arbeiten. Bei der Bewegung des Elektronenstrahls über die Probe bewegt sich auch das Beugungsbild. Ohne Korrektur wird diese Bewegung als Drehung fehlinterpretiert, was zu systematischen Messfehlern bis zu 10° führt.⁸ Um diesen systematischen Fehler genau zu erfassen, wurden großflächige Eichmessungen an Einkristallen durchgeführt. Mit Hilfe der selbsterstellten Software ANG-FILE-CORRECTOR können anhand dieser Eichergebnisse die vom EBSD-System gelieferten Messungen an Zugproben korrigiert werden.

Unter Verwendung dieser Korrekturen können mit dem System Flächen von etwa $1\text{ mm} \times 5\text{ mm}$ gemessen werden. Für eine Zugprobe sind demzufolge 10–15 Messungen nötig. Diese werden mit einer eigenen Software zu einer Gesamtmessung zusammengesetzt.⁹

Wenn der Elektronenstrahl bei einer Messung ungünstig steht, weil er zum Beispiel genau eine Korngrenze, eine kleine Ablagerung oder eine lokal stark verformte Zone trifft, kann es zu Fehlmessungen kommen, bei denen die Orientierung überhaupt nicht oder falsch erkannt wird. Bei einer stark

⁸Dies betrifft selbst aktuelle EBSD-Systeme, obwohl der betreffende Hersteller bereits zu Beginn der vorliegenden Arbeit über das Problem und Lösungsmöglichkeiten unterrichtet wurde.

⁹Ohne die Korrektur des systematischen Messfehlers wären an den Nahtstellen deutliche Sprünge in den gemessenen Orientierungen sichtbar.

verformten Probenoberfläche kann es zu Abschattungen kommen, sodass ein Teil des Beugungsbildes für die CCD-Kamera nicht sichtbar ist.

Messlücken kann die zum EBSD-System gehörende Software nachträglich auffüllen, indem zum Beispiel die Orientierung eines benachbarten Messpunktes verwendet wird. Dies kann unter Umständen sinnvoll sein, aber die Messung auch verfälschen. Es wird deshalb davon abgesehen, sofern nicht explizit auf eine andere Vorgehensweise hingewiesen wird.

Mit Hilfe der Software GRAINFINDER werden die einzelnen Körner einer Messung in Bezug auf mittlere Orientierung und Größe automatisch ausgewertet. Aus diesen Daten werden dann Textur und Korngrößenverteilung abgeleitet. Die Orientierungsmessungen werden außerdem dann hinzugezogen, wenn der Verlauf einer Korngrenze im Lichtmikroskop trotz Bildoptimierung nicht eindeutig erkennbar ist.

5.6. Orientierungsgradienten-Mapping (OGM)

Wie bei der optischen Charakterisierung kann auch mittels EBSD das lokale Verformungsverhalten untersucht werden, indem die Probe im Ausgangszustand und nach einzelnen Verformungsschritten charakterisiert wird: Bei plastischer Verformung kann es zu lokalen Änderungen der Kristallorientierung kommen [121–123].¹⁰ Da dies auf der Skala der Mikrostruktur nicht homogen abläuft, sind die Orientierungsänderungen eine sehr wichtige Messgröße für das lokale Materialverhalten.

Das *Orientation Gradient Mapping* (OGM) ist eine Methode zur Darstellung und Auswertung von EBSD-Messungen im Hinblick auf lokale Orientierungsänderungen. Da es sich dabei um eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methode handelt, wird im Folgenden näher auf die Grundlagen, die Durchführung und die Auswertemöglichkeiten eingegangen. Das grundlegende mathematische Handwerkszeug ist in Anhang C beschrieben. Zur Berechnung des Orientierungsgradienten anhand von EBSD-Messungen, zur Darstellung sowie zur Auswertung wird dabei auf die eigens entwickelte Software GRAINFINDER zurückgegriffen.

¹⁰Die Orientierungsinhomogenitäten können bei starker Kaltverformung soweit gehen, dass die ursprünglichen Körner nicht mehr erkennbar sind [124].

5.6.1. Grundlagen

Die Fließspannung σ_y wächst mit steigender Versetzungsdichte ρ (Verfestigung):

$$\sigma_y \uparrow \Leftrightarrow \rho \uparrow \quad (5.1)$$

Die Erzeugung von Versetzungen geschieht aufgrund plastischer Verformung ε_{pl} , welche von Korn zu Korn unterschiedlich sowie auch innerhalb eines Kornes inhomogen ist. Unterbleiben Prozesse, wie zum Beispiel dynamische Rekristallisation, so gilt:

$$\sigma_y \uparrow \Leftrightarrow \varepsilon_{pl} \uparrow \quad (5.2)$$

Somit folgt:

$$\rho \uparrow \Leftrightarrow \varepsilon_{pl} \uparrow \quad (5.3)$$

Versetzungen führen zu lokalen Orientierungsänderungen des Kristallgitters (einige einfache Beispiele mit Rechnung sind in [108] zu finden). Die Orientierungsänderung, die von einer Versetzung erzeugt wird, kann von einer zweiten Versetzung gleichen Typs und entgegengesetzten Vorzeichens (Versetzungsdipole) wieder neutralisiert werden. Die Netto-Orientierungsänderung, die von einer Gruppe von Versetzungen erzeugt wird, hängt also maßgeblich von der jeweiligen Versetzungsstruktur ab, und über diese mit dem lokalen Verformungsgeschehen. In Abhängigkeit von Material und Temperatur führt plastische Verformung entweder zur Ausbildung einer zellulären oder zu einer homogenen Versetzungsstruktur¹¹.

Zelluläre Versetzungsstrukturen bestehen aus nahezu versetzungsfreien Bereichen (Zellinneres), die von versetzungsreichen Wänden (Zellwänden) umgeben sind. Die Zellwände lassen sich in Wände mit zufälliger Versetzungsanordnung (*Incidental Dislocation Boundaries, IDB*) und Wände mit geometrisch notwendigen Versetzungen (*Geometrically Necessary Boundaries, GNB*) unterteilen [107, 126].¹² Die Netto-Rotationsachsen von

¹¹Die Materialien mit homogener Versetzungsstruktur (*non-cell forming materials*) weisen zwar auch Mechanismen auf, die zu einer Subkornbildung führen, diese unterscheiden sich in ihrer Ausprägung jedoch von versetzungszellbildenden Materialien [125].

¹²Ein Bereich, der von GNB umgeben ist, wird als GNB-Zelle bezeichnet; analog dazu wird ein Bereich, der von IDB umgeben ist, als IDB-Zelle bezeichnet. GNB-Zellen enthalten immer mehrere IDB-Zellen.

IDB sind zufällig verteilt, während die Netto-Rotationsachsen von GNB Vorzugsorientierungen aufweisen [127]. Benachbarte IDB haben bevorzugt eine entgegengesetzte Netto-Missorientierung [125, 128].

In [127] wurden TEM-Untersuchungen an kaltgewalztem Al durchgeführt und der mittlere Missorientierungswinkel $\langle \theta_{\text{IDB}} \rangle$ über IDB beziehungsweise $\langle \theta_{\text{GNB}} \rangle$ über GNB gemessen. Eine Erhöhung der von Mises-Dehnung von 0.06 auf 0.8 führte zu einer Veränderung in $\langle \theta_{\text{IDB}} \rangle$ von 0.5° auf 1.7° beziehungsweise in $\langle \theta_{\text{GNB}} \rangle$ von 1.3° auf 6.2° . Das impliziert, dass der mittlere Missorientierungswinkel mit der lokalen Versetzungsdichte und folglich mit der lokalen Verfestigung skaliert:

$$\langle \theta \rangle \uparrow \Leftrightarrow \rho \uparrow \quad (5.4)$$

In einem ähnlichen Experiment wurde die Zellgröße gemessen [107]. Die untersuchte von Mises-Dehnung reichte von 0.06 bis 0.41. Die IDB-Zellengröße sank dabei von $3 \mu\text{m}$ auf $1.2 \mu\text{m}$, die GNB-Zellengröße von $8.5 \mu\text{m}$ auf $2.5 \mu\text{m}$. Ähnliche Ergebnisse ergaben TEM-Untersuchungen von gewalzten Al-1%Mn-Einkristallen, dabei wurden Abwalzgrade von 18 % bis 90 % verwendet [129]. Das heißt:

$$\text{Zellgröße} \downarrow \Leftrightarrow \varepsilon_{\text{pl}} \uparrow \quad (5.5)$$

Diese Ergebnisse zeigen, dass die Winkelauflösung des verwendeten EBSD-Systems ausreicht, um die Orientierungsänderung über die Zellgrenzen hinweg zu messen. Die Ortsauflösung reicht bei geringen Verformungsgraden aus, um einzelne Zellen klar voneinander getrennt zu messen; bei höheren Verformungsgraden entspricht die Größe des Messpunkts in etwa der Größe einer IDB-Zelle, sodass die Messung aussehen sollte, als wäre sie von einem leichten Rauschen überlagert.

Bei der Charakterisierung von ganzen Zugproben kann aus Zeitgründen jedoch keine Messung mit der maximalen Ortsauflösung erfolgen; die Messpunkte werden deshalb mit höherem Abstand voneinander gesetzt. Es stellt sich somit die Frage, welche Missorientierung sich im statistischen Mittel ergibt, wenn bei einer zellulären Versetzungsstruktur die Orientierung zweier zufällig ausgewählter Zellen gemessen wird.

Die Orientierungsmessungen von zufällig ausgewählten Zellen liefere N Missorientierungswinkel θ_i zwischen benachbarten Messpunkten. Der

Mittelwert $\langle \theta \rangle = \sum_i \theta_i / N$ skaliert mit dem mittleren Missorientierungswinkel der Zellgrenzen ($\langle \theta_{\text{IDB}} \rangle$ beziehungsweise $\langle \theta_{\text{GNB}} \rangle$). Der Zusammenhang zwischen der Höhe der plastischen Verformung (beziehungsweise der Zellgröße) und $\langle \theta \rangle$ hängt davon ab, wie sich die Verteilungsfunktion der Missorientierungswinkel über IDB und GNB im Laufe der Verformung ändert. Nach einer Normalisierung auf $\langle \theta_{\text{IDB}} \rangle$ beziehungsweise $\langle \theta_{\text{GNB}} \rangle$ ist die Form der Verteilungsfunktion für viele Materialien nahezu gleich, und zwar sowohl bei kleinen als auch bei großen plastischen Dehnungen [127, 130].¹³ Deshalb kann davon ausgegangen werden, dass der gemessene Missorientierungswinkel primär auf $\langle \theta_{\text{IDB}} \rangle$ und $\langle \theta_{\text{GNB}} \rangle$ zurückzuführen ist. Es gibt keinen Grund zu der Annahme, eine Erhöhung von $\langle \theta_{\text{IDB}} \rangle$ oder $\langle \theta_{\text{GNB}} \rangle$ könnte zu einer Verringerung in $\langle \theta \rangle$ führen. Das heißt, dass in Bereichen, über die große Missorientierungswinkel θ_i gemessen wurden, im Mittel hohe lokale Versetzungsdichten vorliegen.

In [109] wurde der mittlere Missorientierungswinkel $\langle \theta \rangle$ ermittelt, indem die Missorientierungen θ_i zwischen 10 Punkten nahe der Korngrenze bezüglich eines Punktes in der Kornmitte gemessen wurde. Der ferritische Stahl 2.25%Cr-1%Mo wurde unter verschiedenen Lastbedingungen und nach verschiedenen plastischen Dehnungen untersucht. Es ergab sich ein linearer Zusammenhang zwischen $\langle \theta \rangle$ und der makroskopischen plastischen Dehnung $\varepsilon_{\text{pl,macro}}$. In einem Fall (Raumtemperatur, Zugversuch) wies das Material eine homogene Versetzungsverteilung auf. Das Ergebnis war konsistent mit den Ergebnissen, die bei Vorliegen einer zellulären Versetzungsstruktur (erhöhte Temperatur) erzielt wurden. Ein ferritischer Stahl mit sehr niedrigem Kohlenstoffgehalt wurde in [132] untersucht. Im Zugversuch wurden Dehnungen bis 10 % aufgebracht. Auch hier zeigte sich ein linearer Zusammenhang zwischen θ_{Avg} und $\varepsilon_{\text{pl,macro}}$. Das deutet darauf hin, dass der Einfluss der plastischen Verformung auf die gemessenen Missorientierungen bei homogener Versetzungsstruktur konsistent ist mit den Ergebnissen bei zellulären Versetzungsstrukturen.

Versetzungen können eine Probe an der Oberfläche verlassen oder einander annihilieren. Im Extremfall eines Einkristalls passiert es zu Beginn der plastischen Verformung, dass trotz makroskopischer plastischer Dehnung kaum Verfestigung erfolgt. In der Regel ist die Verfestigungsrate nicht

¹³Ein Vergleich erbrachte ferner, dass sowohl $\langle \theta_{\text{IDB}} \rangle$ als auch $\langle \theta_{\text{GNB}} \rangle$ vergleichbare Verteilungsdichten aufweisen, deren Form am besten mit einer Rayleigh-Verteilung angenähert werden kann [131].

konstant. Auch wenn das an der generellen Aussage von Gl. (5.3) kaum etwas ändern dürfte – ein perfekter linearer Zusammenhang zwischen ρ und ε_{pl} wäre nicht zu erwarten (siehe hierzu auch die Messergebnisse in Kapitel 7.3).

5.6.2. Durchführung

Die gängigen EBSD-Systeme bieten mehrere Möglichkeiten der Messpunkteanordnung:

- **hexagonal:** Die Messpunkte jeder zweiten Zeile sind versetzt, sodass sich ein hexagonales Raster ergibt.
- **quadratisch:** Die Messpunkte sind horizontal und vertikal ausgerichtet. Zeilen- und Spaltenabstand sind gleich, sodass sich ein quadratisches Raster ergibt.
- **angepasst:** Die Messpunktedichte kann entweder vom Benutzer lokal unterschiedlich gewählt werden oder wird vom EBSD-System automatisch gewählt. Im letzteren Fall wird der Messpunkteabstand in der Nähe von Korngrenzen verringert, um den Korngrenzenverlauf möglichst genau abzubilden.

Die quadratische Messpunkteanordnung ist für die nachfolgende Darstellung und Auswertung am einfachsten zu handhaben, weshalb sie bevorzugt zum Einsatz kommt. Bei hexagonaler Anordnung ist eine geeignete Konvertierung in eine quadratische Messpunkteanordnung vorteilhaft. Die angepasste Anordnung mit variablem Messpunkteabstand wird nicht verwendet, da sie bei der Auswertung zusätzliche Probleme bereitet (näheres hierzu nachfolgend in Kapitel 5.6.3).

5.6.3. Auswertung

Für jeden Punkt der EBSD-Messung wird der nächste Messpunkt in positiver x-Richtung ermittelt. Aus dem Orientierungsunterschied zwischen beiden Messpunkten werden der Missorientierungswinkel $\Delta\theta'_x$ und die zugehörige Rotationsachse $\Delta\vec{\theta}'_x$ berechnet (siehe Anhang C). Analog dazu werden $\Delta\theta'_y$

und $\Delta\vec{\theta}'_y$ anhand der Orientierung des nächsten Messpunktes in positiver y-Richtung berechnet. Generell gilt $\Delta\theta' \in [0; \pi]$.

Es gibt nun prinzipiell viele Möglichkeiten, den Orientierungsgradienten $\Delta\theta$ zu definieren. Da die quantitative Betrachtung von Orientierungsgradienten noch neu ist, kann gegenwärtig noch nicht abgesehen werden, welche Definition am zweckmäßigsten ist. Unter Umständen sind je nach Anwendungsfall auch verschiedene Definitionen sinnvoll. Im Folgenden werden deshalb einige einfache Möglichkeiten aufgezeigt, die auf der Auswertung der Missorientierungswinkel basieren.

Hier wird der Orientierungsgradient $\Delta\theta$ definiert als eine Norm der Form

$$\Delta\theta_i := \left(\sum_j \left(\Delta\theta'_j \right)^i \right)^{1/i} \quad (5.6)$$

In dieser Arbeit verwendete Normen sind 1, 2 und ∞ :

$$\Delta\theta_1 = \sum_j \Delta\theta'_j = \Delta\theta'_x + \Delta\theta'_y \quad (5.7)$$

$$\Delta\theta_2 = \sqrt{\sum_j \left(\Delta\theta'_j \right)^2} = \sqrt{\left(\Delta\theta'_x \right)^2 + \left(\Delta\theta'_y \right)^2} \quad (5.8)$$

$$\Delta\theta_\infty = \max \left(\Delta\theta'_j \right) = \max \left(\Delta\theta'_x, \Delta\theta'_y \right) \quad (5.9)$$

Alternativ kann auch ein arithmetischer Mittelwert verwendet werden:

$$\Delta\theta_{\text{Avg}} = \frac{1}{N} \sum_j \Delta\theta'_j = \frac{\Delta\theta'_x + \Delta\theta'_y}{2} \quad (5.10)$$

Hierbei ist N die Anzahl der Missorientierungswinkel. Bei einer quadratischen Anordnung wäre es beispielsweise denkbar, noch einen dritten Missorientierungswinkel $\Delta\theta'_{xy}$ zu betrachten, der anhand des nächsten Messpunktes in der Diagonalen berechnet wird.

Die statistische Missorientierung zwischen benachbarten Messpunkten wird auch vom Abstand der Messpunkte beeinflusst [84, 126, 133]. Ein direkter Vergleich von OGM-Messungen ist deshalb nur dann möglich, wenn alle Messungen den gleichen Messpunkteabstand verwenden. Als erster Ansatz

könnte anstelle von $\Delta\theta'_x$, $\Delta\theta'_y$ und $\Delta\theta'_{xy}$ ein abstandsbezogener Orientierungsgradient $\Delta\theta_{\text{rel}}$ berechnet werden, indem die auf die Messpunkteabstände Δx und Δy bezogenen Missorientierungswinkel verwendet werden [84]:

$$\Delta\theta'_{\text{rel},x} = \frac{\Delta\theta'_x}{\Delta x} \quad (5.11)$$

$$\Delta\theta'_{\text{rel},y} = \frac{\Delta\theta'_y}{\Delta y} \quad (5.12)$$

$$\Delta\theta'_{\text{rel},xy} = \frac{\Delta\theta'_{xy}}{\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}} \quad (5.13)$$

Die Betrachtung abstandsbezogener Orientierungsgradienten setzt voraus, dass sich alle zwischen zwei Messpunkten existierenden Orientierungsänderungen aufaddieren. Dies könnte unter Umständen vielleicht für GNB angenommen werden. Benachbarte IDB bewirken jedoch bevorzugt eine entgegengesetzte Orientierungsänderung. Eine Untersuchung ergab, dass der mittlere Missorientierungswinkel mit zunehmendem Messpunkteabstand ein Sättigungsverhalten zeigt [125, 126].

Die Frage, wie OGM-Messungen mit unterschiedlichem Messpunkteabstand quantitativ miteinander verglichen werden können, kann derzeit nicht eindeutig beantwortet werden. Aus diesem Grund werden in der vorliegenden Arbeit OGM-Messungen nur dann quantitativ gegenübergestellt, wenn der Messpunkteabstand vergleichbar ist.

5.6.4. Abgrenzung zu verwandten Verfahren

Die Betrachtung von Orientierungsänderungen und lokalen Missorientierungen aufgrund plastischer Verformung ist vielerorts in der Literatur zu finden. Um die Unterschiede zwischen OGM und den bisherigen Verfahren zu verdeutlichen, werden diese im Folgenden näher erläutert.

Eine der ersten Vorgehensweisen bestand darin, die Änderung der Textur aufgrund der Verformung zu ermitteln. Die lokalen Orientierungen werden dabei über das ganze Probenvolumen gemittelt erfasst. Eine gängige Vorgehensweise der Modellierung bestand im Grundprinzip darin, die aktiven Gleitsysteme und deren Abgleitung für jede in der Ausgangsprobe vorliegende Orientierung anhand der globalen plastischen Dehnung $\varepsilon_{\text{pl,macro}}$ und

des Taylor-Faktors zu ermitteln (Anhang E). Die daraus für jede Ursprungsorientierung abgeleitete Kristallgitterdrehung wurde verwendet, um die Texturänderung zu modellieren. Eine Vielzahl von Untersuchungen zeigte, dass es mit dieser Vorgehensweise zwar möglich ist, in der Simulation die Tendenz der Orientierungsänderung einer großen Gruppe von Körnern zu berechnen, dass aber bei der gezielten Betrachtung einzelner Körner die Simulationsergebnisse meist falsch sind (siehe zum Beispiel [122, 134]).¹⁴

In einer detaillierteren Variante wird bei der Texturmessung die Verbreiterung einzelner Beugungsreflexe betrachtet. Jedes unverformte Korn liefert bei einer Texturmessung einen Punkt im Orientierungsraum. Kommt es aufgrund plastischer Verformung im Korn zu lokalen Orientierungsänderungen, verbreitert sich der Punkt (*orientation spread*). Die Betrachtung mittelt nun nicht mehr über das gesamte Probenvolumen, sondern über einzelne Körner, wobei die Position der Körner in der Probe nicht betrachtet wird.

Später wurden Orientierungsmessungen an einzelnen Körnern durchgeführt. In [109] wurden die Missorientierungen zwischen 10 Punkten nahe der Korngrenze bezüglich eines Punktes in der Kornmitte gemessen. Vom Prinzip her vergleichbar, wenn auch mit mehr Messpunkten, wurde in [84, 132] eine mittlere Missorientierung pro Korn bestimmt: Für jeden Punkt der EBSD-Messung wurde die Missorientierung zur mittleren Kornorientierung berechnet. Aus allen Missorientierungen wurde der Mittelwert gebildet. Hier ist nun zusätzlich die Position des Kornes in der Probe bekannt.

Eine genauere Information über den Ort von Orientierungsgradienten kann anhand von Messungen entlang einer Linie (*linescans*) und dem Berechnen des Missorientierungswinkels benachbarter Messpunkte erhalten werden [81, 84, 133, 135–137]. Abgesehen davon, dass das Verfahren nur die Orientierungsänderungen entlang einer Linie misst, birgt es auch ein Problem: Die erhaltenen Missorientierungen hängen von der Richtung der Messlinie ab [126].

In den ersten Arbeiten mit einer lokalen, flächigen Darstellung der Gitterrotationen wird der Missorientierungswinkel zwischen lokaler Orientierung und der ursprünglichen mittleren [110, 138] beziehungsweise aktuellen mitt-

¹⁴Auch hier bestätigt sich wieder, dass selbst die in mehreren Versuchen verifizierte Übereinstimmung einer über die ganze Probe gemittelten Eigenschaft in Simulation und Experiment kein Garant dafür ist, dass auch lokal Übereinstimmung herrscht. Eine solche Vorgehensweise ist also nicht geeignet, um die lokale Korrektheit eines Modells zu belegen.

leren [84, 137, 139] Kornorientierung aufgetragen. Diese Art der Darstellung scheint nur auf den ersten Blick vergleichbar mit dem OGM, denn die lokale Mikrostruktur äußert sich *nicht* als Änderung der lokalen Orientierung in Bezug auf irgendeine Referenzorientierung. Die Verwendung der ursprünglichen mittleren Kornorientierung als Referenz hat den Nachteil, dass beim Aus- und Wiedereinbauen der Probe Verkippungen auftreten können, die zu Artefakten führen; Starrkörperrotationen des Kornes werden als lokale Orientierungsänderungen fehlgedeutet. Die Darstellung anhand der aktuellen mittleren Orientierung umgeht diese Probleme zwar, ist aber sehr missverständlich und uneindeutig, wie folgendes Beispiel zeigt: Angenommen, eine Subkorngrenze, die entlang der y-Achse verläuft und eine Gitterrotation R_α um den Winkel α bewirkt, bewege sich entlang der x-Achse durch ein rechteckiges Korn mit der Ausgangsorientierung R_0 ; die aktuelle x-Position der Subkorngrenze sei x . Das Korn habe entlang der x-Achse die Ausdehnung L_x . Die aktuelle mittlere Kornorientierung $\langle R \rangle$ kann dann für kleine α genähert werden mit

$$\begin{aligned}\langle R \rangle &= \left(1 - \frac{x}{L_x}\right) R_0 + \frac{x}{L_x} R_\alpha R_0 \\ &= \left(\left(1 - \frac{x}{L_x}\right) I + \frac{x}{L_x} R_\alpha \right) R_0\end{aligned}\tag{5.14}$$

hierbei bezeichnet I die Einheitsmatrix. In Bezug auf die aktuelle mittlere Kornorientierung ergibt sich linksseits der Subkorngrenze die Missorientierung

$$\begin{aligned}\theta_{\text{links}} &= \langle R \rangle R_{\text{links}}^T \\ &= \langle R \rangle (R_\alpha R_0)^T \\ &= \langle R \rangle R_0^T R_\alpha^T \\ &= \left(\left(1 - \frac{x}{L_x}\right) I + \frac{x}{L_x} R_\alpha \right) R_\alpha^T \\ &= \left(1 - \frac{x}{L_x}\right) R_\alpha^T + \frac{x}{L_x} I\end{aligned}\tag{5.15}$$

Analog dazu gilt rechtsseits der Subkorngrenze

$$\begin{aligned}
 \theta_{\text{rechts}} &= \langle \mathbf{R} \rangle \mathbf{R}_{\text{rechts}}^T \\
 &= \langle \mathbf{R} \rangle \mathbf{R}_0^T \\
 &= \left(1 - \frac{x}{L_x} \right) \mathbf{I} + \frac{x}{L_x} \mathbf{R}_\alpha
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

Auch ohne konkretes Ausrechnen der Missorientierungswinkel θ_{links} und θ_{rechts} ist klar, dass diese nicht konstant sind, sondern von der Lage der Subkorngrenze abhängen. Die Farbgebung in der Darstellung des Korns hängt somit von der Lage der Korngrenze ab. Schlimmer noch: für $x = L_x/2$ folgt wegen $\theta \in [0; \pi]$

$$\theta_{\text{links}} = \theta_{\text{rechts}} \tag{5.17}$$

und die Subkorngrenze ist überhaupt nicht mehr sichtbar. Auch die in [84] gewählte differentielle Darstellung hat wegen $\Delta\theta = \theta_{\text{rechts}} - \theta_{\text{links}} = 0$ dieses Problem. Die lokal erfasste Missorientierung hängt also von ihrer Lage und den Orientierungen an anderen Stellen des Kernes ab. Sie wird demnach unterschiedlich und im Extremfall gar nicht erfasst. Die prinzipiellen Strukturen können in den meisten Fällen qualitativ sichtbar gemacht werden, für eine lokale quantitative Auswertung erscheint diese Vorgehensweise jedoch nicht geeignet.

Das OGM ist daher das einzige Verfahren, welches eine eindeutige, quantitative Charakterisierung der Probenoberfläche im Hinblick auf lokale Missorientierungen erlaubt: Die Messung an einem Ort ist unabhängig von der Lage des Ortes in der Probe und unabhängig von Messungen an anderen Stellen des Kernes. Es ist somit ganz klar ersichtlich, wo welche Missorientierungen vorliegen. Anhand der Orientierungsänderung über eine einzelne Versetzungszellwand kann auf die darin enthaltenen Versetzungen geschlossen werden [140]. Es ist anzunehmen, dass auch das OGM diese Möglichkeit bietet, sodass mit diesem Verfahren die lokalen Gleitsystemaktivitäten quantitativ ausgewertet werden können.

6. Experimenteller Aufbau und Probenpräparation

6.1. Materialwahl

6.1.1. Anforderungsprofil

Der Einfluss der Relation Korngröße : Probengröße auf die Fließspannung soll mit eindeutiger Identifizierbarkeit der Ursache möglichst gezielt untersucht werden. Das bedeutet im Einzelnen:

Die Korngröße sollte in weiten Bereichen skalierbar sein. Andere Materialparameter, wie Textur, Kornform und Korngrößenverteilung, sollten dabei möglichst wenig beeinflusst werden. Die Skalierung sollte keine Veränderung der Verformungsmechanismen bewirken: kommt es bei der Glühbehandlung zum Beispiel zu Korngrenzenseigerungen, kann Korngrenzensprödigkeit folgen. Unter Umständen wird dann der Wechsel des Verformungsmechanismus irrtümlich für einen Größeneffekt gehalten. Eine Glühbehandlung darf auch nicht die lokale chemische Zusammensetzung verändern: ein mögliches Problem stellt das Abdampfen von Materialbestandteilen mit niedrigem Dampfdruck dar, wie beispielsweise eine lokale Zn-Verarmung an der Oberfläche von Messing-Legierungen.

Das Material sollte eine einfache Mikrostruktur aufweisen. Umso komplexer eine Mikrostruktur ist, desto mehr Eigenschaften sind zu berücksichtigen. Dazu zählen zum Beispiel Eigenschaften von unterschiedlichen Phasen und von Phasengrenzflächen. In einem einphasigen Material kann ein dendritisches Gefüge vorliegen, welches aufgrund der Änderungen in der chemischen Zusammensetzung lokal unterschiedliche Eigenschaften aufweist. Ähnliche Probleme ergeben sich bei einer lokal unterschiedlichen Textur oder lokal unterschiedlichen Verfestigungszuständen.

Bei der Skalierung der Korngröße sollen außer der Korngröße möglichst alle Gefügeparameter konstant bleiben. Liegen viele Gefügeparameter vor, so ist die Suche nach einer Prozedur zum gezielten Einstellen der Korngröße sehr aufwändig; gleiches gilt für die jedesmal notwendige vollständige Charakterisierung der Proben, um die Gefügeparameter zu überprüfen. Sofern überhaupt eine Möglichkeit zur gezielten Skalierung der Korngröße gefunden werden kann, ist davon auszugehen, dass die nötige Vorgehensweise selbst wieder sehr aufwändig ist, und dass sie (wegen der erforderlichen Reproduzierbarkeit) eine sehr exakte Prozessführung voraussetzt.

Um die lokalen Verformungsprozesse richtig verstehen und modellieren zu können, müssen neben den lokalen Gefügeparametern aber auch die Eigenschaften der einzelnen Gefügebestandteile bekannt sein. Beides ist häufig nicht oder nur unter sehr großem Aufwand messbar. Es gibt demnach viele Unbekannte, viele Fitkonstanten.

Die Schwierigkeit der eindeutigen Ursachenfindung hängt auch mit der Komplexität der zugrundeliegenden Verformungsmechanismen zusammen. Der einfachste Fall ist Versetzungsgleiten auf klar identifizierbaren Gleitsystemen. Als Materialparameter müssen dann für den Beginn der plastischen Verformung nur noch die kritischen Schubspannungen berücksichtigt werden; diese können prinzipiell direkt gemessen werden. Aber selbst in dieser einfachen Situation sind Fitkonstanten nötig, sobald Verfestigung modelliert werden soll. In vielen Modellen wird ein empirisches, makroskopisch verifiziertes Verfestigungsgesetz verwendet, wie in Gl. (3.13):

$$\tau_y \approx \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (6.1)$$

Ein Problem ist hierbei die Ermittlung der Versetzungsdichte ρ . Jedes Gleitsystem i hat seine eigene Schubspannung $\tau_{y,i}$. Versetzungen des Gleitsystems i haben auf $\tau_{y,i}$ eine andere Wirkung als Versetzungen eines anderen Gleitsystems j . Das heißt, dass die „effektive Versetzungsdichte“ $\rho_{\text{eff},i}$ für jedes Gleitsystem unterschiedliche Werte annimmt [141, 142]. Die Gleichung wird damit zu

$$\tau_{y,i} \approx \alpha \mu b \sqrt{\rho_{\text{eff},i}} \quad (6.2)$$

mit

$$\rho_{\text{eff},i} = \sum_j H_{ij} \rho_j \quad (6.3)$$

Hierbei ist ρ_j die Versetzungsdichte auf dem Gleitsystem j .¹ Unter der Annahme $H_{ij} = H_{ji}$ bleiben bei 12 Gleitsystemen (das entspricht dem einfachsten Fall) „nur“ noch 78 Unbekannte. Bei 48 Gleitsystemen, wie in krz-Metallen maximal möglich, sind es 1176. Das Verfestigungsgesetz nach Taylor gilt vermutlich nur im globalen Mittel, und genau genommen sind die H_{ij} keine Konstanten, sondern es gilt im ungünstigsten Fall $H_{ij}(\rho_1, \dots, \rho_N)$. Hier endet zum gegenwärtigen Stand auch jede Möglichkeit einer lokalen experimentellen Verifikation.² Bei so vielen Fitkonstanten und Fitfunktionen gibt es nahezu endlos viele Möglichkeiten, ein experimentell gemessenes Verhalten nachzubilden. In der Literatur wird häufig vereinfachend angenommen:

$$H_{ij} = H\delta_{ij} \quad (6.4)$$

Es gibt dann nur noch eine Fitkonstante H . Damit wird die Mathematik zwar ein gutes Stück handlicher, ob sie damit aber auch realitätsnah ist, bleibt eine offene Frage.

Selbst bei der Betrachtung des einfachsten Falls kommt es also mit Eintreten der Verfestigung zu Problemen. Bei anderen Verformungsmechanismen, wie Quergleiten/Versetzungsklettern und Zwillingsbildung, sieht es im Prinzip ähnlich aus. Insbesondere kommt noch hinzu, dass die verschiedenen Mechanismen schon zu Beginn der plastischen Verformung miteinander wechselwirken.

Bei all diesen Unwägbarkeiten ist also auf ein Material zurückzugreifen, dessen grundlegende Eigenschaften möglichst vollständig bekannt sind.

6.1.2. Eigenschaften von Fe-3%Si

Die Wahl des Materials ist auf die Legierung Fe-3%Si gefallen. In der Literatur sind Legierungen diesen Typs mit leichten Variationen im Si-Gehalt

¹In der Kristallplastizität wird in ähnlicher Bedeutung zur Modellierung des Abgleitwiderstandes eines Gleitsystems die Verfestigungsraten-Matrix h_{ij} verwendet, siehe zum Beispiel [143, 144].

²Eigentlich handelt es sich hier um ein Homogenisierungsproblem: Die Wirkungen einzelner Versetzungen aufeinander müssen kompakt zusammengefasst werden. Ein Ausweg dürfte also darin bestehen, mit Hilfe dreidimensionaler Versetzungssimulationen die Versetzungswechselwirkungsmatrix $\mathbf{H}$ zu untersuchen. Die dreidimensionale Versetzungssimulation kann prinzipiell mittels TEM-Messungen lokal experimentell verifiziert werden. Die Anzahl der für die Simulation benötigten Kennwerte ist überschaubar, und die Werte sind auch messbar oder mit Hilfe von First-Principle-Simulationen sinnvoll eingrenzbar. Allein die für diese Simulationen nötige Rechenzeit setzt dem heute noch Grenzen.

häufig Gegenstand von Untersuchungen, und wichtige Materialkennwerte sind bekannt (siehe zum Beispiel [145–147]). Auch eine nominell gleich bezeichnete Legierung kann sich jedoch im Detail unterscheiden. Die Übertragbarkeit der Ergebnisse ähnlicher Legierungen auf die verwendete ist zwar tendentiell möglich, bedarf aber grundsätzlich der Überprüfung, sofern es auf exakte Werte ankommt.

Gefüge

Das Gefüge der verwendeten Legierung ist bei Raumtemperatur einphasig und nicht dendritisch. Die Legierung ist krz, es liegen keine Zwillinge vor. Da auch bis zum Schmelzpunkt keine Phasenumwandlung erfolgt [148], kann die Korngröße durch einfache Glühbehandlung eingestellt werden. Die Körner haben dabei selbst im Falle einer zweidimensionalen Kornstruktur eine gleichachsige Form; bei ausreichend hoher Heizrate unterbleibt das anormale Wachstum von Körnern mit Goss-Orientierung [149], sodass die Korngrößenverteilung mit Hilfe der Lognormal-Verteilung beschrieben werden kann. Bei einer zweidimensionalen Kornstruktur sind die Korngrenzen nahezu senkrecht zur Oberfläche [114]. Häufig endet das Kornwachstum, wenn die Korngröße in den Bereich der Blechdicke kommt [150]. Bei der verwendeten Legierung wurde zwar eine Verlangsamung des Kornwachstums festgestellt, aber selbst bei 0.3 mm dicken Blechen konnten durch Glühung Korngrößen von 3 mm und mehr erreicht werden. Die Körner wiesen dabei meist eine sehr gleichmäßige Form und Größenverteilung auf. Die Textur ist bei gewalzten Blechen über die Blechdicke unter Umständen inhomogen. Mit steigender Glühtemperatur wird diese Inhomogenität durch Rekristallisation zunehmend abgebaut, sodass bei Glühtemperaturen ab 750°C keine signifikanten Texturunterschiede mehr erkennbar sind [151]. Dies wurde auch anhand eigener EBSD-Messungen an Querschliffen geglühter Bleche verifiziert.

Makroskopische Plastizität

Wegen des Si-Gehaltes ist die Seigerung von S an den Korngrenzen stark gehemmt, sodass selbst im grobkörnigen Gefüge ein transgranularer Bruch

vorliegt [152].³ Untersuchungen haben ferner gezeigt, dass durch Glühung keine Seigerung des Si an der Probenoberfläche stattfindet [153].

In Abhängigkeit vom C-Gehalt kann es je nach Glühtemperatur und Abkühlgeschwindigkeit zur Bildung von Ausscheidungen (μ -Karbide) kommen. Dies beeinflusst die Härte, wie beispielsweise im Falle von Fe-6%Si mit 200 ppm C [146]. Die in dieser Arbeit verwendete Legierung hat einen niedrigen C-Gehalt von deutlich weniger als 50 ppm; Einflüsse auf die Härte aufgrund von Ausscheidungsbildung sind entsprechend gering. Um dennoch sicherzugehen, werden Glühtemperatur und Abkühlzeiten bei allen Proben möglichst gleich gewählt.

Wegen der elastischen Anisotropie sind die Spannungen bei Belastung an den Korngrenzen deutlich höher als im Korninnern. Deshalb kommt es bereits vor dem Erreichen der globalen Fließspannung zu plastischer Mikrodehnung [35, 154]. Inwiefern die elastische Anisotropie auch bei der Modellierung der verwendeten Legierung zu berücksichtigen ist, wird im Experiment geprüft.

Wie viele andere krz-Legierungen sind auch bei Fe-3%Si Fließspannung und Verfestigung dehnraten- und temperaturabhängig [155, 156]. Die Zugversuche werden deshalb alle quasistatisch und bei gleicher Temperatur durchgeführt.

Gleitsystemaktivität

Allgemein gilt für krz-Systeme, dass je nach Material, Temperatur und Verformungsbedingungen die drei Gleitsystemklassen $\{110\}\langle 111 \rangle$, $\{112\}\langle 111 \rangle$ und $\{123\}\langle 111 \rangle$ zur Verfügung stehen. Stellenweise ist auch $\{hkl\}\langle 111 \rangle$ (*Pencil Glide*) möglich. Generell treten $\{123\}\langle 111 \rangle$ und $\{hkl\}\langle 111 \rangle$ insbesondere bei hohen Temperaturen und niedrigen Umformgeschwindigkeiten auf [48].

Da die $\{112\}$ -Ebene im krz-Gitter keine Spiegelebene ist, hängt die kritische Schubspannung vom Vorzeichen ab (*Twinning*- und *Antitwinning*-Richtung [157], sogenannte *non-Schmid-Effekte* [60]). Das führt dazu, dass bei aktiver $\{112\}$ -Gleitung die Gleitebenen auf der Zugseite von Biegeproben anders verlaufen als auf deren Druckseite. Da Experimente bei Raumtemperatur auf Ober- und Unterseite von Fe-3%Si-Proben gleich verlaufende

³Im Gegensatz beispielsweise zu X6Cr17, welcher feinkörnig zwar transkristallin bricht, nach Grobkornglühung jedoch die Tendenz zum interkristallinen Bruch zeigt.

Gleitlinien zeigen [158], kann eine reine {110}-Verformung vermutet werden. Erst bei Temperaturen oberhalb der Raumtemperatur wird {112}-Gleitung gefunden. Die Gleitebenen sind jedoch auch bei Raumtemperatur häufig gekrümmt [159], wobei die Krümmung der Ebenen der maximalen wirkenden Schubspannung folgt. Dies ist aber eigentlich typisch für {hkl}-Gleitung und kann auf eine Aktivität der {112}-Systeme hindeuten [93].

Es lässt sich für die kritischen Schubspannungen festhalten, dass

$$\tau_{\{110\}} < \tau_{\{112\}, \text{Twinning}} < \tau_{\{112\}, \text{Antitwinning}} \quad (6.5)$$

Dies legt zumindest eine Bevorzugung von {110}-Gleitung nahe. Bei weniger als 5 at% Si ist der Unterschied zwischen den kritischen Schubspannungen jedoch gering [160, 161]. Aber bereits kleine Unterschiede in $\tau_{\{110\}}$ und $\tau_{\{112\}}$ können dazu führen, dass {112}-Gleitung zum Erliegen kommt. So zeigten Untersuchungen an Fe-2.9%Si-Einkristallen, dass bei gezielter Aktivierung eines {112}-Systems eine um 15 % höhere kritische Schubspannung gemessen wurde, als für {110}-Gleitung. Eine genauere Betrachtung ergab, dass exakt bei diesem Wert in den benachbarten {110}-Ebenen die kritische Schubspannung $\tau_{\{110\}}$ erreicht wurde – möglicherweise erfolgte also nur eine scheinbare Aktivierung des {112}-Gleitsystems.

Die Frage, welche Gleitsysteme in der vorliegenden Legierung aktiv sind, ist ohne Weiteres anhand der Literatur nicht eindeutig zu klären. Aus diesem Grund sind vorab Experimente zur Klärung dieser Frage nötig (siehe Kapitel 7.2).

Versetzungsmechanismen

In reinen krz-Metallen verlieren Schraubenversetzungen mit sinkender Temperatur ihre Beweglichkeit, während Stufenversetzungen mobil bleiben. Das lokale Verhalten ist somit stark temperaturabhängig. Bei Fe-3%Si verändert sich die Differenz der Mobilität jedoch nicht merklich [162]. Wird die Bewegung von Versetzungen auf einem Weg ohne Hindernisse betrachtet (*free flight velocity*), so sind Stufenversetzungen bei einer bestimmten anliegenden Spannung stets signifikant schneller als Schraubenversetzungen: die Bewegung der Stufenversetzungen beginnt bereits bei der Hälfte der makroskopischen Fließspannung [4]. Die Unbeweglichkeit der Schraubenversetzungen ist primär darauf zurückzuführen, dass diese aufspalten [163]. Theoretische

Betrachtungen zeigen jedoch, dass die mittlere effektive Geschwindigkeit (= inklusive der Überwindung von Hindernissen) einer Gruppe von Versetzungen für Stufen- und Schraubenversetzungen nahezu gleich ist [147]. Die Verweildauer an Hindernissen beträgt ein Vielfaches der Zeit, in der sich die Versetzungen frei bewegen können.

Bis zu diesem Punkt kann ausgehend von einer weichgeglühten (= nahezu frei von mobilen Versetzungen und wenige Versetzungsquellen) Probe festgehalten werden: Vor Erreichen der makroskopischen Fließspannung sind bereits Stufenversetzungen aktiviert worden und haben entweder die Probe an der Oberfläche verlassen oder wurden an Hindernissen gestoppt [35]. Da es in diesem Stadium außer Korngrenzen kaum Hindernisse gibt, bewegen sich die Stufenversetzungen über weite Strecken ungebremst. Im Material liegen danach lange Schraubensegmente vor, die aufgrund ihrer höheren Aktivierungsspannung um die Versetzungsquellen dicht gedrängt sind und diese zum Erliegen bringen. Des Weiteren liegen kurze Stufensegmente vor, die vor Hindernissen Pile-ups bilden und sich deshalb nicht weiter bewegen können. Die Verformung am makroskopischen Fließpunkt wird demzufolge fast ausnahmslos von Schraubenversetzungen getragen.

Die Aufspaltung der Schraubenversetzungen erschwert Quergleiten zwar, verhindert es aber nicht. Das liegt daran, dass es zu einer Transformation des Versetzungskerns in eine quergleitfähige Modifikation kommen kann [163]. Die zu Beginn der plastischen Verformung vorhandenen Gleitbänder wachsen in die Breite, indem die Schraubenversetzungen quergleiten und dabei auf parallelen Gleitebenen als neue Frank-Read-Quellen wirken [164]. In Fe-3%Si wurden Jogs in $\{110\}\langle 111 \rangle$ -Schraubenversetzungen beobachtet, Quergleiten wurde selbst unter Abwesenheit von Hindernissen beziehungsweise Versetzungen auf parallelen Gleitebenen gefunden. Dies ist ein Indiz dafür, dass die Schraubenversetzungen in Fe-3%Si nicht sehr weit aufspalten: Ist die Ebene maximaler Schubspannung nicht perfekt identisch mit der Gleitebene, so quergleiten die Versetzungen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit senkrecht zur Gleitebene [165]. Diese Wahrscheinlichkeit hängt dabei von der Abweichung zwischen Gleitebene und Ebene der maximalen Schubspannung ab, mithin also vom Anteil der Schubspannung senkrecht zur Gleitebene. Das heißt andererseits aber auch, dass damit prinzipiell $\{hkl\}$ -Gleitung möglich ist und auch $\{112\}$ - sowie $\{123\}$ -Gleitung auf eine Kombination von $\{110\}$ -Gleitsystemen zurückgeführt werden können.

Im Endeffekt bedeutet das für die vorliegende Arbeit: Da der Beginn der makroskopischen plastischen Verformung betrachtet wird, sollte die anfängliche Bewegung der Stufenversetzungen vernachlässigbar sein. Diese kommt schnell zum Erliegen, die dadurch erbrachte plastische Dehnung ist gering. Sie kann tendenziell zu einer Vorauswahl von Gleitsystemen führen, da die erzeugten Schraubenversetzungen im Hinblick auf ihren Burgers-Vektor festgelegt sind. Die Stufenversetzungen werden aber weit unterhalb des makroskopischen Fließpunktes aktiviert. Es ist deshalb davon auszugehen, dass bis zum Fließpunkt auch Stufenversetzungen mit ungünstigem Burgers-Vektor wandern. Es werden somit nicht nur Schraubenversetzungen mit idealem Burgers-Vektor erzeugt. Wegen der Quergleitfähigkeit der Schraubenversetzungen ist die ursprüngliche Gleitebene zwar ihre bevorzugte Gleitebene, sie sind jedoch nicht in jedem Fall daran gebunden. Bei Betrachtung des makroskopischen Fließpunkts kann also die vorhergehende mikroplastische Aktivität der Stufenversetzungen in erster Näherung vernachlässigt werden: Bei Beginn der makroskopischen plastischen Verformung liegt demnach eine Probe vor, die in jedem repräsentativen Volumenelement zu jedem Burgers-Vektor und zu jeder Gleitebene passende Schraubenversetzungen beinhaltet.

Obere und untere Streckgrenze

Fe-Si-Legierungen können je nach Korngröße eine obere und untere Streckgrenze aufweisen. Als Ursache hierfür kommen nach [166,167] in Betracht:

- **Cottrell-Wolken:** (Insbesondere für α -Fe mit Kohlenstoff): Interstitiell gelöste Atome lagern sich in den Versetzungskernen an und blockieren die Bewegung der Versetzungen. Diese müssen zuerst losgerissen werden, was zu einer scharfen oberen Streckgrenze führt. Eine alternative Erklärung ist die Bildung von Karbid-Ausscheidungen im Versetzungskern. Obere und untere Streckgrenze verschieben sich zu höheren Spannungswerten und die Differenz zwischen beiden Werten nimmt zu, wenn die Korngröße sinkt [168].
- **Teilplastizität:** Im Bereich der plastischen Mikrodehnung ist nur ein Teil der Körner plastisch. Somit ist die Dehnung von einem kleinen Teil

der Probe zu tragen, sodass lokal eine erhöhte Dehnrates vorliegt, welche zu einer Spannungsüberhöhung führt. Das Maximum ist erreicht, wenn diese erste Plastizität an die Korngrenzen stößt. Es folgt, dass die Ausprägung der oberen und unteren Streckgrenze mit zunehmender Korngröße abnimmt [169, 170].

- **Versetzungsmangel:** Sind wenige mobile Versetzungen vorhanden, so müssen diese schnell gleiten, um die geforderte Gesamtabgleitung zu bewerkstelligen. Bei einer ausgeprägten Abhängigkeit der Versetzungsgeschwindigkeit von der kritischen Schubspannung ist somit zu Beginn der Verformung eine höhere Fließspannung nötig. Durch Versetzungsmultiplikation sinkt die Spannung zunächst, weil die Gleitgeschwindigkeit pro Versetzung sinkt und der dadurch bewirkte Abfall in der kritischen Schubspannung den Anstieg aufgrund von Verfestigung zunächst noch dominiert. In [167] wurde dieser Effekt an Silizium bei 1093 K bereits bei Dehnraten von $4.6 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ beobachtet.
- **Versetzungskerntransformation:** Die Versetzungskerne der Schraubenversetzungen müssen zunächst in eine gleitfähige Modifikation transformiert werden, was eine Energiebarriere darstellt und deshalb zu Beginn der Verformung eine erhöhte Fließspannung erfordert.

Cottrell-Wolken erscheinen als Ursache aus mehreren Gründen unwahrscheinlich: Die gefundene Streckgrenze weist eine runde Ausprägung auf, der C-Gehalt der verwendeten Legierung ist mit weniger als 50 ppm (etwa 0.001 Gew% beziehungsweise 0.005 at%) sehr gering, und die für das makroskopische Fließen verantwortlichen Schraubenversetzungen wurden durch die Bewegung der Stufenversetzungen im Mikrodehnungsbereich gerade erst erzeugt.

Auch eine Versetzungskerntransformation erscheint unwahrscheinlich: Erstens ist nicht ersichtlich, warum der Prozess korngrößenabhängig sein sollte. Zweitens wäre zu erwarten, dass eine plastisch vorverformte Probe bei Weiterbelastung nach einer gewissen Ruhezeit erneut eine ausgeprägte Streckgrenze aufweist (Alterung), aber dies tritt selbst nach Wochen nicht auf.

Der Mechanismus der Teilplastizität kommt nicht in Frage, da auch einkristalline Proben im Versuch die Spannungsüberhöhung zeigten.

Der für die weiche obere und untere Streckgrenze verantwortliche Mechanismus ist demnach der Versetzungsmangel. Dafür spricht sowohl die Ausprägung einer runden oberen Streckgrenze, als auch das Ausbleiben von Alterungseffekten. Bei ähnlichen Fe-Si-Legierungen wurde außerdem eine Abhängigkeit der Versetzungsgeschwindigkeit von der anliegenden Schubspannung gefunden [4].

Als Folge dieses Mechanismus lässt sich bereits ein Größeneffekt vermuten: Bei der Verformung erhöht sich die Anzahl der mobilen Versetzungen aufgrund von Versetzungsmultiplikation und Neubildung von Versetzungsquellen durch das Quergleiten von Schraubensegmenten. Die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit sinkt, und somit sinkt auch die Fließspannung. Auf der anderen Seite kommt es jedoch parallel dazu zur Verfestigung, was eine Erhöhung der Fließspannung mit sich bringt. Beide Prozesse überlagern sich. Bei kleinen Körnern ist die Verfestigung höher als bei großen Körnern, beim einkristallinen Blech gibt es kaum noch Verfestigung. Aus diesem Grund sollte sich das Minimum der unteren Streckgrenze mit zunehmender Korngröße zu größeren Dehnungen bewegen, die Spannungsdifferenz zwischen oberer und unterer Streckgrenze sollte zunehmen.⁴ Die Verfestigung sollte in den Körnern an der Probenoberfläche geringer sein als im Probeninnern, da an der Oberfläche die neu entstandenen Versetzungen die Probe zum Teil verlassen können. Eine Abnahme der Blechdicke sollte also einen ähnlichen Effekt auf die obere und untere Streckgrenze haben, wie eine Zunahme der Korngröße.

Diese Überlegungen und die nachfolgend in Kapitel 7.4 dargestellten Messergebnisse zeigen, dass die Lage der unteren Streckgrenze wie postuliert deutlich von der Verfestigung beeinflusst wird. Das hat allerdings zur Folge, dass die untere Streckgrenze nicht geeignet ist, Größeneffekte beim Beginn der makroskopischen plastischen Verformung (also noch vor Einsetzen der Verfestigung) zu untersuchen. Zwar ist auch bei der oberen Streckgrenze davon auszugehen, dass bereits erste Verfestigung vorliegt, diese kann jedoch

⁴Das ist also genau das gegenteilige Verhalten, das man beobachten würde, wenn Cottrell-Wolken oder Teilplastizität die Ursache wären. Denn diese Mechanismen bewirken eine zunehmende Ausprägung von oberer und unterer Streckgrenze bei abnehmender Korngröße.

als gering angesehen werden und wird demnach im Folgenden vernachlässigt.

Die obere Streckgrenze beinhaltet eine gewisse Spannungsüberhöhung aufgrund der Dehnrates. Alle Versuche werden jedoch mit gleicher Geschwindigkeit durchgeführt, somit ist der geschwindigkeitsabhängige Vorfaktor bei allen Proben in etwa gleich. Eine Vergleichbarkeit der Versuche untereinander ist somit in erster Näherung gegeben. Aus diesem Grund wird im Folgenden die obere Streckgrenze als repräsentatives Maß für die Fließspannung zu Beginn der plastischen Verformung betrachtet.

Mikrostrukturentwicklung

Die Mikrostrukturentwicklung bei großer plastischer Verformung hängt von der Anzahl der aktivierten Gleitsysteme ab. Einfachgleitung kann im Scherversuch bis zu einer Abgleitung von etwa 40 % stabil bleiben; erst bei etwa 100 % treten in nennenswertem Maße Versetzungen mit anderem Burgersvektor auf. Im Gegensatz dazu wird bei Doppelgleitung im Scherversuch bereits bei 14 % Abgleitung eine deutliche Zellbildung mit Zellgrößen von etwa $1\text{ }\mu\text{m} \times 2\text{ }\mu\text{m}$ gefunden. Das Zellinnere weist in diesem Stadium noch zahlreiche Versetzungen auf, bis bei 28 % Abgleitung das Zellinnere nahezu versetzungsfrei ist (Zellgröße etwa $1\text{ }\mu\text{m} \times 1\text{ }\mu\text{m}$) [171]. Auch im Zugversuch kann bei Mehrfachgleitung eine deutliche Zellstruktur beobachtet werden [106]. Da sich die Versuche in der vorliegenden Arbeit fast ausnahmslos auf Polykristalle beziehen, ist demnach in der Regel von Mehrfachgleitung und somit von der Ausbildung einer zellulären Versetzungsmikrostruktur auszugehen.

6.2. Probenpräparation

Wegen der Korrosionsanfälligkeit des Materials erfolgen alle Präparationsschritte wasserfrei; die Lagerung der Proben erfolgt im Exsikkator. Zugproben mit einer Zielblechdicke von etwa 1 mm werden mittels LASER direkt aus dem Ausgangsblech geschnitten. Für dünnere Zugproben wird das Ausgangsblech zunächst bei 1200 °C unter Vakuum weichgeglüht und anschlie-

ßend mit Hilfe einer Handwalze in mehreren Stichen auf die gewünschte Dicke gewalzt. Die Geometrie der Zugproben ist in Abb. 6.1 dargestellt.

Die Zugproben werden anschließend an den Blechkanten bis zur Körnung 1000 geschliffen. Ober- und Unterseite werden bis zur Körnung 1000 geschliffen und bis 1 µm poliert. Die Einstellung der Korngröße erfolgt anschließend im Ofen unter Vakuum bei 1100 °C bis 1250 °C und variablen Glühzeiten; die Abkühlung erfolgt langsam im Ofen.⁵ Eine eventuelle Wärmeeinflusszone des LASER-Schneidens sowie beim Schleifen und Polieren eingebrachte Oberflächenverformungen werden somit beseitigt. Nach dem Glühen werden Ober- und Unterseite elektropoliert⁶:

- **Lösung:** 1-molare H₂SO₄ in Methanol
- **Spannung:** 9 V
- **Dauer:** 20 s bis 120 s

Aufgrund der thermischen Ätzung der Korngrenzen während des Glühens sind diese auch nach dem Elektropolieren noch erkennbar.

6.3. Versuchsapparatur

Die ex situ Zugversuche werden in einer Spindelzugmaschine von Instron, Modell 8513, mit einer 5 kN-Kraftmessdose durchgeführt. Zur Steuerung dient die Konsole 8500 plus in Kombination mit LabView auf einem PC. Für Untersuchungen in situ im REM oder unter dem Lichtmikroskop wird eine Minispindelzugmaschine der Firma Kammrath & Weiss GmbH mit 10 kN-Kraftmessdose eingesetzt. Die Steuerung erfolgt mit Hilfe einer selbsterstellten Software.

Die Halterung der Zugproben ist in Abb. 6.2 dargestellt. In dieser können Proben mit Blechdicken von etwa 0.1 mm bis 2 mm zuverlässig eingeklemmt werden. Die Klemmung erfolgt nur aufgrund von Haftreibung; auf eine geriffelte Oberfläche wurde im Hinblick auf die zum Teil geringen Blechdicken

⁵Anmerkung: Die Rekristallisation ist bei 700 °C bereits nach 1 h abgeschlossen [172]. Danach findet nur noch Kornwachstum statt.

⁶Wird vor dem Glühen elektropoliert, dann beeinträchtigt die in der Probe gespeicherte plastische Verformung das Ergebnis.

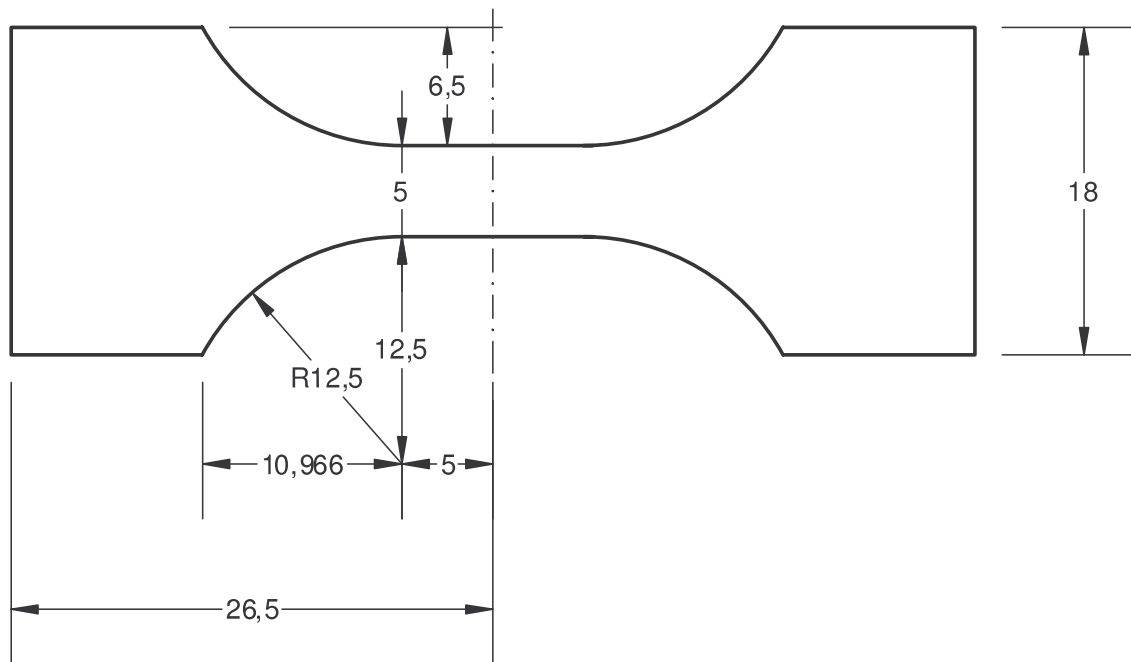


Bild 6.1.: Geometrie der Zugproben.

verzichtet. In Vorversuchen wurde deshalb ermittelt, bei welchen Zuglasten F Probenbleche aus der Halterung gleiten, wenn die Madenschraube der Zugprobenhalterung mit einem vorgegebenen Drehmoment M angezogen wird (Abb. 6.3). Die Auswertung erfolgte dabei im Bereich der Gleitreibung (Abb. 6.4).

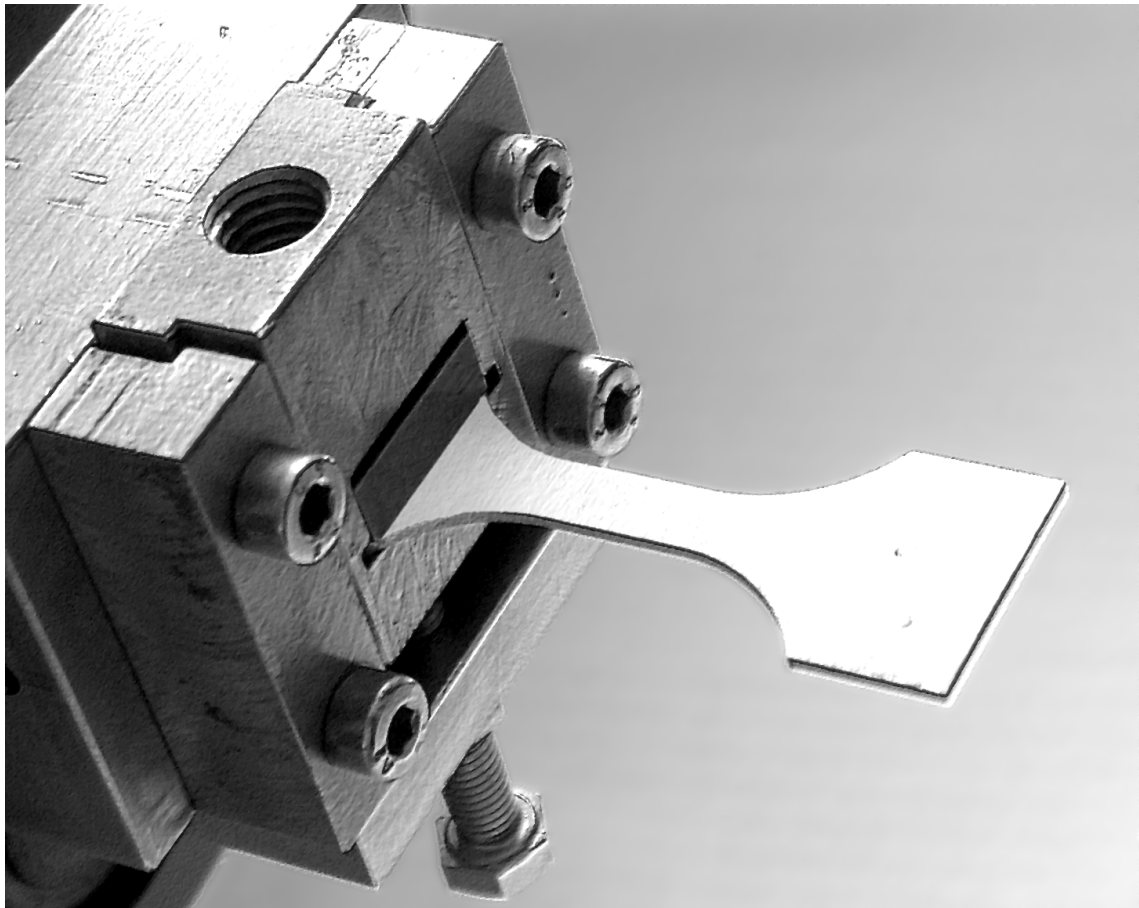


Bild 6.2.: Halterung der Zugproben. Ein Hartmetallplättchen wird mit einer Madenschraube gegen die Zugprobe gedrückt, um diese flächig zu fixieren.

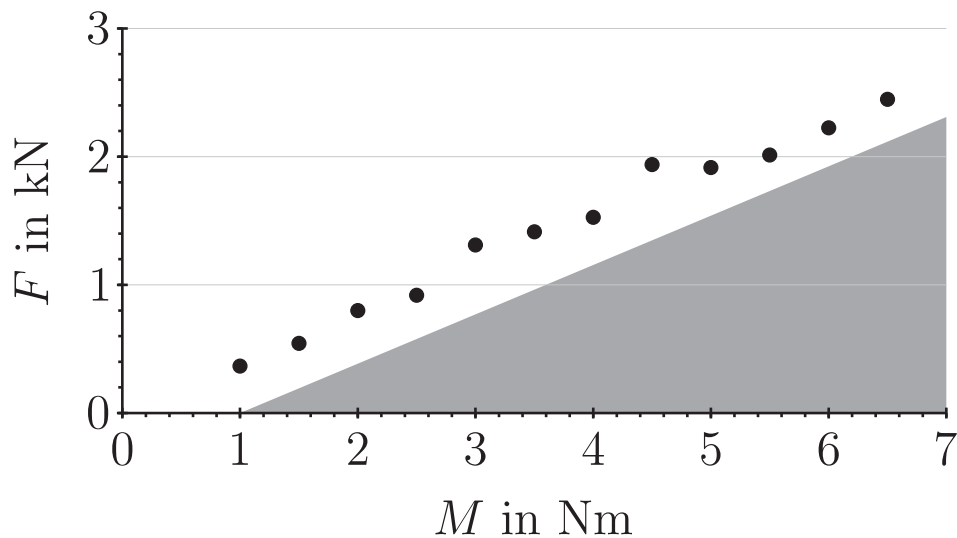


Bild 6.3.: Die Messpunkte stellen die gemessenen Gleitreibungskräfte F dar, mit denen eine Probe aus der Halterung gezogen werden konnte. M ist das Drehmoment, mit dem die Madenschraube der Probenhalterung angezogen wurde. Innerhalb des grau unterlegten Bereichs sitzen die Proben zuverlässig in der Probenhalterung. In den nachfolgenden Zugversuchen wurde zusätzlich noch ein Sicherheitsaufschlag von 1 Nm aufgebracht.

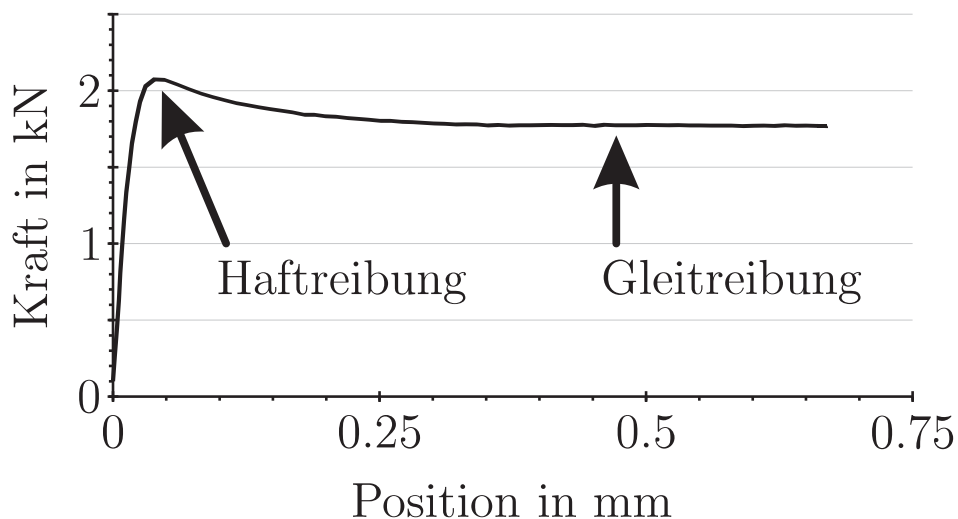


Bild 6.4.: Einzelne Kraft-Weg-Kurve einer Fe-3%Si-Probe beim Herausziehen aus der Probenhalterung mit Darstellung der Bereiche für Haft- und Gleitreibung.

7. Ergebnisse und Diskussion

7.1. Modellierung der Fließspannung

Wird eine Probe belastet, so hängt das Einsetzen lokaler plastischer Verformung von der lokalen Fließspannung ab. Dort, wo diese zuerst erreicht wird, beginnt die plastische Verformung. In der nachfolgenden Betrachtung werden elastische Anisotropie und elastische Inhomogenitäten vernachlässigt.

Beim Zugversuch kann die Probe näherungsweise als Kette betrachtet werden, bei der die Festigkeit von dem schwächsten Kettenglied bestimmt wird.

Makroskopisches Fließen setzt mindestens ein sich plastisch verformendes Teilvolumen der Probe voraus. Dieses Volumen trennt die Probe zwischen den beiden Lastangriffspunkten in genau zwei Bereiche.¹ Die Kette repräsentiert nun die Menge aller möglichen Teilvolumina, welche die Probe zwischen den beiden Lastangriffspunkten in genau zwei Bereiche trennen. Jedes Kettenglied entspricht also einem solchen Teilvolumen. Unter der Annahme, dass es genau ein schwächstes Kettenglied gibt, kann diese Menge ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf infinitesimal dünne bandförmige Volumina reduziert werden (Abb. 7.1). Grundsätzlich existiert eine unendliche Anzahl solcher Volumina. Das Problem besteht nun in der Reduktion auf eine endliche und handhabbare Anzahl.

¹Dies rechtfertigt auch die Verwendung einer elastisch isotropen Näherung. Die aufgrund der elastischen Anisotropie hervorgerufene Plastizität führt zwar zu lokalem, aber nicht zu makroskopischem Fließen, da die Bereiche nur Teile der Querschnittsfläche der Probe bedecken. Die Mikroplastizität gleicht die lokalen elastischen Inhomogenitäten bereits vor dem makroskopischen Fließen aus [35,102].

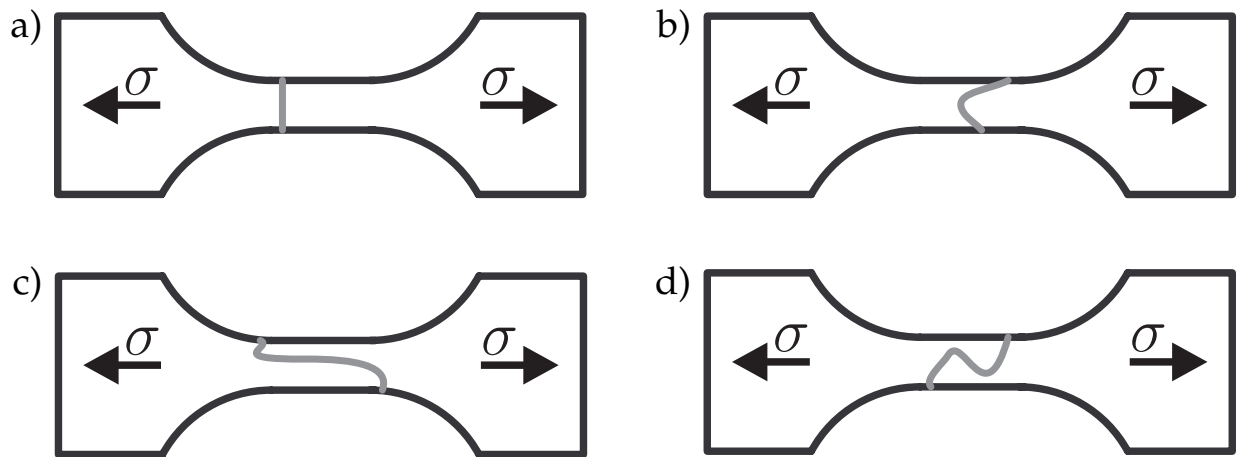


Bild 7.1.: Beispiele für plastische Bänder einer Zugprobe (Der Einfachheit wegen in zweidimensionaler Darstellung)

Es wird angenommen, dass jenes Teilvolumen plastisch wird, für dessen Verformung die geringste Arbeit W nötig ist. Im Fall idealer Plastizität gilt:

$$W = \int_V \sum_{i,j} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dV \quad (7.1)$$

Eine Verringerung von W kann erreicht werden, indem ein Volumen gewählt wird, in dem die lokalen Fließspannungen klein sind. Um ein einfaches Beispiel zu geben, wird eine Probe betrachtet, die nur aus zwei Arten Körnern der gleichen Größe besteht: weiche und harte. Die plastische Arbeit hängt dann vom Volumenanteil der weichen Körner in V ab, welcher mit f_{soft} bezeichnet wird. Die Anzahl der Körner in V sei N , im Mittel nehme jedes Korn das Teilvolumen V/N ein. Es sei nun f_{soft} signifikant höher als der Erwartungswert von f_{soft} . Dann nimmt die Wahrscheinlichkeit, dass $N_{\text{soft}} = f_{\text{soft}}N$ von N Körnern weich sind mit zunehmendem N ab. In anderen Worten: Die Wahrscheinlichkeit einen Bereich zu finden, der signifikant weicher ist als der im Mittel zu erwartende Bereich, ist umso höher, desto weniger Körner enthalten sind. Insbesondere für kleine N (= der Fall, um den es in der vorliegenden Arbeit hauptsächlich geht) ist diese Differenz signifikant. Eine Beispielrechnung soll dies verdeutlichen: Angenommen, weiche und harte Körner kommen mit der gleichen Häufigkeit vor. Dann ist die Wahrscheinlichkeit ein Volumen mit $f_{\text{soft}} \geq 3/4$ zu finden für $N = 4$ etwa 0.31 und für $N = 8$ etwa 0.14. Im Mittel sind die plastischen Bänder mit den wenigsten Körnern die, welche eben und senkrecht zur Lastrichtung

orientiert sind. Aus diesem Grund werden in erster Näherung nichtebene plastische Bänder, sowie plastische Bänder, die nicht senkrecht zur Zugachse orientiert sind, vernachlässigt.² Eine Folge dieser Betrachtung ist außerdem, dass die Dehnung innerhalb des plastischen Bandes homogen verteilt ist.

Ein Kettenglied wird also von einer Probenscheibe senkrecht zur Zugachse repräsentiert. Die Probenscheiben sind dabei sehr dünn. Das heißt: Im Falle einer Probe mit dreidimensionaler Kornstruktur kann die Kornstruktur in der Probenscheibe näherungsweise als zweidimensional angesehen werden. Im Falle einer Probe mit zweidimensionaler Kornstruktur liegt in der Probenscheibe näherungsweise eine Bambusstruktur vor (Abb. 7.2).

Eine Scheibe fließt genau dann, wenn alle in ihr enthaltenen Körner fließen. Es wird nun also ein Kriterium für die Fließspannung einzelner Körner benötigt. Das Schmid'sche Schubspannungsgesetz (Sachs-Faktor, [173]) scheint hier naheliegend zu sein, da es den Beginn des plastischen Fließens über das Gleitsystem mit der maximal wirkenden Schubspannung auf die ersten Versetzungsbewegungen zurückführt. Durch Konstruktion einer darauf basierenden Fließfläche kann auch Mehrfachgleitung berücksichtigt werden [174]. Mit diesem Ansatz ist jedoch die Einhaltung der in der Versuchsrandbedingung vorgegebenen Dehnung nicht gewährleistet. Das Kriterium kollidiert somit mit dem Modell.

Eine Alternative dazu ist der Taylor-Faktor (Details zur Berechnung und zu den enthaltenen Annahmen sind in Anhang E zu finden). Der Taylor-Faktor als Basis des Fließkriteriums ist ohne Änderung konsistent mit dem Modell, da in ihm die gleichen Annahmen enthalten sind:

- Die Verformung stellt sich so ein, dass die Arbeit W minimal ist.
- Die Dehnung ist als Randbedingung vorgegeben

Als Maß für die anfängliche Fließspannung werden deshalb lokale Taylor-Faktoren verwendet. Dann ist die anfängliche Fließspannung $\sigma_{G,i}$ eines Kornes i mit dem Taylor-Faktor m_i gegeben durch

$$\sigma_{G,i} = \tau_0 m_i \quad (7.2)$$

²Es mag an dieser Stelle vielleicht den Anschein haben, dass diese Annahme grundlegend für das Modell ist. Wie nachfolgend in Kapitel 7.5 und Kapitel 7.7.1 noch dargelegt wird, ist dem jedoch nicht so. Eine Verletzung dieser Annahme hat nur geringe Auswirkungen auf das Ergebnis und kann in der Statistik durch einen Korrekturfaktor ausgeglichen werden.

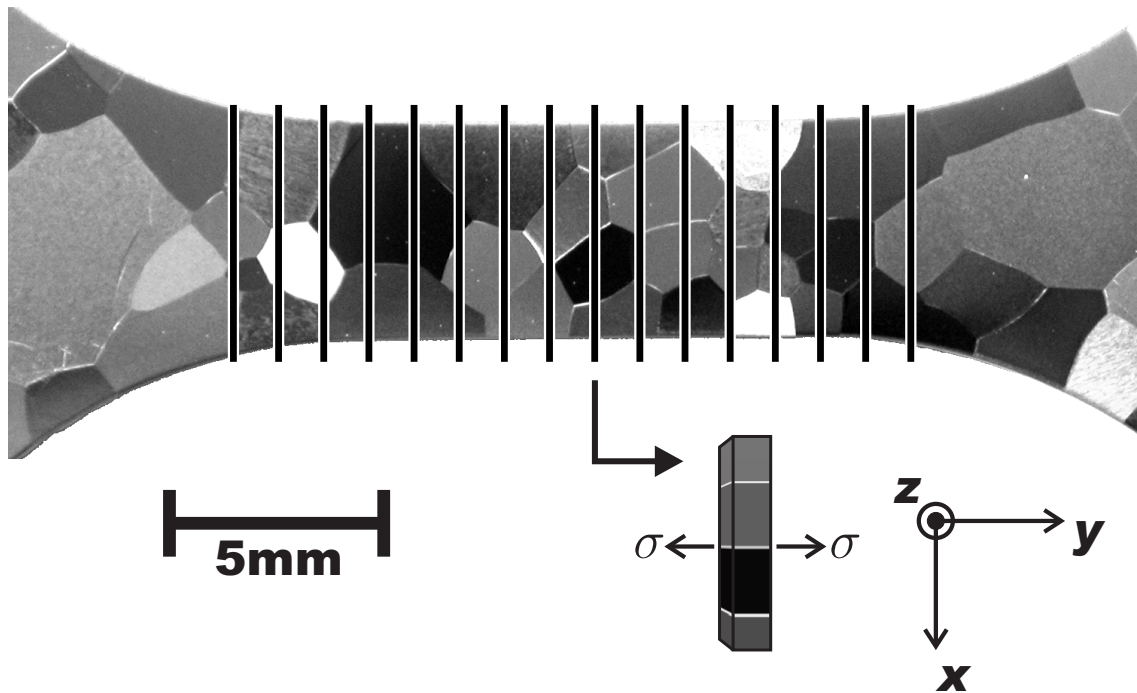


Bild 7.2.: Fotografie einer Probe und Definition der Probenachsen. Gemäß dem Modell werden dünne Scheiben der Probe betrachtet, die senkrecht zur Zugachse orientiert sind. Da die abgebildete Probe eine zweidimensionale Kornstruktur hat, haben die Scheiben eine Bambusstruktur. Dies ist am Beispiel einer Scheibe als Skizze demonstriert. Der Abstand zwischen den Scheiben dient lediglich der besseren Darstellung; bei der Modellierung liegen die Scheiben dicht beieinander.

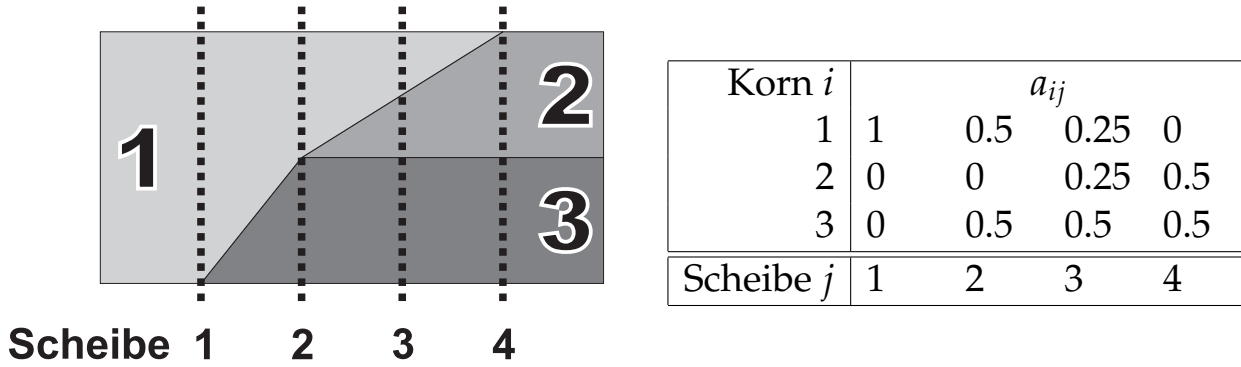


Bild 7.3.: Beispiel für die Verwendung der a_{ij} . Links: eine zweidimensionale Kornstruktur mit Lage der Scheiben. Rechts: die zugehörigen a_{ij} .

Die kritische wirkende Schubspannung τ_0 wird für alle Körner und alle Gleitsysteme gleich angenommen. Der Anteil eines Kornes i an der Schnittfläche von Scheibe j ist a_{ij} und hängt von der Korngeometrie sowie der Position der Scheibe innerhalb der Probe ab; es gilt $\sum_i a_{ij} = 1$. Ein Beispiel hierfür ist in Abb. 7.3 dargestellt. Die Fließspannung $\sigma_{S,j}$ von Scheibe j ist

$$\begin{aligned}
 \sigma_{S,j} &= \sum_i \sigma_{G,i} a_{ij} \\
 &= \tau_0 \sum_i m_i a_{ij} \\
 &=: \tau_0 m_{\text{Avg},j}
 \end{aligned} \tag{7.3}$$

Hierbei ist $m_{\text{Avg},j}$ der mittlere Taylor-Faktor von Scheibe j .

Wenn die Querschnittsfläche jeder Scheibe konstant ist, wird die schwächste Scheibe durch die Scheibe mit dem niedrigsten mittleren Taylor-Faktor repräsentiert. Somit ist der Ort des Fließbeginns näherungsweise bekannt. Die außen an der Probe gemessene anfängliche Fließspannung sollte demnach linear von $\min\{m_{\text{Avg},j}\}$ abhängen.

Variiert die Querschnittsfläche von Scheibe zu Scheibe, dann ist es sinnvoll, anstelle der Spannung die Kraft $F_{S,j}$ in Scheibe j zu betrachten. Die schwächste Scheibe ist gegeben durch $\min\{F_{S,j}\}$, wobei

$$\begin{aligned}
 F_{S,j} &= \sigma_{S,j} A_j \\
 &= \tau_0 A_j m_{\text{Avg},j}
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

A_j ist die Querschnittsfläche von Scheibe j . Gl. (7.4) ist eine Näherung, da Änderungen der Querschnittsfläche zu Dehnungsinhomogenitäten führen. Sie ist somit nur für kleine Unterschiede in der Querschnittsfläche gültig.

Aus Gl. (7.4) kann nun die schwächste Scheibe bestimmt werden. Deren Querschnittsfläche sei im Folgenden $A_{\min}$. Dann ergibt sich die Fließspannung der Probe:

$$\frac{\min\{F_{S,j}\}}{A_{\min}} = \tau_0 \frac{\min\{A_j m_{\text{Avg},j}\}}{A_{\min}} \quad (7.5)$$

In den Experimenten wird die Zugkraft bei Fließbeginn $F_{\text{ext},y}$ gemessen. Die anfängliche Fließspannung der Probe σ_y beträgt dann

$$\sigma_y = \frac{F_{\text{ext},y}}{A_{\min}} \quad (7.6)$$

In dem Modell ist keine Verfestigung berücksichtigt. Es gilt somit nur für die anfängliche Fließspannung, also den Beginn des Fließens. Verfestigung kann jedoch bei der Betrachtung des Fließortes qualitativ berücksichtigt werden. Eine Scheibe i fließt erst dann, wenn alle schwächeren Scheiben j (das heißt $F_{S,j} < F_{S,i}$) ausreichend verfestigt sind. Daraus kann eine Abfolge von Fließorten abgeleitet werden.

7.2. Elastische Anisotropie und aktive Gleitsystemklassen

Im weichgeglühten Zustand mit langsamer Abkühlung sind Eigenspannungen vernachlässigbar. Zu Beginn der plastischen Verformung ist die Spannungsverteilung im Kristall also rein aufgrund der außen anliegenden Randbedingungen und der lokalen elastischen Heterogenitäten gegeben. Somit ist die elastische Anisotropie streng genommen als wichtiger Einflussfaktor zu berücksichtigen [175]. Da die Spannungsverteilung innerhalb eines Kornes inhomogen ist und von der Kornform abhängt [82, 176], müssen die Körner der Probe möglichst realitätsgetreu modelliert werden. Körner gleicher Orientierung können sich völlig unterschiedlich verhalten [110]. Hierfür wird mit der Software DEFMEASURE ein FE-Modell einer charakterisierten Zugprobe generiert. Dabei kommt ein anisotrop linear-elastisches

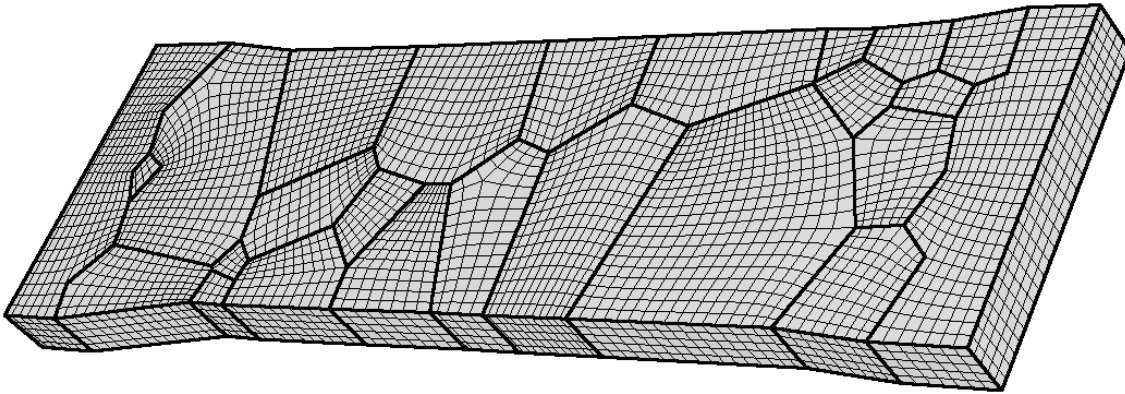


Bild 7.4.: Beispiel eines FE-Netzes für die Gleitbandsimulation

Materialgesetz zum Einsatz. Die berücksichtigten Körner beinhalten die Messlänge und die angrenzenden Probenbereiche. Das Modell der Probe wird an den Enden in eine Umgebung mit gemittelten Eigenschaften eingebettet, was hier einem isotrop ideal-elastischen Materialverhalten entspricht. Damit kann eine störungsarme Anbindung an die Randbedingungen des Zugversuchs erfolgen [176]. Die FEM-Simulation erfolgt implizit mit der FEM-Software ABAQUS (Abb. 7.4). Neben den Korngrenzen wirken auch die Probenkanten als Störstellen, von denen bevorzugt Gleitbänder ausgehen können [113]. Die elastische Anisotropie bewirkt, dass die Lage der Korngrenzen in Relation zur Probenoberfläche Auswirkungen auf die lokalen Spannungszustände hat [177]. Aus diesem Grund muss die Probe als dreidimensionales Modell mit ausreichend vielen Elementen über die Probendicke gerechnet werden.

Für jedes finite Element wird aus dem berechneten Spannungstensor das Gleitsystem mit der höchsten Aktivität a mit $a = \tau_{\text{res}}/\tau_0$ ermittelt (Schmidsches Schubspannungsgesetz), wobei τ_{res} die im Gleitsystem wirkende Schubspannung und τ_0 die gleitsystemspezifische kritische Schubspannung darstellt. Die Schnittgerade aus Gleitebene und Probenoberfläche gibt dann die Orientierung lokal entstehender Gleitbänder an. Hierfür wird das Ergebnis von ABAQUS, welches als odb-Datei (output database) vorliegt, mit Hilfe der selbstentwickelten Software ODBMAP-GENERATOR in eine odbmap-Datei konvertiert. Dabei werden nicht mehr benötigte Daten verworfen und die benötigten Daten in einer optimierten Anordnung ge-

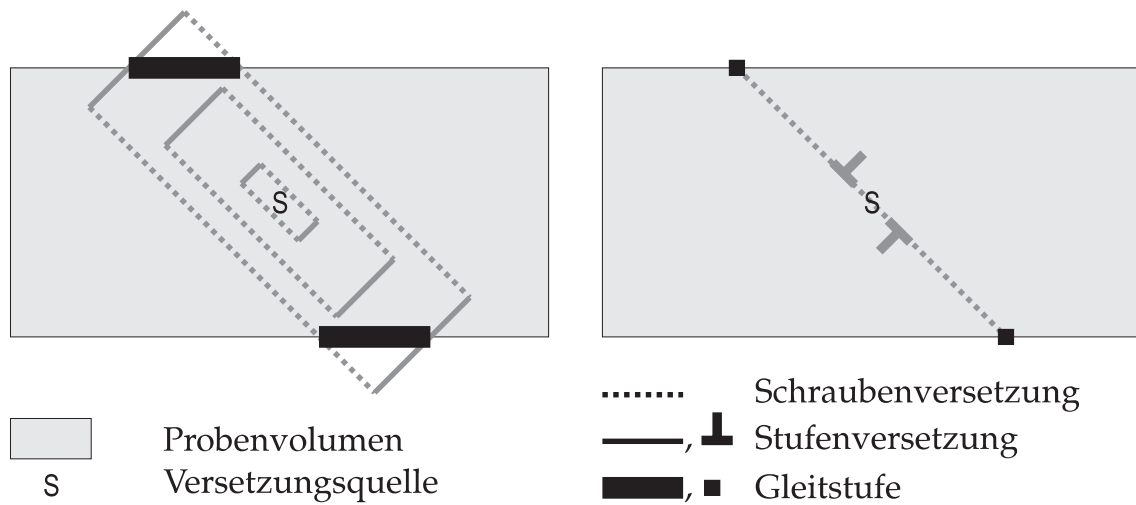


Bild 7.5.: Beispiele für den Ort einer Gleitstufe und die Lage der zugehörigen Versetzungsquelle.

speichert. Die Simulation und Visualisierung der Gleitbänder erfolgt mit der Software DEFMEASURE.

Die Verwendung des Schmid'schen Schubspannungsgesetzes bei der Modellierung von Gleitbändern steht nicht im Widerspruch zur Verwendung des Taylor-Faktors bei der Modellierung der Fließspannung im vorhergehenden Kapitel. Es wird davon ausgegangen, dass die aktivsten Gleitsysteme auch den größten Anteil an der Entstehung der Gleitbänder haben. Ein Vergleich von Sachs-Faktor und Taylor-Modell zeigt, dass das aktivste Gleitsystem von beiden Modellen identisch vorhergesagt wird [137]. Und auch das sekundäre aktive Gleitsystem entspricht in der Regel dem mit der zweithöchsten wirkenden Schubspannung [28]. Unterschiede zeigen sich hier lediglich in der quantitativen Gleitsystemaktivität. Für quantitative Vorhersagen eignet sich demnach das Taylor-Modell besser [93]. Untersuchungen zeigten ferner, dass eine Kombination aus Taylor-Modell und Sachs-Faktor die Orientierungsänderungen einzelner Körner im Vollmaterial relativ gut vorhersagt [178, 179].

Untersuchungen der Gleitbandentstehung zeigen, dass die anfänglich entstandenen Gleitbänder lange sichtbar bleiben [180, 181]. Es ist somit nicht nötig, das Einsetzen der plastischen Verformung im Experiment exakt abzupassen.

Bei der Bewertung der Simulationsergebnisse ist zu berücksichtigen, dass die Entstehung der Gleitstufen sehr stark von der Orientierung von Gleit-

trichtung und Gleitebene sowie dem Ort der Versetzungsnukleation abhängt. Gleitstufen sind nur dort sichtbar, wo die Stufensegmente der Versetzungen die Probenoberfläche verlassen. Dort, wo Schraubensegmente aus der Probenoberfläche austreten, sind keine Gleitstufen zu sehen. Sind Gleitebene oder Burgersvektor geneigt, treten die Gleitstufen nicht am Ort der Versetzungsnukleation auf, sondern etwas versetzt (siehe Abb. 7.5); in der Simulation wird diese Neigung nicht berücksichtigt.

Da die Probenoberfläche im Vergleich zum Probeninneren einen Bereich mit sehr vielen Defekten darstellt, findet die Versetzungsnukleation an der Oberfläche verstärkt statt. Das wird auch in Experimenten beobachtet [113]. Es wird deshalb angenommen, dass ein großer Teil der Gleitstufen aus Versetzungen resultiert, die an einer der Probenoberflächen nukleiert wurden. Obwohl die FEM-Simulation dreidimensional durchgeführt wird, erfolgt die Auswertung der Gleitsystemaktivitäten hier anhand der Spannungstensoren an der Probenoberfläche.

Es ist klar, dass von so einem stark vereinfachten Modell keine naturgetreue Reproduktion der Gleitstufen zu erwarten ist. Allerdings ist das hier auch nicht das primäre Ziel, denn es geht um die prinzipielle Frage, welche Gleitsystemklassen bei der Materialmodellierung überhaupt zu berücksichtigen sind.

In Abb. 7.6 sind die gemessenen Gleitstufen einer Zugprobe und das Ergebnis der Simulation für den Fall anisotroper Elastizität und $\{110\}\langle 111 \rangle$ als einzig aktiver Gleitsystemklasse dargestellt. Wegen der Bildoptimierung treten bei den Probenaufnahmen selbst kleinste Oberflächendetails hervor, wie zum Beispiel Kontaminierungspunkte durch den Elektronenstrahl des REM oder Überreste von Schleifriefen. Damit letztere nicht mit Gleitstufen verwechselt werden, ist in der Abbildung zusätzlich die unverformte Probe gegenübergestellt. Die auf der unverformten Probe sichtbaren Oberflächenstrukturen sind vernachlässigbar: der Kontrast der durch die Verformung entstandenen Gleitstufen ist um ein Vielfaches höher.

Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Selbst der Fall von Korn A mit lokal unterschiedlichen Gleitstufen wird zutreffend vorhergesagt. In Korn B ergibt die Simulation ebenfalls Mehrfachgleitung, das Experiment zeigt jedoch nur eine Art von Gleitstufen. Die Aktivierung des zweiten Gleitsystems erfolgt bei weiterer Verformung der Probe (Abb. 7.7). Korn B stellt hier einen Grenzfall dar, in dem bereits

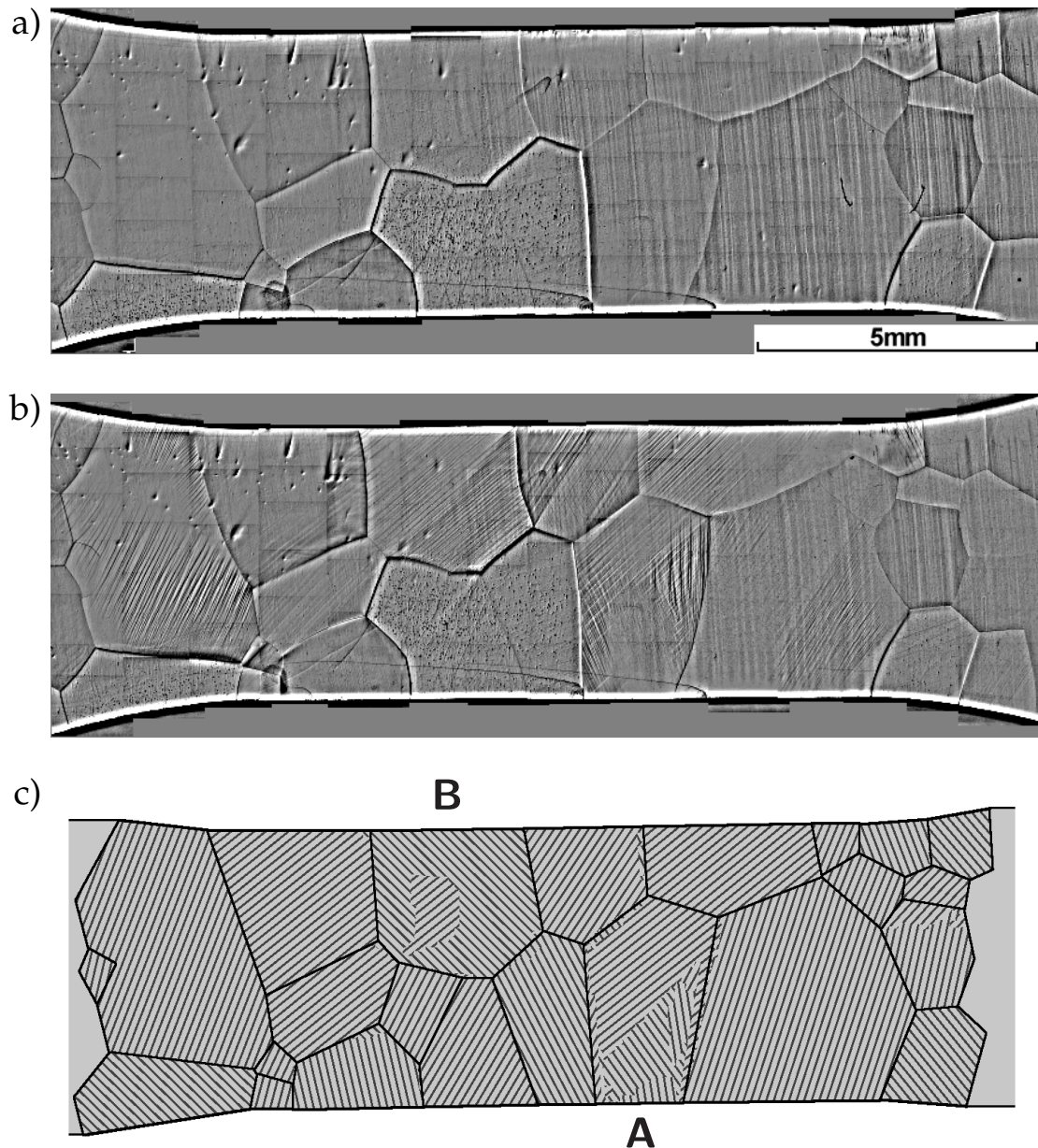


Bild 7.6.: *a)* Unverformte Probe, sowie Vergleich zwischen *b)* gemessenen Gleitstufen und *c)* Ergebnis der Gleitbandsimulation mit anisotroper Elastizität und $\{110\}\langle 111 \rangle$ als einzig aktiver Gleitsystemklasse. Die Simulation zeigt Aktivierung von lokal unterschiedlichen Gleitsystemen innerhalb der Körner A und B.

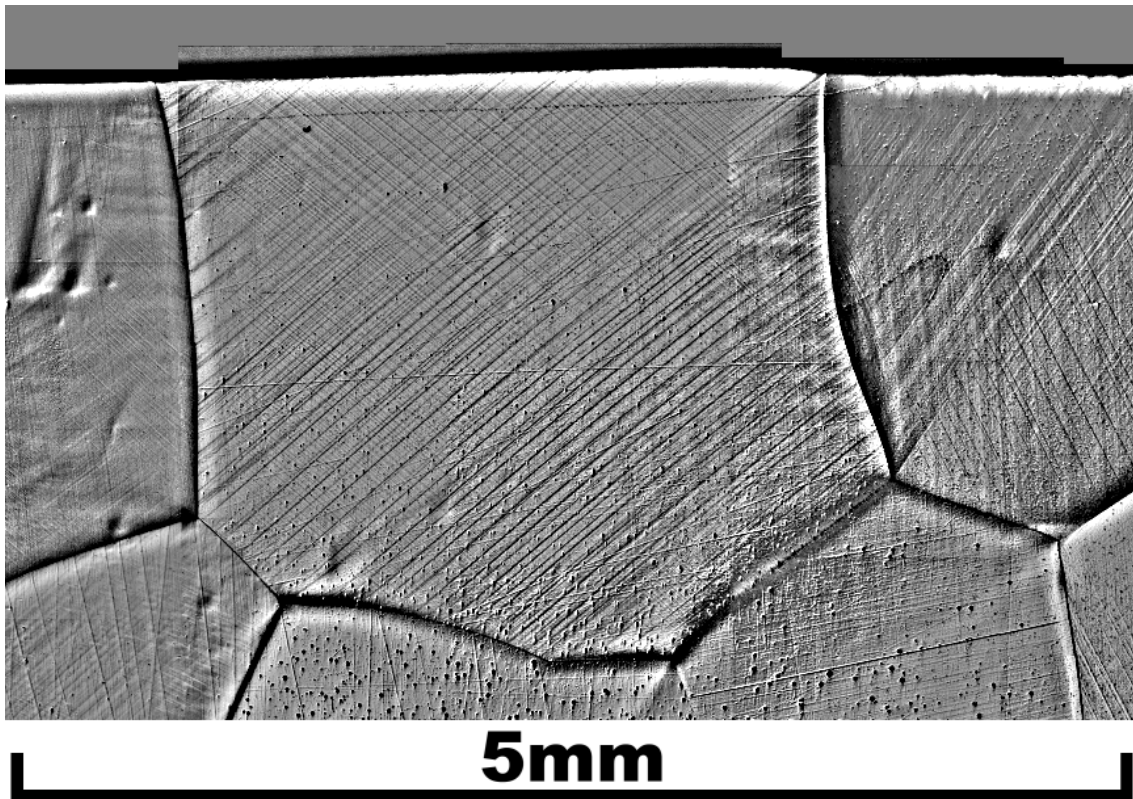


Bild 7.7.: Ausschnittsvergrößerung von Korn B bei $\varepsilon_{pl} = 4\%$ zeigt Einsetzen der Mehrfachgleitung.

kleine Winkelabweichungen in der Orientierungsmessung den Ausschlag geben, welches Gleitsystem zuerst aktiviert wird [161].

Sobald in den Simulationsbedingungen die anisotrope Elastizität vernachlässigt wird oder weitere Gleitsysteme berücksichtigt werden, kommt es zu signifikanten Unterschieden zwischen Simulation und Experiment. Dies fällt insbesondere bei den Körnern A und B auf, bei denen die Mehrfachgleitung in der Simulation nicht mehr korrekt modelliert wird.

Das Ergebnis kann somit als eindeutig angesehen werden: Bei kleinen Verformungen sind lediglich die Gleitsysteme der Klasse $\{110\}\langle 111 \rangle$ aktiv, wobei die Aktivierung der Gleitsysteme in der Nähe der Korngrenzen signifikant von der elastischen Anisotropie beeinflusst wird.

7.3. OGM, lokale Verformung und lokale Verfestigung

7.3.1. Grundlagen am Beispiel von Fe-3%Si

Aufgrund der Vorüberlegungen zum OGM wurde in Kapitel 5.6 geschlossen, dass der OGM ein Maß für die lokale Verfestigung ist. In der Literatur werden lokale Orientierungsänderungen jedoch als Maß für die plastische Dehnung angesehen.

Einschub: Zur Erinnerung

Plastische Dehnung resultiert aus der Bewegung mobiler Versetzungen, es gilt $d\varepsilon_{pl} \propto \rho_m dx$, wobei ρ_m die Dichte der sich bewegendenden Versetzungen ist und dx der mittlere Weg, den eine Versetzung zurücklegt. Insbesondere gibt es keinen allgemein gültigen Zusammenhang zwischen der Entwicklung der mobilen Versetzungsdichte ρ_m beziehungsweise der Gesamtversetzungsdichte ρ und der plastischen Dehnung ε_{pl} . Bei fortschreitender plastischer Dehnung kann die Versetzungsdichte ansteigen (Versetzungsmultiplikation), gleich bleiben (Versetzungen verlassen den Kristall oder annihilieren miteinander und werden durch frisch erzeugte Versetzungen ersetzt) und sogar abnehmen (dynamische Erholung). Verfestigung andererseits resultiert aus gespeicherten Versetzungen, da Versetzungen sich gegenseitig in der Bewegung behindern. Es gilt $\sigma_y \propto \sqrt{\rho}$, wobei σ_y die Fließspannung ist.

Dieser Widerspruch muss zunächst geklärt werden, damit OGM-Messungen zuverlässig interpretiert werden können. Hierfür wurde eine Zugprobe in den Schritten $\varepsilon_{pl,macro} \approx \{1.4 \%, 3.8 \%, 8.7 \%, 17.3 \%, 28.3 \%\}$ verformt. Nach jedem Verformungsschritt erfolgte eine OGM-Messung, sowie eine Bestimmung der lokalen Kornverformung anhand der Bewegung der Korngrenzentripelpunkte. $\varepsilon_{pl,macro}$ bezieht sich auf die über die gesamte Messlän-

ge gemittelte Dehnung, welche ebenfalls anhand der Tripelpunktpositionen ermittelt wurde.

In [113] wurden bei der Untersuchung an Gleitbändern Orientierungsänderungen bis 4° gefunden. Die gemessenen Orientierungsgradienten weisen einen vergleichbaren Wertebereich auf. Abb. 7.8 a) zeigt als Referenz die unverformte Probe, b)–f) die lokale Dehnungsverteilung und Abb. 7.9 die zugehörigen OGM-Messungen. Bei einem Korn der Probe konnte die Orientierung an einigen Stellen nicht zuverlässig gemessen werden. Diese Stellen wurden als Messlücken belassen und *nicht* nachträglich durch Interpolation oder Ähnliches aufgefüllt. Da zur Bestimmung des Orientierungsgradienten neben dem betreffenden Messpunkt auch die beiden benachbarten Punkte nötig sind, führt eine fehlende Orientierung demnach zu drei Fehlstellen im OGM. Diese Lücken sind in der Abbildung schwarz dargestellt. In Abb. 7.10 und Abb. 7.11 ist die lokale Verformung der einzelnen Körner gegen die Korngröße aufgetragen.

Bis zu einer Verformung von $\varepsilon_{\text{pl,macro}} \approx 17.3\%$ weisen die Körner vergleichbare Dehnungen auf. Dehnungslokalisation und Einschnürung wurde bei $\varepsilon_{\text{pl,macro}} \approx 28.3\%$ beobachtet. Die Ursache für Dehnungslokalisation besteht darin, dass einige wenige Körner sich überproportional stark verformen, während die restlichen Körner sich im Vergleich dazu kaum noch verformen. Dieser Übergang kann zwar Abb. 7.8, sowie Abb. 7.10 und Abb. 7.11 entnommen werden, ein besser quantifizierbares, eindeutigeres Maß wäre aber wünschenswert. Die Verteilung der Korndehnungen in Zugrichtung $\varepsilon_{\text{pl},22}$ weist bei einer einheitlichen Verformung trotz der relativ hohen Streuung³ für Median und Mittelwert ungefähr den gleichen Wert auf. Dehnungslokalisation zeigt sich in dieser Darstellung eindeutig durch ein nachhaltiges Auseinanderdriften von Median und Mittelwert (Abb. 7.12).

Die Körner, die zu Beginn des Zugversuchs die größte Verformung aufwiesen, sind jedoch nicht identisch mit den Körnern, die zum Versagen der Probe geführt haben. Die Dehnungsmessung für $\varepsilon_{\text{pl,macro}} \approx 1.4\%$ liefert die höchste Dehnung bei Korn B. Bei fortwährender Verformung sinkt jedoch die Dehnrates⁴ des Kornes B, während andere Körnern mit der Verformung fortfahren. Die Ursache hierfür sind lokale Unterschiede in der Verfesti-

³Eine vergleichbar hohe Streuung in der lokalen Dehnung wurde auch in [105] gefunden.

⁴Der Begriff Dehnrates bezieht sich hier auf die lokale Dehnungszunahme zwischen zwei Verformungsschritten.

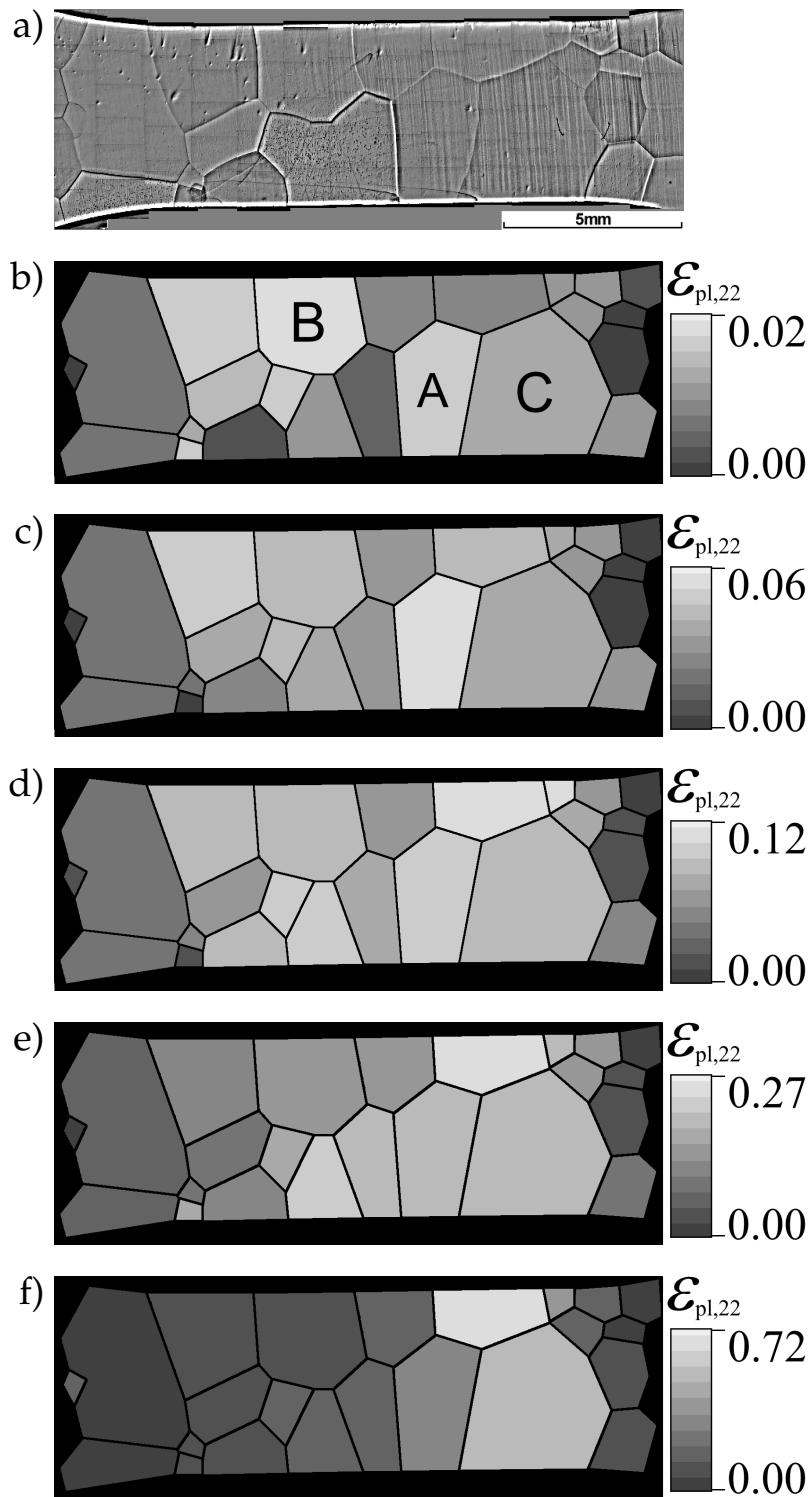


Bild 7.8.: a) Unverformte Zugprobe. b)–f) Plastische Verformung der Körner in Zugachsenrichtung für die makroskopischen Verformungsschritte $\epsilon_{pl,macro} \approx \{1.4 \%, 3.8 \%, 8.7 \%, 17.3 \%, 28.3 \%\}$. Darstellung in Graustufen; die Formänderung der Körner ist nicht wiedergegeben.

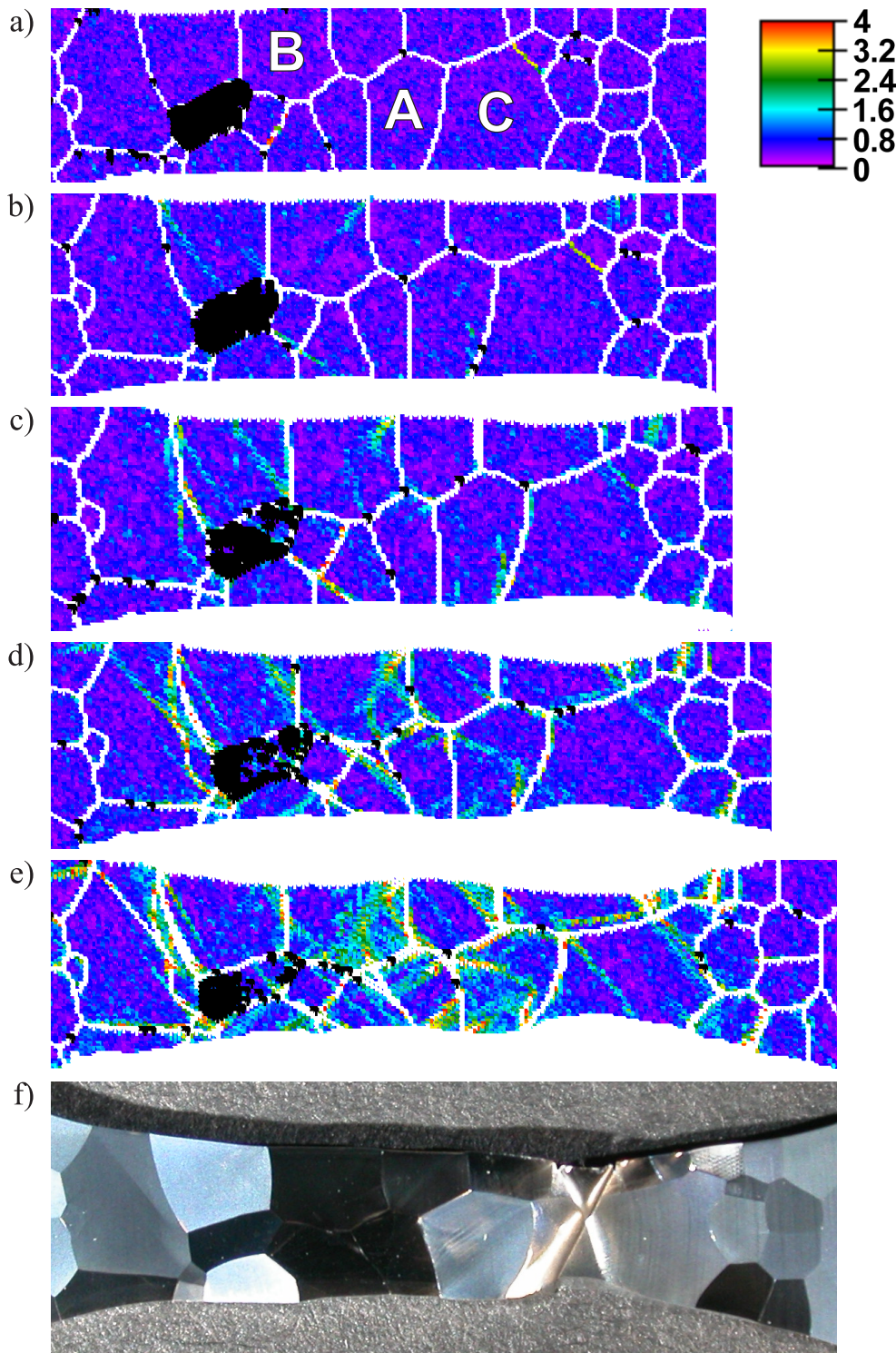


Bild 7.9.: a)–e) Zu Abb. 7.8 a)–e) gehörende OGM-Messungen der Zugprobe, Darstellung von $\Delta\theta_\infty$ in $^\circ$. Fehlstellen sind schwarz dargestellt, Wertüberläufe weiß. Messpunkteabstand $90\ \mu\text{m}$. f) DigiCam-Aufnahme der Zugprobe bei $\epsilon_{pl,macro} \approx 28.3\%$. Bei dieser hohen Verformung war keine OGM-Messung mehr möglich.

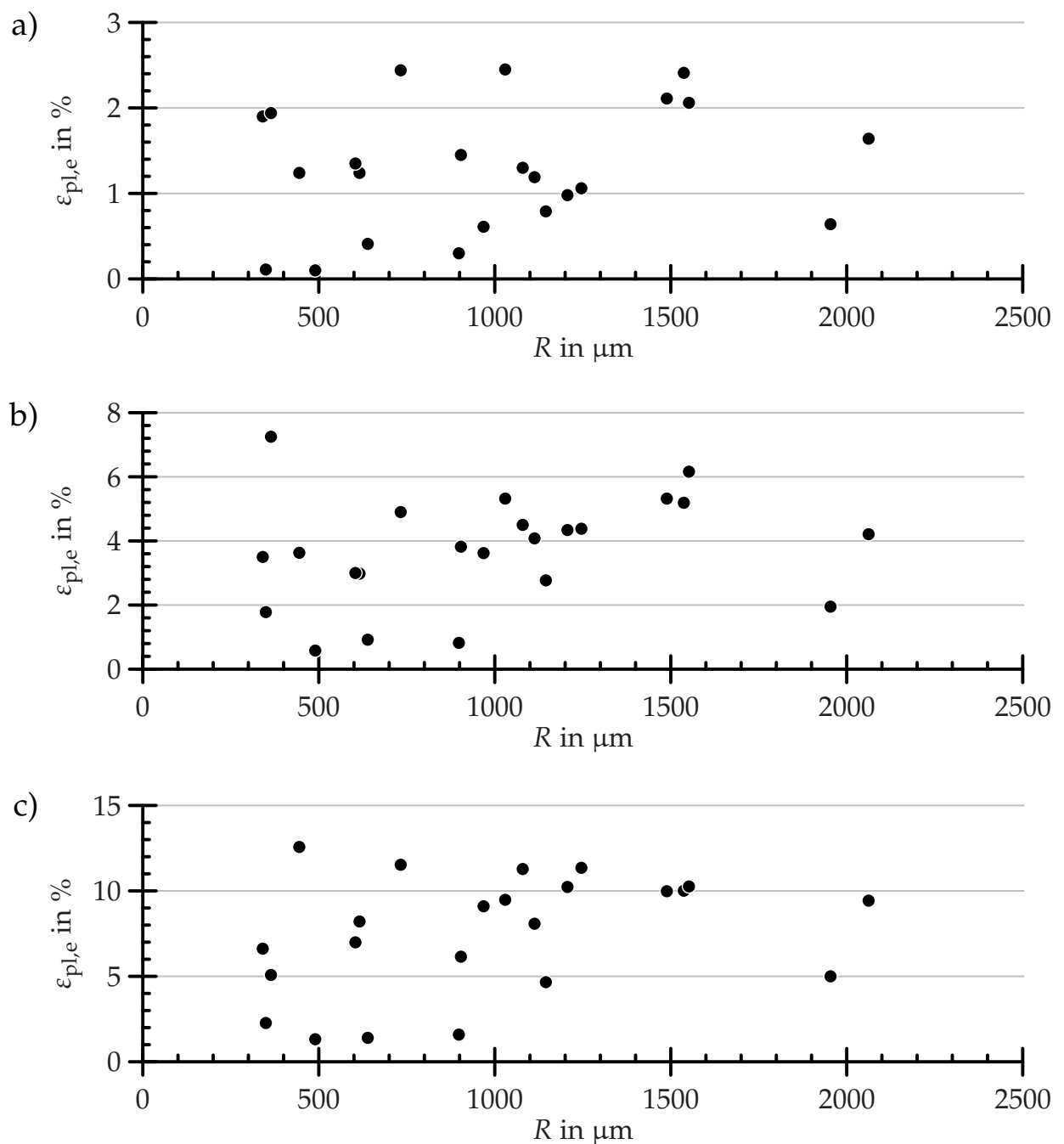


Bild 7.10.: Lokale plastische Vergleichsdehnung der Körner $\varepsilon_{pl,e}$ als Funktion der Korngröße R für die makroskopischen Verformungsschritte a) $\varepsilon_{pl,macro} \approx 1.4 \%$, b) $\varepsilon_{pl,macro} \approx 3.8 \%$ und c) $\varepsilon_{pl,macro} \approx 8.7 \%$.

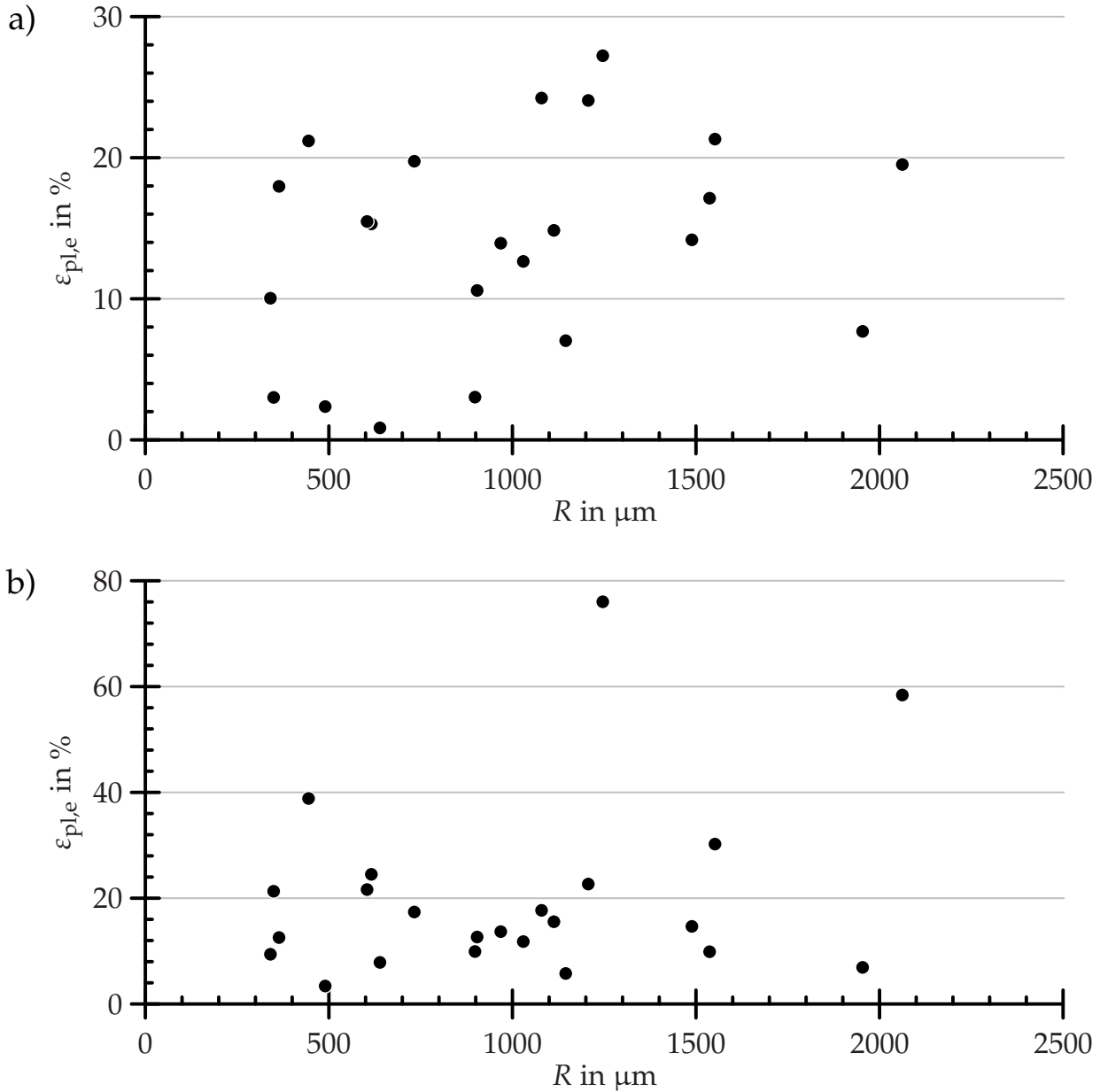


Bild 7.11.: Lokale plastische Vergleichsdehnung der Körner $\varepsilon_{pl,e}$ als Funktion der Korngröße R für die makroskopischen Verformungsschritte a) $\varepsilon_{pl,macro} \approx 17.3\%$ und b) $\varepsilon_{pl,macro} \approx 28.3\%$.

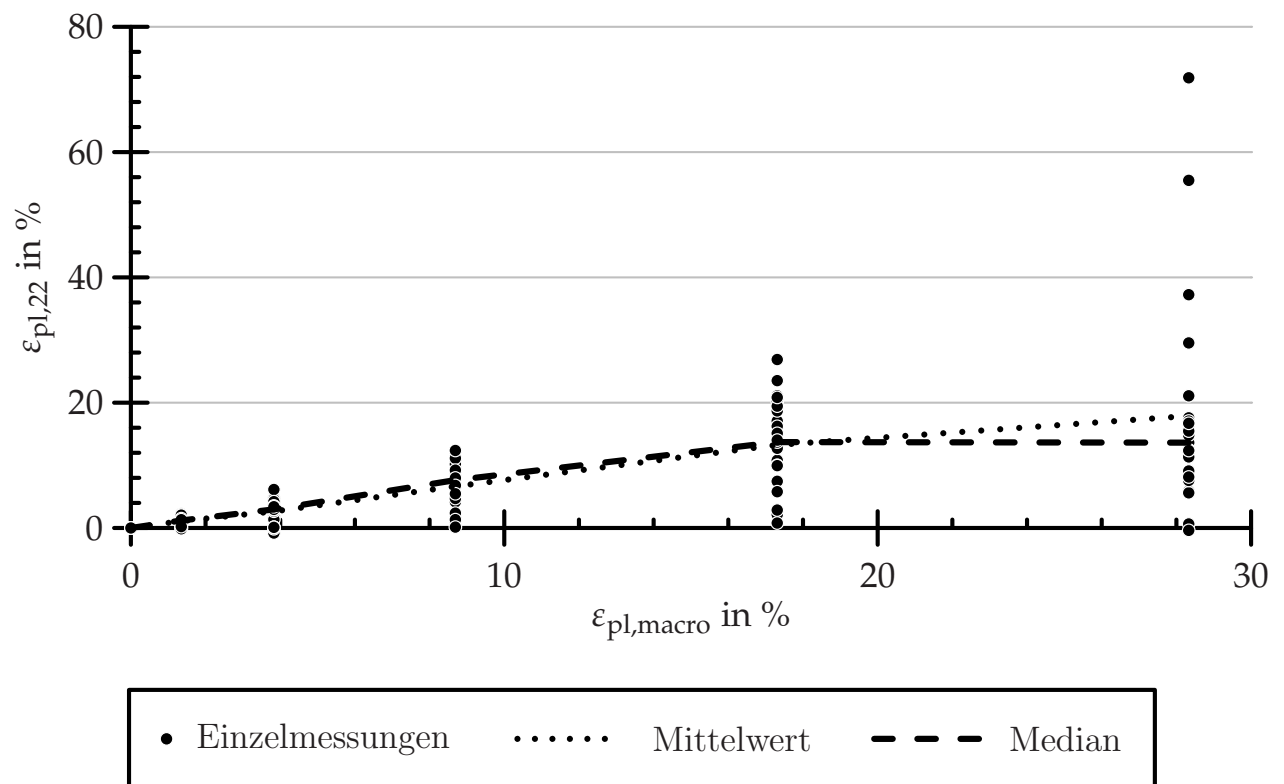


Bild 7.12.: Ermittlung des Eintretens von Dehnungslokalisation anhand der lokalen Dehnungen einzelner Körner.

gung: Korn B verfestigt, und andere Körner (nicht notwendigerweise die benachbarten) verformen sich. Offensichtlich ist also die Verfestigung in Korn B höher als in den anderen Körnern, denn nach weiterer Belastung ist die plastische Dehnung von Korn B vernachlässigbar im Vergleich zur plastischen Dehnung anderer Körner. Die Probe versagte schließlich an Korn C. Zu Beginn war die Dehnrates von Korn C geringer als von Korn B. Da sie aber nahezu konstant geblieben ist, übertrifft sie im Laufe des Versuchs die mit der Verformung abnehmende Dehnrates von Korn B. Die Verfestigung in Korn C ist somit wesentlich geringer als in Korn B. Diese Beobachtung ist konsistent mit den Ergebnissen der OGM-Messung, wie nachfolgend gezeigt wird.

Im Vergleich zum Korninneren sind die Spannungen an der Korngrenze aufgrund der Orientierungsunterschiede zu benachbarten Körnern höher [154]. An Korngrenzentripelpunkten treffen nicht nur zwei, sondern drei Körner aufeinander, was zusätzliche Inkompatibilitäten bedingt. Im Vergleich zum Rest der Korngrenzen liegen deshalb an den Korngrenzentripelpunkten noch höhere Inkompatibilitätsspannungen vor. Plastische Verformung sollte demnach von Korngrenzen und Korngrenzentripelpunkten ausgehen, wo auch eine erhöhte Versetzungsdichte zu erwarten ist [82, 84, 176]. Als Folge davon ist in diesen Bereichen zunächst von einer erhöhten Verfestigung auszugehen [83]⁵. Dies ist in Übereinstimmung mit der Entwicklung der Orientierungsgradienten, die ihren Ursprung an Korngrenzentripelpunkten haben. In [80] wurde anhand der Modellierung von Dipolbewegungen gezeigt, dass sich die Versetzungen von der Korngrenze aus bevorzugt in eines der angrenzenden Körner bewegen. Auch diese Tendenz kann bei den Orientierungsgradienten beobachtet werden.

Zu Beginn des Zugversuchs sind erste Orientierungsgradienten in den Körnern mit der höchsten Dehnung zu finden. Mit fortschreitender Verformung bilden die Orientierungsgradienten in manchen Körnern ein dichtes Netzwerk, während die Orientierung in anderen Körnern relativ gleichmäßig bleibt. Dies kann mit der lokalen Verfestigung korreliert werden und liefert somit eine Erklärung für die Beobachtung, dass zum Beispiel Korn

⁵Theoretische Betrachtungen legen nahe, dass die Verformung in Korngrenzennähe eine lokale Verfestigung bewirkt. Hat sich die Korngrenzenschicht einmal eingestellt, ist die Spannungsverteilung im gesamten Korn homogener. Die Verfestigung hat in Bezug auf das Verformungsverhalten also eine homogenisierende Wirkung.

B trotz der anfangs bei $\varepsilon_{\text{pl,macro}} \approx 1.4 \%$ größten Dehnung nicht zum Versagen der Probe führte. Im Gegenteil: verglichen mit anderen Körnern der Probe ist hier ein deutliches Absinken der Dehnrates zu finden. An der Stelle der Einschnürung (Korn C) weist die Probe im Verlauf der Verformung nur eine geringe Verfestigung auf, was sich in Form einer relativ geringen Ausprägung der Orientierungsgradienten zeigt.

Die Fließspannung kleiner Körner ist nach Hall-Petch höher als die großer Körner. Da bei kleinen Körnern das korngrenzennahe Volumen in Relation zum Gesamtvolumen größer ist als bei großen Körnern, wird bei ihnen auch eine höhere Verfestigung erwartet. Der Schluss, dass sich demnach große Körner stärker verformen sollten als kleine Körner, kann jedoch selbst bei dieser grobkörnigen Probe zu keinem Zeitpunkt des Zugversuchs experimentell belegt werden, wie Abb. 7.10 und Abb. 7.11 zeigen. Bei der Untersuchung mehrerer Proben zeigte sich, dass die Proben tendentiell an Stellen mit großen Körnern einschnüren. Diese beiden Ergebnisse sind nur dann miteinander in Einklang zu bringen, wenn die Verformung bei großen Körnern lokaler stattfindet als bei kleinen Körnern. Dies ist in Einklang mit den Ergebnissen mikrostruktureller Modellbetrachtungen, die in den nachfolgenden Kapiteln näher ausgeführt werden.

In der Literatur findet sich häufig die Aussage, dass der mittlere Misorientierungswinkel linear von der makroskopischen plastischen Dehnung abhängt. Wie zuvor dargestellt, ist jedoch eher eine Korrelation mit der Verfestigung zu erwarten. Und im Gegenteil: Gerade die Körner, die wenig verfestigen, verformen sich stark. Der lineare Zusammenhang kann somit also auch nicht darauf zurückgeführt werden, dass die plastische Dehnung linear von der Verfestigung abhängt. Dass dennoch ein Zusammenhang der Art $\langle \theta \rangle \propto \varepsilon_{\text{pl,macro}}$ gefunden wurde, kann folgende Gründe haben:

- **Korngröße:** Die untersuchten Proben waren ausnahmslos feinkörnig. Insbesondere war die Korngröße deutlich kleiner als die Probengröße. Das individuelle Verformungsverhalten eines Kornes hat somit kaum Auswirkungen auf die lokale Verformung und ist primär durch die Verformung des Umfeldes bestimmt. Eigentlich ist in diesem Fall die lokale Verfestigung von der lokalen plastischen Dehnung weitestgehend entkoppelt.

- **Mittelwertbildung:** Die mittlere Missorientierung wurde nicht auf die lokale Dehnung, sondern auf die makroskopische Dehnung bezogen betrachtet – also ein Mittelwert über die ganze Probe, der lokale Unterschiede außer Acht lässt. Es wurde außerdem über mehrere Körner gemittelt.

In Abb. 7.13 und Abb. 7.14 sind der mittlere Missorientierungswinkel $\langle\theta\rangle$ und die Standardabweichung der Orientierung⁶ θ_{StdDev} der einzelnen Körner einer Zugprobe gegen die plastische Dehnung der Körner in Zugachsenrichtung aufgetragen. Dabei ist θ_i der Missorientierungswinkel zwischen Messpunkt i und der mittleren Kornorientierung mit

$$\langle\theta\rangle = \frac{1}{N_{\text{Ges}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{Ges}}} \theta_i \quad (7.7)$$

$$\theta_{\text{StdDev}} = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{Ges}} - 1} \sum_{i=1}^{N_{\text{Ges}}} \theta_i^2} \quad (7.8)$$

N_{Ges} ist die Anzahl der Messpunkte pro Korn. Es zeigt sich in der Tendenz zwar durchaus eine Zunahme der Missorientierung bei Zunahme der plastischen Dehnung, die Messwerte streuen aber so stark, dass von einem linearen Zusammenhang nicht gesprochen werden kann.

Werden für jeden Verformungsschritt Mittelwerte über alle Körner berechnet und gegen die makroskopische Dehnung aufgetragen, so zeigen die Mittelwerte von $\langle\theta\rangle$ und θ_{StdDev} für kleine Dehnungen näherungsweise einen linearen Verlauf (Abb. 7.15). Jedoch bereits vor Einsetzen der Dehnungslokalisation bei $\varepsilon_{\text{pl,macro}} \approx 17.3\%$ kommt es zu signifikanten Abweichungen. Zum Vergleich wurde der Verlauf einiger Kenngrößen aus der OGM-Messung aufgetragen, die ebenfalls einen linearen Verlauf aufweisen. Die Linearität ist aber bis $\varepsilon_{\text{pl,macro}} \approx 17.3\%$ einschließlich deutlich besser als bei den beiden nichtlokalen Kennwerten $\langle\theta\rangle$ und θ_{StdDev} . Abb. 7.16 zeigt den Verlauf der relativen Standardabweichungen. Eine Zunahme der relativen Standardabweichung weist auf zunehmende Unterschiede der Mikrostruktur zwischen den einzelnen Körnern hin.

⁶Die Standardabweichung der Orientierung ist nicht zu verwechseln mit der Standardabweichung der Missorientierungswinkel. Für letztere gilt die Formel $(\sum_{i=1}^{N_{\text{Ges}}} (\theta_i - \langle\theta\rangle)^2 / (N_{\text{Ges}} - 1))^{-1/2}$.

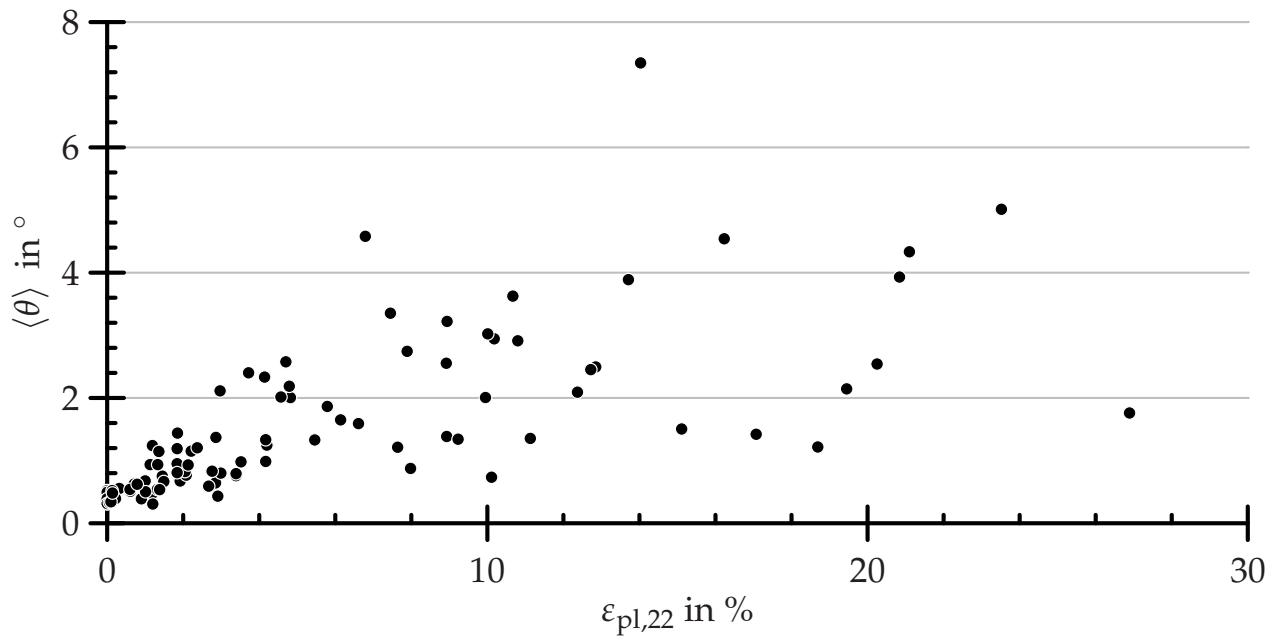


Bild 7.13.: Der mittlere Missorientierungswinkel $\langle \theta \rangle$ als Funktion der lokalen plastischen Dehnung in Zugachsenrichtung $\varepsilon_{pl,22}$ für 23 Körner einer Zugprobe, die in mehreren Schritten gezogen und charakterisiert wurde.

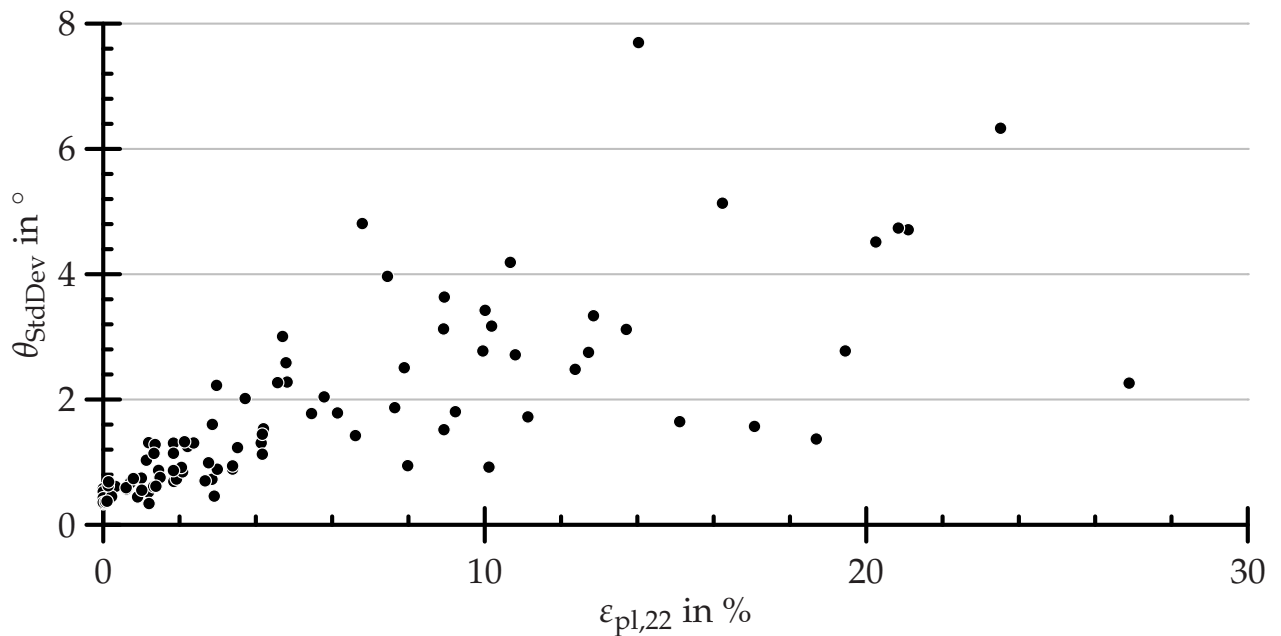


Bild 7.14.: Wie Abb. 7.13, aber bezogen auf die Standardabweichung der Orientierung θ_{StdDev} .

Die Linearität der Kenngrößen ist also ein Resultat der Mittelwertbildung beziehungsweise Homogenisierung. Es stellt sich im Hinblick auf die Untersuchung des lokalen Materialverhaltens die Frage, wie klein das verwendete repräsentative Volumen gewählt werden kann. Die kleinste Volumeneinheit, über die im Rahmen dieser Arbeit bezüglich der Verformung quantitative Aussagen getroffen werden können, sind einzelne Körner. In Abb. 7.17 und Abb. 7.18 sind die Messergebnisse für den nichtlokalen Wert θ_{StdDev} und die OGM-Kenngröße $\langle \Delta\theta_2 \rangle$ als Funktion der lokalen plastischen Dehnung für 23 Körner einer Zugprobe aufgetragen, die in mehreren Schritten verformt wurde.

Im Überblick betrachtet zeigen bis auf einzelne Ausnahmen alle Körner in beiden Kennwerten eine gute Linearität. Es fällt jedoch auf, dass der lineare Zusammenhang bei jedem Korn individuell ist. Die mikrostrukturelle Entwicklung stellt sich erwartungsgemäß von Korn zu Korn als sehr unterschiedlich dar. Des Weiteren fällt auf, dass zwischen den Steigungen der beiden zu einem Korn gehörenden Fitgeraden scheinbar kein Zusammenhang besteht. θ_{StdDev} und $\langle \Delta\theta_2 \rangle$ sind zwar beides Missorientierungskenngrößen, sie repräsentieren aber offensichtlich unterschiedliche Eigenschaften der Mikrostruktur.

Wie anhand der Messergebnisse in Abb. 7.9 zu erkennen ist, sind die Orientierungsgradienten in erster Näherung bandförmige Strukturen, welche die Körner durchziehen. Es wird nun der einfachste Fall eines quadratischen Kornes mit Kantenlänge $2R$ angenommen. Das Missorientierungsband habe eine rechteckige Gestalt, Orientierungsinhomogenitäten im Rest des Kornes seien in Relation dazu vernachlässigbar. Das Band habe die Abmessungen $2R \times B$ und weise in sich eine zellartige Substruktur mit der Zellgröße λ und alternierenden Orientierungen auf. In Bezug auf die Ausgangsorientierung des Kornes weisen die Zellen alternierend die Missorientierungen $+\theta_{\text{cell}}$ beziehungsweise $-\theta_{\text{cell}}$ auf (Abb. 7.19). Die Rotationsachse sei über das ganze Korn näherungsweise konstant. Für die Flächen wird $A_+ = A_-$ angenommen, sodass die mittlere Kornorientierung der Ausgangsorientierung entspricht. Es gilt

$$A_0 = 2R(2R - B) \quad (7.9)$$

$$A_+ = RB \quad (7.10)$$

$$A_{\text{Ges}} = A_0 + 2A_+ = 4R^2 \quad (7.11)$$

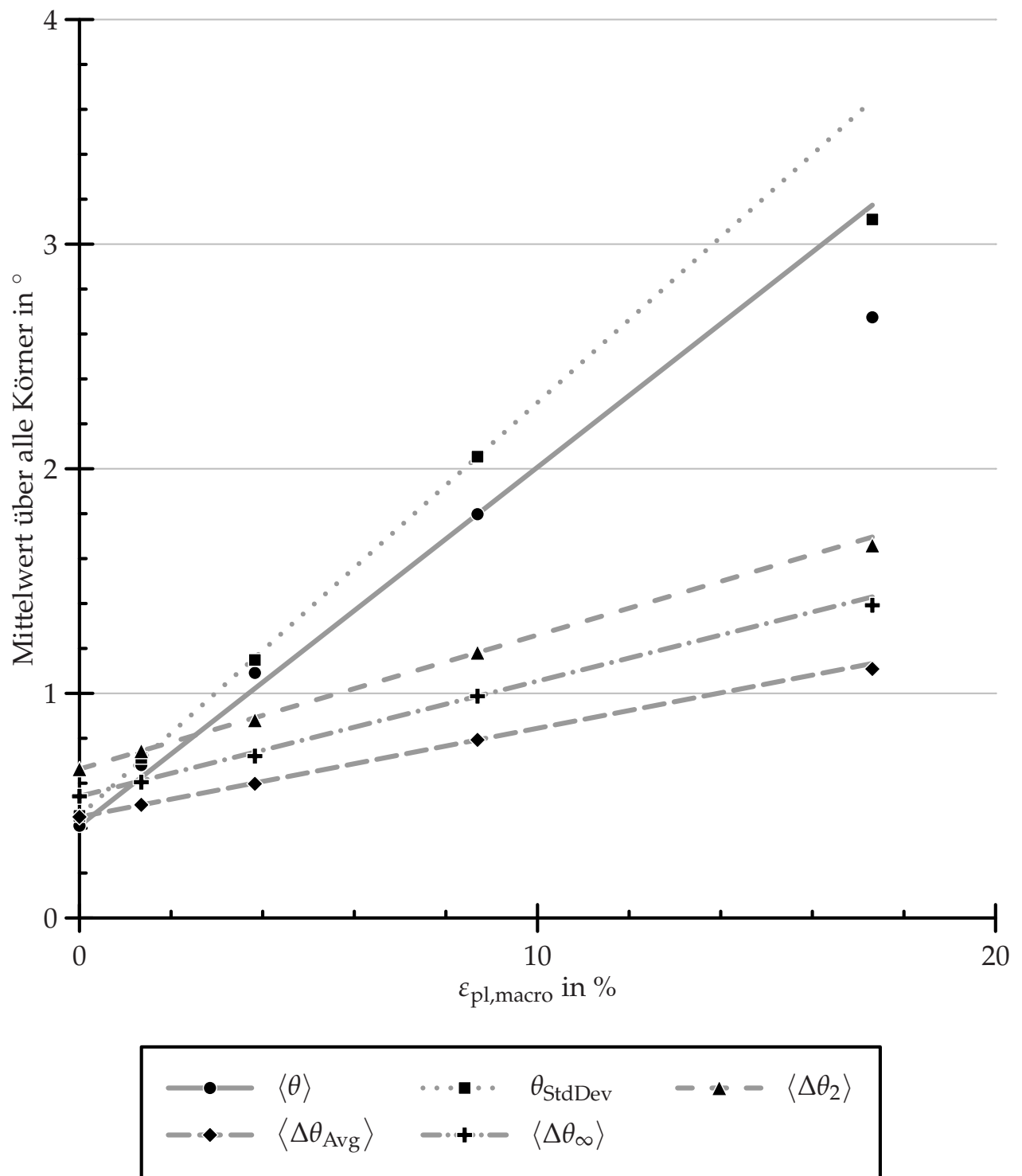


Bild 7.15.: Mittelwerte verschiedener Missorientierungskenngrößen als Funktion der makroskopischen plastischen Dehnung für Fe-3%Si.

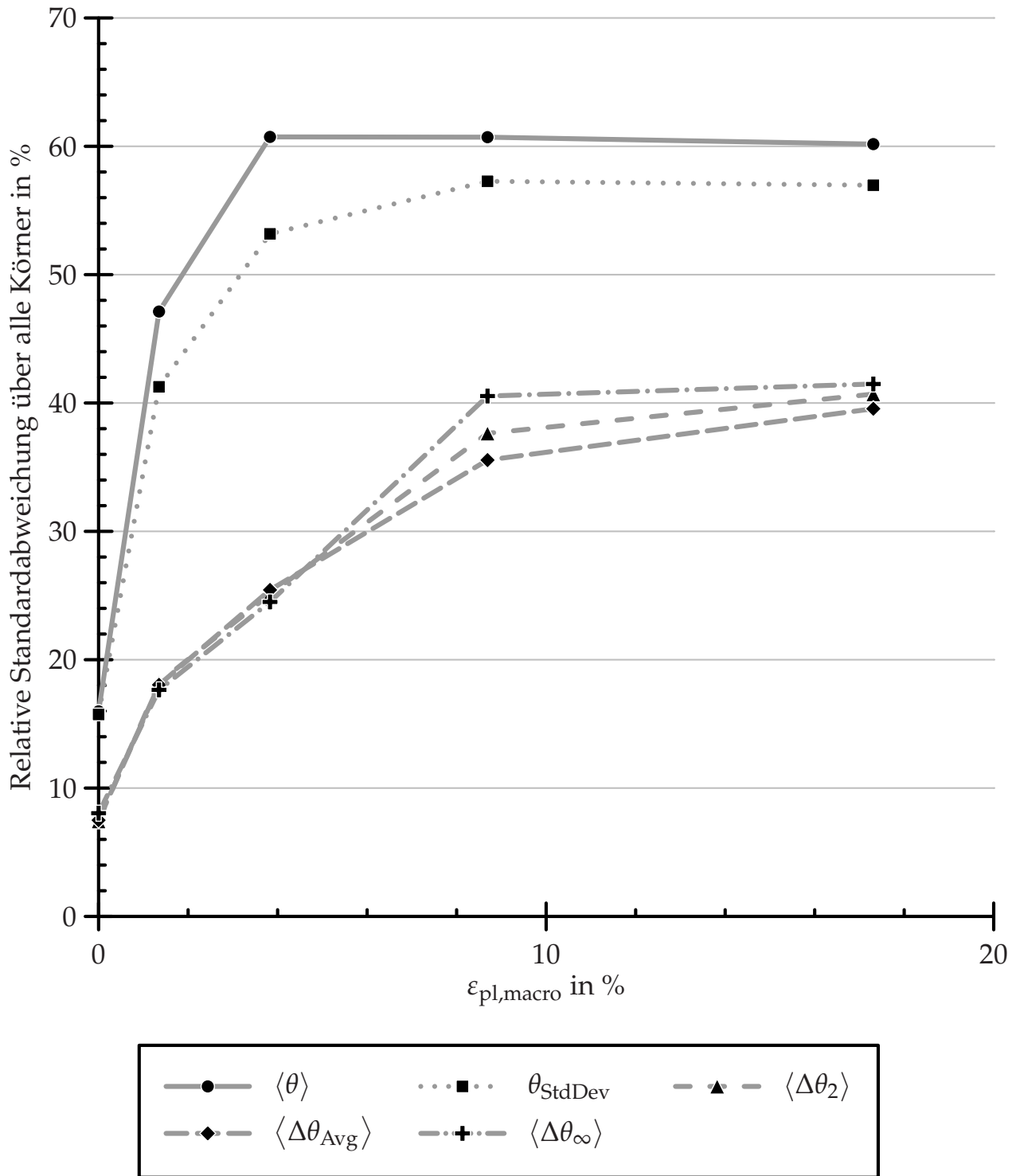


Bild 7.16.: Zu Abb. 7.15 gehörende relative Standardabweichungen der Missorientierungskenngrößen.

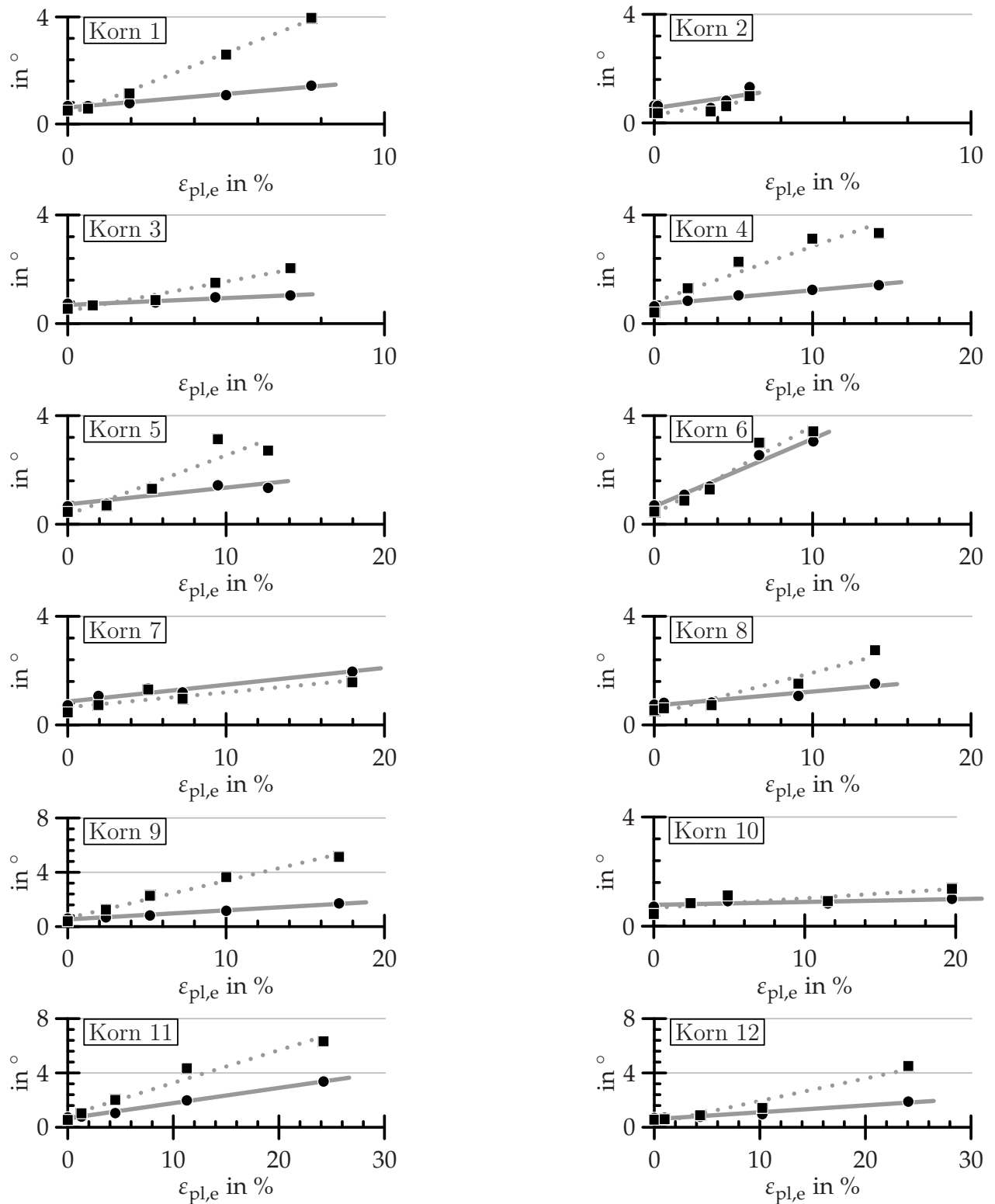


Bild 7.17.: Verlauf von $\langle \Delta \theta_2 \rangle$ und θ_{stdDev} für die Körner einer Zugprobe als Funktion der lokalen Vergleichsdehnung. Legende siehe Abb. 7.18.

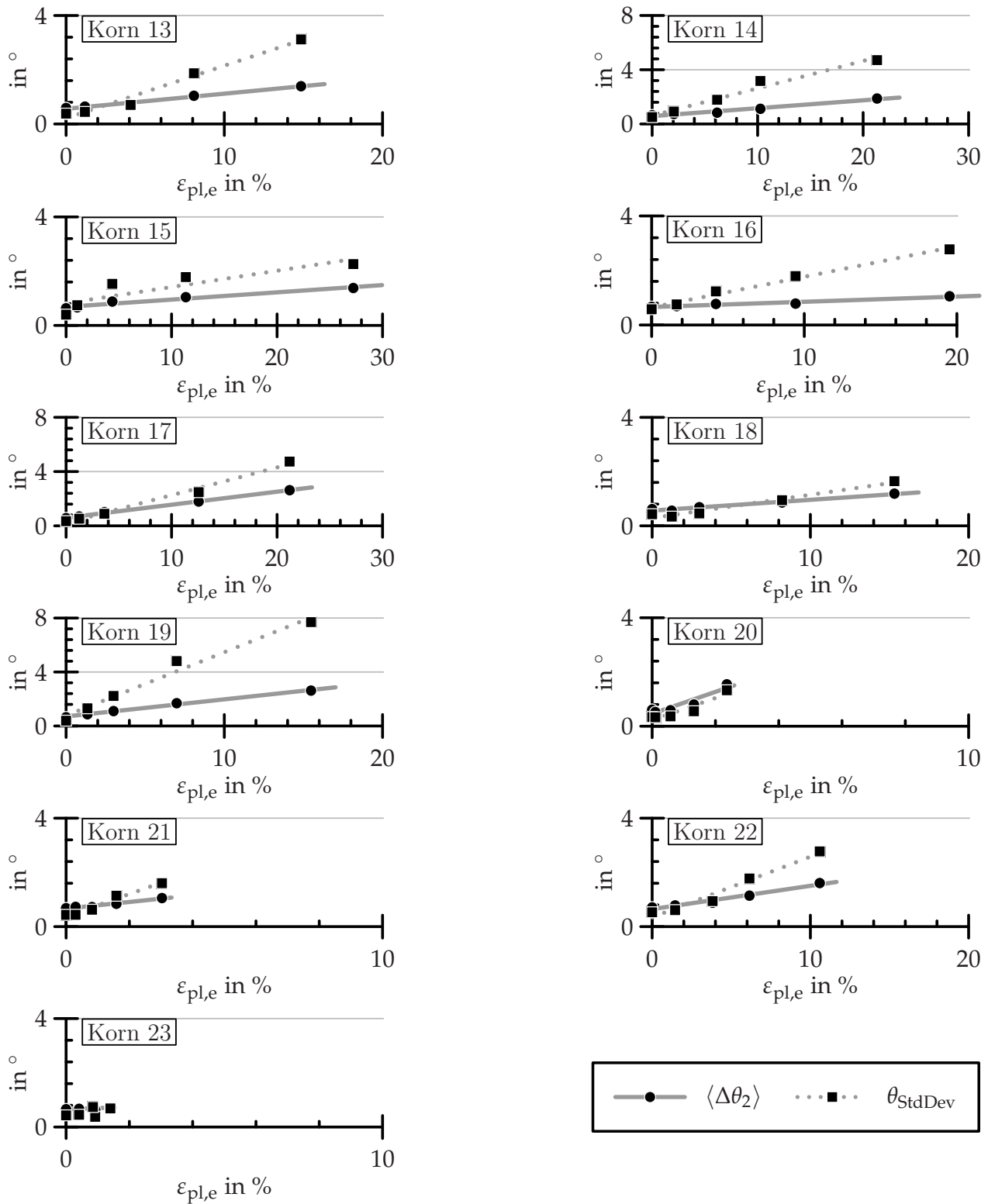


Bild 7.18.: Wie Abb. 7.17, aber für die Körner 13–23.

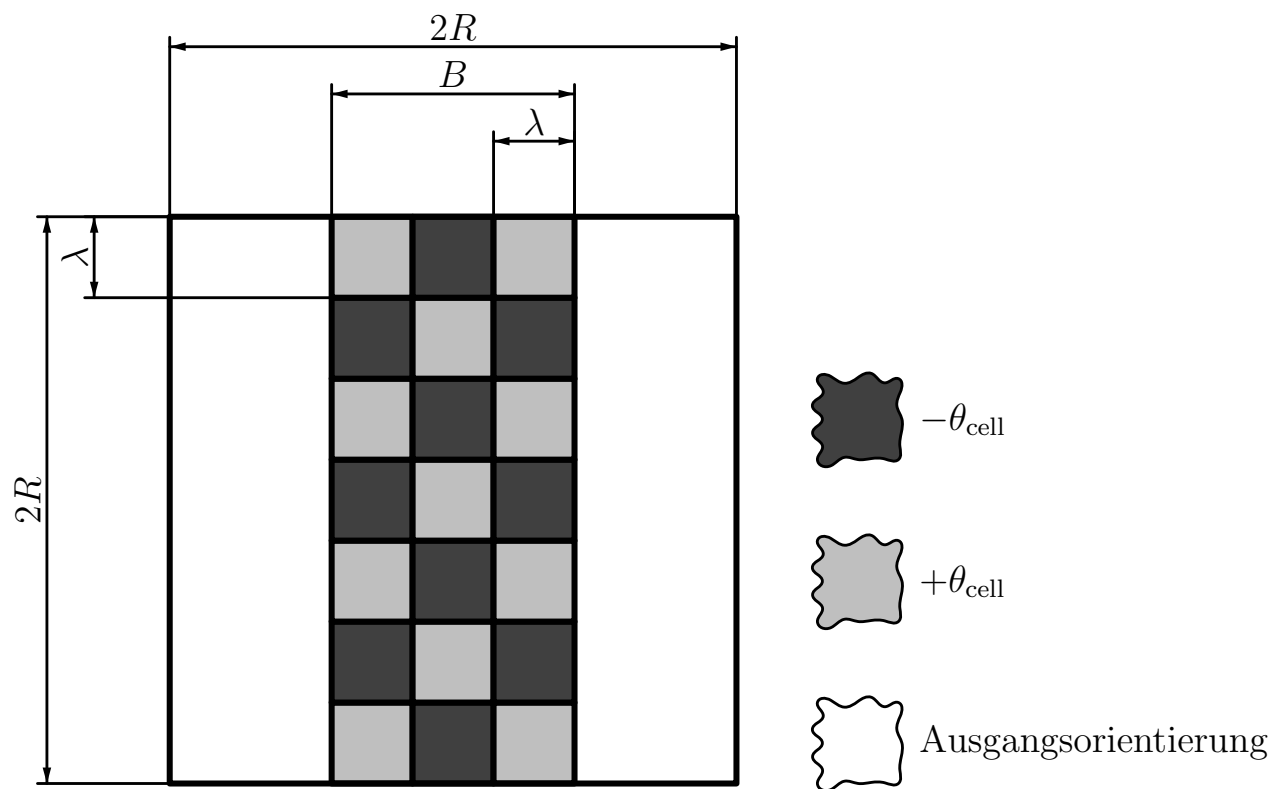


Bild 7.19.: Modell der Zellmikrostruktur eines plastisch verformten Kornes.

Der Index 0 bezeichnet dabei den Bereich mit der Ausgangsorientierung, die Indizes + und – bezeichnen die Bereiche mit den Missorientierungen $+\theta_{\text{cell}}$ beziehungsweise $-\theta_{\text{cell}}$, bezogen auf die Ausgangsorientierung. A_{Ges} ist die Gesamtfläche. Die relativen Flächenanteile sind

$$f_0 = \frac{A_0}{A_{\text{Ges}}} = \frac{N_0}{N_{\text{Ges}}} \quad (7.12)$$

$$f_+ = \frac{A_+}{A_{\text{Ges}}} = \frac{N_+}{N_{\text{Ges}}} = f_- \quad (7.13)$$

Hierbei bezeichnet N_{Ges} die Anzahl der Messpunkte, die in den jeweiligen Bereich fallen mit $N_{\text{Ges}} = N_0 + 2N_+$. Für die Standardabweichung der Orientierung gilt nun ausgehend von Gl. (7.8)

$$\theta_{\text{StdDev}} = \sqrt{\frac{2N_+}{N_{\text{Ges}} - 1}} \theta_{\text{cell}} \approx \sqrt{2f_+} \theta_{\text{cell}} \quad (7.14)$$

Ist $\langle \Delta\theta_2 \rangle$ der Mittelwert der $\Delta\theta_{2,i}$ (siehe Gl. (5.8)) an den Messpunkten i über ein Korn, so gilt

$$\langle \Delta\theta_2 \rangle = \frac{1}{N_{\text{Ges}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{Ges}}} \Delta\theta_{2,i} \quad (7.15)$$

Es ist hier zu beachten, dass sich die Anzahl der $\Delta\theta_{2,i}$ von der Anzahl der θ_i unterscheidet. Das liegt daran, dass von der EBSD-Messung an einem quadratischen Korn mit $n \times n$ Messpunkten zwar n^2 Werte für θ_i resultieren, aber nur $(n - 1)^2$ Werte für $\Delta\theta_{2,i}$. Der Unterschied hängt dabei von der jeweiligen Kornform sowie von der Anordnung eventueller Messfehlstellen ab. Die in den Gleichungen Gl. (7.8) und Gl. (7.15) verwendeten N_{Ges} sind also streng genommen unterschiedlich. Um beide Gleichungen später in Beziehung zueinander setzen zu können, wird stattdessen auf die relativen Flächenanteile f zurückgegriffen. Diese sind in erster Näherung besser vergleichbar.

In der Fläche A_0 ist nach Voraussetzung $\Delta\theta_{2,i} \approx 0^\circ$. In der Fläche $A_+ \cup A_-$ ist der Erwartungswert von $\Delta\theta_{2,i}$

$$\langle \Delta\theta_{2,i} \rangle = \sqrt{2} \theta_{\text{cell}} \quad \text{in } A_+ \cup A_- \quad (7.16)$$

Somit folgt für $\langle \Delta\theta_2 \rangle$

$$\langle \Delta\theta_2 \rangle = \frac{2N_+}{N_{\text{Ges}}} \sqrt{2} \theta_{\text{cell}} = 2\sqrt{2} f_+ \theta_{\text{cell}} \quad (7.17)$$

$$\Leftrightarrow \theta_{\text{cell}} = \frac{\langle \Delta\theta_2 \rangle}{2\sqrt{2} f_+} \quad (7.18)$$

Nach Einsetzen in θ_{StdDev} (Gl. (7.14)) ergibt sich

$$\theta_{\text{StdDev}} = \sqrt{2f_+} \frac{\langle \Delta\theta_2 \rangle}{2\sqrt{2} f_+} = \frac{\langle \Delta\theta_2 \rangle}{2\sqrt{f_+}} \quad (7.19)$$

Das heißt, dass sich anhand θ_{StdDev} und $\langle \Delta\theta_2 \rangle$ auf den plastisch verformten Anteil des Kornes schließen lassen sollte. In der Praxis funktioniert das jedoch nicht. Das Grundrauschen des EBSD-Systems führt dazu, dass die Annahme $\Delta\theta_{2,i} = 0^\circ$ in A_0 in den Messergebnissen nicht erfüllt ist. Die in A_+ und A_- zu messenden Orientierungsgradienten liegen zum Teil in der Nähe der Orientierungsauflösung. Anstelle der absoluten Werte werden deshalb für jedes Korn die über den gesamten Zugversuch gemittelten Inkremente betrachtet: $\langle \partial \langle \Delta\theta_2 \rangle / \partial \varepsilon_{\text{pl,e}} \rangle$ und $\langle \partial \theta_{\text{StdDev}} / \partial \varepsilon_{\text{pl,e}} \rangle$. Das sind die Steigungen der in Abb. 7.17 und Abb. 7.18 gezeigten Fitgeraden. Es gilt:

$$\frac{\langle \partial \theta_{\text{StdDev}} / \partial \varepsilon_{\text{pl,e}} \rangle}{\langle \partial \langle \Delta\theta_2 \rangle / \partial \varepsilon_{\text{pl,e}} \rangle} = \left\langle \frac{\partial \theta_{\text{StdDev}}}{\partial \langle \Delta\theta_2 \rangle} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2\sqrt{f_+}} \right\rangle \quad (7.20)$$

Eine Konsequenz der Formel ist, dass wegen $f_+ \leq 1/2$ der Wert 0.71 eine untere Grenze darstellt. In diesem Fall bezieht sich die mikrostrukturelle Entwicklung auf das komplette Korn. Wegen $f_+ = A_+ / A_{\text{Ges}} = A_+ / 4R^2$ gilt

$$\left\langle \frac{\partial \theta_{\text{StdDev}}}{\partial \langle \Delta\theta_2 \rangle} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{A_+}} \right\rangle R \quad (7.21)$$

Die experimentellen Ergebnisse sind in Abb. 7.20 dargestellt. Die kleinsten Messwerte liegen bei 0.9, somit findet auch bei den kleinen Körnern die mikrostrukturelle Entwicklung hauptsächlich nur in einem Teil des Kornes statt. Obwohl die Messwerte eine sehr große Streuung aufweisen, ist die Tendenz klar erkennbar, dass $\langle \partial \theta_{\text{StdDev}} / \partial \langle \Delta\theta_2 \rangle \rangle$ mit der Korngröße R ansteigt. Das bedeutet, dass A_+ im Mittel nicht proportional zur Kornfläche

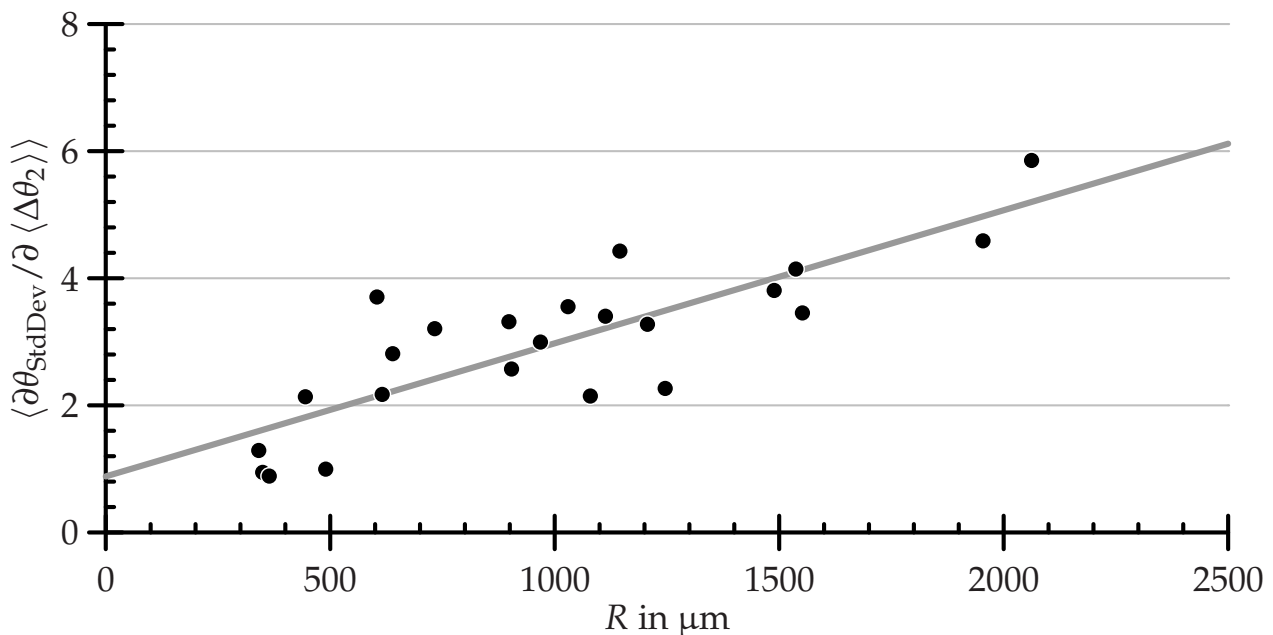


Bild 7.20.: $\langle \partial \theta_{\text{StdDev}} / \partial \langle \Delta \theta_2 \rangle \rangle$ als Funktion der Korngröße R .

ansteigt, sondern wesentlich langsamer. Die in Abb. 7.20 gezeigte Fitgerade ist relativ nahe an einer Ursprungsgeraden, was im Mittel sogar $A_+ = \text{const}$ bedeuten würde.

Fazit Unter der Annahme, dass sich diese Ergebnisse auf das Volumen erweitern lassen, folgt damit, dass der verfestigte Volumenanteil mit steigender Korngröße abnimmt. Anders formuliert: Die experimentellen Ergebnisse weisen darauf hin, dass große Körner im Mittel langsamer verfestigen als kleine Körner. Das ist in Einklang mit Werkstoffmodellen wie zum Beispiel den in Kapitel 3.3.2 erwähnten. Zu Beginn des Kapitels wurde gezeigt, dass der Orientierungsgradient ein Maß für die lokale Verfestigung ist. Wie in Abb. 7.9 zu erkennen ist, konzentriert sich die Verfestigung jedoch nicht in der Nähe der Korngrenzen, auch wenn sie zunächst von dort ausgeht. Das steht im Widerspruch zu den Annahmen vieler Werkstoffmodelle, die eine Verfestigung bevorzugt nahe der Korngrenzen annehmen, und deshalb aus der unterschiedlichen Abhängigkeit der Korngrenzenfläche beziehungsweise des Volumens von der Korngröße eine abnehmende mittlere Verfestigung mit zunehmender Korngröße herleiten. Diese Annahme wird durch Härtemessungen an verformten Körnern gestützt, die in der Nähe der Korngrenze

erhöhte Härtewerte liefern. Allerdings liefern auch Härtemessungen an unverformten Körnern solche erhöhten (und stellenweise auch verringerten) Härtewerte in der Nähe von Korngrenzen. Der Effekt der Korngrenze auf die Härte ist so deutlich, dass er bereits mit Hilfe von Mikrohärtmessungen in relativ großer Entfernung (zum Teil mehr als 50 μm) von der Korngrenze feststellbar ist [182, 183].⁷ Es liegt somit der Verdacht nahe, dass diese Erhöhung der lokalen Härte aus der Nähe des Härteeindrucks zur Grenzfläche resultiert und keinen Rückschluss auf eine erhöhte Verfestigung in der Nähe der Korngrenze aufgrund der *vor* dem Härteeindruck eingebrachten plastischen Verformung darstellt. Anders formuliert: Die Härtemessungen zeigen, dass die Verfestigung höher ist, wenn die plastische Verformung vom Experimentator in die Nähe der Korngrenze gezwungen wird. Sie sagt aber nichts darüber aus, ob sich an dieser Stelle auch von selbst eine entsprechende plastische Verformung einstellen würde.⁸

7.3.2. Lokales Verfestigungsverhalten von Cu

Wie zuvor an Fe-3%Si wurden an Cu schrittweise Zugversuche durchgeführt und die Entwicklung der Orientierungsgradienten gemessen. Analog zu Abb. 7.16 ist in Abb. 7.21 der Verlauf der verschiedenen, über alle Körner gemittelten Missorientierungskenngrößen als Funktion der makroskopischen plastischen Dehnung aufgetragen. Zwillingskorngrenzen wurden bei der Auswertung wie normale Korngrenzen behandelt, sodass in die Auswertung mehr als 400 Körner einbezogen sind.⁹ Bei der untersuchten Probe zeigte die lokale Verformungsmessung anhand der Korngrenzentrupelpunktbewegung für den letztlich zum Versagen führenden Bereich zum ersten Mal bei $\varepsilon_{\text{pl,macro}} = 9.9 \%$ eine Dehnungslokalisation. Das Diagramm zeigt die gleiche Charakteristik wie bei Fe-3%Si: Zu Beginn des Versuchs

⁷Erste eigene Messungen an Fe3%Si zeigten, dass die Härte in der Nähe der verschiedenen Korngrenzensegmente eines Kornes in Abhängigkeit von der Art des Korngrenzensegmentes größer oder auch kleiner sein kann als im Korninneren.

⁸Ein Nachteil der Härtemessung besteht übrigens darin, dass sie nicht zerstörungsfrei ist.

⁹Die Gruppierung der Orientierungsmessungen erfolgte automatisch mit Hilfe der selbstentwickelten Software GRAINFINDER. Ausgehend von einem Messpunkt gilt ein benachbarter Punkt als zum gleichen Korn gehörig, wenn der Orientierungsgradient unterhalb einer vorgegebenen Schwelle liegt. Im Fall der Cu-Probe betrug dieser Wert 8° . Besteht ein Korn aus weniger als 4 zusammenhängenden Messpunkten, wird es verworfen. Eine ähnliche Vorgehensweise zeigte beim Vergleich mit anderen Auswertemöglichkeiten die besten Ergebnisse, wobei als Referenz manuell ausgewertete TEM-Messungen verwendet wurden [184].

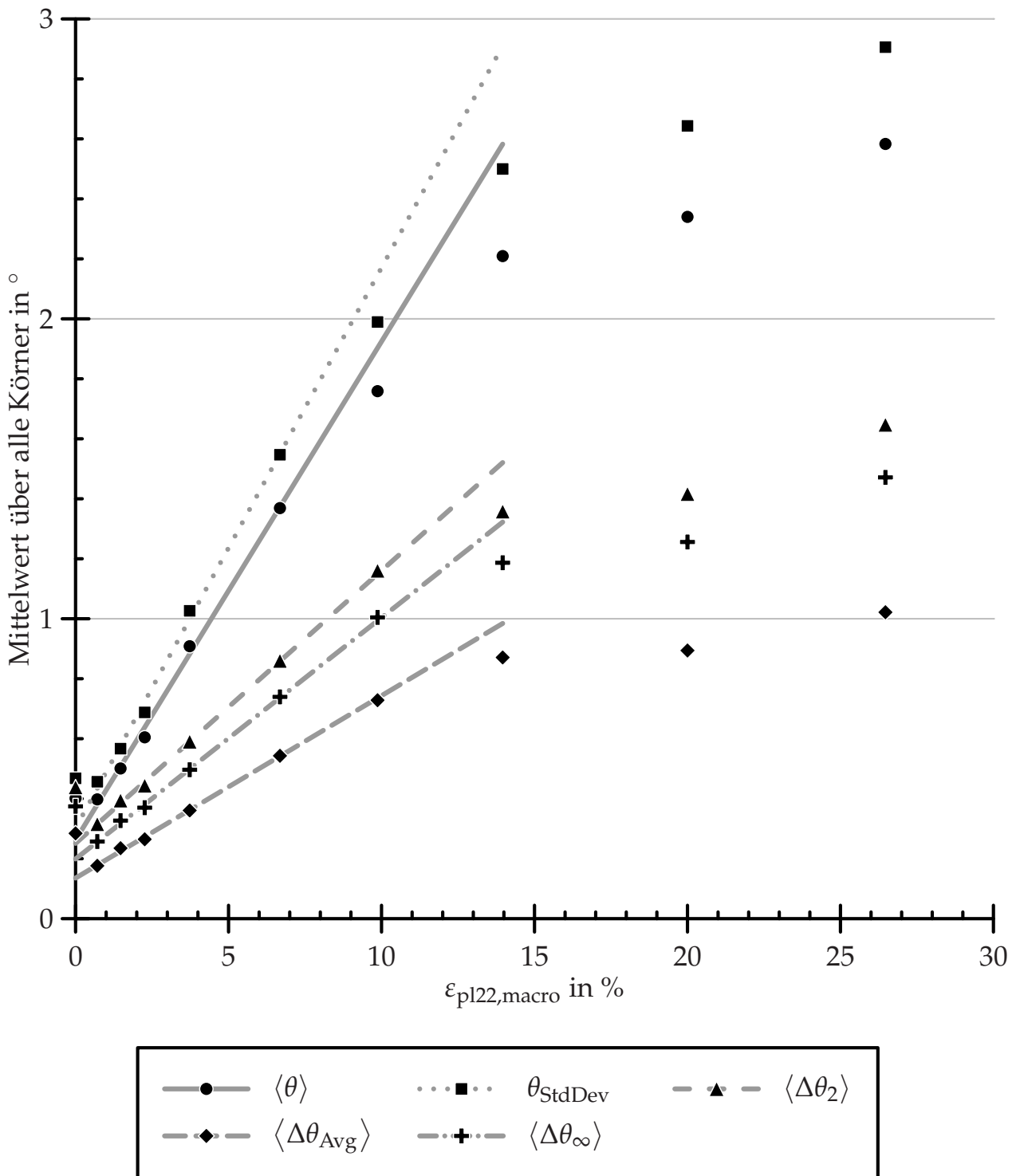


Bild 7.21.: Mittelwerte verschiedener Missorientierungskenngrößen als Funktion der makroskopischen plastischen Dehnung für Cu. Es ist zu erkennen, dass die Messung bei $\varepsilon_{pl,macro} = 0 \%$ eine signifikante Abweichung zeigt. Ursache hierfür war vermutlich eine fehlerhafte Kalibrierung des EBSD-Systems.

weisen alle Kenngrößen ein lineares Verhalten auf. $\langle \theta \rangle$ und θ_{StdDev} zeigen bereits vor Beginn der Dehnungslokalisation signifikante Abweichungen vom linearen Verlauf, während die Linearität der OGM-Kenngrößen länger erhalten bleibt.¹⁰ Das Abfallen der Steigung kann vor dem Hintergrund, dass der Orientierungsgradient ein Maß für die Verfestigung ist, einfach erklärt werden: Dehnungslokalisation tritt auf, wenn ein Bereich der Probe trotz voranschreitender plastischer Verformung unterdurchschnittlich verfestigt. Wären die Orientierungsgradienten ein Maß für die plastische Dehnung, blieben sie davon unbeeinflusst. Dies ist also ein weiterer Hinweis darauf, dass lokale Orientierungsänderungen statt mit der plastischen Dehnung mit der lokalen Verfestigung zusammenhängen.

Cu weist eine sehr hohe Verfestigung auf. Plastisch aktive Regionen werden deshalb aufgrund des starken Anstiegs der lokalen Fließspannung schnell inaktiv, sodass die weitere Verformung in den angrenzenden Regionen stattfindet. Während die Orientierungsgradienten bei Fe-3%Si eine relativ lokal begrenzte Verfestigung anzeigen, sollte bei Cu eine großflächigere Verfestigung sichtbar sein. Dies kann anhand von OGM-Messungen bestätigt werden. Es gibt zwar auch bei Cu bandförmige Bereiche mit besonders hohen Orientierungsgradienten, die Umgebung dieser Bereiche ist jedoch nicht so homogen orientiert wie beim Fe-3%Si, sondern zeigt durchgängig hohe Orientierungsgradienten (Vergleiche Abb. 7.22 und Abb. 7.9).

¹⁰Eine logarithmische Darstellung zeigt, dass keine der Kurven mit Hilfe eines Potenzgesetzes sinnvoll angenähert werden kann.

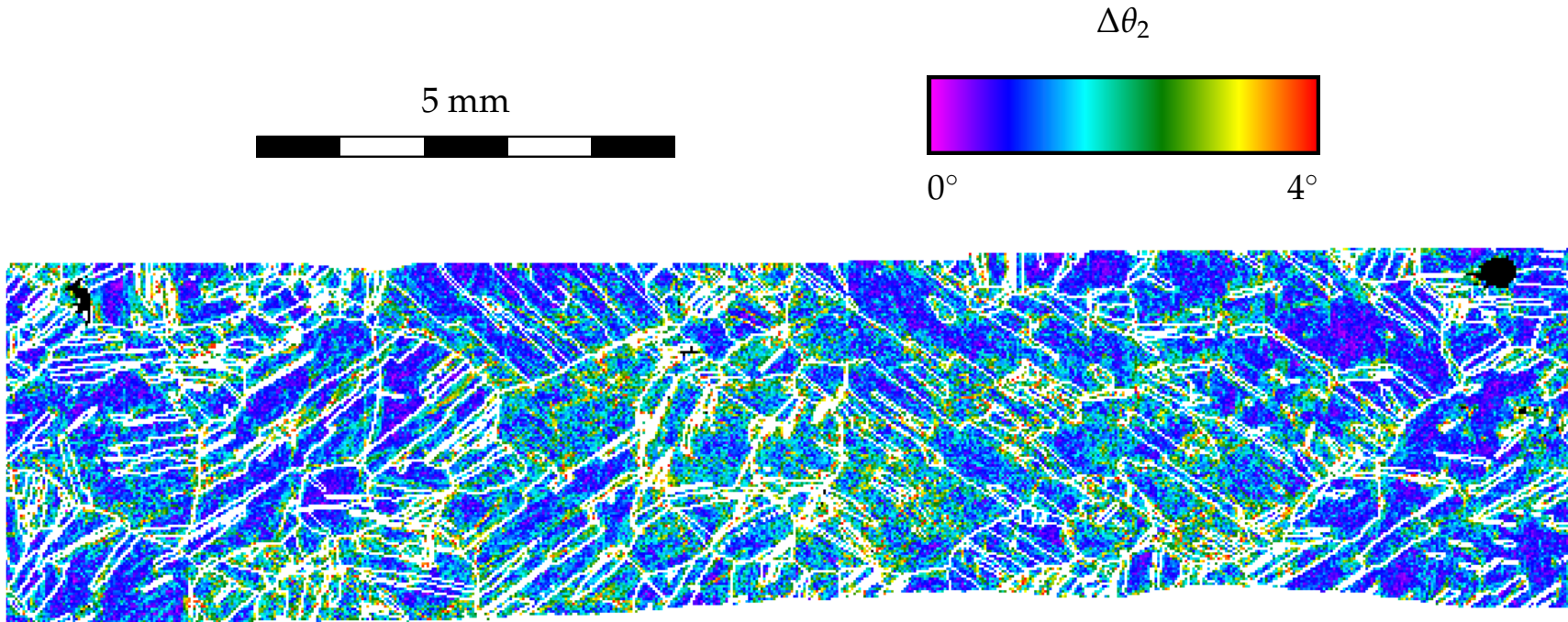


Bild 7.22.: Darstellung von $\Delta\theta_2$ für Cu bei $\varepsilon_{\text{pl,macro}} = 10 \%$. Fehlstellen sind schwarz dargestellt, Wertüberläufe weiß. Der Messpunkteabstand beträgt $30 \mu\text{m}$.

Aufgrund dieses Unterschieds wird für Cu ein leicht modifiziertes Modell verwendet. Die Mikrostruktur wird in zwei Anteile zerlegt. Der erste Anteil beschreibt die bandförmigen Bereiche, deren Abstand deutlich größer ist als der verwendete Messpunkteabstand $\Delta x = \Delta y$. Diese Bänder durchziehen ein Korn ganz oder teilweise und führen zu einer Fragmentierung ähnlich wie in [115] an Al beobachtet (siehe Abb. 7.23). Der zweite Anteil beschreibt die Umgebung der Bänder.

Zuerst wird der Einfluss der Bänder auf $\langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle$ betrachtet (siehe Gl. (5.10)). Angenommen, die Bänder resultieren aus lokalen kontinuumsmechanischen Randbedingungen bei der Verformung. Dann sind sie geometrisch bedingt und somit größeninvariant. Die Gesamtlänge der Bänder eines Kornes skaliert demnach mit dem Kornradius R . Eine Dickenänderung ist im Rahmen der durch den Messpunkteabstand gegebenen Ortsauflösung nicht sicher feststellbar; sie wird deshalb vernachlässigt. Die mittlere Orientierungsänderung an einem Band sei θ_{band} . Das Band sei zur x-Achse um den Winkel α geneigt. Dann ergibt sich für den Beitrag des Bandes $\langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle|_{\text{band},\alpha}$ zu dem über das ganze Korn gemittelten Wert $\langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle|_{\text{band},\alpha} &= \frac{1}{N_{\text{Ges}}} \sum_i \Delta\theta_{\text{Avg},i} \\ &\approx \frac{1}{N_{\text{Ges}}} \frac{1}{2} \left(\frac{2Rl_{\text{rel}}}{\Delta x} \sin \alpha + \frac{2Rl_{\text{rel}}}{\Delta x} \cos \alpha \right) \theta_{\text{band}} \\ &= \frac{1}{N_{\text{Ges}}} \frac{Rl_{\text{rel}}}{\Delta x} (\sin \alpha + \cos \alpha) \theta_{\text{band}} \end{aligned} \quad (7.22)$$

Hierbei ist N_{Ges} die Anzahl der Messpunkte im Korn, l_{rel} ist die Bandlänge relativ zur Korngröße. Wegen der Annahme der Größeninvarianz hängt l_{rel} nicht von R ab. Da die Bänder im statistischen Mittel beliebig geneigt sein können, folgt wegen

$$\frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin \alpha + \cos \alpha \, d\alpha = \frac{4}{\pi} \quad (7.23)$$

im Mittel

$$\langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle|_{\text{band}} \approx \frac{1}{N_{\text{Ges}}} \frac{4}{\pi} \frac{Rl_{\text{rel}}}{\Delta x} \theta_{\text{band}} \quad (7.24)$$

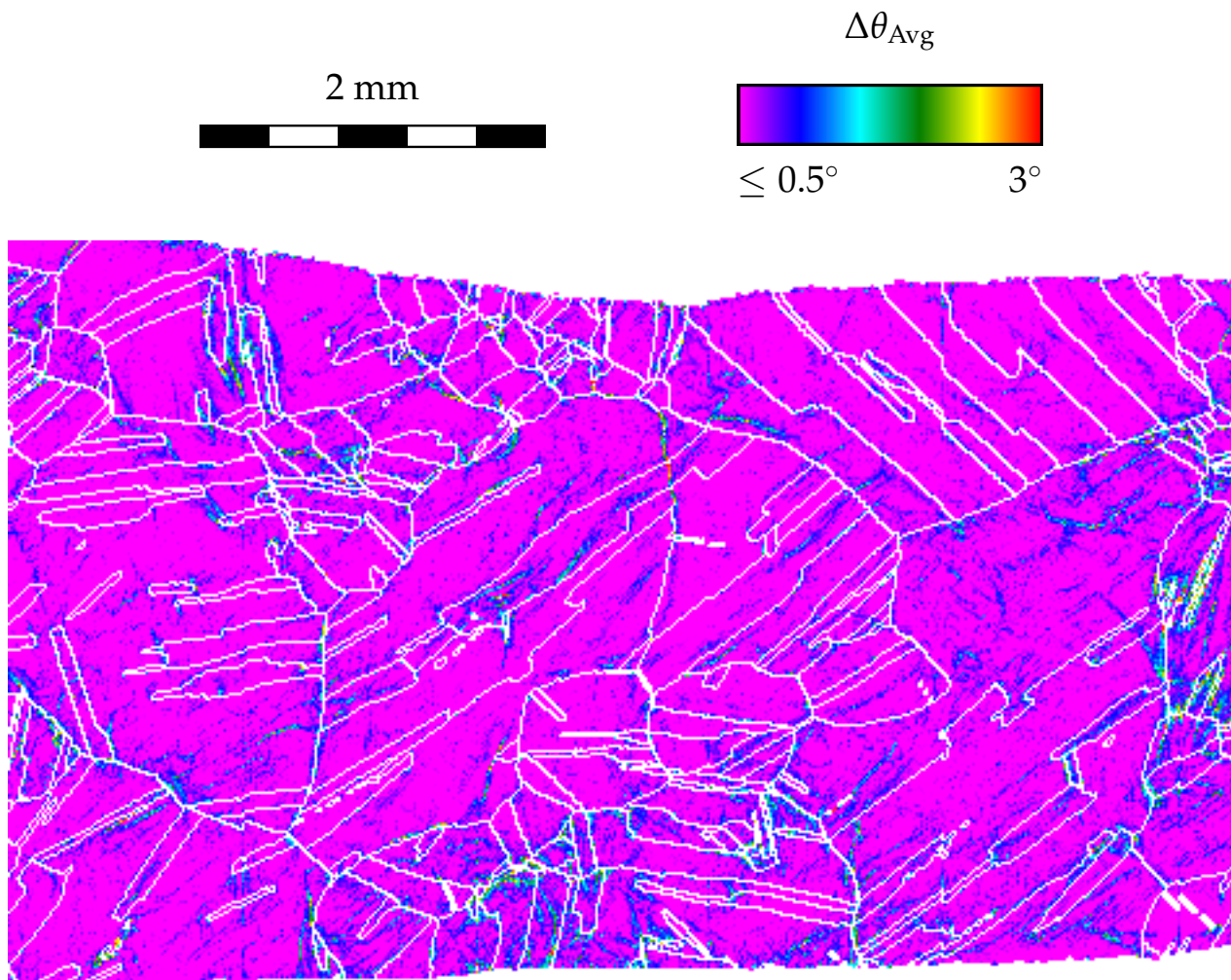


Bild 7.23.: Darstellung von $\Delta\theta_{\text{Avg}}$ für Cu bei $\varepsilon_{\text{pl,macro}} = 6.7\%$ (Ausschnittsvergrößerung). Fehlstellen sind schwarz dargestellt, Wertüberläufe weiß. Zur besseren Verdeutlichung der Strukturen wurde ein anderer Maßstab als in Abb. 7.22 verwendet. Messpunkteabstand $15\ \mu\text{m}$.

Mit $N_{\text{Ges}} \approx \pi(R/\Delta x)^2$ folgt

$$\langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle|_{\text{band}} \approx \frac{4}{\pi^2} \frac{\Delta x}{R} l_{\text{rel}} \theta_{\text{band}} \quad (7.25)$$

Nun muss noch die Umgebung der Bänder berücksichtigt werden. Diese wird in erster Näherung modelliert als Bereich mit einheitlichem Orientierungsgradient $\Delta\theta_{\text{Avg,G}}$. Dies ist ein Maß für die diffus beziehungsweise statistisch verteilte Verfestigung. In Abgrenzung zu θ_{band} kann $\Delta\theta_{\text{Avg,G}}$ als nicht geometrisch bedingt angesehen werden. Es ergibt sich näherungsweise

$$\begin{aligned} \langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle &\approx \langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle|_{\text{band}} + \Delta\theta_{\text{Avg,G}} \\ &= \frac{4}{\pi^2} \frac{\Delta x}{R} l_{\text{rel}} \theta_{\text{band}} + \Delta\theta_{\text{Avg,G}} \end{aligned} \quad (7.26)$$

Die Ergebnisse der Messung von $\langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle$ als Funktion von R^{-1} sind in Abb. 7.24 gezeigt. Die Einzelmessungen wurden aufgrund der hohen Streuung anhand der Korngröße zu Klassen zusammengefasst, wobei wegen der durch den Messpunkteabstand gegebenen Ortsauflösung von 15 μm Körner mit einem Radius kleiner als 40 μm nicht berücksichtigt wurden. Es ist erkennbar, dass $\langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle$ mit abnehmender Korngröße tendentiell zunimmt. Das bedeutet, dass die mittlere Missorientierung und somit die mittlere Verfestigung bei kleinen Körnern stets höher ist als bei großen. Dies ist in Einklang mit den im vorhergehenden Kapitel diskutierten Ergebnissen von Fe-3%Si.¹¹

Der anhand des Modells postulierte lineare Verlauf kann näherungsweise gefunden werden. Nach erstmaligem Auftreten der Dehnungslokalisation scheinen sich die Körner mit einem Radius kleiner als etwa 80 μm anders zu verhalten als die großen Körner: sie verfestigen relativ gesehen weniger stark. Dies mag daran liegen, dass die Verformung an dieser Stelle bevorzugt von den größeren Körnern getragen wird. Eine andere mögliche Ursache könnte darin liegen, dass sich in den großen Körnern kleine Subkörner bilden, die in ihrem Innern weniger stark verfestigt sind. Wird die lineare Regression nur für Körner ab einem Radius von 80 μm durchgeführt, so ändert sich die Bestgerade bei kleinen Verformungen kaum; nach Auftreten der Dehnungslokalisation sind jedoch deutliche Unterschiede sichtbar. Bei der

¹¹Und genau wie bei Fe-3%Si kann auch für Cu eine erhöhte Verfestigung in der Nähe der Korngrenzen nicht festgestellt werden (Abb. 7.22).

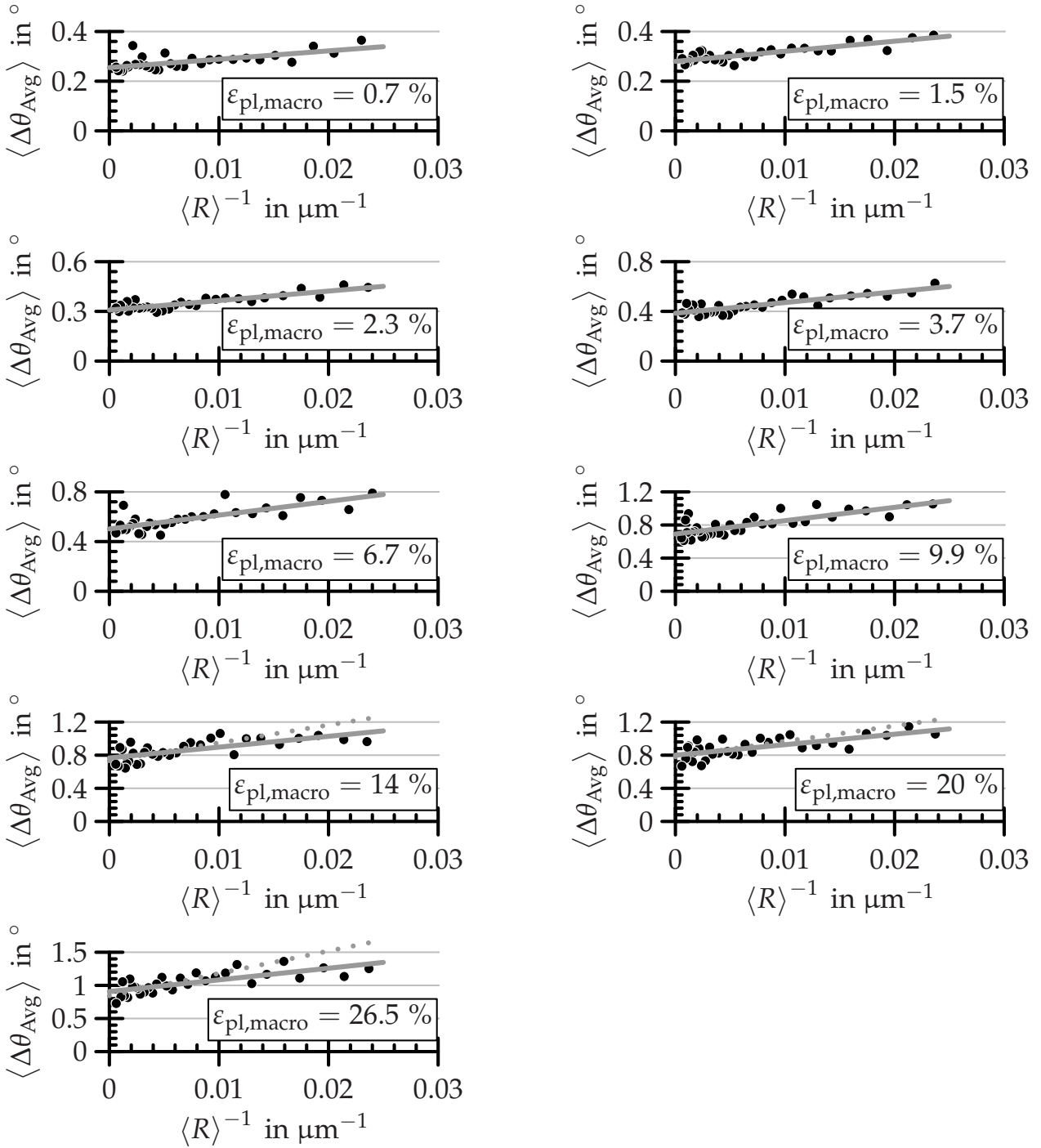


Bild 7.24.: $\langle \Delta\theta_{\text{Avg}} \rangle$ als Funktion von $\langle R^{-1} \rangle$. Die Körner wurden anhand der Korngröße zu Klassen zusammengefasst. Die Bestgerade für Körner mit $R \geq 40 \mu\text{m}$ ist als durchgezogene Linie dargestellt, beschränkt auf Körner mit $R \geq 80 \mu\text{m}$ ist sie als gepunktete Linie dargestellt.

nachfolgenden Auswertung werden deshalb nach der Dehnungslokalisation nur die Körner mit $R \geq 80 \mu\text{m}$ berücksichtigt.

Die Auswertung der Messungen anhand von Gl. (7.26) nach dem Beitrag der bandförmigen Bereiche zur mittleren Missorientierung $l_{\text{rel}}\theta_{\text{band}}$ ist in Abb. 7.25 gezeigt, die Auswertung nach der mittleren Missorientierung in der Umgebung der Bänder $\Delta\theta_{\text{Avg,G}}$ ist in Abb. 7.26 dargestellt. Wird berücksichtigt, dass Genauigkeit und Rauschen des EBSD-Systems eine untere Grenze setzen und somit kleine Werte für $l_{\text{rel}}\theta_{\text{band}}$ und $\Delta\theta_{\text{Avg,G}}$ nicht gemessen werden können, ergeben sich folgende Zusammenhänge:

$$l_{\text{rel}}\theta_{\text{band}} \propto (\varepsilon_{\text{pl}22,\text{macro}})^{0.72} \quad (7.27)$$

$$\Delta\theta_{\text{Avg,G}} \propto (\varepsilon_{\text{pl}22,\text{macro}})^{0.42} \quad (7.28)$$

Das Modell geht davon aus, dass $l_{\text{rel}}\theta_{\text{band}}$ eine Kennzahl für die geometrisch bedingte Verfestigung ist, während $\Delta\theta_{\text{Avg,G}}$ eine Kennzahl für die statistisch bedingte Verfestigung ist. Es ist davon auszugehen, dass bezüglich der Entwicklung während der Verformung zwischen $l_{\text{rel}}\theta_{\text{band}}$ und geometrisch notwendigen Versetzungszellwänden einerseits, sowie $\Delta\theta_{\text{Avg,G}}$ und statistischen Versetzungszellwänden andererseits ein Zusammenhang besteht. In [127, 185] wurden im TEM Missorientierungen über GNB und IDB von Al gemessen. Die TEM-Messungen liefern die Zusammenhänge

$$\langle\theta_{\text{GNB}}\rangle \propto (\varepsilon_{\text{pl,e,macro}})^{2/3} \quad (7.29)$$

$$\langle\theta_{\text{IDB}}\rangle \propto (\varepsilon_{\text{pl,e,macro}})^{1/2} \quad (7.30)$$

Die mittels Gl. (7.26) experimentell erhaltenen Zusammenhänge für $l_{\text{rel}}\theta_{\text{band}}$ und $\Delta\theta_{\text{Avg,G}}$ kommen diesen Ergebnissen sehr nahe. Die Ergebnisse für die statistischen Versetzungen stimmen sogar quantitativ überein (Tab. 7.1). Da l_{rel} nicht bekannt ist, kann θ_{band} nicht direkt mit $\langle\theta_{\text{GNB}}\rangle$ verglichen werden.

Fazit Mit Hilfe des OGM konnte gezeigt werden, dass sich das lokale Verfestigungsverhalten von Cu signifikant von Fe-3%Si unterscheidet. Die Ergebnisse sind konsistent mit den Erwartungen aufgrund der höheren Verfestigung von Cu. Die über die gesamte Probe gemittelten Missorientierungskennwerte als Funktion der makroskopischen plastischen Dehnung zeigen bei Cu sowie bei Fe-3%Si einen ähnlichen Verlauf, der zu Beginn

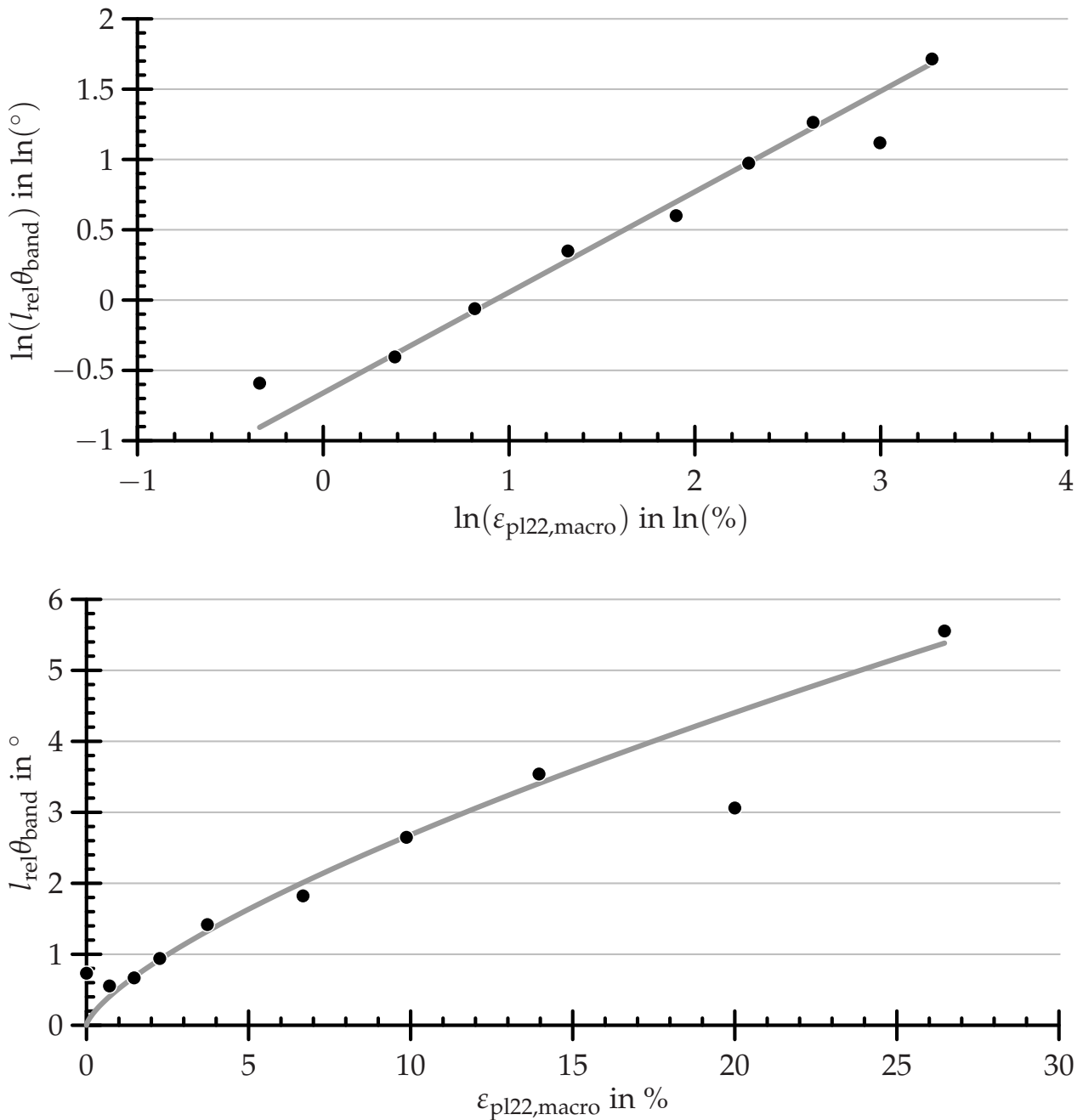


Bild 7.25.: Der Verlauf der geometrisch bedingten Kornfragmentierung $l_{\text{rel}}\theta_{\text{band}}$. *Oben:* Darstellung der logarithmierten Werte. Die Bestgerade liefert Exponent und Vorfaktor für eine parabolische Näherung der Messwerte (*unten*).

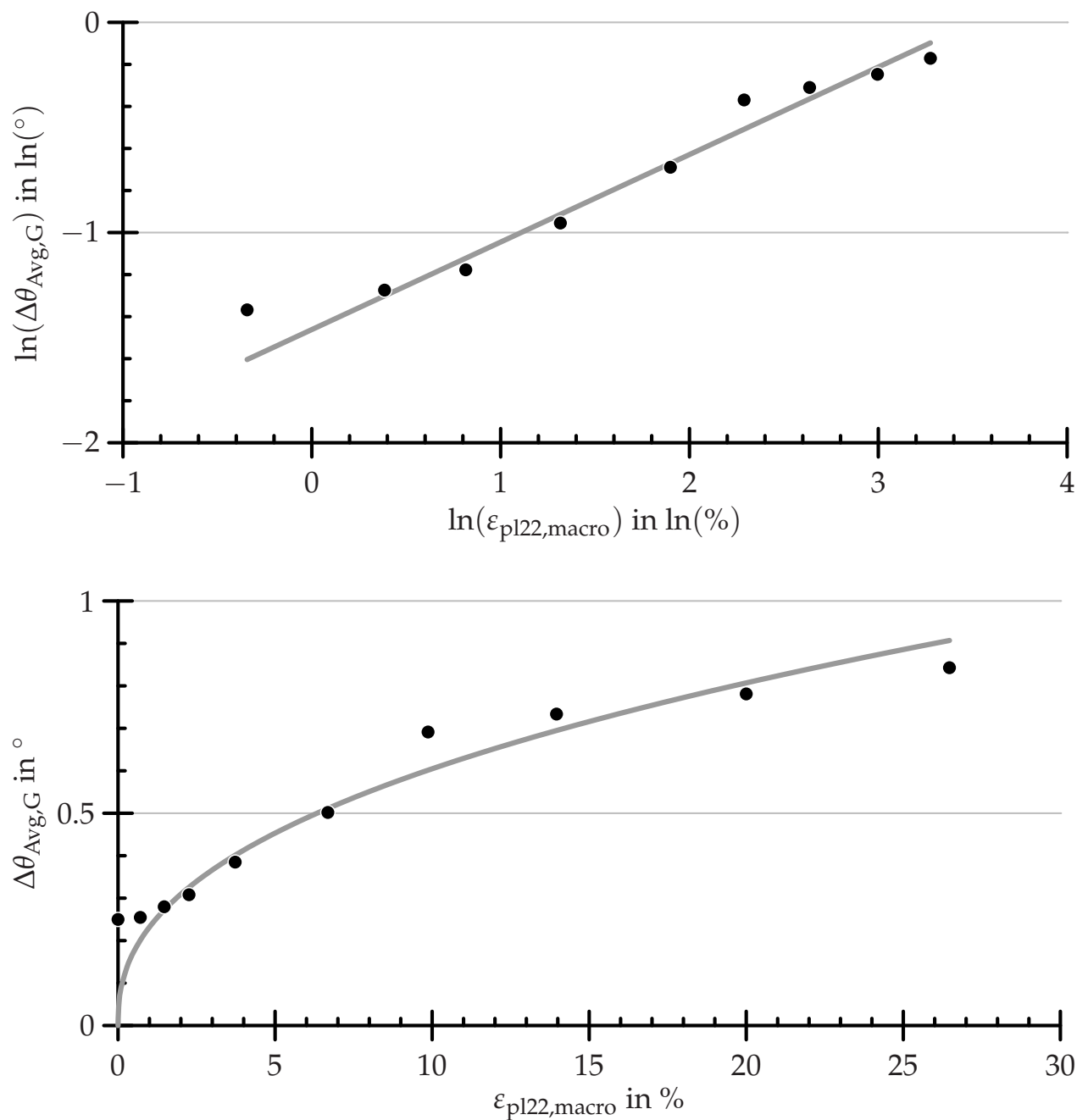


Bild 7.26.: Der Verlauf der statistisch verteilten Verfestigung $\Delta\theta_{\text{Avg,G}}$. *Oben:* Darstellung der logarithmierten Werte. Die Bestgerade liefert Exponent und Vorfaktor für eine parabolische Näherung der Messwerte (*unten*).

$\varepsilon_{\text{pl,e,macro}}$	$\Delta\theta_{\text{Avg,G}}$	$\langle\theta_{\text{IDB}}\rangle$ aus [127]
5 %	0.45°	0.48°
10 %	0.60°	0.61°
30 %	0.96°	0.98°

Tabelle 7.1.: Vergleich der mittels OGM gemessenen mittleren Missorientierung mit den Ergebnissen von TEM-Messungen aus der Literatur. Wegen $d\varepsilon_{\text{pl,e}} = (2d\varepsilon_{ij}d\varepsilon_{ij}/3)^{-1/2}$ gilt beim Zugversuch $\varepsilon_{\text{pl,e,macro}} = \varepsilon_{\text{pl22,macro}}$, sodass eine direkte Vergleichbarkeit gegeben ist.

linear ist und mit einsetzender Dehnungslokalisation zu kleineren Missorientierungswerten hin abweicht. Dies ist darin begründet, dass die Dehnung dann lokalisiert, wenn ein Probenbereich eine unterdurchschnittliche Verfestigungsrate aufweist. Eine Auswertung von $\langle\Delta\theta_{\text{Avg}}\rangle$ als Funktion der Korngröße zeigt auch bei Cu eine im Mittel zunehmende Verfestigung mit abnehmender Korngröße. Die Verfestigung kann in einen geometrisch bedingten, bandförmigen Bereich und einen statistischen, das ganze Korn umfassenden Bereich unterteilt werden. Der daraus resultierende Zusammenhang zwischen geometrisch beziehungsweise statistisch bedingter Verfestigung und der plastischen Dehnung ist vergleichbar mit dem Zusammenhang zwischen der Missorientierungsentwicklung an geometrisch bedingten Versetzungszellwänden und statistischen Versetzungszellwänden, wie sie im TEM gemessen wurden [127]. Wo ein Vergleich möglich war, konnte außerdem eine quantitative Übereinstimmung gezeigt werden.

7.4. Größeneffekte der ausgeprägten Streckgrenze

Ausgehend von den Überlegungen in Kapitel 6.1.2 wurde der Einfluss von Korngröße und Blechdicke auf die obere und untere Streckgrenze im Zugversuch betrachtet. Bei den dicken Blechen war die mittlere Blechdicke $\langle D \rangle$ etwa 960 μm , bei den dünnen Blechen etwa 300 μm .

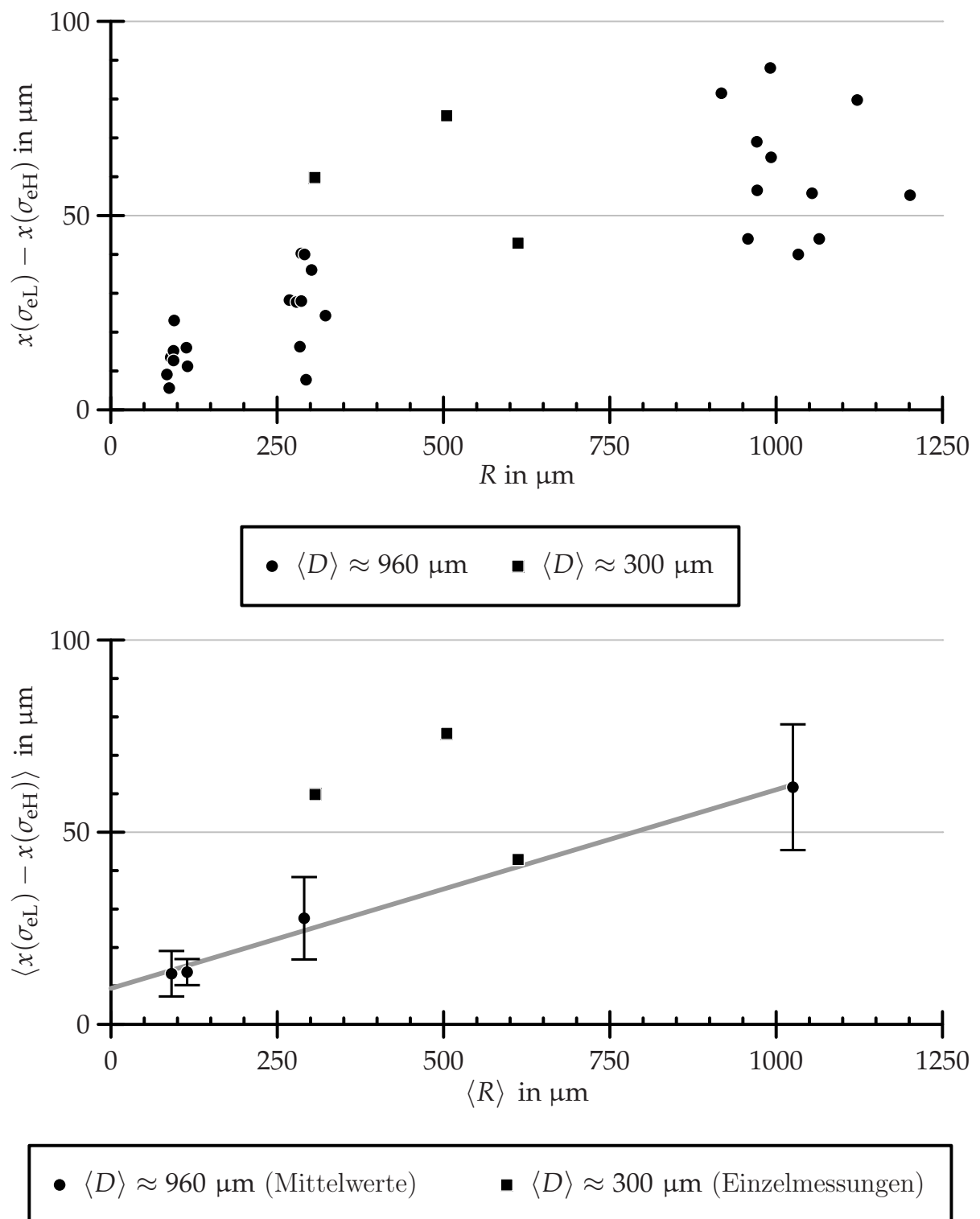


Bild 7.27.: Längenunterschied der Probe zwischen oberer und unterer Streckgrenze. *Oben:* Einzelmessungen aller Proben. *Unten:* Einzelmessungen der dünnen Probenbleche im Vergleich zum mittleren Verhalten der dicken Probenbleche.

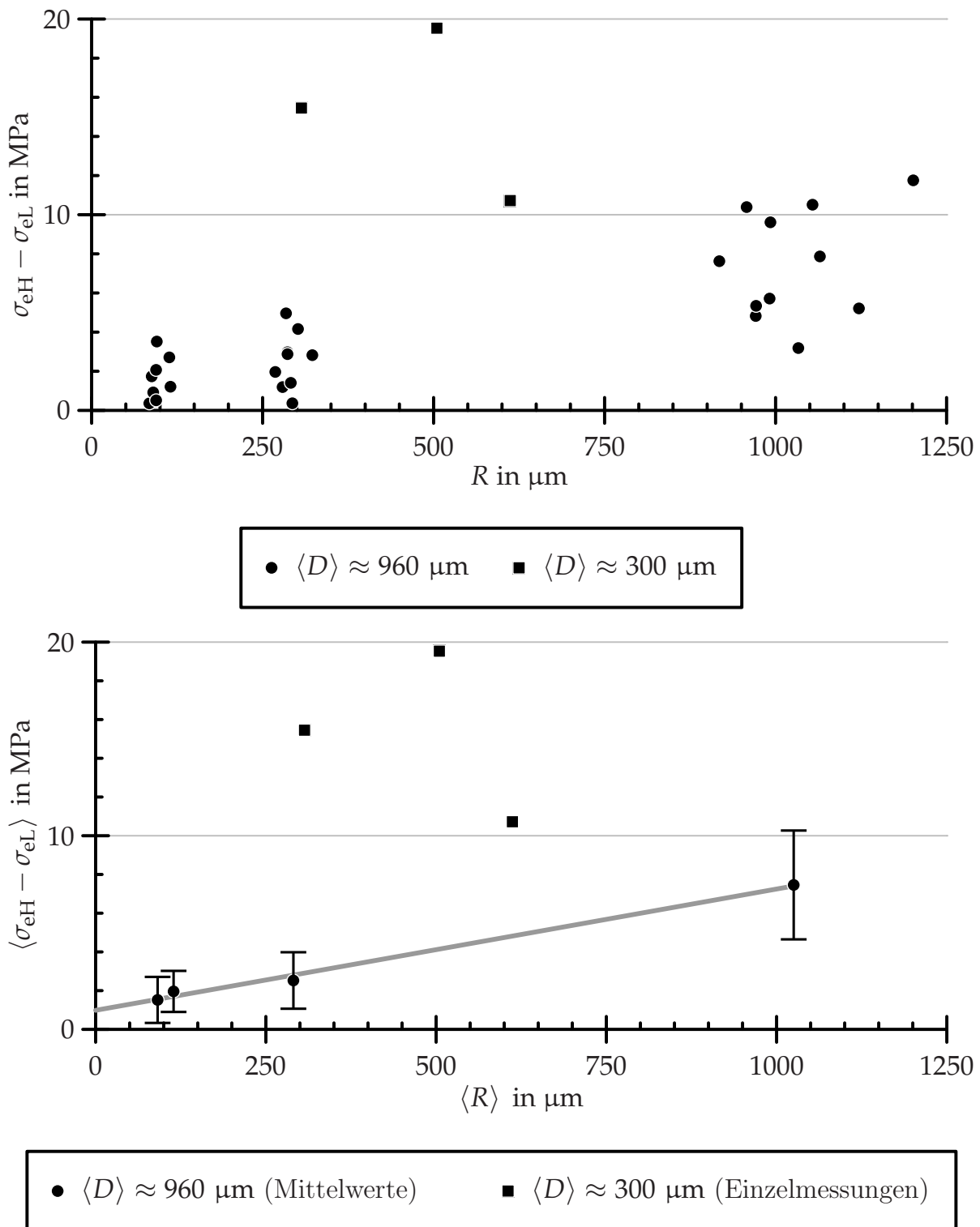


Bild 7.28.: Spannungsabfall zwischen oberer und unterer Streckgrenze. *Oben:* Einzelmessungen aller Proben. *Unten:* Einzelmessungen der dünnen Probenbleche im Vergleich zum mittleren Verhalten der dicken Probenbleche.

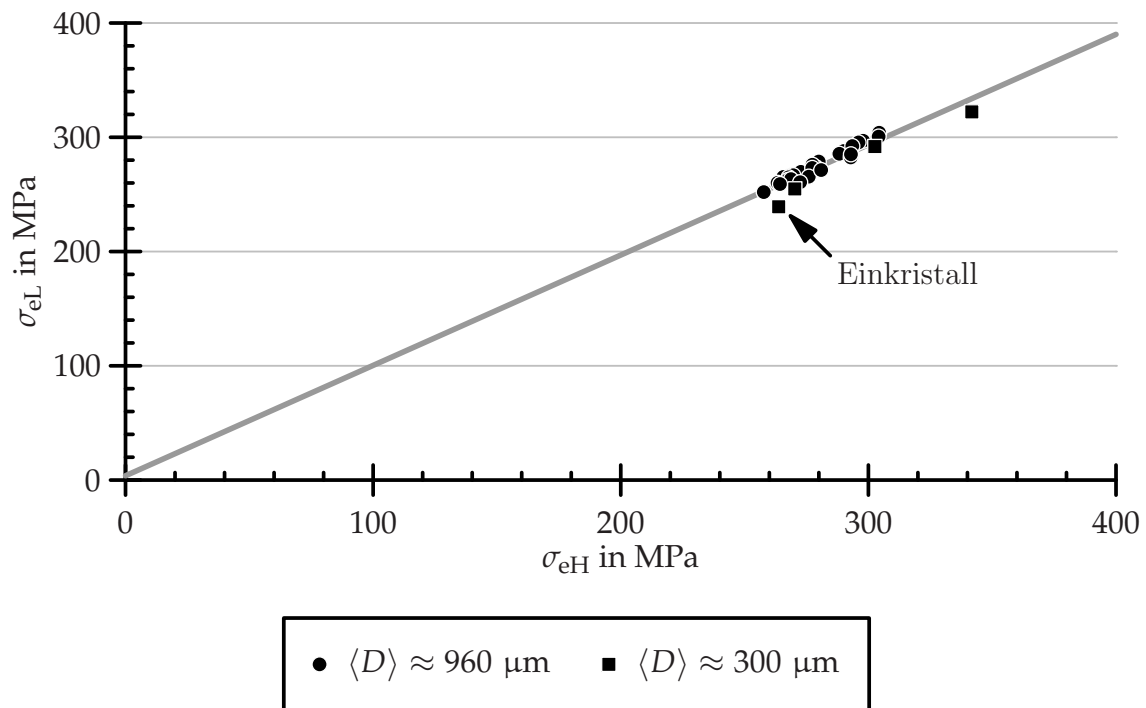


Bild 7.29.: Verhältnis von unterer Streckgrenze σ_{eL} zur oberen Streckgrenze σ_{eH}

In Abb. 7.27 ist der Längenunterschied der Proben zwischen oberer und unterer Streckgrenze dargestellt, in Abb. 7.28 ist der zugehörige Unterschied in der Spannung gezeigt. Der in Kapitel 6.1.2 postulierte Einfluss von Blechdicke und Korngröße auf die Messwerte kann hiermit bestätigt werden.

Das in Kapitel 7.1 vorgestellte Fließspannungsmodell vernachlässigt die Verfestigung. Aus diesem Grund wird überprüft, inwiefern Aussagen über die obere Streckgrenze σ_{eH} auf den weiteren Verlauf der Zugkurve extrapoliert werden können. Abb. 7.29 zeigt für alle Proben σ_{eH} in Relation zur unteren Streckgrenze σ_{eL} . Es zeigt sich, dass näherungsweise gilt

$$\sigma_{eH} \propto \sigma_{eL} \quad (7.31)$$

Ist also das Modell in Bezug auf σ_{eH} korrekt, kann seine tendentielle Aussage auch auf σ_{eL} übertragen werden. Die bei der unteren Streckgrenze bereits vorliegende Verfestigung kann dabei allerdings zu Abweichungen führen.

Zwischen σ_{eH} und σ_m kann bestenfalls für kleine Körner (bis $R \approx 300 \mu\text{m}$) und 1 mm dicke Bleche ein nahezu linearer Zusammenhang gefunden werden. Bei großen Körnern oder dünnen Blechen ist jedoch kein eindeutiger

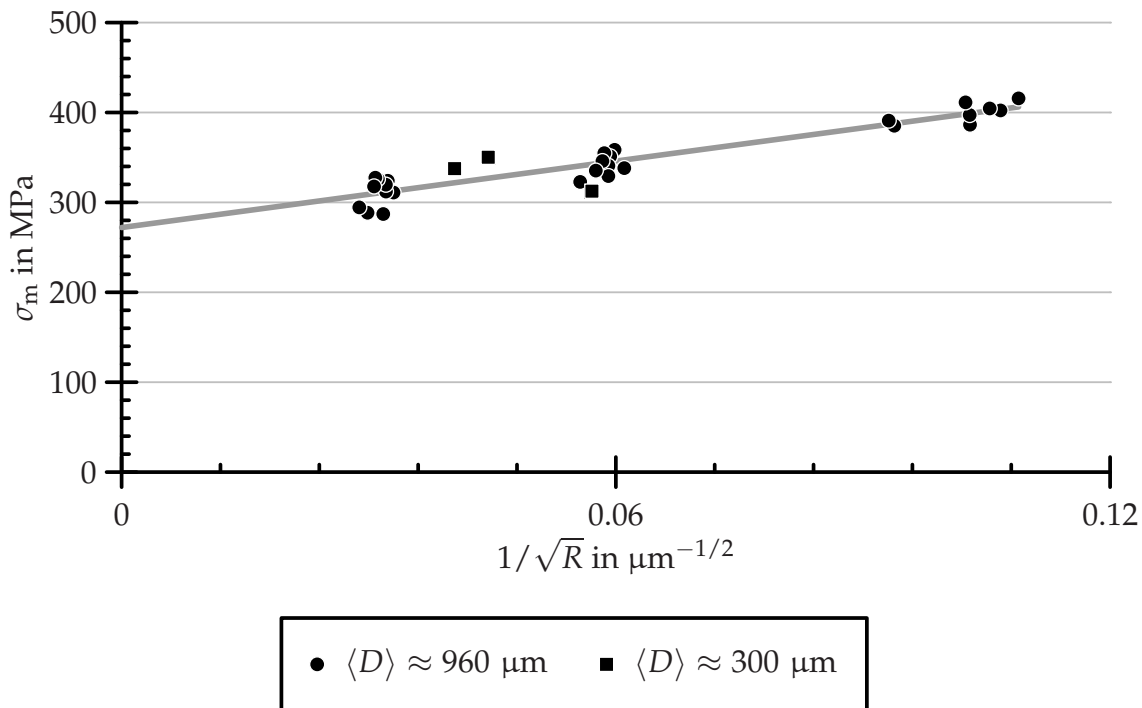


Bild 7.30.: Zugfestigkeit in Abhängigkeit von der Korngröße

Zusammenhang mehr erkennbar. Die Gleichmaßdehnung zeigt unabhängig von der Korngröße eine vergleichbare Streuung mit vergleichbarem Mittelwert. Erst bei Körnern unterhalb $R \approx 100 \mu\text{m}$ nimmt die Streuung auf etwa die Hälfte ab. Demzufolge ist die Ursache für die Streuung in σ_m als Funktion von σ_{eH} nicht in einem zunehmend zufälligen Einschnüren der Probe zu suchen. Die Zugfestigkeit σ_m zeigt als Funktion von $R^{-1/2}$ unabhängig von der Blechdicke einen homogenen Verlauf (Abb. 7.30). Das bedeutet, dass durch die Verfestigung anfängliche Unterschiede ausgeglichen werden: Zu Beginn der Verformung ist der oberflächennahe Bereich versetzungsarm, sodass Versetzungen die Probe einfach verlassen können. Aber auch hier bildet sich im Verlauf der Verformung ein dichtes Versetzungsnetzwerk, und die Versetzungen hindern sich gegenseitig daran, die Probe zu verlassen. Somit unterscheidet sich der oberflächennahe Bereich nach großen Verformungen nicht mehr signifikant vom Probeninneren.

7.5. Abfolge lokaler Fließvorgänge

Das Modell zur Vorhersage des Fließbeginns (Kapitel 7.1) wird zunächst daraufhin überprüft, ob Fließen lokal korrekt vorhergesagt wird. Hierfür werden charakterisierte Zugproben mit zweidimensionaler Kornstruktur schrittweise verformt. Mit Hilfe des Weißlichtinterferometers wird die Änderung der Blechdicke gemessen. Lokale Dickenabnahmen lassen hierbei auf lokale plastische Verformung schließen.

Aufgrund der groben Kornstruktur der Proben wirken sich eine Neigung der plastischen Bänder oder Abweichungen von der ebenen Form kaum auf den Fließort oder die später betrachtete anfängliche Fließspannung aus. Die getroffene Näherung, dass die plastischen Bänder eben und senkrecht zur Lastrichtung orientiert sind, ist für die vorliegende Betrachtung also unkritisch.

Die Ergebnisse der Blechdickenmessung sind für etwa 2 % und etwa 5 % plastische Dehnung in Abb. 7.31 a) und c) gezeigt. Dunkle Bereiche (negative Werte) kennzeichnen eine lokale Reduktion der Blechdicke. In Abb. 7.31 b) ist der Verlauf von $A_j m_{\text{Avg},j}$ dargestellt. $A_j m_{\text{Avg},j}$ ist ein Maß für die Kraft, die nötig ist, um in der entsprechenden Probenscheibe plastisches Fließen zu initiieren. Die Intervalle der drei niedrigsten lokalen Minima sind mit den Blechdickenkarten über vertikale gestrichelte Linien verbunden.

Der Beginn der plastischen Verformung sollte am Minimum von $A_j m_{\text{Avg},j}$ stattfinden. Dieses Minimum stimmt exakt mit dem Bereich der ersten Blechdickenabnahme überein. Da plastische Verformung zu Verfestigung führt, steigt die Fließspannung in diesem Bereich an, sodass Fließen auch in anderen Bereichen einsetzt. Demnach sollte lokale plastische Verformung anschließend im Bereich des zweitniedrigsten Minimums von $A_j m_{\text{Avg},j}$ erfolgen. Nach ausreichender Verfestigung folgt dann Fließen im Bereich des drittniedrigsten Minimums und so weiter.¹² Auch dies kann experimentell bestätigt werden (Abb. 7.31).

¹²In [186] wird die plastische Verformung bei Einkristallen mit einer sich durch die Probe bewegenden plastischen Front verglichen. Bei den betrachteten grobkörnigen Polykristallen geschieht im Prinzip das Gleiche; wegen der verschiedenen Eigenschaften der einzelnen Körnern ist der Vorgang jedoch diskontinuierlich.

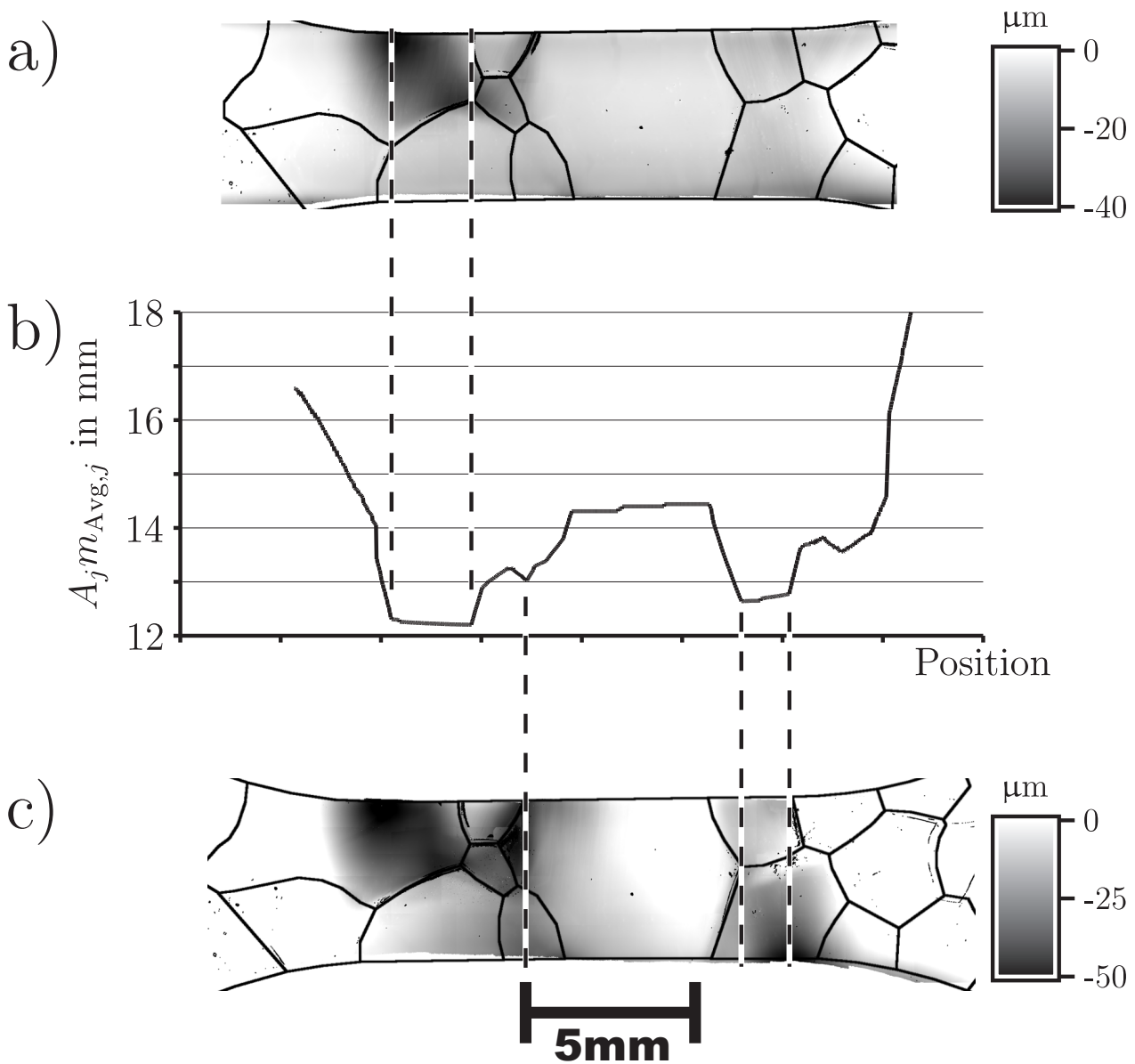


Bild 7.31.: a) Blechdickenmessung mittels Weißlichtinterferometer für $\epsilon_{\text{pl,macro}} \approx 2\%$. Die Korngrenzen der Probe wurden nachträglich als schwarze Linien eingezeichnet. Die Messung umfasst auch den angrenzenden Bereich außerhalb der Messlänge, in dem die Querschnittsfläche zunimmt. b) Verlauf von $A_j m_{\text{Avg},j}$. c) Wie a), aber für $\epsilon_{\text{pl,macro}} \approx 5\%$.

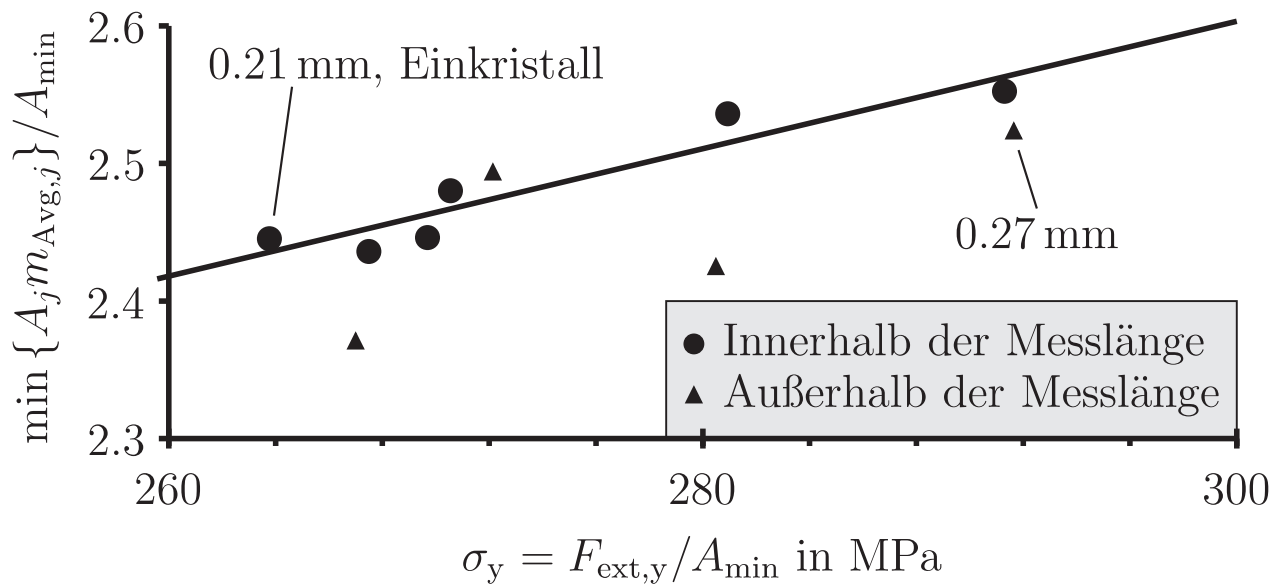


Bild 7.32.: Zusammenhang zwischen der Vorhersage des Modells und der gemessenen Fließspannung. Jeder Messpunkt repräsentiert hierbei eine Probe mit zweidimensionaler Kornstruktur.

7.6. Fließspannung in Abhängigkeit der Kornstruktur

Anhand von Gl. (7.4) und Gl. (7.5) können die Kraft und die Spannung bei Beginn des makroskopischen Fließens berechnet werden. Hierfür wird für jede Probe der Verlauf von $A_j m_{Avg,j}$ berechnet, wie zuvor in Kapitel 7.5 dargestellt. Das absolute Minimum gibt die schwächste Probenscheibe an; ihre Querschnittsfläche ist A_{min} . Somit kann $\min\{A_j m_{Avg,j}\} / A_{min}$ als Maß für die Fließspannung berechnet werden. Abb. 7.32 zeigt den Vergleich mit der gemessenen Fließspannung σ_y . Die Messwerte von Zugproben mit einer von 1 mm abweichenden Blechdicke sind explizit gekennzeichnet. Zusätzlich wurde auch eine einkristalline Zugprobe untersucht.

In Kapitel 7.5 wurde gezeigt, dass die Lage der ersten plastischen Verformung mit guter Genauigkeit vorhergesagt werden kann. In einigen Fällen lag die mit dem Modell ermittelte schwächste Probenscheibe außerhalb der Messlänge. Werden diese Punkte vernachlässigt, zeigt sich in Übereinstimmung mit dem Modell ein deutlicher linearer Zusammenhang zwischen $\min\{A_j m_{Avg,j}\} / A_{min}$ und σ_y . Außerhalb der Messlänge ist der Spannungs-

zustand in der Querschnittsfläche aufgrund der Probengeometrie sehr inhomogen. Dies beeinflusst die Fließspannung und kann im Modell nicht korrekt nachgebildet werden. Demzufolge ist zu erwarten, dass diese Punkte eine stärkere Abweichung von der Bestgeraden zeigen. Dies ist in Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen (Abb. 7.32).

7.7. Statistische Größeneffekte der Fließspannung

7.7.1. Modell

Das in Kapitel 7.1 vorgestellte Modell betrachtet Einzelproben und benötigt hierfür Geometrie, Position und Orientierung jedes einzelnen Kornes. Zur Untersuchung von Größeneffekten muss jedoch eine repräsentative Menge von Proben betrachtet werden, wobei die Skalierung über geeignete Parameter zu steuern ist. Des Weiteren soll im Zuge der Werkstoffoptimierung eine Variation der Materialeigenschaften möglich sein, wie zum Beispiel der Textur. Da bei einer solchen Betrachtung leicht mehrere tausend Simulationen nötig werden, ist die Rechenzeit pro Simulation möglichst niedrig zu halten. Ansonsten scheitert die Betrachtung in der Praxis an der zu hohen Rechenzeit. Aus diesem Grund wird zunächst auf eine Modellierung der Mikrostruktur mittels Voronoinetzen oder dreidimensionalen Kornwachstums verzichtet.¹³ Es wird ein vereinfachter Ansatz gewählt, der nur sehr geringe Rechenzeiten benötigt. Dabei haben alle Körner einer Probe die gleiche Form und Größe. Normalerweise (so auch im Fall der experimentell untersuchten Proben) ist die Korngrößenverteilung eng genug, um diese Näherung zu rechtfertigen. Die Anordnung der Körner ist regelmäßig, wie in Abb. 7.33 gezeigt. Das bedeutet:

- Das Messvolumen setzt sich aus N_S Scheiben zusammen. Jede Scheibe beinhaltet die gleiche Anzahl Körner N_G .

¹³Die Berücksichtigung realistischer Kornformen würde zu einer Koppelung der Scheiben untereinander führen, deren Anzahl außerdem deutlich erhöht werden müsste. Da in einer realistischen Mikrostruktur die Form eines Kornes von der Orientierungsbeziehung zu den Nachbarkörnern abhängt, müsste für jede betrachtete Probe eine zufällige Mikrostruktur mithilfe dreidimensionaler Kornwachstumssimulation berechnet werden. Wegen der hohen Anzahl der zu berechnenden Proben setzt hier die Rechenzeit schlicht eine Grenze.

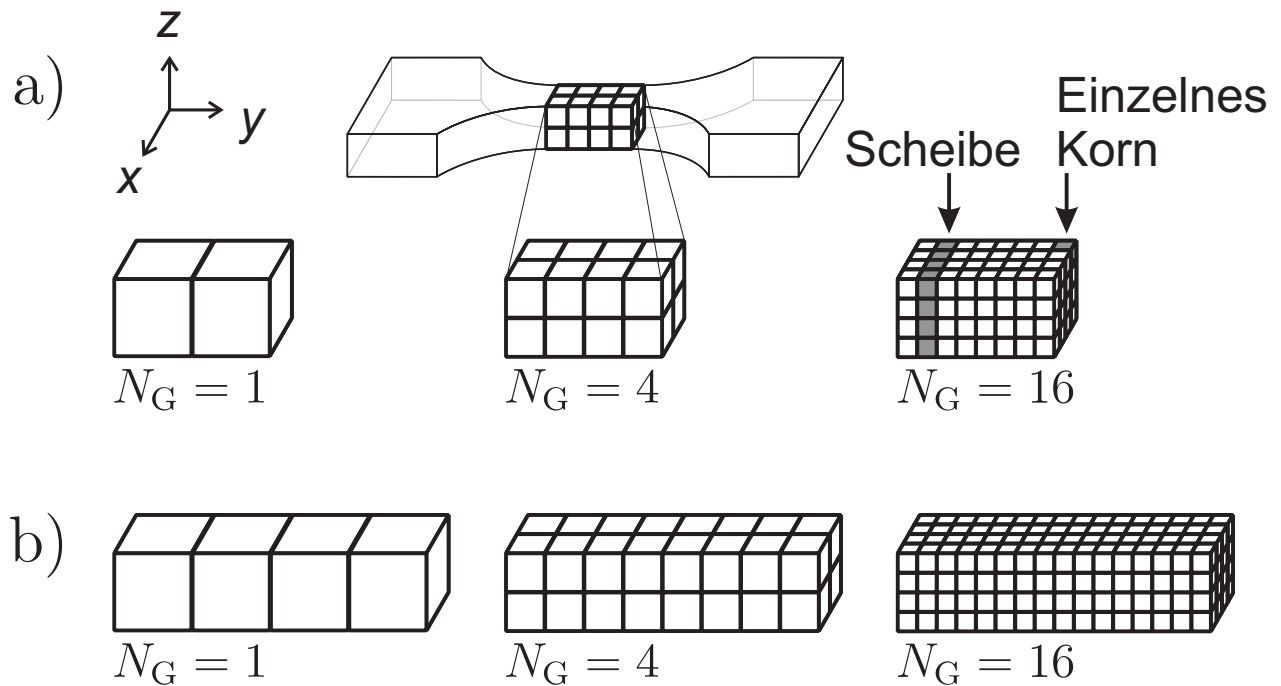


Bild 7.33.: Geometrie der modellierten Mikrostruktur für verschiedene Korngrößen und verschiedene relative Messlängen L_{rel} : a) $L_{\text{rel}} = 2$, b) $L_{\text{rel}} = 4$. Wird L_{rel} konstant gehalten, wirkt sich eine Änderung von N_G nur auf die relative Korngröße aus. Wird N_G konstant gehalten, kann mit L_{rel} die Länge der Messlänge beeinflusst werden. (Auf L_{rel} wird an späterer Stelle im Text noch näher eingegangen.)

- Die anfängliche Fließspannung $\sigma_{S,j}$ der Scheibe j kann anhand von Gl. (7.3) berechnet werden:

$$\sigma_{S,j} = \frac{1}{N_G} \sum_{i=1}^{N_G} \sigma_{G,i} \quad (7.32)$$

Die anfängliche Fließspannung einer Probe ergibt sich in Analogie zur Betrachtung von Einzelproben aus $\sigma_y = \text{Min} \{ \sigma_{S,j} \}$. Dieses Modell berücksichtigt keine absoluten Korn- oder Probengrößen.¹⁴

Die Berechnung wird wie folgt durchgeführt: Zunächst wird anhand der vorgegebenen Textur und der aktiven Gleitsysteme eine repräsentative

¹⁴Das bedeutet, dass zum Beispiel der Hall-Petch-Effekt hier nicht betrachtet wird.

Menge Körner generiert. Hieraus wird eine repräsentative Menge Scheiben der vorgegebenen Größe aufgebaut. Anhand dieser Scheibenmenge wird dann eine repräsentative Menge Zugproben mit der vorgegebenen Anzahl Scheiben in der Messlänge erzeugt. Damit können vollständige Histogramme¹⁵ der anfänglichen Fließspannung f ($\min \{m_{\text{Avg},j}\}$) in Abhängigkeit der Parameter Textur, aktive Gleitsysteme, Probengeometrie, Kornform und Relation Korngröße : Probengröße berechnet werden. Für die statistische Auswertung werden für jedes Histogramm mindestens 1000 Proben betrachtet. Um Größeneffekte zu untersuchen, muss eine solche statistische Auswertung für unterschiedliche Messlängen und verschiedene Verhältnisse Korngröße : Probengröße durchgeführt werden, wobei Proben mit bis zu 10^9 Körnern berücksichtigt werden.

Der Parametervektor $(N_S; N_G)$ ist für selbstähnliche Skalierungen der Probengeometrie oder Mikrostruktur unpraktisch. Aus diesem Grund wird statt des Parameters N_S die relative Messlänge L_{rel} eingeführt. Hier ist L_{rel} definiert als N_S unter der Bedingung $N_G = 1$. Für den Fall von quaderförmigen Messvolumina mit quadratischem Querschnitt und kubischen Körnern bedeutet das

$$L_{\text{rel}} = \frac{N_S}{\sqrt{N_G}} \quad (7.33)$$

Beispiele für $L_{\text{rel}} = 2$, $L_{\text{rel}} = 4$ sowie verschiedene Werte von N_G sind in Abb. 7.33 dargestellt.

Wird L_{rel} konstant gehalten, kann eine selbstähnliche Skalierung der Mikrostruktur durch Variation von N_G erreicht werden.¹⁶ Wird N_G konstant gehalten, kann eine Skalierung der Messlänge durch Variation von L_{rel} erreicht werden.

Eine Anmerkung zur Annahme der senkrecht zur Lastrichtung orientierten Scheiben: Im Allgemeinen würde eine Neigung der Scheiben dazu führen, dass mehr Körner pro Scheibe enthalten sind und die Anzahl der Scheiben in der Messlänge sich verringert. Dies kann berücksichtigt werden, indem N_G und L_{rel} entsprechend skaliert werden. Die Annahme ebener, zur

¹⁵Genauer: Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen

¹⁶Das Modell betrachtet relative Größen. Das Konstanthalten der absoluten geometrischen Abmessungen und das Skalieren der absoluten Korngröße ist daher äquivalent zum Konstanthalten der absoluten Korngröße und entsprechendem Skalieren der absoluten geometrischen Abmessungen.

Lastachse senkrecht orientierter Scheiben kann also auch hier als unkritisch angesehen werden.

7.7.2. Simulationsergebnisse

Zunächst ist zu untersuchen, mit welcher konventionellen Verteilung die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung $f(\min\{m_{\text{Avg},j}\})$ mit ausreichender Genauigkeit beschrieben werden kann. Davon hängt es ab, welche Parameter zur korrekten Beschreibung des statistischen Verhaltens zu verwenden sind. Auch die Berechnung des Vertrauensbereichs und der Relevanz der Größeneffektstatistik hängen davon ab.

In Abb. 7.34 sind einige Beispiele für $f(\min\{m_{\text{Avg},j}\})$ dargestellt. Das Ergebnis für Einkristalle kann nicht mit einer herkömmlichen Verteilungsfunktion beschrieben werden. Die praktisch relevanteren Fälle von Polykristallen können mit guter Genauigkeit durch eine Gaussverteilung approximiert werden. Somit können Mittelwert μ und Standardabweichung s direkt zur Beschreibung der statistischen Ergebnisse verwendet werden.

Die Proben, die einer Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung zugrundeliegen, haben alle die gleichen aktiven Gleitsysteme. Auch die durch den Parametervektor $(L_{\text{rel}}, N_{\text{G}})$ gegebene Korn- und Probengeometrie sind identisch. Die Proben wurden alle anhand der gleichen Textur generiert. Sie unterscheiden sich jedoch in den Orientierungen der einzelnen Körner. Obwohl diese in der Gesamtheit eine gemeinsame Textur ergeben, erfolgt die Auswahl der Orientierungen pro Korn zufällig anhand der Orientierungsdichteverteilungsfunktion. Übertragen auf die Praxis entspricht das der Entnahme vieler Proben aus einem Materialblock. Der Materialblock hat dabei eine homogene Textur und eine homogene Mikrostruktur, die Proben haben die gleiche absolute Geometrie und sind in Bezug auf den Materialblock gleich orientiert.

Zur Untersuchung von Größeneffekten werden solche Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen für viele verschiedene Parametervektoren $(L_{\text{rel}}, N_{\text{G}})$ berechnet. Übertragen auf die Praxis entspricht das der Entnahme vieler Proben aus einem Materialblock. Der Materialblock hat auch hier eine homogene Textur und eine homogene Mikrostruktur. Die Proben sind in Bezug auf den Materialblock gleich orientiert, es wird jedoch die absolute Probengröße variiert.

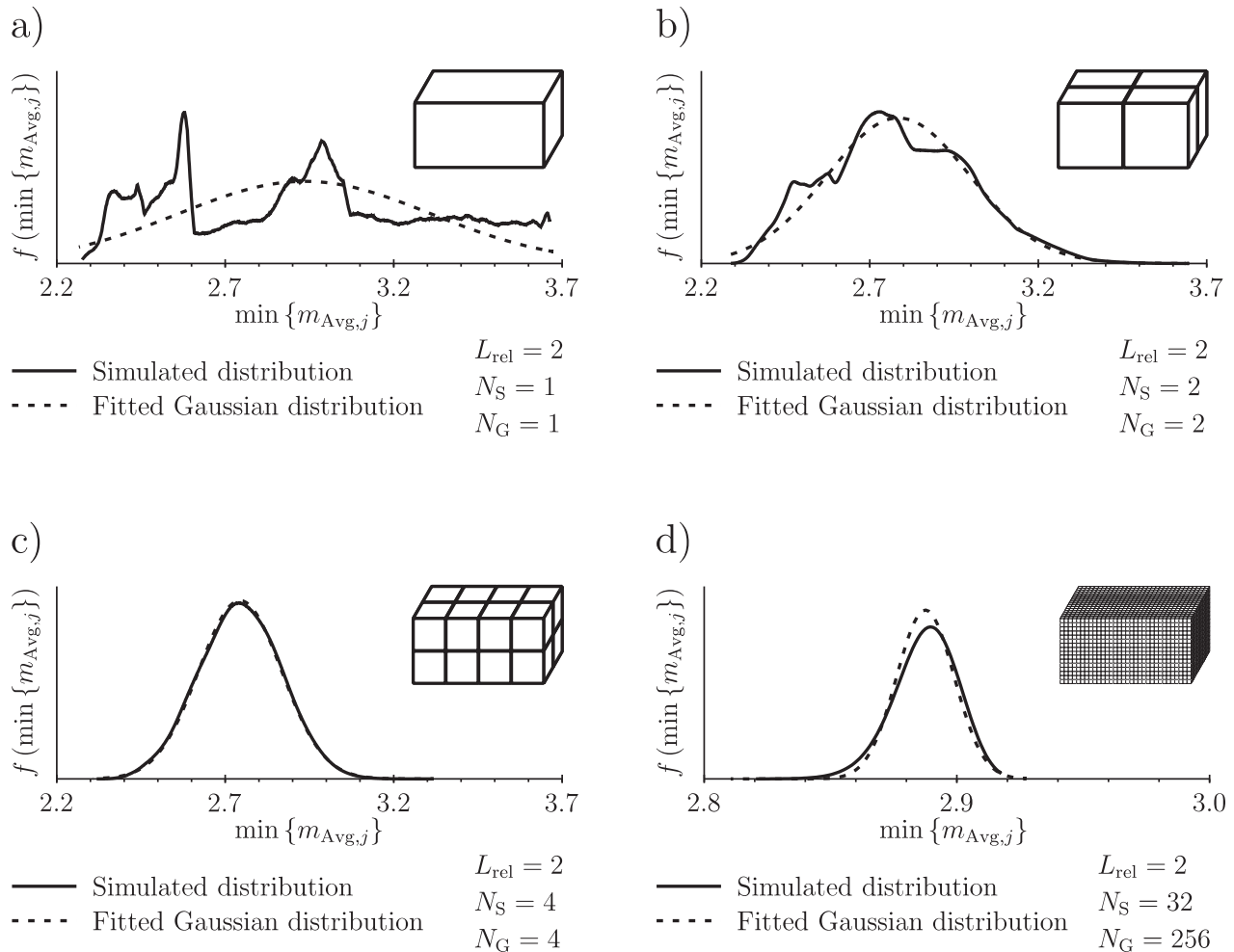


Bild 7.34.: Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen $f(\min\{m_{\text{Avg},j}\})$ für eine Menge von a) Einkristallen, b)-c) Mesokristallen und d) Polykristallen. Die Berechnung wurde für kfz-Material unter der Annahme der Textur in Abb. 7.36 durchgeführt. Da die Körner in a) und b) nicht kubisch sind, weicht L_{rel} von Gl. (7.33) ab.

Für jede Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung werden der Mittelwert μ und die Standardabweichung s berechnet, sodass Mittelwert und Standardabweichung als Funktion des Parametervektors (L_{rel}, N_G) resultieren. Im Folgenden werden der relative Mittelwert $\mu(L_{\text{rel}}, N_G) / M$ und die relative Standardabweichung $s(L_{\text{rel}}, N_G) / \mu(L_{\text{rel}}, N_G)$ betrachtet. Hierbei ist M der über alle Orientierungen gemittelte Taylor-Faktor, wobei eine Wichtung gemäß der Textur erfolgt (siehe Anhang E). Der Einfachheit halber werden die Terme im Folgenden abgekürzt mit μ / M und s / μ bezeichnet.

Die Ergebnisse für texturfrees Material sind in Abb. 7.35 gezeigt. Die Ergebnisse in Unterabbildung a) beziehen sich auf kfz-Materialien und sind äquivalent zu krz-Materialien mit Gleitung auf $\{110\}\langle 111 \rangle$. Die Fälle von krz-Materialien mit $\{110\}\langle 111 \rangle$ - und $\{112\}\langle 111 \rangle$ -Gleitung sind in Unterabbildung b) dargestellt, während sich c) auf krz-Materialien mit $\{110\}\langle 111 \rangle$ -, $\{112\}\langle 111 \rangle$ - und $\{123\}\langle 111 \rangle$ -Gleitung bezieht. Für verschiedene relative Messlängen L_{rel} sind in jedem Diagramm separate Kurven eingezeichnet. Diese Anordnung der Unterabbildungen gilt auch für die folgenden Darstellungen.

Die Simulationsergebnisse zur Textur der untersuchten Fe-3%Si-Proben (Abb. 7.36) sind in Abb. 7.37 gezeigt.

Für die Praxis ist es von großem Interesse, mit welchem Größeneffekt im Extremfall zu rechnen ist. Aus diesem Grund wurden Simulationen für künstliche Texturen durchgeführt, welche lediglich aus zwei gleich gewichteten Orientierungen bestehen: eine, die dem minimalen Taylor-Faktor des Materials entspricht, und eine mit dem maximalen Taylor-Faktor. Diese Textur hängt von den aktiven Gleitsystemklassen ab. Aus diesem Grund beziehen sich die Ergebnisse in Abb. 7.38 absolut gesehen auf verschiedene Texturen.

Die Diagramme, die μ / M darstellen (links in Abb. 7.35, 7.37 und 7.38) sind sehr ähnlich. Es gibt zwar geringe Unterschiede zwischen kfz/ $\{110\}\langle 111 \rangle$ einerseits und krz $\{110\}\langle 111 \rangle$, $\{112\}\langle 111 \rangle$ andererseits, das Hinzufügen der dritten Gleitsystemklasse $\{123\}\langle 111 \rangle$ hat nahezu keine Auswirkung. μ / M zeigt jedoch eine deutliche Abhängigkeit von der relativen Messlänge L_{rel} und der Anzahl Körner pro Querschnittsfläche N_G . Allgemein zeigt sich ein deutlicher Effekt auf die mittlere anfängliche Fließspannung, sobald die Anzahl Körner pro Querschnittsfläche unter etwa 50 sinkt. Dies ist in Übereinstimmung mit bekannten experimentellen Ergebnissen [96].

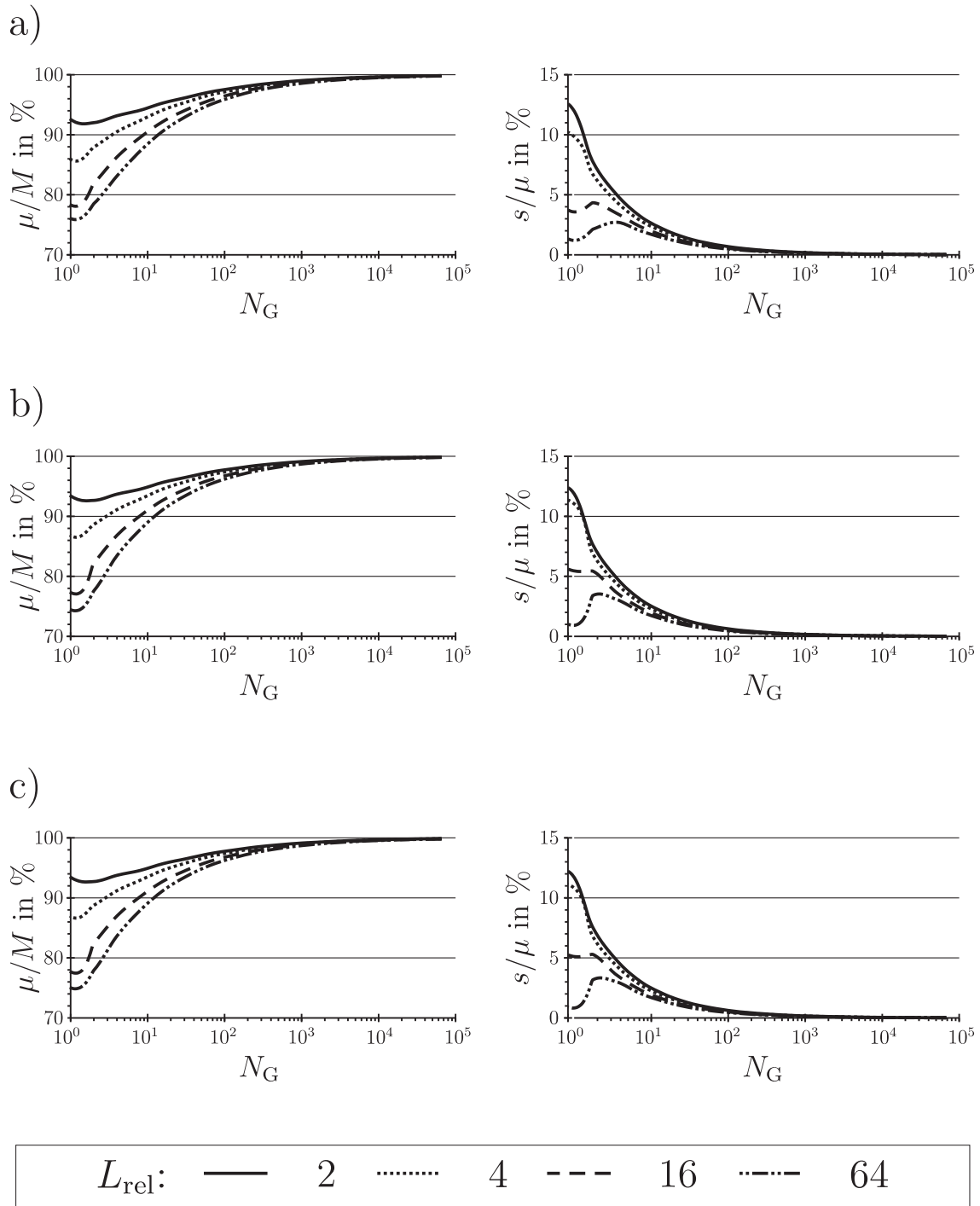


Bild 7.35.: Simulationsergebnisse für texturfrees Material. Die Verläufe des relativen Mittelwerts sind links, die der relativen Standardabweichung rechts dargestellt. *a)* kfz, äquivalent zu krz $\{110\}\langle 111\rangle$, *b)* krz $\{110\}\langle 111\rangle$, $\{112\}\langle 111\rangle$ und *c)* krz $\{110\}\langle 111\rangle$, $\{112\}\langle 111\rangle$, $\{123\}\langle 111\rangle$.

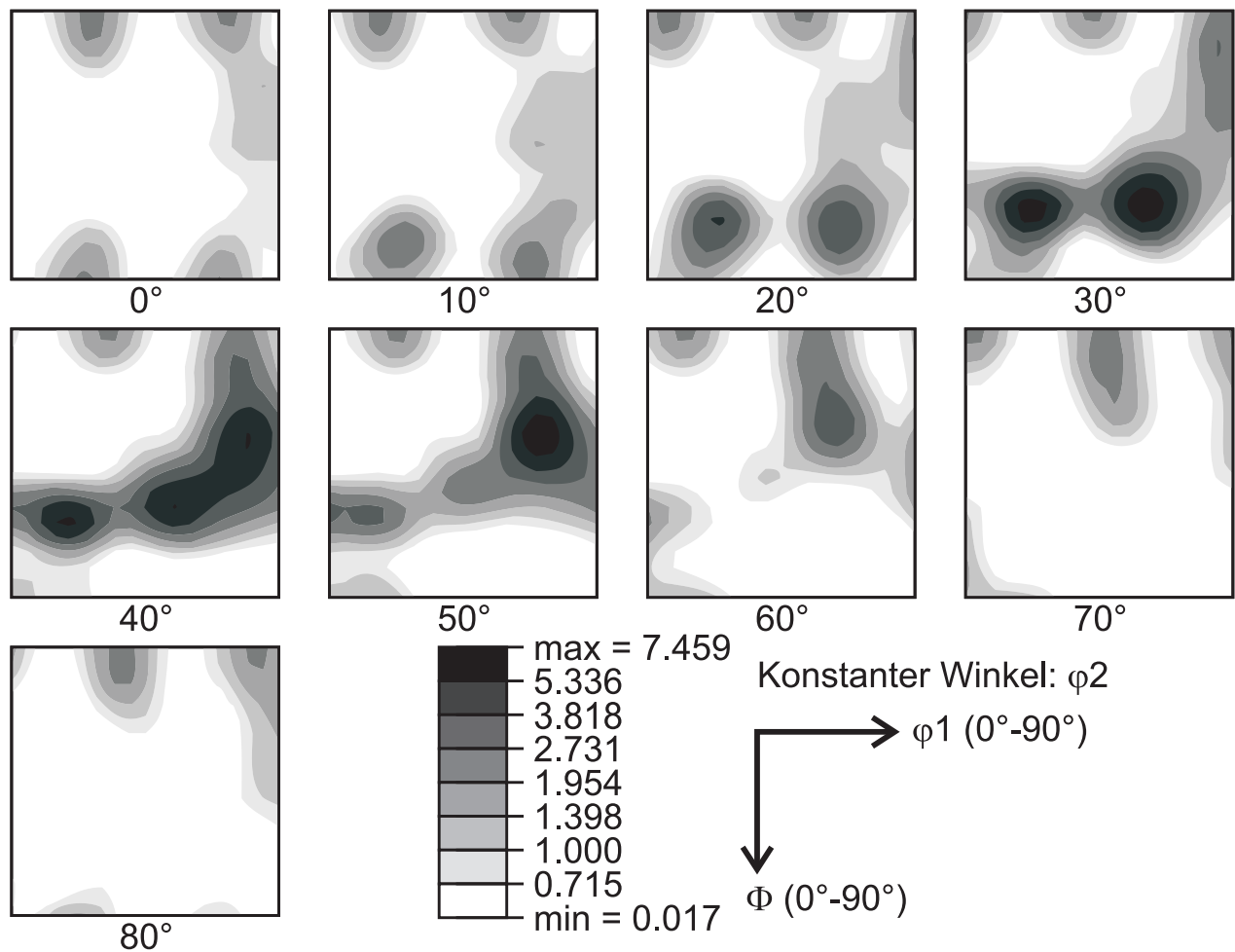


Bild 7.36.: Textur der experimentell untersuchten Fe-3%Si-Proben im Eulerraum. Die Winkel sind gemäß der Bunge-Notation gegeben. Sie beziehen sich auf die Achsen, wie sie in Abb. 7.2 auf Seite 104 definiert sind. Für die Berechnung der Orientierungsverteilungsfunktion wurden die Orientierungen diskretisiert (*discrete binning*, Intervallgröße 5°) und einer gaussischen Glättung unterzogen (*Gaussian smoothing*, Halbwertsbreite 5°).

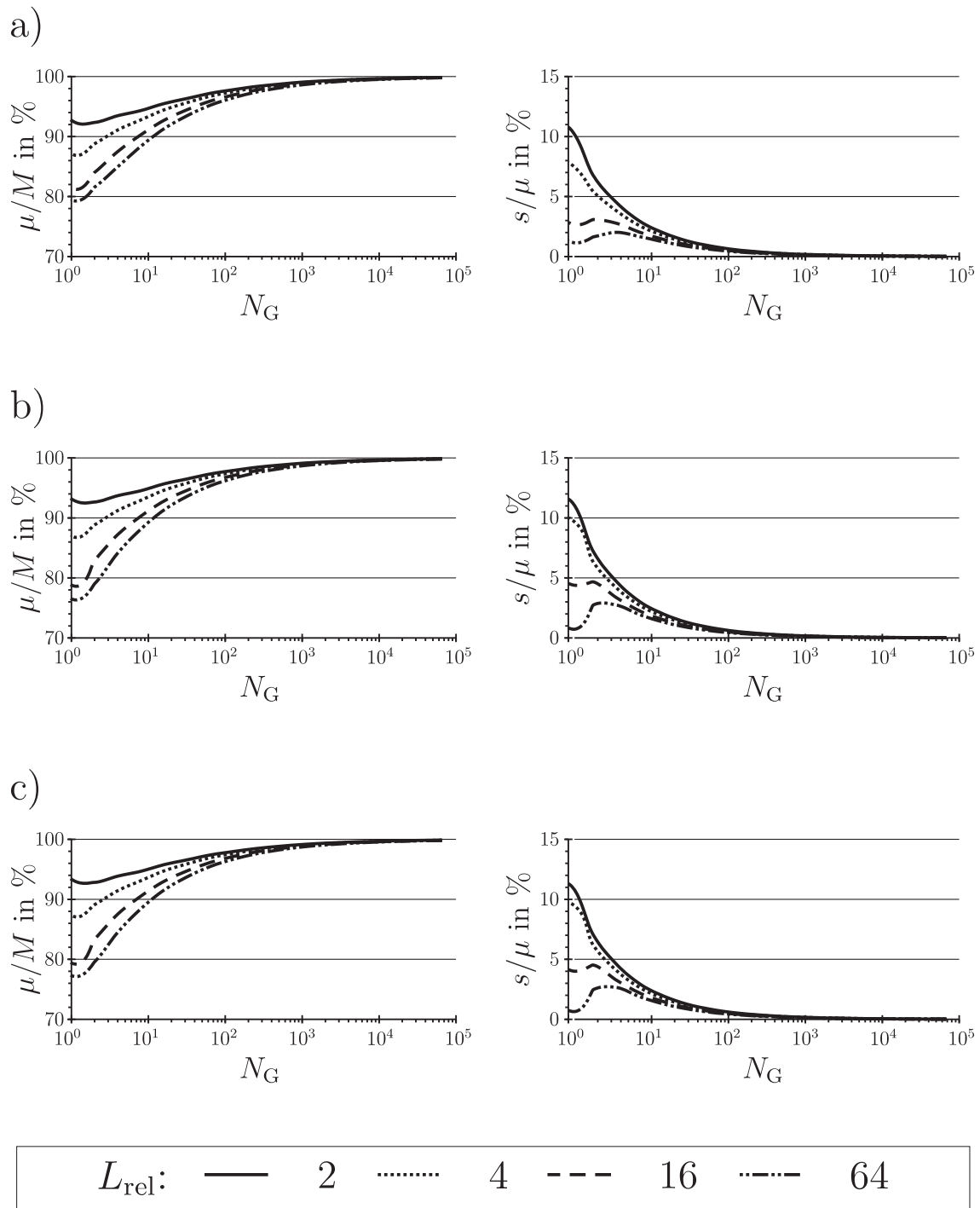


Bild 7.37.: Simulationsergebnisse für Materialien mit der in Abb. 7.36 gegebenen Textur. Anordnung der Diagramme wie in Abb. 7.35

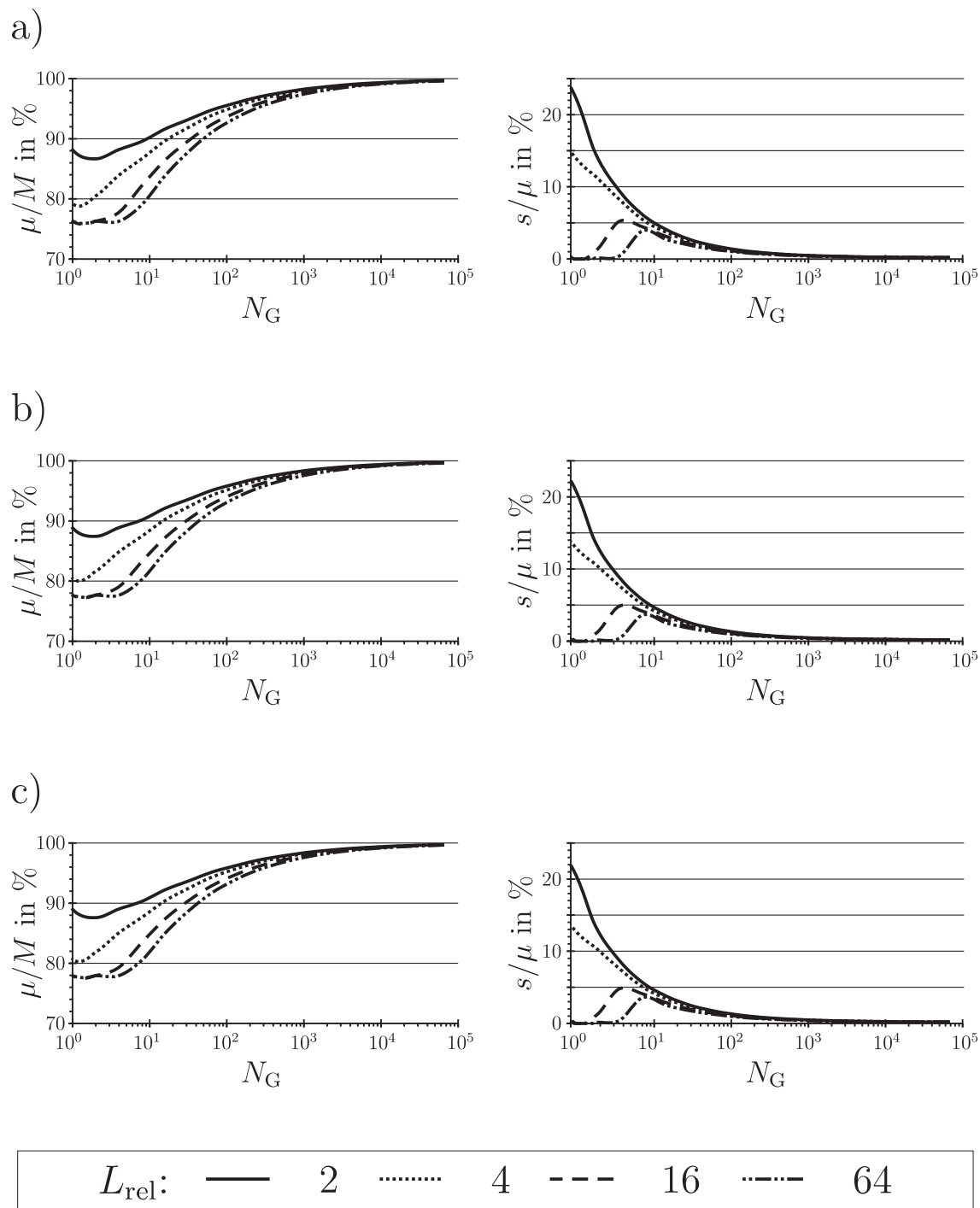


Bild 7.38.: Simulationsergebnisse der Extremwertbetrachtung unter Zuhilfenahme künstlich generierter Extremtexturen. Anordnung der Diagramme wie in Abb. 7.35

Parameter	Einfluss auf	
	μ/M	s/μ
Relative Probenlänge	+	+
Korngröße	+	+
Kristallsystem	O	O
Textur	O	+

Tabelle 7.2.: Stärke des Einflusses der verschiedenen Parameter auf s/μ und μ/M . Das Pluszeichen ‘+’ kennzeichnet einen starken Einfluss, der Kreis ‘O’ kennzeichnet einen schwachen Einfluss.

Eine Anmerkung zum Einfluss der Textur auf die Ergebnisse: Der Bezugswert M ist texturabhängig. Angenommen, zwei Texturen T_1 und T_2 haben die gemittelten Taylor-Faktoren M_1 und M_2 . Für zwei Probengruppen (einmal mit der Textur T_1 , einmal mit T_2), bestehend aus Proben mit gleicher Korn- und Probengröße, mögen sich für die mittlere anfängliche Fließspannung die gleichen Relativwerte $\mu_1/M_1 = \mu_2/M_2$ ergeben. Nichtsdestotrotz können sich die absoluten Mittelwerte der anfänglichen Fließspannung signifikant voneinander unterscheiden.

Die relativen Standardabweichungen s/μ , die in den Diagrammen auf der rechten Seite von Abb. 7.35, 7.37 und 7.38 dargestellt sind, zeigen geringe Unterschiede zwischen kfz/krz {110}<111> einerseits und krz {110}<111>, {112}<111> andererseits; das Hinzufügen der dritten Gleitsystemklasse {123}<111> hat nahezu keine Auswirkung – was vergleichbar mit dem Verhalten von μ/M ist. s/μ wird sehr deutlich von L_{rel} und N_G beeinflusst. Während die Ergebnisse für texturloses und das gemäß Abb. 7.36 texturierte Material sehr ähnlich sind, weicht die Extremwertbetrachtung signifikant davon ab. Das bedeutet, dass die Textur einen großen Effekt auf die Streuung in der anfänglichen Fließspannung haben kann. Allgemein zeigt sich ein deutlicher Effekt auf die Streuung der anfänglichen Fließspannung, sobald die Anzahl Körner pro Querschnittsfläche unter etwa 20–100 sinkt (in Abhängigkeit von der vorliegenden Textur). Auch dieser Bereich ist in Übereinstimmung mit bekannten experimentellen Ergebnissen [24]¹⁷.

¹⁷Bei Messing wurde zunehmende Streuung bei weniger als 15–60 Körner in der Querschnittsfläche festgestellt.

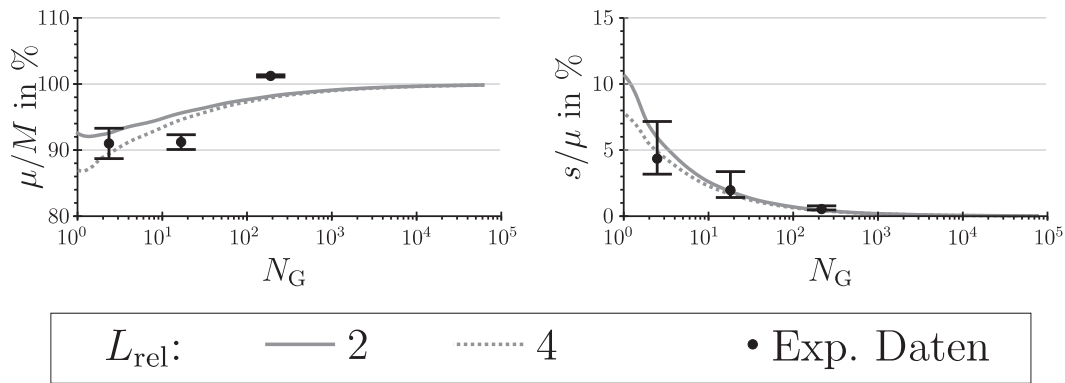


Bild 7.39.: Vergleich des experimentell gemessenen Größeneffekts mit den Vorhersagen des Modells. Die Balken kennzeichnen den 90 %-Vertrauensbereich.

Ein Vergleich des Einflusses von L_{rel} auf s/μ und μ/M zeigt, dass lange Proben eine geringere Streuung aufweisen, die mittlere anfängliche Fließspannung aber stärker von der Anzahl Körner pro Querschnittsfläche abhängt.

Eine kurze Zusammenfassung des Einflusses der verschiedenen Parameter auf s/μ und μ/M ist in Tab. 7.2 dargestellt.

7.7.3. Experimentelle Ergebnisse

Die experimentellen Ergebnisse der relativen mittleren anfänglichen Fließspannung sind im linken Diagramm von Abb. 7.39 dargestellt. Das rechte Diagramm zeigt die experimentell gemessene relative Standardabweichung. In beiden Diagrammen ist für jeden Datenpunkt der 90 %-Vertrauensbereich als Balken eingezeichnet. Zum Vergleich mit den Modellvorhersagen sind auch die entsprechenden Kurven aus Abb. 7.37 abgebildet (krz $\{110\}\langle 111 \rangle$).

Wie zuvor in Kapitel 7.6 dargestellt, wurde die schwächste Scheibe in manchen Fällen auch außerhalb der Messlänge gefunden. Die effektive relative Messlänge ist deshalb vermutlich größer als 2. Aus diesem Grund enthält Abb. 7.39 die Kurven für die relativen Messlängen $L_{rel} = \{2, 4\}$.

Einschub: Auswertung der experimentellen Messwerte

Es stellt kein Problem dar, anhand der experimentellen Messungen die mittlere anfängliche Fließspannung $\langle \sigma_y \rangle$ zu berechnen. Zum Vergleich mit μ / M ist jedoch die *relative* mittlere anfängliche Fließspannung nötig. M entspricht $\mu (L_{\text{rel}}, N_G)$ mit endlichem L_{rel} und $N_G \rightarrow \infty$. Das bedeutet, dass $\langle \sigma_y \rangle$ auf $\sigma_{y, N_G \rightarrow \infty}$ bezogen werden muss. Dann gilt

$$\frac{\mu}{M} = \frac{\langle \sigma_y \rangle}{\sigma_{y, N_G \rightarrow \infty}} \quad (7.34)$$

$\sigma_{y, N_G \rightarrow \infty}$ ist jedoch unbekannt und kann nicht gemessen werden.¹⁸ In erster Näherung kann die Bestgerade in Abb. 7.32 zu M extrapoliert werden. Dies liefert $\sigma_{y, N_G \rightarrow \infty} \approx 370$ MPa, was jedoch einen etwas zu hohen Wert darstellt. Auf der anderen Seite zeigt eine Fehlerbetrachtung bei der Extrapolation ein relativ großes Fehlerintervall. Aus diesem Grund wird eine andere Herangehensweise gewählt: $\sigma_{y, N_G \rightarrow \infty}$ wird so gewählt, dass die mittlere anfängliche Fließspannung der Proben mit der mittleren Korngröße 2 mm ungefähr in der Mitte der Simulationskurven für $L_{\text{rel}} = 2$ und $L_{\text{rel}} = 4$ liegt. Der sich dabei ergebende Wert für $\sigma_{y, N_G \rightarrow \infty}$ liegt innerhalb des Fehlerintervalls der Extrapolation, weshalb er als sinnvolle Näherung angesehen werden kann.

Im Gegensatz zur relativen mittleren anfänglichen Fließspannung kann die relative Standardabweichung $s / \langle \sigma_y \rangle$ direkt anhand der experimentellen Daten berechnet werden.

Der Vergleich der experimentell gemessenen mit der vom Modell vorhergesagten relativen mittleren anfänglichen Fließspannung (linkes Diagramm in Abb. 7.39) zeigt Abweichungen. Dies kann auf mehrere Ursachen zurückgeführt werden:

¹⁸Zur Erinnerung: Das Modell berücksichtigt derzeit keine Effekte, wie zum Beispiel Hall-Petch oder eine möglicherweise verringerte Fließspannung von Oberflächenkörnern. Es besteht keine Möglichkeit, diese Effekte im Experiment auszuschließen.

- **Hall-Petch-Effekt:** ist nicht berücksichtigt.
- **Oberflächenkörner:** eine möglicherweise verringerte Fließspannung von Oberflächenkörnern ist nicht berücksichtigt.
- **Elastische und plastische Anisotropie:** Die Messwerte beziehen sich auf grundlegend verschiedene Verhältnisse Korngröße: Probengröße. Wenn die Korngröße im Bereich der Probengröße ist, dann ist die Kornstruktur nahezu zweidimensional. Solche Proben haben in erster Näherung zweidimensional ausgeprägte Bereiche mit Inkompatibilitätsspannungen aufgrund plastischer oder elastischer Anisotropie. Es findet eine Überlagerung der Inkompatibilitätsspannungen von maximal 3 Körnern statt (Korngrenztripelpunkte).¹⁹ Das ist für die Proben mit einer mittleren Korngröße von 2 mm der Fall. Es stellt somit einen grundlegenden Unterschied zu den anderen untersuchten Proben dar, die eine dreidimensionale Kornstruktur aufweisen. Die Bereiche mit Inkompatibilitätsspannungen haben bei diesen Proben auch einen dreidimensionalen Charakter. In der Tendenz überlagern sich die Inkompatibilitätsspannungen von mehr Körnern als im zweidimensionalen Fall. Die lokale anfängliche Fließspannung könnte deshalb unter Umständen bei niedrigeren außen an der Probe anliegenden Kräften erreicht werden, was zu einer Verringerung der gemessenen anfänglichen Fließspannung führen könnte.
- **Lage der Korngrenzen:** Ist die Korngröße größer oder gleich der Blechdicke, so ist jedes Korn beidseitig ein Oberflächenkorn und alle Korngrenzen verlaufen nahezu senkrecht zur Probenoberfläche. Bei abnehmender Korngröße liegt ein zunehmender Anteil der Körner innerhalb des Vollmaterials. Im Gegensatz zur zweidimensionalen Kornstruktur weist eine dreidimensionale Kornstruktur auch Korngrenzen parallel zur Probenoberfläche auf. Ein möglicher Einfluss dieser Korngrenzen auf die Fließspannung wird in [26] diskutiert. Dies kann zu einer Erhöhung der Fließspannung führen.

Die Überlagerung dieser Effekte könnte erklären, warum die relative mittlere anfängliche Fließspannung bei den Proben mit einer Korngröße von

¹⁹Die Inkompatibilitätsspannungen fallen mit dem Abstand zur Korngrenze stark ab, so dass hier nur die Überlagerung in der direkten Nachbarschaft betrachtet wird.

0.5 mm niedriger ist als vom Modell vorhergesagt, während das Ergebnis für die Proben mit der Korngröße 0.2 mm höher liegt.

Durch den Bezug der Standardabweichung auf die mittlere anfängliche Fließspannung werden die Auswirkungen dieser Effekte größtenteils beseitigt. Und in der Tat zeigen die Verläufe der experimentell gemessenen und vom Modell vorhergesagten relativen Standardabweichung eine gute quantitative Übereinstimmung, wie im rechten Diagramm von Abb. 7.39 zu sehen ist. Die Streuung in der anfänglichen Fließspannung kann demnach auf den modellierten Mechanismus zurückgeführt werden.

8. Zusammenfassung

Die mechanischen Eigenschaften werden von einer Vielzahl Mechanismen und Ursachen bestimmt. Mit der Skalierung einhergehende, ungewollte Modifikationen der Probenparameter können deshalb zu Scheineffekten führen, wie zum Beispiel Änderungen von Textur oder Korngrößenverteilung beim Walzen oder Glühen von Blechen unterschiedlicher Dicke. Dass die Rauheit der Probenoberfläche insbesondere bei Skalierung der Probengeometrie signifikante Auswirkungen haben kann, ist schon lange bekannt – und dennoch wird die Rauheit an den Kanten von Probenblechen bei der Probenpräparation meist nicht beachtet. Um in dieser Arbeit sicherzustellen, dass die gemessenen Effekte wirklich auf die beabsichtigte Skalierung der Probenparameter zurückzuführen sind, und nicht auf Scheineffekte, wurde eine entsprechend aufwändige Probenpräparation und -charakterisierung gewählt.

Zur Untersuchung von Größeneffekten wurden Methoden vorgestellt, die es erlauben die Entwicklung plastischer Vorgänge lokal, zerstörungsfrei und umfassend zu charakterisieren. Dies ist Voraussetzung für ein besseres Verständnis der Mechanismen und bietet darüber hinaus die Möglichkeit einer besseren Vergleichbarkeit von Simulation und Experiment. Die Blechdickenmessung mittels Weißlichtinterferometrie und die Verformungsmessung anhand der Bewegung von Korngrenzentripelpunkten erlauben qualitative und quantitative Aussagen über das lokale Verformungsverhalten. Gängige Modelle zum Hall-Petch-Effekt gehen zum Beispiel davon aus, die Fließspannung werde dadurch bestimmt, dass die plastische Aktivität die Korngrenze überschreitet und sich in angrenzende Körner verbreitet. Die lokalen Verformungsmessungen zeigen, dass dem gerade bei Proben mit großem Verhältnis Korngröße : Probengröße nicht so sein muss: Die Orte der plastischen Verformung müssen nicht in direkter Nachbarschaft liegen. Es kann sogar vorkommen, dass die plastische Verformung am einen Ende der Probe beginnt und dann spontan am anderen Ende der Probe einsetzt,

noch bevor sie an der ersten plastisch aktiven Stelle die Korngrenzen überschreitet. Da die so erreichbaren Dehnungen ein Vielfaches der Streckgrenze betragen können, ist es fraglich, inwiefern die Streckgrenze vom Hall-Petch-Effekt beeinflusst wird.

Das Orientation Gradient Mapping (OGM) liefert Aussagen über die lokale Verfestigung und Mikrostrukturentwicklung. Erste experimentelle Untersuchungen zeigen, dass sich die Resultate von OGM-Messungen sehr gut mit anderen experimentellen Befunden dieser Arbeit sowie aus der Literatur in Einklang bringen lassen. Anhand der OGM-Messungen der Mikrostruktur an Fe-3%Si und Cu konnte lokal gezeigt werden, dass kleine Körner im Mittel stärker verfestigen als große Körner, was aus makroskopischen Messungen schon lange bekannt ist. Es hat sich allerdings gezeigt, dass der zugrundeliegende Mechanismus und insbesondere die Verteilung der Verfestigung sehr vom Werkstoff abhängen können. Ausgehend von den OGM-Messungen kann gefolgert werden, dass manche in der Literatur getroffenen Annahmen zur Verteilung der Verfestigung im Korn nicht zutreffen. Die Untersuchungen der oberen und unteren Streckgrenze von Fe-3%Si zeigen ebenfalls das erhöhte Verfestigungsverhalten von kleinen Körnern. Darüber hinaus gibt es starke Anhaltspunkte, dass die Verfestigung insbesondere zu Beginn der plastischen Verformung deutlich von der Blechdicke beeinflusst wird. Allerdings wirkt sich die Verfestigung ausgleichend aus, so dass bei Erreichen der Zugfestigkeit kein signifikanter Unterschied mehr feststellbar ist. Die genauen Hintergründe bedürfen noch eingehender Untersuchung.

In den Betrachtungen zum größenabhängigen Materialverhalten wurden die Auswirkungen der plastischen Anisotropie als Funktion der Relation Korngröße : Probengröße auf die anfängliche Fließspannung untersucht. Die Aussagen des zur theoretischen Betrachtung verwendeten Werkstoffmodells wurden lokal und quantitativ mit den experimentellen Ergebnissen von Zugversuchen verglichen und zeigten eine gute Übereinstimmung. Das Modell wurde anschließend erweitert, um das statistische Verhalten eines Probenkollektivs als Funktion von relativer Probenlänge, Anzahl Körner im Probenquerschnitt, Textur und aktiven Gleitsystemen zu untersuchen. Das Modell erlaubt dabei insbesondere auch eine Betrachtung der zu erwartenden Streuung. Da die benötigte Rechenzeit gering ist, sind ausgedehnte Parameterstudien möglich. Experimente aus der Literatur zeigen eine Zu-

nahme der Streuung im gleichen Größenbereich wie das Modell. Es konnte gezeigt werden, dass die Modellvorhersagen mit den in eigenen Experimenten gemessenen Mittelwerten der anfänglichen Fließspannung qualitativ und mit den Streuungen quantitativ übereinstimmen. Zusätzlich wurde mit dem Modell eine für die Praxis sehr wichtige Abschätzung über den maximal zu erwartenden Größeneffekt getroffen.

9. Ausblick

Experimente zur lokalen Plastizität betrachten meist nur die lokale Dehnung. Das Orientation Gradient Mapping (OGM) bietet jedoch eine Möglichkeit, die lokale Verfestigung zerstörungsfrei qualitativ zu messen. Es ist zu vermuten, dass mit dem OGM und geeigneten Mikrostrukturmodellen nicht nur quantitative Werte für die Verfestigung erhalten werden können, sondern auch anhand der lokalen Missorientierung Rückschlüsse auf die lokale, gleitsystemspezifische Versetzungsdichte gezogen werden können. In schrittweisen Versuchen könnte somit die lokale Mikrostrukturentwicklung detailliert gemessen werden. Im Idealfall wären quantitative Messungen zu Verformungsmechanismen möglich, die zur Verbesserung von Werkstoffmodellen und zur lokalen Verifizierung von Simulationen verwendet werden können. Die Möglichkeiten des Verfahrens sollten deshalb noch eingehender untersucht werden.

Das Prinzip des in dieser Arbeit vorgestellten Plastizitätsmodells unterscheidet sich in relevanten Punkten von gängigen Werkstoffmodellen (siehe zum Beispiel [187]). Die im Modell betrachtete anisotrope Plastizität könnte als entsprechende Fließfläche in die FEM implementiert werden, wie zum Beispiel als anisotrope Fließfläche [188] oder als isotrope Fließfläche, die jedoch gemäß dem makroskopischen Lastpfad in Abhängigkeit von der Orientierung für jedes Korn einzeln festgelegt wird [174]. Dies erlaubt auch unter Berücksichtigung realistischer Kornstrukturen die Betrachtung komplexer Probengeometrien und Lastfälle (Abb. 9.1). Dabei würde jedoch das Problem nicht gelöst werden, dass diese Modellierungen häufig nur das homogenisierte Mittelwertverhalten betrachten. Bei kleinen Bauteilen wird aber zunehmend die Streuung relevant. Außer der Durchführung zahlreicher, rechenzeitintensiver FEM-Simulationen gibt es zur Beantwortung dieser Fragestellung derzeit kaum Lösungen. Das vorgestellte Modell bietet hierfür einen alternativen Ansatz, denn es erlaubt die Berechnung ausführlicher Statistiken in kurzer Zeit. Ein Nachteil des Modells gegenüber der FEM besteht

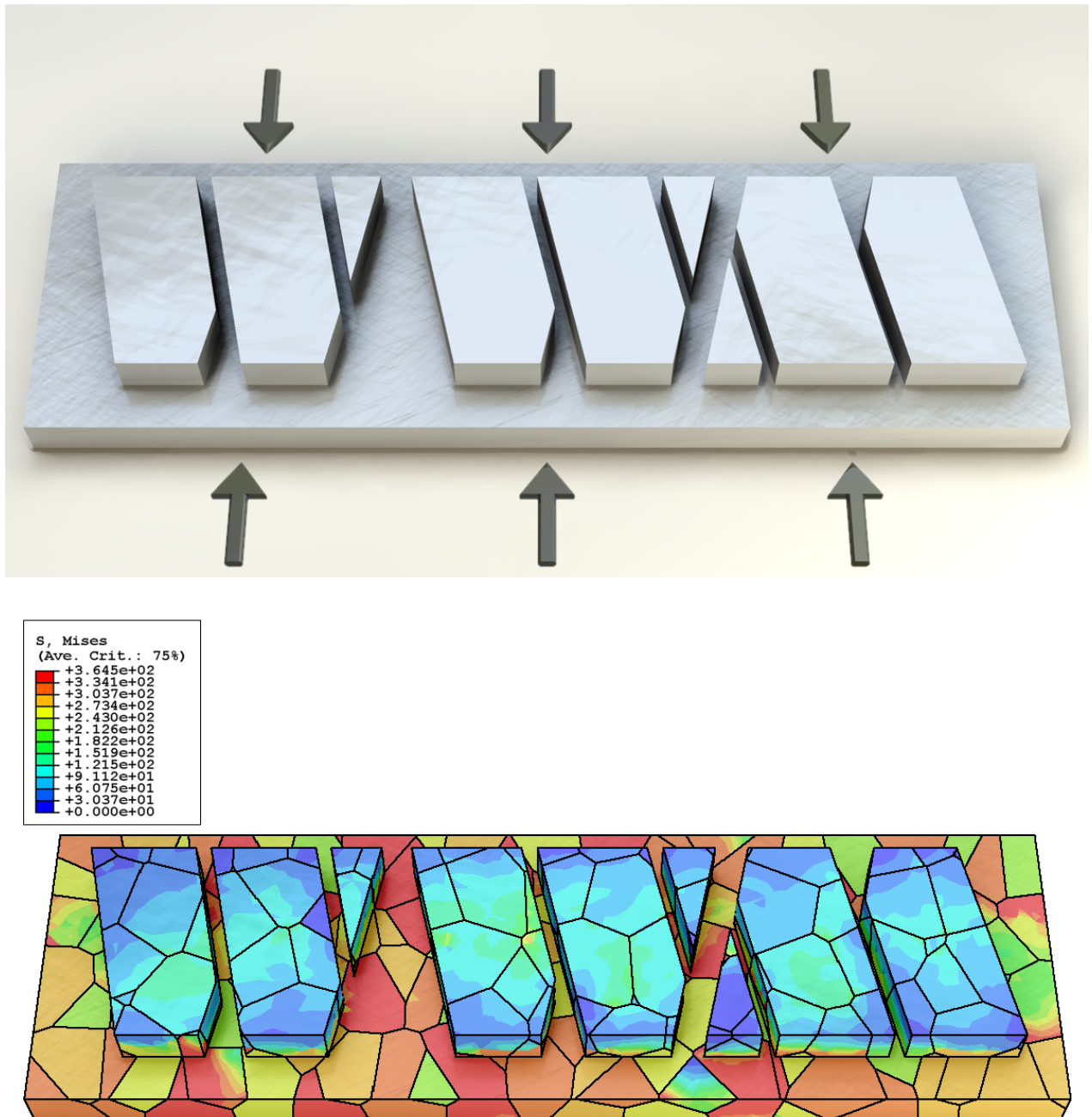


Bild 9.1.: *Oben:* Probengeometrie und Belastungsrichtung. *Unten:* Ergebnis einer FEM-Simulation (Vergleichsspannung nach von Mises). Die Korngrenzen sind als schwarze Linien eingezeichnet. Das Materialgesetz war linear elastisch (anisotrop), ideal plastisch (isotrop, aber in Abhängigkeit von der Kornorientierung für jedes Korn individuell).

darin, dass es keine generalisierte Formulierung gibt, die auf beliebige Lastfälle anwendbar ist. Durch Modifikation der Zugprobengeometrie ähnlich wie in [17] und Berücksichtigung des inhomogenen Spannungszustandes könnte jedoch auch eine Betrachtung weiterer Umformkenngrößen gelingen. Auch realistische Kornformen, korngrößenabhängige Plastizität und Verfestigung könnten in das Modell implementiert werden.¹ Ein größeres Problem stellt aber vermutlich die Berücksichtigung der Kristallgitterdrehung dar, die bei größeren Dehnungen nicht mehr vernachlässigt werden kann: da aufgrund der Größenverhältnisse kein quasihomogenes Material vorliegt, wie dies zum Beispiel für die Texturmodellierung in [190] vorausgesetzt wird, genügt es nicht, dass die Texturänderung im Mittel zutreffend vorhergesagt wird.

9.1. Untersuchung von Mikrotiefziehproben

Es ist gelungen, die in dieser Arbeit verwendeten Charakterisierungsmethoden auch erstmals auf schrittweise tiefgezogene Proben zu übertragen.² Beim Tiefziehen ist die Probenoberfläche in direktem, reibendem Werkzeugkontakt, weshalb eine geeignete Schmierung vorgenommen wurde. Die Verformung der Probe senkrecht zur ursprünglichen Blechnormale begrenzt die Möglichkeiten der Messtechnik: Im Napfinneren sind EBSD-Messungen aufgrund von Abschattungseffekten nicht möglich. In Bezug auf die Blechdickenmessung setzt die Brennweite des Weißlichtinterferometers der maximal zulässigen Napfhöhe eine Grenze bei circa 6 mm. Letzteres ist für die Untersuchung kleiner Proben jedoch unkritisch. Ein Beispiel für eine in zwei Schritten tiefgezogene Ronde aus Fe-3%Si ist in Abb. 9.2 und Abb. 9.3 gezeigt. Die Ronde wurde zuerst aus dem Blech gestanzt und danach weichgeglüht. Die Kornstruktur dieser Probe weist die Besonderheit auf, dass etwa 3/4 der Probe polykristallin ist, während das verbleibende Viertel von

¹Das Hauptproblem hierbei besteht nicht in der Implementierung einer Kornstruktur in das Modell. Künstliche Mikrostrukturen können mittels Monte-Carlo-Potts-Modellierung erzeugt werden, wie in [189] gezeigt. Aufgrund eines Mangels an experimentellen Daten können diese Modelle derzeit noch nicht ausreichend verifiziert werden. Die generierten Mikrostrukturen sehen zwar „echt“ aus, aber inwiefern das modellierte Kornwachstum und die sich einstellenden Nachbarschaftsbeziehungen wirklich realitätsgetreu sind, ist derzeit noch völlig offen.

²Dies erfolgte in Zusammenarbeit mit Herrn Dipl.-Ing. Holger Justinger vom Institut für Bildsame Formgebung, RWTH Aachen.

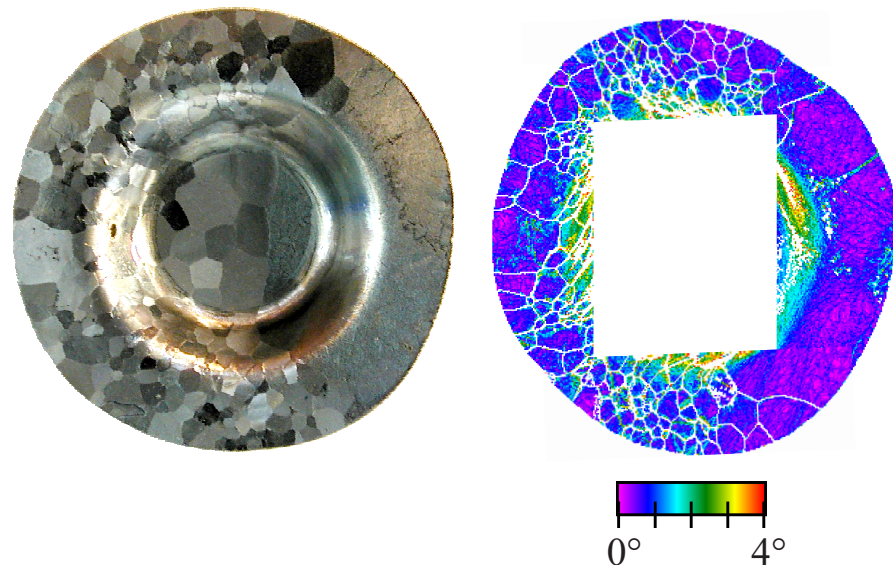


Bild 9.2.: Tiefziehrunde aus Fe-3%Si nach dem ersten Tiefziehschritt (Ausgangsdurchmesser 16 mm, Blechdicke 0.28 mm, Stempeldurchmesser 8 mm). *Links:* Fotografie der Probe. *Rechts:* OGM-Messung am Probenrand.

einem Korn eingenommen wird. Somit war es möglich, das Verhalten des polykristallinen Materials im Vergleich zum (quasi-)einkristallinen Material im gleichen Versuch zu untersuchen.

Die OGM-Messung des Randes zeigt, dass sich die Verfestigung im Bereich des großen Kornes sehr lokal konzentriert. Im polykristallinen Bereich liegt sie zwar auch bandförmig vor, ist aber aufgrund der kleineren Körner auf einen größeren Bereich verteilt. Diese lokale Art der Verfestigung zeigte sich auch im Zugversuch (Kapitel 7.3.1). Sie scheint also eine von der Korngröße und der Art der Belastung (ein- oder mehrachsige) unabhängige Eigenschaft von Fe-3%Si zu sein. Der Bodenbereich zeigt eine signifikante, lokal unterschiedliche Abnahme der Blechdicke, weist jedoch nur eine geringe Verfestigung auf.

Zugversuche an Cu zeigen (Abb. 9.4 und Abb. 9.5), dass die Blechdickenabnahme höherfrequente Strukturen aufweist, als im Fall von Fe-3%Si (vergleiche Abb. 7.31 auf Seite 149).

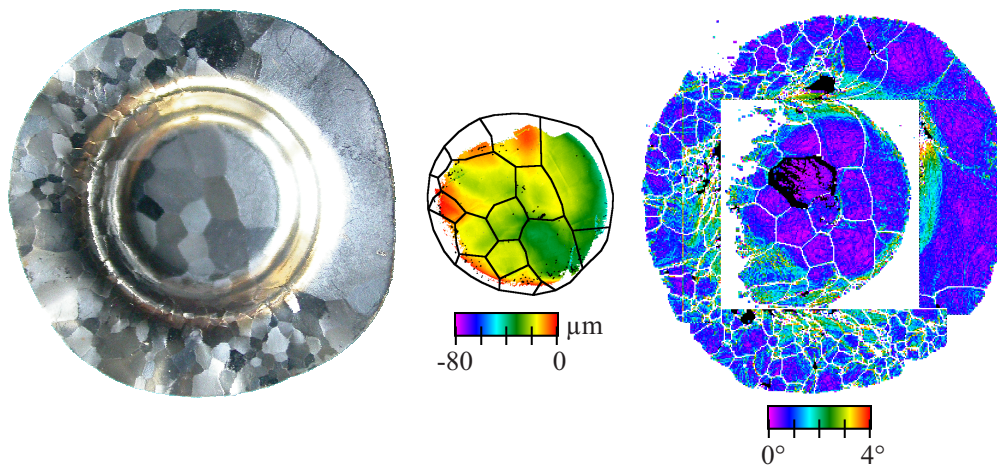


Bild 9.3.: Tiefziehrunde aus Abb. 9.2 nach dem zweiten Tiefziehschritt. *Links:* Fotografie der Probe. *Mitte:* Blechdickenmessung des Napfbodens mittels Weißlichtinterferometrie. Die Korngrenzen sind schwarz eingezeichnet. *Rechts:* Orientierungsgradient am Probenrand und von der Probenunterseite am Napfboden (Die Messung wurde entsprechend gespiegelt, damit die Anordnung der Körner der Fotografie entspricht.).

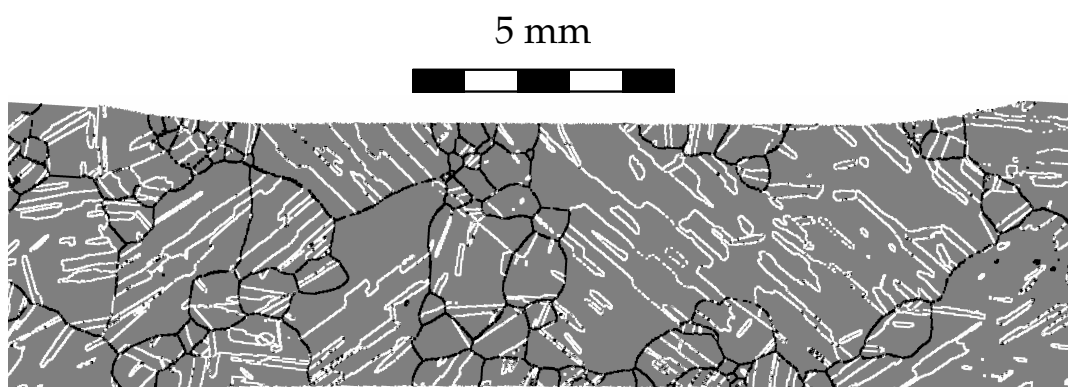


Bild 9.4.: Kornstruktur der Cu-Zugprobe: Die Korngrenzen sind schwarz, Zwillingskorngrenzen weiß dargestellt.

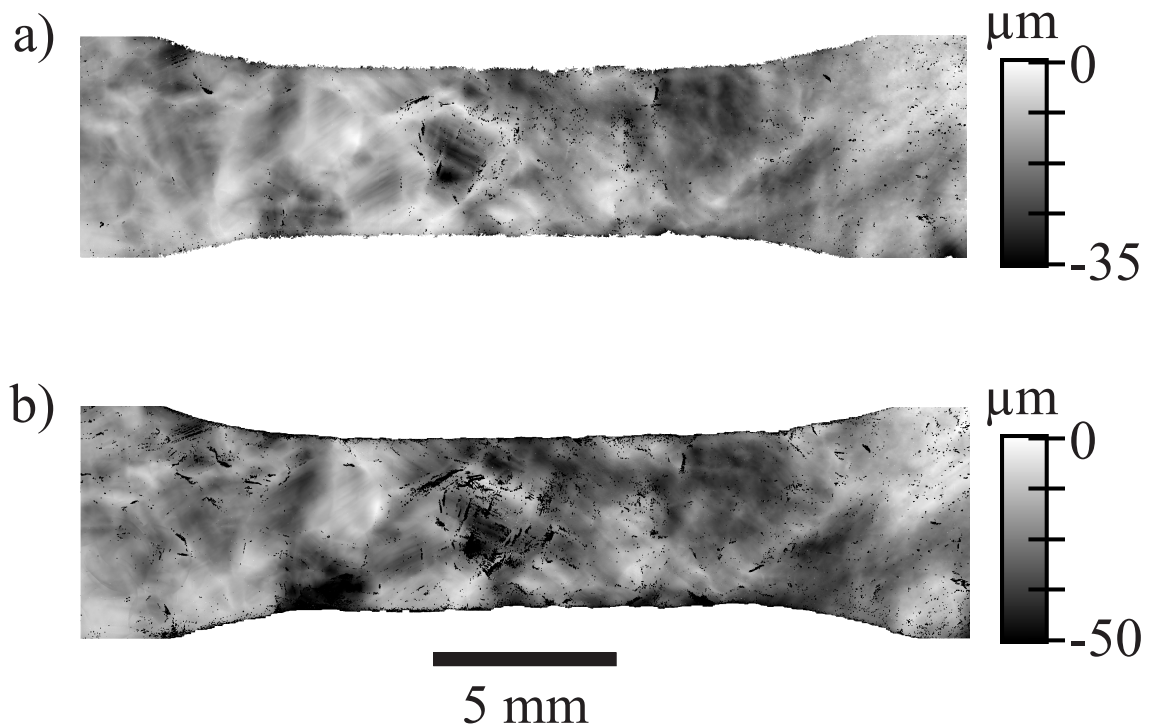


Bild 9.5.: Blechdickenmessung mittels Weißlichtinterferometrie an einer Cu-Zugprobe bei a) $\epsilon_{pl} \approx 3.7\%$ und b) $\epsilon_{pl} \approx 6.8\%$

In Abb. 9.6 sind die Ergebnisse des ersten Tiefziehschritts einer Cu-Ronde dargestellt. Im Gegensatz zur Fe-3%Si-Ronde wurde das Cu-Blech vor dem Stanzen der Ronde gegläht. Mit Ausnahme eines Kornes am Rand ist die Ronde einkristallin und nahezu frei von Zwillingen. Die OGM-Messungen zeigen für Rand und Napfboden im Vergleich zur Fe-3%Si-Ronde ähnlich wie im Zugversuch eine homogenere Verteilung der Verfestigung (Kapitel 7.3.2). Im Außenbereich der Cu-Probe zeigt der Orientierungsgradient die durch das Stanzen der Ronde hervorgerufene plastische Verformung. Die Blechdickenmessung des Napfbodens zeigt auch hier im Vergleich zur Fe-3%Si-Ronde eine relativ feine Strukturierung (obwohl der Boden des Cu-Napfes nahezu einkristallin ist).

Diese Ergebnisse zeigen, dass mit den in dieser Arbeit vorgestellten Methoden und Vorgehensweisen lokales Werkstoffverhalten nicht nur im Zugversuch untersucht werden kann; die Anwendbarkeit ist auch für den Fertigungsprozess gegeben. Eingehendere Untersuchungen sind also möglich. Somit kann das größenabhängige Bauteilverhalten ex situ und in situ unter-

sucht werden, um bei der Skalierung des Fertigungsprozesses Größeneffekte des Materials von den Größeneffekten des Prozesses besser zu trennen.

9.2. Weitere Ansätze

Das Ziel der Homogenisierung in der Simulation ist es einen Mittelweg zwischen Detailgrad und Rechenaufwand zu finden. Hierfür müssen bei der Homogenisierung die zugrundeliegende Mikrostruktur und Geometrie berücksichtigt werden. Ausgehend von den vorliegenden Ergebnissen werden im Folgenden ein paar Vorschläge für mögliche weitere Vorgehensweisen gemacht.

Zunächst wäre zu untersuchen, inwiefern die in Kapitel 7.1 dargestellte Vorgehensweise zur Modellierung anfänglicher Fließprozesse beim Zugversuch auch auf komplexere Versuche übertragbar ist. Beispielsweise wäre eine Übertragung auf den Biegeversuch denkbar. Ähnlich wie im Zugversuch könnte auch hier die Probe in Scheiben zerlegt modelliert werden. Bei der Übertragung auf das Tiefziehen (Lokale Blechausdünnung im Bereich des Napfbodens) wäre die Probe bei der Modellierung nicht in Scheiben sondern aufgrund der radial wirkenden Zugspannung zum Beispiel in radiale Segmente zu zerlegen. Hier wäre zu untersuchen, inwiefern die Segmente selbst wieder zu unterteilen sind, da Bereiche am Rand einer direkteren Belastung ausgesetzt sind als Bereiche in der Mitte des Napfbodens. Somit ließen sich für verschiedene Belastungsfälle Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen der anfänglichen Fließspannung ermitteln.

Auf der Basis solcher Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen könnten komplexere Geometrien und Lastfälle berücksichtigt werden. Zunächst könnte ein kontinuumsmechanisches Modell der Probe mittels FEM berechnet werden, um die lokalen Dehnungspfade anzunähern. Anschließend würden anhand der lokalen Dehnungen lokale Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen der Fließspannung verwendet. Da aus der FEM-Rechnung auch die Spannungsverteilung zu Beginn der plastischen Verformung bekannt ist, kann somit eine Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung für erste lokale Plastizität in Abhängigkeit der äußeren Last ermittelt werden.

Ein Einsatzzweck hierfür wären zum Beispiel Zahnräder. Während das Zahnrad ansich relativ groß sein mag, sind die einzelnen Zähne und Zahn-

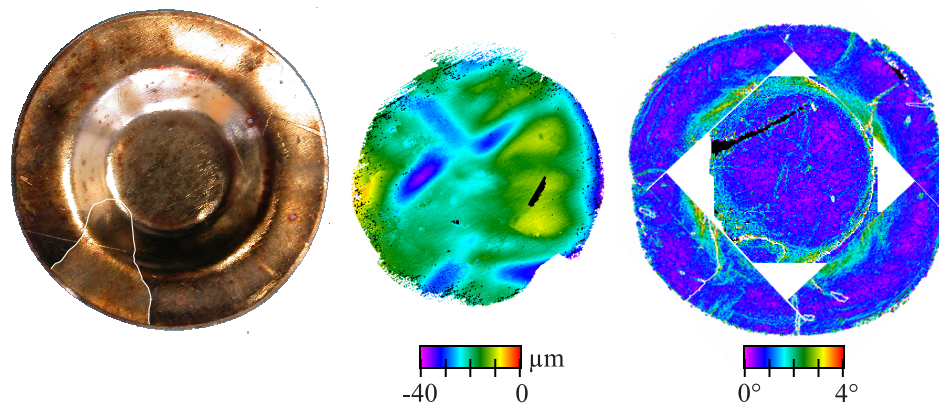


Bild 9.6.: Tiefziehrunde aus Cu nach dem ersten Tiefziehschritt (Ausgangsdurchmesser 16 mm, Blechdicke 0.3 mm, Stempeldurchmesser 8 mm). *Links:* Fotografie der Probe. Die Probe ist bis auf ein Korn links unten einkristallin. Der besseren Sichtbarkeit wegen wurde die Korngrenze durch Überlagerung einer weißen Linie hervorgehoben. *Mitte:* Blechdickenmessung des Napfbodens mittels Weißlichtinterferometrie. Das Blech war im Stempelbereich einkristallin. *Rechts:* Orientierungsgradient am Probenrand und von der Probenunterseite am Napfboden (Die Messung wurde entsprechend gespiegelt, damit die Anordnung der Körner der Fotografie entspricht.). Der schwarze Bereich im Napfboden, bei dem aufgrund der schlechten EBSD-Bilder (Unschärfe zeigt eine hohe Versetzungsdichte an) keine Orientierungsmessung möglich war, könnte auf den Beginn eines Bodenreißers hindeuten, da an der gleichen Stelle auch eine erhöhte Ausdünnung des Bleches gemessen wurde.

gründe, auf welche die Belastung hauptsächlich wirkt, wesentlich kleiner und unter Umständen im Bereich der Korngröße. Eine Auswertung wie oben dargestellt könnte für den einzelnen Zahn eine Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Belastbarkeit ergeben. Anhand der Anzahl der Zähne ist dann eine Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Belastbarkeit des Zahnrades ableitbar.

Anhang

A. Korngrößenbestimmung

Prinzipiell kann die Kornstruktur einer Probe dreidimensional charakterisiert werden, indem Schicht für Schicht abgeschliffen, wegpoliert oder mittels FIB (*Focused Ion Beam*) abgetragen wird [191]. Wegen der in Kapitel 5 geforderten Zerstörungsfreiheit der Charakterisierungsmethoden kann auf diese Vorgehensweise jedoch nicht zurückgegriffen werden. Es stehen demzufolge nur die Schnittlinien der Korngrenzenflächen mit der Probenoberfläche zur Verfügung.¹ Gängige Methoden zur Korngrößenbestimmung sind zum Beispiel Bildreihentafelvergleiche, Linienschnitt- und Flächenauszählverfahren sowie das Verfahren nach Snyder und Graff [193]. Mit diesen Verfahren kann jedoch nur eine mittlere Korngröße bestimmt werden. Um eine Korngrößenverteilung zu erhalten, muss die Größe für alle Körner einzeln bestimmt werden.

Angenommen, die Körner haben ungefähr Kugelform und werden von der Probenoberfläche in zufälliger Höhe geschnitten. Dann erscheinen Körner, die vor dem Schnitt die gleiche Größe hatten, unterschiedlich groß. Demgegenüber können unterschiedlich große Körner gleich groß erscheinen („Tomaten-Salat-Problem“) [194, 195]. Dieses Problem tritt insbesondere dann auf, wenn durch Schneiden der Probe aus dem Vollmaterial oder Abschleifen der obersten Materialschicht die untersuchte Probenoberfläche zufällig im Gefüge platziert wird.

In der vorliegenden Arbeit kommt es auf die wahre Korngrößenverteilung jedoch nicht an; vielmehr dient die Bestimmung der Verteilung zur Ähnlichkeitsanalyse verschiedener Proben. Im statistischen Mittel wird bei allen Proben der gleiche Fehler gemacht, sodass die einfache Ableitung der Korn-

¹In letzter Zeit wurde ein Verfahren zur zerstörungsfreien, lokalen Messung von Kristallorientierungen im Inneren einer Probe entwickelt, welches auf dreidimensionaler Röntgenbeugung-Mikrotomografie basiert (3DXRAY). Hierfür wird allerdings ein Synchrotron benötigt. Der aktuelle Entwicklungsstand dieser Methode und erste Ergebnisse sind in [192] zusammenfassend dargestellt.

größenverteilung anhand der an der Oberfläche sichtbaren Korngrenzen für diesen Anwendungszweck völlig ausreicht.

Die Korngröße wird in Form des Kornradius R angegeben. Körner haben aber keine perfekte Kugelform. Somit haben die Schnitte keine perfekte Kreisform. Als Korngröße R_i des Kornes i wird deshalb der Radius eines Kreises angegeben, dessen Fläche so groß ist, wie die Schnittfläche des Korns mit der Probenoberfläche. Es gibt prinzipiell mehrere Möglichkeiten, daraus einen mittleren Kornradius $\langle R \rangle$ abzuleiten. In der Literatur ist häufig nicht klar ersichtlich, welche Art der Mittelwertbildung vorgenommen wurde [12]. Auf den ersten Blick am naheliegendsten ist

$$\langle R \rangle := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_i \quad (\text{A.1})$$

Auf dieser Methode basieren die eingangs erwähnten gängigen Verfahren. In einigen Materialmodellen wird jedoch angenommen, dass die Hall-Petch-Gleichung

$$\langle \sigma_y \rangle = \sigma_p + \frac{k}{\sqrt{\langle R \rangle}} \quad (\text{A.2})$$

mit der Peierls-Spannung σ_p und der Konstanten k auch für einzelne Körner gilt. Für die Fließspannung $\sigma_{y,i}$ des Kornes i wird deshalb

$$\sigma_{y,i} = \sigma_p + \frac{k}{\sqrt{R_i}} \quad (\text{A.3})$$

verwendet. Dann müsste unter der Annahme von

$$\langle \sigma_y \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_{y,i} \quad (\text{A.4})$$

für den mittleren Kornradius die Formel

$$\langle R \rangle = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{R_i}} \right)^{-2} \quad (\text{A.5})$$

verwendet werden. Soweit dies anhand der historischen Entwicklung der Korngrößenbestimmung und den nur selten anzutreffenden Angaben in

der Literatur abzuleiten ist, liegt dem Hall-Petch-Effekt jedoch Gl. (A.1) zugrunde.² Aus diesem Grund wird auch in der vorliegenden Arbeit davon Gebrauch gemacht. In der Literatur wird der mittlere Kornradius stellenweise auch über die mittlere Kornfläche $\langle A \rangle$ berechnet:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i \quad (\text{A.6})$$

Hierbei ist A_i die Fläche des Kornes i . Unter der Annahme nahezu gleichachsiger Körner wird im Mittel angenommen, dass

$$\langle A \rangle = \pi \langle R \rangle^2 \quad (\text{A.7})$$

$$A_i = \pi R_i^2 \quad (\text{A.8})$$

Einsetzen liefert:

$$\begin{aligned} \pi \langle R \rangle^2 &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \pi R_i^2 \\ \Leftrightarrow \langle R \rangle &= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_i^2} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Auch diese Vorgehensweise ist mit der obigen Interpretation von Hall-Petch nicht kompatibel.

Ein weiteres Problem betrifft übrigens die Frage, inwiefern Zwillingskorngrenzen als normale Korngrenzen behandelt werden. In der Literatur werden häufig Angaben zur Korngröße zum Beispiel von Cu-Proben gemacht. Wie diese genau ausgewertet wurde, ist jedoch häufig nicht erwähnt. Zwillingskorngrenzen sind für manche Versetzungen vollkommen durchsichtig, für andere wiederum Hindernisse wie normale Korngrenzen auch. Ein ähnliches Problem stellt sich in Bezug auf Phasengrenzflächen bei Multiphasenwerkstoffen. In dieser Arbeit werden Zwillingskorngrenzen wie normale Korngrenzen behandelt.

²Da der Hall-Petch-Effekt makroskopisch experimentell gut belegt ist, sind deshalb aufgrund der mathematischen Inkompatibilität Zweifel angebracht, inwiefern die Formel wirklich auch lokal auf einzelne Körner übertragen werden kann.

B. Abschätzung der Dehnungsverteilung

Der Dehnungstensor anhand des Verschiebungsvektorfeldes $\vec{u}(\vec{x})$ ist in der klassischen Kontinuumsmechanik gegeben durch:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j \right) \quad (\text{B.1})$$

Im Experiment ist jedoch keine infinitesimale Betrachtung möglich; es können nur endliche Volumina betrachtet werden. Ist das betrachtete Volumen ausreichend klein, kann eine homogene Dehnung angenommen werden. Unter Ausschluss von Starrkörpertranslationen und -rotationen ist dann

$$u_i = \varepsilon_{ij} x_j \quad (\text{B.2})$$

In diesem Fall würde es genügen, die Verschiebung von 4 Punkten $\vec{P}_0, \vec{P}_1, \vec{P}_2$ und $\vec{P}_3$ zu bestimmen, die im unverformten Zustand linear unabhängig sind. Im einfachsten Fall können diese wie folgt angeordnet werden:

$$\begin{aligned} \vec{P}_0 &= (p_{0,1}; p_{0,2}; p_{0,3})^T \\ \left(\vec{P}_i \right)_j &= \left(\vec{P}_0 \right)_j + \Delta p \delta_{ij} \quad \forall \quad i, j = 1..3 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Bei zweidimensionaler Betrachtung entfällt $\vec{P}_3$, sodass es genügt, die Bewegung der Punkte eines quadratischen Punkterasters zu verfolgen. Für jeden quadratischen Bereich kann somit ein lokaler Dehnungstensor ermittelt werden.

In der vorliegenden Anwendung werden als Referenzpunkte jedoch Korn-grenzentrupelpunkte verwendet, die weder regelmäßig noch (in Bezug auf die Dehnungsinhomogenität) ausreichend dicht angeordnet sind. Um dennoch ein Maß für die lokale Verformung einzelner Körner zu erhalten, wird,

wie in [196] vorgeschlagen, die Methode der kleinsten Quadrate verwendet, um einen mittleren Dehnungstensor anzunähern. Das in [196] abgedruckte Ergebnis ist jedoch fehlerhaft. Des Weiteren wird in der Rechnung nicht auf Starrkörpertranslationen und -rotationen eingegangen. Aus diesem Grund wird im Folgenden ein verallgemeinerter Algorithmus hergeleitet.

In den durchgeführten Experimenten wird die Verformung dünner Bleche im Zugversuch untersucht. In erster Näherung wird angenommen, dass die Dehnung über die Blechdicke konstant ist.¹ Da nur die auf die ursprüngliche Blechebene projizierte Bewegung der Referenzpunkte vorliegt, wird die Betrachtung auf das Zweidimensionale beschränkt. Der genäherte Dehnungstensor ist somit:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{B.4})$$

Die Dehnungskomponente senkrecht zur Blechebene ε_{33} kann mit Hilfe der Annahme der Volumenkonstanz, das heißt $\varepsilon_{ii} = 0$, genähert werden. Die entsprechenden Abgleitungskomponenten ε_{13} und ε_{23} können mit dieser Methode jedoch nicht ermittelt werden. Statt Gl. (B.4) wird im Folgenden die Dehnung im Hauptachsensystem betrachtet:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

$$= \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \cos^2 \phi + \varepsilon_2 \sin^2 \phi & (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cos \phi \sin \phi \\ (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cos \phi \sin \phi & \varepsilon_1 \sin^2 \phi + \varepsilon_2 \cos^2 \phi \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

Hierbei sind ε_1 und ε_2 die Hauptdehnungen. Der Winkel ϕ gibt die Orientierung des Hauptachsensystems an. Aus dem Experiment erhält man für jeden Punkt k

- die Position vor Verformung $\vec{\xi}_k = (\xi_{1,k}; \xi_{2,k})^T$
- die Position nach Verformung $\vec{x}_k = (x_{1,k}; x_{2,k})^T$

Das rein verformungsbasierte Verschiebungsvektorfeld $\vec{u}_k$ kann jedoch nicht einfach aus $\vec{x}_k - \vec{\xi}_k$ berechnet werden. Neben der eigentlichen Verformung ε enthalten die gemessenen Positionen nämlich zusätzlich

¹Im Zugversuch bleibt – anders als im Biegeversuch oder beim Tiefziehen – die Blechoberfläche im Bereich der Gleichmaßdehnung in erster Näherung eben.

- eine Starrkörpertranslation vor Verformung $\vec{\vartheta} = (\vartheta_1; \vartheta_2)^T$
- eine Starrkörperrotation nach Verformung $\mathbf{R}$
- eine Starrkörpertranslation nach Verformung $\vec{t} = (t_1; t_2)^T$

Werden die gemessenen Positionen um die noch unbekannten Starrkörpertranslationen und -rotation korrigiert, kann die rein verformungsbasierte Verschiebung $\vec{u}_k = (u_{1,k}; u_{2,k})^T$ von Punkt k aus

$$\vec{u}_k := \mathbf{R} (\vec{x}_k - \vec{t}) - (\vec{\xi}_k - \vec{\vartheta}_k) \quad (\text{B.7})$$

erhalten werden. Dabei ist

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (\text{B.8})$$

Nach Korrektur der Messwerte um Translationen und Rotation stellen die $\vec{u}_k$ also experimentell gemessene, rein verformungsbasierte Verschiebungen dar. Der gesuchte Dehnungstensor ε soll nun diese Verschiebungen möglichst gut nachbilden. Sind $\vec{\tilde{x}}_k = (\tilde{x}_{1,k}; \tilde{x}_{2,k})^T$ die genäherten Positionen nach Verformung, dann gilt mit Gl. (B.2) für die mit ε genäherten Verschiebungen $\vec{\tilde{u}}_k = (\tilde{u}_{1,k}; \tilde{u}_{2,k})^T$:

$$\begin{aligned} \vec{\tilde{u}}_k &= \vec{\tilde{x}}_k - (\vec{\xi}_k - \vec{\vartheta}_k) \\ &= \varepsilon \cdot (\vec{\xi}_k - \vec{\vartheta}_k) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Als zu minimierendes Maß für die Abweichung wird

$$S := \sum_{k=1}^N \left(\vec{\tilde{u}}_k - \vec{u}_k \right)^2 \quad (\text{B.10})$$

verwendet, wobei N die Anzahl der Messwerte ist. Das Minimum kann gefunden werden, indem alle partiellen Ableitungen von S nach den zu optimierenden Parametern gleich Null gesetzt werden:

$$\frac{\partial S}{\partial \varepsilon_1} = 0 \quad \frac{\partial S}{\partial \varepsilon_2} = 0 \quad \frac{\partial S}{\partial \phi} = 0 \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{\partial S}{\partial \vartheta_1} = 0 \quad \frac{\partial S}{\partial \vartheta_2} = 0 \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{\partial S}{\partial t_1} = 0 \quad \frac{\partial S}{\partial t_2} = 0 \quad (\text{B.13})$$

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = 0 \quad (\text{B.14})$$

Aus Gl. (B.12) ergibt sich

$$\vec{\vartheta} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \vec{\zeta}_k \quad (\text{B.15})$$

Aus Gl. (B.13) ergibt sich

$$\vec{t} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \vec{x}_k \quad (\text{B.16})$$

Die Starrkörpertranslationen können somit aus den Messwerten eliminiert werden, sodass im Folgenden ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\vec{\vartheta} = \vec{0}$ und $\vec{t} = \vec{0}$ angenommen werden kann. Gl. (B.14) kann dann deutlich vereinfacht werden, dennoch konnte keine geschlossene Lösung gefunden werden. Stattdessen ergibt sich

$$\alpha = \arctan \left(\frac{\sum_{k=1}^N (\tilde{x}_{1,k} x_{2,k} - \tilde{x}_{2,k} x_{1,k})}{\sum_{k=1}^N (\tilde{x}_{1,k} x_{1,k} + \tilde{x}_{2,k} x_{2,k})} \right) \quad (\text{B.17})$$

Da die $\tilde{x}_k$ noch unbekannt sind, kann α somit nicht direkt berechnet werden. Zunächst wird deshalb eine reine Starrkörperrotation ohne Verformung

angenommen, sodass eine erste Näherung für α unter der Annahme $\vec{x}_k = \vec{\xi}_k$ gefunden werden kann. Mit diesem Wert für α kann nun die Starrkörperrotation aus den Messwerten in erster Näherung eliminiert werden. Somit kann im Folgenden angenommen werden, dass die Messpunkte frei von Starrkörperrotationen sind. Aus Gl. (B.11) resultiert dann mit

$$\begin{aligned}
 A &:= \sum_k \xi_{1,k}^2 + \xi_{2,k}^2 \\
 B &:= \sum_k 2 \xi_{1,k} \xi_{2,k} \\
 C &:= \sum_k \xi_{1,k}^2 - \xi_{2,k}^2 \\
 D &:= \sum_k u_{1,k} \xi_{1,k} + u_{2,k} \xi_{2,k} \\
 E &:= \sum_k u_{1,k} \xi_{2,k} + u_{2,k} \xi_{1,k} \\
 F &:= \sum_k u_{1,k} \xi_{1,k} - u_{2,k} \xi_{2,k}
 \end{aligned} \tag{B.18}$$

folgendes Gleichungssystem:

$$\varepsilon_1 (A + C \cos(2\phi) + B \sin(2\phi)) = D + E \sin(2\phi) + F \cos(2\phi) \tag{B.19}$$

$$\varepsilon_2 (A - C \cos(2\phi) - B \sin(2\phi)) = D - E \sin(2\phi) - F \cos(2\phi) \tag{B.20}$$

$$(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) (B \cos(2\phi) - C \sin(2\phi)) = 2E \cos(2\phi) - 2F \sin(2\phi) \tag{B.21}$$

Aus Gl. (B.19) und Gl. (B.20) ergeben sich sofort ε_1 und ε_2 zu

$$\varepsilon_1 = \frac{D + E \sin(2\phi) + F \cos(2\phi)}{A + C \cos(2\phi) + B \sin(2\phi)} \tag{B.22}$$

$$\varepsilon_2 = \frac{D - E \sin(2\phi) - F \cos(2\phi)}{A - C \cos(2\phi) - B \sin(2\phi)} \tag{B.23}$$

Einsetzen in Gl. (B.21) liefert dann

$$\phi = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{E (C^2 - A^2) + B (A D - C F)}{F (B^2 - A^2) + C (A D - B E)} \right) \tag{B.24}$$

Die aus diesen gefundenen Verformungsparametern berechneten $\vec{x}$ können nun in Gl. (B.17) eingesetzt werden, um einen exakteren Wert von α zu

erhalten, welcher wiederum verwendet werden kann, um die Verformungsparameter zu verbessern und so weiter. Die Konvergenz dieses iterativen Verfahrens ist im Einzelfall zu prüfen, zum Beispiel anhand von S . Als Abbruchbedingung wird die Erfüllung von mindestens einem der folgenden Kriterien vorgeschlagen:

- S/N unterschreitet einen Schwellenwert (= Forderung einer Mindestgenauigkeit)
- S ist im Vergleich zum vorhergehenden Iterationsschritt nicht kleiner geworden (= Forderung nach Konvergenz)
- Die maximale Anzahl von Iterationen ist erreicht (= Vermeidung von Deadlocks; Begrenzung der Rechenzeit)

In der Praxis hat sich gezeigt, dass selten mehr als 2–10 Iterationsschritte nötig sind, um das optimale Ergebnis zu finden.

C. Rechnen mit Orientierungen

C.1. Grundlagen

Eine Orientierung wird definiert durch eine Rotation $\mathbf{R}$, die das am Laborkoordinatensystem ausgerichtete Kristallgitter so dreht, dass seine Ausrichtung mit dem Kristallgitter der Probe übereinstimmt. Das heißt, dass $\mathbf{R}$ das am Kristallgitter der Probe ausgerichtete Koordinatensystem ins Laborkoordinatensystem überführt. Rotationen sind im Allgemeinen *nicht* kommutativ. Aus diesem Grund ist stets auf die korrekte Reihenfolge zu achten, wenn mehrere Rotationen hintereinander ausgeführt werden sollen!

Die 3 Freiheitsgrade einer Rotation im $\mathbb{R}^3$ können dabei direkt durch Rotationsachse¹ $\vec{q}$ und Rotationswinkel ϕ gegeben werden [197]²:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} c + (1-c)q_1^2 & (1-c)q_1q_2 - sq_3 & (1-c)q_1q_3 + sq_2 \\ (1-c)q_1q_2 + sq_3 & c + (1-c)q_2^2 & (1-c)q_2q_3 - sq_1 \\ (1-c)q_1q_3 - sq_2 & (1-c)q_2q_3 + sq_1 & c + (1-c)q_3^2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

mit den Abkürzungen

$$c := \cos \phi \quad (\text{C.2})$$

$$s := \sin \phi \quad (\text{C.3})$$

Das heißt, dass umgekehrt aus einer gegebenen Rotationsmatrix die Rotationsachse mit

$$\vec{q} = \frac{1}{2s} \begin{pmatrix} R_{32} - R_{23} \\ R_{13} - R_{31} \\ R_{21} - R_{12} \end{pmatrix} \quad (\text{C.4})$$

¹Die Länge der Rotationsachse ist dabei immer 1, sodass der Achsenvektor nur zwei unabhängige Komponenten hat.

²Achtung: Die Herleitung ist in der Literaturquelle zwar korrekt, die Ergebnisformel weist jedoch einen Druckfehler auf!

und der Rotationswinkel wegen

$$|\vec{q}| = 1 \quad (\text{C.5})$$

mit

$$\phi = \arccos \frac{R_{ii} - 1}{2} \quad (\text{C.6})$$

berechnet werden kann. Es gilt die Vereinbarung, dass

$$\phi \in [0; \pi] \quad (\text{C.7})$$

Häufiger als die Angabe einer Rotation mittels Rotationsachse und Winkel ist die Zerlegung einer Rotation in drei Einzelrotationen mit fest definierten Achsen, wie zum Beispiel im Falle der Eulerwinkel ϕ_1 , Φ und ϕ_2 (Notation nach Bunge):

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_z(\phi_2) \mathbf{R}_x(\Phi) \mathbf{R}_z(\phi_1) \quad (\text{C.8})$$

Es bezeichnen $\mathbf{R}_x$, $\mathbf{R}_y$ und $\mathbf{R}_z$ Rotationen um x-, y- und z-Achse:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_x(\alpha) &:= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \\ \mathbf{R}_y(\beta) &:= \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \\ \mathbf{R}_z(\gamma) &:= \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Einschub: Wichtige Anmerkung

In der Literatur ist für $\mathbf{R}_y$ auch häufig die Darstellung

$$\mathbf{R}_y(\beta) := \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (\text{C.10})$$

zu finden. Wie aber leicht durch Ausprobieren festgestellt werden kann, beschreibt dies eine Drehung um die *negative* y-Achse.

C.2. Orientierungsunterschiede

Gegeben seien zwei Orientierungen R_A und R_B . Der Orientierungsunterschied von A nach B sei ΔR_{BA} , sodass gilt:

$$\begin{aligned} R_B &= \Delta R_{BA} R_A \\ \Leftrightarrow R_B R_A^T &= \Delta R_{BA} \end{aligned} \quad (C.11)$$

Analog gilt für den Orientierungsunterschied von B nach A mit der Bezeichnung ΔR_{AB} :

$$\begin{aligned} R_A &= \Delta R_{AB} R_B \\ \Leftrightarrow R_A R_B^T &= \Delta R_{AB} \end{aligned} \quad (C.12)$$

ΔR_{BA} und ΔR_{AB} selbst sind wieder Rotationsmatrizen. Das heißt, ein Orientierungsunterschied kann auch durch eine Rotationsachse und einen Rotationswinkel (Missorientierungswinkel) ausgedrückt werden.

Einschub: Alternative Berechnung

Für die Berechnung der Missorientierung aus zwei mittels Euler-Winkeln gegebenen Orientierungen ist in [126] eine alternative Formel zu finden:

$$D_E = \sqrt{(\phi_{1,A} - \phi_{1,B})^2 + (\Phi_A - \Phi_B)^2 + (\phi_{2,A} - \phi_{2,B})^2} \quad (C.13)$$

Das Maß der Missorientierung ist hierbei die Distanz im Euler-Raum D_E . Der Euler-Raum weist jedoch weder eine gleichmäßige Dichte auf, noch ist eine eindeutige Zuordnung zwischen Orientierung und Position (ϕ_1, Φ, ϕ_2) möglich – in Sonderfällen wie $\Phi = 0$ bezeichnen alle Punkte mit $\phi_1 + \phi_2 = \text{const}$ sogar die gleiche Orientierung. Somit kann die gleiche Orientierung eine Distanz $D_E \neq 0$ zur Folge haben. Aus diesen Gründen erscheint die Verwendung von D_E weder mathematisch begründbar noch aus praktischen Erwägungen heraus ratsam.

Bei der Berechnung von Orientierungsunterschieden ist zu beachten, inwiefern das zugrundeliegende Kristallgitter eine Symmetrie aufweist. Im Falle des kubischen Kristallgitters gibt es 24 verschiedene Orientierungstransformationen, die aufgrund der Symmetrie die gleiche Orientierung bezeichnen. Es seien S_i die Symmetriebeziehungen eines Kristallsystems, also die Drehungen, die das Kristallsystem in sich selbst überführen (inklusive der Einheitsmatrix). Dann ergeben sich die zu R äquivalenten Orientierungen $R_{\text{symm},i}$ aus

$$R_{\text{symm},i} = RS_i \quad (\text{C.14})$$

Es genügt nun, alle äquivalenten Orientierungen von zum Beispiel A zu betrachten. Die möglichen Orientierungsunterschiede $\Delta R_{AB,i}$ sind demnach:

$$\Delta R_{AB,i} = R_{A,\text{symm},i} R_B^T \quad (\text{C.15})$$

$$= R_A S_i R_B^T \quad (\text{C.16})$$

Der Orientierungsunterschied ist dann gegeben durch $\min \{ \Delta R_{AB,i} \}$.

C.3. Mittlere Orientierung

Um aus N gegebenen Orientierungen R_i eine mittlere Orientierung $\langle R \rangle$ zu berechnen, kann *nicht* der arithmetische Mittelwert

$$\langle R \rangle = \frac{1}{N} \sum_i R_i$$

verwendet werden! In [198] wird eine Methode vorgeschlagen, die mittlere Orientierung durch Minimieren der Missorientierungswinkel zwischen $\langle R \rangle$ und R_i zu erhalten. Das Verfahren ist jedoch sehr aufwändig. Die Verwendung von Quaternionen ist eine weitere Möglichkeit zur exakten Berechnung einer mittleren Orientierung [110]. In der vorliegenden Arbeit wird eine dritte Möglichkeit verwendet, die jedoch nur für kleine Orientierungsschwankungen ausreichend genau ist. Zunächst müssen Missorientierungen aufgrund der Kristallsymmetrie beseitigt werden, indem für jede Orientierung R_i mit Hilfe von

$$R_{\text{symm},ij} = R_i S_j \quad (\text{C.17})$$

die äquivalente Orientierung $\mathbf{R}_{\text{symm},ij}$ mit dem kleinsten Missorientierungswinkel zu $\mathbf{R}_1$ gefunden wird. Diese sei im Folgenden mit $\mathbf{R}_i^*$ bezeichnet. Anschließend wird die Summenorientierung $\mathbf{R}_{\text{sum}}$ mit

$$\mathbf{R}_{\text{sum}} = \sum_i \mathbf{R}_i^* \quad (\text{C.18})$$

berechnet. Die genäherte mittlere Orientierung $\langle \mathbf{R} \rangle$ ergibt sich, wenn alle Spaltenvektoren von $\mathbf{R}_{\text{sum}}$ normalisiert werden.

D. Generierung von gleichmäßigen Orientierungsverteilungen

Im Folgenden wird zur Darstellung von Orientierungen die Formulierung

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_z(\gamma) \mathbf{R}_y(\beta) \mathbf{R}_x(\alpha) \quad (\text{D.1})$$

verwendet. Hierbei bezeichnen $\mathbf{R}_x$, $\mathbf{R}_y$ und $\mathbf{R}_z$ Rotationen um x-, y- und z-Achse (Gl. (C.9)). Die Wertebereiche der Winkel α , β und γ sind

$$\begin{aligned} \alpha, \gamma &\in [0; 2\pi[\\ \beta &\in \left[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}\right] \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Es sei $\mathcal{O}$ eine Menge von gleichverteilten Orientierungen und bestehe aus den Elementen $\mathbf{R}_i$. Wird ein auf die Länge 1 normierter Ausgangsvektor $\vec{v}$ gemäß

$$\vec{v}_i^* = \mathbf{R}_i \vec{v} \quad (\text{D.3})$$

gedreht, so liegen die Punkte $\vec{v}_i^*$ gleichverteilt auf der Einheitskugel.¹ Die Wahrscheinlichkeit, einen Vektor $\vec{v}_i^*$ innerhalb eines Flächenelements dA zu finden, ist also $p = dA/A$, wobei $A = 4\pi$ die Oberfläche der Einheitskugel ist. Das heißt, p ist unabhängig von der Lage und Form von dA .

Eine gleichmäßige Punkteverteilung im Parameterraum (α, β, γ) bildet jedoch keine Menge $\mathcal{O}$. In Abb. D.1 ist an einem Beispiel gezeigt, dass die Flächenelemente dA unterschiedlich groß sind.

Im Folgenden wird nun betrachtet, was mit den Achsen eines Koordinatensystems passiert, welches gemäß Gl. (D.1) rotiert wird. Zunächst wird die

¹Ohne Beweis: Auch die Punkte $\vec{v}_{T,i}^* = \mathbf{R}_i^T \vec{v}$ liegen gleichverteilt auf der Einheitskugel.

x-Achse betrachtet, es ist also $\vec{v} = (1; 0; 0)^T$. Die x-Achse ist bezüglich der ersten Drehung $R_x(\alpha)$ invariant, weshalb diese Drehung hier vernachlässigt werden kann. Aus Gl. (D.1) und Gl. (D.3) ergibt sich somit:

$$\begin{aligned}\vec{v}^* &= R\vec{v} \\ &= R_z(\gamma) R_y(\beta) \vec{v} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \gamma \cos \beta \\ \sin \gamma \cos \beta \\ -\sin \beta \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (D.4)$$

Das bei einer infinitesimalen Änderung der Winkel überstrichene Flächenelement dA ist

$$\begin{aligned}dA &= \left| \left(\frac{\partial \vec{v}^*}{\partial \beta} d\beta \right) \times \left(\frac{\partial \vec{v}^*}{\partial \gamma} d\gamma \right) \right| \\ &= \cos \beta d\beta d\gamma\end{aligned}\quad (D.5)$$

Das Flächenelement hängt also von β ab. Aus diesem Grund ist eine geeignete Normierungsvorschrift zu suchen. Es sei

$$f_\beta A = \int_0^{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\beta} \cos \beta' d\beta' d\gamma \quad (D.6)$$

Der Parameter $f_\beta \in [0; 1]$ gibt den relativen Anteil der Kugeloberfläche an, der im Winkelbereich $[-\frac{\pi}{2}; \beta]$ liegt. Ausrechnen von Gl. (D.6) liefert

$$\beta(f_\beta) = \arcsin(2f_\beta - 1) \quad (D.7)$$

Der entsprechende Parameter $f_\gamma \in [0; 1[$ für γ ist demzufolge

$$\gamma(f_\gamma) = 2\pi f_\gamma \quad (D.8)$$

Eine gleichmäßige Punkteverteilung im Parameterraum (f_β, f_γ) führt gemäß Gl. (D.7) und Gl. (D.8) zu einer ungleichmäßigen Punkteverteilung im Parameterraum (β, γ) mit der Eigenschaft, dass

$$\begin{aligned}dA &= \left| \left(\frac{\partial \vec{v}^*}{\partial f_\beta} df_\beta \right) \times \left(\frac{\partial \vec{v}^*}{\partial f_\gamma} df_\gamma \right) \right| \\ &= \text{konstant}\end{aligned}\quad (D.9)$$

Mit diesem Ergebnis ist es möglich, eine Menge $\mathbb{O}^*$ zu konstruieren, so dass die Rotationen der x-Achse $\vec{v}^*$ gemäß Gl. (D.4) auf der Einheitskugel gleichmäßig verteilt liegen. Wird $\vec{v}^*$ als Normalenvektor einer Ebene betrachtet (denn darin liegen die y- und z-Achse des Koordinatensystems), so folgt daraus, dass auch die zugehörigen Ebenen eine gleichmäßige Orientierungsverteilung aufweisen. Im Gegensatz zum x-Achsenvektor sind y- und z-Achsenvektor nicht invariant gegenüber der Rotation $R_x(\alpha)$. Das im Folgenden Gesagte gilt für y-, wie z-Achsenvektor gleichermaßen: Die Rotationen $R_x(\alpha_i)$ bilden den y-Achsenvektor genau dann gleichmäßig verteilt auf die Ebene senkrecht zur x-Achse ab, wenn die α_i im Wertebereich von α gleichmäßig verteilt sind. Da die nachfolgenden Rotationen aus $\mathbb{O}^*$ diese Ebene gleichverteilt auf den Orientierungsraum abbilden, folgt, dass die Schar rotierter y-Achsenvektoren eine gleichmäßige Verteilung aufweisen. Analog zu Gl. (D.8) wird ein Parameter $f_\alpha \in [0; 1[$ für α definiert:

$$\alpha(f_\alpha) = 2\pi f_\alpha \quad (\text{D.10})$$

Die Vorgehensweise, um eine Menge $\mathbb{O}$ von gleichverteilten Orientierungen zu erstellen, ist nun wie folgt:

1. Lege die Anzahl der Schritte N pro Winkel fest, das heißt, $\mathbb{O}$ beinhaltet am Ende N^3 Elemente. Für das Inkrement df gilt dann $df = 1/N$.
2. $f_\alpha := 0$
3. $f_\beta := 0$
4. $f_\gamma := 0$
5. a) Berechne $\alpha(f_\alpha)$, $\beta(f_\beta)$ und $\gamma(f_\gamma)$.
b) Erstelle das neue Element R_i gemäß Gl. (D.1) und füge es $\mathbb{O}$ hinzu.
6. $f_\gamma := f_\gamma + df$; Solange $f_\gamma < 1$, gehe zu Schritt 5.
7. $f_\beta := f_\beta + df$; Solange $f_\beta < 1$, gehe zu Schritt 4.
8. $f_\alpha := f_\alpha + df$; Solange $f_\alpha < 1$, gehe zu Schritt 3.

D. Generierung von gleichmäßigen Orientierungsverteilungen

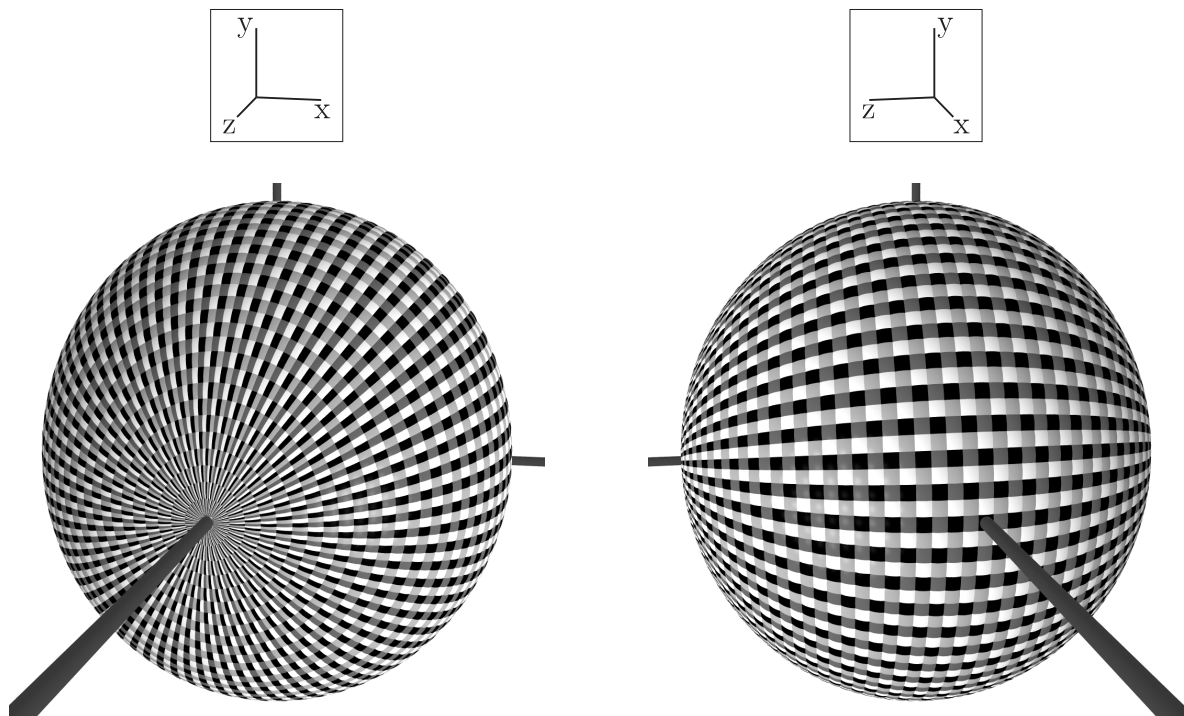


Bild D.1.: Orientierungsverteilung bei gleicher Winkelschrittweite

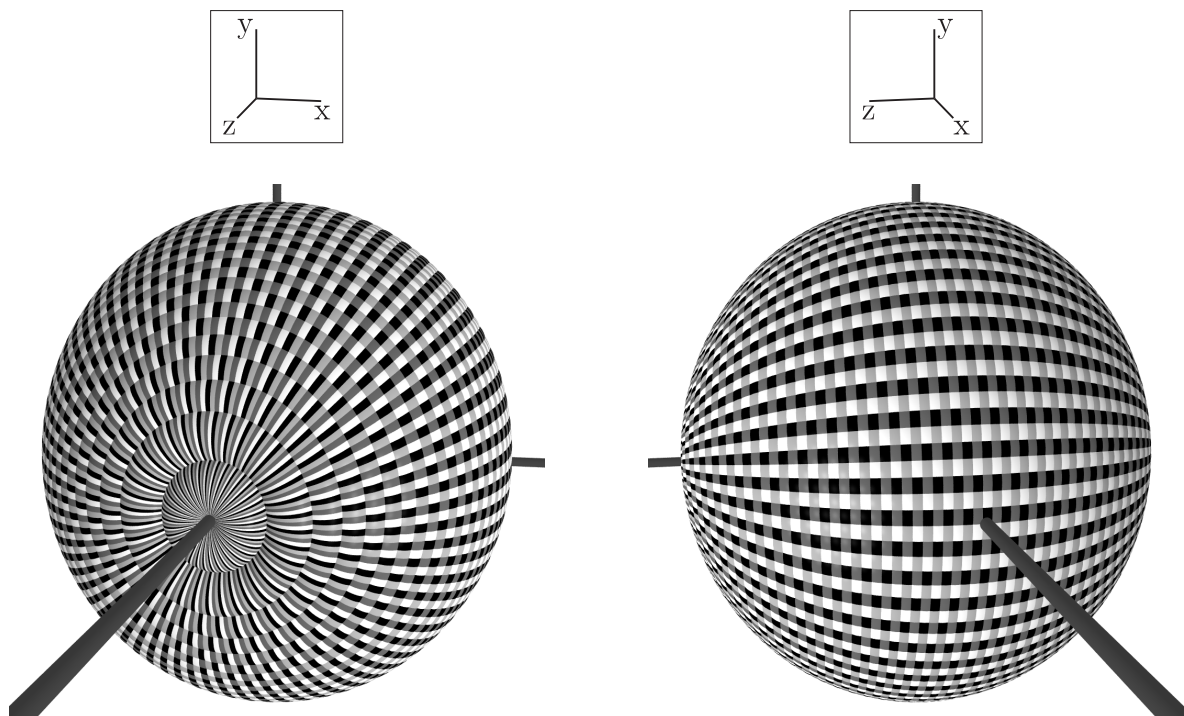


Bild D.2.: Gleichmäßige Orientierungsverteilung

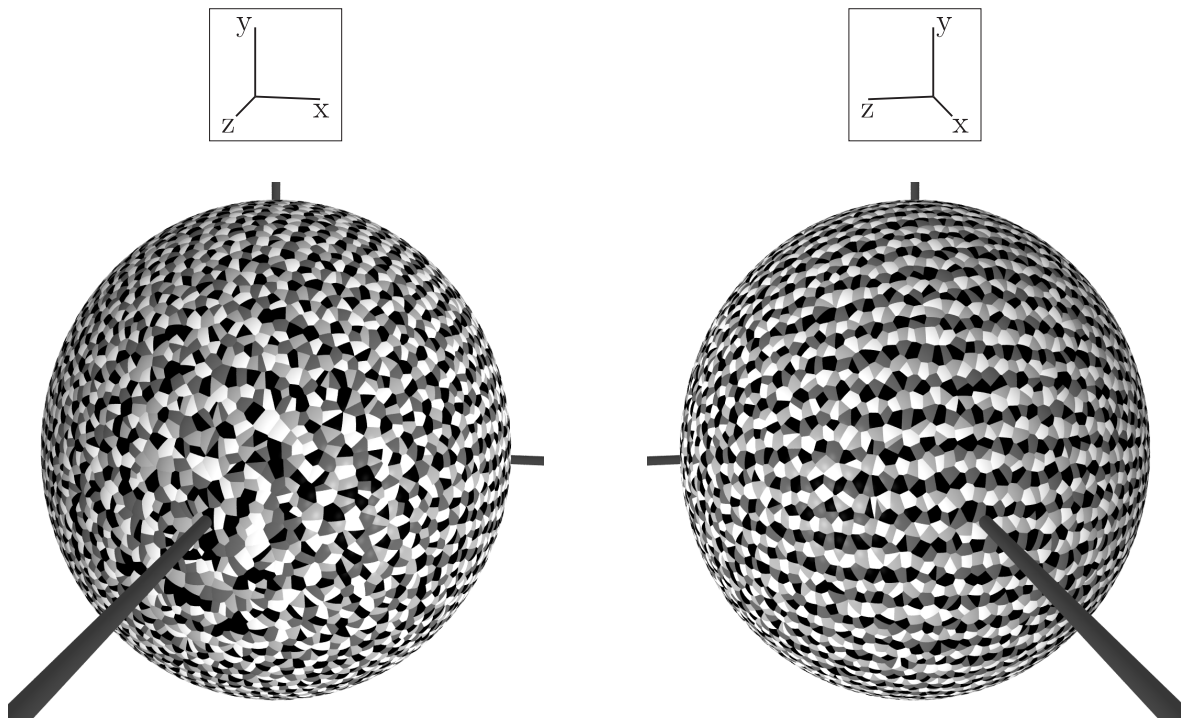


Bild D.3.: Gleichmäßige Orientierungsverteilung mit Dithering

In Abb. D.2 ist an einem Beispiel gezeigt, dass die Flächenelemente dA bei einer so erstellten Menge O gleich groß sind. Es fällt jedoch auf, dass die Abstände zwischen benachbarten Flächenelementmittelpunkten stark schwanken. Und in der Tat führt das zum Beispiel bei der Berechnung von Taylor-Faktor-Verteilungen zu unerwünschten Artefakten (siehe Anhang E.2, Abb. E.2 auf Seite 212). Um diese zu vermeiden, wird Schritt 5 im oben dargestellten Algorithmus wie folgt abgewandelt:

5. a) Berechne drei „Zufallszahlen“ r_1, r_2 und r_3 im Intervall $[0; df[$. Der verwendete Zufallszahlengenerator muss dabei gleichverteilte Zufallszahlen liefern.
- b) Berechne $\alpha(f_\alpha + r_1)$, $\beta(f_\beta + r_2)$ und $\gamma(f_\gamma + r_3)$.
- c) Erstelle das neue Element R_i gemäß Gl. (D.1) und füge es O hinzu.

Die aus diesem modifizierten Algorithmus (*Dithering*) resultierenden Flächenelemente dA sind an einem Beispiel in Abb. D.3 gezeigt. Die Flächenelemente weisen jetzt zwar leichte Schwankungen im Flächeninhalt auf, sind jedoch von wesentlich gleichmäßigerer Form und Anordnung. In der Praxis

überwiegen diese Vorteile in der Regel, während die Schwankungen im Flächeninhalt vernachlässigbar sind.

Es gibt auch andere Vorgehensweisen zur Generierung zufälliger Orientierungen [199,200]. Das hier vorgestellte Verfahren hat jedoch den Vorteil, dass die Orientierungen mit vorgegebener Dichte abzählbar sind.

E. Berechnung von Taylor-Faktoren

E.1. Annahmen des Modells

Die Berechnung der Fließspannung in Kapitel 7.1 basiert auf dem Modell von Taylor [201]: Im Vollmaterial können sich die Körner nicht frei plastisch verformen, da der Materialzusammenhang gewährleistet bleiben muss und die Körner sich nicht gegenseitig durchdringen können (Abb. E.1). Der plastische Dehnungstensor ε_{pl} verfügt über 6 unabhängige Komponenten, da $\varepsilon_{\text{pl},ij} = \varepsilon_{\text{pl},ji}$.¹ Deshalb sind 6 linear unabhängige Gleitsysteme notwendig, um eine aufgrund von Randbedingungen vorgegebene Verformung allgemein verwirklichen zu können. Unter der Annahme der Volumenkonstanz

$$\sum_i \varepsilon_{\text{pl},ii} = 0 \quad (\text{E.1})$$

reduziert sich die Anzahl der unabhängigen plastischen Dehnungskomponenten um eins, sodass 5 linear unabhängige Gleitsysteme ausreichen.² Nicht alle Gleitsysteme eines Kristalls sind voneinander linear unabhängig.³ Deshalb gibt es mehrere Gleitsystemkombinationen, die eine vorgegebene plastische Verformung umsetzen können. Sie unterscheiden sich in den Ableitungen der einzelnen Gleitsysteme.

Es gelten folgende Vereinfachungen und Annahmen:

¹Ob der Dehnungstensor symmetrisch ist oder nicht, hängt vom betrachteten Materialgesetz und Kontinuum ab. In Cosserat-Kontinua zum Beispiel gilt $\varepsilon_{\text{pl},ij} \neq \varepsilon_{\text{pl},ji}$, vergleiche auch [202, 203].

²Bei rein elastischer Dehnung hingegen liegt selten Volumenkonstanz vor, wie anhand einer meist von $\frac{1}{2}$ abweichenden Querkontraktionszahl ν ersichtlich ist.

³Da der plastische Dehnungstensor nur über 6 unabhängige Komponenten verfügt, kann es auch maximal 6 linear unabhängige Gleitsysteme geben. Ein Kristall mit mehr als 6 Gleitsystemen weist deshalb zwangsweise Gleitsysteme mit linearer Abhängigkeit auf.

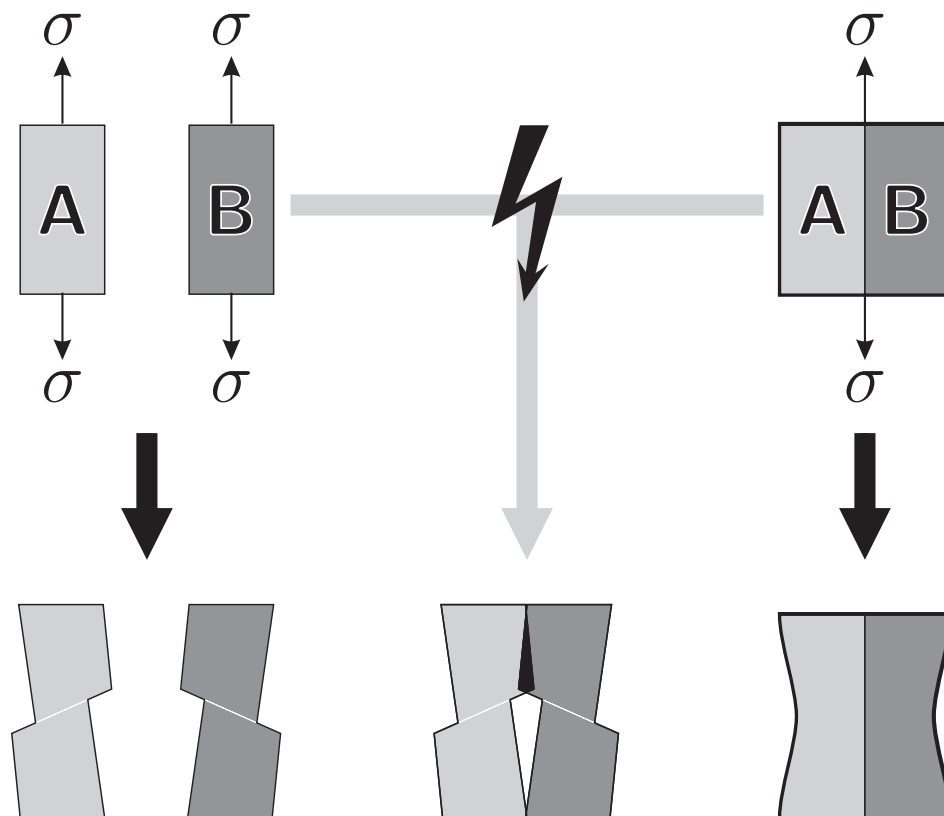


Bild E.1.: *Links:* zwei Einkristalle A und B sowie die aufgrund der wirkenden Zuglast σ resultierende Verformung. *Mitte:* wären A und B die Körner einer Zugprobe, so ergäben sich unter Beibehaltung der Einkristallverformung Lücken (weiß) und Materialüberlappungen (schwarz). *Rechts:* sich aufgrund des Kompatibilitätszwangs einstellende Verformung der Probe.

- Die elastische Verformung wird vernachlässigt.
- Die Verformung ist für alle Körner gleich und entspricht der makroskopischen plastischen Verformung der Probe.
- Die plastische Dehnung innerhalb eines Kornes ist homogen.
- Aus allen möglichen Gleitsystemkombinationen wird die Kombination ausgewählt, bei der die zur plastischen Verformung notwendige Arbeit minimal ist.

Untersuchungen zeigen allerdings, dass an einer Stelle in der Probe selten die vom Taylor-Modell postulierten 5 Gleitsysteme gleichzeitig aktiv sind. In der Regel ist das Volumen unterteilt in kleinere Bereiche mit jeweils 2–3 aktiven Gleitsystemen [125, 137]. Das ist jedoch kein grundsätzlicher Widerspruch zum Modell von Taylor. Dessen Ergebnisse weisen häufig nur für 1–3 Gleitsysteme nennenswerte Abgleitungen auf, während die Aktivitäten der restlichen Gleitsysteme vernachlässigbar sind. Des Weiteren ist zu beachten, dass das experimentelle Ergebnis auch von der Größe des betrachteten Probenvolumens abhängt. Ist das Volumen so groß, dass es mehrere Bereiche mit je 2–3 aktiven Gleitsystemen umfasst, so kann angenommen werden, dass in der Summe, wie vom Taylor-Modell postuliert, 5 Gleitsysteme zusammenkommen.

E.2. Mathematische Betrachtung

Es wird nun eine beliebige Kombination aus 5 linear unabhängigen Gleitsystemen in einem beliebig orientierten Kristall betrachtet. Die Orientierung eines Gleitsystems in Bezug auf das kartesische Laborkoordinatensystem (= Referenzsystem) wird gegeben durch die Richtungskosinus

- n_{ki} zwischen Referenzachse k und Gleitebenennormale von Gleitsystem i
- d_{ki} zwischen Referenzachse k und Gleitrichtung von Gleitsystem i

Wenn γ_i die Abgleitung des Gleitsystems i angibt, so ist die plastische Dehnung bezogen auf das Referenzsystem:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\text{pl},kl} &= \frac{1}{2} \sum_i \underbrace{(n_{ki}d_{li} + n_{li}d_{ki})}_{=: \mu_{ikl}} \gamma_i \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \mu_{ikl} \gamma_i\end{aligned}\quad (\text{E.2})$$

Dieses Gleichungssystem muss nach den Abgleitungen γ_i gelöst werden, um die volumenspezifische Arbeit w zu berechnen. Hierfür ist es nötig, den Dehnungstensor zu kennen. Im Falle eines Zugversuchs in y-Achsen-Richtung gilt:

$$\varepsilon_{\text{pl}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\varepsilon_{\text{pl},22} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\text{pl},22} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\varepsilon_{\text{pl},22} \end{pmatrix} \quad (\text{E.3})$$

Dies ist eine idealisierte Annahme, welche zum Beispiel bei dünnen Blechen aufgrund des ebenen Dehnungszustandes unter Umständen nur bedingt gilt. Bei der in dieser Arbeit verwendeten Probengeometrie wurden zu Beginn der plastischen Verformung weder im Experiment noch in FEM-Simulationen signifikante Abweichungen gefunden. Deshalb wird Gl. (E.3) als gültige Näherung angesehen.

Um nun aus den möglichen Lösungen die gesuchte Gleitsystemkombination zu finden, muss für jede Lösung die volumenspezifische Arbeit w berechnet und das Minimum gesucht werden. Hierfür wird zunächst die außen an der Probe verrichtete volumenspezifische Arbeit w_{Sample} betrachtet. Diese wird dann mit der in der Probe durch kristallographische Gleitung verrichteten Arbeit w_{Crystal} gleichgesetzt:

$$w_{\text{Crystal}} \stackrel{!}{=} w_{\text{Sample}} \quad (\text{E.4})$$

Im Falle idealer Plastizität gilt allgemein:

$$w = \sum_{i,j} \sigma_{ij} \varepsilon_{\text{pl},ij} \quad (\text{E.5})$$

Bei einachsiger Zuglast in y-Achsen-Richtung ist $\sigma_{ij} = 0 \forall (i, j) \neq (2, 2)$. Somit folgt für w_{Sample} :

$$\Rightarrow w_{\text{Sample}} = \sigma_{22} \varepsilon_{\text{pl},22} \quad (\text{E.6})$$

Die durch kristallographische Abgleitung verrichtete volumenspezifische Arbeit w_{Crystal} setzt sich zusammen aus den Abgleitungen γ_i der einzelnen aktiven Gleitsysteme i mit der jeweiligen wirkenden Schubspannung τ_i . Gemäß der Forderung, die Arbeit zu minimieren, gilt somit:

$$w_{\text{Crystal}} = \sum_i \tau_i \gamma_i \stackrel{!}{=} \text{Min} \quad (\text{E.7})$$

Da τ_i und γ_i stets gleichgerichtet sind, ist jeder Summand $\tau_i \gamma_i$ positiv. Unter der Annahme, dass die kritische Schubspannung für jedes Gleitsystem gleich ist, kann die gleitsystemunabhängige Schubspannung τ_0 verwendet werden. Wegen Gl. (E.4) und Gl. (E.6) ergibt sich:

$$\frac{\sigma_{22}}{\tau_0} = \frac{\sum_i |\gamma_i|}{\varepsilon_{\text{pl},22}} \stackrel{!}{=} \text{Min} =: m \quad (\text{E.8})$$

Das bedeutet, dass m das Verhältnis angibt von minimal notwendiger Zugspannung σ_{22} , um plastisches Fließen zu initiieren, zu kritischer Schubspannung τ_0 , welche eine Materialkonstante ist. Somit hängt m nur noch von der Orientierung des Kristallsystems und der gewählten Gleitsystemkombination ab.

Während es immer ein eindeutiges Minimum für w_{Crystal} gibt, ist es andererseits jedoch möglich, dass dieses Minimum durch verschiedene Gleitsystemkombinationen repräsentiert wird. Die Auswahl der Gleitsystemkombination ist deshalb unter Umständen nicht eindeutig.⁴ Wegen Gl. (E.7) kann Gl. (E.8) jedoch auch geschrieben werden als:

$$m \propto \min w_{\text{Crystal}} \quad (\text{E.9})$$

Die Suche nach der Gleitsystemkombination mit der geringsten Arbeit ist also äquivalent zur Suche nach der Gleitsystemkombination mit dem

⁴Dies ist insbesondere im Bereich der Simulation ein Problem [200, 204]. Es wird dadurch verstärkt, dass bei der Bestimmung der Kristallorientierung zum Beispiel mittels EBSD noch Messfehler zu berücksichtigen sind. Kleine Unterschiede in der Orientierung können zu völlig anderen aktiven Gleitsystemkombinationen führen; auf den Wert des Taylor-Faktors haben diese Ungenauigkeiten jedoch kaum eine Auswirkung.

kleinsten m . Eine weitere Folge dieser Gleichung besteht darin, dass es für die Berechnung von m genügt, die minimale volumenspezifische Arbeit zu berechnen. Die erwähnte Mehrdeutigkeit ist hier somit nicht weiter relevant, da das Ergebnis unabhängig von der konkreten Gleitsystemauswahl ist.

Einschub: Taylor Ambiguity

Falls im weiteren Verlauf der Rechnung zum Beispiel Kristallreorientierungen aufgrund plastischer Verformung betrachtet werden sollen, ist die vorgenannte Uneindeutigkeit der Auswahl der aktiven Gleitsystemkombination aus den möglichen günstigen Kombinationen (*Taylor ambiguity*) ein Problem. Von der gewählten aktiven Gleitsystemkombination hängt in starken Maße ab, wie sich die lokale Kristallorientierung und somit die Aktivität der einzelnen Gleitsysteme im Verlaufe der plastischen Verformung ändern. Dieses Problem wird häufig umgangen, indem die starre Aufteilung in aktive Gleitsysteme mit $\gamma_i \neq 0$ und nichtaktive Gleitsysteme mit $\gamma_i = 0$ aufgegeben wird und stattdessen für jedes Gleitsystem die Abgleitgeschwindigkeit $\dot{\gamma}_i$ proportional zur im Gleitsystem wirkenden Schubspannung gesetzt wird, siehe zum Beispiel [205].

Die Untersuchung der Orientierungsänderung von Körnern im Inneren einer Al-Zugprobe mittels dreidimensionaler Röntgenbeugung-Mikrotomografie ergab, dass die Vorhersagen des Taylor-Modells in relativ guter Übereinstimmung mit dem Experiment sind, wenn die aktive Gleitsystemkombination aus den möglichen günstigen Kombinationen so gewählt wird, dass sie das aktivste Gleitsystem enthält (Sachs-Faktor). Es hat sich ferner gezeigt, dass die Kornorientierung in Relation zum makroskopischen Lastpfad einen dominanten Einfluss auf das lokale Verformungsverhalten hat. Die Wechselwirkungen zwischen benachbarten Körnern führen lediglich zu einer Streuung [178,179].

Nun ist m ein Wert, der von der zugrundeliegenden Kristallorientierung abhängt. Oder anders formuliert: m repräsentiert ein Korn. Eine Probe be-

Kristall	Aktive Gleitsystemklassen	M	[206]
kfz	$\{111\}\langle 110 \rangle$	3.067	3.067
krz _{<1>}	$\{110\}\langle 111 \rangle$	3.067	3.067
krz _{<2>}	$\{112\}\langle 111 \rangle$	2.954	2.954
krz _{<3>}	$\{123\}\langle 111 \rangle$	2.804	2.803
krz _{<1-2>}	$\{110\}\langle 111 \rangle, \{112\}\langle 111 \rangle$	2.792	—
krz _{<1-3>}	$\{110\}\langle 111 \rangle, \{112\}\langle 111 \rangle, \{123\}\langle 111 \rangle$	2.754	2.754

Tabelle E.1.: Taylor-Faktoren für verschiedene Kristallsysteme und verschiedene zur Verfügung stehenden Gleitsystemklassen. Zur Berechnung wurde ein selbstgeschriebenes Programm verwendet. Zum Vergleich sind Literaturwerte aus [206] angegeben.

steht meist jedoch aus einer Vielzahl von Körnern mit unterschiedlicher Orientierung. Bei texturlosem Material gibt es keine Vorzugsorientierungen. Wird demzufolge m für alle möglichen Orientierungen berechnet, so ergibt sich der Taylor Faktor M aus dem Mittelwert. Die Ergebnisse hängen vom Kristallsystem und von den zur Verfügung stehenden Gleitsystemklassen ab.⁵

Eine analytische Berechnung von M mittels Integration über alle möglichen Orientierungen ist zwar prinzipiell möglich, jedoch sehr komplex. Deshalb wird eine einfachere Vorgehensweise gewählt. Für eine Vielzahl gleichmäßig verteilter Kristallorientierungen wird für jede Orientierung der zugehörige Wert m berechnet. Anschließend wird über alle m gemittelt. Wenn eine gleichmäßige Orientierungsverteilung wie in Abb. D.2 auf Seite 202 gewählt wird, zeigen sich in der Verteilungsdichtefunktion $f(m)$ Artefakte in Form von zum Beispiel Peaks (siehe Abb. E.2). Aus diesem Grund verwendet die im Rahmen dieser Arbeit erstellte Software zufällig leicht variierte Orientierungen (*Dithering*). Die Ergebnisse von texturfreiem Material für verschiedene Kristallsysteme und Gleitsystemklassen sind in Tab. E.1 dargestellt.

⁵Vielen ist der Zahlenwert 3.06 für den Taylor Faktor geläufig. Dieser Wert von M ergibt sich für texturloses kfz-Material.

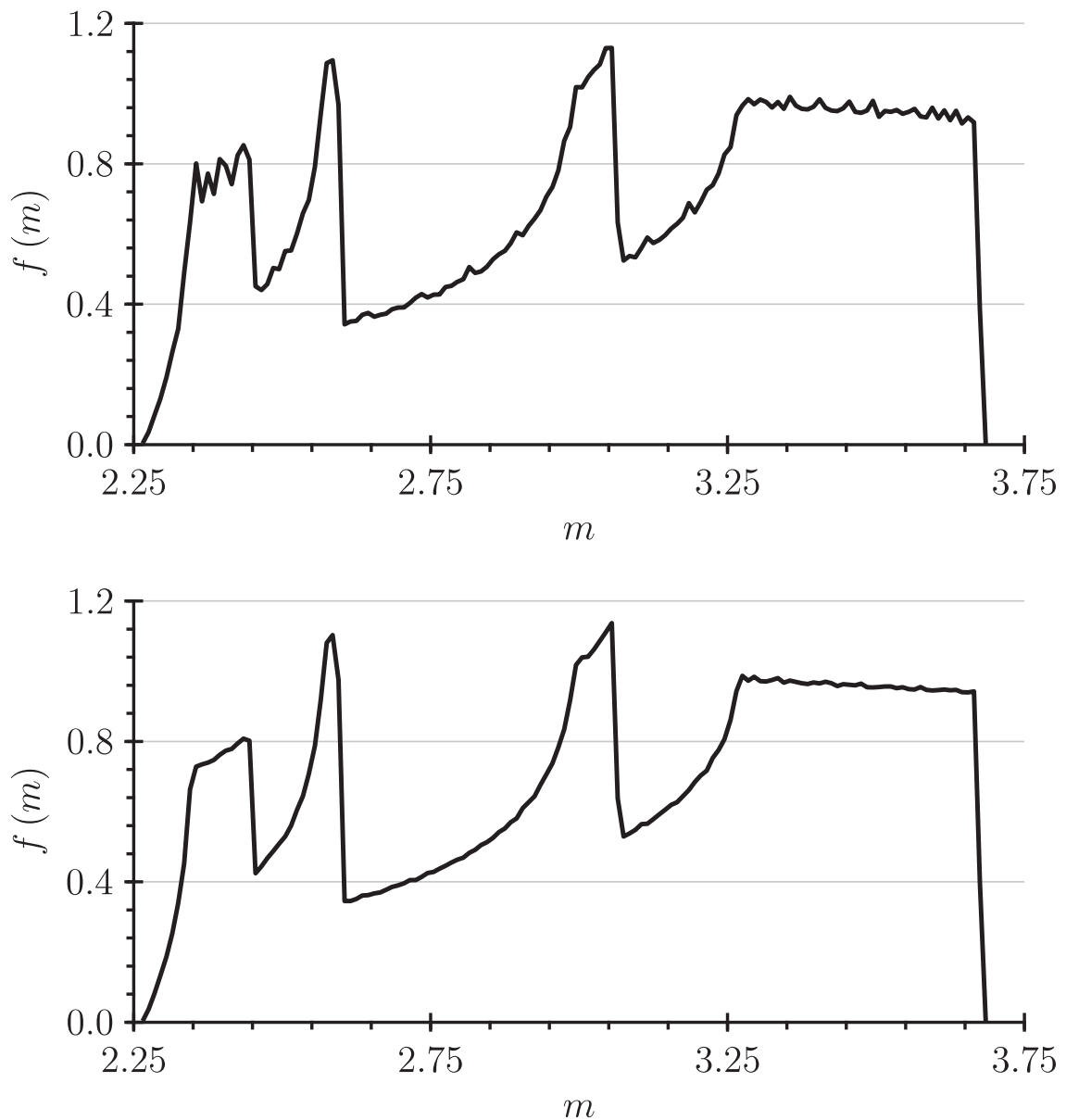


Bild E.2.: Unterschiede in der Verteilungsdichtefunktion von m (normiertes Histogramm mit Klassengröße 0.01) für eine gleichmäßige Orientierungsverteilung und kfz. *Oben:* ohne Dithering. *Unten:* mit Dithering. Für die Berechnung der hier gezeigten Histogramme wurde der Orientierungsraum in $360^3 = 46\,656\,000$ Orientierungen unterteilt. Die Histogramme, die zur Berechnung von Größeneffekten verwendet werden, basieren auf einer Unterteilung des Orientierungsraums in $720^3 = 373\,248\,000$ Orientierungen. Aufgrund der kubischen Symmetrie kann die Anzahl der zu berechnenden m auf $1/8$ reduziert werden.

Soll bei der Berechnung des Taylor-Faktors eine Textur berücksichtigt werden, so ist dies auf zwei Arten möglich: Eine Möglichkeit besteht darin, statt einer gleichmäßigen Orientierungsverteilung eine der Textur entsprechende Orientierungsverteilung zu verwenden. Für jede Textur muss die Taylor-Faktor-Berechnung erneut von Anfang an durchgeführt werden. Eine effizientere Möglichkeit besteht darin, eine gleichmäßige Orientierungsverteilung zu verwenden (= texturfrees Material, siehe Anhang D) und bei der Mittelwertbildung die einzelnen Werte m gemäß der Textur zu gewichten. Das hat den Vorteil, dass die Berechnung der m nur einmal durchgeführt werden muss. Es genügt, für eine ausreichend dichte Menge von Orientierungen jeweils die Orientierung mit dem zugehörigen Wert m in einer Datei zu speichern. Auf dieses Ergebnis muss dann nur noch für jeden Eintrag eine Gewichtung gemäß der Textur angewendet werden.

E.3. Optimierte Berechnungsmethoden

Das Hauptproblem bei der Berechnung besteht darin, aus allen möglichen Kombinationen eine Gleitsystemkombination zu finden, für deren Aktivierung die minimale Arbeit notwendig ist: für jede betrachtete Kombination ist Gl. (E.2) zu lösen und aus den sich ergebenden Ableitungen γ_i mittels Gl. (E.7) die Arbeit zu bestimmen (oder analog: mittels Gl. (E.8) m zu bestimmen).

Die Rechenzeit für einen Brute-Force-Algorithmus ist enorm, da für jede mögliche Fünferkombination aus den vorhandenen Gleitsystemen die Lösung des Gleichungssystems Gl. (E.2) zu berechnen ist. Verfügt der Kristall über N_{SS} Gleitsysteme, dann folgt

$$N_{\text{Comb}} = \binom{N_{SS}}{5} = \frac{N_{SS}!}{(N_{SS} - 5)! \times 5!} \quad (\text{E.10})$$

Somit müssen

$$\begin{aligned} N_{\text{Comb,kfz}} &= 792 \\ N_{\text{Comb,krz}<1>} &= 792 \\ N_{\text{Comb,krz}<1-2>} &= 42\,504 \\ N_{\text{Comb,krz}<1-3>} &= 1\,712\,304 \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

Gleitsystemkombinationen betrachtet werden – und zwar pro betrachteter Orientierung und pro betrachtetem Dehnungstensor.⁶

Der Rechenaufwand kann deutlich verringert werden, indem der Simplex-Algorithmus verwendet wird (Für eine vollständige Erklärung des Simplex siehe [203]). Beim Simplex ist sichergestellt, dass ausgehend von einer Gleitsystemkombination eine nächste Gleitsystemkombination gewählt wird, die ein kleineres m hat. Existiert keine solche Kombination mehr, wurde die optimale Lösung gefunden. Der Vorteil besteht darin, dass nun nicht mehr alle erdenklichen Gleitsystemkombinationen betrachtet werden müssen. Auf der anderen Seite benötigt der Algorithmus als Startpunkt eine sogenannte zulässige Basislösung (*basic feasible solution*, BFS). Aus diesem Grund verwenden viele Implementierungen einen 2-Phasen-Simplex. In der ersten Phase sucht der Algorithmus eine BFS, in der zweiten Phase sucht er anschließend davon ausgehend eine Optimallösung.

Im Folgenden werden einige Varianten vorgestellt, um die Berechnung der BFS zu optimieren. Die Qualität der BFS bestimmt außerdem maßgeblich die Anzahl der nachfolgend nötigen Simplex-Iterationen und somit die Rechenzeit:

- *constant basic feasible solution*, CBFS: Im Prinzip kann jede Kombination aus 5 linear unabhängigen Gleitsystemen als BFS verwendet werden. Die lineare Unabhängigkeit ist unabhängig von der Kristallorientierung und vom Dehnungstensor. Somit genügt es, einmalig für jedes Kristallsystem und seine Gleitsystemklassen eine BFS zu ermitteln. Diese kann dann in allen nachfolgenden Rechenschritten verwendet werden, sodass die erste Phase des Simplex vollständig entfallen kann.
- *adapted basic feasible solution*, ABFS: Um die Qualität der BFS zu verbessern, wird die Annahme getroffen, dass das Gleitsystem mit der höchsten wirkenden Schubspannung Teil der optimalen Lösung ist.⁷

⁶Dass Orientierung und Dehnung innerhalb eines Kornes konstant sind, ist lediglich eine hier getroffene Vereinfachung, die bei anderen Anwendungen unter Umständen entfällt.

⁷In [137] wurden für einige Fälle die Gleitsystemaktivitäten gemäß Schmid-Faktor mit den Aktivitäten gemäß Taylor-Faktor verglichen. Die Gleitsystemaktivität wurde hierbei proportional zur wirkenden Schubspannung angesetzt. Die Ergebnisse stützen die getroffene Annahme ausnahmslos. Diese Wahl der BFS forciert das Auftreten des Gleitsystems mit der maximalen Schubspannung in der optimalen Lösung. Da Untersuchungen zeigen, dass eine Kombination aus Taylor-Modell und Sachs-Faktor die Orientierungsänderungen einzelner Körner im Vollmaterial relativ gut vorhersagt [178, 179], kann diese Vorgehensweise auch als physikalisch sinnvoll angesehen werden.

Zu Beginn der Berechnung werden hierfür einige Kombinationen aus 5 linear unabhängigen Gleitsystemen dergestalt ermittelt, dass jedes verfügbare Gleitsystem des Kristalls Bestandteil von mindestens einer Kombination ist. Als BFS wird nun eine Kombination gewählt, in der das Gleitsystem mit der höchsten wirkenden Schubspannung enthalten ist. Es resultiert somit eine angepasste BFS. Bei diesem Verfahren ist es somit nötig, die wirkende Schubspannung von jedem Gleitsystem zu berechnen. Nichtsdestotrotz verringert sich die Rechenzeit, da der Rechenzeitgewinn durch die Verringerung der Anzahl an Simplex-Iterationen überwiegt.

- *similar state basic solution*, SSBS: In den meisten Anwendungen muss die Berechnung von Taylor-Faktoren wiederholt für Randbedingungen durchgeführt werden, die nur geringe Abweichungen im Dehnungstensor oder der Kristallorientierung aufweisen:
 - In FEM-Simulationen wird zum Beispiel für jedes Finite Element ein eigener Taylor-Faktor berechnet. Benachbarte Elemente sind sich dabei in der Regel bezüglich der Randbedingungen sehr ähnlich. Auch die Änderung des Zustands eines Elements vom einen FEM-Iterationsschritt zum nächsten erfolgt in kleinen Schritten. Es kann davon ausgegangen werden, dass sowohl räumliche (= benachbarte Finite Elemente) als auch zeitliche Nähe (= ein Finite Element während der Verformung) zu einer bevorzugt ähnlichen Auswahl aktiver Gleitsysteme führen.
 - Bei der Berechnung eines mittleren Taylor-Faktors M wird der gleiche Dehnungstensor auf verschiedene Orientierungen angewendet, wobei die Orientierungen häufig dicht beieinanderliegen.

Es wird nun angenommen, dass in der Mehrzahl der Fälle kleine Änderungen in den Randbedingungen nur zu einer geringfügigen Änderung in den Gleitsystemkombinationen mit minimaler Arbeit führen. Da der Simplex-Algorithmus neben m auch die zugehörige Gleitsystemkombination liefert, kann dieses Ergebnis als BFS für die nachfolgende Berechnung verwendet werden. Dieses Verfahren, welches auf der Ähnlichkeit der Randbedingungen basiert, verringert ohne Mehraufwand die Anzahl der Simplex-Iterationen deutlich.

Algorithmus	$\frac{t_{\text{kfz}}}{T_{\text{kfz}}}$	$\frac{t_{\text{krz}<1-3>}}{T_{\text{krz}<1-3>}}$
Brute-Force	2.24	≈ 900
2-Phasen-Simplex	1.00	1.00
Simplex, constant basic feasible solution (CBFS)	0.60	0.71
Simplex, adapted basic feasible solution (ABFS)	0.60	0.43
Simplex, similar state basic solution (SSBS)	0.50	0.29

Tabelle E.2.: Benchmark verschiedener Algorithmen zur Berechnung mittlerer Taylor-Faktoren M . Die Rechenzeiten t sind normiert angegeben. Als Bezugsgröße T wurden hierbei die Rechenzeiten des 2-Phasen-Simplex verwendet. Im Falle von ABFS beinhaltet t auch die Berechnung der wirkenden Schubspannungen für jedes Gleitsystem. Obwohl versucht wurde die Implementierungen der Algorithmen so vergleichbar wie möglich zu halten, sollten die angegebenen Werte nur als Anhaltspunkte verstanden werden. Im Detail können sie vom Anwendungsfall und der Implementierung abhängen.

Die verschiedenen Algorithmen wurden implementiert und zur Berechnung mittlerer Taylor-Faktoren verwendet. In Tab. E.2 sind die Rechenzeiten gegenübergestellt.

F. Software

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zahlreiche Software entwickelt. Im Folgenden wird ein kurzer Überblick über die wichtigsten Anwendungen und deren Hauptfunktion gegeben (In alphabetischer Reihenfolge):

ANG-File-Corrector

- Korrigieren des systematischen Winkelfehlers von EBSD-Messungen bei großen Messflächen.

ANG-GrainFinder (Abb. F.1)

- Bearbeiten von EBSD-Messungen, zum Beispiel: Rauschen entfernen, Scans oder Orientierungen drehen und spiegeln.
- Auswertung von EBSD-Messungen, zum Beispiel: Orientierungsgradient, mittlere Kornorientierung, Streuung der Orientierung innerhalb eines Kornes und Korngrößenverteilung.

ANG-Stitcher (Abb. F.2)

- Zusammenfügen mehrerer EBSD-Einzelmessungen zu einer Gesamt-messung.

CalcEulerDistance (Abb. F.3)

- Mathematische Auswertung und grafische Darstellung von Orientierungsbeziehungen.

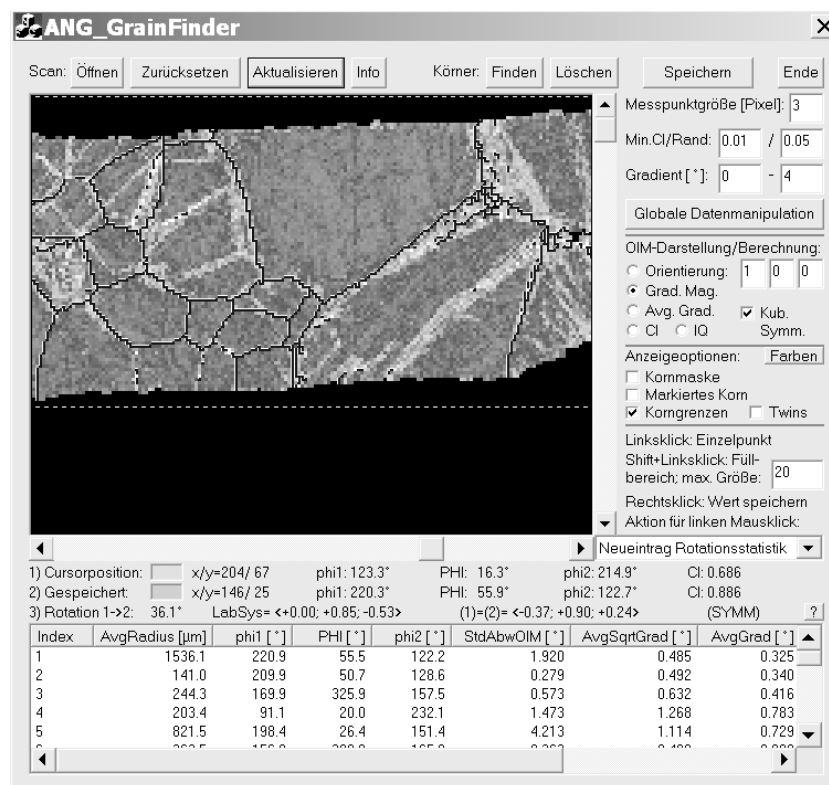


Bild F.1.: Bildschirmfoto ANG-GrainFinder

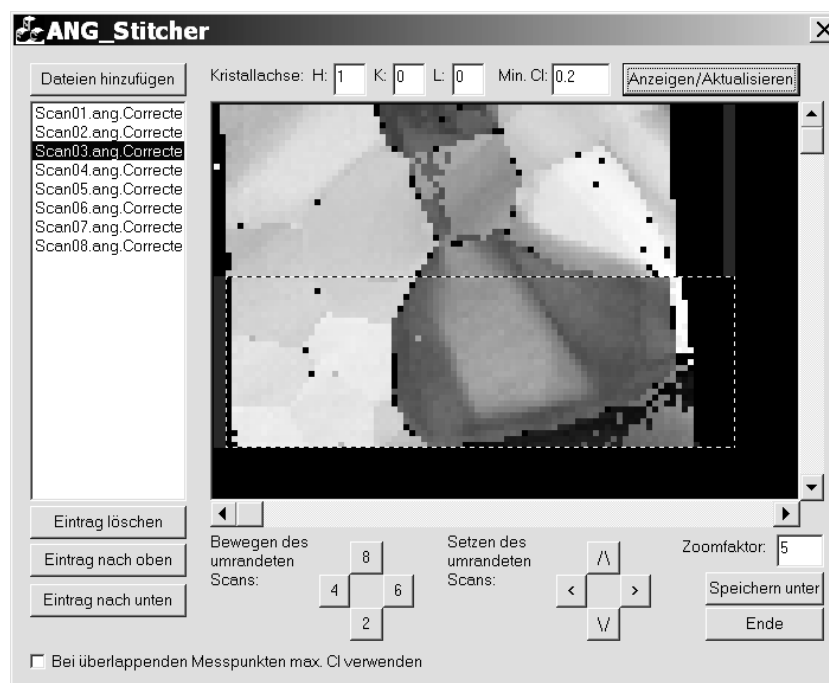


Bild F.2.: Bildschirmfoto ANG-Stitcher

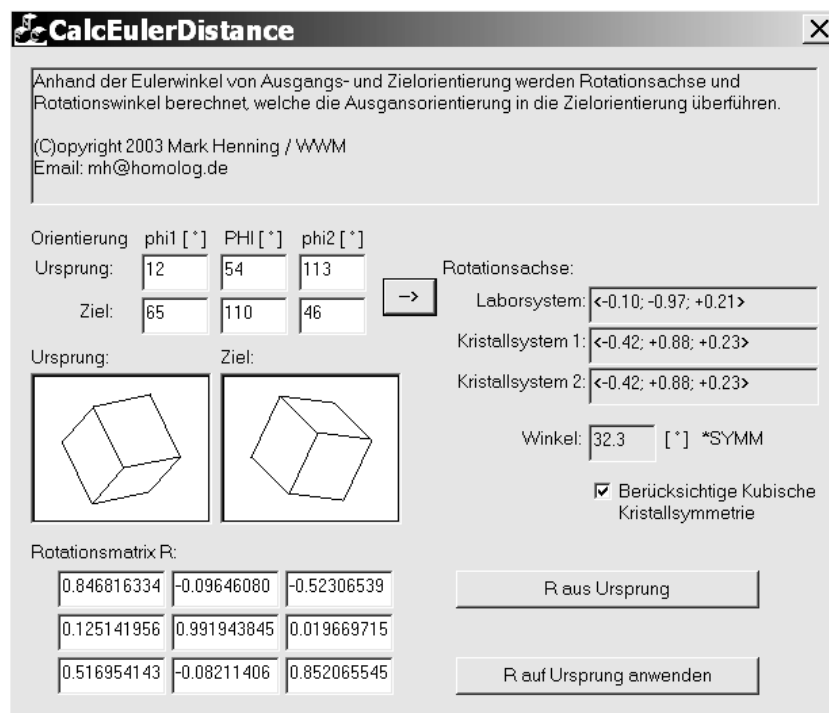


Bild F.3.: Bildschirmfoto CalcEulerDistance

DefMeasure (Abb. F.4)

- Erstellen von Proben- und Korngeometrie vor und nach Verformung aus Probenbildern von DigiCam, Lichtmikroskop oder REM.
- Auswertung von zum Beispiel: Querschnittsflächenverlauf über die Messlänge und Korngrößenverteilungsfunktionen.
- Berechnung von mittleren Verformungstensoren pro Korn (siehe Anhang B).
- Eingabe von Kornorientierungen und Zusammenführung mit der Geometrie des betreffenden Kornes.
- Berechnung mittlerer Taylor-Faktoren $m_{\text{Avg},j}$ von Probenscheiben.
- Einlesen von FEM-Simulationsergebnissen von ABAQUS (über ODB-MAP-Generator) oder generisch erzeugten Spannungsverläufen. Daraus Berechnung von zum Beispiel Gleitlinien und Gleitsystemaktivitäten.

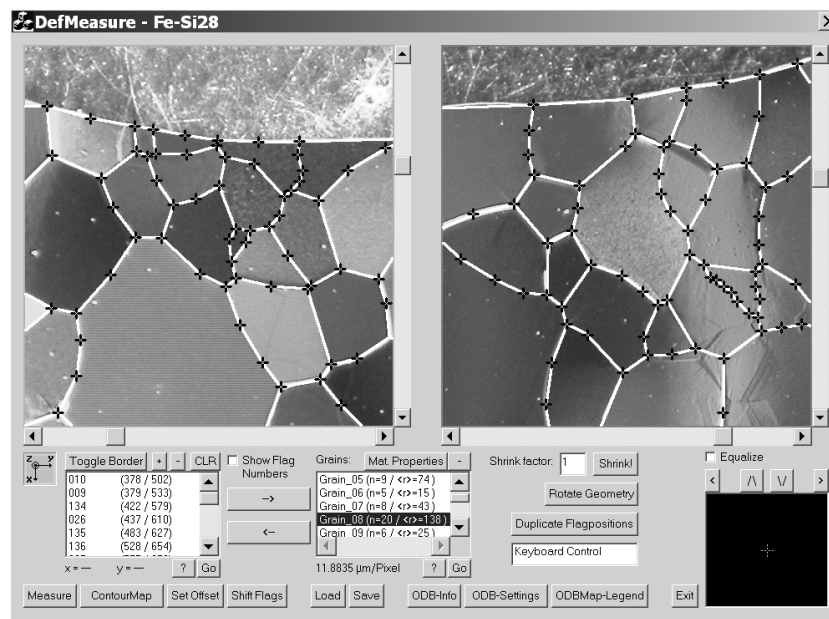


Bild F.4.: Bildschirmfoto DefMeasure

LineDetector (Abb. F.5)

- Statistische und individuelle Auswertung von Gleitlinien mittels Hough-Transformation von Probenbildern.

ODBMAP-Generator

- Extrahieren von Simulationsergebnissen aus ABAQUS ODB-Dateien und erzeugen größen- und zugriffsoptimierter ODBMAP-Dateien, welche von DefMeasure weiterverarbeitet werden können.

PicturePaster (Abb. F.6)

- Zusammensetzen von Teilaufnahmen einer Probe zu einer Gesamtaufnahme. Das Ausrichten der Teilaufnahmen erfolgt halbautomatisch.
- Angleichen von Helligkeit und Kontrast der Einzelaufnahmen sowie weitere Funktionen zur Kontrastoptimierung.

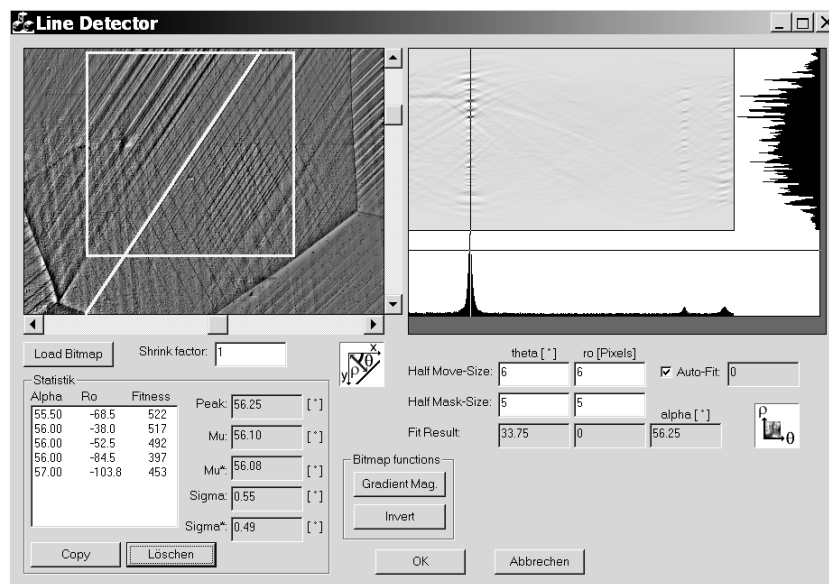


Bild F.5.: Bildschirmfoto LineDetector

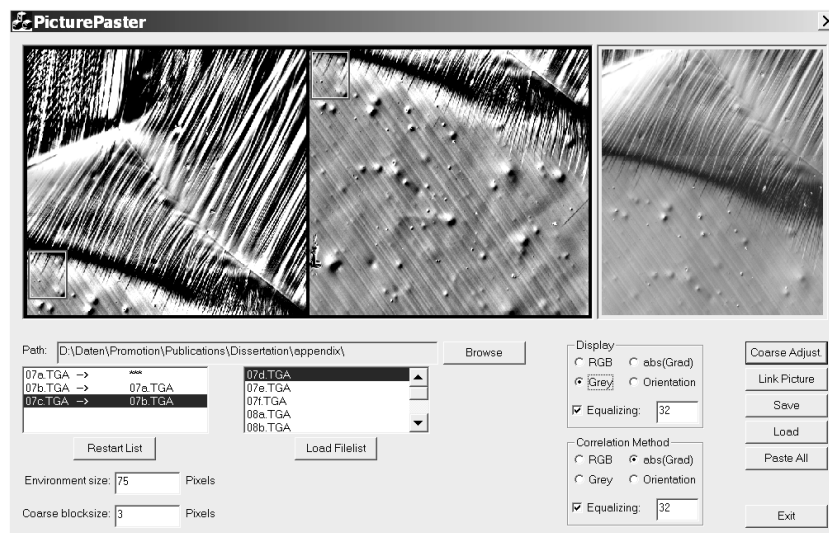


Bild F.6.: Bildschirmfoto PicturePaster

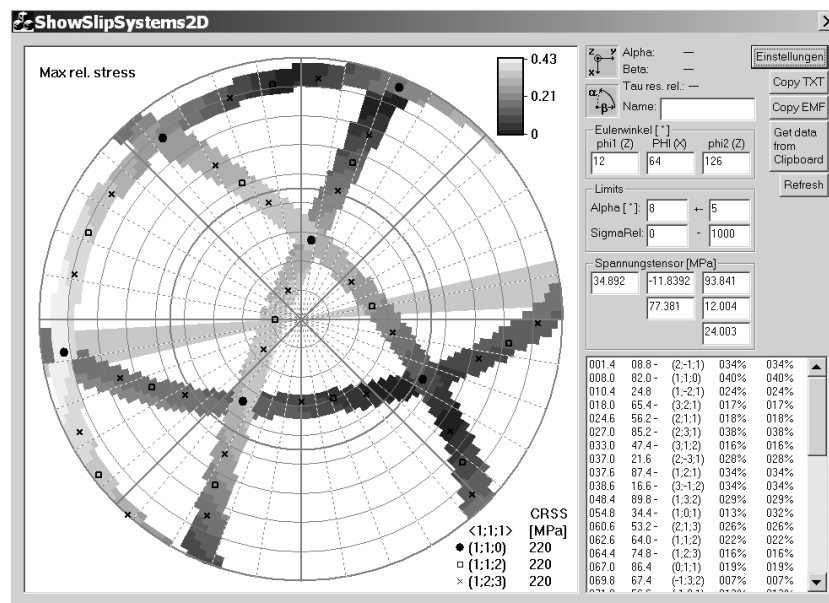


Bild F.7.: Bildschirmfoto ShowSlipSystems2D

SchmidFaktorVerteilung

- Berechnen von texturlosen Schmid- und Taylor-Faktor-Verteilungsdichten anhand vorgegebener Gleitsysteme.

ShowSlipSystems2D (Abb. F.7)

- Anzeigen der Gleitsysteme eines Kornes in einem speziellen Diagramm, welches direkt mit den in Probenaufnahmen sichtbaren Gleitbändern verglichen werden kann.
- Auswerten von Spannungstensoren im Hinblick auf die wirkende Schubspannung pro Gleitsystem, um zu entscheiden, welche Gleitsysteme eventuell in Kombination aktiv sind.

SilhouetteMeasure

- Auswerten der lokalen Krümmung des Probenrandes von tiefgezogenen Ronden im weiteren Projektverlauf.

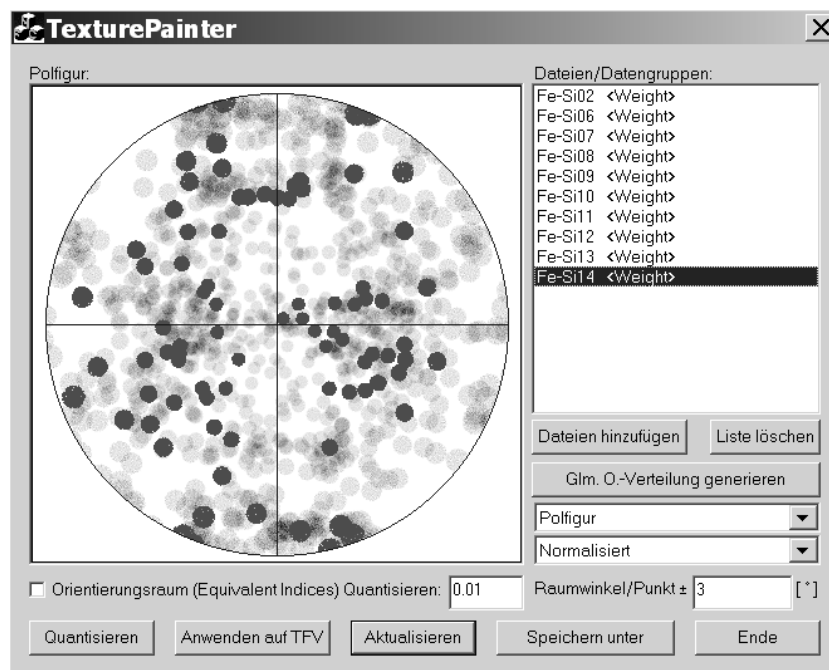


Bild F.8.: Bildschirmfoto TexturePainter

TexturePainter (Abb. F.8)

- Zusammenführen und Darstellen von Texturmessungen aus verschiedenen Einzelmessungen.
- Generieren von texturierten Schmid- und Taylor-Faktor-Verteilungsdichten anhand texturloser Verteilungsdichten und Texturen.
- Generieren zufälliger, gleichverteilter Texturen.

Voronoi

- Erstellen von FE-Modellen mit Voronoi-Kornstrukturen.

WLI-Tools

- Zusammenführen von Topographie-Messungen des Weißlichtinterferometers, um Messlücken zu korrigieren und den lokalen Blechdickenverlauf zu bestimmen. Zur Grobpositionierung kommen die ebenfalls vom Weißlichtinterferometer aufgenommenen Mikroskopbilder zum

Einsatz. Eine Feinpositionierung erfolgt durch optimale Anpassung überlappender Messbereiche, wobei eine Ebenenverkipfung zwischen beiden Messungen automatisch korrigiert wird.

- Spiegeln und Drehen von Messungen; Korrigieren von Ebenenverkipfung.

TaylorFactorCombinat

- Errechnen von Verteilungsfunktionen für Zugproben unterschiedlicher Länge und unterschiedlicher Korngröße auf Basis einer Schmid- oder Taylor-Faktor-Verteilungsdichte.

G. Variablenverzeichnis

Fett gedruckte Variablen bezeichnen Tensoren, $\langle a \rangle$ bezeichnet den arithmetischen Mittelwert über mehrere a_i . In den folgenden Tabellen wird eine Übersicht über die wichtigsten Variablen und ihre Bedeutung gegeben.

G.1. Griechische Variablen

Name	Index	Erklärung
δ_{ij}		Kronecker-Symbol
ε		Dehnung (skalar)
	e	Vergleichsdehnung (auch: effektive Dehnung)
	pl	Plastische Dehnung
	macro	Außen an der Probe gemessene, makroskopische Dehnung
γ		Abgleitung
λ		Versetzungszellgröße
μ		Schubmodul
		Auch: Mittelwert der Gaussverteilung
μ		Transformationsmatrix, um die Abgleitungen einzelner Gleitsysteme in Dehnungen des Laborkoordinatensystems zu überführen.
ϕ		Orientierung des Hauptachsensystems
ρ		Versetzungsdichte
	eff	Effektive Versetzungsdichte
σ		Spannung
	eH	Spannung der oberen Streckgrenze
	eL	Spannung der unteren Streckgrenze
	G	Anfängliche Fließspannung eines Kornes

Name	Index	Erklärung
τ	m	Zugfestigkeit
	S	Anfängliche Fließspannung einer Probenscheibe
	y	Fließspannung einer Probe
		Schubspannung
	{hkl}	Kritische Schubspannung der {hkl}-Gleitsysteme
	0	Kritische Schubspannung zur Aktivierung von Gleitung
	p	Peierls-Spannung
θ	res	Wirkende Schubspannung
	y	Scherfließspannung einer Probe
		Nichtlokaler Missorientierungswinkel zwischen zwei Orientierungen. Das heißt, dass sich mindestens eine der beiden Bezugsorientierungen auf einen durch eine Grenzfläche eingeschlossenen, größeren Bereich bezieht.
	band	Missorientierungswinkel über ein Verfestigungsband
	cell	Orientierung des Inneren einer Versetzungszelle relativ zur ursprünglichen Orientierung
	i	Missorientierungswinkel zwischen einer einzelnen Orientierungsmessung i und einer Referenzorientierung (zum Beispiel gemittelte Kornorientierung). Für mehrere Einzelmessungen wird dabei die gleiche Referenzorientierung verwendet.
	IDB	Missorientierungswinkel über eine Versetzungszellwand aus statistischen Versetzungen
	GNB	Missorientierungswinkel über eine Versetzungszellwand aus geometrisch notwendigen Versetzungen
	StdDev	Standardabweichung der nichtlokalen Missorientierung: $\theta_{\text{StdDev}} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \theta_i^2}$
	$\vec{\theta}$	Zu θ gehörender Rotationsvektor. Die Richtung spezifiziert die Rotationsachse, die Länge gibt den Rotationswinkel an.

Name	Index	Erklärung
$\Delta\theta'$		Lokaler Missorientierungswinkel zwischen zwei benachbarten Orientierungsmessungen
	x	Die eine Orientierungsmessung ist gegenüber der anderen in x-Achsenrichtung verschoben.
	y	Die eine Orientierungsmessung ist gegenüber der anderen in y-Achsenrichtung verschoben.
	xy	Die eine Orientierungsmessung ist gegenüber der anderen diagonal verschoben (in Richtung der Winkelhalbierenden des ersten Quadranten).
$\Delta\vec{\theta}'$		Zu $\Delta\theta'$ gehörender Rotationsvektor. Siehe Erklärung zu $\vec{\theta}$.
$\Delta\theta$		Orientierungsgradient an der Stelle eines Orientierungsmesspunktes. Wird gebildet aus lokalen Missorientierungswinkeln zwischen diesem Orientierungsmesspunkt einerseits und benachbarten Orientierungsmesspunkten andererseits. Hierfür kommen mehrere Normen zum Einsatz, die auf $\Delta\theta'$ zurückgreifen.
	1	Summennorm: $\Delta\theta_1 = \sum_j \Delta\theta'_j$ Hier: $\Delta\theta_1 = \Delta\theta'_x + \Delta\theta'_y$
	2	Quadratische Norm: $\Delta\theta_2 = \sqrt{\sum_j (\Delta\theta'_j)^2}$ Hier: $\Delta\theta_2 = \sqrt{(\Delta\theta'_x)^2 + (\Delta\theta'_y)^2}$
	∞	Maximumnorm: $\Delta\theta_\infty = \max \Delta\theta'_j$ Hier: $\Delta\theta_\infty = \max(\Delta\theta'_x, \Delta\theta'_y)$
	Avg	Mittelwertnorm: $\Delta\theta_{\text{Avg}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \Delta\theta'_j$ Hier: $\Delta\theta_{\text{Avg}} = (\Delta\theta'_x + \Delta\theta'_y)/2$
	G	Innerhalb eines Kornes homogener Orientierungsgradient
$\Delta\vec{\theta}$		Zu $\Delta\theta$ gehörender Rotationsvektor. Siehe Erklärung zu $\vec{\theta}$
$\vec{\vartheta}$		Starrkörpertranslation vor der Verformung
$\vec{\zeta}$		Position nach der Verformung

G.2. Lateinische Variablen

Name	Index	Erklärung
a		Gleitsystemaktivität
$\mathbf{a}$		Korngeometriematrix
A		Fläche; unter Anderem Querschnittsfläche einer Probenscheibe
	0	Fläche des Kornbereiches mit der Ausgangsorientierung
	+	Fläche des Kornbereiches mit der Missorientierung $+\theta_{\text{cell}}$, bezogen auf die Ausgangsorientierung
	-	Fläche des Kornbereiches mit der Missorientierung $-\theta_{\text{cell}}$, bezogen auf die Ausgangsorientierung
	Ges	Gesamtfläche eines Kornes an der Probenoberfläche
	min	Querschnittsfläche der schwächsten Probenscheibe
b		Burgers-Vektor
B		Breite eines Verfestigungsbandes
d		Schichtdicke
d		Richtungskosinus zwischen Referenzachsen und Gleitrichtungen
D		Blechdicke
f		Als Skalar: Relativer Anteil (zum Beispiel relativer Volumenanteil oder relativer Flächenanteil) Als Funktion $f(x)$ einer anderen Variablen x : Histogramm beziehungsweise Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung dieser Variablen bei der statistischen Auswertung einer Menge von Proben.
F		Zugkraft
	ext,y	Extern gemessene Zugkraft bei Fließbeginn
	S	Auf eine Probenscheibe wirkende Zugkraft, die zum Einsetzen des Fließens benötigt wird
I		Einheitsmatrix
l	rel	Relative Länge
L	rel	Relatives Maß für die Messlänge einer Zugprobe
m		Taylor-Faktor eines Kornes

Name	Index	Erklärung
M	Avg	Über eine Probenscheibe gemittelter Taylor-Faktor Drehmoment
n		Auch: Gemäß einer Textur gemittelter TaylorFaktor Anzahl
$\mathbf{n}$		Richtungskosinus zwischen Referenzachsen und Gleitsystemnormalen
N		Anzahl
	0	Anzahl EBSD-Messpunkte im Kornbereich mit der Ausgangsorientierung
	+	Anzahl EBSD-Messpunkte im Kornbereich mit der Missorientierung $+\theta_{\text{cell}}$, bezogen auf die Ausgangsorientierung
	-	Anzahl EBSD-Messpunkte im Kornbereich mit der Missorientierung $-\theta_{\text{cell}}$, bezogen auf die Ausgangsorientierung
	G	Anzahl Körner pro Probenscheibe
	Ges	Gesamtzahl EBSD-Messpunkte in einem Korn
	S	Anzahl Probenscheiben in der Messlänge
R		Kornradius (Bei Näherung der Kornform durch ein Quadrat: die halbe Kantenlänge)
$\mathbf{R}$		Rotationsmatrix; wird auch anstelle von $\vec{\theta}$ zur Beschreibung von Orientierungen verwendet.
s		Standardabweichung der Gaussverteilung
S		Maß für die Abweichung der anhand der genäher-ten Verformung berechneten Positionen von den im Experiment gemessenen Positionen
S		Transformation, die das Kristallsystem in sich selbst überführt (Symmetrietransformation)
$\vec{t}$		Starrkörpertranslation nach Verformung
$\vec{u}$		Verschiebung
V		Volumen
w		Volumenspezifische Arbeit
W		Arbeit
$\vec{x}$		Unter Anderem: Position vor der Verformung

H. Veröffentlichungen im Rahmen dieser Arbeit

Die Nennung der Veröffentlichungen erfolgt in umgekehrter chronologischer Reihenfolge:

- HENNING, Mark; VEHOFF, Horst: Size effects resulting from local strain hardening; microstructural evaluation of Fe-3%Si and Cu deformed in tension and deep drawing using orientation gradient mapping (OGM). – (in prep.)
- GROCHE, P.; SCHÄFER, R.; HENNING, M.: Finite element calculation of surface evolution considering grain size and crystallographic texture effects. In: AZUSHIMA, A. (Hrsg.): *Proceedings of the 3rd International Conference on Tribology in Manufacturing Processes (ICTMP)*. Yokohama (Japan), September 24–26, 2007. – ISBN: 978–4–9903785–0–9, S. 219–226
- HENNING, M.; VEHOFF, V.: Microstructural Evaluation of Fe-3%Si and Cu Deformed in Deep Drawing Using Local Curvature Analysis and Orientation Gradient Mapping (OGM). In: VOLLERTSEN, F.; YUAN, S. (Hrsg.): *Proceedings of the 2nd ICNFT: 2. International Conference on New Forming Technology*. Bremen, 2007. – ISBN 978–3–933762–22–1, S. 631–638
- HENNING, M.; SCHÄFER, R.: Anisotrope Materialdaten einzelner Körner im Polykristall. In: MEYER, L. W.: *Arbeitskreistreffen „Werkstoff und Simulation“ am 23.05.2007 in Erlangen im Rahmen des DFG SPP 1138 „Modellierung von Größeneinflüssen bei Fertigungsprozessen“ – Vorträge*. Chemnitz: Eigenverlag, 2007, ISSN: 1860–8698

- HENNING, Mark; VEHOFF, Horst: Statistical size effects based on grain size and texture in thin sheets. In: *Mater. Sci. Eng. A* 452–453 (2007), S. 602–613
- WELSCH, Markus T.; HENNING, Mark; MARX, Michael ; VEHOFF, Horst: Measuring the Plastic Zone Size by Orientation Gradient Mapping (OGM) and Electron Channeling Contrast Imaging (ECCI). In: *Adv. Eng. Mater.* 9 (2007), Nr. 1–2, S. 31–37
- HENNING, Mark; VEHOFF, Horst: Local mechanical behavior and slip band formation within grains of thin sheets. In: *Acta Metall. Mater.* 53 (2005), Nr. 5, S. 1285–1292
- HENNING, M.; VEHOFF, H.: Größeneffekte im Zugversuch aufgrund plastischer Anisotropie. In: VOLLERTSEN, F. (Hrsg.): *Prozessskalierung* Bd. 27. Bremen : BIAS Verlag, 2005 (Strahltechnik). – ISBN 3–933762–17–0, S. 137–146
- MEYER, L.W.; HERZIG, N.; GAHLERT, C.; VAN PUTTEN, K.; HIRT, G.; JUSTINGER, H.; KORTHÄUER, M.; HENNING, M.; BRAUN, J.; HUNDETMARK, A.; GEISSDÖRFER, M.; SCHIKORRA, M.; HU, Z.; TERZI, M.: Messtechnik in der Umformtechnik - Die Ergebnisse des Ringversuchs der Umformer im Rahmen des SPP 1138. In: VOLLERTSEN, F. (Hrsg.): *Prozessskalierung* Bd. 27. Bremen : BIAS Verlag, 2005 (Strahltechnik). – ISBN 3–933762–17–0, S. 309–320
- HENNING, M.; VEHOFF, H.: Interaction between grain and specimen size: measurements of strain and orientation gradients in single grains as a function of the applied load. In: GHONIEM, Nasr M. (Hrsg.): *Proceedings of Second International Conference on Multiscale Materials Modeling*. Los Angeles : University of California, 2004. – ISBN 0–9762064–1–2, S. 278–280
- HENNING, M.; VEHOFF, H.: Characterization of reference samples for continuum mechanics simulations — grain orientation, rotation and deformation as a function of the applied load. In: HOLLMANN, F. (Hrsg.): *Process Scaling* Bd. 24. Bremen : BIAS Verlag, 2003 (Strahltechnik). – ISBN 3–933762–14–6, S. 185–192

Literaturverzeichnis

- [1] SANCHEZ-SALMERON, A. J. ; LOPEZ-TARAZON, R. ; GUZMAN-DIANA, R. ; RICOLFE-VIALA, C.: Recent development in micro-handling systems for micro-manufacturing. In: *J. Mater. Process. Technol.* 167 (2005), S. 499–507
- [2] QIN, Yi: Micro-forming and miniature manufacturing systems — development needs and perspectives. In: *J. Mater. Process. Technol.* 177 (2006), S. 8–18
- [3] JUSTINGER, H. ; WITULSKI, N. ; HIRT, G.: Untersuchung zur Napfgeometrie und Temperaturverteilung beim miniaturisierten Tiefziehen. In: VOLLERTSEN, F. (Hrsg.): *Prozessskalierung* Bd. 27. Bremen : BIAS Verlag, 2005 (Strahltechnik). – ISBN 3–933762–17–0, S. 71–80
- [4] SAKA, H. ; IMURA, T.: Direct measurement of mobility of edge and screw dislocations in 3% silicon-iron by high voltage transmission electron microscopy. In: *J. Phys. Soc. Jpn.* 32 (1972), Nr. 3, S. 702–716
- [5] NEEDLEMAN, A.: Material rate dependence and mesh sensitivity in localization problems. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 67 (1988), S. 69–85
- [6] PAWELSKI, O.: Beitrag zur ähnlichkeitstheorie der Umformtechnik. In: *Arch. Eisenhuettenwes.* 35 (1964), Nr. 1, S. 27–36
- [7] STAEVES, J.: *Berichte aus Produktion und Umformtechnik*. Bd. 41: *Beurteilung der Topografie von Blechen im Hinblick auf die Reibung bei der Umformung*. Aachen : Shaker-Verlag, 1998. – ISBN 3–8265–4379–3
- [8] YAMAGUCHI, K. ; TAKAKURA, N. ; IMATANI, S.: Increase in forming limit of sheet metals by removal of surface roughening with plastic

- strain (Balanced biaxial stretching of aluminium sheets and foils). In: *J. Mater. Process. Technol.* 48 (1995), Nr. 1, S. 27–34
- [9] NAKASHIMA, S. ; TAKASHIMA, K. ; HARASE, J.: Effect of thickness on secondary recrystallization of Fe-3%Si. In: *Acta Metall. Mater.* 42 (1994), Nr. 2, S. 539–547
- [10] GERLACH, J. ; KLEIN, H. ; KLINKENBERG, C.: Texture development during tensile testing for mechanical r-value determination. In: *Adv. Eng. Mater.* 4 (2002), Nr. 4, S. 203–206
- [11] BOZZOLO, N. ; DEWOBROTO, N. ; GROSDIDIER, T. ; WAGNER, F.: Texture evolution during grain growth in recrystallized commercially pure titanium. In: *Mater. Sci. Eng. A* 397 (2005), S. 346–355
- [12] KURZYDLOWSKI, K. J.: A model for the flow stress dependence on the distribution of grain size in polycrystals. In: *Scr. Metall. Mater.* 24 (1990), S. 879–883
- [13] BERBENNI, S. ; FAVIER, V. ; BERVEILLER, M.: Impact of the grain size distribution on the yield stress of heterogeneous materials. In: *Int. J. Plast.* 23 (2007), Nr. 1, S. 114–142
- [14] HERZIG, N. ; MEYER, L. W. ; MEYER, L. W. (Hrsg.): *Größeneinflüsse beim Fließspannungs- und Versagensverhalten unter Druckbelastung*. 2005. ISSN 1860–8698
- [15] HERZIG, N. ; MEYER, L. W.: Material Characterisation at High Strain Rates with special emphasis on miniaturisation and size dependencies. In: *2nd International Conference on High Speed Forming (ICHSF)*, 2006. – ISBN 3–00–018432–5, S. 13–22
- [16] HARDER, J.: *Simulation lokaler Fließvorgänge in Polykristallen*, Technische Universität Braunschweig, Dissertation, 1997
- [17] WAN, M. ; YANG, Y.-Y. ; LI, S.-B.: A system for evaluating sheet formability using tensile tests with different shapes of specimens. In: *J. Mater. Process. Technol.* 116 (2001), S. 189–193

-
- [18] YUAN, H. ; CHEN, J. ; KROMPHOLZ, K. ; WITTMANN, F. H.: Investigations of size effects in tensile tests based on a nonlocal micro-mechanical damage model. In: *Comp. Mater. Sci.* 26 (2003), S. 230–243
- [19] ZUEV, L. B. ; DANILOV, V. I. ; BARANNIKOVA, S. A. ; ZYKOV, I. Y.: Plastic flow localization as a new kind of wave processes in solids. In: *Mater. Sci. Eng. A* 319–321 (2001), S. 160–163
- [20] SUZUKI, H. ; IKEDA, S. ; TAKEUCHI, S.: Deformation of thin copper crystals. In: *J. Phys. Soc. Jpn.* 11 (1956), Nr. 4, S. 382–393
- [21] FLECK, N. A. ; MULLER, G. M. ; ASHBY, M. F. ; HUTCHINSON, J. W.: Strain gradient plasticity: Theory and experiment. In: *Acta Metall. Mater.* 42 (1994), Nr. 2, S. 475–487
- [22] STÖLKEN, J. S. ; EVANS, A. G.: A microbend test method for measuring the plasticity length scale. In: *Acta Metall. Mater.* 46 (1998), S. 5109–5115
- [23] SIMONS, G. ; WEIPPERT, Ch. ; DUAL, J. ; VILLAIN, J.: Size effects in tensile testing of thin cold rolled and annealed Cu foils. In: *Mater. Sci. Eng. A* 416 (2006), S. 290–299
- [24] RAULEA, L. V. ; GOVAERT, L. E. ; BAAIJENS, F. P. T.: Grain and specimen size effects in processing metal sheets. In: *Adv. Technol. Plast.* 2 (1999), S. 939–944
- [25] RAULEA, L. V. ; GOIJAERTS, A. M. ; GOVAERT, L. E. ; BAAIJENS, F. P. T.: Size effects in the processing of thin metal sheets. In: *J. Mater. Process. Technol.* 115 (2001), S. 44–48
- [26] JANSSEN, P. J. M. ; DE KEIJSER, Th. H. ; GEERS, M. G. D.: An experimental assessment of grain size effects in the uniaxial straining of thin Al sheet with a few grains across the thickness. In: *Mater. Sci. Eng. A* 419 (2006), S. 238–248
- [27] MIYAZAKI, S. ; FUJITA, H. ; HIRAOKA, H.: Effect of specimen size on the flow stress of rod specimens of polycrystalline Cu-Al alloy. In: *Scr. Metall.* 13 (1979), S. 447–449

- [28] FLEISCHER, R. L. ; CHALMERS, B.: Size effects in the deformation of aluminum. In: *Trans. Metall. Soc. AIME* 212 (1958), S. 265–274
- [29] WATANABE, O. ; KURATA, T.: Experimental investigation of size effects of FCC polycrystal by shear banding. In: *Trans. ASME* 121 (1999), Nr. 4, S. 156–161
- [30] FURUBAYASHI, E.: Continuous observation of dislocation interaction in Fe-3%Si by electron microscopy. In: *Trans. Jpn. Inst. Metals* 9 (1968), S. 939–943
- [31] MICHEL, J. F. ; PICART, P.: Size effects on the constitutive behaviour for brass in sheet metal forming. In: *J. Mater. Process. Technol.* 141 (2003), S. 439–446
- [32] KALS, R. T. A.: *Fertigungstechnologie - Erlangen*. Bd. 87: *Fundamentals on the Miniaturization of Sheet Metal Working Processes*. Bamberg : Meisenbach Verlag, 1998. – ISBN 3–87525–115–6
- [33] KALS, T. A. ; ECKSTEIN, R.: Miniaturization in sheet metal working. In: *J. Mater. Process. Technol.* 103 (2000), S. 95–101
- [34] PELL-WALPOLE, W. T.: The effect of grain-size on the tensile strength of tin and tin alloys. In: *J. Inst. Metals* 69 (1943), S. 131–146
- [35] SUITS, J. C. ; CHALMERS, B.: Plastic microstrain in silicon-iron. In: *Acta Metall. Mater.* 12 (1961), S. 854–860
- [36] HALL, E. O.: The deformation and aging of mild steel: III discussion of results. In: *Proc. Phys. Soc. B* 64 (1951), Nr. 9, S. 747–753
- [37] PETCH, N. J.: The cleavage strength of polycrystals. In: *J. Iron & Steel Inst.* 174 (1953), S. 25–28
- [38] BENZERGA, A. A. ; HONG, S. S. ; KIM, K. S. ; NEEDLEMAN, A. ; VAN DER GIESSEN, E.: Smaller is softer: An inverse size effect in a cast aluminum alloy. In: *Acta Metall. Mater.* 49 (2001), S. 3071–3083

- [39] MESSNER, A. ; ENGEL, U. ; KALS, R. ; VOLLERTSEN, F.: Size effect in the FE-simulation of micro-forming processes. In: *J. Mater. Process. Technol.* 45 (1994), S. 371–376
- [40] CHEN, Fuh-Kuo ; TSAI, Jia-Wen: A study of size effect in micro-forming with micro-hardness tests. In: *J. Mater. Process. Technol.* 177 (2006), S. 146–149
- [41] TROOST, A.: *Einführung in die allgemeine Werkstoffkunde metallischer Werkstoffe I*. Mannheim, Wien, Zürich : Bibliographisches Institut, 1984. – 435–468 S. – ISBN 3–411–01693–0
- [42] ELMUSTAFA, A. A. ; STONE, D. S.: Indentation size effect in polycrystalline F.C.C. metals. In: *Acta Metall. Mater.* 50 (2002), S. 3641–3650
- [43] CASALS, O. ; ALCALÁ, J.: The duality in mechanical property extractions from Vickers and Berkovich instrumented indentation experiments. In: *Acta Metall. Mater.* 53 (2005), S. 3545–3561
- [44] MA, Q. ; CLARKE, D. R.: Size dependent hardness of silver single crystals. In: *J. Mater. Res.* 10 (1995), Nr. 4, S. 853–863
- [45] YANG, B. ; VEHOFF, H.: Dependence of nanohardness upon indentation size and grain size — a local examination of the interaction between dislocations and grain boundaries. In: *Acta Metall. Mater.* 55 (2007), Nr. 3, S. 849–856
- [46] SHAKERI, M. ; SADOUGH, A. ; DARIANI, B. M.: Effect of pre-straining and grain size on the limit strains in sheet metal forming. In: *Proc. Inst. Mech. Eng.* 214 B (2000), S. 821–827
- [47] SAOTOME, Y. ; YASUDA, K. ; KAGA, H.: Microdeep drawability of very thin sheet steels. In: *J. Mater. Process. Technol.* 113 (2001), S. 641–647
- [48] *Kapitel 9-3. Slip systems in crystals*. In: HIRTH, J. P. ; LOTHE, J.: *Theory of dislocations*. New York : McGraw-Hill, Inc., 1968, S. 255–269
- [49] VAN DER GIESSEN, E. ; NEEDLEMAN, A.: Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. In: *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 3 (1995), S. 689–735

- [50] STEIN, D. F. ; LOW JR., J. R.: Mobility of edge dislocations in silicon-iron crystals. In: *J. Appl. Phys.* 31 (1960), Nr. 2, S. 362–369
- [51] KUBIN, L. P. ; DEVINCRE, B. ; TANG, M.: Mesoscopic modelling and simulation of plasticity in fcc and bcc crystals: Dislocation intersections and mobility. In: *J. Comput.-Aided Mater. Design* 5 (1998), S. 31–54
- [52] CLEVERINGA, H. H. M. ; VAN DER GIESSEN, E. ; NEEDLEMAN, A.: A discrete dislocation analysis of bending. In: *Int. J. Plast.* 15 (1999), S. 837–868
- [53] NEEDLEMAN, A.: Computational mechanics at the mesoscale. In: *Acta Metall. Mater.* 48 (2000), S. 105–124
- [54] DEVINCRE, B. ; KUBIN, L. P. ; LEMARCHAND, C. ; MADEC, R.: Mesoscopic simulations of plastic deformation. In: *Mater. Sci. Eng. A* 309–310 (2001), S. 211–219
- [55] ZBIB, H. M. ; DE LA RUBIA, T. D.: A multiscale model of plasticity. In: *Int. J. Plast.* 18 (2002), Nr. 9, S. 1133–1163
- [56] WEYGAND, D. ; FRIEDMAN, L. H. ; VAN DER GIESSEN, E. ; NEEDLEMAN, A.: Discrete dislocation modeling in three-dimensional confined volumes. In: *Mater. Sci. Eng. A* 309–310 (2001), S. 420–424
- [57] YASIN, H. ; ZBIB, H. M. ; KHALEEL, M. A.: Size and boundary effects in discrete dislocation dynamics: Coupling with continuum finite element. In: *Mater. Sci. Eng. A* 309–310 (2001), S. 294–299
- [58] ZBIB, H. M. ; DE LA RUBIA, T. D.: A multiscale model of plasticity: Patterning and localization. In: *J. Soc. Mater. Sci. Jpn. A* (2001), S. 341–347
- [59] GALLINA, V. ; GALOTTO, C. P. ; OMINI, M.: Quantum treatment of lattice distortion around a dislocation. In: *Phys. Status Solidi* 8 (1965), S. 239–252
- [60] ITO, K. ; VITEK, V.: Atomistic study of non-Schmid effects in the plastic yielding of bcc metals. In: *Philos. Mag. A* 81 (2001), Nr. 5, S. 1387–1407

- [61] PICU, R. C.: The peierls stress in non-local elasticity. In: *J. Mech. Phys. Solids* 50 (2002), S. 717–735
- [62] RHEE, M. ; ZBIB, H. M. ; HIRTH, J. P.: Models for long/short range interactions and cross slip in 3D dislocation simulation of BCC single crystals. In: *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 6 (1998), S. 467–492
- [63] RHEE, M. ; STOLKEN, J. S. ; BULATOV, V. V. ; DE LA RUBIA, T. D. ; ZBIB, H. M. ; HIRTH, J. P.: Dislocation stress fields for dynamic codes using anisotropic elasticity: Methodology and analysis. In: *Mater. Sci. Eng. A* 309–310 (2001), S. 288–293
- [64] GAO, H. ; HUANG, Y. ; NIX, W. D. ; HUTCHINSON, J. W.: Mechanism-based strain gradient plasticity — I. Theory. In: *J. Mech. Phys. Solids* 47 (1999), S. 1239–1263
- [65] TAYLOR, G. I.: The mechanism of plastic deformation of crystals. In: *Proc. Roy. Soc. Lond. A* 145 (1934), S. 362–415
- [66] LIVINGSTON, J. D.: The density and distribution of dislocations in deformed copper crystals. In: *Acta Metall. Mater.* 10 (1962), S. 229–239
- [67] ASHBY, M. F.: The deformation of plastically non-homogenous materials. In: *Philos. Mag. A* 21 (1970), S. 399–424
- [68] NYE, J. F.: Some geometrical relations in dislocation crystals. In: *Acta Metall. Mater.* 1 (1953), S. 153–162
- [69] YUANG, H. ; CHEN, J.: Analysis of size effects based on a symmetric low-order gradient plasticity model. In: *Comp. Mater. Sci.* 19 (2000), S. 143–157
- [70] MUGHRABI, H.: Dual role of deformation-induced geometrically necessary dislocations with respect to lattice plane misorientations and/or long-range internal stresses. In: *Acta Metall. Mater.* 54 (2006), S. 3417–3427
- [71] FLECK, N. A. ; HUTCHINSON, J. W.: Strain gradient plasticity. In: *Adv. Appl. Mech.* 33 (1997), S. 295–361

- [72] RUSSELL, K. C. ; ASHBY, M. F.: Slip in aluminum crystals containing strong, plate-like particles. In: *Acta Metall. Mater.* 18 (1970), S. 891–901
- [73] NEEDLEMAN, A. ; VAN DER GIESSEN, E.: Discrete dislocation and continuum descriptions of plastic flow. In: *Mater. Sci. Eng. A* 309–310 (2001), S. 1–13
- [74] WEERTMAN, J.: Anomalous work hardening, non-redundant screw dislocations in a circular bar deformed in torsion, and non-redundant edge dislocations in a bent foil. In: *Acta Metall. Mater.* 50 (2002), S. 673–689
- [75] HUANG, Y. ; GAO, H. ; NIX, W. D. ; HUTCHINSON, J. W.: Mechanism-based strain gradient plasticity — II. Analysis. In: *J. Mech. Phys. Solids* 48 (2000), S. 99–128
- [76] CHONG, A. C. M. ; YANG, F. ; LAM, D. C. C. ; TONG, P.: Torsion and bending of micron-scaled structures. In: *J. Mater. Res.* 16 (2001), Nr. 4, S. 1052–1058
- [77] GAO, H. ; HUANG, Y. ; NIX, W. D.: Modeling plasticity at the micro-meter scale. In: *Naturwissenschaften* 86 (1999), S. 507–515
- [78] QIU, X. ; HUANG, Y. ; NIX, W. D. ; HWANG, K. C. ; GAO, H.: Effect of intrinsic lattice resistance in strain gradient plasticity. In: *Acta Metall. Mater.* 49 (2001), S. 3949–3958
- [79] HUANG, Y. ; QU, S. ; HWANG, K. C. ; LI, M. ; GAO, H.: A conventional theory of mechanism-based strain gradient plasticity. In: *Int. J. Plast.* 20 (2004), S. 753–782
- [80] RYBIN, V. V. ; ZISMAN, A. A. ; ZOLOTOREVSKY, N. Y.: Junction disclinations in plastically deformed crystals. In: *Acta Metall. Mater.* 41 (1993), Nr. 7, S. 2211–2217
- [81] SUN, S. ; ADAMS, B. L. ; KING, W. E.: Observations of lattice curvature near the interface of a deformed aluminium bicrystal. In: *Philos. Mag. A* 80 (2000), Nr. 1, S. 9–25

- [82] FENG, H. ; BASSIM, M. N.: Finite element modeling of the influence of anisotropic material properties on dislocations in metals. In: *Mater. Sci. Eng. A* 251 (1998), S. 94–99
- [83] FU, H.-H. ; BENSON, D. J. ; MEYERS, M. A.: Analytical and computational description of effect of grain size on yield stress of metals. In: *Acta Metall. Mater.* 49 (2001), S. 2567–2582
- [84] KAMAYA, Masayuki ; WILKINSON, Angus J. ; TITCHMARSH, John M.: Measurement of plastic strain of polycrystalline material by electron backscatter diffraction. In: *Nucl. Eng. Des.* 235 (2005), S. 713–725
- [85] SEVILLANO, J. G. ; ARIZCORRETA, I. O. ; KUBIN, L. P.: Intrinsic size effects in plasticity by dislocation glide. In: *Mater. Sci. Eng. A* 309–310 (2001), S. 393–405
- [86] RAABE, D. ; SACHTLEBER, M. ; WEILAND, H. ; SCHEELE, G. ; ZHAO, Z.: Grain-scale micromechanics of polycrystal surfaces during plastic straining. In: *Acta Metall. Mater.* 51 (2003), S. 1539–1560
- [87] RAABE, D.: Don't trust your simulation — computational materials science on its way to maturity? In: *Adv. Eng. Mater.* 4 (2002), Nr. 5, S. 255–267
- [88] MASUMURA, R. A. ; HAZZLEDINE, P. M. ; PANDE, C. S.: Yield stress of fine grained materials. In: *Acta Metall. Mater.* 46 (1998), Nr. 13, S. 4527–4534
- [89] CONRAD, Hans ; JUNG, Kang: Effects of grain size from millimeters to nanometers on the flow stress of metals and compounds. In: *J. Electron. Mater.* 35 (2006), Nr. 5, S. 857–861
- [90] UNCKEL, Hermann: Versuche über den Einfluß der Kristallitengröße und Orientierung auf die mechanischen Eigenschaften bei einigen Werkstoffen. In: *Z. Met.kd.* 12 (1937), S. 413–417
- [91] REIHLE, M.: Einfluß der Korngröße auf die Oberflächenfeingestaltung von Tiefziehteilen. In: *Mitteilungen der Forschungsgesellschaft Blechverarbeitung* 12/13 (1961), S. 141–150

- [92] O'BRIEN, B. ; CARROLL, W. M. ; KELLY, M. J.: Passivation of nitinol wire for vascular implants — a demonstration of the benefits. In: *Biomaterials* (?) 23 (2002), S. 1739–1748
- [93] KOCKS, U. F.: The relation between polycrystal deformation and single-crystal deformation. In: *Metall. Trans.* 1 (1970), S. 1121–1143
- [94] KALS, R. ; VOLLERTSEN, F. ; GEIGER, M.: Scaling effects in sheet metal forming. In: KALS, H.J.J. (Hrsg.): *Sheet Metal 1996 - Proceedings of the 4th International Conference* Bd. 2, 1996, S. 65–75
- [95] BANOVIC, S. W. ; VAUDIN, M. D. ; GNAEUPEL-HEROLD, T. H. ; SAYLOR, D. M. ; RODBELL, K. P.: Studies of deformation-induced texture development in sheet materials using diffraction techniques. In: *Mater. Sci. Eng. A* 380 (2004), S. 155–170
- [96] ARMSTRONG, R. W.: On size effects in polycrystal plasticity. In: *J. Mech. Phys. Solids* 9 (1961), S. 196–199
- [97] GEISSDÖRFER, S. ; ENGEL, U. ; GEIGER, M.: Mesoscopic model - simulative approach to the scatter of process factors in microforming. In: VOLLERTSEN, F. (Hrsg.) ; HOLLMANN, F. (Hrsg.): *Process Scaling* Bd. 24. Bremen : BIAS Verlag, 2003 (Strahltechnik). – ISBN 3–933762–14–6, S. 81–88
- [98] ESSMANN, U. ; RAPP, M. ; WILKENS, M.: Die Versetzungsanordnung in plastisch verformten Kupfer-Vielkristallen. In: *Acta Metall. Mater.* 16 (1968), S. 1275–1287
- [99] MIYAZAKI, Shuichi ; SHIBATA, Kenji ; FUJITA, Hiroshi: Effect of specimen thickness on mechanical properties of polycrystalline aggregates with various grain sizes. In: *Acta Metall. Mater.* 27 (1979), S. 855–862
- [100] WOUTERS, O. ; VELLINGA, W. P. ; VAN TIJUM, R. ; DE HOSSON, J. Th. M.: Effects of crystal structure and grain orientation on the roughness of deformed polycrystalline metals. In: *Acta Metall. Mater.* 54 (2006), S. 2813–2821

- [101] FÜLÖP, T. ; BREKELMANS, W. A. M. ; GEERS, M. G. D.: Size effects from grain statistics in ultra-thin metal sheets. In: *J. Mater. Process. Technol.* 174 (2006), S. 233–238
- [102] PROHÁSZKA, János ; DOBRÁNSZKY, János: The role of an anisotropy of the elastic moduli in the determination of the elastic limit value. In: *Mater. Sci. Forum* 414–415 (2003), S. 311–316
- [103] SCHMID, E.: Beiträge zur Physik und Metallographie des Magnesiums. In: *Z. Elektrochem. Angew. Phys. Chem.* 37 (1931), S. 447–459
- [104] SCHMID, E. ; BOAS, W.: *Kristallplastizität mit besonderer Berücksichtigung der Metalle*. Berlin : Springer, 1935
- [105] RAABE, D. ; SACHTLEBER, M. ; ZHAO, Z. ; ROTERS, F. ; ZAEFFERER, S.: Micromechanical and macromechanical effects in grain scale polycrystal plasticity experimentation and simulation. In: *Acta Metall. Mater.* 49 (2001), S. 3433–3441
- [106] RAUCH, E. F.: Formation and evolution of dislocation structures in Fe-3%Si single crystals under monotonous and sequential loading. In: *J. Mech. Behav. Mater.* 4 (1992), Nr. 1, S. 81–89
- [107] LIU, Q. ; HANSEN, N.: Geometrically necessary boundaries and incidental dislocation boundaries formed during cold deformation. In: *Scr. Metall. Mater.* 32 (1995), Nr. 8, S. 1289–1295
- [108] SEDLÁČEK, R. ; KRATOCHVÍL, J. ; BLUM, W.: Deformation induced misorientations: Initial stage of subgrain formation as a plastic instability. In: *Phys. Status Solidi A* 186 (2001), Nr. 1, S. 1–16
- [109] FUKUOKA, C. ; MORISHIMA, K. ; YOSHIZAWA, H. ; MINO, K.: Misorientation development in grains of tensile strained and crept 2.25%Cr-1%Mo steel. In: *Scr. Mater.* 46 (2002), Nr. 1, S. 61–66
- [110] TATSCHL, A. ; KOLEDNIK, O.: On the experimental characterization of crystal plasticity in polycrystals. In: *Mater. Sci. Eng. A* 356 (2003), S. 447–463

- [111] GEISSDÖRFER, S. ; ENGEL, U. ; GEIGER, M.: Erweitertes mesoskopisches Modell zur FE-Berechnung komplexer Mikroumformprozesse. In: VOLLERTSEN, F. (Hrsg.): *Prozessskalierung* Bd. 27. Bremen : BIAS Verlag, 2005 (Strahltechnik). – ISBN 3–933762–17–0, S. 11–20
- [112] HOC, T. ; CRÉPIN, J. ; GÉLÉBART, L. ; ZAOUI, A.: A procedure for identifying the plastic behavior of single crystals from the local response of polycrystals. In: *Acta Metall. Mater.* 51 (2003), S. 5477–5488
- [113] POLCAROVÁ, M. ; GEMPERLOVÁ, J. ; BRÁDLER, J. ; JACQUES, A. ; GEORGE, A. ; PRIESTER, L.: In-situ observation of plastic deformation of Fe-Si bicrystals by white-beam synchrotron radiation topography. In: *Philos. Mag. A* 78 (1998), Nr. 1, S. 105–130
- [114] GRAH, M. D. ; BOWMAN, K. J. ; OSTOJA-STARZEWSKI, M.: Fabrication of two-dimensional microstructures in Fe-3.25%Si sheet. In: *Scr. Metall. Mater.* 26 (1992), S. 429–434
- [115] KALIDINDI, S. R. ; BHATTACHARYYA, A. ; DOHERTY, R. D.: How do polycrystalline materials deform plastically? In: *Adv. Mater.* 15 (2003), Nr. 16, S. 1345–1348
- [116] CHANDRASEKARAN, D. ; NYGÅRDS, M.: Comparison of surface displacement measurements in a ferritic steel using AFM and non-local plasticity. In: *Mater. Sci. Eng. A* 365 (2004), S. 191–195
- [117] LAGATTU, Fabienne ; BRIDIER, Florent ; VILLECHAISE, Patrick ; BRILLAUD, Jean: In-plane strain measurements on a microscopic scale by coupling digital image correlation and an in situ SEM technique. In: *Mater. Charact.* 56 (2006), S. 10–18
- [118] DINGLEY, D. J. ; RANDLE, V.: Review: Microtexture determination by electron back-scatter diffraction. In: *J. Mater. Sci.* 27 (1992), S. 4545–4566
- [119] HENNING, Mark: *REM- und OIM-Untersuchungen zur plastischen Verformung von Polykristallen*, Universität des Saarlandes, Grundlagen der Werkstoffwissenschaft und Methodik, Diplomarbeit, November 2001

- [120] WILKINSON, A. J.: A new method for determining small misorientations from electron back scatter diffraction patterns. In: *Scr. Mater.* 44 (2001), S. 2379–2385
- [121] ADAMS, Brent L. ; WRIGHT, Stuart I. ; KUNZE, Karsten: Orientation Imaging: The Emergence of a New Microscopy. In: *Metall. Trans.* 24A (1993), S. 819–831
- [122] PANCHANADEESWARAN, S. ; DOHERTY, Roger D.: Direct observations of orientation change by channel die compression in polycrystalline aluminium — use of split sample. In: *Scr. Metall. Mater.* 28 (1993), S. 213–218
- [123] HEBESBERGER, Thomas ; SCHAFER, Erhard ; ZEHETBAUER, Michael ; PIPPAN, Reinhard ; UNGAR, Tamas ; BERNSTORFF, Sigrid: Electron back scatter diffraction and synchrotron x-ray peak profile analysis as tools for microstructural characterization of large strain work hardened metals. In: *Z. Met.kd.* 92 (2001), Nr. 5, S. 410–416
- [124] JENSEN, D. J.: Deformation and recrystallisation studied by EBSP: breakthroughs and limitations. In: *Mater. Sci. Technol.* 16 (2000), S. 1360–1363
- [125] HUGHES, D. A.: Microstructural evolution in a non-cell forming metal: Al-Mg. In: *Acta Metall. Mater.* 41 (1993), Nr. 5, S. 1421–1430
- [126] JENSEN, Dorte J.: Applications of orientation mapping by scanning and transmission electron microscopy. In: *Ultramicroscopy* 67 (1997), S. 25–34
- [127] HUGHES, D. A. ; LIU, Q. ; CHRZAN, D. C. ; HANSEN, N.: Scaling of microstructural parameters: Misorientations of deformation induced boundaries. In: *Acta Metall. Mater.* 45 (1997), Nr. 1, S. 105–112
- [128] PANTLEON, W. ; STOYAN, D.: Correlations between disorientations in neighbouring dislocation boundaries. In: *Acta Metall. Mater.* 48 (2000), S. 3005–3014

- [129] LI, Z. J. ; GODFREY, A. ; LIU, Q.: Evolution of microstructure and local crystallographic orientations in rolled Al-1%Mn single crystals of {001}<110> orientation. In: *Acta Metall. Mater.* 52 (2004), S. 149–160
- [130] HUGHES, D. A. ; CHRZAN, D. C. ; LIU, Q. ; HANSEN, N.: Scaling of misorientation angle distributions. In: *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998), Nr. 21, S. 4664–4667
- [131] PANTLEON, W. ; HANSEN, N.: Dislocation boundaries — the distribution function of disorientation angles. In: *Acta Metall. Mater.* 49 (2001), S. 1479–1493
- [132] CHANDRASEKARAN, D. ; NYGÅRDS, M.: A study of the surface deformation behaviour at grain boundaries in an ultra-low-carbon steel. In: *Acta Metall. Mater.* 51 (2003), S. 5375–5384
- [133] PENNOCK, G. M. ; DRURY, M. R. ; TRIMBY, P. W. ; SPIERS, C. J.: Misorientation distributions in hot deformed NaCl using electron backscattered diffraction. In: *J. Microsc.* 205 (2002), Nr. 3, S. 285–294
- [134] LINEAU, C. ; REY, C. ; DE LESEGNO, P. V.: Experimental analysis of plastic deformation of steel grains. Comparison with polycrystal models predictions. In: *Mater. Sci. Eng. A* 234–236 (1997), S. 853–856
- [135] PANTLEON, Wolfgang: On the distribution function of disorientations in dislocation cell structures. In: *Scr. Mater.* 35 (1996), Nr. 4, S. 511–515
- [136] VERBEKEN, K. ; KESTENS, L.: Local strain heterogeneities after cold rolling of an ultra low carbon steel. In: *Mater. Sci. Forum* 408–412 (2002), S. 559–564
- [137] ZAEFFERER, S. ; KUO, J.-C. ; ZHAO, Z. ; WINNING, M. ; RAABE, D.: On the influence of the grain boundary misorientation on the plastic deformation of aluminum bicrystals. In: *Acta Metall. Mater.* 51 (2003), S. 4719–4735
- [138] THORNING, C. ; SOMERS, M. A. J. ; WERT, J. A.: Grain interaction effects in polycrystalline Cu. In: *Mater. Sci. Eng. A* 397 (2005), S. 215–228

- [139] FIELD, D. P. ; WRIGHT, S. I. ; TRIVEDI, P.: Microtextural analysis of grain fragmentation in aluminum. In: *Mater. Sci. Forum* 426–432 (2003), S. 3739–3744
- [140] ZISMAN, A. ; NESTEROVA, E. ; RYBIN, V. ; TEODOSIU, C.: Interfacial misorientations and underlying slip activity of a shear microband in mild steel: TEM analysis and numerical simulation. In: *Scr. Mater.* 46 (2002), S. 729–733
- [141] BASSANI, J. L.: Plastic flow of crystals. In: *Adv. Appl. Mech.* 30 (1994), S. 191–258
- [142] TRAN, Hoang-Nguyen: *Modellierung und Simulation kristallplastischer Werkstoffe mit Hilfe von Versetzungsdichten*, Universität Dortmund, Dissertation, 2005
- [143] BASSANI, J. L.: Single crystal hardening. In: *Appl. Mech. Rev.* 43 (1990), Nr. 5, S. S320–S327
- [144] KALIDINDI, S. R. ; BRONKHORST, C. A. ; ANAND, L.: Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of fcc metals. In: *J. Mech. Phys. Solids* 40 (1992), Nr. 3, S. 537–569
- [145] MORRISON, W. B. ; LESLIE, W. C.: The yield stress-grain size relation in iron substitutional alloys. In: *Metall. Trans.* 4 (1973), S. 379–381
- [146] FALK, J. ; BÜCHNER, A. R.: Analyse der verschiedenen Einflüsse auf die Kaltwalzbarkeit von FeSi-Legierungen. In: *Steel Res.* 59 (1988), Nr. 8, S. 327–335
- [147] ALDEN, T. H.: A calculation of the yield stress using the methods of dislocation dynamics. In: *Mater. Sci. Eng. A* 111 (1989), S. 107–114
- [148] KUBASCHEWSKI, O.: *Iron — Binary Phase Diagrams*. Berlin : Springer-Verlag, 1982. – ISBN 0–387–11711–3. – S. 145–146
- [149] DZUBINSKY, M. ; KOVAC, F.: Influence of heat cycling on microstructural parameters of Fe-3%Si grain oriented steel. In: *Scr. Mater.* 45 (2001), S. 1205–1211

- [150] LÜCKE, K. ; RIXEN, R.: Rekristallisation und Korngröße. In: *Z. Met.kd.* 59 (1968), Nr. 4, S. 321–333
- [151] MOSELEY, D. ; HU, Y. ; RANDLE, V. ; IRONS, T.: Role of silicon content and final annealing temperature on microtexture and microstructure development in non-oriented silicon steel. In: *Mater. Sci. Eng. A* 392 (2005), S. 282–291
- [152] KIM, J. C. ; HEO, N. H. ; NA, J. G. ; WOO, J. S. ; KIM, G. M.: Effects of silicon addition on grain boundary segregation behaviors and mechanical properties in alpha-iron. In: *Scr. Mater.* 38 (1998), Nr. 7, S. 1071–1076
- [153] SUZUKI, S. ; OKU, M.: Surface orientation dependence of the surface composition in an Fe-20%Cr alloy and an Fe-3%Si alloy treated by mechanical polishing and chemical etching. In: *Appl. Surf. Sci.* 44 (1990), S. 151–156
- [154] WORTHINGTON, P. J. ; SMITH, E.: The formation of slip bands in polycrystalline 3% silicon iron in the pre-yield microstrain region. In: *Acta Metall. Mater.* 12 (1964), S. 1277–1281
- [155] ZÁRUBOVÁ, N. ; ŠESTÁK, B.: Plastic deformation of Fe-3 wt% Si single crystals in the range from 113 to 473 K (Part I). In: *Phys. Status Solidi A* 30 (1975), S. 365–374
- [156] DAHL, W. ; REES, H.: Der Einfluss von Temperatur und Verformungsgeschwindigkeit auf die Konstanten der Ludwik-Gleichung. In: *Arch. Eisenhuettenwes.* 51 (1980), Nr. 8, S. 349–354
- [157] GOTTSTEIN, Günter: *Physikalische Grundlagen der Materialkunde*. 1. Berlin : Springer-Verlag, 1998. – ISBN 3–540–62670–0
- [158] ŠESTÁK, B. ; ZÁRUBOVÁ, N.: Asymmetry of slip in Fe-Si alloy single crystals. In: *Phys. Status Solidi* 10 (1965), S. 239–250
- [159] ŠESTÁK, B. ; BLAHOVEC, J.: The temperature dependence of slip planes in Fe-3.4% Si single crystals. In: *Phys. Status Solidi* 40 (1970), S. 599–607

- [160] TAKEUCHI, S. ; TAOKA, T. ; YOSHIDA, H.: Orientation and temperature dependencies of slip in single crystals of iron alloys. In: *Trans. Iron Steel Inst. Jpn.* 9 (1969), S. 105–117
- [161] STAINIER, L. ; CUITIÑO, A. M. ; ORTIZ, M.: A micromechanical model of hardening, rate sensitivity and thermal softening in BCC single crystals. In: *J. Mech. Phys. Solids* 50 (2002), S. 1151–1545
- [162] ZÁRUBOVÁ, N. ; ŠESTÁK, B.: Plastic deformation of Fe-3 wt% Si single crystals in the range from 113 to 473 K (Part II). In: *Phys. Status Solidi A* 30 (1975), Nr. 2, S. 479–488
- [163] CHRISTIAN, J. W.: Some surprising features of the plastic deformation of body-centered cubic metals and alloys. In: *Metall. Trans.* 14A (1983), S. 1237–1256
- [164] LOW, J. R. ; GUARD, R. W.: Dislocation structure of slip bands in iron. In: *Acta Metall. Mater.* 7 (1959), S. 171–179
- [165] LOW, J. R. ; TURKALO, R. W.: Slip band structure and dislocation multiplication in silicon-iron crystals. In: *Acta Metall. Mater.* 10 (1962), S. 215–227
- [166] HAASEN, Peter: *Physikalische Metallkunde*. 3. Berlin : Springer-Verlag, 1994. – ISBN 3–540–57210–4. – S. 257–260, 326–330
- [167] OVER, H. H. ; LUGSCHEIDER, E. ; KNOTEK, O.: Plastische Eigenschaften von einkristallinem Silicium in Abhängigkeit von der Temperatur und der Versetzungsdichte. In: *Z. Werkstofftech.* 14 (1983), S. 64–69
- [168] SYLWESTROWICZ, W. ; HALL, E. O.: The Deformation and Ageing of Mild Steel. In: *Proc. Phys. Soc. B* 64 (1951), Nr. 6, S. 495–502
- [169] BROWN, N. ; LUKENS, K. F.: Microstrain in polycrystalline metals. In: *Acta Metall. Mater.* 9 (1961), S. 106–111
- [170] PETCH, N. J.: The upper yield stress of polycrystalline iron. In: *Acta Metall. Mater.* 12 (1964), S. 59–65

- [171] RAUCH, E. F. ; HASHIMOTO, S. ; BAUDELET, B.: Simple shear deformation of iron-silicon single crystals. In: *Scr. Metall. Mater.* 24 (1990), S. 1081–1085
- [172] TAOKA, T. ; TAKEUCHI, S. ; FURUBAYASHI, E.: Spontaneously and artificially recrystallized textures in rolled 3 pct silicon-iron single crystals. In: *Trans. Metall. Soc. AIME* 239 (1967), Nr. 1, S. 13–21
- [173] SACHS, G.: Zur Ableitung einer Fließbedingung. In: *VDI-Z* 72 (1928), Nr. 22, S. 734–736
- [174] RAABE, D. ; KLOSE, P. ; ENGL, B. ; IMLAU, K.-P. ; FRIEDEL, F. ; ROTERS, F.: Concepts for integrating plastic anisotropy into metal forming simulations. In: *Adv. Eng. Mater.* 4 (2002), Nr. 4, S. 169–180
- [175] HIRTH, J. P.: The influence of grain boundaries on mechanical properties. In: *Metall. Trans.* 3 (1972), S. 3047–3067
- [176] ZISMAN, A. A. ; RYBIN, V. V.: Mesoscopic stress field arising from the grain interaction in plastically deformed polycrystals. In: *Acta Metall. Mater.* 46 (1998), Nr. 2, S. 457–464
- [177] VEHOFF, H. ; NYKYFORCHYN, A.: Fatigue Crack Nucleation at Grain Boundaries — Experiment and Simulation. In: *Z. Met.kd.* 94 (2003), Nr. 6, S. 682–686
- [178] POULSEN, H. F. ; MARGULIES, L. ; SCHMIDT, S. ; WINTHER, G.: Lattice rotations of individual bulk grains — Part I: 3D X-ray characterization. In: *Acta Metall. Mater.* 51 (2003), Nr. 13, S. 3821–3830
- [179] WINTHER, G. ; MARGULIES, L. ; SCHMIDT, S. ; POULSEN, H. F.: Lattice rotation of individual bulk grains Part II: correlation with initial orientation and model comparison. In: *Acta Metall. Mater.* 52 (2004), S. 2863–2872
- [180] ŠESTÁK, B. ; ARNOLD, Z.: Formation of glide bands in Fe-3%Si alloy. In: *Phys. Status Solidi A* 23 (1974), S. 155–164
- [181] ŠESTÁK, B. ; NOVÁK, V.: Formation of glide bands in Fe-3%Si alloy. In: *Phys. Status Solidi A* 23 (1974), S. 703–709

- [182] WESTBROOK, J. H. ; AUST, K. T.: Solute hardening at interfaces in high-purity lead — I grain and twin boundaries. In: *Acta Metall. Mater.* 11 (1963), S. 1151–1163
- [183] AUST, K. T. ; HANNEMAN, R. E. ; NIESSEN, P. ; WESTBROOK, J. H.: Solute induced hardening near grain boundaries in zone refined metals. In: *Acta Metall. Mater.* 16 (1968), S. 291–302
- [184] CAO, W. Q. ; GODFREY, A. ; LIU, Q.: Determining dislocation cell sizes for high-strain deformation microstructures using the EBSD technique. In: *J. Microsc.* 211 (2003), Nr. 3, S. 219–229
- [185] HANSEN, N. ; HUANG, X. ; PANTLEON, W. ; WINTHER, G.: Grain orientation and dislocation patterns. In: *Philos. Mag. A* 86 (2006), Nr. 25–26, S. 3981–3994
- [186] BASINSKI, Z. S. ; SZCZERBA, M. S. ; EMBURY, J. D.: Tensile instability in face-centred cubic materials. In: *Philos. Mag. A* 76 (1997), Nr. 4, S. 743–752
- [187] GRONOSTAJSKI, Z.: The constitutive equations for FEM analysis. In: *J. Mater. Process. Technol.* 106 (2000), S. 40–44
- [188] KURODA, M. ; TVERGAARD, V.: A phenomenological plasticity model with non-normality effects representing observations in crystal plasticity. In: *J. Mech. Phys. Solids* 49 (2001), S. 1239–1263
- [189] IVASISHIN, O. M. ; SHEVCHENKO, S. V. ; VASILIEV, N. L. ; SEMIATIN, S. L.: A 3-D Monte-Carlo (Potts) model for recrystallization and grain growth in polycrystalline materials. In: *Mater. Sci. Eng. A* 433 (2006), S. 216–232
- [190] RAABE, D. ; ZHAO, Z. ; ROTERS, F.: A finite element method on the basis of texture components for fast predictions of anisotropic forming operations. In: *Mat. Tech.* 72 (2001), Nr. 10, S. 421–426
- [191] GROEBER, M. A. ; HALEY, B. K. ; UCHIC, M. D. ; DIMIDUK, D. M. ; GHOSH, S.: 3D reconstruction and characterization of polycrystalline microstructures using a FIB-SEM system. In: *Mater. Charact.* 57 (2006), S. 259–273

- [192] SØRENSEN, H. O. ; JAKOBSEN, B. ; KNUDSEN, E. ; LAURIDSEN, E. M. ; NIELSEN, S. F. ; POULSEN, H. F. ; SCHMIDT, S. ; WINTHER, G. ; MARGULIES, L.: Mapping grains and their dynamics in three dimensions. In: *Nucl. Instr. Meth. B* 246 (2006), Nr. 1, S. 232–237
- [193] NORM DIN 50601: *Ermittlung der Ferrit- oder Austenitkorngröße von Stahl und Eisenwerkstoffen*. 1985
- [194] UNDERWOOD, Ervin E.: *Quantitative stereology*. Reading, Massachusetts : Addison-Wesley Publishing Company, 1970
- [195] RUSS, John C.: *Practical stereology*. New York : Plenum Press, 1986. – ISBN 0–306–42460–6
- [196] LEE, J.-C. ; ANGELIER, J. ; CHU, H.-T. ; YU, S.-B. ; HU, J.-C.: Plate-boundary strain partitioning along the sinistral collision suture of the Phillipine and Eurasion plates: Analysis of geodetic data and geological observation in southeastern Taiwan. In: *Tectonics* 17 (1998), Nr. 6, S. 859–871
- [197] BURG, K. ; HAF, H. ; WILLE, F.: *Höhere Mathematik für Ingenieure — Band II, Lineare Algebra*. 3. Stuttgart : B. G. Teubner, 1992. – ISBN 3–519–22956–0. – S. 316–323; Druckfehler auf S. 320 und S. 321
- [198] BARTON, Nathan R. ; DAWSON, Paul R.: A methodology for determining average lattice orientation and its application to the characterization of grain substructure. In: *Metall. Mater. Trans. A* 32A (2001), S. 1967–1975
- [199] MACKENZIE, J. K.: The distribution of rotation axes in a random aggregate of cubic crystals. In: *Acta Metall. Mater.* 12 (1964), S. 223–225
- [200] SCHMIDT-BALDASSARI, M.: Numerical concepts for rate-independent single crystal plasticity. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* (2002)
- [201] TAYLOR, G. I.: Plastic strain in metals. In: *J. Inst. Metals* 62 (1938), S. 307–324

- [202] BESDO, D.: Possible Material Laws Including Length Dependences. In: HOLLMANN, F. (Hrsg.): *Process Scaling* Bd. 24. Bremen : BIAS Verlag, 2003 (Strahltechnik). – ISBN 3–933762–14–6, S. 193–200
- [203] HAMACHER, Horst W. ; KLAMROTH, Kathrin: *Lineare und Netzwerk-Optimierung — Linear and Network Optimization*. 1. Braunschweig/Wiesbaden : Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, 2000 (Mathematics International). – ISBN 3–528–03155–7
- [204] SARMA, Gorti B. ; RADHAKRISHNAN, Balasubramaniam ; DAWSON, Paul R.: Mesoscale modeling of microstructure and texture during deformation processing of metals. In: *Adv. Eng. Mater.* 4 (2002), Nr. 7, S. 509–514
- [205] PEETERS, Bart ; SEEFELDT, Marc ; VAN HOUTTE, Paul ; AERNOUDT, Etienne: Taylor ambiguity in BCC polycrystals: a non-problem if substructural anisotropy is considered. In: *Scr. Mater.* 45 (2001), S. 1349–1356
- [206] CHIN, G. Y. ; MAMMEL, W. L.: Computer solutions of the Taylor analysis for axisymmetric flow. In: *Trans. Metall. Soc. AIME* 239 (1967), S. 1400–1405