

Mikromechanische Modellierung des Verformungs- und Bruchverhaltens von lamellarem TiAl

**(Vom Promotionsausschuss der Technischen Universität Hamburg-
Harburg als Dissertation angenommene Arbeit)**

**Mikromechanische Modellierung
des Verformungs- und Bruchverhaltens
von lamellarem TiAl**

(Vom Promotionsausschuss der Technischen Universität Hamburg-Harburg
als Dissertation angenommene Arbeit)

Autor:

M. Werwer

(Institut für Werkstoffforschung)

Die Berichte der GKSS werden kostenlos abgegeben.
The delivery of the GKSS reports is free of charge.

Anforderungen/Requests:

GKSS-Forschungszentrum Geesthacht GmbH
Bibliothek/Library
Postfach 11 60
D-21494 Geesthacht
Germany
Fax.: (49) 04152/871717

Als Manuskript vervielfältigt.
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor.

ISSN 0344-9629

GKSS-Forschungszentrum Geesthacht GmbH · Telefon (04152)87-0
Max-Planck-Straße 1 · D-21502 Geesthacht / Postfach 11 60 · D-21494 Geesthacht

GKSS 2005/12

Mikromechanische Modellierung des Verformungs- und Bruchverhaltens von lamellarem TiAl

(Vom Promotionsausschuss der Technischen Universität Hamburg-Harburg als Dissertation angenommene Arbeit)

Malte Werwer

113 pages with 69 figures and 6 tables

Zusammenfassung

Das Verformungs- und Bruchverhalten von lamellaren ($\alpha_2 + \gamma$)-TiAl-Legierungen wird mit Hilfe von umfassenden mikromechanischen Modellierungen untersucht. Die verwendeten Modellierungsmethoden umfassen die Kristallplastizität, das Kohäsivmodell, periodische Einheitszellen und mehrskalige Finite-Element-Simulationen. Die Simulationen werden sowohl für die lamellare Substruktur (PST-Kristall) als auch für den lamellaren Vielkristall (Poly-PST-Kristall) durchgeführt und mit experimentellen Daten verglichen. Der Einfluss der Mikromechanismen auf das Verformungs- und Bruchverhalten wird diskutiert.

Micromechanical modelling of deformation and fracture in lamellar TiAl

Abstract

The deformation and fracture behaviour of lamellar ($\alpha_2 + \gamma$)-TiAl alloys is analyzed by means of micromechanical simulations using crystal plasticity, cohesive models, periodic unit cells, and multiscale finite element analyses. The simulations are performed for the lamellar substructure (PST crystal) as well as for the lamellar polycrystal (Poly-PST crystal), and compared with experimental data. The micromechanical effects on the deformation and fracture behaviour are discussed.

Manuskripteingang in TDB: 2. Dezember 2005

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation und Zielsetzung	11
1.1	Motivation	11
1.2	Zielsetzung	12
2	Grundlagen TiAl	13
2.1	Mikrostruktureller Aufbau von lamellarem TiAl	13
2.1.1	PST-Substruktur	13
2.1.2	Poly-PST-Struktur	15
2.2	Mechanismen der Verformung	15
2.2.1	Verformungsträger in den Einzelphasen	15
2.2.2	Morphologische Klassifizierung der Gleitsysteme	16
2.2.3	Plastische Anisotropie und Zug/Druck-Anomalie bei PST-Kristallen	17
2.2.4	Verformungsmechanismen in PST-Kristallen	19
2.3	Modellierung von lamellarem TiAl	20
2.3.1	Relaxed-constraint-Modell nach Lebensohn	21
2.3.2	PST-Modell nach Schlögl	22
2.3.3	Kristallplastisches Modell nach Kad	22
3	Numerische Methoden	24
3.1	Kristallplastizität	24
3.1.1	Kinematik der Kristallplastizität	25
3.1.2	Konstitutivgesetz	25
3.1.3	Verfestigung	26
3.1.4	Zwillingsbildung	26

3.1.5	Parameter für die Kristallplastizität	27
3.2	Kohäsivmodell	28
3.3	Periodische Einheitszelle	30
3.3.1	Unterschiedliche Einheitszellen	31
3.3.2	Periodische Randbedingungen	32
3.3.3	Implementierung der Kohäsivelemente	33
3.4	Zweiskalige FE ² -Simulationen	34
3.4.1	Umsetzung der FE ² -Methode	36
4	Experimentelle Untersuchungen	39
4.1	PST-Versuche	39
4.1.1	PST-Probenmaterial	39
4.1.2	Druckversuche	39
4.1.3	Biegeversuche	39
4.2	Poly-PST-Versuche	41
4.2.1	Probenmaterial	41
4.2.2	Druckversuche	42
4.2.3	Zugversuche	42
4.2.4	Biegeproben	42
5	Numerische Simulationen	44
5.1	PST-Modelle	44
5.1.1	PST-Druckversuche	44
5.1.2	PST-Biegeversuche	45
5.2	Poly-PST-Modelle	46
5.2.1	Poly-PST-Simulationen	46
6	Ergebnisse: PST-Verformung	49
6.1	Morphologische 1-Element-Simulationen	49
6.2	Morphologische Mehrelement-Simulationen	51
6.3	Einfluss der Festigkeit der Supergleitsysteme	54

6.3.1	Kinematische Notwendigkeit von Superversetzungen	54
6.3.2	Anpassung an die PST-Druckversuche	57
6.3.3	Zug/Druck-Anomalie	58
6.3.4	Gleitgeometrien	60
6.4	Zusammenfassende Diskussion	62
7	Ergebnisse: PST-Bruch	64
7.1	Parametervariation (RT-Orientierung)	64
7.2	Riss-Teiler (RT)	67
7.2.1	Parameteranpassung	67
7.2.2	Beschreibung des Bruchmechanismus	71
7.2.3	Mikromechanische Interpretation	71
7.3	Delaminator (D)	75
7.3.1	Parameteranpassung	75
7.3.2	Bruchmechanismus	77
7.4	Riss-Stopper (RS)	79
7.4.1	Kraft-Verschiebungskurven	79
7.4.2	Bruchmechanismus	80
8	Ergebnisse: Poly-PST-Verformung	83
8.1	Einfluss der modellbezogenen Parameter	83
8.1.1	Statistische Streuung der Fließkurven	84
8.1.2	Einfluss der Dehnungslokalisierung	85
8.2	Einfluss der materialbezogenen Parameter	87
8.2.1	Textureinfluss	87
8.2.2	Zug/Druck-Anomalie	88
8.3	Parameteranpassung	89
8.4	Zusammenfassende Diskussion	90
9	Bruchverhalten von Poly-PST-Kristallen	92
9.1	Klassische FE-Methode	92

9.2	Anpassung der Kohäsivparameter	93
9.3	Bruchmechanismen	97
9.3.1	Bruchflächen	97
9.4	Diskussion	99
9.5	Ausblick	101
10	Zusammenfassung	103
	Literaturverzeichnis	106

Liste der verwendeten Abkürzungen und Formelzeichen

Akronyme

FEM	Finite Elemente Methode
PST	Polysynthetisch verzwillingt (<i>poly-synthetically twinned</i>)
RC	Relaxed-constraint
REM	Rasterelektronenmikroskop
RFL	Rekristallisiert fein-lamellar (<i>refined fully lamellar</i>)

Gefügeparameter

D_L	mittlerer Lamellenabstand
D_D	mittlerer Domänendurchmesser
D_K	mittlere Koloniegröße
λ	Flachheitsgrad D_D/D_L

Kohäsivparameter

T	aktuelle Spannung in der Kohäsivzone
T_0	Separationsspannung
δ	aktuelle Öffnung der Kohäsivzone
δ_0	Normierungsgröße für die Kohäsivöffnung
$\delta_1, \delta_2, \delta_3$	Gestaltparameter
Γ_0	Separationsarbeit
Γ_{23}	dissipierte Arbeit im entfestigenden Bereich des Kohäsivgesetzes
$\chi(\delta/\delta_0)$	Kohäsivgesetz

Kristallplastische Parameter

g	Festigkeit der Gleitsysteme
g_0	anfängliche Festigkeit der Gleitsysteme
h_0	Verfestigungsmodul
$q_{\eta\theta}$	Verfestigungsmatrix
m	Verfestigungsexponent
η, θ	Zähler für die Gleitsysteme
$\dot{\gamma}^{(\eta)}$	Scherrate im Gleitsystem η
$\dot{\gamma}_0$	Referenzscherrate
$\tau^{(\eta)}$	Schmid'sche Schubspannung im Gleitsystem η

Kontinuumsmechanische Formelzeichen

\mathbf{F}	Deformationsgradient $d\mathbf{X}/d\mathbf{x}$
\mathbf{F}_p	plastischer Anteil von \mathbf{F}
\mathbf{F}^*	nicht-plastischer Anteil von \mathbf{F}
$\tilde{\mathbf{F}}$	Mesoskopischer Deformationsgradient
\mathbf{X}	Vektor in der Referenzkonfiguration
\mathbf{x}	Vektor in der Momentankonfiguration
\mathbf{u}	Verschiebungsvektor
\mathbf{J}	Verschiebungsgradient $\mathbf{F} - \mathbf{I}$
$\tilde{\mathbf{J}}$	mesoskopischer Verschiebungsgradient
$\bar{\mathbf{J}}$	gemittelter Verschiebungsgradient
ϵ	Dehnungstensor

Werkstofftechnische und selbstdefinierte Kenngröße

R	Fließgrenze
$R_{p0.2}$	0.2 % plastische Fließgrenze
$R_{p1.0}$	1.0 % plastische Fließgrenze
Q_{SE}	Verhältnis der Festigkeit der Supergleitsysteme zur Festigkeit der Einfachgleitsysteme: $Q_{SE} = g_0^{\text{super}}/g_0^{\text{einf}}$
Q_{DZ}	Zug/Druck-Anomalie der Fließspannung: $Q_{DZ} = R_p^{\text{Druck}}/R_p^{\text{Zug}}$
Q_{quer}	relative plastische Querdehnung $Q_{\text{quer}} = (\epsilon_{xx}/\epsilon_{yy})_{pl}$
ϵ	einachsige Dehnung
ϵ_{pl}	plastischer Anteil der Dehnung

Kapitel 1

Motivation und Zielsetzung

1.1 Motivation

Intermetallische γ -TiAl-Basislegierungen sind neuartige Hochtemperatur-Leichtbau-Strukturwerkstoffe. TiAl-Legierungen zeichnen sich aus durch geringes spezifisches Gewicht, sehr hohe spezifische Steifigkeit, hohe spezifische Festigkeit, gute Hochtemperaturfestigkeit bis etwa 750°C sowie gute Oxidationsbeständigkeit [1]. Dieses Eigenschaftsprofil macht TiAl-Legierungen interessant für Anwendungen in der Luft- und Raumfahrt [2–6] sowie dem Automobilbau [7, 8]. Zu nennen ist insbesondere der potenzielle Einsatz als Schaufelmaterial für Flugzeugturbinen. Mit TiAl-Schaufeln können die bewegten Massen reduziert und somit der Treibstoffverbrauch und die Lärmemission für zukünftige Flugzeugturbinen verringert werden [9].

TiAl-Legierungen bestehen im Wesentlichen aus den beiden intermetallischen Phasen γ (TiAl) und α_2 (Ti₃Al). Je nach Prozessführung bilden diese beiden Phasen unterschiedliche Morphologien, die als lamellar, nahezu-lamellar, duplex und globular (near-gamma) klassifiziert werden [10]. In Bezug auf die angestrebten Hochtemperaturanwendungen werden die ausgewogensten Eigenschaften im Allgemeinen mit lamellaren Gefügen erzielt [11]. Aus diesem Grund konzentriert sich diese Arbeit auf diese Gefügetypen.

Der industrielle Einsatz von TiAl-Legierungen wird, neben einigen anderen Faktoren (Kosten), bisher durch die verhältnismäßig geringe Duktilität begrenzt. Die Duktilität beträgt im Allgemeinen weniger als 2 % und ist bei lamellaren Gefügen oft noch geringer. Mit der geringen Duktilität geht ein erhöhtes Risiko gegen Spröbruchversagen einher. TiAl-Legierungen können daher erst dann für sicherheitsrelevante Turbinenbauteile eingesetzt werden, wenn das Spröbruchversagen technisch beherrschbar ist. Hierfür werden neue, auf die Besonderheiten von TiAl-Legierungen zugeschnittene Methoden zur Bauteilauslegung benötigt [12].

Das Verformungs- und Bruchverhalten von Werkstoffen wird in vieler Hinsicht von der Mikrostruktur bestimmt. Neuere Methoden der Bauteilauslegung tragen dem Rechnung, indem sie die mikromechanischen Verformungs- und Schädigungsmechanismen explizit oder implizit mit

einbeziehen. Gegenüber konventionellen, rein phänomenologischen Methoden haben die mikromechanischen Ansätze den Vorteil, dass die Modellparameter mikromechanisch interpretierbar sind. Hierdurch ergeben sich insbesondere dann Vorteile, wenn komplexe Vorgänge modelliert werden sollen, zu deren Abbildung entsprechend viele Parameter benötigt werden. Bei rein phänomenologischen Ansätzen können durch die Parameterzahl große Unsicherheiten bei der Modellvalidierung und -kalibrierung auftreten. Mit mikromechanischen Ansätzen können diese Unsicherheiten vermieden oder zumindest reduziert werden.

1.2 Zielsetzung

Das Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung, Validierung und Kalibrierung einer mikromechanischen Modellierung für das Verformungs- und Bruchverhalten von lamellarem TiAl. Hierfür werden periodische Einheitszellen entworfen, die die kleinsten lamellaren Elemente (Kolonien) des Materials repräsentieren. In den Einheitszellen wird das Verformungsverhalten der beiden Phasen α_2 und γ kontinuumsmechanisch mit der Kristallplastizität beschrieben. Für das Bruchverhalten wird das Kohäsivmodell in die Einheitszellen implementiert. Für komplexe Simulationen wird eine neuartige zweiskalige FE²-Methode verwendet, bei der die periodischen Einheitszellen als Untermodelle in jeden Integrationspunkt eines übergeordneten FE-Modells implementiert werden.

Für die Validierung und Kalibrierung der Modellierung wird das Verformungs- und Bruchverhalten der lamellaren Substruktur simuliert und mit Versuchsergebnissen von lamellaren Einkristallen (PST-Kristall) verglichen. Im Anschluss wird das Verformungsverhalten von lamellaren Vielkristallen (Poly-PST-Kristall) simuliert und ebenfalls mit Experimenten verglichen. Das Poly-PST-Bruchverhalten wird konventionell mit dem Kohäsivmodell beschrieben. Für die mikromechanische Modellierung des Poly-PST-Bruchverhaltens wird aufbauend auf den Ergebnissen ein Ausblick gegeben.

Mit der mikromechanischen Ausrichtung ergänzt diese Arbeit die Dissertationen von Rainer Mohr [13] und Barbara Wiesand-Valk [14], bei denen das Verhalten von TiAl-Legierungen mit phänomenologischen bzw. statistischen Methoden modelliert wurde.

Kapitel 2

Grundlagen TiAl

2.1 Mikrostruktureller Aufbau von lamellarem TiAl

Die beiden Hauptbestandteile von lamellaren TiAl-Legierungen sind die intermetallischen Phasen γ (TiAl) und α_2 (Ti₃Al). Die Kristallstrukturen dieser Phasen sind eine leicht tetragonal verzerrte $L1_0$ -Struktur (γ) bzw. eine hexagonale $D0_{19}$ -Struktur (α_2), siehe Bild 2.1(a) [15]. Bei typischen Aluminiumgehalten von 45–48 mol % bildet γ mit einem Volumenanteil von 80–95 % die Majoritätsphase. Neben γ und α_2 treten in technischen Legierungen oft noch kleine Menge an Boriden, Siliziden oder Karbiden auf [1], die bei den folgenden mikromechanischen Betrachtungen jedoch nicht explizit berücksichtigt werden sollen.

Im Verbund bilden γ und α_2 ein Gefüge mit einer lamellaren, poly-synthetisch verzwilligten (PST)-Substruktur, siehe Bild 2.1(d).

2.1.1 PST-Substruktur

Die lamellare Substruktur resultiert aus einer Orientierungsbeziehung zwischen γ und α_2 . Die Grenzfläche zwischen den beiden Phasen wird von den dichtest gepackten Ebenen $\{111\}_\gamma$ und $(0001)_{\alpha_2}$ gebildet. Die beiden Ebenen sind dabei so zueinander orientiert, dass die dichtest gepackten Richtungen $[110]_\gamma$ und $[11\bar{2}0]_{\alpha_2}$ parallel sind. Aufgrund der 6-fältigen Symmetrie der $\{111\}$ -Ebene erfüllen 6 unterschiedliche Orientierungsvarianten von γ die Orientierungsbeziehung, Bild 2.1(b). Die Orientierungsvarianten können hinsichtlich ihrer Stapelfolgen in 3 Matrix- und 3 Zwillingorientierungen eingeteilt werden [15].

Die γ -Lamellen haben ihrerseits eine Domänen-Substruktur, d.h. in einer Lamelle gibt es Bereiche, die unterschiedlichen Orientierungsvarianten zugeordnet werden können. Aus elektronenmikroskopischen Untersuchungen ist bekannt, dass die Stapelfolge in einer γ -Lamelle weitgehend konstant ist [16]. Die Domänen in einer γ -Lamelle haben also entweder Matrix- oder Zwillingorientierungen. Insofern können Matrix- und Zwillinglamellen unterschieden werden, Bild 2.1(c).

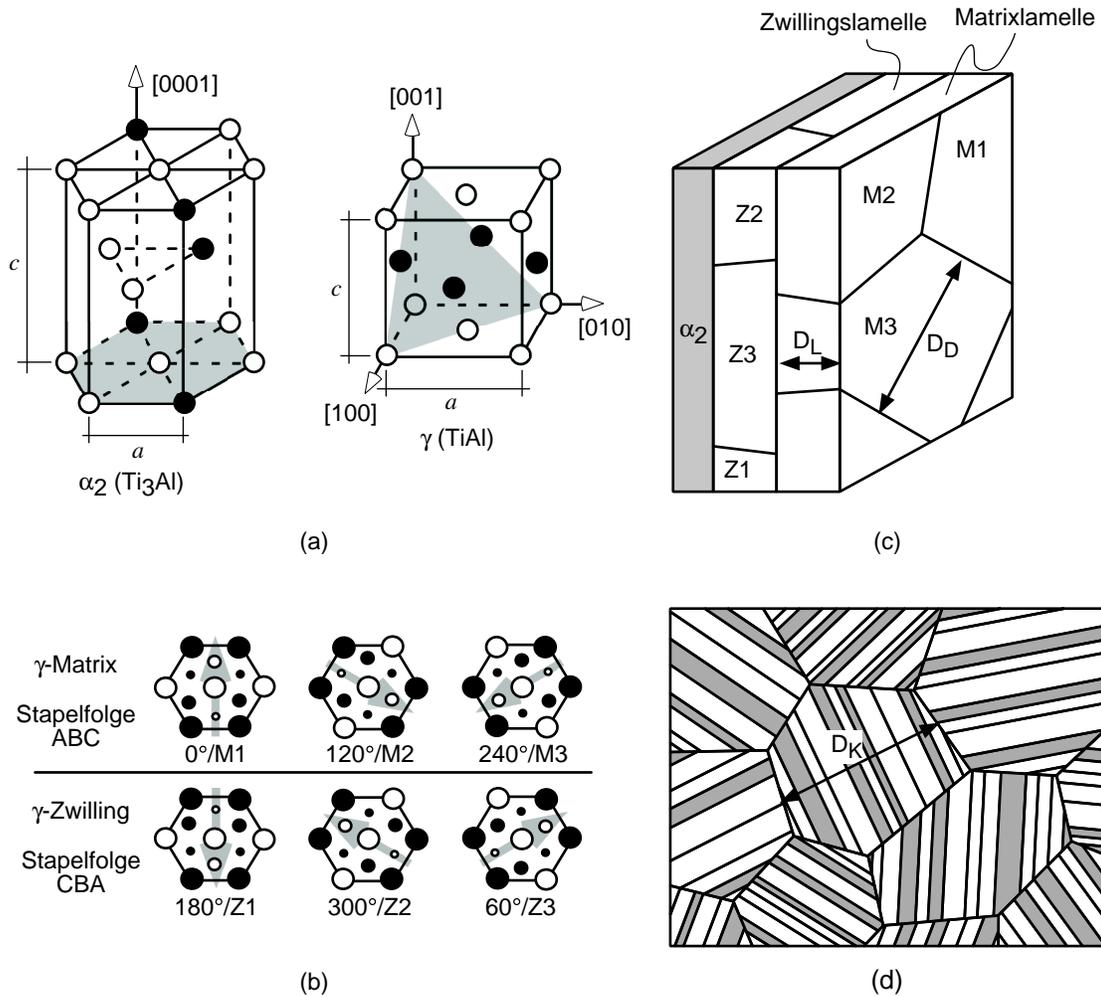


Bild 2.1: (a) Kristallstrukturen von α_2 und γ , die dichtest gepackten Ebenen sind jeweils grau markiert; (b) Orientierung der 6 unterschiedlichen γ -Varianten; (c) PST-Substruktur; (d) Poly-PST-Struktur.

Ähnlich wie monolithische Einkristalle können aus TiAl auch lamellare Kristalle mit einheitlicher Lamellenorientierung (PST-Kristalle) gezüchtet werden. Mit PST-Kristallen können die mikromechanischen Eigenschaften der lamellaren Substruktur experimentell ermittelt werden, siehe z.B. [17–34].

2.1.2 Poly-PST-Struktur

Das Poly-PST-Gefüge besteht aus PST-Kristalliten (Kolonien). Die charakteristischen Gefügeabmessungen sind die Koloniegroße D_K , der Lamellenabstand D_L und die Domänengroße D_D . Je nach chemischer Zusammensetzung und thermomechanischer Behandlung variieren diese Abmessungen sehr stark. Typische Werte liegen bei: $D_K = 100 \dots 1000 \mu\text{m}$, $D_L = 0.1 \dots 2.0 \mu\text{m}$ und $D_D = 10 \dots 50 \mu\text{m}$.

Die mechanischen Eigenschaften sind z.T. sehr stark von den Gefügeabmessungen abhängig. Die ausgewogensten mechanischen Eigenschaften werden mit feinkörnigen, feinlamellaren Gefügen (RFL-Gefüge) erzielt. Zur Erzeugung von RFL-Gefügen sind Umformschritte mit relativ hohen Umformgraden und anschließender Rekristallisation notwendig. Hierbei können sich Texturen einstellen, die das mechanische Verhalten ebenfalls sehr stark beeinflussen.

2.2 Mechanismen der Verformung

2.2.1 Verformungsträger in den Einzelphasen

Bei Raumtemperatur erfolgt die inelastische Verformung in α_2 durch Versetzungsgleiten und in γ durch Versetzungsgleiten und mechanische Zwillingsbildung.

Die am häufigsten gefundenen Gleitsysteme sind in α_2 die prismatischen $\langle 11\bar{2}0 \rangle \{1\bar{1}00\}$ Systeme, die basalen $\langle 11\bar{2}0 \rangle \langle 0001 \rangle$ Systeme sowie die pyramidalen $\langle \bar{1}\bar{1}26 \rangle \{11\bar{2}1\}$ Systeme [35], siehe Bild 2.2(a). In γ findet die Versetzungsbewegung fast ausschließlich auf den $\{111\}$ -Ebenen statt. Hierbei werden am häufigsten $1/2\langle 110 \rangle$ Einfachversetzungen¹, $\langle 011 \rangle$ Superversetzungen sowie die für die mechanische Zwillingsbildung verantwortlichen $1/6\langle 11\bar{2} \rangle$ Partialversetzungen gefunden [36, 37], siehe Bild 2.2(b).

Für die α_2 -Gleitsysteme wurden die kritischen Schubspannungen experimentell an Einkristallen ermittelt [35, 38, 39]. Hierbei wurden für die prismatischen, basalen und pyramidalen Systeme Werte von 100, 330 bzw. 910 MPa ermittelt [35]. Tatsächlich dürften die kritischen Schubspannungen in der α_2 -Phase, die in lamellarem TiAl vorliegt, noch höher sein, da die α_2 -Phase eine höhere Affinität zu Verunreinigung, wie z.B. Sauerstoff, hat als die γ -Phase. Hierdurch reichern sich die Verunreinigungen in der α_2 -Phase an und führen zu einer Mischkristallhärtung [1]. Da für verunreinigte α_2 -Einkristalle keine Werte vorliegen, und der Volumenanteil der α_2 -Phase

¹Die gemischte Notation $\langle hkl \rangle$ der Miller-Indices bezeichnet die Permutationen $[\pm h \pm kl]$.

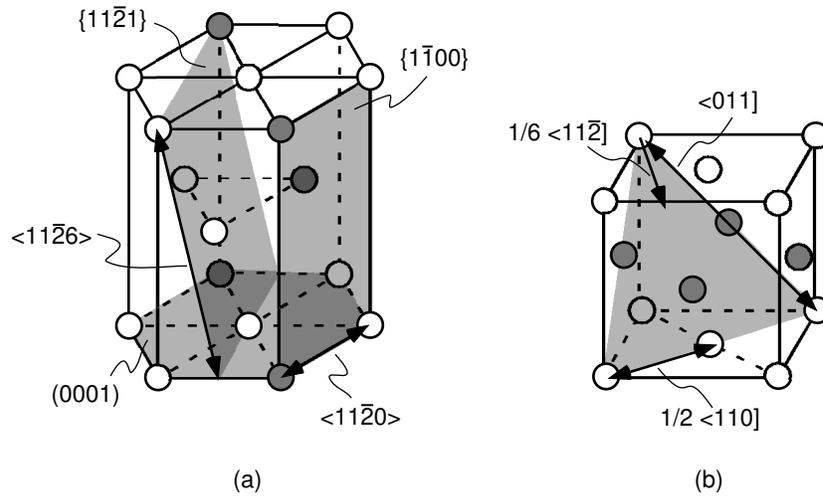


Bild 2.2: Gleitsysteme in α_2 (a) und γ (b).

ohnehin relativ gering ist, wurden die Einkristallwerte aus [35] als kritische Schubspannungen für die Simulationen verwendet.

Nennenswerte Duktilitäten wurden bei den α_2 -Einkristallversuchen nur bei den prismatischen Gleitsystemen beobachtet. Wenn basale oder pyramidale Gleitsystemen aktiviert werden, ist die Bruchdehnung selbst im Druckversuch sehr gering [35].

Für die γ -Gleitsysteme konnten bisher keine experimentellen Anhaltswerte für die kritischen Schubspannungen ermittelt werden. Die kritischen Schubspannungen sind in γ sehr stark vom Aluminiumgehalt abhängig. Es sind zwar Versuche an γ -Einkristallen durchgeführt worden (siehe z.B. [40]), diese hatten in der Regel jedoch Aluminiumgehalte von mehr als 54%, so dass die ermittelten kritischen Schubspannungen nicht als Anhaltswerte für eine mit α_2 im Gleichgewicht stehende γ -Phase (50% Al) verwendet werden können. Die Herstellung von γ -Einkristallen mit einem geringeren Aluminiumgehalt ist ebenfalls nicht ohne Weiteres möglich, da solche Einkristalle in der Regel die PST-Struktur annehmen [41], und an PST-Kristallen keine individuellen Gleitsysteme untersucht werden können. Ein wesentlicher Punkt dieser Arbeit besteht daher darin, die kritischen Schubspannungen der γ -Gleitsysteme mit Hilfe von numerischen Simulationen zu ermitteln.

2.2.2 Morphologische Klassifizierung der Gleitsysteme

Bei der Bestimmung der kritischen Schubspannungen der γ -Gleitsysteme ist zu berücksichtigen, dass die freie Gleitlänge der Versetzungen durch die Lamellenabmessungen begrenzt wird. Aus diesem Grund kann sich die effektive kritische Schubspannung von kristallographisch gleichen, aber in der Lamelle unterschiedlich orientierten γ -Gleitsystemen unterscheiden. Neben der kristallographischen Klassifikation der Gleitsysteme in Einfach-, Super- und Zwillingsversetzungen ist es daher von Bedeutung, die γ -Gleitsysteme auch morphologisch, d.h. hinsichtlich ihrer

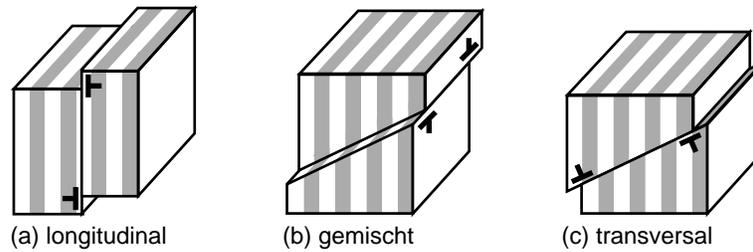


Bild 2.3: Morphologische Klassifizierung der Gleitsysteme.

Orientierung zur Lamellengrenzfläche, zu klassifizieren. Es können insgesamt 3 morphologische Klassen unterschieden werden [28]:

- Longitudinale Systeme, bei denen sowohl die Gleitebene als auch die Gleitrichtung parallel zur Lamellenebene liegen, Bild 2.3(a)
- Transversale Systeme, bei denen weder die Gleitebene noch die Gleitrichtung parallel zur Lamellenebene liegen, Bild 2.3(c)
- Gemischte Systeme, bei denen die Gleitrichtung, aber nicht die Gleitebene parallel zur Lamellenebene liegt, Bild 2.3(b)

Die kristallographische und morphologische Klassifikation der γ -Gleitsysteme ist in Tab. 2.1 aufgeführt. Insgesamt können, wenn beide Klassifikationen angewendet werden, 8 unterschiedliche γ -Gleitsysteme identifiziert werden. Prinzipiell können diese Gleitsysteme alle unterschiedliche Festigkeitseigenschaften haben. Für die nachfolgenden Simulationen ist die Unterscheidung von so vielen unterschiedlichen Gleitsystemen nicht praktikabel. Die Anzahl der freien Gleitparameter wird daher später noch durch weitere vereinfachende Annahmen verringert.

In α_2 führt die morphologische Klassifizierung zu keiner weiteren Unterscheidung: Die basalen Gleitsysteme haben eine longitudinale, die prismatischen Gleitsysteme eine gemischte und die pyramidalen Gleitsysteme eine transversale Orientierung, siehe Tab. 2.2. Für die zu untersuchende Ko-Verformung beider Phasen ist es jedoch von Bedeutung, welche α_2 - und γ -Gleitsysteme miteinander korrespondieren. So korrespondieren die relativ duktilen prismatischen α_2 -Versetzungen mit den gemischten γ -Systemen und die weniger duktilen basalen und pyramidalen α_2 -Versetzungen mit den longitudinalen bzw. transversalen γ -Systemen.

2.2.3 Plastische Anisotropie und Zug/Druck-Anomalie bei PST-Kristallen

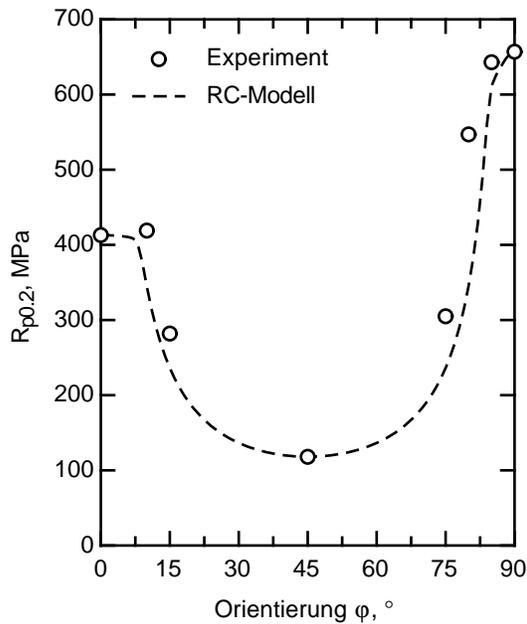
Die mechanischen Eigenschaften von PST-Kristallen sind sehr stark orientierungsabhängig. Durch die Unidirektionalität der mechanische Zwillingsbildung kann darüber hinaus ein unterschiedliches Verhalten bei Zug- und Druckbeanspruchung (Zug/Druck-Anomalie) auftreten. Die

Tabelle 2.1: Klassifikation der γ -Gleitsysteme

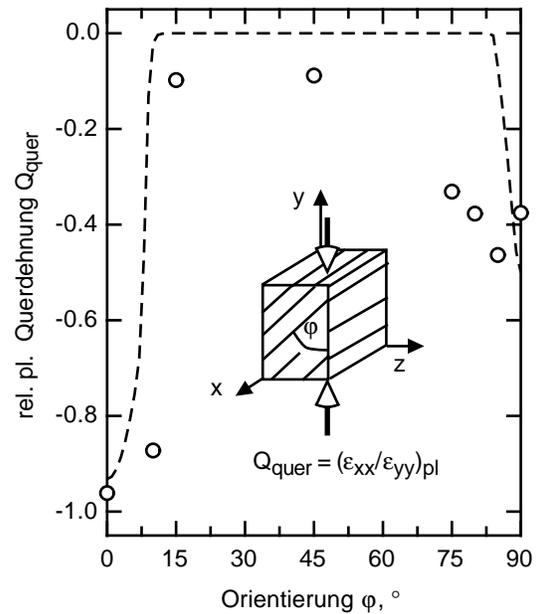
Klassifikation	longitudinal	gemischt	transversal
Einfach	$1/2[1\bar{1}0]$ (111)	$1/2[1\bar{1}0]$ (11 $\bar{1}$)	$1/2[110]$ (1 $\bar{1}1$)
	—	—	$1/2[110]$ (1 $\bar{1}\bar{1}$)
Super	$[01\bar{1}]$ (111)	$[01\bar{1}]$ (1 $\bar{1}\bar{1}$)	$[01\bar{1}]$ (11 $\bar{1}$)
	$[10\bar{1}]$ (111)	$[10\bar{1}]$ (1 $\bar{1}1$)	$[\bar{1}0\bar{1}]$ (11 $\bar{1}$)
	—	—	$[0\bar{1}\bar{1}]$ (1 $\bar{1}1$)
	—	—	$[\bar{1}0\bar{1}]$ (1 $\bar{1}\bar{1}$)
Zwilling	$1/6[11\bar{2}]$ (1 $\bar{1}\bar{1}$)	—	$1/6[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ (11 $\bar{1}$)
	—	—	$1/6[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ (1 $\bar{1}\bar{1}$)
	—	—	$1/6[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ (1 $\bar{1}\bar{1}$)

Tabelle 2.2: Klassifikation der α_2 -Gleitsysteme

Klassifikation	longitudinal	gemischt	transversal
prismatisch	—	$\langle 11\bar{2}0 \rangle \{1\bar{1}00\}$	—
basal	$\langle 11\bar{2}0 \rangle (0001)$	—	—
pyramidal	—	—	$\langle \bar{1}\bar{1}26 \rangle \{11\bar{2}1\}$



(a)



(b)

Bild 2.4: Anisotropie der Fließspannung und der relativen plastischen Querdehnung bei PST-Kristallen: Experiment und RC-Modell [28, 37].

Zug/Druck-Anomalie kann dabei sowohl die Fließspannung als auch das Verformungsverhalten betreffen.

Die Orientierung von PST-Kristallen wird im Allgemeinen durch den zwischen Lastrichtung und Lamellenebene eingeschlossenen Winkel φ gekennzeichnet, siehe Bild 2.4(b). Die Abhängigkeit der Fließspannung von φ wird in Bild 2.4(a) an Hand der Druckversuche von Uhlenhut [37] gezeigt. Hohe Fließspannungen werden bei 0° und insbesondere bei 90° gefunden. Im mittleren Winkelbereich zwischen 15° und 75° liegt hingegen ein ausgeprägtes Minimum mit wesentlich kleineren Fließspannungen. Im Zugversuch zeigt sich die gleiche Anisotropie. Inui *et al.* [18] zufolge ist hierbei keine ausgeprägte Zug/Druck-Anomalie zu beobachten.

Die Anisotropie zeigt sich auch im Verformungsverhalten. Das unterschiedliche Verformungsverhalten wird dabei im Folgenden durch die relativen plastischen Querdehnungen $Q_{\text{quer}} = (\epsilon_{\text{xx}}/\epsilon_{\text{yy}})_{\text{pl}}$ ausgedrückt. Die Orientierungsabhängigkeit von Q_{quer} ist in Bild 2.4(b) dargestellt. Bei der 0° -Orientierung dominiert im Druckversuch ein ebener Dehnungszustand in der Lamellenebene ($Q_{\text{quer}} \approx 1.0$). Hierbei zeigt sich eine leichte Zug/Druck-Anomalie: Kishida *et al.* [36] zufolge ist im Zugversuch $Q_{\text{quer}} \approx 0.67$. Im mittleren Winkelbereich um 45° gleiten die Lamellen aneinander ab, wobei sich eine ebene Verformung in der x - y Ebene mit $Q_{\text{quer}} = 0.0$ einstellt. Bei 90° ist die plastische Verformung im Druckversuch annähernd isotrop. Im Zugversuch versagen die 90° -Orientierungen im Allgemeinen ohne nennenswerte plastische Verformung. Zur besseren Anschauung wird das anisotrope Verformungsverhalten von PST-Kristallen in Bild 2.5 illustriert.

2.2.4 Verformungsmechanismen in PST-Kristallen

Die Aktivierung der unterschiedlichen Versetzungssysteme in PST-Kristallen wurde von Uhlenhut [37] und Kishida *et al.* [36] untersucht. Generell werden in den unterschiedlich orientierten γ -Domänen verschiedene Versetzungssysteme aktiviert. Die Einzeldomänen sollen hier jedoch nicht aufgelöst werden, statt dessen wird in Tab. 2.3 ein globaler Überblick über die am häufigsten gefundenen Gleitsysteme bei Druck- und Zugbeanspruchung gegeben.

In Druckversuch dominieren bei der 0° -Orientierung im Wesentlichen die gemischten Gleitsysteme, wobei sowohl Einfach- als auch Superversetzungen gefunden werden. Seltener werden transversale Zwillings- [37] und Einfachversetzungen [36] beobachtet. Im Zugversuch werden die gemischten Superversetzungen weitgehend umgangen und stattdessen transversale Einfach- und Zwillingsversetzungen aktiviert [36]. Aus der verstärkten Aktivierung von transversalen Versetzungen resultiert die Zug/Druck-Anomalie von Q_{quer} .

Bei der 45° -Orientierung werden bei Druck- und Zugbeanspruchung nur longitudinale Systeme aktiviert. Hierbei werden Einfach-, Super und Zwillingsversetzungen beobachtet [36, 37].

Bei der 90° -Orientierung werden bei Druckbeanspruchung transversale Zwillingsversetzungen [36, 37] und transversale Einfachversetzungen [36] gefunden. Transversale Superversetzungen

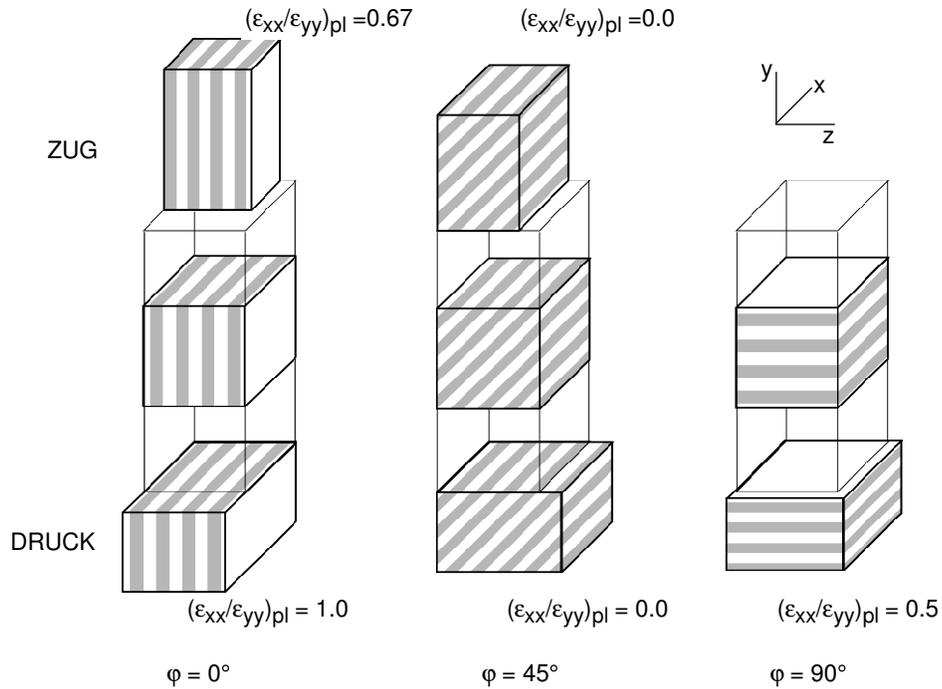


Bild 2.5: Anisotropes Verformungsverhalten von PST-Kristallen bei Zug- und Druckbeanspruchung nach Kishida *et al.* [36] und Uhlenhut [37].

wurden bisher noch nicht beobachtet.

Aus den Beobachtungen wurde geschlossen [36], dass die Supergleitsysteme etwas fester sind als die Einfach- und Zwillingsgleitsysteme, und dass die Einfach- und Zwillingsgleitsysteme etwa gleich fest sind.

2.3 Modellierung von lamellarem TiAl

Mit der Modellierung der plastischen Verformung von lamellarem TiAl haben sich international bisher schon mehrere Arbeitsgruppen beschäftigt. Die im Folgenden vorgestellte mikromechani-

Tabelle 2.3: Aktivierte γ -Gleitsysteme in PST-Kristallen [36, 37].

Beanspruchung	0°	45°	90°
Druck	gem. Einfach	long. Einfach	trans. Zwilling
	gem. Super	long. Super	trans. Einfach
	(trans. Einfach)	long. Zwilling	
	(trans. Zwilling)		
Zug	gem. Einfach	long. Einfach	—
	trans. Einfach	long. Super	
	trans. Zwilling	long. Zwilling	

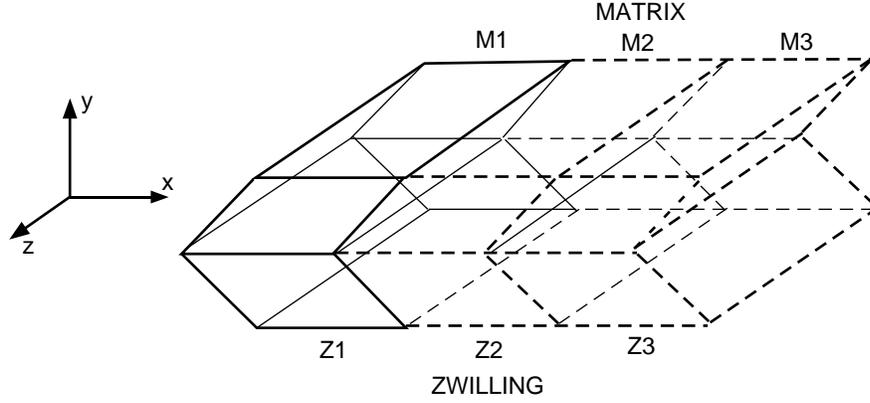


Bild 2.6: RC-Modell nach Lebensohn *et al.* [28].

sche Modellierung basiert im Wesentlichen auf dem Relaxed-constraint(RC)-Modell von Lebensohn *et al.* [28]. Neben dem RC-Modell sind die Arbeiten von Kad *et al.* [42–45], bei denen das Verhalten von PST-Kristallen kristallplastisch homogenisiert wird, und der mikromechanische Ansatz von Schlögl *et al.* [46–49] erwähnenswert.

2.3.1 Relaxed-constraint-Modell nach Lebensohn

Um das anisotrope Verformungsverhalten von PST-Kristallen zu beschreiben, wurde von Lebensohn *et al.* [28] für die Ko-Verformung der unterschiedlichen Bestandteile im lamellaren Verbund das RC-Modell vorgeschlagen.

Das RC-Modell basiert auf einer einfachen Einheitszelle bestehend aus einer γ -Matrix- und einer γ -Zwillingslamelle, siehe Bild 2.6. Für die schädigungsfreie Ko-Verformung muss die Grenzfläche zwischen den beiden Lamellen kompatibel erhalten bleiben. Hieraus ergeben sich Zwangsbedingungen für ϵ_{xx} , ϵ_{zz} , und ϵ_{xz} :

$$\epsilon_{xx}^M = \epsilon_{xx}^Z, \quad (2.1)$$

$$\epsilon_{zz}^M = \epsilon_{zz}^Z, \quad (2.2)$$

$$\epsilon_{xz}^M = \epsilon_{xz}^Z. \quad (2.3)$$

Für die beiden noch verbleibenden unabhängigen Komponenten werden keine Verformungszwangsbedingungen, sondern ein Spannungsgleichgewicht angesetzt.

$$\sigma_{xy}^M = \sigma_{xy}^Z, \quad (2.4)$$

$$\sigma_{yz}^M = \sigma_{yz}^Z. \quad (2.5)$$

Durch die Randbedingungen wird erreicht, dass sich in den beiden Lamellen unterschiedliche longitudinale Verformungszustände einstellen können, während für die gemischten und transversalen Anteile gleiche Verformungszustände erzwungen werden.

Unter Verwendung der in Gl. (2.1–2.5) definierten Randbedingungen wurde von Lebensohn *et al.* das anisotrope Verformungsverhalten von PST-Kristallen in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden beschrieben, siehe Bild 2.4. Hierbei wurde gezeigt, dass die Anisotropie der Fließspannung im Wesentlichen aus der morphologischen Unterscheidung der Gleitsysteme resultiert. Die kristallographische Unterscheidung der Gleitsysteme ist für die Beschreibung der Anisotropie nicht erforderlich.

2.3.2 PST-Modell nach Schlögl

Die Arbeiten von Schlögl *et al.* [46–49] basieren auf einer 2-dimensionalen, periodischen Repräsentation der PST-Struktur, bei der die α_2 -Phase und die unterschiedlichen γ -Domänen örtlich relativ fein aufgelöst werden. Für die dritte Raumrichtung werden ohne weitere Auflösung der Mikrostruktur periodische Randbedingungen angenommen.

Die Verformung der Einzelphasen wird kristallplastisch beschrieben. Als Verformungsträger in der γ -Phase werden longitudinale und transversale Einfach- und Zwillingsversetzungen, aber keine Superversetzungen berücksichtigt. Mit dem Ansatz gelingt es gut, die Orientierungsabhängigkeit der anfänglichen Fließspannung abzubilden. Im Verfestigungsverhalten zeigen sich bei den Simulationen teilweise jedoch große Unterschiede zu den experimentellen Daten von Uhlenhut [37].

Kritisch zu bewerten ist bei dem PST-Modell von Schlögl, dass in den 3 Raumrichtungen keine einheitlichen Randbedingungen herrschen. Das Modell ist daher eher 2-dimensional als 3-dimensional. Für die Kristallplastizität besteht zwischen 2- und 3-dimensionalen Modellen ein großer Unterschied: Bei 2-dimensionalen Modellen werden für eine homogene plastische Verformung kinematisch 2 unabhängige Gleitsysteme benötigt, während bei 3-dimensionalen Modellen 5 unabhängige Gleitsysteme erforderlich sind. Die Verwendung von 2-dimensionalen Modellen kann bei kristallplastischen Problemen daher leicht zu Fehlinterpretationen führen.

2.3.3 Kristallplastisches Modell nach Kad

Die Arbeiten von Kad *et al.* [42–45] basieren auf einem 2-dimensionalen kristallplastischen Ansatz. Die beiden Phasen α_2 und γ werden in diesem Ansatz nicht aufgelöst, sondern in homogener Form betrachtet. Die Anisotropie der PST-Kristallite wird durch die Unterscheidung von longitudinalen und transversalen Versetzungen modelliert.

Mit ihren Arbeiten zeigen Kad *et al.*, dass die Anisotropie der PST-Kristallite in lamellarem TiAl zu starken Dehnungslokalisierungen führt. Sie führen aus, dass durch die Dehnungslokalisierungen lokal hohe 3-achsige Spannungszustände induziert werden, die die Duktilität negativ beeinflussen. Die Modellierung von Kad *et al.* wurde in letzter Zeit von Brockman *et al.* [50, 51] aufgegriffen und zu einem 3-dimensionalen Modell erweitert.

Kritisch zu bewerten ist, dass bei Kad *et al.* eigentlich nur die Anisotropie des lamellaren Gefüges abgebildet wird. Da das Gefüge nur in homogenisierter Form betrachtet wird, können keine Rückschlüsse über die mikromechanisch eigentlich interessanten Wechselwirkungen zwischen den Einzelphasen bzw. den unterschiedlichen Versetzungssystemen getroffen werden.

Kapitel 3

Numerische Methoden

Charakteristisch ist bei allen mikromechanischen Modellierungen die Überbrückung von unterschiedlichen Längenskalen. Die Modelle werden im Allgemeinen auf einer Längenskala definiert, um dann, gegebenenfalls unter Verwendung geeigneter Homogenisierungsmethoden, auf die nächst höhere Längenskala übertragen zu werden.

In dieser Arbeit werden 3 unterschiedliche Längenskalen vom Submikron-Bereich bis zum Poly-PST-Kristall betrachtet, siehe Bild 3.1. Auf den unterschiedlichen Längenskalen werden jeweils unterschiedliche Methoden angewendet.

Auf der ersten Längenskala wird das lokale Verformungs- und Bruchverhalten beschrieben. Die lokale Verformung der Einzelphasen α_2 und γ wird dabei kontinuumsmechanisch mit den Methoden der Kristallplastizität beschrieben (Abschnitt 3.1). Das lokale Bruchverhalten wird mit dem Kohäsivmodell (Abschnitt 3.2) beschrieben.

Auf der zweiten Längenskala werden die Kristallplastizität und das Kohäsivmodell angewendet, um das Verformungs- und Bruchverhalten der lamellaren PST-Substruktur mit Hilfe von periodischen Einheitszellen zu beschreiben (Abschnitt 3.3).

Auf der dritten Längenskala wird schließlich mit Hilfe der periodischen Einheitszellen das Verhalten von Poly-PST-Kristallen bzw. von komplexen PST-Strukturen beschrieben. Hierfür wird die FE²-Methode (Abschnitt 3.4) angewendet, bei der die periodischen Einheitszellen als Untermodelle in jeden Integrationspunkt eines übergeordneten FE-Modells implementiert werden.

Die Ergebnisse aus der Poly-PST-Modellierung können in entsprechend homogenisierter Form auf komplexe Bauteilstrukturen übertragen werden.

3.1 Kristallplastizität

Das konstitutive Verhalten, das aus der Versetzungsgleitung bzw. der Zwillingsbildung resultiert, wird kontinuumsmechanisch mit Hilfe einer benutzerdefinierten ABAQUS Materialroutine

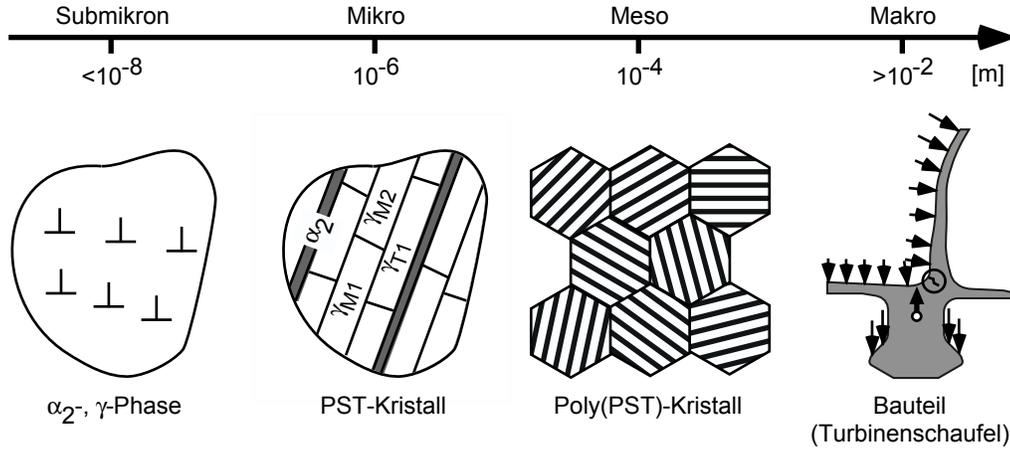


Bild 3.1: Verschiedene Längenskalen bei der mikromechanischen Modellierung von lamellarem TiAl.

(UMAT) für Kristallplastizität beschrieben. Diese UMAT wurde ursprünglich von Huang [52] entwickelt und von Lin [53] für die Anwendung auf α_2 und γ entsprechend modifiziert.

3.1.1 Kinematik der Kristallplastizität

Die verwendete UMAT basiert auf einem von Asaro [54] vorgeschlagenen Ansatz zur Beschreibung der plastischen Verformung von Einkristallen durch das Ableiten von Versetzungen nach dem Schmid'schen Schubspannungsgesetz. Die Grundlage für die Beschreibung bildet die multiplikative Zerlegung des Verformungsgradienten \mathbf{F} in einen plastischen Anteil \mathbf{F}_p und einen nicht-plastischen Anteil \mathbf{F}^* , mit dem sowohl die Rotation als auch die elastische Verzerrung des Volumenelementes beschrieben wird, Bild 3.2:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \mathbf{F}_p \quad (3.1)$$

Aus dem plastischen Anteil \mathbf{F}_p ergeben sich die Verformungsbeiträge $\gamma^{(\eta)}$ der unterschiedlichen Gleitsysteme η . Aus dem Anteil \mathbf{F}^* und den elastischen Konstanten ergeben sich die Schmid'schen Schubspannungen $\tau^{(\eta)}$. Die Herleitung von $\gamma^{(\eta)}$ und $\tau^{(\eta)}$ bzw. deren Zeitableitungen soll hier aus Platzgründen nicht wiederholt werden, kann aber z.B. in den Arbeiten von Asaro [54] und Huang [52] gefunden werden.

3.1.2 Konstitutivgesetz

Für das Konstitutivgesetz müssen die beiden Größen $\gamma^{(\eta)}$ und $\tau^{(\eta)}$ miteinander gekoppelt werden. Hierzu dient ein ratenabhängiger, viskoplastischer Ansatz:

$$\frac{\dot{\gamma}^{(\eta)}}{\dot{\gamma}_0} = \left| \frac{\tau^{(\eta)}}{g^{(\eta)}} \right|^{m-1} \left(\frac{\tau^{(\eta)}}{g^{(\eta)}} \right). \quad (3.2)$$

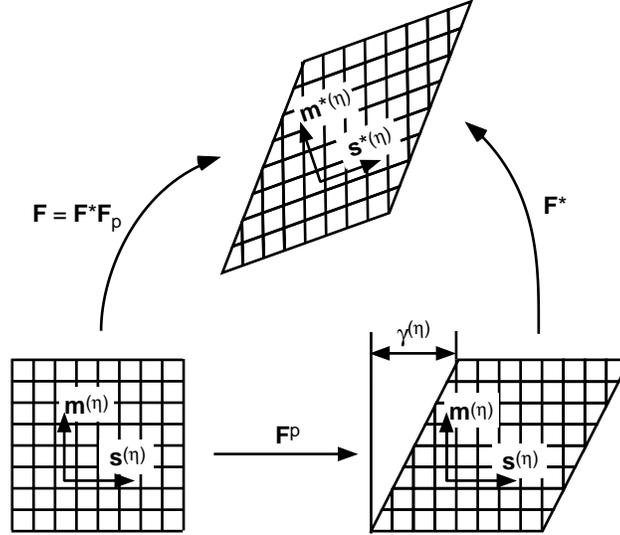


Bild 3.2: Multiplikative Zerlegung des Verformungsgradienten \mathbf{F} .

Hierin ist $\dot{\gamma}_0$ eine Referenzdehnrates, $g^{(\eta)}$ die momentane Festigkeit von η und m der Spannungsexponent. Für genügend große Werte von m wird Gl. (3.2) quasi dehnratenunabhängig.

3.1.3 Verfestigung

Die anfängliche Festigkeit der Gleitsysteme wird durch $g_0^{(\eta)}$ beschrieben. Für das anschließende Verfestigungsverhalten der Gleitsysteme wird die folgende lineare Evolutionsgleichung verwendet:

$$\dot{g}^{(\eta)} = h_0^{(\eta)} \sum_{\theta} q_{\eta\theta} |\dot{\gamma}^{(\theta)}|. \quad (3.3)$$

Hierin ist $h_0^{(\eta)}$ der lineare Verfestigungsmodul und $q_{\eta\theta}$ die Verfestigungsmatrix. Mit $q_{\eta\theta}$ wird die unterschiedliche Wirkung bei Selbstverfestigung ($\eta = \theta$) und Fremdverfestigung ($\eta \neq \theta$) der Gleitsysteme beschrieben. Experimentell werden je nach Werkstoff für $q_{\eta\theta}$ Werte zwischen 1.0 und 1.4 gefunden, z.B. [54]. Für die α_2 - und γ -Gleitsysteme wurden bisher noch keine Werte veröffentlicht. In dieser Arbeit werden die Unterschiede zwischen der Selbst- und Fremdverfestigung vernachlässigt:

$$q_{\eta\theta} = 1.0 \quad \text{für alle } \eta, \theta. \quad (3.4)$$

3.1.4 Zwillingsbildung

Die mechanische Zwillingsbildung resultiert aus dem kollektiven Abgleiten von unvollständigen Versetzungen (Partialversetzungen) [55]. Das kollektive Abgleiten der Partialversetzungen ist, im Gegensatz zum gewöhnlichen Versetzungsgleiten, unidirektional, d.h. es ist nur in die Zwillingsrichtung, nicht aber in die Gegenrichtung möglich.

Tabelle 3.1: g_0 -Werte für die γ -Gleitsysteme.

Klassifikation	longitudinal	gemischt	transversal
Einfach	g_0^{long}	g_0^{gem}	g_0^{trans}
Super	$Q_{\text{SE}} g_0^{\text{long}}$	$Q_{\text{SE}} g_0^{\text{gem}}$	$Q_{\text{SE}} g_0^{\text{trans}}$
Zwilling	g_0^{long}	g_0^{gem}	g_0^{trans}

In der UMAT wird die mechanische Zwillingsbildung prinzipiell genauso beschrieben wie die Versetzungsbewegung. Die Unidirektionalität der Zwillingsbildung wird nur über das Verfestigungsverhalten erzwungen. Indem die Verfestigung der Zwillingssysteme $\dot{g}_{\text{Zwil}}^{(\eta)}$ für Spannungen $\tau^{(\eta)}$, die der Zwillingsrichtung entgegengerichtet sind, in einer Fallunterscheidung (siehe Gl. (3.5)) auf unendlich hohe Werte gesetzt, wird die Gleiten von Zwillingsversetzungen für diese Richtung wirksam unterdrückt.

$$\dot{g}_{\text{Zwil}}^{(\eta)} \begin{cases} = \dot{g}^{(\eta)} & \text{für } \tau^{(\eta)} \geq 0, \\ \rightarrow \infty & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.5)$$

Die Bildung von Verformungszwillingen hat in realen Gefügen eine Reorientierung des Kristallgitters und somit eine Änderung der Schmid-Faktoren zur Folge. Die Reorientierung des Kristallgitters wird in dieser Arbeit vernachlässigt.

3.1.5 Parameter für die Kristallplastizität

Wie bereits ausgeführt, können nach der kristallographischen und morphologischen Klassifikation 8 unterschiedliche γ -Gleitsysteme identifiziert werden, siehe Tab. 2.1. Zur vollständigen Charakterisierung dieser Gleitsysteme wären 8 (g_0, h_0) -Wertepaare nötig. Zu deren Bestimmung bräuchte man 16 unabhängige experimentelle Kennwerte. Da so viele unabhängige experimentelle Kennwerte nicht zur Verfügung stehen, müssen weitere Vereinfachungen über die Festigkeitsparameter der Gleitsysteme getroffen werden.

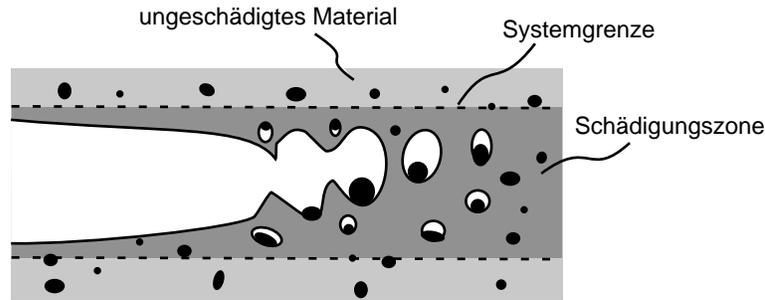
Aus den experimentellen Untersuchungen von Kishida *et al.* [36] und Uhlenhut [37] kann geschlossen werden, dass bei Raumtemperatur die Einfach- und Zwillingsgleitsysteme ähnliche Festigkeiten haben, während die Supergleitsysteme etwas fester sind. Von Lebensohn *et al.* wurde gezeigt, dass zur Beschreibung der Anisotropie von PST-Kristallen die morphologische Unterscheidung der Gleitsysteme wichtiger ist als die kristallographische Unterscheidung.

Vor diesem Hintergrund wurden die Festigkeitsparameter der γ -Gleitsysteme morphologisch unterschieden, wobei als weiterer Parameter das Festigkeitsverhältnis der Super- zu den Einfachgleitsystemen $Q_{\text{SE}} = g_0^{\text{super}}/g_0^{\text{einf}}$ berücksichtigt wurde. Für die Zwillingsgleitsysteme wurde angenommen, dass sie genauso fest sind wie die Einfachgleitsysteme ($g_0^{\text{zwil}} = g_0^{\text{einf}}$). Die g_0 -Werte werden für alle Gleitsysteme in Tab. 3.1 aufgeführt.

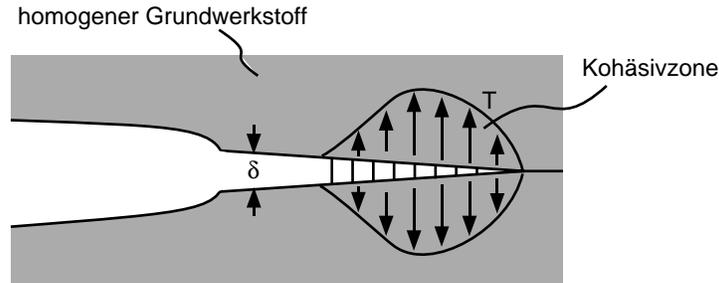
Die Verfestigung wurde nur rein morphologisch unterschieden, siehe Tab. 3.2.

Tabelle 3.2: h_0 -Werte für die γ -Gleitsysteme.

Klassifikation	longitudinal	gemischt	transversal
Einfach	h_0^{long}	h_0^{gem}	h_0^{trans}
Super	h_0^{long}	h_0^{gem}	h_0^{trans}
Zwilling	h_0^{long}	h_0^{gem}	h_0^{trans}



(a)



(b)

Bild 3.3: Kohäsivmodell: (a) Schädigungsprozess an der Risspitze (exemplarisch für duktilen Risswachstum); (b) Idealisierung durch das Kohäsivmodell.

3.2 Kohäsivmodell

Das Kohäsivmodell [56–58] ist ein phänomenologisches Schädigungsmodell. Es basiert auf der Systemabgrenzung des Bereiches, in dem Schädigung angenommen wird, vom ungeschädigten Grundwerkstoff. Durch die Systemabgrenzung werden an der Systemgrenze die vormals inneren Spannungen zu äußeren Kohäsivspannungen T , siehe Bild 3.3. Die grundlegende Annahme ist, dass sich beim Risswachstum an der Risspitze ein stationärer Zustand einstellt, so dass jedes Volumenelement, durch das der Riss läuft, die gleiche Beanspruchungsgeschichte erleidet. Die Beanspruchungsgeschichte wird dabei durch das Kohäsivgesetz, d.h. durch einen für den Bruchmechanismus typischen funktionalen Zusammenhang zwischen der Kohäsivspannung T und der Öffnung der Kohäsivzone δ (Verschiebung der Systemgrenzen) charakterisiert:

$$\frac{T}{T_0} = \chi(\delta/\delta_0) \quad (3.6)$$

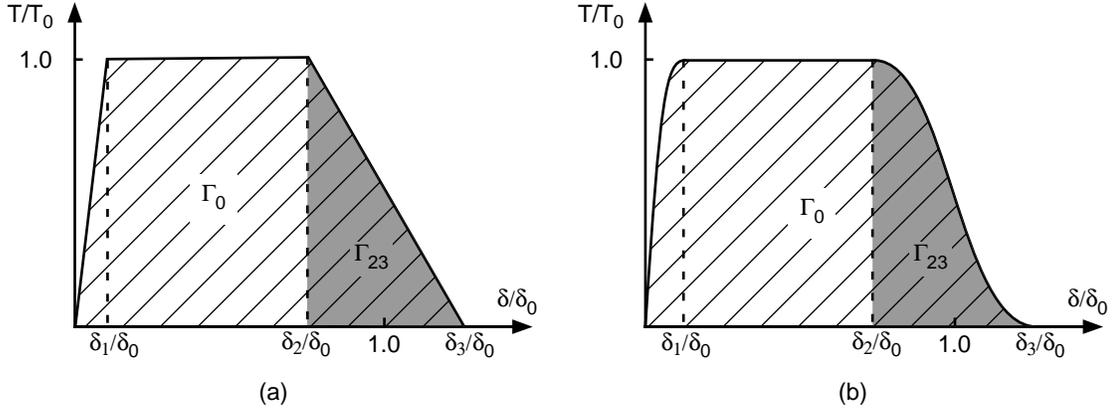


Bild 3.4: Trapezförmiges (a) und stückweise polynomiales (b) Kohäsivgesetz.

Für die Funktion χ werden in der Literatur je nach Bruchmechanismus und Werkstoffklasse sehr viele unterschiedliche Ansätze gemacht, siehe z.B. [58, 59]. Wenn χ jedoch einmal festgelegt wurde, sind die wesentlichen Parameter die beiden Skalierungsgrößen T_0 und δ_0 bzw. als abgeleitete Größe die Kohäsivenergie Γ_0 :

$$\Gamma_0 = T_0 \delta_0 \int_0^\infty \chi(\delta/\delta_0) d(\delta/\delta_0). \quad (3.7)$$

In dieser Arbeit werden zwei unterschiedliche Formulierungen (und Umsetzungen) des Kohäsivmodells verwendet. Für die mehrskaligen FE²-Simulationen wird das Kohäsivmodell mit Hilfe von nichtlinearen Federelementen mit einer trapezförmigen Federkennlinie umgesetzt. Diese Umsetzung erlaubt eine große Modellierungsfreiheit, ist jedoch für die standardmäßigen kontinuumsmechanischen Modellierungen nicht geeignet. Hierfür wird daher das von Scheider entwickelte Kohäsivmodell [59] verwendet. Dieses Modell basiert auf einem stückweise polynomiales Kohäsivgesetz und wird mit Hilfe von benutzerdefinierten ABAQUS User-Elementen (UEL) [59] implementiert.

Das für die FE² Modellierungen verwendete trapezförmige Kohäsivgesetz wird folgendermaßen beschrieben:

$$\frac{T}{T_0} = \begin{cases} (\delta/\delta_1) & \text{für } 0 < \delta \leq \delta_1 \\ 1 & \text{für } \delta_1 < \delta \leq \delta_2 \\ 1 - (\delta - \delta_2)/(\delta_3 - \delta_2) & \text{für } \delta_2 < \delta \leq \delta_3 \end{cases} \quad (3.8)$$

In Gl. (3.8) sind δ_1 , δ_2 und δ_3 Gestaltparameter; δ_1 beschreibt die elastische Nachgiebigkeit der Kohäsivzone. Im Allgemeinen muss $\delta_1 \ll \delta_2, \delta_3$ angenommen werden. Der Bereich zwischen δ_2 und δ_3 beschreibt die Entfestigung beim endgültigen Trennungsvorgang.

Mit der Vereinfachung $\delta_1 \ll \delta_2, \delta_3$ ergibt sich mit $\delta_0 = (\delta_2 + \delta_3)/2$ die Kohäsivenergie zu:

$$\Gamma_0 = T_0 \delta_0. \quad (3.9)$$

Neben T_0 , Γ_0 wird für die Charakterisierung des Kohäsivgesetzes noch die Kenngröße Γ_{23} verwendet (siehe Bild 3.4), die den Anteil von Γ_0 bezeichnet, der bei der Entfestigung dissipiert wird.

$$\Gamma_{23} = \frac{T_0(\delta_3 - \delta_2)}{2}. \quad (3.10)$$

Je nach dem Verhältnis von Γ_{23}/Γ_0 können bei dem trapezförmigen Kohäsivgesetz zwei Grenzfälle unterscheiden werden: Mit $\Gamma_{23} \ll \Gamma_0$ ergibt sich ein nahezu rechteckförmiges Kohäsivgesetz, mit $\Gamma_{23} \approx \Gamma_0$ ein nahezu dreieckförmiges.

Neben der mikromechanischen Bedeutung ist Γ_{23} auch für die numerische Stabilität von Rissfortschrittsimulationen wichtig. Wenn Γ_{23} kleiner ist, als die beim Rissfortschritt frei werdende elastische Energie, tritt das sogenannte Rückfederproblem auf. Das Rückfederproblem führt bei quasi-statischen Simulationen im Allgemeinen zu Konvergenzschwierigkeiten und u.U. auch zum Abbruch der Rechnung. Mikromechanisch kann das Rückfederproblem als instabiles Risswachstum interpretiert werden.

Das für die konventionellen Modellierungen verwendete stückweise polynomiale Kohäsivgesetz hat eine dem trapezförmigen Gesetz sehr ähnliche Gestalt. Nur werden für den verfestigenden und den entfestigende Bereich nicht durch lineare sondern durch quadratische bzw. kubische Ansätze beschrieben:

$$\frac{T}{T_0} = \begin{cases} 1 - (\delta/\delta_1)^2 & \text{für } 0 < \delta \leq \delta_1 \\ 1 & \text{für } \delta_1 < \delta \leq \delta_2 \\ 1 - [(\delta - \delta_2)/(\delta_3 - \delta_2)]^3 & \text{für } \delta_2 < \delta \leq \delta_3 \end{cases} \quad (3.11)$$

Für das durch Gl. (3.11) beschriebene Kohäsivgesetz ergeben sich gleichen Definitionen für δ_0 , Γ_0 und Γ_{23} wie für das trapezförmige Gesetz.

3.3 Periodische Einheitszelle

Zur Beschreibung des Verformungs- und Bruchverhaltens der lamellaren Substruktur werden periodische Einheitszellen verwendet. Die lamellare Substruktur hat zwei unabhängige Längen: den Lamellenabstand D_L und die Domänengröße D_D . Aus kontinuumsmechanischer Sicht ist das Verformungsverhalten von den absoluten Längen unabhängig, kann aber vom Flachheitsgrad $\lambda = D_D/D_L$ beeinflusst werden. Um dem Rechnung zu tragen, wurden zwei unterschiedliche Einheitszellen für große und kleine Flachheitsgrade entworfen, die durch eine dritte Einheitszelle mit homogenisierter Domänenstruktur ergänzt werden, Bild 3.5.

Bei allen periodischen Einheitszellen wird angenommen, dass (i) die Verformungszustände in den Einzeldomänen homogen sind und dass (ii) in einer Einheitszelle gleiche Domänen unabhängig

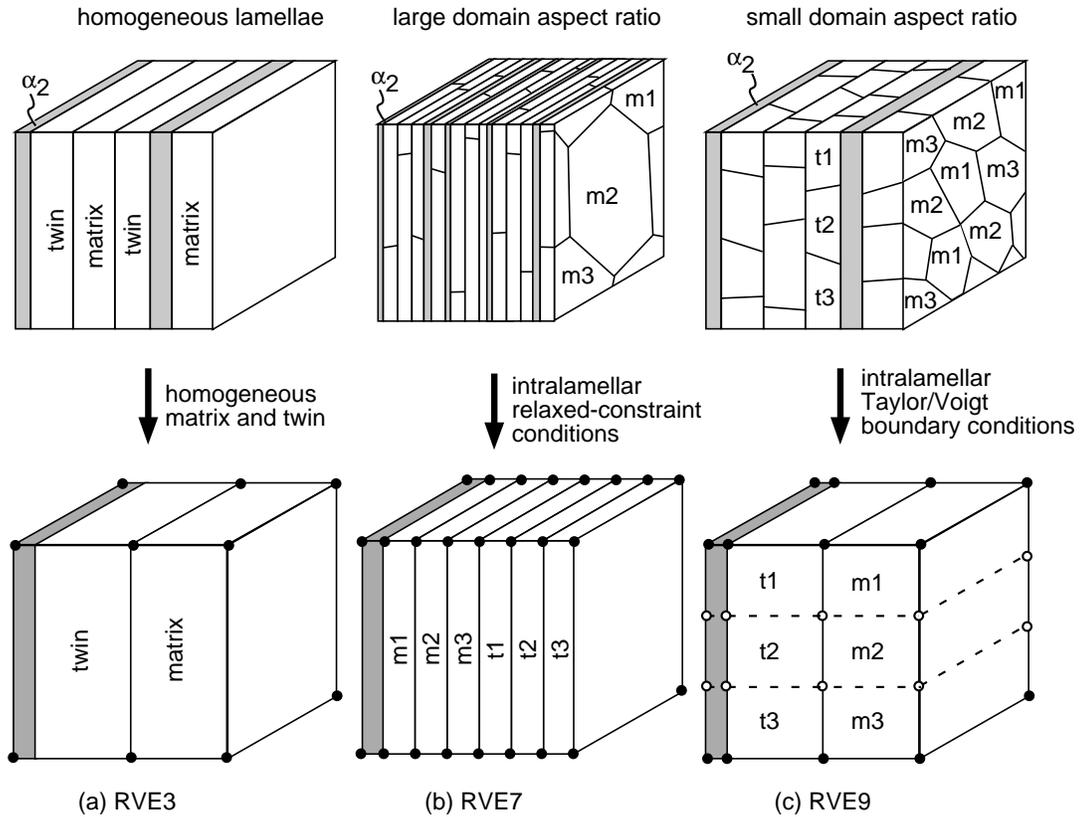


Bild 3.5: Unterschiedliche periodische Einheitszellen RVE3, RVE7 und RVE9.

von ihrer Nachbarschaft stets die gleichen Verformungszustände haben. Durch diese beiden Annahmen vereinfachen sich die Einheitszellen erheblich; außerdem ergeben sich somit ähnliche Randbedingungen wie bei dem RC-Modell von Lebensohn *et al.* [28].

3.3.1 Unterschiedliche Einheitszellen

Die homogenisierte Einheitszelle RVE3 besteht aus 3 Lamellen, wobei jede Lamelle durch ein finites Element repräsentiert wird, siehe Bild 3.5(a). Durch die lamellare Anordnung der Elemente werden die von Lebensohn *et al.* [28] definierten RC-Bedingungen automatisch erfüllt. Die 3 unterschiedlichen in einer γ -Lamelle enthaltenen Orientierungsvarianten werden in der Einheitszelle homogenisiert. Aus diesem Grund ist die Anwendung der Einheitszelle nur dann sinnvoll, wenn die Gleitsysteme ebenfalls homogenisiert werden. Die Homogenisierung erfordert dabei, dass alle Verformungsmoden vernachlässigt werden müssen, die keine dreifältige Symmetrie aufweisen. Dies betrifft die Zwillingsversetzungen und etwaige Unterschiede zwischen den Einfach- und Superversetzungen. Insofern ist bei der Einheitszelle RVE3 nur die Anwendung von rein morphologischen Parametersätzen ohne Berücksichtigung von Zwillingsversetzungen sinnvoll.

Im Grenzfall $\lambda \rightarrow \infty$ verschwindet die Domänenstruktur der γ -Lamellen, und jede γ -Domäne erscheint als individuelle Einzellamelle. In diesem Fall erfüllt auch die intralamellare Verfor-

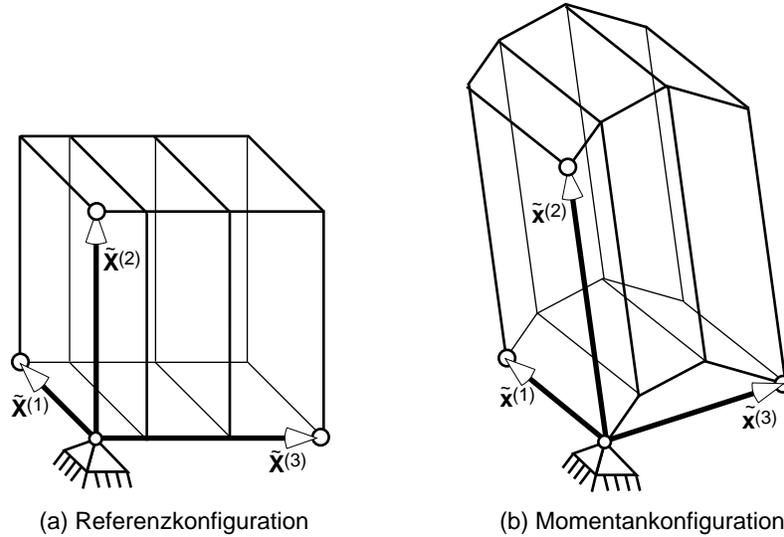


Bild 3.6: Periodische Randbedingungen

mung die RC-Bedingungen, sodass die lamellare Substruktur durch eine Einheitszelle aus 7 Einzellamellen repräsentiert werden kann. Das FE-Modell zu dieser Einheitszelle (RVE7) besteht entsprechend aus 7 parallel angeordneten finiten Elementen, siehe Bild 3.5(b).

Im anderen Grenzfall, wenn λ hinreichend klein ist, ist die Verformung in den 3 unterschiedlichen γ -Domänen in einer γ -Lamelle annähernd gleich, sodass die intralamellare Verformung durch die Taylor/Voigt-Randbedingungen beschrieben werden kann. Das FE-Modell für diesen Fall (RVE9) besteht aus 3 parallelen Lamellen mit jeweils 3 Elementen, die über die Taylor/Voigt-Randbedingungen miteinander gekoppelt sind, siehe Bild 3.5(c).

Nach den Grenzlasttheoremen der Plastizitätstheorie [60] wird für die Fließlast von Strukturen durch ein statisch zulässiges Spannungsfeld stets eine untere Grenze und durch ein kinematisch zulässiges Verschiebungsfeld eine obere Grenze definiert. Für die intralamellare Verformung wird hiernach durch das Modell RVE7 eine untere und durch RVE9 eine obere Grenze markiert. Das Verhalten von realen PST-Kristallen sollte daher zwischen diesen beiden Modellen liegen.

3.3.2 Periodische Randbedingungen

Periodische Randbedingungen erzwingen, dass sich die drei gegenüberliegenden Grenzflächen einer Einheitszelle zu jedem Zeitpunkt der Verformung durch eine einfache Translation kongruent ineinander überführen lassen. Die Vektoren $\tilde{\mathbf{X}}^{(i)}$ bzw. $\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}$, die diese Translation beschreiben, spannen die periodische Einheitszelle in ihrer Referenz- und Momentankonfiguration auf, siehe Bild 3.6.

In der klassischen Kontinuumsmechanik wird die kleinste sich homogen verformende materielle Einheit (Materialpunkt) im Allgemeinen durch ein infinitesimal kleines Parallelepiped re-

präsentiert. Alle kontinuumsmechanischen Verformungsgrößen ergeben sich aus den geometrischen Verhältnissen dieses Parallelepipeds. Wie man unmittelbar sieht, spannen die Vektoren $\tilde{\mathbf{X}}^{(i)}$ bzw. $\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}$ ebenfalls ein Parallelepiped auf. Periodische Einheitszellen können daher als mesoskopische „Materialpunkte“ interpretiert werden.

Die Beschreibung der Verformung von periodischen Einheitszellen erfolgt analog zur klassischen Kontinuumsmechanik. Die Vektoren $\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}$ berechnen sich mit Hilfe des mesoskopischen Deformationsgradienten $\tilde{\mathbf{F}}$:

$$\tilde{\mathbf{x}}^{(i)} = \tilde{\mathbf{F}}\tilde{\mathbf{X}}^{(i)} \quad (3.12)$$

Aus der Differenz zwischen $\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}$ und $\tilde{\mathbf{X}}^{(i)}$ ergeben sich die Verschiebungsvektoren $\tilde{\mathbf{u}}^{(i)}$:

$$\tilde{\mathbf{u}}^{(i)} = \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \tilde{\mathbf{X}}^{(i)}. \quad (3.13)$$

Die Verschiebungen $\tilde{\mathbf{u}}^{(i)}$ werden in den periodischen Einheitszellen mit Hilfe von 3 Referenzknoten angesteuert.

Die Vektoren $\tilde{\mathbf{u}}^{(i)}$ können auch mit Hilfe des mesoskopischen Verschiebungsgradienten $\tilde{\mathbf{J}} = \partial\tilde{\mathbf{u}}/\partial\tilde{\mathbf{X}}$ ausgedrückt werden:

$$\tilde{\mathbf{u}}^{(i)} = \tilde{\mathbf{J}}\tilde{\mathbf{X}}^{(i)}. \quad (3.14)$$

Im Sonderfall, dass die periodischen Einheitszellen genau das Volumen des Einheitswürfels ausfüllen, bilden die Vektoren $\tilde{\mathbf{X}}^{(i)}$ ein karthesisches Koordinatensystem. In diesem Fall stimmen die Komponenten von $\tilde{\mathbf{J}}$ mit den Komponenten von $\tilde{\mathbf{u}}^{(i)}$ überein:

$$\tilde{J}_{ij} = \tilde{u}_j^{(i)} \quad (3.15)$$

Für den genannten Sonderfall ermöglicht die tensorielle Beschreibung, dass globale Konfigurationsänderungen in einer beliebig orientierten Einheitszelle vorgenommen werden können. Hierfür wird der globale Verschiebungsgradient $\tilde{\mathbf{J}}$ durch eine Rotationsmatrix \mathbf{R} in das lokale Koordinatensystem der Einheitszelle transformiert:

$$\tilde{\mathbf{J}}_{\text{lokal}} = \mathbf{R}\tilde{\mathbf{J}}\mathbf{R}^T. \quad (3.16)$$

Gl. (3.16) ermöglicht, mit den periodischen Einheitszellen das Verhalten von beliebig orientierten PST-Kristallen zu simulieren.

3.3.3 Implementierung der Kohäsivelemente

Das Kohäsivmodell wurde in ABAQUS mit Hilfe von Feder-Elementen mit einer dem Kohäsivgesetz entsprechenden nicht-linearen Federkennlinie umgesetzt. Zur Implementierung des Kohäsivmodells wurden die Feder-Elemente mit den Referenzknoten der periodischen Einheitszelle gekoppelt, siehe Bild 3.7. Auf diese Weise werden nur die Normalkomponenten von $\tilde{u}_i^{(i)}$ mit Kohäsivelementen belegt. Ein vollständiges Versagen der Einheitszelle ist bei dieser Implementierung von Kohäsivelementen nur bedingt möglich: Wenn alle Normalkomponenten vollständig geschädigt sind, können von der Einheitszelle noch Scherlasten übertragen werden.

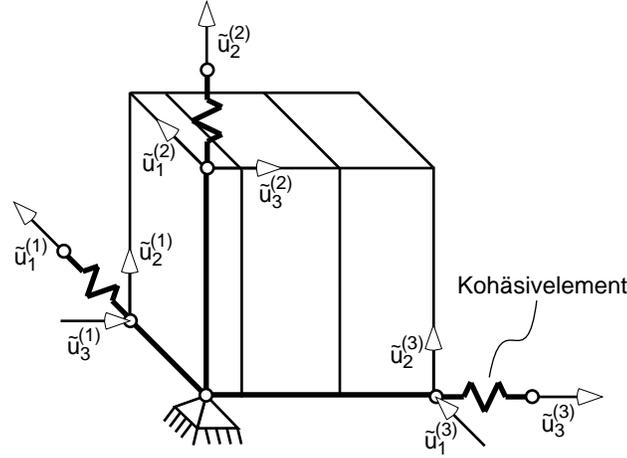


Bild 3.7: Implementierung der Kohäsivelemente in die periodischen Einheitszellen.

3.4 Zweiskalige FE²-Simulationen

Mit periodischen Einheitszellen kann mesoskopisch jede beliebige Verformung beschrieben werden. Periodische Einheitszellen können daher anstelle eines Materialgesetzes als Untermodelle in die einzelnen Integrationspunkte eines übergeordneten FE-Modells implementiert werden (FE²-Methode).

Ein FE-Element verformt sich im Allgemeinen nicht periodisch. Um eine periodische Einheitszelle in ein FE-Element implementieren zu können, muss die Verformung des FE-Elementes in einen periodischen und einen nicht-periodischen Anteil zerlegt werden, siehe Bild 3.8.

Der periodische Anteil der Verformung des FE-Elementes kann durch drei Verschiebungen $\bar{\mathbf{u}}^{(i)}$ beschrieben werden. Die Vektoren $\bar{\mathbf{u}}^{(i)}$ ergeben sich aus den Verschiebungen der 3 gegenüberliegenden Flächenschwerpunkte und können aus den Knotenpunktverschiebungen \mathbf{u}^k berechnet werden, siehe Bild 3.9(a):

$$\bar{\mathbf{u}}^{(1)} = (\mathbf{u}^1 + \mathbf{u}^5 + \mathbf{u}^6 + \mathbf{u}_i^2)/4 - (\mathbf{u}^4 + \mathbf{u}^8 + \mathbf{u}^7 + \mathbf{u}^3)/4 \quad (3.17)$$

$$\bar{\mathbf{u}}^{(2)} = (\mathbf{u}^5 + \mathbf{u}^6 + \mathbf{u}^7 + \mathbf{u}_i^8)/4 - (\mathbf{u}^1 + \mathbf{u}^2 + \mathbf{u}^3 + \mathbf{u}^4)/4 \quad (3.18)$$

$$\bar{\mathbf{u}}^{(3)} = (\mathbf{u}^2 + \mathbf{u}^3 + \mathbf{u}^7 + \mathbf{u}_i^8)/4 - (\mathbf{u}^1 + \mathbf{u}^4 + \mathbf{u}^8 + \mathbf{u}^5)/4 \quad (3.19)$$

Zur Implementierung werden die Komponenten $\bar{u}_j^{(i)}$ und $\tilde{u}_j^{(i)}$ miteinander gekoppelt:

$$\tilde{u}_j^{(i)} = \bar{u}_j^{(i)}. \quad (3.20)$$

Der nicht-periodische Anteil der Verformung wird dabei vernachlässigt.

Durch Gl.(3.17–3.19) wird ein linearer Verschiebungsansatz beschrieben. Ähnlich wie bei der klassischen FE-Methode, können sich bei der FE²-Methode bei Verwendung eines linearen Verschiebungsansatzes sehr leicht Null-Energie-Moden einstellen, in denen das FE-Element rein nicht-periodisch verformt wird, so dass alle Verschiebungen $\bar{\mathbf{u}}^{(i)} = \mathbf{0}$ sind.

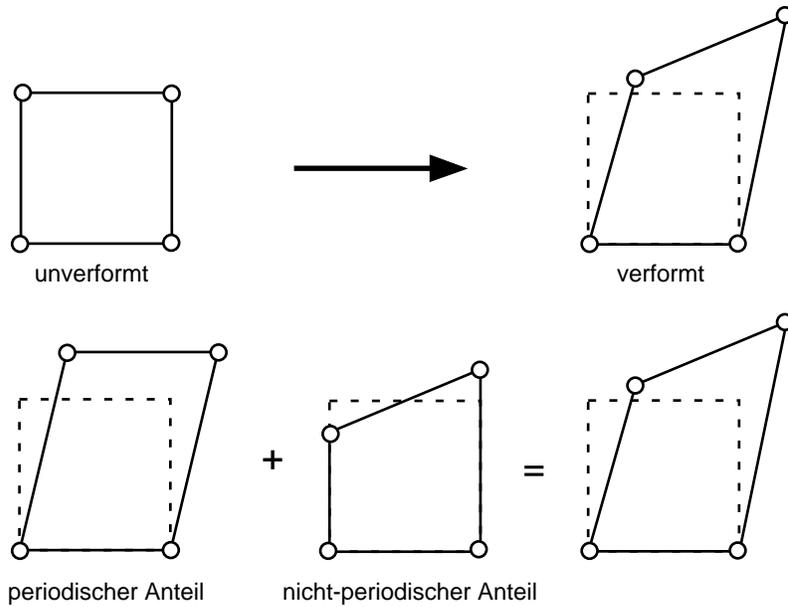


Bild 3.8: Aufteilung der Verformung eines FE-Elementes in einen periodischen und einen nicht-periodischen Anteil.

Die Null-Energie-Moden können weitgehend unterdrückt werden, wenn der lineare Verschiebungsansatz in einem 3D-Element nicht an einer, sondern an 8 Stützstellen (Integrationspunkten) ausgewertet wird. Für ein 2D-Element wird die Unterdrückung der Null-Energie-Moden in Bild 3.10 illustriert. Entsprechend den 8 Stützstellen müssen 8 periodische Einheitszellen in ein übergeordnetes 3D-FE-Element implementiert. Hierfür wird das FE-Element gleichmäßig in 8 Unterelemente aufgeteilt, wofür zusätzliche Knoten eingeführt werden, deren Verschiebungen gemäß dem linearen Verschiebungsansatz aus den Knotenpunktverschiebungen der Originalknoten berechnet werden. Für die 8 Unterelemente werden die Verschiebungsvektoren $\bar{\mathbf{u}}^{(i)}$ gemäß Gl.(3.17–3.19) berechnet.

Um sicherzustellen, dass bei der FE^2 -Methode die Knotenkräfte richtig übermittelt werden, muss das Volumen der zu implementierenden Einheitszelle genau mit dem Volumen des übergeordneten 3D-FE-Elementes übereinstimmen, welches dem Integrationspunkt, in den die Einheitszelle implementiert werden soll, zugeordnet ist. Wenn das übergeordnete FE-Element einen Integrationspunkt hat, muss die Einheitszelle also genau das Elementvolumen ausfüllen, wenn das Element 8 Integrationspunkte hat, müssen die zu implementierenden Einheitszellen jeweils $1/8$ des Elementvolumens ausfüllen.

Außer in dieser Arbeit sind in der neueren Literatur von Feyel und Chaboche [61,62] sowie von Smit *et al.* [63] ähnliche Ansätze vorgeschlagen worden. Die Bezeichnung FE^2 wurde von Feyel eingeführt.

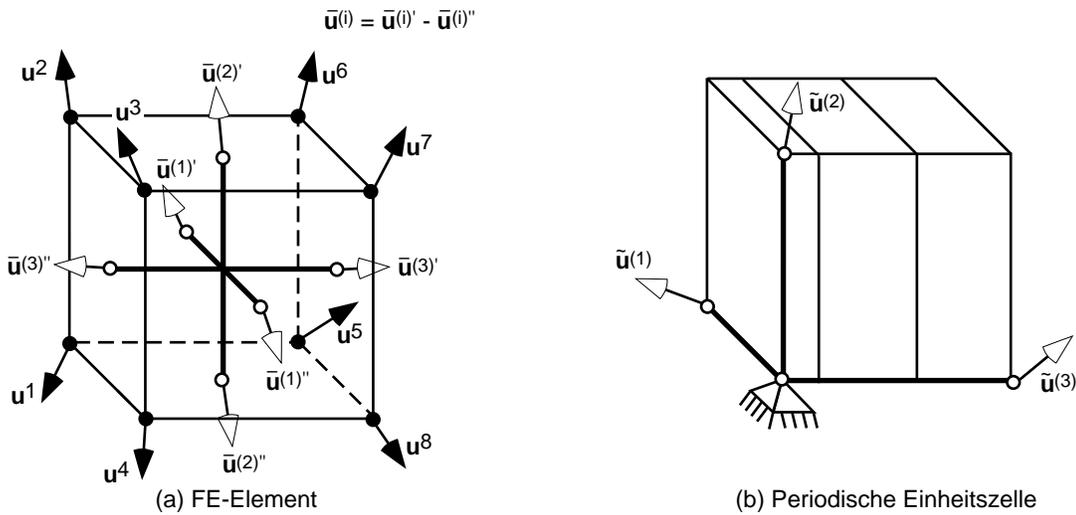


Bild 3.9: Implementierung von periodischen Einheitszellen in ein finites Element.

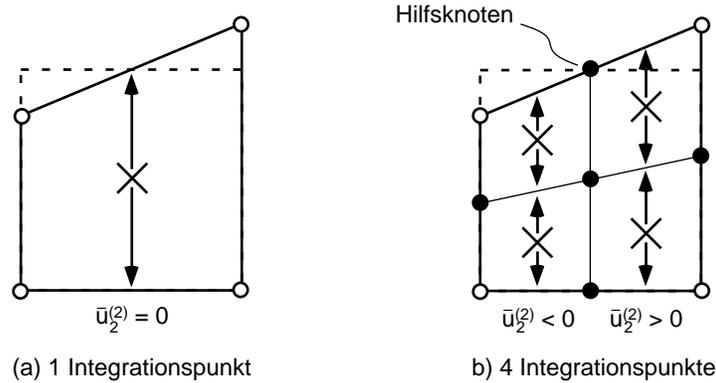


Bild 3.10: Null-Energie-Mode bei Verwendung von einem Integrationspunkt, (b) Unterdrückung des Null-Energie-Modes durch Berücksichtigung von 4 Integrationspunkten.

3.4.1 Umsetzung der FE²-Methode

Bei der Umsetzung der FE²-Methode in ABAQUS (Version 5.8) wird eine konventionelle Eingabedatei (`model.inp`) in eine FE²-Eingabedatei (`model2.inp`) umgewandelt. Hierfür werden zahlreiche neue Knoten generiert, für jeden Integrationspunkt die Knoten und Elemente für eine periodische Einheitszelle implementiert und schliesslich die Referenzknoten der periodischen Einheitszellen mit den Knotenpunkten des Originalmodells verbunden, wobei die jeweilige Orientierung der periodischen Einheitszellen berücksichtigt wird. Um die FE²-Umsetzung zu automatisieren, wurden zwei Hilfsprogramme, `MK8SUBELS.x` und `RVE.x`, geschaffen, die im Folgenden kurz erläutert werden.

Das Programm `MK8SUBELS.x` liest die FE-Elemente von `model.inp` ein und teilt diese entsprechend den Integrationspunkten in jeweils 8 Unter-elemente. Ein vereinfachtes Flussdiagramm für das Programm ist in Bild 3.11 dargestellt. Um die Aufgabe zu erfüllen, werden die Knoten-

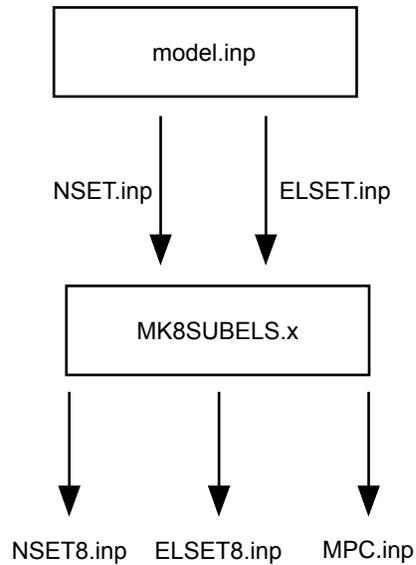


Bild 3.11: Vereinfachtes Flussdiagramm für das Programm MK8SUBELS.x.

(NSET.inp) und Elementinformation (ELSET.inp) getrennt aus der Datei model.inp eingelesen und verarbeitet. Die neuen Knoten- und Elementinformationen werden berechnet und in die Dateien NSET8.inp bzw. ELSET8.inp ausgegeben. Nach dem linearen Verschiebungsansatz werden für die Verschiebungen der neu geschaffenen Knoten Zwangsbedingungen in Abhängigkeit von den Originalknoten berechnet und als ABAQUS-Multi-point-constraints (MPC) in die Datei MPC.inp geschrieben.

Mit dem Programm RVE.x werden die für die Implementierung der periodischen Einheitszellen notwendigen Informationen generiert. Das vereinfachte Flussbild hierfür wird in Bild 3.12 gezeigt. Das Programm liest NSET8.inp und ELSET8.inp ein. In jedes FE-Element aus ELSET8.inp wird gemäß einer vordefinierten Maske RVE.template eine periodische Einheitszelle implementiert. Die Maske RVE.template enthält Platzhalter für die Knoten- und Elementinformation der Einheitszelle, die durch Daten aus NSET8.inp und ELSET8.inp ersetzt werden. Die Informationen über die periodischen Einheitszellen werden in die Datei RVE.inp geschrieben.

In ähnlicher Weise steht für die Orientierung der periodischen Einheitszellen gemäß Gl. (3.16) eine vordefinierte Maske L2G.template verwendet. L2G.template enthält die Zwangsbedingungen für die Verschiebungen der lokalen Referenzknoten in Abhängigkeit von globalen Referenzknoten. Die ABAQUS-Gleichungen (EQUATION) werden von dem Programm RVE.x aufgestellt und in die Datei L2G.inp geschrieben.

Für die Kopplung zwischen der periodischen Einheitszelle und dem umgebenden Element wird die Maske G2N.template verwendet. G2N.template enthält die Zwangsbedingungen für die Verschiebungen der globalen Referenzknoten in Abhängigkeit von den Elementknotenpunkten. Die ABAQUS-Gleichungen (EQUATION) werden von dem Programm RVE.x aufgestellt und in die Datei G2N.inp geschrieben.

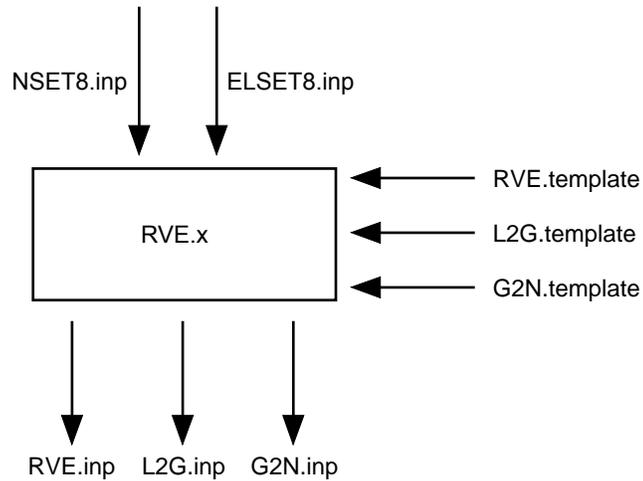


Bild 3.12: Flussdiagramm für das Programm RVE.x.

Tabelle 3.3: Datenstruktur der Modelle model.inp und model2.inp.

model.inp	model2.inp	Beschreibung
NSET.inp	NSET8.inp	Knoteninformation
ELSET.inp	ELSET.inp	Elementinformation
—	RVE.inp	Implementierung der Einheitszellen
—	L2G.inp	Orientierung der Einheitszellen
—	G2N.inp	Kopplung zum umgebenden Element
—	MPC.inp	Kopplung zu Originalknoten (NSET.inp)
—	UMAT.inp	Materialdaten für Kristallplastizität
LOAD.inp	LOAD.inp	Lastschritte

Die Informationen aus den Dateien NSET8.inp, ELSET.inp, RVE.inp, L2G.inp, G2N.inp, MPC.inp sowie die Materialdaten UMAT.inp und die Lastinformation LOAD.inp werden zu einer ABAQUS-Eingabedatei model2.inp zusammengeführt, siehe Tab. 3.3. Die Elementinformation ELSET.inp ist dabei für das zweiskalige FE-Modell nicht wesentlich, dient aber zur Visualisierung der Ergebnisse.

Kapitel 4

Experimentelle Untersuchungen

4.1 PST-Versuche

4.1.1 PST-Probenmaterial

Für die PST-Proben wurde ein PST-Probenstab im Schmelzzonenofen des Arbeitsbereiches Werkstoffphysik und -technologie an der Technischen Universität Hamburg-Harburg gezüchtet. Der PST-Kristall wurde im selben Ofen und unter den gleichen Bedingungen hergestellt wie das Probenmaterial von Uhlenhut [37]. Die chemische Zusammensetzung war Ti-49.3 mol% Al. Die Wachstumsgeschwindigkeit betrug 5 mm/h. Der gezüchtete PST-Kristall hatte einen Durchmesser von 9 mm und eine Länge von 68 mm. Die Lamellenebene war gegenüber der Stabachse um etwa 11° geneigt, siehe Bild 4.1.

Die Mikrostruktur des hergestellten PST-Materials ist in Bild 4.2 dargestellt. In den REM-Aufnahmen sind die α_2 -Lamellen als helle Streifen mit einem mittleren Abstand von etwa $30 \mu\text{m}$ zu erkennen. Zwischen den α_2 -Lamellen liegen jeweils mehrere γ -Lamellen. Der Lamellenabstand der γ -Lamellen liegt zwischen 2 und $10 \mu\text{m}$.

4.1.2 Druckversuche

Es wurden keine eigenen Druckversuche an PST-Kristallen durchgeführt. Die numerischen Simulationen werden mit den Druckversuchen, die Uhlenhut an PST-Kristallen mit der Zusammensetzung Ti-49.3 mol% Al durchgeführt hat [37], verglichen. Die Versuche waren für die Orientierungen $0, 10, 15, 45, 75, 85$ und 90° durchgeführt worden.

4.1.3 Biegeversuche

Für die PST-Biegeproben wurde der hergestellte PST-Kristall senkrecht zur Lamellenebene in 5 mm dicke Scheiben geschnitten. Aus den Scheiben wurden funkenerosiv die PST-Kerne für die

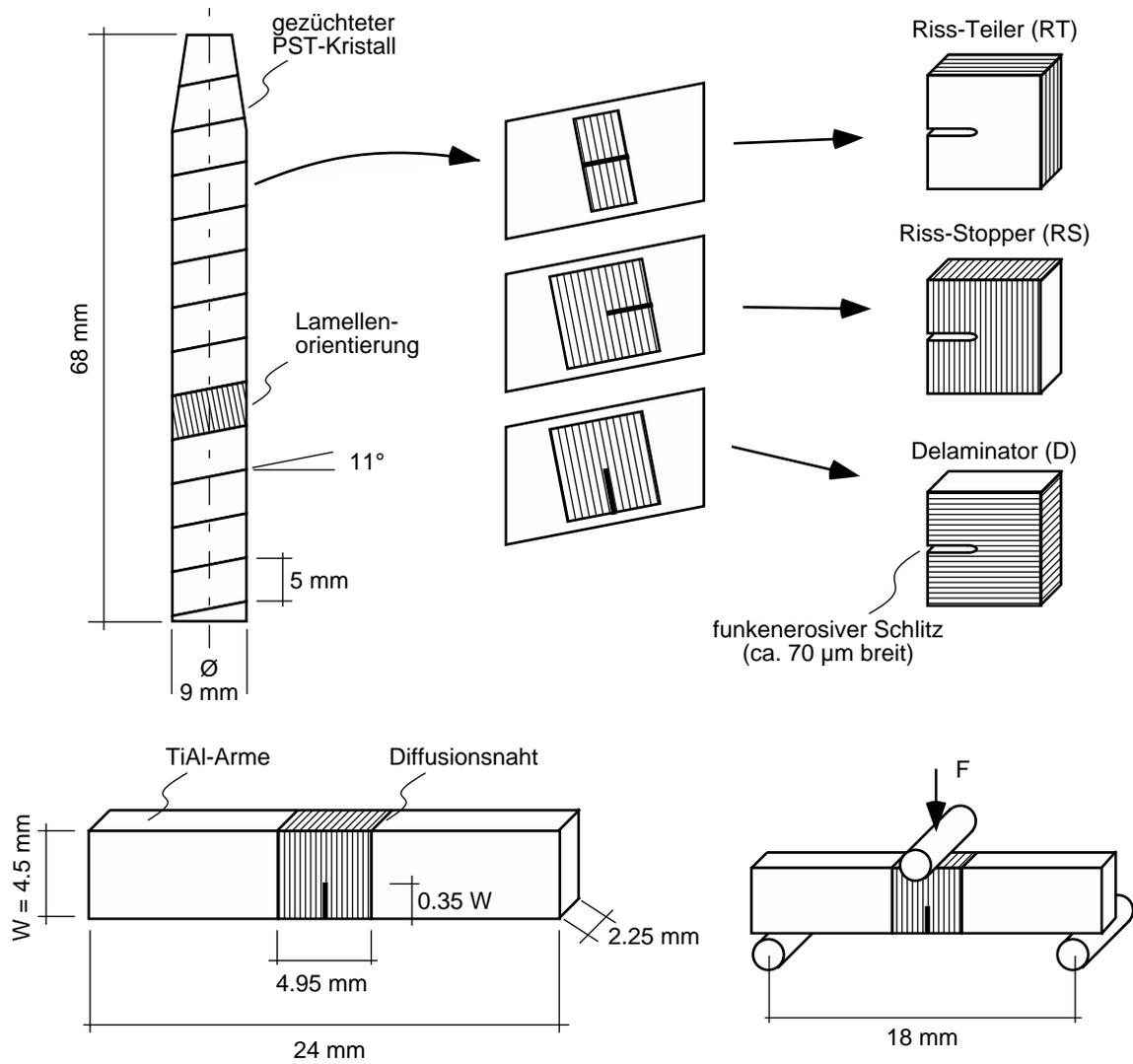


Bild 4.1: Fertigung und Geometrie der PST-Biegeproben.

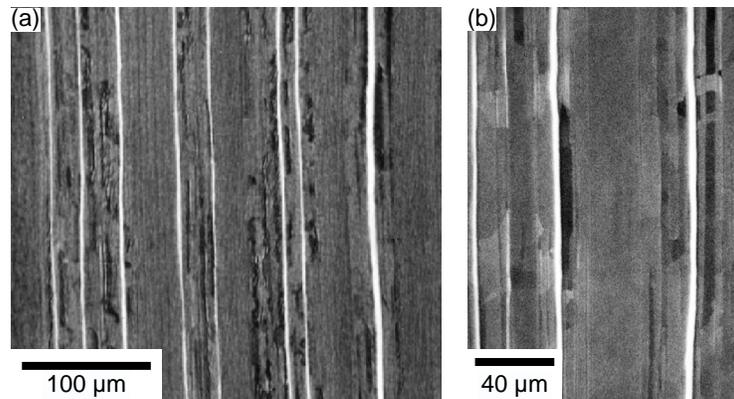


Bild 4.2: Mikrostruktur des hergestellten PST-Stabs in zwei verschiedenen Vergrößerungen (a) und (b). Die α_2 -Lamellen sind als helle Streifen zu erkennen.

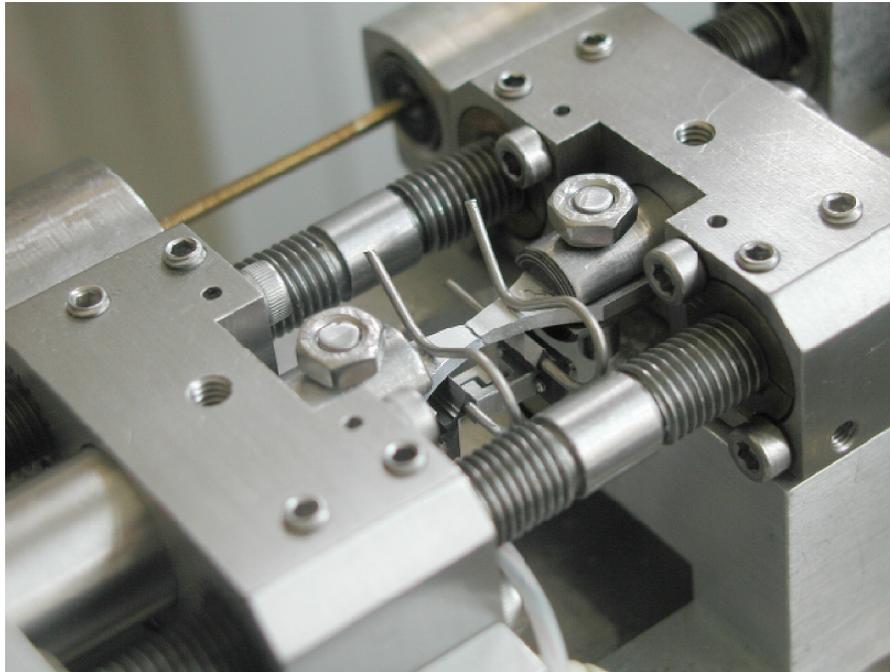


Bild 4.3: In-situ-Versuchseinrichtung mit eingespannter Mini-Zugprobe.

Biegeproben gefertigt. Die Kerne wurden in den Orientierungen Riss-Teiler (RT), Riss-Stopper (RS) und Delaminator (D) gefertigt, siehe Bild 4.1. Die PST-Kerne wurden im Diffusions-schweissverfahren mit Armen aus polykristallinem TiAl zu ganzen Biegeproben zusammengefügt. Die fertigen Biegeproben hatten Abmessungen $24.0 \times 4.5 \times 2.25 \text{ mm}^3$. In die Proben wurden funkenerosiv Kerben mit einem a/W -Verhältnis von 0.35 gefertigt. Die Kerbweite betrug etwa $70 \mu\text{m}$.

Die Proben wurden im 3-Punkt-Biegeversuch in einer In-situ-Versuchseinrichtung (Bild 4.3) im Rasterelektronenmikroskop mit einer Abzugsgeschwindigkeit von etwa $7.0 \mu\text{m}/\text{min}$ geprüft. Der Auflagerabstand betrug 18 mm. Für die In-situ-Aufnahmen wurden die Versuche jeweils kurzzeitig unterbrochen.

4.2 Poly-PST-Versuche

4.2.1 Probenmaterial

Für die Poly-PST-Proben wurde von der Abteilung WFP (GKSS-Forschungszentrum) Probenmaterial aus der technologisch relevanten Legierung Ti-47Al-3.7(Nb, Cr, Mn, Si)-0.5B (γ -TAB) zur Verfügung gestellt. Das Probenmaterial wurde schmelzmetallurgisch über die Ingot-Route hergestellt. In dem Material wurde durch Strangpressen mit einem Strangpressverhältnis vom 7:1 und anschließende 30-minütige Wärmebehandlung bei 1360°C ein RFL-Gefüge mit einer mittleren Koloniegröße D_K von etwa $200 \mu\text{m}$ eingestellt, siehe Bild 4.4. Der Lamellenabstand

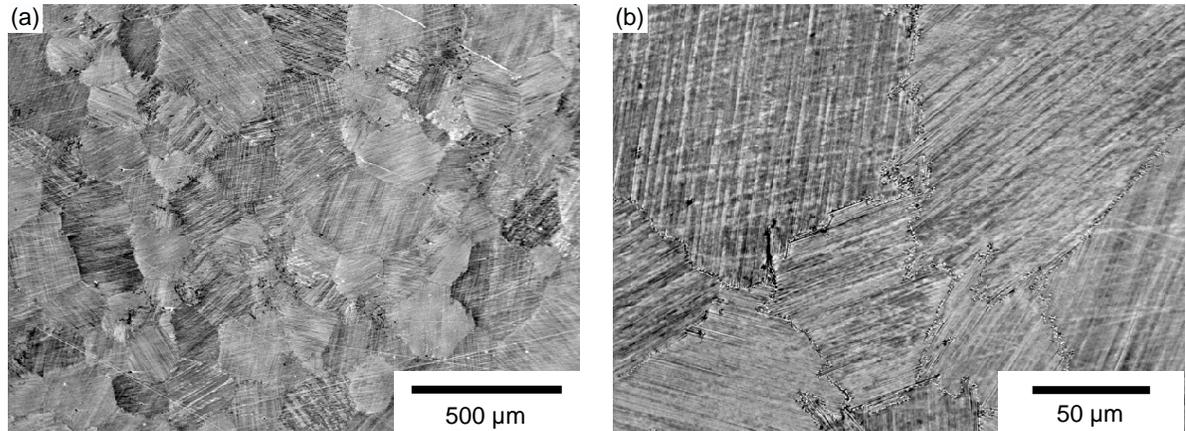


Bild 4.4: Mikrostruktur des hergestellten Probenmaterials ((γ -TAB)).

D_L beträgt 0.2–1.0 μm .

Durch den Strangpressvorgang stellt sich in dem Material eine gewisse Textur ein, die jedoch nicht quantifiziert wurde. Der hergestellte Probenstab hatte einen Durchmesser von 22 mm und eine Länge von 250 mm. Aus dem Stab wurden funkenerosiv Zug- Druck- und Biegeproben gefertigt, siehe Bild 4.5.

4.2.2 Druckversuche

Die Poly-PST-Druckproben waren zylindrisch mit einer Länge von 8 mm und einem Durchmesser von 4 mm. Die Proben wurden in der Abteilung WFP (GKSS-Forschungszentrum) an einer MTS-Prüfmaschine mit einer Dehngeschwindigkeit von 0.0014 min^{-1} getestet. Die Verschiebung der Druckstempel wurde mit Hilfe eines Wegaufnehmers aufgenommen.

4.2.3 Zugversuche

Es wurden Mini-Flachzugproben mit einem quadratischen Querschnitt von $2 \times 2 \text{ mm}^2$ getestet. Die Versuche wurden in der In-situ-Vorrichtung mit einer Abzugsgeschwindigkeit von $3.0 \mu\text{m}/\text{min}$ getestet. Die Dehnung wurde direkt an den Proben mit einem kleinen Messclip bestimmt.

4.2.4 Biegeproben

Die Biegeproben hatten Abmessungen von $22 \times 4.5 \times 2.25 \text{ mm}^3$. Die Biegeproben wurden in den Probenlagen 1 und 2, siehe Bild 4.5, auf dem Probenstab entnommen. In die Biegeproben wurden funkenerosiv Kerben mit einem a/W -Verhältnis von 0.6 und einer Kerbweite von etwa $70 \mu\text{m}$ gefertigt. Die Biegeproben wurden in der In-situ-Vorrichtung im 3-Punkt-Biegeversuch mit einer Abzugsgeschwindigkeit von etwa $7.0 \mu\text{m}/\text{min}$ getestet. Die Rissöffnung CMOD wurde mit einem Messclip aufgenommen.

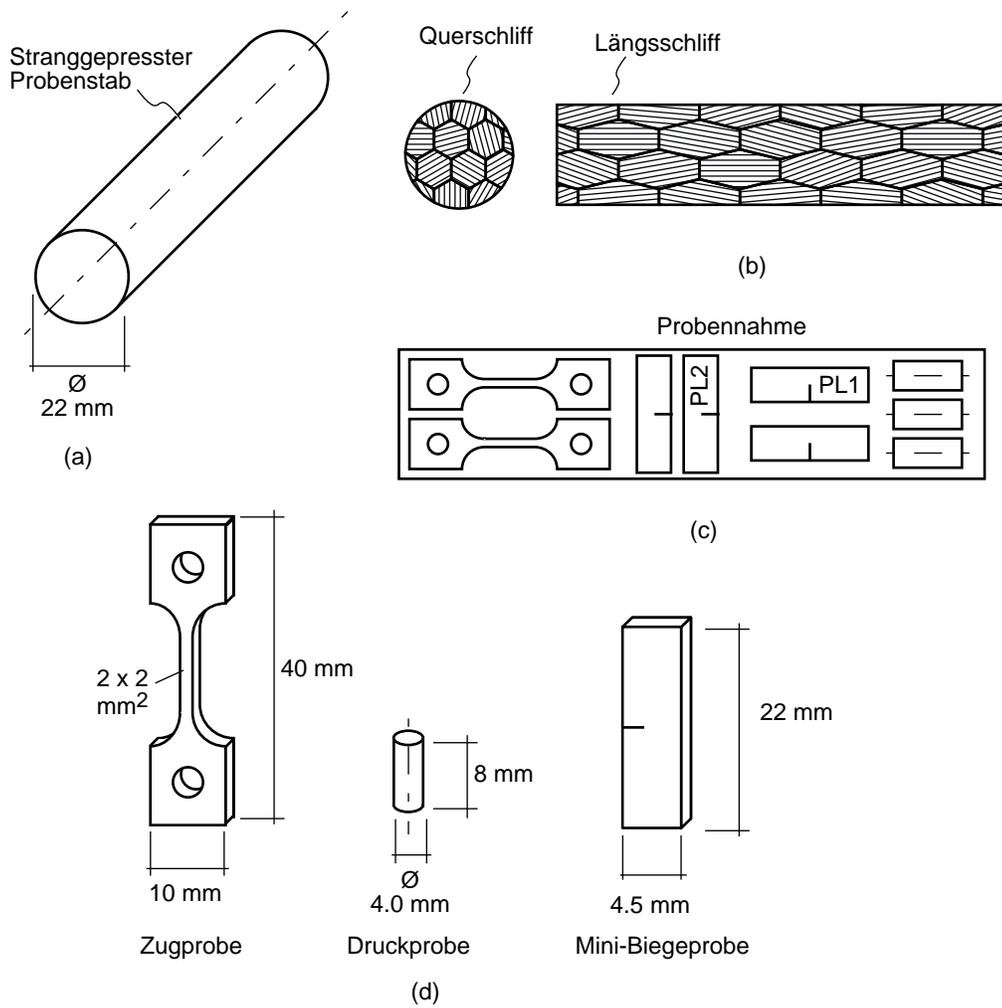


Bild 4.5: Fertigung und Geometrie der Poly-PST-Proben.

Kapitel 5

Numerische Simulationen

5.1 PST-Modelle

5.1.1 PST-Druckversuche

Für die PST-Druckversuche wurden FE^2 -Simulationen sowohl an Ein- als auch an Mehrelement-Modellen durchgeführt.

Die 1-Element-Modelle repräsentieren einen idealen Druckversuch, d.h. einen Druckversuch bei dem im gesamten Probenvolumen ein homogener Verformungszustand herrscht. Die Modelle bestehen aus einem 3D-Element mit reduzierter Integration (1 Integrationspunkt), siehe Bild 5.1(a). Zur Gewährleistung der homogenen Verformung wurden periodische Randbedingungen aufgebracht (Abschnitt 3.3.2). Um die freie Rotation der Modelle zu verhindern, wurden die Verschiebungskomponenten $u_2^{(1)}$, $u_3^{(1)}$ und $u_2^{(3)}$ unterdrückt. Die Verformung wurde über die Verschiebung $u_2^{(2)}$ mit einer Dehnrate von $\dot{\epsilon}_{22} = -2.0 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ aufgebracht.

In die 1-Element-Modelle wurde jeweils eine periodische PST-Einheitszelle implementiert. Zur Einstellung unterschiedlicher Lamellenorientierungen wurden die Einheitszellen um die $[110]_\gamma$ -Achse um den Winkel φ_1 gedreht, siehe Bild 5.4.

Für detaillierte Simulationen wurden quaderförmige Mehrelement-Modelle verwendet. Im Gegensatz zu den 1-Element-Modellen lassen die Mehrelement-Modelle Dehnungslokalisierungen zu. Die relativen Abmessungen der Mehrelement-Modelle in unverformtem Zustand waren $2.0 \times 1.0 \times 1.0$, siehe Bild 5.1(b). Die Modelle bestanden aus insgesamt 128 würfelförmigen Elementen mit je 8 Integrationspunkten. Die Verformung wurde über einen starren und einen waagrecht geführten Druckstempel auf die Modell-Stirnseiten aufgebracht. Die Simulationen wurden mit und ohne Berücksichtigung von Gleitreibung (Reibbeiwert μ) zwischen der Probe und den Druckstempeln durchgeführt. Bei den Simulationen ohne Reibung wurden die horizontale Starrkörperverschiebung und die Starrkörperrotation um die Längsachse durch entsprechende Zwangsbedingungen verhindert. Die Geschwindigkeit \dot{u} des Druckstempels wurde

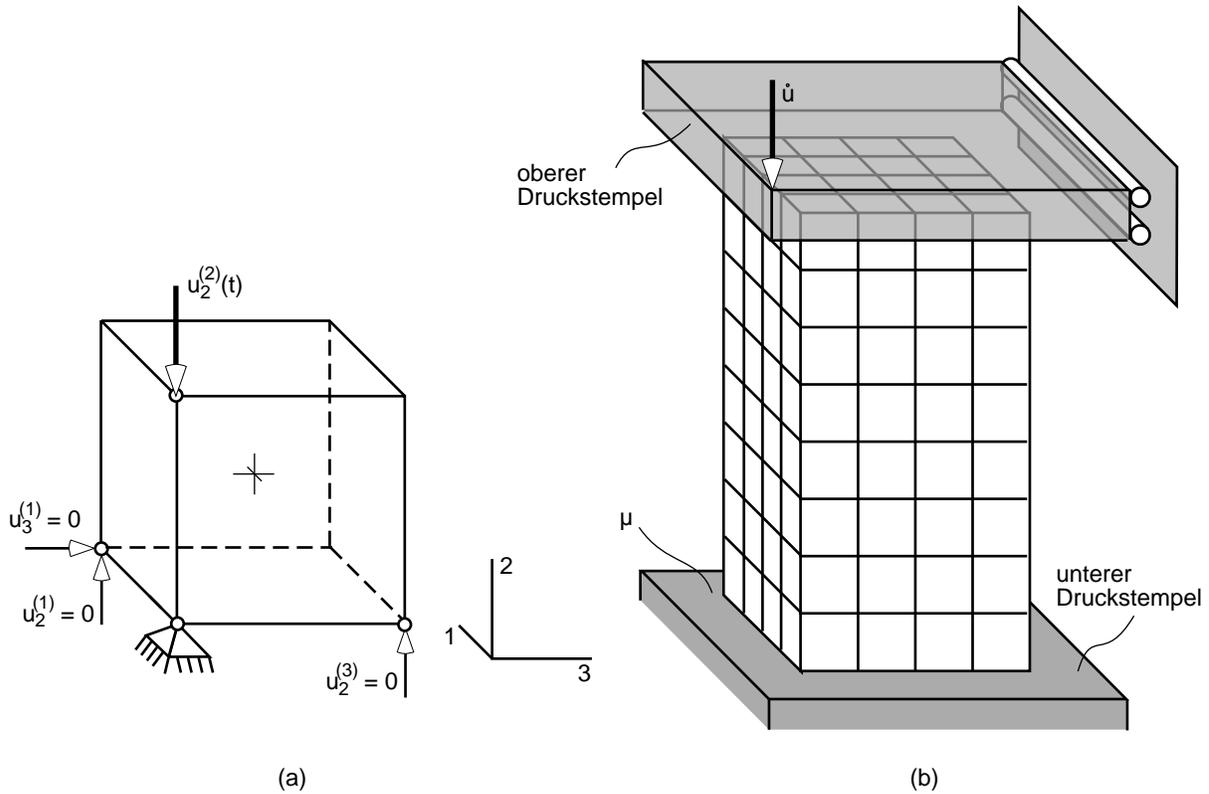


Bild 5.1: Modelle zur Simulation von PST-Druckversuchen: (a) 1-Element-Modell mit periodischen Randbedingungen, (b) Mehrelement-Modell zwischen zwei Druckstempeln.

so gewählt, dass die globale Dehnrates $\dot{\epsilon}_{22} = -2.0 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ betrug. Die Implementierung der PST-Einheitsezellen erfolgte wie bei den 1-Element-Modellen.

5.1.2 PST-Biegeversuche

Für die PST-Biegeproben wurde für die Orientierungen RS, RT und D jeweils ein FE²-Modell erstellt. Für die Modelle wurde das in Bild 5.2 dargestellte, aus einer Elementschicht aufgebaute FE-Netz verwendet. Die Abmessungen stimmten, abgesehen von der Dickenrichtung, mit den Abmessungen der experimentellen Proben überein. Die Abmessungen in Dickenrichtung sind für die Simulationen nicht wesentlich.

In den FE-Modellen wurden zwei Elementgruppen unterschieden. Die polykristallinen TiAl-Arme wurden als isotrop-elastisch angenommen ($E = 176000 \text{ MPa}$, $\nu = 0.27$). Die PST-Kerne wurden mit 336 Elementen mit jeweils 8 Integrationspunkten elementiert. In jeden Integrationspunkt wurde entsprechend der jeweiligen Orientierung eine PST-Einheitzelle implementiert.

Die Verschiebung in x -Richtung wurde in den Auflagern fixiert. Die y - und z -Verschiebung sowie die freie Rotation des FE-Modells wurde durch entsprechende Zwangsbedingungen verhindert. Die Last wurde verschiebungsgesteuert mit einer Geschwindigkeit von $2.0 \mu\text{m/s}$ aufgebracht.

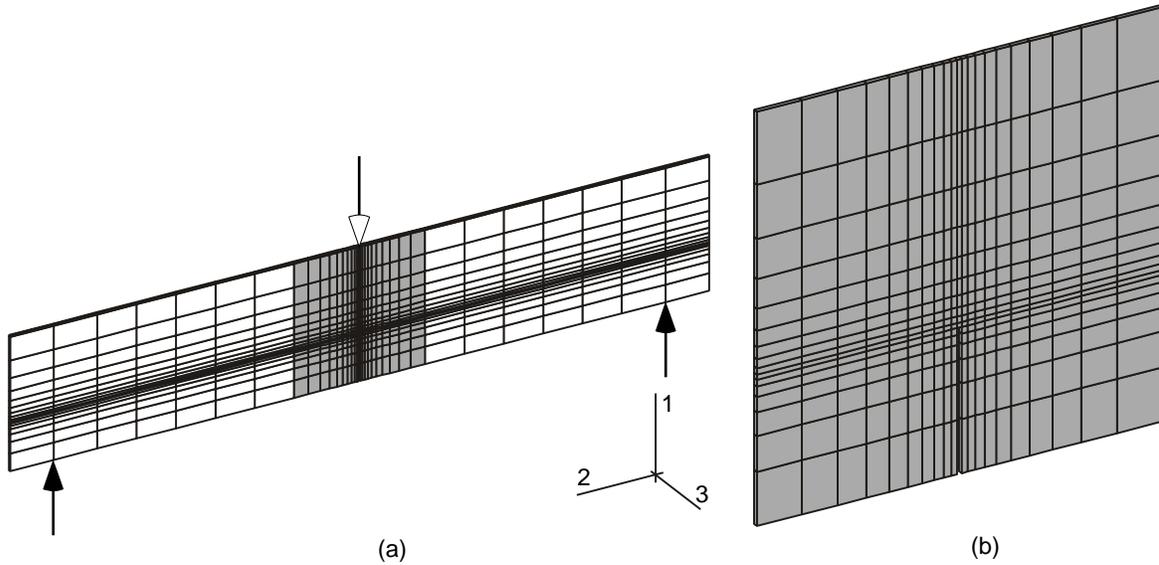


Bild 5.2: FE-Modell für die Mini-Biegeproben (a) und Vernetzung des PST-Kerns (b).

5.2 Poly-PST-Modelle

5.2.1 Poly-PST-Simulationen

Für die Poly-PST-Simulationen wurden Taylor-Modelle (1-Element) und Würfelmodelle (Mehrelement) verwendet. Im Folgenden werden die Poly-PST-Modelle nach der Anzahl der im Modell berücksichtigten PST-Kristallite n_K sowie nach der Anzahl der Interaktionspunkte n_E , mit denen ein PST-Kristallit aufgelöst wird, unterschieden.

Die Taylor-Modelle bestehen aus einem äußeren FE-Element mit reduzierter Integration ($n_E = 1$), in das n_K beliebig orientierte PST-Einheitszellen implementiert sind. Auf das äußere FE-Element werden periodische Randbedingungen aufgebracht (siehe Abschnitt 3.3.2), wodurch die homogene Verformung des Elementes sichergestellt wird. Da die implementierten PST-Einheitszellen alle mit den selben Knoten des äußeren FE-Modells verbunden sind, ist die globale Verformung in allen PST-Einheitszellen identisch. Die Taylor-Randbedingungen werden somit automatisch erfüllt. Als äußere Randbedingungen wurden die Verschiebungskomponenten $u_2^{(1)}$, $u_3^{(1)}$ und $u_2^{(3)}$ unterdrückt. Die Verformung wurde über $u_2^{(2)}$ mit einer Dehnrade von $\dot{\epsilon}_{22} = -2.0 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ aufgebracht.

Für detailliertere Poly-PST-Simulationen wurden Würfelmodelle verwendet. Die verwendeten Würfelmodelle bestehen aus n_K beliebig orientierten würfelförmigen PST-Kristalliten, die ihrerseits aus $n_E/8$ würfelförmigen finiten Elementen mit jeweils 8 Integrationspunkten aufgebaut sind. Bild 5.3 zeigt exemplarisch ein Würfelmodell mit $n_K = 64$ und $n_E = 64$. Die Würfelmodelle wurden mit periodischen Randbedingungen (siehe Abschnitt 3.3.2) beaufschlagt, durch die mesoskopisch eine homogene Verformung sichergestellt wurde. Die freie Rotation des Würfelmodells

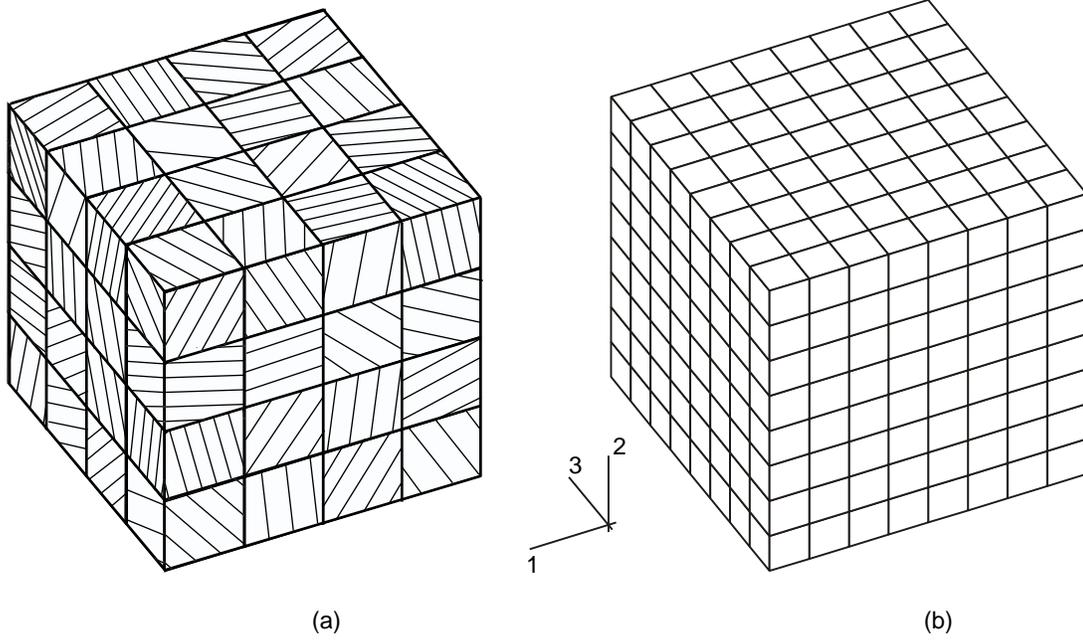


Bild 5.3: Würfel-Modell bestehend aus $n_K = 64$ PST-Kristalliten und insgesamt 512 finiten Elementen mit $n_E = 4096$ implementierten PST-Einheitszellen.

wurde durch Fesselung der Verschiebungskomponenten $u_2^{(1)}$, $u_3^{(1)}$ und $u_2^{(3)}$ unterdrückt. Die Verformung wurde über $u_2^{(2)}$ mit einer Dehnrage von $\dot{\epsilon}_{22} = -2.0 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ aufgebracht.

Die Orientierung der PST-Kristallite in den Poly-PST-Modellen erfolgte über die Rotationsmatrix \mathbf{R} aus Gl. (5.4), die wie folgt gegeben ist:

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_3(\varphi_3)\mathbf{R}_1(\varphi_1)\mathbf{R}_2(\varphi_2) \quad (5.1)$$

Die Matrix $\mathbf{R}_i(\varphi_i)$ beschreibt hierbei die Rotation des PST-Kristalls um die i -Achse um den Winkel φ_i . Bei finiten Rotationen ist die Reihenfolge zu beachten. Die PST-Einheitszellen wurden zunächst um die Lamellen-Normale (x_3) gedreht, anschließend um die x_1 -Achse verkippt und schliesslich um die Lastachse (x_2) rotiert, siehe Bild 5.4.

Die Rotationswinkel φ_i wurden mit Hilfe eines Pseudo-Zufallszahlengenerators ermittelt. Bei der gewählten Reihenfolge ist zu beachten, dass bei texturfreien Orientierungsverteilungen die Häufigkeiten des Winkel φ_1 nicht normalverteilt sind. Aus geometrischen Gründen treten kleine Winkel sehr viel häufiger auf als 90° -Orientierungen. Um eine texturfreie Orientierungsverteilung zu erhalten, muss die relative Häufigkeit von φ_1 mit $\cos(\varphi_1)$ bewertet werden.

Zum Vergleich unterschiedlich stark ausgeprägter Texturen wird ferner die Texturschärfe $\Delta\varphi_i$ eingeführt, die angibt, wie groß der Winkelbereich ist, aus dem Orientierungen auftreten. So bedeutet beispielsweise eine Textur mit $\varphi_1 = 45^\circ$ und $\Delta\varphi_1 = 15^\circ$, dass in der Textur alle φ_1 -Orientierungen zwischen 30 und 60° normalverteilt auftreten. Die Grenzfälle $\Delta\varphi_1 = 0^\circ$ und 90° bezeichnen die Grenzfälle einer ideal scharfen bzw. einer regellosen Textur.

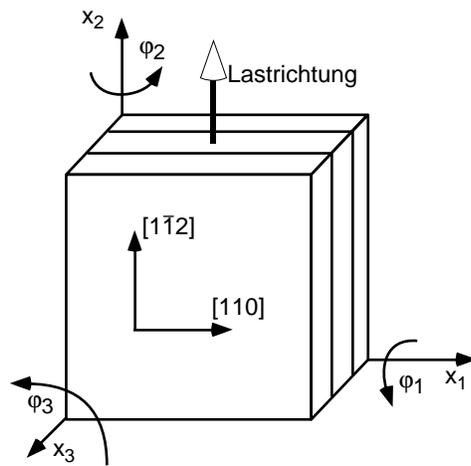


Bild 5.4: Rotation der PST-Einheitszellen um die x_3 -, x_1 - und x_2 -Achse.

Kapitel 6

Ergebnisse: PST-Verformung

In diesem Kapitel wird das Verformungsverhalten von PST-Kristallen untersucht. Als experimentelle Grundlage dienen hierfür die Druckversuche von Uhlenhut [37].

Im ersten Abschnitt wird untersucht, ob und wie weit das Verhalten von PST-Kristallen mit Hilfe von rein morphologischen 1-Element-Simulationen ($Q_{SE} = 1.0$) beschrieben werden kann. Um den Einfluss der unterschiedlichen intralamellaren Randbedingungen herauszufinden, werden die Simulationen mit allen 3 Modellen (RVE3, RVE7, RVE9) durchgeführt.

Im zweiten Abschnitt werden die selben Druckversuche mit den detaillierteren Mehrelement-Simulationen verglichen. Ziel ist hierbei die Aufklärung des Einflusses der äußeren Randbedingungen, die in einem realen Experiment durch freie Probenränder und Reibungseffekte gegeben sind. Darüberhinaus dienen die Mehrelement-Simulationen der Validierung der 1-Element-Simulationen.

Im dritten Abschnitt folgt eine systematische Untersuchung zum Einfluss der Festigkeit der Supergleitsysteme. Zunächst wird hierbei für die unterschiedlichen, durch die Modelle RVE7 und RVE9 gegebenen, intralamellaren Randbedingungen untersucht, wie weit Superversetzungen kinematisch notwendig sind. Anschließend wird, um zu überprüfen, wie weit überhaupt mit signifikanten Effekten zu rechnen ist, der Einfluss der Festigkeit der Supergleitsysteme auf die Zug/Druck-Anomalie untersucht. Schließlich wird exemplarisch für das Modell RVE7 der Einfluss die Festigkeit der Supergleitsysteme auf die Gleitgeometrie beschrieben.

Im letzten Abschnitt, werden die gefundenen Ergebnisse den aus der Literatur bekannten experimentellen Befunden gegenübergestellt.

6.1 Morphologische 1-Element-Simulationen

Für die Simulationen wurden zunächst ein Satz morphologischer Gleitsystemparameter g_0 und h_0 für die longitudinalen, gemischten und transversalen Gleitsysteme ermittelt. Hierfür wurden

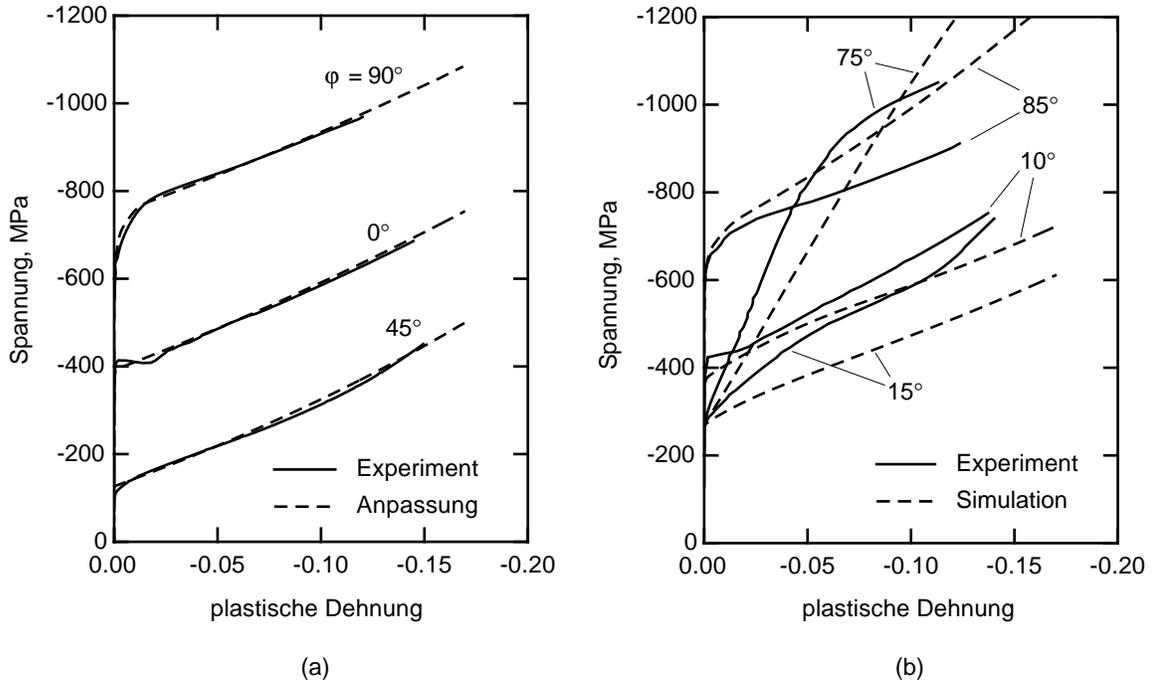


Bild 6.1: Morphologische Parameteranpassung für das RVE9-Modell.

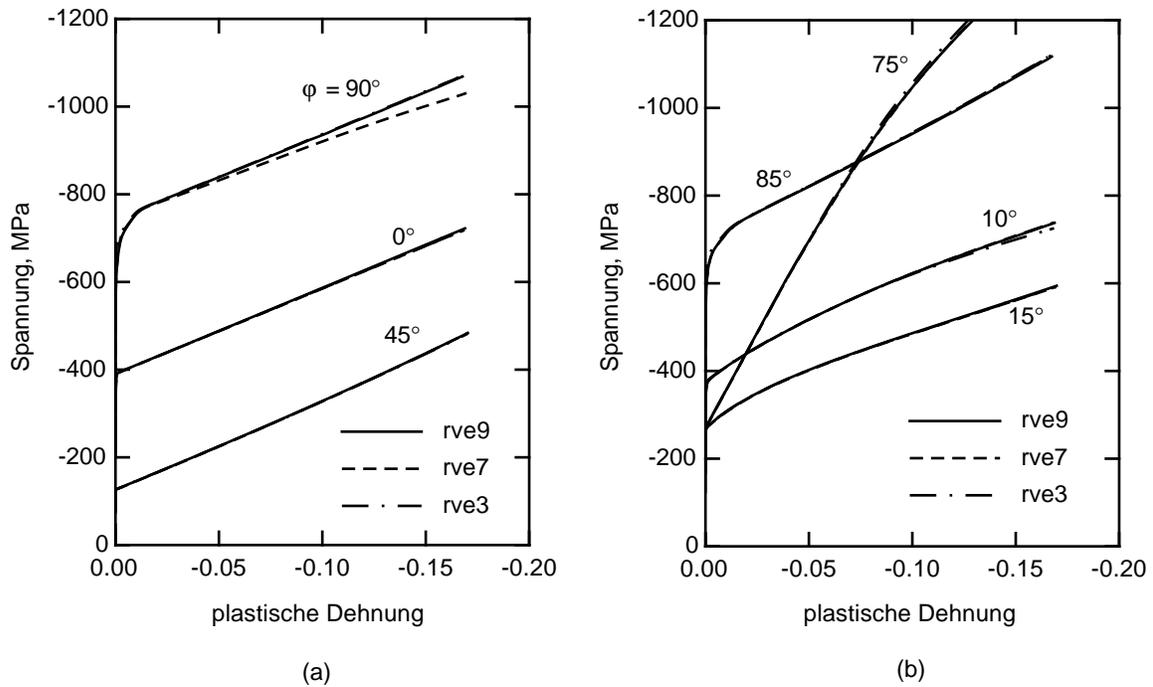


Bild 6.2: Vergleich der Modelle RVE3, RVE7 und RVE9 bei rein morphologischer Parameteranpassung. Die Kurven für die Modelle RVE3, RVE7 und RVE9 liegen nahezu perfekt übereinander.

mit dem Modell RVE9 Simulationen für die Orientierungen 0, 45, und 90° an die experimentell ermittelten Fließkurven angepasst. Hierbei ergaben sich die folgenden Parameter:

$$g_0^{\text{long}} = 55 \text{ MPa} \quad h_0^{\text{long}} = 400 \text{ MPa} \quad (6.1)$$

$$g_0^{\text{gem}} = 150 \text{ MPa} \quad h_0^{\text{gem}} = 320 \text{ MPa} \quad (6.2)$$

$$g_0^{\text{trans}} = 185 \text{ MPa} \quad h_0^{\text{trans}} = 135 \text{ MPa} \quad (6.3)$$

Mit diesem Parametersatz ist die Übereinstimmung zwischen den simulierten und experimentell ermittelten Fließkurven für die Orientierungen 0, 45 und 90° sehr gut, Bild 6.1(a). Bemerkenswert ist hierbei, dass auch das transiente Verfestigungsverhalten der 90°-Orientierung sehr gut wiedergegeben wird.

Zur weiteren Überprüfung wurden Simulationen für die Orientierungen 10, 15, 75 und 85° durchgeführt, Bild 6.1(b). Für diese Orientierungen ist die Übereinstimmung zwischen den experimentellen und berechneten Fließkurven qualitativ ebenfalls gut. Der Fließbeginn stimmt bei allen Orientierungen sehr gut mit den Experimenten überein. Beim anschließenden Verfestigungsverhalten zeigen sich deutliche quantitative Unterschiede. Diese folgen jedoch keiner eindeutigen Systematik und konnten auch nicht durch Variation der weiteren Verfestigungsparameter ($q_{r\theta}$) beseitigt werden.

Um den Einfluss der unterschiedlichen intralamellaren Randbedingungen zu ermitteln, wurden die Simulationen unter Verwendung des gleichen Parametersatzes mit den Modellen RVE3 und RVE7 wiederholt. Für die verschiedenen Orientierungen werden die berechneten Fließkurven in Bild 6.2 miteinander verglichen.

Im Vergleich zeigt sich bei keiner Orientierung ein signifikanter Unterschied zwischen den Modellen RVE3, RVE7 und RVE9. Die Fließkurven liegen nahezu perfekt übereinander, lediglich bei dem Modell RVE7 zeigt die 90°-Orientierung ein etwas schwächeres Verfestigungsverhalten als die beiden anderen Modelle. Bei der Verwendung von rein morphologischen Parametern haben die unterschiedlichen intralamellaren Randbedingungen also offensichtlich keinen signifikanten Einfluss. Für rein morphologische Parametersätze kann demzufolge immer das vereinfachte Modell RVE3 verwendet werden. Hierdurch kann insbesondere für komplexe FE²-Simulationen der Rechenaufwand deutlich reduziert werden.

6.2 Morphologische Mehrelement-Simulationen

Die 1-Element-Simulationen repräsentieren ideale Druckversuche, bei denen das gesamte Probenvolumen homogen verformt wird. Bei einem realen Druckversuch liegen solche idealen Bedingungen im Allgemeinen nicht vor, vielmehr wird der Versuch sowohl von den freien Probenrändern, d.h. von der Probengeometrie, als auch von der Reibung zwischen dem Probenkörper und den Druckstempeln beeinflusst. Um diese Einflüsse zu untersuchen, wurden die Druckversuchs-Simulationen mit den in Abschnitt 5.1.1 vorgestellten Mehrelement-Modellen wiederholt.

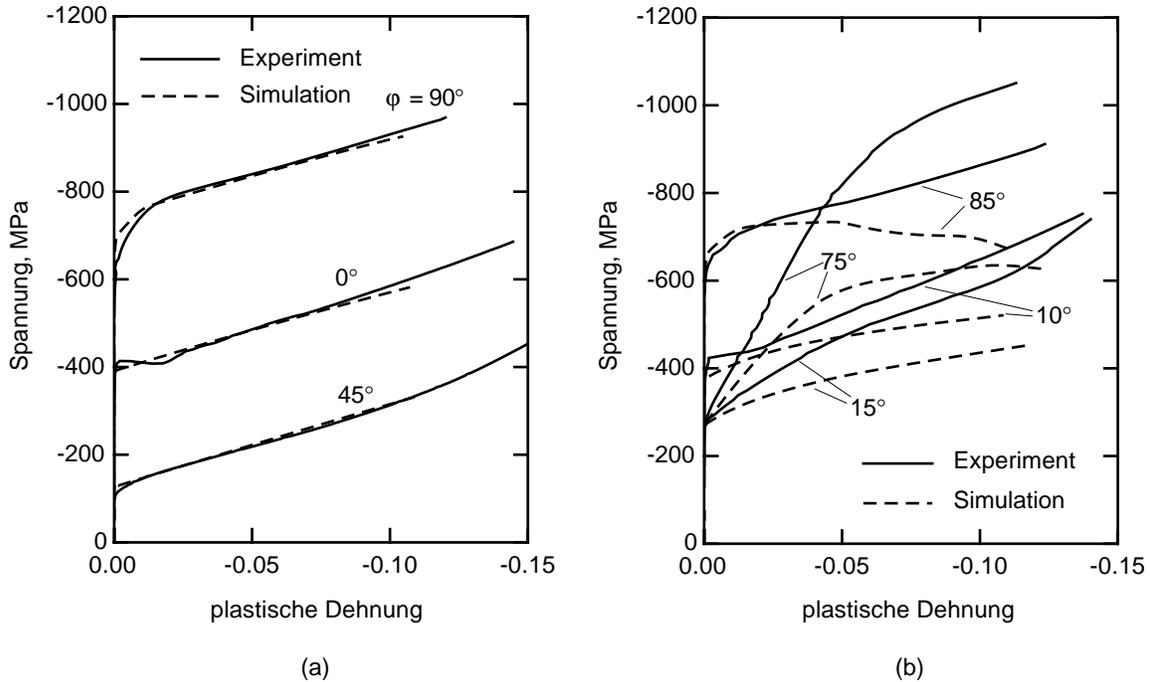


Bild 6.3: Vergleich der experimentellen und der mit den Mehrelement-Modellen simulierten Fließkurven ohne Berücksichtigung von Reibung.

Die Mehrelement-Simulationen wurden zunächst ohne Berücksichtigung von Reibungseffekten durchgeführt. In Bild 6.3 werden die simulierten und experimentellen Fließkurven gegenübergestellt. Wie bei den 1-Element-Simulationen ist bei den Orientierungen 0, 45 und 90° die Übereinstimmung zwischen den Simulationen und den Experimenten sehr gut. Bei den Orientierungen 10, 15, 75 und 85° treten hingegen sehr starke Abweichungen auf. Diese Abweichungen betreffen dabei insbesondere das Verfestigungsverhalten. Dieses ist bei allen vier Simulationen deutlich schwächer ausgeprägt als in den entsprechenden Experimenten. Bei den Orientierung 75 und 85° ist sogar eine deutliche Entfestigung zu beobachten.

Das außergewöhnliche Verfestigungsverhalten bei den Mehrelement-Simulationen kann durch die Inhomogenität der Verformung erklärt werden. Die verformten Mehrelement-Modelle werden in Bild 6.4 gezeigt; dargestellt ist hierbei die Gesamtdehnung in Richtung der Lastachse (ϵ_{yy}). Bei den Orientierungen 0, 45 und 90° ist die Verformung insgesamt sehr homogen; der Betrag der lokalen Dehnungen variiert dabei nur um wenige Prozent. Bei den Orientierungen 10, 15, 75 und 85° bilden sich hingegen ausgeprägte Scherbänder in den Modelldiagonalen aus. Die Variation der lokalen Dehnungen beträgt dabei deutlich mehr als 25%. Durch die Scherbänder verformen sich die Proben s-förmig. Bei den Orientierungen 75 und 85° ist die Ausbildung der S-Form so stark, dass sich die Probenstirnseiten teilweise von den Druckstempeln ablösen. Hierdurch wird der tragende Querschnitt der Proben effektiv verringert, womit die Entfestigungstendenzen bei diesen beiden Orientierungen erklärt werden kann.

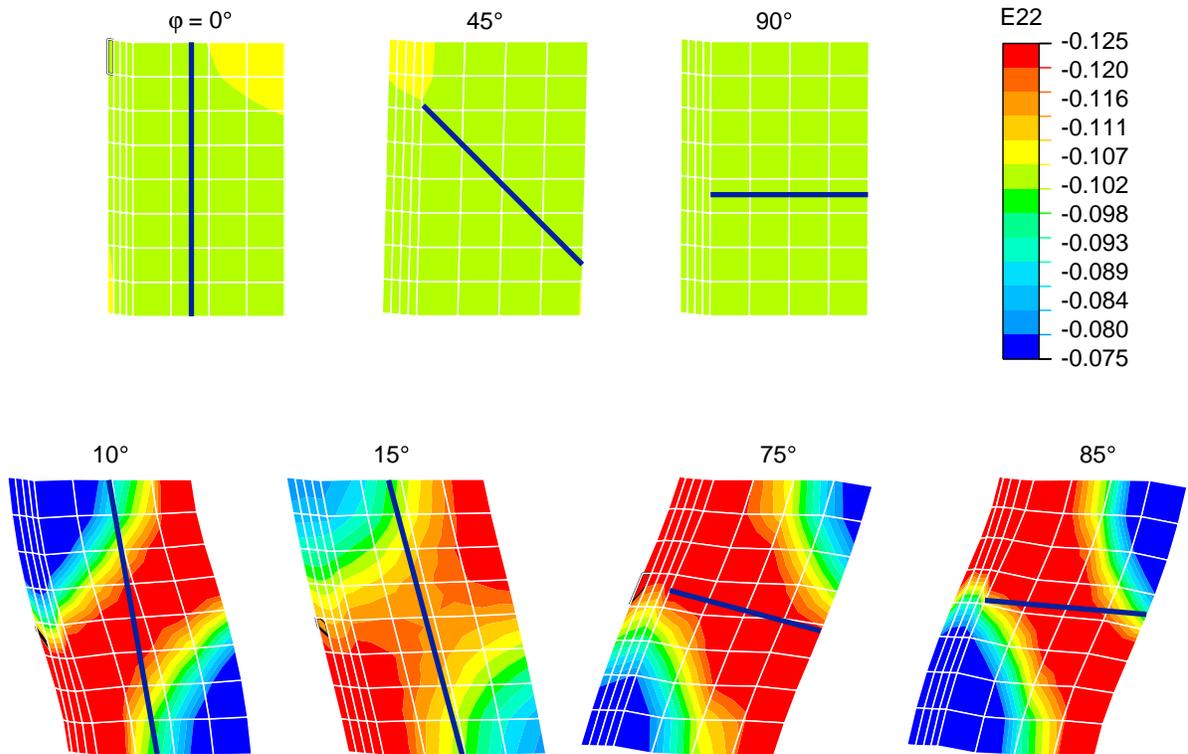


Bild 6.4: Kontur-Bilder der Gesamtdehnung ϵ_{22} für die Mehrelement-Modelle (Randbedingungen siehe Bild 5.1(b)).

Um zu untersuchen, welchen Einfluss Reibung zwischen der Probe und dem Druckstempel hat, wurden die Mehrelement-Simulationen mit einem Reibbeiwert $\mu = 0.1$ wiederholt. Die Fließkurven für $\mu = 0.0$ und $\mu = 0.1$ werden in Bild 6.5 einander gegenübergestellt.

Bei den Orientierungen 0 , 45 und 90° ist durch den Einfluss der Reibung nur ein leichter Anstieg der anfänglichen Fließspannung zu verzeichnen. Auch auf die Verfestigung hat die Reibung bei diesen Orientierungen keinen signifikanten Einfluss.

Bei den Orientierungen 10 , 15 , 75 und 85° zeigen sich hingegen deutliche Unterschiede sowohl beim Fließbeginn als auch im Verfestigungsverhalten. Der Reibungseinfluss auf den Fließbeginn ist insbesondere bei den Orientierungen 15 und 75° ausgeprägt. Hier führt die Reibung zu einem signifikanten Anstieg der anfänglichen Fließspannung. Der Einfluss auf das Verfestigungsverhalten zeigt sich insbesondere bei den Orientierungen 85° und 75° . Hier werden durch die Reibung die Entfestigungstendenzen wirksam unterdrückt. Die Berücksichtigung von Reibung führt bei den Mehrelement-Simulationen tendenziell somit zu einer etwas besseren Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen. Insgesamt ist die Übereinstimmung jedoch nicht so gut wie bei den 1-Element-Simulationen.

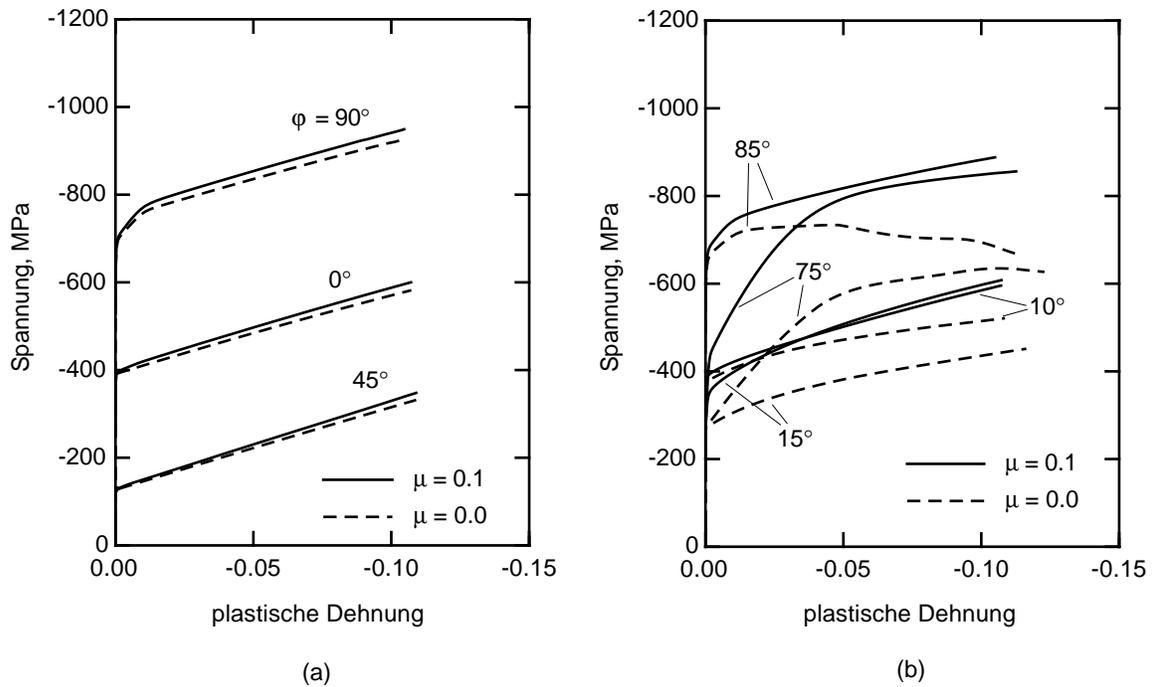


Bild 6.5: Mit den Mehrelement-Modellen simulierten Fließkurven für $\mu = 0.0$ und $\mu = 0.1$.

6.3 Einfluss der Festigkeit der Supergleitsysteme

6.3.1 Kinematische Notwendigkeit von Superversetzungen

Die bisherigen Simulationen wurden unter der Annahme durchgeführt, dass die Einfach-, Super- und Zwillingsgleitsysteme in einer morphologischen Klasse stets die gleiche Festigkeit haben. Es gibt jedoch experimentelle Evidenz, dass die Supergleitsysteme im lamellaren Gefüge fester sind als die beiden anderen Gleitsystemtypen. Aus diesem Grund soll als nächstes untersucht werden, wie sich die Festigkeit der Supergleitsysteme auf das Verformungsverhalten von PST-Kristallen auswirkt. Als erste Frage soll hierbei beantwortet werden, ob und zu welchem Grad Superversetzungen im lamellaren Gefüge kinematisch überhaupt notwendig sind. Hierfür wurden 1-Element-Simulationen mit den Modellen RVE7 und RVE9 durchgeführt, bei denen die Aktivierung der Supergleitsysteme durch entsprechend hohe Festigkeitswerte ($Q_{SE} \rightarrow \infty$) unterdrückt wurde. Die Simulationen wurden für Zug- und Druckbeanspruchung durchgeführt. Für die Einfach- und Zwillingsgleitsysteme wurden die Festigkeitsparameter aus der morphologischen Anpassung verwendet, siehe Gl.(6.1–6.3).

In Bild 6.6 wird für Zug- und Druckbeanspruchung gezeigt, wie sich bei dem Modell RVE7 das Verhalten ändert, wenn die Aktivierung von Superversetzungen unterdrückt wird. Bei Druckbeanspruchung wirkt sich die Unterdrückung der Superversetzungen insbesondere auf die 0° -Orientierung aus, Bild 6.6(a). Für diese Orientierung ist ohne Superversetzungen kein vollplastischer Zustand möglich. Im Gegensatz zu den anderen Orientierungen verfestigt die 0° -

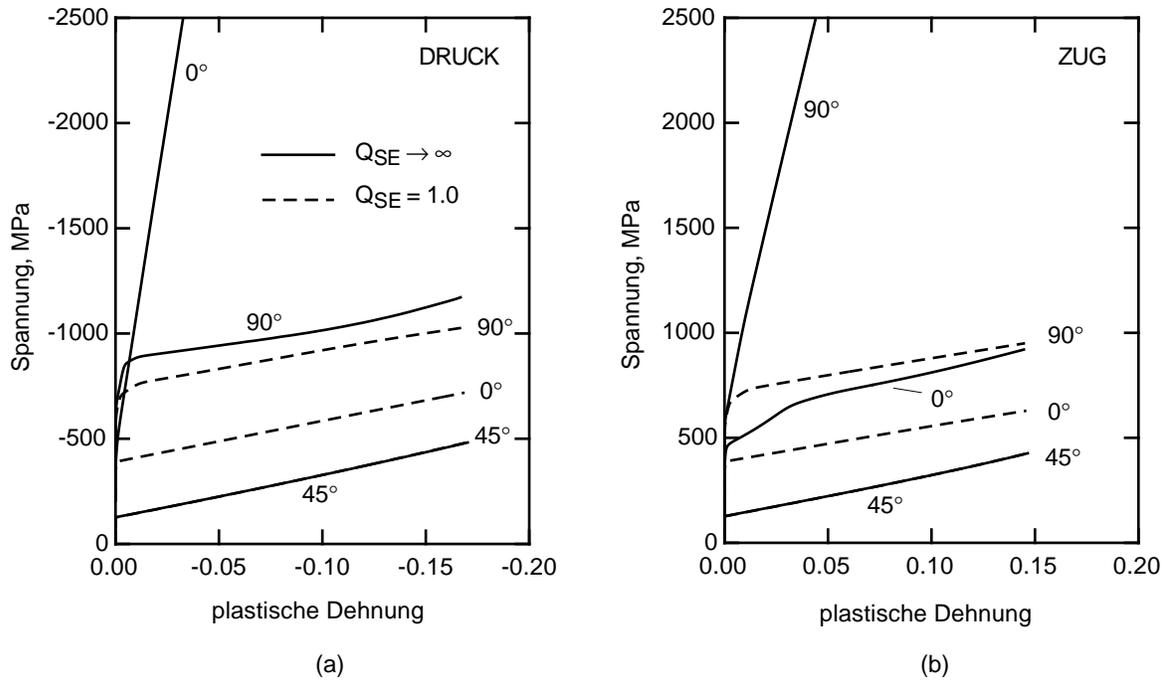


Bild 6.6: Mit dem Modell RVE7 berechnete Fließkurven (Druck, Zug) bei Unterdrückung der Superverstetzungen ($Q_{SE} \rightarrow \infty$) in Vergleich zur Rechnung mit rein morphologischem Parametersatz ($Q_{SE} = 1.0$).

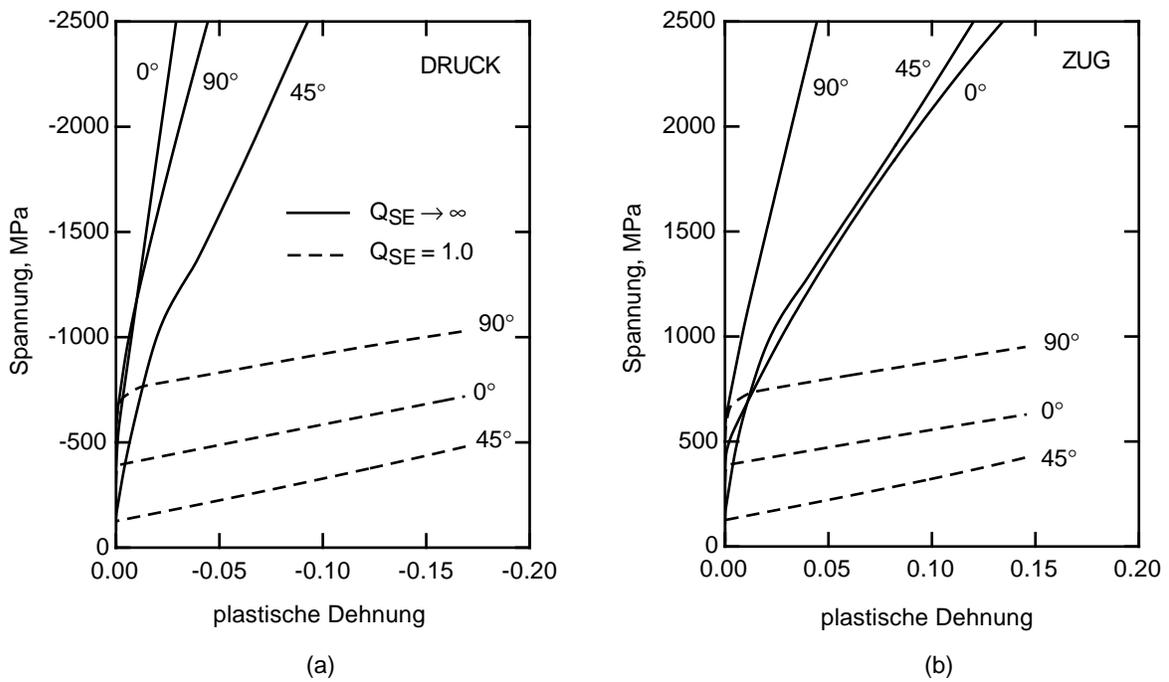


Bild 6.7: Mit dem Modell RVE9 berechnete Fließkurven (Druck, Zug) bei Unterdrückung der Superverstetzungen ($Q_{SE} \rightarrow \infty$) in Vergleich zur Rechnung mit rein morphologischem Parametersatz ($Q_{SE} = 1.0$).

Orientierung mit einer sehr hohen Verfestigungsrate, die darauf hindeutet, dass sich einzelne Gefügebestandteile auch bei hohen Spannungen noch rein elastisch verformen. Bei der 90°-Orientierung ergibt sich gegenüber der Rechnung mit einem rein morphologischen Parameter-satz ($Q_{SE} = 1.0$) nur eine geringfügig höhere Fließspannung. Auf die 45°-Orientierung hat die Unterdrückung der Superversetzungen keinen signifikanten Einfluss.

Bei Zugbeanspruchung kehrt sich das Verhalten der 0°- und 90°-Orientierungen um, Bild 6.6(b). Bei der 90°-Orientierung ist hier kein voll-plastischer Zustand möglich. Bei der 0°-Orientierung kommt es zu einem recht deutlichen Festigkeitsanstieg, der das Niveau der rein morphologisch gerechneten 90°-Orientierung jedoch nicht überschreitet. Bei der 45°-Orientierung zeigt sich auch bei Zugbeanspruchung kein signifikanter Einfluss der Unterdrückung der Superversetzungen. Insgesamt werden bei dem Modell RVE7 also offensichtlich nur für die 90°-Zug- und die 0°-Druckbeanspruchung Superversetzungen kinematisch benötigt, für alle anderen Verformungsmoden reichen Einfach- und Zwillingsversetzungen aus.

Für das Modell RVE9 wird das Verhalten bei Unterdrückung der Superversetzungen in Bild 6.7 den rein morphologischen Rechnungen gegenübergestellt. Bei der Unterdrückung von Superversetzungen bilden sich bei keiner Orientierung und weder bei Zug- noch bei Druckbeanspruchung vollplastische Zustände aus. Die rigideren intralamellaren Randbedingungen bei dem Modell RVE9 führen offensichtlich dazu, dass Superversetzungen für alle Verformungsmoden kinematisch notwendig sind.

Der Unterschied zwischen den Modellen RVE7 und RVE9 liegt in den unterschiedlichen intralamellaren Randbedingungen. Generell lässt sich erwarten, dass fein lamellare Legierungen eher durch das Modell RVE7, und dass grob lamellare Legierungen eher durch das Modell RVE9 repräsentiert werden. Mit den Ergebnissen aus Bild 6.6 und 6.7 lassen sich somit erste Spekulationen über den Einfluss des Lamellenabstandes auf das Verhalten von lamellaren TiAl-Legierungen anstellen. Unter der Annahme, dass die Supergleitsysteme deutlich fester sind als die anderen Gleitsystemtypen, kann man erwarten, dass bei grob-lamellaren Legierungen ein Aufstau von den kinematisch notwendigen Superversetzungen sehr bald zur Bildung von lokalen Spaltbrüchen führt, während fein-lamellare Legierungen, bei denen die Superversetzungen nicht im gleichen Maße kinematisch benötigt werden, über höhere Verformungsreserven verfügen sollten. Dass fein-lamellare PST-Kristalle in der 0°-Orientierung tatsächlich eine höhere Duktilität haben als grob-lamellare, wurde z.B. von Umeda *et al.* [26] experimentell nachgewiesen.

Die Ergebnisse weisen ebenfalls auf ein strukturelles Problem von lamellaren TiAl-Legierungen hin. Wenigstens für die 0°-Druck- und 90°-Zugbeanspruchung werden Superversetzungen für die plastische Verformung kinematisch benötigt. Für die 0°-Druckbeanspruchung ist dies nicht so kritisch, da etwaige Mikrorisse, die sich an lokalen Aufstauungen von Superversetzungen bilden, zgedrückt werden. Für die 90°-Zugbeanspruchung sieht dies jedoch ganz anders aus. Kleine Mikrorisse können hier sehr schnell zu einem Gesamtversagen führen. Es ist daher wahrscheinlich, dass die experimentell gefundene äußerst geringe Duktilität der 90°-Orientierung durch die

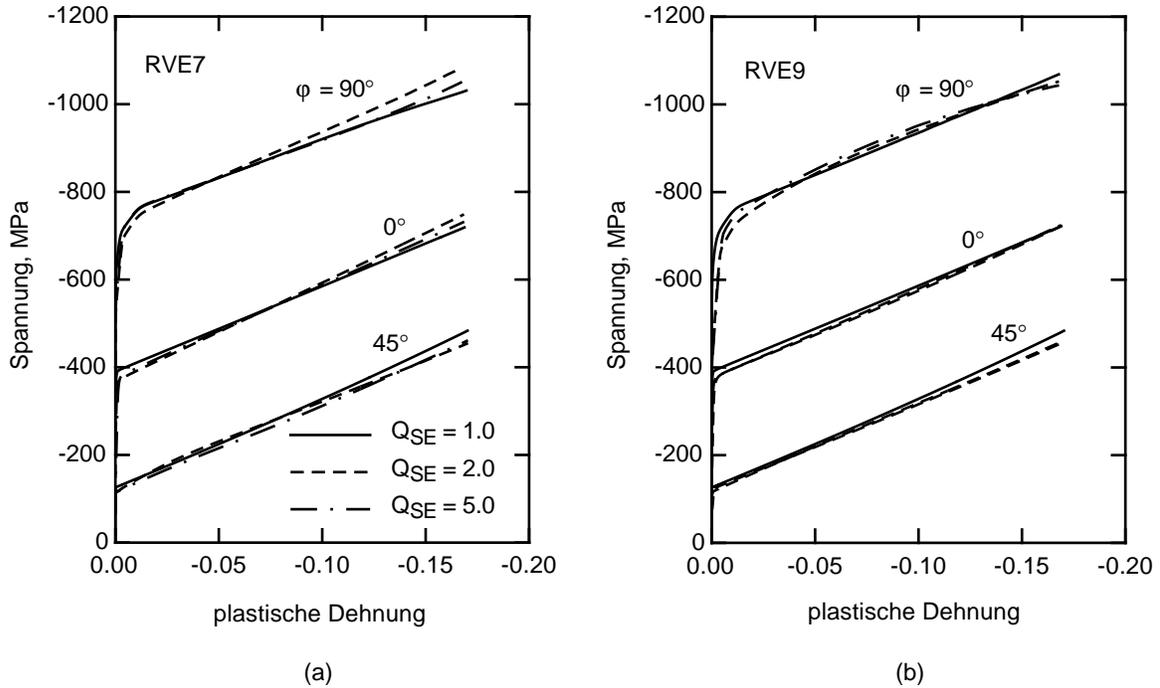


Bild 6.8: Vergleich der Parameteranpassungen mit $Q_{SE} = 1.0$, 2.0 und 5.0 für die Modelle RVE7 (a) und RVE9 (b).

kinematische Notwendigkeit der Superversetzungen mitverursacht wird.

6.3.2 Anpassung an die PST-Druckversuche

In Abschnitt 6.1 wurde gezeigt, dass die PST-Druckversuche mit einem rein morphologischen Parametersatz ($Q_{SE} = 1.0$) sehr gut nachgerechnet werden können. Im Folgenden wird untersucht, ob der rein morphologische Parametersatz eindeutig ist, oder ob es noch weitere Parametersätze gibt, mit denen die Versuche ebenso gut nachgerechnet werden können. Hierfür wurden mit den Modellen RVE7 und RVE9 die Anpassungen an die Druckversuche für unterschiedliche Q_{SE} -Werte wiederholt.

Die neuen Parameteranpassungen wurden für $Q_{SE} = 2.0$ und 5.0 durchgeführt. In Bild 6.8(a, b) werden die Anpassungen mit den Modellen RVE7 und RVE9 mit den rein morphologischen Anpassungen verglichen. Bei beiden Modellen ergeben sich zwischen den unterschiedlichen Anpassungen fast keine qualitativen Unterschiede. Für beide Modelle kann die Anpassung der Druckversuche also offensichtlich für nahezu jeden beliebigen Wert von Q_{SE} durchgeführt werden. Die Parameter können folglich an Hand der Druckversuche nicht eindeutig bestimmt werden. Für eine eindeutige Parameteranpassung müssen noch weitere experimentelle Befunde berücksichtigt werden.

In Bild 6.9 werden für die Modelle RVE7 und RVE9 die Anpassungsparameter g_0 für die unter-

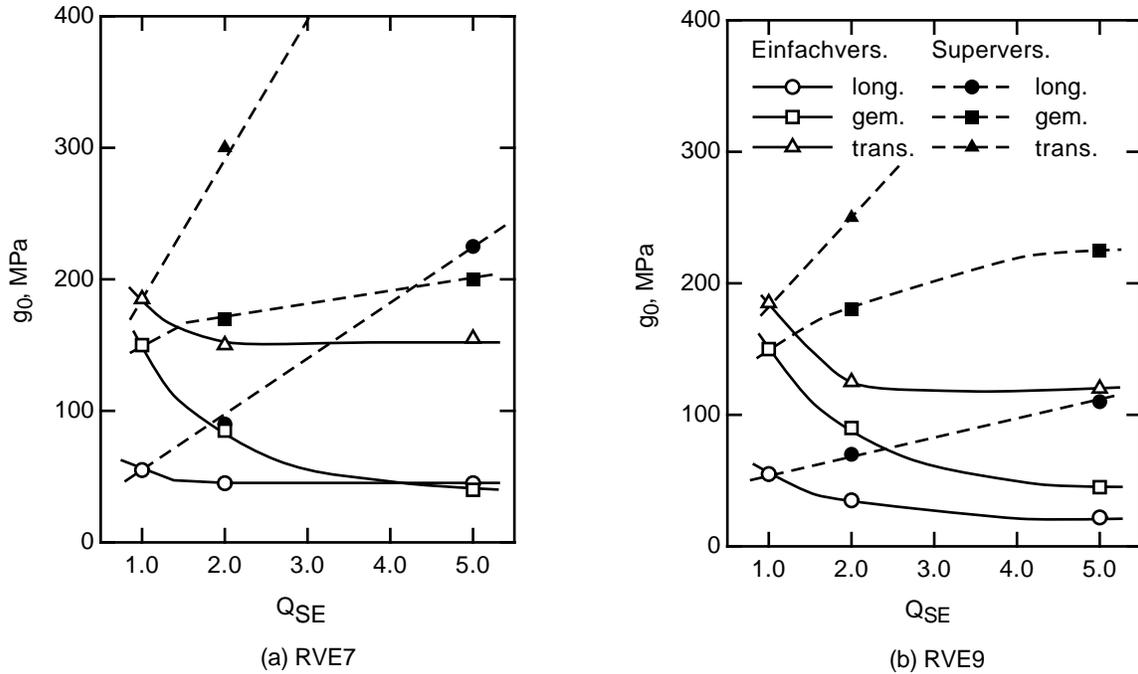


Bild 6.9: Anpassungsparameter g_0 für die unterschiedlichen Gleitsysteme in Abhängigkeit von Q_{SE} .

schiedlichen Gleitsysteme in Abhängigkeit von Q_{SE} gezeigt. Insbesondere bei dem Modell RVE7, und etwas schwächer beim Modell RVE9, zeigt sich, dass bei höheren Q_{SE} die transversalen und longitudinalen Superversetzungen sehr hohe kritische Schubspannungen annehmen, während alle anderen Versetzungssysteme endlichen Werten entgegenstreben. Dies bedeutet, dass diese Superversetzungen bei hohen Q_{SE} -Werten nicht mehr aktiviert werden, und folglich von anderen Systemen umgangen werden können. Es scheint daher, dass bei Druckbeanspruchung nur die gemischten, nicht aber die transversalen und longitudinalen Superversetzungen kinematisch benötigt werden.

6.3.3 Zug/Druck-Anomalie

In Abschnitt 6.3.1 wurde gezeigt, dass sich bei PST-Kristallen in der 0° - und 90° -Orientierung, wenn die Aktivierung von Superversetzungen unterdrückt wird, große Unterschiede im Zug- und Druckverhalten zeigen (Zug/Druck-Anomalie). Im Folgenden soll die Zug/Druck-Anomalie in Abhängigkeit von Q_{SE} exemplarisch für die 0° -Orientierung quantifiziert werden. Ausgangspunkt für diese Parametervariation ist wieder der rein morphologische Parametersatz. Hieraus wird gemäß dem jeweiligen Q_{SE} -Wert die Festigkeit der Supergleitsysteme variiert. Alle anderen Festigkeits- und Verfestigungsparameter bleiben dabei konstant. Die Zug/Druck-Anomalie wird sowohl für die Fließspannung als auch für die plastischen Querdehnungen untersucht.

In Bild 6.10(a) wird die Zug/Druck-Anomalie der Fließspannung für verschieden große plastische

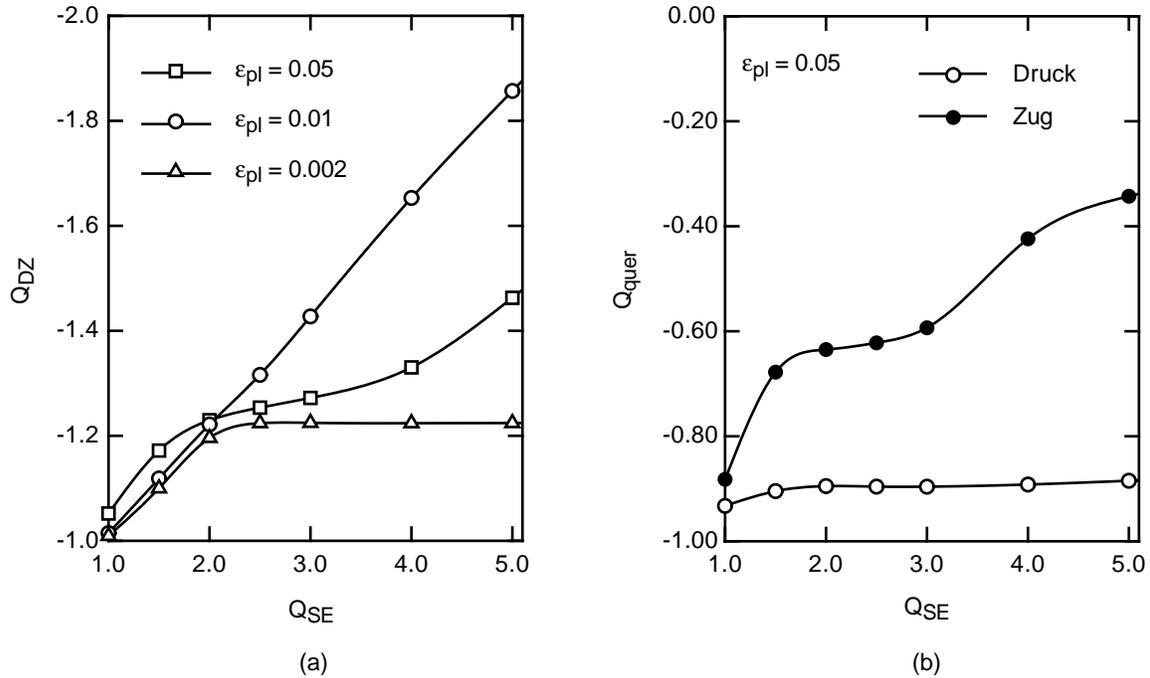


Bild 6.10: Zug/Druck-Anomalie in Abhängigkeit von der Festigkeit der Supergleitsysteme: (a) Anomalie der Fließspannung und (b) Anisotropie der relativen plastischen Querdehnung.

Dehnungen in Abhängigkeit von Q_{SE} gezeigt. Ausgedrückt wird die Zug/Druck-Anomalie hierbei durch den Quotienten der Fließspannungen $Q_{DZ} = R_p^{Druck}/R_p^{Zug}$. Bei einem rein morphologischen Parametersatz ($Q_{SE} = 1.0$), zeigt sich keine ausgeprägte Zug/Druck-Anomalie ($Q_{DZ} = -1.0$). Für größere Q_{SE} -Werte wird die Druckfließspannung zunehmend größer als die Zugfließspannung. Bis zu einem Wert von $Q_{SE} = 2.0$ ist der Zusammenhang zwischen Q_{SE} und Q_{DZ} für alle Dehnungen etwa linear. Für größere Q_{SE} -Werte ist Q_{DZ} dann sehr stark von der jeweiligen plastischen Dehnung abhängig.

In Bild 6.10(b) wird der Unterschied der relativen plastischen Querdehnung $Q_{quer} = (\epsilon_{11}/\epsilon_{22})_{pl}$ bei Zug- und bei Druckbeanspruchung gezeigt (Lastrichtung: x_3). Ein Wert von $Q_{quer} = -0.5$ bedeutet hierbei, dass die plastische Querdehnung isotrop ist, ein Wert von -1.0 bedeutet, dass eine ebene Verformung in der x_1 - x_2 -Ebene, also in der Lamellenebene, stattfindet, und ein Wert von 0.0, dass eine ebene Verformung in der x_2 - x_3 -Ebene stattfindet, siehe Bild 5.4.

Bei $Q_{SE} = 1.0$ zeigt sich kein großer Unterschied zwischen den plastischen Querdehnungen bei Zug- und bei Druckbeanspruchung. In beiden Fällen dominiert ein ebener Verformungszustand in der Lamellenebene mit $Q_{quer} \approx -0.9$. Bei Druckbeanspruchung bleibt dieser Verformungsmodus auch bei höheren Q_{SE} -Werten dominant. Bei Zugbeanspruchung ändert sich der Verformungszustand hingegen in zwei Stufen. In der ersten Stufe bei $Q_{SE} \approx 2.0$ hat Q_{quer} etwa den Wert -0.67 und in der zweiten Stufe bei $Q_{SE} \approx 5.0$ etwa den Wert -0.33. Die Änderungen deuten dabei jeweils auf einen Wechsel der vorherrschenden Gleitgeometrie hin.

6.3.4 Gleitgeometrien

Zum Abschluss der Untersuchung des Verformungsverhalten von PST-Kristallen wird für das Modell RVE7 die Aktivierung der unterschiedlichen Versetzungssysteme besprochen. Hierfür wurden für die Orientierungen 0, 45 und 90° exemplarisch für $Q_{SE} = 1.0$ und 2.0 Zug- und Drucksimulationen durchgeführt. Die Aktivität der Versetzungen ist in den individuellen γ -Domänen unterschiedlich. Bild 6.11 zeigt die Ergebnisse exemplarisch für die Matrixorientierungen M1, M2 und M3. Die Zwillingsorientierungen Z1, Z2 und Z3 zeigen prinzipiell die gleichen Gleitgeometrien und wurden hier nicht extra mit aufgenommen.

Bei $Q_{SE} = 1.0$ werden die Verformungsmechanismen sehr stark von den morphologischen Gleitmoden dominiert: Bei der 0° Orientierung dominiert der gemischte Gleitmode, bei der 45°-Orientierung der longitudinale und bei der 90°-Orientierung der transversale. Bei den Orientierungen 0 und 45° werden bei Zug- und bei Druckbeanspruchung überwiegend die gleichen Systeme von Super- und Einfachversetzungen aktiviert. Gemittelt über die 3 Matrixvarianten beträgt das Verhältnis der relativen Aktivitäten zwischen den Super- und Einfachversetzungen etwa 2:1. Bei der 90°-Orientierung werden bei Zug- und Druckbeanspruchung unterschiedliche Gleitsysteme aktiviert. Bei Druckbeanspruchung werden in allen Matrixvarianten die Super- und Einfachversetzungen im Verhältnis 2:1 aktiviert. Bei Zugbeanspruchung werden hingegen Super-, Zwillings- und Einfachversetzungen im Verhältnis 5:3:2 aktiviert.

Bei $Q_{SE} = 2.0$ bleiben bei Druckbeanspruchung die morphologischen Gleitmoden für die Verformungsmechanismen dominant. Es ändern sich teilweise jedoch die Verhältnisse der Aktivität der unterschiedlichen kristallographischen Versetzungstypen. Bei der 0°-Orientierung bleibt es, gemittelt über alle Matrixvarianten, etwa bei dem Verhältnis 2:1 zwischen den aktivierten Super- und Einfachversetzungen. Bei der 45°-Orientierung wird die Aktivität der Superversetzung zu Gunsten der Zwillings- und Einfachversetzungen deutlich reduziert. Zu beachten ist hierbei jedoch auch, dass die unterschiedlichen γ -Varianten in dem Modell RVE7 parallel angeordnet sind, so dass sich in ihnen sehr unterschiedliche absolute Versetzungsaktivitäten einstellen können. Insbesondere ist in diesem Fall die absolute Versetzungsaktivität in der Matrixvariante M2 sehr viel geringer als in den Matrixvarianten M1 und M3, so dass absolut betrachtet noch deutlich weniger Superversetzungen aktiviert werden. Bei der 90°-Orientierung werden Superversetzungen gar nicht mehr aktiviert, stattdessen werden nur Einfach- und Zwillingsversetzungen im Verhältnis 4:1 aktiviert.

Bei Zugbeanspruchung bleibt bei $Q_{SE} = 2.0$ die Dominanz der morphologischen Verformungsmoden nur bei der 45°- und 90°-Orientierung bestehen. Bei der 0°-Orientierung zeigt sich eine deutlich andere Gleitgeometrie als bei Druckbeanspruchung. Es werden neben den gemischten Einfach- und Superversetzungen auch transversale Einfach- und Zwillingsversetzungen aktiviert. Die Aktivität der gemischten Superversetzungen wird hierdurch im Vergleich zur Druckbeanspruchung deutlich reduziert. Bei der 45°-Orientierung werden wie bei der Druckbeanspruchung die longitudinalen Superversetzungen zu einem großen Teil durch longitudinale Einfach- und

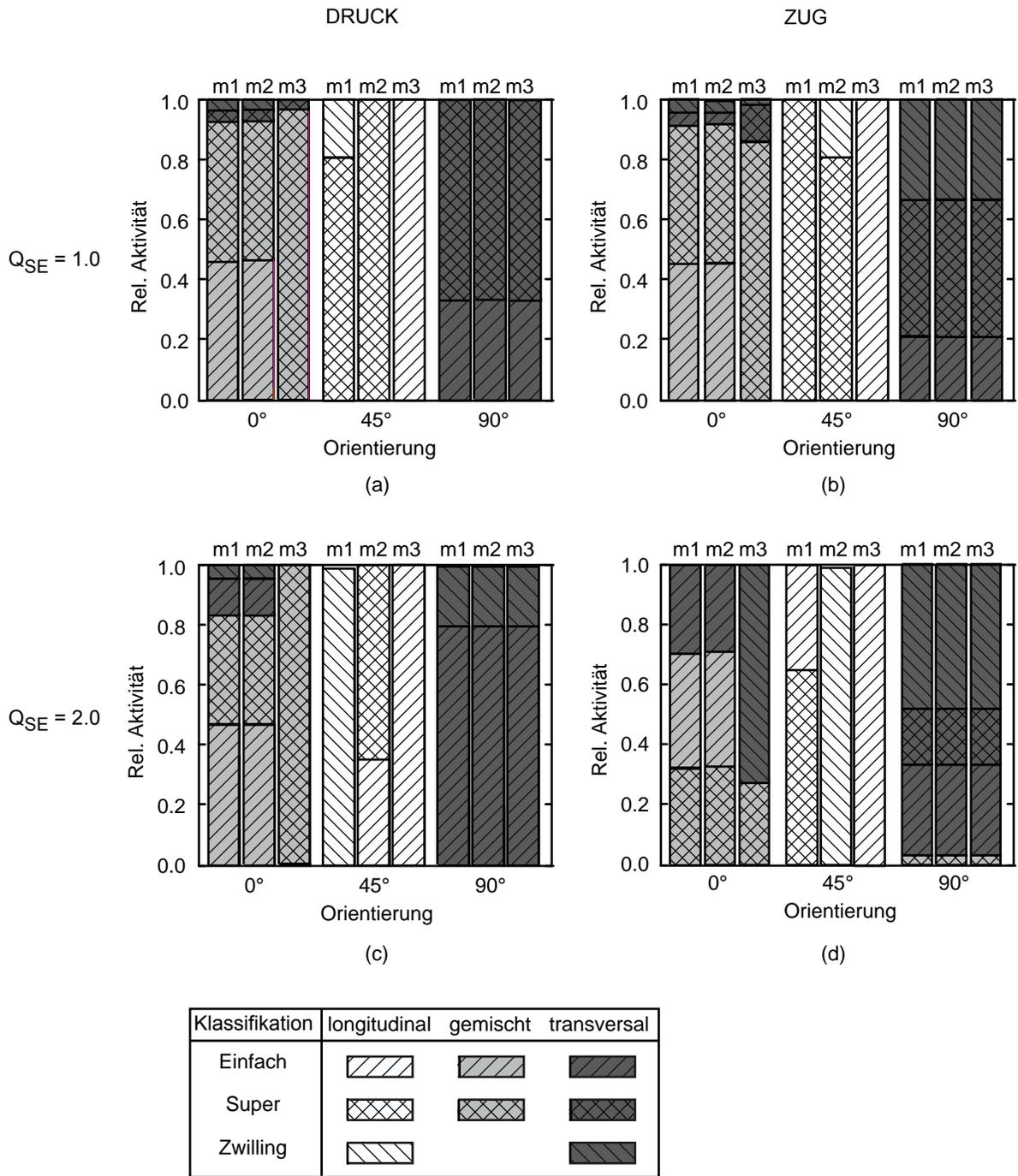


Bild 6.11: Relative Aktivität der verschiedenen Gleitsysteme in den unterschiedlichen γ -Domänen bei Zug- und Druckbeanspruchung: (a) Druck, $Q_{SE} = 1.0$; (b). Zug, $Q_{SE} = 1.0$; (c) Druck, $Q_{SE} = 2.0$; (d) Zug, $Q_{SE} = 2.0$.

Zwillingsversetzungen umgangen. Bei der 90° -Orientierung werden im Gegensatz zur Druckbeanspruchung Superversetzungen aktiviert. Das Verhältnis, in dem transversale Zwillings-, Einfach- und Superversetzungen aktiviert werden, beträgt etwa 5:3:2.

Mit den Ergebnissen kann die Zug/Druckanomalie, die sich in den Simulationen zeigt, sehr gut erklärt werden. Bei der 0° -Orientierung können die festen Supergleitsysteme bei Zugbeanspruchung durch eine Kombination von transversalen Einfach- und Zwillingsversetzungen umgangen werden. Wegen der Unidirektionalität der Zwillingsgleitung steht dieser Umgehungsmechanismus nur bei Zug-, nicht aber bei Druckbeanspruchung zur Verfügung. Neben einer Verringerung der Fließspannung, führen die transversalen Verformungsanteile bei Zugbeanspruchung auch dazu, dass die plastische Querverformung isotroper wird.

Bei der 90° -Orientierung können die Superversetzungen bei Druckbeanspruchung durch eine Kombination von transversalen Einfach und Zwillingsversetzungen vollständig umgangen werden. Bei Zugbeanspruchung werden die für den Umgehungsmechanismus benötigten Zwillingsversetzungen nicht aktiviert. Mit den bei Zugbeanspruchung aktivierten Zwillingsversetzungen ist eine Umgehung der Superversetzungen offensichtlich nicht vollständig möglich, so dass sich hier bei Zugbeanspruchung eine höhere Fließspannung einstellt als bei Druckbeanspruchung.

6.4 Zusammenfassende Diskussion

In den letzten Abschnitten wurde das Verformungsverhalten von PST-Kristallen systematisch mit Hilfe von periodischen Einheitszellen untersucht. Es wurde gezeigt, dass sich mit rein morphologischen Parametersätzen ($Q_{SE} = 1.0$) die plastische Anisotropie von PST-Kristallen sehr gut beschreiben lässt. Gewisse Unterschiede zwischen den Simulationen und Experimenten, die sich für die PST-Orientierungen 10° , 15° , 75° und 85° ergaben, konnten teilweise auf den Einfluss der äußeren Randbedingungen zurückgeführt werden.

Aus elektronenmikroskopischen Untersuchungen ist bekannt, dass sich Superversetzungen schwerer aktivieren lassen als Einfach- und Zwillingsversetzungen. Unbekannt war bisher, welchen Einfluss die Festigkeit der Supergleitsysteme auf das mechanische Verhalten von PST-Kristallen hat. Hierzu wurde in systematischen Parametervariationen zunächst nachgewiesen, dass Superversetzungen für die 0° -Orientierung bei Druckbeanspruchung und die 90° -Orientierung bei Zugbeanspruchung kinematisch notwendig sind. Diese Ergebnisse stützen die Arbeit von Mecking *et al.* [64], in der gezeigt wurde, dass die Fließfläche von γ -TiAl-Einkristallen ohne Superversetzungen nicht geschlossen ist.

Wenn das Verhältnis der Festigkeiten der Super- und Einfachversetzungen (Q_{SE}) als zusätzlicher Parameter in die Modellierung eingeführt wird, können die Parameter nicht mehr eindeutig aus PST-Druckversuchen allein bestimmt werden. Es müssen zusätzliche experimentelle Informationen für eine eindeutige Parameterbestimmung berücksichtigt werden. Für $Q_{SE} > 1.0$ zeigen die PST-Simulationen eine Zug/Druck-Anomalie. Insbesondere für die 0° -Orientierung, ist

die Anomalie ausgeprägt, und zeigt sich sowohl in der Fließspannung als auch in den plastischen Querdehnungen. Die Zug/Druck-Anomalie der 0° -PST-Orientierung kann daher zu einer Abschätzung von Q_{SE} herangezogen werden.

Bis heute wurde die Zug/Druck-Anomalie von PST-Kristallen experimentell nur sporadisch untersucht, so dass hier nur eine sehr grobe Abschätzung von Q_{SE} möglich ist. Die wenigen experimentellen Untersuchungen zur Zug/Druck-Anomalie wurden von Inui *et al.* [18] und Kishida *et al.* [36] veröffentlicht. Inui *et al.* [18] haben die Zug/Druck-Anomalie der Fließspannung untersucht. Für die 0° -Orientierung haben sie hierbei im Rahmen der experimentellen Streuung keine signifikante Zug/Druck-Anomalie gefunden. Geht man von einer experimentellen Streuung der Meßwerte von etwa 10–20% aus, folgt aus Bild 6.10(a), dass die Supergleitsysteme höchstens um den Faktor $Q_{SE} \approx 1.5$ fester sein können als die Einfach- und Zwillingsgleitsysteme. Kishida *et al.* [36] haben die Zug/Druckanomalie der plastischen Querdehnungen untersucht. Nach ihren Ergebnissen verformt ein 0° -PST-Kristall im Druckversuch mit $Q_{\text{quer}} \approx -1.0$ und im Zugversuch mit $Q_{\text{quer}} \approx -0.67$. Hieraus folgt aus Bild 6.10(b) für die Festigkeit der Supergleitsysteme ein Wertebereich $Q_{SE} \approx 1.25 \dots 3.0$. Werden beide Ergebnisse kombiniert, ergibt sich als grobe Abschätzung: $Q_{SE} \approx 1.25 \dots 1.5$. Für eine exaktere Bestimmung wären detailliertere Versuchsergebnisse notwendig, diese liegen bisher aber nicht vor.

Weitere Informationen für die Parameteranpassung ließen sich theoretisch aus der Untersuchung der relativen Aktivitäten der unterschiedlichen Versetzungssysteme gewinnen. Tatsächlich stimmen die numerisch (Abschnitt 6.3.4) und experimentell gefundenen Gleitsysteme (Abschnitt 2.2.4) [36, 37] qualitativ gut überein. Für eine exakte Parameteranpassung müssten die Aktivitäten der unterschiedlichen Gleitsysteme experimentell quantifiziert werden. Hierfür stehen derzeit jedoch noch keine geeigneten experimentellen Methoden zur Verfügung.

Kapitel 7

Ergebnisse: PST-Bruch

Nachdem im letzten Kapitel das Verformungsverhalten von PST-Kristallen besprochen wurde, soll nun in ähnlicher Weise das anisotrope Bruchverhalten von PST-Kristallen für die Hauptorientierungen RT, D und RS mit Hilfe von FE²-Simulationen untersucht werden.

Im nächsten Abschnitt wird zunächst, exemplarisch für die RT-Orientierung, der Einfluss der wesentlichen Kohäsivparameter auf das Bruchverhalten untersucht und mit der Ausdehnung der plastischen Zone korreliert.

Anschließend wird nacheinander für die Orientierungen RT, D und RS das Bruchverhalten untersucht. Hierbei werden jeweils die FE²-Simulationen mit den Experimenten verglichen, die Kohäsivparameter soweit wie möglich bestimmt und das Bruchverhalten an Hand des jeweiligen Bruchmechanismus mikromechanisch interpretiert.

Um den Rechenaufwand klein zu halten, wurden alle FE²-Simulationen mit Hilfe der vereinfachten Einheitszelle RVE3 durchgeführt (Abschnitt 3.3).

7.1 Parametervariation (RT-Orientierung)

Die unabhängigen Parameter des Kohäsivmodells sind T_0 , Γ_0 und Γ_{23} . Der Einfluss dieser Parameter auf die Kraft–Verschiebungskurven soll im Folgenden untersucht werden. Der Parameter Γ_{23} hat, wie sich dabei zeigen wird, nur eine untergeordnete Bedeutung, sodass es ausreicht, nur die beiden Grenzfälle $\Gamma_{23} \ll \Gamma_0$ und $\Gamma_{23} \approx \Gamma_0$ zu betrachten, welche einem nahezu rechteckförmigen bzw. einem nahezu dreieckförmigen Kohäsivgesetz entsprechen.

Für die Interpretation und den Vergleich von Kraft–Verschiebungskurven ist es notwendig den Kurvenverlauf durch geeignete Kenngrößen zu charakterisieren. Die wesentlichen Kenngrößen sind die Höhe (Kraft) und die Lage (Verschiebung) des Kraftmaximums sowie die Entfestigungsrate hinter dem Kraftmaximum. Als abgeleitete Größe ist darüberhinaus die Fläche unter den Kurven von Bedeutung, die als Maß für den Risswiderstand die gesamte in der Probe dissipierte

Arbeit wiedergibt.

Die Simulationen werden mit T_0 -Grenzkurven verglichen, die den Grenzfall $\Gamma_0 \rightarrow \infty$ beschreiben. Die Grenzkurven werden jeweils für $T_0 = 400, 500, 600$ und 1000 MPa angegeben. Von besondere Bedeutung ist die 1000 -MPa-Grenzkurve, da bei der RT-Orientierung bei $T_0 = 1000$ MPa die Kohäsivzone gerade nicht aktiviert wird, sodass die Kurve das rein plastische Verhalten ohne Schädigung wiedergibt. Der Abstand von dieser Kurve kann daher als Schädigungseinfluss interpretiert werden.

In Bild 7.1(a) wird exemplarisch für $T_0 = 600$ MPa und $\Gamma_{23} \ll \Gamma_0$ der Einfluss von Γ_0 gezeigt. Die Kraft–Verschiebungskurven für die beiden untersuchten Werte $\Gamma_0 = 5.0$ und 10.0 N/mm folgen beide zunächst der 600 -MPa-Grenzkurve. Durch Γ_0 wird die Lage des Kraftmaximums festgelegt. Je größer Γ_0 ist, desto später wird das Kraftmaximum erreicht. Γ_0 beeinflusst aber nicht nur den Beginn der Entfestigung, sondern auch die Entfestigungsrate. Je größer Γ_0 ist, desto langsamer entfestigt das Material.

In Bild 7.1(b) wird für $\Gamma_0 = 5.0$ N/mm und $\Gamma_{23} \ll \Gamma_0$ der Einfluss von T_0 gezeigt. T_0 legt die Grenzkurve einer Kraft–Verschiebungskurve und somit auch das erreichbare Kraftmaximum fest. Wie in Bild 7.1(b) zu erkennen ist, hat T_0 , zumindest im untersuchten Wertebereich, nur einen geringen Einfluss auf die Lage des Kraftmaximums, so dass durch T_0 hauptsächlich die Höhe des Kraftmaximums bestimmt wird. Darüberhinaus hat T_0 einen deutlichen Einfluss auf die Entfestigungsrate. Je größer T_0 ist, desto kleiner ist die Entfestigungsrate.

In Bild 7.1(c) wird für $\Gamma_0 = 5.0$ N/mm und $T_0 = 600$ MPa der Unterschied zwischen einem nahezu rechteckförmigen ($\Gamma_{23} \ll \Gamma_0$) und einem nahezu dreieckförmigen ($\Gamma_{23} \approx \Gamma_0$) Kohäsivgesetz gezeigt. Im Prinzip folgen beide Kraft–Verschiebungskurven zunächst der 600 -MPa-Grenzkurve. Bei dem dreieckförmigen Kohäsivgesetz wird das Kraftmaximum etwas früher erreicht als bei dem rechteckförmigen Gesetz. Auf die Entfestigungsrate hat Γ_{23} nur einen geringen Einfluss. Wenn Γ_{23} zu klein wird, tritt jedoch das bereits erwähnte Rückfeder-Problem auf (siehe Abschnitt 3.2). In der Kraft–Verformungskurve führt das Rückfeder-Problem zunächst zu einem stufenförmigen Entfestigungsverhalten und endet schließlich im Abbruch der Rechnung.

Mit Blick auf die in den Proben dissipierte Arbeit ist festzustellen, dass bei allen Simulationen die geleistete Brucharbeit deutlich größer ist als die Kohäsivarbeit allein. Beispielsweise bei der Simulation mit $\Gamma_0 = 5$ N/mm und $T_0 = 600$ MPa beträgt die Kohäsivarbeit maximal $2B(W - a)\Gamma_0 = 68$ Nmm. (Zu beachten ist, dass bei den Simulationen die Schädigung in 2 Integrationspunkt-Reihen gleichzeitig stattfindet. Der angegebene Γ_0 -Wert bezieht sich jedoch jeweils nur auf einen Integrationspunkt. Für den Vergleich mit den Experimenten muss dieser Wert also verdoppelt werden.) Die gesamte Brucharbeit, die sich aus der Fläche unter der Kurve ergibt, beträgt jedoch mehr als 225 Nmm. Die Kohäsivarbeit trägt somit zu weniger als einem Drittel der Gesamtarbeit bei. Der größte Teil der Arbeit wird folglich in der plastischen Zone außerhalb der Kohäsivzone dissipiert.

Wenn der größte Anteil der Gesamtarbeit in der plastischen Zone dissipiert wird, dann ist auch

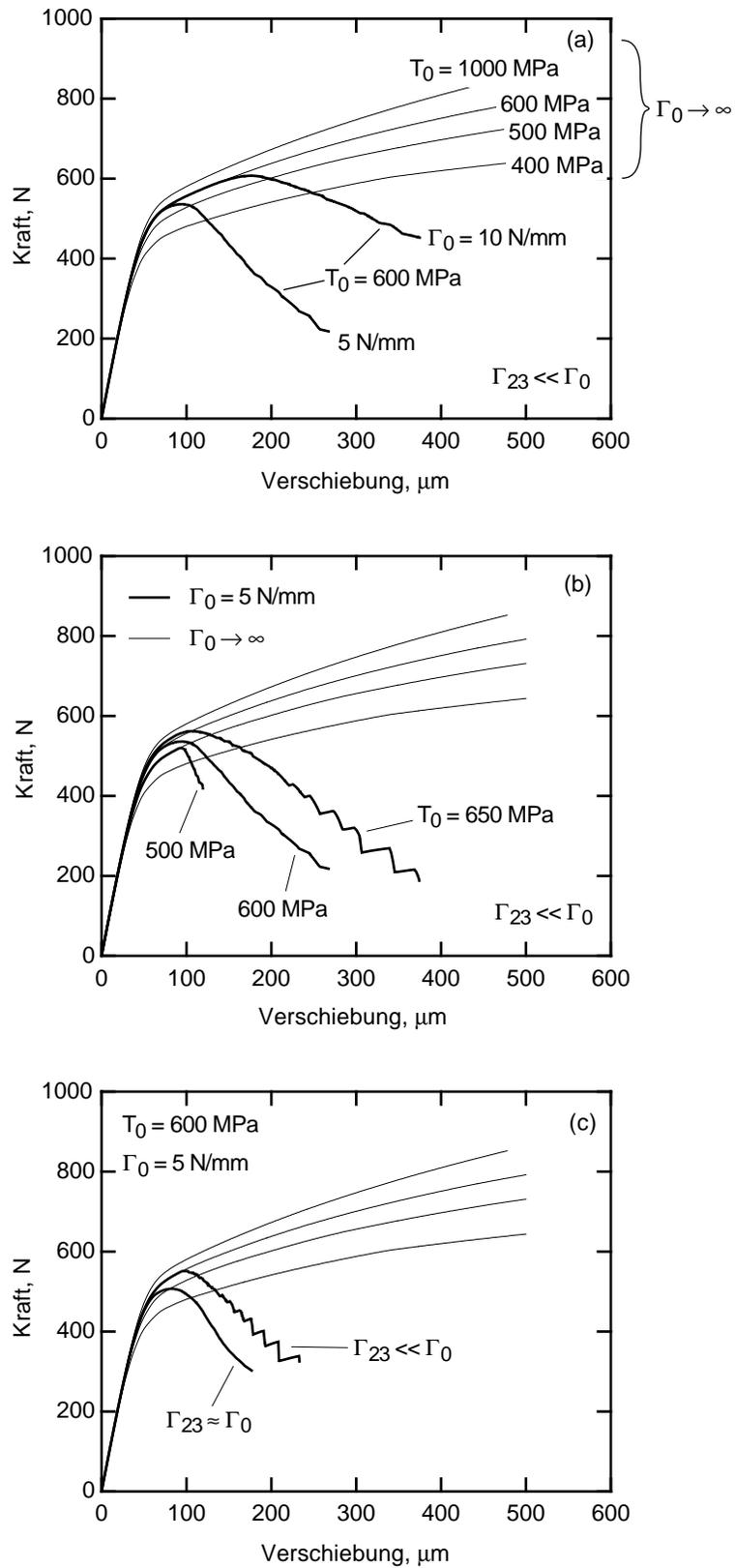


Bild 7.1: Variation der Kohäsivparameter für die RT-Orientierung: (a) Einfluss von Γ_0 , (b) T_0 und (c) Γ_{23} .

der Einfluss der unterschiedlichen Kohäsivparameter hauptsächlich durch deren Einfluss auf die plastische Zonengröße zu erklären. Aus diesem Grund wird im Folgenden der Einfluss der Kohäsivparameter auf die Ausdehnung der plastischen Zonen aufgezeigt.

Da es bei der verwendeten FE²-Methode nicht ohne Weiteres möglich ist, die plastischen Vergleichsdehnungen auszugeben, wird in den Dehnfeldern in Bild 7.2(a–d) jeweils die Dehnungskomponente ϵ_{22} dargestellt. In diesem Fall ist ϵ_{22} die Hauptverformungskomponente, sodass die in den Bildern rot dargestellten Bereiche mit $\epsilon_{22} > 0.005$ die Ausdehnung der plastischen Zonen zumindest qualitativ gut erkennen lassen.

Aus Gründen der Vergleichbarkeit werden in Bild 7.2(a–d) jeweils die Zustände in der Nähe des Kraftmaximums dargestellt. Der Vergleich zwischen Bild 7.2(a) und (b) zeigt den Einfluss von T_0 bei $\Gamma_0 = 5$ N/mm und eine nahezu rechteckförmigen Kohäsivgesetz. Bei $T_0 = 500$ MPa, ist die plastische Zone nicht sehr stark ausgeprägt. Die Dehnung konzentriert sich in einem kleinen Band vor der Rissspitze, der mit der Schädigungszone identisch ist. Die Erhöhung auf $T_0 = 600$ MPa führt zu einer deutlichen Vergrößerung der plastischen Zone. Dieses Ergebnis korreliert mit der aus Bild 7.1(a) ersichtlichen Zunahme der Brucharbeit.

Der Vergleich zwischen Bild 7.2(a) und (c) zeigt den Einfluss von Γ_0 bei $T_0 = 600$ MPa und einem nahezu rechteckförmigen Gesetz. Die Erhöhung von Γ_0 von 5.0 auf 10.0 N/mm bewirkt eine drastische Vergrößerung der plastischen Zone. Die Vergrößerung der plastischen Zone korreliert mit dem Ergebnis aus Bild 7.1(b).

Der Vergleich zwischen Bild 7.2(b) und (d) zeigt schließlich den Einfluss von Γ_{23} bei $T_0 = 600$ MPa und $\Gamma_0 = 5$ N/mm. Der Übergang von einem nahezu rechteckförmigen ($\Gamma_{23} \ll \Gamma_0$) zu einen nahezu dreieckförmigen Gesetz ($\Gamma_{23} \approx \Gamma_0$) führt zu einer deutlichen Verkleinerung der plastischen Zone. Die Ausdehnung der plastischen Zone korreliert somit mit dem Ergebnis aus Bild 7.1(c).

Der Einfluss der unterschiedlichen Kohäsivparameter auf die Kraft–Verschiebungskurven (siehe Bild 7.1) kann somit hauptsächlich auf deren Einfluss auf die Ausdehnung der plastischen Zone zurückgeführt werden. Der Anteil der Kohäsivarbeit Γ_0 an der gesamten Brucharbeit ist dabei verhältnismäßig klein.

7.2 Riss-Teiler (RT)

7.2.1 Parameteranpassung

Nachdem der Einfluss der einzelnen Kohäsivparameter für die RT-Orientierung bekannt ist, sollen die Parameter im Folgenden bestimmt werden. Hierfür werden sowohl für ein nahezu rechteckförmiges als auch für ein nahezu dreieckförmiges Gesetz T_0 und γ_0 angepasst. Der Vergleich beider Anpassungen erlaubt dann Rückschlüsse über die eigentliche Form des Kohäsivgesetzes.

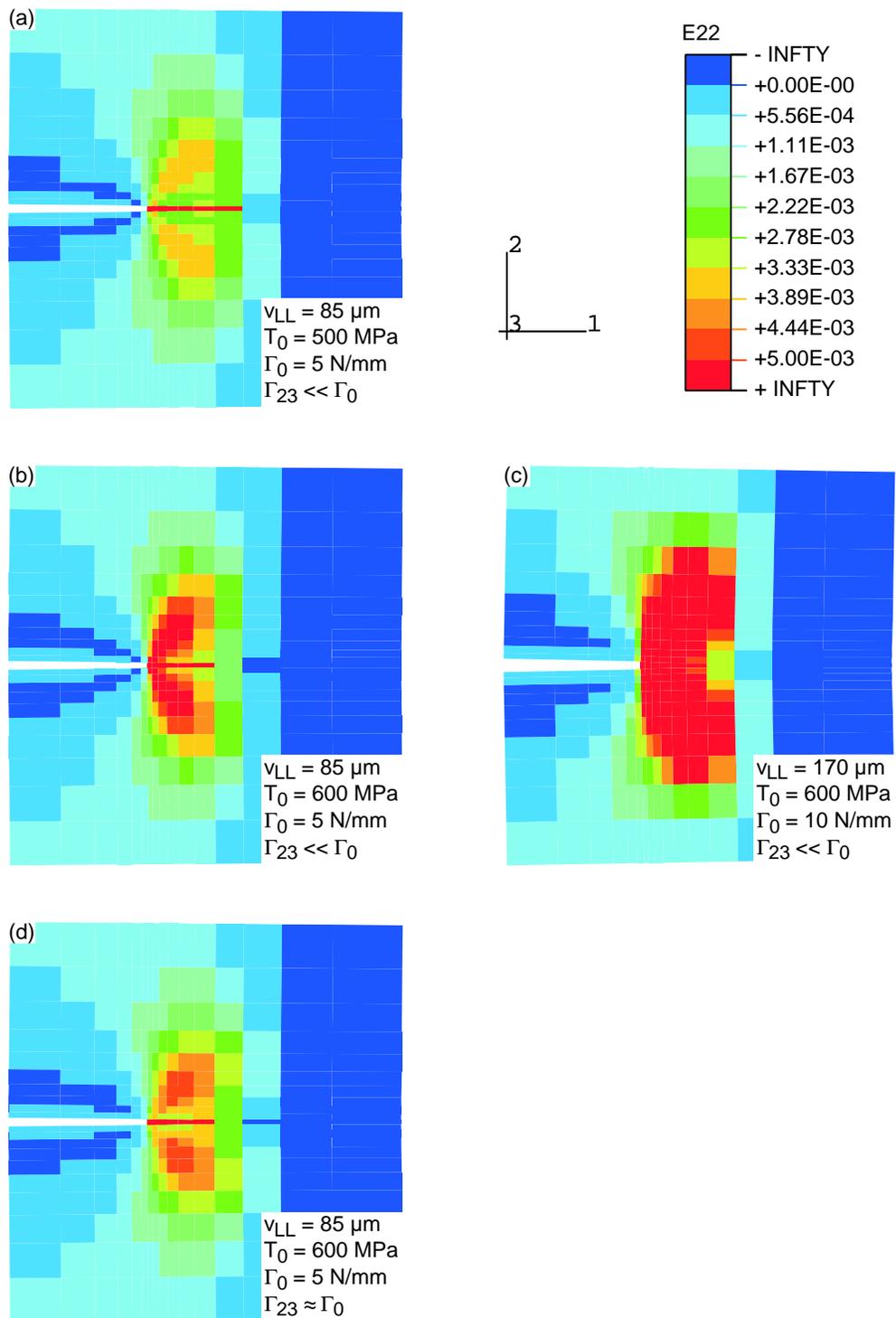


Bild 7.2: Einfluss der Kohäsivparameter auf die Ausdehnung der plastischen Zone. Die Konturbilder entsprechen jeweils dem Zustand im Lastmaximum.

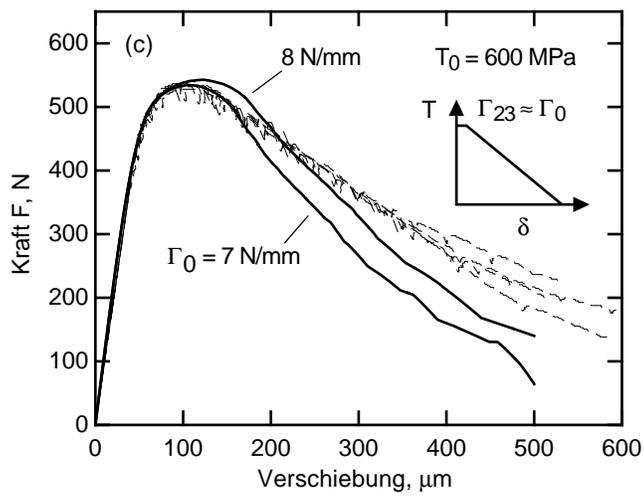
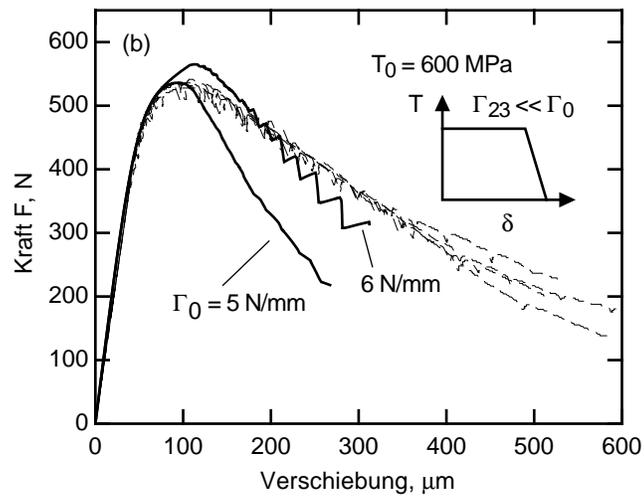
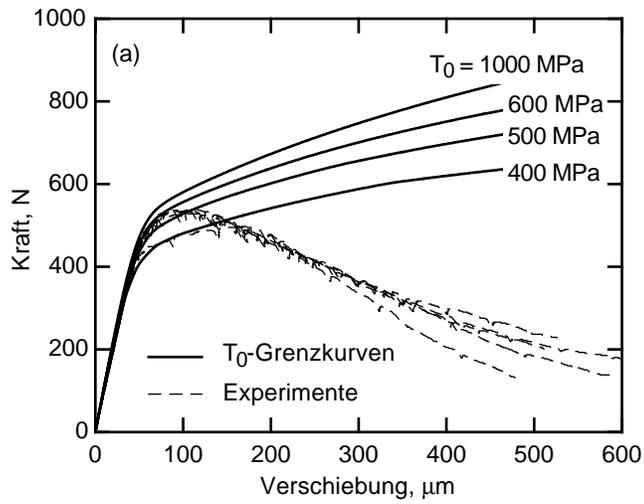


Bild 7.3: Anpassung der Kohäsivparameter für die RT-Orientierung.

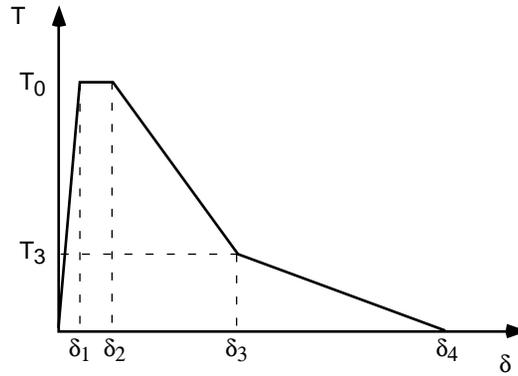


Bild 7.4: Kohäsivgesetz mit einem bilinearen Entfestigungsbereich (Hillerborg-Modell [65, 66]).

In Bild 7.3(a) werden die experimentellen Kraft–Verschiebungskurven mit den T_0 -Grenzkurven für 400, 500, 600 und 1000 MPa verglichen. Bis zur einsetzende Entfestigung stimmen die meisten der experimentellen Kurven gut mit der 600-MPa-Grenzkurve überein. Lediglich ein experimenteller Ausreißer hat eine gute Übereinstimmung mit der 400-MPa-Grenzkurve. Da die Grenzkurven unabhängig von der Form des Kohäsivgesetzes sind, ist $T_0 = 600$ MPa für beide Parametersätze ein guter Näherungswert.

In Bild 7.3(b) wird für ein nahezu rechteckförmiges Gesetz und $T_0 = 600$ MPa die Anpassung für Γ_0 gezeigt. Die beste Anpassung wird mit $\Gamma_0 = 5.0$ N/mm erzielt. Mit diesem Wert ergibt sich bis zum Kraftmaximum eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Kurven. Nach dem Kraftmaximum wird die Entfestigungsrate jedoch deutlich überschätzt. Mit einem etwas höheren Γ_0 kann das Entfestigungsverhalten zwar geringfügig besser beschrieben werden, jedoch wird dann das Kraftmaximum deutlich überschätzt, so dass die Anpassung insgesamt schlechter wird.

Für das nahezu dreieckförmigen Kohäsivgesetz und $T_0 = 600$ MPa wird die Anpassung für Γ_0 in Bild 7.3(c) gezeigt. Mit dem dreieckförmigen Gesetz wird die Kraft–Verschiebungskurve insgesamt besser beschrieben als mit dem rechteckförmigen Gesetz. Die beste Übereinstimmung wird mit $\Gamma_0 = 7.0$ N/mm erzielt. Mit diesem Wert werden die Kraft–Verschiebungskurven bis kurz hinter das Kraftmaximum gut beschrieben. Im hinteren Bereich der Kurve wird die Entfestigungsrate jedoch ebenfalls überschätzt.

Die Beschreibung der experimentellen Kraft–Verschiebungskurve ist umso besser, je größer Γ_{23} ist. Mit einem maximalen Γ_{23} , d.h. mit einem dreieckförmigen Kohäsivgesetz, gelingt es jedoch noch nicht, die ganze Kraft–Verschiebungskurve genau abzubilden. Der Vergleich der berechneten Kraft–Verschiebungskurven mit den Experimenten legt somit nahe, dass für die Beschreibung des Bruchverhaltens eher ein Kohäsivgesetz mit einem bilinearen Entfestigungsbereich (siehe Bild 7.4) geeignet wäre, wie es von Hillerborget *al.* [65, 66] für Beton vorgeschlagen wurde, und auch heute noch Verwendung findet, siehe z.B. [67]. Für die Modellierung würde die Anwendung eines solchen Kohäsivgesetzes bedeuten, dass zwei zusätzliche Parameter (hier T_3 ,

δ_3) an die Experimente angepasst werden müssten. Hierdurch würde sich der Aufwand für die Parameteranpassung erheblich erhöhen.

7.2.2 Beschreibung des Bruchmechanismus

Nachdem die Kohäsivparameter festliegen, soll als nächstes überprüft werden, ob die Parameter physikalisch sinnvoll sind, um den eigentlichen Bruchmechanismus abzubilden. Hierfür wurde der Bruchvorgang in situ und post mortem im Rasterelektronenmikroskop untersucht.

Bild 7.5(a) zeigt die Seitenfläche einer Probe, bei der die α_2 -Lamellen nicht vollständig parallel zur Seitenfläche ausgerichtet waren. Durch die leichte Missorientierung sind die α_2 -Lamellen auf der Seitenfläche als helle Streifen zu erkennen. Wenn der Riss fortschreitet, entstehen auf der Seitenfläche zunächst Mikrorisse in den α_2 -Lamellen, Bild 7.5(a). Diese Mikrorisse entstehen bevorzugt in der Nachbarschaft von γ -Lamellen mit ausgeprägten Gleitspuren, Bild 7.5(b). Nach den Mikrorissen bilden sich in der zweiten Stufe des Bruchvorganges Delaminationen aus. Bild 7.5(c) zeigt einen Schnitt durch eine Probe unmittelbar vor der Rissspitze. In diesem Bild sind zahlreiche Delaminationen zu erkennen. Die Delaminationen finden offensichtlich auf drei unterschiedlichen Längenskalen statt. Die größten Delaminationen (I) haben eine Ausdehnung von etwa 300–600 μm und einen Abstand von etwa 200–400 μm . Sie entstehen bevorzugt an α_2 -Säumen wie in Bild 7.5(c,d) zu erkennen ist. Es ist daher wahrscheinlich, dass diese Delaminationen unmittelbar nach den Mikrorissen entstehen. Die nächst kleineren Delaminationen (II) haben eine Ausdehnung von etwa 50–100 μm und einen Abstand von 20–30 μm . Sie entstehen bevorzugt zwischen γ -Lamellen, Bild 7.5(d). Die kleinsten Delaminationen (III) haben eine Ausdehnung von wenigen μm sind zwischen fast allen gebrochenen Einzellamellen zu finden, Bild 7.5(d,e). Durch die Delaminationen ist die gesamte Bruchfläche stark zerklüftet, Bild 7.5(f). Der lokale Bruch in den Einzellamellen ist jedoch ein relativ glatter Spaltbruch, Bild 7.5(e).

7.2.3 Mikromechanische Interpretation

Für die mikromechanische Interpretation des Bruchverhaltens ist es sinnvoll, die lokale Beanspruchung einer (freien) Einzellamelle an der Rissspitze sowie die Orientierungen der Gleitsysteme zu betrachten. Bild 7.6 zeigt schematisch eine Einzellamelle an der Rissspitze und die prinzipiellen Orientierungen der longitudinalen, gemischten und transversalen Gleitsysteme. Wegen der geringen Grenzflächenfestigkeit können die Spannungen in Richtung der Lamellennormalen vernachlässigt werden ($\sigma_{zz} = 0$). Durch die Dehnungsbehinderung stellt sich in dem Volumenelement an der Rissspitze somit ein zweiachsiger (Zug-)Spannungszustand ein.

Der Spannungszustand wirkt sich auf die Gleitsysteme folgendermaßen aus: Auf Grund der Symmetrie ist die in den longitudinalen Gleitsystemen wirkende Schubspannung $\tau_{\text{long}} = 0$. Die longitudinalen Gleitsysteme werden daher nicht aktiviert. In den gemischten Gleitsystemen ist die maximal wirkende Schubspannung gegeben durch: $\tau_{\text{gem}} = (\sigma_{yy} - \sigma_{xx})/2$. Durch die Deh-

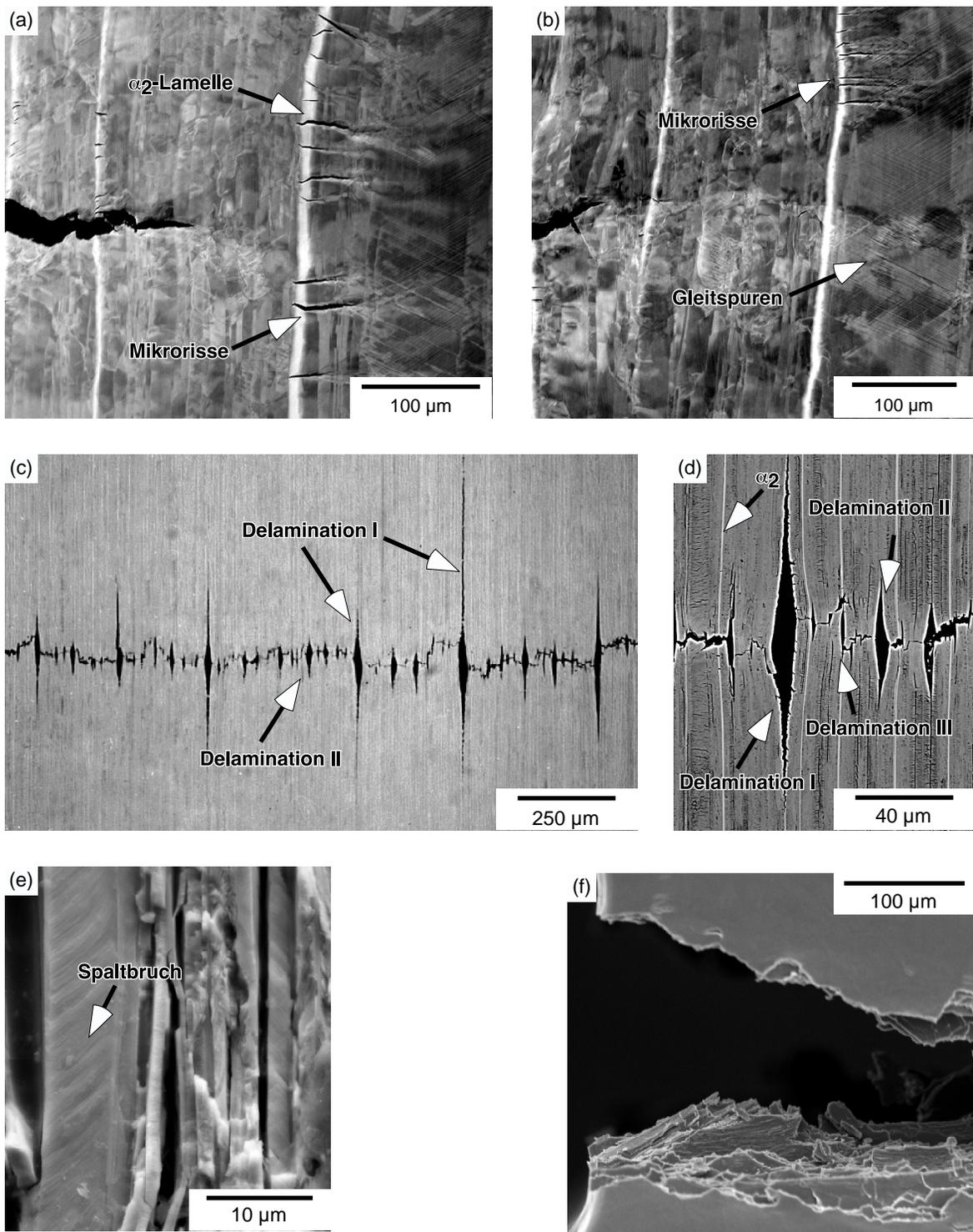


Bild 7.5: Schematisch Darstellung des Bruchvorganges in RT-PST-Biegeproben.

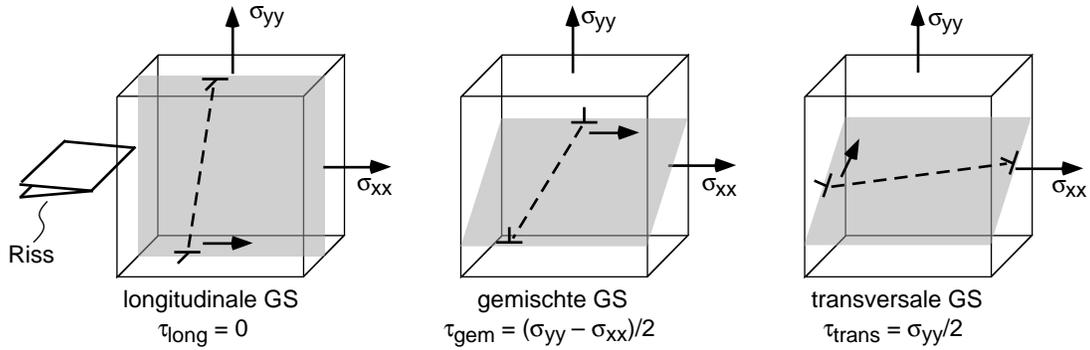


Bild 7.6: Orientierung der Gleitsysteme an der Risspitze (RT-Biegeprobe).

nungsbehinderung wird τ_{gem} daher sehr stark reduziert, sodass die gemischten Gleitsysteme erst bei höheren Spannungen aktiviert werden. Tatsächlich ist, da sie nur zu einer ebenen Verformung führen, mit einem signifikanten Anteil der gemischten Versetzungssysteme an der plastischen Gesamtverformung erst dann zu rechnen, wenn der Nettoquerschnitt der Probe durchplastiziert ist, siehe z.B. [68]. Die maximal wirkende Schubspannung wird in den transversalen Versetzungssystemen erreicht und ist gegeben durch: $\tau_{\text{trans}} = \sigma_{yy}/2$. An der Risspitze werden daher bevorzugt transversale Gleitsysteme aktiviert.

Die Aktivierung von transversalen Versetzungssystemen führt zu einer plastischen Inkompatibilität zwischen den γ - und den α_2 -Lamellen. Während in den γ -Lamellen zumindest die Aktivierung von transversalen Einfach- und Zwillingsversetzungen relativ leicht möglich ist, haben die transversalen (pyramidalen) Versetzungen in den α_2 -Lamellen eine äußerst hohe kritische Schubspannung. In den α_2 -Lamellen führt die plastische Verformung des lamellaren Verbundes daher zu großen elastischen Verzerrungen mit entsprechend hohen Spannungen. Aus diesem Grund ist die Wahrscheinlichkeit, dass die α_2 -Lamellen lokal durch Mikrorissbildung versagen, relativ groß.

Der für α_2 -Lamellen skizzierte Schädigungsmechanismus kann aber nicht nur α_2 -, sondern auch γ -Lamellen betreffen. Bei den transversalen γ -Gleitsystemen haben die Superversetzungen eine höhere kritische Schubspannung als die Einfach- oder Zwillingsversetzungen. Da die γ -Domänen in 6 unterschiedlichen Orientierungsvarianten vorkommen, ist es nicht unwahrscheinlich, dass in einigen Domänen die Einfach- und Zwillingsgleitsystem ungünstige Schmid-Faktoren haben, sodass für die plastische Verformung die festeren Supergleitsysteme aktiviert werden müssen. In diesem Fall könnten sich in den betreffenden γ -Domänen ebenfalls sehr hohe Spannungen einstellen, die zu einem lokalen Versagen führen.

Durch das Versagen von einzelnen Lamellen werden Delaminationen in den Grenzflächen initiiert. Die Delaminationen erlauben dann, dass sich die verbleibenden Lamellenpakete plastisch weiter verformen können, wobei sie lokal einschnüren. Der gesamte Mechanismus der Mikrorissbildung, Delamination und lokaler Einschnürung wird schematisch in Bild 7.7 gezeigt.

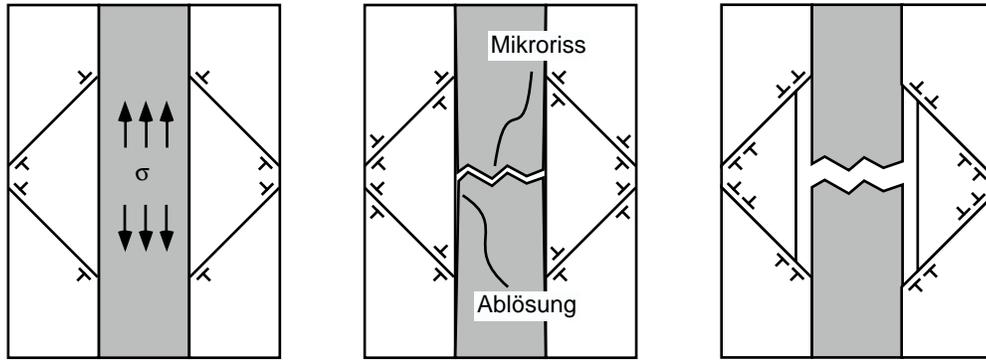


Bild 7.7: Mechanismus der Mikrorissbildung, Delamination und lokaler Einschnürung.

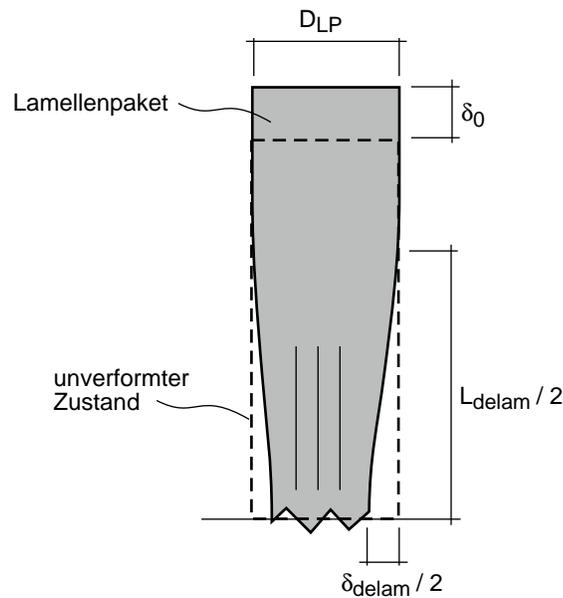


Bild 7.8: Geometrische Größen bei der lokalen Einschnürung eines Lamellenpaketes.

Nachdem der Bruchmechanismus beschrieben ist, bleibt noch zu klären, ob der Mechanismus mit den ermittelten Kohäsivparametern in Einklang steht.

Die Kohäsivspannung T_0 ergibt sich bei dem skizzierten Bruchmechanismus aus der lokalen Fließspannung des lamellaren Verbundes (unter Dehnungsbehinderung) an der Risspitze. Wie dargestellt, ist für die plastische Verformung des lamellaren Verbundes die Aktivierung von transversalen Versetzungen notwendig. Hierfür ist eine Spannung in der Größenordnung der 90° -PST-Fließspannung notwendig. Diese beträgt etwa 650 MPa, siehe Bild 6.1. Diese Spannung stimmt relativ gut mit der ermittelten Kohäsivspannung von 600 MPa überein.

Die Kohäsivöffnung δ_0 kann aus der Geometrie der lokalen Einschnürung abgeschätzt werden, siehe Bild 7.8. Unter Berücksichtigung, dass δ_0 nur für eine Reihe von Integrationspunkten

definiert wurde (aber jeweils zwei versagen), gilt für δ_0 :

$$\delta_0 \approx \delta_{\text{delam}} \frac{L_{\text{delam}}}{2D_{\text{LP}}} \quad (7.1)$$

wobei D_{LP} die mittlere Dicke eines Lamellenpaketes, δ_{delam} die mittlere lokale Einschnürung eines Lamellenpaketes und L_{delam} die mittlere Einschnürlänge eines Lamellenpaketes ist. Aus Bild 7.5(c,d) kann δ_0 grob abgeschätzt werden. Werden die Delaminationen II als repräsentativ zugrunde gelegt, ergibt sich mit $D_{\text{LP}} \approx 25 \mu\text{m}$, $L_{\text{delam}} \approx 75 \mu\text{m}$ und $\delta_{\text{delam}} \approx 5 \mu\text{m}$ ein Wert für δ_0 von $7.5 \mu\text{m}$. Aus den ermittelten Kohäsivparametern, $T_0 = 600 \text{ MPa}$ und $\Gamma_0 = 7 \text{ N/mm}$ (siehe Bild 7.3), ergibt sich der Wert $\delta_0 = 11.6 \mu\text{m}$. Die ermittelten Kohäsivparameter stimmen somit relativ gut mit den mikromechanischen Abschätzungen überein, d.h. der skizzierte Bruchmechanismus wird gut durch die ermittelten Kohäsivparameter charakterisiert.

7.3 Delaminator (D)

Bei den Delaminator-Biegeproben sind die Verhältnisse relativ einfach. Durch die geringe Grenzflächenfestigkeit versagen die Biegeproben bereits im linear-elastischen Bereich durch Spaltbruch. Die Parameteranpassung und die Diskussion des Bruchmechanismus werden hierdurch erheblich vereinfacht.

7.3.1 Parameteranpassung

In Bild 7.9(a) werden die experimentell ermittelten Kraft–Verschiebungskurven mit der 1000-MPa-Grenzkurve verglichen. Bei der 1000-MPa-Grenzkurve wird die Kohäsivzone fast nicht aktiviert, so dass diese Kurve das rein plastische Verhalten ohne Schädigung beschreibt. Die Biegeproben versagen im Experiment bei einer Last von weniger als 100 N. Das ist im Vergleich zur 1000-MPa-Grenzkurve weniger als 30 % der plastischen Fließlast. Nach dem Kraftmaximum zeigen die experimentellen Kraft–Verschiebungskurven ein unregelmässiges pseudo-plastisches Verhalten. Dieses Phänomen wird als experimentelles Artefakt gewertet und vernachlässigt. Die Ursachen für dieses Phänomen werden später mit dem Bruchmechanismus zusammen erläutert.

Unter Vernachlässigung des pseudo-plastischen Bereiches verhalten sich die Biegeproben aus bruchmechanischer Sicht linear-elastisch. Sie sollten daher den Gesetzmäßigkeiten der linear-elastischen Bruchmechanik (LEBM), siehe z.B. [69], gehorchen. Die LEBM ist ein 1-Parameter-Ansatz. Für die Charakterisierung des Bruchverhaltens reicht daher ein einziger Parameter aus. In diesem Fall ist dieser Parameter durch die Kohäsivenergie Γ_0 gegeben, die, wenn die LEBM gültig ist, mit der Energie-Freisetzungsrate \mathcal{G}_c übereinstimmt. Die Kohäsivspannung T_0 hat bei der LEBM keinen Einfluss auf das Bruchverhalten.

Auch wenn T_0 keinen Einfluss auf das Bruchverhalten hat, kann für T_0 ein oberer und ein unterer Grenzwert angegeben werden. Im oberen Grenzfall ist T_0 so groß, dass die Kohäsivzone gerade

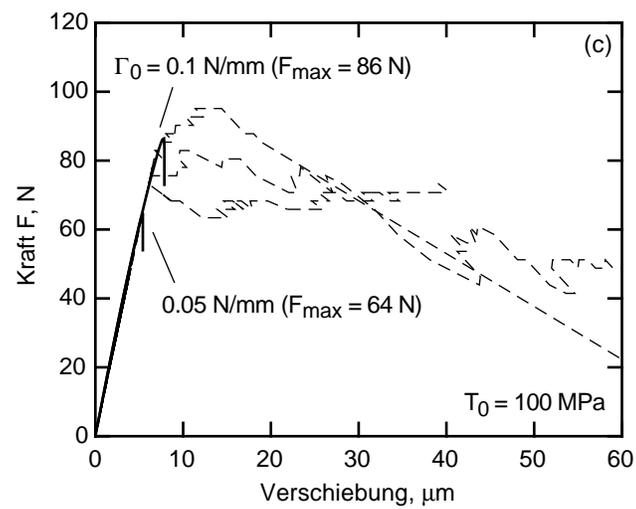
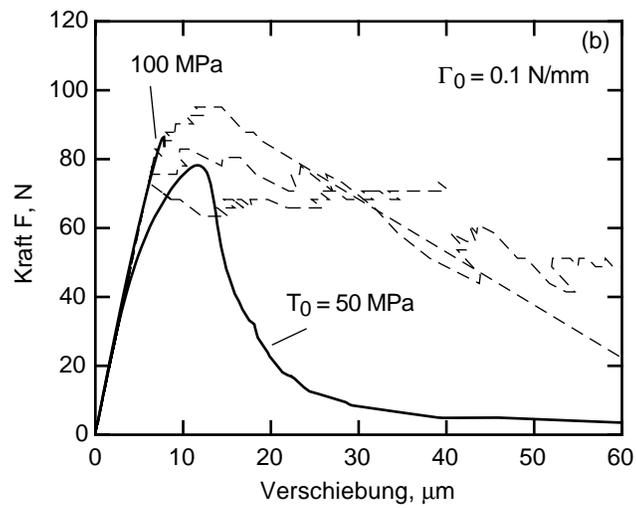
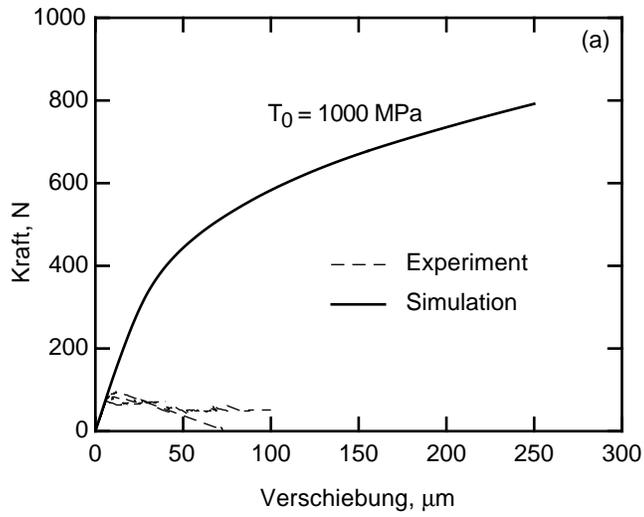


Bild 7.9: Anpassung der Kohäsivparameter für die D-Orientierung.



Bild 7.10: Anpassung der Kohäsivparameter für die D-Orientierung.

nicht aktiviert wird. Wie gesehen, liegt diese Grenze etwa bei 1000 MPa. Die untere Grenze ergibt sich beim Übergang zum sogenannten *Large-scale-bridging*. Diese Grenze wird erreicht, wenn die Kohäsivspannung so klein ist, dass sich die Schädigungszone über einen signifikanten Anteil des ungerissenen Ligamentes erstreckt und so zu einem pseudo-plastischen Strukturverhalten führt.

Die untere Grenze für T_0 wird in Bild 7.9(b) austariert. In dem Bild sind für $\Gamma_0 = 0.1$ N/mm die Kraft–Verschiebungskurven für $T_0 = 50$ und 100 MPa angegeben. Bei $T_0 = 100$ MPa ergibt sich gerade noch ein nahezu linear-elastisches Verhalten, wohingegen sich bei $T_0 = 50$ MPa bereits ein pseudo-plastisches Verhalten zeigt. Die untere Grenze für T_0 liegt somit etwa bei 100 MPa.

Die Anpassung für Γ_0 wird in Bild 7.9(c) gezeigt. die Kohäsivenergie liegt zwischen 0.05 und 0.1 N/mm. Das ist nur etwa ein 100stel des Wertes der RT-Orientierung. Als Spannungsintensitätsfaktor ($K_c^2 = 2\Gamma_0 E$) ausgedrückt liegt der Risswiderstand etwa bei 4–6 MPa \sqrt{m} . Der Wert stimmt gut mit Literaturwerten für K_{Ic} überein, siehe z.B. [23].

7.3.2 Bruchmechanismus

Bild 7.10 zeigt post mortem Aufnahmen von den drei untersuchten D-Biegeproben. Bei allen Proben verläuft der Riss als Spaltbruch relativ glatt entlang den Lamellen, es kommt jedoch zu Mehrfach-Rissbildung, wobei die Mehrfachrisse von kleinen Ligamenten überbrückt werden. Diese Brücken sind für das bereits angesprochene pseudo-plastische Verhalten der D-Biegeproben verantwortlich. Der Grund für die Mehrfachrissbildung besteht vermutlich darin, dass die Rissebenen nicht vollständig parallel zu den Lamellenebenen ausgerichtet waren. Entlang der Rissfront wurden daher möglicherweise in verschiedenen Lamellenebenen Spaltbrüche initiiert, die dann miteinander konkurriert haben. Bei einer idealen Lagen des Risses in einer Lamellenebene sollte das pseudo-plastische Verhalten nicht auftreten.

Der Bruch bei den D-Biegeproben erfolgt durch Spaltbruch. Da sowohl in γ als auch in α_2 die Spaltbruchebene parallel zur Lamellenebene verläuft, wird dem Riss praktisch kein Widerstand

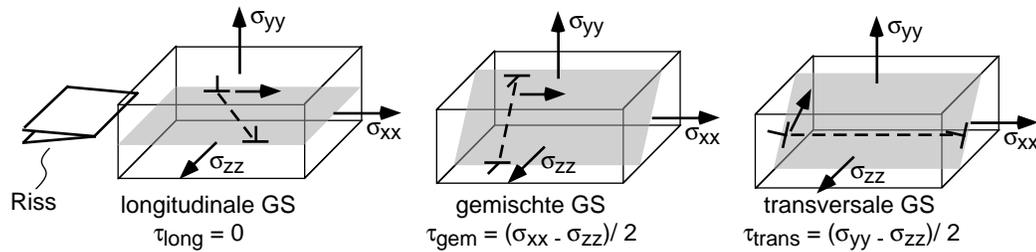


Bild 7.11: Orientierung der Gleitsysteme an der Rissspitze (D-Biegeprobe).

entgegengesetzt. Die beim Bruchvorgang dissipierte Energie setzt sich somit hauptsächlich aus der Oberflächenenergie und eventuell noch einem sehr kleinen plastischen Beitrag zusammen.

Spaltbrüche entstehen in metallischen Werkstoffen nicht zufällig, sondern müssen initiiert werden. Hierfür ist im Allgemeinen zumindest ein kleiner Betrag plastischer Verformung notwendig. Im Folgenden soll daher der Spannungszustand an der Rissspitze der D-Orientierung und die mögliche Aktivierung von Gleitsystemen untersucht werden.

Bei der D-Orientierung stellt sich an der Rissspitze ein 3-achsiger Spannungszustand ein, siehe Bild 7.11, Die Spannungen σ_{xx} und σ_{zz} werden durch die Dehnungsbehinderung induziert und sind betragsmäßig etwa gleich groß sind.

Wie auch bei der RT-Orientierung, resultiert aus der Symmetrie, dass in den longitudinalen Gleitebenen keine Schubspannung wirkt ($\tau_{\text{long}} = 0$), und die longitudinalen Versetzungen daher nicht aktiviert werden. Für die gemischten Gleitsysteme ist die maximal wirkende Schubspannung gegeben durch: $\tau_{\text{gem}} = (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})/2$. Da die beiden Spannungen betragsmäßig etwa gleich groß sind, wird durch den 3-achsigen Spannungszustand die Aktivierung von gemischten Gleitsystemen wirksam unterdrückt. Nebenbei bemerkt, führt Gleitung von gemischten Gleitsystemen bei der D-Orientierung kinematisch zu keiner Rissöffnung, so dass für die gemischten Gleitsysteme von vornherein die treibenden Kraft fehlt. Die einzigen Versetzungssysteme, die an der Rissspitze aktiviert werden können, sind daher die transversalen Gleitsysteme, bei denen die wirkenden Schubspannungen jedoch auch durch die 3-Achsigkeit des Spannungszustands reduziert werden: $\tau_{\text{trans}} = (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})/2$.

Wie schon beim Bruchmechanismus der RT-Orientierung erläutert, besteht bei den transversalen Versetzungen eine generelle Inkompatibilität zwischen den α_2 - und γ -Lamellen. Die kritische Schubspannung von den transversalen Versetzungen ist in den α_2 -Lamellen sehr viel größer als in den γ -Lamellen. Wenn in den γ -Lamellen transversale Versetzungen aktiviert werden, werden in den α_2 -Lamellen, entsprechend dem geringen Volumenanteil, schnell sehr hohe Druckspannungen σ_{ind} induziert, siehe Bild 7.12. Die wirksamen Schubspannungen in den transversalen α_2 -Gleitsystemen werden hierdurch erhöht. Wenn σ_{ind} so groß ist, dass in α_2 transversale Versetzungen aktiviert werden, ist es wegen der hohen kritischen Schubspannung sehr wahrscheinlich,

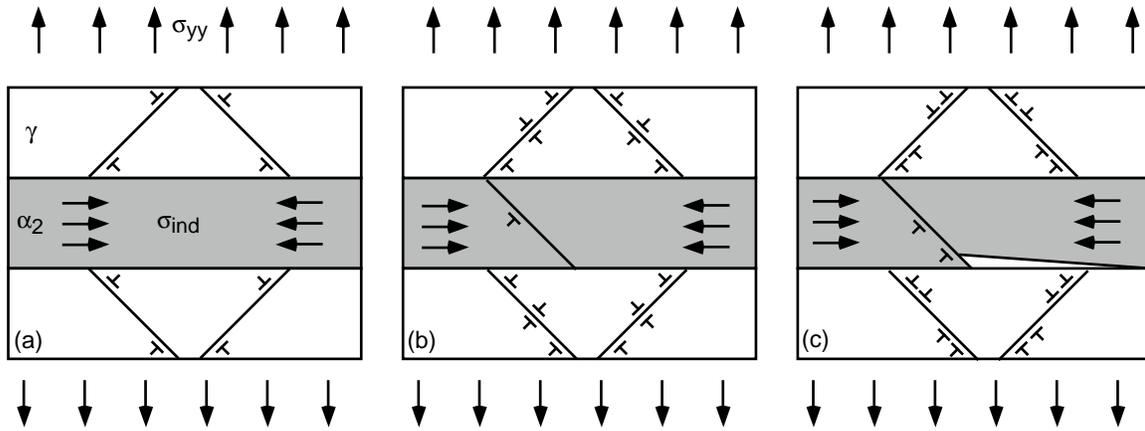


Bild 7.12: Initiierung von Spaltbrüchen durch lokale Aufstauungen von transversalen α_2 -Versetzen.

dass an einem lokalen Versetzungsaufstau ein Spaltbruch initiiert wird, siehe Bild 7.12, der dann schnell zum Versagen der gesamten Probe führt. Die Spannung, die für die Initiierung der Spaltbrüche notwendig ist, wäre nach dem skizzierten Mechanismus mit der 90° -PST-Fließspannung identisch. Demnach wäre für die D-Orientierung die Kohäsivspannung ebenfalls gegeben durch: $T_0 \approx 650 \text{ MPa}$.

7.4 Riss-Stopper (RS)

Im letzten Unterkapitel zum PST-Bruchverhalten wird die RS-Orientierung besprochen. Bei dem Bruchvorgang in PST-Kristallen gibt es prinzipiell nur 2 Risspfade: Quer oder längs zur Lamellenebene. Im Unterkapitel zur RT-Orientierung wurden die Kohäsivparameter für den Risspfad quer zur Lamellenebene ermittelt und im Unterkapitel zur D-Orientierung die für den Risspfad längs zur Lamellenebene. Im Idealfall müsste sich der Bruchvorgang für die RS-Orientierung aus den bereits bestimmten Kohäsivparametern vorhersagen lassen. Wie sich jedoch zeigt, sind die Simulationen numerisch nicht stabil genug, um eine solche Vorhersage durchzuführen. Die Gründe für die numerische Instabilität liegen in einem recht komplexen Bruchmechanismus.

7.4.1 Kraft–Verschiebungskurven

Bild 7.13 zeigt eine experimentell aufgenommene Kraft–Verschiebungskurve im Vergleich mit den T_0 -Grenzkurven für 500, 1000 und 2000 MPa. Im Gegensatz zu den beiden anderen Orientierungen sind die Simulationen für die Berechnung der T_0 -Grenzkurven numerisch nicht stabil. Die Rechnungen sind nach Verschiebungen von 50, 130 bzw. 280 μm abgebrochen. Die experimentelle Kurve zeigt hingegen ein ausgeprägtes plastisches Verhalten. Sowohl die Fließgrenze als auch die Verfestigung sind im Experiment geringer als bei den T_0 -Grenzkurven.

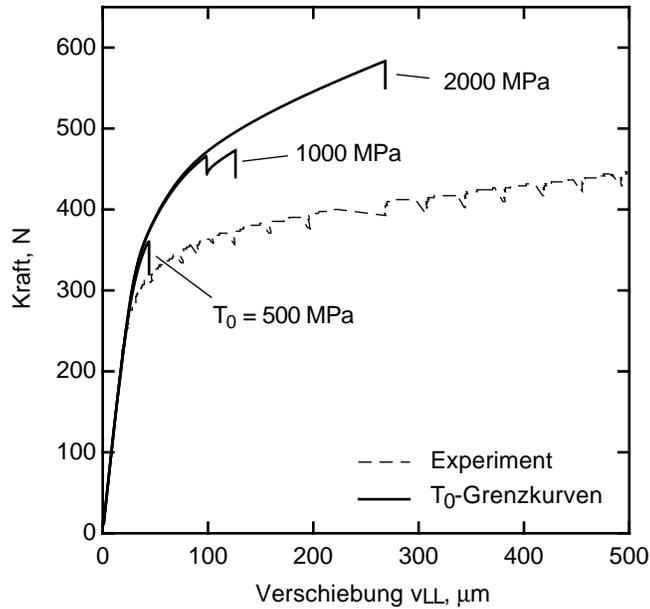


Bild 7.13: Kraft–Verformungskurven für die RS-Orientierung.

7.4.2 Bruchmechanismus

Aufschluss über das Verhalten der RS-Orientierung gibt der Bruchvorgang. Bild 7.14(a) zeigt post mortem eine RS-Biegeprobe. Der Riss hat sich nicht entlang des ungerissenen Ligamentes, sondern entlang der Lamellenebene ausgebreitet, bis er an der Diffusionsschweißnaht zum Stehen gekommen ist. Der verbleibende Querschnitt hat sich dann wie ein Biegebalken verformt, bis die Diffusionsschweißnaht schließlich versagt hat. Die Fließlast der experimentellen Kurve in Bild 7.13 entspricht somit der Fließlast eines Biegebalkens.

Bild 7.14(b) zeigt qualitativ das Verformungsfeld bei den Simulationen. An der Rissspitze bildet sich eine starke Dehnungskonzentration parallel zur Lamellenebene aus. Qualitativ zeigen Simulation und Experiment somit das gleiche Verhalten. Nur ist es bei den Simulationen nicht gelungen, den Rissfortschritt parallel zur Lamellenebene stabil abzubilden.

Zur weiteren Aufklärung des Bruchmechanismus wird, wie bei den beiden anderen Orientierungen, die Aktivierung der Gleitsysteme an der Rissspitze untersucht, siehe Bild 7.15. Direkt an der Rissspitze stellt sich ein 3-achsiger Spannungszustand ein. Die Spannungskomponenten σ_{xx} und σ_{zz} werden durch die Dehnungsbehinderungen induziert, wobei σ_{zz} durch die verhältnismäßig geringe Grenzflächenfestigkeit begrenzt wird.

Aus Symmetriegründen ist die in den longitudinalen Gleitsystemen wirkende Schubspannung direkt vor der Rissspitze $\tau_{\text{long}} = 0$, sodass vor der Rissspitze keine longitudinalen Versetzungen aktiviert werden können. Direkt hinter der Rissspitze gelten die Symmetrierandbedingungen jedoch nicht mehr, da die freie Oberfläche im Riss eine antisymmetrische Verformung erlaubt. Die im Bild 7.14(b) gezeigte Dehnungslokalisierung ist im Wesentlichen auf eine solche antisymmetrische

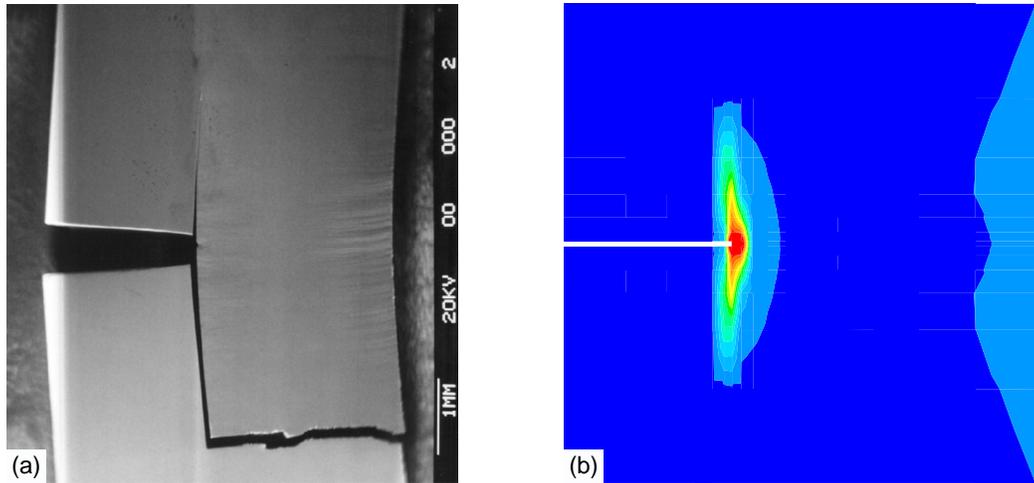


Bild 7.14: Bruchmechanismus beider RS-Orientierung.

Schubverformung hinter der Risspitze zurückzuführen.

Im Gegensatz zu den longitudinalen Versetzungen können die gemischten und transversalen Versetzungen vor der Risspitze aktiviert werden. Die maximal wirkenden Schubspannungen sind durch $\tau_{\text{gem}} = (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})/2$ bzw. $\tau_{\text{trans}} = (\sigma_{yy} - \sigma_{xx})/2$ gegeben. Da σ_{xx} , nicht aber σ_{zz} , durch die relativ schwache Grenzflächenfestigkeit begrenzt wird, ist direkt an der Risspitze überwiegend mit einer Aktivierung von transversalen Versetzungen zu rechnen. Wie bei der RT- und D-Orientierung führt die Aktivierung von transversalen Versetzungen zu einer plastischen Inkompatibilität zwischen den α_2 und γ -Lamellen. Durch die bereits in Bild 7.7 und 7.12 dargestellten Mechanismen könnten die α_2 -Lamellen und/oder die Lamellengrenzfläche geschädigt werden. Durch die Schädigung der Grenzfläche wird die Rissablenkung initiiert.

Es bleibt noch klären, was die treibende Kraft für die Rissablenkung ist. Die Besonderheit des lamellaren Verbundes ist, dass die kritischen Schubspannungen der longitudinalen Versetzungen im Vergleich zu allen anderen Versetzungen sehr gering sind. Dies hat Auswirkungen auf den Biegemechanismus. Unter der Annahme, dass die longitudinalen Schubspannungen verschwindend gering sind, liegt im lamellaren Verbund bei einer reinen Momentbeanspruchung mit freien Probenrändern eine querschubfreie Biegung vor, siehe Bild 7.16. Die querschubfreie Biegung ist dadurch gekennzeichnet, dass die Probenränder bei der Verformung eben bleiben. Bei Anwesenheit eines Risses resultiert aus der Verformung eine treibende Kraft für Risswachstum parallel zur Lamellenebene, die bei einer nicht-querschubfreien Biegung nicht gegeben ist. Wie in Bild 7.16 dargestellt, führt die Rissöffnung an freien Probenrändern zu einem Knick. In den Experimenten ist die freie Verformung des Probenrandes an den Diffusionsnähten unterdrückt. Hierdurch entstehen dort relativ hohe Spannungen, die schließlich, wie im Experiment beobachtet, zu einem Versagen der Diffusionsnaht führen.

Wie geschildert ist der Bruch- und Verformungsmechanismus bei der RS-Orientierung sehr viel

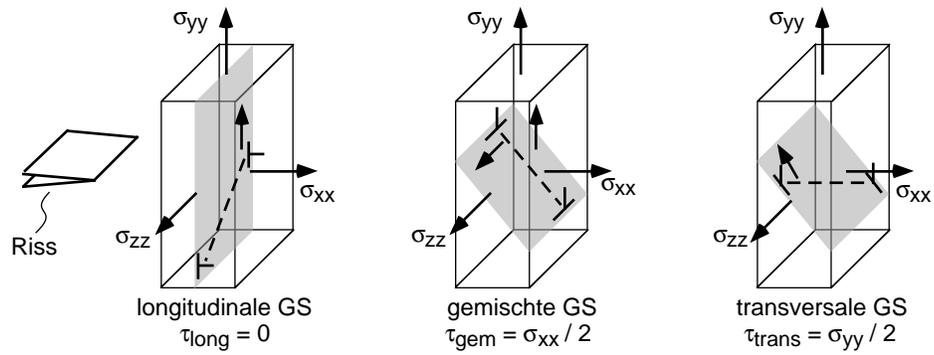


Bild 7.15: Orientierung der Gleitsysteme an der Rissspitze (RS-Biegeprobe)

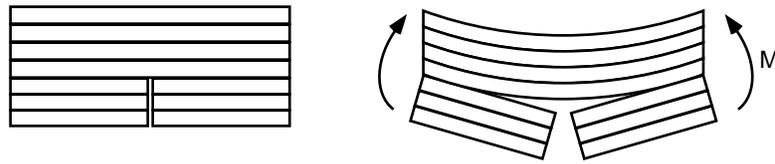


Bild 7.16: Querschubfreie Biegung bei der RS-Biegeproben.

komplexer als bei den beiden anderen Orientierungen und dementsprechend auch schwieriger zu modellieren. Eine adäquate FE²-Modellierung der RS-Orientierung wäre vielleicht mit einer feineren Vernetzung möglich. Da sich die RS-Orientierung aber im Wesentlichen wie ein Biegebalken verhält, ist von einer solchen Modellierung nicht allzuviel Aufschluss über das Bruchverhalten zu erwarten. Aus diesem Grund wurde hier von einer detaillierten Modellierung abgesehen.

Kapitel 8

Ergebnisse: Poly-PST-Verformung

Im folgenden Kapitel wird das Verformungsverhalten von Poly-PST-Kristallen untersucht. Die Poly-PST-Simulationen sind von einer Reihe von Parametern abhängig. Die Parameter können in modell- und materialbezogene Parameter eingeteilt werden. Zu den materialbezogenen Parametern zählen beispielsweise die kristallplastischen Parameter und die Orientierungen der PST-Kristallite. Zu den modellbezogenen Parametern gehört die Modellgröße n_K , d.h. die Anzahl der im Modell berücksichtigten PST-Kristallite, sowie die Modellfeinheit n_E , die angibt mit wievielen Integrationspunkten die PST-Kristallite örtlich aufgelöst sind.

Die beiden modellbezogenen Größen n_K und n_E beeinflussen bei den Simulationen die statistische Streuung der Fließkurven bzw. die Lokalisierung der Dehnungen. Auch wenn diese Größen keine werkstoffphysikalischen Parameter sind, ist es wichtig, deren Einfluss zu kennen, um die Repräsentativität der Simulationen sicherzustellen. Aus der Untersuchung ergeben sich Mindestgrößen für n_K und n_E , die bei repräsentativen Simulationen nicht unterschritten werden sollten. Aus diesem Grund wird im nächsten Unterkapitel zunächst der Einfluss von n_K und n_E untersucht. Im zweiten Unterkapitel folgt dann die Untersuchung der materialbezogenen Parameter. Im Vordergrund stehen dabei die Textur, d.h. der Einfluss der Orientierungsverteilung der berücksichtigten PST-Kristallite, sowie die Zug/Druck-Anomalie, die wie bei den PST-Kristallen von dem Festigkeitsverhältnis der Super- zur den Einfachgleitsystemen (Q_{SE}) abhängig ist. Mit den Ergebnissen aus diesem Abschnitt erfolgt dann die Anpassung an die experimentellen Zug- und Druckversuche.

8.1 Einfluss der modellbezogenen Parameter

Der Einfluss der Modellparameter wurde mit Hilfe der vereinfachten PST-Einheitszelle RVE3 untersucht. Bild 8.1 zeigt eine typische simulierte Fließkurve aus einer quasi-texturfreien Taylor-Simulation ($n_E = 1$) mit $n_K = 125$. Zum Vergleich sind die PST-Fließkurven für die Orientierungen 0 , 45 und 90° im Diagramm mitaufgeführt. Der Fließbeginn setzt bei der Taylor-Simulation

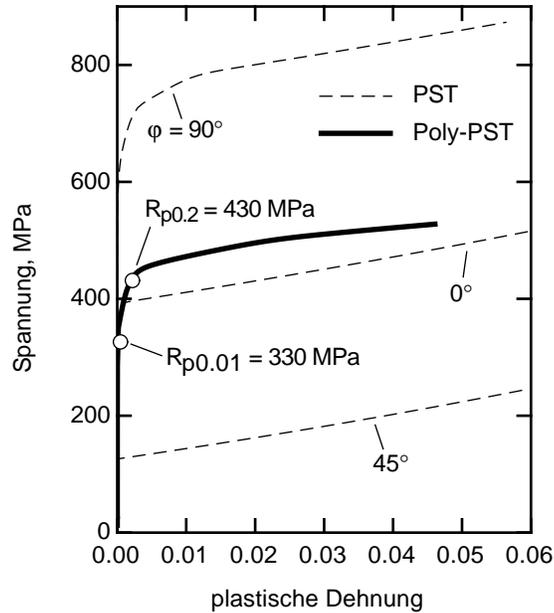


Bild 8.1: Vergleich zwischen den Fließkurven von PST- und Poly-PST-Kristallen (Taylor-Modell, $n_K = 125$).

bei einer relativ niedrig Spannung unterhalb der Fließspannung der 0° -PST-Orientierung ein ($R_{p0.01} = 330$ MPa). Danach verfestigt das Material sehr stark, bis bei $R_{p0.2} = 430$ MPa ein Spannungsniveau etwas oberhalb der 0° -Orientierung erreicht wird. Anschließend verfestigt das Material etwa mit der gleichen Verfestigungsrate wie die PST-Kristalle.

8.1.1 Statistische Streuung der Fließkurven

Ausgehend von der Fließkurve in Bild 8.1 wird im Folgenden untersucht, welchen statistischen Schwankungen quasi-texturfreie Taylor-Modelle in Anhängigkeit von n_K unterworfen sind. Hieraus ergeben sich grobe Anhaltswerte über die Mindestgröße von statistisch repräsentativen Poly-PST-Modellen.

Bild 8.2(a) zeigt den Einfluss der Modellgröße n_K auf den statistischen Mittelwert und die Standardabweichung der Fließspannung $R_{p1.0}$, wobei für die verschiedenen Modellgrößen jeweils 10 unterschiedliche Simulationen mit pseudo-zufälligen, quasi-texturfreien Orientierungsverteilungen durchgeführt worden sind.

Der Mittelwert von $R_{p1.0}$ steigt mit zunehmender Modellgröße etwas an. Aber bereits mit einer Modellgröße von $n_K = 27$ werden statistisch relativ gute Ergebnisse mit einer Standardabweichung von weniger als 10 MPa erzielt. Dass der Mittelwert von $R_{p1.0}$ leicht mit der Modellgröße ansteigt, ist durch die Dehnungsbehinderung, die die PST-Kristallite untereinander ausüben, zu erklären. Bei kleineren Modellen kann sich die für eine quasi-isotrope Verformung notwendige Dehnungsbehinderung nicht vollständig aufbauen, sodass diese Modelle im statistischen Mittel

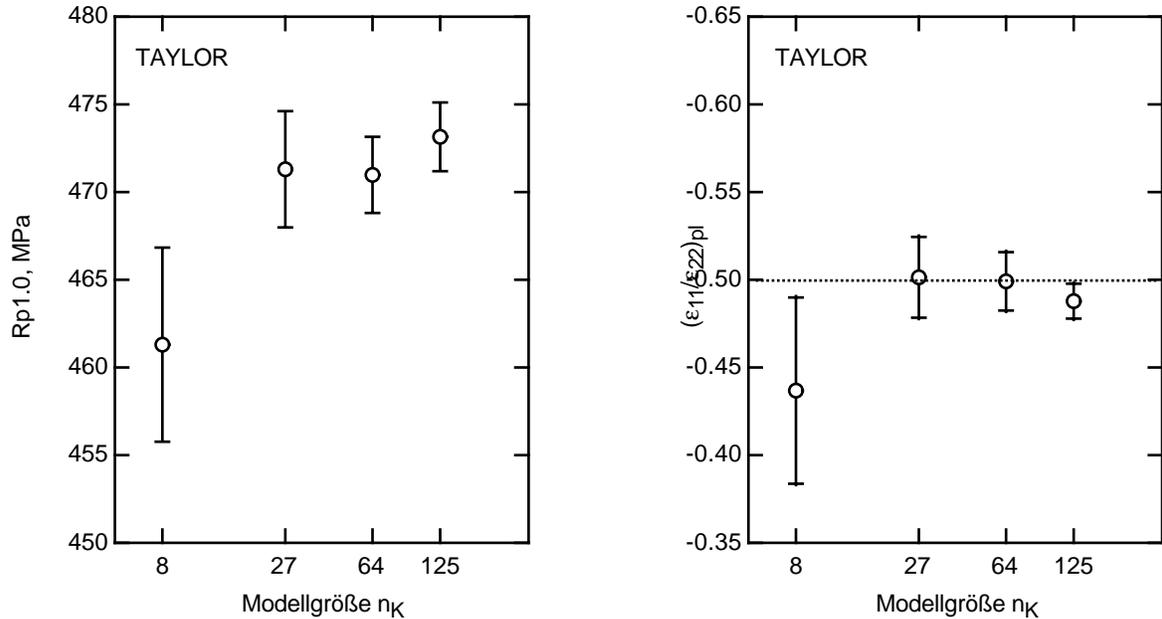


Bild 8.2: Einfluss der Modellgröße n_K auf die statistische Streuung der Fließkurven und plastischen Querdehnungen bei Poly-PST-Simulationen mit dem Taylor-Modell.

etwas geringere Fließspannungen haben.

In Bild 8.2(b) wird der Einfluss der Modellgröße auf die relativen plastischen Querdehnung $(\epsilon_{11}/\epsilon_{22})_{pl}$ gezeigt. Abgesehen von dem Modell mit $n_K = 8$ liegen alle anderen Modelle sehr nah an dem theoretischen Wert $(\epsilon_{11}/\epsilon_{22})_{pl} = 0.5$ für einen ideal texturfreien Polykristall. In diesem Fall sind die Modelle mit $n_K = 27$ also bereits relativ repräsentative Poly-PST-Modelle.

8.1.2 Einfluss der Dehnungslokalisierung

Der Einfluss der Dehnungslokalisierung wurde exemplarisch für quasi-texturfreie Poly-PST-Modellen mit $n_K = 8$ durchgeführt. Es wurden ein Taylor-Modell mit $n_E = 1$ und drei Würfelmodelle mit $n_E = 8, 64$ und 216 erstellt. Über die Initialisierung des Zufallszahlengenerators wurde sichergestellt, dass die PST-Kristallite in allen Modellen die selbe Orientierungsverteilung hatten.

Bild 8.3(a) zeigt die für die unterschiedlichen Modelle ermittelten Fließkurven. Generell ist die Fließspannung umso geringer, je feiner ein Modell aufgelöst ist. Hierbei scheinen sich die Kurven langsam einer unteren Grenzkuve anzupassen. So besteht zwischen den Fließkurven für $n_E = 64$ und 216 nur noch ein sehr kleiner Unterschied.

Bild 8.3(b) zeigt den Einfluß von n_E auf die Fließspannung $R_{p1.0}$ und die Verfestigung $(d\sigma/d\epsilon)$ (ebenfalls bei $\epsilon_{pl} = 0.01$). Die Fließspannung nimmt stetig ab, je größer n_E wird. Die Verfestigung zeigt hingegen zwei gegenläufige Tendenzen. Zwischen $n_E = 1$ und 8 reduziert sich die

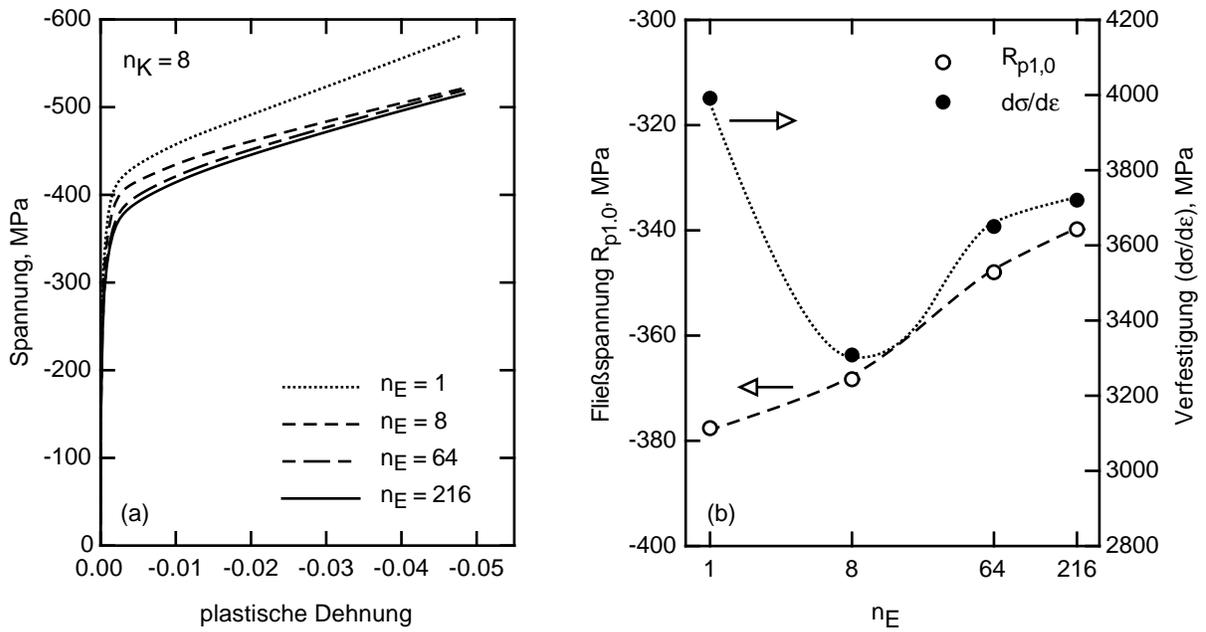


Bild 8.3: Einfluß der Modell-Feinheit auf die Spannungs–Dehnungskurven beim Würfel-Modell ($n_K = 8$).

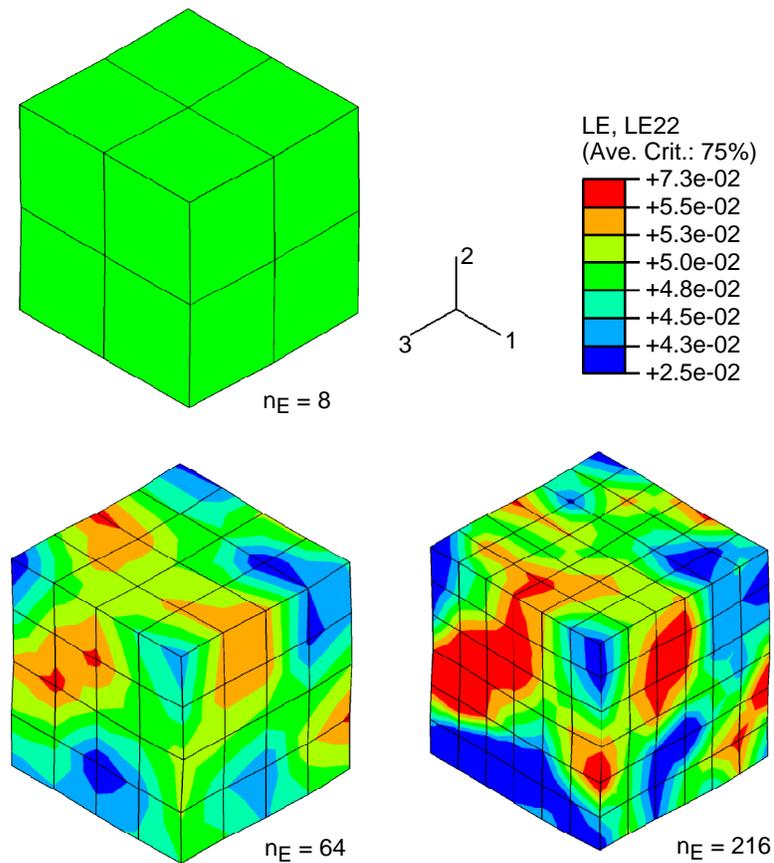


Bild 8.4: Lokalisierung der Dehnungen bei den Poly-PST-Modellen.

Verfestigung zunächst deutlich. Für größere Werte nimmt sie dann jedoch wieder zu.

Die Unterschiede zwischen den einzelnen Fließkurven in Bild 8.3 sind im Wesentlichen durch die Dehnungslokalisierung zu erklären. Je feiner die Auflösung eines Modells ist, desto mehr konzentriert sich die plastische Verformung in weichen Bereichen. Hierdurch wird die Fließspannung generell reduziert. Da die lokalen Dehnungen (und Dehnraten) umso größer sind, je stärker die Konzentration ausgeprägt ist, führt die Dehnungslokalisierung einerseits zu einer Erhöhung der globalen Verfestigung. Gleichzeitig reduziert sich jedoch die Dehnungsbehinderung, die die Kristallite gegenseitig ausüben, und damit die Tendenz zur Mehrfachgleitung. Hierdurch ergibt sich die anfängliche Verringerung der Verfestigung.

In Bild 8.4 wird die Dehnungslokalisierung bei den unterschiedlichen Würfelmodellen gezeigt. Bei dem Modell mit $n_E = 8$ treten noch keine Dehnungslokalisierungen auf. Bei $n_E = 64$ sind die Dehnungslokalisierungen bereits deutlich zu erkennen und bei $n_E = 216$ verstärken sie sich noch. Um quantitative Aussagen über die lokalen Dehnungen treffen zu können, werden also Modelle mit mindestens $n_E = 216$ Integrationspunkten bzw. 27 finiten Elementen pro PST-Kristallit benötigt.

8.2 Einfluss der materialbezogenen Parameter

8.2.1 Textureinfluss

Das Verhalten von Poly-PST-Kristallen ist sehr stark von der Textur abhängig. Um den Einfluss der Textur auf das Verhalten von Poly-PST-Modellen zu untersuchen, wurden Simulationen mit unterschiedlich scharf texturierten Taylor-Modellen mit $n_K = 27$ durchgeführt. Die Simulationen wurden für eine 0° und eine 90° -Textur durchgeführt. Die Texturschärfe wurde durch den Winkelbereich $\Delta\varphi_x$ (siehe Abschnitt 5.2.1) variiert. Bei $\Delta\varphi_x = 0^\circ$ sind in den Poly-PST-Modellen nur 0° - bzw. 90° -Orientierungen vorhanden, bei $\Delta\varphi_x = 90^\circ$ ist die Orientungsverteilung quasitexturfrei. Bei allen Modellen ist der Zufallszahlengenerator mit dem gleichen Wert initiiert worden, so dass alle Modelle ähnliche Orientungsverteilungen haben, die sich jedoch über andere Bereiche $\Delta\varphi_x$ erstrecken.

In Bild 8.5 wird für beide Texturen die Abhängigkeit der Fließspannung $R_{p1.0}$ von der Texturschärfe gezeigt. Bei beiden Texturen liegen bei $\Delta\varphi_x = 0^\circ$ und bei $\Delta\varphi_x = 90^\circ$ lokale Maxima in der Fließspannung. Bei $\Delta\varphi_x = 0^\circ$ werden Fließspannungen von 500 bzw. 750 MPa erreicht. Bei den quasi-texturfreien Orientungsverteilungen bei $\Delta\varphi_x = 90^\circ$ beträgt $R_{p1.0} = 480$ MPa. Für die 0° -Textur liegt das Minimum mit 430 MPa zwischen $\Delta\varphi_x = 45^\circ$ und 60° . Bei der 90° -Textur liegt das Minimum mit einem Wert von 460 MPa bei 75° .

Der Verlauf der beiden Kurven ergibt sich unmittelbar aus der Anisotropie der PST-Kristalle. Bei $\Delta\varphi_x = 0^\circ$ dominieren die 0° - bzw. 90° -PST-Orientierungen. Bei der 90° -Textur stimmt die Fließspannung sehr gut mit der PST-Fließspannung für die 90° -Orientierung überein.

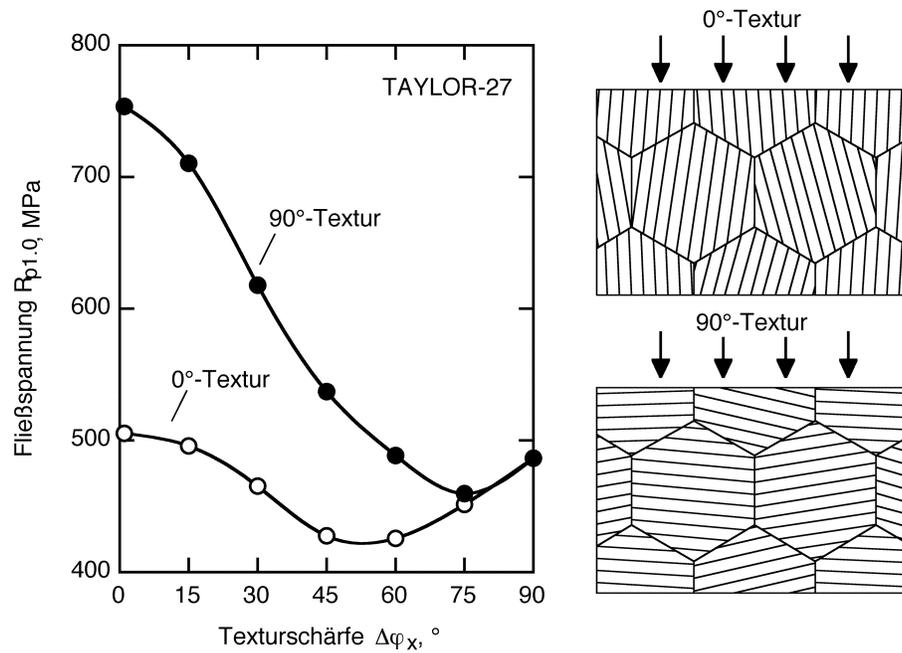


Bild 8.5: Abhängigkeit der Fließspannung $R_{p1.0}$ von der Textur.

Bei der 0° -Textur erhöht sich die Fließspannung des Poly-PST-Kristalls gegenüber einem 0° -PST-Kristall um etwa 100 MPa. Dieser Effekt ist durch die nahezu isotrope Verformung bei den Poly-PST-Simulationen zu erklären. Die gegenseitige Dehnungsbehinderung, die die PST-Kristallite ausüben, macht die Aktivierung von zusätzliche Gleitsystemen erforderlich, was zu einer Erhöhung der Fließspannung führt.

Die Minima der Fließspannung sind bei beiden Texturen durch den relativ hohen Anteil von weichen PST-Orientierungen im mittleren Winkelbereich von $\Delta\varphi_x$ zu erklären.

8.2.2 Zug/Druck-Anomalie

Wenn die Supergleitsysteme fester sind als die Einfachsysteme, zeigt sich auch bei Poly-PST-Kristallen eine Zug/Druck-Anomalie. Die Zug/Druck-Anomalie ist dabei ebenfalls von der Textur abhängig. Bild 8.6 zeigt exemplarisch für eine 0° -Textur für verschiedene Festigkeitsverhältnisse Q_{SE} die Abhängigkeit der Zug/Druck-Anomalie der Fließspannung $R_{p1.0}$ von der Texturschärfe $\Delta\varphi_x$. Die größte Zug/Druck-Anomalie ergibt sich jeweils für eine ideal-scharfe Textur. Bei $Q_{SE} = 1.5$ ist bei einer ideal scharfen Textur zu erwarten, dass die Druckfließspannung um etwa 10 % höher ist als die Zugfließspannung. Bei $Q_{SE} = 2.0$ beträgt der Unterschied 20 %. Für weniger scharf texturierte Poly-PST-Kristalle ist die Zug/Druck-Anomalie weniger stark ausgeprägt. Aber auch ein texturfreier Poly-PST-Kristall ($\Delta\varphi_x = 90^\circ$) zeigt eine Zug/Druck-Anomalie bei $Q_{SE} > 1.0$.

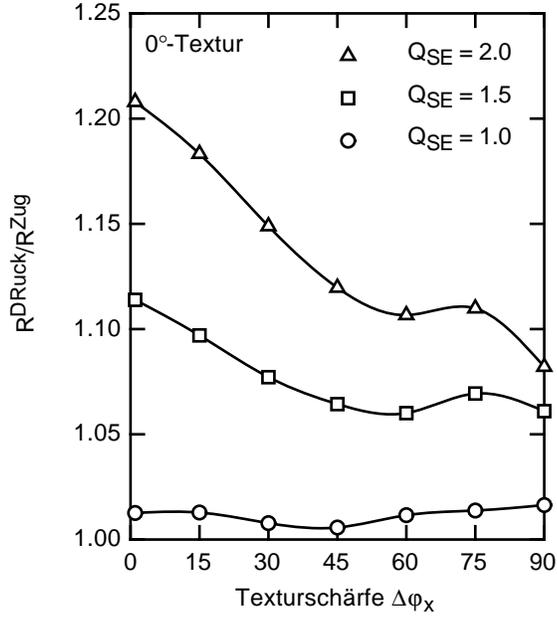


Bild 8.6: Zug/Druck-Anomalie in Abhängigkeit von der Festigkeit der Supergleitsysteme.

8.3 Parameteranpassung

Mit Hilfe von Bild 8.6 können die Poly-PST-Modelle an die experimentellen Zug- und Druckversuchsergebnisse angepasst werden. Für die Parameteranpassung wurde für das extrudierte Probenmaterial eine ideal scharfe 0° -Textur ($\Delta\varphi_x = 0^\circ$) angenommen.

Die Zug- und Druckversuche zeigen eine relativ ausgeprägte Zug/Druck-Anomalie. Im Zugversuch wurde $R_{p0.2}^{\text{zug}} \approx 630$ MPa und im Druckversuch $R_{p0.2}^{\text{druck}} \approx 700$ MPa ermittelt, siehe Bild 8.7. Die Zug/Druck-Anomalie liegt somit etwa bei $R_{p0.2}^{\text{druck}}/R_{p0.2}^{\text{zug}} = 1.10$. Für eine ideal scharfe 0° -Textur ergibt sich aus Bild 8.6 ein Wert von $Q_{\text{SE}} = 1.5$. Um mit den gegebenen Annahmen die Zug/Druck-Anomalie abbilden zu können, müssen die Superversetzungen also um etwa 50% fester angenommen werden als die Einfachversetzungen. Mit der Annahme einer weniger stark ausgeprägten Textur würde sich der Wert für Q_{SE} etwas erhöhen. Ein Wert von $Q_{\text{SE}} \gg 2.0$ kann jedoch offensichtlich ausgeschlossen werden.

Die Anpassung der Festigkeitsparameter der Gleitsysteme (g_0^{long} , g_0^{mix} , g_0^{trans} , h_0) wurden mit einem Würfelmodell mit $n_K = 8$ und $n_E = 8$ durchgeführt. Zunächst wurden die Ergebnisse aus der Anpassung der PST-Kristallen entsprechend skaliert, um die Poly-PST-Versuche abzubilden. Mit einem Skalierungsfaktor von 1.5 für die am PST-Kristall ermittelten Werte für g_0^{long} (55 MPa), g_0^{mix} (150 MPa), g_0^{trans} (185 MPa) und einem Verfestigungsmodul von $h_0 = 1400$ MPa gelingt es sehr gut die Druck-Fließkurve abzubilden, siehe Bild 8.7(a). Mit den gleichen Parametern zeigen sich bei der Simulation der Zug-Fließkurve jedoch deutliche Unterschiede zum Experiment. Insbesondere im Anfangsbereich der Kurve wird die Zug-Fließspannung bei der Simulation etwas überschätzt.

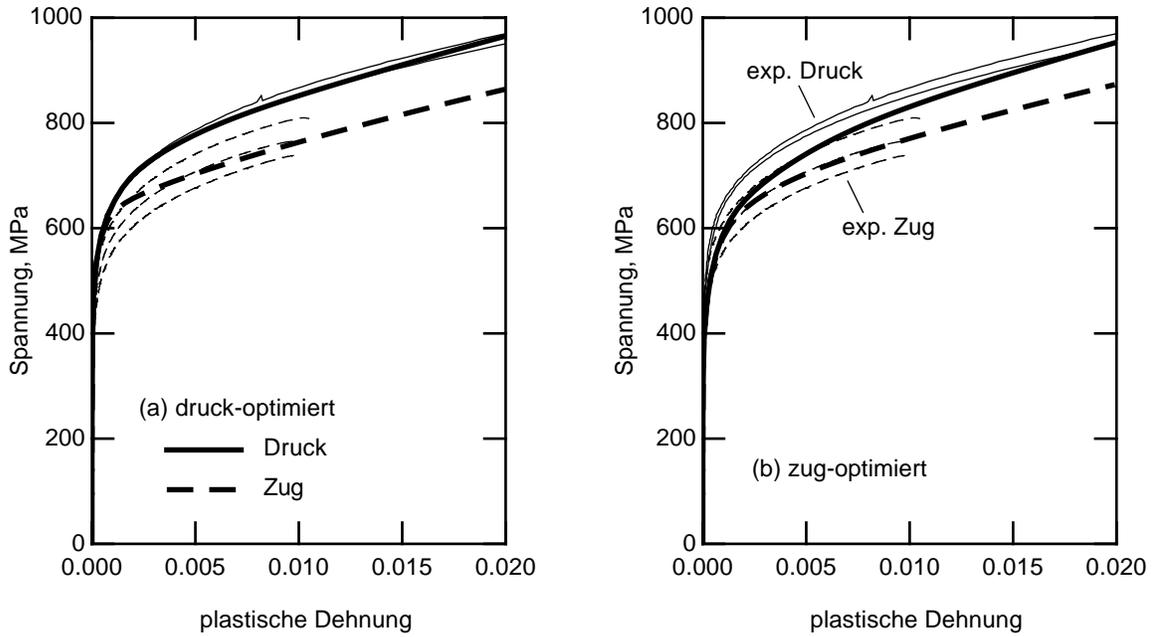


Bild 8.7: Anpassung der Poly-PST-Modellierung an die Zug- und Druckversuche.

Tabelle 8.1: Parameter für die Poly-PST-Simulationen.

	g_0^{long} , MPa	g_0^{gem} , MPa	g_0^{trans} , MPa	h_0 , MPa	Q_{SE}
druck-optimiert	82.5	225.0	277.5	1400	1.5
zug-optimiert	82.5	175.0	277.5	1400	1.5

Um die Zug-Fließkurve abzubilden, wurden g_0^{mix} auf 175 MPa reduziert. Mit diesem Wert wird die Zug-Fließkurve sehr gut beschrieben, während die Druck-Fließkurve im Anfangsbereich etwas unterschätzt wird, siehe Bild 8.7(b).

8.4 Zusammenfassende Diskussion

Die Poly-PST-Simulationen sind von einer Vielzahl unterschiedlicher Parameter abhängig. Hierzu zählen die modellbezogenen Parameter n_E und n_K , die intrinsischen PST-Parameter (g_0 , h_0 , Q_{SE}) sowie weitere materialbezogen Parameter wie die Textur und $\Delta\varphi_x$. Den Parametern stehen mit den Zug- und Druckversuchsdaten nur wenig experimentelle Kennwerte gegenüber, die zudem eine gewisse Streubreite aufweisen. Da bei dem gegebenen Missverhältnis von Parametern zu Kennwerten eine sinnvolle Parameteranpassung nur eingeschränkt möglich ist, wurde bei diesem Kapitel das Schwergewicht auf systematische Parametervariationen gelegt.

Die statistischen Untersuchungen zum Einfluß der modellbezogenen Parameter n_E und n_K geben Anhaltswerte, wie Poly-PST-Modelle für bestimmte Fragestellungen beschaffen sein müssen. Für einfache qualitative Untersuchungen, etwa des Textureinflusses, genügen hiernach Taylor-

Modelle, bei denen 27 individuelle PST-Kristallite berücksichtigt werden. Sollen quantitative Aussagen getroffen werden, sind entsprechende Würfelmodelle mit einer Auflösung von 8 Elementen ($n_E = 64$) pro PST-Kristallit erforderlich. Wenn zusätzlich die lokalen Dehnungen interessieren, muss die Auflösung auf mindestens 27 Elemente ($n_E = 216$) erhöht werden. Unberücksichtigt geblieben ist in dieser Arbeit der Einfluss der Anzahl nächster Nachbarn, von welcher das lokale Dehnungsverhalten ebenfalls beeinflusst wird. Da die Untersuchung des lokalen Dehnungsverhaltens hier nicht im Vordergrund stand, und die Simulationen den Rahmen der vorliegenden Arbeit gesprengt hätten, wurde auf eine detailliertere Untersuchung hierzu verzichtet.

Von den materialbezogenen Parametern wurde der Textureinfluss und der Einfluss von Q_{SE} in Parameterstudien untersucht. Die Untersuchungen zur Textur zeigen auf, in welchem Rahmen mit einer Variation der Festigkeitswerte für 0° - und 90° -Texturen zu rechnen ist. Für bekannte Texturen können mit Hilfe der Untersuchungen Rückschlüsse auf die intrinsischen PST-Parameter gezogen werden. Exemplarisch wurde dies für die durchgeführten Zug- und Druckversuche getan. Hierbei wurde für das Material von einer idealen 0° -Textur ausgegangen. Mit den ermittelten Parametern können die Zug- und Druckversuche gut nachgefahren werden. Es zeigen sich zwar gewisse Unterschiede, je nachdem, ob die Druckversuche angepasst, und die Zugversuche vorgesagt werden; oder umgekehrt. Diese Variationen sind darauf zurückzuführen, dass (i) die exakte Textur nicht vorlag, dass (ii) die intrinsischen PST-Parameter nicht zugänglich sind und daher nur abgeschätzt werden können, und dass (iii) die experimentellen Kennwerte selbst einer Streuung unterliegen.

Ein wesentliches Ergebnis dieses Kapitels ist die Existenz einer Zug/Druck-Anomalie bei Poly-PST-Kristallen für den Fall, dass die Supergleitsysteme fester sind als die Einfach- und Zwillingsgleitsysteme. Diese Anomalie wird von den durchgeführten Versuchen bestätigt. In der Literatur wurde die Zug/Druck-Anomalie bei Raumtemperatur bisher noch nicht systematisch untersucht, sodass eine weitere Absicherung dieses Ergebnisses zur Zeit nicht möglich ist. Bei höheren Temperaturen macht sich die Zug/Druck-Anomalie offenbar stärker bemerkbar. So haben Schillinger *et al.* [70] und Wu *et al.* [71] unterschiedlich hohe Kriechraten bei Zug- und Druckbeanspruchung gefunden. Hierdurch werden die gefundenen Ergebnisse zumindest ansatzweise bestätigt.

Kapitel 9

Bruchverhalten von Poly-PST-Kristallen

Zum Abschluss wird das Bruchverhalten von Poly-PST-Kristallen untersucht. Für die Simulationen wird hier nicht wie in den anderen Kapiteln die FE^2 -Methode verwendet. Stattdessen werden die Rissfortschrittsimulationen mit der klassischen FE-Methode unter Zuhilfenahme des Kohäsivmodells von Scheider [59] durchgeführt. Für die beiden Probenlagen PL1 und PL2 werden die Kohäsivparameter durch Vergleich mit experimentellen Kraft-CMOD-Kurven bestimmt. Die Ergebnisse werden mit Hilfe von Bruchflächenuntersuchungen interpretiert. Anschließend wird ein Ausblick über die Anwendung der FE^2 -Methode für Rissfortschrittsimulationen von Poly-PST-Kristallen gegeben.

9.1 Klassische FE-Methode

Bei den Simulationen nach der klassischen FE-Methode wurde das Verformungsverhalten phänomenologisch mit der J_2 -Plastizität (von-Mises) beschrieben. Zur Vereinfachung wurde die experimentell beobachtete Zug/Druck-Anomalie vernachlässigt. Als Fließkurve wurde die experimentell ermittelte Druck-Fließkurve verwendet. Für die Simulation des Rissfortschritts wurde das von Scheider [59] entwickelte Kohäsivmodell verwendet. Die Simulationen wurden mit 2D-Modellen durchgeführt. Hierbei wurde ein ebener Verzerrungszustand vorausgesetzt. Diese Annahme erscheint in Anbetracht der geringen Duktilität des Materials und der relativ kleinen a/W -Verhältnisse trotz der geringen Dicke der Proben gerechtfertigt. Die Form des Kohäsivgesetzes wurde einer Dreieckform möglichst weit angepasst ($\Gamma_{23} \approx \Gamma_0$).

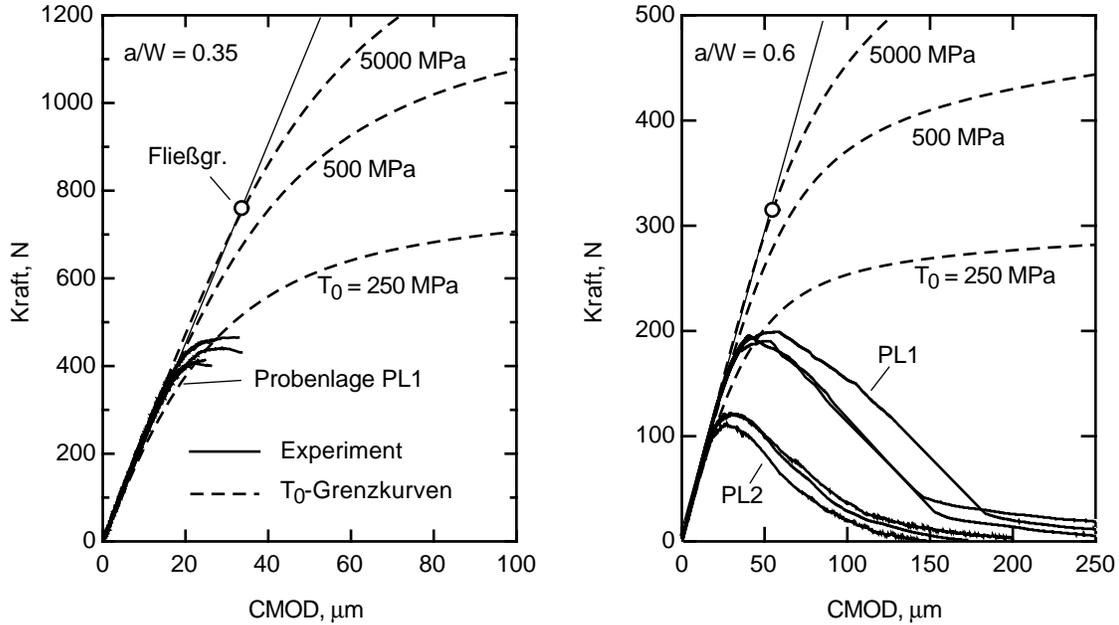


Bild 9.1: Vergleich der experimentellen Kraft–CMOD-Kurven mit T_0 -Grenzkurven für 250, 500 und 5000 MPa.

9.2 Anpassung der Kohäsivparameter

Wie bei den PST-Kristallen wurden für die Bestimmung der Kohäsivparameter zunächst verschiedene T_0 -Grenzkurven ($\Gamma_0 \rightarrow \infty$) berechnet. In Bild 9.1 werden für die beiden a/W -Verhältnisse 0.35 und 0.6 die experimentellen Kraft–CMOD-Kurven mit den Grenzkurven für $T_0 = 250$, 500 und 5000 MPa verglichen.

Bei einem Wert von $T_0 = 5000$ MPa werden die Kohäsivzonen nicht aktiviert. Die 5000 MPa-Grenzkurven geben daher das theoretische, rein plastische Verhalten ohne Schädigung wieder. Aus der Abweichung der 5000 MPa-Grenzkurve von der elastischen Geraden ergeben sich die Fließgrenzen von etwa 750 N für $a/W = 0.35$ und 320 N für $a/W = 0.6$. Experimentell versagen die Proben bei allen Versuchen weit unterhalb der Fließgrenzen. Beispielsweise bei $a/W = 0.6$ liegt das Kraftmaximum der Probenlage PL1 etwa bei $2/3$ der Fließlast und das der Probenlage PL2 bei etwa $1/3$. Das Versagen der Proben findet somit im global elastischen Bereich statt. Das Bruchverhalten wird folglich nicht von der globalen Plastizierung des Probenquerschnitts beeinflusst.

Obwohl die Proben im global elastischen Bereich versagen, zeigen sie ein ausgeprägtes nicht-lineares Verhalten. Diese Nichtlinearität ist auf stabiles Risswachstum zurückzuführen.

Für die Anpassung der Kohäsivparameter werden in Bild 9.1 experimentelle und simulierte Kraft–CMOD-Kurven verglichen. Hierzu soll zunächst, wie bei den PST-Kristallen, die Kohäsivspannung T_0 über den anfänglichen, nicht-linearen Bereich der experimentellen Kurven kalibriert werden. Anders als bei den PST-Kristallen folgen die experimentellen Kurven für die Poly-PST-

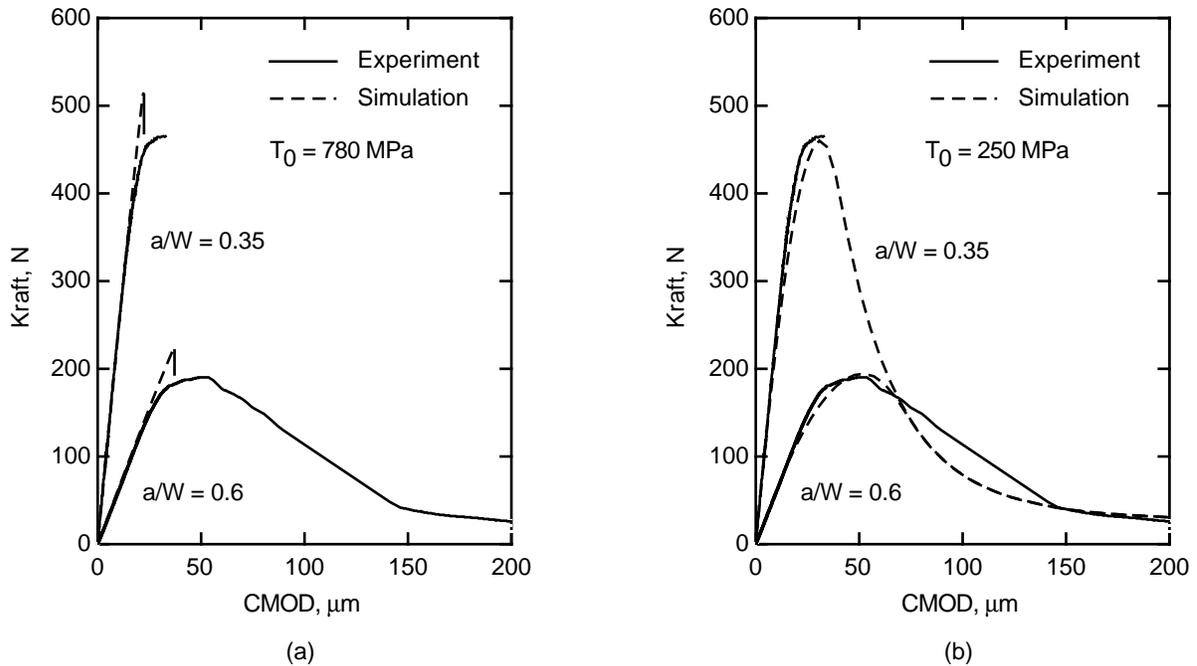


Bild 9.2: Anpassung an die Biegeversuche der Probenlage PL1: (a) $T_0 = 780$ MPa; (b) $T_0 = 250$ MPa.

Kristalle nicht eindeutig einer T_0 -Grenzkurve. Damit ist keine eindeutige Bestimmung sondern nur eine grobe Abschätzung von T_0 möglich. Diese Abschätzung führt für die Probenlage PL1 auf einen relativ niedrigen Wert $T_0 \approx 250$ MPa. Bemerkenswert ist, dass dieser Wert weit unterhalb der Fließgrenze (etwa 500 MPa) und der Bruchfestigkeit (etwa 780 MPa) des Materials liegt, siehe Bild 8.7. Für die Probenlage PL2 ergibt sich ein noch geringerer Wert für T_0 .

Gerade für wenig duktile Materialien gibt es aus theoretischer Sicht eine enge Korrelation zwischen T_0 und der Bruchfestigkeit. Die weitere Bestimmung von Γ_0 für die Probenlage PL1 wurde daher neben $T_0 = 250$ MPa auch für $T_0 = 780$ MPa durchgeführt.

Γ_0 wurde jeweils durch Anpassung der Simulationen an die experimentellen Ergebnisse für $a/W = 0.6$ ermittelt. Die ebenfalls durchgeführten Simulationsrechnungen mit $a/W = 0.35$ können daher als Vorhersagen betrachtet werden, mit denen die Parametersätze beurteilt werden können.

Für $T_0 = 780$ MPa wird die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen mit $\delta_0 = 2.0$ μm erzielt ($\Gamma_0 = 1.56$ N/mm). Bei $T_0 = 780$ MPa zeigen die Simulationen im Gegensatz zu den Experimenten ein linear-elastisches Bruchverhalten. Aus diesem Grund konnte für die Parameteranpassung nur das Kraftmaximum berücksichtigt werden. Mit dem Wert für δ_0 gelingt es relativ gut, das Kraftmaximum für $a/W = 0.35$ vorherzusagen.

Für $T_0 = 250$ MPa wird die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen mit $\delta_0 = 20.0$ μm ($\Gamma_0 = 5.0$ N/mm) erzielt. Im Gegensatz zu den Rechnungen mit $T_0 = 780$ MPa,

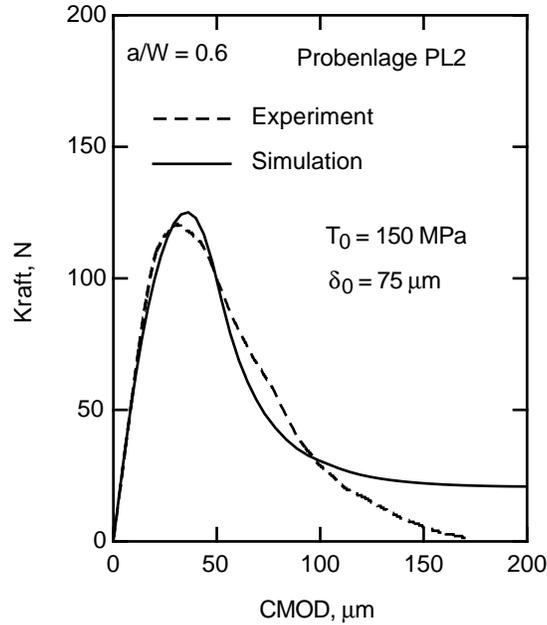


Bild 9.3: Anpassung an die Biegeversuche der Probenlage PL2.

zeigen die Simulationen ein nicht-lineares Bruchverhalten. Mit dem ermittelten Wert für δ_0 gelingt es, den gesamten Verlauf der Kurve für $a/W = 0.6$ relativ gut abzubilden. Die Vorhersage für $a/W = 0.35$ ergibt ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung bis zum Kraftmaximum. Im Kraftmaximum ist bei den Experimenten instabiles Versagen eingetreten. Bei den Simulationen tritt in den Kraftmaxima zwar kein Versagen auf, es zeigen sich jedoch entsprechend hohe Entfestigungsraten.

Für die Probenlage PL2 standen nur Versuche mit $a/W = 0.6$ zur Verfügung. Da eine Vorhersage mit nur einem Datensatz nicht möglich ist, wurden mit den Simulationen nur die Parameter angepasst. Eine qualitativ gute Anpassung ergibt sich mit den Werten $T_0 = 150$ MPa und $\delta_0 = 15$ μm ($\Gamma_0 = 2.25$ N/mm), siehe Bild 9.3. Eine Anpassung mit $T_0 = 780$ MPa war nicht erfolgreich.

Auffällig ist in Bild 9.3, dass bei der Simulation die Kraft nicht auf Null zurückgeht. Hierbei handelt es sich um ein numerisches Artefakt, das darauf hindeutet, dass sich bei der Simulation sogenannte *Large-scale-bridging*-Bedingungen einstellen. Large-scale-bridging-Bedingungen bedeuten, dass sich die Schädigungszone über einen signifikanten Anteil des ungerissenen Ligamentes erstreckt. Unter Large-scale-bridging-Bedingungen kann eine Struktur auch dann noch eine Resttragfähigkeit besitzen, wenn sich die Schädigungszone über den gesamten Restquerschnitt erstreckt [57].

Wie bereits festgestellt, findet der Bruchvorgang im elastischen Bereich statt. Der geringe Einfluss der Plastizität zeigt sich auch in den Dehnungs-Konturbildern der FE-Simulationen. In Bild 9.4(b,c) werden für die Biegeproben (PL1) mit $a/W = 0.6$ die plastische Zonen für $T_0 = 250$

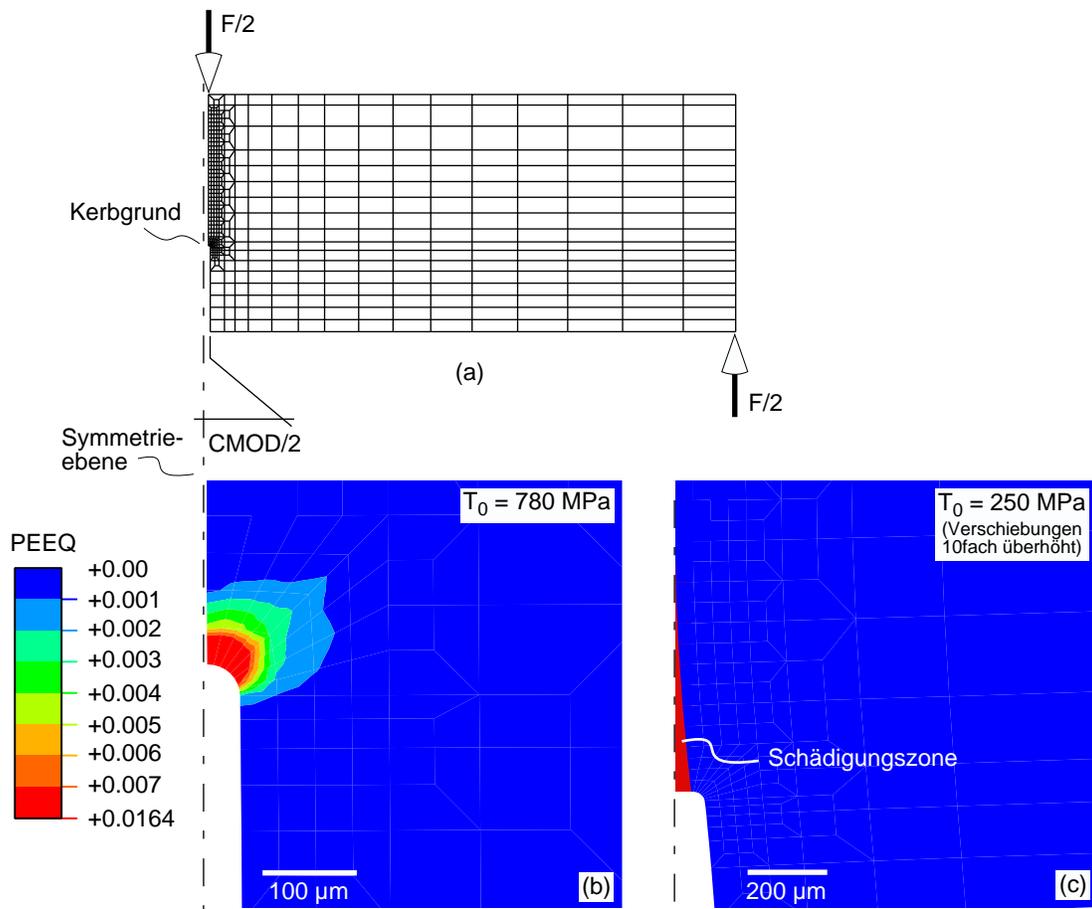


Bild 9.4: Simulation mit dem Kohäsivmodell: (a) FE-Netz, (b) plastische Vergleichsdehnung (PEEQ) an der Risspitze bei $T_0 = 780 \text{ MPa}$ kurz vor dem Lastmaximum, (c) Verformungen an der Risspitze (10fach überhöht) bei $T_0 = 250 \text{ MPa}$ im Lastmaximum.

und 780 MPa verglichen.

Bei einer als theoretische Obergrenze anzunehmenden Kohäsivspannung von $T_0 = 780$ MPa bildet sich im Lastmaximum eine plastische Zone mit einer Ausdehnung von etwa $100 \mu\text{m}$ aus, siehe Bild 9.4(b). Die plastische Zone hat somit maximal die Ausdehnung einer Koloniegroße ($D_K = 100\text{--}200 \mu\text{m}$). Da die plastische Zone selbst bei dieser hohen Kohäsivspannung im Vergleich zu den äußeren Probenabmessungen vernachlässigbar klein ist, wird das Bruchverhalten kaum von der plastischen Zone sondern hauptsächlich von dem elastischen Feld außerhalb der plastischen Zone bestimmt (*Small-scale-yielding*). Eine ausgeprägte Schädigungszone bildet sich bei der Simulation mit $T_0 = 780$ MPa bis zum Kraftmaximum ebenfalls nicht aus.

Für $T_0 = 250$ MPa zeigt Bild 9.4(c) in 10facher Überhöhung den Verformungszustand der Biegeprobe im Lastmaximum. Eine plastische Zone kann sich in diesem Fall nicht ausbilden, da T_0 kleiner ist als die Fließgrenze. Stattdessen bildet sich eine ausgeprägte Schädigungszone aus (rot markiert). Die Ausdehnung der Schädigungszone beträgt im Kraftmaximum etwa $500 \mu\text{m}$. Die Ausdehnung erreicht somit Abmessungen, die im Vergleich zu den relevanten Probenabmessungen ($W - a = 2.7$ mm) nicht vernachlässigbar klein sind. Die Nichtlinearität des Bruchverhaltens ist daher auf den *Large-scale-bridging-Effekt* [57] zurückzuführen. Die Probenlage PL2 (nicht dargestellt) zeigt bei $T_0 = 150$ MPa prinzipiell das gleiche Verhalten.

9.3 Bruchmechanismen

9.3.1 Bruchflächen

Die Bruchflächen der Probenlagen PL1 und PL2 wurden im REM untersucht. Bild 9.5 zeigt eine Bruchfläche von der PL1-Probenlage in verschiedenen Auflösungen. Die Bruchfläche macht insgesamt einen stark zerklüfteten Eindruck. Die Oberflächenrauigkeit liegt dabei etwa in der Größenordnung von 2–3 Koloniedurchmessern (ca. $200 \mu\text{m}$).

Auf der Bruchfläche gibt es translamellare (TL) und interlamellare (IL) Bruchbereiche. In den translamellaren Bereichen werden die Lamellen geschnitten. Die geschnittenen Lamellen sind insbesondere in Bild 9.5(c) gut zu erkennen. In den interlamellaren Bereichen verläuft der Riss parallel zu den Lamellen, sodass die Bereiche eine sehr flächige Morphologie haben, die nur von vereinzelt Stufen unterbrochen wird. In Bild 9.5(b) sind einzelne interlamellare Bruchbereiche zu erkennen, die zudem relativ stark zur globalen Bruchfläche geneigt zu sein scheinen. Insgesamt dominieren jedoch die translamellaren Bereiche das Bruchbild.

In den translamellaren Bereichen geht der Riss relativ glatt durch die Lamellen hindurch, Bild 9.5(c). Anders als bei den PST-Kristallen bilden sich hierbei fast keine Delaminationen aus. Nur vereinzelt sind kleine Querrisse zu beobachten. Größere plastische Verformungen sind auf der Bruchfläche ebenfalls nicht auszumachen.

Bild 9.6 zeigt für die Probenlage PL2 die Bruchfläche in verschiedenen Auflösungen. Die Bruch-

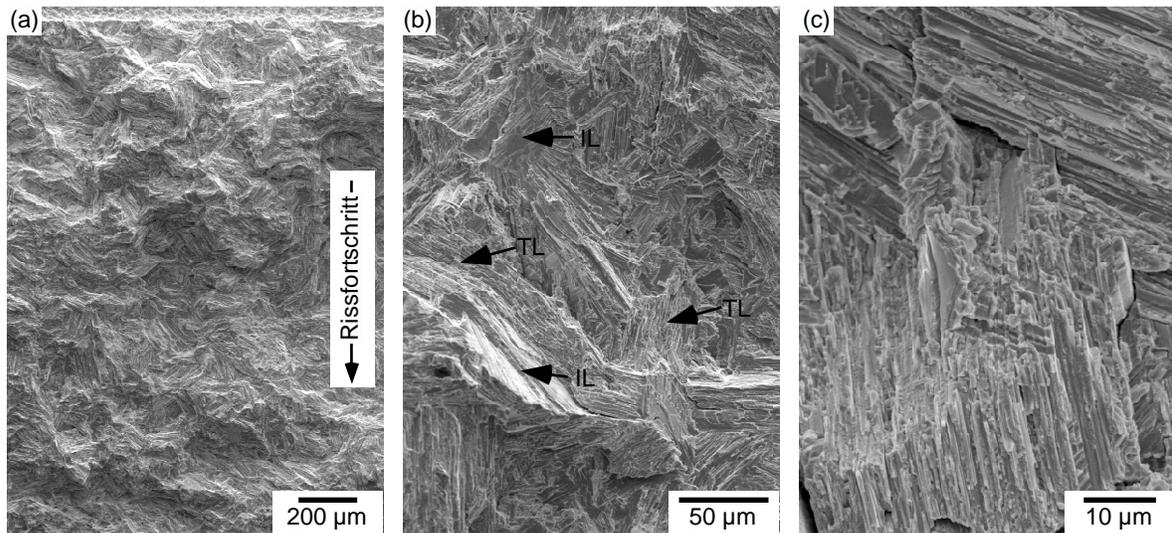


Bild 9.5: Bruchfläche eine Biegeproben aus der Probenlage PL1. (a) Übersicht; (b) interlamellare (IL) und translamellare Bruchbereiche, (c) translamellarer Bruch.

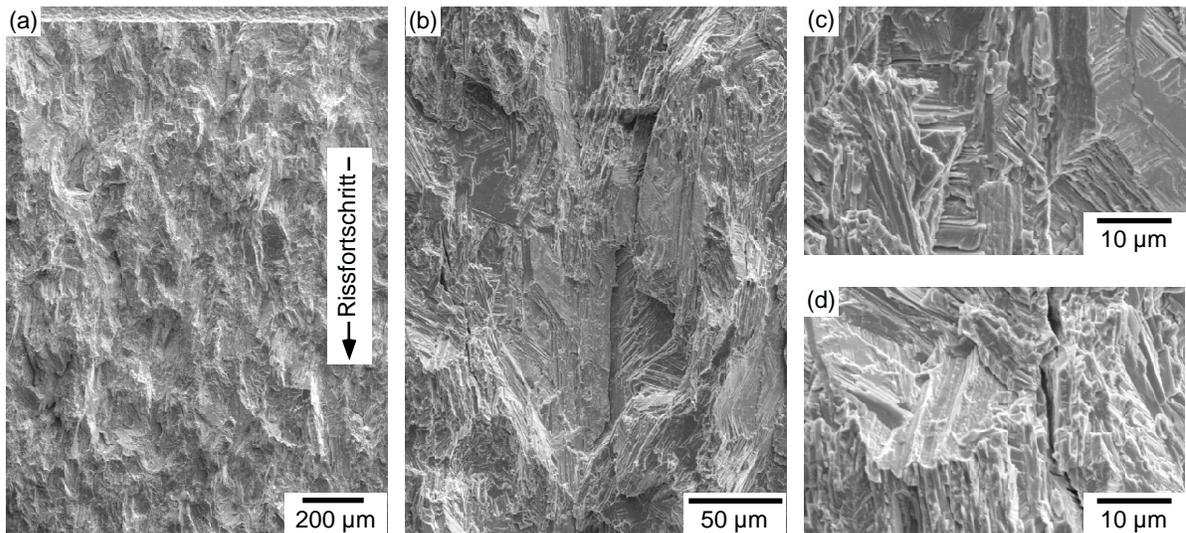


Bild 9.6: Bruchfläche eine Biegeproben aus der Probenlage PL2. (a) Übersicht; (b) Vergrößerung mit inter- und translamellaren Bereichen, (c) interlamellarer Bruchbereich, (d) translamellarer Bruchbereich.

fläche macht insgesamt einen etwas glatteren Eindruck als bei der Probenlage PL1. Ferner scheint das Flussmuster der Bruchfläche in Rissfortschrittsrichtung ausgerichtet zu sein Bild 9.6(a). Auf der Bruchfläche finden sich gleichermaßen inter- und translamellare Bruchflächenanteile, Bild 9.6(b). Der interlamellare Anteil ist jedoch größer als bei der Probenlage PL1. Detailaufnahmen vom inter- und translamellarem Bruch sind in Bild 9.6(c) und (d) abgebildet. Wie bei der Probenlage PL1 sind weder ausgeprägte Delaminationen noch andere Anzeichen größerer plastischer Verformung auf der Bruchfläche zu erkennen.

9.4 Diskussion

Die Bruchsimulationen von den Poly-PST-Kristallen machen einen vermeintlichen Widerspruch sichtbar: Die lokale Bruchfestigkeit (T_0) an der Risspitze scheint kleiner zu sein als die im Zugversuch ermittelte globale Bruchfestigkeit (780 MPa) und sogar kleiner als die globale Fließspannung (500 MPa), siehe Bild 8.7.

Mechanisch betrachtet, erscheint eine lokale Bruchfestigkeit, die kleiner ist als die globale, wenig sinnvoll. Denn würde man einen Zugversuch simulieren, würde die Probe immer bei der lokalen Bruchfestigkeit versagen. Folglich wäre eine sinnvolle Beschreibung des Zugversuchs mit einem solchen Parametersatz nicht möglich. Eine lokale Bruchfestigkeit, die kleiner ist als die globale, widerspricht damit dem Anspruch des Kohäsivmodells, das Bruchverhalten geometrieunabhängig mit einem Parametersatz zu beschreiben.

Werkstoffphysikalisch ist eine Bruchfestigkeit, die kleiner ist als die Fließspannung bei lamellarem TiAl ebenfalls nicht sinnvoll, da die Schädigungsprozesse (Mikrorissbildung) erst durch ein gewisses Maß an plastischer Verformung induziert werden.

Der niedrige Wert für die Kohäsivspannung ist auf die Modellierung selbst zurückzuführen. Wie in Abschnitt 3.2 erläutert wurde, ergibt sich das Kohäsivgesetz aus der Abgrenzung eines Bereiches an der Risspitze, in dem Schädigung angenommen wird, vom ungeschädigten Rest der Probe. Die Unterscheidung, was der geschädigte und was der ungeschädigte Bereich ist, ist dabei recht willkürlich. Je feiner die Bereiche voneinander unterschieden werden, desto genauer und aufwendiger werden im Allgemeinen die Simulationen.

Die hier verwendeten 2D-Simulationen sind von der Modellierung her, als relativ grob einzustufen. Bei der 2D-Modellierung wird durch die Kohäsivelemente nicht das lokale Bruchverhalten abgebildet, sondern die Summe aller Vorgänge, die in einem kleinen Korridor (von der Breite einer Elementlänge) über die gesamte Probendicke stattfinden. Das 2D-Kohäsivgesetz repräsentiert daher das über die Probendicke homogenisierte Bruchverhalten. Dies kann von Bedeutung sein, wenn die Rissfront gekrümmt ist, oder der Riss an ungünstig orientierten Kolonien örtlich vorkommt, siehe Bild 9.7. In diesem Fall muss das Kohäsivgesetz über einen relativ großen Bereich homogenisiert werden. Insbesondere wenn das Kohäsivgesetz ein ausgeprägtes Maximum bei T_0 hat, ist bei dem Rissfrontkrümmungseffekt damit zu rechnen, dass dieses Maximum (scheinbar)

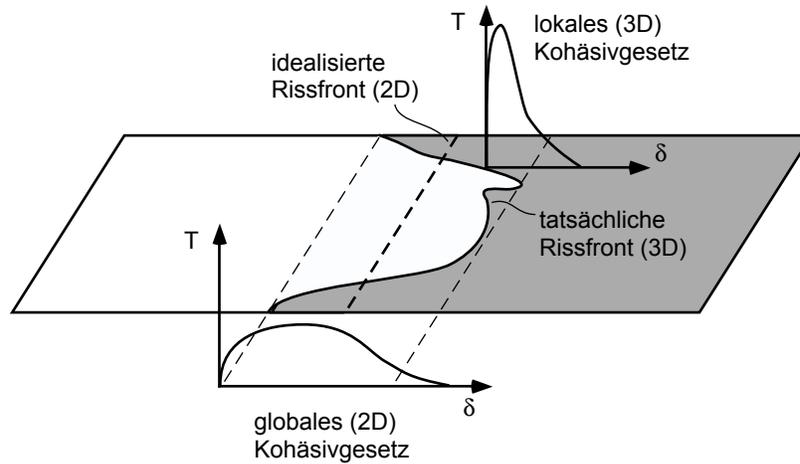


Bild 9.7: Homogenisierung des globalen Kohäsivgesetzes bei der 2D-Idealisierung des Bruchvorganges.

erheblich reduziert wird.

Einen ähnlichen Effekt wie die Rissfrontkrümmung hat die Länge der Kohäsivelemente. Da diese Länge die Breite des betrachteten Korridors definiert, über den das Kohäsivgesetz homogenisiert wird. Mathematisch ist dies gleichbedeutend damit, dass mit zu groben Elementen der Spannungsgradient an der Rissspitze nicht adäquat abgebildet werden kann. Die Anpassung der Kohäsivparameter mit einem feineren FE-Netz würde dann zu einer besseren Abbildung des Gradienten und unter Umständen zu erheblich höheren T_0 -Werten führen.

Die unterschiedliche Kohäsivparameter, die für die Probenlagen PL1 und PL2 ermittelt worden, resultieren offensichtlich aus der Textur des Materials. Die unterschiedlichen Texturen beeinflussen die global ermittelten Kohäsivparameter auf zweierlei Weise:

1. Bei der Probenlage PL2 versagen mehr Kolonien durch interlamellaren Bruch als bei PL1. Da interlamellarer Bruch sehr viel leichter erfolgt als translamellarer Bruch, ist die mittlere Bruchfestigkeit bei PL2 kleiner als bei PL1
2. Das Strangpressen führt zu einer Elongation der Kolonieforn in Strangpressrichtung. Unter der Annahme, dass es zu einem örtlichen Voreilen des Risses an ungünstig orientierten Kolonien kommt, ist der oben diskutierte Risskrümmungseffekt, bei der Probenlage PL2 durch ein Elongation möglicherweise stärker ausgeprägt als bei der Probenlage PL1. Das weitere lokale Voreilen des Risses würde dann zu einem stärkeren Abbau der lokalen Bruchspannungen und demzufolge zu einem kleineren globalen Wert für T_0 führen.

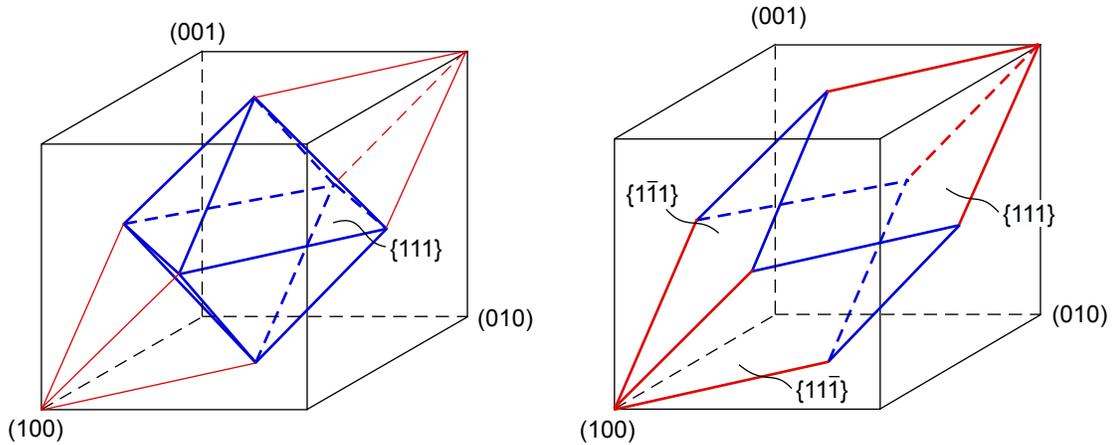


Bild 9.8: Rhomboedrische Einheitszelle

9.5 Ausblick

Rissfortschrittsimulationen mit der FE^2 -Methode sind numerisch sehr aufwendig und hätten den Rahmen dieser Arbeit gesprengt. Trotzdem soll im Folgenden ein Ausblick über die Anwendung der FE^2 -Methode für Rissfortschrittsimulationen gegeben werden.

Die periodischen Einheitszellen, die für die Rissfortschrittsimulationen der PST-Kristalle verwendet wurden, sind nur begrenzt für Rissfortschrittsimulationen von Poly-PST-Kristallen geeignet. Der Grund hierfür liegt in der geometrischen Abbildung der Spaltbruchflächen. Bei den Einheitszellen wurden als Vereinfachung die Würfel­flächen der Zellen als Spaltbruchflächen modelliert. Rissfortschritt kann bei den Einheitszellen folglich nur auf 3 zueinander senkrechten Ebenen erfolgen. Diese Konfiguration verhält sich relativ steif, da nicht alle geometrisch möglichen Rissöffnungsmoden in den Einheitszellen abgebildet werden. Insbesondere ist der Risspfad durch die Einheitszellen bereits sehr stark vorgegeben, so dass der Riss kaum eine Möglichkeit hat, Hindernisse zu umgehen.

Bei den PST-Kristallen wurden nur zwei Rissfortschrittrichtungen untersucht, sodass die Begrenzung auf 3 Bruchebenen keine Einschränkung darstellte. Für Poly-PST-Simulationen mit beliebig orientierten Kolonien führt die Begrenzung jedoch zu einer sehr starken Einschränkung. Für Rissfortschrittsimulationen von Poly-PST-Kristallen muss die Spaltbruchgeometrie besser berücksichtigt werden.

Die wesentlichen Spaltbruchflächen in lamellarem TiAl sind die $\{111\}$ -Ebenen der γ -Phase. Die $\{111\}$ -Ebenen bilden einen Oktaeder, der im Zentrum des Einheitswürfels sitzt. Der Oktaeder selbst ist noch keine raumausfüllende periodische Struktur. Die minimale periodische Einheitszelle, die alle $\{111\}$ -Ebenen enthält, ist eine rhomboedrische Struktur, bestehend aus dem $\{111\}$ -Oktaeder und zwei Tetraedern, die auf zwei gegenüberliegende Oktaederflächen liegen, siehe Bild 9.8.

Die rhomboedrische Einheitszelle kann als FE-Modell relativ einfach umgesetzt werden. Ein einfaches Modell der rhomboedrischen Einheitszelle würde aus 10 Tetraeder-Elementen und 4 Kohäsivelementen bestehen. Das FE-Modell wäre somit einfach genug, um als Untermodell für relativ komplexe FE²-Simulationen verwendet werden zu können.

Kapitel 10

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde ein mikromechanisches Modell für das Verformungs- und Bruchverhalten von lamellarem TiAl vorgestellt. Die Modellierung basiert auf der kristallplastischen Verformung der beiden Einzelphasen α_2 und γ , und dem Kohäsivmodell für die Abbildung des lokalen Bruchverhaltens. Die lamellare Substruktur wird mit unterschiedlichen periodischen Einheitszellen abgebildet, wobei die Einheitszellen so gewählt wurden, dass sie obere und untere Grenzen für das mechanische Verhalten markieren. Die periodischen Einheitszellen werden ihrerseits für neuartige, mehrskalige FE²-Simulationen verwendet. Die FE²-Analysen umfassen Simulationen zum Bruchverhalten von PST-Kristallen sowie Simulationen zum Verformungsverhalten von Poly-PST-Kristallen. Das Bruchverhalten von Poly-PST-Kristallen wurde konventionell (2D) mit dem Kohäsivmodell berechnet; aber auch hierfür wurde ein Ausblick für mögliche FE²-Simulationen gegeben. Mit der gegebenen Modellierung ist es erstmals möglich, das Verformungs- und Bruchverhalten von lamellaren TiAl-Legierungen ganzheitlich, d.h. auf deren Wechselwirkung hin, zu untersuchen.

Bisherige Modellierungsansätze haben sich darauf beschränkt, entweder das Verformungsverhalten von PST-Kristallen [46–49], das Verformungsverhalten von Poly-PST-Kristallen [42–45, 51] oder das Bruchverhalten von Poly-PST-Kristallen [72–74] zu untersuchen. Zudem basieren die meisten dieser Ansätze, mit Ausnahme der Arbeit von Brockman [51], auf 2D-Simulationen. Da sowohl das Verformungs- als auch das Bruchverhalten sehr stark von 3D-Effekten beeinflusst wird, können im Allgemeinen nur qualitative Aussagen aus 2D-Modellierungen abgeleitet werden. Aus diesem Grund wurde in dieser Arbeit auf einen möglichst durchgängigen 3D-Ansatz geachtet.

Die Modellierungen wurden auf den unterschiedlichen Ebenen jeweils mit Experimenten verglichen. Hierbei zeigt sich durchwegs eine gute Übereinstimmung. Die Aussagen, die sich aus dem Vergleich von Simulation und Experiment ableiten lassen, können wie folgt zusammengefasst werden:

1. Wesentlich für die Beschreibung der plastischen Anisotropie von PST-Kristallen ist die

morphologische Klassifizierung der Gleitsysteme in die longitudinalen, gemischten und transversalen Gleitmoden. Eine weitere kristallographische Klassifizierung der Gleitsysteme in Einfach-, Super- und Zwillingsversetzung ist für die Beschreibung der plastischen Anisotropie nicht maßgebend.

2. Für die plastische Verformung von PST-Kristallen ist die Aktivierung von Superversetzungen kinematisch notwendig. Ohne Superversetzungen ist die plastische Verformung von PST-Kristallen bei einer 0° -Druck- und einer 90° -Zugbeanspruchung nicht möglich, was zumindest für die 0° -Druckbeanspruchung der experimentellen Evidenz widerspricht.
3. Wenn die Supergleitsysteme fester sind als Einfach- und Zwillingsgleitsysteme zeigen PST-Kristalle eine Zug/Druck-Anomalie. Die Zug/Druck-Anomalie zeigt sich insbesondere bei der 0° -Orientierung. Hier zeigt sich im Zugversuch eine etwas geringere Fließspannung und eine isotropere Verformung als im Druckversuch. Aus dem Vergleich mit experimentellen Befunden kann abgeschätzt werden, dass die Supergleitsysteme um einen Faktor 1.25–1.5 fester sind als Einfach- und Zwillingsgleitsysteme.
4. Das anisotrope Bruchverhalten von PST-Kristallen kann gut mit dem Kohäsivmodell beschrieben werden. Hierbei ergeben sich für die beiden Hauptrichtungen des Rissfortschritts, längs und quer zu den Lamellen, sehr unterschiedliche Kohäsivparameter. Für Rissfortschritt quer zu den Lamellen wurden die Kohäsivparameter $T_0 = 600$ MPa und $\Gamma_0 = 7$ N/mm ermittelt. Rissfortschritt längs zu den Lamellen ist im Wesentlichen unabhängig von T_0 . Für die Kohäsivenergie ergibt sich der Wertebereich $\Gamma_0 = 0.05$ – 0.1 N/mm.
5. Die Bruchmechanismen von PST-Kristallen werden maßgeblich durch die Aktivierung von transversalen Gleitsystemen beeinflusst. Bei der Aktivierung von transversalen Versetzungen tritt eine plastische Inkompatibilität zwischen α_2 - und γ -Lamellen auf. Durch diese Inkompatibilität werden Mikrorisse in den α_2 -Lamellen bzw. Delaminationen zwischen den α_2 - und γ -Lamellen erzeugt, die bei allen Rissorientierungen (RT, D, RS) für den Bruchmechanismus maßgebend sind.
6. Das Verformungsverhalten von Poly-PST-Kristallen zeigt, wie bei den PST-Kristallen, eine Zug/Druck-Anomalie, wenn die Supergleitsysteme deutlich fester sind als die Einfach- und Zwillingsgleitsysteme. Ein Abgleich mit experimentellen Zug- und Druckversuchsdaten führt zu der Abschätzung, dass die Supergleitsysteme im Poly-PST-Kristall etwa um den Faktor 1.5 fester sind als die Einfach- und Zwillingsgleitsysteme.
7. Das Bruchverhalten von Poly-PST-Kristallen kann mit dem Kohäsivmodell beschrieben werden. Die Kohäsivparameter sind bei texturierten Werkstoffen von der Orientierung des Risses abhängig. Für die beiden untersuchten Probenlagen PL1 und PL2 wurden Kohäsivparameter von $T_0 = 250$ MPa und $\Gamma_0 = 5.0$ N/mm bzw. $T_0 = 150$ MPa und $\Gamma_0 = 2.25$ N/mm gefunden. Die vergleichsweise niedrigen Kohäsivspannungen werden hierbei auf die relativ grobe 2D-Modellierung zurückgeführt.

8. Als Ausblick für eine durchgängige FE²-Simulation wird die Verwendung von rhomboedrischen Einheitszellen vorgeschlagen, mit denen die Spaltbruchgeometrie von der γ -Phase in idealer Weise abgebildet werden könnte. Mit einer solchen Modellierung könnte auch das Bruchverhalten von Poly-PST-Kristallen mikromechanisch untersucht werden.

Literaturverzeichnis

- [1] F. Appel and R. Wagner. Microstructure and deformation of two-phase γ -titanium aluminides. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 22:187–268, 1998.
- [2] W. Smarsly and L. Singheiser. Intermetallische Phasen — Werkstoffe für zukünftige Gasturbinen. *VDI Berichte*, 1151:397–404, 1995.
- [3] C. M. Austin, T. J. McAllister, and J. C. Chesnutt. Aircraft engine applications for gamma titanium aluminides. In M. V. Nathal et al., editor, *Structural Intermetallics*, pages 413–425, 1997.
- [4] D. M. Dimiduk. Gamma titanium aluminide alloys—an assessment within the competition of aerospace structural materials. *Materials Science and Engineering*, A263:281–288, 1999.
- [5] H. Clemens, A. Lorich, N. Eberhardt, W. Glatz, W. Knabl, and H. Kestler. Technology, properties and applications of intermetallic γ -TiAl based alloys. *Zeitschrift zur Metallkunde*, 90:569–580, 1999.
- [6] E. A. Loria. Gamma titanium aluminide as prospective structural materials. *Intermetallics*, 8:1339–1345, 2000.
- [7] T. Tetsui. Application of cast gamma alloy for turbochargers. In M. V. Nathal et al., editor, *Structural Intermetallics*, pages 489–493, 1997.
- [8] T. Tetsui and S. Ono. Endurance and composition and microstructure effects on endurance of TiAl used in turbochargers. *Intermetallics*, 7:689–697, 1999.
- [9] H. Baur. *Kriech- und Ermüdungseigenschaften von γ -Titanaluminiden*. Dissertation, TU Hamburg-Harburg, 1999.
- [10] Y.-W. Kim. Intermetallic alloy based on gamma titanium aluminide. *Journal of Materials*, 41(7):24–30, 1989.
- [11] Y.-W. Kim. Effects of microstructure on the deformation and fracture of γ -TiAl alloys. *Materials Science and Engineering*, A192/193:519–533, 1995.

- [12] D. M. Dimiduk, T. A. Parathasarathy, and P. M. Hazzledine. Design-tool representation of strain compatibility and stress-strain relationship for lamellar gamma titanium aluminides. *Intermetallics*, 9:875–882, 2001.
- [13] R. Mohr. *Modellierung des Hochtemperaturverhaltens metallischer Werkstoffe*. Dissertation, TU Hamburg-Harburg, 1999.
- [14] B. Wiesand-Valk. *Mikrorissbildung und makroskopisches Versagen in intermetallischen Titanaluminiden*. Dissertation, TU Hamburg-Harburg, 2000.
- [15] M. Yamaguchi and Y. Umakoshi. The deformation behaviour of intermetallic superlattice compounds. *Progress in Materials Science*, 34:1–148, 1990.
- [16] H. Inui, M. H. Oh, A. Nakamura, and M. Yamaguchi. Ordered domains in TiAl coexisting with Ti₃Al in the lamellar structure of Ti-rich TiAl compounds. *Philosophical Magazine A*, 66:539–555, 1992.
- [17] T. Fujiwara, A. Nakamura, M. Hosomi, S. R. Nishitani, Y. Shirai, and M. Yamaguchi. Deformation of polysynthetically twinned crystals of TiAl with nearly stoichiometric composition. *Philosophical Magazine A*, 61:591–606, 1990.
- [18] H. Inui, M.H. Oh, A. Nakamura, and M. Yamaguchi. Room-temperature tensile deformation of polysynthetically twinned (PST) crystals of TiAl. *Acta Metallurgica et Materialia*, 40:3095–3104, 1992.
- [19] T. Nakano and Y. Umakoshi. Effect of boron addition on the plastic behaviour of polysynthetically twinned crystals of TiAl. *Intermetallics*, 2:185–191, 1994.
- [20] H. Inui, K. Kishida, M. Misaki, M. Kobayashi, Y. Shirai, and M. Yamaguchi. Temperature dependence of yield stress, tensile elongation and deformation structure in polysynthetically twinned crystals of Ti–Al. *Philosophical Magazine A*, 72:1609–1631, 1995.
- [21] K.-F. Yao, H. Inui, K. Kishida, and M. Yamaguchi. Plastic deformation of V- and Zr-alloyed PST TiAl in tension and compression at room temperature. *Acta Metallurgica et Materialia*, 43:1075–1086, 1995.
- [22] T. Nakano, T. Kawanaka, H. Y. Yasuda, and Y. Umakoshi. Effect of lamellar structure on fracture behavior in TiAl polysynthetically twinned crystals. *Materials Science and Engineering*, A194:43–51, 1995.
- [23] S. Yokoshima and Yamaguchi. Fracture behavior and toughness of PST crystals of TiAl. *Acta Materialia*, 44:873–883, 1996.
- [24] Y. Umakoshi, H.Y. Yasuda, and T. Nakano. Plastic anisotropy and fatigue of TiAl PST crystals: a review. *Intermetallics*, 4:S96–S75, 1996.

- [25] T. Nakano, H. Y. Yasuda, N. Higashitanaka, and Y. Umakoshi. Anomalous behaviour of cyclic deformation and fatigue properties of TiAl PST crystals under constant applied stress. *Acta Materialia*, 45:4807–4821, 1997.
- [26] H. Umeda, K. Kishida, H Inui, and M Yamaguchi. Effect of Al-concentration and lamellar spacing on the room-temperature strength and ductility of PST crystals of TiAl. *Materials Science and Engineering*, A239–240:336–343, 1997.
- [27] L. Heatherly, Jr., E. P. George, C. T. Liu, and M. Yamaguchi. A study of cleavage fracture behavior of PST TiAl alloys. *Materials Science and Engineering*, A239–240:404–409, 1997.
- [28] R. Lebensohn, H. Uhlenhut, C. Hartig, and H. Mecking. Plastic flow of γ -TiAl-based polysynthetically twinned crystals: micromechanical modeling and experimental validation. *Acta Materialia*, 46:4701–4709, 1998.
- [29] K. Kishida, D. R. Johnson, Y. Masuda, H. Umeda, H. Inui, and M. Yamaguchi. Deformation and fracture of PST crystals and directionally solidified ingots of TiAl-based alloys. *Intermetallics*, 6:679–683, 1998.
- [30] T. A. Parthasarathy, M. G. Mendiratta, and D. M. Dimiduk. Flow behavior of PST and fully lamellar polycrystals of Ti–48Al in the microstrain regime. *Acta Metallurgica*, 46:4005–4016, 1998.
- [31] K. Kishida, H. Inui, and M. Yamaguchi. Deformation of PST crystals of a TiAl/Ti₃Al two-phase alloy at 1000°C. *Intermetallics*, 7:1131–1139, 1999.
- [32] M.-C. Kim, M. Nomura, V. Vitek, and D. P. Pope. Deformation of polysynthetically twinned TiAl single crystals with near-hard orientations. In *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, volume 552, pages KK.3.1.1–KK.3.1.6, 1999.
- [33] T. A. Paratharsarathy, P. R. Subramanian, M. G. Mendiratta, and D. M. Dimiduk. Phenomenological observations of lamellar orientation effects on the creep behavior of Ti–48at.%Al PST crystals. *Acta Materialia*, 48:541–551, 2000.
- [34] G. Wegmann, T. Suda, and K. Maruyama. Deformation characteristics of polysynthetically twinned (PST) crystals during creep. *Intermetallics*, 8:165–177, 2000.
- [35] H. Inui, Y. Toda, and M. Yamaguchi. Plastic deformation of single crystal of a DO₁₉ compound with an off-stoichiometric composition (Ti-36.5 at.% Al) at room temperature. *Philosophical Magazine A*, 67:1315–1332, 1993.
- [36] K. Kishida, H. Inui, and M. Yamaguchi. Deformation of lamellar structure in TiAl–Ti₃Al two-phase alloys. *Philosophical Magazine A*, 78:1–28, 1998.
- [37] H. Uhlenhut. *Ursachen plastischer Anisotropie von γ -TiAl-Basislegierungen*. Dissertation, TU Hamburg-Harburg, 1999.

- [38] Y. Minonishi. Plastic deformation of single crystals of Ti_3Al with D0_{19} structure. *Philosophical Magazine A*, 63:1085–1091, 1991.
- [39] Y. Umakoshi, T. Nakano, T. Takenaka, K. Sumimoto, and T. Yamane. Orientation and temperature dependence of yield stress and slip geometry of Ti_3Al and $\text{Ti}_3\text{Al-V}$ single crystals. *Acta Metallurgica et Materialia*, 41:1149–1154, 1993.
- [40] H. Inui, M. Matsumuro, D.-H. Wu, and M. Yamaguchi. Temperature dependence of yield stress, deformation mode and deformation structure in single crystals of TiAl (Ti-56 at.% Al). *Philosophical Magazine A*, 74:395–423, 1997.
- [41] R. Mahapatra, A. Girshick, D. P. Pope, and V. Vitek. Deformation mechanisms of near-stoichiometric single phase TiAl single crystals: a combined experimental and atomistic modeling study. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 33:1921–1927, 1995.
- [42] B. M. Kad, M. Dao, and R. J. Asaro. Numerical simulations and fracture effects in two phase $\gamma\text{-TiAl} + \alpha_2\text{-Ti}_3\text{Al}$ lamellar microstructures. *Philosophical Magazine A*, 71:567–604, 1995.
- [43] B. M. Kad, M. Dao, and R. J. Asaro. Numerical simulations of stress–strain behavior in two-phase $\alpha_2 + \gamma$ TiAl alloys. *Materials Science and Engineering*, A192/193:97–103, 1995.
- [44] M. Dao, B. K. Kad, and R. J. Asaro. Deformation and fracture under compressive loading in lamellar TiAl microstructures. *Philosophical Magazine A*, 74:569–591, 1996.
- [45] B. M. Kad and R. J. Asaro. Apparent Hall–Petch effects in polycrystalline lamellar TiAl . *Philosophical Magazine A*, 75:87–104, 1997.
- [46] E. Parteder, T. Siegmund, F. D. Fischer, and S. Schlägl. Numerical simulation of the plastic behaviour of polysynthetically twinned Ti–Al crystals. *Materials Science and Engineering*, A192/193:149–154, 1995.
- [47] S. M. Schlägl and F. D. Fischer. The role of slip and twinning in the deformation behaviour of polysynthetically twinned crystals of TiAl : a micromechanical model. *Philosophical Magazine A*, 75:621–636, 1997.
- [48] S. M. Schlägl and F. D. Fischer. Numerical simulation of yield loci for PST crystals of TiAl . *Materials Science and Engineering*, A239–240:790–803, 1997.
- [49] S. M. Schlägl. *Micromechanical Modelling of the Deformation Behaviour of Gamma Titanium Aluminides*. VDI-Fortschrittberichte, Nr. 220, VDI-Verlag, Düsseldorf, 1997.
- [50] R. A. Brockman, G. J. Frank, and S. E. Olson. Elastic-plastic stress analysis of gamma titanium aluminide polycrystals. In *Third International Symposium on Structural Materials, Jackson Hole, Wyoming*. 2001.

- [51] R. A. Brockman. Analysis of elastic-plastic deformation in TiAl polycrystals. *International Journal of Plasticity*, 19, 2003.
- [52] Y. Huang. A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the ABAQUS finite element program. Report MECH - 178, Division of Applied Science, Havard University, Cambridge, Massachusetts, 1991.
- [53] G. Lin and M. Werwer. An ABAQUS user material subroutine incorporation single crystal plasticity for simulation of titanium aluminide based alloys. Technical report, GKSS, Technical Note GKSS/WMS/01/01, 2001.
- [54] R. J. Asaro. Micromechanics of crystals and polycrystals. In *Advances in Applied Mechanics*, volume 23. Academic Press, 1983.
- [55] J. W. Christian and S. Mahajan. Deformation twinning. *Progress in Materials Science*, 39:1–157, 1995.
- [56] G. Barenblatt. Mathematical theory of equilibrium cracks. In *Advances in Applied Mechanics*, volume 7, pages 56–129. Academic Press, 1962.
- [57] G. Bao and Z. Suo. Remarks on crack-bridging concepts. *Applied Mechanics Reviews*, 45:355–366, 1992.
- [58] W. Brocks and A. Cornec (eds.). International Workshop on Cohesive Models. *Engineering Fracture Mechanics*, 70, September 2003.
- [59] I. Scheider. *Bruchmechanische Bewertung von Laserschweißverbindungen durch numerische Rißfortschrittsimulation mit dem Kohäsivzonenmodell*. Dissertation, TU Hamburg-Harburg, 2001.
- [60] H. J. Greenberg W. Prager, D. C. Drucker. Extended limit design theorems for continuous media. *Quarterly of Applied Mathematics*, 9:381–389, 1952.
- [61] F. Feyel. Multiscale FE² elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16:344–354, 1999.
- [62] F. Feyel and J.-L. Chaboche. FE² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mathematics and Engineering*, 183:309–330, 2000.
- [63] R. J. M. Smit, W. A. M. Brekelmans, and H. E. H. Meijer. Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling. *Computer Methods in Applied Mathematics and Engineering*, 155:181–192, 1998.
- [64] H. Mecking, Ch. Hartig, and U. F. Kocks. Deformation modes in γ -TiAl as derived from single crystal yield surface. *Acta Materialia*, 44:1309–1321, 1996.

- [65] A. Hillerborg, M. Modéer, and P.-E. Petersson. Analysis of crack formation and growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. *Cement and Concrete Research*, 6:773–782, 1976.
- [66] A. Hillerborg. The theoretical basis of a method to determine the fracture energy G_F of concrete. *Materials and Structures*, 18:291–296, 1985.
- [67] E. P. Prado and J. G. M. van Mier. Effects of particle structure on mode I fracture process in concrete. *Engineering Fracture Mechanics*, 70:1793–1807, 2003.
- [68] F. A. McClintock. Plasticity aspects of fracture. In H. Liebowitz, editor, *Fracture – An Advanced Treatise, Vol. III*. Academic Press, New York, 1971.
- [69] K.-H. Schwalbe. *Bruchmechanik metallischer Werkstoffe*. Carl Hanser Verlag, München, 1980.
- [70] W. Schillinger, B. Lorenzen, and A. Bartels. Anisotropic mechanical behaviour of textures γ -TiAl caused by the directionality of twinning. *Materials Science and Engineering*, A329–331:644–648, 2002.
- [71] X. Wu, D. Song, and K. Xia. Different tensile and compressive creep behaviour in a fully lamellar (Ti–44Al–1Mn–2.5Nb–0.15Gd) alloy. *Materials Science and Engineering*, A329–331:821–827, 2002.
- [72] J. J. M. Arata, A. Needleman, K. S. Kumar, and W. A. Curtin. Microcrack nucleation and growth in elastic lamellar solids. *International Journal of Fracture*, 105:321–342, 2000.
- [73] J. J. M. Arata, K. S. Kumar, W. A. Curtin, and A. Needleman. Crack growth in lamellar titanium aluminide. *International Journal of Fracture*, 111:163–189, 2001.
- [74] J. J. M. Arata, K. S. Kumar, W. A. Curtin, and A. Needleman. Crack growth across colony boundaries in binary lamellar TiAl. *Materials Science and Engineering*, A329–331:532–537, 2002.

Danksagung

Die vorliegende Arbeit ist weitgehend während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Werkstoffforschung des GKSS-Forschungszentrums entstanden.

Meinem Erstgutachter, Herrn Prof. K.-H. Schwalbe, danke ich herzlich für die Möglichkeit die Arbeit in äußerst angenehmer und fruchtbarer Atmosphäre an seinem Institut durchführen zu können, sowie für das fortlaufende Interesse, das er meiner Arbeit entgegen gebracht hat.

Herr Prof. H. Mecking hat sich freundlicherweise als Zweitgutachter zur Verfügung gestellt. Hierfür möchte ich ihm an dieser Stelle ebenso danken wie für die kritischen und anregenden Diskussionen zum Thema TiAl.

Herrn Prof. R. Bormann danke ich für die Übernahme des Vorsitzes des Prüfungsausschusses und angenehme Durchführung des Verfahrens.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. A. Cornec für die fachliche Betreuung der Arbeit und die freundschaftliche Unterstützung, die er mir während dieser Zeit erwiesen hat.

Herrn Prof. W. Brocks danke ich für das fortlaufende Interesse an meiner Arbeit, die anregenden Diskussionen sowie für kritische Durchsicht des Manuskripts.

Meine Arbeit baut weitgehend auf den Ergebnisse von Herrn Dr. H. Uhlenhut auf. Ihm danke ich für die Bereitstellung der Ergebnisse und für die Diskussionen, die mir gerade in der Anfangszeit geholfen haben, in das Thema richtig einzusteigen.

Herrn Dr. F. Appel danke ich für die kritischen Diskussionen zum Thema TiAl sowie für die Bereitstellung des γ -TAB-Materials.

Herrn V. Heitmann danke ich für die gewissenhafte Durchführung der experimentellen Arbeiten, sowie für die Rasterelektronenaufnahmen.

Herrn U. Lorenz danke ich für die Herstellung des γ -TAB-Materials, sowie für die Durchführung der Zug- und Druckversuche an diesem Materials.

Dem japanischen Kultusministerium danke ich für die Bewilligung des Monbusho-Sommerstipendium, mit dem ich im Sommer 2000 zwei Monate an der Kyoto-Universität verbringen konnte. Herrn Prof. M. Yamaguchi danke ich für die freundliche Aufnahme in seinen Institut während dieser Zeit.

Die Arbeit ist im Rahmen des SFB 371 *Mikromechanik mehrphasiger Werkstoffe* entstanden. Dieser Rahmen hat sich als äußerst fruchtbar für die Arbeit erwiesen. Hierfür möchte ich allen Mitarbeitern des SFB371, insbesondere aber dem Juwi-Club, danken. Der DFG danke ich für die Bereitstellung der finanziellen Mittel für meine Arbeit in diesem Rahmen.

Ganz besonders danken möchte ich all meinen alten Kollegen für die angenehme und fruchtbare Zeit, die ich in ihren Reihen verbringen durfte.