

Molekulardynamische Untersuchungen der Festigkeitserhöhung gealterter Aluminium-Legierungen

Von der Fakultät Energie-, Verfahrens- und Biotechnik der
Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Dipl.-Phys. Martin Hummel

aus Lauffen am Neckar

Hauptberichter: Prof. Dr. rer. nat. Dr. h. c. Siegfried Schmauder

Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. Erik Bitzek

Tag der mündlichen Prüfung: 28.07.2021

Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre
der Universität Stuttgart

2022

Danksagung

Mein herzlichster Dank geht an Herrn Prof. Dr. rer. nat. Dr. h.c. Siegfried Schmauder, für das Vertrauen, die Diskussion und die Unterstützung als Vorgesetzter und Mentor, mit welchen er mir während meiner Beschäftigung am Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF) stets zur Verfügung stand. Besonders bedanke ich mich für die Betreuung und die Übernahme des Hauptberichters der vorliegenden Arbeit.

Weiter möchte ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Erik Bitzek danken, welcher das Ziel meiner ersten Dienstreise, der Ideengeber für mein erstes großes Projekt am IMWF, dem Software Paket NanoSCULPT, sowie für das Interesse an dieser Arbeit und schließlich die Übernahme des Mitberichters und die damit verbundenen wertvollen Hinweise und wissenschaftlichen Diskussionen in der Korrekturphase.

Herrn Prof. Tekn. Dr. Damian Vogt danke ich für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Bei allen Mitarbeitern des IMWF möchte ich mich für die kollegiale Atmosphäre bedanken. Insbesondere die kompetente und freundschaftliche Unterstützung von Herrn Dipl.-Ing. Wolfgang Verestek, Dennis Rapp, M.Sc. und Dr.-Ing. Alen Prskalo in allen fachlichen, IT-technischen und sonstigen Fragen.

Der DFG danke ich für die finanzielle Förderung der Forschungsprojekte B7 des SFB 716 sowie SCHM 746/154-1.

Die zur Simulation notwendige Rechenleistung wurde zu großen Teilen vom Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart zur Verfügung gestellt. Auch hier gebührt sich ein großes Dankeschön, für die Bereitstellung der Infrastruktur, sowie die gute Betreuung.

Mit einem klassischen „last but not least“ möchte ich die Danksagung schließen. Dieser Dank gebührt meinem Freundes- und Familienkreis. Insbesondere meinen Eltern Rainer und Irene Hummel, welche mich auf erdenklichste Weise unterstützt und mir diesen Weg ermöglicht haben. Und natürlich den größten Dank an meine Frau Bianca, welche mir im Alltag stets helfend zur Seite stand und gemeinsam mit meinen Kindern Constantin und Paulina den Ausgleich zum akademischen Alltag gestaltet haben.

Inhaltsverzeichnis

1	Kurzfassung	1
2	Abstract	5
3	Motivation und Zielsetzung	9
3.1	Motivation	9
3.2	Zielsetzung	10
4	Grundlagen	11
4.1	Aggregatzustände	11
4.2	Kristallstrukturen	12
4.3	Reale Kristalle	13
4.4	Gitterfehler	14
4.4.1	Punktdefekte	14
4.4.2	Liniendefekte	15
4.4.3	Flächendefekte	19
4.5	Ausscheidungen und Legierungen	20
4.5.1	Mischkristalle	21
4.5.2	GP-Zonen	21
4.6	Deformation und Plastizität	22
4.6.1	Elastische Deformation	22
4.6.2	Plastische Deformation	22
4.6.3	Verfestigungsmechanismen	25
5	Simulationsmethoden	27
5.1	Einführung	27
5.2	Einordnung	27
5.3	Molekulardynamik	29
5.3.1	Verlet-Algorithmus	29
5.3.2	Nosé-Hoover-Thermostat	30
5.4	Potential	33
5.4.1	EAM-Potentiale	33
5.5	LAMMPS	34
5.5.1	Das Skript	35
5.6	Häufig verwendete Funktionen in LAMMPS	36
5.6.1	Minimize	37
5.6.2	Mikrokanonisches Ensemble	37
5.6.3	Kanonisches Ensemble	37
5.6.4	Kanonisch-harmonisches Ensemble	38
6	Strukturerzeugung	39
6.1	NanoSCULPT	39
6.1.1	Eingabeparameter	39
6.1.2	Algorithmus	41
6.1.3	Nachbearbeitung	41
6.1.4	Polykristalle	41
6.2	Weitere Methoden	42

7	Auswertung und Analyse.....	43
7.1	OVITO.....	43
7.1.1	Koordinationszahlanalyse.....	43
7.1.2	CNA.....	44
7.1.3	Versetzungsanalyse.....	44
8	Einfluss der Deformationsrate und Probenkörpergröße	47
8.1	Entwicklung der Hardware	47
8.2	Softwareoptimierung	48
8.3	Entwicklung der Simulationsmodelle.....	49
8.3.1	Die Parallel Replica Methode.....	50
8.3.2	Hyperdynamik	51
8.4	Dehnratenkonvergenz.....	52
8.4.1	Experimentelle Untersuchungen zum Einfluss der Dehnrates	52
8.4.2	Numerische Untersuchungen zum Einfluss der Dehnrates	56
8.4.3	Vergleich der Untersuchungen zu experimentellen und numerischen Dehnrates	61
8.5	Untersuchung des Einflusses von Scherrates	63
8.6	Einfluss der Systemgröße	65
8.6.1	Einfluss der Systemgröße im Experiment.....	65
8.6.2	Einfluss der Systemgröße in der numerischen Simulation	67
8.7	Zusammenfassung des Zeit- und Größeneffekts	72
9	Simulationen und Ergebnisse.....	75
9.1	Korngrenzen	75
9.1.1	Parameterstudie Korngrenzen.....	76
9.2	Legierungen mit Ausscheidung	83
9.2.1	Guinier-Preston-Zonen im Einkristall.....	84
9.2.2	Guinier-Preston-Zonen im Polykristall.....	86
9.3	Versetzungen	88
9.3.1	Schersimulationen mit Molekulardynamik.....	89
9.3.2	Reines Aluminium.....	91
9.3.3	Gelöste Fremdatome	93
9.3.4	GP-Zonen.....	101
9.4	Nanozugversuch	116
9.4.1	Aufbau der Simulation.....	116
9.4.2	Zugversuch reiner Aluminium-Einkristalle	118
9.4.3	Zugversuch Cu- bzw. Mg- legiertes Aluminium	122
9.4.4	Nanozugversuche am Polykristall	127
9.5	Nanoindentation.....	140
9.5.1	Theorie der Nanoindentation	141
9.5.2	Aufbau der Nanoindentationssimulation	143
9.5.3	Nanoindentation am Einkristall	144
9.5.4	Nanoindentation am Einkristall mit Versetzung.....	146
10	Zusammenfassung und Ausblick	159
11	Literaturverzeichnis.....	163
12	Eigene Veröffentlichungen	172

1 Kurzfassung

Ziel der Arbeit ist die numerische Untersuchung von Aluminiumlegierungen, insbesondere des Einflusses von Ausscheidungen in gealterten Materialsystemen. Zum tiefen Verständnis der physikalischen Vorgänge auf atomarer Ebene wird hierzu die Methode der Molekulardynamik angewandt. Neben der Beeinflussung des Materialverhaltens durch die verschiedenen gearteten Ausscheidungsformen entlang des Alterungsprozesses von Aluminiumlegierungen sind kristallographische Störungen wie Versetzungen und Korngrenzen im Fokus der Simulationen. Die makroskopisch beobachtbaren Effekte, wie die Verfestigung durch die nanoskaligen, plättchenförmigen Guinier-Preston-Zonen oder des Hall-Petch-Effekts, werden detailliert untersucht.

Die verschiedenen simulierten Deformationsversuche verlaufen, der atomistischen Simulationemethode geschuldet, in sehr eingeschränkten Zeitfenstern für die Laufzeit des Prozesses sowie geometrisch auf den Bereich einiger hundert Nanometer limitiert. Die kontinuierlich zunehmende Leistungsfähigkeit und Entwicklung verfügbarer Supercomputer erlaubt jedoch die Durchführung atomistischer Berechnungen, welche immer besser geeignet sind, experimentelle Aspekte näherungsweise zu simulieren. Die Komplexität einer umfassenden atomistischen Simulation von Experimenten in allen Details übersteigt jedoch heute weiterhin die Kapazitäten des Simulierbaren. Um die bislang klaffende Lücke zwischen Experimenten und Simulation zunächst parameterweise zu schließen, wurde in dieser Arbeit ein separierender Ansatz zur Untersuchung zweier Haupteinflussgrößen bei Zugversuchen, nämlich der Probengröße und der Dehnrates gewählt. Dabei wurde zur Fokussierung auf die in dieser Arbeit relevanten Haupteinflussgrößen auf die Berücksichtigung der Mikrostruktur, insbesondere der Versetzungsdichte, der Korngrößenverteilung und Textur verzichtet, da zudem zum einen deren Nachbildung im Computermodell sehr aufwendig und zum anderen sehr viele Simulationen für eine aussagekräftige Statistik notwendig gewesen wären. Eine direkte Vergleichbarkeit der Resultate zwischen Simulation und Experiment ist daher nicht gegeben. Es wird jedoch richtungsweisend exemplarisch gezeigt, dass Simulationen mit experimentellen Dehnrates oder Probenabmessungen prinzipiell möglich sind. Die Simulation eines Zugversuches einer Probe wurde mit 837 Millionen Zeitschritten durchgeführt, wodurch eine simulierte Laufzeit des Prozesses von $0,837 \mu\text{s}$ ermöglicht wurde und somit eine experimentell zugängliche

Dehnrates erreicht wurde. Für die Annäherung der Systemgröße des simulierten Probekörpers an das Experiment wurde ein Modell mit 909 Millionen Atome erzeugt. Auf diese Weise ist sowohl für die Dehnraten als auch für die Dimensionierung des Probenkörpers eine Anknüpfung an experimentell zugängliche Situationen gelungen. Durch die an experimentellen Größen orientierten Simulationen – bei einer ersten Simulationsreihe in der Längenabmessung, bei einer weiteren Simulationsreihe in der simulierten Zeit - konnte gezeigt werden, dass wenn Experimente klein und schnell genug durchgeführt, bzw. Simulationen groß und langsam genug ausgeführt werden, sich die Ergebnisse bezüglich der im Zugversuch auftretenden Maximalspannung (R_m) einander annähern können, wobei jedoch die Ergebnisse aufgrund der unterschiedlichen Mikrostrukturen nicht direkt miteinander verglichen werden können. Durch die in dieser Arbeit gezeigten Simulationen, welche dieselben Systemgrößen oder Dehnraten wie ihr experimentelles Pendant erreichen, wird gezeigt, dass der Einfluss der Dehnraten, somit die dynamische Systemreaktion auf die externe Deformation, deutlich geringer ist als der Einfluss der durch die Systemgröße hervorgerufenen freien Weglänge für die entstehenden Versetzungen als Träger der plastischen Deformation.

Die Beeinflussung des Materialverhaltens durch die übergeordnete Mikrostruktur wird im Zusammenhang von Polykristallen analysiert. Es wird ein für diese Arbeit angefertigter Modellerstellungstool präsentiert, welches für die Generierung verschiedener Polykristallmodelle eingesetzt wird. Die Eigenschaft des Tools, beliebige Geometrien mit atomistischen Strukturen füllen zu können, wird hierbei genutzt um den mittels Voronoi-Zerlegung unterteilten Probenkörper mit verschieden orientierten Kristallkörnern zu erzeugen.

Die Umsetzung von klassischen Methoden der Materialprüfung, wie den Scherversuchen, Zugbelastungen und der Nanoindentation, mittels Molekulardynamik-Simulation ermöglicht ein detailliertes Verständnis für die elastischen und plastischen Veränderungen der untersuchten Aluminiumlegierungen auf atomarer Ebene.

Die Beeinflussung des Metallgitters durch Fehlstellen wurde mittels detaillierter Untersuchung des Spannungsfeldes um Korngrenzen, Ausscheidungen und Versetzungen analysiert. Durch Molekulardynamik-Simulation gelingt eine atomistisch aufgelöste Untersuchung von Korngrenzen, insbesondere der lokalen Grenzflächendichte und von Grenzflächenenergien. Es zeigt sich eine starke Abhängigkeit der Stabilität der Korngrenzen von der Orientierung der beteiligten Körner. Auch nach einer thermischen Behandlung der Korngrenzen bei Raumtemperatur, während welcher

sich die Atome im Bereich der Korngrenze umordnen können, wird dieses Ergebnis weiterhin bestätigt. Die Stärke und Reichweite von GP-Zonen als Ausscheidungen wird im Anschluss bestimmt. Versetzungen als Gitterfehler nehmen einen großen Stellenwert in dieser Arbeit ein. Als Träger der plastischen Verformung ist ihre Beweglichkeit maßgeblich für die erhaltenen Spannungswerte verantwortlich. In zahlreichen Scherversuchen an Aluminium mit unterschiedlicher Fremdatomkonzentration wurden die jeweiligen Hindernisstärken ermittelt.

Bei Nanozugversuchen wird die Auswirkung verschiedener Parameter auf das Dehnungsverhalten von Aluminiumlegierungen untersucht. Hierbei spielte der Aufbau der Probe eine entscheidende Rolle, handelt es sich um einen Ein- oder Polykristall? In welcher Weise wirkt sich der mittlere Korndurchmesser aus? Wie beeinflusst die Anzahl, Art und Anordnung der Legierungselemente die Materialeigenschaften und somit die Spannungs-Dehnungs-Kurve? Der Übergang vom Hall-Petch- zum inversen Hall-Petch-Effekt wurde in Abhängigkeit der Fremdatome bestimmt.

Die Indentation als klassische Härteeindringprüfung zeigt die Reaktion des Materialsystems auf starke lokale Deformation auf. Durch die MD lässt sich die Antwort des Materials auf atomistischer Ebene im Detail beobachten, wodurch der Einfluss der Fremdatome und ihrer Konzentration auf das Materialverhalten der Aluminiumlegierung bestimmt werden kann. Es wird gezeigt, dass Kristallgitterfehler in Form von Versetzungen mit dem durch den eindringenden Indenter emittierten Versetzungen wechselwirken. Diese Interaktion beeinflusst die Versetzungsbewegung und daher die plastische Materialreaktion.

Die in dieser Arbeit gewonnenen Erkenntnisse sollen dazu beitragen, im Rahmen von computerbasiertem Material-Design neue Impulse zu setzen, um Aluminiumlegierungen für individuelle Anwendungen zu komponieren. Das grundlegende Verständnis der physikalischen Vorgänge auf atomarer Ebene hilft hierbei, die Effizienz beim Werkstoffdesign zu erhöhen und damit den wirtschaftlichen Gesamtaufwand zu reduzieren bei gleichzeitiger Optimierung des Produkts.

2 Abstract

The aim of the work is the numerical investigation of aluminium alloys, in particular the influence of precipitation in aged material systems. For a deep understanding of the physical processes at the atomic level, the method of molecular dynamics is applied. In addition to the influence of the different types of precipitation forms along the ageing process of aluminium alloys on the material behaviour, the simulations focus on crystallographic disturbances such as dislocations and grain boundaries. The macroscopically observable effects, such as hardening by the nanoscale, platelet-shaped Guinier-Preston zones or the Hall-Petch effect, are investigated in detail.

Due to the atomistic simulation method, the various simulated deformation experiments run in very limited time windows for the runtime of the process and are geometrically limited to the range of a few hundred nanometers. However, the continuously increasing performance and development of available supercomputers allows the performance of atomistic calculations, which are more and more suitable to simulate experimental aspects in a close way. However, the complexity of a comprehensive atomistic simulation of experiments in all details still exceeds the capacities of what can be simulated. In order to close the gap between experiments and simulation on a parameter-by-parameter basis, a separating approach was chosen in this work to investigate two main influencing variables in tensile tests, namely the specimen size and the strain rate. In order to focus on the main influencing variables relevant in this work, the microstructure, in particular the dislocation density, the grain size distribution and texture, was not taken into account, since, on the one hand, their reproduction in the computer model would have been very costly and, on the other hand, a large number of simulations would have been necessary for meaningful statistics. A direct comparability of the results between simulation and experiment is therefore not given. However, it is shown by way of example that simulations with experimental strain rates or specimen dimensions are possible in principle. The simulation of a tensile test of a specimen was carried out with 837 million time steps, enabling a simulated runtime of the process of 0.837 μs and thus achieving an experimentally accessible strain rate. To approximate the system size of the simulated specimen to the experiment, a model with 909 million atoms was generated. In this way, a link to experimentally accessible situations was achieved both for the strain rates and for the dimensioning of the specimen. Through the simulations oriented to experimental quantities - in the case of a first simulation series in the length measurement, in the case of a further simulation series in the simulated time -

it could be shown that if experiments are carried out small and fast enough, or simulations are carried out large and slow enough, the results with respect to the maximum stress (R_m) occurring in the tensile test can approach each other, although the results cannot be compared directly with each other due to the different microstructures. Through the simulations shown in this work, which achieve the same system sizes or strain rates as their experimental counterpart, it is shown that the influence of the strain rates, thus the dynamic system response to the external deformation, is significantly less than the influence of the free path length caused by the system size for the resulting dislocations as carriers of the plastic deformation.

The influence of the superordinate microstructure on the material behaviour is analysed in the context of polycrystals. For this work a model development tool is presented, which is used for the generation of different polycrystal models. The property of the tool to be able to fill arbitrary geometries with atomistic structures is used to generate the sample with differently oriented crystal grains, which is divided by Voronoi decomposition.

The implementation of classical methods of materials testing, such as shear tests, tensile loads and nanoindentation, by means of molecular dynamics simulation allows a detailed understanding of the elastic and plastic changes of the investigated aluminium alloys at the atomic level.

The influence of defects in the metal lattice was analysed by means of a detailed investigation of the stress field around grain boundaries, precipitates and dislocations. Molecular dynamics simulations allow an atomistically resolved investigation of grain boundaries, in particular the local interfacial density and interfacial energies. The stability of the grain boundaries is strongly dependent on the orientation of the grains involved. This result is also confirmed after a thermal treatment of the grain boundaries at room temperature, during which the atoms in the area of the grain boundary can rearrange themselves. The strength and range of GP-zones as precipitates is determined afterwards. Dislocations as lattice defects play a major role in this work. As carriers of plastic deformation, their mobility is largely responsible for the stress values obtained. In numerous shear tests on aluminium with different concentrations of foreign atoms the respective obstacle strengths were determined.

In nanotensile tests, the effect of various parameters on the elongation behaviour of aluminium alloys is investigated. The structure of the sample played a decisive role here; is it a single or

polycrystal? What is the effect of the average grain diameter? How does the number, type and arrangement of the alloying elements influence the material properties and thus the stress-strain curve? The transition from Hall-Petch to inverse Hall-Petch effect was determined as a function of the foreign atoms.

Indentation as a classical hardness indentation test shows the reaction of the material system to strong local deformation. The MD allows the response of the material to be observed in detail at the atomic level, which allows the influence of the foreign atoms and their concentration on the material behaviour of the aluminium alloy to be determined. It is shown that crystal lattice defects in the form of dislocations interact with the dislocations emitted by the penetrating indenter. This interaction influences the dislocation movement and therefore the plastic material reaction.

The knowledge gained in this work should contribute to the development of new impulses for computer-based material design in order to compose aluminium alloys for individual applications. The fundamental understanding of the physical processes at the atomic level helps to increase the efficiency of material design and thus reduce the overall economic effort while optimizing the product.

3 Motivation und Zielsetzung

3.1 Motivation

Aluminium und Aluminiumlegierungen sind bereits seit Jahrzehnten etablierte Materialsysteme mit entsprechend großem Anwendungsspektrum. Eine kontinuierliche Weiterentwicklung führt zur stetigen Ausweitung des Einsatzgebietes. Insbesondere mittels gezielter Modifikation der Materialeigenschaften durch Legierungsatome können spezialisierte Anforderungen, wie zum Beispiel eine hohe Festigkeit, bedient werden. Die qualitative Beeinflussung ergab sich hierbei über einen langen Zeitraum aus experimentellen Studien und Erfahrungen, ohne die zugrundeliegenden physikalischen Ursachen zu ergründen. Die historische metallurgische Tradition beinhaltet bereits das Wissen über die verfestigende Wirkung von Fremdatomen im grundsätzlich zunächst weichen Werkstoff Aluminium [1]. Als Folge hieraus entstand das „Duraluminium“, welches bereits früh im Schiffs- und Flugzeugbau verwendet wurde. Die Vorteile der Aluminiumlegierung mit circa fünf Prozent Kupferanteil bestand in der geringeren Dichte im Vergleich zum klassischen Werkstoff Eisen. Ebenfalls wurde eine weitere Wandlung der Materialeigenschaften bei anschließender Nachbearbeitung ohne weitere Änderung des stöchiometrischen Verhältnisses erkannt und genutzt. Als Beispiele einer solchen Nachbearbeitung dienen die Kaltverfestigung und die Wärmebehandlung. Bei der Wärmebehandlung führt eine erhöhte Diffusion von Legierungsatomen zur Ausbildung von Guinier-Preston-(GP-)Zonen [2, 3], welche die Bewegung von Versetzungen im Kristall erschweren und dadurch eine verfestigende Wirkung mit sich bringen. Die GP-Zonen wurden experimentell beobachtet und in verschiedenen Veröffentlichungen analysiert [4–9].

Ogleich der Werkstoff Aluminium eine lange Tradition besitzt, bestehen noch immer offene Fragestellungen, insbesondere bei den Grenzflächenenergien sowie Versetzungsinteraktionen, welche ihre physikalische Beantwortung auf der Größenordnung der Atome finden. Die Molekulardynamik als die in dieser Arbeit verwendete atomistische Simulationsmethode ist numerisch sehr aufwendig, da die Newtonschen Bewegungsgleichungen für jedes Atom zu jedem Zeitschritt berechnet werden muss. Dadurch ist die Modellgröße, durch die Anzahl der Atome, sowie die simulierbare Zeit, durch die vorhandene Rechenkapazität begrenzt. Diese Zeit- und Längenbeschränkung, und die dadurch entstehende Lücke zu experimentellen Vergleichsversuchen, beschäftigt

namhafte Wissenschaftler seit Jahren. Voter et al. [10] stellten beispielsweise im Jahr 2002 Modifikationen der Molekulardynamik vor, welche für geeignete Fälle die simulierbare Zeit um Zehnerpotenzen ausweiten. Den direkten Einfluss der Deformationsrate auf die notwendige Spannung zur Versetzungsnukleation haben Spearot, Tschopp und Dowell [11] untersucht und 2009 veröffentlicht. Da die Dehnrates das Materialverhalten beeinflusst, welches sowohl ein Phänomen der atomistischen Simulation als auch in makroskopischen Simulationsmethoden und Experimenten ist, bleibt die Frage, wie stark ist diese Beeinflussung des Materialverhaltens durch die Dehnrates? Welcher Einfluss wiegt schwerer, die Dehnrates oder die Modellgröße?

3.2 Zielsetzung

Diese Lücke zwischen atomistischer Simulation und Experiment sowohl in der Größe als auch in der simulierbaren Zeit und somit in der Dehnrates zu schließen ist das Hauptziel dieser Arbeit. Dieser Handshake zwischen Simulation und Experiment ist notwendig, insbesondere im Hinblick auf skalenübergreifende Simulationen, bei welchen der Workflow eine Übergabe der Simulationsergebnisse in andere Simulationsmethoden vorsieht und damit einhergehend gegebenenfalls ein Wechsel der Zeit- und Längendimension vollzogen wird. Nur durch den lückenlosen Übergang aus der Atomistik in den experimentell zugänglichen Bereich können Erkenntnisse aus der atomistischen Forschung ihre Auswirkung im makroskopischen Einsatz geeignet einbringen.

Mit der Störung des metallographischen Kristallgitters durch Versetzungen und Korngrenzen ergeben sich Einflussfaktoren, welche das makroskopische Verhalten eines Werkstoffes ausmachen und in dieser Arbeit untersucht werden. Im Rahmen der Arbeit wurde eine frei verfügbare Anwendung programmiert, welche die Erstellung atomistischer Modelle in Form beliebiger vorgegebener Geometrien ermöglicht. In der Arbeit wurde diese verwendet, um atomistische Modelle von Nanopolykristallen zu generieren.

Ein vollständiger Wegfall von experimentellen Materialuntersuchungen ist nicht das angestrebte Ziel von molekulardynamischen Simulationen, vielmehr steht das Bestreben im Vordergrund, in Kombination mit dem Experiment ein effizientes Materialdesign für aktuelle Fragestellungen umzusetzen. Hierbei sollen die in dieser Arbeit erhaltenen grundlegenden Erkenntnisse aus den atomistischen Simulationen über das Materialverhalten der Aluminiumlegierungen beitragen.

4 Grundlagen

4.1 Aggregatzustände

In der Natur treten Materialien in verschiedenen Aggregatzuständen auf. Die klassischen Vertreter sind hierbei flüssig, fest und gasförmig. Der wohl bekannteste nicht klassische Zustand ist das Plasma, welches durchaus natürliche Erscheinungsformen hat, z.B. in Blitzentladungen, wohingegen die meisten anderen nicht klassischen Zustände häufig lediglich unter Extrembedingungen im Labor realisiert werden. Die verschiedenen Aggregatzustände können durch Änderung der physikalischen Größen Temperatur und Druck ineinander reversibel überführt werden. In welchem Zustand ein Material vorliegt, wird im sogenannten Phasendiagramm dargestellt. Auf den Achsen des p-T-Phasendiagramms sind die physikalischen Größen Druck (p) und Temperatur (T) aufgetragen, daraus resultieren Flächen gleicher Aggregatzustände, welche durch Phasengrenzen getrennt sind. Das Phasendiagramm von Wasser ist exemplarisch in Abbildung 1 aus [12] dargestellt.

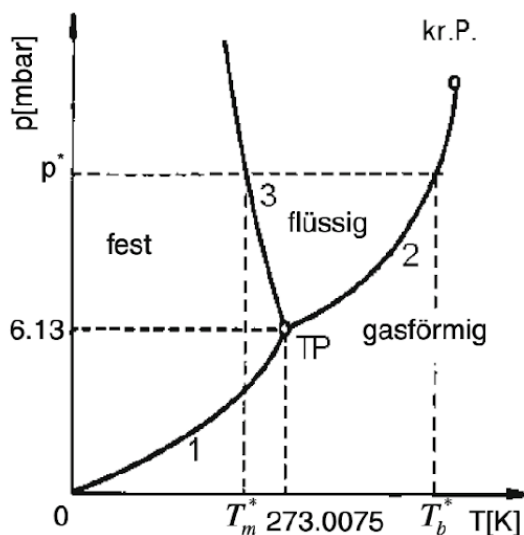


Abbildung 1: Dargestellt ist das Phasendiagramm von Wasser. Hierbei ist kr. P. der kritische Punkt und TP der Tripelpunkt. [12]

Ausgezeichnete Zustände liegen im sogenannten Tripelpunkt sowie im kritischen Punkt vor. Am Tripelpunkt liegen alle drei Phasen im Gleichgewicht vor. Der kritische Punkt markiert die Druck/Temperatur-Kombination, ab welcher bei höheren Werten der Übergang von flüssig zu gasförmig kontinuierlich verläuft. In der hier vorliegenden Arbeit werden vorzugsweise Metalle und

Metalllegierungen in festem Aggregatzustand behandelt. Hierbei wird zwischen zwei Arten von Festkörpern unterschieden, kristalline und amorphe Festkörper. Ein amorphes Material zeichnet sich durch eine vorhandene Nahordnung aus, wohingegen keine Fernordnung erkennbar ist. Im Gegensatz dazu besitzt ein kristalliner Stoff eine sehr ausgeprägte Fernordnung, dabei sind die Atome über weite Bereiche periodisch angeordnet.

4.2 Kristallstrukturen

Kristalle sind in verschiedensten Formen und Farben zu beobachten. Die vorliegende Kristallstruktur eines Materials wird zum einen durch das Punktgitter und zum anderen durch die Basis festgelegt. Das Punktgitter Γ ist eine mathematische Struktur, welche durch primitive Einheitsvektoren \vec{b}_i aufgespannt wird [13].

$$\Gamma := \langle \vec{b}_i \rangle_{\mathbb{Z}} = \{ \sum_{i=1}^d \mathbf{k}_i \vec{b}_i \mid \mathbf{k}_i \in \mathbb{Z} \}. \quad (1)$$

Hierbei ist d der Rang des Gitters. Für reale Kristalle ist der Rang gleich der Dimension und somit drei. Dadurch ist das Gitter für Kristalle die Menge aller Punkte, deren Ortsvektoren durch Linearkombination der Einheitsvektoren \vec{b}_i erhalten werden, gegeben. Eine Eigenschaft mathematischer Gitter ist die Translationsinvarianz, welche die für die Kristallinität geforderte Periodizität sicherstellt. Abhängig von der Länge der Einheitsvektoren \vec{b}_i und deren eingeschlossenem Winkel werden die Kristallsysteme in sieben Gruppen entsprechend ihrer Symmetrie eingeordnet. Diese sieben Gruppen heißen in aufsteigender Symmetrie: triklin, monoklin, orthorhombisch, tetragonal, trigonal, hexagonal und kubisch. Durch Ergänzung weiterer Gitterpunkte in diesen Kristallsystemen können weitere unterscheidbare Gittertypen erzeugt werden. Hierbei werden zusätzliche Gitterpunkte auf zwei gegenüberliegenden Seitenflächen (basiszentriert), auf allen Seitenflächen (flächenzentriert) oder in der Mitte des Raumes (raumzentriert) hinzugefügt. Insgesamt gibt es im dreidimensionalen Raum vierzehn verschiedene Gittertypen, auch Bravais-Gitter genannt. Entsprechend der in dieser Arbeit verwendeten Materialsysteme wird im Folgenden das kubisch flächenzentrierte Gitter detaillierter erläutert.

Im kubisch flächenzentrierten (face centered cubic (fcc)) Gitter bilden die Einheitsvektoren ein Orthogonalsystem, die Vektoren sind also paarweise orthogonal. Darüber hinaus sind alle Einheitsvektoren von gleicher Länge.

$$\vec{\mathbf{b}}_i \perp \vec{\mathbf{b}}_j ; i \neq j \quad (2)$$

$$|\vec{\mathbf{b}}_i| = |\vec{\mathbf{b}}_j| ; \forall i, j \quad (3)$$

Zusätzlich sind in den Flächenmitten Gitterpunkte vorhanden. Aus diesem mathematischen Konstrukt wird mit Hilfe der Basis ein realer Kristall. Als Basis wird die kleinste Gruppe von Atomen, Ionen oder Molekülen bezeichnet, durch welche mit Hilfe periodischer Reproduktion der vollständige Kristall erzeugt werden kann. Die Basis bezieht sich auf ein Element des Punktgitters. Jede Basis enthält mindestens ein Element, welches aber nicht notwendigerweise auf einem Gitterpunkt positioniert ist.

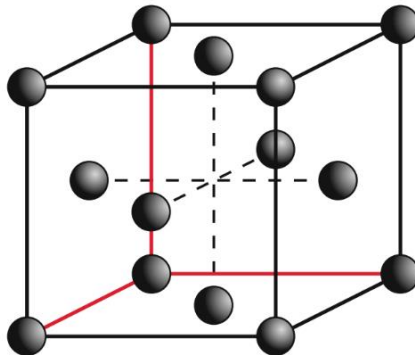


Abbildung 2: Hier ist ein kubisch flächenzentriertes Gitter dargestellt. Die Eigenvektoren sind paarweise orthogonal bei selber Länge. Auf den Flächenmitten sind jeweils weitere Gitterpunkte eingebracht, somit besitzt die Einheitszelle insgesamt 14 Gitterpunkte [13].

4.3 Reale Kristalle

Das in Gleichung (1) definierte Gitter ist in dieser mathematischen Formulierung unendlich ausgedehnt. Ein realer Kristall kann dies selbstverständlich nicht sein. Gilt Gleichung (1) für das gesamte Material, so wird von einem idealen Kristall oder Einkristall gesprochen. Diese sind im Labor nur mit großem Aufwand und nicht für alle Materialsysteme realisierbar, in numerischen

Modellen hingegen ist dies der einfachste Fall. Häufig besteht ein realer Kristall aus mehreren zusammengesetzten Einkristallen auch Körner genannt. Die Einheitsvektoren \vec{b}_i in verschiedenen Körnern können durch Rotation \mathbf{R} der Einheitsvektoren \vec{b}_i erhalten werden.

$$\vec{b}_i = \mathbf{R}\vec{b}_i \quad (4)$$

Die Kontaktfläche zwischen zwei Körnern wird als Korngrenze bezeichnet. Meist folgt der Bereich um die Korngrenze nicht mehr der Gleichung (1) und die Atome bilden eine verzerrte kristalline Struktur. Je nach Materialsystem und thermodynamischen Einflüssen ist dieser Bereich mehr oder weniger stark ausgeprägt. Korngrenzen gelten als zweidimensionale Gitterfehler. Im Folgenden werden, in aufsteigender Dimensionalität, weitere Gitterfehler besprochen, welche für die für die Arbeit durchgeführten Untersuchungen relevant sind.

4.4 Gitterfehler

Neben den zuvor erwähnten Störung der kristallinen Fernordnung entsprechend der Gleichung (1) an Korngrenzen gibt es weitere Abweichungen innerhalb eines Kristalles/Korns. Hier erklärt werden sollen die für die Arbeit relevanten Repräsentanten der Punkt-, Linien- und Flächendefekte.

4.4.1 Punktdefekte

Als Punktdefekte gelten jene Störungen des Punktgitters, welche durch lediglich ein einzelnes Atom verursacht werden. Hierbei sind die zwei häufigsten Vertreter die Leerstellen und die Zwischengitteratome. Bei den Leerstellen verbleibt eine Atomposition unbesetzt. Die durch die zurückbleibende Lücke verursachte Spannung wird vom umliegenden Kristallgitter durch Deformation zu der freien Position teilweise ausgeglichen. Bei den Zwischengitteratomen sind alle regulären Positionen besetzt, jedoch befinden sich weitere Atome im Kristall an Stellen zwischen den Gitterplätzen, welche in einem idealen Kristall nicht besetzt wären. Die hierbei auftretende Spannung wird durch das Aufweiten des Gitters weg vom Zwischengitteratom teilweise reduziert.

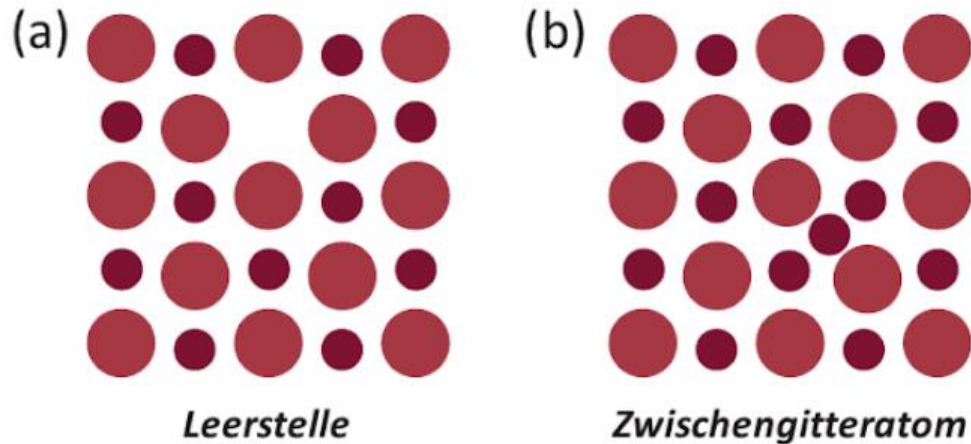


Abbildung 3: Die Abwesenheit eines Atoms auf einem regulären Gitterplatz, wird als Leerstelle bezeichnet. Befindet sich ein Atom zusätzlich zu den auf regulären Gitterpositionen platzierten Atomen im Raum, so heißt dieses Zwischengitteratom oder auch Interstitial. [14]

4.4.2 Liniendefekte

Versetzungen sind die wohl bedeutendsten Liniendefekte. Um Versetzungen beschreiben zu können, müssen zunächst die Millerschen Indizes und ihre Notation eingeführt werden.

Millersche Indizes

Um Richtungen und Ebenen in Kristallformationen zu beschreiben wird die Situation auf die Einheitszelle, den kleinsten vollständigen Repräsentant des Kristalls, reduziert. In dieser werden die Durchstoßpunkte der Achsen durch die Ebene bestimmt, von der jeweils von Null verschiedenen Zahl wird der Kehrwert gebildet und mit dem kleinsten gemeinsamen Vielfachen der reziproken Durchstoßpunkte multipliziert. Die auf diese Weise erhaltenen teilerfremden ganzen Zahlen h , k und l werden als Millersche Indizes bezeichnet. Somit ist eine Ebene durch die Schreibweise (hkl) eindeutig bestimmt. Aus Symmetriegründen sind verschiedene Ebenen kristallographisch äquivalent, sie werden mit geschwungenen Klammern zusammengefasst zu $\{hkl\}$. Im primitiv kubischen Gitter zum Beispiel entspricht die Ebenenfamilie $\{100\}$ den einzelnen Ebenen (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$ und $(00\bar{1})$. Hierbei entspricht der Querstrich über der Zahl einem negativen Vorzeichen. Analog ist eine Richtungsbestimmung mit Hilfe der Indizes möglich, wobei diese in eckige Klammern gefasst werden $[hkl]$. Die entsprechende Klasse der Richtungen wird mit $\langle hkl \rangle$ bezeichnet. In kubischen Systemen steht die Richtung $[hkl]$ senkrecht zur Ebene (hkl) .

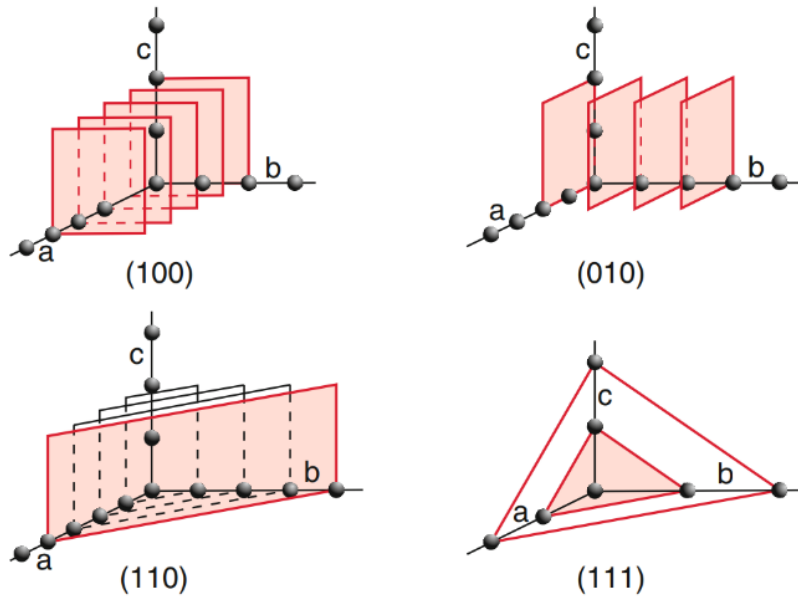


Abbildung 4: Einige ausgewählte Netzebenenscharen in einem kubischen Gitter [13]

Versetzungen

Versetzungen sind Defekte im Kristall, welche sich entlang einer Linie systematisch fortsetzen. Angepasst an die in dieser Arbeit verwendeten Metallsysteme, sowie zur Wahrung der Einfachheit werden hier lediglich Versetzungen in kubischen Systemen betrachtet. Für ein detaillierteres Verständnis von Versetzungen in verschiedenen Kristallsystemen wird an die zahlreich vorhandene Fachliteratur verwiesen. Versetzungen können in zwei Gruppen kategorisiert werden, in Schrauben- und Stufenversetzungen.

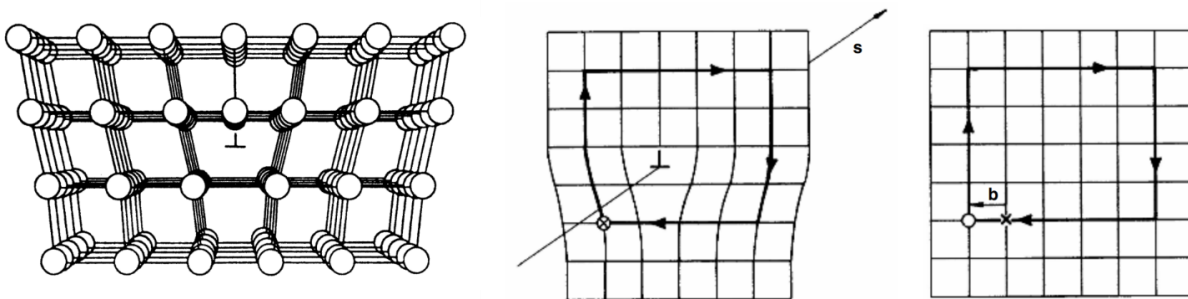


Abbildung 5: Darstellung eines einfach kubischen Kristallgitters nach [12]. In der unteren Hälfte des Kristalls wurde eine Halbebene entfernt. Die Stufenversetzung s verläuft entlang der Kante der verbleibenden Halbebene in die Bildebene hinein. Die geschlossene Vektorkette um die Versetzung wird Burgersumlauf genannt. Im rechten Bild ist der Burgersumlauf in einem nichtverzerrten Gitter, wobei der die offenen Enden des Umlaufs verbindende Vektor der Burgersvektor ist.

Eine Stufenversetzung, wie in Abbildung 5, kann durch das Entfernen einer Halbebene aus dem Kristallgitter erzeugt werden. In hinreichend großem Abstand zur Versetzung scheint das Gitter weitestgehend ungestört, wohingegen die direkte Umgebung der Versetzung stark verzerrt ist, um die fehlende Atomlage auszugleichen. Das Ende der verbleibenden Halbebene ist die Versetzungslinie, sie verläuft senkrecht zur Bildebene.

Eine Schraubenversetzung gemäß Abbildung 6 wird gebildet, indem sich Teile des Gitters entlang einer Halbebene gegeneinander verschieben. Die Versetzungslinie ist hierbei die Verbindung der beiden verschobenen Teilgitter und sie liegt in der Bildebene von unten nach oben orientiert.

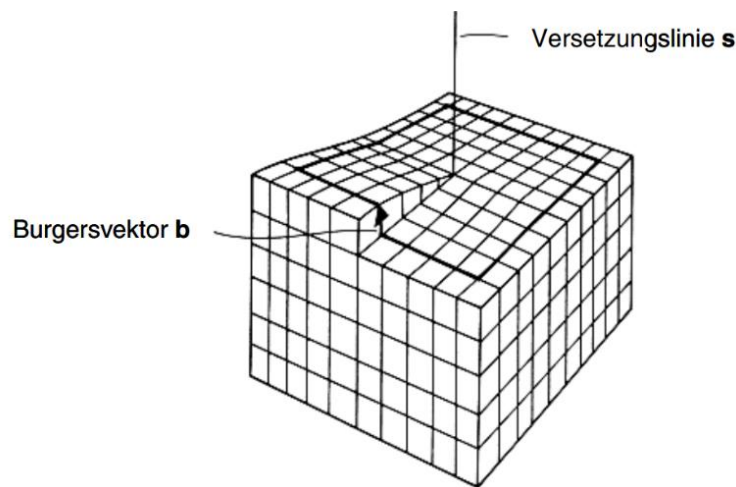


Abbildung 6: Schematische Darstellung eines kubischen Kristalls aus [12]. Um eine Schraubenversetzung zu erhalten, wird ein Teil des Gitters entlang einer Halbebene gelöst und gegen einander verschoben. Die Versetzungslinie s verbindet das verschobene mit dem nicht verschobenen Gitter. Der Burgersvektor verläuft parallel zur Versetzungslinie.

Natürlich treten neben reinen Stufen- und Schraubenversetzungen auch Versetzungen mit gemischtem Charakter auf, bei denen der Burgersvektor in einem beliebigen Winkel zur Versetzungslinie steht [15]. Der Burgersvektor wird bestimmt in dem ein geschlossener Vektorzug entlang von Gitterpunkten um die Versetzung gebildet. Übertragen auf ein versetzungsfreies Kristallgitter, wird der Vektorzug nicht mehr geschlossen sein. Der Differenzvektor wird Burgersvektor genannt. Für Stufenversetzungen steht der Burgersvektor senkrecht zur Versetzungslinie, für Schraubenversetzungen ist er parallel zur Versetzungslinie. Im Allgemeinen sind innerhalb eines Materialsystems Versetzungen mit kurzen Burgersvektoren aus energetischen Gründen häufiger anzutreffen, als jene mit längerem Burgersvektor.

Ein beliebig gearteter Kristall kann, neben der Repetition von Einheitszellen in jede Richtung bis zum Erreichen der Zielgeometrie, ebenso durch Stapeln von Ebenen erstellt werden. Die Stapelrichtung mag hierbei beliebig sein, wobei durch die Stapelrichtung die zweidimensionale Anordnung der Atome festgelegt wird. Abhängig vom Kristalltyp und von der Richtung bedarf es einer bestimmten kleinen Anzahl an Ebenen (typischerweise 2-3) bis sich diese wiederholen.

Besteht nun der Kristall aus zwei Arten von Ebenen A und B, welche in alternierender Reihenfolge ABABAB übereinander gestapelt den Kristall ergeben, so ist es zur Wahrung der Stapelfolge notwendig, zwei Halbebenen zu entfernen. Auf diese Weise erzeugte Versetzungen heißen „perfekte Versetzungen“, sie besitzen einen Burgersvektor, welcher im vollständigen Kristall zwei Ebenen vom Typ A miteinander verbindet.

Die häufigste perfekte Versetzung in fcc-Kristallen ist die Versetzung mit dem Burgersvektor $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$. Sie liegt auf der dichtest gepackten Ebene des Kristalls und wird $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ -Versetzung genannt. Die häufigsten beobachteten Versetzungen sind jedoch die sogenannten Shockley-Partialversetzungen, welche einen Burgersvektor der Form $\frac{1}{6}\langle 112 \rangle$ besitzen. Sie entstehen durch die Aufspaltung einer perfekten $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ -Versetzung in zwei Shockley-Partialversetzungen [12]:

$$\frac{1}{2}[\bar{1}10] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{2}11] + \frac{1}{6}[\bar{1}2\bar{1}] \quad (5)$$

$$\frac{1}{2}[\bar{1}01] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{2}11] + \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2] \quad (6)$$

$$\frac{1}{2}[\bar{1}10] \rightarrow \frac{1}{6}[1\bar{2}1] + \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2] \quad (7)$$

Die Ursache dieser Aufspaltung liegt in der Energie der verursachten Verformung. Werden die kleinen Dehnungen im Kristall als im Hookeschen Bereich angesehen, so ist die Verformungsenergie proportional zu b^2 . Somit bleibt zu zeigen, dass die Summe der Burgersvektor-Quadrate der zwei Shockley Partialversetzungen geringer ist, als das Quadrat des Burgersvektors der perfekten Versetzung:

$$\frac{1}{2}[\bar{1}10] : b^2 = \frac{a^2}{4} ((-1)^2 + 1^2 + 0^2) = \frac{a^2}{2} \quad (8)$$

$$\frac{1}{6}[\bar{2}11] : b^2 = \frac{a^2}{36} ((-2)^2 + 1^2 + 1^2) = \frac{a^2}{6} \quad (9)$$

$$2 * (9) < (8) \quad (10)$$

Nach Gleichung (10) folgt hieraus die energetische Bevorzugung der zwei Partialversetzungen vor der perfekten Versetzung. Da die Partialversetzungen mit den kleineren Burgersvektoren jedoch nicht die Stapelfolge unverändert lassen, kommt es zwischen den Partialversetzungspaaren zu sogenannten Stapelfehlern.

4.4.3 Flächendefekte

Nach den zuvor besprochenen 0- und 1-dimensionalen Gitterfehlern werden nun mit den Flächendefekten Vertreter der 2-dimensionalen Störungen des idealen Gitters erörtert. Vorgestellt werden Stapelfehler und Korngrenzen, inklusive Zwillingskorngrenzen.

Stapelfehler

Wie im Abschnitt über Versetzungen bereits angesprochen, bilden sich zwischen Partialversetzungen sogenannte Stapelfehler aus. Stapelfehler sind räumlich begrenzte Bereiche, in denen die regulär im Kristall vorherrschende Stapelfolge nicht eingehalten wird. Die Störung der regulären Anordnung der Atome im Kristall trägt eine erhöhte Energie mit sich. Diese Energiedifferenz zum perfekten Kristall wird Stapelfehlerenergie genannt. Sie ist materialspezifisch und wird pro Fläche angegeben. Die von Null verschiedene Stapelfehlerenergie führt dazu, dass bei Gleichung (10) die linke Seite unvollständig ist, da die aufgewendete Energie zur Erzeugung von Stapelfehlern zwischen den Partialversetzungen noch nicht berücksichtigt wird. Die Entfernung der beiden Partialversetzungen voneinander hängt umgekehrt proportional von der Stapelfehlerenergie ab und ist somit charakteristisch für ein Material.

Korngrenzen

Im Kapitel „Reale Kristalle“ wurden bereits Korngrenzen angesprochen. Diese stellen den Übergang von unterschiedlich orientierten einkristallinen Körnern dar. Durch die verschiedene

Orientierung der Einzelkörner folgt die Anordnung der Atome nicht mehr der Fernordnung, so dass es zur Bildung von material- und einflussbedingten mehr oder weniger ausgeprägten Grenzschichten mit verzerrtem Kristallgitter zwischen den benachbarten Körnern kommt.

Zwillingskorngrenzen

Zwillingskorngrenzen sind eine besondere Untergruppe der Korngrenzen, bei welcher die verzerrte Grenzschicht ausbleibt und welche als Spiegelebene betrachtet werden kann. Zu jedem Gitterpunkt auf der einen Seite der Zwillingsgrenze gibt es einen äquivalenten Punkt auf der anderen Seite. Für den Fall, dass die Gitter auf beiden Seiten der Korngrenze in einer Regelmäßigkeit gemeinsame Punkte in der Grenzschicht besitzen, so wird von Σ -Korngrenzen gesprochen. Die gemeinsamen Punkte werden Koinzidenzpunkte genannt. Eine Zahl nach dem Σ gibt den Abstand in Ebenen zwischen zwei Koinzidenzpunkte an, so dass für die $\Sigma 5$ -Korngrenze jede fünfte Kristallebene einen gemeinsamen Punkt mit dem benachbarten Korn besitzt. Dies ist bei einem Rotationswinkel von $36,87^\circ$ um eine $\langle 100 \rangle$ -Achse der Fall. Diese Art Korngrenze entsteht häufig bei plastischer Deformation, kann allerdings ebenfalls im natürlichen Kristallwachstum vorkommen.

4.5 Ausscheidungen und Legierungen

Im vorangegangenen Kapitel wurden Kristallfehler besprochen, welche zu einer Störung des perfekten Kristallgitters führen können. Eine Veränderung des Gitters kann jedoch ebenso durch das Vorhandensein von Fremdatomen herbeigeführt werden. Hierbei ist zu unterscheiden, ob diese Fremdatome bewusst in das Basismaterial eingebracht wurden, dann spricht man von Legierungen, oder ob sie unbeabsichtigt also als Verunreinigung vorliegen. Da Verunreinigungen ein Problem der Herstellung realer Proben darstellen und sich diese Arbeit ausschließlich mit molekulardynamischen Simulationen beschäftigt, werden im Folgenden lediglich Legierungen betrachtet. Genauer sollen für Kupfer und Magnesium, welche in der hier gezeigten Arbeit als Legierungselemente in der Aluminiummatrix fungieren, verschiedene Alterungsstufen betrachtet werden. Die Fokussierung ist hierbei das Anfangsstadium der Mischkristalle, sowie die Zwischenstufen der Guinier-Preston-Zonen I und II auf dem Weg der Entwicklung zu der Θ -Phase. Die Θ -Phase ist eine größere inkohärente sphärische Ausscheidung. Theoretischen Untersuchungen von Kupferausscheidungen sind in der Literatur zugänglich [16, 17].

4.5.1 Mischkristalle

In der Ausgangssituation liegen die Legierungselemente in stochastischer Verteilung auf Plätzen der Basismatrix. Im verwendeten Simulationsmodell wird dieser Zustand durch Substitution von Aluminiumatomen mit einer gewünschten Wahrscheinlichkeit realisiert. Das Vorkommen der Legierungsatome auf diese Weise wird als Mischkristall bezeichnet. Es gibt darüber hinaus Mischkristalle, bei welchen die Fremdatome sich auf nicht-Gitterplätzen positionieren, diese sind jedoch nicht Gegenstand der in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen und es wird daher für detailliertere Informationen auf Fachliteratur, wie zum Beispiel [12], verwiesen. Für die Anteile an Kupfer bzw. Magnesium werden exemplarisch ein, zwei und fünf Atomprozent angesetzt. In einzelnen Simulationen werden die Quantitäten des Legierungselementes in Gewichtsprozent angegeben.

4.5.2 GP-Zonen

Die durch Alterung von Mischkristallen erzielte Zwischenstufe wird durch scheibchenförmig angeordnete Legierungsatomen gebildet [2, 3]. Diese Scheibchen werden nach ihren Entdeckern Guinier-Preston-(GP-)Zonen genannt. Die zufällig angeordneten Atome des Mischkristalles bewegen sich mittels Leerstellendiffusion durch den Kristall und bilden gemeinsam diese scheibchenförmigen Ausscheidungen mit einem Durchmesser von etwa 10 Nanometern, welche meist auf den $\{100\}$ -Ebenen der Grundmatrix zu finden sind. In [4] wird über die Existenz von GP-I-Zonen berichtet, welche auf $\{111\}$ -Ebenen liegen, diese sind jedoch seltener. Abhängig von der Größe der GP-I-Zonen zeigt sich die Fremdatomkonzentration, wie es für den Fall von Kupfer in der Arbeit von Takeda et. al [5] dargestellt wird. Die Reinheit der Ausscheidung kann innerhalb eines Systems variieren, GP-I-Zonen im Reinheitsbereich zwischen 40% und 100% wurden experimentell beobachtet [6, 7]. In der direkten Umgebung der GP-Zonen sinkt die Fremdatomkonzentration der in der Matrix verteilten Fremdatome auf null. Wird das Legierungssystem weiter einer Wärmebehandlung ausgesetzt, entstehen weitere scheibchenförmige Ausscheidungen in der Nähe der bereits existierenden GP-I-Zonen und bilden dadurch die GP-II-Zonen. Die Anordnung der die GP-II-Zonen darstellenden GP-I-Zonen ist regelmäßig, wobei die GP-I-Zonen parallel zueinander liegen und durch meist drei Atomlagen von Aluminium-Basisatomen voneinander getrennt sind [8, 9]. Der Durchmesser der GP-II-Zonen erreicht bis zu 150 nm. Die nachfolgenden Alterungsstufen, die

kohärente Θ' -Phase und die inkohärente Θ -Phase, übersteigen die durch die Molekulardynamik abdeckbare Größenordnung und werden daher in dieser Arbeit nicht weiter behandelt.

4.6 Deformation und Plastizität

4.6.1 Elastische Deformation

Die Atome eines Kristalls sind platziert auf ihren Gitterplätzen, diese kann als Ruhelage bezeichnet werden. Jedoch verharren sie dort keinesfalls in Ruhe. Alleine durch die thermische Energie bewegen sie sich um diese Gleichgewichtsposition. Eine weitere Möglichkeit, die Atome von ihrer Ruhelage weg zu bewegen besteht im Aufbringen einer äußeren Belastung. Im Gegensatz zur isotropen thermischen Auslenkung ist die extern hervorgerufene Änderung gerichtet, also anisotrop. Für kleine äußere Belastungen gilt das Hookesche Gesetz, d.h. die kollektive Verschiebung der Atome bildet eine zur Belastung proportionale Gegenkraft. Beim Verschwinden der externen Belastung kehrt das System wieder in seine ursprüngliche Konfiguration zurück. Diese Verformung wird elastische Deformation genannt.

4.6.2 Plastische Deformation

Ist die äußere Belastung zu groß, so gelingt es dem System nicht, sich von selbst wieder in die Ausgangslage zurück zu bewegen. Der elastische Bereich wurde hierbei überschritten und es kommt zur plastischen Verformung. Auf atomarer Ebene zeigt sich dies, wenn sich die obere Lage des Kristallgitters, wie in Abbildung 7 schematisch dargestellt, soweit gegen die untere Lage verschoben hat, dass das Atom nach dem Verschwinden der externen Belastung an der Stelle zur Ruhe kommt, an welchem zuvor ein benachbartes Atom seine Ruhelage hatte. Im fehlerfreien Kristall erfordert dies jedoch die Überwindung der durch die darunterliegenden Atome verursachte Barriere von allen Atomen simultan und somit eine sehr große externe Belastung.

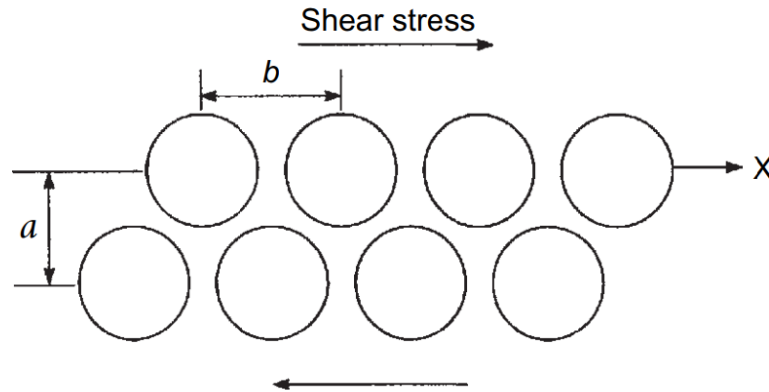


Abbildung 7: Schematische Darstellung zweier Atomlagen, welche gegeneinander verschoben werden [15]. Es handelt sich um eine defektfreie Anordnung der Atomlagen.

Durch die Existenz von Versetzungen wird die zur plastischen Deformation notwendige Energie deutlich reduziert. Ebenen auf denen sich Versetzungen bewegen, werden Gleitebenen genannt. Es werden in der Regel jene bevorzugt, welche am dichtesten gepackt sind. In Abbildung 8 ist dargestellt, dass beim Vorhandensein von Versetzungen lediglich drei Halbebenen pro Versetzungsschritt involviert sind. Die Versetzung befindet sich zu Beginn an der Position 2. Position 1 und 3 sind benachbarte Gitterplätze der ersten durchgängigen Ebene unter und über der Gleitebene der Versetzung. Gitterplatz 1 löst sich von 3 und rekombiniert mit Gitterplatz 2. Somit ist nach dem ersten Schritt Position 3 die offene Stelle und somit die Position der Versetzung. Durch Wiederholung dieses Mechanismus kann die Versetzung durch den gesamten Kristall wandern. Aufgrund der mit nur drei Halbebenen deutlich reduzierten Anzahl an beteiligten Kristallebenen ist die notwendige Energie zur Versetzungsbewegung ebenfalls deutlich reduziert.

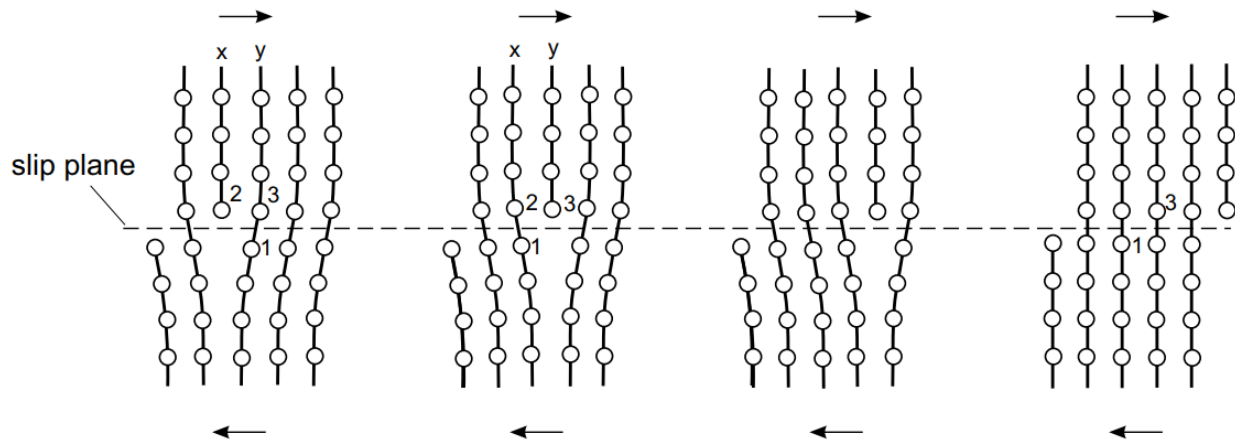


Abbildung 8: Schematische Darstellung einzelner Schritte bei der Versetzungsbewegung durch einen Kristall aus [15].

Plastische Deformation im kfz-System

Bereits im Abschnitt über Versetzungen und bei jenem über Stapelfehler wurde die Neigung zur Aufspaltung von Versetzungen im fcc-Kristall angesprochen. Im jetzigen Abschnitt soll diese noch einmal unter dem Gesichtspunkt der Versetzungsbewegung aufgegriffen werden. In Abbildung 9 wird gezeigt, wie diese Aufspaltung aufgebaut ist. Links ist die perfekte Versetzung dargestellt und rechts die in zwei Partialversetzungen aufgespaltene Versetzung. Die Versetzungen liegen links wie auch rechts in der Gleitebene $[\bar{1}11]$. Die Buchstaben an den Kristallebenen dienen zur Identifikation des Stapelfehlers der Breite d_0 . Die Burgersvektoren sind mit b_c für die perfekte Versetzung und mit b_{pa} und b_{pb} für die Partialversetzungen gekennzeichnet. Aufgrund des kürzeren Burgersvektors der zwei Partialversetzungen können diese den im Abschnitt zuvor beschriebenen Versetzungsschritt mit geringerer äußerer Belastung vollziehen. Darüber hinaus muss die Bewegung beider Teilversetzungen nicht absolut simultan ablaufen.

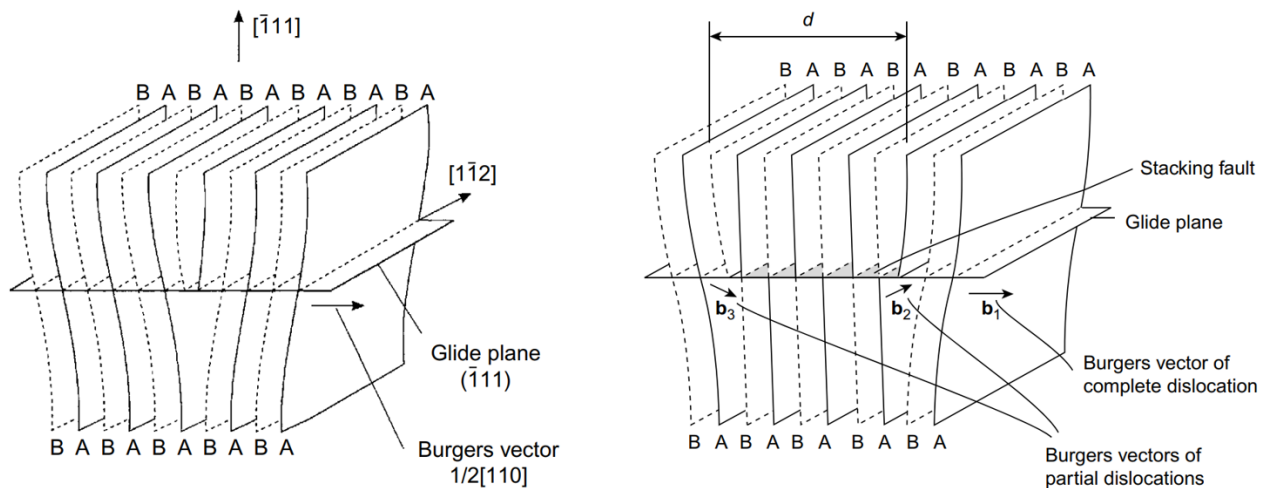


Abbildung 9: Schematische Veranschaulichung der Versetzungsaufspaltung einer perfekten Versetzung in zwei Partialversetzungen im krz-Kristall nach [15]. Links die perfekte Versetzung mit Erhalt der Stapelreihenfolge, rechts die aufgespaltene Versetzung mit dazwischenliegendem Stapelfehler.

4.6.3 Verfestigungsmechanismen

Im Folgenden sollen verschiedene Mechanismen beschrieben werden, welche direkten Einfluss auf die Festigkeit eines Materialsystems haben. Im realen Experiment lassen sich die verschiedenen Mechanismen nicht so einfach voneinander separieren, wodurch die gemessene Festigkeitsveränderung eines Werkstoffes die Summe der einzelnen Verfestigungsmechanismen ist. Zur detaillierteren Beschreibung wird auf die Grundlagenliteratur der Materialkunde wie zum Beispiel das Buch von Gottstein [12] verwiesen. Der Vorteil der Simulation zeigt sich hier in der direkten Zugänglichkeit der einzelnen Parameter.

Mischkristallverfestigung

Wie im Kapitel Plastische Deformation beschrieben, ist die Versetzungsbewegung der Träger der Deformation und somit eng verknüpft mit der Festigkeit eines Werkstoffes. Die im Kapitel Mischkristalle beschriebene punktweise Substitution oder Ergänzung des Grundwerkstoffes durch Fremdatome zieht eine Verzerrung der Basismatrix mit sich. Diese Gitterverzerrung behindert die Bewegung der Versetzung, wodurch es zu einer Verfestigungswirkung kommt. Die Ausprägung der Verfestigung ist abhängig von der Fremdatomkonzentration und ist für sehr kleine Konzentrationen zunächst linear und anschließend proportional zur Wurzel der Konzentration der Fremdatome.

Partikelverfestigung

Zunächst kann die Partikelverfestigung als Erweiterung der Mischkristallverfestigung angesehen werden, da die Partikel selbst ebenso die Grundmatrix des Werkstoffes verzerren und somit der Versetzungsbewegung entgegenstehen. Dieser Umstand wird jedoch dadurch ergänzt, dass die Partikel selbst eine andere Widerstandskraft gegen die Versetzung besitzen und somit abhängig von dem ausgeschiedenen Partikel, Umgehungs- oder Schneidemechanismen zur Überwindung des Partikels notwendig werden können. Hierbei ergibt sich der Partikeldurchmesser als Parameter der Verfestigung.

Kaltverfestigung

Von Kaltverfestigung wird gesprochen, wenn Versetzungen den Werkstoff verfestigen. Bei der vorangegangenen Deformation entstehen Versetzungen, die zu einer Erhöhung der Versetzungsdichte beitragen. Eine erhöhte Konzentration an Versetzungen erhöht die Wechselwirkungshäufigkeit zwischen den Versetzungen wodurch die Versetzungsbewegung immer weiter behindert wird. Somit ist die Versetzungsdichte ein weiterer Faktor der Verfestigung.

Hall-Petch-Effekt

Der Hall-Petch-Effekt beschreibt die Abhängigkeit der Verfestigung eines Werkstoffes durch die Reduktion des mittleren Durchmessers der einzelnen Körner. Wird ein materialspezifischer mittlerer Korndurchmesser erreicht, so führt eine weitere Reduzierung der Korngröße zu einer Entfestigung des Werkstoffes. Für diesen Bereich wird vom inversen Hall-Petch-Effekt gesprochen, welcher bereits in verschiedenen Arbeiten experimentell, sowie in der atomistischen Simulation, untersucht wurde [18, 19]. Dieser Übergang vom Hall-Petch- zum inversen Hall-Petch-Effekt liegt im Bereich von 10 – 50 nm und eignet sich somit sehr gut für die Untersuchung mit Hilfe der Molekulardynamik.

5 Simulationsmethoden

5.1 Einführung

Numerische Simulationen haben bereits eine lange Tradition bei der Unterstützung von realen Experimenten. Gründe für den Wechsel von tatsächlichen Experimenten zu deren Pendant auf dem Computer können verschiedenster Natur sein, z.B. ist häufig die Ökonomie im Vordergrund, da Versuchsaufbauten sehr komplex und oft kostenintensiv sind, gerade bei nicht zerstörungsfreien Experimenten. Darüber hinaus sind praktische Argumente vorhanden, wie z.B. die bessere Reproduzierbarkeit und Steuerbarkeit des numerischen Versuches und der externen Einflüsse in Form von Randbedingungen. Bei der Auswertung der Ergebnisse numerischer Simulationen zeigen sich weitere große Vorteile in der Fülle an Informationen, welche für die Simulation selbst benötigt werden und dadurch als Messdaten zur Verfügung stehen, wie z.B. die exakte Geschwindigkeit und Position jedes einzelnen Atoms bei atomistischen Simulationen. Nichts desto trotz stehen die Simulationen in einem Abhängigkeitsverhältnis zu realen Experimenten, da diese zur Verifizierung und Verbesserung von Simulationsmethoden unverzichtbar sind.

5.2 Einordnung

Da numerische Simulationen bereits seit mehreren Dekaden Anwendung in der Forschung und Entwicklung finden, ist es wenig verwunderlich, dass eine sehr große Anzahl verschiedenster Methoden entwickelt wurden, welche das ganze Spektrum vom Bereich der Elektronen (Dichtefunktionaltheorie) bis zu kosmischen Simulationen bei welchen Differentialgleichungen zur Beschreibung der Himmelskörperbewegung gelöst werden. An dieser Stelle besteht nicht der Anspruch zur Erstellung einer vollständigen Liste oder eine detaillierte Bewertung verschiedener Ansätze. Die in dieser Arbeit verwendete Simulationsmethode ist die molekulardynamische Simulation oder auch Molekulardynamik (MD) genannt. Sie gehört zur Familie der Partikelmethode, wobei die einzelnen Partikel durch verschiedene Atome, Atomgruppen oder Moleküle dargestellt werden können. In der vorliegenden Arbeit werden einzelne Atome als Partikel verwendet. Die Zeit- und Längenskala in welcher sich die klassische Molekulardynamik bewegt ist auf durch die große Anzahl der zu lösenden Gleichungen auf den Bereich von Nanosekunden und Nanometer beschränkt. Daher wird sie häufig zusammen mit z.B. Monte-Carlo-Methoden (MC) unter die Methoden der

Nanosimulation eingestuft, wobei die in MC zugänglichen Zeiten deutlich umfangreicher sind. Skalentechnisch in Zeit und Länge geringer versammeln sich die ab-initio-Methoden, wie z.B. die Dichtefunktionaltheorie. Diese Methoden werden häufig verwendet, um wesentliche Bestandteile der MD zu berechnen, namentlich wären dies geometrische Anordnungen der Partikel, sowie das Herzstück der MD, das Potential welches die Interaktion der Partikel beschreibt. Die ab-initio-Methoden beinhalten weniger Approximationen als Molekulardynamik-Simulationen und sind daher deutlich rechenzeitaufwändiger. Die zu berechnende Systemgröße beinhaltet lediglich wenige Tausend Atome für sehr groß angelegte ab-initio-Simulationen. Skalentechnisch über der MD-Simulation schließen sich Methoden der Meso-, Mikro- und Makrosimulation an. Wichtige Vertreter daraus sind die Versetzungsdynamiksimulationen, Finite-Elemente-Methoden, Phasenfeldmethoden, uvm. Mit ihrer Hilfe werden von der Versetzungsbewegung über Realgefügemodelle bis hin zu Strukturmodellen eine beinahe endlose Bandbreite an Phänomenen berechnet.

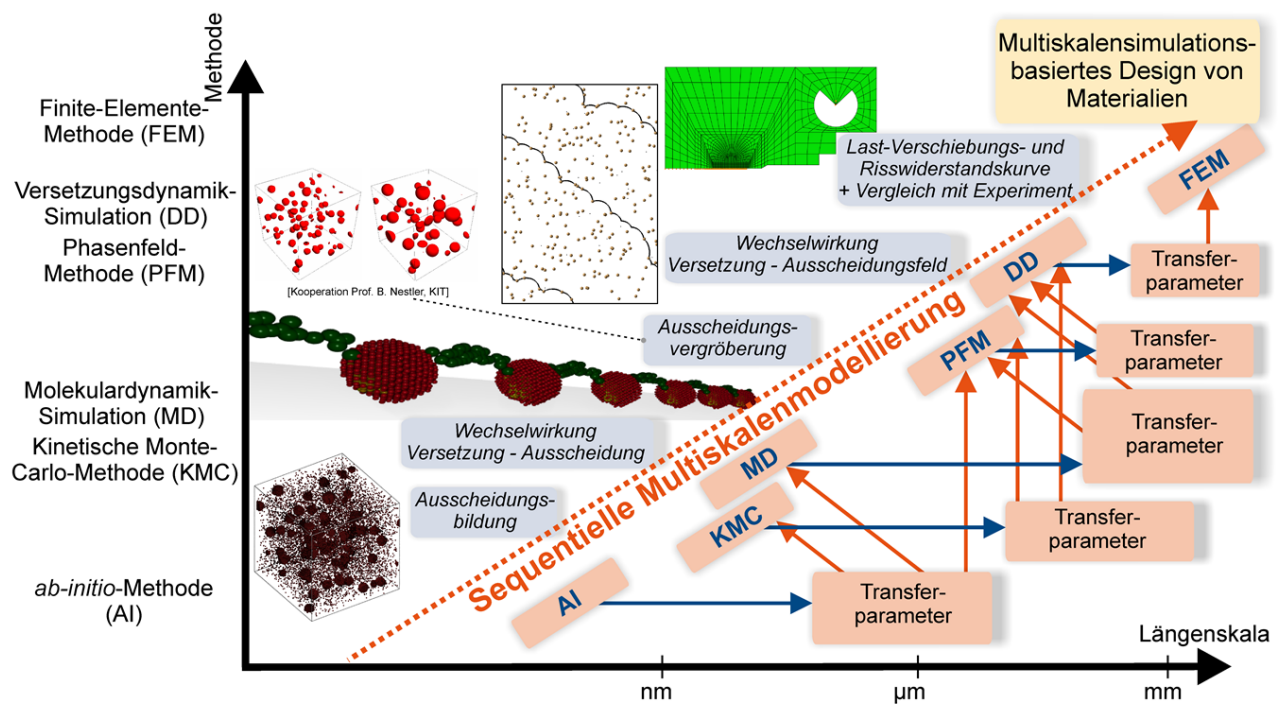


Abbildung 10: Übersicht über verschiedene Simulationsmethoden in verschiedenen Bereichen [20].

5.3 Molekulardynamik

Die Molekulardynamik dient zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Trajektorien einzelner Partikel, im Falle der vorliegenden Arbeit von Atomen, im Kontext von ihrer Umgebung und abhängig von äußeren Einflüssen. Die in dieser Arbeit verwendeten Simulationspakete IMD [21] und LAMMPS [22] sind in ständiger Weiterentwicklung und weit verbreitet, vor allem durch die kostenfreie Verfügbarkeit als open source Software. Das allem zugrunde liegende Prinzip ist das zweite Newtonsche Axiom:

$$\vec{F} = m \vec{a} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} \quad (11)$$

bei welchem \vec{F} die Kraft auf ein Teilchen der Masse m am Ort \vec{r} zur Zeit t angibt. Die momentane Geschwindigkeit des Teilchens wird mit \vec{v} angegeben, die dabei erfahrene Beschleunigung mit \vec{a} . Die auf das Teilchen wirkende Kraft wird aus dem ortsabhängigen Potential V , welches aus der Wechselwirkung des Teilchens mit den umgebenden Teilchen resultiert, gemäß (28) abgeleitet. Auf dieses Potential wird in einem späteren Kapitel weiter eingegangen.

5.3.1 Verlet-Algorithmus

Um die klassischen Bewegungsgleichungen für N Partikel zu lösen, müssten N Differentialgleichungen zweiter Ordnung oder $2N$ Differentialgleichungen erster Ordnung gelöst werden. Da dies für jeden Zeitschritt sehr zeitaufwendig wäre, wird der Verlet-Algorithmus angewandt [23]. Dieser geht auf Loup Verlet zurück, welcher ihn 1967 für Molekulardynamik-Simulationen populär machte. Der Algorithmus ist zum einen sehr einfach zu verstehen und anzuwenden und zum anderen besitzt er trotz seiner Einfachheit eine hohe Genauigkeit. Die Grundidee bildet die Taylorentwicklung der Ortskoordinate $r(t)$ in der Zeit:

$$\vec{r}(t + \delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\delta t^2 + \frac{1}{3!}\ddot{\vec{r}}(t)\delta t^3 + O(\delta t^4), \quad (12)$$

$$\vec{r}(t - \delta t) = \vec{r}(t) - \vec{v}(t)\delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\delta t^2 - \frac{1}{3!}\ddot{\vec{r}}(t)\delta t^3 + O(\delta t^4). \quad (13)$$

Durch Addition der beiden Entwicklungen ergibt sich:

$$\vec{r}(t + \delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \delta t) + \vec{a}(t)\delta t^2 + O(\delta t^4). \quad (14)$$

Auf diese Weise kann die neue Ortskoordinate des Teilchens ohne Kenntnis der Geschwindigkeit bis auf einen Fehler der Ordnung δt^4 bestimmt werden. Es werden ausschließlich die aktuellen Positionen und die von einem Zeitschritt zuvor benötigt, sowie die Beschleunigung welche die Teilchen erfahren. Obwohl die Teilchengeschwindigkeiten für die Berechnung der Ortskurve des Atoms nicht notwendig sind, werden sie dennoch berechnet, da sie zur Bestimmung der kinetischen Energie notwendig sind. Weiterhin lässt sich mit ihnen die Temperatur nach Gl. (16) [22] berechnen, in welcher k_B die Boltzmannkonstante, dim die Dimensionalität der Simulation und N die Anzahl der Atome ist. Sie werden durch Subtraktion der taylorentwickelten Orte (Gleichung (12) und (13)) erhalten:

$$v(t) = \frac{r(t+\delta t) - r(t-\delta t)}{2\delta t} + O(\delta t^2), \quad (15)$$

$$\frac{dim}{2} N k_B T = \sum_{i=1}^N \frac{mv_i^2}{2}. \quad (16)$$

5.3.2 Nosé-Hoover-Thermostat

Als Standardthermostat in dem in dieser Arbeit verwendeten Simulationsprogramm LAMMPS [22] kommt der Nosé-Hoover-Thermostat zum Einsatz. Die Beschreibung des Thermostaten orientiert sich an der Veröffentlichung von P.H. Hünenberger [24]. Die Simulationen finden häufig im kanonischen oder im isotherm-isobaren Ensemble statt. Dies bedeutet, dass die Teilchenzahl N , die Temperatur und das Volumen V bzw. der Druck p des Systems kontrolliert wird. Im Kontrast zum realen Experiment lassen sich diese Parameter vergleichsweise gut regulieren. Zur Steuerung der Temperatur wird hierzu als Kontrollinstrument ein Thermostat eingeführt: Er entspricht einem Wärmebad und ermöglicht die Kontrolle und Einstellung der Temperatur. Durch die regelmäßige Gegenkontrolle mit dem vorgegebenen Sollwert wird die Aufsummierung von Rundungsfehlern ausgeglichen.

Zunächst wird der Thermostat nach Nosé [25] erläutert, bevor später die Ergänzungen von Hoover hinzugefügt werden: Dieser bezieht das Wärmebad fest mit in das System ein. Hierzu wird eine zusätzliche Variable \tilde{s} , mit zugehöriger "Masse" $Q > 0$ sowie Geschwindigkeit $\dot{\tilde{s}}$ eingeführt. Über die Masse Q wird die Kopplung zwischen System und Wärmebad und somit die Temperaturfluktuationen beeinflusst. Die eingeführte Variable \tilde{s} kann als Skalierungsfaktor der Zeit betrachtet werden, genauer wird die Zeit um den Faktor \tilde{s} gedehnt oder gestaucht:

$$d\tilde{t} = \tilde{s} dt. \quad (17)$$

Die Ortskoordinaten bleiben durch die neue Variable unverändert.

$$\tilde{r} = r, \dot{\tilde{r}} = \tilde{s}^{-1} \dot{r}, \dot{\tilde{s}} = \dot{s} \text{ und } \ddot{\tilde{s}} = \tilde{s}^{-1} \ddot{s}. \quad (18)$$

Die Lagrange-Funktion des erweiterten Systems wird wie folgt gewählt:

$$L = \sum_i \frac{m_i}{2} \tilde{s}^2 \dot{\tilde{r}}_i^2 - U(\tilde{r}) + \frac{1}{2} Q \dot{\tilde{s}}^2 - g k_B T_0 \ln \tilde{s}. \quad (19)$$

Die ersten beiden Terme geben die kinetische und die potentielle Energie des tatsächlich modellierten Systems an. Die letzten beiden Terme stehen für die kinetische Energie von \tilde{s} und das Potential. Die Wahl des Potentials erfolgt auf diese Weise, damit ein kanonisches Ensemble (vgl. 5.6.3) erzeugt wird. Im Nosé-Hoover-Formalismus steht das g für die Anzahl an Freiheitsgraden.

Daraus ergeben sich die „Nosé-Bewegungsgleichungen“ zu:

$$\ddot{\tilde{r}}_i = \frac{\tilde{F}_i}{m_i \tilde{s}^2} - \frac{2 \dot{\tilde{s}} \dot{\tilde{r}}_i}{\tilde{s}}, \quad (20)$$

$$\ddot{\tilde{s}} = \frac{1}{Q \tilde{s}} \left(\sum_i m_i \tilde{s}^2 \dot{\tilde{r}}_i^2 - g k_B T_0 \right). \quad (21)$$

Diese Gleichungen bilden ein mikrokanonisches Ensemble (vgl. 5.6.2) für das erweiterte System. Die Energie des simulierten Systems ist jedoch nicht konstant. Über die Fluktuationen von \tilde{s} wird der Wärmetransport zwischen dem System und dem Wärmebad realisiert. Es kann gezeigt

werden, dass die Bewegungsgleichungen ein kanonisches Ensemble für das simulierte System darstellen. Die Nosé-Bewegungsgleichungen sind glatt, deterministisch und umkehrbar in der Zeit. Da die zeitliche Entwicklung der Variablen \tilde{s} durch eine Differentialgleichung zweiter Ordnung beschrieben wird, kommt es zu oszillatorischem Austausch von Wärme in und aus dem System heraus. Dies wiederum hat beinahe periodische Temperaturschwankungen zur Folge. Vor allem die ungleichmäßigen Intervalle des erweiterten Systems machen die Untersuchung auf dynamische Eigenschaften der abgetasteten Trajektorien relativ kompliziert. Abhilfe schafft eine Umformulierung der Bewegungsgleichungen in die Variablen des simulierten Systems, entwickelt 1985 durch William G. Hoover [26]. Diese Umformulierung stellt sich folgendermaßen dar:

$$s = \tilde{s}, \dot{s} = \tilde{s}\dot{\tilde{s}}, \ddot{s} = \tilde{s}^2\ddot{\tilde{s}} + \dot{\tilde{s}}^2, r = \tilde{r}, \dot{r} = \tilde{s}\dot{\tilde{r}}, \ddot{r} = \tilde{s}^2\ddot{\tilde{r}} + \dot{\tilde{s}}\dot{\tilde{r}}^2. \quad (22)$$

Mit der Substitution:

$$\gamma = \frac{\dot{s}}{s}, \quad (23)$$

werden die Langrange'schen Bewegungsgleichungen zu

$$\ddot{r}_i = \frac{F_i}{m_i} - \gamma r_i, \quad (24)$$

$$\dot{\gamma} = \frac{-k_B g}{Q} T(t) \left(\frac{T_0}{T(t)} - 1 \right). \quad (25)$$

Unabhängig von der Formulierung der Bewegungsgleichung muss die fiktive Masse Q mit Bedacht gewählt werden. Für ein zu großes Q , eine sogenannte schwache Kopplung, besteht über das Wärmebad nur ein geringer Einfluss auf die Temperatur. Im Limes $Q \rightarrow \infty$ besteht ein mikrokanonisches Ensemble. Ist Q endlich, ist das System zwar ein kanonisches Ensemble, die Verteilung der Temperatur wird sich allerdings erst nach sehr langen Simulationszeiten einstellen. Wird das Q zu klein gewählt, kommt es zu hochfrequenten Temperaturschwankungen, welche mit dem physikalischen Verhalten des Systems nichts mehr gemeinsam haben. Für eine anschaulichere Wahl der Kopplungsstärke lassen sich die Bewegungsgleichungen auch als

$$\dot{\gamma} = -\frac{1}{\tau_{NH}} \left(\frac{T_0}{T(t)} - 1 \right) \quad (26)$$

mit der effektiven Relaxationszeit

$$\tau_{NH}^2 = \frac{Q}{gk_B T_0} \quad (27)$$

schreiben.

Für die Kontrolle des Drucks besteht ein Äquivalent zum Thermostaten in Form eines Barostaten, welcher den Druck des simulierten Systems reguliert.

5.4 Potential

Elementarer Bestandteil von MD-Simulationen bildet das atomistische Potential. Während bei ab-initio-Verfahren die Art und Position als alleinige Angaben zur Bestimmung der wechselseitigen Kräfte genügen, liegt für die Molekulardynamik diese Information in Form der, häufig tabellierten, Potentiale V vor. In ihnen wird mit Hilfe weniger Parameter, wie zum Beispiel Abstände, Bindungswinkel oder lokaler Elektronendichte hinterlegt, welche Kräfte lokal wirken.

$$F_i = -\nabla_i V(r_1, \dots, r_n). \quad (28)$$

Diese vereinfachte Wechselwirkung zwischen den Atomen ist ausschlaggebend für die Simulation von bis zu Milliarden von Atomen, wohingegen ab-initio-Methoden auf wenige tausend Atome, aufgrund des hohen notwendigen Rechenaufwands, begrenzt sind. Kernpunkt ist, dass die physikalische Exaktheit der Simulationsergebnisse maßgeblich von der Qualität des verwendeten Potentials abhängt.

5.4.1 EAM-Potentiale

Potentiale, welche lediglich auf den Abständen der Atome basieren führen häufig zu Abweichungen bei der Simulation von verschiedenen mechanischen Eigenschaften der untersuchten Materialien, wie z.B. Zugfestigkeit und Schubspannungen, im Vergleich mit realen Experimenten [27]. Dies gilt insbesondere beim Wechsel vom Potential für ein reines Metall zu Legierungen

komplexerer atomistischer Konfigurationen. Daher wurde von Daw und Baskes [28, 29] die Embedded-Atom-Methode (EAM) entwickelt bei der die lokale Elektronendichte mit in die Wechselwirkung mit einbezogen wird:

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{i \neq j}^N \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}). \quad (29)$$

Hierbei ist F die Einbettungsenergie welche von der lokalen Elektronenkonfiguration um das Atom herum abhängt. Die Funktion ϕ gibt das Paarpotenzial zwischen dem Atom i und j vom Typ α oder β an, welchen abstandsabhängigen Einfluss das Atom j auf das Atom i hat. EAM-Potentiale bilden die mechanischen Eigenschaften von Metallen mit einer sehr hohen Genauigkeit ab.

In dieser Arbeit werden verschiedene EAM-Potentiale verwendet. Für die atomaren Wechselwirkungen in der Aluminium-Kupfer-Legierung wurde das Potenzial von Cheng, Ma und Sheng [30] angewandt. Bei Verwendung von Magnesium als Zuschlagelement wurde auf Basis der Wechselwirkung von reinem Aluminium aus [31] und von reinem Magnesium aus [32] das EAM-Potenzial für die Aluminium-Magnesium-Legierung [33] entwickelt. Neben den beschriebenen EAM-Potentialen bestehen Weiterentwicklungen desselben, sie werden als modifizierte EAM (MEAM)-Potentiale bezeichnet. Sie berücksichtigen zum Beispiel Winkelinformationen von Atomanordnungen. Vor allem im Bereich der Molekülbeschreibung existieren noch eine Vielzahl weiterer, häufig hochkomplexer Potentiale, wie zum Beispiel, ReaxFF [34], GROMOS [35], MARTINI [36], etc., die jedoch erheblich höheren Rechenaufwände nach sich ziehen.

5.5 LAMMPS

Das hier zumeist verwendete Simulationsprogramm LAMMPS [22] ist ein sehr umfangreiches Softwarepaket mit einer Vielzahl verschiedener unterstützter Partikel-Methoden. Die ursprüngliche und in dieser Arbeit verwendete Methode ist die klassische Molekulardynamik. Der folgende Abschnitt erhebt nicht den Anspruch einer vollständigen Erläuterung oder Einführung in die Nutzung der Software, hierzu wird auf die von den Entwicklern geführte Webseite [37] verwiesen, welche detaillierte Beschreibungen aller Funktionen, so wie Tutorials zur Erlernung des Umgangs mit der Software bereitstellt. Hier sollen wenige grundlegende Bestandteile des Softwarepakets

und Arbeitsweisen zur Ausführung genannt werden, um einen Überblick über den Ablauf innerhalb des Programms zu skizzieren.

5.5.1 Das Skript

Die Simulationssoftware wird über eine Textdatei, das sogenannte LAMMPS-Skript ausgeführt, welches zeilenweise eingelesen und abgearbeitet wird. In jeder Zeile werden durch die Verwendung von bestimmten Kommandos entsprechende Funktionen von LAMMPS ausgeführt. Nicht alle Kommandos sind unabhängig voneinander, sondern können sich wechselseitig bedingen oder ausschließen, andere sind notwendig und wieder andere sind optional. Einige Kommandos haben Standardwerte welche verwendet werden so lange sie nicht anders definiert werden. Die grundsätzliche Struktur des Skriptes unterteilt sich in die vier Bausteine Initialisierung, Definition, Parameter und Ausführen welche im Folgenden kurz dargestellt werden.

Initialisierung

Das Skript beginnt mit der Initialisierung, in welcher entscheidende Elemente, wie die Wahl der Einheiten in welchen die ein- und ausgegebenen Werte angegeben werden, die Dimension des simulierten Systems, die Periodizität des Systems und weitere Parameter festgelegt werden. Nur teilweise können diese Parameter im weiteren Verlauf des Skriptes, wie im Falle der Periodizität, noch geändert werden.

Definition

Im Baustein der Definition werden die Atome inklusive ihrer zugehörigen Positionen an die Software weitergegeben, beziehungsweise festgelegt. Hierfür stehen drei Möglichkeiten zur Verfügung: Es besteht die Möglichkeit, die Informationen über das Einlesen von Dateien zu erhalten. Diese Dateien können aus vorangegangenen Simulationen erhalten oder anderweitig erstellt werden. Alternativ ist es möglich, im Skript anhand einer vorhandenen großen Auswahl an bereitgestellten Gittertypen, Atome innerhalb definierter Regionen zu erzeugen. Die dritte Möglichkeit besteht darin, bestehende Konfigurationen zu replizieren. Über die Möglichkeiten der Platzierung der Atome und die tatsächliche Umsetzung in dieser Arbeit wird im Kapitel Strukturzeugung ausführlicher berichtet.

Parameter und Einstellungen

Nachdem die Positionen der Atome definiert wurden, können diverse Parameter festgelegt werden, welche den Verlauf der Simulation beeinflussen: Zunächst wird die Art der Wechselwirkung zwischen den Atomen festgelegt. Hierzu gibt es die Möglichkeit auf ein oben beschriebenes Potential zurückzugreifen, welches in tabellierter oder analytischer Form vorliegen kann. Die Variante des Integrators wird über so genannte „fixes“ ausgewählt, somit wird bestimmt, in welchem Ensemble gerechnet wird und welches die Erhaltungsgrößen sind. Einzelne Kommandos können auf zuvor bestimmte Gruppen von Atomen beschränkt werden, so dass während eines Simulationsschrittes, d.h. Kraftauswertung gefolgt von Integration der Trajektorien, unterschiedliche Randbedingungen auferlegt sein können. Ebenfalls werden in diesem Abschnitt des Skriptes verschiedene Berechnungen, welche später während der Simulation ausgeführt werden, deklariert. Ein wichtiger einzustellender Parameter ist die Form und Häufigkeit der Ausgabe der gewünschten Größen. Wenn die Absicht besteht, dass die Simulation an einem Zwischenzeitschritt zu einem späteren Zeitpunkt erneut gestartet werden können soll, so besteht die Möglichkeit, eine Datei erstellen zu lassen, welche alle für einen Neustart notwendigen Informationen enthält.

Ausführen

Die bisherigen Kommandos sind zur Simulation notwendig, jedoch werden erst mit dem Befehl zur Ausführung des Programmes die Berechnungen gestartet, die zuvor spezifiziert wurden. Es wird vorgegeben, wie viele Rechenschritte bei der Molekulardynamik-Simulation ausgeführt werden sollen. Es besteht darüber hinaus die Möglichkeit, eine Energieminimierung auszuführen, bei welcher die Atome in ihr lokales Energieminimum überführt werden. Die Bausteine drei und vier werden zumeist mehrfach nacheinander ausgeführt, um zum Beispiel vor einer dynamischen Simulation sicher zu stellen, dass sich das System zum Ausgangszeitpunkt im thermodynamischen Gleichgewicht befindet.

5.6 Häufig verwendete Funktionen in LAMMPS

Im Folgenden sollen bestehende Funktionen von LAMMPS, welche häufig zum Einsatz kommen, sehr kurz beschrieben werden. Die Aufzählung der hier genannten Funktionen, sowie deren

Beschreibung entbehrt dem Anspruch auf Vollständigkeit. Sie dient insbesondere der Verbesserung der Nachvollziehbarkeit der für diese Arbeit durchgeführten Simulationen. Für die detaillierte Beschreibung der Funktionen wird auf die LAMMPS Homepage [37] verwiesen.

5.6.1 *Minimize*

Die Funktion *Minimize* dient zur Minimierung der potentiellen Energie des Systems, bzw. von einem Teil des Systems. Die Minimierung erfolgt durch iterative Variation der Atomkoordinaten. Auf diese Weise soll die Atomkonfiguration in ein lokales Minimum überführt werden. Es stehen verschiedene Algorithmen zur Variation der Atomkoordinaten zur Verfügung. Am häufigsten wird als schnelles Standardverfahren die konjugierte Gradienten-Methode nach Polak-Ribiere [38] verwendet. Bei diesem Verfahren wird in jedem Iterationsschritt mittels des Kraftgradienten und den Informationen aus vorherigen Simulationsschritten die Richtung bestimmt, in welche die neue Variation der Atomposition ausgeführt wird. Hierbei ist die neue Richtung senkrecht zur vorherigen. Zur Beendigung des Minimierungsschrittes sind vier Parameter anzugeben: Energiedifferenz, Kraftdifferenz, Iterationsschritte und Kraft- bzw. Energieauswertungen. Sobald die errechnete Differenz geringer ist als die als Toleranz vorgegebene oder wenn die maximale Anzahl an Iterations- bzw. Auswertungsschritten erreicht ist, gilt die Minimierung als abgeschlossen.

5.6.2 *Mikrokanonisches Ensemble*

Mit der Funktion *NVE* werden die Atome entsprechend einem mikrokanonisches Ensemble bewegt. Hierbei wird die Gesamtenergie E des Systems konstant gehalten. Eine Volumenänderung V sowie eine Änderung der Teilchenzahl N ist nicht möglich.

5.6.3 *Kanonisches Ensemble*

Bei der Simulation des kanonischen Ensembles wird im Gegensatz zum Mikrokanonischen Ensemble die Gesamtenergie nicht erhalten. Das modellierte System steht über den zuvor beschriebenen Nosé-Hoover-Thermostat mit einem Wärmebad in Verbindung, wodurch das simulierte System Energie aufnehmen oder abgeben kann, um die vorgegebene Temperatur zu halten. In der Simulation besteht durch die Temperaturdefinition T des Wärmebades die Möglichkeit, die Systemtemperatur einzustellen. Die Teilchenzahl N sowie das Simulationsvolumen V werden auch bei

diesem Ensemble konstant gehalten. Entsprechend ihrer Erhaltungsgrößen heißt diese Funktion NVT.

5.6.4 *Kanonisch-harmonisches Ensemble*

Das kanonisch-harmonische Ensemble, auch isotherm-isobares Ensemble genannt, zeichnet sich durch die Erhaltung des Druckes p aus. Diese wird vergleichbar der Temperaturregulierung durch den Kontakt mit einem Reservoir umgesetzt und bietet daher die Möglichkeit, als Eingabeparameter definiert zu werden. Die Temperaturregulierung T wird weiterhin durch den Kontakt zu einem Wärmebad realisiert. Das Volumen ist in diesem Ensemble keine Erhaltungsgröße mehr. Die Teilchenzahl N ist weiterhin über die Simulation konstant. Gemäß der Nomenklatur über die Erhaltungsgrößen wird diese Funktion mit NpT bezeichnet.

6 *Strukturzeugung*

Im vorherigen Kapitel der Simulationsmethoden wurde die zeitliche Entwicklung der Atompositionen beschrieben. Dieses Kapitel behandelt die Erzeugung der initialen Konfigurationen. Im Abschnitt der Kristallstrukturen wurden die Grundlagen hierfür eingeführt. Das Softwarepaket LAMMPS [22] verfügt über eine Vielzahl an Möglichkeiten zur geometrischen Definition des Simulationsraumes, sowie die Platzierung der Atome innerhalb dieser vorgegebenen Bereiche. Durch geeignete Befehle im Eingabeprotokoll werden somit die notwendigen Anfangsstrukturen modelliert. Einfache Modifikationen, beispielsweise das Entfernen von Halbebenen zur Erzeugung von Stufenversetzungen, können direkt im Eingabeskript implementiert werden. Jedoch ist es ebenfalls möglich, Atomkonfigurationen aus externen Dateien einzulesen. Die Größe des simulierten Systems variiert hierbei je nach Zielsetzung der jeweiligen Simulation. So werden für die Analyse der Korngrenzen kleine Systeme mit wenigen Tausend Atomen verwendet. Wobei die Systemgröße bei den Zugversuchen an Polykristallen bis auf mehrere hundert Millionen Atome anwächst. Diese enorme Anzahl an Atomen ist notwendig, um eine konkrete Anzahl an Körnern mit einem gewünschten Korndurchmesser darzustellen.

6.1 *NanoSCULPT*

Bei den zuvor genannten Polykristallen stößt die direkte Erzeugung der Struktur innerhalb von LAMMPS an seine Grenzen, beziehungsweise wäre die Modellierung des Systems sehr komplex. Daher wurde zusammen mit E. Bitzek und A. Prakash von der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg eine Methode entwickelt, um realistische Atomkonfigurationen zu erzeugen. Die von E. Bitzek konzipierte Idee wurde von A. Prakash und mir auf Basis bestehender Programmelementen zu der als Open Source verfügbaren Software umgesetzt. Die Veröffentlichung [39] in welcher die Funktionsweise im Detail beschrieben wird, wurde von A. Prakash federführend verfasst, wobei alle Autoren zur endgültigen Form des Manuskriptes beitrugen. Im Folgenden soll eine kompakte Einführung in die Arbeitsweise von NanoSCULPT gegeben werden.

6.1.1 *Eingabeparameter*

Die Wahl für die einzulesende Geometriedatei fiel auf das Wavefront .obj Format [40]. Darin liegen die geometrischen Informationen in Form von Flächen und deren Eckpunkten vor (vergl.

Abbildung 11a). Die Eckpunkte werden zeilenweise notiert, beginnend mit „v“ für vertice (engl. Ecke) gefolgt von den drei Raumkoordinaten x, y und z. Zeilen, die eine Fläche angeben, werden mit „f“ (engl. face) begonnen und anschließend durch ganze Zahlen in mathematisch positiver Reihenfolge die Punkte genannt, welche zusammen den Umlauf um die Fläche bilden. Die Zuordnung der Punkte geschieht nach der Reihenfolge ihrer Definition.

Als weitere Eingabe werden Details zur kristallographischen Beschaffenheit der die Geometrie füllenden Struktur benötigt. Hierfür stehen eine Vielzahl an Kristallstrukturtypen, wie zum Beispiel fcc, bcc, hcp etc. zur Verfügung. Darüber hinaus werden die Orientierung des Kristalls sowie die Gitterparameter und die Masse der verwendeten Atome angegeben.

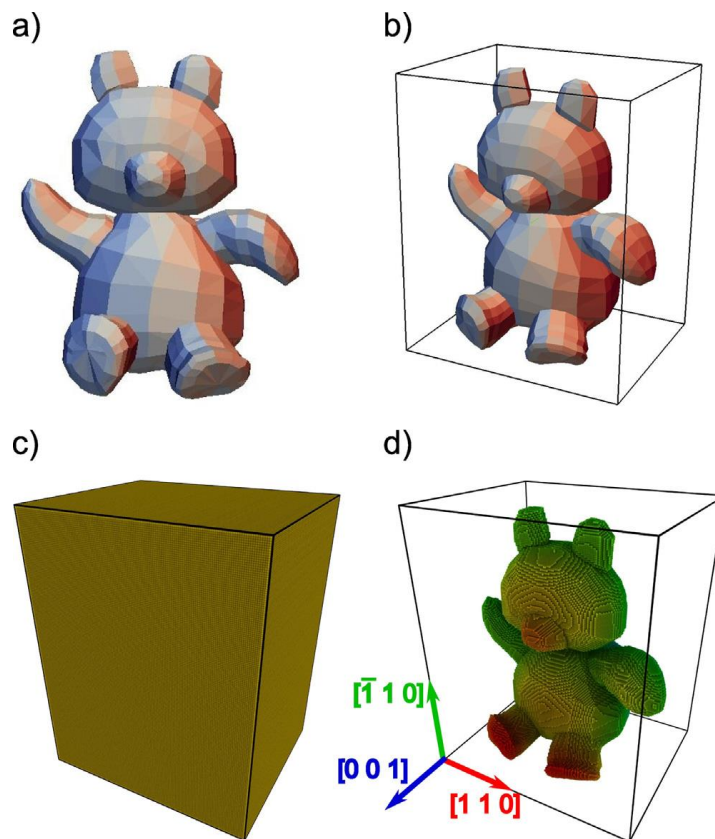


Abbildung 11: Darstellung eines Teddybären zur Veranschaulichung der Funktionsweise von NanoSCULPT: In a) ist die vorgegebene und mit Atomen zu befüllende Struktur abgebildet. b) zeigt den einhüllenden Quader, welcher die Struktur vollständig enthält. Der aus Atomen bestehenden Teddybär in d) wird aus dem komplett mit Atomen bestückten Hilfsquader in c) erhalten.

6.1.2 Algorithmus

Die eingelesene Geometrie wird durch einen sie vollständig beinhaltenden Quader nach oben approximiert (vergl. Abbildung 11b). Dieser Hilfsquader wird vollständig mit Atomen in der gewünschten Orientierung und Struktur gefüllt (vergl. Abbildung 11c). Im rechenzeitaufwändigsten Schritt wird für jedes Atom entschieden, ob dieses sich innerhalb oder außerhalb der Geometrie befindet. Dies wird mit Hilfe eines Raycasting-Verfahrens bewerkstelligt, wobei die Implementierung eine abgewandelte Version des von Joseph O'Rourke [41] vorgestellten Algorithmus ist: Bei dieser Methode wird von einem ausgewählten Atom ein Strahl in zufällige Richtung entsandt. Die Länge des Strahls beträgt mindestens die Länge der Raumdiagonalen des Hilfsquaders um zu gewährleisten, dass unabhängig von der Richtung der Endpunkt des Strahles außerhalb der Geometrie liegt. Anschließend wird detektiert, wie häufig der Strahl eine begrenzende Fläche der Geometrie durchstößt. Bei einer ungeraden Anzahl an Durchstoßpunkten liegt das Atom, von welchem der Strahl ausgeht, innerhalb des Objektes, ansonsten außerhalb. Am Ende dieses Auswahl-Algorithmus steht wie im Beispielobjekt aus Abbildung 11 der mit Atomen befüllte Teddybär der im Teilbild d zu sehen ist.

6.1.3 Nachbearbeitung

Abhängig von der gewählten Struktur kann eine Nachbearbeitung erforderlich sein. Dies ist der Fall, wenn das geometrische Objekt eine hohe Komplexität im Sinne von Verwinkelungen und sich sehr nahekommenden Flächen aufweist, oder wenn eine, wie in dieser Arbeit sehr häufig auftretende, Kombination aus verschiedenen einzelnen Korngeometrien verwendet wird, um z. B. einen Polykristall nachzubilden.

6.1.4 Polykristalle

Die Verwendung von Polykristallen stellt ein Kernthema dieser Arbeit dar und bildet eine Triebfeder bei der Entwicklung von NanoSCULPT. Die einzelnen Körner, welche mit Hilfe von NanoSCULPT mit Atomen befüllt werden, entstehen durch eine Voronoi-Zerlegung der Simulationsbox. Hierbei werden in der vorgegebenen quaderförmigen Simulationsbox zufällig Kornzentren festgelegt, um welche mit QHull [42] die entsprechenden Voronoi-Volumen definiert werden. Aufgrund der Methodik ist die Größenverteilung der Körner logarithmisch normalverteilt. Als Ver-

gleichsparameter für Polykristalle wird häufig der Korndurchmesser herangezogen. Zur Bestimmung des mittleren Korndurchmessers wird der Radius einer Kugel bestimmt, deren Volumen mit dem mittleren Kornvolumen übereinstimmt.

6.2 Weitere Methoden

Neben der komplexen Erzeugung der Polykristalle, welche im vorherigen Kapitel beschrieben wurde, gibt es noch zahlreiche Einzelsituationen für welche Skripte erstellt wurden, um angepasste Atomkonfigurationen zu erreichen. Unter anderem für den Fall der Implementierung scheibchenförmiger Guinier-Preston (GP)-Zonen, welche unter anderem als Hindernis der Versetzungsbewegung bei den Scherversuchen zum Einsatz kamen, um die verfestigende Wirkung der Überalterung von Aluminiumlegierungen darzustellen. Um den Einfluss der Ausscheidungen ebenfalls im polykristallinen System zu analysieren wurde in NanoSCULPT eine Routine implementiert, welche GP-Zonen automatisiert in die einzelnen Körner integriert. Sie ermöglicht für die Orientierung des Normalenvektors des Scheibchens eine zufällige Wahl aus der Klasse der Richtungen $\langle 100 \rangle$ und einem Radius, welcher aus einem vorgegebenen Band zwischen einem minimalen und maximalen Radius liegt. Ein Überlapp der GP-Zonen ist in diesem Algorithmus nicht erlaubt.

7 Auswertung und Analyse

Durch die Simulation erhaltene Daten müssen entsprechend ausgewertet werden. Da die Ausgabedateien meist im ASCII-Format vorliegen, eignen sich textbasierte Kommandozeilenskripte gut zur Sortierung und Auswertung der darin gespeicherten Werte. Diese Skripte bestehen aus einigen wenigen Textzeilen und sind meist individuell auf die vorliegende Situation angepasst. Zur Darstellung von funktionellen Zusammenhängen, wie die Zugspannung in Abhängigkeit der Streckung, wird die freie Software Gnuplot verwendet. Neben der Erstellung von zwei- und dreidimensionalen Graphen zur Veranschaulichung der Simulationsergebnisse bietet die Software zahlreiche weitere Unterstützungen für den Anwender, welche jedoch nicht weiter ausgeführt werden, da sie in der vorliegenden Arbeit keine Anwendung finden.

7.1 OVITO

Eine herausragende Stellung bei der Visualisierung und Auswertung der Simulationsergebnisse nimmt das kostenlose Open Source Programm OVITO [43] ein. Ausgangspunkt des Programms ist die Visualisierung von wissenschaftlichen Daten mittels graphischer Benutzeroberfläche. Die angebotenen Auswertefunktionen gehen jedoch weit über die Visualisierung der aus der Simulation erhaltenen Daten hinaus. Das Programm bietet zahlreiche Möglichkeiten, um erhaltene wissenschaftliche Daten auszuwerten. Hiervon sollen in den folgenden Abschnitten häufig verwendete Routinen, im Programm selbst „modifier“ genannt, kurz angesprochen werden. Die Zielsetzung ist es, hier nicht die vollständige Funktionsweise der zugrundeliegenden Algorithmen zu beschreiben, sondern mehr eine prägnante Zusammenfassung zu geben und die Einsetzbarkeit bei der Auswertung und Analyse durch Simulation erhaltener Daten aufzuzeigen. Für detailliertere Ausführungen wird auf die zum Programm zugehörige Internetseite verwiesen, auf welcher ein ausführliches Handbuch zur Verwendung der einzelnen Funktionen bereitsteht, sowie auf den jeweiligen wissenschaftlichen Hintergrund verwiesen wird.

7.1.1 Koordinationszahlanalyse

Die Koordinationszahlanalyse bestimmt die Anzahl an nächsten Nachbarn innerhalb eines einstellbaren Radius. Für kubisch flächenzentrierte Strukturen sind dies 12 Nachbaratome, wenn der

Abschneideradius zwischen den zweiten und dritten Nachbarn gewählt wird, für kubisch raumzentrierte Strukturen jedoch 14. Auf diese Weise können Gitterfehler, wie Fehlstellen oder Korngrenzen in einem perfekten Einkristall detektiert werden. Die Routine gibt selbst eine Paarverteilungsfunktion an, aus welcher zusätzlich die Häufigkeit von Objektabständen bestimmt werden kann.

7.1.2 CNA

Die CNA steht für „Common Neighbor Analysis“, was direkt übersetzt gemeinsame Nachbarschaftsauswertung bedeutet. Die Methode wurde 1987 publiziert [44] und dient der Identifizierung der lokalen Struktur eines Atoms anhand seiner direkten Umgebung. Diese Auswertung ist rechenzeitaufwendiger als die zuvor geschilderte Koordinationszahlanalyse, welche jedoch nicht zwischen der kubisch flächenzentrierten und der hexagonal dichtest gepackten Struktur unterscheiden kann, da für beide Strukturen bei demselben Abschneideradius die Anzahl an erwarteten Nachbaratomen 12 beträgt. Die in OVITO implementierte Version bietet die Auswahl verschiedener Varianten des Abschneideradius an. Es besteht die Möglichkeit, einen festen Zahlenwert anzugeben oder einen adaptiven Radius [45] zu wählen. Weiterhin besteht die Möglichkeit, eine speziell für Molekülkonfigurationen, welche Bindungen enthalten, entwickelte Bindungslängen basierte Auswertung durchzuführen.

7.1.3 Versetzungsanalyse

Die Versetzungsanalyse basiert auf einem zuvor unabhängigen Auswertungsprogramm mit dem Namen DXA (Dislocation Extraction Algorithm) [46], welches von den Entwicklern von OVITO entwickelt wurde. Die aktuell implementierte Version verfolgt einen allgemeineren Ansatz welcher in [47] beschrieben ist. Die Berechnungsroutine detektiert Versetzungen anhand von Burgersvektor-Umläufen. Es werden verschiedene Arten von Versetzungen unterschieden und jedem Versetzungssegment wird ein Burgersvektor zugeschrieben. Neben den zahlreichen Varianten an Versetzungen gibt das Programm auch Defektoberflächen an. Diese Defektoberflächen bestehen zum Beispiel um Ausscheidungen oder an Korngrenzen. Diese Routine ermöglicht eine effektive Auswertung von atomistischen Systemen, bei welchen es zu plastischen Verformungen ausgelöst durch Versetzungen kommt. Durch die Angabe der Gesamtlänge der Versetzung ist eine Bestimmung von weiteren Parametern, wie zum Beispiel der Versetzungsdichte im System, möglich. Die

in dieser Berechnungsroutine des DXA-Algorithmus ausgeführten Berechnungen sind sehr zahlreich und komplex, wodurch eine gewisse Hardwareanforderung besteht (circa 1 Gigabyte Arbeitsspeicher pro 1 Million Atome) sowie ein hoher Bedarf an Rechenleistung.

8 Einfluss der Deformationsrate und Probenkörpergröße

Die Molekulardynamik-Simulation ist in der Materialwissenschaft eine weit verbreitete und akzeptierte Methode. Dennoch wird die Authentizität der erhaltenen Ergebnisse regelmäßig hinterfragt. Dieses Kapitel entspricht meiner Veröffentlichung [48], für welche die zugrundeliegende Konzeption von S. Schmauder und mir entwickelt wurde, ich die Literaturzusammenfassung übernahm und ebenfalls die vorgestellten Simulationen mit fachlicher und methodischer Unterstützung von W. Verestek durchführte. Es soll einen Überblick über die rasante Weiterentwicklung der letzten Jahrzehnte geben und zeitgleich für verbleibende Limitierungen sensibilisieren. Die Entwicklung gliedert sich in drei Teile. Die Schaffung leistungsfähigerer Hardware, die Optimierung des Softwarecodes durch effizientere Routinen und Compiler sowie die Anpassung und Entwicklung der Modellierung selbst. Zusammen ermöglicht die Weiterentwicklung dieser drei Komponenten eine beachtliche Erweiterung der simulierbaren Zeit- und Längenskalen, welche durch Molekulardynamik-Simulationen zugänglich sind. Trotz dieser Entwicklung bleibt das simulierbare Volumen und die erreichbare Zeit stark eingeschränkt, wodurch eine Anwendbarkeit der Simulationsergebnisse zeitweilig infrage gestellt wird.

Im Folgenden wird zunächst ein Überblick über die drei Teile der Entwicklungen vorgestellt. Anschließend werden ausgewählte Konvergenzstudien zum Thema der Dehnratenabhängigkeit bei Zugversuchen aus der Literatur vorgestellt und durch eigene Untersuchungen ergänzt. Diesen Deformationsgeschwindigkeitsuntersuchungen angeschlossen, wird der Einfluss der Systemgröße bei Zugversuchen betrachtet. Hierbei wird eine experimentelle Analyse präsentiert und mit Hilfe von Molekulardynamik simulativ reproduziert. Eine Betrachtung der Scherversuche bildet den Abschluss dieses Kapitels.

8.1 Entwicklung der Hardware

Im Jahre 1936 entwickelte Alan Turing die als Vorfahre der modernen Computer geltende Turing-Maschine. Bereits in den 1960er Jahren wurden die ersten Supercomputer entwickelt. Ebenfalls in den 60ern, genauer gesagt 1965, sagte Gordon Moore voraus, dass die Entwicklung der Komponenten integrierter Schaltkreise sich jedes Jahr verdoppeln würde [49]. Dies wurde als Mooresches Gesetz bezeichnet. Zehn Jahre später, im Jahre 1975, wurde die erwartete Entwick-

lungsrates halbiert, so dass eine Verdoppelung alle zwei Jahre zu erwarten sei. Die weitere Verbesserung der Transistoren selbst führte dazu, dass die Zeitspanne pro Verdoppelung um den Wert von 1,5 Jahre schwankt. Die lediglich auf historischen Beobachtungen und Extrapolation basierte Vorhersage ist heute noch erstaunlich genau. In Abbildung 12 ist die Entwicklung der maximalen Rechenleistung in Gleitkommaoperationen pro Sekunde seit 1936 dargestellt. Im November 2018 arbeitete der weltweit schnellste Supercomputer im Oak Ridge National Laboratory in den Vereinigten Staaten von Amerika. Er erreicht 143,5 PETAFLIPS (143,5 Billionen Gleitkommaoperationen pro Sekunde)

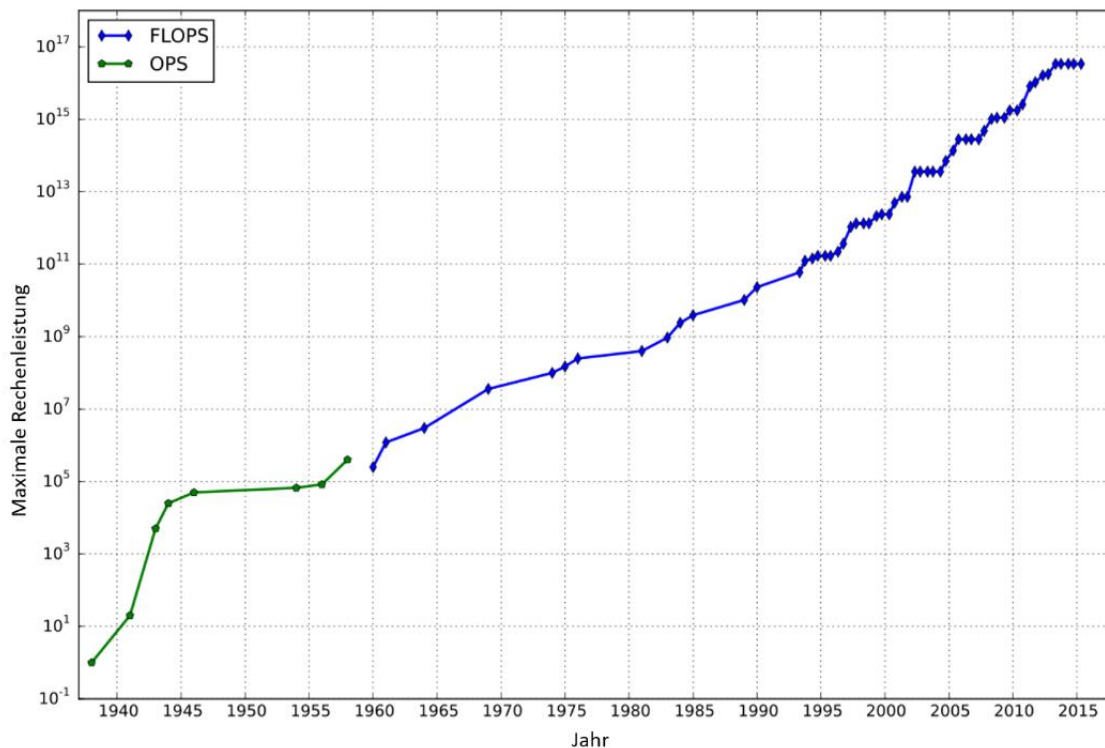


Abbildung 12: Entwicklung der maximalen Rechenleistung in (FL)OPS ((floating point) operations per second; (Gleitkomma)operationen pro Sekunde) über die Jahre. [50]

8.2 Softwareoptimierung

Zusätzlich zur rasanten Entwicklung der Hardware wurde gehöriger Aufwand betrieben, um die auf den Supercomputer laufende Software weiter zu optimieren. Eine vergleichbar imposante Geschwindigkeitssteigerung wie bei der Hardware zu erreichen ist sehr schwierig, zum einen aufgrund der enormen Steigerung der Berechnungsgeschwindigkeiten, zum anderen aufgrund der

Anforderung an die Software. Denn die Entwicklung der Software hat neben der gesteigerten Effizienz ebenfalls eine erhöhte Flexibilität zum Ziel. Die Notwendigkeit der Flexibilität ist teilweise bedingt durch die durch die Leistungssteigerung neu erschlossenen Anwendungsgebiete der Molekulardynamik-Simulationen. Die Entwickler von LAMMPS [22] bewerten die Geschwindigkeit des Softwarecodes auf der LAMMPS-Homepage [37] als relativ konstant. Die aktuelle Version, welche in C++ geschrieben ist, variiert selten um mehr als 5-10 % im Vergleich mit den Vorgängerversionen, geschrieben in Fortran F90 oder F77. „Manchmal ist die C++-Version ein wenig schneller; manchmal ein wenig langsamer.“ Für den Fall der Verwendung von EAM-Potentialen [28, 29] wurde durch die geänderte Implementierung eine Beschleunigung um den Faktor 2-4 im Vergleich zu den Vorversionen erreicht.

Seit der Verwendung von Supercomputern entfällt ein Großteil der erzielten Beschleunigung auf die Optimierung der Parallelisierung. Mit zunehmender Clustergröße, die für die numerischen Berechnungen herangezogen werden, nimmt die Datenmenge, welche zwischen den Prozessoren kommuniziert werden muss, zu. Die Optimierung der Parallelisierung ist stark von dem verwendeten Rechencluster abhängig. Eine Vielzahl an Benchmark-Tests sind auf der LAMMPS-Homepage verfügbar.

8.3 Entwicklung der Simulationsmodelle

Die zuvor beschriebene Entwicklung in den Bereichen der Soft- und vor allem der Hardware genügen alleine um eine Vielzahl an Anwendungen, durch die schlichte Ausweitung der simulierbaren Größen in Länge und Zeit, zu erschließen. Obgleich der enormen Entwicklung verbleiben die simulierbaren Größen dennoch eingeschränkt. Sehr große Simulationen, welche Milliarden an Atomen beinhalten, können Längen im Bereich von Mikrometern abdecken; ein Aluminiumwürfel der Kantenlänge $1\ \mu\text{m}$ enthält circa 60 Milliarden Atome. Ebenfalls ist es möglich, Simulationen durchzuführen, welche den Bereich von $1\ \mu\text{s}$ simulierter Zeit erreichen. Jedoch bedarf es, bei einem für Metallsysteme üblichen Zeitschritt von $1\ \text{fs}$, eine Milliarde Simulationsschritte. Simultan in der Größe und der Zeit den μ -Bereich zu erreichen würde 47 248 Prozessorjahre auf dem Cray XT5 vereinnahmen, basierend auf dem Benchmark der LAMMPS-Homepage [37] von $1,49\ 10^{-6}$ Sekunden/Atom/Zeitschritt.

Daher bedarf es einer zusätzlichen Weiterentwicklung zur Beschleunigung von Simulationen. A. Voter präsentiert in seinem Übersichtsartikel [10] verschiedene Optionen um die simulierbare Zeit auszudehnen. Im Folgenden soll eine kurze Vorstellung von zwei der vorgeschlagenen Methoden gemacht werden. Für eine vollständige Beschreibung wird auf die Veröffentlichung von Voter, oder die Primärliteratur verwiesen. Die vorgestellten Methoden sind jeweils für Spezialfälle konzipiert.

8.3.1 Die Parallel Replica Methode

Als erstes Beispiel wird die Parallel Replica-Methode (Abbildung 13) präsentiert. Diese Methode eignet sich für Simulationen, in welchen es zu seltenen Ereignissen kommt. Die Methode besteht aus vier Schritten. Von dem zu simulierenden System werden N identische Kopien erstellt (Schritt A). Diese Kopien durchlaufen im Anschluss eine Dephasierung (Schritt B), bei welchem die makroskopischen Charakteristika des Gesamtsystems erhalten bleibt, jedoch im Detail unterscheidbar werden. Dadurch werden die Systeme in Schritt C unabhängig voneinander entwickelt und dadurch der Phasenraum um den Faktor der Replikation N schneller exploriert. Der Schritt C endet damit, dass in einer Replik das erwartete seltene Ereignis stattfindet. Zu diesem Moment werden alle zeitlichen Entwicklungen abgebrochen. Die gesamte simulierte Zeit entspricht N mal der Zeit bis zum seltenen Event. Im Schritt D wird der Endzustand der Simulation bei der das seltene Ereignis auftrat zum Anfangszustand des darauffolgenden Zyklus, welcher erneut repliziert wird.

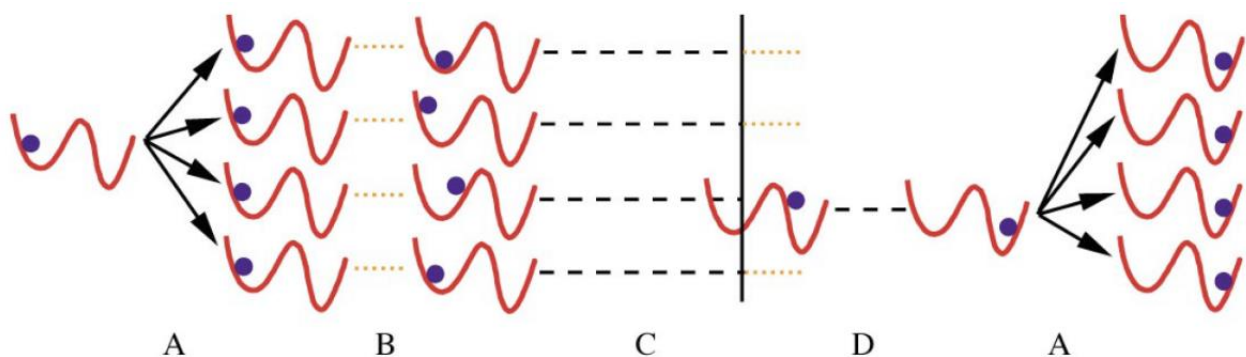


Abbildung 13: Schematische Darstellung der Parallel Replica-Methode. Die Methode lässt sich in vier Arbeitsschritte untergliedern. Im Schritt A wird das System durch eine beliebige Anzahl an identischen Kopien vervielfacht. In B findet eine Dephasierung statt, damit die Systeme gleichartig aber nicht identisch sind. Diese gleichartigen Systeme werden nun in C unabhängig voneinander zeitlich entwickelt. Die zeitliche Integration endet, sobald in einem der Systeme das seltene Event stattfindet. In D wird der Endzustand des aktuellen Zyklus zum Anfangszustand des folgenden. Die simulierte Zeit entspricht der aufsummierten berechneten Zeiten im Schritt C. [10]

8.3.2 Hyperdynamik

Die Grundüberlegung hinter der Hyperdynamik besteht darin, den Übergang von unterschiedlichen Zuständen durch die Verringerung der notwendigen Aktivierungsenergie zu beschleunigen. Diese Verringerung entsteht durch die Addition eines künstlichen Potentials $\Delta V(r)$ zum realen Potential $V(r)$, welches die Wechselwirkung zwischen den simulierten Atomen beschreibt. Durch die Ergänzung durch ein künstliches Potential wird die Energiebarriere des Übergangs von beispielsweise Zustand C zu A in Abbildung 14 reduziert, wodurch die Übergangsrate k_{CA} für die Überführung von C zu A, welche proportional zur Energiebarriere zwischen C und A ist.

$$k_{CA} \sim \exp[V(r)/k_B T]. \quad (30)$$

Die Beschleunigung der Simulation durch die Hyperdynamik wird mit Hilfe des „boost factor“,

$$\text{boost}(\text{hyperdynamics}) = \frac{t_{\text{hyper}}}{t_{\text{MD}}} = \langle \exp[\Delta V(r)/k_B T] \rangle_b \quad (31)$$

dividiert durch die zusätzlich notwendige Rechenzeit aufgrund des ergänzenden Potentials. Die eckigen Klammern $\langle \rangle_b$ zeigen die Mittelung über die Trajektorie an. Als Randbedingung für das künstliche Potential besteht die Vorgabe, dass es am Maximum des Übergangs den Wert 0 annimmt. Diese Randbedingung ist notwendig um zu gewährleisten, dass die Trajektorie erhalten bleibt. Dass keine korrelierten Ereignisse stattfinden, ist eine Annahme im Hyperdynamik-Konzept.

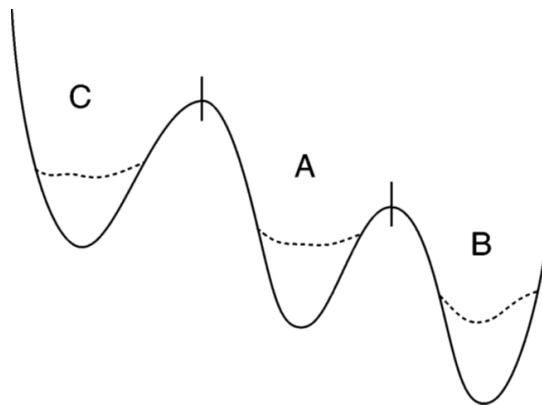


Abbildung 14: Schematische Darstellung der Hyperdynamik-Methode. Das Wechselwirkungspotential wird um ein künstliches Potential ergänzt. Die Summe beider Potentiale ist durch die gepunktete Linie dargestellt. [10]

Die Hyperdynamik-Methode wurde verifiziert, indem die konventionelle Molekulardynamik-Simulation des Ausheilungsvorganges einer Silizium-Beschichtung [51] nachsimuliert wurde. Die Tiefe des Tersoff-Potentials [52] wurde hierbei halbiert, die Simulation wurde hierdurch um einen Faktor von circa 200 beschleunigt. In [53] wurde gezeigt, dass die Hyperdynamik-Methode beim Einsatz in Simulationen von Risswachstum den Pfad des Risses nicht wesentlich beeinflusst.

8.4 Dehnratenkonvergenz

In den meisten verfügbaren Untersuchungen besteht eine ausgeprägte Lücke zwischen den angewandten Dehnraten bei Experimenten und Molekulardynamik-Simulationen. Häufig resultieren daraus deutlich höhere Spannungswerte bei den Molekulardynamik-Simulationen. Jedoch wurde der Einfluss von verschiedenen Dehnraten in beiden Bereichen, experimentell und numerisch, untersucht. In den folgenden zwei Unterkapiteln sollen die Ergebnisse dieser Untersuchungen vorgestellt werden und darüber hinaus ein Beispiel präsentiert werden, bei welchem ein Überlapp beider Welten darstellbar ist.

8.4.1 Experimentelle Untersuchungen zum Einfluss der Dehnrates

Im Jahr 1991 wurde von Higashi et al. [54] eine Studie für fünf verschiedene Aluminiumlegierungen bei unterschiedlichen Dehnraten im Bereich von $0,001 \text{ s}^{-1}$ bis 4000 s^{-1} vorgenommen. Die Abbildung 3 aus [54] ist in Abbildung 15 dargestellt. Es zeigt wie die maximale Fließspannung der jeweiligen Aluminiumlegierung von der angelegten Dehnrates abhängt. Die geringen Dehnrates wurden mit einer Zugprüfmaschine der Firma Instron, die mittleren Rates durch hydraulischen Zugprüfmaschinen und die dynamischen Zugversuche mit Hilfe eines Split-Hopkinson-Druckstabs dargestellt. Für die Legierungen mit geringer Fremdatomkonzentrationen, die 1050- (Der Massenanteil der Legierungskomponenten beträgt für Eisen 0,27 % und für Silizium 0,10 %) und die 3003-Legierung (0,15 % Cu, 1,2 % Mn, 0,61 % Fe und 0,27 % Si), ist eine Beeinflussung durch die Dehnrates über einige Dekaden nicht zu beobachten. Erst bei den Versuchen mit dem Split-Hopkinson-Druckstab kommt es zu einem Anstieg der maximalen Fließspannung. Für die höher legierten Aluminiumversuchsträger führt eine Zunahme der Dehnrates zunächst sogar zu einer Reduktion der gemessenen Spannungswerte. Der Anstieg des Wertes der maximalen Fließspannung bei Verwendung des Split-Hopkinson-Druckstabs ist bei den Legierungen mit erhöhtem Anteil an Fremdatomen ebenfalls zu beobachten.

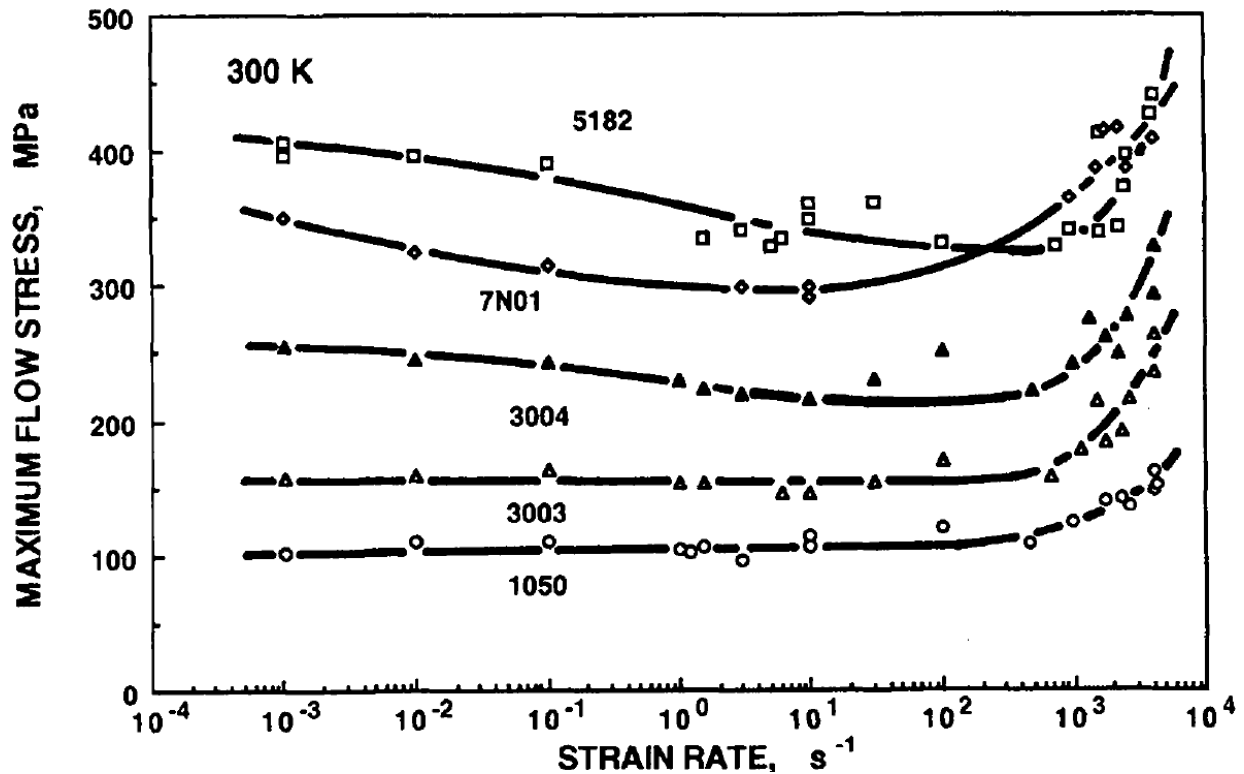


Abbildung 15: Die Beziehung zwischen der maximalen Fließspannung und der Dehnrates für fünf unterschiedliche Aluminiumlegierungen. [54]

In einer neueren Arbeit von Peng et al. [55] aus dem Jahr 2017 wurde ebenfalls ein großes Spektrum an Dehnrates auf den Aluminiumwerkstoff 6082-T6 angewendet. Die Zugversuche wurden in variierenden Dehnrates von quasi-statisch bis hochdynamisch über das Spektrum von 0,001 s⁻¹ bis 3400 s⁻¹ ausgeführt. Für die dynamischen Zugversuche wurde ebenfalls wie in [54] ein Split-Hopkinson-Druckstab verwendet. Die erhaltenen Spannungsverläufe sind in Abbildung 16 wiedergegeben. Ein untereinander generell sehr ähnliches Verhalten unter Belastung ist unabhängig von der Belastungsrates zu beobachten. Im elastischen Bereich ist zu beobachten, dass die Steigung der Spannungs-Dehnungskurven und somit der E-Modul für die hohen Dehnrates geringer ist, als für die niedrigeren Dehnrates. Der Übergang vom elastischen zum plastischen Materialverhalten findet ebenfalls bei höheren Dehnrates erst bei höheren Dehnungen statt. Die Spannung bei welcher der Übergang stattfindet und während dem plastischen Verhalten, ist nahezu identisch für die unterschiedlichen Dehnrates. Lediglich die Fluktuation für die dynamischen Zugversuche nimmt zu.

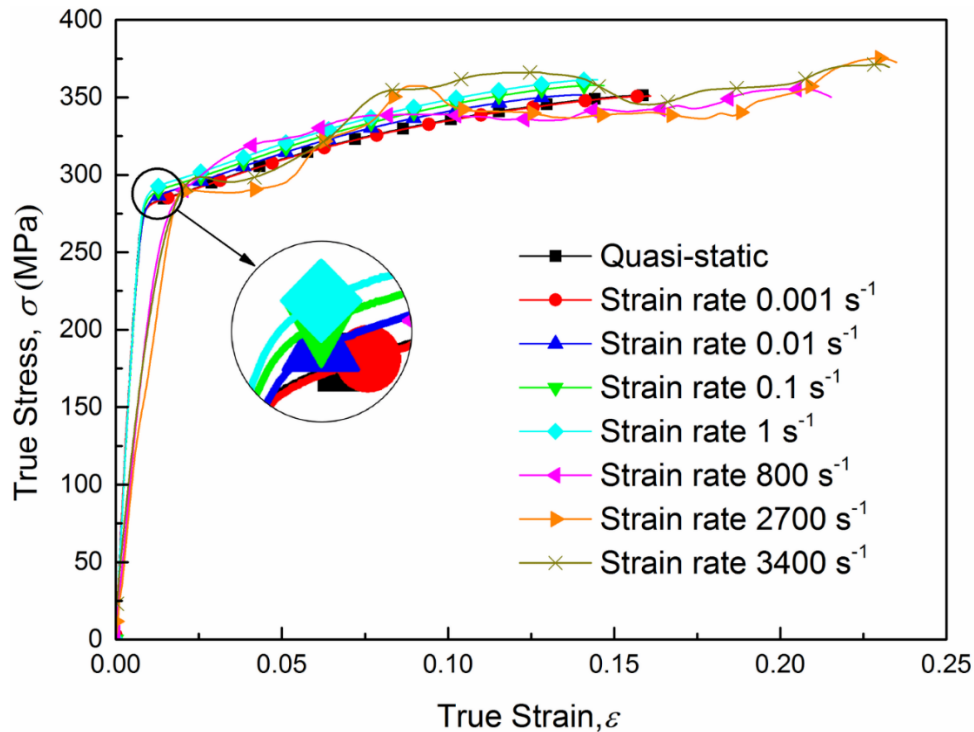


Abbildung 16: Aus Zugversuchen mit verschiedenen Dehnraten erhaltenen Spannungs-Dehnungskurven für die 6082-T6 Aluminiumlegierung. [55]

Ein Vergleich von Abbildung 15 und Abbildung 16 liefert ein identisches Verhalten für geringe Dehnraten, jedoch ein unterschiedliches Verhalten bei den hohen Dehnraten. Obgleich in beiden Fällen die hochdynamischen Zugversuche mittels des Split-Hopkinson-Druckstabs durchgeführt wurden, konnte der Anstieg der Maximalspannung, welcher 1991 [54] für hohe Dehnraten beobachtet wurde, in der aktuellen Veröffentlichung von 2017 [55] nicht bestätigt werden. Dies könnte eine Folge der Optimierung des experimentellen Aufbaus sein, jedoch ist ebenfalls eine starke Abhängigkeit der verwendeten Legierung wahrscheinlich.

Eine alternative Methode zur Anwendung von extrem hohen Deformationsraten bietet die Stoßwellenbelastung, wobei hierbei die Deformation in Form von Kompression vorliegt. Die Asymmetrie der Fließspannung bei Zug- und Druckbelastung wurde in [56] untersucht. Es wurde ermittelt, dass die Druckbelastung für die sehr feinkörnige Aluminiumlegierung AA1050 um 20 % höher ist als bei Zugbelastung. Mit zunehmender mittlerer Korngröße verschwindet die Asymmetrie. Kanel et al. veröffentlichten [57] eine große Reihe an Stoßwellenexperimenten mit verschiedenen Testkörpern aus Aluminium und Aluminiumlegierungen. Dabei wurden zwei verschiedene Arten

von Schockwellenerzeugern verwendet. Zum einen wurde ein Aufprall eines Projektils mit einer Geschwindigkeit von $600\text{-}700\text{ ms}^{-1}$ auf einen Probekörper der Dicke $300\text{-}400\text{ }\mu\text{m}$ bewerkstelligt, wodurch Kompressionsraten von $3\text{-}6 \times 10^5\text{ s}^{-1}$ erzielt werden. Zum anderen wurde der gepulste hochenergetische Protonenstrahl KALIF [58] auf Probekörper einer Dicke von $50\text{-}100\text{ }\mu\text{m}$ angewendet, um Kompressionsraten von $1,5\text{-}3 \times 10^6\text{ s}^{-1}$ umzusetzen. Die Abbildung 17 entnommen aus [57] zeigt verschiedene Ergebnisse von Versuchen mit hohen Dehnraten in einem Schaubild zusammengefasst. Der erste Eindruck einer stark zunehmenden Bruchfestigkeit mit zunehmender Dehnrates bestätigt sich bei Unterscheidung der verschiedenen Messreihen lediglich für das einkristalline Aluminium und die Aluminiumfolien. Diese wurden bei Dehnraten höher als $1 \times 10^6\text{ s}^{-1}$ durchgeführt. Die AlMg6-Platte verzeichnet ebenfalls den starken Anstieg der Bruchfestigkeit mit Zunahme der Dehnrates lediglich beim Messpunkt mit der höchsten Kompressionsrate von mehr als $1 \times 10^6\text{ s}^{-1}$. Für geringere Kompressionsraten fällt der Anstieg der Bruchfestigkeit eher moderat aus. Die Aluminiumlegierung AD1, mit 99,3 Gewichtsprozent Aluminium, in Stäbchenform zum Beispiel besitzt die Bruchfestigkeit von $1,06\text{ GPa}$ bei $1,1 \times 10^4\text{ s}^{-1}$ und $1,38\text{ GPa}$ für $8,8 \times 10^5\text{ s}^{-1}$. Dadurch ergibt sich ein Anstieg der Bruchfestigkeit von circa 30 % über das Spektrum von zwei Dekaden der Deformationsrate. Dies verdeutlicht die Wichtigkeit der Materialkomposition sowie die geometrischen Eigenschaften der Probekörper.

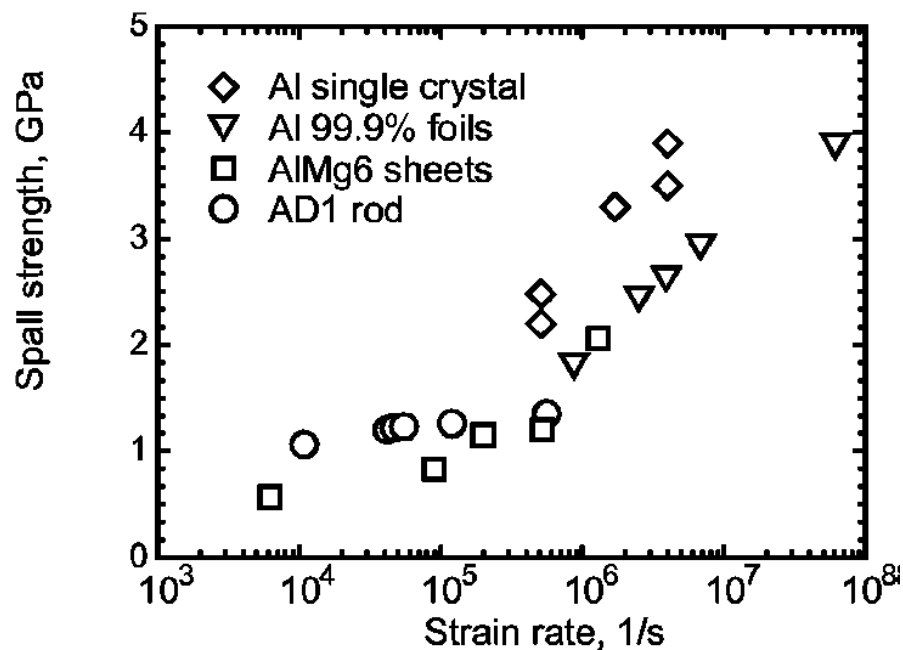


Abbildung 17: Bruchfestigkeit bei Raumtemperatur als Funktion der Kompressionsrate für verschiedene Geometrien von Probekörpern aus Aluminium- und Aluminiumlegierung. [57]

8.4.2 Numerische Untersuchungen zum Einfluss der Dehnrates

Der vorangegangene Abschnitt zeigte die Weiterentwicklung der Experimente in Sachen erreichbare Dehnrates. Dennoch besteht eine Lücke zwischen dem Intervall experimentell darstellbarer und den in Simulationen verwendeten Dehnrates. Koh und Lee veröffentlichten 2006 [59] eine numerische Untersuchung von kubisch flächenzentrierten Nanodrähten unterschiedlicher Größe und unter verschiedenen Dehnrates. Die für die Nanodrähte verwendeten Metalle sind Gold und Platin, für welche je drei Probegrößen untersucht wurden. Es wurden Durchmesser von 2, 4 und 6 nm modelliert und die Länge des Drahtes jeweils doppelt so groß gewählt, wodurch das Simulationsmodell aus 890, 6660 und 24000 Metallatomen besteht. Mit $4,0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, $4,0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ und $4,0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ wurden drei verschiedene Dehnrates angewendet. Die Ergebnisse der Zugsimulation sind in Abbildung 18 dargestellt. Ein sehr ähnliches Verhalten der unterschiedlichen Spannungs-Dehnungskurven ist im plastischen Bereich für alle 18 Simulationen zu beobachten. Die Höhe der Spannung, insbesondere jener des Hauptmaximums, unterscheidet sich jedoch bei

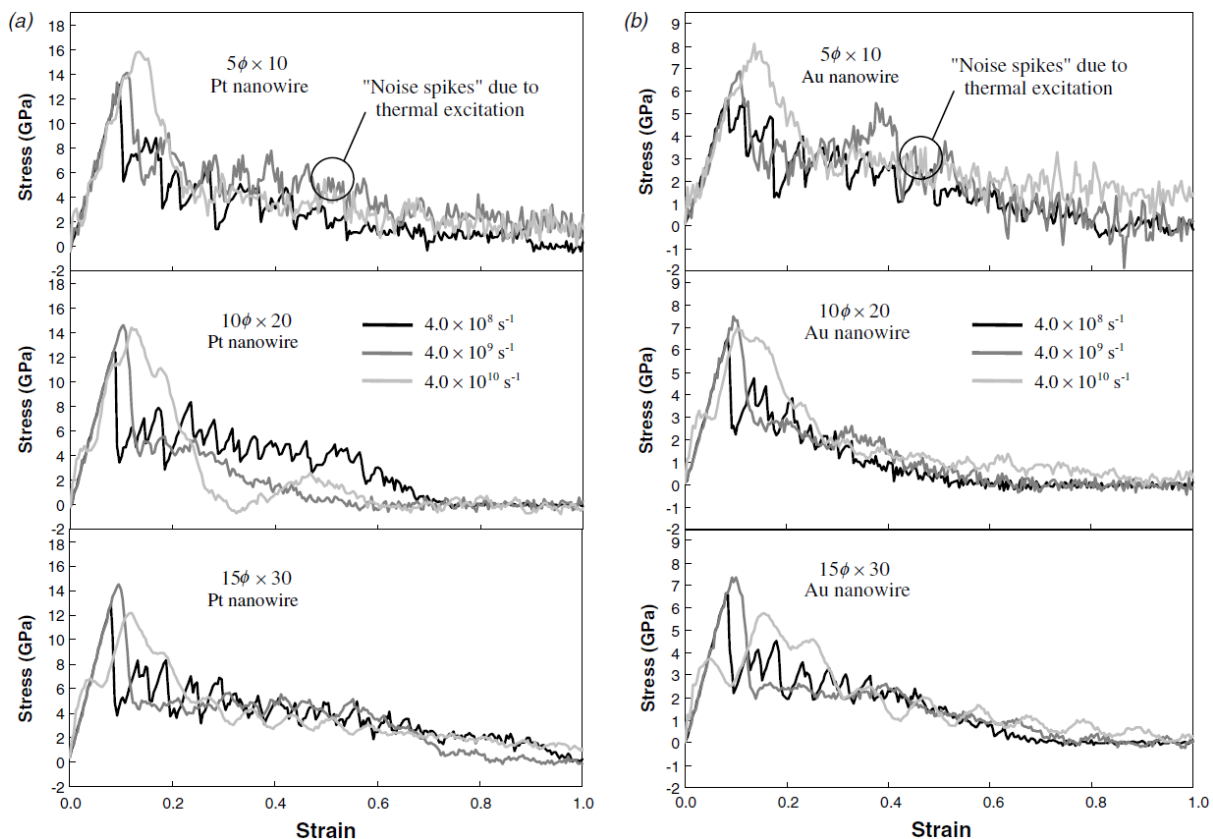


Abbildung 18: Spannungs-Dehnungs-Verläufe für 18 verschiedene Nanodrähte aus a) Gold und b) Platin. Jeweils für drei unterschiedliche Abmessungen und Dehnrates. [59]

den verschiedenen Dehnraten. Ebenfalls variiert die Dehnung beim ersten Hauptmaximum. In den meisten Fällen ist der Wert des Maximums und die Dehnung beim Maximum für die höchste Dehnrates am höchsten. Bei der höchsten Dehnrates sind ebenfalls Oszillationen über die ganze Spannungs-Dehnungskurve zu beobachten. Dies deutet auf eine zu hohe Deformationsrate hin, da das System diese Verformung nicht homogen aufnehmen kann. Die Oszillationen mit scharfen Kanten, welche alle Kurven gemein haben, ist der Emission von Versetzungen zuzuordnen. Die Fluktuationen in den Peaks werden als „noise spikes“ also thermisches Rauschen identifiziert.

Zur Verifikation der Beobachtungen aus [59] wurden eigene Zugversuche simuliert. Als Probenkörper wurde ein Aluminium-Polykristall, welcher mit nanoSCULPT [39] generiert wurde und aus zwölf Körner besteht verwendet. Bei einer Größe von $20 \times 20 \times 40 \text{ nm}^3$ besteht der Polykristall aus 960 000 Atomen. Das angewandte Deformationsratenintervall reicht von $5,0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ bis $5,0 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ und wurde mit der Simulationssoftware IMD [21] numerisch aufgebracht. Die Simulationen wurden für 0 K ausgeführt, der Zeitschritt der Molekulardynamik-Simulation wurde auf 2 fs festgelegt und es wurden periodische Randbedingungen aufgebracht. Als Wechselwirkungspotential wird das EAM-Potential von Chen [30] verwendet. In Abbildung 19 ist der Verlauf der Spannungs-Dehnungskurven der acht Simulationen dargestellt, wobei die Legende die Deformation pro Simulationsschritt angibt.

Die Oszillation der Spannungs-Dehnungskurve, welche in [59] für die höchste Dehnrates von $4,0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ beobachtet wurde, wird bei den zwei höchsten Deformationsraten, in Abbildung 19 rot ($5,0 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$) und grün ($5,0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$) abgebildet, bestätigt. Die dadurch erzielten Maxima sind im Vergleich mit den anderen dargestellten Dehnrates deutlich höher. Für Dehnrates von $5,0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ und weniger wird ein Maximum bei weniger als 10 % Dehnung erreicht, welches nach einem Abfall in ein konstantes Spannungsniveau im plastischen Bereich übergeht. Die Höhe des Maximums reduziert sich mit abnehmender Dehnrates. Für $5,0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ wird das Maximum bei 2,5 GPa erreicht, und reduziert sich über 2,1 GPa bei $2,5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ und 1,61 GPa bei $2,5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ bis hin zu 1,58 GPa bei $5,0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$. Die Spannung am Maximum reduziert sich ebenfalls.

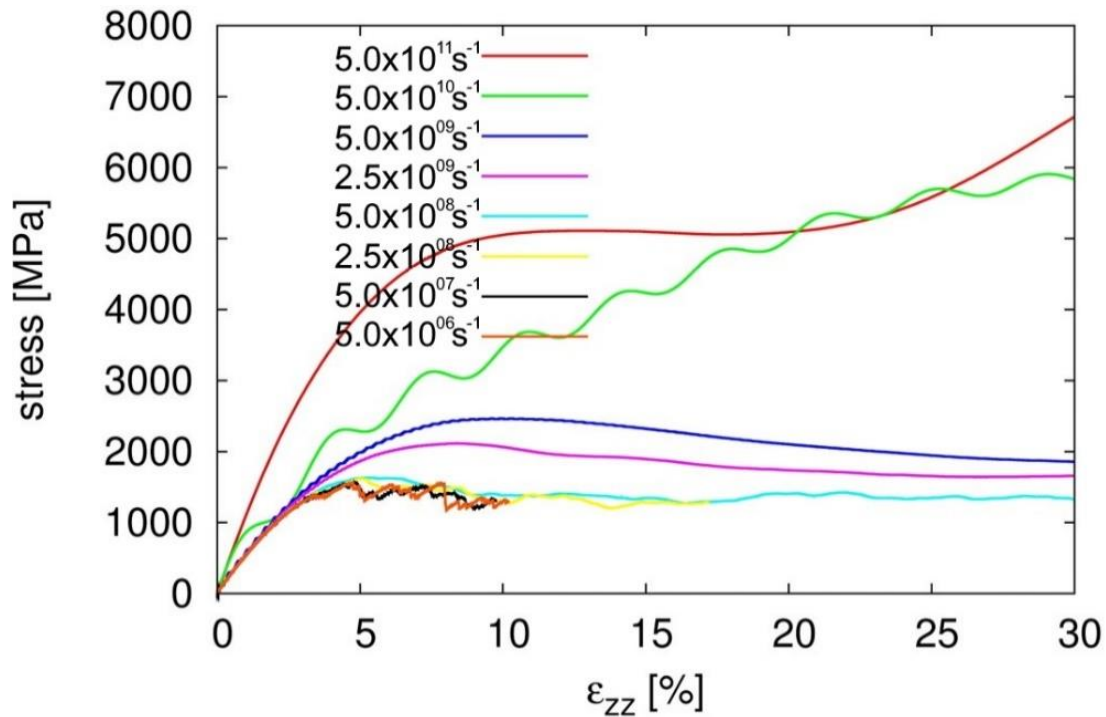


Abbildung 19: Spannungs-Dehnungs-Kurven für acht verschiedene Dehnraten. Die Legende gibt die Deformation pro Simulationsschritt an.

Zur besseren Vergleichbarkeit sind die drei geringsten Dehnraten aus Abbildung 19 in Abbildung 20 noch einmal detaillierter dargestellt. Es zeigt sich, dass der erreichte maximale Spannungswert für $2,5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ (grün) und $5,0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ (blau) annähernd identisch sind, jedoch die um den Faktor 50 langsamere blaue Spannungs-Dehnungskurve in ihrer gezackten Kurve mehr Details offenbart. Die einzelnen Zacken können Versetzungsbildungen und -emissionen zugeordnet werden. Der Unterschied der Maxima beträgt lediglich 30 MPa und somit weniger als 2 %, wodurch sich die Frage nach der Rechtfertigung eines 50-fach höheren Rechenaufwands stellt.

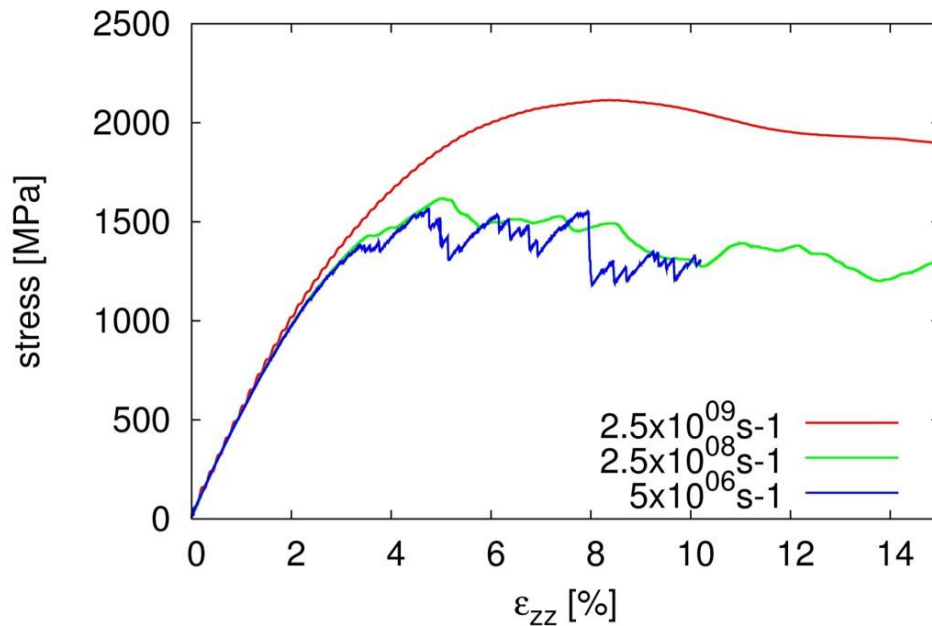


Abbildung 20: Detailansicht der drei geringsten Dehnraten aus Abbildung 19. Die Legende gibt die unterschiedlichen Dehnraten an.

Für eine weitere Langzeitstudie wurde ein anderer Aluminium-Nanopolykristall mit einer Kantenlänge von 22 nm herangezogen. Diese 642 000 Aluminiumatome sind auf 20 Körner aufgeteilt. Bei einer simulierten Temperatur von 300 K wurden vier verschiedene Dehnraten zwischen $1,0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ und $1,0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, appliziert. Die im molekulardynamischen Kontext sehr geringe Dehnrates von $1,0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$, welche in Abbildung 21 in Rot dargestellt ist, überschätzt das Ergebnis aus Abbildung 16 um circa den Faktor 4. Es wurden 837 300 000 Simulationsschritte ausgeführt, wodurch bei einem Zeitschritt von einer Femtosekunde eine Gesamtzeit von $0,837 \mu\text{s}$ simuliert wurde. Die sehr hohe Zahl an Simulationsschritten führt zu einem enormen Verbrauch an Computerleistung. Die mit der Simulationssoftware LAMMPS [22] ausgeführten Berechnungen unter der Verwendung des EAM-Potential für Aluminium-Magnesiumlegierungen von Liu [33] wurden auf dem HLRS, dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart, durchgeführt. Die notwendige Rechenzeit betrug 150 Tage auf 144 Prozessoren, was einer Rechenzeit von 59,18 Jahre auf einem einzelnen Prozessor entspricht. Dieser Rechenaufwand ist schwer anwendbar auf einen breiten Einsatz. Die Maxima der in Abbildung 21 dargestellten Spannungs-Dehnungs-Diagramme sind 1686 MPa bei einer Dehnrates von $1,0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ (pink), 1455 MPa bei $1,0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ (blau), 1346 MPa bei $1,0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ (grün) und 1202 MPa bei einer Dehnrates von $1,0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ (rot). Somit wurde ein Einfluss der

Dehnrates, in Form der Erhöhung der Maximalspannung bei höherer Dehnrates, durch diese Untersuchung bestätigt.

Für den Vergleich der Simulationsergebnisse zur Bruchfestigkeit mit dem Experiment werden die Ergebnisse der Untersuchung zur Zerreifestigkeit der AD1-Aluminiumlegierung aus [60], welche in Abbildung 17 dargestellt sind, herangezogen. Sie sind im passenden Dehnratespektrum vorhanden, welche einen bergang von den simulierten Dehnrates $1,0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ - $1,0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ zu den experimentellen Dehnrates von $8,8 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ - $1,1 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$ ermglichen. Fr die AD1-Aluminiumlegierung liegen die Materialeigenschaften fr die Festigkeit mit einer Zugfestigkeit von 60 MPa und einer Streckgrenze von 25 MPa [61] ber den Werten fr reines Aluminium (Zugfestigkeit 45 MPa und Streckgrenze 17 MPa [62]). ber die Mikrostruktur des im Experiment 50 – 100 μm dicken Probenkrpers liegen keine Details vor, jedoch kann davon ausgegangen werden, dass eine grer kristalline Struktur mit einer deutlich hheren Versetzungsdichte vorliegt als beim versetzungsfreien nanokristallinen Simulationsmodell. Selbst bei Kenntnis der fr den Probenkrper reprsentativen Mikrostrukturparameter lieen sich diese jedoch fr mikrostrukturelle Detailuntersuchungen nur bedingt im Modell nachbilden.

Das Maximum der experimentellen Werte, welches der grnen Kurve mit 1346 MPa bei $1,0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ entspricht, betrgt 1380 MPa bei $8,8 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ und 1260 MPa bei $1,2 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ entsprechen der roten Kurve, mit einem Wert von 1202 MPa bei $1,0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$. Somit betragen die Werte aus der Simulation erhalten 34 MPa bzw. 58 MPa weniger als im entsprechenden Experiment.

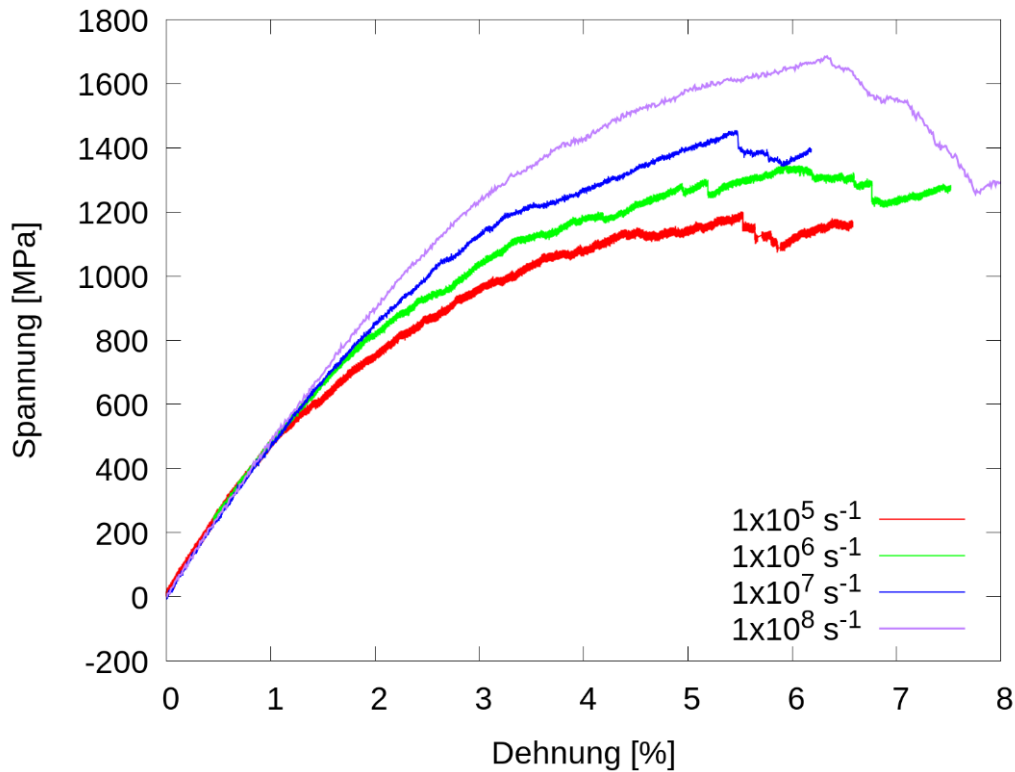


Abbildung 21: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für vier Dehnraten. Der modellierte Aluminiumwürfel einer Kantenlänge von 22 nm besteht aus zwanzig Körnern und 642 000 Atomen.

8.4.3 Vergleich der Untersuchungen zu experimentellen und numerischen Dehnraten

Die beiden vorangegangenen Unterkapitel haben den Aufwand dargestellt, welcher sowohl in Experimenten, als auch in Simulationen betrieben wird, um den Einfluss der Dehnraten zu untersuchen. In den Experimenten, welche in Abbildung 15 und Abbildung 16 dargestellt sind, zeigen sich nahezu konstante Werte über einen mit sechs Dekaden sehr ausgedehnten Bereich der Deformationsraten. Ebenso wurden in numerischen Simulationen, wie in Abbildung 19 dargestellt, nahezu konstante Maximalwerte der Spannung über mehr als zwei Dekaden mit Hilfe der Molekulardynamik ermittelt. Andererseits zeigt Abbildung 21 ebenfalls, dass ein Erreichen dieser Konvergenz selbst bei $1,0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ noch nicht notwendigerweise abgeschlossen sein muss und sensibilisiert daher zur individuellen Prüfung der Rahmenbedingungen unter welchen das jeweilige Experiment, numerisch oder real, durchgeführt wird. Die beeinflussenden Faktoren sind zahlreich, zum Beispiel spielt die Temperatur, die Systemgröße und bei numerischen Simulationen insbeson-

dere die Wahl des Wechselwirkungspotentials. In Abbildung 22 sind die Messreihen aus Abbildung 17 für die Aluminiumlegierung AD1 [60] gemeinsam mit den numerischen Ergebnissen für den Aluminiumwürfel aus Abbildung 21 aufgetragen. Dies zeigt einen relativ kontinuierlichen Übergang vom experimentell zugänglichen Spektrum zum mit Simulationen erreichbaren Bereich. Bemerkenswert ist hierbei ebenfalls, dass im Bereich der selben Dehnraten die errechneten Spannungswerte um circa 60 MPa unterhalb der experimentell gemessenen Spannungswerte bei äquivalenten Dehnraten liegen. Jedoch unterscheidet sich aufgrund der oben beschriebenen Vorgehensweise der Modellierung des Effektes des Dehnrateneinflusses, die Mikrostruktur im Experiment und in der Simulation signifikant. Ein direkter Vergleich wie in Abb. 22 ist daher nicht immer sinnvoll und notwendigerweise ausreichend. Er zeigt jedoch das Potential hinsichtlich Tendenz und Größenordnung solcher langsamen Molekulardynamik-Simulationen (10^5 s^{-1}) zur Zusammenführung mit experimentelle Untersuchungen.

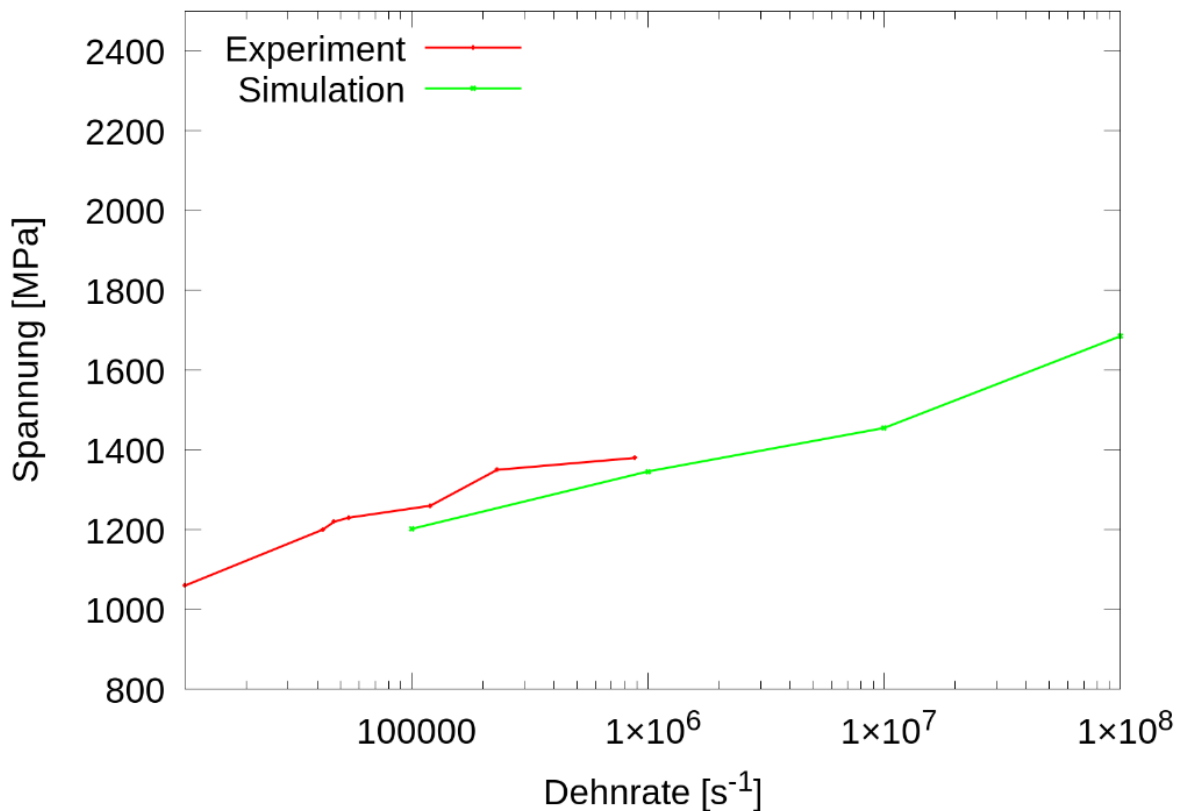


Abbildung 22: Werte der Maximalspannung in Abhängigkeit der Dehnraten. Die experimentellen Daten sind rot dargestellt und die simulierten Werte in grün.

8.5 Untersuchung des Einflusses von Scherraten

Für Schersimulationen sind in Abbildung 23 fünf verschiedene Scherraten graphisch aufgetragen. Es wird ein Aluminium-Einkristall der Größe $14,8 \times 21,0 \times 45,6 \text{ nm}^3$ verwendet, welcher so orientiert ist, dass die favorisierte Gleitebene mit dem Normalenvektor (111) parallel zu der Ober- und Unterseite der Simulationsbox liegt (analog zu Abbildung 50 im Kapitel der Scherversuche mit GP-Zonen). Die Simulationsbox enthält 861300 meist Aluminiumatome, lediglich 880 Kupferatome bilden eine GP-I-Zone mit Radius 4,7 nm, welche auf einer (100)-Ebene der Aluminiummatrix liegt. Die zwei eingebrachten partialen Stufenversetzungen reichen auf der Gleitebene jeweils bis zum Rand der Simulationsbox, wodurch sie eine Länge von 14,8 nm aufweisen. Periodische Randbedingungen setzen die Gleitebene in ihrer Ausdehnung fort, lediglich die Ober- und Unterseite der Simulationsbox wird nicht periodisch fortgesetzt, um die Weg-kontrollierte Scherung aufbringen zu können. Auf der Ober- und Unterseite der Simulationsbox werden jeweils drei Atomlagen festgehalten welche in Kristallrichtung (1-10) gegeneinander kontrolliert verschoben werden, um die vorgesehene Scherdeformation aufzubringen, welche die Versetzung auf der Gleitebene in die (1-10)-Richtung bewegt. Die Schersimulationen werden für eine Temperatur von 300 K durchgeführt. Das dargestellte Intervall reicht von $1 \times 10^{-5} \text{ ps}^{-1}$ bis $1 \times 10^{-7} \text{ ps}^{-1}$ pro Simulationsschritt. Es überdeckt somit zwei Größenordnungen und entspricht einer Scherrate von $1 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ bis $1 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$. Es ist lediglich für die schnellste Deformation eine geringe Abweichung bei der Maximalspannung von 9 MPa auszumachen. Für alle anderen Raten zeigt sich eine perfekte Überdeckung der Spannungskurven, wodurch sich eine Unabhängigkeit der Scherspannung von der aufgebrachten Dehnung ergibt. Da die Peaks exakt übereinanderliegen, lässt sich ebenfalls eine lineare Abhängigkeit der Versetzungsgeschwindigkeit von der Scherrate ableiten. Für die in dieser Arbeit am häufigsten verwendete Scherrate $1 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ errechnet sich die Versetzungsgeschwindigkeit zu $13,7 \text{ ms}^{-1}$. Die theoretische Höchstgeschwindigkeit von Versetzungen ist nach [63] und [64] durch die Gleichung für die Energie U bewegter Versetzungen

$$U = \frac{U_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_0^2}}} \quad (32)$$

gegeben. Hierbei ist U_0 die Energie der ruhenden Versetzung, v die Versetzungsgeschwindigkeit und c_o die Geschwindigkeit von Rayleigh-Oberflächenwellen, welche die Geschwindigkeits-obergrenze für Stufenversetzungen darstellt. Die Oberflächenwellengeschwindigkeit c_o ist abhängig von der Poissonzahl ν und der Transversalwellengeschwindigkeit c_t . Für reines Aluminium mit der Poissonzahl $\nu = 0,34$ ergibt sich die Relation zu

$$c_o = 0,93 c_t \quad (33)$$

mit einer Transversalwellengeschwindigkeit von 3.100 ms^{-1} ergibt sich somit eine theoretische Maximalgeschwindigkeit zu 2.883 ms^{-1} . Nach [65] werden selbst unter Idealverhältnissen lediglich 1/10 bis 1/5 von diesem Wert erreicht. Im realen Werkstoff kommen noch weitere Faktoren zur Behinderung der Versetzungsbewegung hinzu, so dass die Geschwindigkeit der Versetzungen noch weiter gebremst wird. Es bleibt festzuhalten, dass die Versetzungsgeschwindigkeit von $13,7 \text{ ms}^{-1}$, die bei den durchgeführten Simulationen mit der Scherrate von $1 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ erreicht werden, weit genug von diesen theoretischen Grenzen entfernt sind.

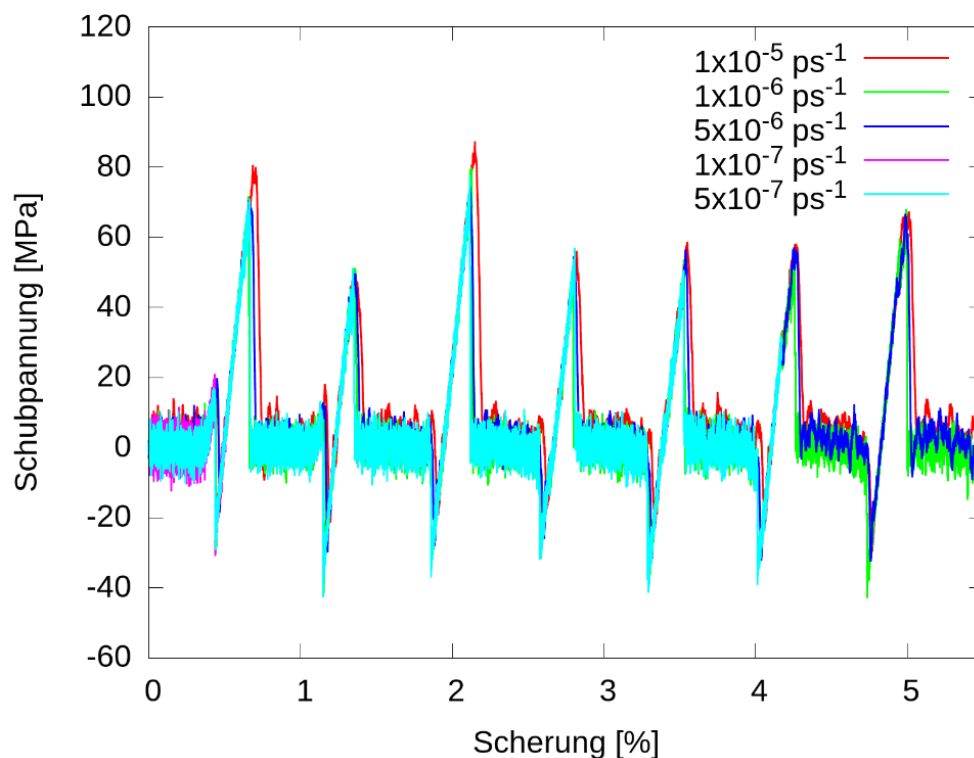


Abbildung 23: Vergleich von Scherraten im Spektrum von $1 \times 10^{-5} \text{ ps}^{-1}$ bis $1 \times 10^{-7} \text{ ps}^{-1}$ bei Scherung einer Versetzung mit GP-Zone als Hindernis. Die Schubspannung ist in MPa über der Scherung in Prozent angegeben.

8.6 Einfluss der Systemgröße

Im Kapitel 8.4.3 wurde bereits der Einfluss von anderen Größen neben der Dehnrates auf die Zugfestigkeit erwähnt, wie zum Beispiel Temperatur, verwendetes Potential und eben die Größe des Modellsystems. Ebenfalls ersichtlich ist der Einfluss der simulierten Modellgröße in Abbildung 18 aus der Arbeit von Koh und Lee [59]. Bei der Auswertung der experimentellen Untersuchungen für hohe Dehnrates fällt auf, dass der beobachtete Anstieg der Zugfestigkeit stets bei kleinen Modellgrößen beobachtet wurde. Daher beschäftigt sich der nächste Abschnitt mit dem Einfluss der Größe des Probenkörpers auf die Zugfestigkeit, zunächst experimentell und im Anschluss numerisch.

8.6.1 Einfluss der Systemgröße im Experiment

In der Arbeit von Huang et al. [66] wurde der Einfluss verschiedener Probenkörpergrößen von Aluminium-Einkristallen auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten untersucht. Für die „Mini“-Größe wurde ein Quader mit der Länge 1,5 mm sowie einer Breite und Dicke von 0,5 mm aus einem Aluminium-Einkristall gefertigt. Die Reinheit des Einkristalls beträgt 99,95 %. Der „Mikro“-Probekörper ist ein Zylinder der Länge $4,5 \pm 0,5$ bei einem Durchmesser von $2,0 \pm 0,2$ μm , welcher durch einen fokussierten Ionenstrahl (FIB) präpariert wurde. Für die Kompression des Mikrokörpers wurde eine Nanoindentationsmaschine (MTS Nano-Indenter XP) mit einem flachen Indenter verwendet. Für die Gestaltung der „Nano“-Probe wurde ebenfalls ein FIB verwendet. Eine schematische Darstellung und ein Bild einer Rastererlektronenmikroskopaufnahme (REM) sind in Abbildung 24 angegeben. Der mit der Nummer 2 markierte Block in der schematischen Darstellung hat die Abmessung von 400 ± 100 nm Länge, 200 ± 50 nm Breite und einer Dicke von 150 ± 50 nm. Alle Probenkörper wurden in [111]- und [110]-Richtung gefertigt. Die angewandte Verformungsrate wurde im Bereich von 10^{-3} s^{-1} gewählt, für das „Mini“-Modell $2 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, für das „Mikro“-Modell $7 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ und für das „Nano“-Modell $1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. Die Ergebnisse der Experimente sind in

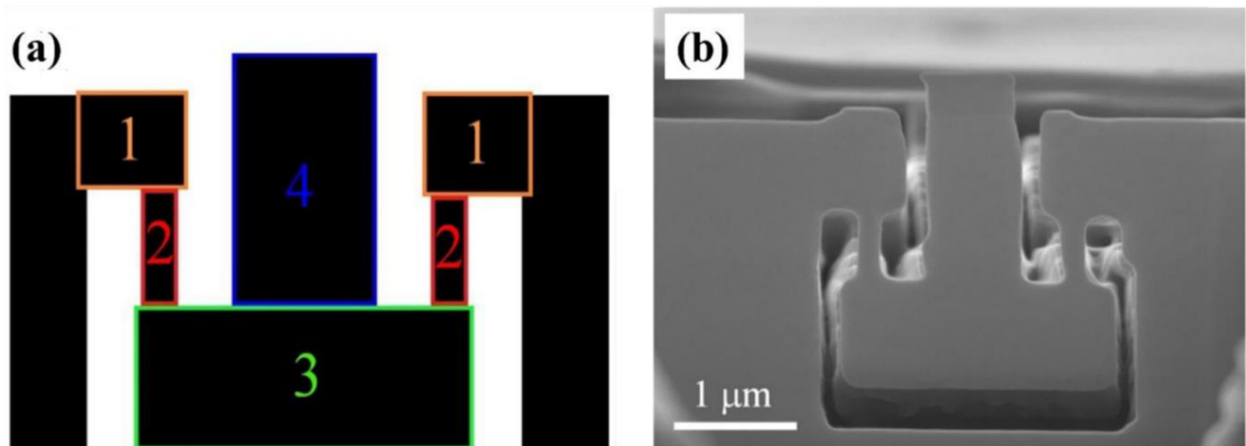


Abbildung 24: Schematische Darstellung (a) und REM-Aufnahme der mit der Ionenstrahl geformten Aluminiumprobe für den Nanozugversuch. [66]

Tabelle 1 aufgeführt. Ein starker Zuwachs der Fließspannung bei abnehmender Probengröße ist zu beobachten. Für die „Mini“-Probe ist die Fließspannung zu 60 MPa ermittelt, was in guter Übereinstimmung mit Spannungswerten für handelsübliches reines Aluminium aus der Literatur von 60-95 MPa [67], je nach Reinheitsgrad und Verarbeitung. Die Reduktion der Probengröße auf „Micro“ führt zu einer Erhöhung der Fließspannung auf 180 MPa, bei gleichzeitiger Ausdehnung des elastischen Bereichs auf 0,25 %. Eine weitere Verkürzung der Seitenlänge des Probekörpers um circa den Faktor zehn in jeder Dimension führt zu einem noch deutlicheren Anstieg der Fließspannung auf 750 MPa. Ebenso findet eine Erweiterung des elastischen Bereichs auf 1,0 % erneut statt.

Tabelle 1: Zusammenfassung der in [66] erhaltenen Ergebnisse der Deformationsversuche an den [111]-orientierten, einkristallinen Aluminiumproben.

	Probengröße	Fließspannung [MPa]	Dehnung [%]
Mini	1,5x0,5x0,5 mm ³	60±3	0,1
Micro	4,5±0,5x(2,0±0,2) ² µm ³	180±5	0,25
Nano	400±100x200±50x150±50 nm ³	750±10	1,0

8.6.2 Einfluss der Systemgröße in der numerischen Simulation

Die Beeinflussung der ermittelten Spannung durch die Systemgröße, wie sie bereits in [59] beobachtet wurde, soll mit der Modellierung des „Nano“-Modells aus [66] bestätigt werden. Zunächst wurde hierfür ein atomistisches Modell an der unteren Grenze des Toleranzbereichs der Abmessungen des Probenkörpers erstellt. Der Quader aus einem Aluminium-Einkristall besitzt die Kantenlängen von $300 \times 150 \times 100 \text{ nm}^3$ und beinhaltet 268 Millionen Atome. Da die hohe Anzahl an Atomen bereits sehr viel Rechnerleistung in Anspruch nimmt, wurde die Dehnrate mit $1 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ gewählt. Es wurden in Zugrichtung periodische Randbedingungen aufgeprägt, um den Kontakt zu Block 1 bzw. 3 aus Abbildung 24 zu imitieren. Die beiden anderen Richtungen besitzen offene Ränder. Die erhaltene Spannungs-Dehnungskurve ist in Abbildung 25 in Grün dargestellt. Das Maximum bildet sich nach einer Dehnung von 3,7 % bei einem Wert von 1535 MPa aus. Dieser Wert liegt um den Faktor zwei über dem experimentell bestimmten Wert von 750 MPa. Um den Einfluss der Probenkörpergröße innerhalb des numerischen Simulationsmodelles zu überprüfen wurden die Kantenlängen des Probequaders jeweils halbiert, geviertelt und geachtelt.

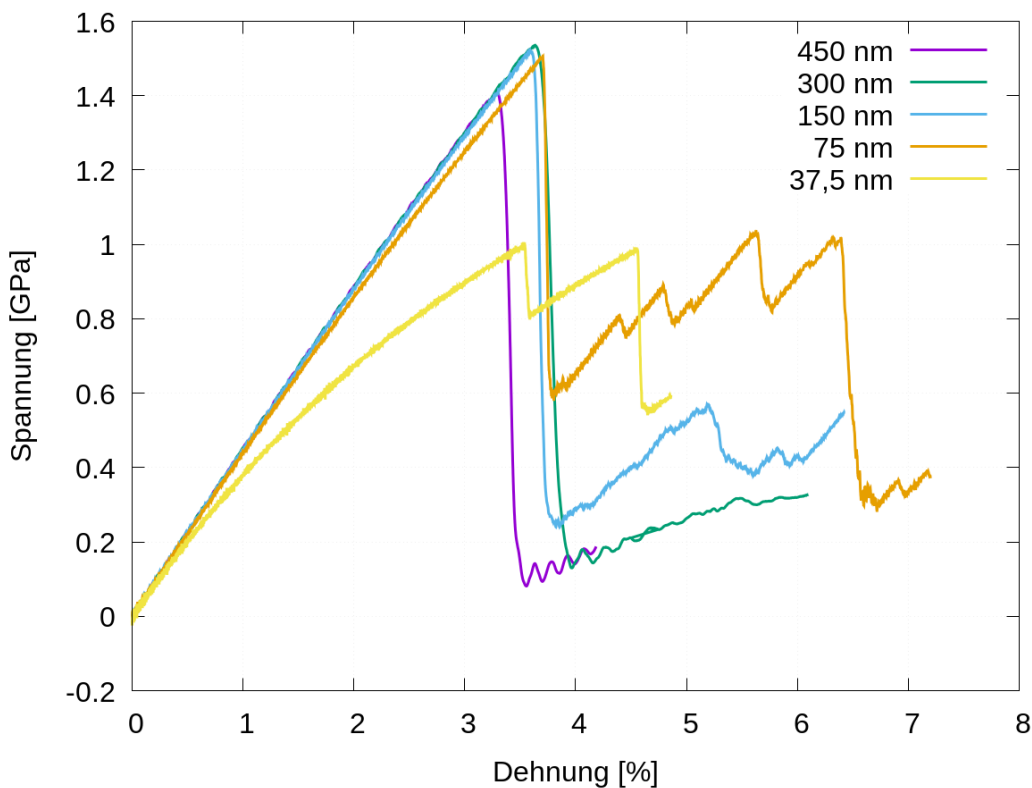


Abbildung 25: Spannungs-Dehnungs-Kurven für fünf verschiedene Probengrößen. Die Legende gibt die Länge in z-Richtung an, welche gleichzeitig die Zugrichtung darstellt.

Entsprechende Spannungs-Dehnungskurven finden sich ebenfalls in Abbildung 25 und in der Aufstellung in Tabelle 2 die entsprechenden Zahlenwerte. Es ist zu beobachten, dass die Werte für eine Länge von 300, 150 und 75 nm mit 1535, 1522 und 1505 MPa sehr nahe beieinanderliegen und dadurch der experimentell bestimmte Trend in diesem Größenbereich nicht bestätigt werden konnte. Eine weitere Reduktion des Probenkörpers auf ein Achtel der Ursprünglichen Kantenlänge führt entgegen dem experimentellen Trend zu einer Erniedrigung der Maximalspannung. Der Übergang einer ansteigenden Maximalspannung zur Spannungsreduktion bei Verringerung der Probengröße erinnert an den Hall-Petch-Effekt bzw. an den Übergang zum inversen Hall-Petch-Effekt bei Polykristallen, der in einem späteren Kapitel (vgl. 9.4.4) weiter untersucht wird. Der Querschnitt des Quaders stimmt mit dem Größenbereich überein, in welchem später der Übergang zum inversen Hall-Petch-Effekt beobachtet wird, welcher materialabhängig ist und bei circa 20 nm liegt [68, 69]. Li und Ma [70] haben diesen Übergang von „smaller is stronger“ zu „smaller is (much) weaker“ für verschiedene einkristalline Metalle aus diversen Veröffentlichungen (unter anderem Experimentell: Zinn [71], Kupfer [72], Gold [73], Silber [74], Silber und Platin [75]; Simulation: Silber [74] und Kupfer [76]) ausgewertet. Es konnte von Li und Ma gezeigt werden, dass sich der bekannte Trend bei Metallen, nämlich von sich erhöhenden Festigkeiten („stronger“) bei verringerter Probenkörpergröße („smaller“), bei Unterschreiten einer kritischen Probenkörpergröße von wenigen zehn Nanometern umkehrt und die Festigkeit auch im Einkristall absinkt („weaker“). Da die Absicht dieser numerischen Untersuchungsreihe jedoch die Übertragung und Fortführung der experimentell beobachteten Erhöhung der Maximalspannung bei einer Reduktion der Probengröße ist, wurde die Simulationsreihe, trotz dem bereits sehr hohen Rechenaufwand für die Simulation der größten Probengeometrie (300 x 150 x 100 nm³), zu einem noch größeren Modell erweitert. Um nicht mehr am unteren Rand der experimentell verwendeten Schwankungsbreite zu rangieren, wurde die Probenkörpergröße auf 226 x 153 x 450 nm³ erhöht. Somit enthält das Simulationsmodell nun 909 Millionen Aluminiumatome. Die erhaltene Spannungs-Dehnungs-Kurve für das größte Modell zeigt eine Absenkung der maximalen Spannung auf 1407 MPa bei einer Reduktion der Dehnung beim Maximum auf 3,2 %. Ein Anstieg der Spannung im plastischen Bereich ist für die Reduktion der simulierten Probengröße bei allen Spannungs-Dehnungs-Kurven zu beobachten.

Tabelle 2: Tabellarischer Vergleich der Ergebnisse der Simulationsreihe zum Einfluss der Probengröße auf die Maximalspannung.

Größe [nm]	Atomzahl [10^6]	Spannung [MPa]	Dehnung [%]
19 x 11 x 37	0,46	1006	3,52
38 x 26 x 75	4,2	1505	3,70
75 x 51 x 150	33,7	1522	3,59
150 x 102 x 300	268	1535	3,70
226 x 153 x 450	909	1407	3,20

Der Unterschied in der Maximalspannung (R_m) der Zugversuche welcher zwischen der Simulation (1407 MPa) und dem Experiment (750 MPa) beobachtet wird, ist auf verschiedene Ursachen zurückzuführen.

Zum einen liegt die Reinheit des experimentellen Einkristalls mit 99,95 % zwar auf einem sehr hohen Niveau, jedoch unter der absoluten Reinheit von 100 %, welche in der Simulation zum Einsatz kam. Übertragen auf die 909 Millionen Atome des größten simulierten Modells ergibt dies circa 450 000 mögliche Fremdatome. Zum anderen sind für das Experiment keine Informationen über die Versetzungsdichte zu erhalten. Abhängig vom Prozess, wie der Einkristall im Experiment aufgebaut wird, kann die Versetzungsdichte stark variieren, in [70] wird der Nanometerbereich als „Versetzung-Verarmungszone“ bezeichnet, d.h. im Vergleich zu einem Material makroskopischer Ausdehnung liegt im Größenbereich von Nanometern eine geringere Versetzungsdichte vor. Mit der Methode der Gasabscheidung gelingt es sogar, versetzungsfreie Aluminiumeinkristalle herzustellen [77], was in unseren versetzungsfreien Simulationen aufgegriffen wurde. Die Nachbehandlung, bei diesem Experiment mit dem fokussierten Ionenstrahl, kann ebenfalls die Versetzungsdichte erhöhen oder verringern. Zur Veranschaulichung wieviele Versetzungen eingebaut werden könnten, wird hier eine Abschätzung einer oberen Grenze durchgeführt, und zwar unter der Annahme einer Versetzungsdichte von $0,61 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$, welche von Adachi et al. [78] für einen ultrafeinkörnigen Al100-Aluminiumlegierungspolykristall (Si 0,12 %, Fe 0,53 %, Cu 0,13 %, Mn 0,02 %, Zn 0,01 % und Al 99,19 %), mit einer mittleren Korngröße von circa 260 nm, gemessen wurde. Hierbei handelt es sich zwar um legiertes Aluminium, jedoch ist aus [79] bekannt, dass sich beim

Übergang von legiertem zu nicht legiertem Aluminium die Sättigung der Versetzungsdichte eher reduziert, wodurch diese Versetzungsdichte als obere Schranke durchaus verwendet werden kann. Der Umstand, dass es sich in [78] um einen Polykristall handelt und in der simulierten Probe um einen versetzungsfreien Einkristall, lässt sich insoweit auflösen, dass im Polykristall zu den Versetzungen im Korninneren zusätzlich noch geometrisch notwendige Versetzungen an den Korngrenzen enthalten sind, deren Dichte mit abnehmendem Korndurchmesser zunimmt [80, 81]. Somit bleibt die Möglichkeit der Verwendung der Versetzungsdichte beim Wegfall dieser geometrisch notwendigen Versetzungen als obere Schranke erhalten. Um also die angenommene Versetzungsdichte von $0,61 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$ zu erzielen, müssten in der Simulation Versetzungen einer Gesamtlänge von circa 900 nm eingebracht werden. Dies entspricht zwei Versetzungen der Länge (450 nm) durch das Modell, oder 4 bzw. 6 Versetzungen im Querschnitt (226 nm bzw. 153nm). Unter dieser Annahme könnten prinzipiell vergleichbare Versetzungsdichten in der Simulation hergestellt werden. Aufgrund der dazu notwendigen Statistik wurde hier jedoch darauf verzichtet. Ein direkter Vergleich der Spannungswerte zwischen Experiment und den hier durchgeführten Simulationen ist daher nicht notwendigerweise vollumfänglich sinnvoll, ohne die Berücksichtigung des Einflusses der Dehnrates.

Die Dehnrates liegt in der Simulation mit $1 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ um zehn Größenordnungen höher als im Experiment mit $1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. Eine Extrapolation der experimentellen und der simulierten Ergebnisse der Zugversuche für unterschiedliche Dehnrates aus Abbildung 22 ist in Abbildung 26 dargestellt. Grundsätzlich muss man wie von Brandl et al. [82] dargelegt, bei jeder Extrapolation große Vorsicht walten lassen, da im Bereich hoher Dehnrates die Deformationsmechanismen bei Unterdrückung diffusiver Prozesse vorrangig spannungsbasiert sind. Die Werte aus Abbildung 22 sind nicht für Einkristalle, sondern für polykristalline Strukturen simuliert bzw. experimentell erhalten, jedoch entsprechen die Spannungswerte der Simulation des Polykristalls mit periodischen Randbedingungen (1455 MPa) sehr gut denen des großen Einkristalls mit 1407 MPa bei einer Dehnrates von jeweils $1 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$. Dies könnte jedoch mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit als reiner Zufall gedeutet werden. Die folgende Überlegung kann dennoch einen Ansatz zur Überwindung der großen Dehnratesunterschiede zwischen Simulation und Experiment liefern, falls zukünftige detailliertere Untersuchungen des Einflusses der Versetzungsdichte und der Mikrostruktur auf die Dehn-

ratenabhängigkeit dem nicht entgegenstehen. Unter der Voraussetzung der guten Übereinstimmung der Simulationswerte für die maximale Zugspannung bei hohen Dehnraten zwischen Polykristallen und Einkristallen könnte eine Extrapolation der Maximalspannungswerte aus der Simulationsreihe der Polykristalle zur Untersuchung des Dehnrateneinflusses (8.4.3) die bestehende Lücke schließen. Der Unterschied des Spannungsmaximums zwischen Aluminiumeinkristall und -polykristall beträgt lediglich 3,3 %. Die quadratische Extrapolation in Abbildung 26 würde bei der experimentellen Dehnrate von $1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ zu einem maximalen Spannungswert von 556 MPa führen. Unter Berücksichtigung der 3,3 % Abweichung des Spannungsmaximum zwischen Aluminiumeinkristall und -polykristall ergäbe dies einen extrapolierten Maximalspannungswert von 537 MPa für die Dehnrate von $1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ des großen Aluminium-Einkristalls. Dies entspräche einer Unterschätzung von 28 % des experimentellen Wertes von 750 MPa aus der Veröffentlichung von Huang et al. [66] durch die Molekulardynamik-Simulation.

Die gezeigte Extrapolation mittels Maximalspannungswerten aus Experiment- und Simulationsreihen mit hohen Dehnraten ($1 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$ bis $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$) für Polykristalle hin zur experimentellen Dehnrate ($1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) und die zuvor ausgeführten Berechnungen zur Bestimmung von möglichen Versetzungsdichten im Einkristall verdeutlichen die weiter bestehenden Herausforderungen im Themenfeld der hier begonnenen Verknüpfung zwischen Experiment und Simulation. Zukünftige Forschungsprojekte können auf der hier gezeigten Arbeit aufbauen und der Zusammenführung von Experiment und Simulation vervollständigen.

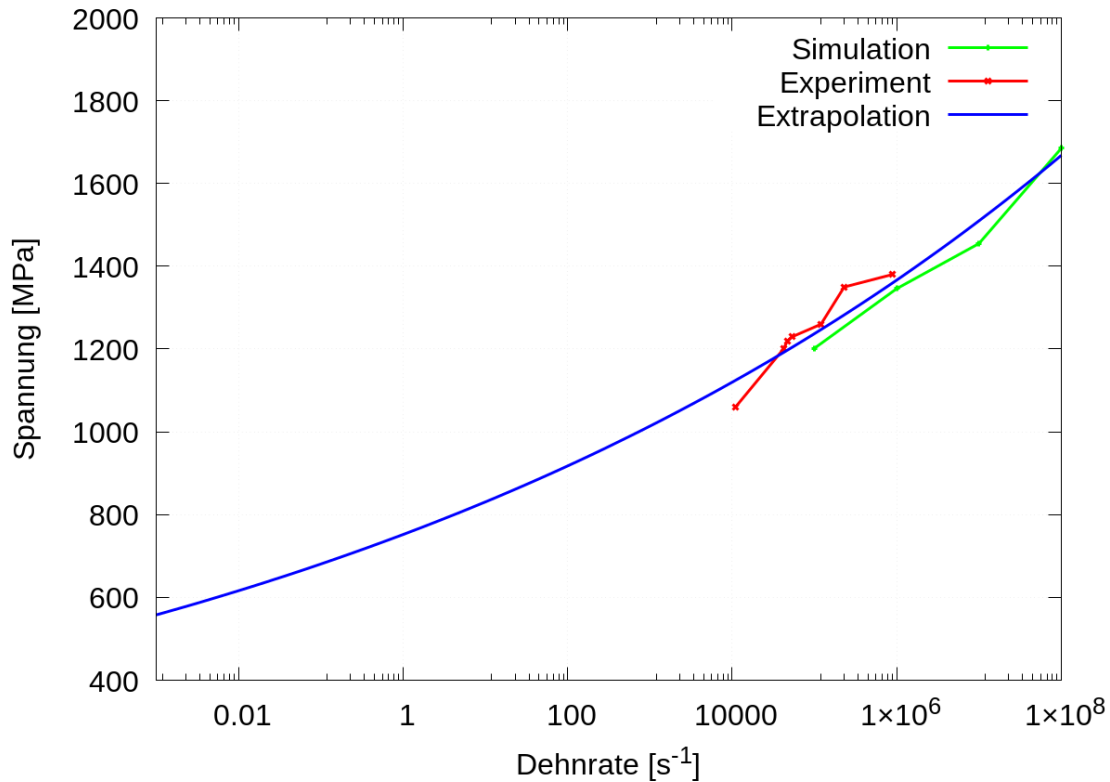


Abbildung 26: Extrapolation der experimentellen und simulierten Ergebnisse aus Abbildung 22 bis zur in [66] angewandten Dehnrate von $1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

8.7 Zusammenfassung des Zeit- und Größeneffekts

Die enorme Entwicklung der Soft- und insbesondere der Hardware hat dazu beigetragen, dass es heutzutage möglich ist, molekulardynamische Simulationen mit denselben Parametern wie Experimente durchzuführen. Selbstverständlich bleiben diese Untersuchungen mit Parametern in derselben Größenordnung weiterhin Extremfälle für beide Methoden. Jedoch wurde gezeigt, dass die Ergebnisse der untersuchten Maximalspannung der Simulation des Zugversuchs und im Experiment bei einem übereinstimmenden Parameter, in dieser Arbeit ist dies in einer Simulationsreihe die Dehnrate und in einer weiteren Simulation die Probengröße, nahe beieinanderliegen können. Jedoch können diese Ergebnisse aufgrund der völlig unterschiedlichen Mikrostrukturen und

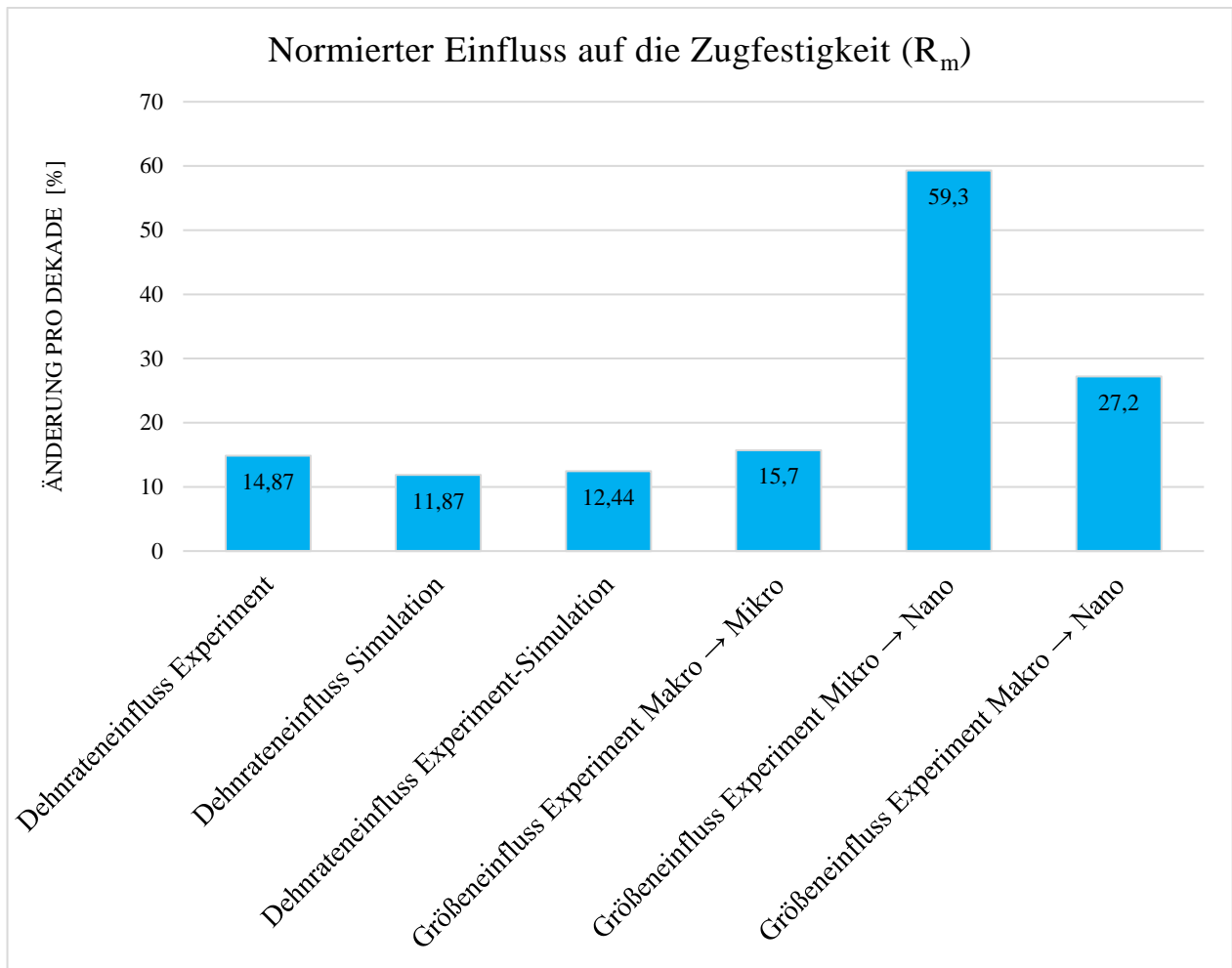


Abbildung 27: Darstellung des normierten Einflusses der Variation der Dehnrates sowie des Volumens des Probenkörpers in Prozent pro Dekade.

dominierenden Verformungsmechanismen in dem vorliegenden Fall, jedoch nicht immer direkt miteinander verglichen werden. Ebenfalls wurde der starke Einfluss der Probengröße bestimmt, welcher den Einfluss der Dehnrates, insbesondere im Nanobereich, deutlich überwiegt (siehe Abbildung 27). In Zahlen bedeutet Abbildung 27 folgendes: Der Maximalspannungswert erhöht sich im Experiment bei einer Änderung der Dehnrates von circa zwei Dekaden (von $1,1 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$ auf $8,8 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$) um ungefähr 30 Prozent, bei der Simulation mit einem Unterschied von drei Dekaden (von $1 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ auf $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$) kommt es zu einer Maximalspannungserhöhung beim Zugversuch von 40 Prozent. Wird der Bereich vom langsamsten Experiment bis zur schnellsten Simulation angewendet, ist der Faktor bei der Erhöhung um vier Dekaden (von $1,1 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$ auf $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$)

1,59, was einer Erhöhung von ungefähr 59 Prozent entspricht. Bei der Änderung der Probengröße im Experiment (siehe Tabelle 1) führt eine Reduktion des Volumens beim Übergang vom Makro- auf das Mikromodell um den Faktor $2,6 \times 10^7$ zu einer Erhöhung der Maximalspannung um 200 Prozent. Noch deutlicher wird es beim Übergang vom Mikro- zum Nanomodell, hier führt die Volumenreduktion um den Faktor $1,17 \times 10^3$ zu einer Erhöhung der Maximalspannung von circa 320 Prozent. Beim direkten Vergleich von Makro- mit dem Nanomodell ändert sich das Volumen um den Faktor $3,1 \times 10^{10}$ und die Maximalspannung bei den Zugversuchen erhöht sich um 1150 Prozent. Darüber hinaus wurde gezeigt, dass das Konvergenzverhalten der Dehnraten bei numerischen Zugversuchen stark von der Legierungszusammensetzung abhängt, daher ist bei der Übertragung von Ergebnissen auf einen anderen Größenbereich stets besondere Sorgfalt anzuwenden.

9 Simulationen und Ergebnisse

9.1 Korngrenzen

Im Zuge der Modellierung von Polykristallen kommt es zu Korngrenzen, welche im Kapitel Flächendefekte eingeführt wurden. Diese Korngrenzen stellen eine Störung des perfekten Einkristalls dar und besitzen daher andere Materialeigenschaften, als der Bereich im Inneren eines Einkristalls. Zur Untersuchung des Einflusses der Korngrenzen auf die Materialeigenschaften wird im Computer ein Einkristall sowie ein Bikristall erstellt und mittels Relaxationssimulation in einen energetischen Gleichgewichtszustand überführt. Für den Bikristall wurde der Simulationsraum in zwei gleich große Bereiche unterteilt, welche jeweils mit einem Einkristall befüllt wurde und sich lediglich in ihrer Orientierung unterscheiden, ähnlich wie in der Arbeit von Rittner und Seidman [83]. Das System hat die Dimension von $20 \times 10 \times 10 \text{ nm}^3$ und enthält circa 120.000 Aluminium-Atome in einer kubisch flächenzentrierten Matrix (vergl. Abbildung 28), bei welchen beim Vergleichseinkristall auf der linken Seite die $\langle 100 \rangle$ -Richtungen den Kanten der Simulationsbox entsprechen. Die simulierte Temperatur beträgt 0 K, periodische Randbedingungen sind in allen Richtungen aufgeprägt.

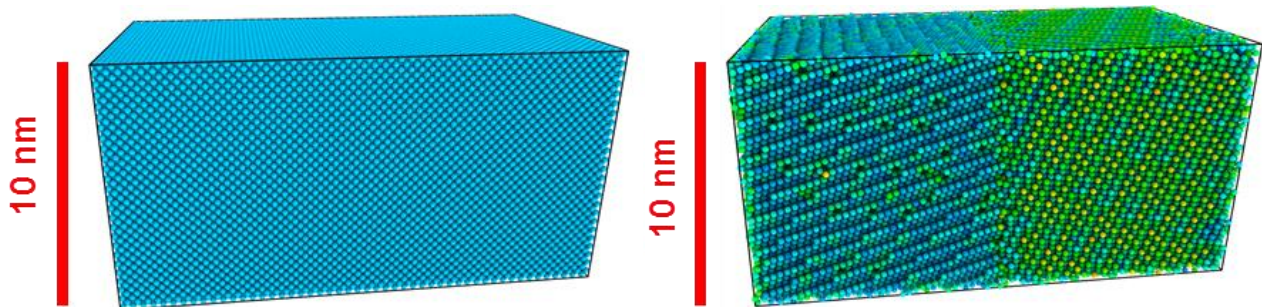


Abbildung 28: Simulationszelle eines Aluminium-Einkristalls links und eines Aluminium-Bikristalls rechts. Der Bikristall besteht aus zwei einkristallinen Würfeln der Kantenlänge 10 nm bei welchen sich die Atomorientierungen unterscheiden. Zur Vergleichbarkeit ist der einkristalline Quader mit Abmessungen von $10 \times 10 \times 20 \text{ nm}^3$ erstellt.

Nach Erreichen des Gleichgewichtszustandes wird an dem Modell, welches die Korngrenze enthält, eine Nachbarschaftsauswertung (CNA) durchgeführt. Die von der Korngrenze weiter entfernten Atome befinden sich jeweils in ihrer energetisch idealen Position zueinander und bilden somit ein perfektes kubisch flächenzentriertes (fcc) Gitter. Werden die Atome welche sich auf ihrer idealen Position befinden ausgeblendet, so bleiben die in Abbildung 29 rechts dargestellten Atome als

durch die Korngrenze beeinflusste Atome übrig. Der kleinste diese Atome vollständig beinhaltende Quader wird als Korngrenzbereich definiert und auf den Einkristall ohne Korngrenze übertragen. Somit kann die Dichte und potenzielle Energie der beiden Systeme verglichen werden. Es ergibt sich eine Dicke von 1,2 Nanometer des Quaders und hierdurch ebenso für die Korngrenzdicke. Für den fehlerlosen Kristall berechnet sich eine mittlere Dichte von $\rho = 60,93$ Atome pro Kubik-Nanometer bei einer mittleren potentiellen Energie von $E_{\text{pot}} = -3,354$ eV/Atom. Bei dem in Abbildung 28 und Abbildung 29 rechts dargestellten System mit Korngrenze reduziert sich die mittlere Dichte auf $\rho = 54,67$ Atome pro Kubik-Nanometer während sich die potentielle Energie im Mittel auf $E_{\text{pot}} = -3,314$ eV/Atom erhöht. Dies entspricht einer Reduktion der Dichte um circa ein Zehntel auf 89,72 % bei einer Anhebung der potentiellen Energie um 0,04 eV/Atom, was einer Änderung von 1,19 % entspricht.

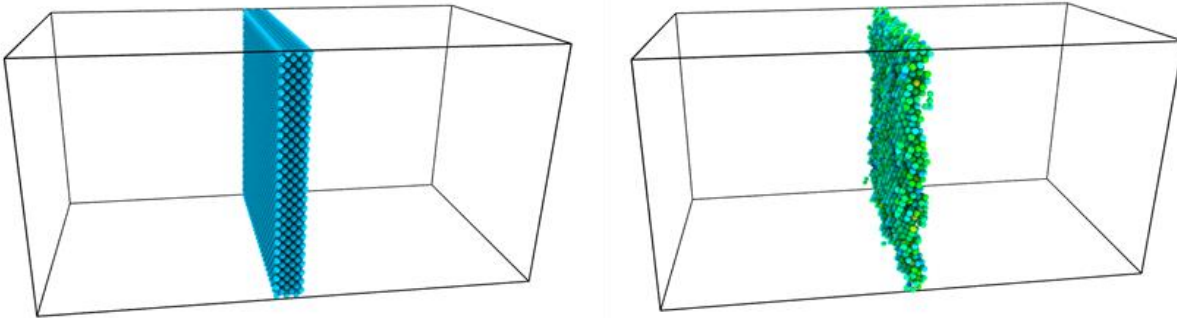


Abbildung 29: Die Atome des Modells aus Abbildung 28 reduziert auf den Bereich der Korngrenze. Die Korngrenzdicke beträgt circa 1,2 nm. Die Farbgebung ist entsprechend der potentiellen Energie, wobei Blau niedrige und Rot hoher potentieller Energie entspricht. Auf der linken Seite ist derselbe Bereich an einem Einkristall dargestellt.

9.1.1 Parameterstudie Korngrenzen

Aufbauend auf die zuvor beschriebene Methode zur Analyse der Korngrenzenergie wurde der Ablauf der Modellerstellung und der Auswertung der potentiellen Energie automatisiert, um eine Auswertung von verschiedenen Korngrenzen zu ermöglichen. Der Simulationsraum besteht hierbei aus zwei aneinandergesetzten Würfeln mit einer Kantenlänge von 20 Nanometern (vgl. Abbildung 30). In beiden Würfeln werden Aluminiumatome im kubisch-flächenzentrierten Gitter eingebracht, bei welchen zunächst die $\langle 100 \rangle$ -Richtungen entlang der Kanten der Simulationsbox zeigen. Die Orientierung des Gitters wird durch die in Abbildung 30 gezeigten Rotationen variiert. In dem Würfel auf der rechten Seite wird um die senkrechte Achse mit dem Winkel α und um die in

die Bildebene gerichtete Achse um den Winkel Beta gedreht. Auf die Atome im linken Würfel werden die spiegelbildlichen Operationen ausgeführt, somit um dieselben Achsen, jedoch um den negativen Winkel gedreht. Durch dieses Vorgehen werden symmetrische Korngrenzen erzeugt.

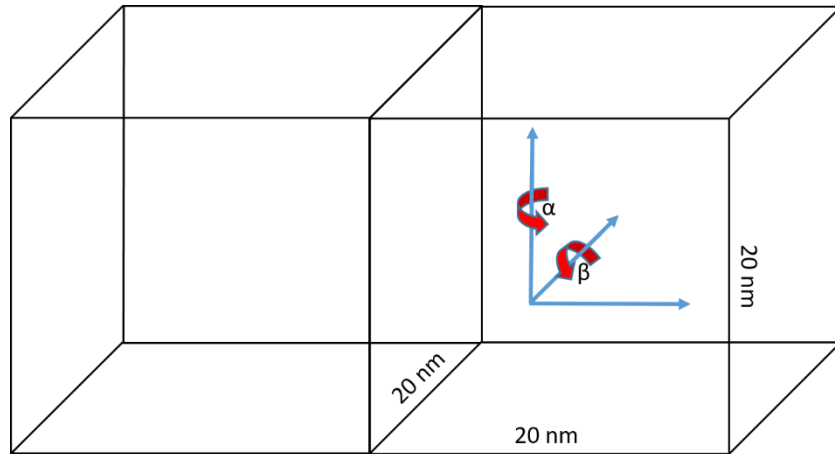


Abbildung 30: Simulationsquader bestehend aus zwei Würfeln der Kantenlänge 20 Nanometer. Der Quader beinhaltet circa 960 000 Aluminiumatome. Die Orientierung der Aluminiumkristalle wird über die Winkel α und β verändert. Die Orientierung der Gitter der beiden Würfel ist spiegelbildlich zur Grenzfläche, so dass eine symmetrische Korngrenze vorliegt.

Um Einflüsse der freien Oberflächen auf die zu beobachtende potentielle Energie zu vermeiden, werden bei der Auswertung nur Atome aus dem Inneren der Simulationsbox herangezogen. Hierzu wird eine zusätzliche Box in der Mitte entlang der Korngrenze gelegt (vgl. Abbildung 31). Sie ist $10 \times 10 \times 2 \text{ nm}^3$ groß und beinhaltet je nach Orientierung ungefähr 12.000 Aluminiumatome. Die in den vorangegangenen Simulationen ermittelte Korngrenzdicke von 1,2 nm wurde in der hier vorgegebenen Dimensionierung der relevanten Box mit der Dicke von 2 nm berücksichtigt. Diese 2 nm zeigten sich als ausreichend, um bei den verschiedenen Orientierungen die Korngrenzatome vollständig zu beinhalten.

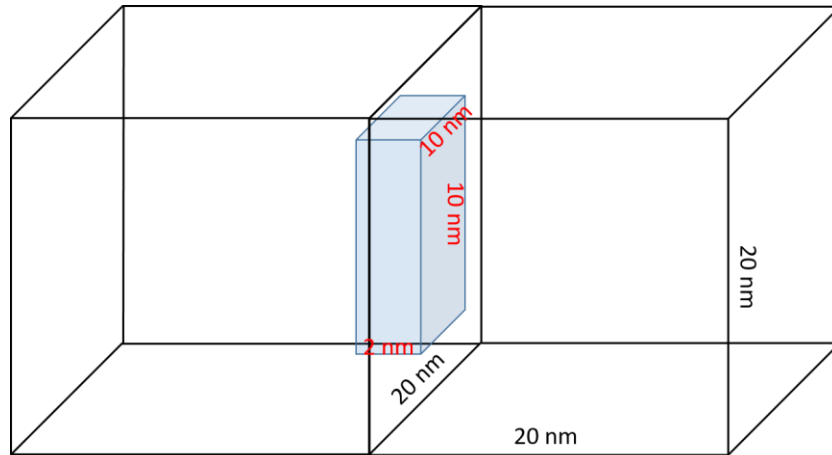


Abbildung 31: Relevanter Ausschnitt welcher zur Betrachtung der potentiellen Energie der Korngrenzatome herangezogen wird. Die Abmessungen betragen $10 \times 10 \times 2 \text{ nm}^3$.

Die Winkel α und β werden jeweils mit einer Schrittweise von 5° von 0° auf 45° erhöht. Auf diese Weise entstehen 100 symmetrische Startkonfigurationen. Der Maximalwert von 45° ist ausreichend, da dann aufgrund der spiegelsymmetrischen Anordnung ein rechter Winkel zwischen den Kornorientierungen entsteht. Das kubisch flächenzentrierte Gitter ist invariant bei einer Rotation um 90° . Somit ist der Bereich der möglichen orientierten Korngrenzen vollständig abgedeckt. Für diese 100 so erzeugten Korngrenzen wurde ein einheitlicher Ablauf der Simulationen vorgenommen. Nach dem Einlesen der Konfiguration wird eine Energieminimierung durch die im Kapitel „Häufig verwendete Funktionen in LAMMPS“ beschriebene Routine „Minimize“ durchgeführt. Diese Optimierung wird auf die gesamte Simulationsbox angewendet, betrifft jedoch lediglich den Bereich der Korngrenze, da die im Verbund des Einkristalls befindlichen nicht Korngrenzatome bereits in energetisch optimaler Position liegen. Anschließend wird eine Simulation bei 0,1 Kelvin im kanonischen Ensemble (Kanonisches Ensemble) für 200.000 Zeitschritte der Dauer 2 fs durchgeführt. Diese NVT-Simulation ermöglicht es im Gegensatz zur zuvor erfolgten Minimierung, dass sich Atome aus ihrem lokalen Minimum heraus bewegen können, um somit möglicherweise eine global energetisch bevorzugtere Position einzunehmen. Die geringe Temperatur von 0,1 K führt jedoch dazu, dass nur schwache Aktivierungsenergien für Umordnungen durch die thermisch aktivierte kinetische Energie bereitgestellt werden können. Um größere Umordnungen zu realisieren, wird eine zusätzliche NVT-Simulation angeschlossen, bei welcher innerhalb von weiteren 200.000 Zeitschritten zu je 2 fs die Temperatur auf 300 K angehoben wird. Auf diese Weise werden die

Atome mit ausreichend kinetischer Energie versorgt, um ihren Gleichgewichtszustand bei Raumtemperatur auszubilden. Eine kontinuierliche Erhöhung der Temperatur ist ratsam, da ein direkter Anstieg auf 300 K aus der Minimierung, bzw. aus der Temperatur von 0,1 K zu schockwellenartigen Schwankungen im System führen kann, welche gegebenenfalls artefaktisches Verhalten nach sich ziehen könnte und somit Einfluss auf die zu untersuchenden Messgrößen, wie z.B. die potentielle Energie und den genauen Ort, haben könnte. Daher wird versucht, zu jedem Zeitschritt der Simulation das System in einem Gleichgewichtszustand zu behalten.

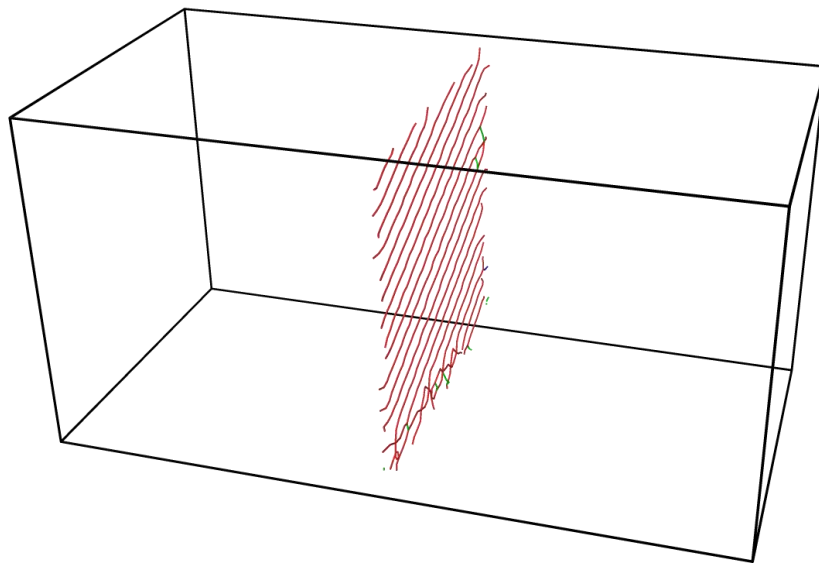


Abbildung 32: Geometrisch notwendige Versetzungen an der Korngrenze bei $\alpha = 30^\circ$ und $\beta = 40^\circ$ nach der Energieminimierung. Versetzungsanalyse durchgeführt mit OVITO.

Bei bestimmten Anordnungen von den Orientierungen der beiden Teilkristalle, abhängig von den Winkeln Alpha und Beta, kann es zur Ausbildung von geometrisch notwendigen Versetzungen an der Korngrenze kommen, wie sie in Abbildung 32 exemplarisch gezeigt werden. Die beobachteten Linienversetzungen entstehen bei der Kombination der Winkel $\alpha = 30^\circ$ und $\beta = 45^\circ$. Die regelmäßigen und engen Versetzungslinien zeugen von einer relativ geordneten, stabilen Korngrenze, was sich bei einem Blick auf Abbildung 33 bestätigt. In Abbildung 33 ist die durchschnittliche potentielle Energie pro Atom in Abhängigkeit von den Winkeln Alpha und Beta, um welche gemäß Abbildung 30 rotiert wurde, aufgetragen. Hierzu wird der Durchschnitt der potentiellen Energie aller Atome, welche sich innerhalb des relevanten Quaders aus Abbildung 31 befinden, gebildet.

Somit wird zu jeder Simulation einer symmetrischen Korngrenze ein Energiewert erhalten, welcher in Abbildung 33 aufgetragen ist. Zur besseren Illustration wurden die Punkte durch ein Gitternetz verbunden. Nicht jeder Gitterpunkt entspricht hierbei einer Simulation. Ein weiteres Hilfsmittel der Visualisierung ist die farbliche Unterscheidung der Ober(rot)- und Unterseite(grün) des Gitternetzes. Die Projektion der Werte der potentiellen Energie in Form von Höhenlinien auf die XY-Ebene erschafft eine topographische Karte der Funktion, durch welche einzelne stabile Winkelkombinationen optisch in einfacher Weise identifiziert werden können. Als Maß der Stabilität einer Korngrenze gilt die potentielle Energie und hierbei bedeutet ein geringerer Wert eine höhere Stabilität. Diese potentielle Energie ist in den Abbildung 33 - Abbildung 35 dargestellt. Sie ist abhängig von der jeweiligen Orientierung der beiden Einkristalle, welche die Korngrenze bilden und über die beiden Winkel Alpha und Beta definiert ist. Die Darstellung ist so ausgerichtet, dass vorne in der Mitte beide Winkel gleich Null sind, nach rechts sind die Werte von Alpha aufgetragen, nach links jene von Beta. Beim Betrachten von Abbildung 33 fällt zunächst eine deutliche Symmetrie ins Auge, welche dem kubisch flächenzentrierten Gittertyp, aus welchem die Aluminiumkristalle aufgebaut sind, geschuldet ist. Für die Wertepaare der Winkel Alpha und Beta 0;0, 0;45 und 45;0 ergeben sich ausgeprägte lokale Minima. Dies ist offensichtlich für das Winkelpaar 0;0 bei welchem beide Teilstrukturen ungedreht vorliegen und somit einen Einkristall bilden. Die anderen beiden absoluten Minima lassen sich durch die bereits zuvor erwähnte Invarianz des Aluminiumkristalls bei einer Rotation um 90° erklären. Da beide Teilkristalle dem Betrag nach um denselben Winkel gedreht werden, jedoch mit verschiedenem Vorzeichen, ergibt sich bei einem Winkel von 45° für Alpha sowie Beta erneut ein Einkristall bei dem es faktisch keine Korngrenze gibt, so lange der andere Winkel 0° bleibt oder 45° einschließt. Die erhaltene Energie entspricht mit $E_{\text{pot}} = -3,357$ eV/Atom dem von dem Potential vorgegeben Wert für fehlerfreie Strukturen. Der fehlerfreie Kristall enthält eine Grenzflächenenergie von 0 mNm^{-1} .

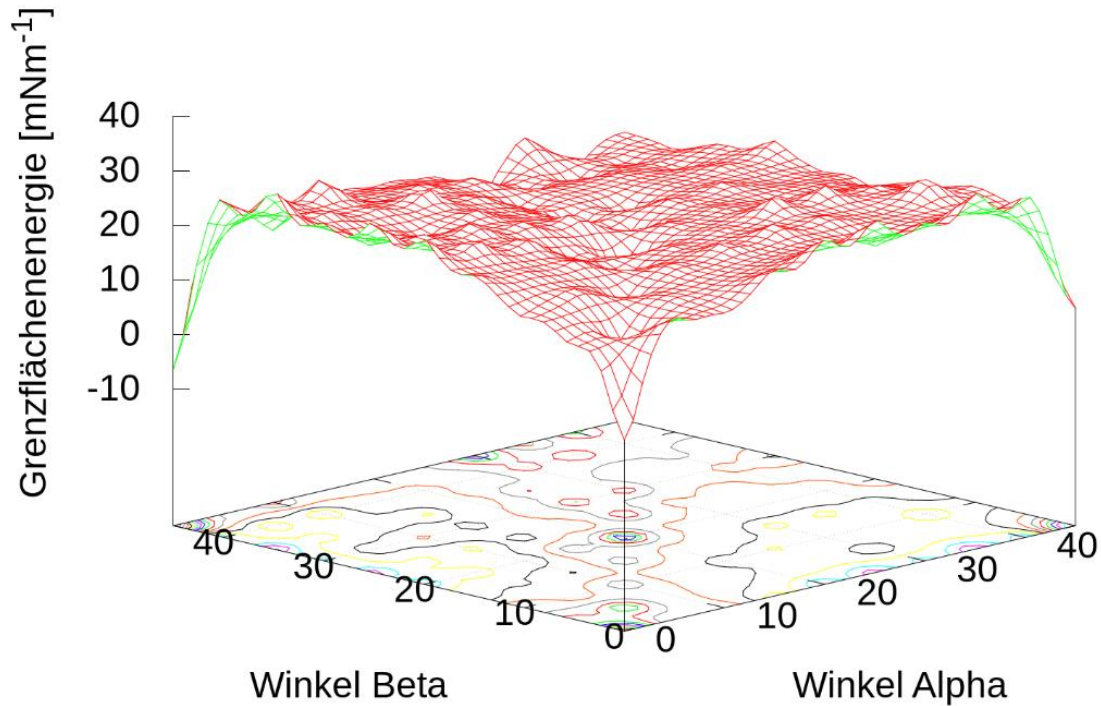


Abbildung 33: Dreidimensionale Darstellung der potentiellen Energie über den variierten Winkeln Alpha und Beta nach dem Ende der Energieminimierung. Die Grenzflächenenergie ist hierbei in Millinewton pro Meter angegeben und zusätzlich als projizierte Höhenlinie dargestellt.

Für die anderen Winkelkombinationen ergeben sich weitestgehend einheitliche Werte für die potentielle Energie von circa $-3,3$ eV, was einer Grenzflächenenergie von circa 20 mNm⁻¹ entspricht. Auf den projizierten Wertelinien lassen sich einzelne Bereiche ausmachen, für welche die Winkelkombination zu relativ stabilen Korngrenzen führt, zum Beispiel die Winkelpaare 20;20 und 30;45, welche jeweils eine Grenzflächenenergie von $8,90$ mNm⁻¹ besitzen. In Abbildung 34 sind die Energiewerte für die selben Konfigurationen nach 200.000 Simulationsschritten im kanonischen Ensemble dargestellt. Beim Vergleich von Abbildung 33 und Abbildung 34 fallen zunächst keine großen Unterschiede auf: Das Energieniveau bleibt nach der Simulation des Bikristalls bei 0,1 Kelvin nahezu unverändert im Vergleich zur reinen Energieminimierung. Lediglich eine vereinzelte Glättung der Energielandschaft lässt sich bei Betrachtung der topographischen Karte erkennen. Diese Glättung geht weiter, wenn die Strukturen langsam auf 300 Kelvin erwärmt werden, dies zeigt sich in Abbildung 35. Begründet ist dies mit der notwendigen kinetischen Energie, um aus dem lokalen Minimum der Atome in der Potenziellandschaft in eine energetisch globale favorisierte Position zu gelangen.

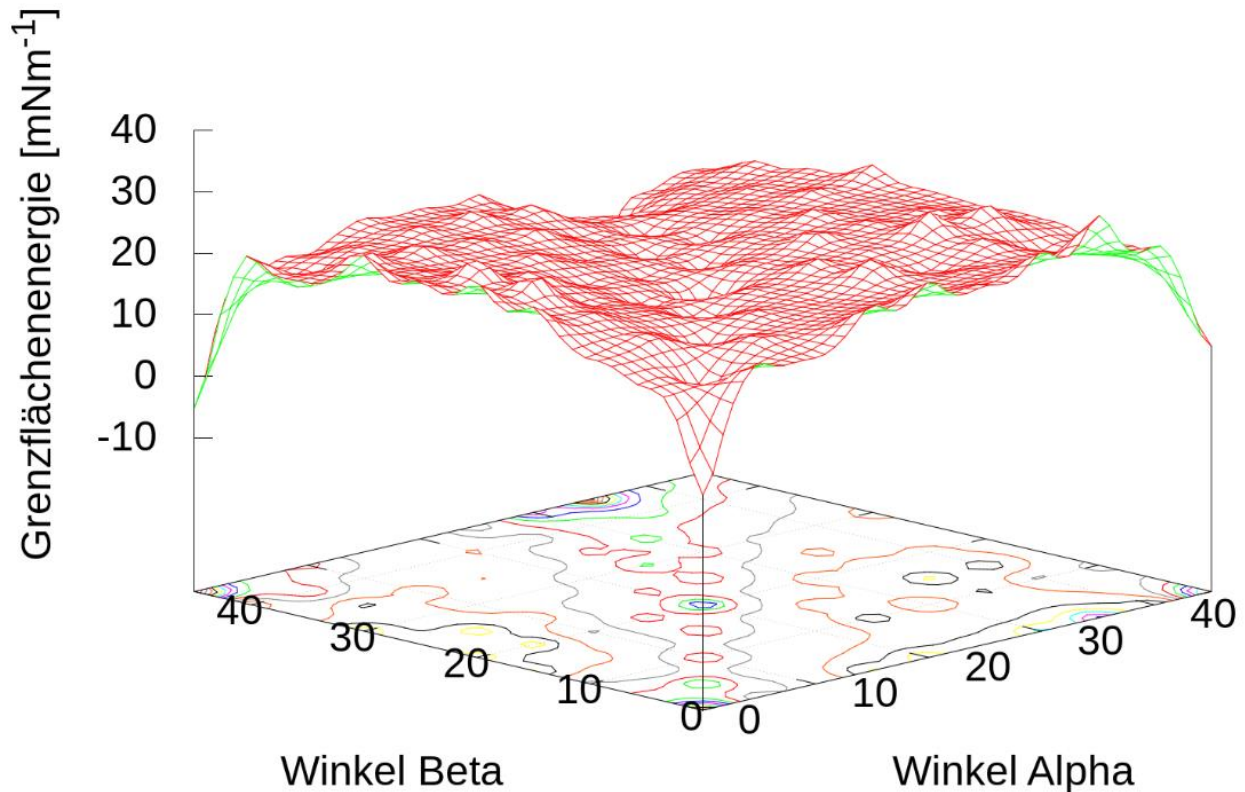


Abbildung 34: Dreidimensionale Darstellung der potentiellen Energie über den variierten Winkeln Alpha und Beta nach 200 000 Simulationsschritten bei 0,1 K im kanonischen Ensemble.

Aus diesem Grund erscheinen die energetisch äquivalenten Bereiche in Abbildung 35 klarer voneinander abgegrenzt als in Abbildung 33, wobei die Übergänge zwischen den Bereichen harmonischer ausgestaltet sind. Für das Winkelpaar 20;20 geht die relative Stabilität zurück, zu erkennen an der nicht mehr so ausgeprägten Energiedifferenz zur Umgebung. Somit wird deutlich, welche Relevanz die energetische und thermische Equilibrierung für die akkurate Modellierung der Grenzflächenenergie hat. Grundsätzlich ist das Energieniveau nach der Simulation von 300 Kelvin insgesamt um wenige mNm^{-1} angehoben, da die einzelnen Atome nun um ihre Gleichgewichtslage aufgrund ihrer thermischen Aktivierung oszillieren. Der absolute Abstand zwischen den Hauptminima und dem Energieplateau hat sich jedoch nicht verändert, wodurch die Stabilität der Korngrenze konstant ist.

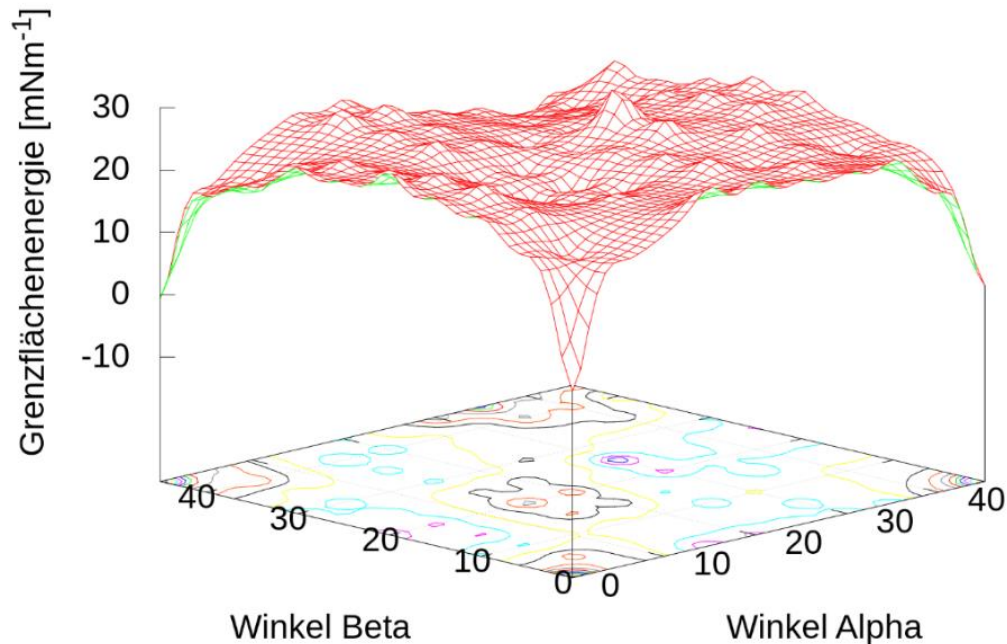


Abbildung 35: Dreidimensionale Darstellung der potentiellen Energie über den variierten Winkeln Alpha und Beta nach der Aufheizsimulation auf 300 K.

9.2 Legierungen mit Ausscheidung

In der vorliegenden Arbeit werden Simulationen nicht nur für reines Aluminium durchgeführt, sondern darüber hinaus mit Modellsystemen, bei welchen Fremdatome als Legierungselement mit ins Modell eingebracht werden: Im Folgenden werden entweder Kupfer- oder Magnesiumatome als Legierungsatome verwendet. In reiner Form besitzt Kupfer unter Standardbedingungen wie Aluminium ebenfalls kubisch flächenzentrierte Struktur, Magnesium jedoch bildet eine hexagonale Struktur aus. Die Legierungsatome werden durch Substitution von Aluminiumatomen in das Modell eingebracht. Entsprechend der verschiedenen Alterungsstufen liegen die Atome zunächst an stochastisch zufälligen Positionen vor, hierbei wird von gelösten Atomen gesprochen. Durch Alterung entstehen mittels Diffusion aus der Legierung mit gelösten Atomen heraus Ausscheidungen, welche legierungsspezifische geometrische Gestalten annehmen können. Diese geometrische Gestalt minimiert die potentielle Energie der Legierung. Für Kupfer und Magnesium sind dies die Guinier-Preston-Zonen [2, 3], sie sind scheibchenförmig angeordnete Kupfer- oder Magnesiumatome innerhalb der Aluminiummatrix, welche ebenfalls durch Substitution der Aluminium-Matrixelemente im Modell generiert werden.

9.2.1 Guinier-Preston-Zonen im Einkristall

Betrachtet wird ein Aluminiumwürfel in Abbildung 36 mit einer Kantenlänge von circa 12 Nanometern, welcher 108.000 Atome enthält. In diesem werden Aluminiumatome durch Kupferatome substituiert, welche um die Seitenflächenmitten scheibchenförmig angeordnet sind. Diese kreisförmigen Ausscheidungen entsprechen den Guinier-Preston(GP)-Zonen, welche bei der Alterung von Aluminium-Kupfer-Legierungen auftreten. Sie haben einen Durchmesser von 2,4 nm. Durch den nativen Unterschied in der Gitterkonstante zwischen Aluminium mit 0,405 nm und Kupfer mit 0,361 nm kommt es bei der Substitution der Atome zu intrinsischer Spannung. Zur Quantifizierung dieser wird als Maß die von-Mises-Vergleichsspannung σ_v herangezogen.

$$\sigma_v = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 - \sigma_x \sigma_y - \sigma_x \sigma_z - \sigma_y \sigma_z + 3(\tau_{xy}^2 + \tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2)} \quad (34)$$

wobei σ_i den Normalspannungen des Spannungstensors entspricht und die Schubspannungen durch die τ_{kl} gegeben sind. In Abbildung 36 ist eine Draufsicht des Aluminiumwürfels dargestellt. Hierbei ist jeweils links und unten in der Kantenmitte das Kupferscheibchen in der äußersten Atomlage eingebracht. Eine energetische Relaxationssimulation überführt das System in einen Gleichgewichtszustand bei einer Temperatur von 0,01 K. Über periodisch Randbedingungen wird das Spannungsfeld des Aluminiumwürfels auf die Atomebene rechts bzw. oben übertragen. Die Farbgebung ist entsprechend der von-Mises-Vergleichsspannung gewählt, wobei rot einem Wert von Null entspricht und dunkelblau einer Spannung von 8 GPa. Hohe Spannungswerte sind direkt um die GP Zone zu beobachten, sowie ein über mehrere Atomebenen wirkendes Spannungsfeld senkrecht zu den Scheibchen.

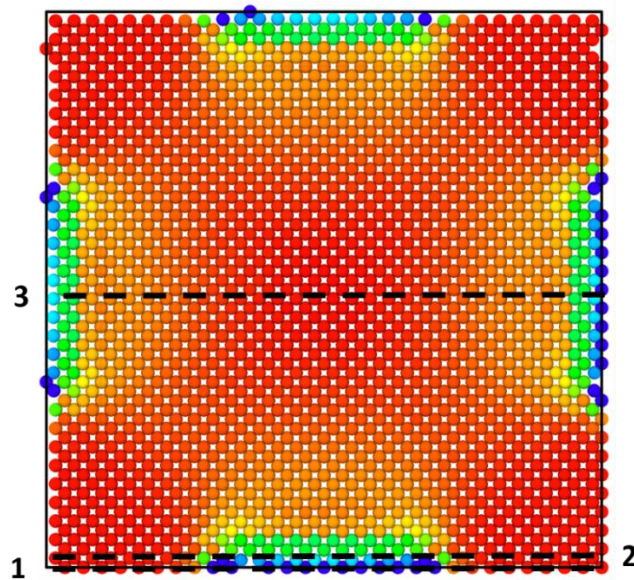


Abbildung 36: Draufsicht auf einen Aluminiumwürfel, bei welchem auf den Seitenflächen jeweils eine Guinier-Preston-Zone substituiert wurde. Das System unterliegt periodischen Randbedingungen. Die Farbgebung ist entsprechend der von-Mises-Vergleichsspannung angegeben.

In Abbildung 36 sind zusätzlich drei Pfade (1,2 und 3) eingezeichnet, entlang welcher die Spannungen in Abbildung 37 dargestellt sind. Die Abszisse bildet der Abstand zum linken Rand in Nanometern. Der erste Eindruck, dass um die GP-Zonen eine hohe Spannungskonzentration vorliegt, wird bestätigt. Der rote Pfad (1) läuft direkt durch den Durchmesser der Kreisscheibe aus Kupferatomen, welche die GP-Zone bilden. Außerhalb der GP-Zone herrscht in dem Aluminiumbasisgitter Spannungsfreiheit. Ein Anstieg der Spannung ist ab 3 Atomlagen Abstand zum äußersten Kupferatom zu beobachten. Dieser Spannungsanstieg verläuft sehr steil. Bei circa 8 GPa erreicht die Spannung ihr Maximum am Rand der GP-Zone. Innerhalb der GP-Zone besteht ein näherungsweise konstanter Spannungszustand von circa 2 GPa unterhalb des Maximums, welcher zur Scheibchenmitte auf 5,75 GPa abfällt. Aufgrund der Anordnung der GP-Zonen sind die Spannungsverläufe symmetrisch zur Würfelmitte. Der im Abstand von einer Atomlage parallel dazu verlaufende Pfad 2 ist im Schaubild grün dargestellt. Der Beginn des Verlaufs ist vergleichbar mit dem von Pfad 1, jedoch fällt der Spannungsabfall nach dem Maximum steiler aus. Ebenso ist die Spannungsspitze mit 8 GPa etwa gleich hoch wie am Randatom der GP-Zone. Im Pfad zwei zeigt sich ebenfalls ein plateauhafter Charakter der Spannung entlang des Scheibchens. Dieses liegt jedoch ungefähr drei Gigapascal niedriger bei 2,75 GPa. Das leichte Absinken der Spannung zur

Scheibchenmitte ist hier ebenfalls zu beobachten, jedoch deutlich schwächer. Die zweite Beobachtung aus Abbildung 36 wird durch den im Schaubild blau gezeichneten Pfad 3 bestätigt. Dieser senkrecht zur GP-Zone verlaufende Pfad hat sein Maximum bei circa 11 GPa, welches mehr als der Spannung des mittleren Atoms im Pfad 1 entspricht. Das Absinken der Spannung fällt im

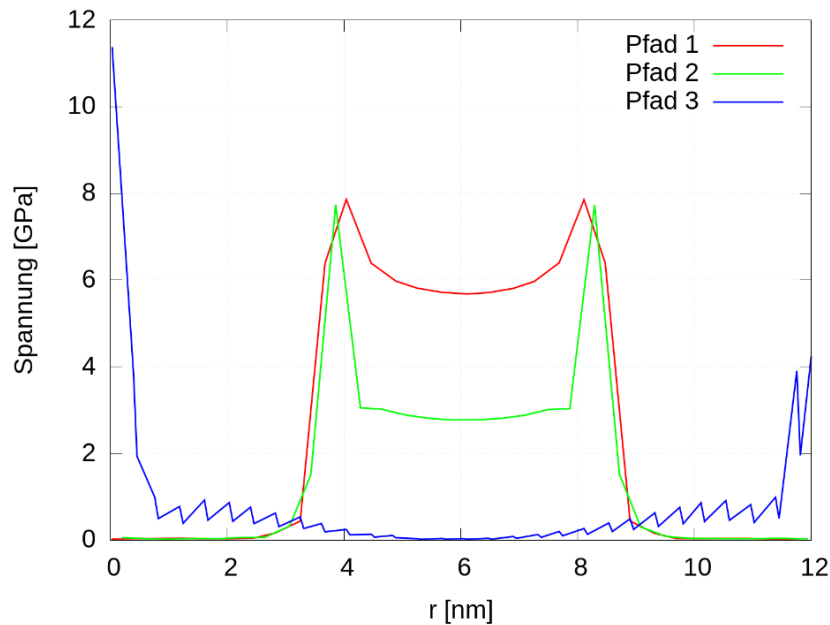


Abbildung 37: Spannungsverlauf entlang der in Abbildung 36 eingezeichneten Pfade 1-3. Die angegebene Spannung ist die von-Mises-Vergleichsspannung.

Pfad 3 genauso steil aus, wie bei den beiden anderen Pfaden, so dass der Spannungswert des dem Scheibchen benachbarten Aluminiumatoms noch 2 GPa beträgt. Für weitere vier Atomlagen verbleibt der Spannungswert schwankend bei 0,7 GPa bevor er langsam kontinuierlich auf null zur Systemmitte absinkt.

9.2.2 Guinier-Preston-Zonen im Polykristall

Im vorangegangenen Abschnitt wurde der Spannungseinfluss von GP-Zonen in einem würfelförmigen Aluminium-Einkristall untersucht. Hierbei wurden hohe Spannungen beobachtet, sowie deren charakteristischer Verlauf ausgewertet. Diese Betrachtung ist begründet, da der direkte Einfluss auf das umliegende Gitter im Fokus liegt. In diesem Abschnitt werden die GP-Zonen in einem Polykristall betrachtet. Zum automatisierten Einbringen der GP-Zonen wurde eine zusätzliche Routine für das Programm nanoSCULPT programmiert, welche im Abschnitt „Weitere Methoden“

ausführlich beschrieben ist. Die in verschiedene Kristallrichtungen orientierte Scheibchen mit variierenden Radien verändern das Spannungsfeld im Innern des Kornes. In Abbildung 38 ist der Spannungszustand in einem Korn eines Aluminium-Polykristalls dargestellt, in welchen verschiedene GP-Zonen gleichzeitig eingebracht wurden. Die Abbildung teilt sich in zwei Hälften. Die obere Hälfte zeigt die Analyse der von-Mises-Vergleichsspannung in dem Zustand direkt nach der Erzeugung des Modells ohne Relaxation. Zu diesem Zeitpunkt wurde noch keine Simulation der Relaxation durchgeführt, es wurde lediglich die Kornstruktur generiert und es wurden gezielt einzelne Aluminiumatome durch Kupferatome substituiert. Hierbei wird ebenfalls ein Pfad durch einen Querschnitt des Kornes gelegt und der Spannungsverlauf entlang diesem in der Graphik rechts daneben dargestellt. Die Abszisse bilden die z-Koordinaten der Atome in Ångström. Die Spannung ist in Megapascal angegeben. Unten ist derselbe Kornquerschnitt mit demselben Pfad dargestellt, jedoch dieses Mal nach der Relaxationssimulation.

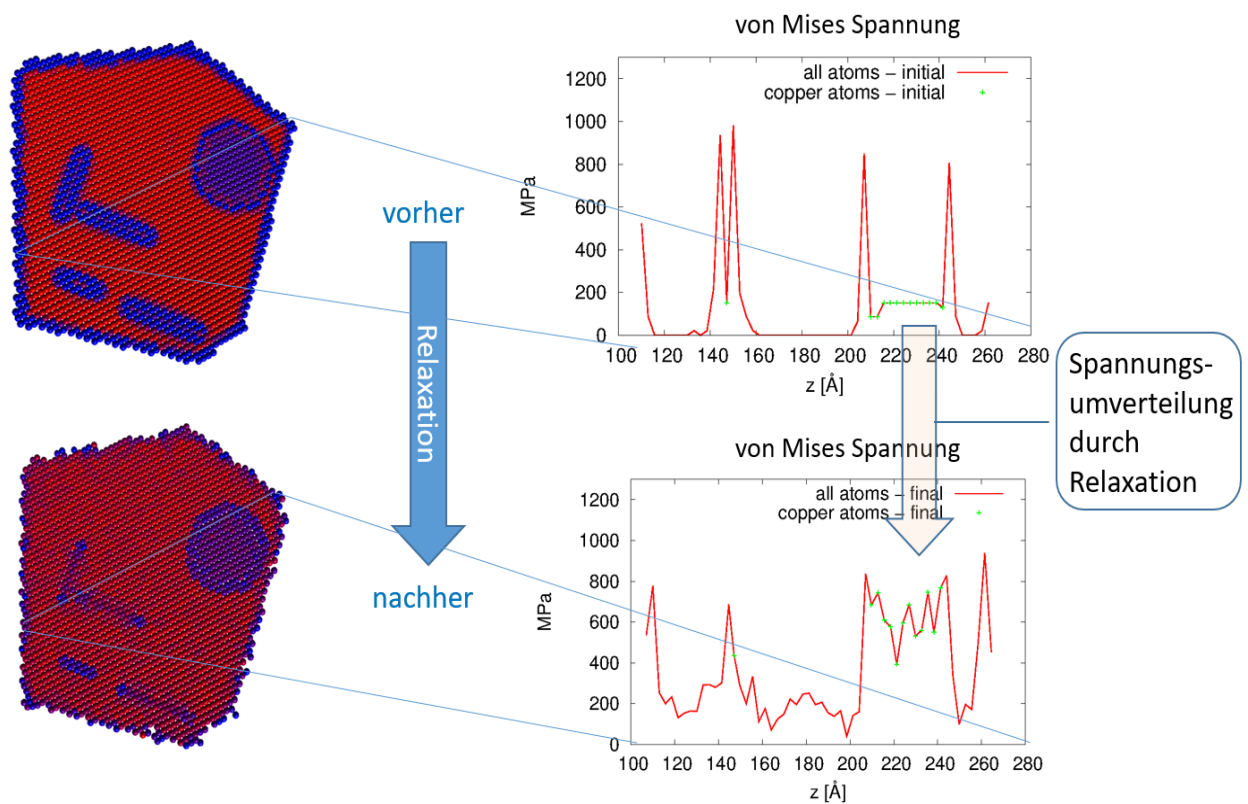


Abbildung 38: Diagramm zur Veranschaulichung des Spannungsverlaufs im Inneren eines Kornes eines Polykristalls. Auf der linken Seite besteht die Farbkodierung entsprechend der von-Mises-Vergleichsspannung (rot entspricht geringer Spannung, blau hoher), rechts wird der Verlauf der Spannung in MPa über dem Ort aufgetragen. In der oberen Zeile ist der Zustand vor und unten nach der Relaxation abgebildet.

Der Spannungsverlauf beginnt an der Korngrenze mit einem Wert von 500 MPa. Im weiteren Verlauf des Pfades ergibt sich eine Erhöhung um wenige MPa, welche dem Passieren einer GP-Zone im Abstand von wenigen Atomlagen zuzuschreiben ist. Danach bei 140 Å schneidet der Pfad eine GP-Zone, wobei der Verlauf der Spannung eher dem Pfad 2 aus Abbildung 37 mit den Spannungsspitzen am Rand und dem abgesenkten Spannungsfeld in der Zone selbst entspricht. Dies ist dadurch begründet, dass Abbildung 36 und Abbildung 37 jeweils die Situation nach der Relaxationssimulation beschreiben und hier noch ein unrelaxiertes System vorliegt. Dasselbe Szenario zeigt sich im weiteren Verlauf. Hier wird bei ungefähr 200 Å die GP-Zone im Querschnitt erreicht. Erneut bilden sich an den Übergängen von der Aluminiummatrix zu den GP-Zonen Spannungsspitzen von circa 1 GPa aus, welche durch einen plateauhaften Bereich dazwischen verbunden werden. Das Plateau selbst liegt bei einer Spannung von ungefähr 175 MPa vor. Während der Relaxationssimulation, welche zum Gleichgewichtszustand bei einer Temperatur von 300 K führt, kommt es zu einem Spannungsabbau und zu einer Spannungsumverteilung. Die zuvor auf ihrer festen Aluminium-Gitterposition fixierten Atome können sich nun gemäß dem verwendeten atomaren Potential umordnen. Hierbei fällt auf, dass die Spannung in der Korngrenze um circa 200 MPa zunimmt. Einen vollständig spannungsfreien Bereich gibt es entlang dieses Pfades im Gleichgewichtszustand nicht mehr. Die passierte GP-Zone ist zwischen den Fluktuationen nicht weiter auszumachen. Der Spannungsverlauf beim Schneiden der GP-Zone hat sich auf eine einzelne niedrigere Spitze reduziert. Eine große Veränderung des Spannungsverlaufs tritt bei den Spannungen beim Durchlaufen des Pfades durch den Querschnitt auf. Die Spannung im Plateau wird auf circa 700 MPa im Mittel angehoben. Jedoch ist der Verlauf nicht mehr ideal konstant, sondern mit zahlreichen Fluktuationen versehen.

9.3 Versetzungen

Die in den Methoden unter dem Kapitel Versetzungen (4.4.2) beschriebenen Gitterfehler sind die Träger der Deformation in Kristallen. Daher wird bei der Simulation von kristallinen Metallen ebenso ein großes Augenmerk auf die Versetzungen und ihre Interaktionen gelegt. Es werden Stufenversetzungen erzeugt und beobachtet, welche sich aufgrund eines durch Scherung erzeugten Spannungsfeldes entlang der Gleitebenen durch den Kristall bewegen. Die zur Bewegung der Versetzung über ein Hindernis notwendige Spannung τ wird als kritische Scherspannung τ_{CRSS} (critical resolved shear stress) bezeichnet. Ist das einzige Hindernis die Gitterstruktur selbst, so entspricht

die CRSS der Peierls-Spannung [84]. Bevor die CRSS für reines Aluminium, Aluminium mit gelösten Legierungselementen Kupfer und Magnesium und Aluminium mit eingebrachten GP-Zonen beschrieben und ausgewertet werden, wird zunächst der simulative Aufbau der Schersimulationen erläutert. Einige der hier dargestellten Ergebnisse zur Wechselwirkungsinteraktion von Versetzungen mit GP-Zonen im System Aluminium-Kupfer sind in [85] publiziert. Bei der Konzeption waren im Rahmen der SFB 716 Antragstellung die Herren P. Binkele und S. Schmauder entscheidend. Für die Ausführung wurde die Grundidee zur Umsetzung von Herrn A.-P. Prskalo eingebracht. Gemeinsam mit A.-P. Prskalo übernahm ich die Koordination der Projektumsetzung sowie die Betreuung des zum Zeitpunkt der Durchführung studentischen Mitarbeiters und inzwischen Kollegen W. Verestek, welcher die Simulationen ausführte und auswertete. Bei der Erstellung des Manuskripts waren A.-P. Prskalo und W. Verestek federführend, an der endgültigen Fassung der Veröffentlichung waren alle Autoren beteiligt.

9.3.1 Schersimulationen mit Molekulardynamik

Zur Realisierung der Schubspannung auf dem System sind zunächst diverse Vorbereitungen notwendig. Zu Beginn wird die Einheitszelle erzeugt, in welcher die gewünschte Orientierung der Kristallstruktur vorliegt. Für die Schersimulation ist dies jene mit der [111]-Richtung senkrecht nach oben: Diese Orientierung wird gewählt, damit die favorisierte Gleitebene (111) zur besseren Beobachtbarkeit parallel zu den Rändern der Simulationsbox liegt. Damit nicht bereits durch minimale Bewegung der Atome ein Wechsel von der einen zur anderen Seite der Simulationsbox über die periodischen Randbedingungen erfolgt, werden alle Atome der Einheitszelle um denselben Translationsvektor leicht verschoben, so dass kein Atom auf den Randflächen der Elementarzelle liegt. Diese Elementarzelle wird nun repliziert bis die gewünschte Simulationsboxgröße erreicht ist, für Kapitel 9.3.2 und 9.3.3 beträgt diese Größe $14,8 \times 21,0 \times 45,6 \text{ nm}^3$. Mit dieser Methode lässt sich somit ein versetzungsfreier Einkristall aus Aluminium erzeugen. Die Geometrie der gewünschten Ausscheidung wird im folgenden Schritt eingebracht. Diese sind für die GP-I-Zonen Scheibchen, welche durch den Schnitt von Hilfsebenen mit einer Kugel definiert werden. Die Kugel gibt die Positionierung im System an und die Normalenvektoren der Hilfsebenen geben die Orientierung der GP-I-Zonen an. Der Atomtyp aller Atome innerhalb der so bestimmten Geometrie wird zu Fremdatomen geändert. Für den Fall der zufälligen Verteilung der Fremdatome wird jedes Aluminiumatom mit einer Wahrscheinlichkeit, die der gewünschten Konzentration entspricht,

durch ein Legierungsatom substituiert. Damit die Scherung später kontrolliert werden kann, werden die unteren und oberen drei Atomlagen als eigene Gruppen deklariert, diese sind in Abbildung 39 in rot (oben) bzw. blau (unten) dargestellt. Anschließend werden die zu entfernenden Halbebenen definiert. Dabei werden von der gewünschten relativen Höhe der Gleitebene im Bezug zur gesamten Simulationsbox, in den meisten Fällen der Scherversuche die Hälfte der Simulationsbox, aufwärts die zwei Halbebenen mit den höchsten x-Koordinaten markiert, um sie zu einem späteren Zeitpunkt zu entfernen. Bevor die Versetzung jedoch durch Entfernen der Halbebenen eingebracht wird, wird das Gesamtsystem bei der gewünschten Temperatur im NpT-Ensemble equilibriert. Anschließend werden die zum Entfernen definierten Atome gelöscht und das Gitter der übrigen Atome oberhalb der entstehenden Gleitebene gleichmäßig gestreckt, bis die Streckung die beiden entfernten Atomlagen kompensiert und somit das obere und untere Teilsystem erneut die selbe Länge haben. Für die eigentliche Scherung wird den oberen drei Atomlagen eine konstante Geschwindigkeit \vec{v} in x-Richtung vorgegeben. Um eine uniforme Bewegung der gesamten Simulationsbox zu verhindern, wird die Krafteinwirkung in x-Richtung bei den unteren Atomlagen unterbunden. Neben den beschriebenen Randbedingungen für die oberen und unteren Atomlagen werden diese im NVE-Ensemble integriert. Die zeitliche Entwicklung der mittleren Atome wird durch ein NVT-Ensemble beschrieben.

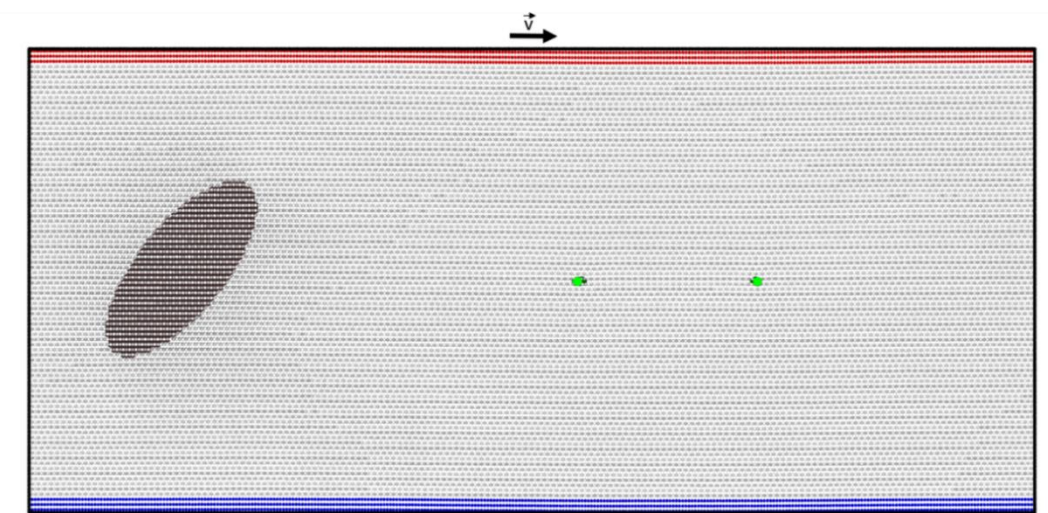


Abbildung 39: Exemplarische Seitenansicht des Modells zur Schersimulation. In rot eingefärbt sind Aluminiumatome der oberen drei Atomlagen, welche mit der Geschwindigkeit v nach rechts bewegt werden, in blau die Atome der drei unteren Lagen, welche festgehalten werden. Links in der Mitte ist eine runde GP-I-Zone dargestellt, die aufgrund der Perspektive elliptisch erscheint. In grün sind die beiden Partialversetzungen dargestellt, welche in die Bildebene hinein verlaufen. Sonstige Aluminiumatome sind grau dargestellt.

9.3.2 Reines Aluminium

Zur Referenzierung der Simulation wird zunächst ein System mit reinem Aluminium herangezogen, welches neben der Versetzung selbst keine weitere Störung der Gitterstruktur beinhaltet. In Abbildung 40 ist ein Schnitt der Simulationsbox dargestellt. Die Schnittebene wurde so gewählt, dass sie der Gleitebene [111] der eingebauten Versetzung entspricht. Farblich gekennzeichnet ist in der linken Darstellung die von-Mises-Vergleichsspannung. Hier zeigen sich hohe Spannungswerte im Zentrum der Versetzung, welche schnell abklingen. Jedoch sind die Spannungsfelder bis weit vor und hinter der Versetzung auszumachen, diese Beobachtung deckt sich mit dem in der Literatur bekannten Wissen über Spannungsfelder von Versetzungen [86]. Auf der rechten Seite

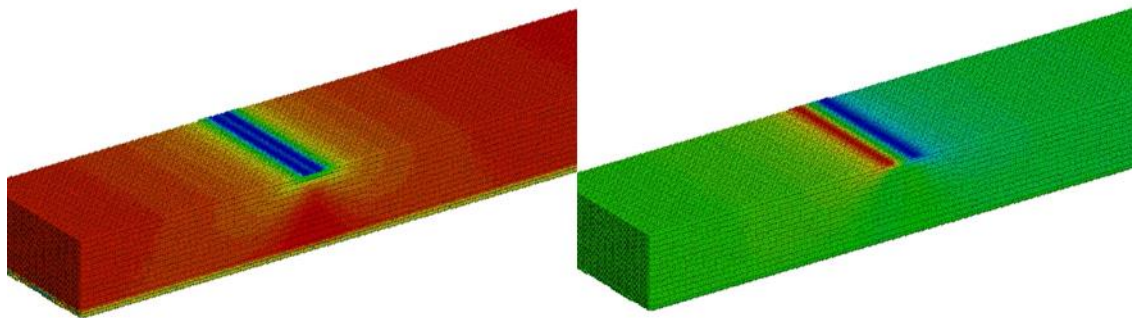


Abbildung 40: In diesen Bildern ist das Spannungsfeld zum Beginn der Schersimulation dargestellt. Zur besseren Übersicht ist lediglich die untere Hälfte der Simulationsbox bis zur Gleitebene sichtbar. Auf der linken Seite wird zur Farbdarstellung die von-Mises-Vergleichsspannung herangezogen, hierbei entspricht ein Atom in rot einem Atom im spannungsfreien Zustand. Bei einem Atom in blau herrscht hohe Spannung. Auf der rechten Seite die Schubspannung τ angegeben, hierbei ist Grün spannungsfrei, Blau für eine positive und Rot für eine negative Schubspannung.

wurde zur Visualisierung die Schubspannung τ_{xz} verwendet. Die Scherrichtung ist in dieser Simulation von links nach rechts, somit steht Blau für eine positive und Rot für eine negative Scherspannung. Für kubisch flächenzentrierte Kristalle ist die zu erwartende Peierls-Spannung typischerweise sehr gering: Für reines Aluminium beträgt sie lediglich 0,79 MPa [87]. Dieser Literaturwert deckt sich sehr gut mit den Ergebnissen der Schersimulationen von welchen die Schubspan-

nungen τ_{xz} im Spannungs–Dehnungs–Diagramm in Abbildung 41 für die beiden verwendeten Potentiale für Cu [30] und Mg [33] dargestellt sind. Die Oszillation der Spannungswerte entspricht der Überwindung einzelner Atomlagen, welche in diesem, bis auf die Versetzung, fehlerlosen Aluminiumkristall das einzige Hindernis darstellt, welche die Versetzungsbewegung hemmt. Die Amplitude für das Aluminium-Kupfer Potential beträgt zu Beginn circa 3 MPa. Diese Spannung klingt jedoch im Verlauf weiterer Simulation weiter ab und sinkt dem Literaturwert entgegen. Der Zielwert von 0,79 MPa wird mit 0,77 MPa nahezu perfekt getroffen. Für das Potential, welches Magnesium als Legierungsatom berücksichtigt überschätzt die berechnete Scherspannung den Literaturwert über die gesamte Simulation etwas, jedoch ist die Amplitude am Ende der Simulation ebenfalls deutlich unter 2 MPa, wodurch sich ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit dem Literaturwert von 0,79 MPa ergibt.

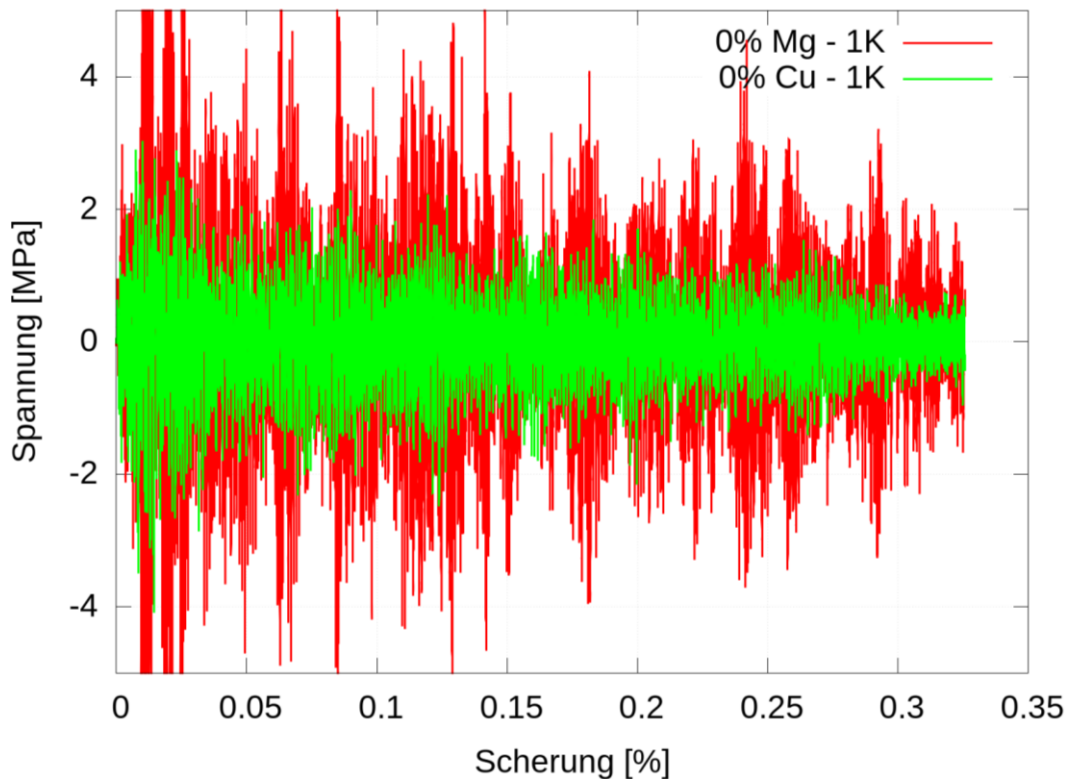


Abbildung 41: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für das System mit reinem Aluminium für die beiden verwendeten Potentiale für AlCu in rot und AlMg in grün. Hierbei ist der Wert der Schubspannung in Megapascal angegeben und die Verschiebung der oberen Atomlagen bei der Scherung in Prozent.

In Abbildung 42 sind die Spannungs-Dehnungs-Diagramme für das AlCu-Potential für sieben verschiedene Temperaturen von 1 K bis 600 K abgebildet. Um die Spannungsunterschiede zu veranschaulichen, wurde der reale Verlauf der Spannungen mit Hilfe der Bezier-Interpolation geglättet.

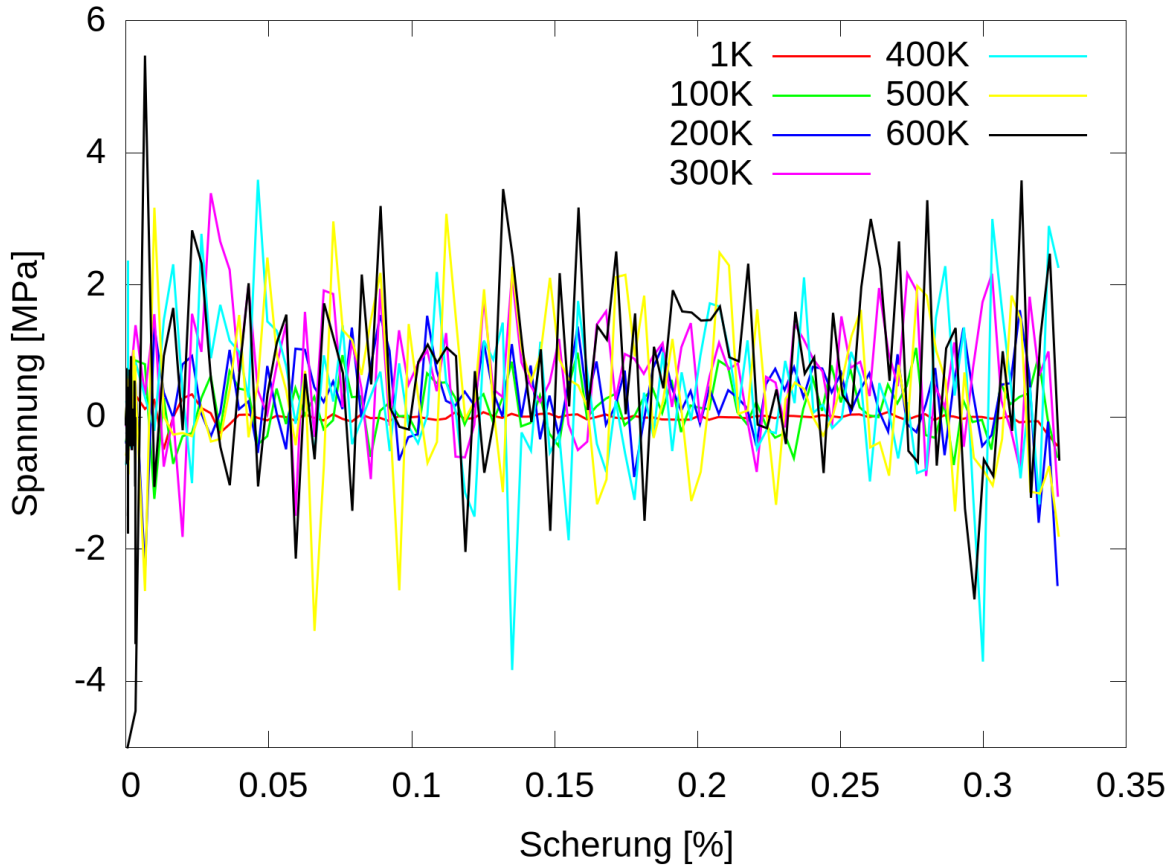


Abbildung 42: Bezier-geglättete Spannungs-Dehnungs-Diagramm für verschiedene Temperaturen.

9.3.3 Gelöste Fremdatome

Im vorangegangenen Abschnitt wurde die Versetzungsbewegung für einen reinen Aluminiumkristall untersucht und es wurde dabei festgestellt, dass eine sehr geringe Spannung notwendig ist, um eine Versetzung zu bewegen, da in diesem System keine nennenswerten Hindernisse für die Versetzung vorliegen. Diese Situation ändert sich bei der Substitution von Aluminiumatomen durch Fremdatome in der Aluminiummatrix. Die Fremdatome besetzen reguläre Gitterpositionen, wodurch es zu Verzerrungen des vorher idealen Gitters kommt. Diese Gitterverzerrung geht mit den dadurch vorliegenden Spannungen einher. Wird in dieses spannungsbehaftete System eine

Versetzung eingebracht, so dienen die durch die Legierungsatome induzierten Spannungsmodulationen zusätzliches als Hindernis für die Bewegung der Versetzung. Dieser Einfluss der Legierungsatome wird in den folgenden Abschnitten für verschiedene Konzentrationen von Kupfer oder Magnesium untersucht.

Ein Prozent Kupfer

In das zuvor verwendete System aus 860.000 Aluminiumatomen werden circa 8.600 Kupferatome durch Substitution statistisch verteilt eingebracht. In Abbildung 43 zeigt sich mit Hilfe der von-Mises-Vergleichsspannung der Einfluss der Kupferatome. Durch die nativ mit 3,6148 Å geringere Gitterkonstante des Kupfers als die mit 4,04959 Å des Aluminiums werden die das Kupfer umgebenden Aluminiumatome vom Kupferatom etwas stärker angezogen, wodurch es zu einem Spannungsfeld kommt, welches durch die grüne Färbung sichtbar ist. Bei der Durchführung der Schersimulation zeigen sich diese Spannungsfelder um die gelösten Legierungsatome wie erwartet als Hindernis für die Versetzung. Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm in Abbildung 44 zeigt eine deutliche Erhöhung der Schubspannung im Vergleich zur legierungsatomfreien Scherung aus Abbildung 41. Die Spannungsspitzen werden mit 20 MPa erreicht, der Spannungsverlauf verläuft bei einem Kelvin schwankend zwischen -10 und 20 MPa.

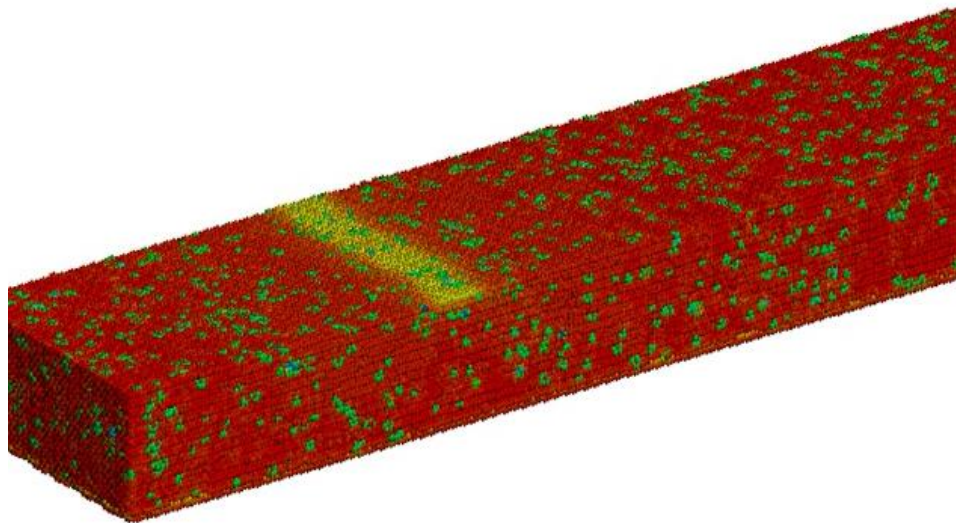


Abbildung 43: In diesem Bild dargestellt ist die untere Hälfte des Aluminium-Kupfer-Systems bis zur Gleitebene in der die eingebrachte Versetzung läuft. Die Farbe beschreibt die von-Mises-Vergleichsspannung, wobei der spannungsfreie Zustand rot eingefärbt ist. Das Spannungsfeld der Versetzung sowie um die einzelnen Legierungsatome ist deutlich erkennbar.

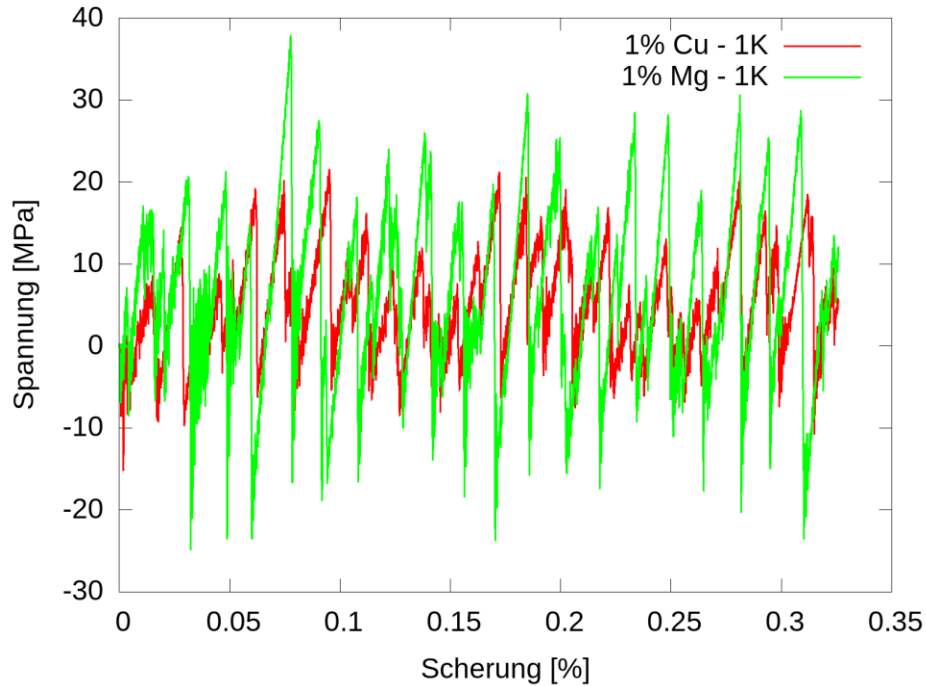


Abbildung 44: Spannungs-Dehnungs-Kurve für die Scherung des Aluminiumsystems mit einem Prozent zulegiertem Kupfer in rot bzw. einem Prozent Magnesium in grün. Die Schubspannung ist in MPa über der Dehnung in Prozent aufgetragen.

Diese Schwankungen deuten darauf hin, dass die Versetzung an Legierungsatomen festgehalten wird, sich die Spannung dabei aufbaut bis die kritische Schubspannung erreicht ist und das Hindernis dann unter Reduktion der Spannung überwunden wird. Der charakteristisch gezackte Verlauf zeigt sich ebenfalls für das mit Magnesium dotierte System, welches in grün dargestellt ist. Grundsätzlich ist der Spannungsbereich beim mit Mg dotierten System mit 58 MPa im Vergleich zum Kupfer mit 30 MPa fast doppelt so hoch. Die Spannung pendelt zwischen -20 und 38 MPa bei 1 K Temperatur. Beim Betrachten des Temperatureinflusses auf die Spannungshöchstwerte fällt in Abbildung 45 eine Umkehrung der in Abbildung 42 erkannten Reihenfolge ins Auge. Bei dem System mit gelöstem Kupfer sinkt die Maximalspannung innerhalb des Peaks mit steigender Temperatur. Dies ist dadurch zu erklären, dass in diesem System nun bereits ohne Temperatur Hindernisse in Form von Kupferatomen vorliegen, die zu einer Gitterverzerrung führen, welche deutlich ausgeprägter ist, als jene, die durch die Temperatur induziert sind. Im Gegensatz zum System aus reinem Aluminium unterstützen diese thermisch verursachten Gitterbewegungen die Überwindung der durch Fremdatome verursachten Hindernisse.

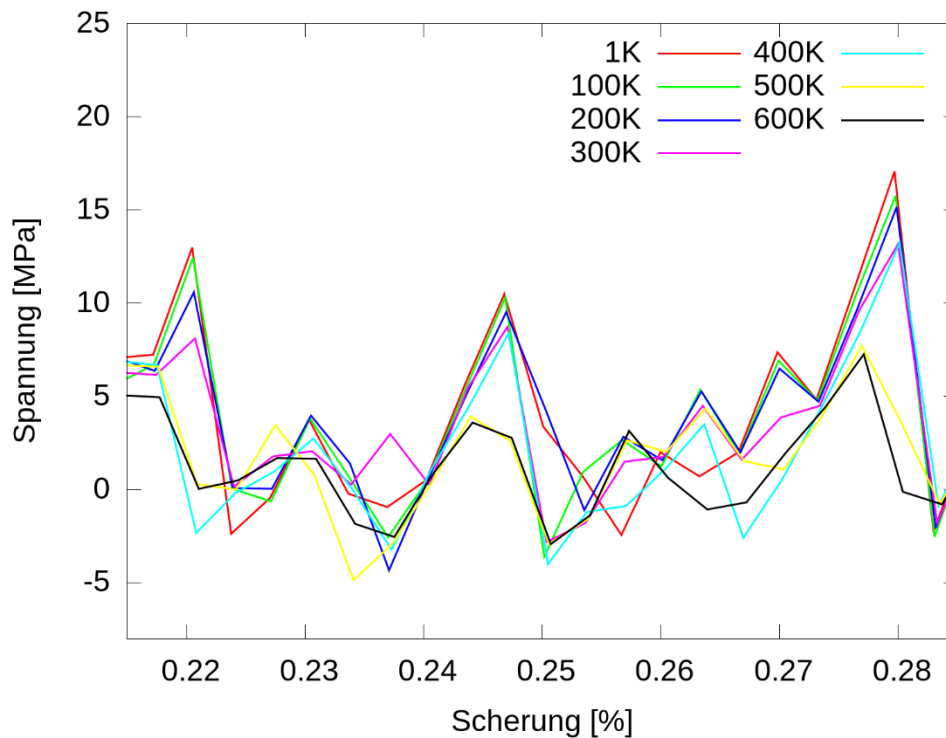


Abbildung 45: Die Schubspannung in MPa über der Dehnung aufgetragen für eine Kupferkonzentration von einem Prozent in einer Aluminiummatrix. Die verschiedenen Kurven entsprechen verschiedenen Temperaturen.

Höhere Kupferkonzentrationen

Nachdem zuvor der Einfluss von einem Prozent substituiertes Fremdatome ausgewertet wurde, wird im vorliegenden Abschnitt die Änderung des Einflusses von höheren Konzentrationen von Fremdatomen auf die Schubspannung betrachtet. Hierzu werden jeweils Simulationen bei zwei und fünf Prozent Fremdatomkonzentrationen durchgeführt. In Abbildung 46 sind die Spannungs-Dehnungs-Kurven gemeinsam mit den bisher erhaltenen Werten für die Temperatur von 1 Kelvin in einem Schaubild aufgetragen. Hierbei ist eine Spannungszunahme mit zunehmender Konzentration der Kupfer- bzw. Magnesiumatome zu beobachten. Bei zwei Prozent Kupfer, dargestellt durch die blaue Kurve in der Abbildung, beträgt die Spannungsspitze etwa 50 MPa und geht an verschiedenen Stellen auf 0 MPa und sogar nach dem Überwinden einzelner Hindernisse auf -10 MPa zurück. Diese negativen Schubspannungswerte deuten an, dass es beim Überwinden von Hindernissen durch Fremdatome zu einer Überreaktion der Versetzung kommt. Die Überreaktion hat die Gestalt,

dass die Versetzung beim Lösen vom Hindernis sich schlagartig von selbigen entfernt und dabei weiter in den Kristall hineinläuft, als die von außen aufgebrachte Deformation dies verursachen würde. Daher reagiert das modellierte System mit einer negativen Schubspannung um die Versetzung wieder in die gegensätzliche Richtung zu bewegen. Bei einer Kupferkonzentration von fünf Prozent geht die Spannung seltener wieder ganz auf 0 MPa zurück, sondern verbleibt phasenweise auf erhöhtem Niveau. Die Höchstwerte der Spannung werden bei 75 MPa erreicht. Allen drei Kurven für die drei verschiedenen Kupferkonzentrationen ist gemeinsam, dass der Schubspannungsverlauf nicht monoton ist. Dieser Effekt liegt wie für das System mit einem Prozent gelöstem Kupfer daran, dass die Versetzung sich an den Legierungselementen anlagert und dadurch zu lokalen Spannungsspitzen führt. Für höhere Konzentrationen von Fremdatomen steigt die Wahrscheinlichkeit für die Ansammlung von Kupferatomen zu Clustern, welche für die Versetzung ein stärkeres Hindernis darstellen und somit zu höheren Fluktuationen der Schubspannung führen.

Analoge Beobachtungen werden in Abbildung 47 für Magnesium als Fremdatom gemacht. Hierbei sind die Spitzenwerte für zwei Prozent Magnesium bei Werten von 40 MPa erreicht. Wird die Magnesiumkonzentration auf fünf Prozent erhöht, so werden Spitzenwerte von 80 MPa erzielt. Wie bereits in Abbildung 45 für ein Prozent Kupfer gezeigt, zieht sich der spannungsreduzierende Einfluss der Temperatur für höhere Fremdatomkonzentrationen weiter fort.

Die Übersicht über die Ergebnisse aller 28 Simulationen pro Fremdatom sind in Tabelle 3 sowie in Abbildung 48 für Kupfer und in Tabelle 4 sowie Abbildung 49 für Magnesium dargestellt. Die zweite Spalte zeigt den bereits für Abbildung 42 beschriebenen Verlauf der steigende Maximalspannung für zunehmende Temperaturen ohne Fremdatome. Dieser Effekt ist bei Magnesium nicht zu beobachten, hier sind die Maximalwerte relativ konstant. Für Kupfer zeigt sich diese Temperaturinvarianz erst bei einer Konzentration von einem Prozent, bei welchem sich die Effekte der zuvor beschriebenen spannungserhöhenden thermisch induzierten Gitterverzerrung im ungestörten Aluminiumgitter und die durch thermische Fluktuationen verursachte Vereinfachung der Hindernisüberwindung gerade kompensieren. Es werden relativ einheitliche Spannungswerte zwischen 18,7 MPa und 22,9 MPa erhalten. Bei Magnesium gibt es mit 37,8 MPa einen einzelnen Ausreißer, die sonstigen Werte liegen im Intervall zwischen 20,1 und 25,9 MPa. Der Ausreißer kann durch eine zufällige Anhäufung der im Kristall auf zufälligen Positionen verteilten Fremdatome verursacht sein. Durch die fehlende thermische Fluktuation bei der geringen Temperatur von 1 Kelvin

kommt es zu einer, im Vergleich zu den höheren Temperaturen, ausgeprägten Behinderung der Versetzungsbewegung. Ein ähnliches Verhalten, jedoch auf etwas höherem Niveau, zeigt sich bei 2 Prozent Magnesium durch ein Intervall von 23,1 MPa bis 30,1 MPa, weiterhin zeigt auch hier die Simulation bei 1 Kelvin mit 40,7 MPa höhere Maximalwerte aufgrund der fehlenden thermischen Fluktuation. Die monotone Abnahme der Maximalspannung mit steigender Temperatur stellt sich bei Magnesium erst bei einer Konzentration von 5 Prozent ein, bei Kupfer hingegen bereits bei 2 Prozent. Die einzelnen Ausreißer sind dadurch zu erklären, dass die Entscheidung über die Positionierung der Legierungsatome zufällig geschieht. Somit kann es zu Anhäufungen von Legierungsatomen innerhalb des Interaktionsbereichs der Versetzung kommen, wodurch die notwendige Spannung zur Bewegung der Versetzung beeinflusst werden kann. Selbiges gilt für die Fremdatomkonzentration, welche zwar über den gesamten Kristall vorgegeben ist, jedoch muss diese nicht zwingend auf der Gleitebene der Versetzung vorherrschen.

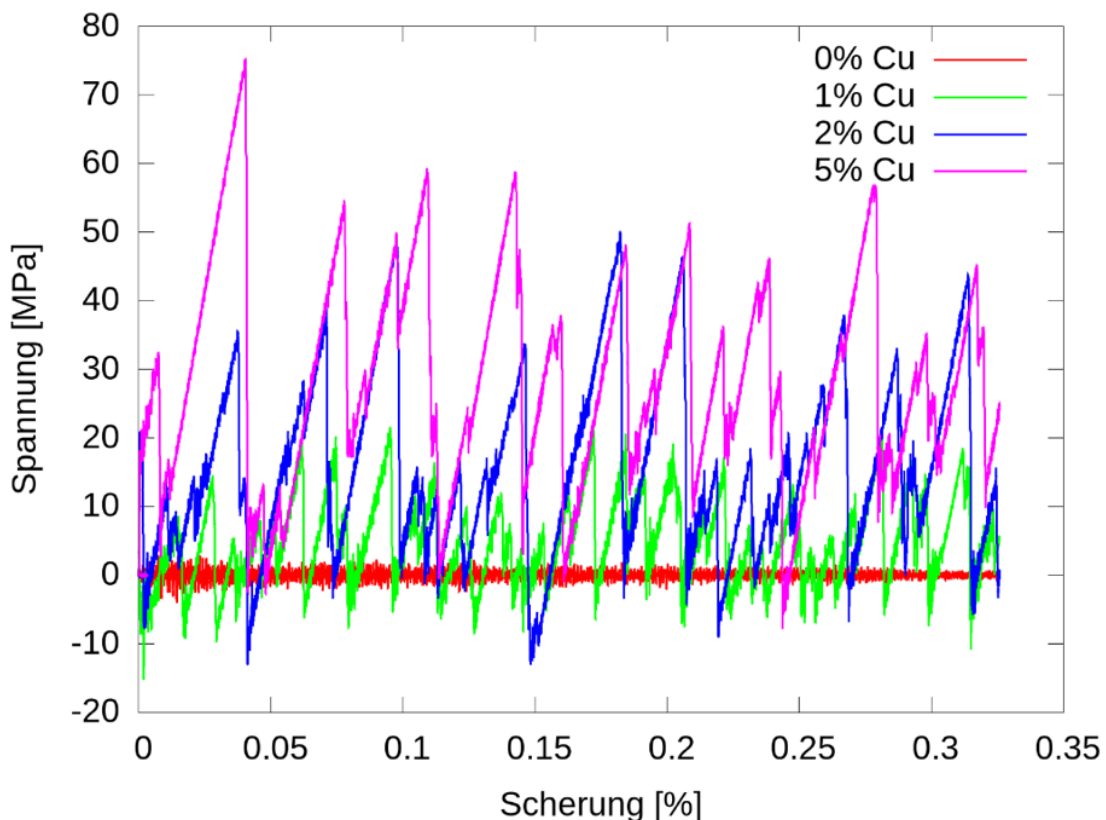


Abbildung 46: Spannungs-Dehnungs-Kurven für die Scherung des Aluminiumsystems mit variierendem Anteil an zulegiertem Kupfer bei 1 Kelvin. Die Schubspannung ist in MPa über der Dehnung in Prozent aufgetragen.

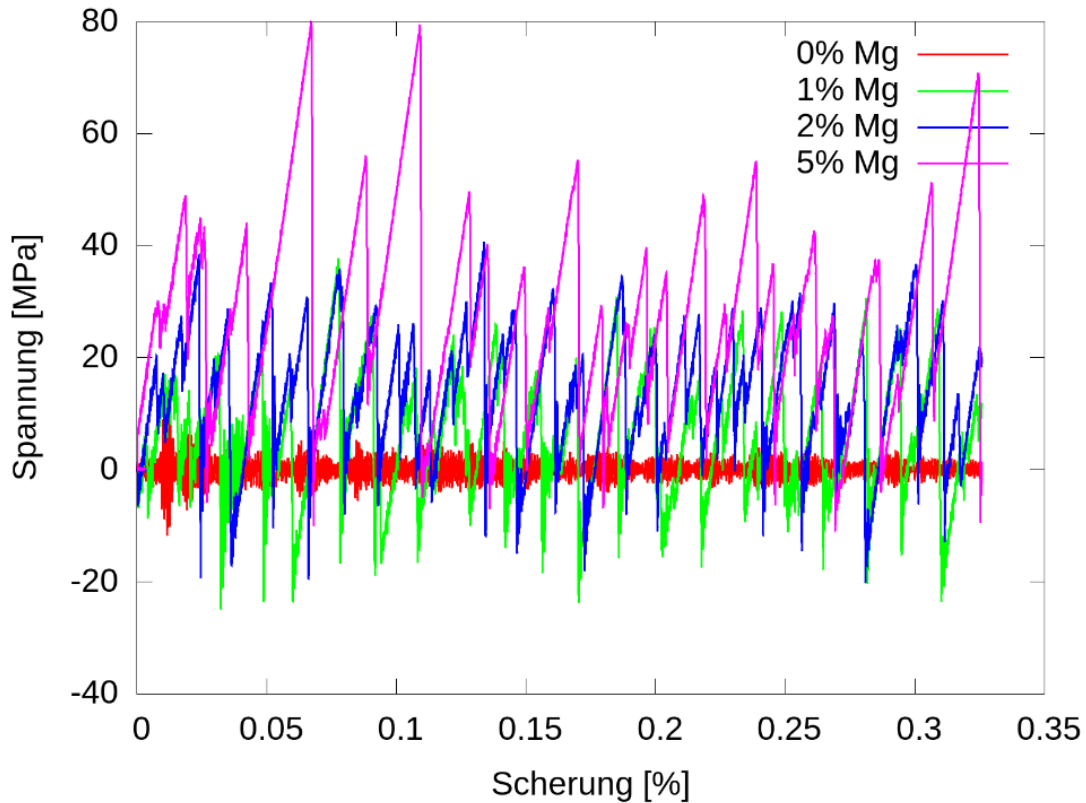


Abbildung 47: Spannungs-Dehnungs-Kurven für die Scherung des Aluminiumsystems mit variierendem Anteil an zulegiertem Magnesium bei 1 Kelvin. Die Schubspannung ist in MPa über der Dehnung in Prozent aufgetragen.
 Tabelle 3: Werte der maximalen Schubspannung [MPa] der Scherversuche für vier verschiedene Kupferkonzentrationen bei sieben unterschiedlichen Temperaturen

Cu	0 %	1 %	2 %	5 %
1 K	3,0	21,6	50,1	75,2
100 K	4,9	22,9	47,8	65,4
200 K	6,3	20,9	44,2	60,7
300 K	8,1	20,4	38,8	51,6
400 K	9,9	18,7	36,9	41,8
500 K	10,3	21,1	21,9	35,9
600 K	11,7	20,5	21,2	31,4

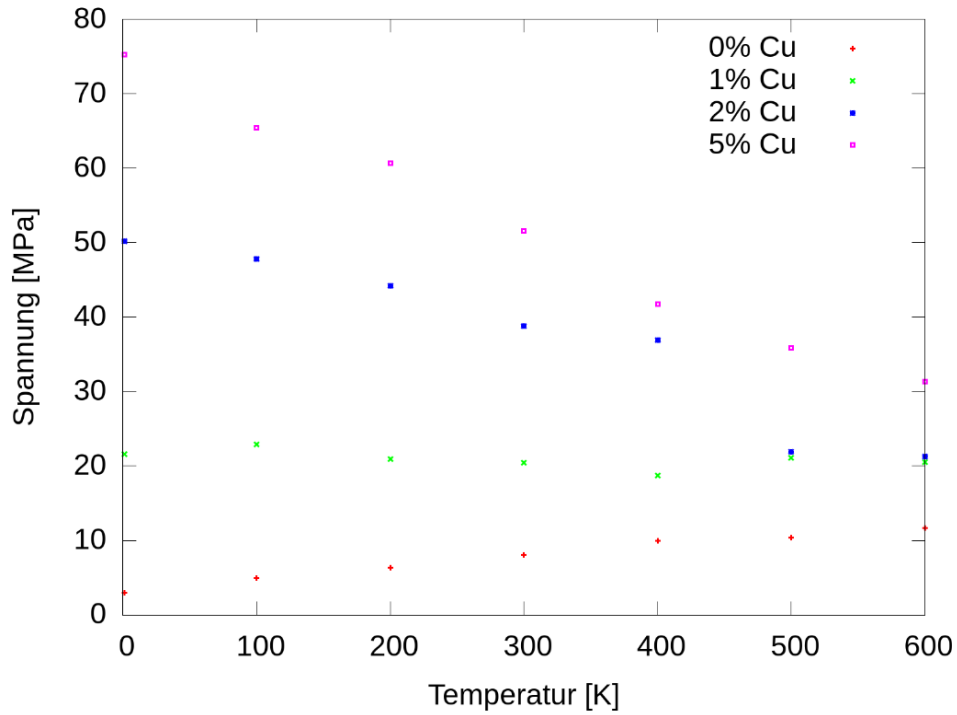


Abbildung 48 Graphische Darstellung der Ergebnisse aus Tabelle 3

Tabelle 4: Werte der maximalen Schubspannung [MPa] der Scherversuche für vier verschiedene Magnesiumkonzentrationen bei sieben unterschiedlichen Temperaturen

Mg	0 %	1 %	2 %	5 %
1 K	11,4	37,8	40,7	79,8
100 K	11,3	25,9	28,7	63,5
200 K	8,9	20,1	25,8	50,7
300 K	9,6	23,0	23,1	40,0
400 K	13,3	22,6	30,1	41,3
500 K	13,1	24,8	29,9	31,8
600 K	15,2	25,5	29,3	30,9

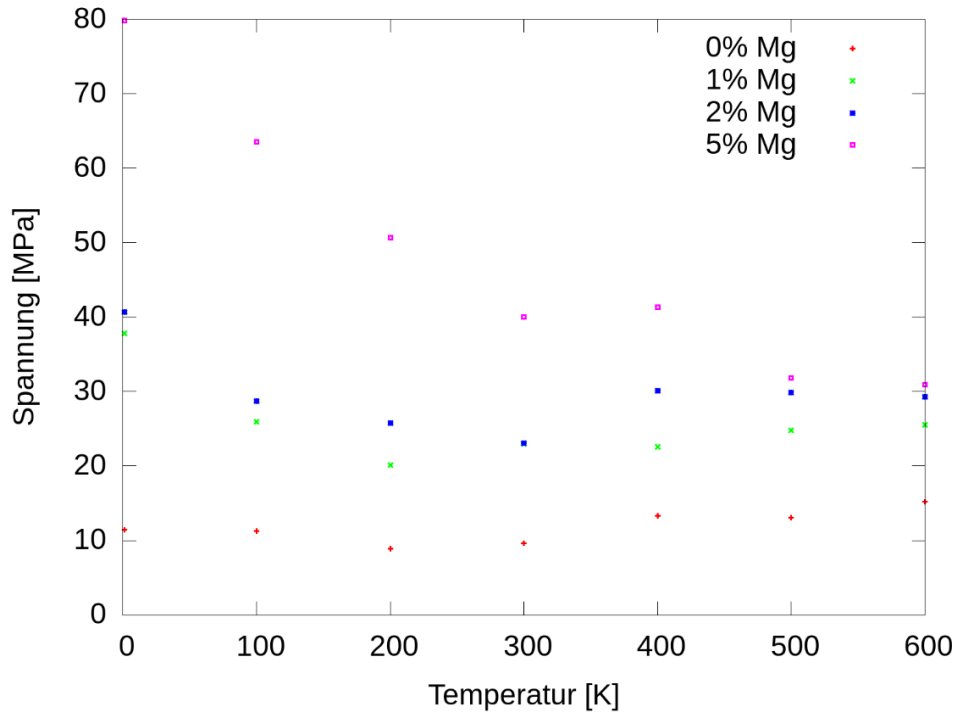


Abbildung 49: Graphische Darstellung der Ergebnisse aus Tabelle 4. Maximalspannung über der Temperatur für verschiedene Magnesiumkonzentrationen

9.3.4 GP-Zonen

In den vorangegangenen Abschnitten wurde die Hindernisstärke von gelösten Fremdatomen analysiert. Im Gegensatz hierzu sollen nun geordnete Strukturen in Form von Guinier-Preston-Zonen untersucht werden. Diese scheibchenförmige Struktur mit einer Dicke von nur einer Atomlage für die GP-I-Zone ist Teil der Ausscheidungssequenz während der thermischen Alterung von Aluminiumlegierungen. Aus der gesättigten Struktur der gelösten Atome formen sich durch diffusive Prozesse diese scheibchenförmigen Ausscheidungen, welche auf $\{100\}$ -Ebenen der Aluminiummatrix liegen. Weitere thermische Alterung führt zu den GP-II-Zonen, welche aus mehreren GP-I-Zonen mit vergrößertem Durchmesser und einigen Lagen Aluminium dazwischen bestehen. Als Endstruktur der Alterung existieren die größeren, teilweise kohärenten, scheibchenförmigen Θ' - und die inkohärente kugelförmige Θ -Phasen, welche hier nicht weiter untersucht wurden, da bereits die Simulation der Ausscheidung der Θ' -Phase, mit ihrer Ausscheidungsgröße von typischerweise circa 400 nm [88], in ihrer sie umgebenden Matrix den Anwendungsbereich der Molekulardynamik übersteigt.

GP-I

Die GP-I-Zone wird entlang der $\{100\}$ -Ebene in den $18 \times 18 \times 110 \text{ nm}^3$ Aluminiumquader eingebracht, so dass sich zunächst der Durchmesser auf der Gleitebene der eingebrachten Versetzung befindet (vgl. Abbildung 50). In mehreren Simulationen werden die drei möglichen Ebenen (100), (010) und (001) als Orientierung der GP-I-Zonen modelliert. Während die Normalenvektoren der (100)- und (010)-Ebenen äquivalent in Relation zum Burgersvektor der Versetzung stehen, nämlich unter einem Winkel von 60° , steht der Normalenvektor der GP-I-Zone auf der (001)-Ebene senkrecht dazu. Die GP-I-Zonen haben einen Durchmesser von 13 Nanometern. Die Scherrichtung ist für unterschiedliche Simulationen einmal in die positive und einmal in die negative x-Richtung gewählt,

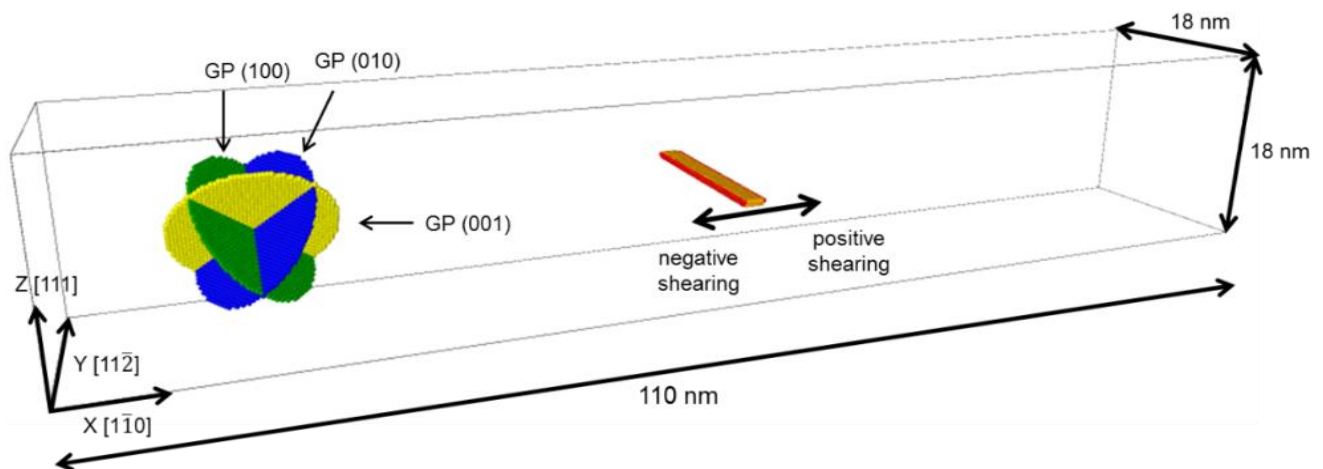


Abbildung 50: Darstellung der drei möglichen Orientierungen vom Typ $\{100\}$ der GP-I-Zone in der Aluminiummatrix. Der Durchmesser der GP-I-Zonen beträgt 13 nm . Zwei Shockley-Partialversetzungen sind in der Mitte in das System eingebracht, sie liegen $1,9 \text{ nm}$ auseinander und sind durch einen Stapelfehler getrennt.

da im Gegensatz zum zufällig verteilten Kupfer die Asymmetrie des Systems einen Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben kann. Die Asymmetrie entsteht durch das Fehlen der zwei Halbebenen in der oberen Hälfte des Simulationsquaders, welche beim Einbringen der Versetzung entfernt werden. Der anfängliche Abstand der Versetzung zur GP-I-Zone ist mit 6 nm ausreichend groß gewählt, um eine Anziehung oder Abstoßung ohne äußere Kräfte zu verhindern. Periodische Randbedingungen in X- und Y-Richtung werden aufgeprägt, so dass die Versetzung mehrere Durchläufe durch das System vollziehen kann.

(010)- und (100)-GP-Zonen

Zunächst soll die Interaktion der Versetzung mit einer GP-I-Zone untersucht werden, bei welcher der Winkel zwischen Burgersvektor und Normalenvektor 60° beträgt, hierbei wird mit der GP-I-Zone in der (010)-Ebene begonnen. Mit Beginn der Scherung bewegt sich die Versetzung unter Aufbringung der Peierls-Spannung auf die GP-I-Zone zu (vgl. Abbildung 51). Diese Bewegung hält im Bereich einer Dehnung zwischen 0,0 und 0,3 % an. Bei der Annäherung an die

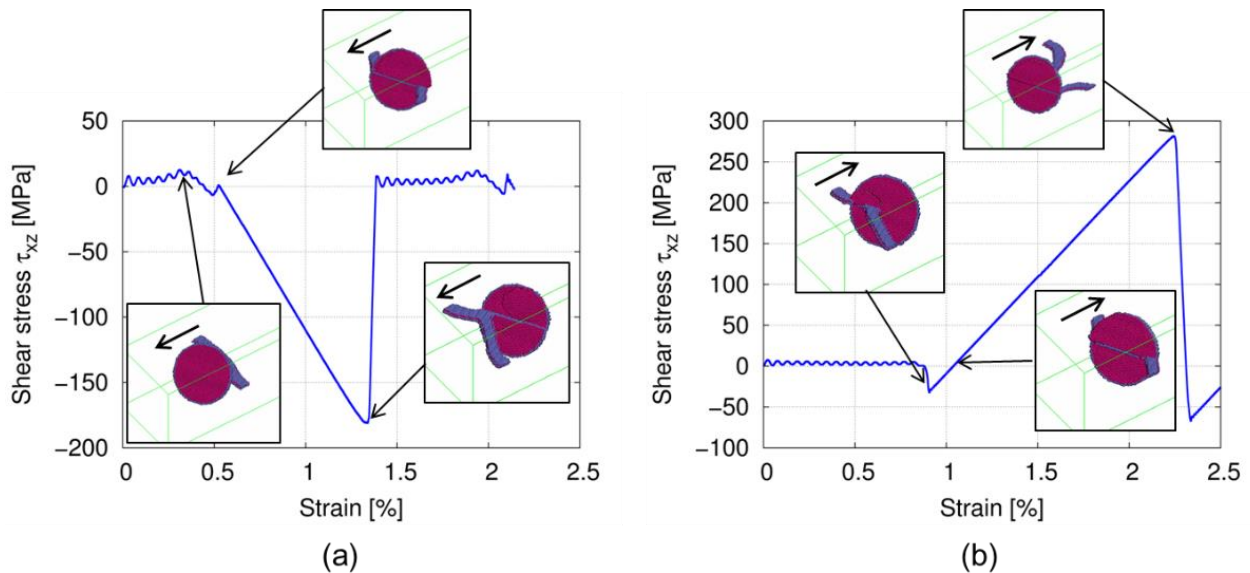


Abbildung 51: Spannungs-Dehnungs-Diagramm der Aluminiummatrix mit (010)-GP-I-Zone bei der Interaktion mit der Versetzung. Abgebildet sind die verschiedenen globalen Spannungszustände des Systems bebildert mit den entsprechenden Momentaufnahmen der mit der GP-I-Zone interagierenden Versetzung. Links für die negative und rechts für die positive Scherrichtung.

GP-I-Zone wird bei einer Dehnung von 0,3 - 0,4 % die Versetzung zunächst abgestoßen. Dies führt zu einer Erhöhung der Peierls-Spannung um etwa 5-10 MPa. Durch die fortschreitende Zunahme der äußeren Kraft durch die Verschiebung der Atome in x-Richtung baut sich die Spannung bis zu einer Dehnung von 1,3 % weiter auf, bis in einem ersten Schritt die führende Partialversetzung die Kupferscheibe schneidet. Die Spannungsspitze wird bei 1,3 % Dehnung mit einer Spannung von 175 MPa erreicht. Dieser einzelne sehr hohe Peak deutet auf ein simultanes Lösen beider Partialversetzungen von der GP-I-Zone hin. Dies wird ebenso in der Momentaufnahme zu diesem Zeitpunkt bestätigt.

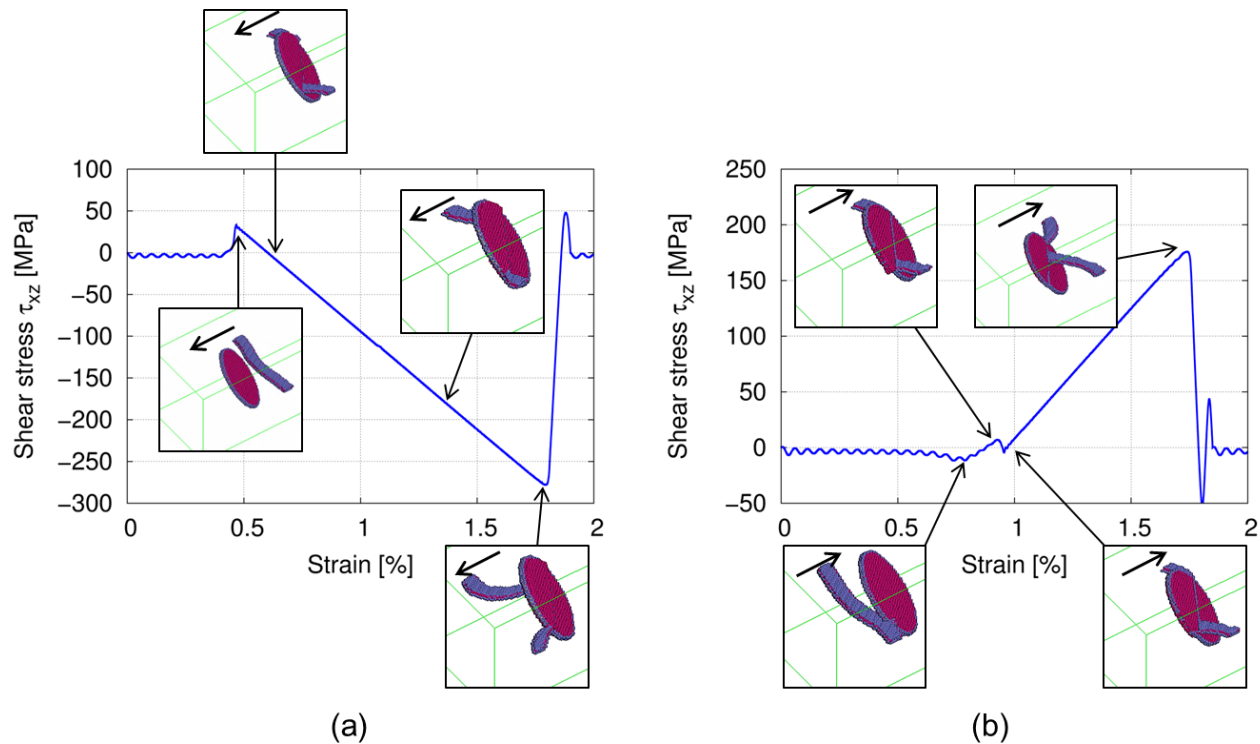


Abbildung 52: Spannungs-Dehnungs-Diagramm der Aluminiummatrix mit (100)-GP-I-Zone bei der Interaktion mit der Versetzung. Abgebildet sind die verschiedenen globalen Spannungszustände des Systems bebildert mit den entsprechenden Momentaufnahmen der mit der GP Zone interagierenden Versetzung. Links für die negative Scherrichtung, rechts für die positive.

Für die entgegengesetzte Scherrichtung zeigt sich ein etwas verändertes Bild: Der zuvor repulsive Effekt beim Annähern der Versetzung an die GP-I-Zone wird zum attraktiven. Die Versetzung krümmt sich der GP-I-Zone entgegen unter einer Reduktion der Spannung um 30 MPa bei einer Dehnung um 0,9 %. Die Schubsspannung erhöht sich in diesem Fall bis auf 275 MPa bevor sich die Versetzung von der GP-I-Zone lösen kann.

Für die GP-Zone in der (100)-Ausrichtung zeigt sich dasselbe Bild, jedoch mit vertauschten Scherrichtungen, so dass die linke Seite in Abbildung 52 mit der rechten Seite von Abbildung 51 übereinstimmt. Dies lässt die Schlussfolgerung zu, dass die attraktive Wirkung der GP-I-Zone dann auftritt, wenn sie im Bereich geringerer Dichte in die Richtung der Versetzungsbewegung geneigt ist. Die geringere Dichte beruht darauf, dass die Versetzung durch das Entfernen zweier Halbebenen erzeugt wird, welche dadurch in der oberen Hälfte des Modellsystems fehlen. Die vollzogene Streckung des oberen Teilsystems führt dort zu einer Vergrößerung des mittleren Gitterabstandes

der Aluminiumatome. Die eingebrachte GP-I-Zone besteht wie zuvor bereits beschrieben aus Kupfer-Atomen. Kupfer-Atome haben eine Gitterkonstante von $3,61 \text{ \AA}$, so dass sich beim Platzieren auf Aluminium-Gitterplätzen mit einer Gitterkonstante von $4,05 \text{ \AA}$ ein negativer hydrostatischer Druck um die GP-I-Zone ausbildet. Dieser Druck wird im weniger dichten Teilsystem durch die vergrößerte mittlere Gitterkonstante weiter verstärkt. Das resultierende stärkere Spannungsfeld bildet für die Versetzung ein stärkeres Hindernis, weshalb eine höhere Schubspannung für die weitere Propagation der Versetzung notwendig ist.

(001)-GP-I-Zone

Für die (001)-GP-Zone, für welche der Normalenvektor senkrecht zum Burgersvektor der Versetzung steht, verändert sich der Spannungsverlauf während der Scherung. Dieser Verlauf so wie die einzelnen Momentaufnahmen während des Schneideprozesses sind in Abbildung 53 dargestellt. Zunächst fällt auf, dass die Hindernisstärke mit 60 MPa, dieser so orientierten Versetzung, geringer ausfällt, als bei den zuvor beschriebenen unterschiedlich orientierten GP-I-Zonen. Auch unterscheidet sich der Ablauf des Schneideprozesses selbst. Bei dieser vorliegenden Konstellation der Versetzung und der GP-I-Zone verhalten sich die Seiten links beziehungsweise rechts der GP-I-Zone in Laufrichtung der Versetzung unterschiedlich. Die eine Seite der Versetzung wird angezogen während die andere Seite abgestoßen wird. Dies geschieht äquivalent zur Beobachtung der anders orientierten GP-I-Zonen, so dass die Seite der GP-I-Zone anziehend auf die Versetzung wirkt, welche in dem dichteren Teilsystem sich weiter der Versetzung entgegen neigt, somit einen geringeren Winkel mit ihr einschließt. Diese Attraktion, bzw. Repulsion der anderen Seite ist unabhängig von der Scherrichtung. In den Momentaufnahmen zeigt sich dies ebenfalls dadurch, dass die linke obere Hälfte des Versetzungs-Stapelfehlersystems der unteren rechten Hälfte in Versetzungsbewegungsrichtung vorausseilt. In der Phase in der alle Versetzungshälften der GP-I-Zone entlangwandern, ist die Scherspannung konstant bei 45 MPa. Das Loslösen selbst gestaltet sich ebenso verschieden von dem der anders orientierten GP-I-Zonen. Beide Partialversetzungen lösen sich nacheinander, was sich in einem doppelten Peak von 60 MPa zeigt. Die geringere Hindernisstärke der (001)-GP-I-Zone im Vergleich zu der (100)- und (010)-GP-I-Zone liegt darin begründet, dass sich die Versetzung nicht frontal der (001)-GP-Zone nähert und somit lediglich der einatomige Querschnitt der Bewegung als Hindernis entgegen steht.

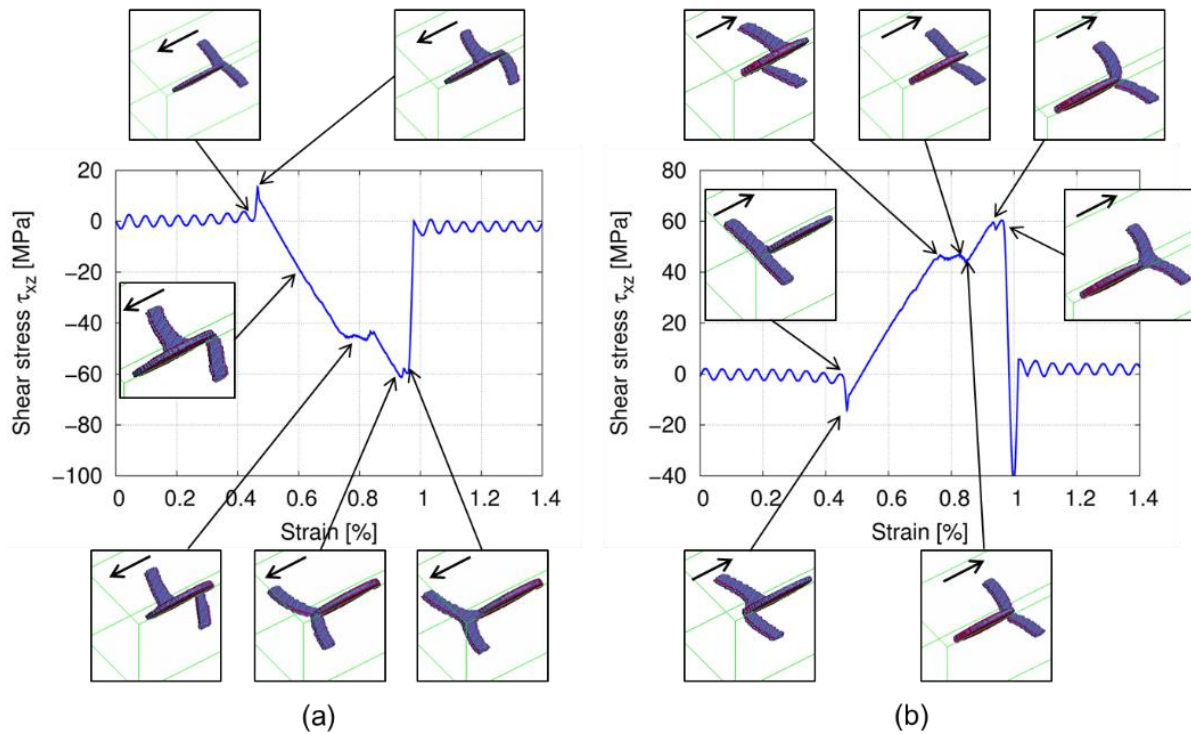


Abbildung 53: Spannungs-Dehnungs-Diagramm der Aluminiummatrix mit (001)-GP-I-Zone bei der Interaktion mit der Versetzung. Abgebildet sind die verschiedenen globalen Spannungszustände des Systems bebildert mit den entsprechenden Momentaufnahmen der mit der GP-I-Zone interagierenden Versetzung. Links für die negative und rechts für die positive Scherrichtung.

GP-I-Zonen nach einem Schneideprozess durch eine Versetzung

Nachdem der Spannungsverlauf beim Schneiden der GP-Zonen durch eine Versetzung in den vorangegangenen Abschnitten analysiert wurde, beschäftigt sich dieser Abschnitt mit der Gestalt der GP-I-Zonen, nachdem sie durch die Versetzung geschnitten wurde. In Abbildung 54 ist ein Repräsentant einer GP-I-Zone in (010)- oder (100)-Orientierung dargestellt. Die beiden verschieden orientierten GP-I-Zonen zeigen, wie auch bei der Schersimulation selbst, keine Unterschiede in ihrer Gestalt nach dem geschnitten werden. Die Versetzung sieht auf ihrem Weg entlang der Gleitebene eine einzelne Reihe von Kupferatomen. Durch die Versetzung werden die Kupferatome der GP-I-Zone, sowie alle anderen Aluminiummatrixatom oberhalb der Gleitebene der Versetzung um einen Burgersvektor entgegen der Bewegungsrichtung der Versetzung verschoben. Dies ist in Abbildung 54 (b) und (c) für die beiden Scherrichtungen dargestellt.

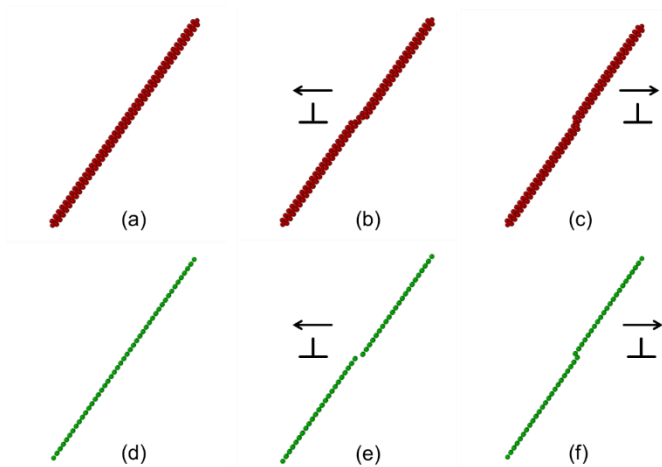


Abbildung 54: Repräsentant einer (010)- und (100)-GP-I-Zone vor (a, d) und nachdem (b, e) und (c, f) sie von einer Versetzung geschnitten wurde. In der oberen Reihe werden die Atome dargestellt, die bei einer CNA-Untersuchung nicht einer fcc-Struktur zugeordnet werden. In der unteren Reihe sind die Kupferatome abgebildet. Für (b, e) war die Scherrichtung negativ und für (c, f) positiv.

Der Fall für die (001)-orientierte GP-I-Zone stellt sich anders als bei den (010)- oder (100)-GP-I-Zonen dar. Der Blick auf die obere Reihe der Abbildung 55 lässt beim Vergleich mit Abbildung 54 zunächst vermuten, dass der Ablauf des Schneidens der (001)-GP-I-Zone mit dem der (010)- oder (100)-GP-I-Zonen vergleichbar ist. Die CNA-Analyse ergibt das Bild, dass die obere Hälfte der Scheibe um einen Burgersvektor entgegen der Bewegungsrichtung der Versetzung verschoben ist (vgl. Abbildung 55 (b)). Werden jedoch die Positionen der Kupferatome betrachtet, so zeigt sich, dass die obere Hälfte der GP-I-Zone zwar homogen deformiert, jedoch nicht um einen vollständigen Burgersvektor verschoben ist. Dieser Effekt lässt sich durch den höheren E-Modul von Kupfer (140 GPa) im Vergleich zu Aluminium (70 GPa) erklären. Da es keine Anzeichen für einen Umgehungsmechanismus gibt, jedoch die Kupferatome keine vollendete Scherung darstellen, sind detailliertere Untersuchungen notwendig. In Abbildung 56 wird die Verschiebung der durch die CNA-Analyse detektierten Atome in x-Richtung abgebildet. In (a) sind die Aluminiumatome zu erkennen, welche sich um einen Burgersvektor entgegen der Versetzungsbewegungsrichtung einen Burgersvektor entgegen der Versetzungsbewegungsrichtung verschoben haben. Die Versetzung ist homogen und ist homogen und uniform. In (b) ist die Verschiebung der Kupferatome farblich gekennzeichnet. Hierbei zeigt sich ein uneinheitliches Bild, wobei der Großteil der Atome im Inneren

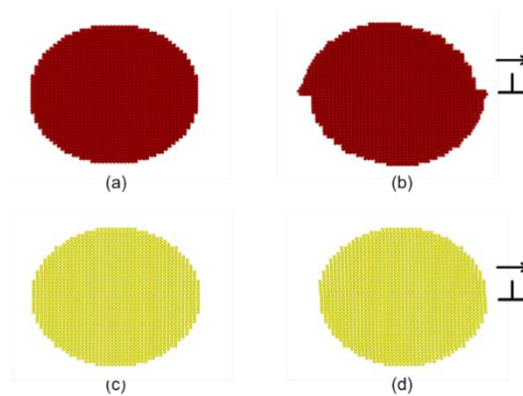


Abbildung 55: Darstellung der (001)-GP-I-Zone vor (a, c) und nach (b, d) der Scherung. In der oberen Reihe werden alle Atome dargestellt, die bei einer CNA-Untersuchung nicht einer fcc-Struktur zugeordnet werden können. In der unteren Reihe sind alle Kupferatome abgebildet.

der GP-I-Zone sich um einen halben Burgersvektor verschoben hat (In der Abbildung der grüne Bereich). Am linken unteren Rand befindet sich ein Bereich von Kupferatomen, welche ihre Position nicht verändert haben. Lediglich rechts oben folgte eine mit den ortsfesten Atomen vergleichbare Anzahl an Kupferatomen der Verschiebung um einen Burgersvektor nach links. Der Übergang zwischen den verschiedenen Bereichen verläuft kontinuierlich. Die Darstellung in (c) entspricht der Situation nachdem nach dem Loslösen der Versetzung weitergeschert wurde, bis durch die periodischen Randbedingungen die Versetzung ein weiteres Mal auf die GP-I-Zone trifft und diese durchläuft. Hierbei zeigt die GP-I-Zone eine relativ homogene Verschiebung. Die Farbkodierung wurde in der Form angepasst, dass der Maximalwert nun zwei Burgersvektoren entspricht.

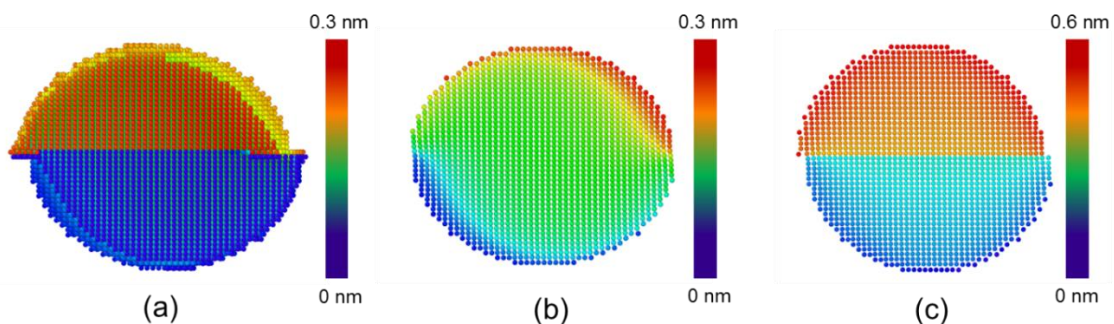


Abbildung 56: Farbliche Visualisierung der Verschiebungsweite einzelner Atome in Relation zur Position vor dem Schneiden durch die Versetzung: In (a) sind die Atome der die (001)-GP-I-Zone umgebenden Aluminiummatrix dargestellt, in (b) und (c) dagegen die die GP-I-Zone bildenden Kupferatome, in (b) nach dem erstmaligen Schneiden und in (c) nach einem weiteren Schnitt durch die Versetzung. Blau zeigt keine Verschiebung an, rot die Verschiebung um einen Burgersvektor.

Einfluss der Positionierung der GP-I-Zone

In den vorangegangenen Untersuchungen wurde der Spezialfall untersucht, bei welchem der Durchmesser der GP-I-Zone in der Gleitebene der Versetzung liegt. In der Realität werden jedoch darüber hinaus andere relative Anordnungen auftreten, bei welchen die Versetzungen an unterschiedlichen Positionen auf die GP-I-Zone treffen. Dieser Tatsache soll mit den folgenden Untersuchungen gerecht werden, bei welchen die GP-I-Zone senkrecht zur Gleitebene verschoben wird. Die Verschiebung ist derart, dass die Versetzung die GP-I-Zone in der Höhe 1/3, 2/3 und 3/3 schneidet. Wobei bei 3/3 wiederum zu unterscheiden ist zwischen einem Schneiden des letzten Kupferatoms der GP-I-Zone und einer Atomlage höher, bei welchem die Gleitebene genau zwischen dem letzten Kupferatom und erstem Aluminiummatrixatom liegt. Im letzten Fall wird dies als Streifen an der GP-I-Zone bezeichnet. Um die Verschiebung in derselben Simulationsbox wie bisher verwendet zu ermöglichen, wird der Durchmesser der GP-I-Zone auf 6,5 nm halbiert. Auf diese Weise kann gleichzeitig zum Einfluss der Höhe der GP-Zone der Einfluss der GP-I-Zonen-größe auf die GP-I-Widerstandstärke betrachtet werden.

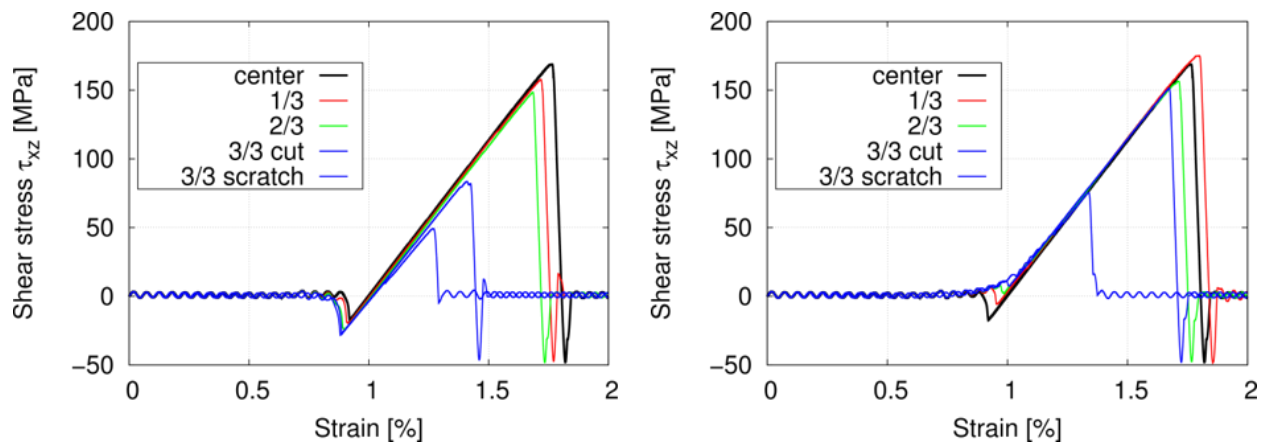


Abbildung 57: Entwicklung der globalen Schubspannung beim Schneiden der Versetzung mit der GP-I-Zone für verschiedene Positionierungen der GP-I-Zone relativ zur Gleitebene der Versetzung. Auf der linken Seite ist die negative und auf der rechten Seite die positive Scherrichtung dargestellt.

In Abbildung 57 sind die Spannungs-Dehnungs-Verläufe der Schubspannung für die verschiedenen Simulationen dargestellt. Die Scherrichtung im linken Teilbild ist negativ im rechten positiv. Zunächst zeigt sich in beiden unterschiedenen Scherrichtungen eine Reduzierung der Ablösespannung bei Vergrößerung des Abstandes des Durchmessers von der Gleitebene. Da die Ablösespannung von der Ausscheidung im Vergleich zur für die Propagation der Versetzung in der reinen

Aluminiummatrix notwendigen Peierlsspannung deutlich größer ist, handelt es sich hierbei um die kritische Schubspannung (CRSS = critical resolved shear stress). Wenn die Versetzung die GP-I-Zone an ihrer breitesten Stelle trifft ergibt sich eine Ablösespannung von 175 MPa im Vergleich zu den 275 MPa aus Abbildung 51, verursacht durch die halbierte Größe des Durchmessers.

Diese Abhängigkeit der Ablösespannung von dem Durchmesser der GP-I-Zone wurde bereits in [89] untersucht. Hierbei wurde eine Wurzelabhängigkeit festgestellt, welche in guter Übereinstimmung mit den hier gefundenen Werten ist. Abbildung 58 zeigt einen Überblick über die Ablösespannung bei den neun unterschiedlichen Verschiebungen der GP-I-Zone. Die Datenpunkte (Kreise in Abbildung 58) zeigen ein asymmetrisches Verhalten der Ablösespannung bezüglich der Verschieberichtung der GP-I-Zone. Zum Verständnis dieses Effektes wird die Ursache für die Höhe der Ablösespannung betrachtet. Ein großer Beitrag resultiert aus dem Unterschied der Elastizitätsmoduln, welcher für Kupfer wie zuvor beschrieben mit 140 GPa circa doppelt so groß ist wie jener des Aluminiums. Dies hat zur Folge, dass die Ablösespannung direkt mit der Ausscheidungsgröße, also der Anzahl an Kupfer-Atomen in der Gleitebene, in welcher sich die Versetzung bewegt, korreliert. Ein weiterer Anteil an der Höhe der Ablösespannung ist durch die Interaktion der Versetzung mit, durch die Gitterverzerrung verursachte, systeminternen Spannungen, die Eigenspannung, begründet. Die Kupferatome besetzen Aluminiummatrixplätze wodurch der Kupfer-Kupfer-Bindungsabstand auf den von Aluminium (circa 0,29 nm) gestreckt wird. Die Bindungen der benachbarten Aluminiumatome werden ebenfalls etwas elongiert, um die Differenz zu den Kupferatomen zu kompensieren. Auf diese Weise entsteht eine negative hydrostatische Spannung um die GP-I-Zone herum, also hydrostatischer Druck in der umgebenden Aluminiummatrix. Diese wechselwirkt mit dem Spannungsdipol der Versetzung, welcher aufgrund der höheren Dichte unterhalb und der geringeren Dichte oberhalb der Gleitebene der Versetzung entsteht. Dieses Spannungsfeld ist ebenso ursächlich für die notwendige erhöhte Spannung beim Streifen der GP-I-Zone, bei welchem keine Kupferatome in der Gleitebene der Versetzung liegen. Hierbei wechselwirkt die Versetzung ausschließlich mit dem von der GP-I-Zone verursachten Spannungsfeld, da in der Gleitebene keine Kupferatome vorliegen, welche die Versetzung direkt behindern könnten. um die GP-I-Zone herum. Diese wechselwirkt mit dem Spannungsdipol der Versetzung, welcher aufgrund der höheren Dichte unterhalb und der geringeren Dichte oberhalb der Gleitebene der Versetzung entsteht. Dieses Spannungsfeld ist ebenso ursächlich für die notwendige erhöhte Spannung beim

Streifen der GP-I-Zone. Hierbei wechselwirkt die Versetzung ausschließlich mit dem von der GP-I-Zone verursachten Spannungsfeld, wodurch die notwendige Ablösespannung geringer ausfällt, als beim Überwinden der Ausscheidung mit Kupferatomen in der Gleitebene der Versetzung.

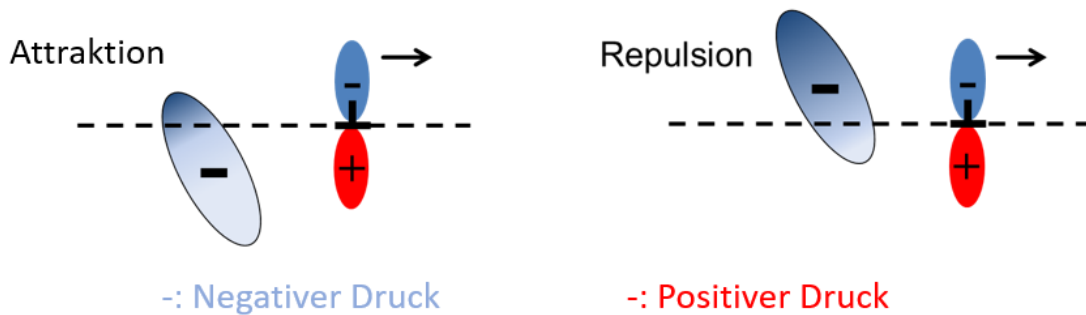
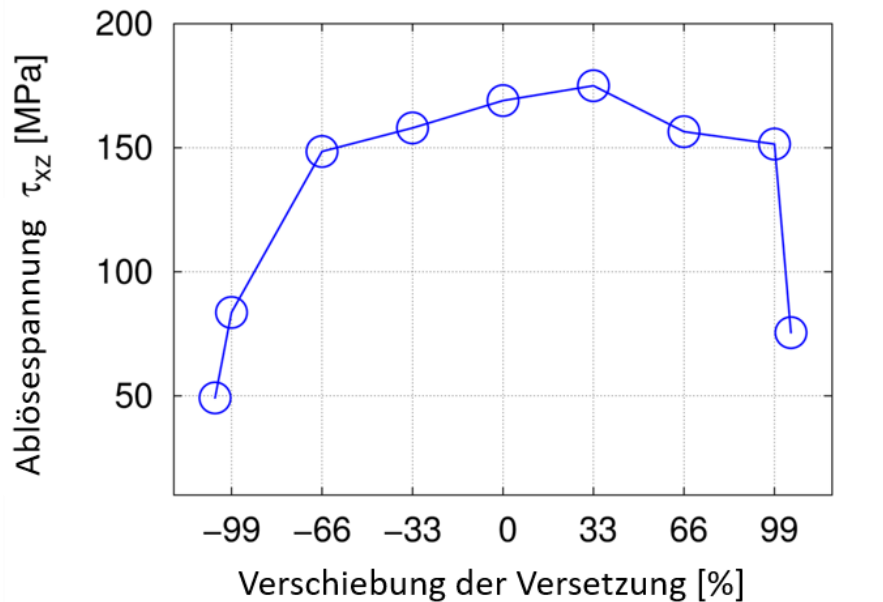


Abbildung 58: Die Ablösespannung der Versetzung von der in der (010) Ebene orientierten GP-I-Zone wird in der oberen Grafik als Funktion der Verschiebung der GP-I-Zone aus der Gleitebene heraus dargestellt. Im unteren Teil sind schematisch die Spannungsfelder der Versetzung sowie der GP-I-Zone für den Versatz nach oben, bzw. nach unten gezeigt [85].

GP-II-Zonen

Als weitere Alterungsstufe in kupferlegiertem Aluminium bilden sich, im zeitlichen Verlauf auf die GP-I-Zonen folgend, die GP-II-Zonen. Im Wesentlichen bestehen die GP-II-Zonen aus mehreren hintereinander angeordneten GP-I-Zonen, wobei sich zwischen den die GP-II-Zonen bildenden GP-I-Zonen jeweils drei Lagen Aluminiumatome befinden [17]. Die Durchmesser der Scheibchen, welche die GP-II-Zone aufbauen, ist im Vergleich zu denen einer GP-I-Zone ebenso vergrößert auf bis zu 150 nm. Zur besseren Vergleichbarkeit der Ergebnisse der Simulationen zu den GP-II-Zonen mit denen der GP-I-Zonen werden in den hier dargestellten Untersuchungen zu den GP-II-Zonen die Scheibchen der bereits zuvor verwendeten Dimensionierung von 6,5 nm Durchmesser verwendet. Ebenso wie im Fall der GP-I-Zonen bestehen auch im Fall der GP-II-Zonen drei sich unterscheidende mögliche Orientierungen bezüglich der sich auf der Gleitebene (110) bewegenden Versetzung. Für den Fall der (100)- oder (010)-orientierten GP-II-Zone wechselwirkt die Versetzung sukzessive mit den verschiedenen Kupferscheibchen (vgl. Abbildung 59 (a) und (c)). Im Fall der (001)-orientierten GP-II-Zone trifft die Versetzung die parallel liegenden GP-I-Zonen gleichzeitig (vgl. Abbildung 59 (b) und (d)). Somit unterscheiden sich auch die Wechselwirkungsmechanismen.

Ziel der Untersuchungen hier ist es, die Ablösespannung im fortlaufenden Alterungsprozess von der GP-I-Zone ausgehend zur GP-II-Zone zu simulieren und auszuwerten. Hierbei werden zunächst Simulationen von Systemen mit einer steigenden Anzahl an Scheibchen als Hindernis für die Versetzung betrachtet. Anschließend wird der Einfluss des Abstandes zwischen zwei die GP-II-Zone bildenden Scheibchen untersucht.

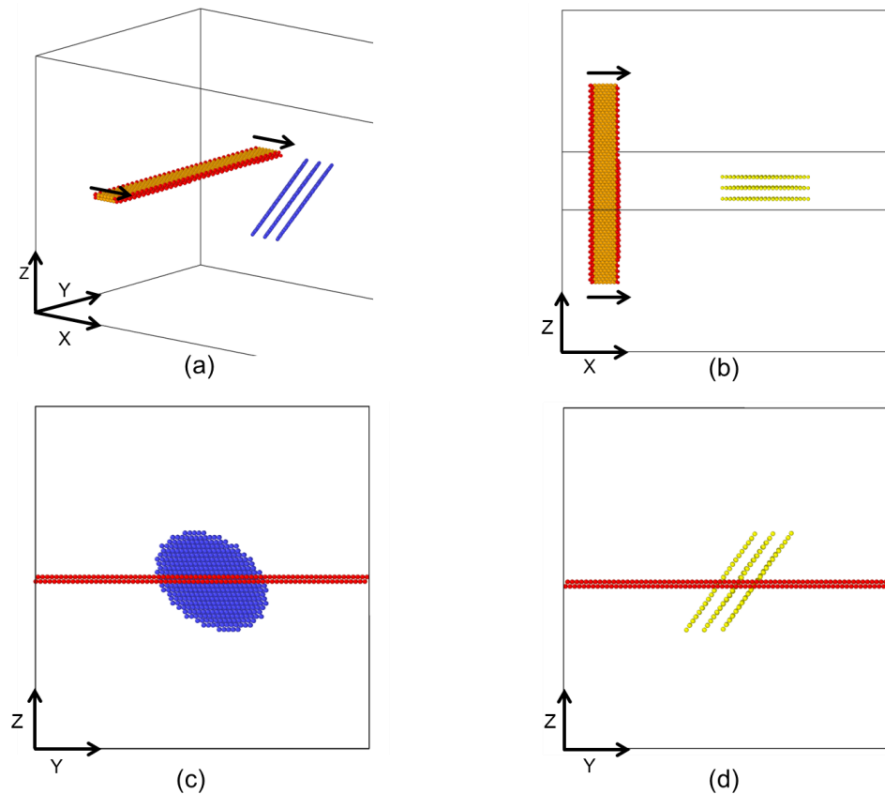


Abbildung 59: Die verschiedenen Anordnungsmöglichkeiten der GP-II-Zone in Relation zur Versetzungsebene sind hier dargestellt. Dabei ist die (010)-orientierte GP-II-Zonen durch die (100)-orientierte GP-II-Zone links (a) und (c) mit repräsentiert. Rechts in (b) und (d) zeigt sich die GP-II-Zone in (001)-Orientierung. Der Blickwinkel in der oberen Reihe (a) und (b) wurde so gewählt, dass die Versetzung so wie die drei individuellen Scheibchen der GP-II-Zone sichtbar sind. In der unteren Zeile (c) und (d) ist der Blick entlang der Gleitebene gerichtet, um zu verdeutlichen, wie die Kupferscheibchen der Versetzung entgegenstehen.

Es werden Schersimulationen an Konfigurationen mit 1, 2 und 3 Kupferscheibchen, welche die GP-II-Zone bilden, durchgeführt. Für ein Scheibchen ergibt sich der Verlauf entsprechend der blauen Kurve in Abbildung 60 (a), welche mit den Ergebnissen der schwarzen Kurve aus Abbildung 57 für die GP-I-Zone übereinstimmt. Die Ergänzung um eine weitere Scheibe lässt die Hindernisstärke des Zweischeibchensystems gegenüber dem Einscheibensystem der GP-I-Zone um 17,6 % auf 200 MPa ansteigen, was aus dem Verlauf der roten Kurve abzulesen ist. Die Erhöhung der Scheibchenzahl auf drei hat keine weitere verfestigende Wirkung. Tatsächlich liegt der Maximalwert der grünen Kurve mit 195 MPa sogar leicht unter dem der roten Kurve, was jedoch auf numerische Schwankungen zurückzuführen ist. Die grundsätzlich relativ gering ausfallende verfestigende Wirkung des Hindernisses bei der Durchführung von Zugversuchen mittels der im Vergleich zur GP-I-Zone in der GP-II-Zone zusätzlichen Kupferscheiben resultiert aus der Anordnung

in Relation zur Versetzung. Gemäß Abbildung 59 (c) stellt sich die GP-II-Zone weiterhin als eine Fläche an Kupferatomen dar. Die Schubspannung steigt unter der Scherung an bis diese erste Front durch die Versetzung überwunden werden kann; anstelle der vollständigen Ablösung und Weiterbewegen der Stufenversetzung fällt diese direkt in die nächste Scheibe, wobei die an das Material angelegte und lokal vorherrschende Spannung bereits nahezu ausreicht, um dieses zweite Kupferscheibchen ebenfalls zu überwinden.

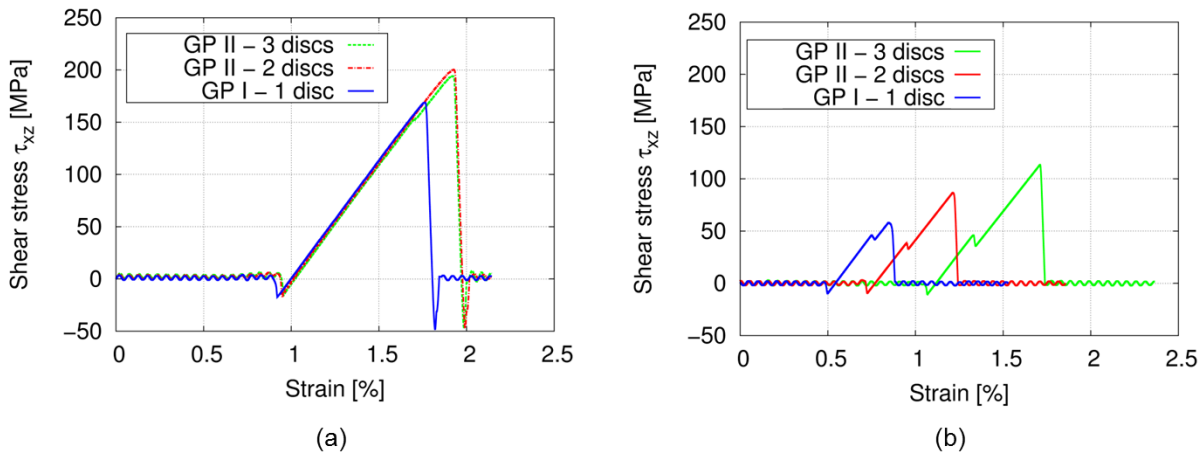


Abbildung 60: Die Spannungs-Dehnungs-Verläufe für Systeme mit zunehmender Anzahl an Kupferscheibchen ist hier dargestellt: In (a) für die (010)-orientierten GP-II-Zonen, wobei blau dem Ergebnis der GP-I-Zone entspricht. In (b) sind die Ergebnisse der selben Parameterstudie für die GP-II-Zonen in (001)-Orientierung abgebildet. Der initiale Abstand der Versetzung zur GP-II-Zone ist unterschiedlich, weshalb der Anstieg der Schubspannung bei verschiedenen Scherungen beginnt.

Für den Fall der (001)-orientierten GP-II-Zone ist die Änderung der Anordnung, welche sich der Versetzung entgegenstellt, beim Übergang von der GP-I- zur GP-II-Zone deutlicher auszumachen. Anstelle einer einzelnen Linie an Kupferatomen stellen sich nun drei parallel verlaufende Kupferlinien in den Bewegungsweg der Stufenversetzung innerhalb der Gleitebene. Dies ist insbesondere deshalb spannend, da in Abbildung 53 festgestellt wurde, dass sich die Versetzungssegmente verschieden schnell auf den unterschiedlichen Seiten der GP-I-Zone bewegen. Durch die nun vorliegende Anordnung wird die Versetzung gleich in vier Segmente unterteilt. Zuvor hat der langsamere Teil der Versetzung im Verlauf der anhaltenden Scherung weiter aufgeholt, so dass es bei einem Wert von circa 45 MPa zu einer Vereinigung der beiden Versetzungssegmente kommt, bevor sich die Versetzung bei 60 MPa von der GP-I-Zone löst (vgl. Abbildung 60 blaue Kurve bzw. Abbil-

dung 53). Diese lokale Spannungsspitze ist bei allen drei Spannungs-Dehnungs-Kurven zu erkennen. Die Ablösespannung erhöht sich von 60 MPa für ein Kupferscheibchen über 90 MPa für zwei, bis hin zu 110 MPa für drei Kupferscheibchen. Die relative Zunahme der Hindernisstärke ist für die (010)-orientierte GP-II-Zone deutlich ausgeprägter als die Zunahme bei den (100)- und (010)-orientierten GP-II-Zonen, da die Versetzung beim Auftreffen auf die Versetzung nicht mehr nur ein sondern zwei bzw. drei Kupferatome gleichzeitig in ihrem Weg „sieht“ (vgl. Abbildung 59 b) & d)).

Der Einfluss des Abstandes zwischen zwei Kupferscheiben innerhalb der GP-II-Zone wird dadurch untersucht, dass die Anzahl an Aluminiumlagen zwischen den Scheiben erhöht wird. Der aus Experimenten [17] bekannte Wert von drei Atomlagen an Aluminium-Atomen zwischen den die GP-II-Zonen formenden GP-I-Zonen, ist in der blauen Kurve in Abbildung 61 dargestellt. Weitere Konfigurationen beinhalten den Abstand von 10 Atomlagen Aluminium, was einem Abstand der Kupferscheiben von 2,2 nm entspricht, 21 Lagen entsprechen 4,5 nm und 33 Lagen entsprechen 6,8 nm Abstand. Bei den grundsätzlichen Anordnungen der (100)- und (010)-orientierten GP-II-Zonen könnte ein lokales Zwischenmaximum, ähnlich dem bei der (001)-orientierten GP-II-Zone, erwartet werden, wenn sich die Versetzung zwischen den beiden Scheiben befindet. Abbildung 59 zeigt jedoch, dass dies nicht der Fall ist. Dies ist mit der Stapelfehlerenergie von Aluminium und somit mit dem Abstand der beiden Partialversetzungen zu begründen: Der Abstand zweier

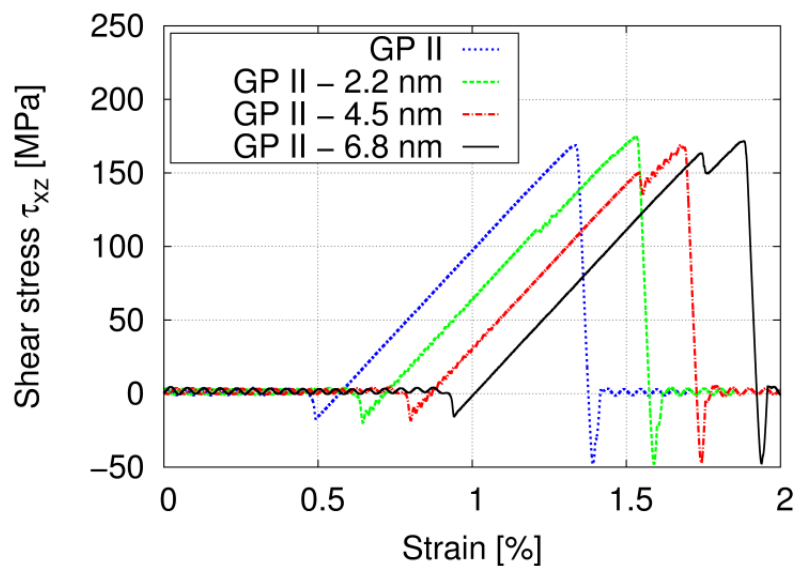


Abbildung 61: Spannungs-Dehnungs-Verläufe für die Studie bezüglich des Abstandes der Kupferscheibchen zueinander in einer (010)-orientierten GP-II-Zone (vgl. Abbildung 59 b) & d)).

Partialversetzungen in Aluminium beträgt 2,2 nm. Ein Blick auf Abbildung 61 bestätigt diese Vermutung. Bei der grünen Kurve zeigt sich weiterhin keine Unterbrechung des linearen Anstiegs. Erst ab circa der doppelten Stapelfehlerbreite (4,5 nm) zeigt sich in der roten Kurve ein kurzes Einbrechen der Spannung bei circa 150 MPa. Für den weiter erhöhten Abstand auf 6,8 nm führt sich dieser Effekt weiter fort, wobei sich die Höhe des Zwischenmaximums an das globale Maximum annähert. Dieser Verlauf unterstreicht die Tendenz dazu, die GP-II-Zone mit größerem Abstand als zwei einzelne aufeinanderfolgende GP-I-Zonen zu betrachten, da die Ablösung der Versetzung von der zuerst getroffenen und die Attraktion mit dem anschließend interagierenden Kupfer-Scheibchen der GP-II-Zone mit zunehmendem Abstand immer weniger überlappen. Der Schubspannungswert des globalen Maximums ist für alle Abstände gleich.

9.4 Nanozugversuch

In diesem Kapitel wird mit dem Zugversuch ein weiteres klassisches experimentelles Versuchsvorgehen in die nanoskopische Simulation überführt. Ziel des Zugversuches ist die Bestimmung von verschiedenen Werkstoffkennwerten. Von großem Interesse sind im Experiment wie in der Simulation vor allem die Zugfestigkeit, die Bruchdehnung sowie der Elastizitätsmodul der verschiedenen Aluminiumlegierungen. Als Probengeometrie wird bei den Simulationen der Zugversuche ein Quader verwendet. Dem atomistischen Modellsystem wird eine homogene, also eine gleichmäßige, Deformation aufgebracht. Die Details der Vorgehensweise bei der Nanozugsimulation werden im Folgenden beschrieben, bevor deren Ergebnisse präsentiert werden.

9.4.1 Aufbau der Simulation

Im Vorfeld der Simulation ist die Geometrie, in welcher das Material vorliegt, bestimmt. Diese wird vor Beginn der Simulation durch die entsprechende Aluminiumlegierung gefüllt. Bei hinreichend komplexen Strukturen, beispielsweise bei Vorliegen entsprechender Ausscheidungen oder wenn Kornstrukturen wie bei Polykristallen vorhanden sind, kann der Probenkörper wahlweise entweder ebenfalls vor oder während der Ausführung des Simulationsprogramms erstellt werden. Bei der Erstellung der Struktur vorab kann zusätzliche Software herangezogen werden, wie z.B. das für diesen Zweck selbst entwickelte Programm NanoSCULPT [39]. Die Entwicklung des Programms war unbedingt notwendig, da keine freie Software bekannt ist, welche die Erstellung von Polykristallen unterstützt, bei welchen sich innerhalb der Kristallkörner Guinier-Preston-Zonen

einbauen lassen. Bevor mit der Elongation der Struktur begonnen wird, wird vorbereitend noch eine energetische Minimierung durchgeführt, um eine ideale im Gleichgewicht befindliche Anfangsmodellstruktur zu erhalten (vgl. Kapitel 5.6.1). Für Simulationen die für endliche Temperaturen durchgeführt werden, werden den einzelnen Atomen im Anschluss an die energetische Minimierung Geschwindigkeiten zugeordnet. Diese Zuordnung der Geschwindigkeiten erfolgt in der Weise, dass die Geschwindigkeitsverteilung der Atome der einer Gaußverteilung entspricht. Dabei entspricht die mittlere kinetische Energie der Atome der thermischen Energie der einzustellenden Temperatur. Bei höheren Temperaturen erhöht sich der Gleichgewichtsabstand zwischen benachbarten Atomen, so dass die zuvor gefundene energetisch minimierte Anordnung für höhere Temperaturen nicht mehr einem Gleichgewichtszustand entspricht. Um den Atomen im System die Möglichkeit zu geben, einen der Temperatur entsprechenden Gleichgewichtszustand zu erreichen wird nach erfolgter Zuordnung der Temperatur eine NpT (vgl. Kanonisch-harmonisches Ensemble im Kapitel 5.6.4)-Simulation durchgeführt. Die somit erhaltene Atomkonfiguration ist druckfrei und im thermischen Gleichgewicht. Nachdem alle bisher durchgeführten Simulationen der Vorbereitung des Probenmodells für die Computersimulation mittels Molekulardynamik dienen, ist der nächste Schritt in der Prozessreihenfolge der eigentliche Zugversuch. Zur homogenen Deformation stehen verschiedene Optionen bereit. In dieser Arbeit wurden hauptsächlich die zwei folgenden Varianten der Deformation verwendet, welche im Folgenden kurz beschrieben werden. Ausführliche Beschreibungen der verwendbaren Deformationsmöglichkeiten sind in der Dokumentation des verwendeten Simulationsprogramms LAMMPS [37] verfügbar. Häufig verwendet wird die wahre Dehnrage, hierbei werden die Ortskoordinaten zu jedem Zeitschritt mit einer konstanten Verzerrungsmatrix multipliziert. In den meisten der hier präsentierten Fälle ist die Zugrichtung entlang der z-Achse, so dass lediglich die z-Komponente der Atomkoordinaten eine Vergrößerung um den Faktor der wahren Dehnung erfährt. Die Atome des Systems werden gleichzeitig als NpT-Ensemble in den Richtungen senkrecht zur Zugrichtung relaxiert, so dass sich ein Gleichgewicht unter der Randbedingung der beim Zugversuch durchgeführten Streckung einstellen kann. Alternativ zur Methode der wahren Dehnrage wird mit der Option „scale“ die Deformation über eine technische Dehnrage realisiert: Dabei wird die gewünschte Dehnung, welche nach der gesamten Simulation vorliegen soll, angegeben. Ausgehend von dieser Vorgabe wird eine konstante Verschiebung für

jeden Zeitschritt der Deformationssimulation errechnet und jeweils zu den Ortskoordinaten hinzuaddiert. Die simultan ablaufende Relaxation der Atome senkrecht zur Deformationsrichtung ist sowohl für die Variante der wahren als auch für die der technischen Dehnrate identisch.

9.4.2 Zugversuch reiner Aluminium-Einkristalle

Eine Fokussierung auf den Zugversuch selbst ohne die Beeinflussung durch Fremdatome oder geometrische Faktoren einer Kornstruktur wird durch die Simulation von Zugversuchen an Einkristallen erreicht. Hierbei wird das Potential von Cheng [30, 33] für die Aluminium-Kupfer-Legierung verwendet. Um dem anisotropen Werkstoffverhalten Rechnung zu tragen, wird weitergehend die Orientierung des Einkristalls variiert. Dies ist äquivalent zu einer Variation der Richtung der angelegten Deformation. Durch diese Orientierungsänderung des Einkristalls, bzw. eine Änderung der Deformationsrichtung, wird die Reaktion des Materialsystems verändert, da die aufgelöste Schubspannung τ ist, und durch das Schmid'sche Schubspannungsgesetz [90]

$$\tau = \sigma \cos \gamma \cos \kappa \quad (35)$$

beschrieben wird, bei welchem σ die Zugspannung ist und γ und κ die Winkel zwischen Zugspannung und Gleitrichtung bzw. Gleitebennormalen sind. Abhängig von der Relation zwischen Deformationsvektor und Kristallorientierung werden somit die verschiedenen Gleitebenen unterschiedlich stark aktiviert. Die gewählte Größe des Systems ist kubisch mit einer Kantenlänge von circa 40 nm, dies entspricht ungefähr 3,8 Millionen Aluminiumatome enthält. Es werden periodische Randbedingungen in alle Richtungen verwendet. Zunächst wird die Kristallorientierung so gewählt, dass sie den Systemen aus den Scherversuchen entspricht, also die [111]-Richtung in Zugrichtung zeigt. In Abbildung 62 ist die durch die Simulation bei 300 K erhaltene Spannung in Abhängigkeit von der aufgebrauchten Dehnung gezeigt. Es ergibt sich ein zunächst linearer Anstieg der Spannung bei zunehmender Deformation. Nach Erreichen der Maximalspannung von 2850 MPa bei einer Dehnung von 5,8 % fällt die Spannung steil auf 114 MPa ab, um anschließend langsam wieder auf 250 MPa anzusteigen. Die erreichte Maximalspannung überschätzt die experimentell bestimmten Zugfestigkeiten für reines Aluminium in dieser (111)-Orientierung, welche in [66] für quaderförmige Stäbchen mit Kantenlängen von 150 ± 50 nm, bzw. 200 ± 50 nm und einer Höhe von 400 nm zu circa 750 MPa bestimmt wurden, um einen Faktor von circa 4. In derselben Arbeit

wird eine starke Größenabhängigkeit der Maximalspannung bestimmt. Zusätzlich ergeben sich Unterschiede, welcher bereits in 8.6.2 besprochen werden, unter anderem in der Reinheit, welche in [66] mit 99,95 % für ein Experiment sehr hoch ist, jedoch im Vergleich zum fehlerfreien Modell der Simulation einige Defektstellen in der Probe aufweist. Für versetzungsfreie einkristalline Kupferwhisker wurden im Experiment, bei Whiskerdurchmessern von 75-230 nm, Bruchspannungen zwischen 1 und 7 GPa gemessen [77]. Die Dehnrates sind mit $0,4 \text{ nm s}^{-1}$ oder $1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ im Vergleich zur simulierten Dehnrates von $3 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ außerdem um zehn Größenordnungen langsamer. Die hier erhaltenen Ergebnisse sind mit 2,85 GPa zudem deutlich näher am experimentellen Wert von 0,75 GPa, als zum Beispiel in der Arbeit [91], in welcher für Aluminium eine Maximalspannung von 13,02 GPa bestimmt wurde.

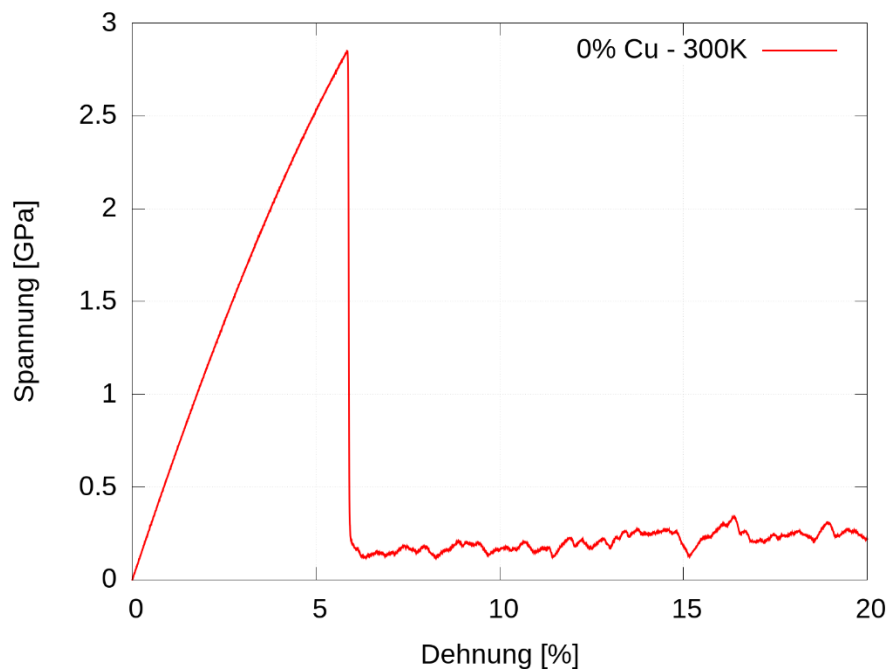


Abbildung 62: Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines reinen Aluminium-Einkristalls in (111)-Orientierung.

Die Erklärung für den abrupten Spannungsabfall in Abbildung 62 findet sich in Abbildung 63 in welcher der Verlauf der Versetzungsdichte während der Simulation aufgetragen ist. Hier wird deutlich, dass dieser Spannungsabfall mit der Entstehung von Versetzungen einhergeht. Zwischen zwei herausgeschriebenen Momentaufnahmen steigt die Gesamtversetzungslänge um $5 \mu\text{m}$ an, um im Anschluss auf einigermaßen konstantem Niveau um diesen Wert herum zu verbleiben. Aus dem

Volumen des simulierten Körpers errechnet sich die Versetzungsdichte zu $7-8 \times 10^{-4} \text{ \AA}^{-2}$. Die Versetzungen sind in Abbildung 64 zu verschiedenen Momentaufnahmen dargestellt, wobei sich beim ersten Auftreten von Versetzungen in Teilbild b) keine ausgeprägte Struktur erkennbar ist. Im weiteren Verlauf des Zugversuchs bilden sich zwei Zwillingskorngrenzen aus. In der unteren Reihe der Abbildung 64 e) – h) kann die zunehmende Ordnung in den in Rot dargestellten Stapelfehleratomen in hcp-Konfiguration beobachtet werden. Im Teilbild h), also bei einer Streckung von 15,5%, sind bereits 44% aller Atome in hcp-Konfiguration.

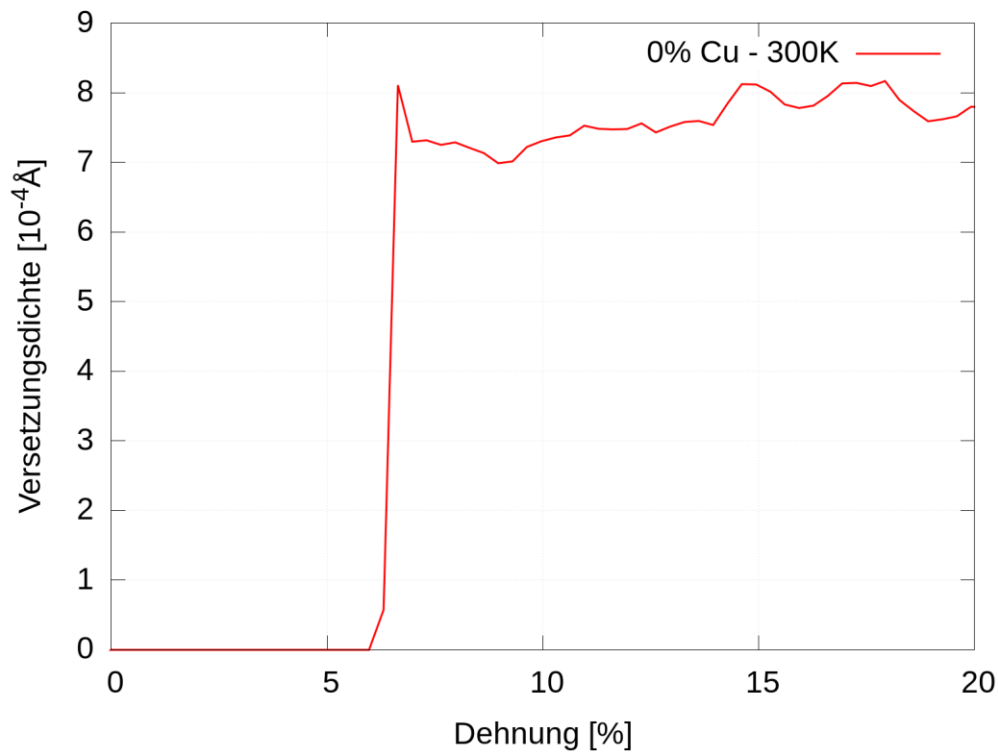


Abbildung 63: Versetzungsdichte aufgetragen über der Dehnung.

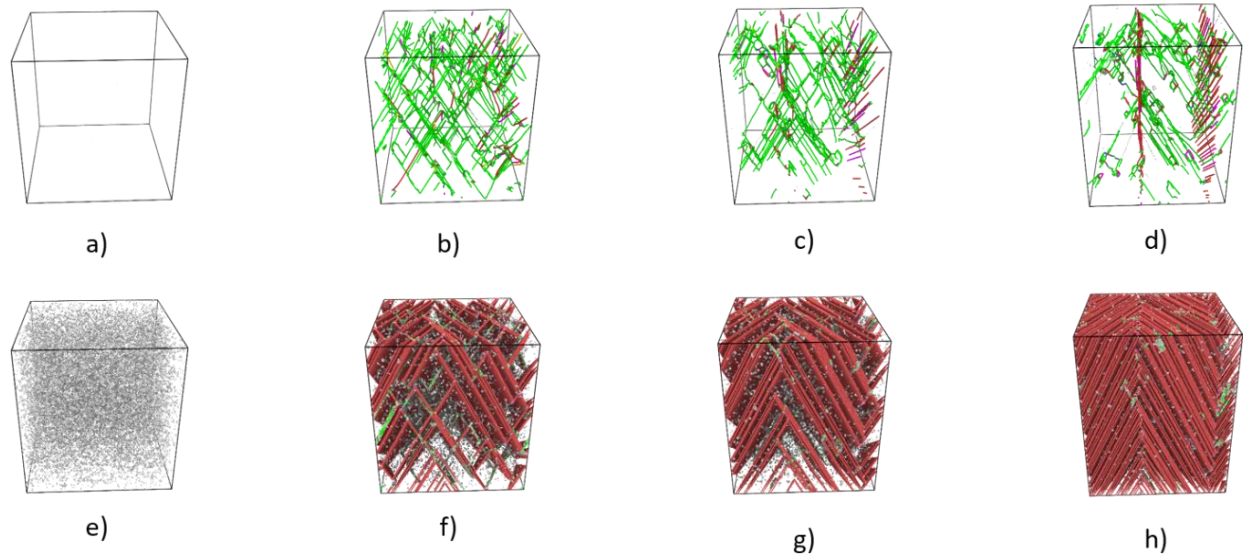


Abbildung 64: Aluminium-Einkristall in (111)-Orientierung in verschiedenen Stadien des Zugversuches: In a) – d) sind die entstandenen Versetzungen zu den Momentaufnahmen für 3,3, 6,6, 9,9 und 15,5% Dehnung abgebildet. Von grün nach rot nimmt die Versetzungslänge zu. In e) – h) sind die Atome in nicht fcc-Konfiguration zusätzlich mit eingeblendet, wobei Stapelfehleratome rot eingefärbt sind und weder den Stapelfehler noch der regulären Aluminium fcc-Struktur zugeordnete Atome grau gekennzeichnet sind.

Als zweite Orientierung des Kristallgitters des Einkristalls wird nach der [111]- die [100]-Richtung verwendet, welche in [92] für andere fcc-Strukturen als ausgeprägtes Minimum der Zugfestigkeit ermittelt wurde. Der qualitative Verlauf entspricht dem Schaubild der (111)-Orientierung in Abbildung 62, wobei das Maximum bei lediglich 2120 MPa, allerdings bei einer Dehnung von 7,6% liegt. Die Orientierungsabhängigkeit maximalen Zugspannung liegt daran, dass Versetzungen auf unterschiedlichen Gleitebenen entstehen, wozu unterschiedliche Spannung notwendig ist [11]. Das geringere Maximum bei höherer Dehnung resultiert in einem flacheren Anstieg der Spannungs-Dehnungs-Kurve und somit in einem geringeren Elastizitätsmodul. Die einigermaßen konstante Spannung im weiteren Verlauf des Zugversuchs liegt mit circa 400 MPa deutlich über dem Wert für die (111)-orientierte Struktur. Dies ist auf die bei der (100)-Orientierung um circa 12% erhöhte Versetzungsdichte im Vergleich mit der (111)-Orientierung zurückzuführen, wobei der qualitative Verlauf der Versetzungsdichte während des Zugversuchs ebenfalls wie in Abbildung 63 aussieht. Ein verschiedenes Bild zeigt sich bei der atomistischen Struktur bei dem (100)-orientierten System wie in Abbildung 65 zu sehen: Die Stapelfehlerebenen sind durch die verschiedene Orientierung des Gesamtsystems in anderer Lage. Der auffälligste Unterschied liegt in der in diesem Fall nicht

auftretenden Korngrenzbildung. Bei der höchsten dargestellten Dehnung von 15,5% befinden sich ebenfalls mit 9,4% deutlich weniger Atome in hcp-Konfiguration, somit haben sich deutlich weniger Stapelfehler ausgebildet.

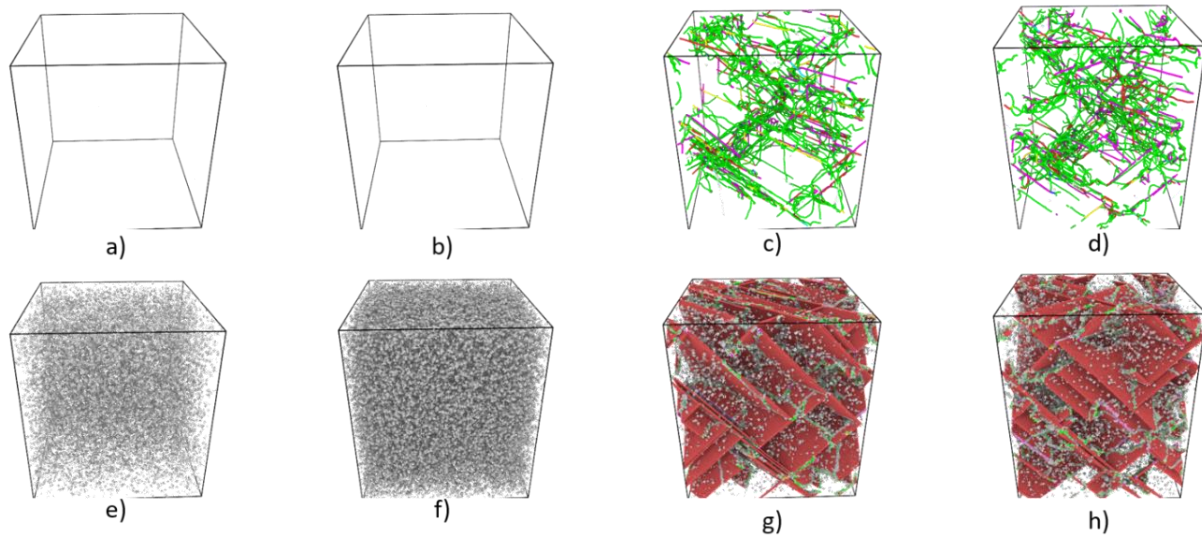


Abbildung 65: Aluminium-Einkristall in (100)-Orientierung in verschiedenen Stadien des Zugversuches: In a) – d) sind die entstandenen Versetzungen zu den Momentaufnahmen für 3,3, 6,6, 9,9 und 15,5% Dehnung abgebildet. In e) – h) sind die Atome in nicht fcc-Konfiguration zusätzlich mit eingeblendet. Die Farbgebung entspricht der von Abbildung 64.

9.4.3 Zugversuch Cu- bzw. Mg- legiertes Aluminium

Im Weiteren sollen Einflüsse resultierend aus der Legierung mit Fremdatomen bestimmt werden. Hierzu wird die selbe Struktur wie im Abschnitt zuvor, also ein Würfel der Kantenlänge 40 nm, erstellt und anschließend werden mit der gewünschten Wahrscheinlichkeit die Atome substituiert, um die angestrebte Fremdatomkonzentration zu erlangen. Für beide Legierungselemente, Kupfer und Magnesium, werden Konzentrationen von 1, 2 und 5% erzeugt. Periodische Randbedingungen bleiben weiterhin in alle Raumrichtungen aktiviert. In Abbildung 66 sind die Spannungs-Dehnungs-Kurven für die Magnesiumlegierungen aufgetragen. Die Orientierung ist zur Vergleichbarkeit gleich gewählt wie zum Beginn des letzten Kapitels, sowie bei den Schersimulationen, die (111)-Orientierung. Es zeigt sich eine Reduktion der Maximalspannung bei zunehmender Fremdatomkonzentration. Dem zu Beginn perfekten Einkristall werden durch die Substitution mit Legierungselementen Störstellen hinzugefügt. Der Anteil von zwei Prozent Magnesium aus Abbildung 66 verringert die Stapelfehlerenergie von Aluminium von 162 mJm^{-2} auf 142 mJm^{-2}

[93], welche bei der Nukleation von Versetzungen überwunden werden muss. Somit wird die Nukleation von Versetzungen vereinfacht. Auf diese Weise kommt es zu einer Reduktion von 6314 MPa für das reine Aluminium unter der Verwendung des Potentials für AlMg [33] über 5871 MPa für 1 %, 5691 MPa für 2 % auf 5206 für 5 % Magnesium-Atome. Die größte Veränderung tritt beim ersten Prozent ein, hier wird die Maximalspannung um 443 MPa reduziert. Die drei Prozent bei der Erhöhung der Magnesiumkonzentration von 2 % auf 5 % haben mit 485 MPa nur zusammen einen vergleichbar hohen Einfluss. Dies ist zurückzuführen auf die Natur der Veränderung, bei welchem das erste Prozent die Umwandlung vom perfekten Einkristall zum Kristall mit punktwise verzerrtem Gitter, an welchem die Nukleation vereinfacht möglich ist. Eine zusätzliche Erhöhung der Fremdatome führt zu weiteren Keimstellen, wodurch die Entstehung weiter vereinfacht wird, jedoch nicht im selben Maße. In Abbildung 67 sind für dieselben Konzentrationen die Spannungs-Dehnungs-Kurven für 300 K abgebildet. Hier liegen die Maxima deutlich dichter beieinander, und zwar innerhalb des Intervalls von 3860 MPa bis 4247 MPa. Die große Reduktion der Spannung bei der Substitution mit dem ersten Prozent Magnesium-Atome fällt deutlich geringer aus als bei der Simulation für 1 K, da bei der erhöhten Temperatur von 300 K bereits durch thermische Fluktuationen Störungen im Gitter vorhanden sind, welche die Versetzungsnukleation bereits vereinfacht.

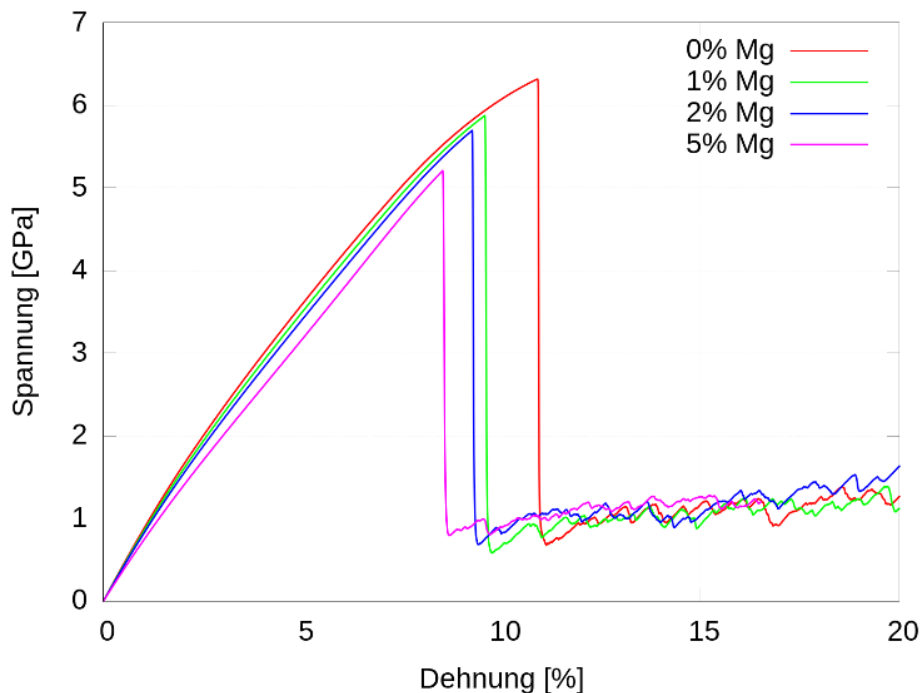


Abbildung 66: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für vier verschiedene Magnesiumkonzentrationen bei einer Temperatur von 1 K.

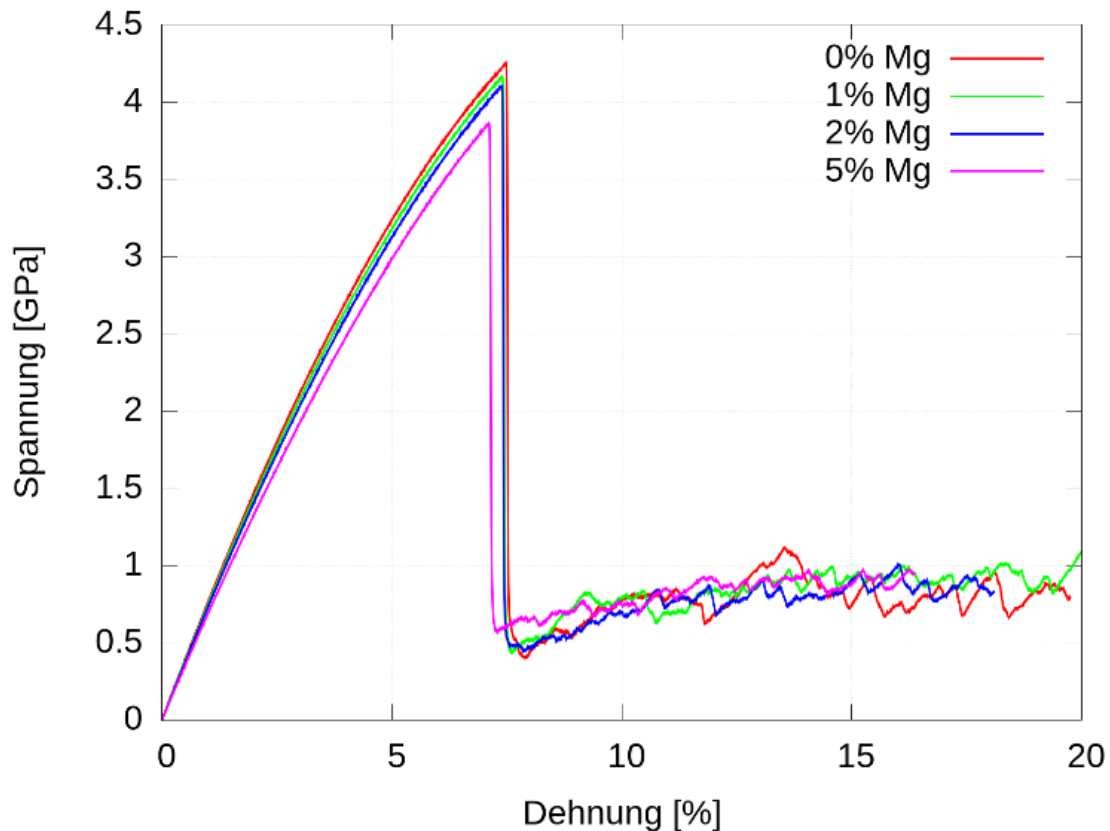


Abbildung 67: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für vier verschiedene Magnesiumkonzentrationen bei einer Temperatur von 300 K.

Zugversuch am Einkristall mit Temperatureinfluss

Der Einfluss der Temperatur wird in den Spannungs-Dehnungs-Diagrammen in Abbildung 68 veranschaulicht. Es zeigt sich eine reziproke Entwicklung der Maximalspannung zur simulierten Temperatur. Dies ist zurückzuführen auf die bei höherer Temperatur ausgeprägter vorhandene kinetische Energie, welche in lokalen Gitterverzerrungen resultiert, wodurch ähnlich einer erhöhten Fremdatomdotierung die Versetzungsnukleation vereinfacht wird. Ebenso reduziert sich die Dehnung, bei welcher die Maximalspannung auftritt. Für die Temperatur von 1 K wird der höchste Maximalwert von 4712 MPa und für 600 K der niedrigste mit 1644 MPa erreicht. Es wird deutlich, dass der Einfluss der Temperatur ausgeprägter ist als jener durch Fremdatome.

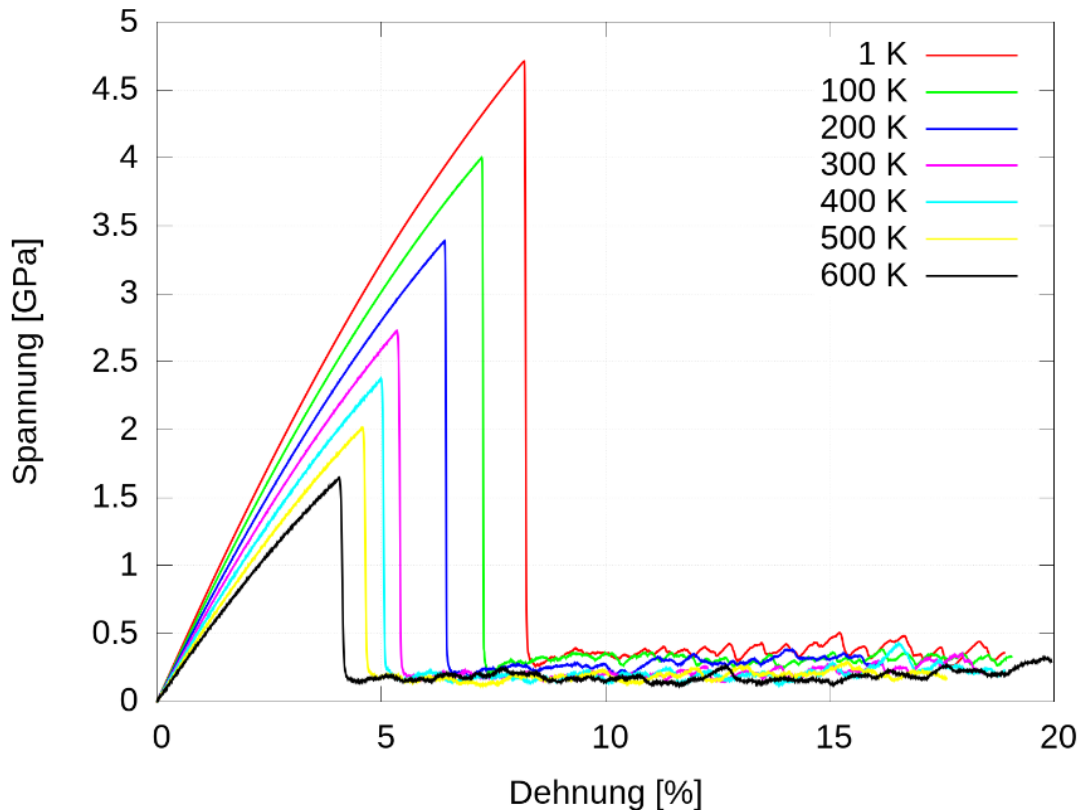


Abbildung 68: Spannungs-Dehnungs-Diagramm für die zwei-prozentige Aluminium-Kupferlegierung im Temperaturbereich von 1 bis 600 K.

Einen Überblick über alle durchgeführten Simulationen ist in Abbildung 69 dargestellt: Die dreidimensionale Darstellung verdeutlicht sehr gut die Temperatur- und Fremdatomkonzentrationsabhängigkeit der Maximalspannungen für die simulierten Zugversuche sowie den Einfluss der gewählten Orientierung auf die maximale Spannung bei der zugehörigen Dehnung. Des Weiteren zeigt sich die Relevanz der einzelnen Einflussfaktoren. Die Fremdatome und deren Konzentration tragen einen relativ geringen Anteil zur Höhe der Maximalspannung bei. Größer hingegen ist der Einfluss der Temperatur, wobei der quantitative Verlauf der Maximalspannungen bei zunehmenden Temperaturen, bei den verschiedenen Orientierungen und Legierungselementen, ähnlich ist. Bei der AlMg-Probe mit der (111)-Orientierung zeigt sich im Vergleich mit den anderen Simulationsreihen der deutlichsten Einfluss der Menge an Legierungsatomen, insbesondere im niedrigen Temperaturbereich. Die Dehnung bei welcher die Maximalspannung auftritt erhöht sich mit geringer werdender Temperatur.

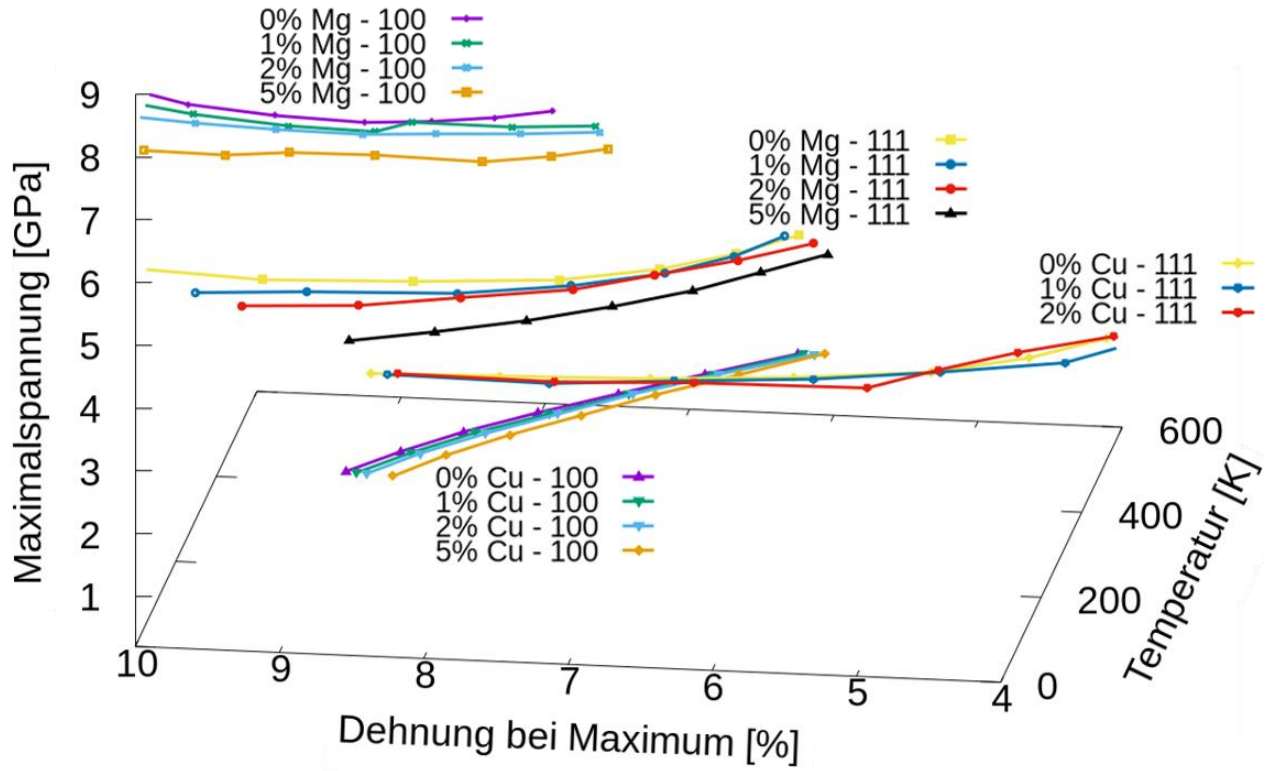


Abbildung 69: Dreidimensionale Darstellung der Maximalspannung über der Dehnung beim Maximum sowie der Temperatur.

9.4.4 Nanozugversuche am Polykristall

Die Fokussierung im Kapitel der Zugversuche soll auf der Untersuchung von polykristallinen Aluminiumsystemen liegen. Auf dem „3. International Symposium on Computational Mechanics of Polycrystals“ 2012 in Bad Honnef, wurden erste Ergebnisse von Simulationen vorgestellt, welche hier als Einstieg in die Thematik aufgegriffen werden sollen.

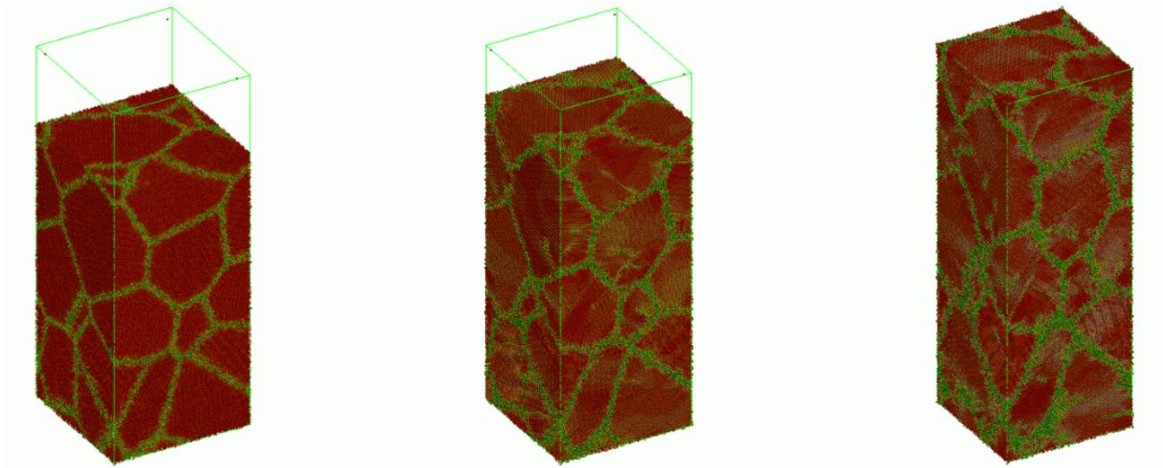


Abbildung 70: Aluminium-Nano-Polykristall mit 10 Körnern mit periodischen Randbedingungen. Bei 0 %, 10 % und 25 % Dehnung. Aluminiumatome auf fcc-Gitterplätzen sind in braun dargestellt, andere Aluminiumatome in grün.

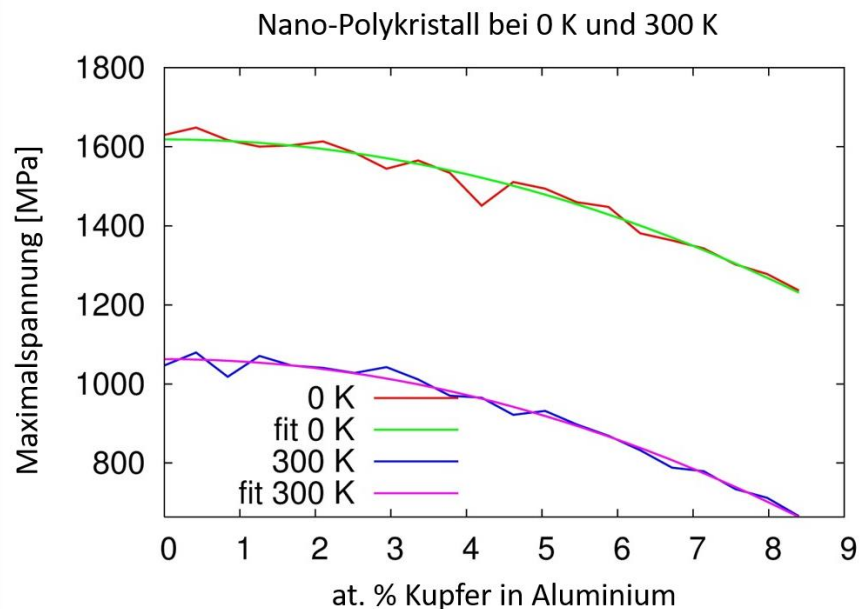


Abbildung 71: Dargestellt sind die maximalen Spannungen von aus zehn Körnern bestehenden Aluminium-Polykristallen für 0 K und 300 K in Abhängigkeit von verschiedenen Kupferkonzentrationen. Eine quadratische Funktion wurde für die verschiedenen Temperaturen an die Simulationsergebnisse angepasst.

Es wurden zwei Simulationsreihen durchgeführt, und zwar für 0 K und für 300 K. Die Simulationsbox wird quaderförmig mit einer quadratischen Grundfläche mit der Seitenlänge 20 nm und einer Höhe von 40 nm, welcher in zehn Körner mit verschiedener Orientierung unterteilt ist, gewählt (vgl. Abbildung 70). Der mittlere Korndurchmesser beträgt 7,24 nm, somit handelt es sich um einen Nano-Polykristall und die Zugprobe enthält dadurch circa 960.000 Atome. In Abbildung 71 ist die maximale Zugspannung für 20 verschiedene Kupferkonzentrationen für die beiden Temperaturen 0 K und 300 K aufgetragen. Die Werte für 0 K beginnen bei circa 1650 MPa und fallen quadratisch mit steigender Kupferkonzentration auf 1240 MPa ab. Die maximale Spannung für 300 K ist mit 1080 MPa deutlich geringer als für 0 K. Mit steigender Kupferkonzentration ergibt sich derselbe charakteristische quadratische Verlauf. Bei 8,5 Atomprozent Kupferanteil beträgt die Maximalspannung bei dieser Simulation noch 665 MPa. Die Reduktion der Maximalspannung mit zunehmender Fremdatomkonzentration lässt sich durch die Störung des idealen Aluminiumgitters erklären. Diese Störstellen vereinfachen in dem zu Beginn versetzungsfreien Polykristall die Versetzungsbildung.

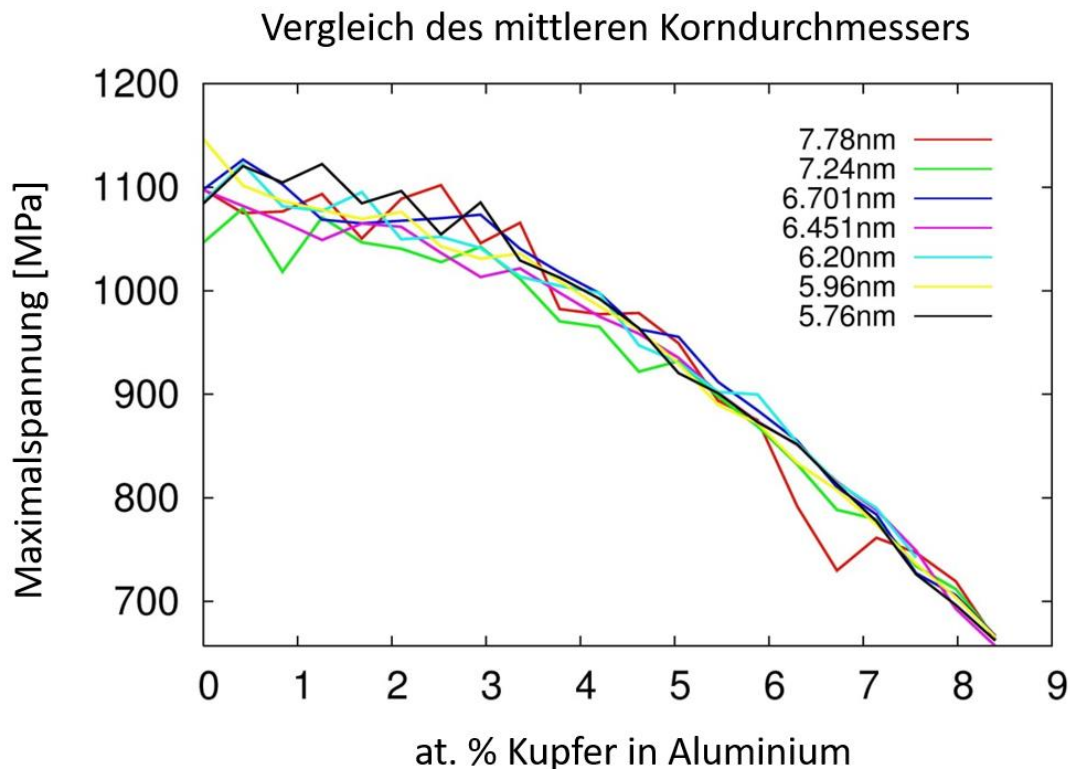


Abbildung 72: Verlauf der Maximalspannung des Aluminium-Polykristalls aus den Simulationen von Abbildung 71 in Abhängigkeit der Kupferkonzentration für verschiedene Korndurchmesser bei 300 K.

Nach der Untersuchung der Auswirkung von Temperatur und Legierungsatomkonzentration interessiert nun der Einfluss des mittleren Korndurchmessers. Die Variation dieser Größe wird durch eine unterschiedliche Kornanzahl bei konstantem Gesamtsimulationsvolumen erzielt. Die Simulationsboxgröße beinhaltet weiterhin knapp eine Million Atome in einer Simulationsbox der Dimension $20 \times 20 \times 40 \text{ nm}^3$. Die Anzahl an Körnern wurde mittels NanoSculpt von 8 auf 20 in Zweierschritten erhöht, wodurch mittlere Korndurchmesser von 15,56 nm bis 11,52 nm erhalten werden. Aus Abbildung 72 wird ersichtlich, dass der Verlauf der Maximalspannung mit zunehmendem Anteil an Fremdatomen für die verschiedenen Korndurchmesser sehr ähnlich ist. Auffällig ist dabei, dass sich die Kurven für höhere Kupferkonzentration immer weiter angleichen. Im Bereich geringer Kupferkonzentration dominieren starke Schwankungen zwischen den einzelnen aus den Simulationen erhaltenen Maximalspannungen. Einen signifikanten Einfluss des mittleren Korndurchmessers auf die maximale erhaltene Spannung während des Zugversuchs kann hier nicht festgestellt werden. Durch die Konstruktionsweise der Polykristalle, bei der die Form der einzelnen Körner und deren Orientierung zufällig mit Hilfe der Voronoi-Zerlegung bzw. der Eulerwinkel bestimmt sind, ergeben sich bei zwei Systemen mit derselben Anzahl an Körnern und identischer Simulationsbox verschiedene Maximalspannungen. Diese Unterschiede sind durch die Korngrenzenergie (vgl. Kapitel Korngrenzen, Abbildung 33 - Abbildung 35) zu erklären. Ist die gewählte Anzahl an Körnern geringer, so verringert sich damit ebenso deren Gesamtkontaktfläche, wodurch sich der Einfluss einzelner Korngrenzen vergrößert. Das bedeutet für den Fall, dass wenn in einem Polykristall eine energetisch besonders ungünstige und somit relativ instabile Grenzfläche ausgebildet ist, die maximale Spannung während des Zugversuchs geringer ausfällt. Weitere Simulationen, wie in Abbildung 73 [94] dargestellt, bestätigen dies. Diese Veröffentlichung verfasste ich im Rahmen des Jahresberichts für das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart, sie behandelt Simulationen welche ich durchgeführt oder betreut habe. Dort werden Spannungs-Dehnungs-Diagramme aus fünf Simulationsreihen gezeigt. Die Simulationsreihen wurden durchgeführt für jeweils zwei GP-I- und GP-II- Zonen mit unterschiedlichen Durchmessern, sowie für Polykristalle mit gelöstem Kupfer. In den Simulationsreihen ist der Anteil an Kupfer so erhöht worden, dass die Kupferkonzentration für die Simulationsreihen gleich groß ist, damit eine gute Vergleichbarkeit untereinander gegeben ist. In jeder Simulationsreihe wurde als Referenz ein System mit null Prozent Legierungselementen durchgeführt. Obwohl es sich bei jedem simulierten System mit $37 \times 37 \times 74 \text{ nm}^3$ um

eine Box derselben Größe mit jeweils 6 Millionen Aluminium-Atome handelt, zeigen die Maximalspannungswerte in Abbildung 73 Unterschiede von bis zu 62 MPa an. Die Boxen wurden jeweils in 20 Körner unterteilt. Ein Vergleich von Abbildung 73 und Abbildung 72 zeigt wie erwartet, dass die Schwankung aufgrund der Struktur des Polykristalls mit steigender Anzahl an Körnern abnimmt.

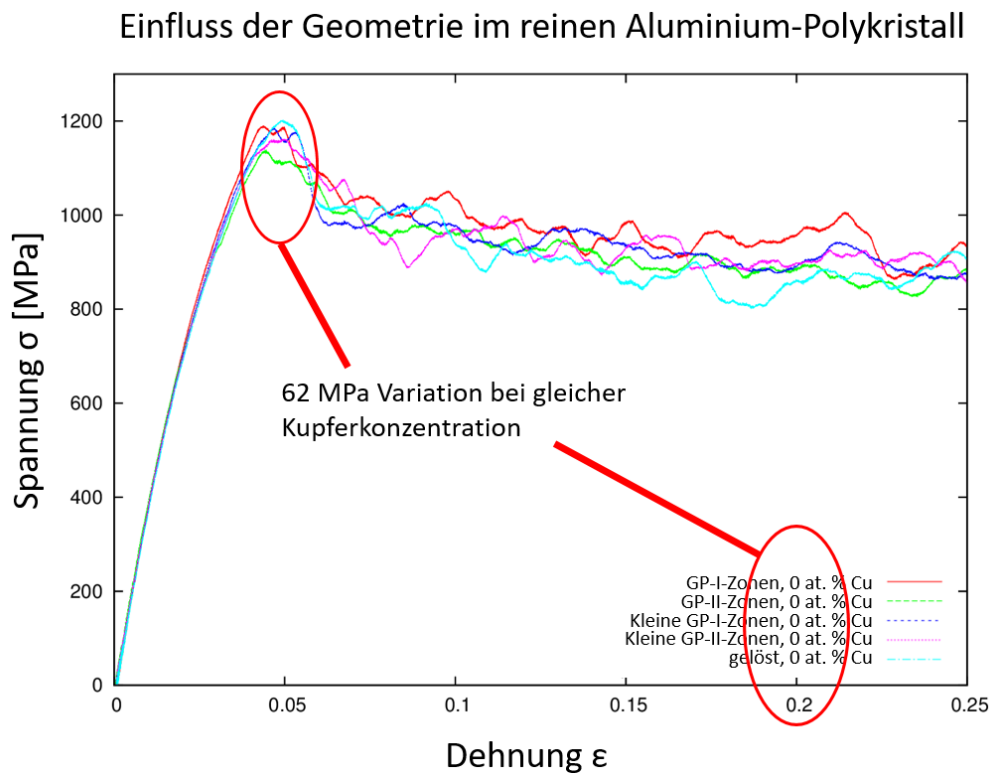


Abbildung 73: Spannungs-Dehnungs-Diagramme für reines Aluminium aus verschiedenen Simulationsreihen. Eine Variation der maximalen Spannung aufgrund der geometrischen Form und Anordnung der Körner, sowie der verschiedenen Kristallgitter-Orientierungen der einzelnen Körner ist zu beobachten.

Inverser Hall-Petch-Effekt

Die Untersuchung des in Kapitel 4.6.3 beschriebenen Hall-Petch-Effekts, bzw. seiner Umkehrung zum inversen Hall-Petch-Effekt war das Ziel der nun vorgestellten Simulationen. Um diesen zu untersuchen, wurden Simulationen an Aluminiumsystemen mit verschiedenen mittleren Korndurchmessern mit periodischen Randbedingungen durchgeführt. Aufgrund der zuvor erkannten Abhängigkeit von der Anzahl an im System vorhanden Körnern wurden nun mehrere Simulationen mit denselben mittleren Durchmessern gerechnet. Aus diesen erhaltenen Maxima der Spannung

wird der statistische Durchschnitt ermittelt. Diese Mittelung der Maximalspannung ist in Abbildung 74 zusammen mit dem Ergebnisintervall in welchem die Maxima der einzelnen Simulationen liegen abgebildet. Wie in Abbildung 72 bereits zu erkennen ist, muss der betrachtete Bereich, in welchem die Korndurchmesser liegen, möglichst groß gewählt werden. Bei der vorliegenden Simulationsboxgröße von $23 \times 23 \times 46 \text{ nm}^3$ sind dabei die vorhandenen Möglichkeiten stark limitiert. Es besteht bei konstantem Volumen konkurrierendes Bestreben nach möglichst großen Korndurchmessern sowie einer hohen Anzahl an Körnern zur Minimierung des Einflusses einzelner Sonderfälle. Die Anzahl an Körnern und die zugehörigen mittleren Durchmesser sind in Tabelle 5 aufgelistet.

Tabelle 5: Anzahl der Körner in der Simulationsbox von $23 \times 23 \times 46 \text{ nm}^3$ und die daraus resultierenden mittleren Durchmesser.

Anzahl Körner	10	15	20	30	50	100	200	500
Korndurchmesser [nm]	16,69	14,58	13,25	11,57	9,76	7,75	6,15	4,53

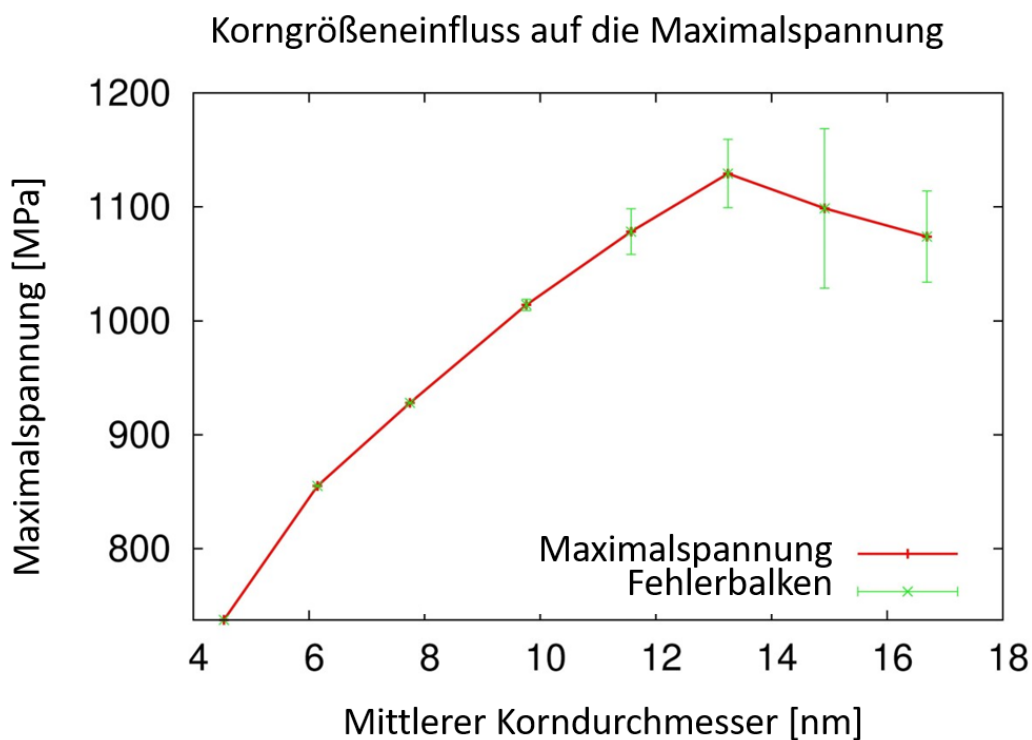


Abbildung 74: Mittlere Maximalspannung in Abhängigkeit des mittleren Korndurchmessers. Die Fehlerbalken zeigen das Ergebnisintervall an, in welchem sich die einzelnen Maxima der Simulationsreihe befinden.

Für die Korndurchmesser über 10 nm wurden jeweils 10 Simulationen an hinsichtlich Simulationsboxgröße und Kornzahl gleichen Systemen durchgeführt. Die in Abbildung 74 mit angegebenen Ergebnisintervalle für diese Vielfachsimulationen verringern sich mit abnehmenden mittleren Korndurchmessern, bzw. zunehmender Anzahl an Körnern. Diese abnehmende Schwankungsbreite wurde bereits im vorangegangenen Kapitel festgestellt und diskutiert. Somit wurde das System mit 50 Körnern lediglich viermal erzeugt und simuliert und alle Systeme mit noch größerer Anzahl lediglich einmal. Entsprechend der Theorie zum Hall-Petch-Effekt nimmt die Maximalspannung bei Reduktion des mittleren Korndurchmessers zu, in der hier dargestellten Simulation von 1075 MPa bei einem mittleren Korndurchmesser von 16,69 nm auf 1135 MPa bei 13,25 nm. Bei weiterer Reduktion der Korndurchmesser dominiert jedoch das Korngleiten gegenüber der Versetzungsbildung und -bewegung (vgl. Hall-Petch-Effekt) und die Maximalspannung sinkt auf 738 MPa, bei einem Korndurchmesser von 4,53 nm, ab. Dieser Übergang vom Hall-Petch- zum inversen Hall-Petch-Effekt bei einem mittleren Korndurchmesser bei 13,35 nm ist in guter Übereinstimmung mit der in der Literatur [19, 68, 69] bestimmten Größe von 15 nm für reines Kupfer. Diese Ergebnisse von 2013 wurden durch Xu und Dávila 2018 [95] in einer ausführlichen Diskussion ebenfalls für reines Aluminium mit 19 nm bestätigt.

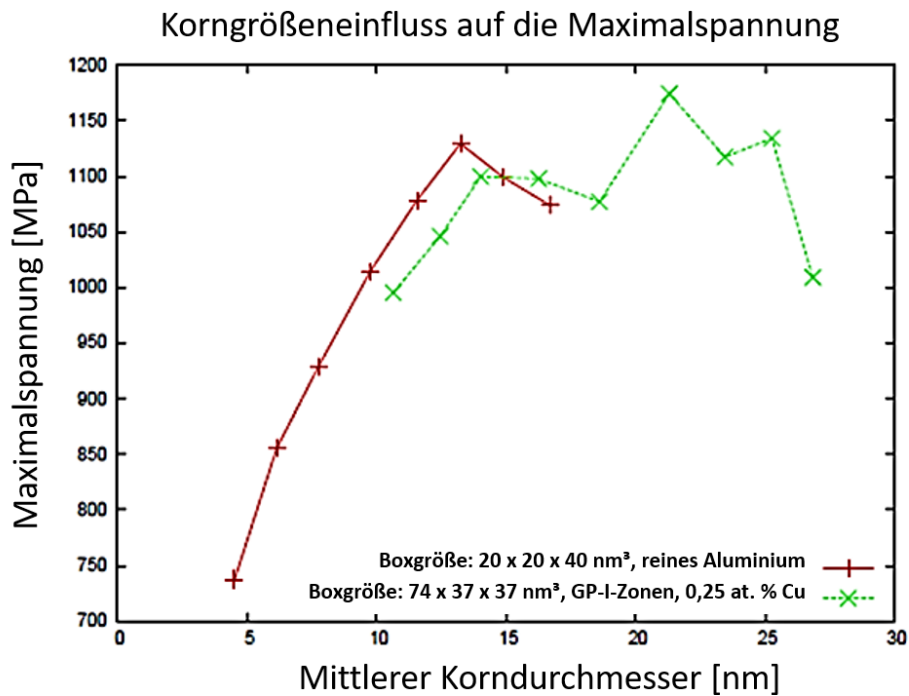


Abbildung 75: Maximalspannung über mittlerem Korndurchmesser für reines Aluminium (rot) und mit als GP-I-Zonen dazulegiertem Kupfer im Polykristall.

Anschließend wurden vergleichbare Simulationen für Polykristalle, bei welchen GP-I-Zonen in den einzelnen Körnern eingebracht wurden, durchgeführt. Die Fremdatomkonzentration wurde mit 0,25 % sehr niedrig gewählt. Die limitierende Größe ist die Mindestanzahl von zehn Körnern um die Selbstinteraktion zu verhindern, im Zusammenspiel mit dem gewünschten großen mittleren Korndurchmesser. Durch das Verwenden einer größeren Simulationsbox ist es bei dieser Untersuchung möglich, einen größeren Bereich der mittleren Korndurchmesser abzudecken. Der bei dieser Simulation größte verfügbare Durchmesser beträgt 26,8 nm bei 10 Körnern. Dieselbe Simulationsbox ergibt bei 100 Körnern einen mittleren Korndurchmesser von 12,4 nm. Wie bereits das System mit reinem Aluminium, zeigt das Legierungssystem AlCu mit 0,25 at.% Kupfer in Form von GP-I-Zonen ebenfalls den Übergang zum Inversen-Hall-Petch-Effekt. Die eingebrachten GP-I-Zonen verursachen eine Verschiebung des Wertes für den Korndurchmesser, bei welchem der Übergang vom Hall-Petch- zum inversen Hall-Petch-Effekt stattfindet, zu höheren Korndurchmessern. Dieser befindet sich in dem System mit in Form von GP-I-Zonen dazulegiertem Kupfer bei 21,25 nm gegenüber den 13,35 nm beim Modell mit reinem Aluminium. Der Übergang vom Hall-Petch- zum inversen Hall-Petch-Effekt ist durch Versetzungen im Inneren der Körner erklärt. Eine Versetzung auf seiner Gleitebene kann die Korngrenze nicht überwinden, da ihr Burgersvektor ein Translationsvektor des Kristallgitters sein muss, was über die Korngrenze hinaus nicht gegeben ist. Dadurch kommt es zur Aufstauung von Versetzungen in der Nähe der Korngrenze. Um Versetzungen einander näher zu bringen, ist jedoch eine Kraft nötig, welche durch die von außen angelegte Spannung erzeugt wird. Die von außen angelegte Spannung und der Abstand zweier Versetzungen bilden somit ein Gleichgewicht. Je kleiner der Korndurchmesser, desto näher müssen sich die Versetzungen kommen, wodurch eine höhere Spannung notwendig ist. Diese Aufstauung versagt jedoch, wenn der halbe Korndurchmesser, halb, da eine Aufstauung aus der Mitte zu beiden Seiten zur Korngrenze hin möglich ist, den Versetzungsabstand unterschreitet. Bei geringeren Korndurchmessern dominiert somit das Korngleiten, wobei dieses mit kleiner werdenden Körnern, durch die Verringerung der Grenzflächen, vereinfacht wird. Die eingebrachte GP-Zone beeinflusst als zusätzliches Hindernis für die Versetzung die Versetzungsaufstauung, so dass der Übergang zum Korngleiten, wie in Abbildung 75 gezeigt, zu größeren Korndurchmessern verschoben ist.

Einfluss der Anzahl der Körner

Die vorangegangenen Untersuchungen beschäftigten sich mit dem Einfluss des mittleren Korndurchmessers. In diesem Abschnitt wird nun der mittlere Korndurchmesser konstant gehalten jedoch die Zahl der in der Simulationsbox vorhandenen Körner, die den Polykristall bilden, variiert. Begonnen wird mit einem Einkristall der Dimension $26 \times 26 \times 52 \text{ nm}^3$, dieser beinhaltet circa 4,27 Millionen Atome, wovon 11076 Kupferatome in GP-I-Zonen sind. Der entsprechende mittlere Korndurchmesser beträgt hierbei 20,32 nm. Die Kupferkonzentration entspricht damit ungefähr 0,25 % und ist dadurch vergleichbar mit der grünen Kurve aus Abbildung 75. Die Zahl der Körner wurde stetig von einem auf 15 Körner erhöht. Der somit größte simulierte Polykristall besteht aus 31,8 Millionen Aluminiumatomen und 90.687 Kupferatomen. Die Simulationsbox hat die Dimension $64 \times 64 \times 128 \text{ nm}^3$. In Abbildung 76 sind die Spannungs-Dehnungs-Kurven der durchgeführten Simulationen dargestellt. Es zeigt sich für den Einkristall ein ausgeprägtes Maximum der Spannung um 1380 MPa zum Ende des elastischen Bereichs. Der Fließbereich liegt im Bereich zwischen 500 und 800 MPa und unterliegt relativ ausgeprägten Schwankungen.

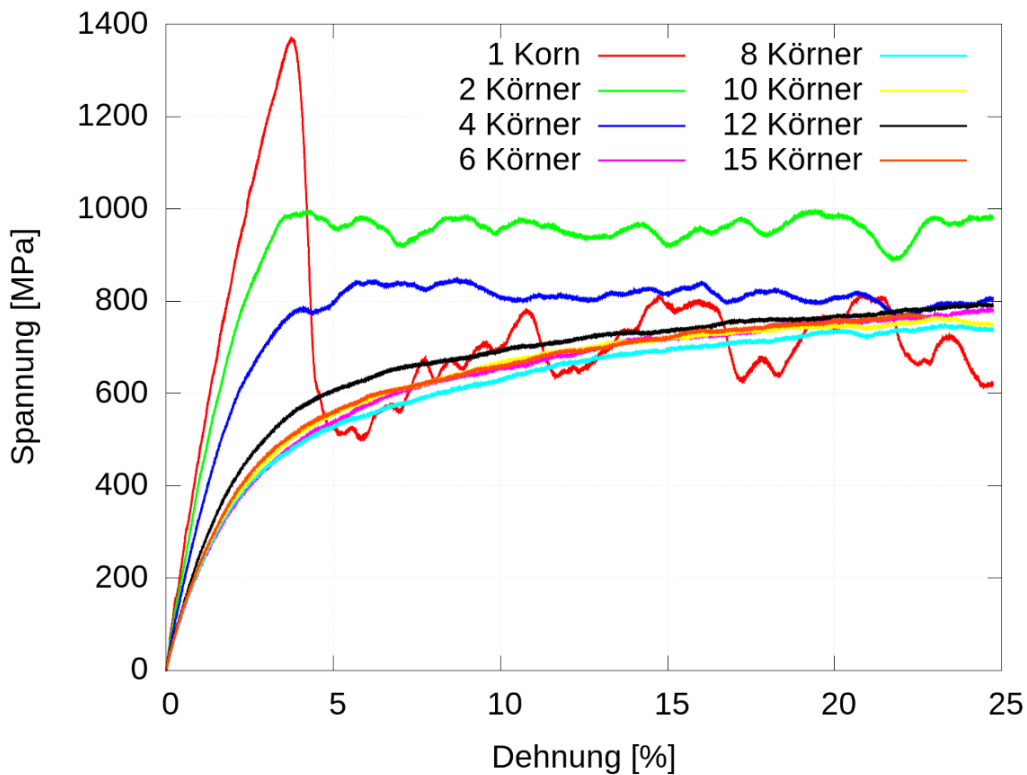


Abbildung 76: Darstellung ist die Spannung in Zugrichtung in Abhängigkeit von der Dehnung des Systems. Die verschiedenen Kurven entsprechen einer verschiedenen Anzahl an Körnern.

Für zwei Körner verschwindet die ausgeprägte Streckgrenze bereits und die Fließspannung variiert deutlich geringer im Bereich zwischen 900 und 1000 MPa. Bei weiterer Verdoppelung der Kornzahl senkt sich die Fließspannung weiter ab und pendelt um den Bereich um 800 MPa. Bei einer weiteren Erhöhung der Anzahl an Körnern reduziert sich die Schwankung der Spannung zunehmend. Der charakteristische Verlauf der Kurven wird für eine zunehmende Anzahl an Körnern zunehmend ähnlicher. Nach anfänglichem starken Anstieg gehen die Kurven ab circa 5 % Dehnung bei ungefähr 550 MPa über in einen Bereich geringer Steigerung der Zugspannung, die sich steigert auf circa 700 MPa bei einer maximal betrachteten Dehnung von 25 %.

Zugversuch am reinen Polykristall

Im vorangegangenen Kapitel wurde der Einfluss der gegebenen mittleren Korndurchmesser detailliert ausgewertet. Jedoch wurde bei der Betrachtung das Augenmerk auf makroskopisch bekannte Materialeigenschaften, wie die maximale Spannung und die dazugehörige Dehnung, gelegt. Nun wird der Vorteil der Molekulardynamik, die atomare Auflösung, sowie der genaue Ort und die Geschwindigkeit jedes einzelnen Atoms, ausgenutzt und es findet eine Fokussierung der Auswertung der Simulation auf die Nanostruktur selbst statt. Dafür werden bei der Auswertung des Zugversuchs in der Visualisierung Atome selektiv entfernt, welche ihre Position innerhalb eines Kornes auf einem Gitterpunkt besitzen. Dieser Vorteil der atomistischen Simulation ermöglicht es, Defektstrukturen isoliert zu betrachten und zu verstehen. In Abbildung 77 sind vier Momentaufnahmen während eines Zugversuches gezeigt, welcher zu Demonstrationszwecken auf der mit 88 Millionen Pixel höchstaflösenden Rückprojektionsleinwand des Visualisierungsinstituts VISUS der Universität Stuttgart simuliert wurde. Der Aluminium-Probenkörper besteht aus 20 Körnern, welche zusammen ein Quadvolumen von $60 \times 60 \times 120 \text{ nm}^3$ einnehmen. Die Simulationsbox enthält somit 25,7 Millionen Aluminiumatome bei einem mittleren Korndurchmesser von 34,56 nm. Gedehnt wird das System über eine wahre Dehnrates von $2,46 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, welche durch eine Vergrößerung der z-Komponente jedes Atoms um den Faktor 5×10^{-7} pro Zeitschritt (2,038 fs) erreicht wird. Dies entspricht einer Dehngeschwindigkeit von $29,47 \text{ ms}^{-1}$ und resultiert in einer gesamten Dehnung von 13,3% nach 250 000 Zeitschritten. Die Intention der Präsentation auf der hochauflösenden Leinwand resultierte darin, dass alle 250 fs eine Momentaufnahme ins Dateisystem geschrieben wurde. Dies ermöglicht eine detaillierte Verfolgung der Entstehung und Entwicklung

von Defekten in der Struktur. In Abbildung 77 a) ist der Beginn des Zugversuchs dargestellt. Teilbild b) zeigt die 880. Momentaufnahme, dies entspricht dem Zeitpunkt 220 ps nach Beginn der Deformation, Teilbild c) 3 ps und d) 5 ps später. Atome eines Kornes werden in einheitlicher Farbe dargestellt. Unten im Vordergrund ist gezeigt wie das dunkelblau dargestellte Korn von links nach rechts periodisch fortgesetzt wird. Zur übersichtlicheren Darstellung werden nur Atome dargestellt, welche nicht in fcc-Konfiguration vorliegen. Auf diese Weise werden im undeformierten Zustand in Teilbild a) lediglich die Atome an der Korngrenze dargestellt. In Teilbild b) ist das System bereits um 5,7 % gedehnt und es zeigen sich diverse Defekte in dem Aluminiumpolykristall. Zentral in der Mitte ist in Rot ein Stapelfehler zu sehen. Dieser bleibt ebenfalls in den Folgebildern bestehen. Andere gebildete Stapelfehler werden im Verlauf der fortschreitenden Dehnung wieder aufgelöst, wie beispielsweise rechts darüber in gelb dargestellt. In der Mitte vor dem stabilen Stapelfehler ist in hellem Blau eine Versetzung abgebildet welche sich von Teilbild zu Teilbild weiterbewegt. Unterhalb des zentralen Stapelfehlers kann in Türkis die Entstehung einer Versetzung aus einer Frank-Read-Quelle beobachtet werden, diese Versetzung ist in Teilbild b) noch sehr kompakt, dehnt sich jedoch weiter aus, bis es in Bild c) zur Bildung der Ringstruktur der Versetzung kommt, welche in Teilbild d) vollständig abgeschlossen ist.

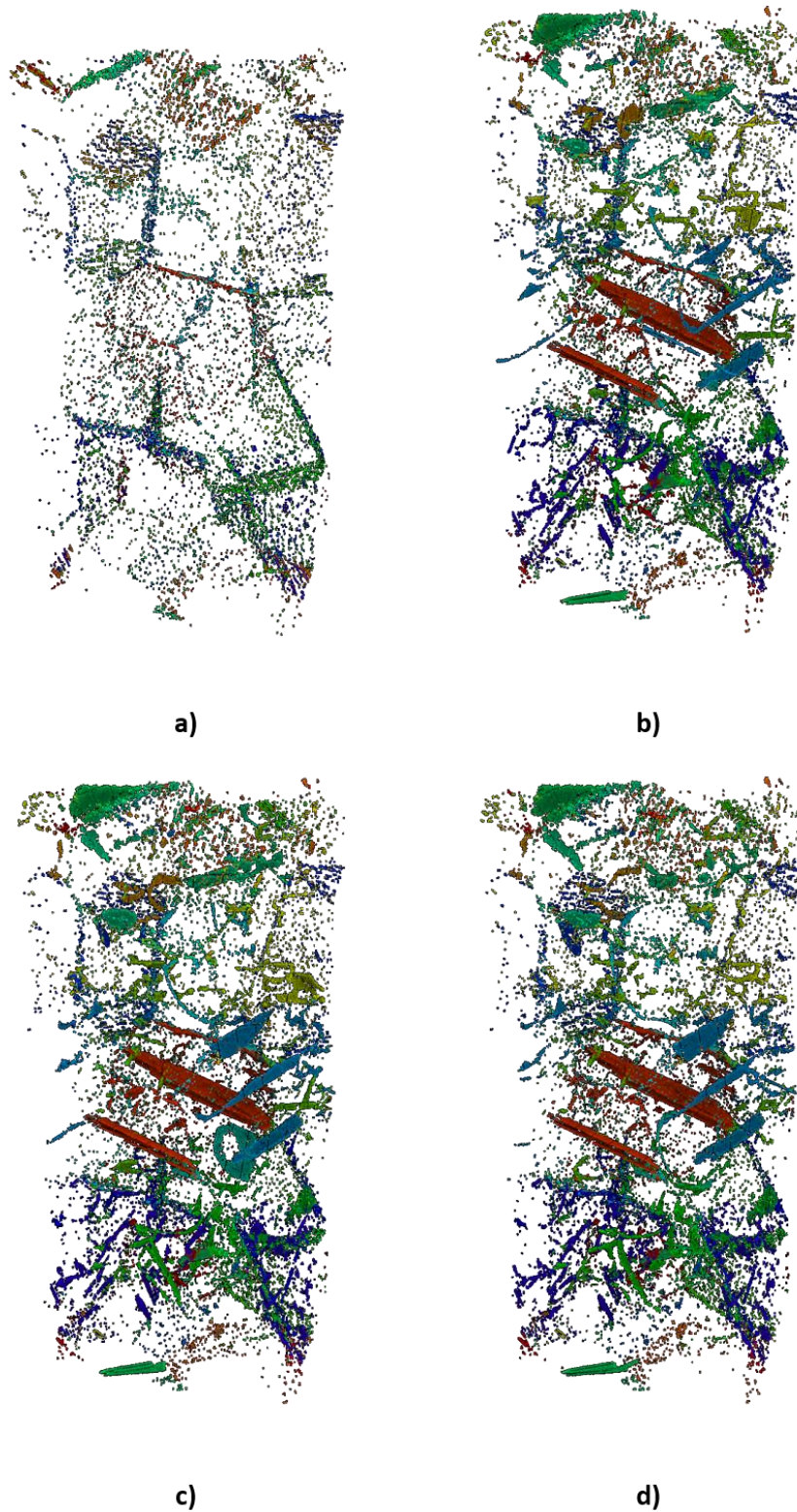


Abbildung 77: Die vier Bilder zeigen Momentaufnahmen eines Zugversuches von einem Aluminium-Polykristall. Hierbei werden alle Atome ausgeblendet, welche die für Aluminium reguläre fcc-Struktur besitzen. Atome eines Kornes werden in einheitlicher Farbe dargestellt.

Zugversuch von Aluminium-Polykristallen mit zulegiertem Kupfer

Nachdem im vorangegangenen Kapitel die entstehenden Defekte, wie Stapelfehler und Versetzungen, beim Zugversuch gezeigt wurden, soll nun der Einfluss der Legierungselemente auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten bei Aluminium-Polykristallen untersucht werden. Zu erwarten ist, entsprechend der in dem Kapitel 4.6.3 Verfestigungsmechanismen beschriebenen und im Kapitel 9.3.1 Schersimulationen mit Molekulardynamik identifizierten Mechanismen, eine Erhöhung der Festigkeit, da die Fremdatome durch ihre Gitterverzerrung die

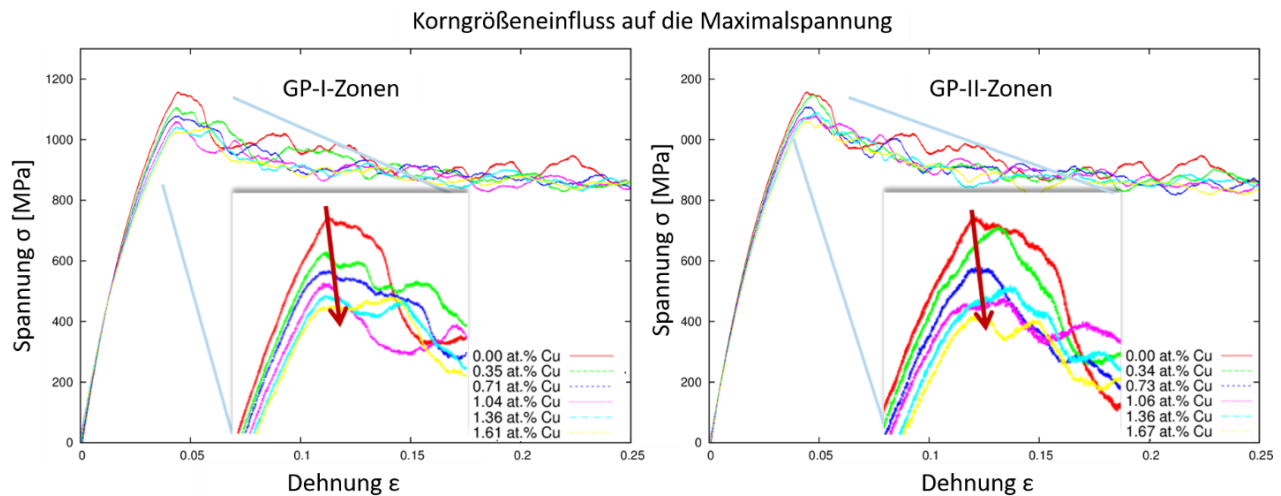


Abbildung 78: Spannungs-Dehnungs-Kurven für GP-I-Zonen links und GP-II-Zonen rechts. Es wurden jeweils sechs verschiedene Kupferkonzentrationen dargestellt.

Versetzungsbewegung behindern. Die Spannungs-Dehnungs-Kurven in Abbildung 78 wurden aus simulierten Zugversuchen mit verschiedenen Konzentrationen an Kupferatomen erhalten. Die unterschiedlichen Kupferkonzentrationen werden durch Variation der Anzahl von GP-Zonen pro Korn sowie durch Variation des Durchmesserintervalls, aus welchem die Durchmesser der GP-Zonen gewählt werden, erreicht. Die Simulationsparameter entsprechen denen der Simulation von Abbildung 77, was eine Elongation mit dem Faktor 5×10^{-7} pro Zeitschritt (2,038 fs) bedeutet, wodurch eine wahre Dehnrates von $2,46 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ erzielt wird. Die Abbildung zeigt entgegen der Erwartung eine verringerte maximale Spannung bei zunehmender Kupferkonzentration. Diese Differenz zum experimentellen Ergebnis lässt sich dadurch erklären, dass im realen Werkstoff im Gegensatz zur Simulation bereits zu Beginn Versetzungen vorhanden sind. In dem vorliegenden simulierten System existieren zunächst keine Versetzungen, diese werden erst mit zunehmender

Zugspannung generiert. Dadurch entspricht die hier bestimmte maximale Spannung einer notwendigen Spannung, um Versetzungen in diesem Materialsystem zu erzeugen. Bei dieser Erzeugung der Versetzungen bewirken die eingebrachten Fremdatome mit ihren Gitterverzerrungen eine Vereinfachung und dadurch eine geringere maximale Spannung (vgl. Kapitel 9.4.3). Werden die verschiedenen Ausscheidungen entsprechend ihrer jeweiligen Alterungsstufe miteinander verglichen (gelöstes Kupfer Abbildung 71 und Abbildung 72, GP-Zonen Abbildung 78), so zeigt sich, dass bei derselben Konzentration von Kupferatomen die Scheibenstruktur der GP-Zonen mit 150 MPa das Entstehen von Versetzungen in größerem Ausmaß vereinfacht, als dieselbe Anteil an Kupferatomen mit räumlich zufälliger Verteilung in Form eines Mischkristalls, welche im Mittel zu einer Reduktion der Maximalspannung von 50 MPa führen. Eine Anordnung von GP-Zonen nach der Interaktion mit Versetzungen ist in Abbildung 79 dargestellt. Zur besseren Darstellung wurden die Aluminiumatome ausgeblendet. Die zurückbleibenden Kupferatome in ihrer GP-Zonen-Anordnung zeigen dieselben Strukturänderungen auf, wie sie im Kapitel 9.3.4 GP-I-Zonen nach einem Schneideprozess durch eine Versetzung beobachtet wird. Durch den Kreis ist in Abbildung 79 eine GP-I-Zone markiert, welche zwei Mal von einer Stufenversetzung geschnitten wurde. Die Detailansicht zeigt exemplarisch jeweils eine GP-Zone nach dem Schnitt für eine Versetzungslinie parallel und einmal senkrecht zum Durchmesser der GP-Zone.

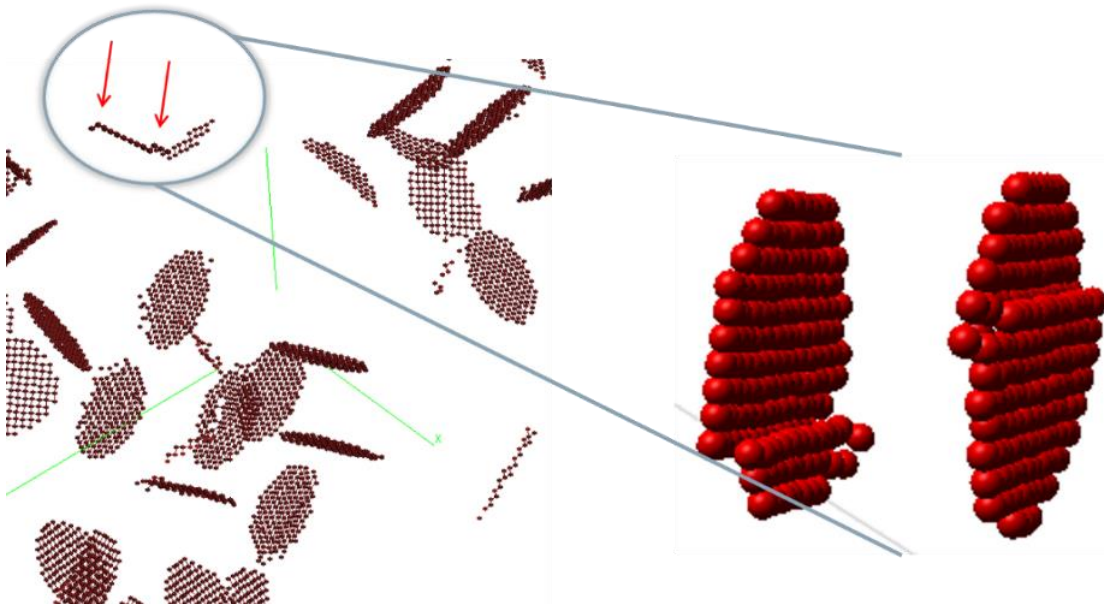


Abbildung 79: Darstellung eines Aluminium-Polykristalls mit GP-Zonen in den verschiedenen Körnern nach erfolgter Dehnung. Aluminiumatome sind ausgeblendet, so dass lediglich die Kupferatome zu sehen sind. Die Detailaufnahme zeigt GP-Zonen nach der Interaktion mit einer Versetzung.

9.5 Nanoindentation

Der „Widerstand eines Werkstoffes gegenüber dem Eindringen durch einen anderen, härteren Werkstoff“ [96] definiert die Härte eines Werkstoffes. Sie dient zur Abschätzung der Festigkeit eines Werkstoffes. Für die Bestimmung der Härte werden Härteeindringprüfungen durchgeführt.

Experimentellen Untersuchungen im Bereich der Nanoindentation prognostizieren eine Reduktion der notwendigen Kraft für die Initialisierung der Plastizität, da keine Versetzungen neu nukleiert werden müssen, sondern es brauchen lediglich die bestehenden auf ihren Gleitebenen aktiviert zu werden [97–99]. Während in [98] und [97] die Annahme getroffen wird, dass das Einsetzen der Plastizität mit der Versetzungsnukleation einher geht, wenn die Versetzungsdichte gering genug und die Indenterspitze ausreichend klein ist und dadurch im betroffenen Bereich unter der Indenterspitze keine Versetzungen vorhanden sind. In [99] wird der Einfluss von vor Beginn der Indentation vorhandenen Versetzungen untersucht. Hierbei wird festgestellt, dass bei Verkleinerung des Indenterdurchmessers die Härte zunimmt, was durch die Wahrscheinlichkeit einen versetzungsfreien Raum unter der Indenterspitze zu treffen, begründet wird.

Der Übersichtsartikel von Ruestes et al. [100] aus dem Jahr 2017 zeigt den großen Beitrag, welchen atomistische Untersuchungen bei dem Verständnis der Nanoindentation leisten können. Übersetzt heißt es dort: Ein scheinbar einfacher Prozess – eine Spitze wird in eine sich plastisch verformende Materialoberfläche gedrückt – dabei sind bis heute immer noch viele Dinge unklar und Molekulardynamik-Simulationen scheinen ein vielversprechender Ansatz zu sein, um das Verständnis dieses Prozesses zu erweitern. Es werden zahlreiche Veröffentlichungen zitiert, welche sich mit der Variation der Kristallstruktur (fcc, bcc, hcp, ...), der Indentergeometrie, und Weiterem auseinandersetzen.

Abschließend wird in [100] angemerkt, dass bereits viele Untersuchungen von Nanoindentationen über nicht perfekte Gitter durchgeführt wurden, z.B. bei Korngrenzen und Mehrschichtsysteme [101], wo gezeigt wird, dass die Grenzschichten die Versetzungsausbreitung stark beeinflussen. Jedoch heißt es in [100] weiter, dass allgemeinere defektbehaftete Materialien, mit zu Beginn enthaltenen Hohlräumen, Versetzungen, Stufen und Kanten, ... noch weiterer Klärung bedürfen.

Ukwatta und Achuthan [102] untersuchten den Einfluss von vor Beginn der Indentation vorhandenen Versetzungen auf das Initiationsverhalten der plastischen Deformation. Hierbei wurden

oberflächennah eine bis drei Versetzungen eingebaut, welche je nach Konfiguration zu einer Erhöhung und zu einer Erniedrigung der notwendigen Kraft auf den Indenter zur plastischen Verformung des Materials führten. Der Einfluss des Radius der Indenterspitze auf die notwendige Kraft ist unabhängig davon, ob Versetzungen vorab enthalten sind oder nicht. Die Kraft steigt mit zunehmendem Radius. Wird die Weglänge des Indenters betrachtet, die notwendig ist um die Kraft auf den Indenter auf dasselbe Niveau zu bringen, wie zum Moment des ersten Spannungsabfalls bei der Indentation, so zeigt sich ein Unterschied. Während sich bei der versetzungsfreien Probe die zu indentierende Weglänge mit größerem Indenterradius erhöht, verringert sie sich bei dem versetzungsbehafteten System ab. Dies wird damit erklärt, dass bei der versetzungsfreien Probe neue Versetzungen entstehen, während bei den Proben mit zum Beginn enthaltenen Versetzungen diese zunächst ihre Gleitebene wechseln. Für diesen Wechsel der Gleitebene ist weniger Energie notwendig, als zur Neubildung von Versetzungen im perfekten Kristall.

9.5.1 Theorie der Nanoindentation

Bevor der Aufbau und Ablauf der Simulation des Nanoindentationsversuchs beschrieben wird, wird die verwendete Methode nach Oliver und Pharr [103] zur Bestimmung des Elastizitätsmoduls schematisch erläutert.

Aus der Veröffentlichung wird die Gleichung zur Berechnung des effektiven Elastizitätsmoduls E_{eff}

$$E_{eff} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{S}{\sqrt{A}} \quad (36)$$

entnommen. Hierbei ist S die Steifigkeit des Systems bei der Entlastung, welche aus der Steigung der Tangente an die Entlastungskurve am Punkt der maximalen Belastung gewonnen wird (vgl. Abbildung 80), und A die projizierte Kontaktfläche. Aus E_{eff} wird mit Gl. (37)

$$\frac{1}{E_{eff}} = \frac{(1 - \nu^2)}{E} + \frac{(1 - \nu_i^2)}{E_i} \quad (37)$$

durch die Verwendung eines simulierten Starrkörpers mit $E_i = \infty$ und einer für die Simulation erhaltenen Poisson-Zahl $\nu \cong 0$ der Elastizitätsmodul E ermittelt. Die projizierte Kontaktfläche A

hängt von der Wahl des Indenters, bzw. dessen Geometrie ab. In der hier verwendeten Arbeit wird der Berkovich-Indenter [104] verwendet, welcher die Form einer dreiseitigen Pyramide mit einem gleichseitigen Dreieck als Grundfläche hat. Die Seitenflächen schließen mit der Pyramidenhöhe einen Winkel von $63,5^\circ$ ein. Daraus ergibt sich nach [105] eine Kontaktfläche in Abhängigkeit von der Kontakttiefe des Indenters zu:

$$A(h_c) = 24,67 h_c^2 + 0,562 h_c + 0,003216 \quad (38)$$

Die Härte als Definition der mittleren Belastung pro Kontaktfläche, wie in Gl. (39) angegeben, entspricht im Nanometerbereich gegebenenfalls nicht der auf konventionelle Weise durch Experimente bestimmten Härte [103], ist jedoch für die meisten Materialsysteme in guter Übereinstimmung. Die Unterschiede sind durch das anisotrope Materialverhalten begründet, welches in makroskopischen Experimenten durch statistische Mittelung egalisiert wird.

$$H = \frac{P_{max}}{A} \quad (39)$$

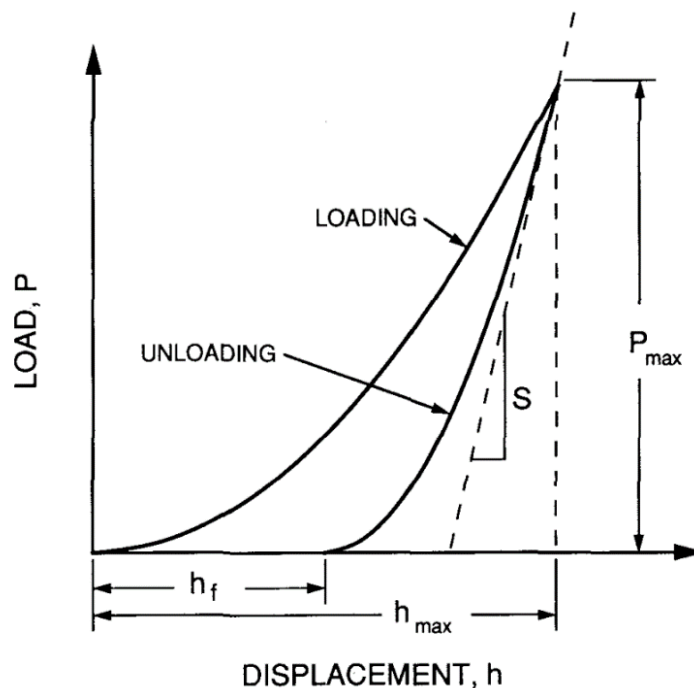


Abbildung 80: Schematische Darstellung des Last-Verschiebungs-Diagramms für die Be- und Entlastung beim Nanoindentationsversuch aus [103]. Wichtige Größen hierbei sind die maximale Belastung P_{max} , die Steigung S , sowie die finale Eindringtiefe h_f und die maximale Eindringtiefe h_{max} .

9.5.2 Aufbau der Nanoindentationssimulation

Die Härteeindringprüfung zu simulieren, ist die Zielsetzung im vorliegenden Kapitel. Es wird ein Berkovich-Indenter über dem Prüfkörper im Abstand von wenigen Ångström positioniert. Der Indenter ist aus Atomen aufgebaut, ist jedoch als Starrkörper definiert. Die Wechselwirkung zwischen Indenteratomen und den Atomen des zu prüfenden Systems wird durch ein rein repulsives Potential beschrieben. Der Indenter wird schrittweise um $0,02 \text{ \AA}$ abgesenkt. Nach jeder Absenkung wird das System mit Hilfe der Routine Minimize in LAMMPS in ein energetisches Gleichgewicht überführt. Die Bewegungsfreiheit der Atome auf der Unterseite des Prüfkörpers werden in Richtung der Indenterbewegung eingeschränkt, um ein Ausweichen des Gesamtsystems nach unten zu verhindern. Es werden typischerweise 1000 Simulationsschritte zum Absenken ausgeführt, damit sich der Indenter insgesamt um 20 \AA nach unten bewegt. Abhängig von der anfänglichen Distanz zwischen Indenterspitze und Prüfkörperoberfläche ergibt sich daraus eine Indentationstiefe von $15 - 20 \text{ \AA}$. Als Systemgröße werden hauptsächlich die bereits aus den Scherversuchen bekannten Abmessungen von circa $460 \times 21 \times 15 \text{ nm}^3$ herangezogen und um den Indenter ergänzt. Der Indenter besitzt als Grundfläche ein gleichseitiges Dreieck mit einer Kantenlänge von $13,5 \text{ nm}$ und beinhaltet bei einer Höhe von circa 22 \AA somit circa 12000 Atome. Die periodischen Randbedingungen bleiben davon unberührt und bestehen weiterhin senkrecht zur Indentationsrichtung.

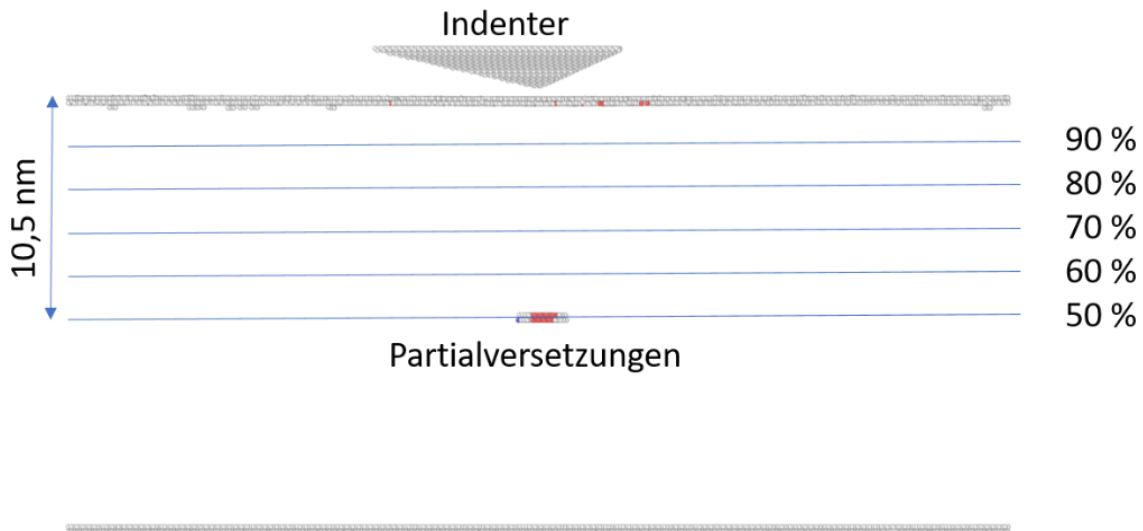


Abbildung 81: Darstellung des Simulationsaufbaus vor Absenken des Indenters. Hier ist eine Versetzung in der Hälfte der Höhe des Modells eingebracht (50 %). Für die folgenden Untersuchungen gibt es Konfigurationen, bei welchen die Versetzung in den Höhen 60 % - 90 % liegt.

9.5.3 Nanoindentation am Einkristall

Zum Simulieren der Nanoindentationsprüfung werden die Systeme aus den Scherversuchen herangezogen (vgl. Kapitel 9.3.1), jedoch zunächst ohne eingebrachte Versetzung. Somit liegen Aluminiumlegierungssysteme vor, welche eine Magnesiumkonzentration von 0 %, 1 %, 2 % und 5 % beinhalten. Die Simulationen wurden ebenfalls für das System aus Kupfer als Legierungselement in der Aluminiummatrix durchgeführt, die Resultate decken sich qualitativ mit den im Folgenden präsentierten Ergebnissen für Magnesium. Daher werden hier ausschließlich Ergebnisse zur Nanoindentation von Aluminium-Magnesium-Legierungen präsentiert. Der Normalenvektor der zu indentierenden Ebene ist der (111)-Vektor. In Abbildung 82 ist die Indenterkraft über der Indenterbewegung aufgetragen. Die Kurven enden an verschiedenen Werten, da sie so angepasst wurden, dass die Indentation an derselben Stelle beginnt. Zwar ist der Modellaufbau so, dass der Indenter für jede Simulation zu Beginn denselben Abstand zur Prüfkörperoberfläche hat, jedoch führt die Substitution der Aluminium- durch Magnesiumatomen aufgrund der größeren Gitterkon-

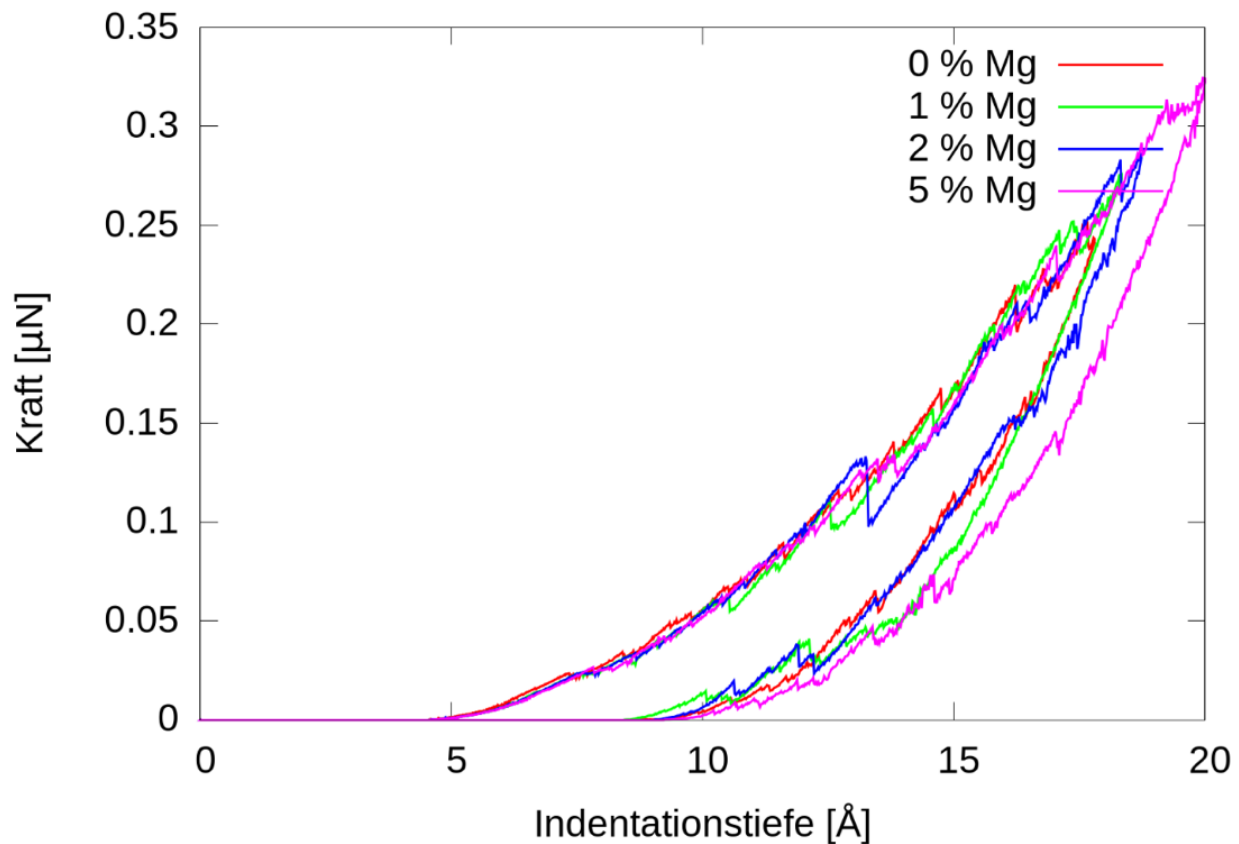


Abbildung 82: Kraft-Indentations-Diagramm für vier verschiedenen Magnesiumkonzentrationen.

stanten von Magnesium zu einer Ausdehnung des Systems und daher zu einer Reduktion des Abstandes der Indenterspitze zur Oberfläche. Ein charakteristischer Unterschied zwischen den Kurven ist nicht auszumachen. Die beim Eindringen erhaltenen Ergebnisse sind in Tabelle 6 zusammengefasst.

Tabelle 6: Ergebnisse der Nanoindentationssimulation

	hc [Å]	Fi [μN]	E [GPa]	H [GPa]
0 % Mg	16,55	0,240	127,51	10,24
1 % Mg	16,03	0,267	125,42	11,41
2 % Mg	15,7	0,280	118,27	11,71
5 % Mg	15,4	0,317	113,55	11,10

Die ermittelten Werte für die Härte der vier Legierungen überschätzen den Wert von 4 GPa, wie er von Komanduri et al. [106] bestimmt wurde, dort wurde die Nanoindentation für verschiedene Orientierungen von reinem Aluminium untersucht. Jedoch betrug die Indentationstiefe lediglich 0,81 nm. Der berechnete E-Modul nimmt mit zunehmender Magnesiumkonzentration ab, was auf eine Behinderung der Versetzungsbewegung nach dem Entlasten zurückzuführen ist. Ein Marker zur Einordnung des Grades der plastischen Deformation bildet die Versetzungsdichte. Die Gesamtlänge der in dieser Simulation entstandenen Versetzungen beträgt 192,2 nm, dies entspricht auf den simulierten Körper gerechnet einer Versetzungsdichte von $9,00 \times 10^{15}$, was einem stark verformten Material entspricht. Für die nachfolgende Betrachtung wird jedoch weiter die Gesamtlänge der Versetzungssegmente als Maß genommen, da die Versetzungen konzentriert um den Indenter auftreten und das restliche Volumen versetzungsfrei ist. Somit würde eine Vergrößerung der Simulationsbox die Versetzungsdichte beliebig ändern, ohne Einfluss auf die Interaktionen zwischen den Versetzungen zu haben.

9.5.4 Nanoindentation am Einkristall mit Versetzung

Die Analyse der durchgeführten Nanonindentations-Simulationen zeigt, dass sich bei der Indentation stets Versetzungen bilden, welche in das Materialsystem hineinpropagieren. Daher wurde das Interesse geweckt, welchen Einfluss eine bereits vor Beginn der Indentation im System vorhandene Versetzung auf die Ergebnisse der Nanoindentation hat, analog zu den Untersuchungen in [102], jedoch mit einem größeren Abstand zur Oberfläche. Bei der Auswertung der Be- und Entlastungskurven der verschiedenen Simulationen der Indentationsversuche ergab sich stets eine höhere auf den Indenter wirkende Gegenkraft in den Systemen, in welchen zu Beginn der Simulation bereits eine Versetzung eingebracht war.

Dies zeigt sich beispielhaft in Abbildung 83, bei welcher die in Rot dargestellte Kurve ihren Höchstwert der Belastung bei $0,2866 \mu\text{N}$ erreicht. Wohingegen die das System mit initialer Versetzung abbildende grüne Kurve im Belastungsbereich vollständig über der des zu Beginn versetzungslosen Systems liegt und ihr Maximum bei $0,3639 \mu\text{N}$ erreicht, der Höchstwert ist somit circa 27 % höher als für das versetzungslose System.

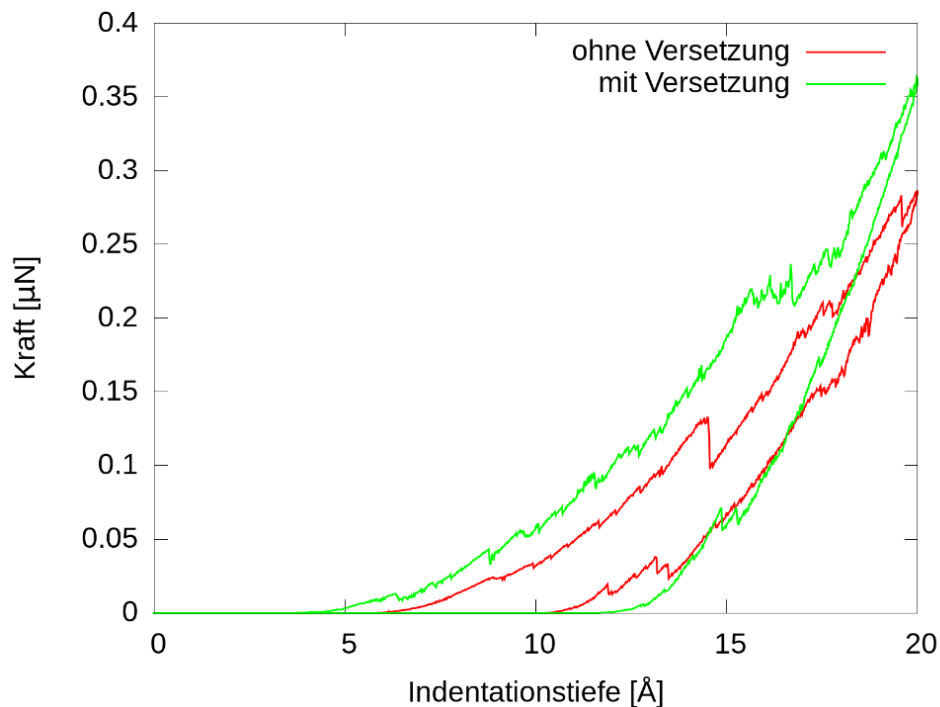


Abbildung 83: Die Kraft des Indenters bei Be- und Entlastung aufgetragen über der Indenterverschiebung. Der Magnesiumanteil in der Aluminiummatrix beträgt 2 %. Die rote Kurve zeigt den Verlauf für die zu Beginn versetzungsfreie Struktur, die grüne Kurve den entsprechenden Verlauf für ein System mit initialer Versetzung in der Mitte der Höhe des Substrates.

Dieser Mehrbedarf an Kraft zur Indentation lässt sich durch die Interaktion der entstehenden Versetzungen mit der zuvor eingebrachten Versetzung erklären. Zum Beginn der Belastung führt das Spannungsfeld, welches durch die Gitterverzerrung um die bestehende Versetzung herum entsteht, dazu, dass das Eindringen des Indenters behindert wird, wodurch die anfängliche Anhebung der notwendigen Kraft erklärt ist. Die Differenz der erforderlichen Kraft erhöht sich bei fortschreitendem Eindringen des Indenters in den Prüfkörper. Dabei trägt die Interaktion zwischen den vom Indenter neu emittierten Versetzungen mit der anfänglich bereits vorhandenen Versetzung zusätzlich zum gesamten Spannungsfeld bei. Diese verfestigende Wirkung ist vergleichbar mit der einer Kaltverfestigung. Durch die Behinderung der Versetzungsbewegung weg von der Indenterspitze durch die zuvor eingebrachte Versetzung kommt es zur Aufstauung (pile-up) der vom Indenter emittierten Versetzungen, wodurch eine weitere Emission erschwert wird und somit einen weiter erhöhten Kraftaufwand nach sich zieht. Die weniger ausgeprägten Zacken in der Kurve bestätigen diesen Eindruck. Die Reduktion der notwendigen Kraft durch entstehende Versetzungen fällt im Fall ohne vorhandene Versetzung, z.B. nach Absenkung des Indenters um $14,5 \text{ \AA}$, intensiver aus, da die Versetzung lediglich durch die relativ geringe Peierls-Spannung gehindert in das System abgleiten kann.

Diese Beobachtung wurde zum Anlass genommen den Einfluss des Abstandes der Versetzung zur zu indentierenden Oberfläche zu analysieren. Der Indentationsablauf bleibt der oben Beschriebene. Jedoch wird die Position der Gleitebene, in der die Versetzung eingebaut ist, variiert. Bisher wird diese in der Mitte der Höhe des simulierten Systems, bei $10,5 \text{ nm}$, eingebracht (im Vergleich zu $1-3 \text{ nm}$ bei [102]), jedoch für diese Simulationsreihe ebenso in Höhe von 60% bis 90% der Gesamthöhe in Schritten von je 10% . Für die vier verschiedenen Konzentrationen von Fremdatomen ergeben sich somit pro Legierungselement 20 Simulationen. In Abbildung 84 - Abbildung 88 sind verschiedene Aufnahmen zum jeweiligen Ende der Indentation dargestellt. Sie zeigen lediglich die Atome welche sich nicht in kubisch flächenzentrierter, also für die Aluminiumlegierung normale, Konfiguration befinden. Die Farbe der einzelnen Atome kennzeichnet ihre Zugehörigkeit zu Kristallstrukturen. Hierbei steht rot für Atome in Stapelfehlern, sie befinden sich in der hexagonal dichtest gepackten Konfiguration. Einige Atome werden kubisch raumzentrierter Struktur zugeschrieben, welche in blau abgebildet sind. In weiß sind zum einen die Indenteratome markiert,

sowie Atome die durch die CNA keiner kristallographischen Struktur zugeordnet wurden, dies sind unter anderem die Oberflächenatome und jene die direkt in den Versetzungslinien liegen.

In Abbildung 84 sind die Aufnahmen für reines Aluminium mit den fünf verschiedenen Versetzungshöhen dargestellt. In Teilbild a) und b) ergibt sich eine komplexe Versetzungsstruktur, welche sich vom Indenter weg bis hin zur bestehenden Versetzung ausbreitet. Hier zeigt sich bereits, dass die eingebrachte Versetzung als Begrenzung der Ausbreitung der neu emittierten Versetzungen dient. Die Gesamtlänge aller Versetzungssegmente summiert sich auf 192,2 nm, wobei 30 nm auf die initial eingebrachte Versetzung entfallen. Das Versetzungsgeflecht wird hauptsächlich durch Shockley-Partialversetzungen gebildet, für das Teilbild a) zu 92 Prozent. Zusätzlich umfasst das Versetzungsnetzwerk circa 4,2 Prozent perfekte und 2,6 Prozent Kantenversetzungen (stair-rod). Das System beinhaltet ebenso sogenannte Jogs, welche als Sprünge der Versetzung definiert sind. Hierbei wird unterschieden zwischen Sprüngen innerhalb der Gleitebene, auch Kinken genannt, und die Gleitebenen überbrückende Sprünge. Zwischen den Partialversetzungen befinden sich die Stapelfehler.

Für Teilbild b) zeigt sich ein vergleichbares Bild. Das Versetzungsnetzwerk ist hierbei etwas breiter aufgefächert, beinhaltet jedoch bei einer Versetzungsgesamtlänge von 198,7 nm nur geringfügig mehr Versetzungen. Die neu emittierten Versetzungen bewegen sich nicht über die Gleitebene der bestehenden Versetzung hinaus in den Kristall. Im Unterschied zu Teilbild a) wird die zuvor eingebrachte Versetzung durch das Spannungsfeld der neu hinzugekommenen Versetzungen von ihrer ursprünglichen Position auf ihrer Gleitebene aus der Mitte heraus bewegt.

Die Versetzungen des in Teilbild c) aus Abbildung 84 dargestellten Systems ergeben eine Gesamtlänge der aufsummierten Teilversetzungen von 206,4 nm und sind somit erneut etwas länger als bei den Varianten mit größerem Abstand der Versetzung zur indentierten Oberfläche. Auffällig ist bei diesem Abstand, dass sich ein Zweig des Versetzungsnetzwerks an der ursprünglichen Versetzung vorbei in das System ausbreitet. Wird die Entwicklung, welche hier nicht bebildert ist mitberücksichtigt, so zeigt sich, dass die bestehende Versetzung zunächst vom ersten Zweig angezogen wird und dann direkt mit ihm wechselwirkt. Bei fortschreitender Indentation bildet sich erst später der zweite Zweig aus. Die bestehende Versetzung wird von diesem Zweig ebenfalls angezogen, jedoch durch die Interaktion mit dem ersten Zweig von der Bewegung hin zum zweiten Zweig aufgehalten. Das Betrachten des zweiten Zweiges im letzten Schritt der Indentation (Teilbild

c)) zeigt, dass die beiden Partialversetzungen häufige Kontaktpunkte miteinander ausbilden, wodurch im Gegensatz zu den Beispielen der Teilbilder a) und b), sowie zum ersten Zweig, die Stapelfehlerflächen stark segmentiert sind. Dies zeigt eine ausgeprägte Beeinflussung der Versetzungen des zweiten Zweiges durch das Spannungsfeld der initial eingebrachten Versetzung, obgleich im Verlauf der Simulation deren Gleitebene geschnitten wurde.

Für den Fall der Gleitebene auf 80 Prozent der Gesamthöhe, welcher in Teilbild d) dargestellt ist, sinkt die Länge der summierten Teilsegmente auf 155,5 nm. Der Anteil der Atome in hcp-Konfiguration sinkt dabei überproportional stark von zuvor 2185 Atomen auf 1156 Atome. Diese Abnahme an Stapelfehleratomen beruht auf dem Effekt der sich vielfach schneidenden Partialversetzungen, welcher zuvor an dem zweiten Zweig der Konfiguration aus Teilbild c) beobachtet wurde. Der strukturelle Ablauf der Versetzungsausbreitung ist ebenfalls stark vergleichbar mit dem aus Teilbild c): Zunächst interagieren die neu emittierten Versetzungen mit dem bestehenden Partialversetzungspaar und später bildet sich eine Versetzung, welche die Gleitebene in 80 % der Gesamthöhe leicht nach unten durchbricht.

Im letzten Teilbild von Abbildung 84 wird das Aluminiumsystem mit initialer Versetzung in 90 % der Gesamthöhe dargestellt. Direkt ersichtlich ist ein tieferes Eindringen der Versetzungen in das Materialsystem auch unterhalb der Gleitebene der vorher eingebrachten Versetzung. Die Partialversetzungen sind jedoch weiterhin nicht so angeordnet wie in den ersten Teilbildern, so dass sich erneut keine zu großen zusammenhängenden Stapelfehlerflächen ausbilden. Die Anzahl der Atome in hcp-Konfiguration fällt dabei weiter auf einen Wert von 998 Atome und obwohl die Versetzungen sich raumgreifender in das simulierte Probenvolumen ausbreiten, sinkt die Gesamtversetzungslänge erneut auf 144,8 nm. Dies deutet darauf hin, dass die initiale Versetzung sehr dicht an der Oberfläche den neu gebildeten Versetzungen keine starke Barriere bezüglich der Ausbreitung darstellen kann, jedoch ihre Ordnung erheblich beeinträchtigt.

Die Simulationen wurden für reines Aluminium, sowie mit 1, 2 und 5 % dazulegiertem Magnesium durchgeführt. Die Momentaufnahmen zum Zeitpunkt tiefster Indentation für die höchste Magnesiumkonzentration wird in Abbildung 85 dargestellt. Die Darstellungsform sowie die gewählten Schnappschüsse sind äquivalent zu den in Abbildung 84 gewählten. Es zeigt sich in großen Teilen ein sehr ähnliches Bild der Versetzungsentstehung und Versetzungspropagation während

der Indentation. Im Wesentlichen sollen daher lediglich die Unterschiede zwischen den Simulationsreihen noch einmal ausgeführt werden.

Beim Betrachten von Teilbild a) und b) fällt auf, dass die neu entstandenen Versetzungen nicht wie bei dem System mit reinem Aluminium von der bestehenden Versetzung angezogen werden, sondern jeweils die Versetzungsschlaufen in einem Abstand an der bestehenden Versetzung vorbeiführen. Dies lässt sich durch die von den Fremdatomen verursachte Einschränkung der Beweglichkeit der initialen Versetzung erklären. Für die Bewegung der Versetzung hin zu den durch den eindringenden Indenter neu entstandenen Versetzungen wäre eine stärkere Anziehung notwendig, als die beiden Spannungsfelder aufbringen.

In Teilbild a) bilden sich sehr ausgeprägte Stapelfehlerflächen im Kern des Versetzungsnetzwerks um die Indenterspitze. In Teilbild c) und d) werden die emittierten Versetzungen nahezu vollständig an der Gleitebene der bestehenden Versetzung aufgehalten. Für das Teilbild e) präsentieren sich die in das Materialsystem vordringenden Partialversetzungen als seltener selbst interagierend, so dass sich ausgeprägtere zusammenhängende Stapelfehlerflächen ausbilden als in Abbildung 84 e).

In Abbildung 86 - Abbildung 88 sind jeweils die selbe prozentuale Höhe der Gleitebene für die verschiedenen Magnesiumkonzentrationen 0 %, 1 %, 2 % und 5 % abgebildet. Die Farbgebung und die Auswahl der in den Grafiken dargestellten Atome entspricht den für die vorherigen Bilder beschriebenen. Für die Höhe der Gleitebene von 50 % interagieren die Versetzungsarme ausschließlich ohne Fremdatome in der Aluminiummatrix direkt mit der zuvor eingebrachten Versetzung. Für die Fälle der Aluminium-Magnesium-Mischkristallen, mit durch 1%, 2% und 5% Magnesium substituierten Atome, werden die neu entstandenen Versetzungen zwar angezogen, jedoch ist diese Attraktion nicht stark genug, um die initiale Versetzung zu bewegen. Dies ist durch die Fremdatome in der Gleitebene begründet, welche die Versetzungsbewegung behindern (vgl. Kapitel 9.3.1 Schersimulationen mit Molekulardynamik). Der aus Abbildung 84c) und Abbildung 85c) ersichtliche Blockade-Effekt der initialen Versetzung lässt sich auch bei den übrigen Magnesiumkonzentrationen auf dieselbe Weise beobachten für die Gleitebenenhöhe von 70 % der Systemhöhe (vgl. Abbildung 88).

Für die Höhe der Gleitebene der Versetzung von 70 % der Systemhöhe ist die Gesamtlänge der Versetzungssegmente am höchsten im Vergleich mit den anderen Höhen der Gleitebenen der eingebrachten Versetzung. Für die Struktur mit der Konzentration von 2 % Magnesium ist die Versetzungslinienlänge um 10,7 Å kürzer als bei der Struktur mit der um 10 Prozent niedriger eingebrachten Versetzung. Eine Übersicht über die Gesamtversetzungslinienlängen ist in Tabelle 7 für die verschiedenen Kombinationen der Versetzungshöhen und Magnesiumkonzentrationen dargestellt. Ausgeprägte Stapelfehlerflächen ergeben sich lediglich für die fremdatomfreie Struktur. Ist die Höhe der Gleitebene der eingebrachten Versetzung 10 % unter der indentierten Oberfläche, so überwinden die emittierten Versetzungen die bestehende Versetzung unabhängig von der Fremdatomkonzentration. Die zusammenhängenden Stapelfehlerflächen nehmen mit zunehmender Legierungsatomzahl zu.

Tabelle 7: Aufsummierte Versetzungslänge für verschiedene Versetzungshöhen und Magnesiumkonzentrationen

	50 %	60 %	70 %	80 %	90 %
0 % Mg	192,2	198,7	206,4	155,5	144,8
1 % Mg	218,1	210,2	263,4	255,5	96,8
2 % Mg	177,8	209,3	198,6	178,2	161,1
5 % Mg	233,8	180,2	223,1	173,3	159,6

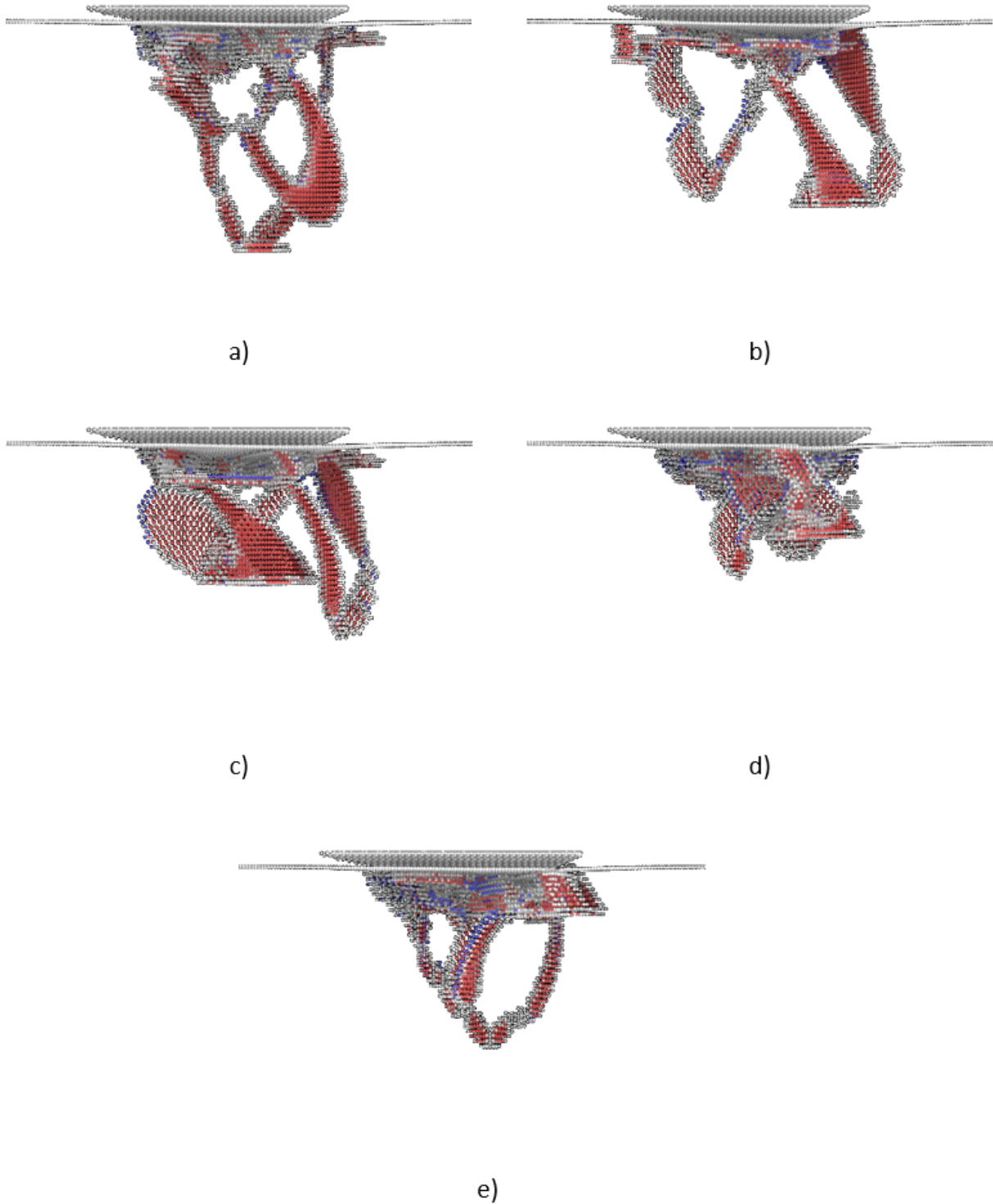


Abbildung 84: Aluminiumsubstrat nach der Indentation um 15 \AA durch den Berkovich-Indenter. Die Atome in der kfz-Konfiguration werden aus Visualisierungsgründen ausgeblendet. In Rot sind die Atome eingefärbt, welche durch die CNA als hcp zugehörig, als Stapelfehler, identifiziert werden, blau repräsentiert Atome in krz- Konfiguration und weiß diejenigen Atome die keiner Struktur zugeordnet werden können sowie die Indenteratome. Die relative Höhe der initial eingebauten Versetzung beträgt in a) 50 %, b) 60 %, c) 70 % d) 80 % und in e) 90 %.

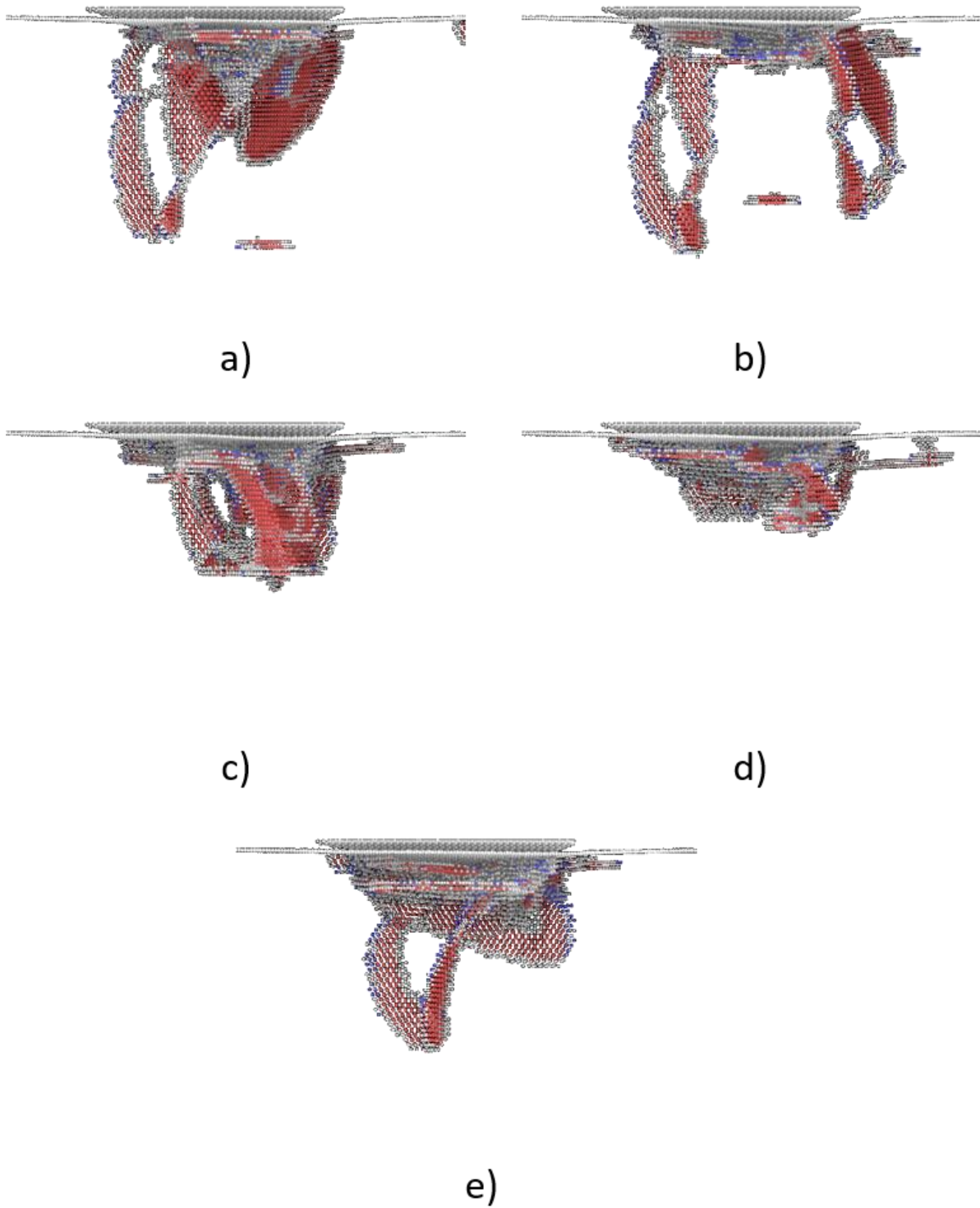


Abbildung 85: Aluminium-Magnesium-Mischkristall mit 5 % zu legiertem Magnesium nach der Indentation um 15 Å durch den Berkovich-Indenter. Die Auswahl sowie die Färbung der dargestellten Atome ist wie in Abbildung 84. Die relative Höhe der initial eingebauten Versetzung beträgt in a) 50 %, b) 60 %, c) 70 % d) 80 % und in e) 90 %.

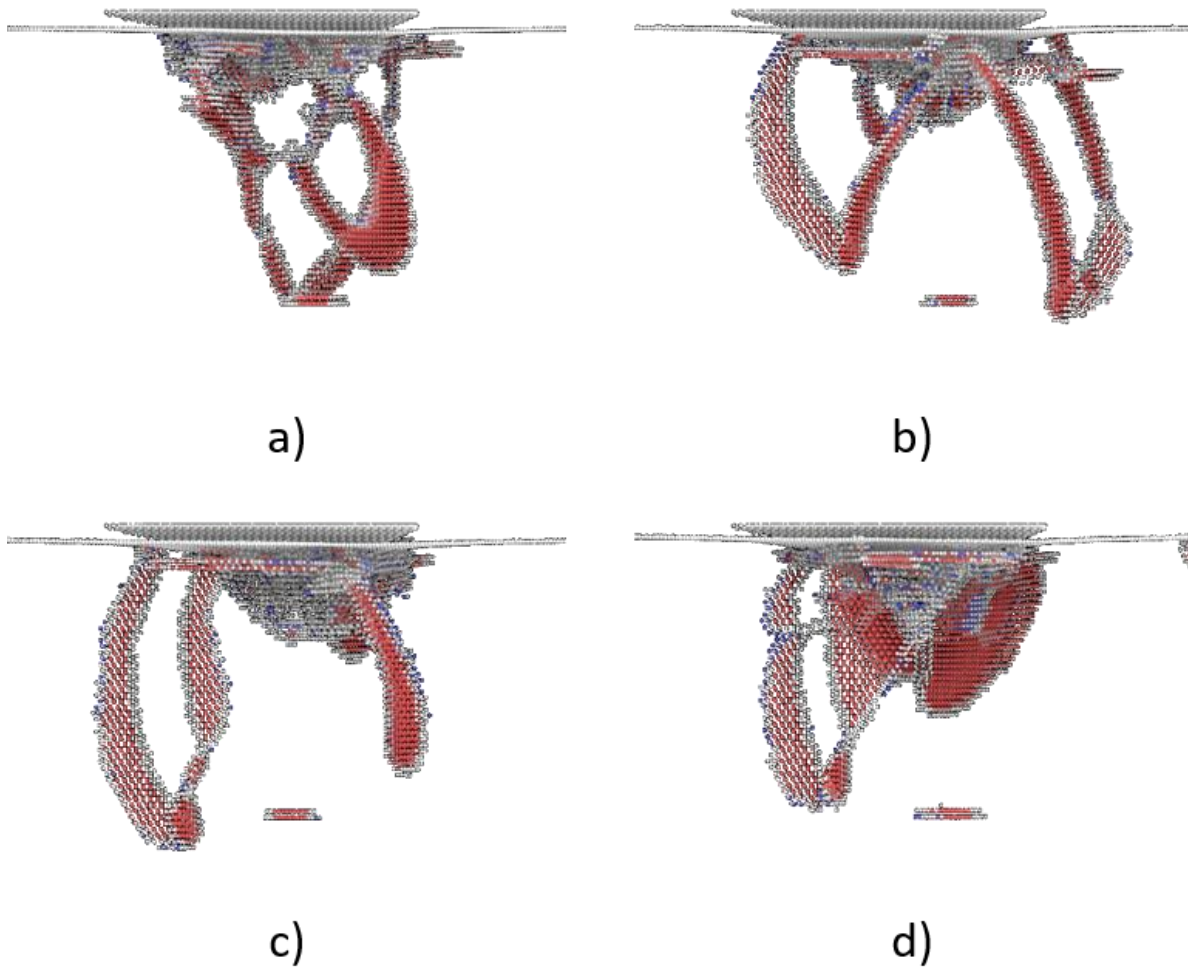


Abbildung 86: Aluminium-Magnesium-Mischkristall nach der Indentation um 15 \AA durch den Berkovich-Indenter. Die Auswahl sowie die Färbung der dargestellten Atome ist wie in Abbildung 84. Die relative Höhe der initial eingebauten Versetzung beträgt in 50% der Höhe der Simulationsbox. Die Magnesiumkonzentration beträgt für a) 0 %, b) 1 %, c) 2 % und d) 5 %.

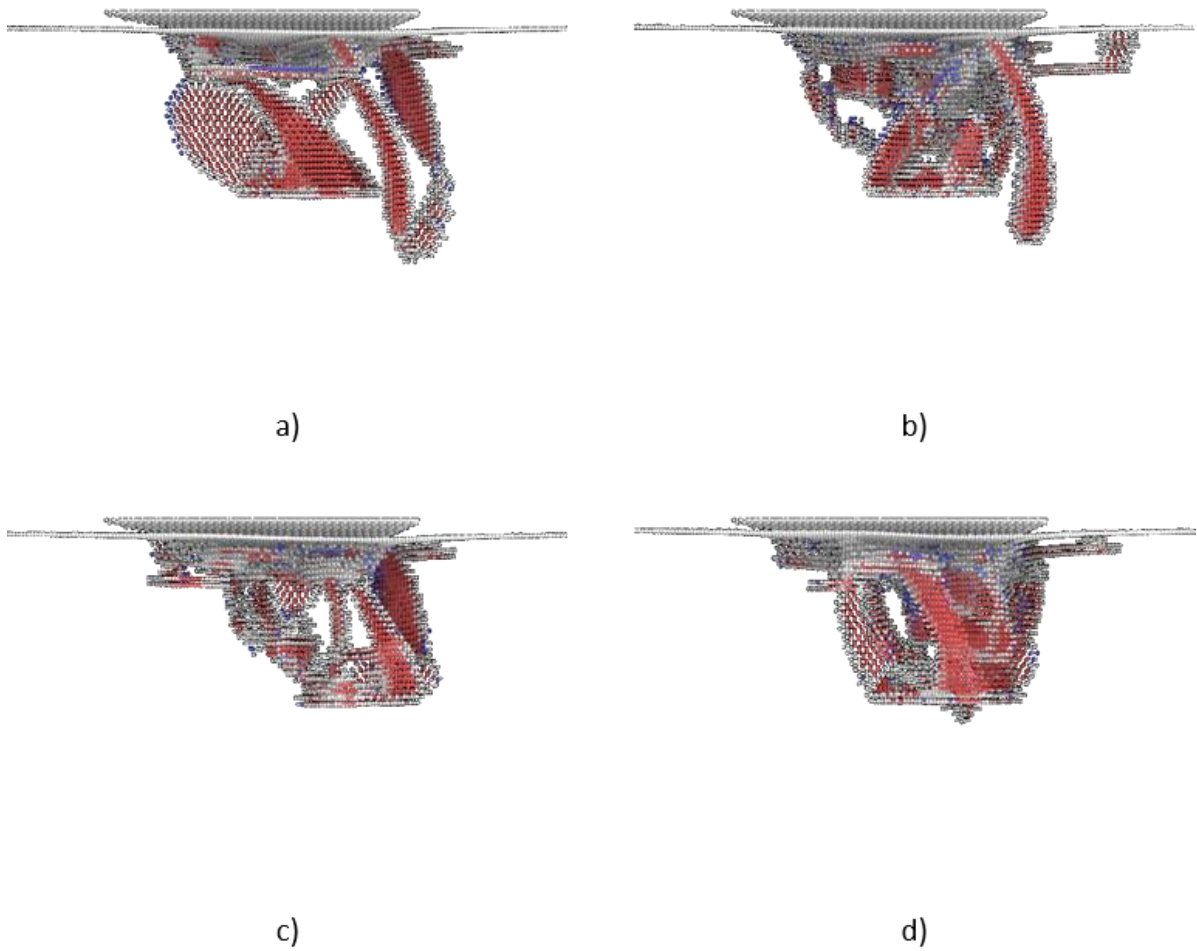


Abbildung 87: Aluminium-Magnesium-Mischkristall nach der Indentation um 15 \AA durch den Berkovich-Indenter. Die Auswahl sowie die Färbung der dargestellten Atome ist wie in Abbildung 84. Die relative Höhe der initial eingebauten Versetzung beträgt in 70% der Höhe der Simulationsbox. Die Magnesiumkonzentration beträgt für a) 0 %, b) 1 %, c) 2 % und d) 5 %

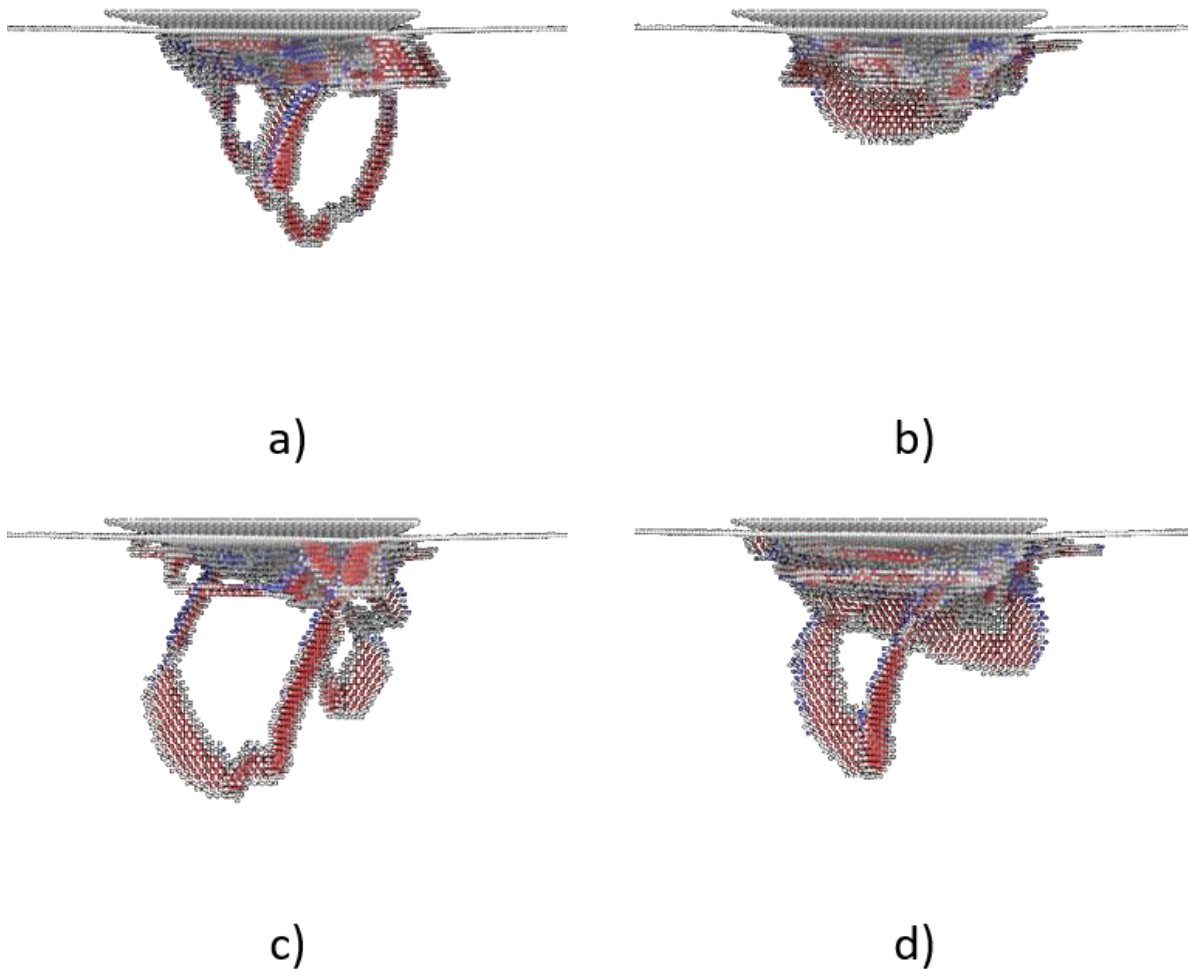


Abbildung 88: Aluminium-Magnesium-Mischkristall nach der Indentation um 15 \AA durch den Berkovich-Indenter. Die Auswahl sowie die Färbung der dargestellten Atome ist wie in Abbildung 84. Die relative Höhe der initial eingebauten Versetzung beträgt in 90% der Höhe der Simulationsbox. Die Magnesiumkonzentration beträgt für a) 0 %, b) 1 %, c) 2 % und d) 5 %.

Die Legierungselemente bewirken wie bei der Nanoindentation am Einkristall eine Vergrößerung des Prüfvolumens. Daher ist ein Vergleich der Kraft-Eindring-Kurven lediglich zwischen Systemen derselben Fremdatomkonzentration zu empfehlen. In Abbildung 89 werden die Kraft-Inden-tations-Kurven gruppenweise für die verschiedenen Magnesiumkonzentrationen vorgestellt. Selbst bei Betrachtung nach Gruppen innerhalb einer Konzentration ist ein numerischer Vergleich sehr schwierig, da die Versetzungsemissionen spontan auftreten und somit zu unregelmäßigen Entlastungen führen. Diese Entlastungsknicke in den Kurven werden mit abnehmendem Abstand der

vorab eingebrachten Versetzung zur indentierten Oberfläche schwächer ausgeprägt. Der glättende Effekt der bestehenden Versetzung lässt sich dadurch erklären, dass eine neu emittierte Versetzung nach ihrer Entstehung nicht lediglich durch die Peierls-Spannung gebremst in den Kristall propagiert, sondern zusätzlich durch das Spannungsfeld der bereits vorhandenen initialen Versetzung und der Legierungsatome beeinflusst wird. Diese Interaktion der Versetzungen macht eine höhere externe Kraft zur Ausbreitung notwendig, wodurch ein Teil der frei werdenden Entlastung durch die Versetzungsemission kompensiert wird.

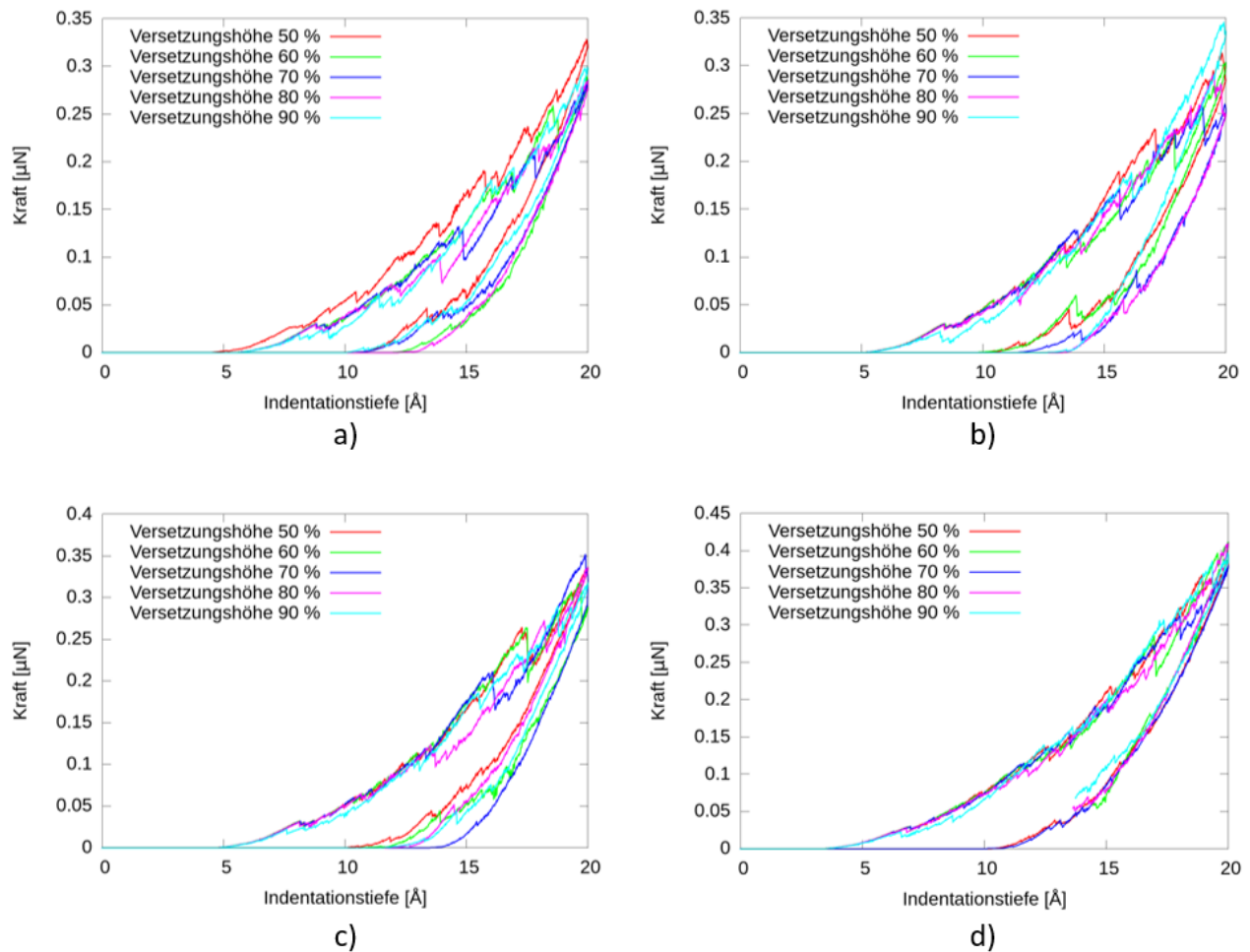


Abbildung 89: Kraft-Indentation-Kurve in a) – d) für 0 at. %, 1 at. %, 2 at. % und 5 at. % Magnesiumkonzentration, welche in Form von gelösten Atomen vorliegt.

Die hier gezeigten Untersuchungen verdeutlichen den Einfluss von Versetzungen auf die aus der Simulation bestimmte Härte. Die bestimmte Sensitivität vom Abstand der bestehenden Versetzung zur Oberfläche, unterstreicht den anisotropen Werkstoffcharakter bei der Messung mittels Nanoindentation, da es entscheidend ist, ob sich eine Versetzung an der Messstelle befindet oder nicht und zusätzlich in welchem Abstand zur Oberfläche diese positioniert ist. Darüber hinaus wird gezeigt, dass die Eindringprüfung ebenfalls den in Kapitel 4.6.3 beschriebenen Verfestigungsmechanismus der Kaltverfestigung nachweisen kann.

Die Ergebnisse und Erkenntnisse der Indentationssimulationen sollen der Aufforderung des Reviewartikels von Ruestes et al. [100] nachgekommen sein und zur Klärung des Verständnisses des Prozesses der Nanoindentation beigetragen haben.

10 Zusammenfassung und Ausblick

Aluminium und dessen Legierungen sind trotz ihrer langen Tradition der Herstellung und Anwendung weiterhin häufig vertreten bei der Anwendung neuer, innovativer Materialien. Die geringe Dichte sowie die gute Einstellbarkeit von Materialeigenschaften durch Legierungselemente ermöglichen einen energieeffizienten und zielgerichteten Einsatz. Die vorliegende Arbeit als Teil der Grundlagenforschung erweitert das Verständnis des Materialverhaltens sowie der zugrundeliegenden physikalischen Prozesse und in Folge daher ebenfalls das Einsatzgebiet. Deshalb steht die Untersuchung von Materialverhalten und Wechselwirkungsmechanismen im Fokus dieser Arbeit.

Um der von Jacobsen und Schiøtz [107] in Aussicht gestellten Vergleichbarkeit von Simulation und Experiment näher zu kommen, wurden aufwendige Simulationen durchgeführt. Hierbei wurde mit einem Bereich an Dehnraten zwischen $5,0 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ und $1,0 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ ein Spektrum von mehr als sechs Zehnerpotenzen abgedeckt. Durch die extrem langen Simulationen mit, für atomistische Verhältnisse, langsamen Dehnraten wurde ein Übergang von simulierten zu experimentellen Dehnraten realisiert. Die Langzeitsimulation mit mehr als 150 Berechnungstagen führt beim Vergleich mit dem mit derselben Dehnrate ausgeführten Experiment [60] mit 1202 MPa zu einem um lediglich circa 60 MPa geringeren Maximalwert für die Spannung im Zugversuch, trotz unterschiedlicher Mikrostrukturen (Abbildung 22). Für die untersuchten Scherraten ergab sich wie in Abbildung 23 gezeigt kein nennenswerter Einfluss auf die Widerstandsstärke der GP-Zone. Die resultierende Versetzungsgeschwindigkeit ist mit $13,7 \text{ ms}^{-1}$ deutlich geringer als der theoretische Grenzwert bei 2888 ms^{-1} , wodurch sichergestellt ist, dass keine Phänomene auftreten, welche auf eine extreme Versetzungsgeschwindigkeit zurückzuführen sind.

Der Übergang vom Experiment zur Simulation wurde ebenfalls beim Größeneffekt für die Experimente von Huang et al. [66] bewerkstelligt. Für die Modellierung des kleinsten im Experiment untersuchten Probenkörper wurde ein Modell generiert, welches 909 Millionen Aluminiumatome beinhaltet. Das Anwachsen der berechneten maximalen Zugspannung konnte für kleiner werdende Probenabmessungen zunächst bestätigt werden, bevor ab einer Systemhöhe von 300 nm bis 75 nm, bei einer Breite von 102 nm bis 26nm, ein in etwa konstanter Wert der Maximalspannung erreicht wurde. Die weitere Reduktion der Probenkörpergröße führt zur Absenkung der Maximalspannung

in Analogie zum inversen Hall-Petch-Effektes, bei welchem für Korngrößen im Polykristall unter circa 20 nm im Durchmesser ebenfalls eine Reduktion der Maximalspannung eintritt.

Das intrinsische Spannungsfeld durch 0-, 1- und 2-dimensionale Gitterfehler in Form von Fremdatomen, Versetzungen und Korngrenzen sowie Ausscheidungen wurde ermittelt. Hierbei wurden energetisch favorisierte Anordnungen von Korngrenzorientierungen ausgemacht, sowie die anisotrope Ausbildung des Spannungsfeldes um GP-Zonen herausgearbeitet. Die Untersuchungen des intrinsischen Spannungsfeldes tragen zum Verständnis der Mechanismen bei der plastischen Deformation bei, zum Beispiel bei der Interaktion von Versetzungen mit GP-Zonen.

Ausgehend von den Ergebnissen der statischen Spannungssimulationen wurden mit Schersimulationen die Versetzungen als Träger der plastischen Deformation durch Einkristalle bewegt. Im Fokus stand hierbei die Hindernisstärke der jeweiligen Legierungselemente abhängig von ihrer Konzentration und der Form ihres Auftretens. Eine Erhöhung der Hindernisstärke mit zunehmender Fremdatomkonzentration wurde sowohl für Kupfer als auch für Magnesium beobachtet. Die Temperatur bewirkt bei hohen Konzentrationen von Fremdatomen eine Reduktion der notwendigen Spannung zum Überwinden der Hindernisse. Dieser Temperatureinfluss nimmt mit abnehmender Legierungskonzentration ab, bis bei Kupfer sogar das Gegenteil der Fall ist und die Hindernisstärke mit steigender Temperatur ansteigt. Dies liegt darin begründet, dass die Erleichterung des Überwindens des durch die wenigen Fremdatome verzerrten Gitters mittels der thermischen Energie die Erschwerung der Versetzungsbewegung durch die Gitteroszillation nicht kompensieren kann.

Für GP-Zonen als Ausscheidungen wurde bei Schersimulationen eine Abhängigkeit von der Ausbreitungsrichtung der Versetzung relativ zur Orientierung der GP-Zone nachgewiesen. Das Verhältnis der Gleitebenen der Versetzung zur GP-Zone führt erst bei Erreichen des Randbereiches der GP-Zone zu einer deutlichen Reduktion der Hindernisstärke (vgl. Abbildung 58). Ebenso ist der Anstieg der notwendigen Spannung zum Überwinden der Ausscheidung beim Übergang von GP-I- zu GP-II-Zonen, bestehend aus zwei oder drei GP-I-Zonen, geringer als durch die Einbringung der ersten GP-I-Zone in den ungestörten Kristall. Eine Untersuchung des Einflusses des Abstands zwischen den zwei Blättchen der GP-II-Zone ergab keinen Einfluss auf die zur Überwindung notwendigen Scherspannung.

Auswertungen von Zugversuchen an Einkristallen ergaben eine Verringerung der Maximalspannung durch Fremdatome auf Gitterplätzen. Diese ist auf die vereinfachte Versetzungsemission durch die reduzierte Stapelfehlerenergie zurückzuführen, für den Fall, dass keine initialen Versetzungen vorhanden sind. Wären von Beginn an Versetzungen im Materialsystem vorhanden, so würden die Fremdatome als Hindernisse für die Versetzungsbewegung fungieren. Der Einfluss der Temperatur zeigt sich jedoch als deutlich ausgeprägter. Während die statistische Zulegierung von 5 % Kupfer in Form eines Mischkristalls lediglich zu einer Reduktion der Maximalspannung um 18 % führen, reduziert sich die Spannung bei der Steigerung der Temperatur auf 600 K gleichmäßig um 65 %.

Der Übergang vom Einkristall zum Polykristall wird durch die Unterteilung der gesamten Simulationsbox in einzelne einkristalline Körner bewerkstelligt. Die Untersuchungen befassten sich mit der Anzahl der Körner, sowie deren mittleren Durchmessern. Der Übergang vom regulären zum inversen Hall-Petch-Effekt wurde, in guter Übereinstimmung mit experimentellen Beobachtungen in der Literatur für das ebenfalls kubisch flächenzentrierte reine Kupfer, zu 13,35 nm bestimmt. Das Einbringen von GP-Zonen in den Polykristall bewirkt eine Verschiebung des Übergangs in den inversen Hall-Petch-Effekt in Richtung größerer mittlerer Korndurchmesser.

Mit der simulierten Nanoindentation wurde insbesondere die Ausbreitung der vom Indenter neuemittierten Versetzungen in die Probe untersucht. Zum einen dienten homogen verteilte Legierungsatome als Hindernis für die Ausbreitung. Zum anderen wurde eine Versetzung eingebracht und ihre Position variiert. Für die zunehmende Konzentration an Fremdatomen wurde ein abnehmender E-Modul berechnet. Eine initial eingebrachte Versetzung interagiert mit den durch den Indenter emittierten Versetzungen. In einer geeigneten Höhe von circa 70 % des Probenkörpers führt dies zu einer geringer notwendigen Kraft zur Indentation, da die emittierten Versetzungen durch die bestehende Versetzung angezogen werden. Befindet sich die bestehende Versetzung näher an der indentierten Oberfläche kommt es zu einem Aufstauen der neuen Versetzungen und es ist eine höhere Kraft zu Indentation notwendig.

Die in dieser Arbeit gewonnenen Erkenntnisse über die bei der Deformation von Aluminiumlegierung auftretenden physikalischen Mechanismen können helfen, neue Materialien zielgerichtet entsprechend der geforderten Materialeigenschaften zu generieren. Das Schließen der Lücke zwischen Simulation und Experiment soll ermutigen im, Material-Design weiterhin computerbasierte

Methoden intensiv mit einzubeziehen. Der in dieser Arbeit für das Aluminiumsystem erbrachte Schluß von Simulation und Experiment bietet gute Ansatzpunkte für die Verwendung von Methoden der KI (künstliche Intelligenz), bei welcher z.B. mittels maschinellem Lernen die Extrapolation übernehmen und optimieren kann. Gemeinsam können Experiment und Simulation helfen, die Anforderungen an zukünftige Aluminiumlegierung zu erfüllen, um Rohstoffe für Bauteile effizient einzusetzen.

11 Literaturverzeichnis

- [1] A. Wilm, „Physikalisch-metallurgische Untersuchungen über magnesiumhaltige Aluminiumlegierungen“, *Metallurgie: Zeitschrift für die gesamte Hüttenkunde*, Jg. 8, Nr. 8, S. 225–227, 1911.
- [2] G. D. Preston, „LXXIV. The diffraction of X-rays by an age-hardening alloy of aluminium and copper. The structure of an intermediate phase“, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, Jg. 26, Nr. 178, S. 855–871, 2009, doi: 10.1080/14786443808562177.
- [3] A. Guinier, „La diffraction des rayons X aux très petits angles: Application à l'étude de phénomènes ultramicroscopiques“, *Ann. Phys.*, Jg. 11, Nr. 12, S. 161–237, 1939, doi: 10.1051/anphys/193911120161.
- [4] M. Karlík und B. Jouffrey, „High resolution electron microscopy study of Guinier-Preston (GP1) zones in Al · Cu based alloys“, *Acta Mater.*, Jg. 45, Nr. 8, S. 3251–3263, 1997, doi: 10.1016/S1359-6454(97)00003-7.
- [5] M. Takeda, Y. Nagura, A. Igarashi und T. Endo, „Copper Concentration inside Guinier-Preston I Zones Formed in an Al–Cu Alloy“, *MEKU*, Jg. 93, Nr. 3, S. 204–207, 2002, doi: 10.3139/146.020204.
- [6] M. Karlík, A. Bigot, B. Jouffrey, P. Auger und S. Belliot, „HREM, FIM and tomographic atom probe investigation of Guinier-Preston zones in an Al-1.54at% Cu alloy“ (eng), *Ultramicroscopy*, Jg. 98, 2-4, S. 219–230, 2004, doi: 10.1016/j.ultramic.2003.08.015.
- [7] M. Karlík, B. Jouffrey und S. Belliot, „The copper content of Guinier–Preston (GP1) zones in Al–1.84 at.% Cu alloy“, *Acta Mater.*, Jg. 46, Nr. 5, S. 1817–1825, 1998, doi: 10.1016/S1359-6454(97)00342-X.
- [8] M. Karlík, „Atomic resolution investigation of Guinier-Preston zones in Al-Cu based alloys“. Dissertation, Prag, Prag, 2010.
- [9] S. K. Son, M. Takeda und T. Endo, „Microstructures and thermal stability of metastable-phase precipitates formed in an Al–Cu alloy at 463 K“, *MEKU*, Jg. 96, Nr. 4, S. 358–361, 2005, doi: 10.3139/146.018117.
- [10] A. F. Voter, F. Montalenti und T. C. Germann, „Extending the Time Scale in Atomistic Simulation of Materials“, *Annu. Rev. Mater. Res.*, Jg. 32, Nr. 1, S. 321–346, 2002, doi: 10.1146/annurev.matsci.32.112601.141541.
- [11] D. E. Spearot, M. A. Tschopp und D. L. McDowell, „Orientation and rate dependence of dislocation nucleation stress computed using molecular dynamics“, *Scr. Mater.*, Jg. 60, Nr. 8, S. 675–678, 2009, doi: 10.1016/j.scriptamat.2008.12.037.

- [12] G. Gottstein, *Physikalische Grundlagen der Materialkunde*, 3. Aufl. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. [Online]. Verfügbar unter: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-71105-6>
- [13] W. Demtröder, Hg., *Experimentalphysik 3*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [14] R. Gross und A. Marx, *Festkörperphysik*, 2. Aufl., 2014.
- [15] D. Hull und D. J. Bacon, *Introduction to dislocations*, 5. Aufl. Amsterdam: Butterworth-Heinemann, 2011. [Online]. Verfügbar unter: <http://site.ebrary.com/lib/academiccompletetitles/home.action>
- [16] I. Kohlbach, „Die Rolle von Leerstellen bei der Ausscheidungsbildung von Al-Cu-Legierungen“. Diplomarbeit, Bonn, Bonn, 2007.
- [17] M. Röbel, „Ab-initio Untersuchungen an Aluminium, seinen Defekten und Aluminium-Legierungen“. Dissertation, Bonn, Bonn, 2005.
- [18] H. W. Song, S. R. Guo und Z. Q. Hu, „A coherent polycrystal model for the inverse Hall-Petch relation in nanocrystalline materials“, *Nanostructured Materials*, 11 (2), S. 203–210, 1999.
- [19] D. E. Spearot und D. L. McDowell, „Atomistic Modeling of Grain Boundaries and Dislocation Processes in Metallic Polycrystalline Materials“, *J. Eng. Mater. Technol.*, Jg. 131, Nr. 4, S. 41204, 2009, doi: 10.1115/1.3183776.
- [20] D. Molnar, U. Weber, P. Binkele, D. Rapp und S. Schmauder, „Prediction of macroscopic damage behaviour of precipitation strengthened steels via multiscale simulations“, *GAMM Mitteilungen*, Jg. 38, Nr. 2, S. 228–247, 2015, doi: 10.1002/gamm.201510013.
- [21] J. Stadler, R. Mikulla und H.-R. Trebin, „IMD: A Software Package for Molecular Dynamics Studies on Parallel Computers“, *Int. J. Mod. Phys. C*, Jg. 08, Nr. 05, S. 1131–1140, 1997, doi: 10.1142/S0129183197000990.
- [22] S. Plimton, „Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics“, *J. Comput. Phys.*, Nr. 117, S. 1–19, 1995.
- [23] L. Verlet, „Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules“, *Phys. Rev.*, Jg. 159, Nr. 1, S. 98–103, 1967, doi: 10.1103/PhysRev.159.98.
- [24] P. H. Hünenberger, „Thermostat Algorithms for Molecular Dynamics Simulations“ in *Advanced Computer Simulation*, S. 105–149, doi: 10.1007/b99427.
- [25] S. Nosé, „A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods“, *J. Chem. Phys.*, Jg. 81, Nr. 1, S. 511–519, 1984, doi: 10.1063/1.447334.

- [26] W. G. Hoover, „Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions“, *Phys. Rev. A*, Jg. 31, Nr. 3, S. 1695–1697, 1985, doi: 10.1103/PhysRevA.31.1695.
- [27] F. Ercolessi, M. Parrinello und E. Tosatti, „Simulation of gold in the glue model“, *Philos. Mag. A*, Nr. 58, S. 213–226, 1988.
- [28] M. S. Daw und M. I. Baskes, „Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals“, *Phys. Rev. B*, Nr. 50, S. 1285–1288, 1983.
- [29] M. S. Daw und M. I. Baskes, „Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals“, *Phys. Rev. B*, Nr. 29, S. 6443–6453, 1984.
- [30] Y. Q. Cheng, E. Ma und H. W. Sheng, „Atomic level structure in multicomponent bulk metallic glass“ (eng), *Phys Rev Lett*, Jg. 102, Nr. 24, S. 245501, 2009, doi: 10.1103/PhysRevLett.102.245501.
- [31] F. Ercolessi und J. B. Adams, „Interatomic Potentials from First-Principles Calculations: the Force-Matching Method“, *EPL*, Nr. 26, S. 583–588, 1994.
- [32] X.-Y. Liu, J. B. Adams, F. Ercolessi und J. A. Moriarty, „EAM potential for magnesium from quantum mechanical forces“, *Model Simul Mat Sci Eng*, Nr. 4, S. 293–303, 1996.
- [33] X.-Y. Liu, P. P. Ohotnicky, J. B. Adams, C. Lane Rohrer und R. W. Hyland, „Anisotropic surface segregation in Al-Mg alloys.“, *Surf. Sci. Rep.*, Nr. 373, S. 357–370, 1997.
- [34] A. C. T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant und W. A. Goddard, „ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons“, *J. Phys. Chem. A*, Jg. 105, Nr. 41, S. 9396–9409, 2001, doi: 10.1021/jp004368u.
- [35] C. Oostenbrink, A. Villa, A. E. Mark und W. F. van Gunsteren, „A biomolecular force field based on the free enthalpy of hydration and solvation: The GROMOS force-field parameter sets 53A5 and 53A6“ (eng), *J Comput Chem*, Jg. 25, Nr. 13, S. 1656–1676, 2004, doi: 10.1002/jcc.20090.
- [36] S. J. Marrink, H. J. Risselada, S. Yefimov, D. P. Tieleman und A. H. de Vries, „The MARTINI force field: Coarse grained model for biomolecular simulations“ (eng), *J. Phys. Chem. B*, Jg. 111, Nr. 27, S. 7812–7824, 2007, doi: 10.1021/jp071097f.
- [37] Sandia National Laboratories, *LAMMPS Molecular Dynamics Simulator*. [Online]. Verfügbar unter: <http://lammps.sandia.gov>.
- [38] Polak, E., Ribiere, G., „Note sur la convergence de méthodes de directions conjuguées“, *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis - Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, R1, S. 35–43, 1969. [Online]. Verfügbar unter: <http://eudml.org/doc/193115>

- [39] A. Prakash, M. Hummel, S. Schmauder und E. Bitzek, „Nano sculpt: A methodology for generating complex realistic configurations for atomistic simulations“ (eng), *MethodsX*, Jg. 3, S. 219–230, 2016, doi: 10.1016/j.mex.2016.03.002.
- [40] WaveFront, *Wavefront .obj Format*. [Online]. Verfügbar unter: https://en.wikipedia.org/wiki/Wavefront_.obj_file (Zugriff am: 20. April 2017).
- [41] J. O'Rourke, *Computational geometry in C*, 2. Aufl. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2008.
- [42] C. B. Barber, D. P. Dobkin und H. Huhdanpaa, „The quickhull algorithm for convex hulls“, *ACM Trans. Math. Softw.*, Jg. 22, Nr. 4, S. 469–483, 1996, doi: 10.1145/235815.235821.
- [43] A. Stukowski, „Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool“, *Model Simul Mat Sci Eng*, Jg. 18, Nr. 1, S. 15012, 2010, doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
- [44] J. D. Honeycutt und H. C. Andersen, „Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters“, *J. Phys. Chem.*, Jg. 91, Nr. 19, S. 4950–4963, 1987, doi: 10.1021/j100303a014.
- [45] A. Stukowski, „Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials“, *Model Simul Mat Sci Eng*, Jg. 20, Nr. 4, S. 45021, 2012, doi: 10.1088/0965-0393/20/4/045021.
- [46] A. Stukowski und K. Albe, „Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data“, *Model Simul Mat Sci Eng*, Jg. 18, Nr. 8, S. 85001, 2010. [Online]. Verfügbar unter: <http://stacks.iop.org/0965-0393/18/i=8/a=085001>
- [47] A. Stukowski, V. V. Bulatov und A. Arsenlis, „Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces“, *Model Simul Mat Sci Eng*, Jg. 20, Nr. 8, S. 85007, 2012. [Online]. Verfügbar unter: <http://stacks.iop.org/0965-0393/20/i=8/a=085007>
- [48] M. Hummel, W. Verestek, and S. Schmauder, „Molecular Dynamics Simulations – A time and length scale investigation“ in *High Performance Computing in Science and Engineering '19* (accepted), S. xx.
- [49] G. E. Moore, „Cramming more components onto integrated circuits, Reprinted from Electronics, volume 38, number 8, April 19, 1965, pp.114 ff“, *IEEE Solid-State Circuits Soc. Newsl.*, Jg. 11, Nr. 3, S. 33–35, 2006, doi: 10.1109/N-SSC.2006.4785860.
- [50] nn. [Online]. Verfügbar unter: <https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/b/b8/Supercomputing-rmax-graph2.svg/1260px-Supercomputing-rmax-graph2.svg.png>.
- [51] A.-P. Prskalo, *Molecular Dynamics Simulations Of Si, SiC and SiN Layered Systems*. [S.l.]: Südwestdeutscher Verlag F, 2014.

- [52] J. Tersoff, „New empirical approach for the structure and energy of covalent systems“, *Phys. Rev. B*, Jg. 37, Nr. 12, S. 6991–7000, 1988, doi: 10.1103/PhysRevB.37.6991.
- [53] S. Chakraborty, J. Zhang und S. Ghosh, „Accelerated molecular dynamics simulations for characterizing plastic deformation in crystalline materials with cracks“, *Comput. Mater. Sci.*, Jg. 121, S. 23–34, 2016, doi: 10.1016/j.commatsci.2016.04.026.
- [54] K. Higashi, T. Mukai, K. Kaizu, S. Tsuchida und S. Tanimura, „Strain Rate Dependence On Mechanical Properties In Some Commercial Aluminum Alloys“, *J. Phys. IV France*, Jg. 01, C3, C3-341-C3-346, 1991, doi: 10.1051/jp4:1991349.
- [55] X. Chen, Y. Peng, S. Peng, S. Yao, C. Chen und P. Xu, „Flow and fracture behavior of aluminum alloy 6082-T6 at different tensile strain rates and triaxialities“ (eng), *PloS one*, Jg. 12, Nr. 7, e0181983, 2017, doi: 10.1371/journal.pone.0181983.
- [56] C. Y. Yu, P. L. Sun, P. W. Kao und C. P. Chang, „Mechanical properties of submicron-grained aluminum“, *Scr. Mater.*, Jg. 52, Nr. 5, S. 359–363, 2005, doi: 10.1016/j.scriptamat.2004.10.035.
- [57] G. I. Kanel, S. V. Razorenov, K. Baumung und J. Singer, „Dynamic yield and tensile strength of aluminum single crystals at temperatures up to the melting point“, *J. Appl. Phys.*, Jg. 90, Nr. 1, S. 136–143, 2001, doi: 10.1063/1.1374478.
- [58] K. Baumung *et al.*, „Shock-wave physics experiments with high-power proton beams“, *Laser Part. Beams*, Jg. 14, Nr. 02, S. 181, 1996, doi: 10.1017/S0263034600009939.
- [59] S. J. A. Koh und H. P. Lee, „Molecular dynamics simulation of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires“ (eng), *Nanotechnology*, Jg. 17, Nr. 14, S. 3451–3467, 2006, doi: 10.1088/0957-4484/17/14/018.
- [60] G. I. Kanel, S. V. Razorenov, A. Bogatch, A. V. Utkin, V. E. Fortov und D. E. Grady, „Spall fracture properties of aluminum and magnesium at high temperatures“, *J. Appl. Phys.*, Jg. 79, Nr. 11, S. 8310–8317, 1996, doi: 10.1063/1.362542.
- [61] nn, *The table of alloys*. [Online]. Verfügbar unter: http://www.vsmmpo.ru/en/manufacture/Al-juminij/property/Tablica_splavov.
- [62] D. R. Askeland und W. Fahland, *Materialwissenschaften: Grundlagen, Übungen, Lösungen*. Heidelberg: Spektrum Akad. Verl., 1996.
- [63] J. D. Eshelby, „Uniformly Moving Dislocations“, *Proc. Phys. Soc. A*, Jg. 62, Nr. 5, S. 307–314, 1949, doi: 10.1088/0370-1298/62/5/307.
- [64] A. H. Cottrell und D. L. Dexter, „Dislocations and Plastic Flow in Crystals“, *Am J Phys*, Jg. 22, Nr. 4, S. 242–243, 1954, doi: 10.1119/1.1933704.

- [65] K. G. Schmitt-Thomas, *Metallkunde für das Maschinenwesen: Band I, Aufbau und Eigenschaften metallischer Werkstoffe*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1990. [Online]. Verfügbar unter: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-93451-3>
- [66] J. H. Wu, W. Y. Tsai, J. C. Huang, C. H. Hsieh und G.-R. Huang, „Sample size and orientation effects of single crystal aluminum“, *Mater. Sci. Eng. A*, Jg. 662, S. 296–302, 2016, doi: 10.1016/j.msea.2016.03.076.
- [67] Markus Sebastian Agerer, *maschinenbau-wissen.de*. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.maschinenbau-wissen.de/skript3/werkstofftechnik/aluminium/383-eigenschaften-alu>.
- [68] H. van Swygenhoven, „Polycrystalline materials. Grain boundaries and dislocations“ (eng), *Science (New York, N.Y.)*, Jg. 296, Nr. 5565, S. 66–67, 2002, doi: 10.1126/science.1071040.
- [69] J. R. Weertman, „Hall-Petch strengthening in nanocrystalline metals“, *Mater. Sci. Eng. A*, Jg. 166, 1-2, S. 161–167, 1993, doi: 10.1016/0921-5093(93)90319-A.
- [70] Q.-J. Li und E. Ma, „When ‘smaller is stronger’ no longer holds“, *Materials Research Letters*, Jg. 6, Nr. 5, S. 283–292, 2018, doi: 10.1080/21663831.2018.1446192.
- [71] L. Tian, J. Li, J. Sun, E. Ma und Z.-W. Shan, „Visualizing size-dependent deformation mechanism transition in Sn“ (eng), *Sci Rep*, Jg. 3, S. 2113, 2013, doi: 10.1038/srep02113.
- [72] Y. Yue *et al.*, „Crystalline liquid and rubber-like behavior in Cu nanowires“ (eng), *Nano letters*, Jg. 13, Nr. 8, S. 3812–3816, 2013, doi: 10.1021/nl401829e.
- [73] Y. Lu, J. Y. Huang, C. Wang, S. Sun und J. Lou, „Cold welding of ultrathin gold nanowires“ (eng), *Nature nanotechnology*, Jg. 5, Nr. 3, S. 218–224, 2010, doi: 10.1038/NNANO.2010.4.
- [74] J. Sun *et al.*, „Liquid-like pseudoelasticity of sub-10-nm crystalline silver particles“ (eng), *Nature materials*, Jg. 13, Nr. 11, S. 1007–1012, 2014, doi: 10.1038/NMAT4105.
- [75] L. Zhong, F. Sansoz, Y. He, C. Wang, Z. Zhang und S. X. Mao, „Slip-activated surface creep with room-temperature super-elongation in metallic nanocrystals“ (eng), *Nature materials*, Jg. 16, Nr. 4, S. 439–445, 2017, doi: 10.1038/NMAT4813.
- [76] Q.-J. Li, B. Xu, S. Hara, J. Li und E. Ma, „Sample-size-dependent surface dislocation nucleation in nanoscale crystals“, *Acta Mater.*, Jg. 145, S. 19–29, 2018, doi: 10.1016/j.actamat.2017.11.048.
- [77] G. Richter, K. Hillerich, D. S. Gianola, R. Mönig, O. Kraft und C. A. Volkert, „Ultrahigh strength single crystalline nanowhiskers grown by physical vapor deposition“ (eng), *Nano letters*, Jg. 9, Nr. 8, S. 3048–3052, 2009, doi: 10.1021/nl9015107.
- [78] H. Adachi, Y. Miyajima, M. Sato und N. Tsuji, „Evaluation of Dislocation Density for 1100 Aluminum with Different Grain Size during Tensile Deformation by Using In-Situ X-ray

- Diffraction Technique“, *Mater. Trans.*, Jg. 56, Nr. 5, S. 671–678, 2015, doi: 10.2320/mater-trans.L-M2015803.
- [79] N. Q. Chinh, J. Gubicza und T. G. Langdon, „Characteristics of face-centered cubic metals processed by equal-channel angular pressing“, *J Mater Sci*, Jg. 42, Nr. 5, S. 1594–1605, 2007, doi: 10.1007/s10853-006-0900-3.
- [80] B. von Blanckenhagen, „Versetzen in dünnen Metallschichten“, 2002.
- [81] S. Zhang, W. Liu, J. Wan, R. Misra, Q. Wang und C. Wang, „The grain size and orientation dependence of geometrically necessary dislocations in polycrystalline aluminum during monotonic deformation: Relationship to mechanical behavior“, *Mater. Sci. Eng. A*, Jg. 775, S. 138939, 2020, doi: 10.1016/j.msea.2020.138939.
- [82] C. Brandl, P. M. Derlet und H. van Swygenhoven, „Strain rates in molecular dynamics simulations of nanocrystalline metals“, *Philosophical Magazine*, Jg. 89, 34-36, S. 3465–3475, 2009, doi: 10.1080/14786430903313690.
- [83] Rittner und Seidman, „ $\langle 110 \rangle$ symmetric tilt grain-boundary structures in fcc metals with low stacking-fault energies“ (eng), *Phys. Rev. B*, Jg. 54, Nr. 10, S. 6999–7015, 1996, doi: 10.1103/PhysRevB.54.6999}.
- [84] R. Peierls, „The size of a dislocation“, *Proc. Phys. Soc.*, Jg. 52, Nr. 1, S. 34–37, 1940, doi: 10.1088/0959-5309/52/1/305.
- [85] W. Verestek, A.-P. Prskalo, M. Hummel, P. Binkele und S. Schmauder, „Molecular dynamics investigations of the strengthening of Al-Cu alloys during thermal ageing“, *Phys Mesomech*, Jg. 20, Nr. 3, S. 291–304, 2017, doi: 10.1134/S1029959917030055.
- [86] J. Zhang, H. Zhang, H. Ye und Y. Zheng, „Twin Boundaries merely as Intrinsically Kinematic Barriers for Screw Dislocation Motion in FCC Metals“ (eng), *Sci Rep*, Jg. 6, S. 22893, 2016, doi: 10.1038/srep22893.
- [87] J. D. Verhoeven, *Fundamentals of physical metallurgy*. New York NY u.a.: Wiley, 1975.
- [88] Y. Chen *et al.*, „The enhanced theta-prime (θ') precipitation in an Al-Cu alloy with trace Au additions“, *Acta Mater.*, Jg. 125, S. 340–350, 2017, doi: 10.1016/j.actamat.2016.12.012.
- [89] C. V. Singh und D. H. Warner, „Mechanisms of Guinier–Preston zone hardening in the athermal limit“, *Acta Mater.*, Jg. 58, Nr. 17, S. 5797–5805, 2010, doi: 10.1016/j.actamat.2010.06.055.
- [90] M. Merkel und K.-H. Thomas, *Taschenbuch der Werkstoffe: Mit 143 Tabellen*, 7. Aufl. München: Fachbuchverl. Leipzig, 2008.

- [91] R. Komanduri, N. Chandrasekaran und L. M. Raff, „Molecular dynamics (MD) simulation of uniaxial tension of some single-crystal cubic metals at nanolevel“, *Int. J. Mech. Sci.*, Jg. 43, Nr. 10, S. 2237–2260, 2001, doi: 10.1016/S0020-7403(01)00043-1.
- [92] N. H. Macmillan und A. Kelly, „The Mechanical Properties of Perfect Crystals. I. The Ideal Strength“, *Proc. Math. Phys. Eng. Sci.*, Jg. 330, Nr. 1582, S. 291–308, 1972, doi: 10.1098/rspa.1972.0146.
- [93] M. Muzyk, Z. Pakieła und K. J. Kurzydłowski, „Generalized Stacking Fault Energies of Aluminum Alloys—Density Functional Theory Calculations“, *Metals*, Jg. 8, Nr. 10, S. 823, 2018, doi: 10.3390/met8100823.
- [94] M. Hummel, A.-P. Prskalo, P. Binkele und S. Schmauder, „MD-Simulations on Metallic Alloys“ in *High Performance Computing in Science and Engineering '14*, W. E. Nagel, D. H. Kröner und M. M. Resch, Hg., Cham: Springer International Publishing, 2015, S. 153–162, doi: 10.1007/978-3-319-10810-0_11.
- [95] W. Xu und L. P. Dávila, „Tensile nanomechanics and the Hall-Petch effect in nanocrystalline aluminium“, *Mater. Sci. Eng. A*, Jg. 710, S. 413–418, 2018, doi: 10.1016/j.msea.2017.10.021.
- [96] *Instrumentierte Eindringprüfung zur Bestimmung der Härte und anderer Werkstoffparameter*, 14577, Deutsches Institut für Normung e.V., Nov. 2015.
- [97] L. Wang, H. Bei, T. L. Li, Y. F. Gao, E. P. George und T. G. Nieh, „Determining the activation energies and slip systems for dislocation nucleation in body-centered cubic Mo and face-centered cubic Ni single crystals“, *Scr. Mater.*, Jg. 65, Nr. 3, S. 179–182, 2011, doi: 10.1016/j.scriptamat.2011.03.036.
- [98] Y. Shibutani, T. Tsuru und A. Koyama, „Nanoplastic deformation of nanoindentation: Crystallographic dependence of displacement bursts“, *Acta Mater.*, Jg. 55, Nr. 5, S. 1813–1822, 2007, doi: 10.1016/j.actamat.2006.10.055.
- [99] S. Shim, H. Bei, E. P. George und G. M. Pharr, „A different type of indentation size effect“, *Scr. Mater.*, Jg. 59, Nr. 10, S. 1095–1098, 2008, doi: 10.1016/j.scriptamat.2008.07.026.
- [100] C. Ruestes, I. Alhafez und H. Urbassek, „Atomistic Studies of Nanoindentation—A Review of Recent Advances“, *Crystals*, Jg. 7, Nr. 10, S. 293, 2017, doi: 10.3390/cryst7100293.
- [101] S. Shao, H. M. Zbib, I. Mastorakos und D. F. Bahr, „Effect of Interfaces in the Work Hardening of Nanoscale Multilayer Metallic Composites During Nanoindentation: A Molecular Dynamics Investigation“, *J. Eng. Mater. Technol.*, Jg. 135, Nr. 2, S. 20, 2013, doi: 10.1115/1.4023672.
- [102] A. Ukwatta und A. Achuthan, „A molecular dynamics (MD) simulation study to investigate the role of existing dislocations on the incipient plasticity under nanoindentation“, *Comput. Mater. Sci.*, Jg. 91, S. 329–338, 2014, doi: 10.1016/j.commatsci.2014.05.001.

- [103] W. C. Oliver und G. M. Pharr, „An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments“, *J. Mater. Res.*, Jg. 7, Nr. 06, S. 1564–1583, 1992, doi: 10.1557/JMR.1992.1564.
- [104] E. S. Berkovich, „Three-Faceted Diamond Pyramid for Micro-hardness Testing“, *Industrial Diamond Review*, Vol. 11 No. 127, S. 129–132, 1951.
- [105] N. A. Sakharova, J. V. Fernandes, J. M. Antunes und M. C. Oliveira, „Comparison between Berkovich, Vickers and conical indentation tests: A three-dimensional numerical simulation study“, *Int J Solids Struct*, Jg. 46, Nr. 5, S. 1095–1104, 2009, doi: 10.1016/j.ijsol-str.2008.10.032.
- [106] R. Komanduri, N. Chandrasekaran und L. M. Raff, „MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum“, *Wear*, Jg. 240, 1-2, S. 113–143, 2000, doi: 10.1016/S0043-1648(00)00358-6.
- [107] K. W. Jacobsen und J. Schiøtz, „Computational materials science: Nanoscale plasticity“ (eng), *Nature materials*, Jg. 1, Nr. 1, S. 15–16, 2002, doi: 10.1038/nmat718.

12 Eigene Veröffentlichungen

- [1] Ž. Božić, S. Schmauder, M. Mlikota, and M. Hummel, “Fatigue crack growth modelling in welded stiffened panels under cyclic tension”, 13th International Conference on Fracture, Beijing, China, vol. 7, pp. 5853–5862, 2013.
- [2] M. Hummel, C. Böhm, P. Binkele, S. Schmauder, “Molecular dynamics simulations of nanoporous iron to evaluate the influence of porosity on the mechanical strength”, Proceedings of the American Society for Composites: Twenty-Ninth Technical Conference, La Jolla, Californien, September 8-10, 2014. American Society for Composites, CD-ROM, 2014.
- [3] Ž. Božić, S. Schmauder, M. Mlikota, and M. Hummel, “Multiscale fatigue crack growth modelling for welded stiffened panels”, *Fatigue Fract Engng Mater Struct*, vol. 37, no. 9, pp. 1043–1054, 2014, doi: 10.1111/ffe.12189.
- [4] M. Hummel, A.-P. Prskalo, P. Binkele, and S. Schmauder, “MD-Simulations on Metallic Alloys” in *High Performance Computing in Science and Engineering ‘14*, W. E. Nagel, D. H. Kröner, and M. M. Resch, Eds., Cham: Springer International Publishing, pp. 153–162, 2015, doi: 10.1007/978-3-319-10810-0_11.
- [5] Ž. Božić, S. Schmauder, M. Mlikota, and M. Hummel, “Multiscale fatigue crack growth modelling for welded stiffened panels” in *Multiscale Materials Modeling*, S. Schmauder and I. Schäfer, Eds., Berlin, Boston: De Gruyter, pp. 191–211, 2016.
- [6] S. Hocker, M. Hummel, P. Binkele, H. Lipp, and S. Schmauder, “Molecular dynamics simulations of tensile tests of Ni-, Cu-, Mg- and Ti-alloyed aluminium nanopolycrystals”, *Computational Materials Science*, vol. 116, pp. 32–43, 2016, doi: 10.1016/j.com-matsci.2015.07.047.
- [7] A. Prakash, M. Hummel, S. Schmauder, and E. Bitzek, “Nano sculpt: A methodology for generating complex realistic configurations for atomistic simulations”, *MethodsX*, vol. 3, pp. 219–230, 2016, doi: 10.1016/j.mex.2016.03.002.
- [8] M. Mlikota, S. Schmauder, Ž. Božić, and M. Hummel, “Modelling of overload effects on fatigue crack initiation in case of carbon steel”, *Fatigue Fract Engng Mater Struct*, vol. 40, no. 8, pp. 1182–1190, 2017, doi: 10.1111/ffe.12598.

- [9] W. Verestek, A.-P. Prskalo, M. Hummel, P. Binkele, and S. Schmauder, “Molecular dynamics investigations of the strengthening of Al-Cu alloys during thermal ageing”, *Physical Mesomechanics*, vol. 20, no. 3, pp. 291–304, 2017, doi: 10.1134/S1029959917030055.
- [10] M. Hummel, C. Böhm, W. Verestek, and S. Schmauder, “Introducing a method of constructing realistic closed cell nano-porous iron crystals and MD simulations to investigate the influence of the system size on the stability and the mechanical properties”, *Computational Materials Science*, vol. 166, pp. 150–154, 2019, doi: 10.1016/j.commatsci.2019.04.035.
- [11] M. Hummel, W. Verestek, and S. Schmauder, “Molecular Dynamics Simulations – A time and length scale investigation”, in *High Performance Computing in Science and Engineering '19*, pp. 125-141, 2021, doi: 10.1007/978-3-030-66792-4_9.