

Identifikation und Validierung eines kristallplastischen Modells auf Makro- und Mikroebene

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur (Dr.-Ing.)

von Dipl.-Ing. Thorsten Hoffmann
geb. am 04.09.1978 in Bernau (bei Berlin)

genehmigt durch die Fakultät für Maschinenbau
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. Albrecht Bertram

Prof. Dr.-Ing. Martin Heilmaier

Promotionskolloquium am 19.01.2011

Kurzzusammenfassung

Mikro-Makro-Modelle werden in zunehmendem Maße zur Beschreibung des Materialverhaltens von Metallen eingesetzt, demzufolge steigt auch ihre Anzahl stetig an. Es besteht jedoch ein Mangel an verlässlichen Identifikations- und Validierungsmethoden für solche Modelle. Zur Entwicklung derartiger Methoden können sowohl Experimente auf der polykristallinen Makroebene als auch auf der einkristallinen Mikroebene genutzt werden. In dieser Arbeit werden Experimente beschrieben, die auf beiden Ebenen durchgeführt werden. Alle Proben stammen von gewalzten Blechen des Tiefziehstahls DC04. Parallel zu den experimentellen Untersuchungen werden Finite-Elemente Rechnungen unter Verwendung eines kristallplastischen Materialmodells durchgeführt. Im ersten Teil der Arbeit wird eine Identifikation und Validierung des Materialmodells auf der Grundlage klassischer makroskopischer Scher- und Zugversuche präsentiert. Im zweiten Teil der Arbeit werden die Möglichkeiten der Nutzung von makroskopischen und mikroskopischen Eindringversuchen zur Identifikation und Validierung untersucht. Mit den Berechnungen auf der Mikro- und Makroebene kann ein mittelbarer Zusammenhang zwischen dem Materialverhalten auf beiden Ebenen nachgewiesen werden. Anhand von Sensitivitätsstudien ist es möglich, einige für die Eindringversuche wichtige Einflussfaktoren zu ermitteln. Schließlich werden die bestehenden Probleme bezüglich einer Identifikation aufgezeigt.

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt meinem Betreuer Prof. Albrecht Bertram, der mit seiner Ideengebung und dem mir entgegengebrachten Vertrauen die Voraussetzungen zum Entstehen dieser Arbeit geschaffen hat. Weiterhin möchte ich Ihm für die zahlreichen Anregungen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Für die Bereitstellung der vielfältigen experimentellen Daten, die eine wichtige Säule dieser Arbeit darstellen, danke ich im Folgenden: Dr. Ben Larson und Dr. Jon Tischler für die Ergebnisse der Mikroindenterversuche und die zahlreichen Diskussionen. Prof. Heinz-Günter Brokmeier danke ich für die Messung der Textur sowie Prof. Werner Skrotzki und Juliane Scharnweber für die durchgeführte Texturzerlegung. Ich danke Heike Rühle, Olga August, Prof. Joachim Schneibel und Prof. Martin Heilmaier für Ihre Unterstützung bei der Durchführung von Experimenten und der Betreuung von Studienarbeiten. Ihre vielen werkstoffwissenschaftlichen Erklärungen sind eine Bereicherung für diese Arbeit gewesen. Prof. Martin Heilmaier möchte ich zudem für die Übernahme des Zweitgutachtens danken. Auch möchte ich mich bei Christoph Karl, Alexander Aman und Norbert Lucke für die fleißige Bearbeitung ihrer Studienarbeiten bedanken. Für die Bereitstellung der Scherversuchsdaten gilt mein Dank Jan Kalisch und Prof. Salima Bouvier. Ich danke Dr. Maria Doig für ihr Interesse an meiner Arbeit und den von der INPRO Berlin zur Verfügung gestellten Zugversuchsdaten.

Meinen Kollegen am Institut für Mechanik, insbesondere Manuela Schildt, Simone Spröte, Dr. Wolfgang Lenz, Jan Kalisch, Dr. Gerrit Risy, Dr. Rainer Glüge und Sebastian Borsch, danke ich für die freundliche Arbeitsatmosphäre und die unzähligen Hilfestellungen.

Weiterhin gilt mein Dank der deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die Finanzierung meiner wissenschaftlichen Tätigkeit am Institut für Mechanik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg. Diese wurde im Rahmen des Graduiertenkollegs 828 „*Micro-Macro Interactions in Structured Media and Particle Systems*“ in Form eines Stipendiums bereitgestellt.

Besonders herzlich möchte ich meiner Frau Kristin danken, die mit Ihrer immerwährenden Unterstützung einen maßgeblichen Anteil am Erfolg dieser Arbeit hat.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Beschreibung und Modellierung des mechanischen Materialverhaltens	3
2.1	Notation der Tensorrechnung	3
2.2	Kinematik	3
2.3	Elastisches Verhalten von Kristallen mit kubischer Symmetrie	4
2.3.1	Elastisches Gesetz	4
2.3.2	Isomorphie der elastischen Gesetze	5
2.4	Plastische Verformung kubisch raumzentrierter Kristalle	6
2.4.1	Beschreibung der Gleitmechanismen	6
2.4.2	Nicht-Schmid-Effekte	10
2.4.3	Modellierung des kristallographischen Gleitens	11
2.4.4	Beschreibung der Verfestigungsmechanismen	12
2.4.5	Modellierung der Verfestigung	13
2.5	Implementierung des Materialmodells	15
2.5.1	Schematische Beschreibung der Implementierung	15
2.5.2	Diskretisierung und Lösung der Modellgleichungen	15
2.6	Homogenisierung	17
2.6.1	Beurteilung der verfügbaren Methoden	17
2.6.2	Umsetzung des Taylor-Modells	18
2.6.3	Umsetzung des RVE-Modells	19
2.7	Identifikation	21
2.7.1	Die Identifikation als inverses Problem	21
2.7.2	Optimierung unter Verwendung der Levenberg-Marquardt-Methode	21
2.7.3	Berechnung und Auswertung der Korrelationsmatrix	23
3	Identifikation und Validierung des Materialmodells mittels homogener makroskopischer Versuche	25
3.1	Experimentelle Untersuchungen	25

3.1.1	Beschreibung des Probenmaterials	25
3.1.2	Texturmessung und -approximation	26
3.1.3	Scherversuche	27
3.1.4	Zugversuche	31
3.2	Vorauswahl verschiedener Materialparameter	32
3.2.1	Notwendigkeit der Vorauswahl von Modellparametern	32
3.2.2	Auswahl der elastischen Konstanten	33
3.2.3	Festlegung der Gleitsysteme	34
3.2.4	Wahl der Parameter des viskosen Ansatzes	34
3.3	Identifikation der Verfestigungsparameter von Verfestigungsregel I und II anhand der Scherversuche in Walzrichtung	38
3.3.1	Beschreibung des allgemeinen Vorgehens	38
3.3.2	Identifikation unter Nutzung der monotonen Scherversuche	39
3.3.3	Identifikation unter Nutzung der monotonen und zyklischen Scherversuche	41
3.4	Parameter- und Modellvalidierung anhand der Scher- und Zugversuche	43
3.4.1	Vergleich der Scherzahl-Spannungskurven für Scherversuche anderer Orientierungen	43
3.4.2	Vergleich der Spannungs-Dehnungskurven der Zugversuche	44
3.4.3	Vergleich der R-Werte	45
4	Experimentelle und numerische Analyse des Doppelindenterversuchs	49
4.1	Vorbetrachtungen zum Doppelindenterversuch	49
4.2	Experimentelle Untersuchungen	50
4.2.1	Versuchsaufbau und -durchführung	50
4.2.2	Darstellung und Diskussion der Ergebnisse	52
4.3	Berechnungsmodell des Doppelindenterversuchs	54
4.4	Vergleich von Experiment und Simulation	55
4.4.1	Kraft-Verschiebungskurve	55
4.4.2	Oberflächenverschiebungen	56
4.4.3	Untersuchung des Einflusses einer Exzentrizität der Indenter	57
4.5	Anpassung der Verfestigungsparameter anhand der Kraft-Verschiebungskurve	59
4.6	Abschließende Diskussion	60
5	Analyse des Materialmodells anhand von Eindringversuchen im Mikrometerbereich	63
5.1	Einleitende Diskussion	63
5.2	Experimentelle Untersuchungen	66

5.2.1	Beschreibung der Eindringversuche	66
5.2.2	Messung der Gitterrotationen	67
5.2.3	Auswertung der Gitterrotationen	68
5.3	Berechnungsmodell des Eindringversuchs	72
5.3.1	Modellierung der Probe	72
5.3.2	Modellierung des Eindringkörpers	73
5.3.3	Kontaktmodellierung	73
5.4	Validierung des makroskopisch identifizierten Materialmodells	74
5.4.1	Vergleich der Kraft-Verschiebungskurven	74
5.4.2	Vergleich der Rotationen	76
5.5	Untersuchung der Abhängigkeit der Berechnungsergebnisse von verschiedenen Modelleigenschaften	80
5.5.1	Studie zur Netzabhängigkeit der Berechnungsergebnisse	80
5.5.2	Einfluss der Randbedingungen	82
5.5.3	Variation des Reibungskoeffizienten	83
5.5.4	Berücksichtigung der Nachgiebigkeit des Eindringkörpers	84
5.6	Sensitivität der Rotationen gegenüber verschiedenen Materialparametern	86
5.6.1	Variation der Gleitebenen	86
5.6.2	Berücksichtigung von Selbst- und Fremdverfestigung	88
5.6.3	Variation der Referenzscherrate	89
6	Zusammenfassung	91
	Anhang	93
A	Jacobi-Matrix des Newton-Raphson-Verfahrens	93
B	Algorithmisch konsistente Tangente	94
C	Überprüfung des RVE-Modells	94
	Literatur	97

Kapitel 1

Einleitung

Zur Lösung von Problemen der finiten Plastizität werden kristallplastische Materialmodelle bereits seit Jahrzehnten erfolgreich angewendet. Sie werden genutzt, um die maßgeblichen Mechanismen, die bei der plastischen Verformung von polykristallinen Materialien auftreten, zu identifizieren und nachzubilden (Habraken, 2004). Die dabei gewonnenen Erkenntnisse dienen unter anderem zur Verbesserung von makroskopischen Materialmodellen, welche dann beispielsweise die Berücksichtigung von Effekten der Texturentwicklung ermöglichen (Tsotsova und Böhlke, 2009; Miehe et al., 2010). In Gottstein (2003) wird der Frage nachgegangen, wie realistisch der Einsatz von Mikro-Makro-Modellen in virtuellen Versuchslaboren ist. Solche Untersuchungen verfolgen das Ziel, den Aufwand und die Kosten von realen Experimenten zu verringern (Kraska et al., 2009; Butz et al., 2010). Als notwendig erweist sich der Einsatz von kristallplastischen Materialmodellen auch für die Simulation von Bauteilen, deren Abmessungen der Größenordnung ihrer relevanten Mikrostruktur (z. B. Korngröße) entsprechen. Weiterhin sind über rein wissenschaftliche Aspekte hinausgehend Bestrebungen erkennbar, die Kristallplastizität direkt für industrielle Anwendungen nutzbar zu machen (Schulze et al., 2009). Für all diese Anwendungsmöglichkeiten wird allerdings vorausgesetzt, dass die verwendeten kristallplastischen Modelle in der Lage sind, das Materialverhalten hinreichend genau nachzubilden. Zur Erfüllung dieser Anforderung ist eine verlässliche Identifikation und Validierung dieser Modelle zwingend erforderlich.

Üblicherweise erfolgt die Identifikation und Validierung von kristallplastischen Modellen anhand von homogenen Versuchen, die mit polykristallinen Proben durchgeführt werden. Mit wachsender Komplexität der Modelle und der damit verbundenen gesteigerten Anzahl an Materialparametern, erweist sich diese Vorgehensweise jedoch als unzureichend. Viele dieser Parameter sind keiner direkten Messung zugänglich und der Informationsgehalt in den experimentellen Daten ist zu gering für eine inverse Identifikation aller Materialparameter. Weiterhin besteht das Problem, dass die plastischen Deformationen bei homogenen Versuchen weitaus geringer sind, als diejenigen, die bei verschiedenen Anwendungen, wie z. B. Umformprozessen, erreicht werden (Belytschko und Mish, 2001). Somit besteht die größte Herausforderung bei der Entwicklung von Mikro-Makro-Modellen in der Identifikation und Validierung dieser Modelle (Cailletaud et al., 2003).

Eine mögliche Lösung bietet hier der Einsatz inhomogener Versuche. Die Höhe der dabei

erreichten plastischen Deformationen ist vergleichbar mit jener, die auch bei Umformprozessen zu beobachten ist. Neben der klassischen Kraft-Verschiebungskurve besteht zudem die Möglichkeit, Deformationsfelder zu messen, die zusätzliche Informationen über das Materialverhalten beinhalten und die Identifikation einer größeren Anzahl von Materialparametern erlauben. Es existieren vielfältige Vorschläge zur Durchführung solcher Versuche (Kreißig, 1998; Meuwissen et al., 1998; Khalfallah et al., 2002; Kajberg und Lindkvist, 2004; Cooreman et al., 2008), welche jedoch hauptsächlich zur Anpassung phänomenologischer Materialmodelle genutzt werden. Dabei ist der Eindringversuch einer der am häufigsten für die inverse Identifikation eingesetzten inhomogenen Versuche (Huber und Tyulyukovskiy, 2004; Lindner und Kreißig, 2004; Bocciarelli et al., 2005).

Ziel dieser Arbeit ist es, die Möglichkeiten der Identifikation und Validierung eines kristallplastischen Materialmodells anhand von makroskopischen und mikroskopischen Eindringversuchen zu ermitteln. Alle Experimente werden an gewalzten Blechen des unlegierten Tiefziehstahls DC04 durchgeführt. Da die geringe Blechdicke die Anwendung des klassischen Eindringversuchs auf der Makroebene verbietet, wird stattdessen ein Doppelindenterversuch durchgeführt. Hierbei ist die Blechprobe zwischen zwei sich gegenüberliegenden koaxialen Eindringkörpern positioniert und wird senkrecht zur Blechebene indentiert. Zusätzlich zu der während des Versuchs aufgenommenen Kraft-Verschiebungskurve werden nach dem Versuch die Oberflächenverschiebungen senkrecht zur Blechebene gemessen.

Besondere Aufmerksamkeit wird in dieser Arbeit den Eindringversuchen auf der Mikroebene gewidmet. Diese Versuche werden auf einzelne Körner des Stahlblechs angewendet und erlauben somit die Untersuchung des einkristallinen Materialverhaltens im Polykristall. Dies bietet gerade im Fall von kubisch-raumzentrierten Materialien interessante Vergleichsmöglichkeiten, da hier die Anwendung der Kristallplastizität mit größeren Unsicherheiten verbunden ist, als es z. B. bei kubisch-flächenzentrierten Materialien der Fall ist. Auch bei den mikroskopischen Eindringversuchen wird neben der Kraft-Verschiebungskurve ein zusätzliches Deformationsfeld gemessen. Dabei handelt es sich um das Feld der Gitterrotationen unterhalb des Eindrucks, welches sich in Folge der plastischen Deformation einstellt. Zur Messung dieser Daten wird die Röntgenstrahlmikroskopie eingesetzt (Yang et al., 2004b), die im Vergleich zu anderen Methoden (Zaafarani et al., 2006, 2008) präzisere Ergebnisse liefert.

Parallel zu den Experimenten wird jeder Eindringversuch mittels dreidimensionaler Finite-Elemente-Simulationen nachgebildet. Zur Beschreibung des mikroskopischen Materialverhaltens wird ein elastisch-viskoplastisches Standardmodell verwendet. Die im Vorfeld der Simulationen notwendige Anpassung des Materialmodells an das Verfestigungsverhalten des DC04-Stahls erfolgt anhand von Scherzahl-Spannungskurven, die bei Scherversuchen gemessen werden. Zur anschließenden Überprüfung dienen Spannungs-Dehnungskurven und R-Werte, die in Zugversuchen bestimmt werden. Der dabei notwendige Übergang von der Mikro- zur Makroebene wird mit dem Taylor-Modell und der Technik des Repräsentativen Volumenelements realisiert.

Kapitel 2

Beschreibung und Modellierung des mechanischen Materialverhaltens

2.1 Notation der Tensorrechnung

Für die kontinuumsmechanische Beschreibung des Materialmodells wird eine symbolische Tensorschreibweise verwendet, wie sie unter anderem von Bertram (2008) eingeführt wird. Alle tensoriellen bzw. vektoriellen Größen sind auf kartesische Basen \mathbf{e}_i bezogen. Für skalare Größen werden einfache und für Vektoren $\mathbf{v} = v_i \mathbf{e}_i$ fettgedruckte Kleinbuchstaben verwendet. Tensoren 2ter Stufe $\mathbf{A} = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ werden durch fettgedruckte Großbuchstaben und Tensoren 4ter Stufe $\mathbb{K} = K_{ijkl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l$ mit doppelt gestrichenen Großbuchstaben dargestellt. Bei eindimensionalen Zahlentupeln und Matrizen werden die gleichen Symbole wie für Vektoren bzw. Tensoren zweiter Stufe verwendet. Um welche Größen es sich jeweils handelt, wird eindeutig in den dazugehörigen Textstellen geklärt. Das Skalarprodukt $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij}$ wird durch einen Punkt gekennzeichnet. Wird kein Berechnungssymbol zwischen den Größen verwendet, so handelt es sich um eine einfache Überschiebung wie z. B. bei $\mathbf{AB} = A_{ik} B_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_l$ oder $\mathbf{Av} = A_{ij} v_j \mathbf{e}_i$. Die doppelte Überschiebung zwischen einem Tensor vierter und einem Tensor zweiter Stufe $\mathbb{K}[\mathbf{A}] = K_{ijkl} \mathbf{A}_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ wird mit einer eckigen Klammer symbolisiert. Das Rayleigh-Produkt $\mathbf{A} \star \mathbb{K} = K_{ijkl} (A_{io} \mathbf{e}_o) \otimes (A_{jp} \mathbf{e}_p) \otimes (A_{kr} \mathbf{e}_r) \otimes (A_{ls} \mathbf{e}_s)$ wird mit einem Stern gekennzeichnet.

2.2 Kinematik

In der Festkörpermechanik hat sich zur Beschreibung finiter Deformationen ein weitgehend einheitlicher kinematischer Ansatz durchgesetzt. Die aus diesem Ansatz resultierenden kinematischen Größen werden daher als bekannt vorausgesetzt. Hier erfolgt nur eine kurze Einführung der in dieser Arbeit am häufigsten verwendeten Deformationsmaße. Für detailliertere Ausarbeitungen und weiterführende Literatur wird auf die entsprechenden Kapitel in Bertram (2008) und Holzapfel (2000) verwiesen.

Man betrachtet die zeitabhängige Bewegung eines materiellen Körpers im Euklidischen

Punktraum und bezeichnet die Positionen die dieser Körper zu verschiedenen Zeiten einnimmt als Platzierungen. Zur Einführung von Deformationsmaßen werden üblicherweise eine feste Bezugsplatzierung und eine zeitlich abhängige Momentanplatzierung eingeführt. Die Abbildung eines Linienelements $d\mathbf{x}_0$ aus der Bezugsplatzierung in die Momentanplatzierung

$$d\mathbf{x} := \mathbf{F}d\mathbf{x}_0 \quad (2.1)$$

wird durch den Deformationsgradienten \mathbf{F} beschrieben. Ausgehend von dieser Definition lassen sich weitere Deformationsmaße wie z. B. der rechte Cauchy-Green Deformationstensor $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T\mathbf{F}$ beschreiben. Die zeitliche Änderung des räumlichen Linienelements

$$d\mathbf{x}' = (\mathbf{F}d\mathbf{x}_0)' = \dot{\mathbf{F}}d\mathbf{x}_0 = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}d\mathbf{x} = \mathbf{L}d\mathbf{x} \quad (2.2)$$

wird durch den Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L} beschrieben.

2.3 Elastisches Verhalten von Kristallen mit kubischer Symmetrie

2.3.1 Elastisches Gesetz

Bei der Verformung von Metallen werden nur geringe elastische Deformationen erreicht bevor das Material beginnt, sich plastisch zu deformieren. Aus diesem Grund ist es ausreichend, das elastische Verhalten von Metallen durch ein linear-elastisches Gesetz zu beschreiben. Das hier gewählte St. Venant-Kirchhoff Gesetz

$$\mathbf{T}^{2PK} = k(\mathbf{C}) = \mathbb{K}[\frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I})] \quad (2.3)$$

ist auf eine spannungsfreie Bezugsplatzierung bezogen. Durch die Steifigkeitstetrade \mathbb{K} werden die Dehnungen auf den 2. Piola-Kirchhoff Spannungstensor \mathbf{T}^{2PK} abgebildet. Da es sich bei diesem Gesetz um eine reduzierte Form handelt, werden das Prinzip der materiellen Objektivität (PMO) und das Prinzip der Invarianz gegen überlagerte Starrkörperbewegungen (PISM) erfüllt (Bertram, 2008, S. 176). Da die Steifigkeitstetrade zwei symmetrische Tensoren miteinander verknüpft, kann die rechte Subsymmetrie, d. h. $K_{ijkl} = K_{ijlk}$, vorausgesetzt werden. Weiterhin wird vorausgesetzt, dass die im Material geleistete Spannungsarbeit lastpfadunabhängig ist. Dies bedeutet für die Steifigkeitstetrade, dass sie auch eine Hauptsymmetrie $K_{ijkl} = K_{klij}$ und als Folge dessen auch die linke Subsymmetrie $K_{ijkl} = K_{jikl}$ besitzen muss. Nach Ausnutzung der genannten Symmetrien reduziert sich die Anzahl der unabhängigen Größen der Tetrade von 81 auf 21. Eine weitere Reduktion auf nur noch 3 unabhängige elastische Konstanten (K_{1111} , K_{1122} , K_{1212}) wird durch die Ausnutzung der kubischen Kristallsymmetrie erreicht (Hosford, 1993).

Aus Gründen einer übersichtlicheren Darstellung und der besseren Implementierbarkeit in Berechnungsprogramme, ist es üblich, symmetrische Tensoren zweiter Stufe als sechsdimensionale Vektoren und die Tetraden als sechsdimensionale Tensoren zweiter Stufe zu

behandeln. Somit erhält man für den 2. Piola-Kirchhoff Spannungstensor die Darstellung $\mathbf{T}^{2PK} = T_{ij}^{2PK} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j = T_{\alpha}^{2PK} \mathbf{e}_{V\alpha}$ mit dem Komponentenvektor

$$T_{\alpha}^{2PK} = [T_{11}^{2PK}, T_{22}^{2PK}, T_{33}^{2PK}, \sqrt{2}T_{12}^{2PK}, \sqrt{2}T_{13}^{2PK}, \sqrt{2}T_{23}^{2PK}] \quad .$$

Entsprechend ergibt sich dann für die Darstellung der Steifigkeitstetrade als Tensor 2. Stufe $\mathbb{K} = K_{ijkl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l = K_{\alpha\beta} \mathbf{e}_{V\alpha} \otimes \mathbf{e}_{V\beta}$ mit der Komponentenmatrix

$$K_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} K_{1111} & K_{1122} & K_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ K_{1122} & K_{1111} & K_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ K_{1122} & K_{1122} & K_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2K_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2K_{1212} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2K_{1212} \end{bmatrix}$$

Die dafür eingeführte Basis wird als Voigt-Basis bezeichnet (Bertram, 2008, S.42)

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{V1} &= \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 & ; & \quad \mathbf{e}_{V4} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1) \\ \mathbf{e}_{V2} &= \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 & ; & \quad \mathbf{e}_{V5} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1) \\ \mathbf{e}_{V3} &= \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 & ; & \quad \mathbf{e}_{V6} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2) \end{aligned} \quad (2.4)$$

und die darin vorkommenden Faktoren von $(\sqrt{2})^{-1}$ resultieren aus einer Normierung.

2.3.2 Isomorphie der elastischen Gesetze

Der Einfluss von plastischer Deformation auf das elastische Verhalten eines Materials wird in Bertram (2008) als eine kontinuierliche Änderung des elastischen Gesetzes interpretiert. Daraus resultiert die Schlussfolgerung, dass für jeden elastischen Bereich p ein separates elastisches Gesetz

$$k_p(\mathbf{C}) = \mathbb{K}_p[\frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{C}_p)] \quad (2.5)$$

existiert, welches bezüglich einer spannungsfreien Konfiguration \mathbf{C}_p aufgestellt werden kann. Es wird angenommen, dass diese elastischen Gesetze zueinander *isomorph* sind und es somit möglich ist, sie durch eine materielle Transformation ineinander zu überführen. Auf Grundlage dieser Annahme wird ein konstantes elastisches Referenzgesetz $\tilde{k}(\mathbf{C})$ eingeführt, woraus sich über die Beziehung

$$\mathbf{T}^{2PK} = k_p(\mathbf{C}) = \mathbf{P} \tilde{k}(\mathbf{P}^T \mathbf{C} \mathbf{P}) \mathbf{P}^T = \mathbf{P} \tilde{\mathbb{K}}[\frac{1}{2}(\mathbf{P}^T \mathbf{C} \mathbf{P} - \mathbf{P}^T \mathbf{C}_p \mathbf{P})] \mathbf{P}^T \quad (2.6)$$

alle anderen elastischen Gesetze $k_p(\mathbf{C})$ berechnen lassen (Bertram, 2008, S.261). Der Tensor \mathbf{P} wird als plastische Transformation bezeichnet und hat die Eigenschaft $\det(\mathbf{P}) = 1$. Durch die Festlegung einer geeigneten Bezugsplatzierung ist es immer möglich

$$\mathbf{P}^T \mathbf{C}_p \mathbf{P} = \mathbf{I} \quad (2.7)$$

zu setzen. Diese Platzierung wird im Weiteren als *ungestörte Bezugsplatzierung* bezeichnet. Bezüglich dieser ungestörten Bezugsplatzierung ergeben sich der 2. Piola-Kirchhoff Spannungstensor und der rechte Cauchy-Green Tensor zu

$$\tilde{\mathbf{T}}^{2PK} = \det(\mathbf{P})\mathbf{P}^{-1}\mathbf{T}^{2PK}\mathbf{P}^{-T} \quad \text{bzw.} \quad \tilde{\mathbf{C}} = \mathbf{P}^T\mathbf{C}\mathbf{P} \quad . \quad (2.8)$$

Dabei symbolisiert das \sim -Zeichen den Bezug der jeweiligen Größe auf die ungestörte Bezugsplatzierung. Durch Einsetzen der beiden Gleichungen 2.8a und 2.8b in Gleichung 2.6 erhält man das elastische Referenzgesetz

$$\tilde{\mathbf{T}}^{2PK} = \tilde{\mathbb{K}}_{\left[\frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{C}} - \mathbf{I})\right]} \quad (2.9)$$

bezogen auf die ungestörte Bezugsplatzierung. Die Transformation der Steifigkeitstetrade von der ungestörten in eine beliebige Bezugsplatzierung oder die Momentanplatzierung wird mit Hilfe der Beziehung

$$\mathbb{K} = \mathbf{P} \star \tilde{\mathbb{K}} = \tilde{K}_{ijkl}(\mathbf{P}\tilde{\mathbf{e}}_i) \otimes (\mathbf{P}\tilde{\mathbf{e}}_j) \otimes (\mathbf{P}\tilde{\mathbf{e}}_k) \otimes (\mathbf{P}\tilde{\mathbf{e}}_l) \quad (2.10)$$

bzw.

$$\mathbb{K}_E = (\mathbf{F}\mathbf{P}) \star \tilde{\mathbb{K}} = \tilde{K}_{ijkl}(\mathbf{F}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{e}}_i) \otimes (\mathbf{F}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{e}}_j) \otimes (\mathbf{F}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{e}}_k) \otimes (\mathbf{F}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{e}}_l) \quad (2.11)$$

durchgeführt.

2.4 Plastische Verformung kubisch raumzentrierter Kristalle

2.4.1 Beschreibung der Gleitmechanismen

Die Bewegung von Versetzungen bildet den grundlegenden Mechanismus für die Gleitung in kristallinen Materialien. Auf welche Art und Weise diese Bewegung erfolgt, hängt wiederum von der im Material vorherrschenden Gitterstruktur ab. Da das in dieser Arbeit untersuchte Material eine kubisch-raumzentrierte (krz) Gitterstruktur aufweist, werden im Folgenden die für krz-Gitter grundlegenden Gleitmechanismen und die dabei zu berücksichtigenden Besonderheiten beschrieben.

Die Abhängigkeit der Versetzungsbewegung von der Gitterstruktur kann sehr gut anhand des Peierls-Modells (Abbildung 2.1) verdeutlicht werden. Dieses Modell basiert auf der Annahme, dass eine Versetzung, die sich auf einer Gleitebene bewegt, ein gitterperiodisches Potenzial überwinden muss. Die für die Überwindung der Potenzialberge notwendige Schubspannung wird als Peierls-Spannung τ_P bezeichnet und ist näherungsweise über die Beziehung

$$\tau_P = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi}{(1-\nu)} \frac{d}{b}\right) \quad (2.12)$$

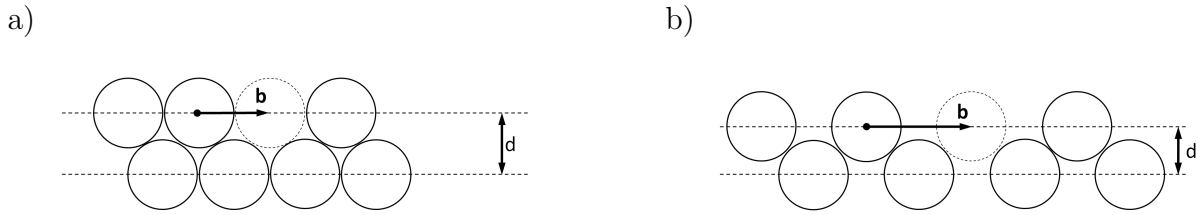


Abbildung 2.1: a) Gleitebene und -richtung dichtester Packung, b) Gleitebene und -richtung die keine maximale Packungsdichte aufweisen

berechenbar (Gottstein, 2001). Darin sind G der Schubmodul, ν die Querkontraktionszahl, b der Betrag des Burgers-Vektor und d der Gleitebenenabstand, welcher sich mit Hilfe der Gitterkonstante a und den Miller-Indizes $\{hkl\}$ der Gleitebene über die Gleichung

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (2.13)$$

berechnen lässt. Aus Gleichung 2.12 geht hervor, dass sich für Gleitrichtungen mit einem möglichst kurzen Burgers-Vektor und Gleitebenen mit einem möglichst großen Gleitebenenabstand, geringe Peierls-Spannungen ergeben. Einen minimalen Wert nimmt die Peierls-Spannung für Gleitrichtungen und Gleitebenen an, die eine maximale Packungsdichte aufweisen (Abbildung 2.1). In Kristallen mit kubisch flächenzentrierter Gitterstruktur besitzen die $\langle 110 \rangle$ -Richtungen und die $\{111\}$ -Ebenen eine maximale Packungsdichte und bilden dadurch die primären Gleitsysteme. Bei krz-Gittern hingegen existiert zwar mit der $\langle 111 \rangle$ -Richtung eine Gleitrichtung maximaler Packungsdichte, für die dazugehörigen Gleitebenen trifft dies jedoch nicht zu. Die drei Gleitebenen mit den höchsten Packungsdichten sind die $\{110\}$ -, $\{112\}$ - und $\{123\}$ -Ebenen. Die sich für diese drei Typen von Gleitsystemen ergebenden Peierls-Spannungen liegen allerdings weit über den bei krz-Gittern experimentell bestimmten kritischen Schubspannungen. Der Grund dafür wird in der thermischen Aktivierung der Gitteratome gesehen, wodurch die Versetzungsbewegung erleichtert und somit auch die kritische Schubspannung reduziert wird (Gottstein, 2001). Mit dieser Deutung lässt sich auch die starke Temperaturabhängigkeit der kritischen Schubspannung bei Kristallen mit krz-Gitterstruktur erklären.

Falls Versetzungen nicht durch Korngrenzen oder freie Oberflächen unterbrochen werden, bilden sie geschlossene Ringe die sich aus Stufen- und Schraubenanteilen zusammensetzen (Abbildungen 2.2 und 2.3). Charakteristisch für krz-Metalle ist, dass in einem Temperaturbereich bis ca. $\frac{1}{5}$ der Schmelztemperatur (für Eisen ca. $90^\circ C$), die Mobilität von Stufenversetzungen weitaus größer ist als die der Schraubenversetzungen (Seeger, 2001). Dies führt dazu, dass sich schon vor dem Erreichen der makroskopischen Fließgrenze Stufenversetzungen in Bewegung setzen und damit die unbeweglichen Schraubenversetzungen in die Länge ziehen (Abbildung 2.3). Hierbei kommt es zu einer allmählichen Auslöschung der Stufenversetzungen, so dass bei Erreichen der makroskopischen Fließgrenze die plastische Deformation zum überwiegenden Teil durch die verbleibenden Schraubenversetzungen getragen wird. Während die Bewegungsrichtung einer Stufenversetzung parallel zum Burgers-Vektor verläuft, bewegt sich die Schraubenversetzung in eine Richtung senkrecht zum Burgers-Vektor und zur Gleit-

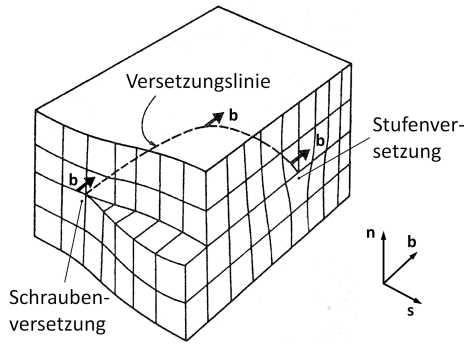


Abbildung 2.2: Segment eines Versetzungs-rings mit Burgers-Vektor \mathbf{b} , Gleitebenen-normale \mathbf{n} und Bewegungsrichtung der Schraubenversetzung \mathbf{s} (Gottstein, 2001)

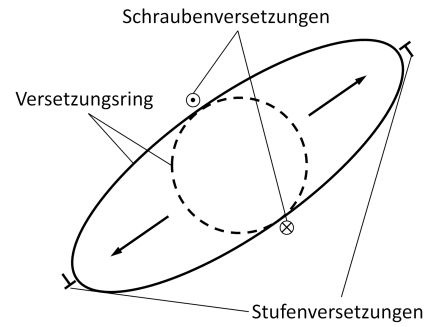


Abbildung 2.3: Für krz-Gitter typische Aufweitung des Versetzungsringes im Mikrodehnungsbereich bis zu Temperaturen von $1/5$ der Schmelztemperatur

tebenennormale. In Abbildung 2.2 ist diese Bewegungsrichtung der Schraubenversetzung mit \mathbf{s} gekennzeichnet. Allerdings wird sich die Versetzung nicht auf ihrer gesamten Länge in eine neue Position bewegen. Vielmehr führt die Schraubenversetzung thermisch aktivierte Schwingungen aus, wodurch sie sich auf einem Teilstück in ein benachbartes Potentialtal bewegt und ein Kinkpaar gebildet wird (Abbildung 2.4). Durch eine Schubspannung, die in Richtung des Burgers-Vektor wirkt, wird dieses Kinkpaar solange auseinandergetrieben, bis sich die Versetzung vollständig in dem benachbarten Potentialtal befindet (Hollang, 1996). Diese thermisch und mechanisch aktivierte Bewegung setzt sich in elementaren Schritten auf wechselnden Gleitebenen fort, wobei diese Ebenen immer kristallographische Ebenen mit niedriger Indizierung sind (Hollang, 1996). Allerdings können sich durch die Kombination dieser elementaren Gleitschritte im Mittel auch Gleitebenen ergeben, die eine höhere Indizierung aufweisen. So haben Sesták und Seeger (1978) gezeigt, dass durch solch eine

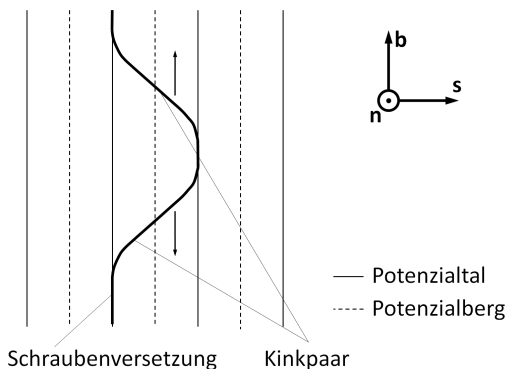


Abbildung 2.4: Thermisch und mechanisch aktivierte Bewegung einer Schraubenversetzung (Hollang, 1996)

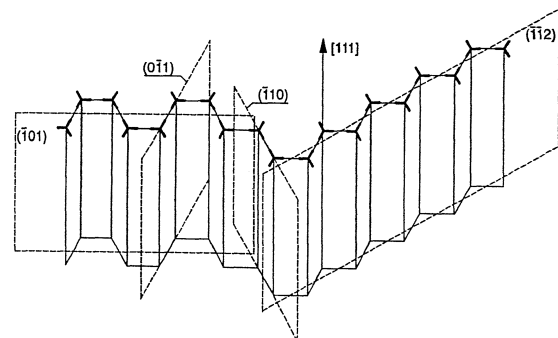


Abbildung 2.5: Mikroskopische Gleitung auf $\{110\}$ -Ebenen (Sesták und Seeger, 1978)

elementare Wechselgleitung auf den $\{110\}$ -Ebenen, auch eine makroskopische Gleitebene vom Typ $\{112\}$ resultieren kann (Abbildung 2.5). Neuere Analysen experimenteller Untersuchungen an Eisen-Einkristallen (Seeger, 2004) geben Hinweise darauf, dass die elementaren Gleitschritte nicht nur auf Gleitebenen vom Typ $\{110\}$ beschränkt sind. So zeigt sich, dass bei Temperaturen über $100^\circ K$ die elementaren Gleitschritte hauptsächlich auf Ebenen vom Typ $\{112\}$ erfolgen.

Das hier beschriebene Gleiten von Schraubenversetzungen auf wechselnden Gleitebenen ist auch die Ursache für das bei krz-Kristallen typisch wellenförmige Erscheinungsbild der Gleitlinien (Abbildungen 2.6). In Abbildung 2.7 wird noch einmal verdeutlicht wie ein Einkristall

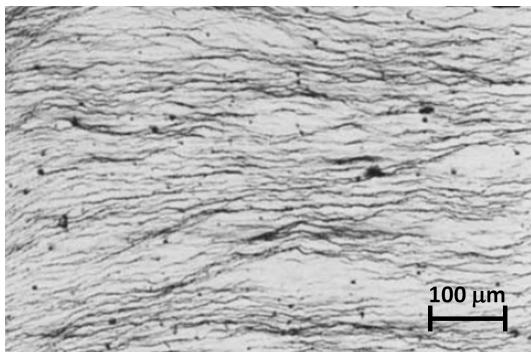


Abbildung 2.6: Lichtmikroskopische Aufnahme wellenförmiger Gleitlinien auf einem Eisen-Einkristall (Keh, 1965)

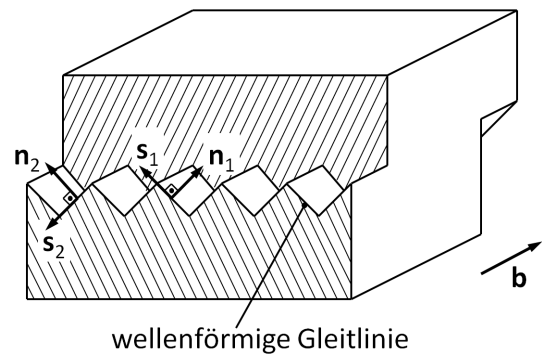


Abbildung 2.7: Scherung eines Kristalls nach dem Durchgang einer Schraubenversetzung auf wechselnden Gleitebenen

abschert, der von einer Schraubenversetzung auf wechselnden Gleitebenen durchlaufen wird. Trotz der Kenntnis darüber, dass die elementaren Gleitschritte in den Ebenen vom Typ $\{110\}$ bzw. $\{112\}$ erfolgen, kann nicht vorhergesagt werden, welche Gleitebenen sich im Mittel daraus ergeben. Dadurch besteht auch weiterhin die Notwendigkeit, die Gleitebenen anhand von experimentellen Ergebnissen zu bestimmen. Seit der Pionierarbeit von Taylor und Elam (1926) sind auf diesem Gebiet viele unterschiedliche Ergebnisse erzielt worden, die zum Teil zu widersprüchlichen Interpretationen geführt haben. Zu den häufigsten Beobachtungen zählen dabei die Gleitebenen vom Typ $\{110\}$ -, $\{112\}$ - und $\{123\}$ bzw. auch Kombinationen dieser Gleitebenen (Hull und Bacon, 2007). In einigen Experimenten ist auch beobachtet worden, dass die Gleitebenen mit denjenigen zusammenfallen, für die die Schmid-Spannung maximal ist (*pencil glide*) (Havner, 1992). In der Regel haben diese Ebenen keinen kristallographischen Charakter.

Eine Vielzahl der eben genannten Ergebnisse werden von Seeger und Wasserbäch (2002) zusammengetragen und verglichen. Dadurch ist es ihnen möglich, einige Tendenzen herauszuarbeiten die im Folgenden kurz genannt werden. Ganz allgemein lässt sich sagen, dass die Aktivierung bestimmter Gleitebenen immer stark vom Legierungsgrad des Materials und der Temperatur abhängen. Im Bereich tiefer Temperaturen werden vor allem die Gleitebenen vom Typ $\{110\}$ beobachtet. Bei Versuchen an hochreinen Materialien, sind die Gleitebenen

vom Typ $\{123\}$ nicht mehr existent. Ein Gleiten auf nicht-kristallographischen Ebenen wird als unwahrscheinlich angesehen, da es im Konflikt zu vielen experimentellen Beobachtungen und der Versetzungstheorie steht.

2.4.2 Nicht-Schmid-Effekte

In der Literatur werden unter dem Begriff der Nicht-Schmid-Effekte drei Phänomene zusammengefasst, die bei Materialien mit einer krz-Gitterstruktur zu beobachten sind. Im Folgenden sind diese Phänomene aufgelistet:

1. In Gleitsystemen vom Typ $\langle 111 \rangle \{112\}$ ist die kritische Schubspannung davon abhängig, ob das Gleitsystem in positive oder negative Richtung geschert wird (*twin-antitwin asymmetry*).
2. Neben der Schmid-Spannung haben auch alle anderen Spannungskomponenten einen Einfluss auf das Gleitverhalten des Materials.
3. Es werden Gleitsysteme aktiviert, für deren Gleitebenen die Schmid-Spannung wesentlich geringer ist als für andere Ebenen, die nicht aktiviert werden (*anomales Gleiten*).

Der erste Effekt lässt sich auf die Asymmetrie der krz-Gitterstruktur in den $\{112\}$ -Ebenen bezüglich einer positiven und negativen $\langle 111 \rangle$ -Gleitrichtung zurückführen. Experimentelle Untersuchungen zeigen, dass die kritische Schubspannung für eine Gleitung in Zwillingsrichtung geringer ist als für eine Gleitung in entgegengesetzter Richtung. Diese Beobachtungen werden auch von atomistischen Simulationen gestützt, die deutlich eine solche Asymmetrie vorhersagen (Duesbery und Vitek, 1997). Es ist jedoch zu beachten, dass die atomistischen Simulationen oftmals bei einer Temperatur von $0^\circ K$ durchgeführt werden. Vergleicht man experimentelle Daten (Spitzig und Keh, 1970; Christian, 1983; Hollang et al., 1997) die bei verschiedenen Temperaturen ermittelt wurden, so erkennt man, dass sich die kritischen Schubspannungen bei Temperaturen oberhalb von $200^\circ K$ nur noch sehr gering voneinander unterscheiden. Die Berücksichtigung einer solchen richtungsabhängigen Schubspannung lässt sich relativ einfach in kristallplastische Modelle integrieren. Vorschläge dazu existieren z. B. von Van Houtte (1978), Lee et al. (1999) und Yalcinkaya et al. (2008). In Van Houtte (1978) wird der Einfluss einer richtungsabhängigen, kritischen Schubspannung auf die Texturentwicklung eines Polykristalls untersucht. Dabei zeigt sich, dass die Texturentwicklung deutlich vom Verhältnis der kritischen Schubspannungen in Zwillingsrichtung und in die dazu entgegengesetzte Richtung abhängt. Eine verbesserte Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen konnte jedoch nicht erreicht werden.

Der zweite Effekt bezieht sich hauptsächlich auf versetzungstheoretische Überlegungen und atomistische Simulationen. Diese geben Hinweise darauf, dass neben der Schmid-Spannung auch andere Spannungskomponenten, sowohl Schubspannungen als auch Normalspannungen, das Gleitverhalten beeinflussen (Sesták und Seeger, 1978; Gröger und Vitek, 2005). Nach Asaro (1983) begünstigen z. B. die Nicht-Schmid-Schubspannungen die Quergleitung der Schraubenversetzungen auf andere Gleitebenen, was wiederum einen Einfluss auf die

Ausbildung der bereits besprochenen wellenförmigen Gleitlinien hat. Ein Ansatz der den Einfluss aller Spannungskomponenten auf das Gleitverhalten in einem kristallplastischen Modell berücksichtigt, wird unter anderen von Dao und Asaro (1993) vorgeschlagen. Allerdings bleibt bei diesem Modell das Gleiten auf wechselnden Gleitebenen unbeachtet. Somit bietet es nur bedingt Vorteile gegenüber klassischen Modellen.

Der dritte Effekt bezieht sich auf Beobachtungen, bei denen die Gleitung auf kristallographischen Ebenen erfolgt, für welche die Schmid-Spannung nicht am größten ist. In neueren Arbeiten wird dies auf Schneidprozesse von Schraubenversetzungen zurückgeführt (Seeger und Wasserbäch, 2002). Dieser als anomales Gleiten bezeichnete Effekt wird allerdings ausschließlich an hochreinen Einkristallen beobachtet und hat somit für die meisten technologisch relevanten Materialien keine Bedeutung.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der erste und dritte Nicht-Schmid-Effekt für die in dieser Arbeit untersuchten Probleme vernachlässigt werden können, da das untersuchte Material eine Reihe von Fremdatomen enthält und alle Untersuchungen bei Raumtemperatur stattfinden. Die Berücksichtigung des zweiten Effekts hingegen, könnte sich mit Hinblick auf die mikroskopischen Untersuchungen als sinnvoll erweisen. Allerdings existiert bisher kein kristallplastisches Modell, welches diesen Effekt hinreichend genau modelliert.

2.4.3 Modellierung des kristallographischen Gleitens

Wie bereits erwähnt, werden alle in dieser Arbeit berücksichtigten Experimente bei Raumtemperatur durchgeführt. Aus diesem Grund wird die thermische Aktivierung der Versetzungsbewegung als konstant angenommen und bei der Modellierung vernachlässigt. Somit ist es ausreichend, ausschließlich die mechanische Aktivierung der Gleitsysteme zu modellieren. Die maßgebliche Größe zur Aktivierung des jeweiligen Gleitsystems α , ist die resultierende Schmid-Spannung

$$\tau^\alpha = \mathbf{T}^C \cdot (\mathbf{d}^\alpha \otimes \mathbf{n}_\alpha) \quad . \quad (2.14)$$

In dieser Gleichung repräsentieren \mathbf{T}^C den Cauchy-Spannungstensor, \mathbf{d}^α die momentane Gleitrichtung und \mathbf{n}_α die momentane Gleitebenennormale. Für die numerische Umsetzung des Materialmodells ist es vorteilhaft, Gleichung 2.14 auf die ungestörte Bezugsplatzierung zu beziehen. Daraus ergibt sich

$$\tau^\alpha = \tilde{\mathbf{C}} \tilde{\mathbf{T}}^{2PK} \cdot (\tilde{\mathbf{d}}^\alpha \otimes \tilde{\mathbf{n}}_\alpha) \quad , \quad (2.15)$$

wie Bertram (2008) aufzeigt. Übersteigt die Schmid-Spannung in einem Gleitsystem die *kritische* Schmid-Spannung τ_k^α , wird dieses Gleitsystem aktiviert. Die daraus resultierenden Scherraten

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau^\alpha) \left(\frac{|\tau^\alpha|}{\tau_k^\alpha} \right)^{\frac{1}{m}} \quad (2.16)$$

werden mit Hilfe eines empirischen Ansatzes berechnet. Dieser Ansatz wird erstmals von Hutchinson (1976) zur Modellierung kristallographischen Gleitens verwendet und enthält

mit der Referenzscherrate $\dot{\gamma}_0$ und dem Dehnratensensitivitätsexponenten m zwei Materialparameter. Die Entwicklung der kritischen Schubspannung während der plastischen Deformation wird in den sich anschließenden Abschnitten behandelt. Aus zwei Gründen wird hier ein viskoser Ansatz zur Berechnung der Scherraten verwendet. Zum Einen kann dadurch das Taylor-Problem (Auswahl der aktiven Gleitsysteme) umgangen werden. Zum Anderen hat sich in Experimenten gezeigt, dass das reale Materialverhalten vielmehr einen viskoplastischen als einen ratenunabhängigen Charakter hat. Weitere solcher Ansätze, die zum Teil stärker physikalisch motiviert sind, werden u. a. in Asaro (1983) und Nemat-Nasser (2004) vorgestellt. Die Fließregel

$$\mathbf{P}^{-1} \dot{\mathbf{P}} = - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} (\tilde{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha}) \quad (2.17)$$

beschreibt die Entwicklung der plastischen Transformation und damit der plastischen Deformation. Dabei wird angenommen, dass sich die Verformungsrate des betrachteten Kristallits additiv aus den einzelnen Verformungsraten eines jeden Gleitsystems zusammensetzt (Bertam, 2008).

2.4.4 Beschreibung der Verfestigungsmechanismen

Die bei der plastischen Deformation von Metallen beobachtete Verfestigung kann hauptsächlich auf die Wechselwirkung von Versetzungen mit Störungen im Kristallgitter zurückgeführt werden. In erster Linie sind solche Störungen andere Versetzungen, aber auch Fremdatome oder Korngrenzen. Für Metalle mit einer kubischen Gitterstruktur hat sich eine Unterteilung des Verfestigungsprozesses in vier Bereiche (I-IV) etabliert (Kettunen und Kuokkala, 2003; Kocks und Mecking, 2003). Um diese Bereiche zu veranschaulichen wird oft eine Darstellung gewählt, in der man die Verfestigungsrate $\theta := \partial\tau_k/\partial\gamma$ über der kritischen Schubspannung τ_k aufträgt (Abbildung 2.8). Diese vier Bereiche bilden sich auf Grund verschiedener Mechanismen heraus, die gleichzeitig aktiv sein können und sich teilweise gegenseitig beeinflussen. Der erste Bereich ist nur in Einkristallen zu beobachten die so orientiert sind, dass nur ein Gleitsystem aktiv ist. In solch einer Konfiguration können die Versetzungen relativ lange Wege zurücklegen ohne dass es zu einer Wechselwirkung mit anderen Versetzungen kommt. Dadurch bleibt die Verfestigungsrate auf einem niedrigen Niveau. Bereich II ist hingegen durch eine massive Versetzungsproduktion gekennzeichnet. Da sich diese gegenseitig behindern, ist in diesem Bereich eine hohe Verfestigungsrate zu beobachten. Im Bereich III werden infolge des Spannungsanstiegs zwei weitere Mechanismen ausgelöst. Zum Einen sind die Versetzungen in der Lage, auf Quergleitebenen die sie blockierenden Hindernisse zu umgehen (Lücke und Mecking, 1973). Zum Anderen kommt es zu einer gegenseitigen Elimination von Versetzungen. Dieser als dynamische Erholung bezeichnete Mechanismus sorgt für ein Absinken der Verfestigungsrate bis auf ein sehr niedriges Niveau, welches ungefähr dem des ersten Bereiches entspricht. Dieser Punkt bildet den Übergang zu Bereich IV, der durch eine konstant niedrige Verfestigungsrate gekennzeichnet ist. Die dabei ablaufenden Mechanismen sind relativ schwierig zu identifizieren, da hier bereits Effekte wie Dehnungslokalisierung und Schädigung das Materialverhalten wesentlich beeinflussen. In Untersuchungen von Fang und

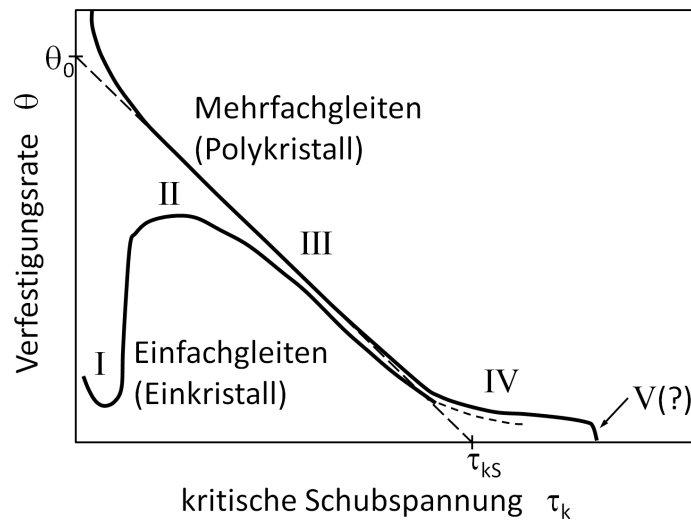


Abbildung 2.8: Bereiche der Verfestigung in Polykristallen und Einkristallen (Kocks und Mecking, 2003)

Dahl (1994) an Stählen mit krz-Gitterstruktur wird dieser Bereich durch die Erzeugung von Versetzungen innerhalb von Versetzungsstrukturen erklärt. In manchen Fällen wird noch ein fünfter Bereich eingeführt, der hier aber nicht weiter diskutiert werden soll. Für eine detaillierte Analyse der verschiedenen Verfestigungsbereiche und den sie konstituierenden Mechanismen wird auf die entsprechenden Ausarbeitungen in Kocks und Mecking (2003), Kettunen und Kuokkala (2003) und Gottstein (2001) verwiesen.

Es ist allerdings zu beachten, dass sich ein Großteil der soeben vorgestellten Erkenntnisse auf Experimente stützt, die an Materialien mit einer kfz-Gitterstruktur durchgeführt wurden. Für Materialien mit krz-Gitterstruktur gestaltet sich die systematische Untersuchung des Verfestigungsverhaltens wesentlich schwieriger. Während sich für kfz-Materialien das Verfestigungsverhalten über weite Temperaturbereiche qualitativ nicht ändert, wird bei krz-Materialien eine starke Temperaturabhängigkeit beobachtet. Im Allgemeinen ist aber davon auszugehen, dass bei mittleren bis hohen Temperaturen die Verfestigungsmechanismen in Materialien mit krz-Gitterstruktur ähnlich denjenigen mit kfz-Gitterstruktur sind (Mecking, 2001; Tang et al., 2001; Stainier et al., 2002; Kettunen und Kuokkala, 2003). Da zusätzlich noch eine starke Abhängigkeit vom Legierungsgrad existiert, ist es schwierig, quantitative Aussagen über bestimmte Temperaturbereiche zu erhalten. In Mecking (2001) wird experimentell gezeigt, dass für einen kohlenstoffarmen Stahl bis zu Temperaturen von $-25^\circ C$, ähnliche Verfestigungsmechanismen wie bei kfz-Kristallen zu beobachten sind.

Weiterhin sollte für Prozesse, bei denen es zu einem Lastpfadwechsel kommt, wie z. B. zyklische oder auch inhomogene Versuche, der anisotrope Charakter der Verfestigung berücksichtigt werden. Es sind eine Reihe von Mechanismen bekannt, die eine anisotrope Verfestigung hervorrufen. In dieser Arbeit wird allerdings nur die ungleiche Verfestigung von aktiven und inaktiven Gleitsystemen berücksichtigt. Dieser Mechanismus ist eine Folge der unterschiedlichen Wechselwirkung zwischen Versetzungen mit parallelen und nicht-parallelen Gleitebenen.

Da sich Versetzungen auf parallelen Gleitebenen untereinander weniger stark behindern als Versetzungen auf nicht-parallelen Ebenen, verfestigen die inaktiven Gleitsysteme stärker als die aktiven. Das Verhältnis von Fremd- und Selbstverfestigung beeinflusst maßgeblich den Wechsel von aktiven Gleitsystemen.

2.4.5 Modellierung der Verfestigung

Ausgangspunkt zur Modellierung der Verfestigung bildet ein Verfestigungsansatz nach Voce, welcher erstmals von Kocks (1976) mikromechanisch interpretiert wurde. Basierend auf der Annahme, dass die Verfestigung nur von einer mittleren Versetzungsdichte abhängt, wird bei diesem Ansatz die Bildung von Versetzungsstrukturen (Peeters et al., 2001) vernachlässigt. Erprobt und entwickelt wurde dieses Modell hauptsächlich auf der Grundlage von Experimenten an kfz-Metallen (Kocks und Mecking, 2003). Wie bereits im vorherigen Abschnitt diskutiert, ähneln sich die Verfestigungsmechanismen beider Gitterstrukturen bei Raumtemperatur. Deshalb ist die Verwendung dieses Modells für den hier untersuchten Stahl gerechtfertigt. Für den Fall isotroper Verfestigung (Taylor-Verfestigung) beschreibt der Ansatz

$$\dot{\tau}_k^\alpha = \dot{\tau}_k = \theta_0 \left(1 - \frac{\tau_k}{\tau_{ks}}\right) \dot{\gamma} \quad \text{mit} \quad \dot{\gamma} = \sum_{\alpha} |\dot{\gamma}^\alpha| \quad (2.18)$$

die Verfestigungsrate $\theta := \partial\tau_k/\partial\gamma$ für die Bereiche II und III (Abbildung 2.8) als lineare Funktion der kritischen Schubspannung τ_k . Der Parameter θ_0 repräsentiert die anfänglich sehr hohe Verfestigungsrate des zweiten Bereichs und τ_{ks} wird als Sättigungsspannung bzw. Skalierungsspannung bezeichnet. Die Sättigungsspannung ist im Allgemeinen stark temperatur- und scherratenabhängig. Im Folgenden wird diese Spannung allerdings als konstant angenommen, weil alle Experimente bei Raumtemperatur durchgeführt werden und bereits durch den viskosen Ansatz (Gleichung 2.16) die Dehnratenabhängigkeit des Materials berücksichtigt wird.

Durch Integration von Gleichung 2.18 lässt sich die kritische Schubspannung

$$\tau_k(\gamma) = \tau_{k0} + (\tau_{ks} - \tau_{k0}) \left(1 - \exp\left(\frac{-\theta_0\gamma}{\tau_{ks}}\right)\right) \quad \text{mit} \quad \tau_k(\gamma = 0) = \tau_{k0} \quad (2.19)$$

als Funktion der akkumulierten Scherrung $\gamma = \int \dot{\gamma} dt$ darstellen. Der Anfangswert der kritischen Schubspannung wird als τ_{k0} bezeichnet und ist ein weiterer Materialparameter. Zur Beschreibung der Verfestigung bei großen plastischen Deformationen, hat es sich als notwendig erwiesen, einen zusätzlichen linearen Term einzuführen. Damit ergibt sich für die kritische Schubspannung

$$\tau_k(\gamma) = \tau_{k0} + (\tau_{ks} - \tau_{k0}) \left(1 - \exp\left(\frac{-\theta_0\gamma}{\tau_{ks}}\right)\right) + \theta_\infty\gamma \quad (2.20)$$

Darin kann θ_∞ als verbleibende Verfestigungsrate (Bereich IV) interpretiert werden. Diese Verfestigungsregel ist gut geeignet, um das Verfestigungsverhalten von Stahl bei monotonen,

homogenen Versuchen zu beschreiben und wird im Weiteren als Verfestigungsregel I bezeichnet.

Eine zweite Verfestigungsregel soll eine Unterscheidung von Fremd- und Selbstverfestigung zwischen den Gleitsystemen ermöglichen. Dazu wird der übliche Ansatz

$$\dot{\tau}_k^\alpha = \sum_{\beta} h^{\alpha\beta} \dot{\gamma}^\beta \quad \text{mit} \quad h^{\alpha\beta} = q^{\alpha\beta} \theta(\tau_k^\beta) \quad (2.21)$$

verwendet (Bertram, 2008). Die Diagonalelemente der Koeffizientenmatrix $q^{\alpha\beta}$ besitzen den Wert 1 und kennzeichnen die Selbstverfestigung. Die nicht-Diagonalelemente repräsentieren hingegen das Verhältnis von Fremd- zu Selbstverfestigung. Aus experimentellen Untersuchungen ist bekannt, dass dieses Verhältnis immer größer als 1 ist und das es bei Eisen-Einkristallen typischerweise Werte zwischen 1,2 und 1,4 annimmt (Nakada und Keh, 1966). In Anlehnung an die Verfestigungsregel von Bronkhorst et al. (1992) und Kalidindi et al. (1992) ist die Selbstverfestigungsrate $\theta(\tau_k^\beta)$ eines jeden Gleitsystems β eine Funktion der jeweiligen kritischen Schubspannung. Die Selbstverfestigungsrate wird durch die empirische Funktion

$$\theta(\tau_k^\beta) = a \exp \left(- \left(\frac{\tau_k^\beta}{b} \right)^2 \right) + c \quad (2.22)$$

beschrieben, wobei die Verfestigungsparameter a, b, c , sowie die anfängliche kritische Schubspannung τ_{k0} für jedes Gleitsystem als identisch angenommen werden.

2.5 Implementierung des Materialmodells

2.5.1 Schematische Beschreibung der Implementierung

Das in den vorherigen Abschnitten beschriebene kristallplastische Modell ist mit Hilfe der UMAT-Schnittstelle in das Finite Elemente Programm Abaqus eingebunden. An dieser Schnittstelle werden bei jedem globalen Iterationsschritt der aktuelle Deformationszustand und die Zustandsvariablen des letzten Zeitschritts als Eingangsvariablen an die Materialroutine übergeben. In der Materialroutine müssen anschließend die aktuellen Zustandsvariablen, der Spannungszustand sowie die Materialtangente berechnet und an Abaqus zurückgegeben werden (Abaqus/Benutzerhandbuch, 2007). Die dafür notwendige Lösung der Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen erfolgt über diskrete Zeitintegrationsverfahren. Während die Fließregel (Gleichung 2.17) mit Hilfe des impliziten Euler-Verfahrens gelöst wird, werden die Verfestigungsvariablen explizit integriert und somit im jeweiligen Zeitschritt als konstant angesehen. Dadurch kann die Berechnung der Jacobi-Matrix und der Materialtangente unabhängig von der jeweils verwendeten Verfestigungsregel erfolgen, wodurch eine hohe Flexibilität bezüglich einer Änderung der Verfestigungsregel besteht. Für kleine Zeitschrittweiten ist dieses Vorgehen gerechtfertigt, da sich in diesem Fall die Verfestigungsvariablen nur geringfügig zwischen zwei Zeitschritten ändern. Bei dem hier implementierten

Modell hat sich gezeigt, dass die maximale Zeitschrittweite maßgeblich durch den viskosen Ansatz (Gleichung 2.16) bestimmt wird, da der in aller Regel sehr hohe Exponent $1/m$ die Verwendung großer Zeitschritte verbietet.

2.5.2 Diskretisierung und Lösung der Modellgleichungen

Wie bereits angemerkt, wird die Fließregel mit Hilfe des impliziten Euler-Verfahrens gelöst. Dazu wird, unter Ausnutzung der Beziehung $\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{F}\mathbf{P}$, die Fließregel in Gleichung 2.17 in die äquivalente Form

$$\dot{\tilde{\mathbf{F}}}\tilde{\mathbf{F}}^{-1} = \mathbf{L} - \tilde{\mathbf{F}} \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} (\tilde{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha}) \right) \tilde{\mathbf{F}}^{-1} \quad \text{mit} \quad \mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} \quad (2.23)$$

gebracht. Unter Verwendung des Vorwärtsdifferenzenquotienten $\dot{\tilde{\mathbf{F}}} = (\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t} - \tilde{\mathbf{F}}_t)/\Delta t$ wird diese Gleichung zu der Residuumsgleichung

$$\mathbf{R}(\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}) = 0 = \tilde{\mathbf{F}}_t - \tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t} + \Delta t \left(\mathbf{L}\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t} - \tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t} \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} (\tilde{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha}) \right) \right) \quad (2.24)$$

umgeformt. Erfolgt die Berechnung des Geschwindigkeitsgradienten durch die Beziehung

$$\mathbf{L} = \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{F}_{t+\Delta t} - \mathbf{F}_t) \mathbf{F}_{t+\Delta t}^{-1} \quad , \quad (2.25)$$

erfüllt auch die Residuumsgleichung (Gleichung 2.24) die drei Prinzipien PFI, PISM und PMO (Risay, 2007). Mit dem Newton-Raphson-Verfahren

$$\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}^{k+1} = \tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}^k - \frac{\partial \mathbf{R}(\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}^k)}{\partial \tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}^k} \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}^0 = \tilde{\mathbf{F}}_t, \quad \tilde{\mathbf{F}}_{t=0} = \mathbf{Q} \quad (2.26)$$

kann die Residuumsgleichung iterativ gelöst werden. Die Anfangswerte für $\tilde{\mathbf{F}}$ sind in Form eines eigentlich orthogonalen Tensors \mathbf{Q} gegeben und repräsentieren die Ausgangsorientierung des zu berechnenden Kristallits. Es wird angenommen, dass eine korrekte Lösung der Zustandsvariablen gefunden ist, wenn deren Änderung zwischen zwei lokalen Iterationsschritten k und $k+1$ innerhalb einer vordefinierten Toleranz $\|\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}^{k+1} - \tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}^k\| < Tol.$ liegt. Die für dieses Verfahren notwendige Jacobi-Matrix $\partial \mathbf{R}(\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t})/\partial \tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}$ ist analytisch bestimmt worden (Anhang A). Mit dem vorgestellten Lösungsverfahren wird allerdings nicht automatisch die plastische Inkompressibilität ($\det(\mathbf{P}) = 1$) sichergestellt. Aus diesem Grund erfolgt eine Determinantenkorrektur

$$\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}^* = \sqrt[3]{\frac{\det(\mathbf{F}_{t+\Delta t})}{\det(\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t})}} \tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t} \quad (2.27)$$

der mit Hilfe des Newton-Raphson-Verfahrens errechneten Lösung (Sarma und Zacharia, 1999). Anschließend werden die Verfestigungsvariablen

$$\tau_{k,t+\Delta t}^{\alpha} = \tau_{k,t}^{\alpha} + \Delta t \left(\sum_{\beta} q^{\alpha\beta} \theta(\gamma_{t+\Delta t}^{\beta}) \dot{\gamma}^{\beta} \right) \quad \text{mit} \quad \gamma_{t+\Delta t}^{\beta} = \gamma_t^{\beta} + \Delta t \dot{\gamma}^{\beta} \quad (2.28)$$

für den nächsten Zeitschritt aktualisiert. Die von der UMAT-Schnittstelle benötigte Materialtangente wird über die Beziehung

$$\mathbb{K}^{umat} = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \mathbf{T}_{t+\Delta t}^C}{\partial \mathbf{D}_{t+\Delta t}} \quad (2.29)$$

berechnet, wobei \mathbf{D} der symmetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradienten ist. Ein analytischer Ausdruck für Gleichung 2.29 ist in Anhang B gegeben.

2.6 Homogenisierung

2.6.1 Beurteilung der verfügbaren Methoden

Bei der Verwendung kristallplastischer Materialmodelle zur Beschreibung polykristallinen Materialverhaltens, müssen Methoden angewendet werden, die einen Übergang zwischen den beiden Größenbereichen ermöglichen. Methodenunabhängig sind dabei aber immer mindestens zwei solcher Übergänge notwendig. In einem ersten Schritt, der als Lokalisierung oder auch Makro-Mikro-Übergang bezeichnet wird, müssen aus den makroskopischen Belastungen die mikroskopischen Randbedingungen ermittelt werden. Unter Verwendung der mikroskopischen Randbedingungen erfolgt dann die Berechnung des Materialverhaltens für das betrachtete Teilvolumen. Der zweite Übergang ist dann wiederum notwendig, um das sich aus dem Materialverhalten der Teilvolumina konstituierende, makroskopische Materialverhalten zu ermitteln. Dieser als Homogenisierung oder auch Mikro-Makro-Übergang bezeichnete Prozess wird meist durch die Bildung des Volumenmittels realisiert. In der Literatur hat sich der Begriff Homogenisierung jedoch als ein übergeordneter Begriff durchgesetzt, der zusammenfassend die verschiedenen Übergänge zwischen den beiden Größenbereichen bezeichnet. Dementsprechend wird auch in dieser Arbeit der Begriff Homogenisierung in seiner allgemeinen Bedeutung verwendet.

Es existieren mehrere Kriterien, die die Auswahl einer geeigneten Homogenisierungsmethode beeinflussen. Diese Kriterien sind z. B.:

- Mikrostruktur des untersuchten Materials (Gestalt der Körner, elastische und plastische Anisotropie der Kristallite, Anzahl der Phasen)
- numerischer Aufwand (Simulation homogener oder inhomogener Versuche)
- zu untersuchendes Materialverhalten (z. B. elastisch oder plastisch, finite Deformationen)

Die für kristallplastische Anwendungen am häufigsten genutzte Homogenisierungsmethode ist das Taylor-Modell. Bei dem Taylor-Modell wird eine homogene Deformation des gesamten Kornverbundes vorausgesetzt. Mit dieser Annahme ist auch automatisch die Kompatibilität zwischen den Körnern sichergestellt und die berechneten polykristallinen Spannungen bilden eine obere Grenze (Tomé und Canova, 1998). Es hat sich allerdings gezeigt, dass mit

diesem Modell die Texturentwicklung stark überschätzt wird (Kothari und Anand, 1998; Dawson und Beaudoin, 1998a; Walde, 2005). Für Materialien, die eine kubische Kristallstruktur besitzen, stimmen die mit dem Taylor-Modell vorhergesagten Ergebnisse qualitativ mit den experimentellen Messungen überein. Es wird keine direkte Interaktion zwischen den Körnern berücksichtigt und die Deformation innerhalb eines Kornes ist ebenfalls konstant. Eine weitere Gruppe von Homogenisierungsmethoden bilden die selbstkonsistenten Modelle, wobei das viskoplastisch-selbstkonsistente Modell VPSC (viscoplastic self-consistent model) von Lebensohn und Tomé (1993) und dessen Weiterentwicklungen (Tomé und Lebensohn, 2004) am weitesten verbreitet sind. Bei diesen Modellen wird das Korn als elliptischer Einschluss in einer homogenen Matrix betrachtet, wobei diese Matrix die gemittelten Eigenschaften aller im Kornverbund enthaltenen Körner besitzt. Dadurch wird eine indirekte Wechselwirkung zwischen den Körnern erreicht. Weiterhin können sich, im Gegensatz zum Taylor-Modell, die einzelnen Körner des Kornverbunds auch unterschiedlich deformieren. Diese erweiterten Modelleigenschaften spielen besonders dann eine Rolle, wenn Materialien mit einer ausgeprägten plastischen Anisotropie (basales Gleiten), großen Steifigkeitsunterschieden zwischen den einzelnen Körnern (mehrphasiges Material) oder deutlich anisotropen Kornformen berechnet werden. Es hat sich gezeigt, dass die VPSC-Modelle für Materialien mit einer hexagonalen Kristallstruktur bessere Ergebnisse als das Taylor-Modell liefern. Im Fall von Materialien mit kubischer Kristallstruktur sind hingegen keine nennenswerten Verbesserungen zu erkennen (Harren, 1991; Bacroix et al., 1999; Van Houtte et al., 2004). Das Problem der überschätzten Texturentwicklung bleibt sowohl bei den VPSC, als auch bei den Weiterentwicklungen des Taylor-Modells (LAMEL,GIA) erhalten. Erst durch die Berücksichtigung eines, durch Korn-Korn Interaktion hervorgerufenen, inhomogenen Deformationszustandes innerhalb eines Kornes, kann die Texturentwicklung deutlich verlangsamt werden (Lebensohn, 2001). Dies hat sich auch bei der Weiterentwicklung der „relaxed-constraint“-Modelle gezeigt und führte somit zur Entwicklung des ALAMEL-Modells von Van Houtte et al. (2005). Diese Modelle sind bisher allerdings erst einer geringen Anzahl von Tests unterzogen worden und dadurch für nur wenige Deformationsmoden und Materialien validiert. Dabei stellt sicherlich auch die Komplexität des zu implementierenden Algorithmus eine starke Restriktion dar.

Mit der Methode des repräsentativen Volumenelements (RVE) existiert eine weitere Möglichkeit der Homogenisierung. Dabei wird mit Hilfe der Finiten Elemente Methode der Kornverbund räumlich aufgelöst. Die Mikrostruktur kann mit verschiedenen Genauigkeitsgraden nachgebildet werden. Weiterhin hat die Wahl der Randbedingungen, in den meisten Fällen homogen oder periodisch, einen erheblichen Einfluss auf die resultierenden Ergebnisse. Mit der RVE-Methode können qualitativ und quantitativ sehr gute Ergebnisse erzielt werden (Miehe und Schotte, 2004; Delannay et al., 2009), wobei gilt: je realistischer die Mikrostruktur nachgebildet wird, umso realistischer sind auch die Ergebnisse. Der große Nachteil von RVE-Rechnungen liegt in den hohen Berechnungszeiten, die ganze Größenordnungen über denen des Taylor-Modells liegen (Van Houtte et al., 2005). Somit verbietet sich der Einsatz der RVE-Methode für die meisten Probleme, bei denen makroskopisch inhomogene Deformationszustände auftreten oder auch für Optimierungen bei denen Berechnungen oft wiederholt

werden müssen.

Ausführliche Vergleiche und Bewertungen von Homogenisierungsmethoden, die noch weitere Aspekte als die eben besprochenen einbeziehen, werden z. B. bei Böhlke (2001) und Risy (2007) diskutiert. Zusammenfassend lassen sich zwei Aussagen treffen: der Berechnungsaufwand ist umso größer, je mehr Mikrostruktureinflüsse berücksichtigt werden. Die höchsten Genauigkeiten lassen sich mit der RVE-Technik erzielen, wobei diese auch die höchsten numerischen Kosten verursachen.

2.6.2 Umsetzung des Taylor-Modells

Das Taylor-Modell ist direkt in die bereits vorgestellte Materialroutine (Abschnitt 2.5) implementiert. Ausgehend von dem für den jeweiligen Iterationsschritt bekannten makroskopischen Deformationszustand, werden für eine endliche Anzahl von Kristalliten die resultierenden Spannungszustände \mathbf{T}_i^C und Materialtangente \mathbb{K}_i^{Abq} berechnet. Jedem Kristallit wird derselbe Volumenanteil zugeordnet. Somit unterscheiden sie sich ausschließlich durch ihre anfängliche Orientierung. Auf Grund der kleinen elastischen und der isochoren plastischen Deformation von Metallen, kann der Volumenanteil eines jeden Kristallits über den gesamten Deformationsprozess als konstant angenommen werden. Daher vereinfacht sich die Berechnung des makroskopischen Spannungszustandes und der makroskopischen Materialtangente zu

$$\bar{\mathbf{T}}^C = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{T}_i^C \quad \text{und} \quad \bar{\mathbb{K}}^{Abq} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbb{K}_i^{Abq} . \quad (2.30)$$

In dieser Gleichung ist i der Index des jeweiligen Kristallits und N die Gesamtzahl der berücksichtigten Kristallite. Die Nachbildung realer Versuche erfordert oftmals die Vorgabe gemischter Randbedingungen. Für homogene Versuche kann dies sehr effizient unter Verwendung eines einzelnen Hexaederelements erfolgen. An jedem Gauss-Punkt dieses Elements wird mit Hilfe des Taylor-Modells das polykristalline Materialverhalten berechnet.

2.6.3 Umsetzung des RVE-Modells

Das würfelförmige RVE setzt sich aus 20^3 linearen Hexaederelementen zusammen. Jedem dieser Elemente ist genau eine Kristallorientierung zugewiesen. Bildlich gesprochen wird also im unverformten Zustand jedes Korn durch ein Würfelement abgebildet. Eine solche Umsetzung vernachlässigt zwar die morphologische Textur des Materials, hat aber die Vorteile, dass eine große Anzahl von Orientierungen berücksichtigt werden kann und die Berechnungsdauer vertretbar ist. Da die Elemente des RVEs 8 Gauss-Punkte besitzen ist es möglich, dass die Deformation eines einzelnen Kristallits inhomogen ist. Dies stellt ein wesentliches Kriterium für die realistische Beschreibung der Texturentwicklung (vgl. Abschnitt 2.6.1) dar. Durch die räumliche Auflösung der kristallographischen Textur weißt das RVE ein sehr heterogenes Materialverhalten auf. Selbst bei homogener Belastung werden sich infolge dessen inhomogene Dehnungs- und Verschiebungsfelder einstellen. Die Anwendung homogener Randbedingungen würde somit eine starke Einschränkung der Lösung in

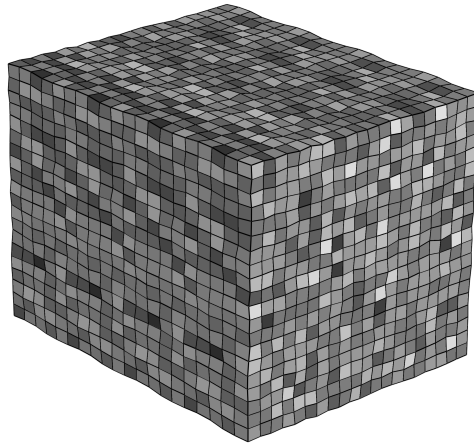


Abbildung 2.9: RVE mit periodischen Randbedingungen im deformierten Zustand, die Orientierungen werden durch die verschiedenen Graustufen symbolisiert

den oberflächennahen Bereichen des RVEs darstellen. Aus diesem Grund werden für das vorgestellte RVE periodische Randbedingungen verwendet. Die Aufbringung dieser Randbedingungen erfolgt über die Kopplung der Knotenverschiebungen aller Oberflächenknoten. Dazu wird die Beziehung

$$\mathbf{u}^{k+} - \mathbf{u}^{k-} = \bar{\mathbf{H}}(\mathbf{x}_0^{k+} - \mathbf{x}_0^{k-}) \quad \text{mit} \quad \bar{\mathbf{H}} = \bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I} \quad (2.31)$$

auf Paare von sich jeweils gegenüberliegenden Knoten $k+$ und $k-$ angewendet. Darin repräsentieren \mathbf{u}^{k+} und \mathbf{u}^{k-} die Knotenverschiebungen, \mathbf{x}_0^{k+} und \mathbf{x}_0^{k-} die Knotenkoordinaten im unverformten Zustand und $\bar{\mathbf{H}}$ den makroskopischen Verschiebungsgradienten. Vorgegeben werden die 9 Komponenten des Verschiebungsgradienten über die Verschiebungsfreiheitsgrade von 3 zusätzlich eingeführten Knoten. Die Erstellung des RVEs erfolgt mit dem FE-Programm Abaqus. Zur Einbindung von Gleichung 2.31 wird die Option „linear constraint equation“ genutzt. Bei dieser Option generiert Abaqus automatisch für jedes gekoppelte Knotenpaar zusätzliche Zwangskräfte (Abaqus/Benutzerhandbuch, 2007, S.28.2.1-3). Da die Summe der von den Zwangskräften verrichteten Arbeit null sein muss, ergeben sich für den Fall periodischer Verschiebungsrandbedingungen immer antiperiodische Kräftepaare. Die Vorgabe von Spannungsrandbedingungen wird ebenfalls anhand der 3 zusätzlichen Knoten realisiert. Dazu müssen anstelle der Verschiebungen, die Knotenkräfte vorgeschrieben werden. Die Zuordnung der Spannungskomponenten zu den 9 Knotenkräften ist dabei zu jener äquivalent, die für die Komponenten des Verschiebungsgradienten und den Verschiebungen gewählt worden ist. Bei Vorgabe von einzelnen Spannungskomponenten ergeben sich die entsprechenden Komponenten des Verschiebungsgradienten aus der globalen Gleichgewichtssiteration (siehe Anhang C).

Um bei der Bestimmung des makroskopischen Spannungszustandes eine aufwendige Integration über das Volumen des RVEs zu vermeiden, können die Spannungen auch über die resultierenden Knotenkräfte der zusätzlichen Knoten berechnet werden. Für den Fall des Zugversuchs werden die nicht-Diagonalelemente des 1. Piola-Kirchhoff-Spannungstensors $\bar{\mathbf{T}}^{1PK}$

zu null angenommen. Die Diagonalelemente von $\bar{\mathbf{T}}$ berechnen sich aus dem Quotienten der entsprechenden Knotenkraft und der Ausgangsfläche. Da der makroskopische Deformationsgradient $\bar{\mathbf{F}}$ (Gleichung 2.31) ebenfalls bekannt ist, können die Cauchy-Spannungen über die Beziehung

$$\bar{\mathbf{T}}^C = \det(\bar{\mathbf{F}})\bar{\mathbf{T}}^{1PK}\bar{\mathbf{F}}^{-T} \quad . \quad (2.32)$$

berechnet werden. Eine Überprüfung dieser Vorgehensweise ist in Anhang C dargestellt, wo für ein einfaches Beispiel eine analytische Vergleichslösung erzeugt wird.

2.7 Identifikation

2.7.1 Die Identifikation als inverses Problem

Der erfolgreichen Anwendung von Materialmodellen ist immer eine zuverlässige Identifikation der im Materialmodell verwendeten Parameter vorangestellt. In einigen Fällen ist es möglich, diese Materialparameter direkt aus experimentellen Daten zu ermitteln. So kann z. B. anhand eines Zugversuchs für den Fall isotrop-linear-elastischen Materialverhaltens der Elastizitätsmodul aus den Spannungs-Dehnungsdaten und die Querkontraktionszahl aus dem Verhältnis der Querdehnung zur Längsdehnung bestimmt werden. In Fällen, bei denen die direkte Bestimmung der Materialparameter nicht möglich ist, muss die Identifikation als inverses Problem formuliert und gelöst werden (Wolfersdorf, 1994; Mahnken, 1996).

Die Lösung des inversen Problems erfolgt dann iterativ. Dazu werden die Parameter der Modellgleichungen so lange variiert, bis eine hinreichende Übereinstimmung zwischen den numerisch und experimentell ermittelten Daten besteht. Es wird angenommen, dass derjenige Parametersatz mit dem die beste Übereinstimmung zwischen Berechnung und Simulation erreicht wird, auch die Lösung des inversen Problems darstellt. Allerdings ist zu beachten, dass die meisten anwendungsorientierten inversen Probleme *schlecht gestellt* sind und somit eine Instabilität oder auch Mehrdeutigkeit der Lösung nicht ausgeschlossen werden kann. Die Ursachen dafür können z. B. die natürliche Streuung oder auch Unvollständigkeit der experimentellen Daten sein. Weiterhin kann eine Überparametrisierung des Materialmodells zur Instabilität der Lösung führen (Mahnken, 2004). Zwar lassen sich diese Ursachen durch Mittelung der experimentellen Daten oder durch eine präzise Vorauswahl des Materialmodells reduzieren, aber eine völlige Vermeidung wird oftmals nicht möglich sein.

Anhand dieser Problematik wird deutlich, wie wichtig eine der Identifikation nachgeschaltete Validierung ist und dass diese nicht nur eine Überprüfung des Materialmodells bedeutet sondern auch zur Verifikation der identifizierten Materialparameter dient. Weiterhin existieren unter bestimmten Voraussetzungen Analysewerkzeuge, die Hinweise liefern, ob eine Lösung des inversen Problems mehrdeutig oder instabil ist (Kreißig et al., 2001). Eines dieser Analysewerkzeuge wird in Abschnitt 2.7.3 vorgestellt.

2.7.2 Optimierung unter Verwendung der Levenberg-Marquardt-Methode

Wie bereits erwähnt, ist es das Ziel der inversen Identifikation einen Parametersatz zu finden, für den eine möglichst hohe Übereinstimmung zwischen den berechneten und experimentellen Daten erreicht wird. Um diese Übereinstimmung zu quantifizieren wird in einem ersten Schritt ein Abstandsmaß in Form einer skalaren Zielfunktion

$$\Psi(p_j) = \sum_{i=1}^N (v_i^{exp} - v_i^{ber}(p_j))^2, \quad j = 1, \dots, M \quad (2.33)$$

eingeführt. Wie auch hier wird dazu üblicherweise eine quadratische Form gewählt. In der Zielfunktion sind v_i^{exp} der Vektor der Messdaten und v_i^{ber} der Vektor der entsprechenden berechneten Daten. Während die Messdaten konstante Eingabegrößen darstellen, sind die berechneten Daten eine Funktion der Materialparameter p_j . In Gleichung 2.33 repräsentieren N die Anzahl der Messdaten bzw. M die Anzahl der gesuchten Materialparameter. Der Zusammenhang in Gleichung 2.33 lässt sich auch in vektorieller Form

$$\Psi(\mathbf{p}) = (\mathbf{v}^{exp} - \mathbf{v}^{ber}(\mathbf{p})) \cdot (\mathbf{v}^{exp} - \mathbf{v}^{ber}(\mathbf{p})) \quad (2.34)$$

darstellen. In Fällen, in denen die Berechnungsergebnisse nicht durch eine analytisch geschlossene Funktion erzeugt werden, muss die Minimierungsaufgabe iterativ gelöst werden. Die dazu entwickelten Verfahren sind sehr vielfältig und lassen sich grob in zwei Klassen unterteilen. Zum Einen gibt es stochastische Verfahren wie z. B. die Evolutions- oder Schwarmstrategien, zum Anderen deterministische Verfahren, wozu z. B. auch die Gradienten-basierten Verfahren gehören. Die Anwendung neuronaler Netze nimmt bezüglich dieser Einteilung eine übergeordnete Sonderstellung ein, da für deren Konditionierung wiederum die Anwendung einer der vorher genannten Verfahren notwendig ist (Huber, 2000). Detaillierte Diskussionen verschiedener Optimierungsmethoden können unter anderem in Brandt (1992), Mahnken (1996) und Huber (2000) gefunden werden. Zusammenfassend lässt sich dazu sagen, dass die stochastischen Verfahren zuverlässig das globale Optimum finden, dafür aber eine sehr hohe Anzahl an Funktionsaufrufen benötigen. Hingegen konvergieren Verfahren, bei denen konjugierte Gradienten zur Lösungssuche verwendet werden, sehr viel schneller. Allerdings kann dabei die ermittelte Lösung auch nur ein lokales Minimum repräsentieren.

In dieser Arbeit wird das frei verfügbare Computerprogramm MinPack verwendet (Moré et al., 1984). Darin ist das konjugierte Gradienten-Verfahren von Levenberg und Marquardt implementiert. Als Eingabegrößen verlangt dieses Programm den Vektor der Differenzen von Messdaten und berechneten Daten ($\mathbf{v}^{exp} - \mathbf{v}^{ber}(\mathbf{p})$). Der neue Parametersatz

$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n + \alpha \mathbf{d}^n \quad (2.35)$$

für den nächsten Optimierungsschritt wird als Summe des aktuellen Parametersatzes \mathbf{p}^n und einer mit dem Faktor α gewichteten Suchrichtung \mathbf{d}^n bestimmt. Für das Levenberg-Marquardt-Verfahren berechnet sich die Suchrichtung über die Beziehung

$$\mathbf{d}^n = (\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \mu \mathbf{I})^{-1} (-\mathbf{J} [\mathbf{v}^{exp} - \mathbf{v}^{ber}(\mathbf{p}^n)]) \quad (2.36)$$

wobei \mathbf{J} die Jacobi-Matrix repräsentiert. Die Jacobi-Matrix

$$\mathbf{J} = \frac{\partial (\mathbf{v}^{exp} - \mathbf{v}^{ber}(\mathbf{p}^n))}{\partial \mathbf{p}^n} \quad (2.37)$$

berechnet sich aus der Ableitung des Differenzvektors nach dem Vektor der Materialparameter. Da die Werte $v_i^{ber}(p_j)$ nicht mittels einer geschlossenen analytischen Funktion bestimmt werden, muss die Ableitung durch Anwendung des Vorwärtsdifferenzenquotienten numerisch berechnet werden. Damit ergeben sich die Komponenten der Jacobi-Matrix zu

$$J_{ij} = \frac{\partial (v_i^{exp} - v_i^{ber}(p_j))}{\partial p_j} \approx \frac{(v_i^{exp} - v_i^{ber}(p_j + \varepsilon)) - (v_i^{exp} - v_i^{ber}(p_j))}{\varepsilon} . \quad (2.38)$$

Die Größe der dazu verwendeten Störung ε ist problem- und rechnerabhängig. Sie liegt üblicherweise zwischen Werten von 10^{-8} und 10^{-16} .

2.7.3 Berechnung und Auswertung der Korrelationsmatrix

Die Korrelationsmatrix gibt an, inwieweit verschiedene Materialparameter voneinander abhängig sind. Dieses Problem tritt immer dann auf, wenn zwei oder mehr Parameter die Berechnungsergebnisse in gleicher Weise beeinflussen und somit deren Wirkung nicht unterschieden werden kann (Bruhns und Anding, 1999). Sie ist ein Indikator, der es ermöglicht, solche Probleme während der Identifikation zu erkennen. Die Berechnung dieser Matrix ist z. B. in Press et al. (1997) angegeben. In der Nähe des Minimums kann die Hesse-Matrix der Zielfunktion

$$\mathbf{H} := \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{p}} \approx \mathbf{J}^T \mathbf{J} \quad (2.39)$$

durch Verwendung der Jacobi-Matrix approximiert werden. Die Komponenten der Korrelationsmatrix \mathbf{B} berechnen sich aus

$$B_{ij} = \frac{A_{ij}}{\sqrt{A_{ii}A_{jj}}} \quad \text{mit} \quad A_{ij} = (H^{-1})_{ij} , \quad (2.40)$$

wobei $(H^{-1})_{ij}$ die Komponenten der inversen Hesse-Matrix sind. Damit ist die Korrelationsmatrix quadratisch und die Dimension entspricht der Anzahl der Materialparameter. Die Diagonalelemente geben die Korrelation der Materialparameter mit sich selbst an und haben immer den Wert 1. Die Nebendiagonalelemente sind ein Maß dafür wie stark die Materialparameter untereinander korrelieren und können Werte zwischen -1 und 1 annehmen. Ein Absolutwert von 1 bedeutet, dass die entsprechenden Parameter vollständig voneinander abhängig sind. Ein Wert von 0 zeigt an, dass keine Korrelation vorhanden ist. Werden bei einer Identifikation Absolutwerte von 1 ermittelt, so sollte entweder das verwendete Materialmodell überprüft oder zusätzliche Messdaten zur Anpassung genutzt werden. Weiterhin wird in Beck und Arnold (1977) darauf hingewiesen, dass die Identifikation problematisch ist, wenn alle Nebendiagonalwerte den Absolutwert von 0.9 überschreiten.

Kapitel 3

Identifikation und Validierung des Materialmodells mittels homogener makroskopischer Versuche

3.1 Experimentelle Untersuchungen

3.1.1 Beschreibung des Probenmaterials

Der untersuchte DC04 Stahl liegt als kaltgewalztes Blech mit einer Dicke von $0,8\text{ mm}$ vor. Er enthält nur sehr geringe Mengen an Kohlenstoff und anderer Legierungselemente (Tabelle 3.1), worauf sich seine gute Verformbarkeit und die damit verbundene Eignung als Tiefziehwerkstoff zurückführen lässt. Nach Bleck und Schael (2000) besitzt der Stahl eine einphasige

Tabelle 3.1: Chemische Zusammensetzung des DC04

Element	C	Si	Mn	P	S	Al
max. Gew%	0.08	-	0.4	0.03	0.03	-

ferritische Mikrostruktur. Trotz dieser Charakterisierung kann man an einigen Korngrenzen Ausscheidungen erkennen (Abbildung 3.1, schwarze Bereiche), bei denen es sich wahrscheinlich um Perlit handelt. Die Korngröße des Stahls ist mit dem Linienschnittverfahren bestimmt worden (Bertram und Heilmaier, 2007). Diese Messung ergab eine Korngröße von $19\text{ }\mu\text{m}$ in Walzrichtung und $13\text{ }\mu\text{m}$ in Querrichtung. Die Korngröße senkrecht zur Blechebene ist nicht bestimmt worden, kann aber auf Grund der starken Kompression beim Walzen als relativ gering angenommen werden. Die durch das Walzen hervorgerufene kristallographische Textur wird in dem nächsten Abschnitt näher behandelt. Ein wichtiger Teil dieser Arbeit beschäftigt sich mit der Untersuchung des Materialverhaltens an einzelnen Körnern.

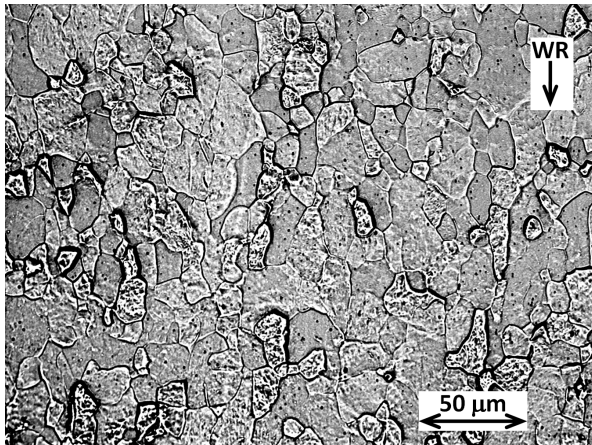


Abbildung 3.1: Lichtmikroskopische Aufnahme der Mikrostruktur des DC04-Stahls im Auslieferungszustand

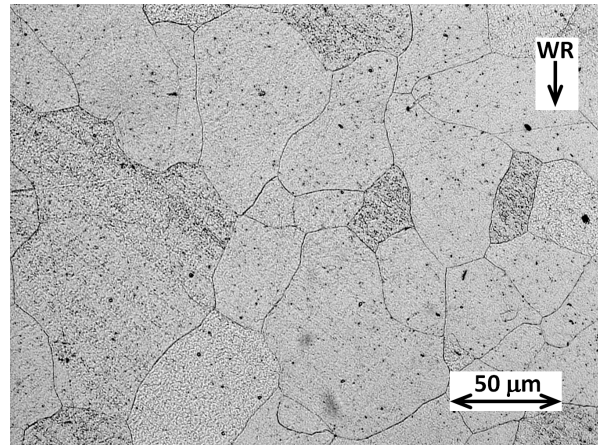


Abbildung 3.2: Lichtmikroskopische Aufnahme der Mikrostruktur des DC04-Stahls nach der Wärmebehandlung

Die dafür eingesetzten Methoden erfordern allerdings eine Korngröße von ca. $100 \mu\text{m}$. Zur Realisierung solcher Korngrößen muss der Stahl einer Wärmebehandlung unterzogen werden. Nach einer Glühdauer von 18 h , bei einer Temperatur von 1200°C , in Verbindung mit einer langsamen Abkühlung im Ofen¹, weisen einige Körner des Stahls die notwendige Größe von $100 \mu\text{m}$ auf (Abbildung 3.2).

3.1.2 Texturmessung und -approximation

Der Begriff Textur wird hier als Synonym für eine ungleichmäßige Verteilung kristallographischer Orientierungen in einem polykristallinen Material verwendet. Solch eine Ausrichtung kristallographischer Orientierungen in bestimmte Vorzugsrichtungen kann durch plastische Deformationen, wie sie z. B. beim Walzen auftreten, verursacht werden. Da die makroskopischen Eigenschaften eines polykristallinen Materials stark von dessen Textur abhängen können, kommt deren Berücksichtigung in Mikro-Makro-Modellen eine besondere Bedeutung zu.

Die Textur des für diese Arbeit untersuchten DC04-Stahlblechs ist mit dem Verfahren der Neutronenstrahlbeugung gemessen worden². Da die Neutronen nur gering mit dem Probenmaterial wechselwirken, ist diese Methode gut geeignet um relativ große Volumina zu vermessen. Dies bietet den Vorteil, dass bei diesen Messungen nicht nur, wie es z. B. bei Röntgen- oder EBSD-Verfahren der Fall ist, die Oberflächentextur, sondern die Textur der gesamten Probe erfasst wird. Besonders bei gewalzten Blechen ist diese Eigenschaft von großem Nutzen, da hier ein hoher Texturgradient über die Blechdicke vorhanden ist (Truszkowski et al.,

¹Die Wärmebehandlung der Proben wurde von Heike Rühle unter der Leitung von Martin Heilmaier an der Otto-von-Guericke Universität durchgeführt.

²Die Messung der Textur wurde von Mitarbeitern des GKSS-Forschungszentrums Gesthacht unter der Leitung von Heinz-Günter Brokmeier durchgeführt.

1980; Dawson und Beaudoin, 1998b) und sich somit die Textur an der Oberfläche signifikant von der in der Mitte des Blechs unterscheidet.

Die für die Texturmessung verwendete Probe besteht aus 10 einzelnen quadratischen Blechplättchen mit einer Kantenlänge von 1 *cm*. Diese Plättchen werden zu einem Probenstapel übereinandergelegt und anschließend mit Neutronen bestrahlt. Die gebeugten Neutronen werden von einem Goniometer erfasst und das Ergebnis in Form von Polfiguren dargestellt. Bei den hier verwendeten Polfiguren handelt es sich um vollständige stereografische Projektionen mit einem 5° Raster. Für den DC04 Stahl werden die {111}-, {110}- und {100}-Polfiguren gemessen (Abbildung 3.3a). Während die {110}-Polfigur ein für Walztexturen typisches Aussehen hat, lässt sich die {100}-Polfigur nicht eindeutig zuordnen (Wassermann und Grewen, 1962, S.211).

Im Materialmodell wird die Textur über eine repräsentative Anzahl von Einzelorientierungen berücksichtigt. Zur Erzeugung dieser Einzelorientierungen aus den Polfiguren wird ein Programm verwendet, welches auf den Arbeiten von Dahms und Bunge (1989) und Dahms (1992) beruht. Mit diesem Programm wird aus der Gesamtheit aller gemessenen Polfiguren die Orientierungsverteilungsfunktion in Form einer endlichen harmonischen Reihe berechnet (Polfigurinversion). Anschließend kann dann unter Anwendung einer inversen Analyse ein Satz von Einzelorientierungen bestimmt werden, der eine möglichst gute Approximation der Orientierungsverteilungsfunktion liefert. Dieses Problem ist auch bei der Verwendung von mehreren Polfiguren nicht eindeutig zu lösen, führt aber bei der gleichzeitigen Einhaltung von Nebenbedingungen wie z. B. der Nichtnegativitätsbedingung für die Orientierungsverteilungsfunktion, zu befriedigenden Ergebnissen (Dahms, 1987).

Die DC04-Textur ist in 3 verschiedene Sätze von jeweils 10^3 , $2 \cdot 10^3$ und 10^4 Einzelorientierungen zerlegt worden³. Anhand eines Vergleichs zwischen den aus den Einzelorientierungen zurückgerechneten Polfiguren (Abbildung 3.3b-d) und den gemessenen Polfiguren kann die Qualität der Zerlegungen beurteilt werden. Es ist zu erkennen, dass mit einer steigenden Anzahl von Einzelorientierungen auch eine bessere Approximation der gemessenen Polfiguren möglich ist. Bezüglich der Rechenzeit muss jedoch die Verwendung des Satzes mit 10^4 Orientierungen ausgeschlossen werden. Somit wird für die weitere Arbeit der Satz mit den $2 \cdot 10^3$ Orientierungen verwendet.

3.1.3 Scherversuche

Für die Scherversuche⁴ werden rechteckige Proben mit einer Länge von 30 *mm* und einer Breite von 18 *mm* verwendet. Um die anisotropen Eigenschaften des Materials zu berücksichtigen, werden diese Proben mit 7 unterschiedlichen Orientierungen bezüglich der Walzrichtung aus dem DC04-Blech entnommen (Abbildung 3.4). Dabei variieren die Orientierungen mit einer Winkeldifferenz von jeweils 15° zwischen der Walzrichtung (0°) und der Querrichtung (90°). In Abbildung 3.5 ist eine deformierte Scherprobe dargestellt. Man erkennt deutlich die

³Die Texturerlegung wurde von Juliane Scharnweber unter der Leitung von Werner Skrotzki an der TU Dresden durchgeführt.

⁴Die Scherversuche wurden von Jan Kalisch an der Universität Paris 13 durchgeführt. Die Leitung hatte Salima Bouvier.

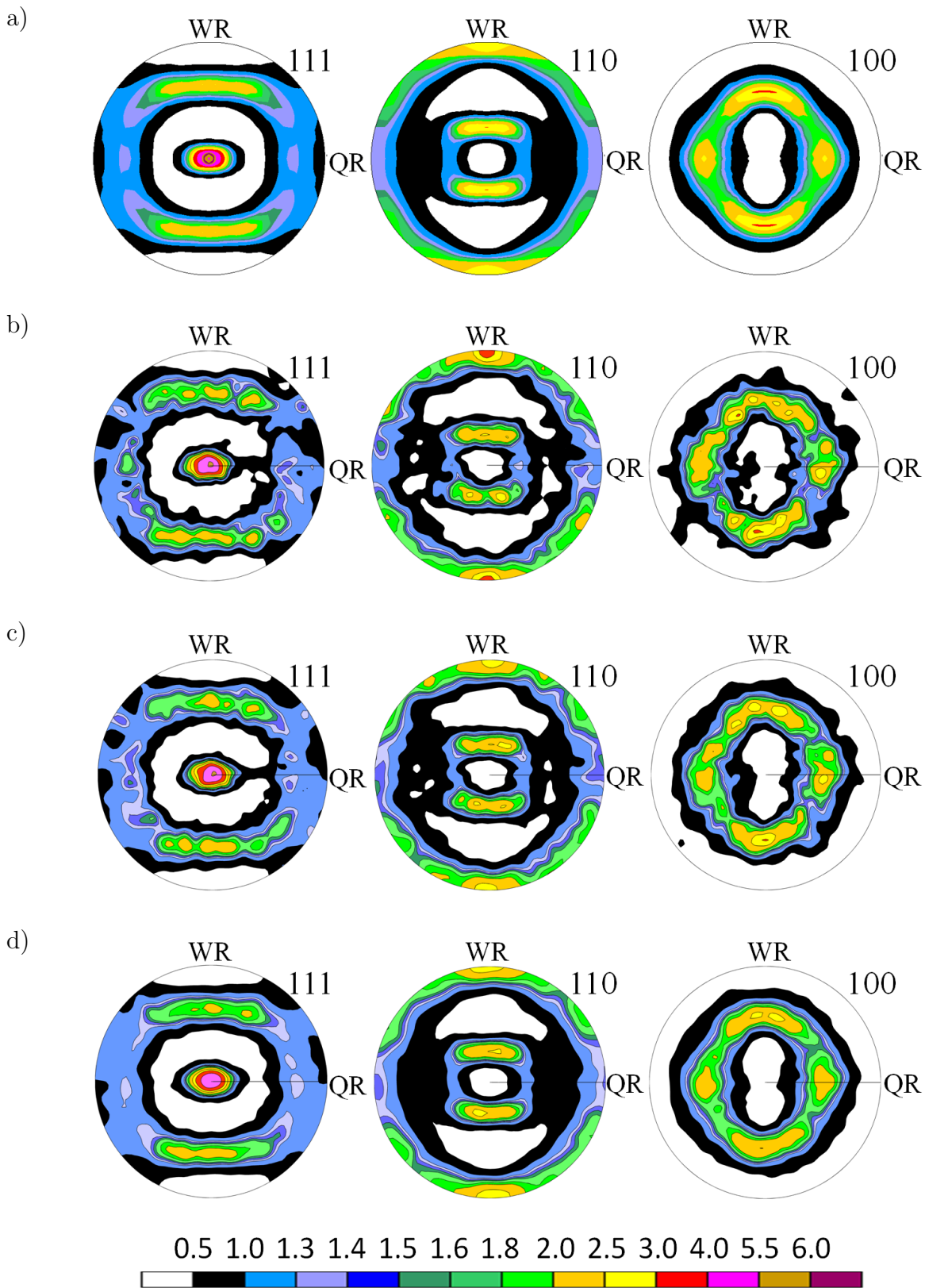


Abbildung 3.3: a) mittels Neutronenstrahlbeugung gemessene Polfiguren; zurückgerechnete Polfiguren für Sätze von b) 1000, c) 2000 und d) 10000 Einzelorientierungen

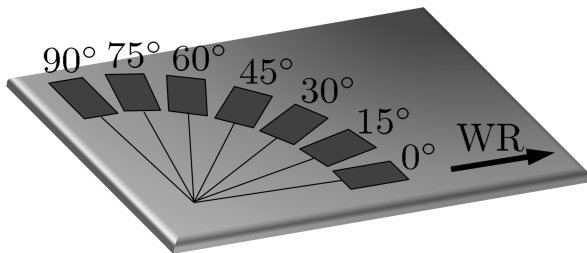


Abbildung 3.4: Orientierung der Scherproben bezüglich der Walzrichtung

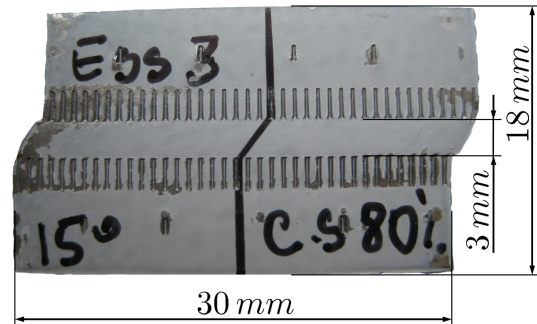


Abbildung 3.5: Deformierte Scherprobe

Abdrücke der Einspannung die relativ nah an der Mittellinie erfolgt, so dass die Breite der Scherzone mit 3 mm sehr viel kleiner als deren Länge ist. Dadurch kann sich eine überwiegend homogene einfache Scherung einstellen und die inhomogenen Randeffekte, die durch die Ausbauchungen an beiden Enden der Scherzone sichtbar werden, haben einen nur geringen Einfluss auf die Versuchsergebnisse (Bouvier et al., 2006b). Die Scherversuche werden mit einer konstanten Scherrate von $1,8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ durchgeführt, wobei zwei unterschiedliche Lastpfade vorgegeben werden. Während bei dem einen Lastpfad die Proben bis zu einer Scherzahl von $0,8$ monoton belastet werden, kommt es bei dem anderen Lastpfad zu einer Lastumkehr nach dem Erreichen einer Scherzahl von $0,3$. Diese entgegengesetzte Scherung wird dann bis zu einer Scherzahl von $-0,6$ fortgesetzt.

Für jede der 7 Orientierungen werden 2 bis 3 monotone und zyklische Versuche durchgeführt.

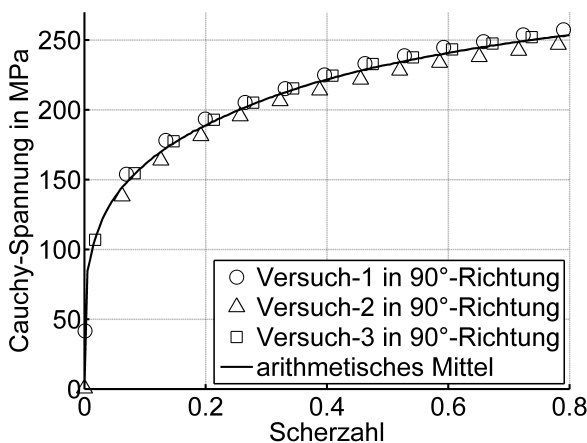


Abbildung 3.6: Scherzahl-Spannungskurven für die drei monotonen Scherversuche in 90° -Richtung und deren Mittel

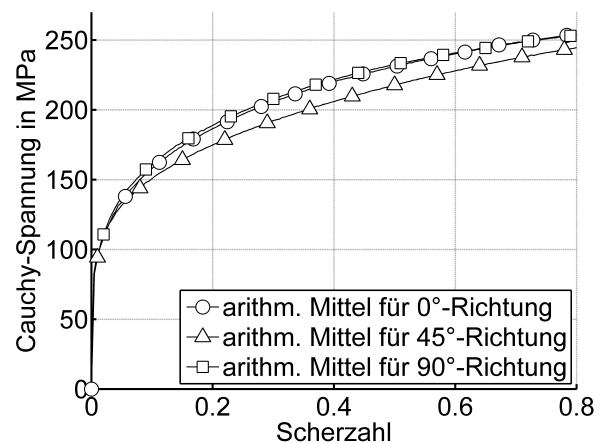


Abbildung 3.7: Vergleich der gemittelten Scherzahl-Spannungskurven für die Versuche in 0° , 45° und 90° -Richtung

Unter der Annahme einer homogenen Scherdeformation kann für jeden dieser Versuche eine Scherzahl-Spannungskurve ermittelt werden. In Abbildung 3.6 sind exemplarisch die Ergebnisse für die drei monotonen Versuche in 90° -Richtung dargestellt. Bei diesem Vergleich ist eine nur geringe Abweichung zwischen den drei Kurven zu erkennen, was auf eine hohe experimentelle Verlässlichkeit dieser Versuche schließen lässt. Um eine bessere Vergleichbarkeit mit den numerischen Ergebnissen zu erreichen, werden aus allen Scherzahl-Spannungskurven für Proben gleicher Orientierung die arithmetischen Mittel berechnet. Vergleicht man die gemittelten Scherzahl-Spannungskurven so wird deutlich, dass sich diese nur in einem geringen Maße voneinander unterscheiden. Der größte Unterschied besteht dabei zwischen dem Versuch in 45° -Richtung und den Versuchen in Walz- bzw. Querrichtung (Abbildung 3.7). Die Kurven der Versuche für die anderen vier Orientierungen befinden sich zwischen den drei dargestellten Kurven. Somit kann für das untersuchte Material der Einfluss der Textur auf die Scherzahl-Spannungskurven als gering eingeschätzt werden. Ein Vergleich von Abbildung 3.6 und 3.7 macht sogar deutlich, dass der Textureinfluss nur leicht über der experimentellen Streuung liegt.

Auch bei den zyklischen Versuchen bleibt nach der Lastumkehr der Textureinfluss auf die Scherzahl-Spannungskurven gering. Somit wird in Abbildung 3.8 aus Gründen der Übersichtlichkeit ausschließlich die gemittelte Kurve der 75° -Versuche dargestellt. Eine auffällige Besonderheit der zyklischen Versuche ist die kurzzeitige Stagnation der Verfestigung in einem kleinen Bereich kurz nach der Lastumkehr. Hier zeigt die Scherzahl-Spannungskurve ein Plateau welches um so ausgeprägter ist, je größer die Vorbelastung war (Bouvier et al., 2006a). Nach Nesterova et al. (2001) kann dieser Effekt auf die Auflösung der Versetzungsmikrostruktur, welche sich während der anfänglichen Belastung bildet, zurückgeführt werden.

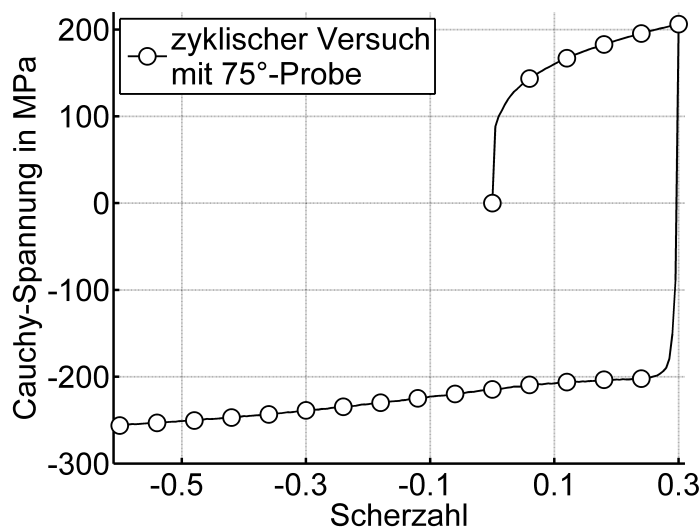


Abbildung 3.8: Gemittelte Scherzahl-Spannungskurve für die zyklischen Scherversuche mit einer Probenorientierung von 75°

3.1.4 Zugversuche

Anders als bei den Scherversuchen, werden die Zugversuche⁵ für nur drei unterschiedlich orientierte Proben durchgeführt. Dazu werden Zugproben in 0°, 45°- und 90°-Richtung bezüglich der Walzrichtung aus dem gewalzten Blech entnommen. Die für die Messung relevante Länge der Probe beträgt 80 mm und die Breite ist mit 20 mm angegeben. Bis zu einer Dehnung von 0.02 wird der Versuch mit einer Dehnrage von 10^{-3} s^{-1} durchgeführt. Danach kommt es zu einer allmählichen Erhöhung der Dehnrage bis zu $4 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. Dabei werden neben der Zugkraft und der Längenänderung in Zugrichtung, zusätzlich noch die Breitenänderung der Probe kontinuierlich während des Versuchs aufgezeichnet. Aus diesen Daten lassen sich zum Einen die Spannungs-Dehnungskurven und zum Anderen die R-Werte bestimmen. Für den DC04-Stahl können diese Versuche bis zu einer logarithmischen Dehnung von 0,25 als homogen ausgewertet werden, bevor es zu Einschnürungen der Probe kommt. Ähnlich wie

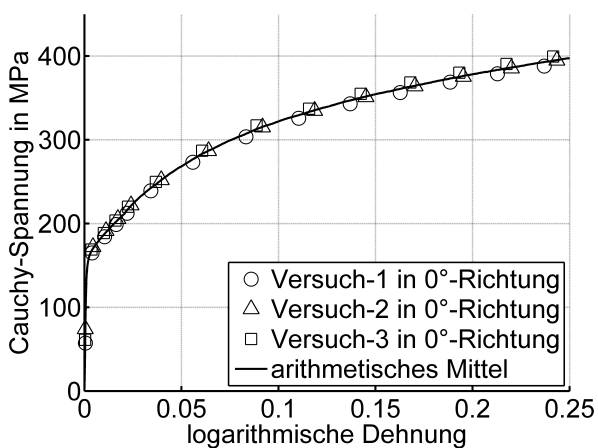


Abbildung 3.9: Berechnung des arithmetischen Mittels aller Zugversuche in 90°-Richtung

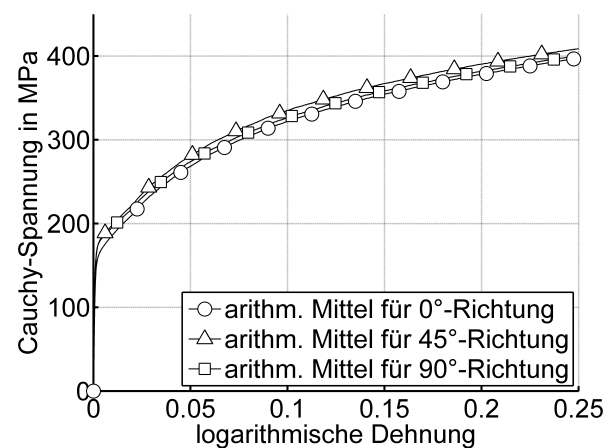


Abbildung 3.10: Vergleich der gemittelten Spannungs-Dehnungskurven für die Versuche in 0°, 45° und 90°-Richtung

bei den Scherversuchen, zeichnen sich die Zugversuche durch eine hohe experimentelle Reproduzierbarkeit aus (Abbildung 3.9). Der Textureinfluss auf die Spannungs-Dehnungskurven ist relativ gering (Abbildung 3.10). Die Berechnung der R-Werte erfolgt nach der klassischen Beziehung (Lankford et al., 1950)

$$R = \frac{\ln\left(\frac{b_0}{b}\right)}{\ln\left(\frac{l b}{l_0 b_0}\right)} \quad (3.1)$$

Darin sind l und b die aktuelle, bzw. l_0 und b_0 die anfängliche Länge und Breite der Probe. Der R-Wert gibt demnach das Verhältnis von Breiten- zur Dickenreduktion der Zugprobe an und ist ein äußerst sensibler Indikator zur Untersuchung des Textureinflusses auf das

⁵Die Zugversuchsdaten wurden von der INPRO Berlin zur Verfügung gestellt.

Materialverhalten. In Abbildung 3.11 sind die R-Werte der 0°- und 90°-Versuche über der Dehnung dargestellt. Auch für die R-Werte ist die experimentelle Streuung gering. Nur der erste 0°-Versuch weist eine leicht erhöhte Abweichung auf. Bis auf den elastischen Bereich stellen sich für alle Versuche konstante R-Werte ein, wobei deren Ermittlung bis zu einer Dehnung von rund 0,18 möglich gewesen ist. Vergleicht man die gemittelten R-Werte für die verschiedenen Zugrichtungen ($R_0 = 1,74$, $R_{45} = 1,55$, $R_{90} = 2,22$), so zeigt sich ein deutlich anisotropes Materialverhalten.

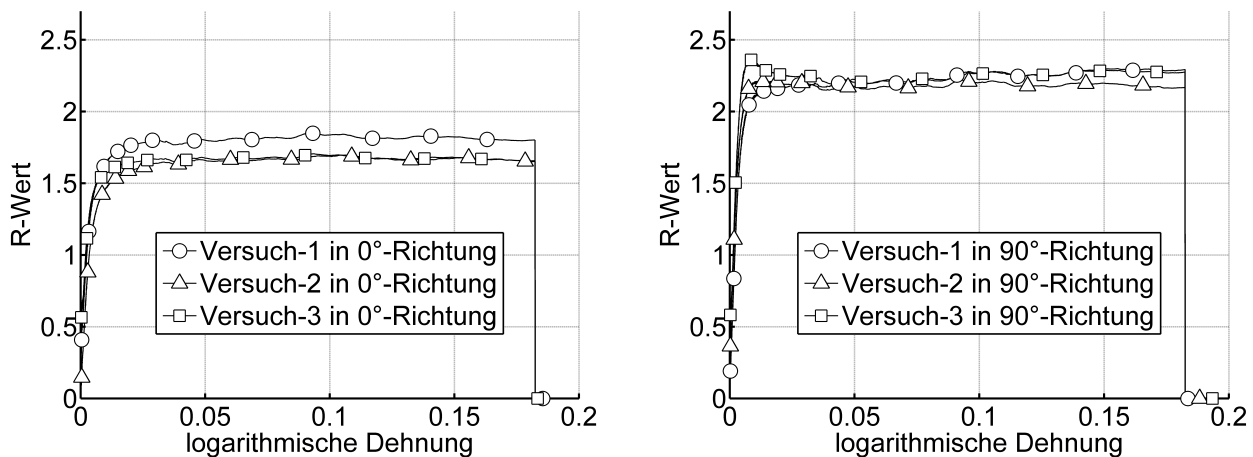


Abbildung 3.11: Experimentell bestimmte R-Wert-Verläufe für die Zugversuche mit 0° und 90° orientierten Proben

3.2 Vorauswahl verschiedener Materialparameter

3.2.1 Notwendigkeit der Vorauswahl von Modellparametern

Wie bereits in Abschnitt 2.7.1 erwähnt wird, können die Informationen, die in den experimentellen Daten enthalten sind, unvollständig sein (Mahnken, 1996) und somit eine inverse Identifikation erschweren oder sogar verfälschen. Die Ursachen dafür sind vielfältig. So werden beispielsweise in bestimmten Experimenten immer nur einige Mechanismen des Materials aktiviert. Demnach wird es nicht möglich sein, kinematische Verfestigung an Spannungs-Dehnungskurven eines monotonen Versuchs anzupassen oder eine Dehnratensensitivität anhand von Versuchen zu ermitteln, die mit konstanten Dehnraten durchgeführt werden. Bei der Identifikation von Mikromodellen besteht weiterhin die Schwierigkeit, dass die mit Hilfe von makroskopischen Versuchen gemessenen Daten nur noch das gemittelte Materialverhalten repräsentieren, was ebenfalls einen Verlust von Information bedeutet.

Damit trotz fehlender experimenteller Informationen dennoch eine stabile Identifikation durchgeführt werden kann, ist eine Vorauswahl der nicht zu identifizierenden Parameter erforderlich. Für das hier verwendete kristallplastische Modell müssen die elastischen Kon-

stanten, die Parameter des viskosen Ansatzes und die Gleitsysteme im Voraus festgelegt werden. Auf welcher Grundlage diese Vorauswahl erfolgt und wie verlässlich diese ist, wird in den folgenden Abschnitten diskutiert.

3.2.2 Auswahl der elastischen Konstanten

In einer ersten Näherung können die einkristallinen elastischen Konstanten des DC04-Stahls durch die an Eisen-Einkristallen (Tabelle 3.2) gemessenen Werte approximiert werden. Diese Werte sind bereits mehrmalig ermittelt worden, und da all diese Messungen bis auf geringe Schwankungen die gleichen Ergebnisse liefern (Kim und Johnson, 2007), können diese als sehr zuverlässig angenommen werden. Um den Fehler, der bei dieser ersten Näherung auftritt, zu quantifizieren und um eventuell eine bessere Näherung für die einkristallinen elastischen Konstanten des DC04-Stahls zu erhalten, wird im Folgenden der Einfluss des Kohlenstoffgehalts auf die elastischen Eigenschaften diskutiert und zusätzlich die durch Messungen und Berechnungen ermittelten polykristallinen Elastizitätsmoduln verglichen.

Der Einfluss des Kohlenstoffgehalts auf die elastischen Eigenschaften eines Stahls hängt stark von der Löslichkeit des Kohlenstoffs in der ferritischen Phase ab. Nach Ledbetter (2010) bewirken die in der ferritischen Phase gelösten Kohlenstoffatome eine Reduktion der Steifigkeit. Da bei Raumtemperatur die Löslichkeit von Kohlenstoff in Eisen aber sehr gering ist ($< 0,02 \text{ Gew. } \%$), kommt es zur Ausscheidung von Zementit, welches in lamellarer Form in der perlitischen Phase zu finden ist. In experimentellen Messungen von Ledbetter (2010) wird gezeigt, dass die Steifigkeit von Zementit ungefähr 10 % über der von reinem Eisen liegt. Aus diesen Ergebnissen lässt sich schlussfolgern, dass sich der DC04-Stahl aus zwei Phasen zusammensetzt, die sich deutlich in ihrer Steifigkeit unterscheiden und der polykristalline Elastizitätsmodul von dem Mengenverhältnis dieser beiden Phasen abhängen wird. Da der Stahl hauptsächlich aus der ferritischen Phase besteht und das Perlit nur punktuell zu finden ist (Abbildung 3.1), müsste die Verwendung der elastischen Konstanten des reinen Eisens im Berechnungsmodell zu einer Überschätzung der polykristallinen Elastizitätsmoduln führen. In wie weit die einkristalline elastische Anisotropie von dem Kohlenstoffgehalt beeinflusst wird, kann an dieser Stelle nicht geklärt werden.

Zur Ermittlung des polykristallinen Elastizitätsmoduls des DC04-Stahls, der texturbedingt auch eine Richtungsabhängigkeit aufweist, wird hier auf zwei verschiedene Quellen zurückgegriffen. Zum Einen stehen die Versuchsdaten von Evertz et al. (2004) zur Verfügung, und zum Anderen können die Elastizitätsmoduln auch anhand der in Abschnitt 3.1.4 beschriebenen Zugversuche bestimmt werden. In beiden Fällen wird der Elastizitätsmodul in drei verschiedene Richtungen (0° , 45° , 90°) mit Bezug auf die Walzrichtung angegeben (Tabelle 3.3). Der Unterschied zwischen den experimentellen Werten beider Quellen beträgt bis zu 10 %. Da die in Abschnitt 3.1.4 vorgestellten Zugversuche vorwiegend zur Bestimmung der plastischen Eigenschaften optimiert sind und nur eine einfache graphische Auswertung erfolgt, werden im Weiteren die von Evertz et al. (2004) ermittelten Elastizitätsmoduln als experimentelle Vergleichsgrößen verwendet.

Die Berechnung der polykristallinen Elastizitätsmoduln wird unter Einsatz des in Abschnitt

2.6.3 vorgestellten RVEs realisiert. Die Walztextur des Stahls wird über einen Satz von 2000 Orientierungen (Abschnitt 3.1.2) im Modell berücksichtigt. Ein Vergleich der experimentellen und numerischen Werte zeigt, dass bei der Verwendung der elastischen Konstanten von reinem Eisen die polykristalline Elastizitätsmoduln überschätzt werden. Aus diesem Grund werden die elastischen Konstanten des Eisens um 10 % reduziert (Tabelle 3.2), wodurch sich eine bessere Übereinstimmung zwischen Experiment und Berechnung ergibt (Tabelle 3.3).

Tabelle 3.2: Einkristalline elastische Konstanten für reines Eisen (Kim und Johnson, 2007) und eine Schätzung für den untersuchten Stahl in GPa

	K_{1111}	K_{1122}	K_{1212}
ElaKonst-I	230	135	117
ElaKonst-II	207	121	105

ElaKonst-I: elastische Konstanten des reinen Eisens

ElaKonst-II: elastische Konstanten des reinen Eisens um 10% reduziert

Tabelle 3.3: Gemessene und berechnete polykristalline Elastizitätsmoduln in 0°, 45°- und 90°-Richtung für das DC04-Blech in GPa

Quelle	0°	45°	90°
Evertz et al. (2004)	202	220	204
Zugversuche	184	197	209
RVE-Rechnung (mit ElaKonst-I)	225	233	230
RVE-Rechnung (mit ElaKonst-II)	201	209	206

3.2.3 Festlegung der Gleitsysteme

Mit der Diskussion in Abschnitt 2.4.1 ist deutlich geworden, dass es im Fall von krz-Materialien nicht möglich ist, eine eindeutige Vorauswahl der Gleitebenen zu treffen. Da diese auch nicht experimentell ermittelt worden sind, wird für den in dieser Arbeit untersuchten Stahl angenommen, dass die Gleitung auf den Gleitsystemen vom Typ $\{110\}\langle 111 \rangle$ und $\{112\}\langle 111 \rangle$ stattfindet (Tabelle 3.4).

3.2.4 Wahl der Parameter des viskosen Ansatzes

Der in dieser Arbeit verwendete empirische Ansatz (Gleichung 2.16) zur Berechnung der Scherraten dient in erster Linie zur Vermeidung des Taylor-Problems (Taylor, 1938). Die damit verbundene Einführung einer Dehnratenabhängigkeit des Materialmodells wird hier nicht benötigt, da alle Experimente in einem schmalen Dehnratenbereich von ungefähr 10^{-4} s^{-1} bis 10^{-2} s^{-1} durchgeführt werden.

Mit der Verwendung eines sehr kleinen Dehnraten sensitivitätsexponenten $m < 0.01$ ist es prinzipiell möglich, diese Dehnratenabhängigkeit des Materialmodells weitgehend zu unterdrücken. Dadurch besitzt auch die Referenzscherrate einen nur noch geringfügigen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse (Abbildung 2.16). Allerdings ist diese Vorgehensweise oftmals

Tabelle 3.4: Auflistung der $\{110\}\langle 111\rangle$ - und $\{112\}\langle 111\rangle$ -Gleitsysteme nach Kothari und Anand (1998)

α	$\sqrt{2} \tilde{n}_\alpha$	$\sqrt{3} \tilde{d}^\alpha$	α	$\sqrt{6} \tilde{n}_\alpha$	$\sqrt{3} \tilde{d}^\alpha$
1	(110)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	13	(21 $\bar{1}$)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
2	(011)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	14	(112)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
3	(110)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	15	($\bar{1}$ 12)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
4	(011)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	16	(1 $\bar{1}$ 2)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
5	(0 $\bar{1}$ 1)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	17	($\bar{1}$ 2 $\bar{1}$)	[111]
6	(101)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	18	(121)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
7	(101)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	19	($\bar{1}$ 21)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
8	($\bar{1}$ 10)	[111]	20	(11 $\bar{2}$)	[111]
9	($\bar{1}$ 10)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	21	(12 $\bar{1}$)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
10	($\bar{1}$ 01)	[111]	22	(211)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
11	($\bar{1}$ 01)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	23	($\bar{2}$ 11)	[111]
12	(0 $\bar{1}$ 1)	[111]	24	(2 $\bar{1}$ 1)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$

mit erheblichen numerischen Schwierigkeiten verbunden und wird aus diesem Grund nicht angewendet.

Stattdessen soll der Dehnratensensitivitätsexponent anhand von Literaturquellen auf einen möglichst realistischen Wert eingestellt werden. Bei dieser Vorgehensweise erweist es sich wiederum als problematisch, die Referenzscherrate $\dot{\gamma}_0$ zu bestimmen, welche ebenfalls einen Einfluss auf die Dehnratensensitivität des Materialmodells hat (Abbildung 3.14). Wie in den meisten anderen Arbeiten (Hutchinson, 1976; Nemat-Nasser und Obata, 1986; Kalidindi et al., 1992; Boyce et al., 2006), die den empirischen Ansatz (Gleichung 2.16) verwenden, wird deshalb aus Mangel an dehnratenabhängigen experimentellen Daten die Referenzscherrate auf einen beliebigen Wert festgelegt (hier $\dot{\gamma}_0 = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$).

Zur Bestimmung des Dehnratensensitivitätsexponenten werden Versuche mit polykristallinen Materialien bei verschiedenen Dehnraten durchgeführt. Das daraus resultierende Verhältnis von Spannungsänderung zu Dehnratenänderung ist ein Maß für die Dehnratensensitivität des Materials. Für schmale Dehnratenbereiche kann der lineare Zusammenhang

$$m = \frac{\partial \log(\sigma)}{\partial \log(\dot{\epsilon})} \quad (3.2)$$

angenommen werden. In Bleck und Schael (2000) und Bleck et al. (2004) werden die Ergebnisse von Zugversuchen mit DC04-Proben bei Dehnraten zwischen $5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ und $2 \cdot 10^2 \text{ s}^{-1}$ ausgewertet. Als zu vergleichende Spannungswerte werden zum Einen die Fließgrenze $R_{p0,2}$ und zum Anderen die Festigkeitsgrenze R_m ermittelt. Die Ergebnisse für diese Versuche bei Raumtemperatur sind in Abbildung 3.12 dargestellt. Man erkennt, dass die Dehnratensensitivität deutlich davon abhängt, welche Spannungswerte zur Auswertung verwendet werden. Auf Grund dieser erheblichen Streuung und des Umstandes, dass die untersuchten Dehnraten äußerst hoch sind, werden zusätzlich noch die Ergebnisse von Rusinek et al.

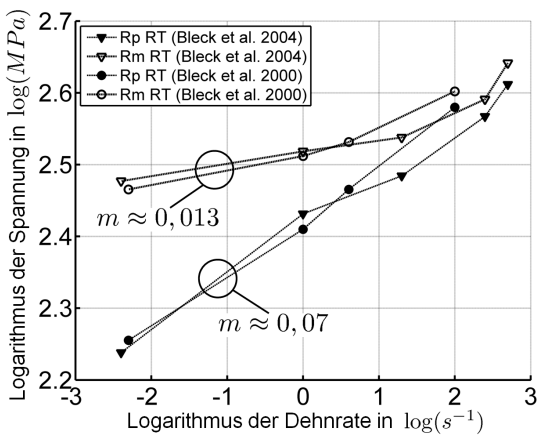


Abbildung 3.12: Bestimmung des Dehnratensensitivitätsexponenten für DC04 (Bleck et al. (2004); Bleck und Schael (2000))

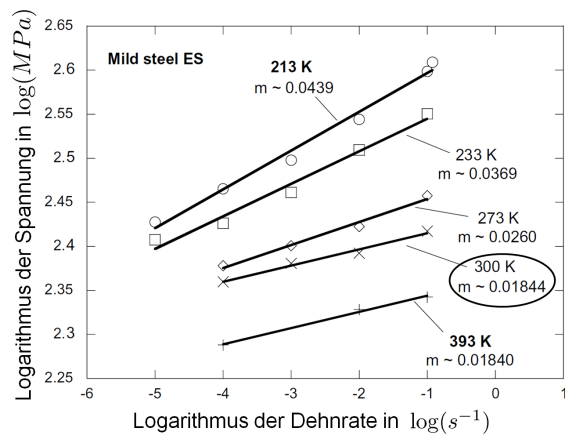


Abbildung 3.13: Bestimmung des Dehnratensensitivitätsexponenten für einen Baustahl (Rusinek et al. (2007))

(2007) ausgewertet. Bei Rusinek et al. (2007) wird ein Baustahl (*mild steel ES*) untersucht, dessen chemische Zusammensetzung weitgehend der des DC04-Stahls entspricht. Da die chemische Zusammensetzung beider Stähle ähnlich ist, wird auch die Dehnratensensitivität als vergleichbar angenommen. Zudem weist der untersuchte Dehnratenbereich eine größere Relevanz für diese Arbeit auf (Abbildung 3.13). Nach Auswertung dieser Literaturquellen wird der Dehnratensensitivitätsexponent für den DC04-Stahl mit $m = 0.02$ abgeschätzt.

Wie in Kalidindi et al. (1992), so wird auch hier der am polykristallinen Material ermittelte Dehnratensensitivitätsexponent direkt in dem zur Beschreibung des Einkristallverhaltens aufgestellten viskosen Ansatz verwendet. Diese einfache Übertragung von der polykristallinen Ebene auf die einkristalline Ebene wird von Roters (2004, S.566) im Allgemeinen als nicht möglich eingeschätzt. Für das hier verwendete Materialmodell konnte allerdings anhand von Zugversuchssimulationen bei verschiedenen Dehnraten gezeigt werden, dass der polykristalline und der einkristalline Dehnratensensitivitätsexponent sich um weniger als 1% voneinander unterscheiden.

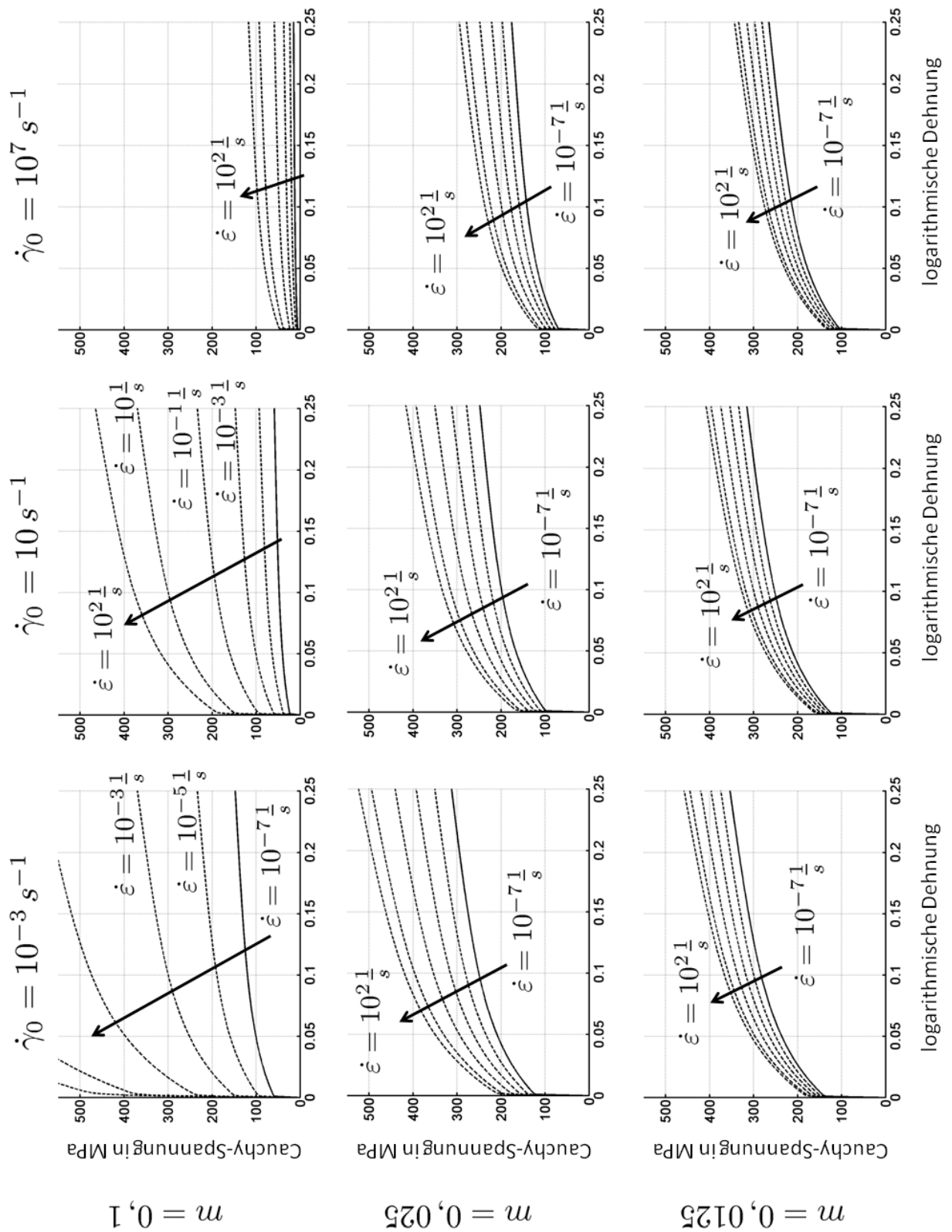


Abbildung 3.14: Dehnratensensitivität der Spannungs-Dehnungskurven in Abhängigkeit vom Dehnratensensitivitätsexponenten m und der Referenzscherrate $\dot{\gamma}_0$ (Simulation: Zugversuch mit Taylor-Modell)

3.3 Identifikation der Verfestigungsparameter von Verfestigungsregel I und II anhand der Scherversuche in Walzrichtung

3.3.1 Beschreibung des allgemeinen Vorgehens

Die Anpassung der Parameter von Verfestigungsregel I (Gleichung 2.20) und II (Gleichungen 2.21 und 2.22) erfolgt anhand der Scherzahl-Spannungskurven des monotonen und des zyklischen Scherversuchs in Walzrichtung. Während es für die erste Verfestigungsregel genügt den monotonen Versuch auszuwerten, werden für die zweite Verfestigungsregel die Daten beider Versuche benötigt.

Die Modellierung der Scherversuche erfolgt mit Hilfe eines einzelnen Hexaederelements unter Verwendung des FE-Programms Abaqus und des implementierten Taylor-Modells. Durch Vorgabe der entsprechenden Verschiebungs- und Krafttrandbedingungen wird dieses Element einer einfachen Scherung (Bertram, 2008, S.113) unterzogen. Dabei beträgt die Scherrate konstant $1,8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. In der Berechnung werden 2000 Kristallite berücksichtigt, deren Anfangsorientierung aus der Approximation der gemessenen Polfiguren stammt (Abbildung 3.3).

Tabelle 3.5: Durch Vorauswahl festgelegte Materialparameter (siehe Abschnitt 3.2)

Gleitsysteme $\tilde{\mathbf{n}}_\alpha, \tilde{\mathbf{d}}^\alpha$	$\{110\}\langle 111 \rangle$ $\{112\}\langle 111 \rangle$
Anzahl der Kristallite	2000
viskose Parameter	$\dot{\gamma}_0 = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ $m = 0,02$
elastische Konstanten in GPa	$K_{1111} = 207$ $K_{1122} = 121$ $K_{1212} = 105$

Alle weiteren Materialparameter, die für die Berechnung benötigt werden, sind in Tabelle 3.5 zusammengefasst. Die Anpassung erfolgt mit Hilfe der freien Software MinPack (Moré et al., 1984), worin das in Abschnitt 2.7.2 vorgestellte Levenberg-Marquadt Verfahren genutzt wird. Zur Bildung der Zielfunktion (Gleichung 2.33) wird ein Vektor erzeugt der die Differenzen der experimentellen und numerischen Schubspannungswerte enthält. Damit ergibt sich für die Zielfunktion die Form

$$\Psi = \sum_i^k (T_{12}^{exp}(\gamma_i) - T_{12}^{sim}(\gamma_i))^2 \quad . \quad (3.3)$$

Die Spannungsdifferenzen werden für den gesamten Versuch an äquidistanten Scherzahlwerten γ_i gebildet. Um Probleme mit extremalen bzw. physikalisch unzulässigen Parametern

zu vermeiden, wird zu Beginn der Optimierung der Lösungsbereich eingeschränkt. Dieser eingeschränkte Bereich wird als Vertrauensintervall bezeichnet und beruht überwiegend auf Erfahrungswerten, welche anhand von Literaturstudien und im Vorfeld durchgeführter Berechnungen erarbeitet werden konnten. Ermittelt das Optimierungsprogramm Parameter, die nicht im Vertrauensintervall liegen, wird die Berechnung des Scherversuchs umgangen. An Stelle des Fehlervektors wird dann ein fiktiver Vektor, welcher einen hohen Abstand zwischen Experiment und Berechnung suggeriert, an das Optimierungsprogramm übergeben.

3.3.2 Identifikation unter Nutzung der monotonen Scherversuche

Für Verfestigungsregel I müssen 4 Parameter identifiziert werden. Das für diese Parameter gewählte Vertrauensintervall ist in Tabelle 3.6 dargestellt. Die Scherzahl-Spannungskurve

Tabelle 3.6: Vertrauensintervall der Verfestigungsparameter von Verfestigungsregel I in *MPa*

Parameter	τ_{k0}	τ_{ks}	θ_0	θ_∞
Intervall	70 ± 50	170 ± 130	800 ± 400	$102,5 \pm 97,5$

wird durch 201 Wertepaare repräsentiert, wobei der Abstand der Scherzahlwerte äquidistant ist und somit $4 \cdot 10^{-3}$ beträgt. Exemplarisch werden 4 Optimierungen mit verschiedenen Startwerten für die Verfestigungsparameter durchgeführt. Dabei beinhalten die 4 Startwertsätze immer solche Parameter, die am Rand des jeweiligen Vertrauensintervalls liegen. Die Ergebnisse aller 4 Optimierungen sind in Tabelle 3.7 zusammengefasst. Es lässt sich erkennen, dass der Algorithmus unabhängig von den verschiedenen Startwertsätzen immer dasselbe Minimum findet. Dieses kann als Indiz dafür gewertet werden, dass es sich bei dem ermit-

Tabelle 3.7: Optimierungsergebnisse für verschiedene Sätze von Startwerten für die Materialparameter τ_{k0} , τ_{ks} , θ_0 , θ_∞ in *MPa*; Zielfunktionswert Ψ ; Anzahl der Iterationen n

	Satz 1		Satz 2		Satz 3		Satz 4	
	Start	Optim.	Start	Optim.	Start	Optim.	Start	Optim.
τ_{k0}	20	57,5	120	57,5	20	57,4	120	57,4
τ_{ks}	40	115	300	115	40	115	300	115
θ_0	400	801	1200	802	1200	805	400	803
θ_∞	5	42,4	200	42,4	200	42,5	5	42,5
Ψ	$9 \cdot 10^6$	$3 \cdot 10^3$	$7 \cdot 10^7$	$3 \cdot 10^3$	$3 \cdot 10^6$	$3 \cdot 10^3$	$7 \cdot 10^6$	$3 \cdot 10^3$
n	-	5	-	5	-	8	-	12

telten Parametersatz um ein globales Minimum handelt. Die relativ großen Zielfunktionswerte im Optimum können durch die hohen Spannungsdifferenzen im Anfangsbereich der Scherzahl-Spannungskurve erklärt werden. Da hier, nahe dem elastischen Bereich, ein sehr

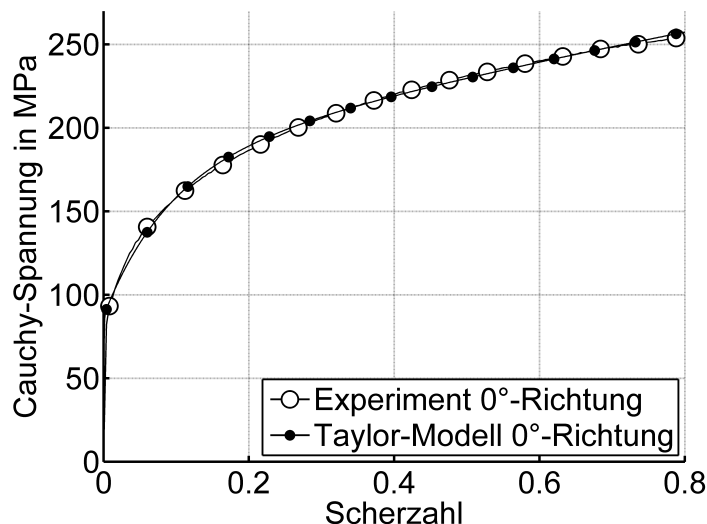


Abbildung 3.15: Angepasste Scherzahl-Spannungskurve für den Scherversuch in Walzrichtung

steiler Anstieg der Kurve vorhanden ist, liegen die Differenzen zwischen 10 – 20 MPa. Vergleicht man die experimentelle und die angepasste Scherzahl-Spannungskurve in Abbildung 3.15, so lässt sich schlussfolgern, dass die erste Verfestigungsregel prinzipiell in der Lage ist, das Verfestigungsverhalten des DC04-Stahls wiederzugeben. Die Auswertung der Korrelationsmatrix (Tabelle 3.8) erfolgt nach den Kriterien, die in Abschnitt 2.7.3 angegeben sind. Demzufolge werden keine Probleme für die durchgeführte Optimierung angezeigt. Lediglich die beiden Parameter τ_{ks} und θ_∞ besitzen eine hohe Abhängigkeit voneinander. Somit werden die identifizierten Verfestigungsparameter als sehr zuverlässig angesehen.

Tabelle 3.8: Korrelationsmatrix für die Identifikation der 4 Verfestigungsparameter von Verfestigungsregel I

	τ_{k0}	τ_{ks}	θ_0	θ_∞
τ_{k0}	1.00	0.38	-0.70	-0.34
τ_{ks}		1.00	-0.77	-0.98
θ_0			1.00	0.71
θ_∞				1.00

3.3.3 Identifikation unter Nutzung der monotonen und zyklischen Scherversuche

Zur Identifikation der 6 Parameter von Verfestigungsregel II wird zu dem monotonen Scherversuch zusätzlich der zyklische Scherversuch in Walzrichtung verwendet. Die beiden Parameter q_c und q_n kennzeichnen das Verhältnis von Fremd- zur Selbstverfestigung zwischen Gleitsystemen mit gleichen (*coplanar slip systems*) bzw. unterschiedlichen (*non-coplanar slip systems*) Gleitebenen. In Voruntersuchungen hat sich gezeigt, dass eine Unterscheidung von Fremd- und Selbstverfestigung innerhalb des Materialmodells, die Nachbildung des für die zyklischen Versuche typischen Plateaus (Abbildung 3.8) erlaubt. Dies ist bei Verwendung der ersten Verfestigungsregel nicht möglich gewesen. Um das erwähnte Plateau in der Simulation

Tabelle 3.9: Vertrauensintervall der Verfestigungsparameter von Verfestigungsregel II für die ersten 4 Parameter in *MPa*

Parameter	τ_{k0}	a	b	c	q_c	q_n
Intervall	70 ± 50	2000 ± 1500	80 ± 50	30 ± 30	3 ± 2	3 ± 2

korrekt nachzubilden, müssen jedoch für das Verhältnis von Fremd- und Selbstverfestigung relativ hohe Werte eingesetzt werden. Diese übersteigen die normalerweise in der Literatur angegebenen Werte von $q_c = 1,2$ und $q_n = 1,4$ (vgl. Abschnitt 2.4.5). Aus diesem Grund wird den beiden Parametern q_c und q_n auch ein relativ großes Vertrauensintervall zugewiesen (Tabelle 3.9). Wie schon bei Verfestigungsregel I, so wird auch hier die Anpassung für

Tabelle 3.10: Optimierungsergebnisse für verschiedene Sätze von Startwerten für die Materialparameter τ_{k0} , a , b , c , q_c , q_n (für die ersten 4 Parameter in *MPa*), Zielfunktionswert Ψ , Anzahl der Iterationen n

	Satz 1		Satz 2		Satz 3		Satz 4	
	Start	Optim.	Start	Optim.	Start	Optim.	Start	Optim.
τ_{k0}	50	44,3	40	46,3	120	50,6	60	44,2
a	900	1504	500	1071	3500	1033	2000	1478
b	80	56,4	50	61,9	130	52,9	100	56,3
c	20	0	0	0	60	0	5	0
q_c	1,1	1	1	1,14	4,6	4,45	2	1,1
q_n	1,4	2,7	1	2,56	4,6	4,5	2	2,8
Ψ	10^6	$8 \cdot 10^3$	10^7	$1,1 \cdot 10^4$	10^8	$5 \cdot 10^4$	10^7	$8 \cdot 10^3$
n	-	16	-	34	-	11	-	20

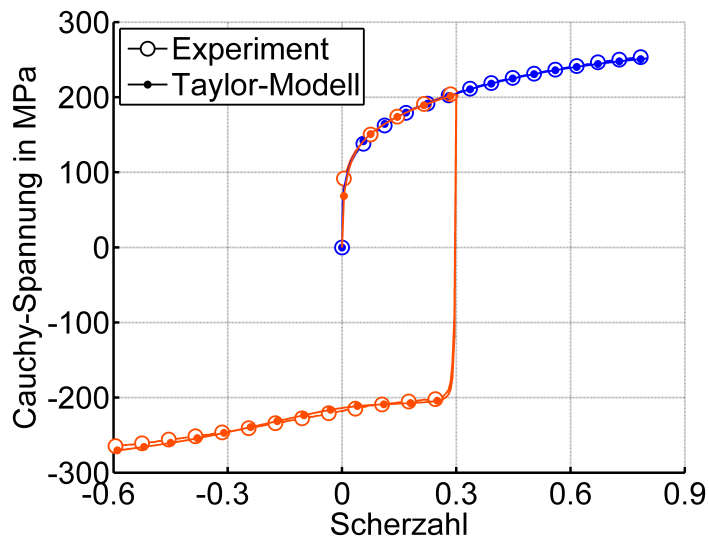


Abbildung 3.16: Angepasste Scherzahl-Spannungskurve für den monotonen und zyklischen Scherversuch in Walzrichtung

vier verschiedene Startwertsätze von Materialparametern durchgeführt. Die Ergebnisse dieser vier Identifikationsläufe sind in Tabelle 3.10 zusammengefasst. Darin ist zu erkennen, dass insgesamt vier verschiedene Minima ermittelt werden. Die kleinsten Zielfunktionswerte ergeben sich für die Identifikation mit dem ersten und dem vierten Startwertsatz. Die aus diesen beiden Identifikationsläufen resultierenden Parameter unterscheiden sich allerdings nur unwesentlich voneinander. Alle weiteren Berechnungen werden auf Grund eines geringfügig kleineren Zielfunktionswertes mit den im ersten Identifikationslauf ermittelten Parametern durchgeführt. Vergleicht man die angepassten Kurven des monotonen und zyklischen Scherversuchs mit den experimentell ermittelten Kurven (Abbildung 3.16), so lässt sich eine sehr gute Übereinstimmung feststellen. Dennoch sollte bei der Einschätzung der

Tabelle 3.11: Korrelationsmatrix für die Identifikation der 6 Verfestigungsparameter von Verfestigungsregel II

	τ_{k0}	a	b	c	q_c	q_n
τ_{k0}	1.00	0.54	0.46	-0.01	-0.63	-0.58
a		1.00	0.42	0.04	-0.98	-0.97
b			1.00	-0.12	-0.58	-0.61
c				1.00	-0.01	-0.01
q_c					1.00	1.00
q_n						1.00

Zuverlässigkeit der identifizierten Verfestigungsparameter beachtet werden, dass die Lösung der Optimierung stark von den Startparametern abhängt, eine hohe Anzahl von Optimierungsschritten benötigt wird, und dass die Höhe des ermittelten Verhältnisses von Fremd- zu Selbstverfestigung weit über den experimentell bestätigten Werten liegt. Anhand der Korrelationsmatrix wird weiterhin deutlich, dass eine Unterscheidung der Parameter q_c und q_n keinen Einfluss auf die berechneten Scherzahl-Spannungskurven hat. Demzufolge können q_c und q_n anhand der monotonen und zyklischen Scherversuche nicht als separate Parameter identifiziert werden.

3.4 Parameter- und Modellvalidierung anhand der Scher- und Zugversuche

3.4.1 Vergleich der Scherzahl-Spannungskurven für Scherversuche anderer Orientierungen

In diesem Abschnitt wird überprüft, ob die beiden an die Scherversuche in Walzrichtung angepassten Modelle ebenso in der Lage sind, die Scherversuche mit den anders orientierten Proben wiederzugeben. In Abbildung 3.17 werden dazu die experimentellen und numerischen Scherzahl-Spannungskurven für die monotonen Versuche in 45°- und 90°-Richtung verglichen. Insgesamt kann hier von einer guten Übereinstimmung gesprochen werden. Allerdings wird die Anisotropie des Materialverhaltens in der Berechnung unterschätzt. Während im Anfangsbereich der Scherzahl-Spannungskurve der Unterschied zwischen den 45°- und 90°-Kurven qualitativ wiedergegeben wird, besitzen die berechneten Kurven im hinteren Bereich

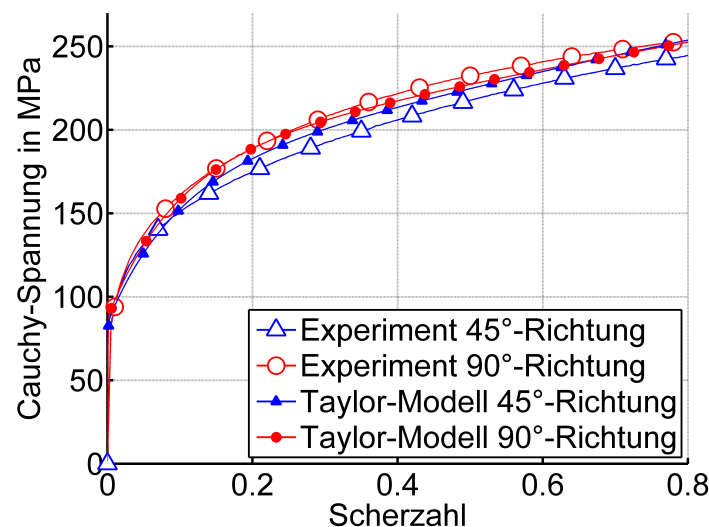


Abbildung 3.17: Vorhergesagte Scherzahl-Spannungskurven für die monotonen Scherversuche in 45°- und 90°-Richtung

einen fast identischen Verlauf. Es wird vermutet, dass diese Abweichungen hauptsächlich eine Folge der einfachen Taylor-Homogenisierung sind. Da das Taylor-Modell die Texturentwicklung überschätzt, könnte das augenscheinlich isotrope Verhalten die Folge einer bereits einheitlichen Schertextur sein. Auch mit der zweiten Verfestigungsregel können die Scherversuche an Proben mit anderen Orientierungen gut wiedergegeben werden. Als Beispiel ist in Abbildung 3.18 der Vergleich zwischen den berechneten und gemessenen Scherzahl-Spannungskurven für den monotonen und zyklischen Versuch in 75°-Richtung dargestellt.

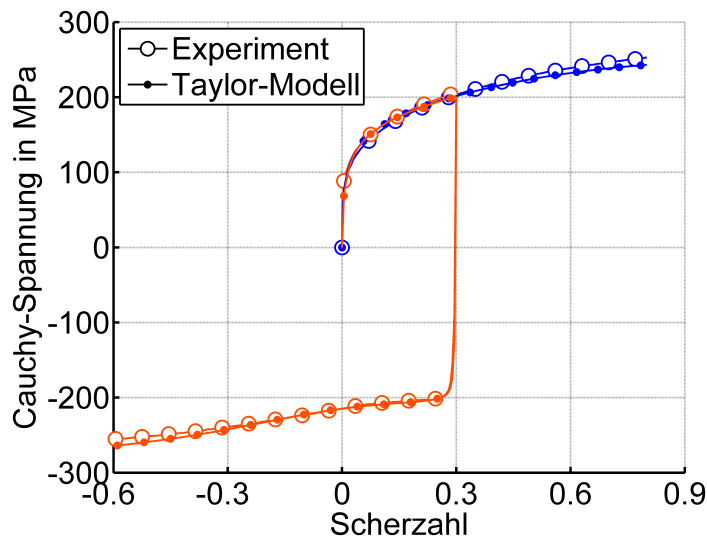


Abbildung 3.18: Vorhersage für den monotonen und zyklischen Scherversuch in 75°-Richtung

3.4.2 Vergleich der Spannungs-Dehnungskurven der Zugversuche

Wie bei den Scherversuchen, erfolgt die Modellierung der Zugversuche mit Hilfe eines einzelnen Hexaederelements unter Verwendung des FE-Programms Abaqus und des implementierten Taylor-Modells. Die Zugversuche werden für beide Verfestigungsregeln simuliert. Als Materialparameter werden diejenigen genutzt, die mit Hilfe der Scherversuche an das plastische Verhalten des DC04-Stahls angepasst werden konnten (Tabellen 3.7 und 3.10). An den 8 Knoten des Hexaederelements werden in Zugrichtung die Verschiebungsrandbedingungen und in die beiden anderen Richtungen die Krafterandbedingungen vorgegeben. Dabei wird senkrecht zur Zugrichtung Kräftefreiheit gefordert. In Zugrichtung werden die Verschiebungen derart vorgegeben, dass sich eine mittlere Dehnrates von $2,5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ einstellt, was allerdings eine leichte Abweichung von den experimentellen Vorgaben bedeutet (vgl. Abschnitt 3.1.4). Ein Vergleich der Spannungs-Dehnungskurven der drei Versuche in 0°, 45°- und 90°-Richtung zeigt, dass die Verwendung der ersten Verfestigungsregel eine bessere Vorhersage der experimentellen Ergebnisse ermöglicht. Beispielhaft ist in Abbildung 3.19 ein

Vergleich der experimentellen und numerischen Spannungs-Dehnungskurven für den Versuch in 45° -Richtung dargestellt. Die schlechteste Vorhersage der Spannungs-Dehnungskurven ergibt sich für den Zugversuch in 0° -Richtung. Hier betragen die Abweichungen zwischen den experimentellen und numerischen Ergebnissen bis zu 5% für Verfestigungsregel I und sogar bis zu 14% für Verfestigungsregel II.

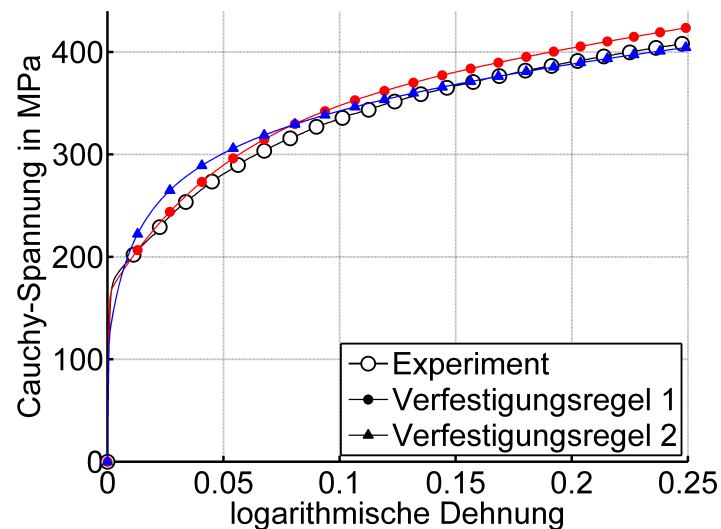


Abbildung 3.19: Vergleich der experimentellen und berechneten Spannungs-Dehnungskurven für den Zugversuch in Diagonalrichtung

3.4.3 Vergleich der R-Werte

Die Berechnung der R-Werte aus den Daten der Zugversuchssimulationen erfolgt direkt über das Verhältnis der logarithmischen Dehnungen in Breitenrichtung der Zugprobe und senkrecht zur Blechebene. Bei einem Vergleich zeigt sich, dass der experimentell beobachtete konstante R-Wert-Verlauf vom Taylor-Modell nicht nachgebildet werden kann. Vielmehr wird ein stetiger Anstieg der R-Werte über den gesamten Prozess vorhergesagt (Abbildung 3.20). Zwar kann durch den Einsatz von Verfestigungsregel II dieser Anstieg etwas reduziert werden, das Problem bleibt aber prinzipiell bestehen. Erst durch Anwendung der RVE-Technik kann hier ein befriedigendes Ergebnis erreicht werden (Abbildung 3.21).

Für die RVE-Simulationen der Zugversuche wird ausschließlich die erste Verfestigungsregel verwendet. Eine Neuanpassung der Verfestigungsparameter ist nicht durchgeführt worden, da im Fall von isotroper Verfestigung von einem geringen Einfluss der Verfestigungsparameter auf die R-Werte ausgegangen werden kann. Viel entscheidender ist der Einfluss der Textur auf die R-Werte, wodurch auch die ansteigenden R-Werte beim Taylor-Modell erklärt werden können. In Abbildung 3.22 werden dazu die $[111]$ -Polfiguren verschiedener Texturen miteinander verglichen. Dabei handelt es sich zum Einen um die Ausgangstextur der 45° -Probe

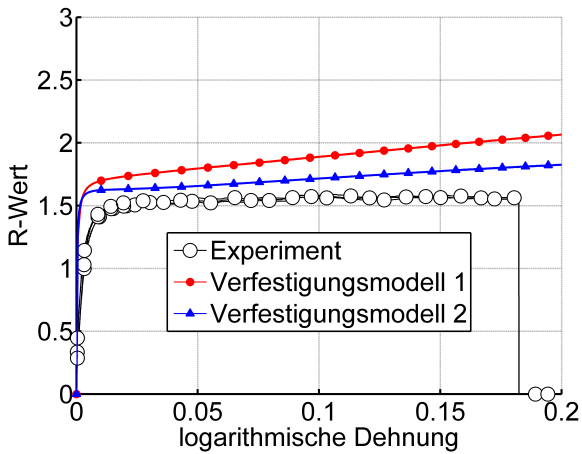


Abbildung 3.20: Mittels Taylor-Modell ermittelte R-Werte für verschiedene Verfestigungsregeln am Beispiel des 45°-Versuchs

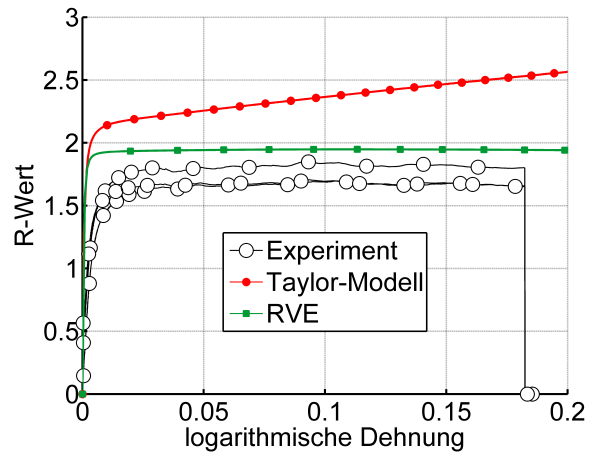


Abbildung 3.21: Verbesserte Vorhersage der R-Werte durch Verwendung der RVE-Technik am Beispiel des 0°-Versuchs

und zum Anderen um die Texturen die mit den verschiedenen Modellen für eine Zugdeformation von 25% berechnet werden. Es zeigt sich, dass es bei der Taylor-Rechnung mit Verfestigungsregel I zu einer Verschärfung der Textur kommt. Dabei erfährt besonders die

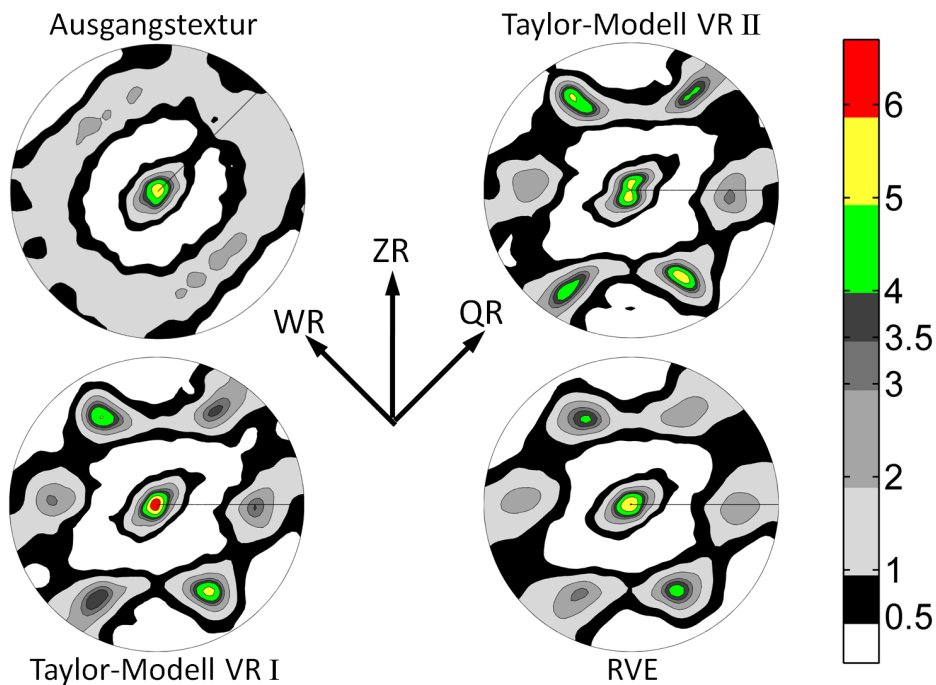


Abbildung 3.22: Vergleich der [111]-Polfiguren für die Ausgangstextur der 45°-Probe und für die berechneten Texturen nach einer Zugdeformation von 25% (WR-Walzrichtung, ZR-Zugrichtung, QR-Querrichtung, VR-Verfestigungsregel)

111-Komponente, welche nach Jongenburger et al. (1974) maßgeblich zu einer Erhöhung der R-Werte beiträgt, eine deutliche Intensivierung. Bei Verwendung des Taylor-Modells in Verbindung mit Verfestigungsregel II, ist diese Entwicklung nicht zu beobachten. Vielmehr reduziert sich die 111-Komponente und es bilden sich zwei neue Maxima in unmittelbarer Nähe zur 111-Komponente heraus. Der Grund dafür ist die hohe latente Verfestigung, die einen Wechsel der aktiven Gleitsysteme erschwert und somit die Texturentwicklung beeinflusst. Eine weitaus geringere Texturentwicklung wird durch die RVE-Rechnung prognostiziert. Man erkennt, dass sich der Bereich um die 111-Komponente im Vergleich zur Ausgangstextur kaum verändert hat. Damit lassen sich auch die konstanten R-Wert-Verläufe erklären.

Abschließend werden noch einmal die gemessenen und berechneten R-Werte über den Probenorientierungen aufgetragen (Abbildung 3.23). Die für das Taylor-Modell eingesetzten R-Werte repräsentieren einen mittleren Wert bei 10% Dehnung. Es ist erkennbar, dass mit den RVE-Rechnungen die Vorhersage der R-Werte verbessert werden konnte und dadurch auch bei den R-Werten eine gute quantitative Übereinstimmung zwischen den experimentellen und numerischen Ergebnissen besteht.

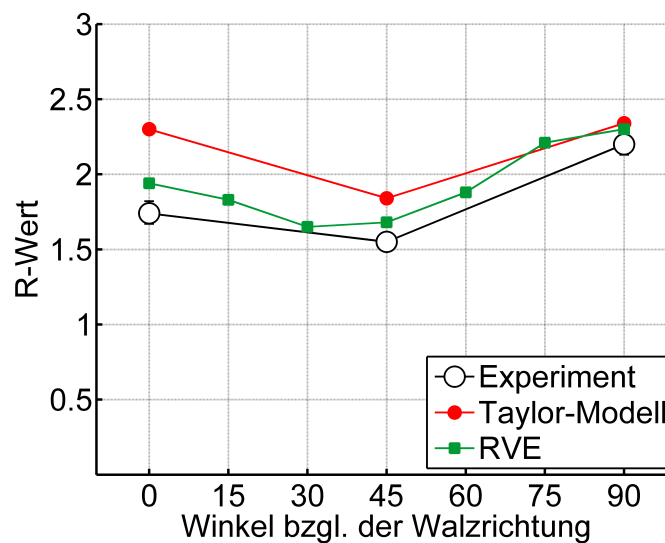


Abbildung 3.23: Vergleich der berechneten und gemessenen R-Werte bezüglich der Probenorientierung (dargestellte Berechnungsergebnisse sind unter Verwendung von Verfestigungsregel I erzeugt worden)

Kapitel 4

Experimentelle und numerische Analyse des Doppelindenterversuchs

4.1 Vorbetrachtungen zum Doppelindenterversuch

Obwohl die klassischen homogenen Zug- und Scherversuche technisch ausgereift sind und sehr verlässliche experimentelle Ergebnisse liefern, ist ihre Verwendung zur Identifikation von Materialparametern bei Modellen der finiten Plastizität nur begrenzt möglich. So werden z. B. bei Umformprozessen plastische Dehnungen erreicht, die signifikant größer sind als jene, die bei homogenen Tests gemessen werden können, bevor es zu Einschnürungen kommt (Kajberg und Lindkvist, 2004). Ebenfalls sind Druckversuche bei Blechen mit geringer Dicke schwierig umzusetzen, da diese zu geometrischer Instabilität neigen und somit schon bei geringen Dehnungen versagen (Kuwabara, 2007). Weiterhin wird der Informationsgehalt der aus homogenen Versuchen ermittelten Daten als zu gering eingeschätzt, um eine verlässliche Identifikation komplexer Materialmodelle zu gewährleisten. Eine Möglichkeit, um die erwähnten Probleme zu umgehen, bietet die Verwendung inhomogener Versuche, welche in zunehmender Zahl vorgeschlagen werden (Cooreman et al., 2008; Kajberg und Lindkvist, 2004; Khalfallah et al., 2002; Kreißig, 1998). Bei inhomogenen Versuchen werden plastische Deformationen erreicht, die vergleichbar mit denen sind, die bei technischen Anwendungen auftreten. Allerdings wäre es unzureichend, bei diesen Versuchen ausschließlich die globalen Verschiebungen und Kräfte zu messen, da diese nur Mittelwerte des lokalen und stark inhomogenen Materialverhaltens darstellen. Um ausreichend Informationen über das Materialverhalten zu erhalten, müssen bei inhomogenen Versuchen noch zusätzliche Messdaten ermittelt werden. Hier bietet sich in erster Linie die Messung von Verschiebungs- und Deformationsfeldern an. Solche Felder können z. B. die Oberflächenverschiebungen oder auch die Kristallorientierungen der deformierten Probe sein.

Im Folgenden soll der Eindringversuch in ein polykristallines Material betrachtet werden. Auf Grund der geringen Dicke der DC04-Bleche kann hier allerdings nicht der klassische Eindringversuch eingesetzt werden, da die Probenunterlage einen nicht vernachlässigbaren Einfluss hätte. Dieses Problem kann jedoch durch die Anwendung des Doppelindenterver-

suchs umgangen werden. Bei diesem Versuch befindet sich eine Blechprobe zwischen zwei gegenüberliegenden koaxial angeordneten Eindringkörpern, wobei die Eindringrichtung senkrecht zur Blechebene liegt. In der Literatur ist dieser Versuch nur wenig dokumentiert. In Quadrini et al. (2007) wird eine experimentelle Studie vorgestellt, bei der der Doppelindenterversuch an Blechen einer Aluminiumlegierung angewendet wird. Die verwendeten Eindringkörper haben eine zylindrische Form mit Durchmessern von 1 und 2 mm, wobei die Zylinderachse in Eindringrichtung orientiert ist. Die Blechdicken variieren zwischen 0,6 und 1,5 mm und die maximale Eindringtiefe beträgt 0,15 mm. Durch die Auswertung der Kraft-Verschiebungskurven kann gezeigt werden, dass die Doppelindenterversuche gut reproduzierbar sind und eine Korrelation mit Zugversuchsdaten des gleichen Materials besteht. In diesem Kapitel werden experimentelle und numerische Untersuchungen zum Doppelindenterversuch präsentiert. Diese umfassen neben den Messungen der Kraft-Verschiebungsdaten auch die Messungen der resultierenden Oberflächenverschiebungen senkrecht zur Blechebene. Mit anschließenden FE-Simulationen des Versuchs und Vergleichen von gemessenen und berechneten Daten sollen die numerische Reproduzierbarkeit überprüft und die maßgeblichen Einflussfaktoren ermittelt werden.

4.2 Experimentelle Untersuchungen

4.2.1 Versuchsaufbau und -durchführung

Die Doppelindenterversuche¹ werden mit einer Zug-Druck-Prüfmaschine (*TIRAtest 2825*) durchgeführt, die für eine Maximallast von bis zu 25 kN ausgelegt ist. Jeder Indenter setzt sich aus jeweils zwei Teilen zusammen, nämlich dem Eindringkörper und einer entsprechenden Haltevorrichtung (Abbildung 4.1). Bei den Haltevorrichtungen für die Eindringkörper handelt es sich um Vorrichtungen, die für herkömmliche Brinell-Eindringversuche verwendet werden. Als Eindringkörper werden Wolframcarbid-Kugeln mit einem Durchmesser von 2,5 mm eingesetzt. Mit Hilfe einer Justiervorrichtung ist es möglich, den unteren Indenter lateral zu verschieben, wodurch die Koaxialität beider Indenter erreicht werden kann. Die Probe, die direkt zwischen den Indentern positioniert wird, besitzt eine rechteckige Form mit der Abmessung 18 × 9 mm, wobei die lange Seite parallel zur Walzrichtung ausgerichtet ist. Ein Teil der Proben wird vor den Versuchen einer Wärmebehandlung unterzogen, welche schon im Abschnitt 3.1.1 beschrieben wird. Dadurch soll eine Möglichkeit geschaffen werden, die Änderung der Materialeigenschaften auf Grund dieser Wärmebehandlung quantitativ zu beurteilen. Die Einspannung der Probe erfolgt ausschließlich durch die Anpresskraft der beiden Eindringkörper. Dazu wird die Probe per Hand zwischen den Eindringkörpern positioniert und der Abstand zwischen beiden Eindringkörpern solange verringert, bis eine Druckkraft von ungefähr 5 N erreicht ist. Als Maß für die Exzentrizität der Indenter wird die Schrägstellung der Blechprobe angesehen. Bezüglich einer im Hintergrund befestigten

¹Die Doppelindenterversuche und die anschließende Messung der Oberflächenverschiebungen wurden von Alexander Aman im Rahmen einer Studienarbeit an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg durchgeführt. Die Betreuung dieser Arbeit oblag Joachim H. Schneibel, Heike Rühle und Thorsten Hoffmann.

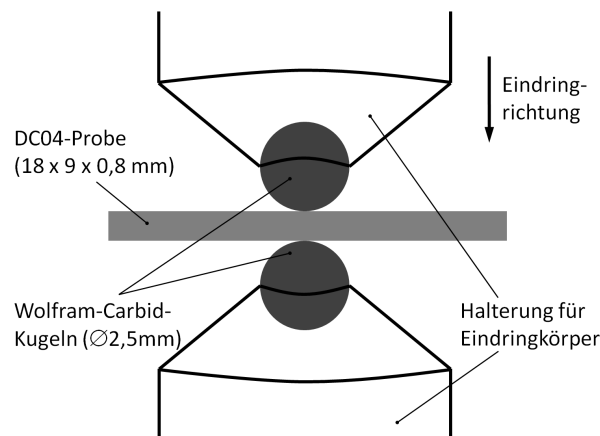


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus für den Doppelindenterversuch

Lehre wird die Position des unteren Indenters so eingestellt, dass sich die Probe in einer horizontalen Lage befindet.

Die Versuche werden weggeregelt mit einer Geschwindigkeit von $0,1 \text{ mm s}^{-1}$ durchgeführt. Als Abbruchkriterium wird eine maximale Verschiebung von $0,4 \text{ mm}$ vorgegeben, was der halben Blechdicke entspricht. Nach dem Erreichen der maximalen Verschiebung, folgt für eine Dauer von 150 s eine Haltephase, bevor die Entlastungsphase beginnt. Leider zeigte sich bei der Mehrzahl der Versuche, dass mit ansteigender Belastung die Quersteifigkeit der Versuchsvorrichtung nicht ausreicht, um die Koaxialität der Eindringkörper zu gewährleisten. Wie in Abbildung 4.2 und 4.3 dargestellt, kann man einen deutlichen Unterschied der Probenschragstellung zu Beginn des Versuchs und unter Maximallast erkennen. Unter Vernachlässigung der Indenter ist die elastische Nachgiebigkeit des Versuchsaufbaus ermittelt worden. Dabei hat sich bis zu einer Last von 4000 N ein nahezu linear-elastisches Verhalten gezeigt.

Im Anschluss an die Doppelindenterversuche werden die Messungen der Oberflächendeformationen mit Hilfe der Rasterkraftmikroskopie durchgeführt. Aus zeitlichen Gründen werden diese Messungen auf ein quadratisches Gebiet mit einer Kantenlänge von $2,5 \text{ mm}$ begrenzt. Dabei besitzen die Messpunkte einen Abstand von jeweils $10 \mu\text{m}$ und die Auflösung senkrecht zur Blechebene beträgt ungefähr 16 nm . Mit diesen Messungen werden die relativen Höhenunterschiede auf der Probenoberfläche ermittelt. Zur Bestimmung der absoluten Höhenunterschiede ist es notwendig einen Nullpunkt festzulegen, welcher der ungestörten Probenoberfläche entspricht. Dazu wird der Mittelwert aller Messwerte gebildet, die innerhalb eines Radius von $0,3 \text{ mm}$ um die vier Eckpunkte des Messgebiets liegen. Weil die Messpunkte in den vier Ecken des Messgebiets den größten Abstand zum Eindruck aufweisen ist hier eine unverformte Probenoberfläche am wahrscheinlichsten. Der berechnete Mittelwert wird anschließend als Nullpunkt angenommen.

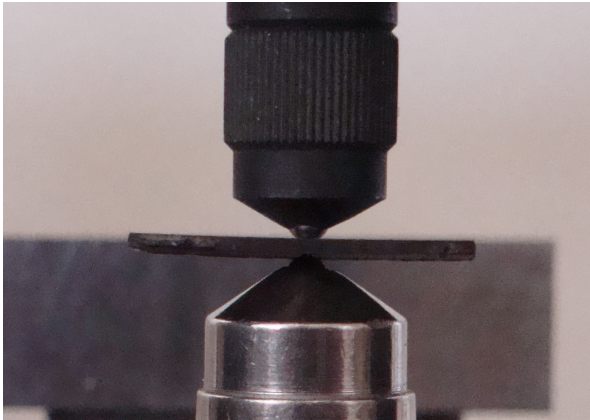


Abbildung 4.2: Probe vor dem Versuch in horizontaler Lage

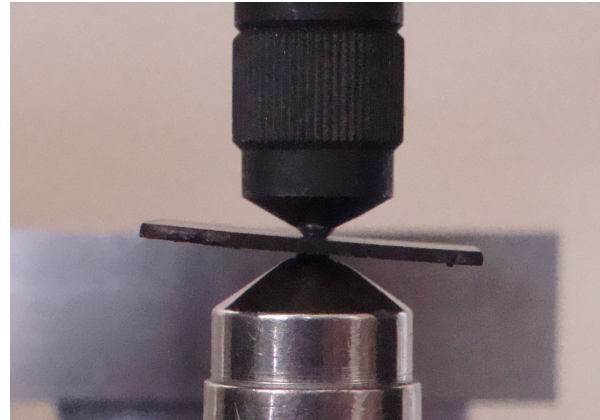


Abbildung 4.3: Probe bei Maximallast mit deutlicher Schrägstellung

4.2.2 Darstellung und Diskussion der Ergebnisse

Wie bereits erwähnt, werden für den Doppelindenterversuch die Kraft-Verschiebungskurve und die bleibenden Oberflächenverschiebungen senkrecht zur Blechebene gemessen. In Abbildung 4.4 sind die Kraft-Verschiebungskurven der ungeglühten und der grobkorngeglühten Proben dargestellt. Darin ist erkennbar, dass die Wärmebehandlung einen deutlichen Abfall der maximalen Eindringkraft zur Folge hat. Der Unterschied zwischen beiden Arten von Proben beträgt ungefähr 25 %. Weiterhin ist auch eine starke Streuung zwischen den Ergebnissen für Proben gleicher Wärmebehandlung sichtbar. Eine mögliche Ursache für diese Streuung könnte z. B. die sich während des Versuchs einstellende Exzentrizität der Indenter sein. Die

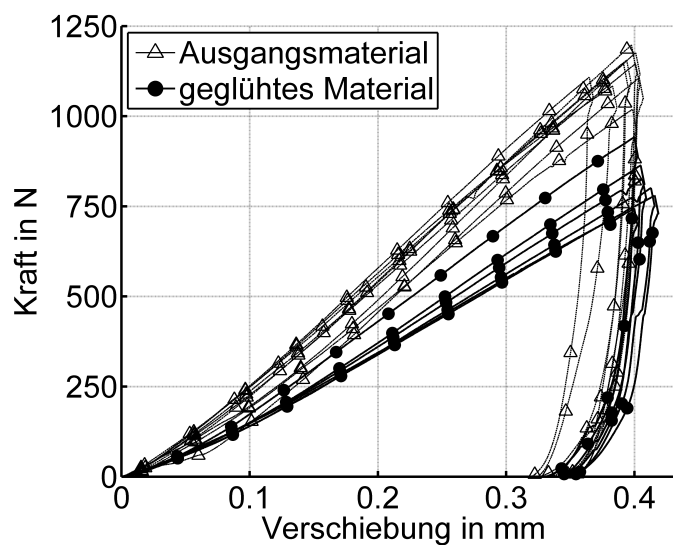


Abbildung 4.4: Experimentelle Kraft-Verschiebungskurven für die geglühten und ungeglühten Proben

Entlastungskurven zeigen bis ca. 300 N einen steilen, beinahe linearen Verlauf. Unterhalb dieser Marke sind die Entlastungskurven stark nichtlinear und die Eindringtiefe reduziert sich in diesem letzten Bereich erheblich. Die Höhe der elastischen Rückfederung ist mit 0,06 mm unerwartet groß. Besonders bei Berücksichtigung der geringen Blechdicke liegt die Vermutung nahe, dass die elastische Rückfederung nicht nur von der Probe beeinflusst wird. Der Verlauf der Kraft-Verschiebungskurven des Doppelindenterversuchs entspricht weitgehend denen, die auch bei klassischen Brinell-Eindringversuchen gemessen werden (Field und Swain, 1993; Fischer-Cripps, 2004).

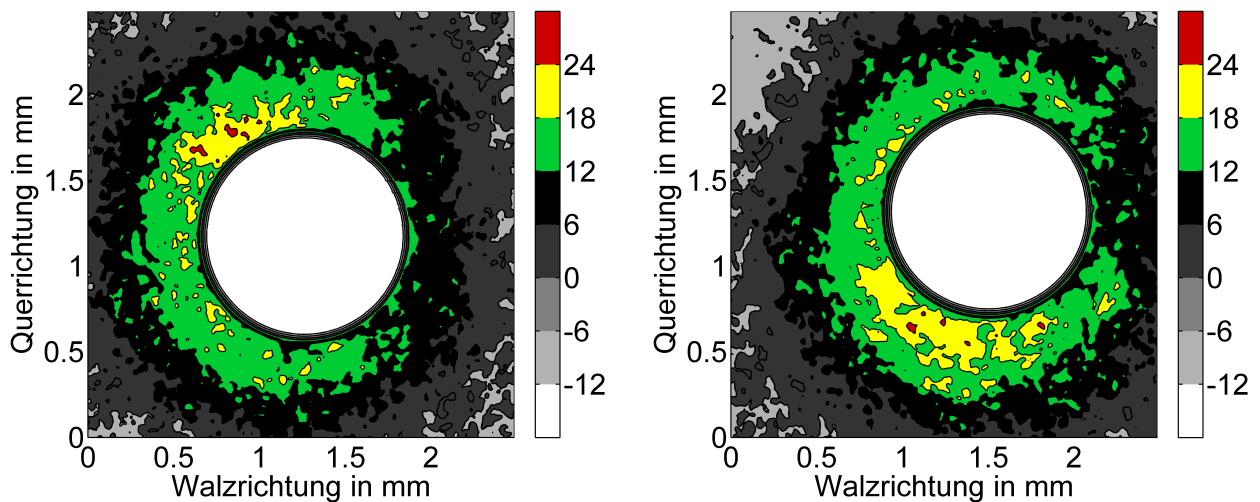


Abbildung 4.5: Gemessene Verschiebungen senkrecht zur Blechebene in μm für eine nicht wärmebehandelte Probe (**links:** Oberseite, **rechts:** Unterseite)

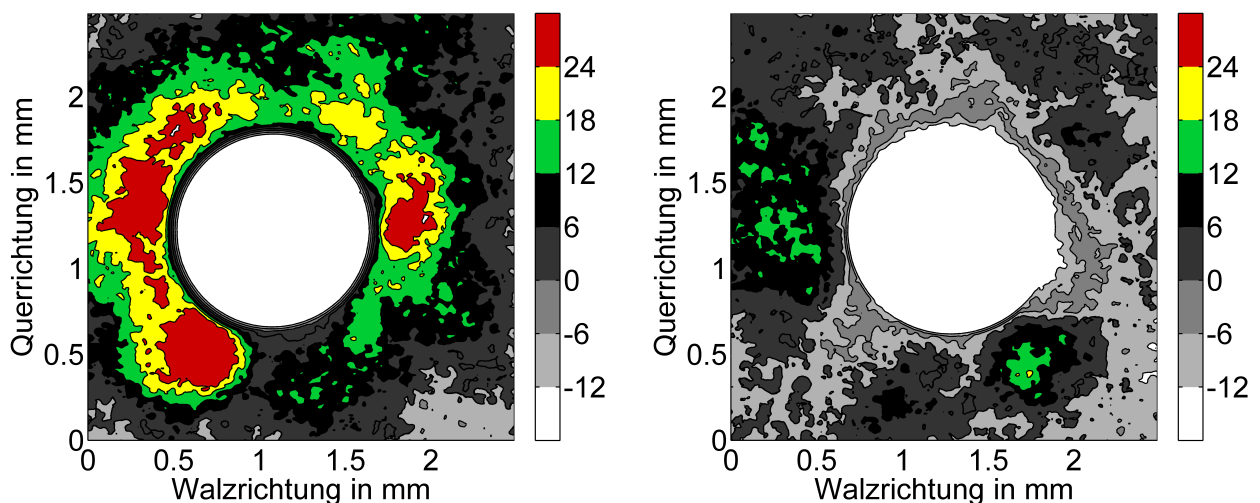


Abbildung 4.6: Gemessene Verschiebungen senkrecht zur Blechebene in μm für eine grobkorngeglühte Probe (**links:** Oberseite, **rechts:** Unterseite)

Die Oberflächenverschiebungen senkrecht zur Blechebene, wie sie in Abbildung 4.5 für eine ungeglühte Probe und in Abbildung 4.6 für eine grobkorngeglühte Probe dargestellt sind, zeigen keine Abhängigkeit von der anfänglichen Walztextur. Bei der ungeglühten Probe kommt es auf der Ober- und Unterseite zu ähnlichen Verschiebungen. Hier wölbt sich das Material auf beiden Seiten zwischen 18 und $24\ \mu\text{m}$ auf. Im Gegensatz dazu zeigt sich bei der geglähten Probe ein deutlicher Unterschied zwischen den Verschiebungen auf der Ober- und Unterseite. Während sich auf der Oberseite das Material mehr als $24\ \mu\text{m}$ aufwölbt, ist auf der Unterseite vielmehr ein Einsinken des Materials zu erkennen. Ob sich dieses Verhalten auf die geringe Anzahl von Körnern im Bereich des Eindrucks zurückführen lässt, kann hier nicht geklärt werden. Für die in Abbildung 4.5 und 4.6 dargestellten Versuche ist unter Maximallast eine nur geringe Schrägstellung der Probe beobachtet worden.

Im Folgenden wird ein Vergleich der mittels Zug-Druck-Prüfmaschine und Rasterkraftmikroskop gemessenen Eindringtiefen durchgeführt. In Tabelle 4.1 sind die entsprechenden Eindringtiefen für beide Versuche zusammengestellt. Während für den Versuch mit der grobkorngeglühten Probe die mittels Rasterkraftmikroskopie und Zug-Druck-Prüfmaschine ermittelten Eindringtiefen übereinstimmen, wird für den Versuch mit der ungeglühten Probe eine Abweichung von $25\ \mu\text{m}$ festgestellt.

Tabelle 4.1: Vergleich der mittels Rasterkraftmikroskopie (RKM) und Zug-Druck-Prüfmaschine gemessenen Eindringtiefen für die Versuche

Messmethode	ungeglühte Probe in mm	geglühte Probe in mm
RKM-Oberseite	0,165	0,158
RKM-Unterseite	0,163	0,183
RKM-Gesamttiefe	0,328	0,341
Zug-Druck-Prüfmaschine	0,353	0,340

4.3 Berechnungsmodell des Doppelindenterversuchs

Unter der Annahme, dass das gewalzte Blech eine orthorhombische Symmetrie (siehe Abbildung 3.3a und Kocks (1998)) besitzt und die beiden Indenter koaxial ausgerichtet sind, ist es ausreichend $\frac{1}{8}$ der Probe zu modellieren. Das Probenmodell (Abbildung 4.7) besteht aus 2868 linearen Hexaederelementen welche selektiv reduziert integriert werden (Abaqus/Benutzerhandbuch, 2007). Der Indenter wird als eine starre Kugel modelliert. In der Kontaktzone wird das Elementnetz stark verfeinert, so dass die kleinsten Elemente eine Kantenlänge von $0,05\ \text{mm}$ besitzen. Dadurch wird eine detaillierte Berechnung der Oberflächendeformationen ermöglicht. Die Kraft-Verschiebungskurve weist nur geringe Fluktuationen auf, da

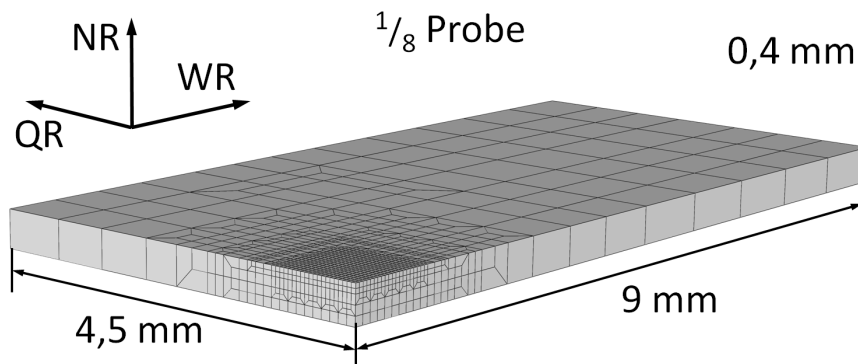


Abbildung 4.7: FE-Modell der Probe für den Doppelindenterversuch

die Kontaktkraft zwischen Indenter und Probe kontinuierlicher übertragen werden kann. Das Kontaktverhalten wird in Normalenrichtung als harter Kontakt und in tangentialer Richtung als Coulomb-Reibung modelliert. Als Materialmodell wird das Taylor-Modell in Verbindung mit Verfestigungsregel I verwendet. Alle Materialparameter entsprechen denen, die im vorhergehenden Kapitel für den DC04-Stahl ermittelt worden sind (Tabelle 3.5 und 3.7). Auf Grund der hohen Elementanzahl wird die Menge der berücksichtigten Kristallite pro Gauss-Punkt von 2000 auf 10 reduziert. Diese 10 Orientierungen werden für jeden Gauss-Punkt per Zufallsgenerator aus dem Satz der 2000 Orientierungen bestimmt, mit denen die Walztextur approximiert worden ist (siehe Abschnitt 3.1.2). Der starre Indenter wird über Verschiebungsrandbedingungen gesteuert. Beim Probenmodell ist es ausreichend, die Verschiebungen an den drei Symmetrieebenen in Richtung der jeweiligen Normalen zu verhindern.

4.4 Vergleich von Experiment und Simulation

4.4.1 Kraft-Verschiebungskurve

Ein Vergleich der gemessenen und der berechneten Kraft-Verschiebungskurven (Abbildung 4.8) lässt ein deutlich steiferes Verhalten des Berechnungsmodells erkennen. Im Bereich der Belastung werden Kräfte vorausgesagt, die um 25 % über den gemessenen Kräften liegen. Im Bereich der Entlastung wird ausschließlich ein linearer Verlauf prognostiziert, so wie er auch bei den Messungen im oberen Bereich der Entlastungskurve erkennbar ist. Der unterhalb von 300 N stark nichtlineare Verlauf der gemessenen Kraft-Verschiebungskurve wird durch die Simulation nicht nachgebildet. Eine mögliche Ursache für die beschriebenen Unterschiede könnte z. B. die im Experiment beobachtete Exzentrizität der Indenter darstellen, welche im Berechnungsmodell auf Grund der Symmetrienausnutzung verhindert wird. Weiterhin konnte die Nachgiebigkeit des Versuchsaufbaus nur unter Vernachlässigung der beiden Indenter ermittelt werden. Falls die Indenter selbst oder auch die Verbindung zwischen ihnen und dem restlichen Versuchsaufbau eine deutliche Nachgiebigkeit aufweisen, könnte das ein möglicher

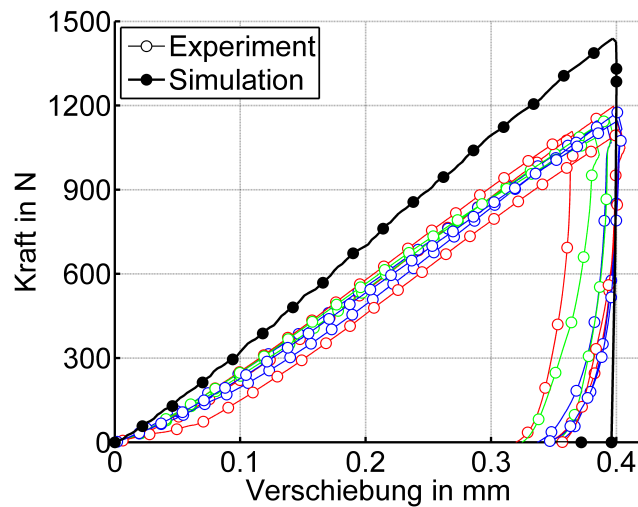


Abbildung 4.8: Vergleich der berechneten und gemessenen Kraft-Verschiebungskurven für das ungeglühte Material

Grund für die beobachteten Unterschiede zwischen Experiment und Berechnung sein. Eine dritte Fehlerquelle könnten die verwendeten Materialparameter darstellen. Da diese mit Hilfe des Scherversuchs angepasst werden, besitzen sie im Fall der Doppelindenterversuche nur eine eingeschränkte Gültigkeit, weil die bei diesem Versuch erreichten plastischen Deformationen weit über denen des Scherversuchs liegen.

4.4.2 Oberflächenverschiebungen

Im Gegensatz zur Messung ist in der Simulation ein Einfluss der Textur auf die Oberflächenverschiebungen erkennbar (Abbildung 4.9). Die Berechnungsergebnisse zeigen in Walzrichtung-

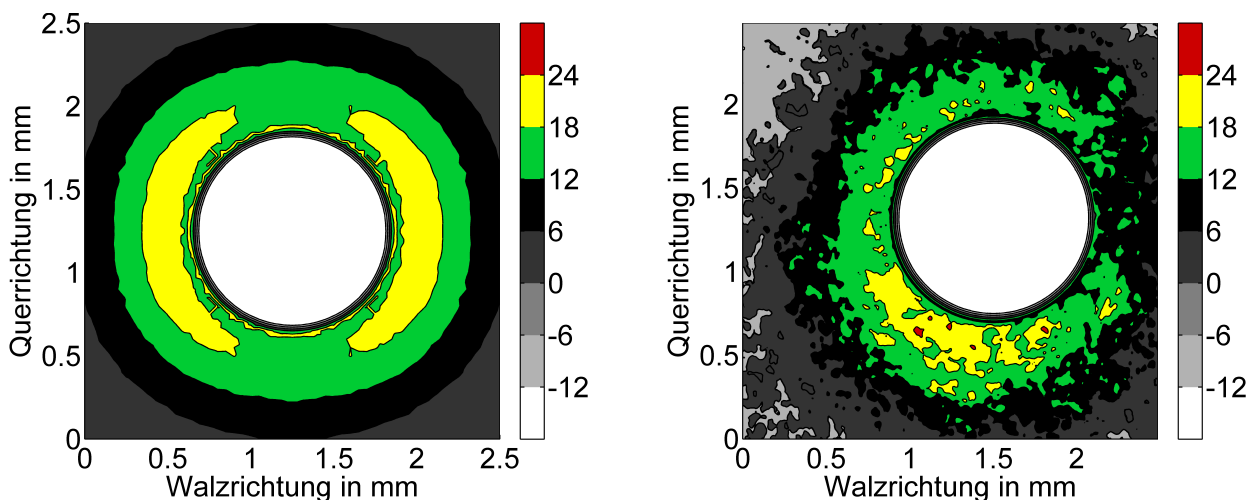


Abbildung 4.9: Vergleich der berechneten (**links**) und gemessenen (**rechts**) Oberflächenverschiebungen senkrecht zur Blechebene in μm für eine ungeglühte Probe

tung eine etwas deutlichere Materialaufwölbung als in die Querrichtung. Im Mittel liegen die berechneten und die gemessenen Oberflächenverschiebungen in der gleichen Größenordnung. Trägt man die Ergebnisse aus Abbildung 4.9 entlang einer Linie auf, die parallel zur Walzrichtung und durch den Mittelpunkt des Eindrucks verläuft, erhält man das in Abbildung 4.10 dargestellte Diagramm. Hier ist noch einmal deutlich zu erkennen, dass die Tiefe des bleibenden Eindrucks im Experiment geringer ist als in der Simulation. Allerdings kann auch anhand dieser Darstellung keine Entscheidung darüber getroffen werden, ob dieser Unterschied maßgeblich auf die elastische Rückfederung der Probe oder auf eine Nachgiebigkeit der Indenter zurückzuführen ist.

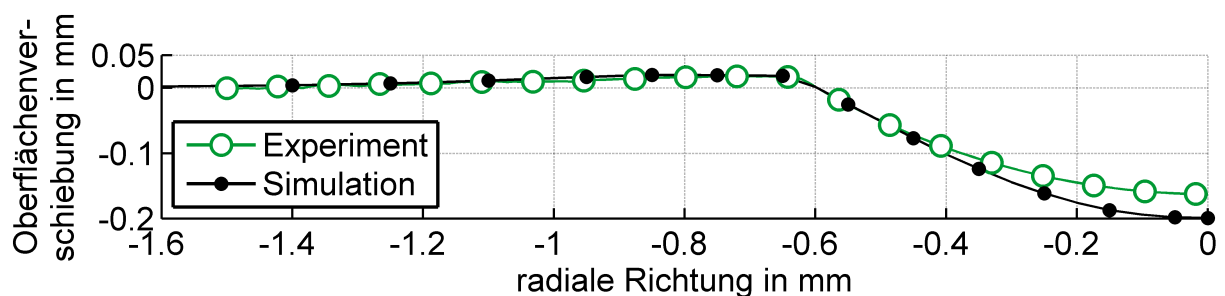


Abbildung 4.10: Vergleich der berechneten und gemessenen Oberflächenverschiebungen entlang einer Linie parallel zur Walzrichtung (linke Seite in den Abbildungen 4.9)

4.4.3 Untersuchung des Einflusses einer Exzentrizität der Indenter

In den bisherigen Untersuchungen zum Doppelindenterversuch ist eine deutliche Streuung der experimentellen Ergebnisse untereinander und auch eine Differenz zwischen berechneter und gemessenen Kraft-Verschiebungskurven festgestellt worden. Als eine mögliche Ursache für diese Ungenauigkeiten wird die sich während des Versuchs einstellende Exzentrizität der Indenter angesehen. Um den Einfluss einer solchen Exzentrizität zu untersuchen, wird im Folgenden eine Simulation des Doppelindenterversuchs mit einer nicht-koaxialen Verschiebung der Indenter durchgeführt. Dazu werden zwei Indenter modelliert, wobei jeder von ihnen mit einer zusätzlichen Verschiebung in die Querrichtung der Probe beaufschlagt wird. Bei Erreichen der maximalen Eindringtiefe weisen somit beide Indenter einen Versatz von insgesamt $0,2\text{ mm}$ auf (Abbildung 4.11). Auf Grund der nicht-koaxialen Verschiebung der Indenter neigt sich die Probe um ungefähr 6° . Diese Schrägstellung ist mit denjenigen vergleichbar, die auch experimentell zu beobachten sind. Für diesen Versuch erhöht sich der Berechnungsaufwand erheblich, da nur noch eine Symmetrieebene existiert und somit die halbe Probe berechnet werden muss. Alle weiteren Modelleigenschaften werden wie bei der Berechnung des koaxialen Versuchs gewählt. In Abbildung 4.12 ist zu erkennen, dass sich die Kraft-Verschiebungskurve des nicht-koaxialen Versuchs kaum an die experimentellen Kurven

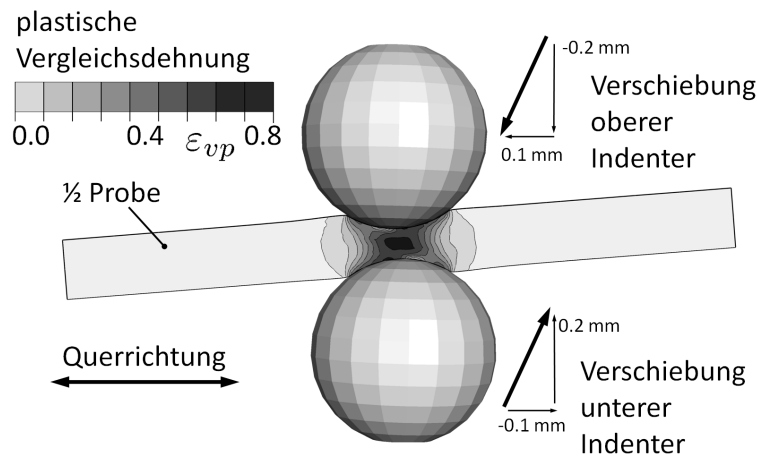


Abbildung 4.11: Berechnung des Doppelindenterversuchs für eine nicht-koaxiale Verschiebung der Indenter, Darstellung der plastischen Vergleichsdehnung und der sich einstellenden Schrägstellung der Probe

angenähert hat. Die Änderung ist sogar so gering, dass es als unwahrscheinlich erachtet wird, dass die Exzentrizität der Indenter eine mögliche Ursache für die experimentelle Streuung darstellt. Im Gegensatz zu den Kraft-Verschiebungskurven, erweisen sich die Oberflächenverschiebungen als äußerst sensitiv gegenüber einer Exzentrizität der Indenter (vgl. Abbildung 4.13 und 4.9-links). Man erkennt, dass die Richtung der lateralen Verschiebung des Indenters die Position der maximalen Aufwölbung des Materials bestimmt. Dieses bezüglich einer bestimmten Richtung auftretende Maximum der Oberflächenverschiebungen ist auch bei den experimentellen Ergebnissen zu beobachten (Abbildung 4.5).

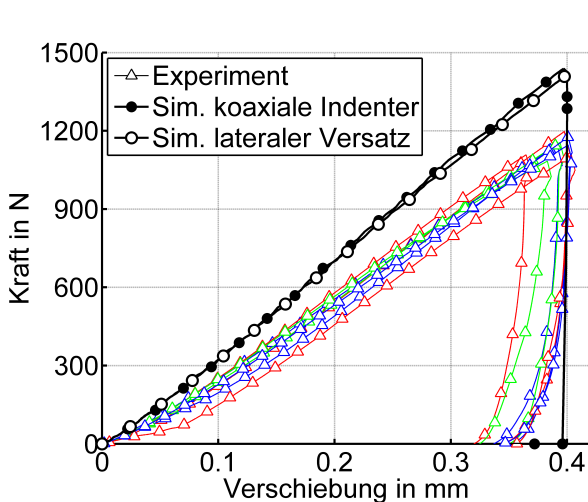


Abbildung 4.12: Vergleich der berechneten Kraft-Verschiebungskurven für den koaxialen und nicht-koaxialen Versuch

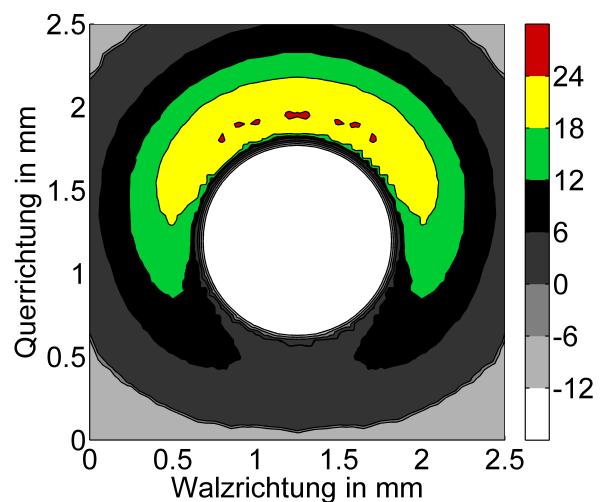


Abbildung 4.13: Berechnete Oberflächenverschiebungen für einen nicht-koaxialen Versuch (Oberseite)

4.5 Anpassung der Verfestigungsparameter anhand der Kraft-Verschiebungskurve

Im Folgenden wird die Identifikation der Verfestigungsparameter von Verfestigungsregel I anhand der Kraft-Verschiebungskurven vorgestellt. Dabei erfolgt die Anpassung ausschließlich für den Bereich der Belastung. Die gemessenen Entlastungskurven und Oberflächendeformationen können nicht berücksichtigt werden, da diese Daten mit dem verwendeten Berechnungsmodell numerisch nicht reproduzierbar sind. Die für die Identifikation notwendige Vergleichskurve wird aus dem arithmetischen Mittel aller an den ungeglühten Proben gemessenen Kraft-Verschiebungskurven gebildet (Abbildung 4.4). Die Simulation des Versuchs erfolgt mit dem in Abschnitt 4.3 vorgestellten Modell. Als Startwerte für die Optimierung werden die an den Scherversuch angepassten Verfestigungsparameter verwendet (vgl. Tabelle 3.7 und 4.2). Zur Anpassung wird wie in Abschnitt 3.3 die MinPack-Software verwendet. Als Fehlervektor werden die Differenzen von gemessener und berechneter Eindringkraft an 101 äquidistanten Stützstellen übergeben.

Die anhand des monotonen Scherversuchs und des Doppelindenterversuchs identifizierten Verfestigungsparameter (Tabelle 4.2) unterscheiden sich deutlich voneinander. Obwohl eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der gemessenen und der berechneten Kraft-Verschiebungskurve erzielt werden konnte (Abbildung 4.14), zeigt die Auswertung der Korrelationsmatrix (Tabelle 4.3), dass Probleme bei der eindeutigen Bestimmung der Verfestigungsparameter bestehen. Es ist erkennbar, dass die Verfestigungsparameter τ_{ks} und θ_∞ vollständig miteinander korrelieren. Weiterhin ist es nicht auszuschließen, dass die Bestimmung der anfänglichen kritischen Schubspannung problematisch ist, da die Kraft-Verschiebungskurve keinen ausgeprägten Übergang zwischen dem elastischen und plastischen Materialverhalten erkennen lässt. Zur weiteren Überprüfung werden die in Abschnitt 3.1.4 vorgestellten Zugversuche unter Verwendung der an den Doppelindenterversuch angepassten Verfestigungsparameter erneut simuliert. In Abbildung 4.15 werden die experimentelle und die berechnete Spannungs-Dehnungskurve beispielhaft für den Versuch in Walzrichtung miteinander vergli-

Tabelle 4.2: Startwerte und angepasste Verfestigungsparameter der ersten Verfestigungsregel; τ_{k0} , τ_{ks} , θ_0 , θ_∞ in *MPa*; Zielfunktionswert Ψ ; Anzahl der Iterationen n

	Start	Optimum
τ_{k0}	57,7	35,7
τ_{ks}	115	191
θ_0	801	265
θ_∞	42,4	1,07
Ψ	$3,4 \cdot 10^6$	$1,5 \cdot 10^3$
n	-	12

Tabelle 4.3: Korrelationsmatrix für die Anpassung an die Kraft-Verschiebungskurve des Doppelindenterversuchs

	τ_{k0}	τ_{ks}	θ_0	θ_∞
τ_{k0}	1.00	-0.03	-0.82	0.06
τ_{ks}		1.00	0.13	-1.00
θ_0			1.00	-0.20
θ_∞				1.00

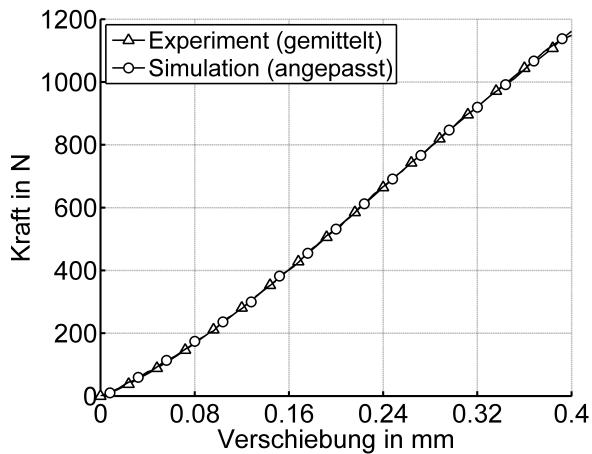


Abbildung 4.14: Ergebnis der Anpassung an die gemittelte Kraft-Verschiebungskurve der ungeglühten Proben im Bereich der Belastung

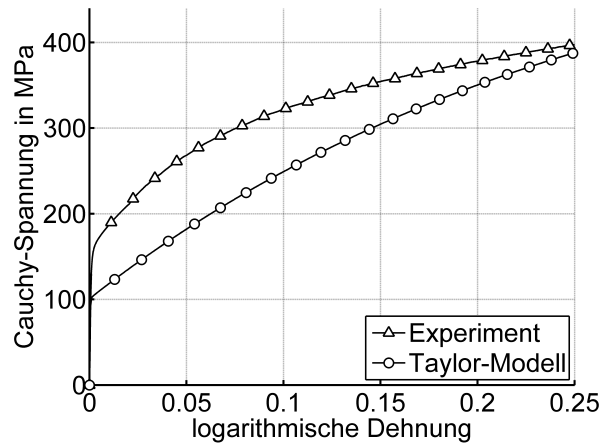


Abbildung 4.15: Prognose der Spannungs-Dehnungskurve des Zugversuchs in Walzrichtung im Vergleich zur experimentell bestimmten Kurve

chen. Dabei zeigt sich eine deutliche Diskrepanz zwischen beiden Kurven. Auf Grund der beschriebenen Ergebnisse wird die Identifikation der vier Verfestigungsparameter von Verfestigungsregel I ausschließlich an die Belastungskurve des Doppelindenterversuchs als nicht möglich eingeschätzt.

4.6 Abschließende Diskussion

Es konnte gezeigt werden, dass die großen Unterschiede zwischen den gemessenen und den berechneten Kraft-Verschiebungskurven (Abbildung 4.8) keine Folge der Exzentrizität der Indenter sind. Als mögliche Ursachen für diese Unterschiede werden z. B. die Nachgiebigkeit der Indenter oder deren Verbindung mit der Prüfmaschine angenommen. Dies wäre ebenfalls eine Erklärung für die geringe Tiefe des bleibenden Eindrucks (Abbildung 4.10). Dass die Differenz zwischen maximaler Eindringtiefe und Tiefe des bleibenden Eindrucks einzig aus der elastischen Rückfederung der Probe resultiert, wird wegen der geringen Blechdicke als unwahrscheinlich angesehen.

Im Gegensatz zur Kraft-Verschiebungskurve werden die Oberflächenverschiebungen sehr stark von der Exzentrizität der Indenter beeinflusst (vgl. Abbildung 4.9-links und 4.13). Die Simulation des Doppelindenterversuchs mit nicht-koaxialen Indentern ist zwar prinzipiell möglich, erhöht allerdings die Berechnungsdauer um das Vierfache. Darum sollte vielmehr eine Erhöhung der Präzession des Versuchsaufbaus angestrebt werden. Um für eine Identifikation verwendbare Oberflächenverschiebungen zu erhalten, müsste die laterale Abweichung der Indenter während des Versuchs deutlich unter $50\ \mu\text{m}$ liegen.

Auf Grund der bestehenden Unterschiede zwischen den experimentellen und berechneten Entlastungskurven sowie den Oberflächenverschiebungen, wurde im vorangegangenen Abschnitt eine Anpassung der Verfestigungsparameter ausschließlich auf der Grundlage der Be-

lastungskurve des Doppelindenterversuchs vorgenommen. Dabei hat sich allerdings gezeigt, dass eine Identifikation nur auf der Grundlage dieser Daten keine verlässlichen Ergebnisse liefert.

Kapitel 5

Analyse des Materialmodells anhand von Eindringversuchen im Mikrometerbereich

5.1 Einleitende Diskussion

Experimentelle Daten, die bei Versuchen an einkristallinen Materialien gemessen werden, eignen sich sehr gut für einen direkten Vergleich mit Berechnungsergebnissen kristallplastischer Modelle, weil keine Homogenisierung benötigt wird. Dies könnte zu einer verbesserten Identifikation und Validierung dieser Modelle führen, da sowohl Effekte als auch Fehler viel besser bestimmten Modelleigenschaften zugeordnet werden können. Ein experimentell sehr verlässlicher Versuch ist der Eindringversuch im Mikro- bzw. Nanometerbereich, der die Untersuchung monolithischer Einkristalle aber auch einzelner Körner im Polykristall ermöglicht. In verschiedenen Arbeiten ist bereits gezeigt worden, dass für diesen Versuch neben der klassischen Kraft-Verschiebungskurve zusätzlich noch zwei verschiedene Deformationsfelder gemessen werden können. Das erste Deformationsfeld umfasst die Verschiebungen an der Oberfläche des Kristalls, die in unmittelbarer Nähe des Eindrucks beobachtet werden und stark von der Kristallorientierung abhängen (Stelmashenko et al., 1993). Bei dem zweiten Deformationsfeld handelt es sich um die Rotationen des Kristallgitters, die direkt unterhalb des Eindrucks in Folge der plastischen Deformation entstehen.

Im Folgenden werden mehrere Arbeiten diskutiert, bei denen Eindringversuche im Mikro- bzw. Nanometerbereich durchgeführt und die gemessenen Daten mit Berechnungsdaten kristallplastischer Materialmodelle verglichen werden. Eindringversuche mit einem konischen Indenter an drei unterschiedlich orientierten Kupfer-Einkristallen mit Eindringtiefen zwischen 9 und 18 μm werden von Wang et al. (2004) untersucht. In allen drei Fällen zeigt sich eine gute qualitative Übereinstimmung der gemessenen und berechneten Oberflächenverschiebungen. Weiterhin prognostiziert die Berechnung ein stark heterogenes Feld von Gitterrotationen, was jedoch auf Grund fehlender experimenteller Vergleichsdaten nicht verifiziert werden konnte. In Liu et al. (2005, 2008) werden ebenfalls Eindringversuche an einem Kupfer-Einkristall

durchgeführt. Als Eindringkörper wird eine Kugel mit einem Radius von $3,4 \mu\text{m}$ verwendet. Die Eindringtiefe beträgt $0,3 \mu\text{m}$. Durch eine Anpassung der Verfestigungsparameter konnte eine gute Übereinstimmung der experimentellen und numerischen Kraft-Verschiebungskurven erreicht werden. Eine Validierung der Verfestigungsparameter erfolgte anschließend durch weitere Eindringversuche, bei denen ein Indenter mit einem Radius von $10 \mu\text{m}$ verwendet und eine Eindringtiefe von $0,7 \mu\text{m}$ erreicht wird. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass eine Erhöhung des Reibungskoeffizienten zu einer Verringerung der Materialaufwölbung auf der Oberfläche des Kristalls führt. Anhand mehrerer Testrechnungen konnte der Reibungskoeffizient so eingestellt werden, dass die berechneten und die gemessenen Oberflächenverschiebungen eine gute Übereinstimmung zeigen. Die Kraft-Verschiebungskurve bleibt von der Variation des Reibungskoeffizienten weitestgehend unbeeinflusst.

Ein Vergleich der Rotationen des Kristallgitters wird von Zaaferani et al. (2006, 2008) präsentiert. Hier sind qualitative Übereinstimmungen zwischen den experimentell und numerisch bestimmten Rotationen zu erkennen. Die Messung der Gitterrotationen im Material unterhalb des Eindrucks wird mit Hilfe der EBSD-Technik (engl. *electron backscattered diffraction*) realisiert. Da die EBSD-Technik nur die Vermessung von Oberflächen erlaubt, ist es im Vorfeld notwendig, einen Teil des Probenmaterials mit einem fokussierten Ionenstrahl abzutragen bis die zu untersuchende Querschnittsfläche frei zugänglich ist. Das Abtragen des Materials wird hier als eine Hauptursache für die stark verzerrten experimentellen Ergebnisse angesehen (Zaaferani et al., 2008). Bei dem untersuchten Material handelt es sich wieder um einen Kupfer-Einkristall. Die Eindrücke besitzen annähernd eine Halbkugelform mit einem Radius von ca. $1 \mu\text{m}$. Zur Berechnung werden zwei verschiedene kristallplastische Modelle verwendet, wobei das erste ein empirisches Standardmodell (Kalidindi et al., 1992) ist. Beim zweiten und etwas komplexeren Modell werden viel stärker versetzungstheoretische Aspekte berücksichtigt. Zur Anpassung der Verfestigungsparameter wird ein Kompressionsversuch an einem Kupfer-Einkristall durchgeführt. Ein Vergleich der gemessenen und berechneten Kraft-Verschiebungskurven des Eindringversuchs wird für keines der beiden Modelle angegeben. Es wird deutlich, dass beide Modelle die Höhe der Gitterrotationen überschätzen und das komplexere Modell ein heterogeneres Rotationsfeld prognostiziert. Welches der beiden Modelle jedoch eine bessere Prognose der Gitterrotationen zulässt, kann auf Grund der stark verzerrten experimentellen Ergebnisse nicht eindeutig geklärt werden.

Von weiteren Untersuchungen an Kupfer wird in Casals et al. (2007) und Alcalá et al. (2008) berichtet. Hier werden experimentelle Daten verwendet die von Eindringversuchen an einzelnen Körnern eines Polykristalls stammen. Als Eindringkörper werden Vickers- und Berkovich-Indenter verwendet. Der Fokus der Untersuchungen wird hier auf den Einfluss des Verfestigungsverhaltens auf die Oberflächendeformationen gelegt. Es kann gezeigt werden, dass die Ausprägung der Oberflächendeformationen stark von der Wahl der Verfestigungsregel und den darin enthaltenen Parametern abhängt. Eine gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen und berechneten Oberflächendeformationen ist auch in Zambaldi et al. (2007) dokumentiert. Hier wird ein Brinell-Eindringversuch in eine Nickelbasis-Superlegierung mit einer kfz-Gitterstruktur simuliert. Als Materialmodell wird Standard-Kristallplastizität verwendet, worin zwischen Selbst- und Fremdverfestigung unterschieden

wird. Die Kraft-Verschiebungskurve des Eindringversuchs wird vom Berechnungsmodell leicht unterschätzt, wobei die Anpassung der Verfestigungsparameter unter Verwendung eines Kompressionsversuchs des gleichen Materials erfolgte.

In Britton et al. (2010) werden Berkovich-Eindringversuche an einzelnen Körnern eines α -Ti Polykristalls beschrieben, welche eine hexagonale Gitterstruktur aufweisen. Die Eindringtiefe beträgt ca. $1\ \mu\text{m}$. Als experimentelle Daten werden die Kraft-Verschiebungskurve, die Oberflächenverschiebungen und die Gitterrotationen auf der Oberfläche der Probe gemessen. Die im Materialmodell verwendeten Ansätze für die Scherrate und die Verfestigung sind durch die Versetzungstheorie motiviert. Die anfänglichen Versetzungsdichten werden frei gewählt und die kritische Schmid-Spannung wird so angepasst, dass die berechneten Kraft-Verschiebungskurven in guter Übereinstimmung mit den gemessenen Kurven sind. Für die Oberflächenverschiebungen liefert das Modell überzeugende Werte. Wie schon in vorhergehenden Untersuchungen werden auch hier die Gitterrotationen von der Berechnung prinzipiell überschätzt.

Die hier erwähnten Arbeiten zeigen eine Reihe von vielversprechenden Ansätzen zur Modellierung von mikroskopischen Eindringversuchen in einkristalline Materialien. Besonders bei der Vorhersage der Oberflächendeformationen konnten bisher gute Übereinstimmungen mit experimentellen Daten gewonnen werden. Die bei den Gitterrotationen erreichten Übereinstimmungen können hingegen nur als unbefriedigend angesehen werden, was auf die unzureichende Qualität der experimentellen Ergebnisse zurückzuführen ist.

In diesem Kapitel werden mikroskopische Eindringversuche in einzelne Körner des Tiefziehstahls DC04 und deren Simulation unter Verwendung eines kristallplastischen Modells beschrieben. Der Vergleich von Experiment und Berechnung erfolgt anschließend anhand der Kraft-Verschiebungskurven und der Felder der Gitterrotationen unterhalb des Eindrucks. Eine Abgrenzung zu den vorher zitierten Arbeiten kann anhand mehrerer Punkte verdeutlicht werden. Erstens wird zur Messung der Gitterrotationen die Röntgenstrahlmikroskopie eingesetzt, wodurch, im Vergleich zur EBSD-Technik, präzisere experimentelle Daten ermittelt werden. Dies ermöglicht eine solidere Beurteilung des Berechnungsmodells. Zweitens weist das Material eine krz-Gitterstruktur auf. Da die Gleitmechanismen in krz-Gittern deutlich komplexer als in kfz-Gittern sind (siehe Abschnitt 2.4.1), stellt ein Vergleich auf der Mikroebene eine besondere Herausforderung dar. Als dritter Punkt sei erwähnt, dass die Anpassung der Verfestigungsparameter anhand polykristalliner Scherversuche erfolgt. Somit kann geprüft werden, ob die auf unterschiedlichen Größenskalen identifizierten Parameter miteinander vergleichbar sind. Viertens wird eine umfassende Parameterstudie durchgeführt, die aufzeigen soll, gegenüber welchen Parametern die Gitterrotationen besonders sensitiv sind und wie viel Spielraum für Anpassungen in dem verwendeten Modell vorhanden ist.

5.2 Experimentelle Untersuchungen

5.2.1 Beschreibung der Eindringversuche

Ziel der mikroskopischen Eindringversuche¹ ist es, das einkristalline Materialverhalten des DC04-Stahls zu untersuchen. Demzufolge sollte der Eindruck innerhalb eines einzelnen Kornes liegen und einen hinreichenden Abstand zu dessen Korngrenzen aufweisen. Diese Bedingungen können allerdings nicht mit dem im Ausgangszustand vorliegendem Material eingehalten werden, da die Größe des Brinell-Indenters mit einem Radius von $100\ \mu\text{m}$ festgelegt ist. Die durchschnittliche Korngröße beträgt jedoch nur ungefähr $16\ \mu\text{m}$. Aus diesem Grund werden die Versuche an dem grobkorngeglühten Material (siehe Abschnitt 3.1.1) durchgeführt, welches Körner enthält, die eine Größe von bis zu $100\ \mu\text{m}$ haben. Der kugelförmige Eindringkörper besteht aus Saphir und wird durch Vorgabe einer Kraft P in das Material gedrückt. Die Versuche werden in zwei Versuchsreihen unterteilt und unterscheiden sich bezüglich des vorgegebenen Belastungspfads. Während bei der ersten Versuchsreihe die Kraft eine konstante Steigerung von $\dot{P} = 1\ \text{mNs}^{-1}$ erfährt, wird bei der zweiten Versuchsreihe die Methode der kontinuierlichen Steifigkeit $\dot{P}P^{-1} = 0.05\ \text{s}^{-1}$ angewendet. Beide Versuchsreihen werden bei Raumtemperatur und bis zu einer maximalen Kraft von $500\ \text{mN}$ durchgeführt. Die Messung der Gitterrotationen erfolgt beispielhaft an zwei geeigneten Versuchen, die aus jeweils einer der unterschiedlichen Versuchsreihen stammen. Die sich für diese beiden Versuche ergebenden Eindringtiefen sind in Abbildung 5.1 über der Versuchszeit aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass sich für den ersten Versuch eine fast konstante Eindringgeschwindigkeit einstellt. Dagegen kommt es bei dem zweiten Versuch zu einer starken Beschleunigung des Eindringkörpers. Die Kraft-Verschiebungskurven der beiden Versuche sind in Abbildung

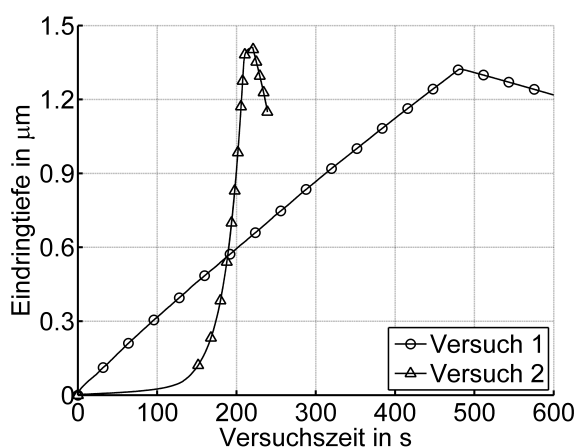


Abbildung 5.1: Gemessene Eindringtiefen in Abhängigkeit der Versuchszeit

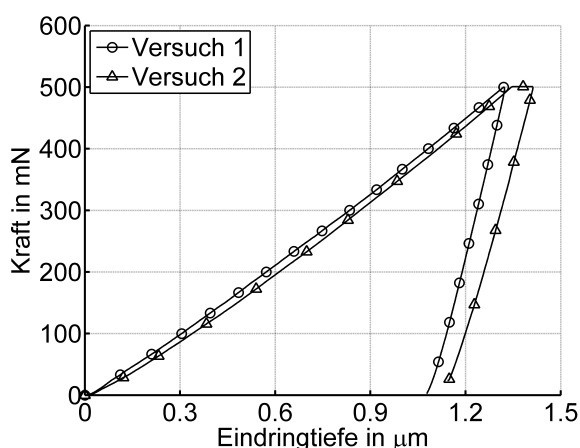


Abbildung 5.2: Gemessene Kraft-Verschiebungskurven beider Versuche

¹Diese Versuche wurden von Hongbin Bei und S. Shim am Oak Ridge National Laboratory in den USA durchgeführt.

5.2 dargestellt. Der erste Versuch zeigt bei der Be- und Entlastung ein geringfügig steiferes Materialverhalten als der zweite Versuch. Die Ursache dafür wird in den unterschiedlichen Orientierungen der indentierten Körner (Tabelle 5.1) gesehen. Bei dem zweiten Versuch zeigt sich ein deutliches Kriechverhalten nach dem Erreichen der Maximalkraft. Da im ersten Versuch sofort nach Erreichen der Maximalkraft mit der Entlastung begonnen wird, ist bei diesem Versuch kein Kriechverhalten erkennbar.

5.2.2 Messung der Gitterrotationen

Die Veränderung der Kristallgitterorientierung im plastisch deformierten Material unterhalb des Eindrucks wird mit Hilfe der Röntgenstrahlmikroskopie gemessen². Das in Abbildung 5.3 dargestellte Schema und die folgenden Erläuterungen sollen einen Überblick über die Funktionsweise dieser Messtechnik geben. Ausgehend von einer Röntgenquelle durchdringt ein ge-

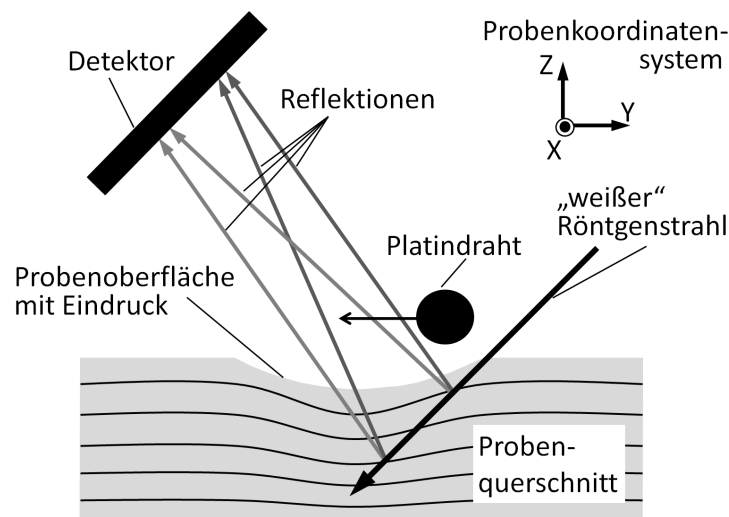


Abbildung 5.3: Schema der Orientierungsmessung mittels Röntgenstrahlmikroskopie (Yang et al., 2003)

richteter polychromatischer Röntgenstrahl mit einem Durchmesser von ca. $0.5 \mu m$ punktuell das zu untersuchende Material. Derjenige Teil der Strahlung, der von verschiedenen Gitterebenen reflektiert wird und das Material wieder verlässt, wird von einem Flächendetektor registriert. Für jede Position, die der fokussierte Röntgenstrahl bei einer Messung einnimmt, wird ein dünner Platindraht schrittweise durch das Strahlungsfeld der Reflektionen geführt. Weil dieser Draht von der Strahlung nicht durchdrungen werden kann, registriert der Detektor für jede neue Position des Drahts unterschiedliche Reflektionen. Durch Subtraktion von zwei aufeinanderfolgenden Messungen kann anschließend ermittelt werden, welche Re-

²Diese Versuche wurden von Jon Z. Tischler und Ben C. Larson am Oak Ridge National Laboratory in den USA durchgeführt.

flektionen verhindert worden sind. Anhand der Positionen des Drahtes und der Positionen der verhinderten Reflexe auf dem Detektor ist es möglich, die Richtungen der reflektierten Strahlen zu berechnen. Anschließend kann durch die Bestimmung der Schnittpunkte mit dem einfallenden Strahl, der Ursprung jeder Reflektion innerhalb des Materials ermittelt werden. Damit erhält man die tiefenaufgelöste Orientierungsinformation des Kristallgitters. Eine detaillierte Beschreibung dieser Methode ist in Yang et al. (2004a,b) und Larson et al. (2008) zu finden. Bei diesen Messungen werden Tiefen von bis zu $40 \mu\text{m}$ unterhalb der Kornoberfläche erreicht. Mit einem räumlichen Abstand von $0,7 \mu\text{m}$ der Messpunkte und einer Winkelgenauigkeit von ca. 0.01° ist die Qualität dieser Messergebnisse als sehr hoch einzuschätzen.

5.2.3 Auswertung der Gitterrotationen

Aus den vom Detektor aufgezeichneten *von-Laue-Aufnahmen* werden die reziproken Gitterbasen $\{\mathbf{a}^*; \mathbf{b}^*; \mathbf{c}^*\}$ ermittelt. Durch Normierung

$$\mathbf{g}_1 = \frac{\mathbf{a}^*}{|\mathbf{a}^*|}, \quad \mathbf{g}_2 = \frac{\mathbf{b}^*}{|\mathbf{b}^*|}, \quad \mathbf{g}_3 = \frac{\mathbf{c}^*}{|\mathbf{c}^*|} \quad (5.1)$$

erhält man die Orthonormalbasis \mathbf{g}_i des Kristallgitters für den jeweiligen Messpunkt. Um die Orientierung dieser Gitterbasis bezüglich einer orthonormalen Probenbasis \mathbf{e}_i zu beschreiben, wird der orthogonale Tensor

$$\mathbf{Q} = \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{e}_i \quad (5.2)$$

eingeführt. Dessen Komponentenmatrix

$$Q_{lk} = \mathbf{e}_l \cdot \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_k = \mathbf{e}_l \cdot \mathbf{g}_k = \begin{bmatrix} g_1^1 & g_2^1 & g_3^1 \\ g_1^2 & g_2^2 & g_3^2 \\ g_1^3 & g_2^3 & g_3^3 \end{bmatrix} = [\mathbf{g}_1; \mathbf{g}_2; \mathbf{g}_3] \quad (5.3)$$

kann bezüglich der Probenbasis direkt durch spaltenweises Einsetzen der Basisvektoren \mathbf{g}_i erzeugt werden.

Die Umrechnung des orthogonalen Tensors in einen Drehwinkel θ und eine normierte Drehachse $\mathbf{n} = n_i \mathbf{e}_i$ kann mit Hilfe der Euler-Rodriguez-Formel erfolgen. Eine eindeutige Methode für diese Umrechnung ist z. B. in Brannon (2002) angegeben. Daraus ergibt sich für den Drehwinkel

$$\sin(\theta) = \sqrt{1 - \left(\frac{(Q_{11} + Q_{22} + Q_{33}) - 1}{2} \right)^2} \quad (5.4)$$

und für die Komponenten der Drehachse

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{1}{2 \sin(\theta)} (Q_{32} - Q_{23}), \\ n_2 &= \frac{1}{2 \sin(\theta)} (Q_{13} - Q_{31}), \\ n_3 &= \frac{1}{2 \sin(\theta)} (Q_{21} - Q_{12}). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Weiterhin erfordert die Auswertung der Messergebnisse die Berücksichtigung der 24 Symmetrierotationen des kubischen Gitters. Eine Auflistung der 24 Komponentenmatrizen ist z. B. in Hansen et al. (1978) zu finden³. An jedem Messpunkt wird jeweils diejenige Symmetrierotation angewendet, für die sich der kleinste Winkel θ ergibt.

Die Ausgangsorientierung \mathbf{Q}_0 des jeweils indentierten Kornes wird an einem Messpunkt bestimmt, der tief im Inneren des Kornes und somit außerhalb des plastisch deformierten Bereichs liegt. Die Ausgangsorientierungen sind in Form von Miller-Indizes in Tabelle 5.1 aufgelistet.

Tabelle 5.1: Ausgangsorientierungen der indentierten Körner mit Bezug auf das Probenkoordinatensystem (Abbildung 5.3) in Form von Miller-Indizes

Achse im Probenkoordinatensystem	Versuch 1	Versuch 2
	kristallographische Richtung (hkl)	kristallographische Richtung (hkl)
X	(-6.29, 1.00, 6.41)	(3.71, -1.00, 2.86)
Y	(1.00, -5.14, 1.78)	(-1.00, 3.49, 2.52)
Z	(1.97, 1.00, 1.78)	(-1.05, -1.02, 1.00)

Die auf Grund der plastischen Deformation resultierende Orientierungsänderung $\Delta\mathbf{Q}_i$ an jedem Messpunkt i wird über die Beziehung

$$\Delta\mathbf{Q}_i = \mathbf{Q}_0^T \mathbf{Q}_i \quad (5.6)$$

berechnet. Der aus dieser Orientierungsänderung resultierende Drehwinkel $\theta_G(\Delta\mathbf{Q}_i)$, ist ein Maß der räumlichen Gesamttrotation des Kristalls an dem jeweiligen Messpunkt. Mittels einfacher Vektorzerlegung (Linearkombination) kann diese Gesamttrotation in die drei Anteile

$$\theta_X = \theta_G n_1 \quad , \quad \theta_Y = \theta_G n_2 \quad \text{und} \quad \theta_Z = \theta_G n_3 \quad (5.7)$$

bezüglich der drei Achsen des Probenkoordinatensystems (Abbildung 5.3) zerlegt werden. Die Messung der Gitterrotationen wird für beide Versuche entlang einer geraden Linie durchgeführt. Diese Linie ist so gewählt, dass sie parallel zur Y-Achse des Probenkoordinatensystems liegt und durch den Mittelpunkt des Eindrucks geht. Aus diesen Messungen ergeben sich ebene Felder der Gitterrotationen, die senkrecht zur Probenoberfläche orientiert sind. In Abbildung 5.4 sind die Gesamttrotationen und die Rotationen um die einzelnen Achsen des Probenkoordinatensystems in Form von Kontourdiagrammen dargestellt. Es ist erkennbar, dass die größten Gesamttrotationen (Abbildung 5.4 a und e) von ungefähr 3° direkt unterhalb des Eindrucks erreicht werden. In einer Tiefe von $40 \mu\text{m}$ unterhalb der Kornoberfläche, was

³Bei dem angegebenen Zitat ist zu beachten, dass die erwähnte Übersicht Druckfehler für die Symmetrieelemente 8, 11 und 21 enthält.

ungefähr dem 30-fachen der Eindringtiefe entspricht, ist nur noch eine leichte Rotation des Kristallgitters zu beobachten.

In besonderem Maße sind die Rotationen um die X-Achse (Abbildung 5.4 b und f) ausgeprägt, während die Anteile um die beiden anderen Achsen (Abbildung 5.4 c, d, g und h) eher gering ausfallen. Besonders deutlich ist dies am Beispiel des zweiten Versuchs zu sehen. Für die Rotationen um die X-Achse bilden sich maßgeblich zwei Gebiete mit einem unterschiedlichen Drehsinn aus. Bei Zaafarani et al. (2006), wo größere plastische Deformationen erreicht wurden, konnten 6 solcher Gebiete mit wechselndem Drehsinn beobachtet werden.

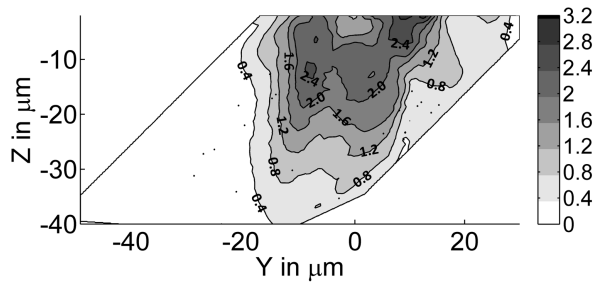
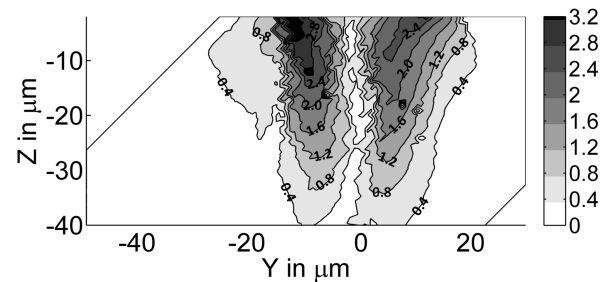
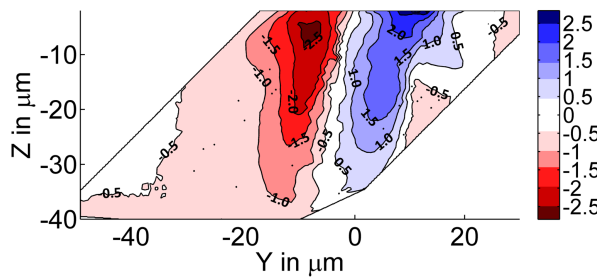
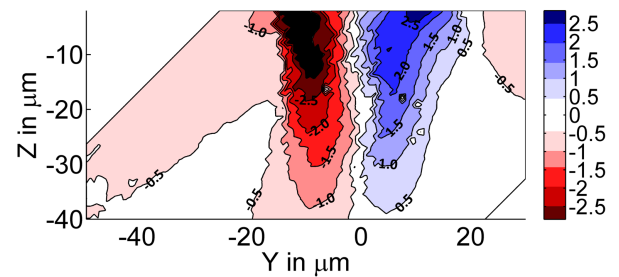
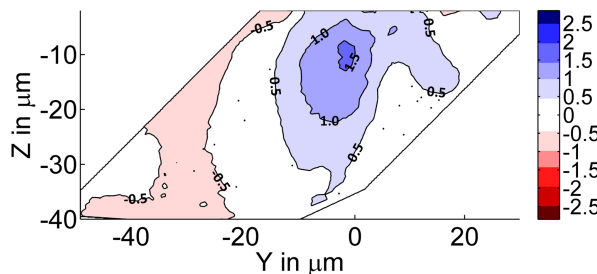
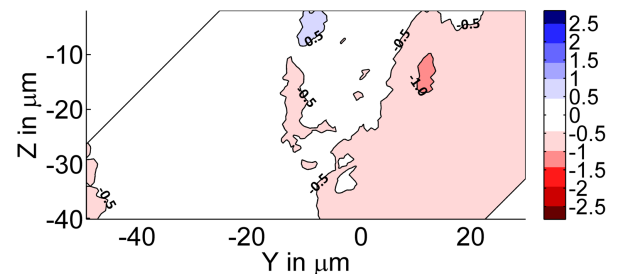
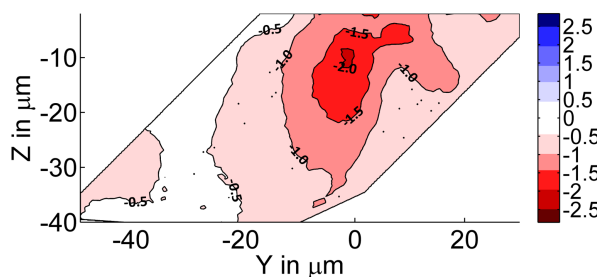
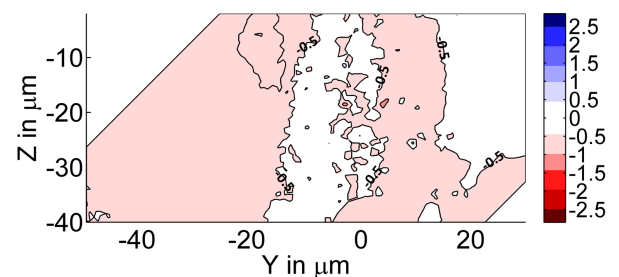
a) **Versuch 1** - Gesamtrotatione) **Versuch 2** - Gesamtrotationb) **Versuch 1** - Rotation um die X-Achsef) **Versuch 2** - Rotation um die X-Achsec) **Versuch 1** - Rotation um die Y-Achseg) **Versuch 2** - Rotation um die Y-Achsed) **Versuch 1** - Rotation um die Z-Achseh) **Versuch 2** - Rotation um die Z-Achse

Abbildung 5.4: Darstellung der mittels Röntgenstrahlmikroskopie gemessenen Gitterrotationen für Versuch 1 (a,b,c,d) und 2 (e,f,g,h); (Darstellung ab einer Tiefe von $Z = -2\ \mu\text{m}$, deshalb ist der Eindruck nicht sichtbar)

5.3 Berechnungsmodell des Eindringversuchs

5.3.1 Modellierung der Probe

Das FE-Modell, welches zur Simulation der mikroskopischen Eindringversuche verwendet wird, besteht aus zwei Teilen. Diese repräsentieren zum Einen die Probe und das Korn und zum Anderen den Eindringkörper. Die an das indentierte Korn angrenzenden Körner werden nicht modelliert. Somit wird deren Einfluss in der Simulation vernachlässigt. Da sich bei den Experimenten gezeigt hat, dass sich auf Grund der geringen Eindringtiefe ein Großteil der plastischen Deformation auf ein Gebiet innerhalb des indentierten Korns beschränkt (Abbildung 5.4), ist dieses Vorgehen gerechtfertigt. Demzufolge wird jedem Gauss-Punkt die in Tabelle 5.1 aufgelistete Ausgangsorientierung des jeweiligen Versuchs zugewiesen. Das Probenmodell besitzt eine quadratische Grundfläche mit einer Kantenlänge von $160\ \mu\text{m}$ und eine Höhe von $80\ \mu\text{m}$ (Abbildung 5.5). Eine Reduzierung der Modellgröße durch Ausnutzung von

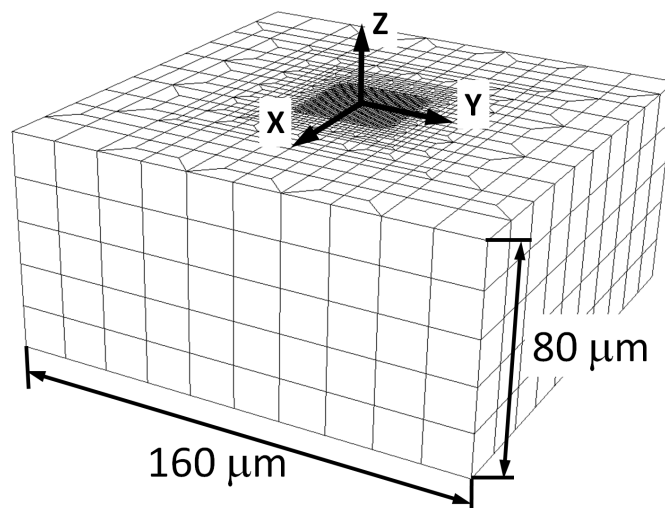


Abbildung 5.5: FE-Modell der Probe mit Abmessungen und Probenkoordinatensystem

Symmetrien ist auf Grund des anisotropen Materialverhaltens und der beliebigen Kristallorientierung des indentierten Korns nicht möglich. Für Bereiche in der Nähe der Kontaktzone von Indenter und Probe ist das Elementnetz stark verfeinert (Abbildungen 5.5 und 5.6). Dabei haben die kleinsten Elemente eine Elementkantenlänge von $1\ \mu\text{m}$, was ungefähr der räumlichen Auflösung der experimentell ermittelten Gitterrotationen entspricht. Insgesamt beinhaltet das Probennetz 20580 Hexaeder-Elemente mit linearen Ansatzfunktionen. Diese Elemente werden teilweise reduziert integriert. Dies bedeutet, dass die Berechnung der Volumenänderung nicht an jedem der 8 Gauss-Punkte erfolgt, sondern durch die Berechnung einer über das gesamte Element gemittelten Volumenänderung ersetzt wird. In der Literatur wird diese Methode als *selectively reduced-integration* (Abaqus/Benutzerhandbuch, 2007) oder auch *b-bar-method* (Hughes, 1980) bezeichnet. Effekte wie die Blockierung der Volu-

mendehnung (*volumetric locking*) werden dadurch verhindert, weshalb sich diese Elemente sehr gut für die Verwendung von nahezu inkompressiblen Materialmodellen, wie dem hier eingesetzten elastisch-viskoplastischen Modell, eignen. Als Randbedingungen werden auf der Bodenfläche der Probe die Verschiebungen in alle 3 Richtungen zu null gesetzt. Für die Seitenflächen und die Oberfläche der Probe wird für diejenigen Bereiche, die keinen Kontakt zum Indenter haben, Spannungsfreiheit vorausgesetzt.

5.3.2 Modellierung des Eindringkörpers

Obwohl der Brinell-Indenter aus Saphir besteht, wird er in einer ersten Näherung als starre Kugel modelliert. Bedingt durch diese Modellierung kann der Eindringkörper nur über Verschiebungsrandbedingungen gesteuert werden. Aus diesem Grund werden in den Simulationen der beiden Versuche die experimentell aufgezeichneten Verschiebungsdaten (Abbildung 5.1) vorgegeben. Das Modell des Indenters ist in Abbildung 5.6 schematisch dargestellt. Die Position zu Beginn der Simulation ist so gewählt, dass der Indenter die Probe im Ursprung des Probenkoordinatensystems berührt. Die Eindringrichtung ist die negative Z-Richtung. Alle weiteren Verschiebungen und Rotationen des Eindringkörpers werden verhindert.

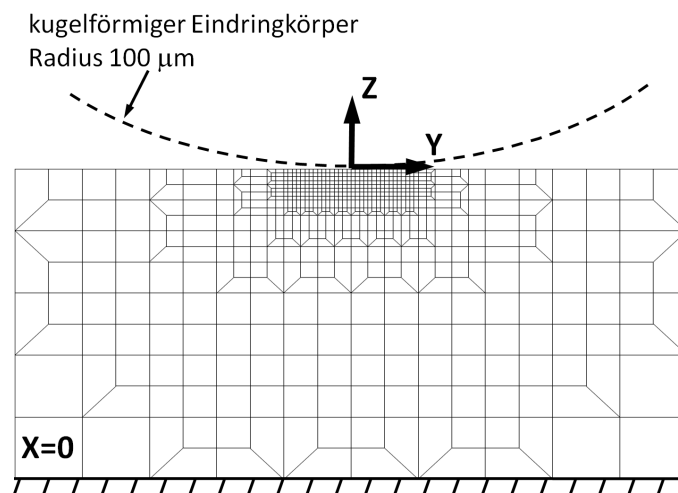


Abbildung 5.6: Querschnitt des FE-Modells bei $X=0$ mit schematischer Darstellung des Eindringkörpers

5.3.3 Kontaktmodellierung

Zur Modellierung der Kontakteigenschaften zwischen Indenter und Probe werden die in Abaqus vorimplementierten Modelle genutzt. Die Beschreibung des Kontakts in Normalenrichtung wird mit dem „Hard Contact“-Modell umgesetzt. Bei diesem Modell ist die gegenseitige Durchdringung der Kontaktflächen nicht zugelassen und es können ausschließlich

Druckspannungen zwischen den Kontaktflächen übertragen werden. Die numerische Umsetzung des „Hard Contact“ Modells erfolgt durch die Anwendung von Lagrangeschen Multiplikatoren (Abaqus/Benutzerhandbuch, 2007).

Zur Beschreibung des Kontaktverhaltens in tangentialer Richtung wird das einfache Coulombsche Reibungsgesetz verwendet. Bei diesem Modell wird eine kritische Schubspannung aus dem Produkt von Reibungskoeffizient und Kontaktdruck berechnet. Überschreitet die Schubspannung zwischen beiden Kontaktflächen diese kritische Schubspannung, kommt es zum Abgleiten der beiden Kontaktflächen bis die Schubspannung wieder unter den kritischen Wert abfällt. Anders als bei dem „Hard Contact“ Modell, wird diese Methode mit Hilfe eines Penalty-Verfahrens realisiert (Abaqus/Benutzerhandbuch, 2007). Auf Grund fehlender experimenteller Daten wird der Reibungskoeffizient standardmäßig mit 0,1 angenommen.

5.4 Validierung des makroskopisch identifizierten Materialmodells

In diesem Abschnitt wird analysiert, inwieweit das mit Hilfe von polykristallinen Versuchen angepasste Materialmodell (Materialparameter in den Tabellen 3.5 und 3.7) in der Lage ist, das Materialverhalten auf der einkristallinen Kornebene wiederzugeben. Diese Einschätzung erfolgt anhand eines Vergleichs von gemessenen und berechneten Daten für die beiden mikroskopischen Eindringversuche. Im Einzelnen handelt es sich um die Kraft-Verschiebungskurven und die zwei-dimensionalen Felder der Gitterrotationen.

5.4.1 Vergleich der Kraft-Verschiebungskurven

Der Vergleich von gemessenen und berechneten Kraft-Verschiebungskurven (Abbildungen 5.7 und 5.8) zeigt für beide Versuche eine gute Übereinstimmung. Besonders für den Bereich der Belastung werden die gemessenen Kräfte durch die Berechnung nur leicht überschätzt. Größere Abweichungen sind hingegen im Bereich der Entlastung zu erkennen. Hier sagt die Berechnung ein wesentlich steiferes Materialverhalten voraus. Trotz dieser insgesamt guten Übereinstimmung der Kraft-Verschiebungskurven gibt es einige Unsicherheiten, die einer weiterführenden Diskussion bedürfen. Diese Unsicherheiten lassen sich zu den folgenden drei Fragestellungen zusammenfassen:

- Die mittels polykristallinem Scherversuch identifizierten Verfestigungsparameter hängen stark von der bei der Identifikation verwendeten Homogenisierungsmethode ab. Welchen Einfluss hätte eine Änderung der Homogenisierungsmethode auf die berechneten Kraft-Verschiebungskurven?
- Die Identifikation erfolgt anhand von Versuchsdaten, die an Proben des nicht wärmebehandelten Materials ermittelt werden. Der Eindringversuch wird hingegen am grobkorngeglühten Material durchgeführt. In wie weit hat diese Wärmebehandlung das Verfestigungsverhalten des Materials beeinflusst?

- Ist bei dem Übergang von der polykristallinen zur einkristallinen Ebene ein Größeneffekt zu erwarten und welchen Einfluss hätte ein solcher Effekt auf die Ergebnisse?

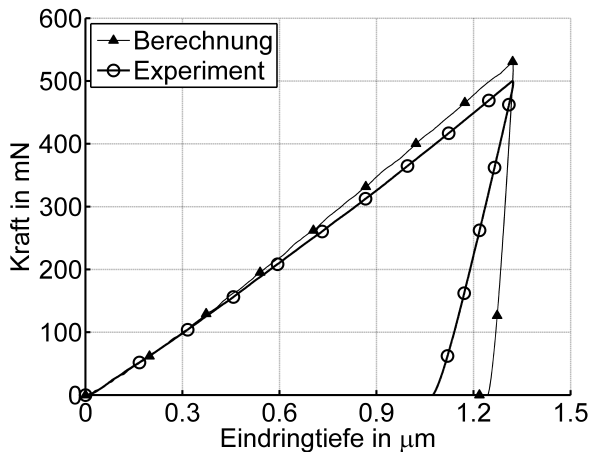


Abbildung 5.7: Vergleich der experimentellen und berechneten Kraft-Verschiebungskurve für Versuch 1

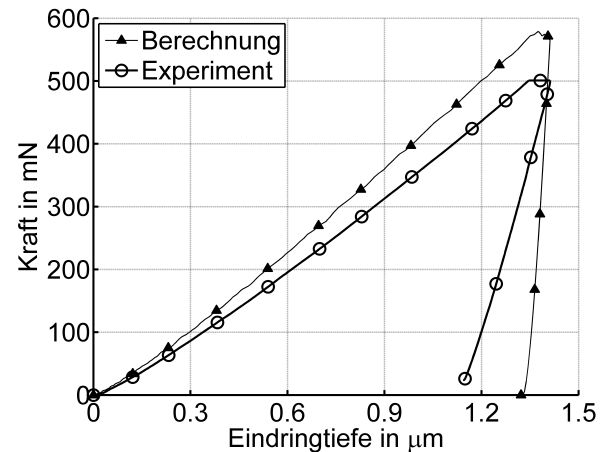


Abbildung 5.8: Vergleich der experimentellen und berechneten Kraft-Verschiebungskurve für Versuch 2

Die für die Identifikation verwendete Taylor-Homogenisierung schränkt die Deformationsmöglichkeiten des Materials beträchtlich ein und prognostiziert demzufolge ein steiferes Materialverhalten als es z. B. mit einer RVE-Homogenisierung der Fall wäre. Somit würde die Verwendung der RVE-Homogenisierung bei der Identifikation größere als die bisher ermittelten Verfestigungsparameter zur Folge haben. Unter der Annahme, dass die RVE-Homogenisierung realitätsnähere Ergebnisse liefert, sind die hier verwendeten Verfestigungsparameter als etwas unterschätzt anzusehen. Bezüglich der Mikroindenterversuche bedeutet dies, dass eine Änderung der Homogenisierungsmethode einen steileren Anstieg der Kraft-Verschiebungskurven bewirkt, wodurch sich der Abstand zwischen Experiment und Simulation vergrößern würde.

Der in der zweiten Fragestellung angesprochene Unterschied der Verfestigungseigenschaften zwischen dem nicht wärmebehandelten und dem grobkorngeglühten Material kann anhand der Doppelindenterversuche abgeschätzt werden (Abbildung 4.4). Es zeigt sich erwartungsgemäß eine deutliche Entfestigung des grobkorngeglühten Materials, woraus eine Differenz von ca. 25 % zwischen den Kraft-Verschiebungskurven für die unterschiedlichen Proben resultiert. Überträgt man dieses Verhalten auf die Ergebnisse der Mikroindenterversuche, so wäre bei gleicher Eindringtiefe mit deutlich höheren experimentellen Eindringkräften für das nicht wärmebehandelte Material zu rechnen. Dieser und der im ersten Punkt beschriebene Effekt sind somit gegenläufig und könnten sich zum Teil kompensieren.

Der im dritten Punkt angesprochene Größeneffekt kann maßgeblich zwei Ursachen haben. Zum Einen ist es möglich, dass die Anzahl statistisch verteilter Versetzungen im Materialvolumen unterhalb des Eindrucks so gering ist, dass dies zu einem veränderten plastischen

Verhalten führt. Zum Anderen wäre denkbar, dass es während des Eindringversuchs zu einem Aufstau der Versetzungen an den Korngrenzen und somit zu einer ansteigenden Verfestigung kommt. Da der Indenter einen Radius von $100\ \mu\text{m}$ hat und der bleibende Eindruck im Material einen Durchmesser von ungefähr $30\ \mu\text{m}$ aufweist, ist davon auszugehen, dass eine statistisch repräsentative Anzahl von Versetzungen im indentierten Materialvolumen vorhanden ist. Eindringversuche, bei denen solche Effekte üblicherweise gemessen werden, liegen in Größenbereichen von mehreren Nanometern. Weithin wird auch der Aufstau von Versetzungen an den Korngrenzen als unwahrscheinlich angesehen, da sich, wie in Abbildung 5.4 zu erkennen ist, die Gitterrotationen und somit auch die Versetzungsaktivität auf ein Gebiet innerhalb des Kornes beschränken.

Auch bei der Entlastungskurve müssen mehrere Aspekte berücksichtigt werden, die für die beobachtete Diskrepanz zwischen Experiment und Simulation eine Rolle spielen könnten.

- Da die Steifigkeit eines Saphir-Indenters deutlich geringer ist als z. B. diejenige eines Diamant-Indenters, könnte es während des Eindringversuchs zu einer nicht unerheblichen elastischen Deformation des Indenters kommen. Dieser Effekt wird erst in nachfolgenden Berechnungen berücksichtigt. Weiterhin ist unbekannt, wie hoch die Nachgiebigkeit der Probenhalterung bei den Versuchen ist.
- Die Entlastungskurve spiegelt kein vollkommen elastisches Materialverhalten wider. Vielmehr kommt es zu einem Abbau von Versetzungsstaus und somit zu einer Art plastischer Erholung. Solch ein Materialverhalten kann von dem hier verwendeten Materialmodell nicht nachgebildet werden.
- Da die elastischen Eigenschaften des ferritischen Materials nicht genau bekannt sind, ist hier ein gewisser Spielraum für Anpassungen gegeben. Dieser wird jedoch nicht als groß genug erachtet, um die gesamte Differenz zwischen gemessener und berechneter Entlastungskurve auszugleichen.

Abschließend kann nicht völlig geklärt werden, welcher der erwähnten Einflussfaktoren maßgeblich für die Differenz zwischen Messung und Simulation verantwortlich ist.

Dass die Kraft-Verschiebungskurve des zweiten Versuchs stärker überschätzt wird als die des ersten Versuchs, kann auf eine überhöhte Dehnratensensitivität des Materialmodells zurückgeführt werden. Verwendet man für die Berechnung des zweiten Versuchs die niedrigere Eindringgeschwindigkeit des ersten Versuchs, resultiert daraus eine Kraft-Verschiebungskurve, die sich kaum von der des ersten Versuchs unterscheidet. Diese Übereinstimmung ist auch zwischen den beiden experimentell bestimmten Kraft-Verschiebungskurven (Abbildung 5.2) zu beobachten.

5.4.2 Vergleich der Rotationen

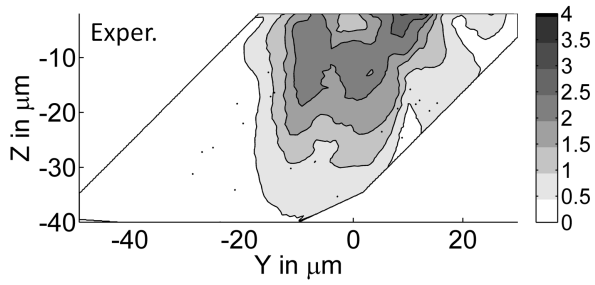
Die Kontourdiagramme (Abbildungen 5.9 und 5.10) zeigen eine Gegenüberstellung der gemessenen und berechneten Rotationen für den ersten und den zweiten Versuch. Neben den

Gesamtrotationen werden auch die Rotationen um die einzelnen Achsen des Probenkoordinatensystems miteinander verglichen. Die beste Übereinstimmung lässt sich dabei für die Rotationen um die X-Achse erkennen. Es ist bemerkenswert, dass das Berechnungsmodell nicht nur das prinzipielle Auftreten von zwei Rotationsgebieten mit unterschiedlichem Drehsinn wiedergibt. Auch Details werden präzise von der Berechnung vorhergesagt (vgl. Abbildung 5.9 b und f bei Koord. Z=-12; Y=18 bzw. Abbildung 5.10 b und f bei Koord. Z=-6; Y=-20). Im Fall der Gesamtrotationen und der Rotationen um die X-Achse wird die räumliche Ausbreitung der Rotationen sehr gut vom Berechnungsmodell prognostiziert. Dies gilt sowohl in vertikale als auch in horizontale Richtung. Etwas größere Abweichungen sind vor allem für Versuch 1 bei den Rotationen um die Y- und Z-Achse zu erkennen.

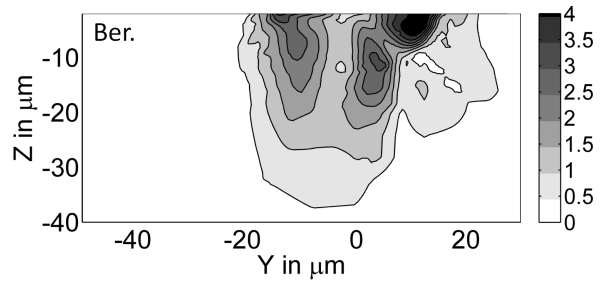
Weiterhin ist für beide Versuche zu beobachten, dass in den Simulationen die Größe der Rotationen überschätzt wird. Dies ist besonders für Regionen direkt unterhalb des Indenters der Fall. Während hier Gesamtrotationen von maximal 3° gemessen werden, ergeben sich in den Simulationen Maxima von 4° . Diese Beobachtung deckt sich mit denen von Zaaferani et al. (2006, 2008) und Britton et al. (2010), welche ihre Untersuchungen an kubisch-flächenzentrierten und hexagonalen Kristallen durchgeführt haben. Somit scheint die Überschätzung der Rotationen unabhängig von der untersuchten Gitterstruktur und den bisher eingesetzten Berechnungsmodellen zu sein.

Die Überschätzung der Größe der Rotationen deckt sich ebenfalls mit der Prognose eines zu steilen Abfalls der numerischen Kraft-Verschiebungskurven im Bereich der Entlastung (Abbildungen 5.7 und 5.8). Interpretiert man die resultierende Tiefe des bleibenden Eindrucks als ein Maß für die plastische Deformation des Probenmaterials, so wird diese von den Berechnungen erheblich überschätzt. Die im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Ursachen für die Unterschiede bei den Kraft-Verschiebungskurven könnten somit auch einen maßgeblichen Einfluss auf die Diskrepanz zwischen den gemessenen und berechneten Rotationen haben. Trotz der beschriebenen Unterschiede zwischen Experiment und Berechnung ist die Genauigkeit der Berechnungsergebnisse hoch.

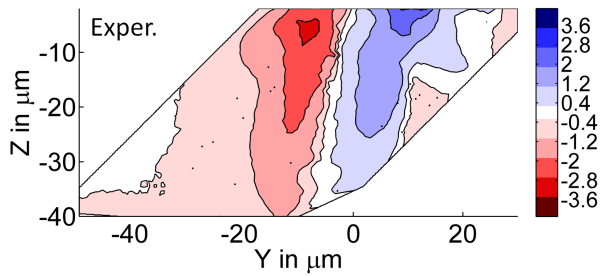
a) **Experiment** - Gesamtdrehung



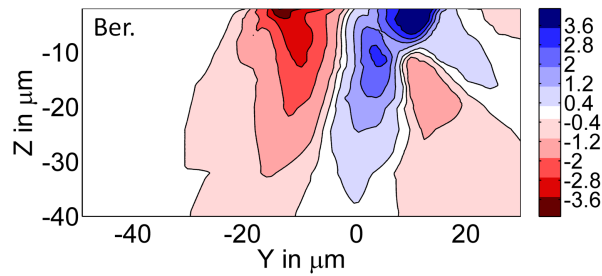
e) **Berechnung** - Gesamtdrehung



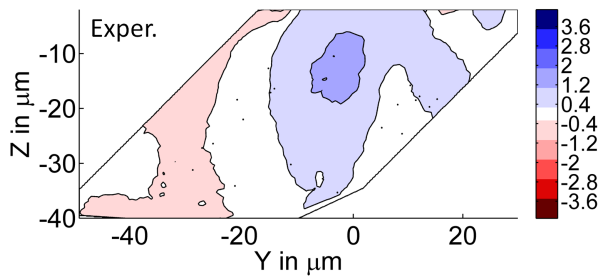
b) **Experiment** - Rotation um die X-Achse



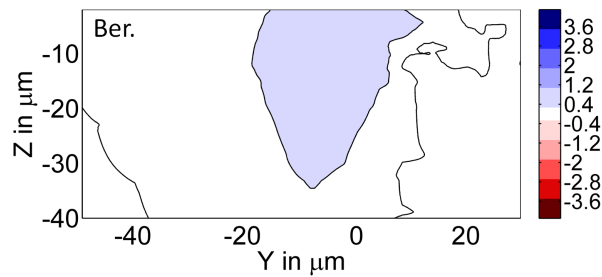
f) **Berechnung** - Rotation um die X-Achse



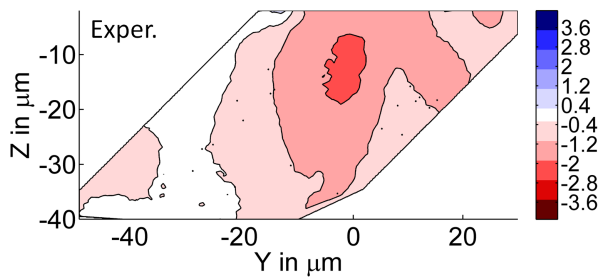
c) **Experiment** - Rotation um die Y-Achse



g) **Berechnung** - Rotation um die Y-Achse



d) **Experiment** - Rotation um die Z-Achse



h) **Berechnung** - Rotation um die Z-Achse

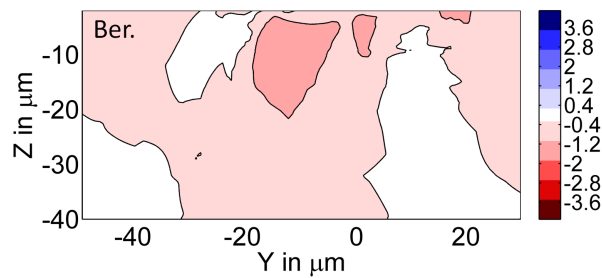


Abbildung 5.9: Vergleich der gemessenen (a-d) und berechneten (e-h) Gitterrotationen für Versuch 1 (in Grad)

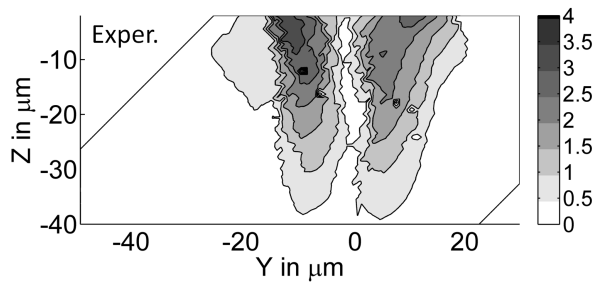
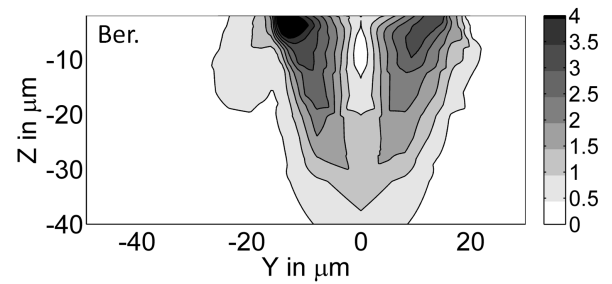
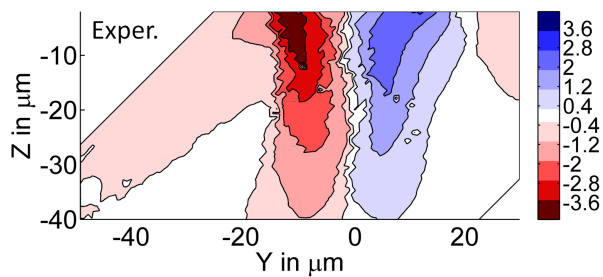
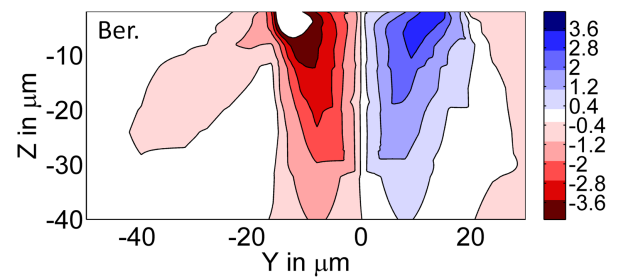
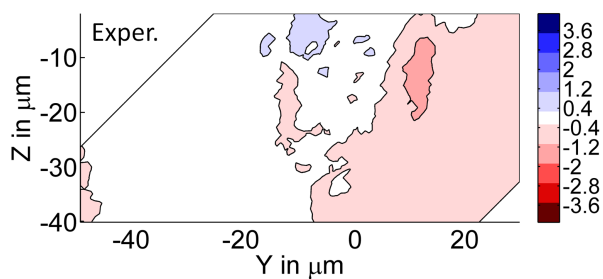
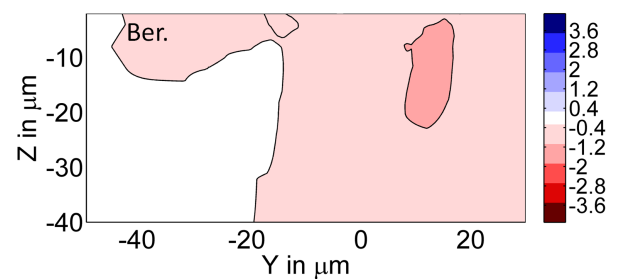
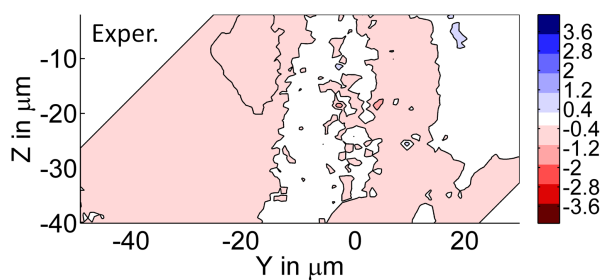
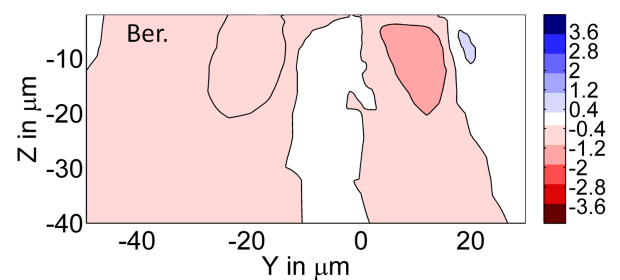
a) **Experiment** - Gesamtrotatione) **Berechnung** - Gesamtrotationb) **Experiment** - Rotation um die X-Achsef) **Berechnung** - Rotation um die X-Achsec) **Experiment** - Rotation um die Y-Achseg) **Berechnung** - Rotation um die Y-Achsed) **Experiment** - Rotation um die Z-Achseh) **Berechnung** - Rotation um die Z-Achse

Abbildung 5.10: Vergleich der gemessenen (a-d) und berechneten (e-h) Gitterrotationen für Versuch 2 (in Grad)

5.5 Untersuchung der Abhängigkeit der Berechnungsergebnisse von verschiedenen Modelleigenschaften

In diesem Abschnitt werden systematisch bestimmte Modelleigenschaften geändert um deren Einfluss auf die Kraft-Verschiebungskurve und die Rotationen zu untersuchen. In vielen Fällen ist der Einfluss dieser Änderungen auf die Berechnungsergebnisse für beide Versuche äquivalent. Aus diesem Grund werden die Auswertungen oftmals nur für einen der beiden Versuche dargestellt. Weiterhin wird dazu übergegangen, die Rotationen entlang horizontaler und vertikaler Linien zu vergleichen. Diese Art der Darstellung ermöglicht eine genauere quantitative Beurteilung der Ergebnisse.

5.5.1 Studie zur Netzabhängigkeit der Berechnungsergebnisse

Im Folgenden soll anhand einer Variation der Diskretisierung analysiert werden, inwieweit die numerische Lösung des Mikroeingringversuchs von der Elementgröße abhängt und ob eine Konvergenz der Lösung erreicht werden kann. Dazu werden vier verschiedene Netze mit unterschiedlich feinen Diskretisierungen erzeugt. Da die Berechnungsdauer quadratisch mit der Anzahl der Freiheitsgrade im Modell steigt und ein dreidimensionales Problem vorliegt, ist die Menge der zu untersuchenden Elementgrößen stark begrenzt. Um dennoch hinreichend

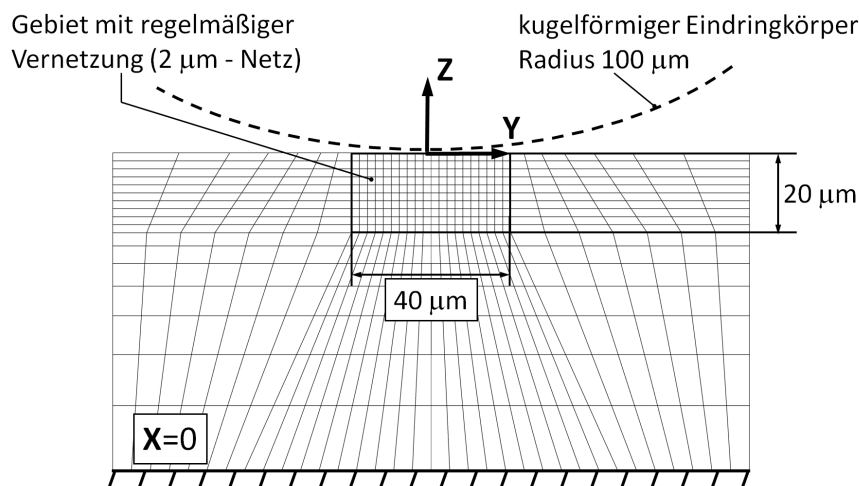


Abbildung 5.11: Querschnitt eines der vier FE-Netze zur Untersuchung der Netzabhängigkeit (beispielhaft für das $2\ \mu\text{m}$ -Netz)

kleine Elementgrößen verwenden zu können, wird die Netzverfeinerung auf ein relativ kleines quaderförmiges Gebiet des Probenmodells beschränkt. Die Abmessungen dieses Gebiets betragen in X-Richtung und Z-Richtung $20\ \mu\text{m}$, sowie $40\ \mu\text{m}$ in Y-Richtung. Es umfasst denjenigen Bereich der Probe, für den die größten plastischen Deformationen erwartet werden (Abbildung 5.11). Für jede der vier Diskretisierungsstufen werden würfelförmige Elemente

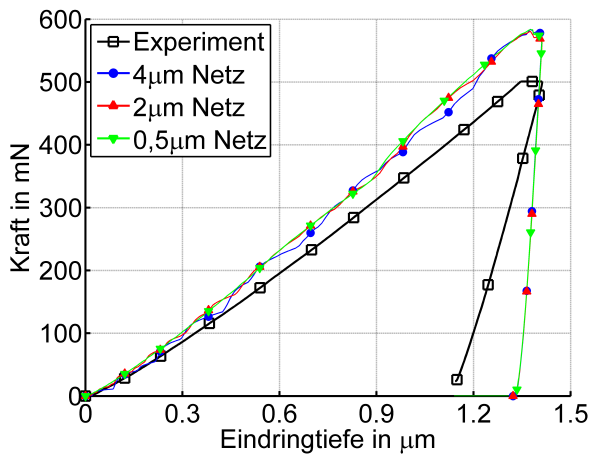


Abbildung 5.12: Kraft-Verschiebungskurve für drei verschiedene Diskretisierungsstufen

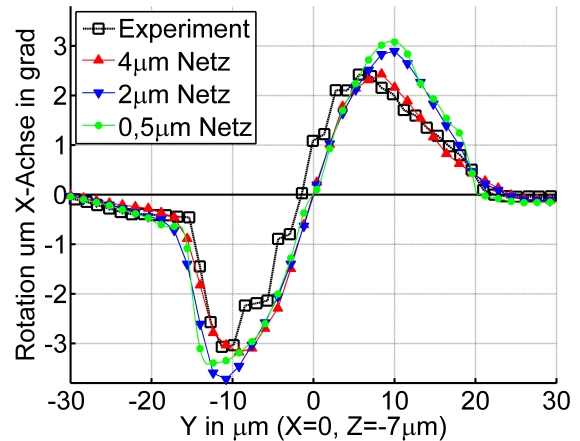


Abbildung 5.13: Rotationen um die X-Achse in Abhängigkeit der Elementgröße

eingesetzt, deren Kantenlängen jeweils 4, 2, 1 und 0,5 μm betragen. Alle weiteren Modelleigenschaften sind mit denen identisch, die in Abschnitt 5.3 beschrieben sind. Der Vergleich in Abbildung 5.12 für drei der vier Diskretisierungsstufen macht deutlich, dass die Kraft-Verschiebungskurven nur schwach von der Elementgröße abhängen. Lediglich leichte Schwankungen während der Belastungsphase können hier beobachtet werden. Der Grund dafür ist in der unterschiedlichen Diskretisierung der Kontaktfläche zu suchen. Weil eine höhere Anzahl von Knoten eine kontinuierlichere Übertragung der Kontaktkraft erlaubt, wird eine Glättung der Kraft-Verschiebungskurve bewirkt. Im Gegensatz zur Kraft-Verschiebungskurve zeigen die Rotationen eine deutliche Abhängigkeit von der Elementgröße. Mit abnehmender Elementgröße nimmt die Höhe der Rotationen zu (Abbildung 5.13 und 5.14). Besonders deutlich

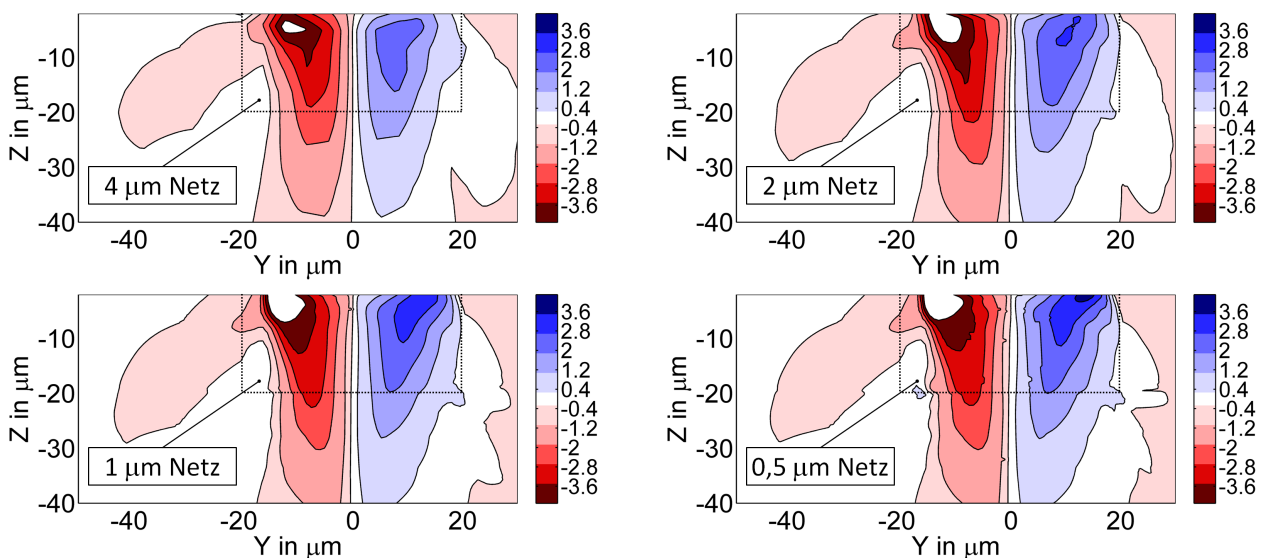


Abbildung 5.14: Kontourdiagramme der Rotationen um die X-Achse für 4 Netze mit verschiedenen Elementgrößen

ist dieser Anstieg bei der Gegenüberstellung des $4\ \mu\text{m}$ -Netzes und des $2\ \mu\text{m}$ -Netzes. Bei einem Vergleich der Lösung des $1\ \mu\text{m}$ -Netzes mit der des $0,5\ \mu\text{m}$ -Netzes können hingegen nur noch marginale Unterschiede zwischen den Rotationsfeldern festgestellt werden. Anhand dieser Beobachtungen ist es nicht auszuschließen, dass für Elementgrößen, die unterhalb von einem Mikrometer liegen, die Lösung bezüglich des Rotationsfeldes konvergiert. Die Feststellung, dass die Höhe der Rotationen mit abnehmender Elementgröße steigt, trifft allerdings nicht auf jeden Punkt des Rotationsfeldes zu. In Abbildung 5.13 im Bereich um den Punkt ($X = 0\ \mu\text{m}$, $Y = -10\ \mu\text{m}$, $Z = -7\ \mu\text{m}$) ist zu sehen, dass eine Berechnung mit dem $0,5\ \mu\text{m}$ -Netz niedrigere Rotation prognostiziert als eine Berechnung mit dem $2\ \mu\text{m}$ -Netz.

5.5.2 Einfluss der Randbedingungen

Da das indentierte Korn nicht im Kristallverbund modelliert wird sondern als monolithischer Einkristall, soll untersucht werden, inwieweit die Randbedingungen an den Seitenflächen und der Bodenfläche der Probe die Berechnungsergebnisse beeinflussen. Für das in Abschnitt 5.3.1 beschriebene Referenzmodell ist vorausgesetzt worden, dass die Seitenflächen des Probenmodells spannungsfrei sind. Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Verschiebungen an den Seitenflächen zu verhindern. Wie sich diese Änderung der Randbedingungen auf die Berechnungsergebnisse auswirkt, ist in Abbildung 5.15 am Beispiel des zweiten Versuchs dargestellt. Erkennbar ist, dass die beschriebene Änderung der Randbedingungen an den

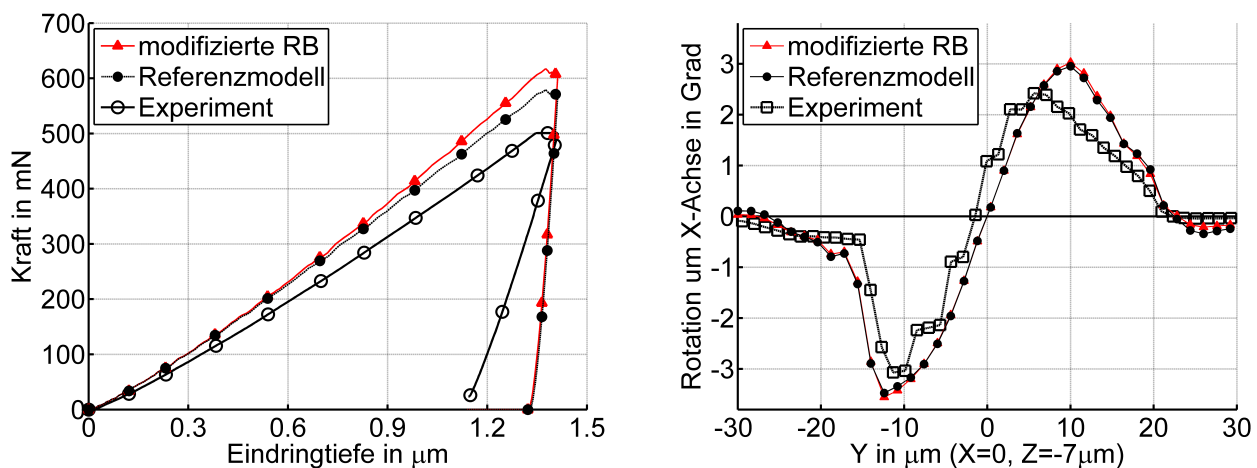


Abbildung 5.15: Vergleich der Kraft-Verschiebungskurve und der Rotationen um die X-Achse für unterschiedliche Randbedingungen an den Seitenflächen des Probenmodells

Seitenflächen einen steileren Anstieg der Kraft-Verschiebungskurve während der Belastung bewirkt. Die maximale Eindringkraft des modifizierten Modells liegt ca. 5% über derjenigen, die anhand des Referenzmodells berechnet wird. Im Entlastungsbereich zeigen hingegen beide Modelle einen identischen Kurvenverlauf. Die Rotationen weisen eine nur minimale Sensitivität gegenüber der Modifizierung der Randbedingungen auf.

Der Einfluss der Verschiebungsrandbedingungen an der Bodenfläche der Probe kann durch eine Änderung der Höhe der Probe analysiert werden. Dazu wird eine erneute Simulation des zweiten Versuchs mit einer verdoppelten Probenhöhe durchgeführt. Alle weiteren Modelleigenschaften entsprechen wieder denen des Referenzmodells. Die daraus resultierenden Änderungen der Berechnungsergebnisse sind jedoch noch geringer als diejenigen, die durch die Modifikation der Randbedingungen an den Seitenflächen hervorgerufen werden. Daher wird auf eine graphische Auswertung dieser Ergebnisse verzichtet. Abschließend ist festzustellen, dass die gewählten Abmessungen des Referenzmodells ausreichen, um eine nur geringfügig von den Randbedingungen abhängige Lösung des Eindringversuchs zu erzeugen.

5.5.3 Variation des Reibungskoeffizienten

Von Liu et al. (2005) ist anhand einer numerischen Studie gezeigt worden, dass die Oberflächenverschiebungen maßgeblich von der Reibung zwischen Eindringkörper und Probe beeinflusst werden. Hingegen ist bisher wenig darüber bekannt, wie sich die Reibung auf die Rotationen des Kristallgitters auswirken. Zur Untersuchung dieses Effekts wird die Simulation des Eindringversuchs unter Vorgabe verschiedener Reibungskoeffizienten wiederholt. Neben dem für die Referenzrechnung verwendeten Reibungskoeffizienten von $\mu = 0,1$ werden zusätzlich noch Rechnungen mit $\mu = 0,05$ und $\mu = 0$ durchgeführt.

Die Ergebnisse dieser Berechnungen werden diesmal entlang zweier vertikaler Linien miteinander verglichen. Diese Linien verlaufen parallel zur Z-Achse (Abbildung 5.6) und befinden sich an den Positionen $Y = -10 \mu m$ und $Y = 10 \mu m$. In Abbildung 5.16 ist das entsprechende Diagramm dargestellt. Darin symbolisiert $Z = 0 \mu m$ einen Punkt an der Oberfläche bzw. $Z = -40 \mu m$ einen Punkt tief im Inneren des indentierten Korns. Es zeigt sich, dass die Änderung des Reibungskoeffizienten bis ca. $15 \mu m$ unterhalb der Oberfläche einen starken

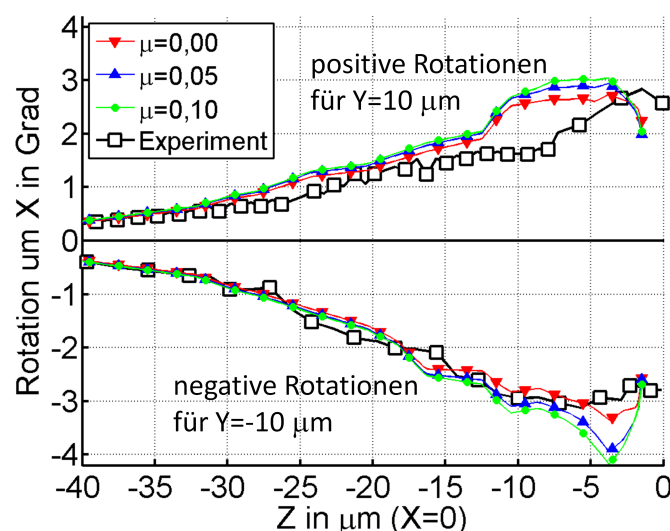


Abbildung 5.16: Rotationen um die X-Achse entlang der vertikalen Linien $Y = -10 \mu m$ und $Y = 10 \mu m$ für verschiedene Reibungskoeffizienten μ (Versuch 2)

Einfluss auf die Rotationen hat. Unterhalb dieser Marke ist bei diesem Versuch nur noch ein marginaler Unterschied der Rotationen festzustellen. Es wird deutlich, dass die Reibung zu einer Erhöhung der Rotationen führt. Eine Steigerung des Reibungskoeffizienten auf Werte über $\mu = 0,1$ führt zu keiner weiteren Erhöhung der Rotationen. Weiterhin hat sich gezeigt, dass die Kraft-Verschiebungskurve nur unwesentlich von der Variation des Reibungskoeffizienten beeinflusst wird.

5.5.4 Berücksichtigung der Nachgiebigkeit des Eindringkörpers

Als ein möglicher Grund für die Unterschiede zwischen der berechneten und der gemessenen Kraft-Verschiebungskurve im Bereich der Entlastung wird in Abschnitt 5.4.1 die Vernachlässigung der Nachgiebigkeit des Indenters angegeben. Um abschätzen zu können, inwieweit diese Idealisierung einen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse hat, werden Vergleichsrechnungen mit einem elastischen Indenter durchgeführt. Der für die Experimente verwendete Saphir-Indenter besitzt eine kugelförmige Spitze mit einem Radius von $100 \mu\text{m}$. Unbekannt ist allerdings die weitere Geometrie des Indenters sowie dessen Halterung und die Orientierung des Saphir-Kristalls. Aus diesem Grund muss die Modellierung des Indenters stark vereinfacht werden. Im Folgenden wird angenommen, dass der Indenter aus einem isotrop-elastischen Material besteht. Die elastischen Eigenschaften von Saphir variieren beim Elastizitätsmodul zwischen $365 - 416 \text{ GPa}$ und bei der Querkontraktionszahl zwischen $0.23 - 0.25$ (Cardarelli, 2008, S.663). Um einen möglichst nachgiebigen Indenter zu modellieren und somit einen maximalen Effekt zu erzielen, werden jeweils die unteren Grenzen der angegebenen Intervalle für das Elastizitätsmodul und die Querkontraktionszahl in der Berechnung berücksichtigt. Der Indenter wird als Halbkugel modelliert und besteht aus 23144 linearen Hexaeder-Elementen. Auf der Grundfläche dieser Halbkugel werden als

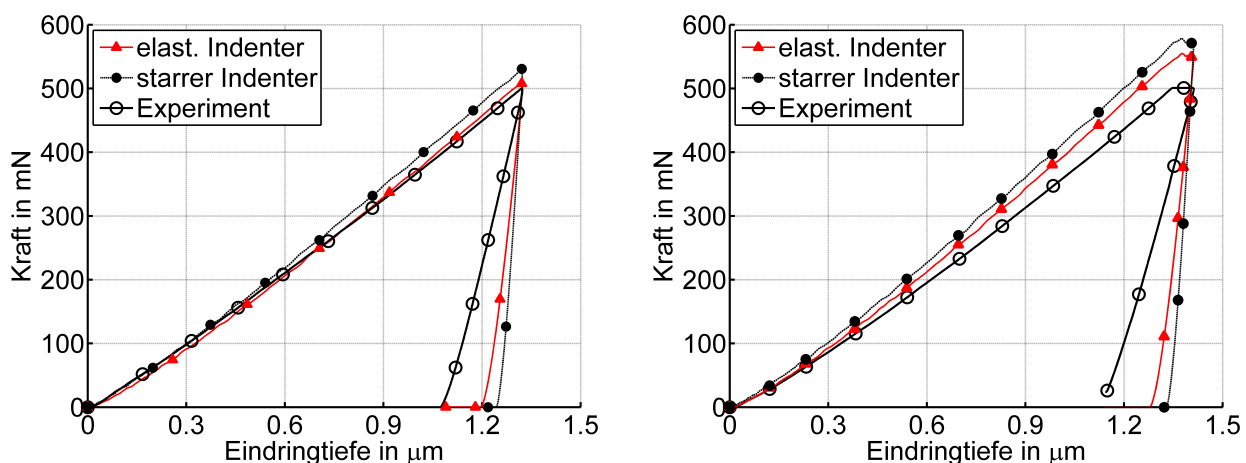


Abbildung 5.17: Einfluss der Nachgiebigkeit des Indenters auf die Kraft-Verschiebungskurven von Versuch 1 und 2

Randbedingungen die Verschiebungen in alle drei Richtungen vorgegeben, für die beiden

Richtungen senkrecht zur Eindringrichtung werden die Verschiebungen zu null gesetzt. Alle anderen Modelleigenschaften sind identisch mit denen des Referenzmodells. In Abbildung 5.17 werden für Versuch 1 und 2 die Kraft-Verschiebungskurven verglichen. Es zeigt sich, dass bei Berücksichtigung der Nachgiebigkeit des Eindringkörpers die Eindringkraft reduziert wird. Ebenfalls reduziert sich die Tiefe des bleibenden Eindrucks. Diese Änderungen stellen zwar eine Annäherung an die Messdaten dar, dennoch existiert ein deutlicher Unterschied zwischen den gemessenen und berechneten Kraft-Verschiebungskurven im Bereich der Entlastung. Beispielhaft für die Rotationen werden die Gesamtrotationen entlang einer horizontalen Linie $7\ \mu\text{m}$ unterhalb der Kornoberfläche miteinander verglichen (Abbildung 5.18). Auch hier zeigt die Berechnung mit einem elastischen Indenter realistischere Werte als die Referenzrechnung. Für Versuch 1 ergibt sich sogar eine Reduzierung der maximalen Gesamtrotation um ca. 10%. Ansonsten prognostizieren beide Modelle über weite Bereiche beinahe identische Rotationen. Auf Grund der feinen Diskretisierung des Eindringkörpers steigt allerdings die Berechnungszeit für dieses Modell erheblich an.

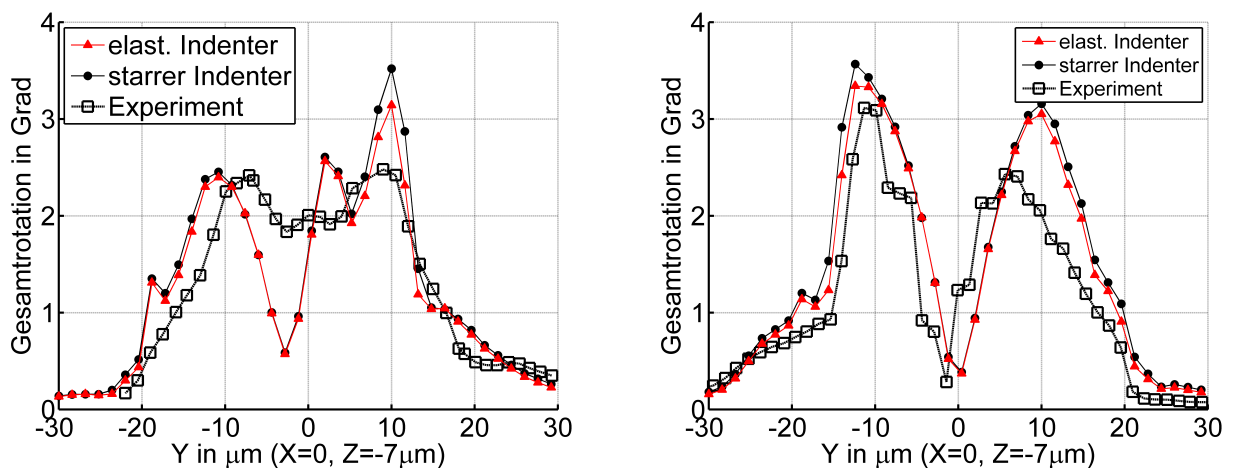


Abbildung 5.18: Änderung der Gesamtrotationen bei Berücksichtigung der Nachgiebigkeit des Indenters (links: Versuch 1; rechts Versuch 2)

5.6 Sensitivität der Rotationen gegenüber verschiedenen Materialparametern

Im folgenden Abschnitt soll die Sensitivität der Rotationen in Abhängigkeit von verschiedenen Materialparametern untersucht werden. Wie im vorhergehenden Abschnitt werden auch hier die Rotationen anhand von Liniendiagrammen verglichen.

5.6.1 Variation der Gleitebenen

Wie bereits in Abschnitt 3.2.3 beschrieben, ist die Bestimmung der Gleitebenen in kubisch-raumzentrierten Materialien mit großen Unsicherheiten verbunden. Meist wird hier eine auf Literaturquellen gestützte Annahme getroffen, die jedoch bei der Untersuchung polykristalliner Materialien keiner experimentellen Überprüfung zugänglich ist. Mit den gemessenen Rotationen stehen experimentelle Daten zur Verfügung, die durch die Wahl der Gleitebenen beeinflusst werden. Wie hoch die Sensitivität der Rotationen in Abhängigkeit der aktiven Gleitebenen ist und ob es eventuell möglich ist eine Anpassung durchzuführen, soll im Folgenden untersucht werden.

Nach dem aktuellen Stand der Forschung ist nicht davon auszugehen, dass die Modellierung einer immer größeren Anzahl von Gleitsystemen zu immer realistischeren Berechnungsergebnissen führt. Weiterhin scheint keine streng hierarchische Ordnung bezüglich der Aktivierungsreihenfolge in Abhängigkeit des Netzebenenabstandes zu existieren. So können z. B. die $\langle 111 \rangle \{112\}$ -Gleitsysteme aktiviert werden, ohne dass es zur Aktivierung der $\langle 111 \rangle \{110\}$ -Gleitsysteme kommen muss. Während für alle bisherigen Berechnungen die Summe der $\langle 111 \rangle \{110\}$ - und $\langle 111 \rangle \{112\}$ -Gleitsysteme als aktivierbare Gleitsysteme zur Verfügung gestanden hat, werden für die nachfolgenden Berechnungen ausschließlich die $\langle 111 \rangle \{110\}$ -

Tabelle 5.2: Anhand des monotonen Scherversuchs angepasste Verfestigungsparameter für eine unterschiedliche Auswahl von Gleitsystemen

Gleitsysteme	\tilde{d}, \tilde{n}	$\langle 111 \rangle \{110\}$ $\langle 111 \rangle \{112\}$	$\langle 111 \rangle \{110\}$	$\langle 111 \rangle \{112\}$
Referenzscherrate	$\dot{\gamma}_0$	$10^{-3} s^{-1}$	$10^{-3} s^{-1}$	$10^{-3} s^{-1}$
Dehnratensens.-exponent	m	0,02	0,02	0,02
elastische Konstanten (in GPa)	K_{1111} K_{1122} K_{1212}	207 121 105	207 121 105	207 121 105
Verfestigungs- parameter (in MPa)	τ_{c0} τ_{cs} θ_0 θ_∞	57.4 115 804 42.5	55.3 110 739 38.9	52.6 105 674 36.2

Gleitsysteme oder die $\langle 111 \rangle \{112\}$ -Gleitsysteme zugelassen. Da diese Modifikation auch eine Änderung des Verfestigungsverhaltens verursacht, ist es notwendig, die Verfestigungsparameter erneut an den monotonen Scherversuch anzupassen. In Tabelle 5.2 werden neben dem bisher verwendeten Satz von Materialparametern (linke Spalte) auch die beiden neuen Materialparametersätze angegeben. Es ist zu sehen, dass sich für die neue Auswahl von Gleitsystemen kleinere Verfestigungsparameter ergeben. Trotz der Neuanpassung an den polykristallinen Scherversuch zeigen die Kraft-Verschiebungskurven des Eindringversuchs (Abbildung 5.19) eine deutliche Differenz zwischen den Berechnungen mit unterschiedlichen Gleitsystemen. In Abbildung 5.20 werden die resultierenden Rotationen um die X-Achse verglichen. Für beide Versuche zeigt sich, dass die Berechnung mit den $\langle 111 \rangle \{110\}$ -Gleitsystemen wesentlich höhere Maxima prognostiziert als diejenige mit den $\langle 111 \rangle \{112\}$ -Gleitsystemen. Für den Ausschnitt der in Abbildung 5.20 dargestellt wird, liegen die mit den $\langle 111 \rangle \{112\}$ -Gleitsystemen

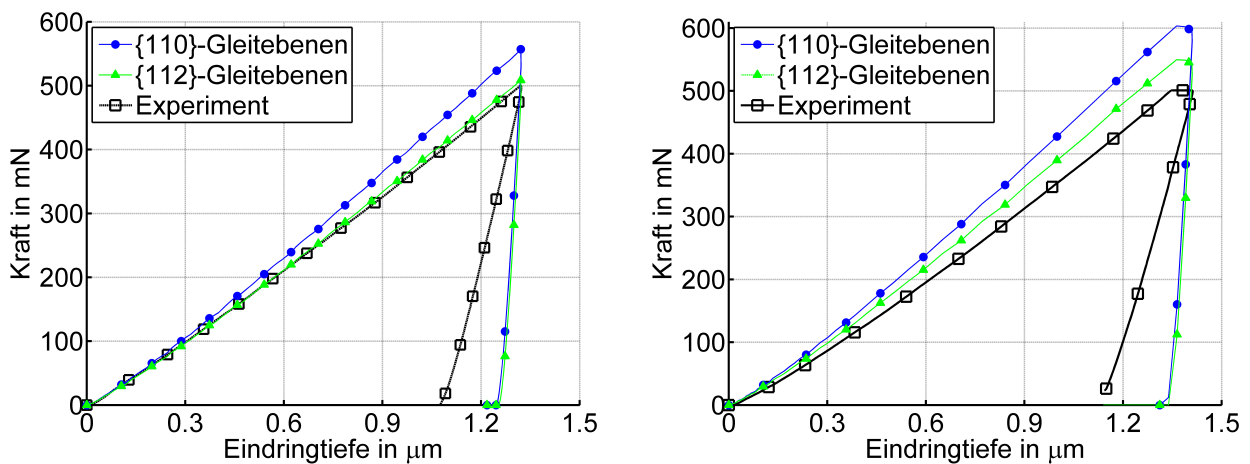


Abbildung 5.19: Kraft-Verschiebungskurven in Abhängigkeit der verwendeten Gleitsysteme (**links:** Versuch 1; **rechts:** Versuch 2)

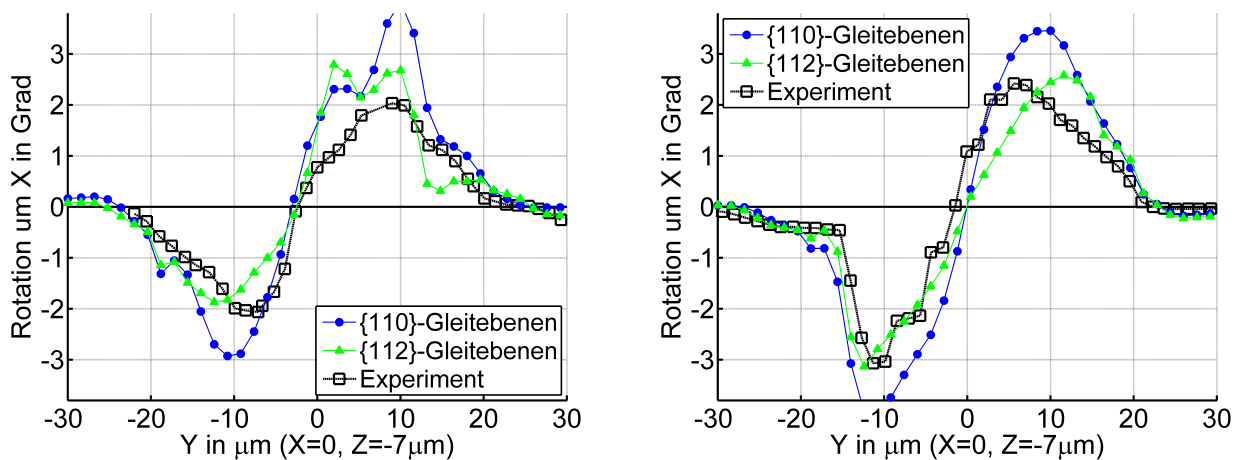


Abbildung 5.20: Sensitivität der Rotationen um die X-Achse bezüglich der Wahl der Gleitebenen (**links:** Versuch 1; **rechts:** Versuch 2)

berechneten maximalen Rotationen nur knapp über den gemessenen Maxima. Allerdings sind auch Bereiche erkennbar, in denen mit den $\langle 111 \rangle \{112\}$ -Gleitsystemen schlechtere Prognosen erzielt werden als mit den $\langle 111 \rangle \{110\}$ -Gleitsystemen. Die vom Referenzmodell prognostizierten Rotationen liegen immer zwischen den Lösungen der mit einer reduzierten Anzahl von Gleitsystemen durchgeführten Berechnung. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird an dieser Stelle auf die Darstellung der Referenzlösung verzichtet.

Diese Untersuchung hat gezeigt, dass die Wahl der Gleitsysteme einen erheblichen Einfluss auf die Entwicklung der Rotationen unterhalb des Eindrucks hat. Anhand der hier vorgestellten Ergebnisse ist es jedoch nicht möglich, die dominierenden Gleitsysteme in dem untersuchten Material zu identifizieren. Gerade die im Entlastungsbereich erkennbare Differenz zwischen den gemessenen und berechneten Kraft-Verschiebungskurven ist ein Hinweis auf bestehende Ungenauigkeiten des Berechnungsmodells. Deren Beseitigung ist voraussichtlich mit einer deutlichen Reduzierung der Größe der Rotationen verbunden, wie es in Abschnitt 5.5.4 am Beispiel einer Berechnung mit einem elastischen Indenter zu sehen ist. In solch einem Fall wäre eine Neubewertung des hier vorgestellten Vergleichs erforderlich.

5.6.2 Berücksichtigung von Selbst- und Fremdverfestigung

Im Verlauf des Eindringversuchs ist das Material unterhalb des Indenters einem ständigem Wechsel der Belastungsrichtung ausgesetzt. Da mit diesem Wechsel der Belastungsrichtung auch ein Wechsel der aktiven Gleitsysteme verbunden ist, hat auch das Verhältnis von Selbst- zu Fremdverfestigung einen nicht unerheblichen Einfluss auf die Gitterrotationen. Aus diesem Grund werden die folgenden Berechnungen der mikroskopischen Eindringversuche unter Verwendung von Verfestigungsregel II durchgeführt, welche eine unterschiedliche Wichtung von Selbst- und Fremdverfestigung ermöglicht. Die Identifikation der dafür notwendigen Verfestigungsparameter wird in Abschnitt 3.3.3 beschrieben. Dort sind in Tabelle 3.10 die anhand der monotonen und zyklischen Scherversuche ermittelten Werte aufgeführt. Die Auswertung der Kraft-Verschiebungskurven hat für beide Versuche ergeben, dass die Unterschiede zwischen der Berechnung mit Verfestigungsregel II und mit dem Referenzmodell vernachlässigbar klein sind. Betrachtet man die resultierenden Rotationen (Abbildung 5.21), so erkennt man einen deutlichen Unterschied zu den Ergebnissen, die vom Referenzmodell prognostiziert werden. Für den hier untersuchten Fall einer starken Fremdverfestigung zeigt sich allerdings in weiten Bereichen eine große Diskrepanz zwischen den gemessenen und den berechneten Werten. Besonders deutlich ist dies für die Gesamtrotationen des zweiten Versuchs sichtbar. Zusätzlich werden in Abbildung 5.21 die Rotationen um die X-Achse dargestellt. Hier lässt sich erkennen, dass mit einer zunehmenden Fremdverfestigung auch ein schnellerer Wechsel von negativen zu positiven Rotationen einhergeht.

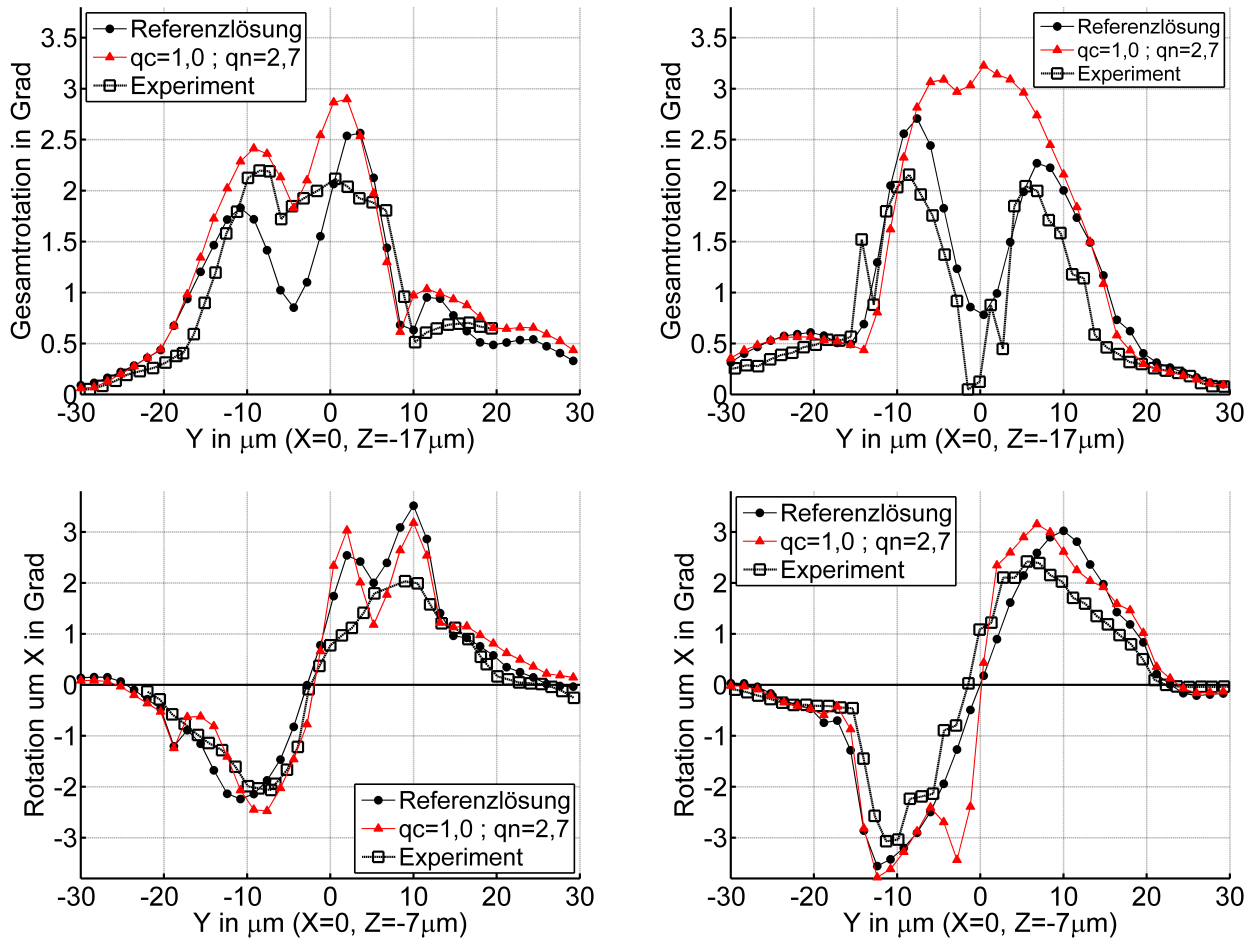


Abbildung 5.21: Einfluss einer Wichtung zwischen Selbst- und Fremdverfestigung auf die Rotationen (**links:** Versuch 1; **rechts:** Versuch 2; **oben:** Gesamttrotationen; **unten:** Rotationen um die X-Achse)

5.6.3 Variation der Referenzscherrate

In Abschnitt 3.2.4 ist der Einfluss einer Modifikation der Referenzscherrate $\dot{\gamma}_0$ auf das Verfestigungsverhalten diskutiert worden. Für Versuche mit konstanten Dehnraten können diese, durch eine Modifikation der Referenzscherrate hervorgerufenen Änderungen des Verfestigungsverhaltens, mittels einer Neuanpassung der Verfestigungsparameter ausgeglichen werden. Offen ist jedoch, inwieweit solche Änderungen die Entwicklung aller weiteren inneren Variablen beeinflussen. Die inneren Variablen des hier verwendeten Materialmodells sind neben der kritischen Schubspannung τ_k die Komponenten von $\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{F}\mathbf{P}$. Da die Informationen über die Rotationen des Kristallgitters in $\tilde{\mathbf{F}}$ enthalten sind, wird angenommen, dass eine Modifikation der Referenzscherrate eine Änderung der resultierenden Rotationen zur Folge hat.

Zur Untersuchung dieser Problematik werden die Verfestigungsparameter von Verfestigungsregel I für 2 weitere Referenzscherraten $\dot{\gamma}_0 = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ und $\dot{\gamma}_0 = 10^3 \text{ s}^{-1}$ an den monotonen

Tabelle 5.3: Anhand des monotonen Scherversuchs angepasste Verfestigungsparameter für verschiedene Referenzscherraten $\dot{\gamma}_0$

Gleitsysteme	$\tilde{\mathbf{n}}, \tilde{\mathbf{d}}$	$\{110\}\langle 111 \rangle$	$\{110\}\langle 111 \rangle$	$\{110\}\langle 111 \rangle$
		$\{112\}\langle 111 \rangle$	$\{112\}\langle 111 \rangle$	$\{112\}\langle 111 \rangle$
Referenzscherrate	$\dot{\gamma}_0$	10^{-3} s^{-1}	10^{-1} s^{-1}	10^3 s^{-1}
Dehnratensens.-exponent	m	0,02	0,02	0,02
elastische Konstanten (in GPa)	K_{1111}	207	207	207
	K_{1122}	121	121	121
	K_{1212}	105	105	105
Verfestigungsparameter (in MPa)	τ_{k0}	57.4	63.0	75.7
	τ_{ks}	115	126	151
	θ_0	804	882	1060
	θ_∞	42.5	46.6	56.0

Scherversuch angepasst. Die Ergebnisse dieser Anpassung sind in Tabelle 5.3 zusammengefasst. Es ist erkennbar, dass die Erhöhung der Referenzscherrate ebenfalls zu einer Erhöhung der Verfestigungsparameter führt. Die Ergebnisse dieser Untersuchung werden in Abbildung 5.22 beispielhaft für die Kraft-Verschiebungskurve und die Rotationen um die X-Achse von Versuch 2 dargestellt. Entgegen den bisher geäußerten Erwartungen führt die Modifikation der Referenzscherrate zu keiner Änderung der Lösung des Mikroindenterversuchs.

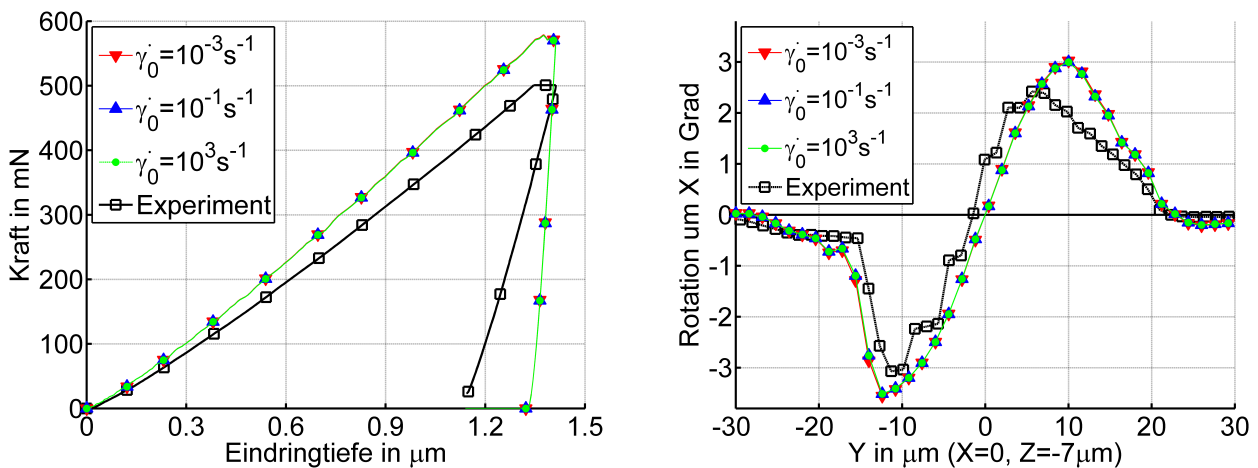


Abbildung 5.22: Vergleich der Kraft-Verschiebungskurven und der Rotationen um die X-Achse für Berechnungen mit 3 unterschiedlichen Referenzscherraten $\dot{\gamma}_0$ (Versuch 2)

Kapitel 6

Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es, die Möglichkeiten der Identifikation und Validierung eines kristallplastischen Materialmodells anhand von Eindringversuchen auf der Makro- und Mikroebene zu analysieren. Dazu wurden vielfältige experimentelle Daten zusammengestellt, die mit Hilfe verschiedener Versuche ermittelt worden sind. Bei dem verwendeten Probenmaterial handelt es sich um gewalzte Bleche des Tiefziehstahls DC04. Parallel zu den Experimenten, wurden auf der Grundlage eines einfachen kristallplastischen Modells Simulationen aller Versuche durchgeführt, wodurch detaillierte Vergleiche von gemessenen und prognostizierten Daten ermöglicht werden. Mit Hilfe klassischer Scherversuche wurden die Verfestigungsparameter des Materialmodells an das Verfestigungsverhalten der gewalzten Stahlbleche angepasst. Anschließend konnte das Modell anhand von Spannungs-Dehnungskurven und R-Wert-Verteilungen, welche mittels Zugversuchen bestimmt wurden, validiert werden. Die für die Berechnung der polykristallinen Versuche benötigte Textur wurde über eine Messung ermittelt. Trotz der Unsicherheiten bei der Wahl der Gleitsysteme für das krz-Gitter, konnten für diese Versuche qualitativ und quantitativ gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten erreicht werden.

Auf Grund der geringen Blechdicke wurde als Eindringversuch am polykristallinen Material der Doppelindenterversuch gewählt. Für diesen Versuch konnten nur unzureichende Übereinstimmungen zwischen den experimentellen und numerischen Daten erreicht werden, so dass hier zum derzeitigen Stand keine Möglichkeit für eine Identifikation oder Validierung besteht. Da der Doppelindenterversuch bisher nur wenig untersucht und daher technisch nicht ausgereift ist, bestehen hier noch große experimentelle Unsicherheiten. Eine Identifikation einzig auf der Grundlage einer Kraft-Verschiebungskurve hat sich als unzureichend herausgestellt. Möchte man die Oberflächenverschiebungen für die Anpassung nutzen, müssen sehr hohe Anforderungen an die Genauigkeit der Zentrierung der beiden Indenter gestellt werden. Die FE-Simulation des Doppelindenterversuchs konnte durch Ausnutzung von Symmetrien auf $1/8$ der Gesamtprobe beschränkt werden. Mit der verwendeten Diskretisierung, die eine hinreichend genaue Darstellung der Oberflächendeformationen ermöglicht, umfasste die Berechnung des Doppelindenterversuchs einen Zeitrahmen von ca. 3 Stunden. Demzufolge bewegt sich die Dauer einer gesamten Optimierung im Bereich von mehreren Tagen. Die mikroskopischen Eindringversuche stellen in doppelter Hinsicht eine Besonderheit dar.

Zum Einen ist es möglich, die Materialparameter des Mikromodells ohne den Zwischenschritt einer Homogenisierung an die gemessenen Daten anzupassen. Zum Anderen enthält das bei diesen Versuchen gemessene Feld der Gitterrotationen Informationen, die in den bisher verwendeten experimentellen Daten nicht vorhanden sind. Bei den Untersuchungen hat sich gezeigt, dass die Berechnungsergebnisse, die anhand des makroskopisch identifizierten und validierten Materialmodells erzeugt wurden, gut mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmen. Obwohl bei der Kraft-Verschiebungskurve noch Unsicherheiten bezüglich der im Vorfeld durchgeführten Wärmebehandlung und der qualitativen Unterschiede im Entlastungsbereich existieren, konnte mit Hilfe des kristallplastischen Modells ein mittelbarer Zusammenhang zwischen dem makroskopischen und mikroskopischen Materialverhalten hergestellt werden. Eine gute Übereinstimmung ist auch bei dem Vergleich der gemessenen und berechneten Rotationen des Kristallgitters festgestellt wurden. Berücksichtigt man die Einfachheit des verwendeten Materialmodells muss man sogar sagen, dass diese unerwartet hoch ist. In besonderem Maße trifft diese Aussage für den zweiten Versuch zu. Die größten Unterschiede zwischen den experimentellen und numerischen Rotationen sind knapp unterhalb des Eindrucks zu beobachten. Hier kommt es zu einer Überschätzung der Rotationen seitens der Berechnung. Anhand der erwähnten Vergleiche war es möglich, das auf der Makroebene identifizierte und validierte Materialmodell zusätzlich auch auf der Mikroebene zu validieren. Weiterhin wurden Sensitivitätsstudien durchgeführt, die dazu dienen, den Einfluss bestimmter Modelleigenschaften und Materialparameter auf die Simulationsergebnisse des Mikroindenterversuchs zu untersuchen. Dabei hat sich gezeigt, dass die berechneten Rotationsfelder erst für relativ feine Diskretisierungen konvergieren. Weiterhin wird in einem Bereich bis ca. $10\ \mu\text{m}$ unterhalb der Kornoberfläche ein deutlicher Einfluss der Reibung auf die Rotationen prognostiziert. Es ist zu beobachten, dass mit steigendem Reibungseinfluss auch die Höhe der Rotationen zunimmt. Bei den Materialparametern wurden diejenigen untersucht, die makroskopisch keiner verlässlichen Identifikation zugänglich waren. Im Einzelnen waren dies die Gleitsysteme, das Verhältnis von Fremd- zu Selbstverfestigung und die Referenzscherrate des viskosen Ansatzes. Während die Variation der Referenzscherrate keinen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse hatte, zeigten besonders die Rotationen eine deutliche Abhängigkeit von der Wahl der Gleitsysteme und dem Verhältnis von Fremd- zu Selbstverfestigung. Daher lässt sich schlussfolgern, dass die in den gemessenen Rotationsfeldern enthaltenen Informationen hilfreich für die Identifikation der Gleitsysteme und des Verhältnisses von Fremd- zu Selbstverfestigung sind.

Eine Identifikation der Verfestigungsparameter anhand der Ergebnisse des mikroskopischen Eindringversuchs wurde nicht durchgeführt. Ein Grund dafür sind die bestehenden Unterschiede zwischen den experimentellen und den berechneten Ergebnissen, wie sie z. B. bei den Entlastungskurven oder den Rotationen auftreten. Weiterhin ist die Dauer der Mikroindenterrechnung mit ca. 8 Stunden sehr hoch, wodurch systematische Untersuchungen erschwert werden. Für eine verlässliche Identifikation sollte eine weiterführende Untersuchung der für die bestehenden Unterschiede verantwortlichen Ursachen angestrebt werden. In dieser Arbeit konnte bereits gezeigt werden, dass die Nachgiebigkeit des Indenters einen nicht unerheblichen Einfluss auf die Entlastungskurve und die Rotationen hat.

Anhang

A Jacobi-Matrix des Newton-Raphson-Verfahrens

Im Folgenden wird ein analytischer Ausdruck für die Jacobi-Matrix $\partial \mathbf{R}(\tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}) / \partial \tilde{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}$ angegeben (Risý, 2007). Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird im Weiteren der Index $t + \Delta t$ vernachlässigt und es wird die Abkürzung

$$\mathbf{Y} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} (\tilde{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha}) = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau^{\alpha}) \left(\frac{|\tau^{\alpha}|}{\tau_k^{\alpha}} \right)^{\frac{1}{m}} (\tilde{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha}) \quad (\text{A.1})$$

eingeführt. Damit ergibt sich die Ableitung der Residuumsgleichung 2.24 zu

$$\frac{\partial \mathbf{R}(\tilde{\mathbf{F}})}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} = -\mathbf{I} + \Delta t \left(\frac{\partial(\mathbf{L}\tilde{\mathbf{F}})}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} - \frac{\partial(\tilde{\mathbf{F}}\mathbf{Y})}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \right). \quad (\text{A.2})$$

Die darin enthaltenen Ableitungen werden wie folgt berechnet:

$$\frac{\partial(\mathbf{L}\tilde{\mathbf{F}})}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} = L_{ia} \frac{\partial \tilde{F}_{aj}}{\partial \tilde{F}_{kl}} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l = L_{ik} \delta_{jl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\tilde{\mathbf{F}}\mathbf{Y})}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} &= \left(\frac{\partial \tilde{F}_{ia}}{\partial \tilde{F}_{kl}} Y_{aj} + \tilde{F}_{ia} \frac{\partial Y_{aj}}{\partial \tilde{F}_{kl}} \right) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \\ &= \left(\delta_{ik} Y_{lj} + \tilde{F}_{ia} \frac{\partial Y_{aj}}{\partial \tilde{F}_{kl}} \right) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Unter der Annahme kleiner elastischer Deformationen $\tau^{\alpha} \approx \tilde{\mathbb{K}}^{[1/2}(\tilde{\mathbf{F}}^T \tilde{\mathbf{F}} - \mathbf{I})] \cdot (\tilde{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha})$ berechnet sich die Ableitung aus Gleichung A.4 zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} &= \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial \tau^{\alpha}} \frac{\partial \tau^{\alpha}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \\ &= \sum_{\alpha} \frac{\dot{\gamma}_0}{m \tau_k^{\alpha}} \operatorname{sgn}^2(\tau^{\alpha}) \left(\frac{|\tau^{\alpha}|}{\tau_k^{\alpha}} \right)^{\frac{1-m}{m}} (\tilde{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha}) \otimes \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbb{K}}[(\tilde{\mathbf{d}}^{\alpha} \otimes \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha})]. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

B Algorithmisch konsistente Tangente

Die von Abaqus benötigte Materialtangente

$$\mathbb{K}^{umat} = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \mathbf{T}^C}{\partial \mathbf{D}} = \frac{1}{\det(\mathbf{F})} \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \mathbf{T}^K}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \frac{\partial \tilde{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{L}} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{D}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{T}^K = \det(\mathbf{F}) \mathbf{T}^C \quad (\text{B.1})$$

wird mit Hilfe der Kettenregel in drei partielle Ableitungen aufgespalten (Risay, 2007). Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird der Index $t + \Delta t$ vernachlässigt (vgl. Gleichung 2.29). Durch Einsetzen des elastischen Gesetzes (Gleichung 2.9) erhält man für die erste Ableitung den Ausdruck

$$\frac{\partial \mathbf{T}^K}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} = \left(\delta_{ik} \tilde{T}_{lm}^{2PK} \tilde{F}_{jm} + \delta_{jk} \tilde{T}_{lm}^{2PK} \tilde{F}_{im} + K_{ijkm}^E \tilde{F}_{ml}^{-T} \right) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l. \quad (\text{B.2})$$

Zur Berechnung der zweiten Ableitung muss von der Residuumsleichung 2.24 das totale Differential

$$d\mathbf{R} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} [d\tilde{\mathbf{F}}] + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{L}} [d\mathbf{L}] = \mathbf{0} \quad (\text{B.3})$$

gebildet werden. Durch Umstellung ergibt sich die zweite Ableitung der Materialtangente zu

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{L}} = - \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{L}}. \quad (\text{B.4})$$

Darin ist $\partial \mathbf{R} / \partial \tilde{\mathbf{F}}$ die in Anhang A berechnete Jacobi-Matrix. Die Ableitung $\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{L}$ berechnet sich zu

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{L}} = \Delta t \frac{\partial (\mathbf{L} \tilde{\mathbf{F}})}{\partial \mathbf{L}} = \Delta t \left(\delta_{ik} \tilde{F}_{lj} \right) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l. \quad (\text{B.5})$$

Die verbleibende Ableitung des Geschwindigkeitsgradienten nach seinem symmetrischen Anteil

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{D}} = \mathbb{I}^S \quad (\text{B.6})$$

ergibt den Symmetrisierer vierter Stufe.

C Überprüfung des RVE-Modells

Die in Abschnitt 2.6.3 vorgestellte Auswertung der RVE-Rechnung soll hier mit einer analytischen Lösung verglichen werden. Für beide Rechnungen wird ein isotrop-elastisches Materialverhalten vorausgesetzt. Die analytische Lösung wird anhand des Hookeschen Gesetzes

$$\mathbf{T} = \lambda Sp(\mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E} \quad (\text{C.1})$$

berechnet. Darin sind $\mathbf{E} = 0,5(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T)$ das lineare Dehnungsmaß und \mathbf{T} das lineare Spannungsmaß. Die Lamé-Konstanten

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad \text{und} \quad \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (\text{C.2})$$

können aus dem Elastizitätsmodul $E = 200\,000 \text{ MPa}$ und der Querkontraktionszahl $\nu = 0,3$ bestimmt werden. Für das RVE wird das isotrop-elastische Gesetz von Abaqus verwendet. Alle weiteren Eigenschaften des RVEs sind äquivalent zu der Beschreibung in Abschnitt 2.6.3. Die Randbedingungen

$$H_{11} = 0.002, \quad H_{ij} = 0 \quad \forall i \neq j, \quad T_{22} = T_{33} = 0$$

werden so gewählt, dass die Deformation derjenigen eines realen Zugversuchs entspricht. Mit diesen Randbedingungen und dem Hookeschen Gesetz (Gleichung C.1) berechnen sich die gesuchten Komponenten des Verschiebungsgradienten und des Spannungstensors zu

$$H_{22} = H_{33} = -\nu H_{11} \quad \text{und} \quad T_{11} = E H_{11}.$$

Um Abweichungen zwischen der analytischen und der numerischen Lösung auf Grund unterschiedlicher elastischer Gesetze zu vermeiden, wird eine nur geringe Dehnung von 0,2% vorgegeben. Ein Vergleich der analytischen und numerischen Ergebnisse (Tabelle C.1) zeigt,

Tabelle C.1: Vergleich der analytischen und numerischen Werte

	analytisch	RVE	Fehler in %
H_{22}, H_{33}	$-6 \cdot 10^{-4}$	$-5,9922 \cdot 10^{-4}$	0,13
T_{11} in <i>MPa</i>	400	399,6	0,1
T_{22}, T_{33} in <i>MPa</i>	0	0	0

dass die RVE-Lösung etwas von der exakten Lösung abweicht. Allerdings sind diese Unterschiede sehr gering.

Literaturverzeichnis

- Abaqus/Benutzerhandbuch (2007). *User Reference Manual*, 6.7. Simulia.
- Alcalá, J., Casals, O., und Ocenásek, J. (2008). Micromechanics of pyramidal indentation in fcc metals: Single crystal plasticity finite element analysis. *J. Mech. Phys. Solids*, 56:3277–3303.
- Asaro, R. J. (1983). Micromechanics of crystals and polycrystals. In Hutchinson, J. W. und Wu, T. Y., editors, *Adv. Appl. Mech.*, volume 23, pages 1–115. Academic Press.
- Bacroix, B., Miroux, A., und Castelnau, O. (1999). Simulation of the orientation dependence of stored energy during rolling deformation of low carbon steels. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 7:851–864.
- Beck, J. V. und Arnold, K. J. (1977). *Parameter Estimation in Engineering and Science*. John Wiley and Sons New York.
- Belytschko, T. und Mish, K. (2001). Computability in non-linear solid mechanics. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 52:3–21.
- Bertram, A. (2008). *Elasticity and Plasticity of Large Deformations*. Springer-Verlag Berlin, 2nd edn.
- Bertram, A. und Heilmaier, M. (2007). *Modellierung des Fließverhaltens tiefziehfähiger Stähle*. Automotive Projektbericht (intern).
- Bleck, W., Engl, B., Frehn, A., Nicklas, D., und Steinbeck, G. (2004). Ermittlung von Berechnungskennwerten an Karosseriewerkstoffen - Bericht über ein Gemeinschaftsprojekt der Stahl- und Automobilindustrie. *Mat.-wiss. und Werkstofftech.*, 35(8):483–494.
- Bleck, W. und Schael, I. (2000). Determination of crash-relevant material parameters by dynamic tensile tests. *Steel Res.*, 71(5):173–178.
- Bocciarelli, M., Bolzon, G., und Maier, G. (2005). Parameter identification in anisotropic elastoplasticity by indentation and imprint mapping. *Mech. Mater.*, 37:855–868.
- Böhlke, T. (2001). *Crystallographic Texture Evolution and Elastic Anisotropy: Simulation, Modeling, and Applications*. Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg.

- Bouvier, S., Gardey, B., Haddadi, H., und Teodosiu, C. (2006a). Characterization of the strain-induced plastic anisotropy of rolled sheets by using sequences of simple shear and uniaxial tensile tests. *J. Mater. Process. Technol.*, 174:115–126.
- Bouvier, S., Haddadi, H., Levée, P., und Teodosiu, C. (2006b). Simple shear tests: Experimental techniques and characterization of the plastic anisotropy of rolled sheets at large strains. *J. Mater. Process. Technol.*, 172:96–103.
- Boyce, D. E., Dawson, P. R., Sidle, B., und Gnäupel-Herold, T. (2006). A multiscale methodology for deformation modeling applied to friction stir welded steel. *Comput. Mater. Sci.*, 38:158–175.
- Brandt, S. (1992). *Datenanalyse*. BI-Wissenschafts-Verlag Mannheim.
- Brannon, R. M. (2002). *A review of useful theorems involving proper orthogonal matrices referenced to three dimensional physical space*. www.mech.utah.edu/~brannon/public/rotation.pdf.
- Britton, T. B., Liang, H., Dunne, F. P. E., und Wilkinson, A. J. (2010). The effect of crystal orientation on the indentation response of commercially pure titanium: experiments and simulations. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 466(2115):695–719.
- Bronkhorst, C. A., Kalidindi, S. R., und Anand, L. (1992). Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in fcc metals. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 341:443–477.
- Bruhns, O. T. und Anding, D. K. (1999). On the simultaneous estimation of model parameters used in constitutive laws for inelastic material behaviour. *Int. J. Plast.*, 15:1311–1340.
- Butz, A., Lossau, S., Springub, B., und Roters, F. (2010). On the Modeling of Dual Phase Steels: Microstructure-Based Simulation from the Hot Rolled Sheet to the Deep Drawn Component. *Int. J. Mater. Form.*, 3(Suppl.1).
- Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Mounoury, V., und Quilici, S. (2003). Some elements of microstructural mechanics. *Comput. Mater. Sci.*, 27:351–374.
- Cardarelli, F. (2008). *Materials Handbook*. Springer-Verlag London.
- Casals, O., Ocenásek, J., und Alcalá, J. (2007). Crystal plasticity finite element simulations of pyramidal indentation in copper single crystals. *Acta Mater.*, 55:55–68.
- Christian, J. W. (1983). Some Surprising Features of the Plastic Deformation of Body-Centered Cubic Metals and Alloys. *Metall. Trans. A*, 14:1237–1256.
- Cooreman, S., Lecompte, D., Sol, H., Vantomme, J., und Debruyne, D. (2008). Identification of Mechanical Material Behavior Through Inverse Modeling and DIC. *Exp. Mech.*, 48:421–433.

- Dahms, M. (1987). *Spezielle mathematische Methoden der Texturanalyse und ihre Anwendungen unter besonderer Berücksichtigung der intermetallischen Phasen*. Dissertation, TU Clausthal.
- Dahms, M. (1992). The Iterative Series-Expansion Method for Quantitative Texture Analysis. II. Applications. *J. Appl. Cryst.*, 25:258–267.
- Dahms, M. und Bunge, H. J. (1989). The Iterative Series-Expansion Method for Quantitative Texture Analysis. I. General Outline. *J. Appl. Cryst.*, 22:439–447.
- Dao, M. und Asaro, R. J. (1993). Non-Schmid effects and localized plastic flow in intermetallic alloys. *Mater. Sci. Eng., A*, 170:143–160.
- Dawson, P. R. und Beaudoin, A. J. (1998a). Finite Element Modelling of Heterogeneous Plasticity. In Kocks, U. F., Tomé, C. N., und Wenk, H. R., editors, *Texture and Anisotropy*, pages 512–531. Cambridge University Press.
- Dawson, P. R. und Beaudoin, A. J. (1998b). Finite Element Simulations of Metal Forming. In Kocks, U. F., Tomé, C. N., und Wenk, H. R., editors, *Texture and Anisotropy*, pages 533–559. Cambridge University Press.
- Delannay, L., Melchior, M. A., Signorelli, J. W., Remacle, J.-F., und Kuwabara, T. (2009). Influence of grain shape on the planar anisotropy of rolled steel sheets - evaluation of three models. *Comput. Mater. Sci.*, 45:739–743.
- Duesbery, M. S. und Vitek, V. (1997). Plastic Anisotropy in B.C.C. Transition Metals. *Acta Mater.*, 46(5):1481–1492.
- Evertz, T., Sonne, H.-M., Steinbeck, G., und Engl, B. (2004). Werkstoffverhalten unter zügiger elastischer Beanspruchung. *Mat.-wiss. u. Werkstofftech.*, 35(8):514–521.
- Fang, X. F. und Dahl, W. (1994). Microstructure and Strain Hardening of Steels. *Key Eng. Mater.*, 97-98:329–334.
- Field, J. S. und Swain, M. V. (1993). A simple predictive model for spherical indentation. *J. Mater. Res.*, 8(2):297–306.
- Fischer-Cripps, A. C. (2004). *Nanoindentation*. Springer New York, 2nd edn.
- Gottstein, G. (2001). *Physikalische Grundlagen der Materialkunde*. Springer Berlin, 2nd edn.
- Gottstein, G. (2003). Virtuelle Werkstoffe - Utopie oder Alltag von morgen. In *Nordrhein-Westfälische Akad. Wiss., Vorträge*, pages 5–24. Ferdinand Schöningh Verlag.
- Gröger, R. und Vitek, V. (2005). Breakdown of the Schmid law in bcc molybdenum related to the effect of shear stress perpendicular to the slip direction. *Mater. Sci. Forum*, 482:123–126.

- Habraken, A. M. (2004). Modelling plastic anisotropy of metals. *Arch. Comput. Meth. Eng.*, 11(1):3–96.
- Hansen, J., Pospiech, J., und Lücke, K. (1978). *Tables for Texture Analysis of Cubic Crystals*. Springer-Verlag Berlin.
- Harren, S. V. (1991). The Finite Deformation of Rate-Dependent Polycrystals-II: A Comparison of the Self-Consistent and Taylor Methods. *J. Mech. Phys. Solids*, 39(3):361–383.
- Havner, K. S. (1992). *Finite Plastic Deformation of Crystalline Solids*. Cambridge Univ. Press.
- Hollang, L. (1996). *Fließspannung und Verfestigung hochreiner Molybdän-Einkristalle*. Dr. rer. nat. thesis, Universität Stuttgart.
- Hollang, L., Hommel, M., und Seeger, A. (1997). The Flow Stress of Ultra-High-Purity Molybdenum Single Crystals. *Phys. Stat. Sol. (a)*, 160:329–354.
- Holzapfel, G. A. (2000). *Nonlinear Solid Mechanics*. John Wiley and Sons Chichester.
- Hosford, W. F. (1993). *The Mechanics of Crystals and Textured Polycrystals*. Oxford Science Publications.
- Huber, N. (2000). *Anwendung Neuronaler Netze bei nichtlinearen Problemen der Mechanik*. Habilitationsschrift, Universität Karlsruhe (TH).
- Huber, N. und Tyulyukovskiy, E. (2004). A new loading history for identification of viscoplastic properties by spherical indentation. *J. Mater. Res.*, 19(1):101–113.
- Hughes, T. J. R. (1980). Generalization of selective integration procedures to anisotropic and nonlinear media. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 15(9):1413–1418.
- Hull, D. und Bacon, D. J. (2007). *Introduction to Dislocations*. Butterworth Heinemann Oxford, 4th edn.
- Hutchinson, J. W. (1976). Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 348(1652):101–127.
- Jongenburger, P., Watchers, A. R., und Weng, G. J. (1974). Plastic Anisotropy of Textured Steel Sheet. *Metall. Trans.*, 5:2451–2455.
- Kajberg, J. und Lindkvist, G. (2004). Characterisation of materials subjected to large strains by inverse modelling based on in-plane displacement fields. *Int. J. Solids Struct.*, 41:3439–3459.
- Kalidindi, S. R., Bronkhorst, C. A., und Anand, L. (1992). Crystallographic Texture Evolution in Bulk Deformation Processing of FCC Metals. *J. Mech. Phys. Solids*, 40(3):537–569.

- Keh, A. S. (1965). Work hardening and deformation sub-structure in iron single crystals deformed in tension at 298°K. *Philos. Mag.*, 12:9–30.
- Kettunen, P. O. und Kuokkala, V.-T. (2003). Plastic Deformation and Strain Hardening. In Magini, M. und Whlbier, F. H., editors, *Materials Science Foundations*. Trans Tech Publications.
- Khalfallah, A., Salah, H. B. H., und Dogui, A. (2002). Anisotropic parameter identification using inhomogeneous tensile test. *Eur. J. Mech. A. Solids*, 21:927–942.
- Kim, S. A. und Johnson, W. L. (2007). Elastic constants and internal friction of martensitic steel, ferritic-pearlitic steel, and α -iron. *Mater. Sci. Eng. A*, 452-453:633–639.
- Kocks, U. F. (1976). Laws for work-hardening and low-temperature creep. *J. Eng. Mater. Technol.*, 98(1):76–85.
- Kocks, U. F. (1998). Anisotropy and Symmetry. In Kocks, U. F., Tomé, C. N., und Wenk, H. R., editors, *Texture and Anisotropy*, pages 10–43. Cambridge University Press.
- Kocks, U. F. und Mecking, H. (2003). Physics and phenomenology of strain hardening: the fcc case. *Prog. Mater. Sci.*, 48:171–273.
- Kothari, M. und Anand, L. (1998). Elasto-Viscoplastic Constitutive equations for polycrystalline Metals: Application to Tantalum. *J. Mech. Phys. Solids*, 46(1):51–83.
- Kraska, M., Doig, M., Tikhomirov, D., Raabe, D., und Roters, F. (2009). Virtual material testing for stamping simulations based on polycrystal plasticity. *Comput. Mater. Sci.*, 46(2):383–392.
- Kreißig, R. (1998). Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder zur Identifikation der Parameter elastisch-plastischer Deformationsgesetze. *Forsch. Ingenieurswes.*, 64:99–109.
- Kreißig, R., Benedix, U., und Görke, U.-J. (2001). Statistical aspects of the identification of material parameters for elasto-plastic models. *Arch. Appl. Mech.*, 71:123–134.
- Kuwabara, T. (2007). Advances in experiments on metal sheets and tubes in support of constitutive modeling and forming simulations. *Int. J. Plast.*, 23(3):385–419.
- Lankford, W. T., Snyder, S. C., und Bauscher, J. A. (1950). New Criteria for Predicting the Press Performance of Deep Drawing Sheets. *Trans. Am. Soc. Met.*, 42:1197–1232.
- Larson, B. C., Tischler, J. Z., El-Azab, A., und Liu, W. (2008). Dislocation density tensor characterization of deformation using 3D X-ray microscopy. *J. Eng. Mater. Technol.*, 130(2):0210241–02102410.
- Lebensohn, R. A. (2001). N-Site Modeling of a 3D Viscoplastic Polycrystal Using Fast Fourier Transform. *Acta Mater.*, 49:2723–2737.

- Lebensohn, R. A. und Tomé, C. N. (1993). A Self-Consistent Anisotropic Approach for the Simulation of Plastic Deformation and Texture Development of Polycrystals: Application to Zirconium Alloys. *Acta Metall. Mater.*, 41(9):2611–2624.
- Ledbetter, H. (2010). Polycrystalline elastic constants of in situ cementite (Fe_3C). *Mater. Sci. Eng. A*, 527:2657–2661.
- Lee, Y. J., Subhash, G., und Ravichandran, G. (1999). Constitutive modeling of textured body-centered-cubic (bcc) polycrystals. *Int. J. Plast.*, 15:625–645.
- Lindner, M. und Kreissig, R. (2004). Dertermination of the Plastic Anisotropy of Metals by Indentation Tests: Part B - Dertermination of Anisotropy by Inverse Methods. In *Proc. 4th ICFG Workshop on Process Simul., Shanghai*, pages 10–16.
- Liu, Y., Varghese, S., Ma, J., Yoshino, M., Lu., H., und Komanduri, R. (2008). Orientation effects in nanoindentation of single crystal copper. *Int. J. Plast.*, 24:1990–2015.
- Liu, Y., Wang, B., Yoshino, M., Roy, S., Lu., H., und Komanduri, R. (2005). Combined numerical simulation and nanoindentation for determining mechanical properties of single crystal copper at mesoscale. *J. Mech. Phys. Solids*, 53:2718–2741.
- Lücke, K. und Mecking, H. (1973). Dynamic Recovery. In *The Inhomogeneity of Plastic Deformation*, pages 223–250. Am. Soc. Met.
- Mahnken, R. (1996). *Theoretische und numerische Aspekte zur Parameteridentifikation und Modellierung bei metallischen Werkstoffen*. Habilitationsschrift, Universität Hannover.
- Mahnken, R. (2004). Identification of Material Parameters for Constitutive Equations. In Stein, E., de Borst, R., und Hughes, T. J. R., editors, *Encycl. Comput. Mech., Vol. 2: Solids Struct.*, pages 637–655. John Wiley & Sons.
- Mecking, H. (2001). Work Hardening of Single-phase Polycrystals. In Buschow, K. H. J. und Cahn, R. W., editors, *Encycl. Mater.: Sci. Technol.*, pages 9785–9794. Elsevier.
- Meuwissen, M. H. H., Oomens, C. W. J., Baaijens, F. P. T., Petterson, R., and Janssen, J. D. (1998). Determination of the elasto-plastic properties of aluminium using a mixed numerical-experimental method. *J. Mater. Process. Technol.*, 75:204–211.
- Miehe, C., Rosato, D., und Frankenreiter, I. (2010). Fast estimates of evolving orientation microstructures in textured bcc polycrystals at finite plastic strains. *Acta Mater.*, 58:4911–4922.
- Miehe, C. und Schotte, J. (2004). Crystal Plasticity and Evolution of Polycrystalline Microstructure. In Stein, E., de Borst, R., und Hughes, T. J. R., editors, *Encycl. Comput. Mech., Vol. 2: Solids Struct.*, pages 267–289. John Wiley & Sons.
- Moré, J. J., Sorensen, D. C., Hillstrom, K. E., und Garbow, B. S. (1984). The minpack project. In Cowell, W. J., editor, *Sources Dev. Math. Softw.*, pages 88–111. Prentice-Hall.

- Nakada, Y. und Keh, A. S. (1966). Latent Hardening in Iron Single Crystals. *Acta Metall.*, 14:961–973.
- Nemat-Nasser, S. (2004). *Plasticity: A Treatise on Finite Deformation of Heterogeneous Inelastic Materials*. Cambridge University Press.
- Nemat-Nasser, S. und Obata, M. (1986). Rate-Dependent, Finite Elasto-Plastic Deformation of Polycrystals. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 407(1833):343–375.
- Nesterova, E. V., Bacroix, B., und Teodosiu, C. (2001). Microstructure and texture evolution under strain-path changes in low-carbon interstitial-free steel. *Metall. Mater. Trans. A*, 32(10):2527–2538.
- Peeters, B., Seefeldt, M., Teodosiu, C., Kalidindi, S. R., van Houtte, P., and Aernoudt, E. (2001). Work-Hardening/Softening Behaviour of B.C.C. Polycrystals During Changing Strain Paths: I. An Integrated Model Based on Substructure and Texture Evolution, and its Prediction of the Stress-Strain Behaviour of an IF Steel During Two-Stage Strain Paths. *Acta Mater.*, 49:1607–1619.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., und Flannery, B. P. (1997). *Numerical recipes in Fortran 77*. Cambridge University Press.
- Quadrini, F., Santo, L., und Squeo, E. A. (2007). Mechanical characterization of metal sheets by means of double indentation. *Key Eng. Mater.*, 344:127–134.
- Risy, G. (2007). *Modellierung der texturinduzierten plastischen Anisotropie auf verschiedenen Skalen*. Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg.
- Roters, F. (2004). The Texture Component Crystal Plasticity Finite Element Method. In Raabe, D., Roters, F., Barlat, F., und Chen, L.-Q., editors, *Continuum Scale Simulation of Engineering Materials*, pages 561–572. Wiley-VCH.
- Rusinek, A., Zaera, R., und Klepaczko, J. R. (2007). Constitutive relations in 3-D for a wide range of strain rates and temperatures - Application to mild steels. *Int. J. Solids Struct.*, 44:5611–5634.
- Sarma, G. und Zacharia, T. (1999). Integration algorithm for modeling the elasto-viscoplastic response of polycrystalline materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 47:1219–1238.
- Schulze, V., Bertram, A., Bhlke, T., und Krawietz (2009). Texture-Based Modeling of Sheet Metal Forming and Springback. *Tech. Mech.*, 29(2):135–159.
- Seeger, A. (2001). Why anomalous slip in body-centered cubic metals? *Mater. Sci. Eng., A*, 319-321:254–260.
- Seeger, A. (2004). Experimental evidence for the $\{110\} \leftrightarrow \{112\}$ transformation of the screw-dislocation cores in body-centred cubic metals. *Phys. Stat. Sol. (a)*, 201(4):R21–R24.

- Seeger, A. und Wasserbäch, W. (2002). Anomalous Slip - A Feature of High-Purity Body-Centered Cubic Metals. *Phys. Stat. Sol. (a)*, 189(1):27–50.
- Sesták, B. und Seeger, A. (1978). Gleitung und Verfestigung in kubisch-raumzentrierten Metallen und Legierungen (II). *Z. Metallkd.*, 69(6):355–363.
- Spitzig, W. A. und Keh, A. S. (1970). Orientation Dependence of the Strain-Rate Sensitivity and Thermally Activated Flow in Iron Single Crystals. *Acta Metall.*, 18:1021–1033.
- Stainier, L., Cuitiño, A. M., und Ortiz, M. (2002). A micromechanical model of hardening, rate sensitivity and thermal softening in bcc single crystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 50:1511–1545.
- Stelmashenko, N. A., Walls, M. G., Brown, L. M., und Milman, Y. V. (1993). Microindentations on W and Mo Oriented Single Crystals: An STM Study. *Acta Metall. Mater.*, 41(10):2855–2865.
- Tang, M., Fivel, M., und Kubin, L. P. (2001). From forest hardening to strain hardening in body centered cubic single crystals: simulation and modeling. *Mater. Sci. Eng., A*, 309-310:256–260.
- Taylor, G. I. (1938). Plastic Strain in Metals. *J. Inst. Met.*, 62:307–324.
- Taylor, G. I. und Elam, C. F. (1926). The distortion of iron crystals. *Proc. R. Soc. London*, 112(1):337–361.
- Tomé, C. N. und Canova, G. R. (1998). Self-Consistent Modeling of Heterogeneous Plasticity. In Kocks, U. F., Tomé, C. N., und Wenk, H. R., editors, *Texture and Anisotropy*, pages 466–511. Cambridge University Press.
- Tomé, C. N. und Lebensohn, R. A. (2004). Self Consistent Homogenization Methods for Texture and Anisotropy. In Raabe, D., Roters, F., Barlat, F., und Chen, L.-Q., editors, *Continuum Scale Simulation of Engineering Materials*, pages 473–500. Wiley-VCH.
- Truszkowski, W., Król, J., und Major, B. (1980). Inhomogeneity of rolling texture in fcc metals. *Metall. Trans. A*, 11(5):749–758.
- Tsotsova, R. und Böhlke, T. (2009). Representation of Effective Flow Potentials for Polycrystals Based on Texture Data. *Int. J. Mater. Form.*, 2(Suppl. 1):451–454.
- Van Houtte, P. (1978). Influence of the Critical Shear Stress Ratio of {112} and {110} Slip Planes on the Rolling Texture of BCC Metals. In Gottstein, G. und Lücke, K., editors, *Proc. ICOTOM 5*, pages 347–356. Springer, Berlin.
- Van Houtte, P., Li, S., und Engler, O. (2004). Taylor-Type Homogenization Methods for Texture and Anisotropy. In Raabe, D., Roters, F., Barlat, F., und Chen, L.-Q., editors, *Continuum Scale Simul. Eng. Mater.*, pages 459–472. Wiley-VCH.

- Van Houtte, P., Li, S., Seefeldt, M., und Delannay, L. (2005). Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel model. *Int. J. Plast.*, 21:589–624.
- Walde, T. (2005). *Modellierung der Textur- und Anisotropieentwicklung beim Walzen - Kopplung der Finite Elemente Methode mit mikrostrukturbasierten Modellen*. Dissertation, Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik.
- Wang, Y., Raabe, D., Klüber, C., und Roters, F. (2004). Orientation dependence of nanoindentation pile-up patterns and of nanoindentation microtextures in copper single crystals. *Acta Mater.*, 52:2229–2238.
- Wassermann, G. und Grewen, J. (1962). *Texturen metallischer Werkstoffe*. Springer-Verlag Berlin.
- Wolfersdorf, L. v. (1994). *Inverse und schlecht gestellte Probleme: Eine Einführung*. Akademie Verlag Berlin.
- Yalcinkaya, T., Brekelmans, W. A. M., und Geers, M. G. D. (2008). BCC single crystal plasticity modeling and its experimental identification. *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 16(8):085007.
- Yang, W., Larson, B. C., Pharr, G. M., Ice, G. E., Budai, J. D., Tischler, J. Z., und Liu, W. (2004a). Deformation Microstructure Under Microindents in Single-Crystal Cu Using Three-Dimensional X-Ray Structural Microscopy. *J. Mater. Res.*, 19(1):66–72.
- Yang, W., Larson, B. C., Pharr, G. M., Ice, G. E., Tischler, J. Z., Budai, J. D., und Liu, W. (2003). X-ray Microbeam Investigation of Deformation Microstructure in Microindented Cu. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 779:207–212.
- Yang, W., Larson, B. C., Tischler, J. Z., Ice, G. E., Budai, J. D., und Liu, W. (2004b). Differential-Aperture X-Ray Structural Microscopy: A Submicron-Resolution Three-Dimensional Probe of Local Microstructure and Strain. *Micron*, 35(6):431–439.
- Zaafarani, N., Raabe, D., Roters, F., und Zaefferer, S. (2008). On the origin of deformation-induced rotation patterns below nanoindents. *Acta Mater.*, 56:31–42.
- Zaafarani, N., Raabe, D., Singh, R. N., Roters, F., und Zaefferer, S. (2006). Three-dimensional investigation of the texture and microstructure below a nanoindent in a Cu single crystal using 3D EBSD and crystal plasticity finite element simulations. *Acta Mater.*, 54:1863–1876.
- Zambaldi, N., Roters, F., Raabe, D., und Glatzel, U. (2007). Modeling and experiments on the indentation deformation and recrystallization of a single-crystal nickel-base superalloy. *Mater. Sci. Eng., A*, 454-455:433–440.