

# **Modellierung von Verformung und Schädigung in Werkstoffgefügen mit unterschiedlich großen Teilchen und unter Wasserstoffeinfluss**

Von der Fakultät Maschinenbau der Universität Stuttgart  
zur Erlangung der Würde eines Doktors der  
Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Dipl.-Ing. Ulrich Weber

aus Leonberg

Hauptberichter: Prof. Dr. rer. nat. S. Schmauder

Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. E. Göde

Tag der mündlichen Prüfung 24. April 2006

Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und  
Festigkeitslehre (IMWF) Universität Stuttgart

2006

## Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Abteilung Verfahrensentwicklung an der Materialprüfungsanstalt Universität Stuttgart (MPA, ehemals Staatliche Materialprüfungsanstalt, Universität Stuttgart).

Dem Direktor der MPA Stuttgart, Herrn Professor Dr.-Ing. habil. Eberhard Roos gilt mein Dank für die großzügige Förderung der Arbeit.

Besonders bedanke ich mich bei Herrn Professor Dr. rer. nat. Siegfried Schmauder für seine ständige Diskussions- und Hilfsbereitschaft.

Herrn Professor Göde danke ich für sein Interesse an meiner Arbeit und für die Übernahme des Mitberichtes.

Vielen Dank an Herrn Dr. phil. Peter Deimel und an Herrn Dipl.-Ing. Erich Sattler für die Durchführung und Bereitstellung der experimentellen Untersuchungen zum Wasserstoffeinfluss und an Herrn Dr. rer. nat. Denis Saraev für die Durchführung der atomistischen Simulationen.

Ganz herzlich danken möchte ich allen Kolleginnen und Kollegen der MPA Stuttgart, die mich durch Rat und Tat bei meiner Arbeit unterstützt und zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Die Untersuchungen wurden vorwiegend mit Mitteln der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG-Förderkennzeichen Schm 746/12-1 und 12-2 ; Schm 746/28-1 und 28-3) und mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Arbeit (BMWA-Förderkennzeichen 150 1029) finanziert. Hierfür bedanke ich mich.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meiner Familie für das Verständnis, die Geduld und die Unterstützung während des Entstehens dieser Arbeit bedanken.

Stuttgart, im April 2006

Ulrich Weber

# Inhaltsverzeichnis

<b>Zusammenfassung</b> .....	<b>5</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>10</b>
<b>Symbole und Abkürzungen</b> .....	<b>13</b>
<b>1 Einleitung</b> .....	<b>18</b>
<b>2 Grundlagen</b> .....	<b>21</b>
2.1 Die Finite-Elemente-Methode.....	21
2.2 Grundlagen zur Kontinuumsmechanik .....	26
2.3 Die verwendeten Schädigungsmodelle .....	30
2.3.1 Der Damage-Parameter .....	31
2.3.2 Das Rousselier-Modell .....	35
2.3.3 Die Kohäsivmodelle.....	39
2.3.3.1 Das Kohäsivzonenmodell.....	40
2.3.3.2 Das Kohäsivoberflächenmodell.....	42
2.4 Grundsätzliches zu Berechnungen mit Einheitszellen.....	44
2.4.1 Uniaxial faserverstärkter Verbundwerkstoff .....	48
2.4.2 Teilchenverstärkter Verbundwerkstoff .....	49
2.4.3 Der Matrixcharakter als Gefügeparameter .....	50
2.5 Versetzungstheoretische Modelle .....	55
2.5.1 Die Theorie nach Russell&Brown .....	55
2.5.2 Die Mechanism-based Strain Gradient (MSG) Plasticity-Theorie .....	56
<b>3 Werkstoffe mit Einschlussgefüge</b> .....	<b>59</b>
3.1 Realgefügemodellierung .....	61
3.2 Anwendung und Ergebnisse .....	62
3.2.1 Randbedingungen und Werkstoffkennwerte.....	63
3.2.2 Untersuchungen am Al/10vol.%SiC-Verbundwerkstoff.....	67
3.2.2.1 Künstliche Gefüge und Realgefüge.....	67
3.2.2.2 Numerische Simulation der Schädigung im Realgefüge unter Druckbelastung .....	69
3.2.2.3 Numerische Simulation der Schädigung im Realgefüge unter Zugbelastung .....	71

3.2.3	Untersuchungen am Al/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -Verbundwerkstoff .....	73	
3.2.3.1	In-situ-Versuche an Zugproben.....	75	
3.2.4	Untersuchungen an einem Duplexstahl.....	78	
<b>4</b>	<b>Werkstoffe mit Durchdringungsgefüge.....</b>	<b>81</b>	
4.1	Einführung.....	81	
4.2	Anwendung und Ergebnisse .....	81	
4.2.1	Der Verbundwerkstoff W/Cu.....	81	
4.2.2	Der Verbundwerkstoff 82vol.%Fe/Ag.....	86	
4.2.3	Der Verbundwerkstoff Al/TiO <sub>2</sub> .....	87	
<b>5</b>	<b>Werkstoffe mit Ausscheidungen und Teilchen .....</b>	<b>90</b>	
5.1	Problemstellung .....	90	
5.2	Zum Einfluss von Cu-Ausscheidungen im nm-Bereich .....	92	
5.2.1	Allgemeines.....	92	
5.2.2	Anwendung und Ergebnisse.....	93	
5.3	Zum Einfluss von Teilchen mittlerer Größe .....	98	
5.3.1	Allgemeines.....	98	
5.3.2	Anwendung und Ergebnisse.....	98	
5.4	Zum Einfluss von großen Teilchen mit länglicher Form .....	101	
5.4.1	Allgemeines.....	101	
5.4.2	Anwendung und Ergebnisse.....	101	
5.5	Numerische Abschätzung eines minimierten Risswiderstandes .....	112	
<b>6</b>	<b>Der Werkstoff 15MnNi6-3 unter Wasserstoffeinfluss .....</b>	<b>115</b>	
6.1	Einfluss des Wasserstoffs auf das Verformungs- und Bruchverhalten.....	116	
6.2	Einfluss des Wasserstoffs auf die Versetzungsdichte .....	118	
6.3	Einfluss des Wasserstoffs auf die Versetzungsbewegung .....	120	
6.4	Numerische Schädigungssimulationen .....	124	
<b>7</b>	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>136</b>	
<b>Anhang A1: Beziehung zwischen Einheitszellendurchmesser, Matrizität und</b>			
	<b>Volumenanteil.....</b>	<b>154</b>	
<b>Anhang A2: Vernetzung und Verteilung von Damage-Werten.....</b>			<b>155</b>
<b>Anhang A3: Anwendung der Russell&amp;Brown-Theorie.....</b>			<b>160</b>
<b>Anhang A4: Anpassung von Rousselier-Parametern .....</b>			<b>162</b>



## Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war es, den Einfluss von unterschiedlich großen Teilchen und von Wasserstoff auf das Verformungs- und Schädigungsverhalten von Verbundwerkstoffen bzw. ausgewählten Stählen darzustellen und durch Wahl geeigneter numerischer und analytischer Modelle skalengerecht, d. h. in den dem jeweiligen Problem angepassten Dimensionen, zu beschreiben. Es ist gelungen, einen Bezug zwischen Teilchengröße und Teilchenart und deren Wirkung auf das Werkstoffverhalten hinsichtlich Verformung und Schädigung herzustellen. Die Anwendbarkeit der zum Einsatz kommenden Modelle (Realgefügemodellierung, selbstkonsistente Einheitszelle incl. Matrizität, MSG (Mechanism-based Strain Gradient) Plasticity-Theorie, sowie der Damage-Parameter und das Rousselier-Modell) wurde über begleitende Experimente nachgewiesen.

Bei Verbundwerkstoffen mit eingeschlossenen Keramikeilchen hat sich sowohl die Realgefügemodellierung unter gleichzeitiger Anwendung des auf Rice&Tracey zurückgehenden und modifizierten Damage-Parameters  $D$  als auch die Methode der selbstkonsistenten Einheitszellberechnungen bewährt. Sind lokal im Gefüge ablaufende Schädigungsmechanismen von Interesse, so ist auf die aufwändige Realgefügemodellierung zurückzugreifen. Sollen die globalen Werkstoffeigenschaften ermittelt werden, so kann dies über die, hinsichtlich Modellierungs- und Rechenaufwand, sehr viel weniger aufwändigen Einheitszellberechnungen geschehen.

Die Ergebnisse aus den Untersuchungen am Al/10vol.%SiC-Verbundwerkstoff zeigen, dass Schädigungen in der Al-Matrix bei der in dieser Arbeit angewendeten Druckumformung hauptsächlich im Bereich von Teilchenclusterungen ausgehen, da sich hier hohe plastische Verformungen und Spannungen konzentrieren. Teilchenform und -orientierung spielen hingegen eine weniger wichtige Rolle, können aber die Höhe des Schädigungsparameters ebenfalls beeinflussen. Bei zufällig verteilten Einschlüssen tritt Schädigung bevorzugt in Scherbändern auf. Die wegen der unterschiedlichen Ausdehnungskoeffizienten der Einzelphasen hervorgerufenen thermischen Eigenspannungen leisten bei künstlichen Gefügen (mit quadratischen, runden oder elliptischen Einschlussformen) einen vernachlässigbaren Beitrag zur Entwicklung des  $D$ -Parameters. Dagegen tragen beim hier untersuchten Realgefüge die thermisch bedingten Eigenspannungen zur Entwicklung des  $D$ -Parameters einen nicht vernachlässigbaren Beitrag bei. Zur Simulation der Schädigungsinitiierung und -ausbreitung bei Druck- und Zugbelastung hat sich die Methode des Elementausfalls sehr gut bewährt. Experimentell an einem Al/20vol.%SiC-Verbundwerkstoff nachgewiesene Verläufe von Risspfaden, hauptsächlich in Bereichen mit hohem Clusteranteil, konnten damit numerisch bestätigt werden.

Im Gegensatz zur Druckbelastung, bei der sich die Schädigung nur ausschließlich auf die Clusterbereiche konzentriert, wurde bei Zugbelastung ein totales Versagen des Realgefüges und somit die Empfindlichkeit von Metall/Keramik-Verbundwerkstoffen auf Zug- gegenüber Druckbelastung aufgezeigt.

Bei den numerischen Berechnungen zum Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Verbundwerkstoff werden neben der Realgefügemodellierung ebenfalls das selbstkonsistente Einheitszellmodell angewendet. Am Beispiel des Werkstoffs mit 15vol.% Keramik wird gezeigt, dass beide Modelle den Zugversuch sehr gut numerisch beschreiben. Werden dafür Realgefügemodelle angewendet, bei denen Elemente mit VEDZ-Formulierung (verallgemeinerter ebener Dehnungszustand) eingesetzt werden, kann das mechanische Verhalten des Aluminium/Keramik-Verbundwerkstoffs ebenfalls zufriedenstellend erfasst werden. Die Simulation von an Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Verbundproben durchgeführten in-situ-Zugversuchen haben gezeigt, dass die phasenspezifischen Eigenspannungen von der Form und von der Orientierung der Einschlüsse relativ zur Zugrichtung abhängen. Zur erfolgreichen numerischen Berechnung der Phasenspannungen sind daher aufwändige 3D-Einheitszellen (selbstkonsistent) erforderlich.

Die Ergebnisse aus den Untersuchungen am austenitisch-ferritischen Duplexstahl (X3CrNiMoCu26-6) zeigen, dass in den künstlichen Gefügen die Entwicklung des Damage-Parameters unterer äußerer Belastung nur gering von der Verteilung und der Form der Austenitphase beeinflusst wird. (Die schädigungsinitiierende Wirkung von dicht benachbarten Teilchen ist bei diesem zweiphasig-duktilen Werkstoff nicht vorhanden). Dagegen zeigen die Realgefüge, ebenso wie beim Al/10vol.%SiC-Verbundwerkstoff, gegenüber den künstlichen Gefügen ein deutlich erhöhtes Schädigungspotential. Somit kann auch beim Duplexstahl durch Gefügeoptimierung ein weniger versagensanfälliger Werkstoff erreicht werden: Hinsichtlich einer reduzierten Versagensanfälligkeit stellen Duplex-Gefüge mit einer zufällig verteilten Austenitphase den Idealfall dar.

Gefüge von Verbundwerkstoffen, bei denen sich die Phasen gegenseitig ganz oder nur teilweise umschließen, werden als Durchdringungsgefüge bezeichnet, wobei die gegenseitige Umschließung der Phasen über den Gefügeparameter Matrizität beschrieben werden kann. Das unter Einbeziehung der Matrizität verwendete numerische Modell der selbstkonsistenten Einheitszelle wurde in dieser Arbeit durch zusätzliche Softwarebausteine (Netzgeneratormodul, Programm zur Bereitstellung von Startgrößen für die 1. Iteration (z. B. der Fließkurve des Verbundwerkstoffes)) erweitert, über eine Umstrukturierung des Datenaustausches auf dokumentierte Schnittstellen verbessert und zur Beschreibung des globalen Werkstoffverhaltens von W/Cu-, Fe/Ag- und Al/TiO<sub>2</sub>

Verbundwerkstoffen angewendet: Neben dem Wärmeausdehnungskoeffizienten konnte damit sowohl das elastische als auch das plastische Materialverhalten in guter Übereinstimmung mit dem Experiment ermittelt werden.

Die Berechnungen zeigen, dass der Gefügeparameter Matrizität einen deutlichen Einfluss auf das Verformungsverhalten der Metall/Keramik-Verbundwerkstoffe ausübt. Liegen in der Keramikphase von Durchdringungsgefügen Druckeigenspannungen vor, so kann durch Modifikation eines am Verbundwerkstoff Al/TiO<sub>2</sub> eingesetzten konservativen Abbruchkriteriums die Belastungsgrenze von Metall/Keramik-Verbundwerkstoffen vor allem bei hohen Keramikanteilen um bis zu 30 % erhöht werden.

Zur Beschreibung des festigkeitssteigernden Einflusses kleiner Cu-Teilchen im nm-Bereich wird im Allgemeinen die Theorie nach Russell&Brown angewendet. Experimentelle SANS (Small Angle Neutron Scattering) Untersuchungen haben ergeben, dass die für die Festigkeitszunahme des Werkstoffs 15NiCuMoNb5 (WB36) verantwortlichen Cu-Ausscheidungen einen Radius von  $r_{ppt} = 1,2 - 2$  nm aufweisen. Der Vergleich der Russell&Brown-Theorie mit experimentellen Daten und atomistischen Modellrechnungen weist darauf hin, dass die Anwendbarkeit dieser Theorie für „kleine“ Cu-Teilchen nicht mehr gegeben ist.

In Zukunft werden daher noch umfangreichere versetzungsdynamische Modelle dazu beitragen, den Einfluss kleiner Cu-Ausscheidungen besser zu beschreiben, da in diesen Modellen gegenüber der Russell&Brown-Theorie das Gefüge realistischer abgebildet wird.

Neben den bisher behandelten kleinen Teilchen liegen in dem Werkstoff WB36 auch nichtmetallische Einschlüsse in Form von Mangansulfiden und Aluminiumoxidpartikel (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) vor. Wegen des Massenverhältnisses von Mangan zu Aluminium von 21:1 kann der Einfluss der Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Teilchen auf das Werkstoffverhalten vernachlässigt werden. Um dennoch die mögliche Wirkung von Keramikpartikeln zu untersuchen, wird angenommen, dass diese mit  $f = 0,07\%$  den selben Volumenanteil wie die nichtmetallischen Einschlüsse aufweisen. Unter Anwendung einer skalenübergreifenden Plastizitätstheorie (Mechanism-based StrainGradient (MSG) Plasticity) kann jedoch keine merkliche Erhöhung der Festigkeit aufgrund der Keramikpartikel festgestellt werden. Erst kleine Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Partikel mit einem Durchmesser  $\leq 2$   $\mu\text{m}$  führen bei einem Volumengehalt von 1% zu einer erkennbaren Festigkeitszunahme. Damit kann die Änderung der Festigkeit ausschließlich auf die kupferreichen Ausscheidungen zurückgeführt werden.

Als dritte Teilchenklasse sind im Werkstoff WB36 nichtmetallische Einschlüsse (hauptsächlich Mangansulfideinschlüsse) vorhanden. Zur numerischen Beschreibung des

durch diese Einschlüsse hervorgerufenen Porenwachstums und des anschließenden Materialversagens wird das Rousselier-Modell herangezogen und in das kommerzielle FE-Programm ABAQUS in Form einer USER-Subroutine (UMAT) implementiert.

Im Gegensatz zu einem aus Parameteranpassung erhaltenen Ausgangshohlraumvolumen wird in dieser Arbeit das am Werkstoff gemessene Hohlraumvolumen  $f_0$  und die experimentell ermittelten Hohlraumabstände als gegeben angesehen und der Rousselier-Parameter  $\sigma_k$  angepasst. Die längliche Form der Einschlüsse wird über die Korrektur des aus dem Gefüge abgeleiteten Anfangshohlraumvolumens  $f_0$  berücksichtigt, wobei die beiden Grenzfälle von nadelförmigen und plattenförmigen Einschlüssen betrachtet werden. Für die beiden schädigungsmechanisch betrachteten Werkstoffzustände E60A und E60B wird über die Anpassung an die Experimente ein Wert von  $\sigma_k = 420$  MPa (Nadel) bzw.  $\sigma_k = 470$  MPa (Platte) ermittelt. Die früher angepasste bzw. vorgegebene Parameterwahl von  $f_0 = 0,2\%$  und  $\sigma_k = 445$  MPa kann als Mittelung beider Einschlussformen (Nadel und Platte) gewertet werden. Damit konnte der bisher noch fehlende Zusammenhang zwischen dem numerisch angepassten und dem aus den Gefügedaten ermittelten Anfangshohlraumvolumen  $f_0$  geliefert und die schädigungsmechanische Wirkung der nichtmetallischen Einschlüsse durch die Berücksichtigung des Anfangshohlraumvolumens  $f_0$  unter Anwendung des Rousselier-Modells nachgewiesen werden.

Unter Verwendung von experimentellen Befunden und theoretischen Überlegungen der festigkeitssteigernden Wirkung von Cu-Ausscheidungen wird für den Werkstoff WB36 durch die Übertragung von Ergebnissen eines versetzungsbasierten Modells auf ein anderes schädigungsmechanisches Modell mit unterschiedlicher Längenskala die numerische Ermittlung von  $J_R$ -Kurven mit einem minimalen Risswiderstand aufgezeigt. Die Vorgehensweise, unterschiedliche Längenskalen miteinander zu verknüpfen, wird auch unter dem Begriff der „hierarchischen Werkstoffmodellierung“ zusammengefasst.

Die kürzlich dokumentierten und in dieser Arbeit auszugsweise zusammengestellten experimentellen Ergebnisse zum Einfluss des Wasserstoffs auf das Verformungs- und Schädigungsverhalten des ferritischen Werkstoffs 15MnNi6-3 belegen, dass dieser durch Wasserstoffeinfluss deutlich an Duktilität verliert. Sowohl experimentelle Untersuchungen an gedünnten Metallfolien als auch atomistische Simulationen weisen darauf hin, dass der Wasserstoff keinen wesentlichen Einfluss auf die Versetzungsdichte und auf die Versetzungsbewegung ausübt. Die abnehmende Duktilität des Werkstoffs unter Wasserstoffeinfluss ist somit nicht versetzungsbedingt, sondern vielmehr auf die Schwächung von Bindungskräften zurückzuführen. Dies bildet die Grundlage für die Anwendung des Dekohäsionsmodells zur Beschreibung der Schädigung in Werkstoffen

infolge von Wasserstoffeinfluss. Durch Verwendung eines zeitlich abhängigen Separationsgesetzes soll die durch ständig nachdiffundierenden Wasserstoff zeitliche Veränderung der Materialeigenschaften berücksichtigt werden. Die in dieser Arbeit simulierten Kerbzugproben und C(T)-Proben unter Wasserstoffeinfluss wurden damit schädigungsmechanisch in Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben.

Auf dem Gebiet der numerischen Werkstoffbeschreibung werden ausblickend die dreidimensionale Abbildung von Mikrogefügen und deren schädigungsmechanische Berechnung eine zunehmende Rolle spielen. Aufgrund der Komplexität dieser Berechnungen und der dabei anfallenden großen Datenmengen werden sowohl an Computer als auch an Speichermedien deutlich höhere Anforderungen als bisher gestellt werden.

Die Modellierung wird auch in Zukunft das Experiment nicht ersetzen. Der Nachweis der Anwendbarkeit von neu entwickelten, numerischen Ansätzen ist nur über begleitende Experimente möglich. Neben den Säulen Experiment und Theorie bilden numerische Modelle die dritte Säule für eine erfolgreiche Werkstoffentwicklung.

## Abstract

The objective of this work was to show the effect of differently sized particles and of hydrogen on the deformation and damage behaviour of composite materials as well as of selected steels. A close relation between particle size and type and its effect on the material behaviour in view of deformation and damage was found. The applicability of appropriate models (real structural modelling, self-consistent unit cell model including matrixity, MSG (Mechanism-based Strain Gradient) Plasticity theory as well as the damage parameter  $D$  according to Rice&Tracey and the Rousselier model) was proven in accompanying experiments.

The modelling of representative microstructural cut-outs, the application of the damage parameter  $D$  and the method of self-consistent unit cell models were successfully implemented for composite materials including ceramic particles in metallic matrices. When the damage mechanisms are of interest, one has to revert to complex real structural modelling, while the self-consistent unit cell model can be used to determine the global material properties in less computing time.

The deformation behaviour of the investigated Al/10vol.%SiC-composite is analysed under compressive external loading. It was found, that damage occurs between clusters of particles where shear deformation as well as hydrostatic tensile stresses are concentrated in the matrix. However, particle shape and orientation play a less important role but may influence as well the degree of the damage parameter. For randomly distributed inclusions damage occurs preferably in the shear bands. Residual stresses do have some impact on failure initiation in the microstructure, but strains due to external loading are much more of importance in this respect. The element elimination technique was found to be very reliable in simulating the damage initiation and propagation under compressive and tensile loading: crack paths found experimentally in an Al/20vol.%SiC-composite material have been numerically found to appear in areas of particle clusters. In contrast to compressive load where damage concentrates near cluster areas total failure of the real microstructure under tensile load was found.

Modelling of a representative microstructural cut-out and the self-consistent unit cell model is also applied to the numerical simulation of deformation and damage in an Al/15vol.%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> metal matrix composite (MMC). Both models provide an excellent numerical description of the stress-strain behaviour obtained experimentally during a tensile test. If the real microstructure is modelled under generalized plane strain conditions the mechanical behaviour of the MMC is also well described. To determine phase-specific residual stresses a tensile specimen has been investigated numerically. The

results showed that the stresses in the individual phases are considerably influenced by the shape of the embedded unit cell and by the loading direction. Axisymmetric spherical embedded cell models are successfully used to determine the global material behaviour. Longitudinal inclusions, which orientations are not parallel to the loading axis require more complex 3D (self-consistent) unit cell models for numerical calculations of phase-specific residual stresses.

The results obtained from the austenitic-ferritic duplex steel (X3CrNiMoCu26-6) show that the damage parameter under external load depends hardly on the distribution and shape of the austenitic phase in artificial microstructures. There is less pronounced damage initiated effect from particle clustering in this two-phase ductile material. According to the modelling of a real microstructure cut-out of the Al/10vol.%SiC-composite, the duplex steel shows also a distinctly increased damage potential. Consequently, the microstructure of the duplex steel can be optimised so that the material will be less susceptible to failure. In view of a reduced failure potential the duplex steel with a randomly distributed austenitic phase is the ideal case.

To describe composites with interpenetrating microstructures, a self consistent matrixity model has been developed. It was successfully used to describe the global material behaviour of W/Cu, Fe/Ag and Al/TiO<sub>2</sub> composites: good agreement has been obtained between experiment and calculation with respect to the thermal expansion coefficient and both the elastic as well as the plastic material behaviour. The calculations showed, that the matrix parameter influences clearly the deformation behaviour of such composites with interpenetrating microstructures.

In order to describe the influence of Cu precipitates in the nm-scale the Russell&Brown theory is generally used. Experimental SANS (Small Angle Neutron Scattering) investigations on the material 15NiCuMoNb5 (WB36) have shown, that the Cu precipitates, which are essential for the increase in strength, possess a radius of  $r_{ppt} = 1,2 - 2$  nm. A comparison with atomistic simulations pointed out, that the application of the Russell&Brown-theory is highly questionable for such small Cu precipitates.

For the future, extended atomistic models may lead to an improved description of the contribution of these Cu- precipitates concerning their influence on the material behaviour of this steel.

There exist also aluminium oxide (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) particles in the steel WB36. To investigate a possible effect of these ceramic particles it is assumed that they possess the same volume fraction of  $f = 0.07$  % as the non-metallic inclusions. For this purpose, the Mecha-

nism-based Strain Gradient (MSG) Plasticity theory was applied: only small  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -particles ( $\varnothing \leq 2 \mu\text{m}$ ) cause a noticeable increase in strength at a  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -volume fraction of 1 %. This confirms the result, which relates the change in strength only to the copper rich precipitates.

It was found by the application of the Rousselier model, that the damage behaviour of the material WB36 is strongly influenced by non-metallic inclusions (mainly manganese sulfide inclusions). The longitudinal shape of the MnS-inclusions is considered by appropriately correcting the initial volume fraction  $f_0$  derived from microstructural investigations. As an application of "hierarchical modelling", a lower bound  $J_R$ -curve (curve with a least expected crack resistance) for the material WB36 is determined numerically: results from a dislocation based model are used as input for the second damage model of different length scale.

The influence of hydrogen on the material behaviour of the steel 15MnNi6-3 at room temperature is demonstrated experimentally and numerically: Tensile tests and  $J_R$ -tests show that pressurised hydrogen changes the ductility and crack resistance. As well the damage behaviour of the material is described. Moreover, atomistic simulations help to get some insight how hydrogen atoms impede the movement of dislocations. In order to investigate the damage behaviour of hydrogen affected round notched tensile and Compact Tension specimens, the decohesion model was used and adjusted in order to take the influence of hydrogen embrittlement into account.

Three-dimensional calculations of microstructures in view of investigating their damage behaviour will play an ever increasing role in the field of numerical simulations of materials. Since these calculations are very complex and generate a high amount of data the demand on both the computer and storage media will be definitely higher than it used to be in the past.

Modelling will not replace the experiment in future. Innovative numerical approaches can only be proved by accompanying experiments. In addition to experiment and theory the numerical models are another important basis for a successful development of materials.



## Symbole und Abkürzungen

### *Kleine Symbole*

a	[mm]	Ellipsoidachse
a <sub>0</sub>	[mm]	Risstiefe des Ausgangsfehlers
Δa	[mm]	Risswachstum
a/b	[ - ]	Verhältnis der Ellipsoidachsen
a/W	[ - ]	Risstiefenverhältnis
b	[nm]	Burgersvektor bzw.
	[mm]	Ellipsoidachse
c	[mm]	Ellipsoidachse bzw.
	[ - ]	Geometriefaktor
f	[ - ]	Aktuelles Hohlraumvolumen bzw.
	[ - ]	Volumenanteil der ausgeschiedenen Kupferteilchen
f <sub>B</sub>	[ - ]	Geometrieabhängiger Volumenanteil
f <sub>0</sub>	[ - ]	Anfangshohlraumvolumen
f <sub>0*</sub>	[ - ]	Formkorrigiertes Anfangshohlraumvolumen
f <sub>c</sub>	[ - ]	Kritisches Hohlraumvolumen
h <sub>E</sub>	[ - ]	Elementhöhe
k	[MPa]	Verfestigungsparameter
l <sub>e</sub>	[mm]	Elementkantenlänge
l <sub>c</sub>	[mm]	Charakteristischer Abstand zwischen zwei großen Teilchen bzw.
	[mm]	Abstand zwischen zwei FE-Knoten
n	[ - ]	Verfestigungsparameter
r	[μm]	Partikelradius
r <sub>0</sub>	[nm]	Innerer Abschneide-Radius bei der Russell&Brown-Theorie
r <sub>k</sub>	[mm]	Kerbradius
r <sub>mittel</sub>	[nm]	Mittlerer Teilchenradius
r <sub>ppt</sub>	[nm]	Teilchenradius
(Δ)u	[mm]	(Inkrementelle) Verschiebung

### **Große Symbole**

A	[ - ]	Werkstoffkonstante des Damage-Parameter-Modells
B	[ - ]	Transformationsmatrix bzw.
	[ - ]	Werkstoffkonstante des Damage-Parameter-Modells
D	[ - ]	Damage-Parameter bzw.
	[ $\mu\text{m}$ ]	Teilchendurchmesser
$D_c$	[ - ]	Kritischer Damage-Parameter
$D_{\text{min/max}}$	[ $\mu\text{m}$ ]	Min./max. Abmessungen eines Teilchens bzw. Min./max. Damage-Parameter
$D_N$	[mm]	Durchmesser der Kerbzugprobe im Kerbgrund
E	[MPa]	Elastizitätsmodul
$E_{A,B,C}$	[MPa]	Elastizitätsmodul der Phase A, B bzw. des Verbundwerkstoffs (C)
$E^\infty/P^\infty$	[ - ]	Verhältnis der Versetzungsenergien in einer unendlich angenommenen Matrix und im Teilchen
F	[ - ]	Korrekturfaktor zur Berücksichtigung länglicher Hohlräume
$F_{(e)}$	[N]	äußere (diskrete) Kraft
G	[MPa]	Schubmodul
J	[ - ]	Jacobi-Matrix
$J_{IC}$	[N/mm]	Rissinitiierungswert nach ASTM
$J_R$	[N/mm]	Risswiderstand
K	[ - ]	Durchmesser Verhältnis $D_{\text{max}} / D_{\text{min}}$
$K_{\text{mittel}}$	[ - ]	Mittleres Durchmesser Verhältnis $D_{\text{max}} / D_{\text{min}}$
L	[ $\mu\text{m}$ ]	Teilchenabstand im Russell&Brown-Modell
N	[ - ]	Formfunktion bzw.
	[ $1/\text{cm}^3$ ]	Anzahl der ausgeschiedenen Kupferteilchen
$N_E$	[N/mm <sup>2</sup> ]	Teilchendichte
Q	[ - ]	Werkstoffunabhängige Konstante des Rousselier-Modells
R	[nm]	Äußerer Abschneide-Radius im Russell&Brown-Modell
$R_A$	[ - ]	Reduktionsfaktor im Dekohäsionsmodell

$R_e, R_{p0,2}$	[MPa]	Streckgrenze, 0,2%-Dehngrenze
$R_m$	[MPa]	Zugfestigkeit
RT	[°C]	Raumtemperatur
X	[ - ]	Ortsvektor
$S_R$	[MPa]	Kohäsionsspannung
T	[MPa]	Kohäsivspannung
$T_E$	[mm]	Elementdicke
$V_{E, i}$	[mm <sup>3</sup> ]	Elementvolumen, Volumen des Integrationspunktes
$W_1, W_2$	[mm]	Einheitszellendurchmesser
Z	[%]	Brucheinschnürung

### ***Kleine griechische Symbole***

$\alpha$	[ - ]	Phasenkennzeichnung bzw. [1/K] Wärmeausdehnungskoeffizient
$\beta$	[ - ]	Phasenkennzeichnung
$\varepsilon$	[ - ]	Dehnung
$\varepsilon_{pl}$	[ - ]	Plastische Dehnung
$\varepsilon^f$	[ - ]	Versagensdehnung
$\varphi_B$	[ - ]	Lokale Bruchdehnung
$\eta$	[ - ]	Mehrachsigkeit bzw. [ $\mu\text{m}^{-1}$ ] Dehnungsgradient
$\mu$	[ - ]	Querkontraktion
$\rho_{G/S}$	[ $\mu\text{m}^{-2}$ ]	Dichte der geometrisch notwendigen/statistisch verteilten Versetzungen
$\sigma$	[MPa]	Spannung
$\sigma_{1,2,3}$	[MPa]	Hauptspannungen
$\sigma_{dB}$	[MPa]	Druckfestigkeit
$\Delta\sigma$	[MPa]	Spannungszuwachs

$\Delta\sigma_{rel}$	[MPa]	Auf den Ausgangszustand bezogener Spannungszuwachs
$\sigma_k$	[MPa]	Werkstoffkonstante des Rousselier-Modells
$\sigma_H$	[MPa]	Hydrostatischer Spannungsanteil
$\sigma_v$	[MPa]	Von Mises-Vergleichsspannung
$\sigma_o$	[MPa]	Fließgrenze
$\tau$	[MPa]	Schubspannung bzw.
	[MPa]	Spannung höherer Ordnung
$x$	[ - ]	Ortsvektor

### **Große griechische Symbole**

$\Phi$	[MPa]	Fließfunktion
$\Gamma_0$	[J]	Kohäsivenergie

### **Abkürzungen**

ASTM	American Society for Testing and Materials
COD	Crack Opening Displacement
C(T)	Compact Tension
DKM	Dekohäsionsmodell
E60A	Ausgangszustand des Werkstoffs 15NiCuMoNb5
E60B	Betriebsbeanspruchter Zustand des Werkstoffs 15NiCuMoNb5
E60LA	Zustand des Werkstoffs 15NiCuMoNb5 nach Langzeitauslagerung
E2A	Ausgangszustand des Werkstoffs 15NiCuMoNb5
E2LA	Zustand des Werkstoffs 15NiCuMoNb5 nach Langzeitauslagerung
E59EG	Ausgangszustand des Werkstoffs 15NiCuMoNb5
E59B	Betriebsbeanspruchter Zustand des Werkstoffs 15NiCuMoNb5
EDZ	Ebener Dehnungszustand

EPE	Einphasenelemente
ESZ	Ebener Spannungszustand
FE(M)	Finite-Elemente (-Methode)
FGM	Gradientenwerkstoff (Functionally Graded Material)
GEH	Gestaltänderungsenergiehypothese
GNDs	Geometrisch notwendige Versetzungen (Geometrically Necessary Dislocations)
HMI	Hahn-Meitner-Institut (Berlin)
IMD	ITAP Molekulardynamik
ITAP	Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart
M	Matrizität
MMC	Metall/Matrix-Verbundwerkstoff (Metal Matrix Composite)
MPC	Multi-Point-Constraint
MPE	Mehrphasenelemente
MSG	Mechanism-based Strain Gradient
NH	Normalspannungshyothese
REM	Rasterelektronenmikroskop
RGM	Realgefügemodellierung
RVE	Repräsentatives Volumenelement (Representative Volume Element)
SANS	Neutronen-Kleinwinkelstreuung (Small Angle Neutron Scattering)
sk	Seitengekerbt
SKEZM	Selbstkonsistentes Einheitszellmodell
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
UEL	User-defined Element
VEDZ	Verallgemeinerter ebener Dehnungszustand
WB36	Bezeichnung für den Werkstoff 15NiCuMoNb5

# 1 Einleitung

Die Weiter- und Neuentwicklung von Werkstoffen bilden die Grundlage von Produktinnovationen und sind damit für die internationale Konkurrenzfähigkeit von Industrienationen auf dem Weltmarkt von großer Bedeutung. Neben der Anwendung von Faserverbundwerkstoffen (die nicht Thema dieser Arbeit sind) wird ein wesentlicher Anteil technologischer Fortschritte auch durch den Einsatz metall/keramischer Verbundwerkstoffe in Form von Schicht- oder Teilchenverbunden für thermische Barrieren, für Schneidwerkstoffe oder als Korrosionsschutz erzielt: Metallmatrix-Verbundwerkstoffe (Metal Matrix Composites, MMC) kombinieren dabei die hohen Festigkeiten und Elastizitätsmoduln keramischer oder graphitischer Einschlüsse mit den metallischen, hauptsächlich duktilen Eigenschaften der Matrix. Besonders teilchenverstärkte Aluminiumlegierungen sind durch ihre hohe spezifische Festigkeit und Steifigkeit sowie wegen ihrer verbesserten Ermüdungseigenschaften sehr interessant für Anwendungen in der Automobil- und Luftfahrtindustrie. Neben künstlich eingebrachten Partikeln liegen in den meisten technischen Werkstoffen bereits Teilchen in Form von nichtmetallischen Einschlüssen und Ausscheidungen vor. Da nichtmetallische Einschlüsse häufig nur schwach mit der Matrix verbunden sind, entstehen dort bei einsetzender Verformung Hohlräume, die ihrerseits duktilen Risswachstum auslösen. Ausscheidungen wiederum behindern die Bewegung von Versetzungen und führen zu einer Verfestigung und zu einer Zähigkeitsabnahme des Werkstoffs. Die auf makroskopischen Kenntnissen beruhende Elastizitäts- und Plastizitätstheorie kann zwar die durch die Teilchen hervorgerufene, globale Änderung des Spannungs-Dehnungsverhalten beschreiben. Versagensmechanismen oder Teilchengrößeneffekte können damit aber nicht erfasst werden. Durch Weiterentwicklung bekannter und durch Anwendung neuer Theorien und Modelle wird in der vorliegenden Arbeit der Einfluss unterschiedlich großer Teilchen auf das Verformungs- und Schädigungsverhalten von Werkstoffen mikromechanisch bewertet.

Vielfach wird das Werkstoffverhalten nicht nur von „innen“ sondern auch von Umgebungseinflüssen verändert. Neben der Temperaturwirkung auf Ausscheidungsvorgänge wird in dieser Arbeit auch das Werkstoffverhalten unter Wasserstoffeinfluss untersucht.

Das Gefüge der in dieser Arbeit pulver- bzw. schmelzmetallurgisch hergestellten Verbundwerkstoffe (Al/10vol%SiC bzw. Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) wird als Einschlussgefüge bezeichnet. Die Besonderheit von diesen Verbundwerkstoffen liegt in den meist sehr unterschiedlichen, phasenspezifischen Materialeigenschaften: Die deutlichen Unterschiede der Wärmeausdehnungskoeffizienten rufen Eigenspannungen hervor, die bereits bei der Herstellung zu Schädigungen im Gefüge führen können. Unter mechanischer Belastung können aufgrund der unterschiedlichen Verformungsfähigkeit der Einzelphasen schädi-

gungsmechanische Prozesse im Gefüge ausgelöst werden. Inwiefern zwei duktile Gefügebereiche das Schädigungsverhalten des Werkstoffs beeinflussen, wird an einem Duplexstahl mit seiner in Ferrit eingeschlossenen Austenitphase nachgewiesen.

Stellvertretend für Werkstoffe mit Einschlussgefüge werden am Beispiel der Verbundwerkstoffe Al/10vol.%SiC und Al/15vol.%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und des Duplexstahls X3CrNiMoCu26-6 der Einfluss der Einschlussform und Orientierung auf das Verformungs- und Schädigungsverhalten untersucht. Zur numerischen Beschreibung derartiger Gefüge sollen sowohl künstliche als auch Realgefügemodelle sowie selbstkonsistente Einheitszellen zur Anwendung kommen. Die duktile Schädigung der metallischen Matrix (Al) bzw. der ferritischen und austenitischen Phasen des Duplexstahls sollen über den auf Rice&Tracey /Ric/ basierenden Schädigungsparameter  $D$  erfasst werden. Dabei sind die herstellungsbedingten Eigenspannungen bei der Simulation zu berücksichtigen. Ein Bruch der Keramikpartikel (SiC bzw. Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) ist wegen der geringen Teilchengröße ( $< 15 \mu\text{m}$ ) nicht zu erwarten /Llo/. Eine Teilchenablösung der Keramikpartikel von der Al-Matrix bzw. eine Trennung der duktilen Phasen im Duplexstahl ist wegen der jeweils guten Anbindung ebenfalls auszuschließen.

Zur Verbesserung der Einsatzfähigkeit und Lebensdauer von Verbundwerkstoffen werden zudem Gradientenwerkstoffe entwickelt. Sowohl bei Halbfabrikaten wie bei Bauteilen wird dabei in mindestens einer Raumkoordinate die Zusammensetzung stetig verändert /Ilsch/. Allgemein gilt für Gradientenwerkstoffe die synergetische Nutzung der positiven Eigenschaften der Einzelphasen. Wegen der bei diesen Werkstoffen vorliegenden gegenseitigen Durchdringung der Phasen werden diese Gefüge als Durchdringungsgefüge bezeichnet. Zur Beschreibung dieser Phasendurchdringung wurde von Poeh /Poe1/ der Gefügeparameter Matrizität eingeführt. Bisher konnte dieser Gefügeparameter bei der Werkstoffmodellierung nur über sehr aufwändige Realgefügemodelle erfasst werden. Zur Reduktion des Modellierungsaufwandes von Durchdringungsgefügen soll in dieser Arbeit die Methode der selbstkonsistenten Einheitszelle hinsichtlich der Berücksichtigung der Matrizität weiterentwickelt werden.

Stellvertretend für Werkstoffe mit Durchdringungsgefüge soll am Beispiel von W/Cu, Fe/Ag und Al/TiO<sub>2</sub> der Einfluss der herstellungsbedingten Eigenspannungen und der Matrizität auf das elastisch-plastische Verformungsverhalten untersucht werden. In Durchdringungsgefügen kann die Keramikphase eine kritische Größe erreichen und brechen: Die durch die Trennfestigkeit der Keramik begrenzte Verformungsfähigkeit der Keramikpartikel ist über ein geeignetes Abbruchkriterium am Beispiel des Werkstoffs Al/TiO<sub>2</sub> zu berücksichtigen.

Im Gegensatz zu dem bei Verbundwerkstoffen gezielten Einbringen von Teilchen bzw. einer zweiten Phase sind in vielen metallischen Werkstoffen bereits nichtmetallische

Einschlüsse (z. B. Mangansulfide oder  $Al_2O_3$ ) vorhanden oder es werden Teilchen im Werkstoff z. B. unter Temperatureinfluss ausgeschieden. Wegen der schlechten Anbindung dieser nichtmetallischen Einschlüsse an die Matrix können dort bei einsetzender Verformung Hohlräume entstehen und somit der mikrostrukturelle Prozess des duktilen Risswachstums ausgelöst werden.

Im Gefüge ausgeschiedene submikroskopische Teilchen reduzieren die Beweglichkeit von Versetzungen und führen zu einer Verfestigung und damit verbundenen Zähigkeitsabnahme. Inwiefern die Teilchenart und die Teilchengröße das Verformungs- und Schädigungsverhalten des Werkstoffs beeinflussen, soll am Beispiel des kupferlegierten ferritischen Stahls 15NiCuMoNb5 behandelt werden. Zunächst soll im nm-Bereich die durch Kupferausscheidungen hervorgerufene Festigkeitssteigerung experimentell nachgewiesen und über die Theorie nach Russell&Brown /RB/ für unterschiedliche Werkstoffzustände beschrieben werden. Der Einfluss mittelgroßer Teilchen im  $\mu\text{m}$ -Bereich (Aluminiumoxidpartikel) soll mittels der MSG-Theorie (Mechanism-based Strain Gradient) erfasst werden /Gao/. Die schädigungsmechanische Wirkung nichtmetallischer Einschlüsse (Mangansulfidteilchen) im  $100\mu\text{m}$ -Bereich soll mit dem Rousselier-Modell untersucht werden /Rous1/. Dazu wird speziell die Thematik von länglichen Teilchenformen aufgegriffen. Die Möglichkeit, wie eine Kombination von in dieser Arbeit angewendeten numerischen Modellen aufwändige Experimente zu Ermittlung von Materialgrenzkurven ersetzen kann, wird am Beispiel von  $J_R$ -Kurven aufgezeigt.

Das Verformungs- und Schädigungsverhalten von Werkstoffen wird nicht nur über das Gefüge selbst beeinflusst, sondern in vielen Fällen auch von außen durch die Einwirkung von unterschiedlichen Umgebungsmedien verändert. Dabei gewinnt die technische Anwendung von metallischen Werkstoffen unter Wasserstoffeinfluss zunehmend an Bedeutung. Die durch das Eindringen des Wasserstoffs in das Gefüge verursachte Abnahme der Werkstoffduktilität soll in dieser Arbeit ebenfalls untersucht werden.

Welche Vorgänge im Gefüge im Wesentlichen für die durch Wasserstoffeintritt hervorgerufene Zähigkeitsabnahme verantwortlich sind, wird sowohl experimentell als auch numerisch am Beispiel des Werkstoffs 15MnNi6-3 untersucht. Über begleitende atomistische Simulationen wird die Rolle von Stufenversetzungen bei der wasserstoffinduzierten Reduktion der Verformungsfähigkeit aufgezeigt. Das Verformungs- und Schädigungsverhalten von Laborproben unter Wasserstoffeinfluss soll unter Anwendung des aus dem Kohäsivoberflächenmodell abgeleiteten Dekohäsionsmodell simuliert werden. Die nicht mit Wasserstoff beaufschlagten und somit duktilen Werkstoffbereiche werden wiederum unter Anwendung des Rousselier-Modells schädigungsmechanisch modelliert.



## 2 Grundlagen

Mit der Entwicklung von immer leistungsfähigeren Rechenanlagen vor allem in den letzten zwei Jahrzehnten werden numerische Methoden zur Behandlung von komplexen Fragestellungen auch auf dem Gebiet der Werkstoffwissenschaften zunehmend eingesetzt. Neben der im Folgenden dargestellten Finite-Elemente-Methode (FEM) und der Kontinuumsmechanik als Grundlage zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens von festen Körpern, werden die darauf basierenden und in dieser Arbeit angewendeten Schädigungsmodelle vorgestellt und das selbstkonsistente Einheitszellenmodell beschrieben, welches hauptsächlich dann zur Anwendung kommt, wenn weniger lokale mikrostrukturelle Vorgänge im Gefüge sondern vielmehr das globale Werkstoffverhalten von Verbundwerkstoffen im Vordergrund stehen. Am Ende des Kapitels werden die in dieser Arbeit zur Anwendung kommenden Theorien von Russell&Brown und die MSG (Mechanism-based Strain Gradient) Plasticity-Theorie vorgestellt, welche beide die Wirkung von Versetzungen auf das Werkstoffverhalten berücksichtigen.

### 2.1 Die Finite-Elemente-Methode

Bei der Behandlung technischer Systeme sind im Wesentlichen Gleichgewichtsbedingungen bzw. Bewegungsgleichungen aufzustellen und zu lösen. Dabei unterscheidet man zwischen diskreten und kontinuierlichen Systemen. Der Unterschied liegt in der Bestimmung der Systemantwort, welche bei den diskreten Systemen aus einer endlichen Anzahl von Zustandsgrößen zu ermitteln ist. Bei kontinuierlichen Systemen wird die Systemantwort nicht anhand algebraischer Gleichungen sondern über Differentialgleichungen beschrieben. Eine exakte Lösung für das zu behandelnde Problem, die alle Randbedingungen (wie z. B. Verschiebungen und/oder Kräfte) erfüllt, lässt sich aber nur für relativ einfache Systeme (z. B. einfache Fachwerke) ermitteln. Zur Lösung technisch aufwendiger Probleme (z. B. komplexe Fachwerke) müssen numerische Verfahren angewandt werden, wobei die kontinuierlichen Systeme auf diskrete numerische Systeme übergeführt bzw. reduziert werden. In diesem Zusammenhang sind vor allem Variationsverfahren zu nennen, bei deren Herleitung in der Festkörpermechanik i. A. von Energien ausgegangen wird: Betrachtet man hierzu einen elastischen Körper, so setzt sich die gesamte potentielle Energie (Gesamtpotential) aus der im Körper gespeicherten elastischen Energie und dem Potential der angreifenden Lasten zusammen. Hält man nun die von außen aufgeprägten Kräfte konstant und variiert die Verschiebungen,

so ergibt sich aus dem Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie, dass von allen möglichen kompatiblen Verschiebungszuständen, welche die Verschiebungsrandbedingungen erfüllen, nur derjenige Zustand das Problem exakt löst, welches das Gesamtpotential minimiert. Derartige Minimalprinzipien wurden bereits von C.A. Castigliano im Jahre 1873 eingesetzt /Cast/. Diese Verfahren haben jedoch den Nachteil, dass die Formänderungsenergien als Funktion der noch unbekanntem aufgeprägten Kräfte definierbar sein müssen. Beim Verfahren von Ritz /Ritz/ wird dieser Nachteil umgangen, indem für das Innere des Körpers Ansatzfunktionen für die Verschiebungen mit freien Parametern gewählt werden. Der Grundgedanke, das Kontinuum in endlich viele Untergebiete aufzuteilen und das Ritz-Verfahren bereichsweise anzuwenden taucht zum erstenmal bei Courant /Cou1+2/ auf. Die Finite-Elemente-Methode ist daher nichts anderes als ein spezielles Ritz-Verfahren. Auch bei der FEM wird das System nicht geschlossen betrachtet, sondern in eine endliche Anzahl von Lösungsbereichen, den so genannten finiten Elementen, unterteilt. Die prinzipielle Vorgehensweise bei der Lösung eines physikalischen Problems mit Hilfe der FEM besteht im Wesentlichen aus acht Schritten:

- Aufteilen des Lösungsbereiches in eine endliche Anzahl von Unterbereiche, den finiten Elementen
- Beschreibung des Werkstoffverhaltens
- Definition der Randbedingungen
- Beschreiben des Problems durch eine Variationsformulierung
- Approximation der wesentlichen Unbekannten in jedem Element durch Ansatzfunktionen
- Einsetzen der Elementansätze in die Variationsformulierung und Aufstellung des Elementgleichungssystem
- Zusammenstellen der Elementgleichungssysteme zu einem Strukturgleichungssystem
- Lösen des Strukturgleichungssystem auf numerischem Weg

Bei konventionellen FEM-Programmen sind i. A. nur die ersten 3 Schritte vom Benutzer zu übernehmen. In den meisten ingenieurmäßigen Anwendungen ist in dem mit finiten Elementen aufgeteilten Lösungsbereich das Verschiebungsfeld zu ermitteln. Durch geeignete Ansatzfunktionen  $u^{(e)}$  (zumeist Polynome niedriger Ordnung) wird dieses Verschiebungsfeld in jedem finiten Element approximiert. Dabei müssen die Verschiebungen an den Elementrändern kompatibel sein, so dass keine Risse bzw. Überlappungen auftreten. Aus diesem Grund sind die finiten Elemente über charakteristische Punkte,

den Knotenpunkten, miteinander verknüpft. Die endgültige Formulierung des Verschiebungsfeldes im finiten Element erfolgt mit Hilfe so genannter Formfunktionen  $N$  ( $i$  indiziert die  $i$  Knoten im Element  $e$ ):

$$\mathbf{u}^{(e)} = \sum_{i=1}^o \mathbf{u}_i^{(e)} N_i^{(e)} \quad (2.1)$$

Die Formfunktionen sind den Knoten zugeordnet und haben lokale Trägereigenschaften: Sie sind am entsprechenden Knotenpunkt gleich eins und klingen bis zum benachbarten Knotenpunkt auf Null ab. Durch die Wahl eines gemeinsamen Polynomgrades wird die erforderliche Stetigkeit erreicht. Die globale Darstellung des Verschiebungsfeldes  $\mathbf{u}$  ist dann die Zusammenfassung sämtlicher Formfunktionen im Modell (bei fortlaufender Nummerierung aller Knotenpunkte von 1 bis  $n$ ):

$$\mathbf{u} = \sum_{k=1}^n \mathbf{u}_k N_k \quad (2.2)$$

Zur einheitlichen Formulierung der Formfunktionen der Elemente ist es notwendig, die im FE-Modell unterschiedlich gestalteten Elemente im globalen  $(x,y,z)$ -Koordinatensystem in eine Einheitsform zu transformieren: Dreieckselemente werden dabei zum Einheitsdreieck, Viereckselemente werden dabei auf ein Einheitsquadrat in dem natürlichen  $(r,s,t)$ -Koordinatensystem abgebildet. Bei den in dieser Arbeit verwendeten isoparametrischen Elementen werden dazu die gleichen bereits in Gl. (2.1) verwendeten Formfunktionen  $N$  verwendet:

$$\mathbf{x}^{(e)} = \sum_{i=1}^o \mathbf{x}_i^{(e)} N_i^{(e)} \quad (2.3)$$

Bevor nun die Element-Steifigkeitsmatrix aufgestellt werden kann, müssen die Elementverzerrungen berechnet werden. Über die Verzerrungs-Verschiebungs-Transformationsmatrix  $B$  wird der Bezug zwischen den Dehnungen  $\boldsymbol{\varepsilon}$  und den Knotenpunktverschiebungen  $\vec{\mathbf{u}}$  hergestellt:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = B \cdot \vec{\mathbf{u}} \quad (2.4)$$

Die Matrix  $B$  ist im Allgemeinen eine Funktion der natürlichen Koordinaten der Elemente  $(r, s, t)$ . Daher erstreckt sich das Volumenintegral, das die Steifigkeitsmatrix  $K$  des Elements liefert, über diese natürlichen Koordinaten:

$$K = \int_V B^T C B dV \quad (2.5)$$

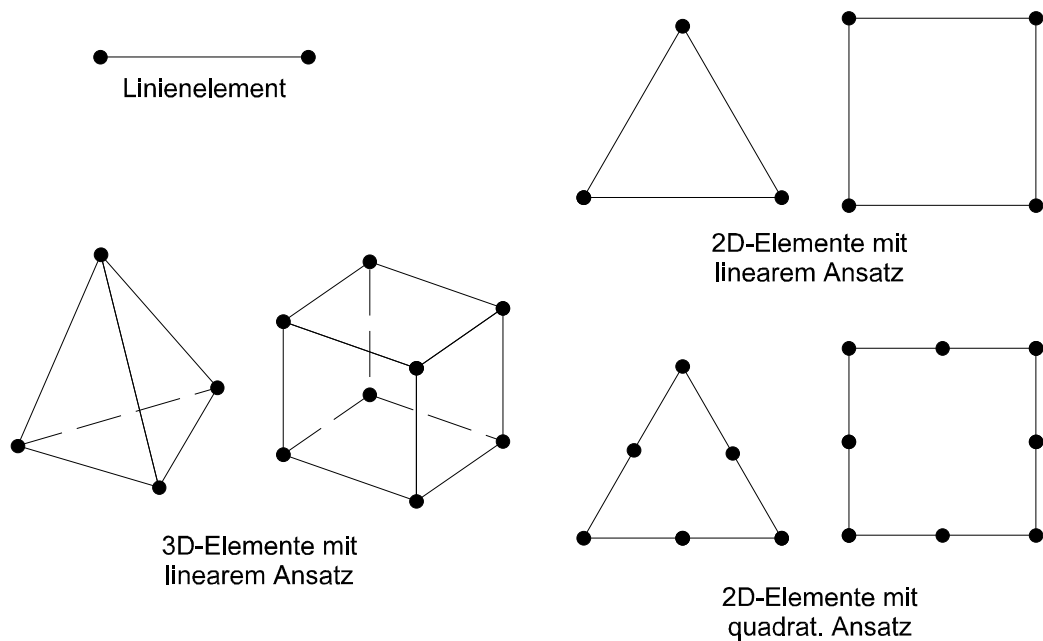
Das Volumenelement  $dV$  muss somit auch durch natürlichen Koordinaten ausgedrückt werden. Dies wird über die Jacobi-Matrix  $\mathbf{J}$  bzw. über die Determinante dieser Matrix

erreicht, welche eine Elementlänge im globalen (x,y,z)-System mit einer Elementlänge im natürlichen (r,s,t)-System verknüpft. Allgemein gilt:

$$dV = J \cdot drdsdt \tag{2.6}$$

Eine explizite Auswertung des Volumenintegrals in Gl. (2.5) ist im Allgemeinen und insbesondere dann nicht effektiv, wenn Interpolationen von höherer Ordnung verwendet werden oder wenn das Element verzerrt ist. Die Integration auf dem jeweiligen Einheitselement wird stattdessen mittels eines numerischen Schemas, der Gaußschen Integration, über eindeutig definierte Integrationspunkte (Gaußpunkte) vorgenommen.

Zur Aufteilung des Lösungsgebiets in eine endliche Anzahl finiter Elemente stehen in konventionellen FE-Paketen verschiedenartige und problemspezifische Elementtypen



**Bild 2.1:** Gängige Elementtypen (Position der Knoten mit Punkten markiert).

zur Auswahl. In **Bild 2.1** sind die für ein-, zwei- oder dreidimensionale Strukturen am häufigsten eingesetzten Elementtypen zusammengestellt. In dieser Arbeit werden 2- bzw. 3-dimensionale Elemente mit quadratischem Ansatz (Dreiecke mit 6 Knotenpunkten, Vierecke mit 8 Knotenpunkten und Hexaeder mit 20 Knotenpunkten) eingesetzt.

Ist das zu behandelnde System bzw. Problem in Lösungsgebiete (finite Elemente) aufgeteilt und über die Vorgabe von Randbedingungen wie Verschiebungen, Kräften, Spannungen oder Temperaturen eindeutig formuliert, so ist zur Ermittlung der gesuchten Knotenpunktverschiebungen ein meist nichtlineares Gleichungssystem zu lösen:

$$S(\vec{u}) \cdot \vec{u} + \vec{R} = 0 \tag{2.7}$$

Hierbei ist  $\vec{R}$  der Vektor der Reaktionskräfte an den Knotenpunkten und  $S(\vec{u})$  ist die aus den einzelnen Elementbeiträgen assemblierte Gesamtsteifigkeitsmatrix, die wegen des meist nichtlinearen Materialverhalten wiederum vom Verschiebungsfeld  $\vec{u}$  abhängt. Die Lösung eines derartigen Gleichungssystems hat somit iterativ zu erfolgen.

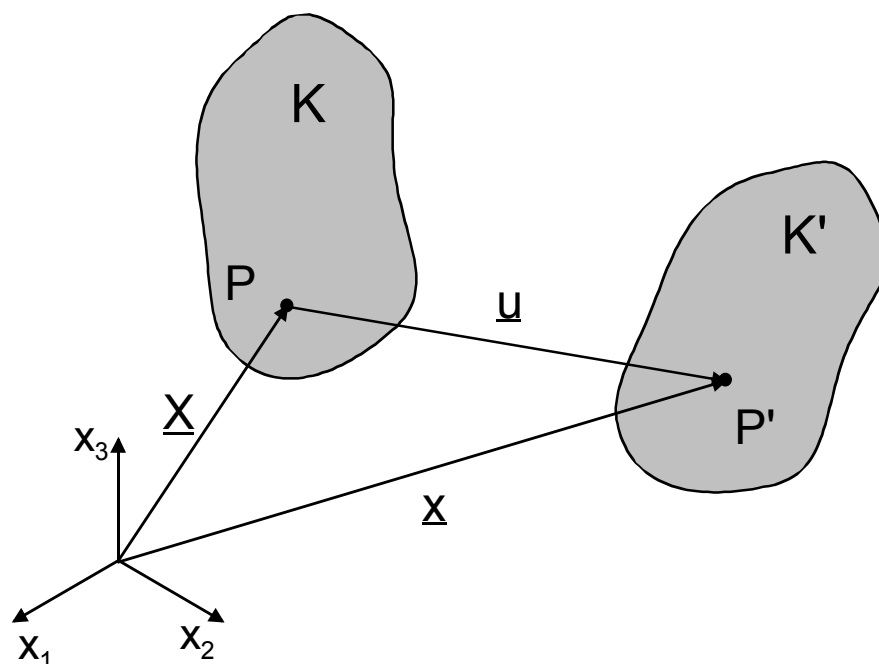
Im Folgenden seien noch mögliche Fehlerquellen und Schwierigkeiten, die bei der Lösung nichtlinearer elasto-plastischer Probleme mit Hilfe der FEM auftreten, angesprochen:

- Durch unzureichende Elementierungsdichte können in Abhängigkeit vom Verschiebungsansatz im Element hohe Verzerrungsgradienten nur ungenügend erfasst und damit ein zu steifes Verhalten der Struktur vorgetäuscht werden. Durch systematische Variation der Netzdichte müsste der Fehler bei jeder FE-Anwendung abgeschätzt werden. Dies wird häufig aus Zeit- und Kostengründen nicht durchgeführt. Vielmehr wird bereits bei der Elementierung der Struktur und ausreichender Erfahrung mit dem Umgang der FE-Methode diese Problematik umgangen.
- Aufgrund der iterativen Berechnung der meist nichtlinearen Steifigkeitsmatrix tritt ein numerischer Fehler auf, der durch die Wahl des Konvergenzkriteriums beeinflusst wird. In der Vergangenheit war die Wahl einer für das jeweilige Problem geeigneter Konvergenzschranke problematisch. Ein zu kleiner Wert erhöhte die Rechenzeiten, ein zu grober Wert verfälschte die Lösung. Modernere FE-Systeme, wie das in dieser Arbeit angewendet FE-Programm ABAQUS /ABA/, bieten hierfür eine automatisierte Schrittweitensteuerung an. Dennoch ist eine Konvergenz des Lösungsverfahrens a priori nicht gesichert.
- Allgemein kann es bei nichtlinearen Problemen auch mehrdeutige Lösungen geben.

## 2.2 Grundlagen zur Kontinuumsmechanik

In der Kontinuumsmechanik existieren zwei Methoden mit denen die Bewegung und Deformation eines Körpers im Raum beschrieben werden kann, die *Langrange-* (oder materielle) und die *Euler-* (oder räumliche) Formulierung.

Betrachtet man in **Bild 2.2** einen Körper  $K$  zunächst im undeformierten Zustand, so kennzeichnen wir dort die Lage eines beliebigen materiellen Punktes  $P$  durch den Ortsvektor  $\underline{X}$ , mit den materiellen Koordinaten  $X_i$  ( $i=1,3$ ). Bei einer Deformation geht der undeformierte Körper  $K$  in den deformierten Körper  $K'$  zum Zeitpunkt  $t$  über.



**Bild 2.2:** Bewegung eines materiellen Punktes  $P$  im Raum.

Wird die Lageänderung eines materiellen Teilchens mit dem Ortsvektor  $\underline{X}$  verfolgt, so bezeichnet man dies als *Lagrangesche* Beschreibung. Die Lage im deformierten Zustand wird gegeben durch

$$\underline{x} = \underline{x}(\underline{X}, t) \quad (2.8)$$

wobei die Ausgangslage  $\underline{X}$  die Referenzposition darstellt.

Dagegen wird in der *Eulerschen* Betrachtungsweise der Zustand in einem Raumpunkt betrachtet:

$$\underline{X} = \underline{X}(\underline{x}, t) \quad (2.9)$$

Bei der *Eulerschen* Formulierung wird also die Ausgangslage als Funktion der aktuellen Position beschrieben. Bezogen auf einen festen Betrachtungspunkt  $\underline{x}$  bedeutet dies, dass zu verschiedenen Zeitpunkten  $t$  unterschiedliche Materialteilchen an diesem Ort liegen.  $\underline{X}$  wird auch als *Lagrange-Koordinate* und  $\underline{x}$  als *Euler-Koordinate* bezeichnet.

Die Verschiebung  $\underline{u}$  eines Materialteilchens ist die Differenz zwischen der Ausgangslage und der aktuellen Position und formuliert in *Lagrange-Koordinaten*:

$$\underline{u}(\underline{X}, t) = \underline{x}(\underline{X}, t) - \underline{x}(\underline{X}, 0) \quad (2.10)$$

In *Euler-Koordinaten* wird die Verschiebung durch

$$\underline{u}(\underline{x}, t) = \underline{X}(\underline{x}, 0) - \underline{X}(\underline{x}, t) \quad (2.11)$$

ausgedrückt. Die Gl. (2.10) repräsentiert die Verschiebung eines bestimmten Materialteilchens, während Gl. (2.11) die Verschiebung des Materialteilchens beschreibt, welches sich zum Zeitpunkt  $t$  am Ort  $\underline{x}$  befindet.

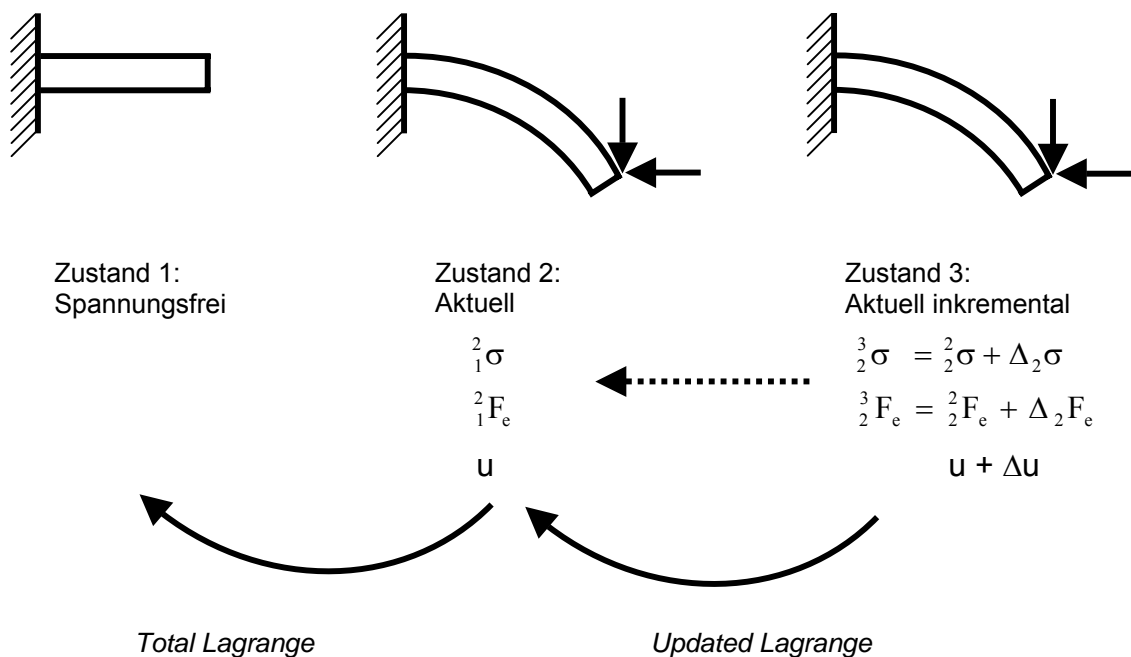
Auch die mit einem Teilchen verbundenen materiellen Eigenschaften ändern sich im Allgemeinen mit der Bewegung dieser Punkte, d.h. mit der Zeit. In der *Lagrange-Formulierung* ist ein Beobachter über die Zeit mit dem Teilchen verbunden und misst die Veränderungen der jeweiligen Eigenschaft. Bei der *Euler-Formulierung* sitzt der Beobachter am Ort  $\underline{x}$  und kann zum Zeitpunkt  $t$  das Passieren eines Teilchens beobachten, welches sich zur Zeit  $t = 0$  am Ort  $\underline{X}$  befunden hat. Er misst Veränderungen, die sich für den Ort  $\underline{x}$  dadurch ergeben, dass zu unterschiedlichen Zeiten unterschiedliche materielle Punkte am Ort  $\underline{x}$  sind. Die *Eulersche* Betrachtungsweise gibt somit Auskunft über die zeitliche Veränderung einer Eigenschaft am Punkt  $\underline{x}$ , aber nicht über die Änderung der Eigenschaften eines bestimmten materiellen Teilchens mit der Zeit.

Auf die FEM übertragen bedeuten die beiden unterschiedlichen Betrachtungsweisen, dass sich bei Verwendung der *Lagrange-Formulierung* das verwendete FE-Netz materialbezogen, also entsprechend des berechneten Materialflusses, verschiebt. Gerade bei der Behandlung mehrphasiger Werkstoffe, die Gegenstand dieser Arbeit sind, ist diese materielle Art der Problembeschreibung von Vorteil.

Das Hauptanwendungsgebiet für die Formulierung nach *Euler*, bei der ein Materialfluss durch ein ortsfestes Netz (Kontrollvolumen) betrachtet wird, sind fluidmechanische Berechnungen. Hier interessiert im Allgemeinen, woher ein bestimmtes Teilchen kommt oder wohin es fließt, oder man braucht z. B. Informationen über die Geschwindigkeit an bestimmten Orten.

Bei Berechnungen in der Festkörpermechanik bietet sich die *Lagrange*-Formulierung an, da im Allgemeinen die Referenzkonfiguration zum Zeitpunkt  $t = 0$  bekannt ist und die deformierte Konfiguration gesucht wird. Den deformierten Zustand erhält man durch Verfolgung der materiellen Punkte auf ihrer Bahn vom Referenzzustand in den deformierten Zustand. Die Referenzkonfiguration kann dabei der letzte Gleichgewichtszustand (*Updated Lagrange*) oder der Ausgangszustand (*Total Lagrange*) sein.

Der Unterschied der beiden Lagrange-Formulierungen werden im Folgenden dargestellt /Argy/: Dazu sind in **Bild 2.3** ein spannungsfreier Zustand (Zustand 1) und zwei Gleich-



**Bild 2.3:** Beschreibung von Lagrange-Formulierungen ( $\sigma$  = Spannungen,  $F_e$  = diskrete Kräfte,  $u$  = Verschiebungen) /Argy/.

gewichtszustände (Zustand 2+3) dargestellt. Über die Einführung von Zustand 3, der über die inkrementelle Verschiebung  $\Delta u$  aus Zustand 2 entsteht, wird eine inkrementale Lösungstechnik vorbereitet.

Bei der *Total Lagrangeschen* Betrachtungsweise werden alle Größen auf den spannungsfreien Zustand 1 bezogen. Ein Wechsel des Referenzzustandes während der Berechnung findet nicht statt. Die Beziehung zwischen den Kräften und Spannungen wird über Gl. (2.12) beschrieben:

$${}^2_1F_e = \int_{V_1} [({}^1\alpha_L + \alpha_{NL}(u))^t {}^2_1\sigma] {}^1dV \quad (2.12)$$



Dabei beinhalten  $\alpha_L$  und  $\alpha_{NL}$  den linearen bzw. verschiebungsabhängigen Teil des Differentialoperators, der Dehnungsincremente mit Verschiebungsincrementen verknüpft.

Wird dagegen der inkrementale Zustand 3 auf den jeweils vorigen aktuellen Zustand 2 bezogen, so erhält man die *Updated Lagrange*-Formulierung.:

$$\Delta_2 F_e = \int_{\overset{2}{V}} \left[ \alpha_L^t \Delta_2 \sigma + \alpha_{NL}(\Delta u)^t \overset{2}{\sigma} + \alpha_{NL}(\Delta u)^t \Delta_2 \sigma \right]^2 dV \quad (2.13)$$

In Gl. (2.13) ist der Zuwachs an diskreten Kräften beim Übergang von Zustand 2 nach Zustand 3 definiert. Darin sind  $\overset{2}{\sigma}$  die Spannungen im Zustand 2 und  $\Delta_2 \sigma$  ist der Zuwachs der Spannungen im inkrementalen Übergang von Zustand 2 nach Zustand 3. Ist die Lösung für Zustand 3 gefunden, so wird dieser bei der nächsten Iteration zum Referenzzustand (Bild 2.3, ←).

Sowohl die *Total Lagrangesche* als auch die *Updated Lagrange*-Formulierung erfasst alle kinematischen nichtlinearen Effekte infolge von großen Verschiebungen, großen Drehungen und großen Verzerrungen. Der einzige Unterschied der beiden Formulierungen liegt in der Wahl der Bezugsconfiguration für die kinematischen Variablen (Spannungen und Verschiebungen). Je nach numerischer Effektivität wird die eine oder andere Formulierung angewendet, wobei die numerische Effektivität wiederum vom verwendeten Materialgesetz und von der Elementwahl abhängt: In /Bath/ wird dargestellt, dass die Berechnung der Steifigkeitsmatrix K (vergl. Gl. (2.5)) für die in dieser Arbeit verwendeten 2D-Elemente für den ebenen Dehnungszustand bzw. für Axialsymmetrie unter Anwendung der *Updated Lagrange*-Formulierung weniger zeitaufwendig ist als bei Anwendung der *Total Lagrange*-Formulierung.

Bei den in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen unter Vorgabe von geometrischen Nichtlinearitäten und elastisch-plastischen Materialverhalten wird die Bestimmung des Gleichgewichtszustandes in dem in dieser Arbeit eingesetzten FEM-System ABAQUS /ABA/ im jeweiligen Belastungsschritt iterativ von Inkrement zu Inkrement gelöst und über die relative Zeit t gesteuert. Als Referenzconfiguration wird während der Iteration die jeweils letzte Gleichgewichtskonfiguration gewählt. Da in ABAQUS die Referenzconfiguration nach jedem Zeitschritt aktualisiert wird, lässt sich dieses Vorgehen als *Updated-Lagrange*-Methode bezeichnen.

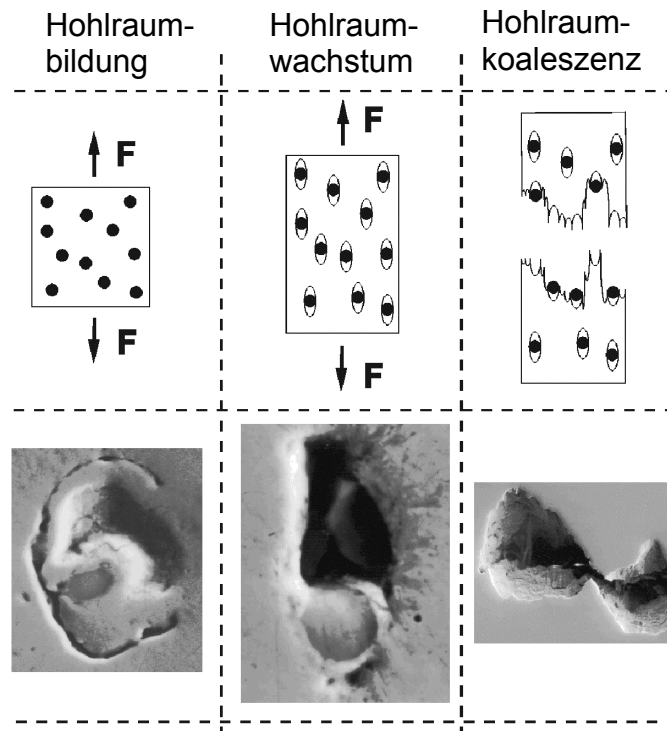
## 2.3 Die verwendeten Schädigungsmodelle

In der Schädigungsmechanik finden „lokale Ansätze“ und „mikromechanische Modelle“ zunehmend Anwendung. Im Gegensatz zur klassischen Bruchmechanik mit seinen geometrieabhängigen Parametern werden diese Konzepte ausschließlich über materialabhängige Größen beschrieben. Dies hat den Vorteil, dass die an Laborproben ermittelten Kenngrößen im Allgemeinen auf Bauteile übertragbar sind. Dennoch gibt es in diesem Zusammenhang noch viele ungelöste Probleme. Diese Problematik ist nicht Gegenstand dieser Arbeit, da hier ausschließlich Laborproben oder einfache mikromechanische Modelle behandelt werden. Es sei dazu auf /Bern/ verwiesen, wo in numerischen Round-Robin-Untersuchungen versucht wird, diese Problematik anzugehen.

Das Versagen technischer Werkstoffe durch Bruch kann im Wesentlichen in zwei Brucharten eingeteilt werden /Roos/ und zwar in:

- *Spröbruch* aufgrund der Entstehung und Ausbreitung von Mikrorissen bei gleichzeitig geringer plastischer Verformung. Das Risswachstum verläuft meist instabil. Die Bruchflächen sind metallisch glänzend. Der Bruch verläuft entlang der Korngrenzen (interkristalliner Bruch) oder durch die Körner hindurch (transkristalliner Bruch). Meist treten derartige Versagensmechanismen deutlich unterhalb der Spröbruchübergangstemperatur des Werkstoffs auf.
- *Zähbruch* aufgrund der Entstehung, Ausbreitung und Vereinigung von Hohlräumen bei gleichzeitig ausgeprägter plastischer Verformung. In **Bild 2.4** sind diese Stadien von Hohlraumbildung, Hohlraumwachstum und Hohlraumkoaleszenz schematisch und metallographisch dargestellt. Das Risswachstum kann stabil oder instabil verlaufen. Bei den meisten technischen Metallen und Metalllegierungen sind auf der Bruchfläche wabenartige Strukturen zu erkennen, deren Ursache in den aufbrechenden Reststegen der Poren beim Bruch liegt. Im Allgemeinen verläuft der Bruch transkristallin.

In dieser Arbeit werden die schädigungsmechanischen Untersuchungen ausschließlich auf Werkstoffe oberhalb der jeweiligen Spröbruchübergangstemperatur angewendet, so dass im Folgenden hauptsächlich duktile Schädigungsmodelle vorgestellt werden. Das zur Beschreibung des Einflusses von Wasserstoff auf die Materialschädigung eingesetzte Schädigungsmodell bildet eine Ausnahme.



**Bild 2.4:** Bildung, Wachstum und Vereinigung von Poren (Hohlräumen) als Stadien des duktilen Risswachstums /Seid/.

### 2.3.1 Der Damage-Parameter

Tritt der Schadensfall ein, so wird bei ferritischen Stählen und bei Temperaturen oberhalb der spröde-duktilen Übergangstemperatur bei quasistatischer Belastung ein Zähbruchmechanismus bei gleichzeitiger plastischer Verformung stattfinden. Durch Hohlraumentstehung, -wachstum und -vereinigung wird jedoch die plastische Deformation eingeschränkt. Dieses Phänomen wurde schon früh erkannt /Tip/. Im ersten Stadium duktilen Versagens entstehen Hohlräume an Partikeln, z. B. nichtmetallischen Einschlüssen, durch Trennung von Teilchen und Matrix bei einer kritischen Spannung /Arg1, Arg2/, oder es kommt zu lokalen Brüchen von Teilchen. Das Schädigungsmodell von Rice&Tracey /Ric/ beschreibt dabei das Wachstum von Hohlräumen und es wird dort eine Gleichung für die Wachstumsrate eines kugelförmigen Hohlraums in einem ideal-plastischen Material abgeleitet:

$$\frac{dR}{R} \propto e^{\frac{3\sigma_H}{2\sigma_0}} d\epsilon_{pl} \quad (2.14)$$

mit dem aktuellen Hohlraumradius  $R$ , der hydrostatischen Spannung  $\sigma_H$  und der plastischen Vergleichsdehnrate  $d\varepsilon_{pl}$ . Beremin /Ber1, Ber2/ hat die Fließspannung  $\sigma_0$  durch die aktuelle Vergleichsspannung  $\sigma_v$  ersetzt, um die Verfestigung des Materials zu berücksichtigen. Mit der Definition der Mehrachsigkeit  $\eta = \sigma_H / \sigma_v$  folgt aus Gl. (2.14)

$$\frac{dR}{R} \propto e^{1.5\eta} d\varepsilon_{pl} \quad (2.15)$$

Durch Einführung eines inkrementellen Schädigungsparameters, der den Zuwachs an plastischer Dehnung auf die Versagensdehnung  $\varepsilon^f$  bezieht

$$d\tilde{D}_i = \frac{d\tilde{\varepsilon}_{pl}}{\varepsilon^f} \quad (2.16)$$

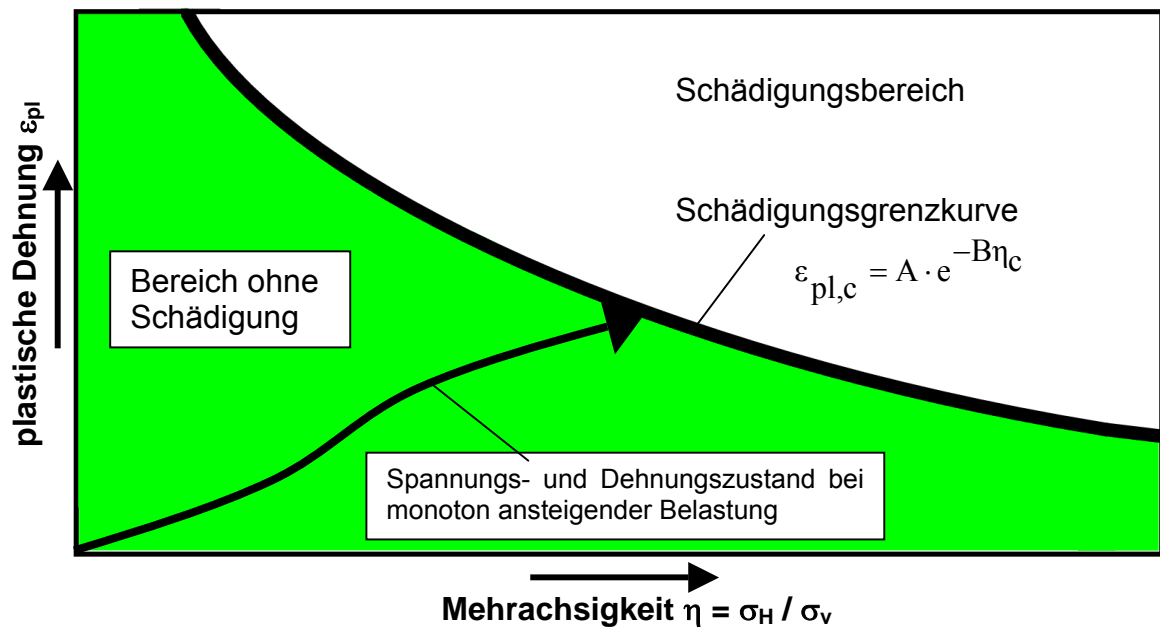
und mit der Annahme, dass die Versagensdehnung  $\varepsilon^f$  umgekehrt proportional zur Wachstumsrate des Hohlraums ist, kann der Schädigungsparameter  $D$  aus der Integration von Gl. (2.16) zusammen mit Gl. (2.15) wie folgt abgeleitet werden:

$$D = \int_0^{\varepsilon_{pl,c}} e^{1.5\eta} d\tilde{\varepsilon}_{pl} \quad (2.17)$$

Über den Damage-Parameter  $D$  wird die duktile Schädigung sowohl über die Verformungsvorgeschichte als auch über den aktuellen Spannungszustand beschrieben. Im Gegensatz sind auch Schädigungsmodelle bekannt, die jeweils nur eine kontinuumsmechanische Größe berücksichtigen. Im Modell von /Brown, Roy, Good/ werden zur Beschreibung des duktilen Bruchs nur die kritische plastische Dehnung herangezogen, wogegen die Modelle von /Spieg, Gur, Arg1/ ausschließlich Spannungsgrößen berücksichtigen. In /Wulf/ wurde gezeigt, dass bei der Berechnung von Risspfaden unter Zugrundelegung von Spannungs- und/oder Dehnungskriterien immer nur Teilaspekte des experimentell beobachteten Risspfades richtig simuliert werden. Oft pflanzte sich der Riss in eine experimentell nicht beobachtete Richtung fort. Erst die Einführung des Damage-Parameters konnte dieses Problem lösen.

Soll dieses Schädigungskriterium zu Anwendung kommen, so ist dem Damage-Parameter  $D$  eine kritische, Material bezogene Größe  $D_c$  gegenüberzustellen. In /Arndt, Holl1/ wird dafür die Schädigungsgrenzkurve definiert:

$$\varepsilon_{pl,c} = A \cdot e^{-B\eta_c} \quad (2.18)$$



**Bild 2.5:** Verlauf der Schädigungsgrenzkurve mit Abgrenzung des Dehnungs-Mehrachsigsigkeitsgebiets in zwei Teile.

Diese Schädigungsgrenzkurve teilt das Dehnungs-Mehrachsigsigkeitsgebiet in zwei Teile auf. Unterhalb der Kurve tritt keine Schädigung ein. Liegen die Punkte auf der Kurve und darüber, so ist von Materialschädigung auszugehen (**Bild 2.5**). Die Parameter A und B sind werkstoffabhängige, dimensionslose Größen.

Über folgende Transformation wird der Schädigungsparameter D aus Gl. (2.17) mit der Schädigungsgrenzkurve aus Gl. (2.18) in Verbindung gebracht:

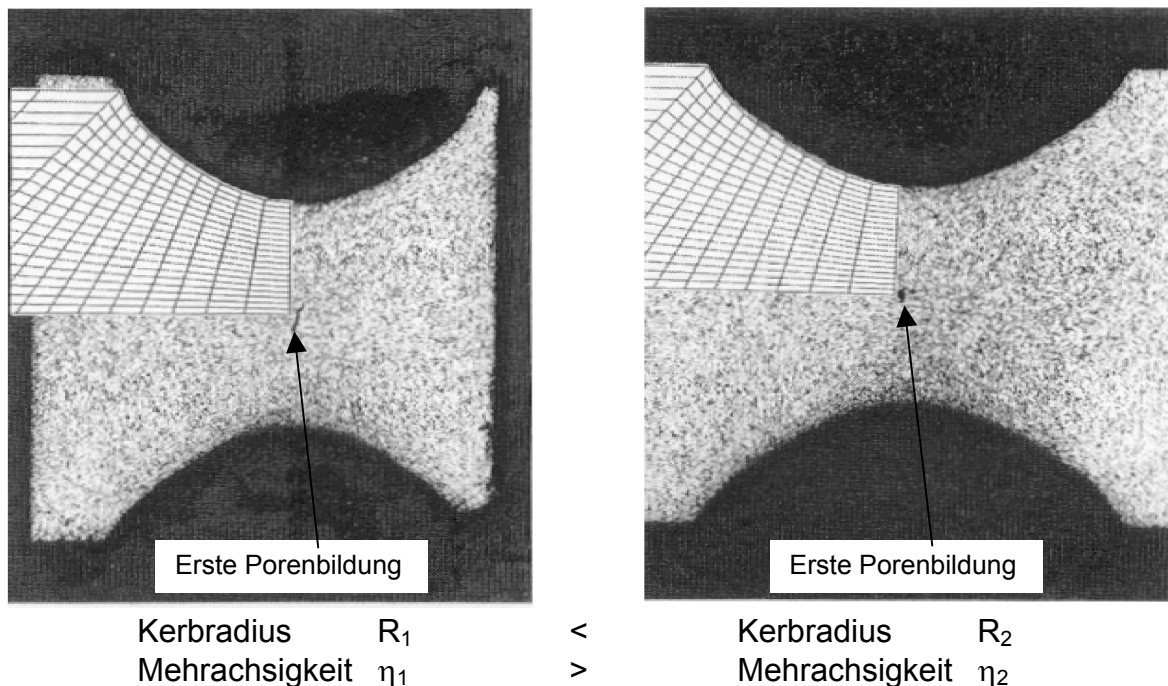
$$1 \equiv D_c = \frac{\epsilon_{pl,c}}{\epsilon_{pl,c}} = \frac{1}{\epsilon_{pl,c}} \cdot \int_0^{\epsilon_{pl,c}} d\tilde{\epsilon}_{pl} = \frac{1}{A} \cdot e^{B\eta_c} \cdot \int_0^{\epsilon_{pl,c}} d\tilde{\epsilon}_{pl} = \frac{1}{A} \cdot \int_0^{\epsilon_{pl,c}} e^{B\eta_c} d\tilde{\epsilon}_{pl} \quad (2.19)$$

Während monoton ansteigender Belastung kann der Spannungs-Dehnungszustand beispielhaft über den in Bild 2.5 dargestellten Lastpfad beschrieben werden. Experimentell wurde dieses Werkstoffverhalten von /Holl1, Holl2, Kong/ an Stahl und Kupfer nachgewiesen. Zu Beginn der Belastung ist im Allgemeinen  $\epsilon_{pl} \leq \epsilon_{pl,c}$  und  $\eta \leq \eta_c$  und der Belastungszustand hinsichtlich der Materialschädigung kann über den verallgemeinerten Damage-Parameter D beschrieben werden:

$$D = \frac{1}{A} \cdot \int_0^{\epsilon_{pl}} e^{B\eta} d\tilde{\epsilon}_{pl} \quad (2.20)$$

Materialschädigung tritt ein, wenn der Damage-Parameter D den Wert  $D_c = 1$  erreicht.

Die Ermittlung der Werkstoffparameter A und B ist sehr aufwendig und erfordert sowohl experimentelle Versuche als auch numerische Simulationen. Dabei werden zunächst gekerbte Zugproben mit unterschiedlichem Kerbradius soweit belastet, bis erste Anzeichen einer Schädigung festzustellen sind. Da diese Bereiche auch bei gekerbten Proben meist in der Probenmitte liegen, ist ein direkter Zugang zum Zeitpunkt der Schädigung während des Versuchs nicht möglich. Dazu werden mehrere gleichartig gekerbte Zugproben soweit unterschiedlich belastet und metallographisch untersucht, bis diejenige Probe gefunden ist, bei der erste Anzeichen von Schädigung festzustellen sind. Zur Bestimmung der plastischen Dehnung  $\varepsilon_{pl}$  und der Mehrachsigkeit  $\eta$  wird diese Probe numerisch simuliert. Sind auf diese Weise durch Verwendung unterschiedlich gekerbter Zugproben für unterschiedliche Mehrachsigkeiten die dazu gehörigen plastischen Dehnungen ermittelt (Bild 2.5), so kann durch diese  $\eta$ - $\varepsilon_{pl}$ -Wertepaare eine Schädigungsgrenzkurve approximiert und die Parameter A und B ermittelt werden. Im Allgemeinen genügen dazu 4 - 5 Wertepaare, wobei jedoch die experimentelle Seite jeweils ca. 5 - 10 Proben erfordert, so dass im Mittel 40 - 50 Experimente durchzuführen sind.



**Bild 2.6:** Ermittlung der Werkstoffparameter A und B über Zugproben mit unterschiedlichen Kerbradien und begleitender numerischer Simulation.

Neuere Entwicklungen auf der Basis von Einheitszellberechnungen zielen darauf ab, den experimentellen Aufwand zu minimieren /Moha/. Vorarbeiten dazu sind in /Kuna, Schlo/ dokumentiert. Das Modell der Einheitszellen wird in Kapitel 3 auch zur Ermittlung der Eigenspannungen in unterschiedlichen Phasen von Verbundwerkstoffen und in Kapitel 4 zur Beschreibung von Durchdringungsgefügen angewendet.

### 2.3.2 Das Rousselier-Modell

Ein weiteres Schädigungsmodell zur numerischen Behandlung von duktilen Bruchvorgängen stellt das Rousselier-Modell /Rous1/ dar. Das duktile Werkstoffversagen wird hier ebenfalls auf die in Bild 2.4 dargestellten mikrostrukturellen Prozesse zurückgeführt.

Als Erweiterung zum Modell nach Rice&Tracey wird bei einer modifizierten Form des Rousselier-Modells neben dem Hohlraumwachstum auch die Hohlraumkoaleszenz (Hohlraumvereinigung) über die Definition einer kritischen Hohlraumgröße  $f_c$  bei der Schädigungsmodellierung berücksichtigt /Seid/. Mit Hilfe der folgenden Fließfunktion wird das Werkstoffverhalten unter Berücksichtigung der Schädigung beschrieben /Rous1/:

$$\Phi = \frac{\sigma_v}{1-f} + \sigma_k Q f e^{\frac{\sigma_H}{(1-f)\sigma_k}} - \sigma_0 \quad (2.21)$$

$\sigma_v$  = von Mises-Vergleichsspannung

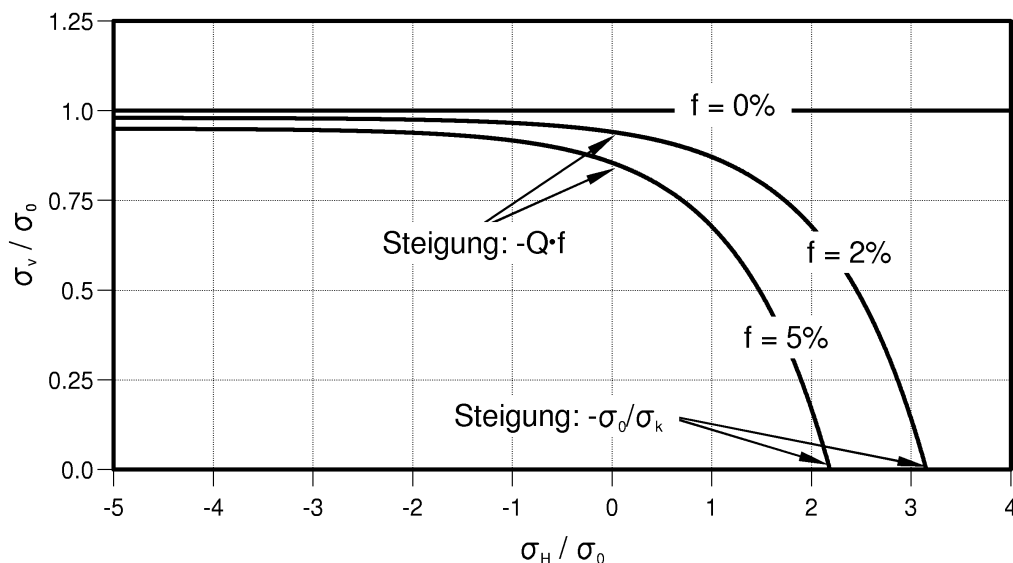
$\sigma_H$  = hydrostatischer Spannungsanteil

$\sigma_0$  = Fließgrenze

$\sigma_k$  = Werkstoffkonstante

$f$  = Hohlraumvolumenanteil (anfänglich  $f_0$ )

$Q$  = Werkstoffkonstante ( $Q = 2 / \text{Bat}$ )<sup>1</sup>

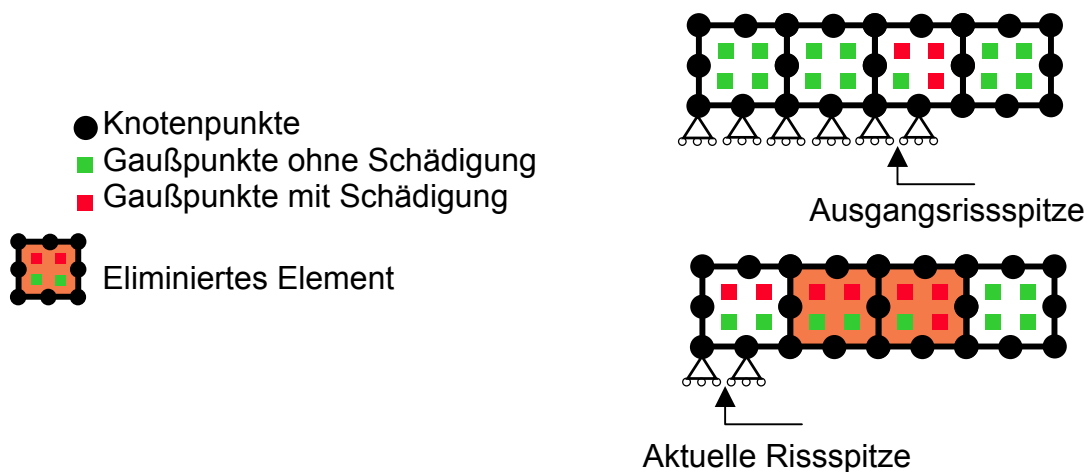


**Bild 2.7:** Fließfläche von Rousselier in der normierten  $\sigma_v$ - $\sigma_H$ -Ebene für verschiedene Hohlraumvolumenanteile  $f = 0\%$ ,  $f = 2\%$  und  $f = 5\%$  ( $\sigma_k / \sigma_0 = 1$ ).

<sup>1</sup> In der Literatur wird diese Konstante i. d. R. mit D bezeichnet. In dieser Arbeit wird Q verwendet, um eine Verwechslung mit dem Schädigungsparameter D zu vermeiden.

In **Bild 2.7** ist die Fließfläche von Rousselier in der normierten  $\sigma_v$ - $\sigma_H$ -Ebene für verschiedene Hohlraumvolumenanteile  $f$  dargestellt. Als Spannungsverhältnis wird hier  $\sigma_k/\sigma_0 = 1$  vorgegeben (dieses Spannungsverhältnis repräsentiert den in Kapitel 5 untersuchten kupferlegierten ferritischen Stahl 15NiCuMoNb5 (WB36)). Entsprechend dem D-Parameter wird auch beim Rousselier-Modell die erste Phase der duktilen Schädigung, die Hohlrumbildung, nicht explizit behandelt. Vielmehr wird bei Beginn der Schädigungsberechnung ein Anfangshohlraumvolumen  $f_0$  vorgegeben. Das Wachstum von Hohlräumen wird des Weiteren nicht durch den Fließort sondern durch die Normale zur Fließfläche gesteuert. In /Bes/ wird darauf hingewiesen, dass im Falle des Rousselier-Modells für reine Scherung ( $\sigma_H = 0$ ) die normierte Fließfläche eine Steigung von  $-Q \cdot f$  aufweist (Bild 2.7), so dass an dieser Stelle die Normale zur Fließfläche nicht mit der  $\sigma_v$ -Achse übereinstimmt und das Rousselier-Modell für reine Scherung eine plastische Dehnrage und damit ein Anwachsen der Schädigung vorhersagt. Im Druckbereich ( $\sigma_H \ll 0$ ) nähert sich die normierte Rousselier-Fließfläche asymptotisch dem um den Faktor  $1-f$  reduzierten von-Mises-Potential. Unter rein hydrostatischer Beanspruchung ( $\sigma_v = 0$ ) liegt eine Steigung von  $-\sigma_0/\sigma_k$  vor (Bild 2.7), so dass bei hohen Mehrachsigkeiten aus dem Rousselier-Modell stets eine nicht verschwindende Scherkomponente im plastischen Deformationstensor folgt /Bes/.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde zunächst das Rousselier-Modell in Form einer User-Subroutine (UMAT) für das kommerzielle FE-Programm ABAQUS /ABA/ auf der Basis der in /GKSS/ entwickelten Software implementiert. Die numerische Stabilität der schädigungsmechanischen Berechnungen von C(T)-Proben konnte dabei durch Eliminierung stark geschädigter Elemente aus der Steifigkeitsmatrix wesentlich verbessert werden. In **Bild 2.8** ist diese Vorgehensweise dargestellt: Sind in einem Element die zwei zur Rissebene abgewandten Gaußpunkte geschädigt (das Hohlraumvolumen  $f$  hat den



**Bild 2.8:** Eliminierung stark geschädigter Elemente bei Simulation des Risswachstums.

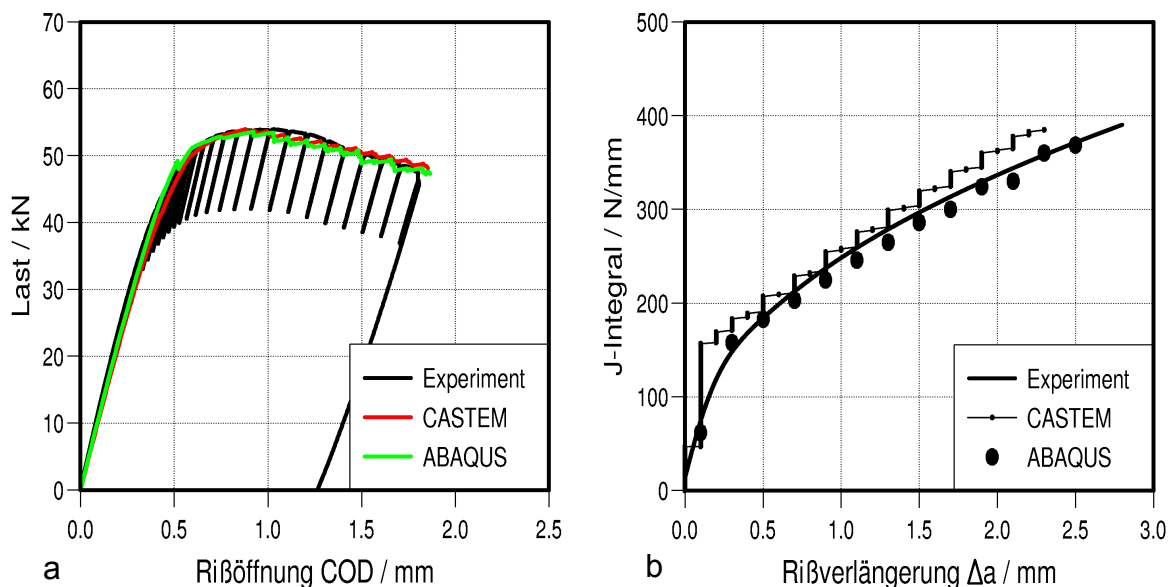


kritischen Wert  $f_c$  erreicht), so wird dieses Element aus der Steifigkeitsmatrix eliminiert. Die dem Risspfad nahen Gaußpunkte sind (entsprechend der CASTEM-Implementierung in /Uhl/) von der Schädigung ausgeschlossen.

Durch zusätzlich entwickelte Programmbausteine (J-Prozessor und Modellierungsmodul) konnte die Qualität der numerischen Ermittlung von Risswiderstandskurven ( $J_R$ -Kurven) deutlich verbessert und der Modellieraufwand erheblich reduziert werden:

#### *J-Prozessor auf der Basis der Kraft-Aufweitungs (F-COD)-Kurve*

Entsprechend der experimentellen Ermittlung der  $J_R$ -Kurve aus der Fläche unter der gemessenen Kraft-Aufweitungskurve (F-COD) wird zur numerischen Bestimmung der J-Werte die berechnete Kraft-Aufweitungskurve herangezogen. Das im Experiment aus metallographischen Untersuchungen an der C(T)-Probe ermittelte Risswachstum wird durch das Protokollieren der während der Belastung geschädigten und aus der Steifigkeitsmatrix entfernten Elemente bereitgestellt: Durch jedes ausgefallene Element wird das numerisch ermittelte Risswachstum um die jeweilige Elementkantenlänge erweitert. Unter Anwendung dieses Programmbausteins können aufwändige, auf J-Integral-Prozessoren gestützte Berechnungen, umgangen werden. In **Bild 2.9** ist beispielhaft für den Werkstoff 15NiCuMoNb5 (WB36) die experimentelle und die mit dem Programm CASTEM und ABAQUS berechnete Kraft/Rissaufweitungskurve (F-COD, a) und die  $J_R$ -Kurve (b) gegenübergestellt. Obwohl beide FE-Systeme den experimentellen F-COD-Verlauf einer C(T)-Probe gut wiedergeben, gibt es Unterschiede in der Güte der nume-

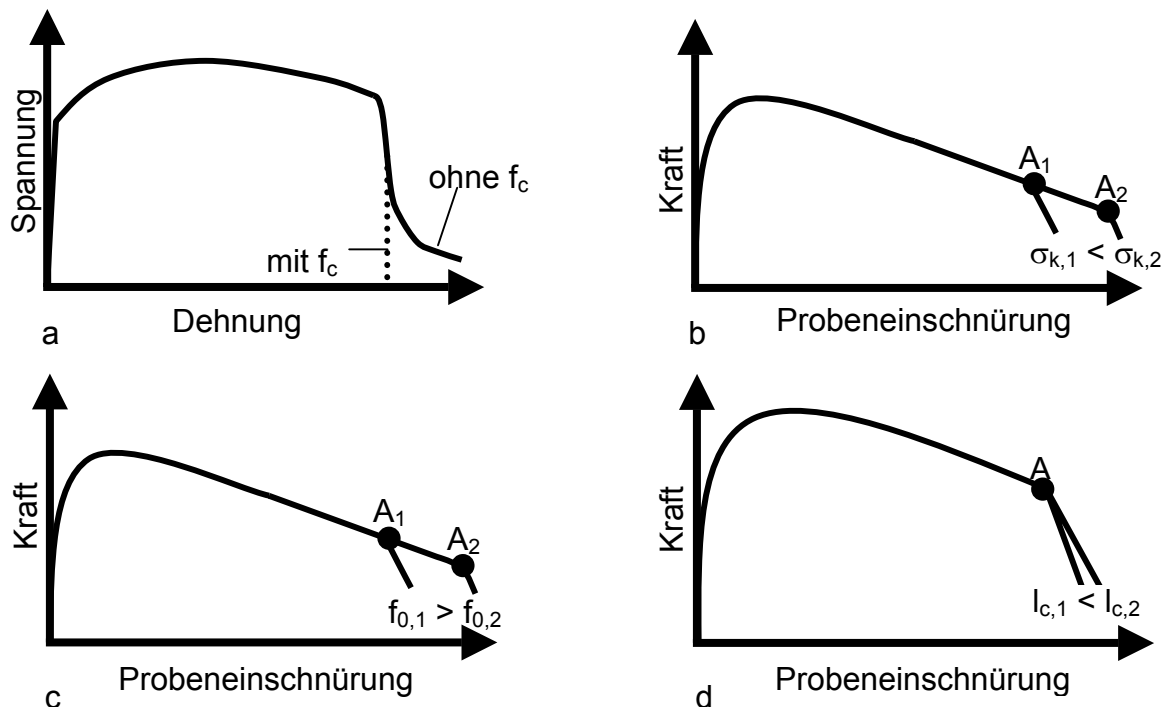


**Bild 2.9:** Vergleich Experiment-Simulation: Kraft-Rissöffnungskurve (a) und Risswiderstandskurve (b) für eine C(T)25-Probe (20%sk). Berechnung des J-Integrals direkt über den J-Prozessor (CASTEM (b)) und aus der in (a) numerisch ermittelten Last-COD-Kurve nach /ASTM/ (ABAQUS).

risch ermittelten  $J_R$ -Kurven: Der in CASTEM implementierte J-Prozessor zeigt vor allem in der Anfangsphase der  $J_R$ -Kurve als auch bei maximalem Risswachstum größere Abweichung zum Experiment. Dagegen wird unter Anwendung des entwickelten Programmbausteins (ABAQUS) die experimentell ermittelte Risswiderstandskurve gut abgebildet.

#### Modellierungsmodul zur automatisierten Vernetzung von Laborproben

Bei der Anwendung des Rousselier-Modells wird der mittlere Abstand der Poren über eine entsprechende Wahl der Elementkantenlänge in das Berechnungsmodell eingebracht. Bei der Anwendung quadratischer Elemente mit nur 4 Integrationspunkten (reduzierte Integration) wird der geforderte Porenabstand direkt durch den Abstand der Integrationspunkte abgebildet. So wird ein Porenabstand von  $l_c = 0,1$  mm simuliert, wenn in der Prozesszone der Schädigung quadratische Elemente mit einer Kantenlänge von  $2 \cdot l_c = 0,2$  mm eingesetzt werden. Des Weiteren sind C(T)-Proben unterschiedlich tief angeschwungen und für jede C(T)-Laborprobe ist ein eigenes FE-Netz zu erstellen. Um den Modellierungsaufwand zu verringern, wurde in dieser Arbeit ein modularer Softwarebaustein entwickelt, mit dessen Hilfe sowohl Zugproben (glatt und gekerbt) als auch C(T)-Proben in Zusammenarbeit mit dem Softwaresystem MSC/PATRAN /Pat/ modelliert werden können. Dieser Softwarebaustein setzt die geometrierelevanten Daten in eine für das Programmsystem MSC/PATRAN lesbare Script-Sprache um.



**Bild 2.10:** Einfluss der Rousselier-Parameter auf das mechanische Verhalten von glatten (a) und gekerbten (b-d) Zugproben.

Im Rousselier-Modell sind mit  $f_0$ ,  $f_c$ ,  $l_c$  und  $\sigma_k$  vier unabhängige Parameter anzupassen. Aus theoretischen Überlegungen kann für die Konstante  $Q$  unabhängig vom Werkstoff der Wert 2 angenommen werden /Bat/. In **Bild 2.10** ist der Einfluss der einzelnen Parameter auf das Spannungs-Dehnungs bzw. Kraft-Einschnürungsverhalten von glatten bzw. gekerbten Proben schematisch dargestellt. Der Knickpunkt A1 und A2 in der Kraft-Probeneinschnürungskurve gekerbter Zugproben wird von den beiden Parametern  $\sigma_k$  (Spannungsparameter) und  $f_0$  (Anfangshohlraumvolumen) beeinflusst. Eine gleichzeitige Anpassung von diesen beiden Parametern ist somit nicht sinnvoll, sondern es wird eine von beiden Größen als gegeben angenommen. Die Anpassung der beiden anderen Parameter  $f_c$  und  $l_c$  ist schwierig, da nach Erreichen des Knickpunktes die Berechnungen wegen des Einschnürens der Probe numerisch instabil werden. Beim Rousselier-Modell erfolgt das Versagen eines materiellen Volumenelements, wenn das Hohlraumvolumen einen kritischen Wert  $f_c$  erreicht hat. Für das kritische Hohlraumvolumen konnte anhand schädigungsmechanischer Berechnungen von Zugproben der Wert  $f_c = 0,05$  abgeleitet werden /Seid, Kuß/. Die globale Größe des Hohlraumabstandes  $l_c$  wird in dieser Arbeit über die Anpassung der C(T)-Probe an das Experiment bestimmt. In Kapitel 5 wird die Leistungsfähigkeit dieses Schädigungsmodells nachgewiesen.

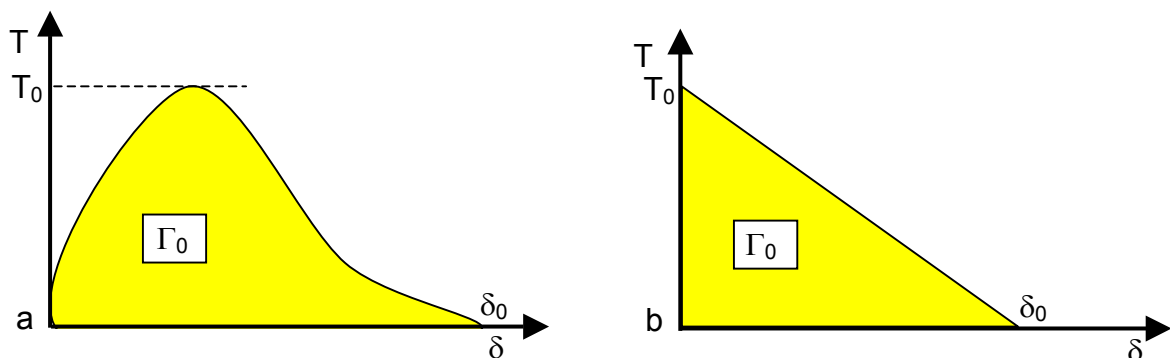
### 2.3.3 Die Kohäsivmodelle

Für die numerische Simulation der Rissentwicklung, d.h. von der Rissbildung bis zum Bauteilversagen unter monoton zunehmender Beanspruchung haben sich neben dem Damage-Parameter und dem Rousselier-Modell auch Kohäsivmodelle als besonders geeignet herausgestellt. Der Ursprung der Kohäsivmodelle geht auf Arbeiten von Barrenblatt /Bar/ und Dugdale /Dug/ zurück. Beide Autoren teilen den Riss in eine spannungsfreie und eine mit Kohäsivspannungen beaufschlagte Zone auf. In /Bar/ werden die Kohäsivspannungen als Funktion der nur vom Material abhängigen Ausdehnung der Kohäsivzone beschrieben. Damit konnten die an Risspitzen auftretenden unrealistischen Spannungssingularitäten umgangen werden. Die ersten Anwendungen der Kohäsivmodelle in Verbindung mit der FE-Methode gehen auf /Hill/ zurück. Durch ständige Weiterentwicklung werden diese Modelle auch zur Beschreibung von Schädigungsvorgängen /Cris, Elic/ und auf „fibre-bridging“-Problemen in Faserverbundwerkstoffen angewendet /Bao1, Suo, Duan/. Bei der Anwendung von Kohäsivmodellen in Verbindung mit der FEM wird grundsätzlich zwischen dem Kohäsivzonenmodell und dem Kohäsivoberflächenmodell unterschieden, wobei begleitende Verifizierungen über Experimente der unterschiedlichen Varianten erst in neueren Arbeiten zu finden sind /Sieg1/.

### 2.3.3.1 Das Kohäsivzonenmodell

Bei dem von Tvergaard /Tver1/ vorgeschlagenen Kohäsivzonenmodell werden im Gegensatz zum Rousselier-Modell keine kontinuumsmechanischen Elemente geschädigt, sondern der Bereich der Schädigung wird lokal durch eine vorgegebene Zone (Kohäsivzone) definiert. Der Risspfad wird beim Kohäsivzonenmodell somit a priori festgelegt. Zur Modellierung der Kohäsivzone werden spezielle Elemente (Kohäsivelemente) eingesetzt, welche die Materialschädigung über eine an das jeweilige Problem angepasste Traktions-Trennungs-Funktion (Separationsgesetz) beschreiben (**Bild 2.11**). Sehr häufig wird bei Schädigungsberechnungen eine Dreiecksform (Bild 2.11b) vorgegeben /Cris, Elic, Suo/. Je nach Definition dieser Funktion kann sowohl duktiles als auch sprödes Werkstoffversagen simuliert werden.

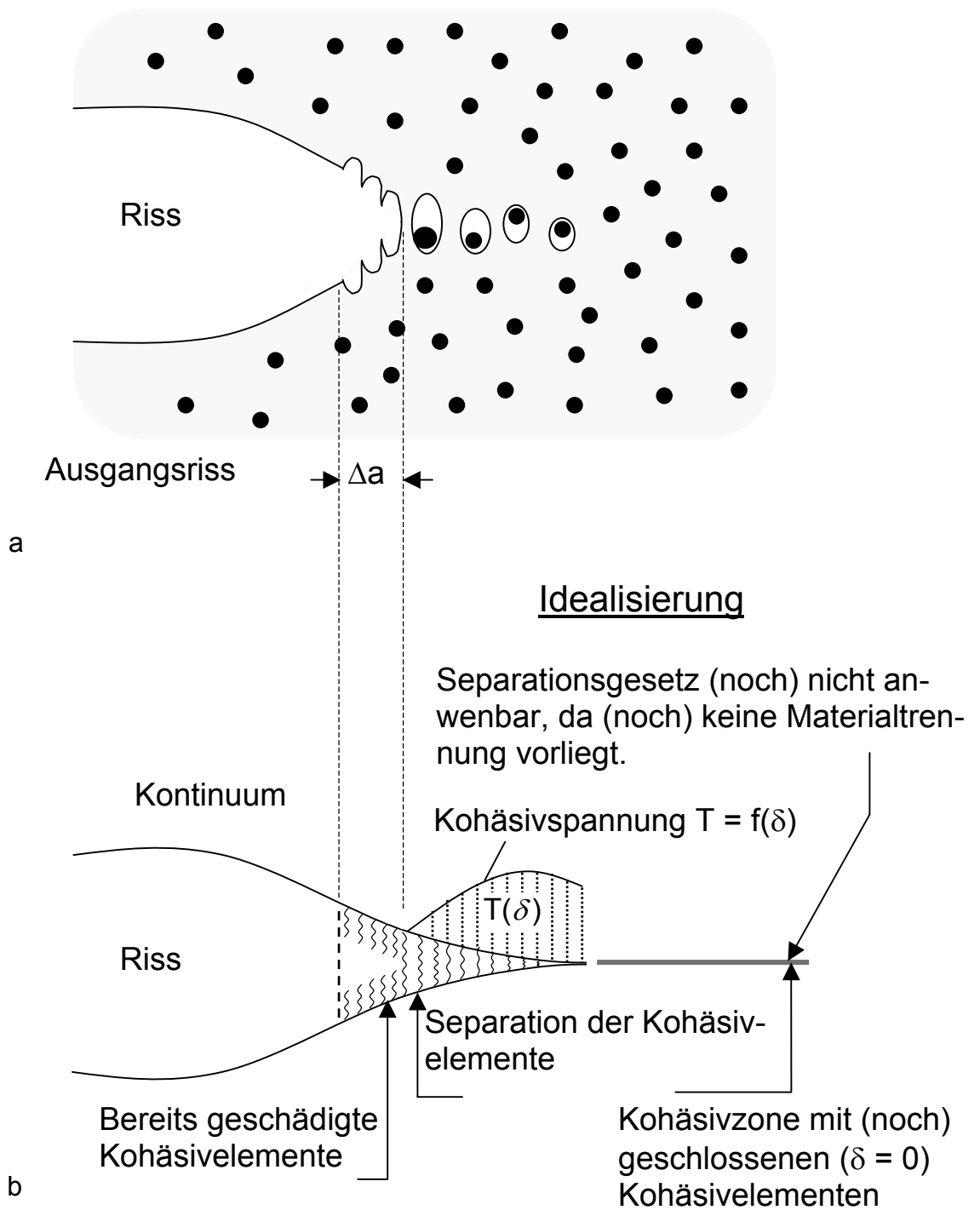
$$\Gamma_0 = \int_0^{\delta_0} T(\delta) d\delta \quad (2.22)$$



**Bild 2.11:** Allgemeine Form (a) und häufig verwendete Form (b) des Separationsgesetzes beim Kohäsivzonenmodell. Verlauf der Kohäsivspannung  $T$  über der Aufweitung  $\delta$  mit den Modellparametern  $T_0$  und  $\Gamma_0$ .

Bei der Verschiebung  $\delta_0$  ist der Bruch eingetreten. Auch beim Kohäsivzonenmodell werden die Stadien Porenbildung, -wachstum und -vereinigung als Ursache für duktilen Risswachstum definiert (vergl. Bild 2.4 und **Bild 2.12a**). In diesem Zusammenhang sind auch Arbeiten von Siegmund und Brocks /Sieg2/ zu nennen, die das auf Porenwachstum basierende Gurson-Modell /Gurs/ in die Kohäsivzone mit einbeziehen. In /Corn1, Corn2/ wird das Separationsgesetz über zwei Parameter beschrieben und zwar über die maximale Kohäsivspannung  $T_0$  und über der Fläche unter der Kohäsivspannung-Aufweitungskurve (Bruchenergie  $\Gamma_0$ , Bild 2.11). Unter der Anwendung von „User-Defined-Elements“ (UEL, **Bild 2.12b**) in der Kohäsivzone konnten damit sowohl Laborproben als auch Laserschweißverbindungen erfolgreich schädigungsmechanisch simuliert werden.

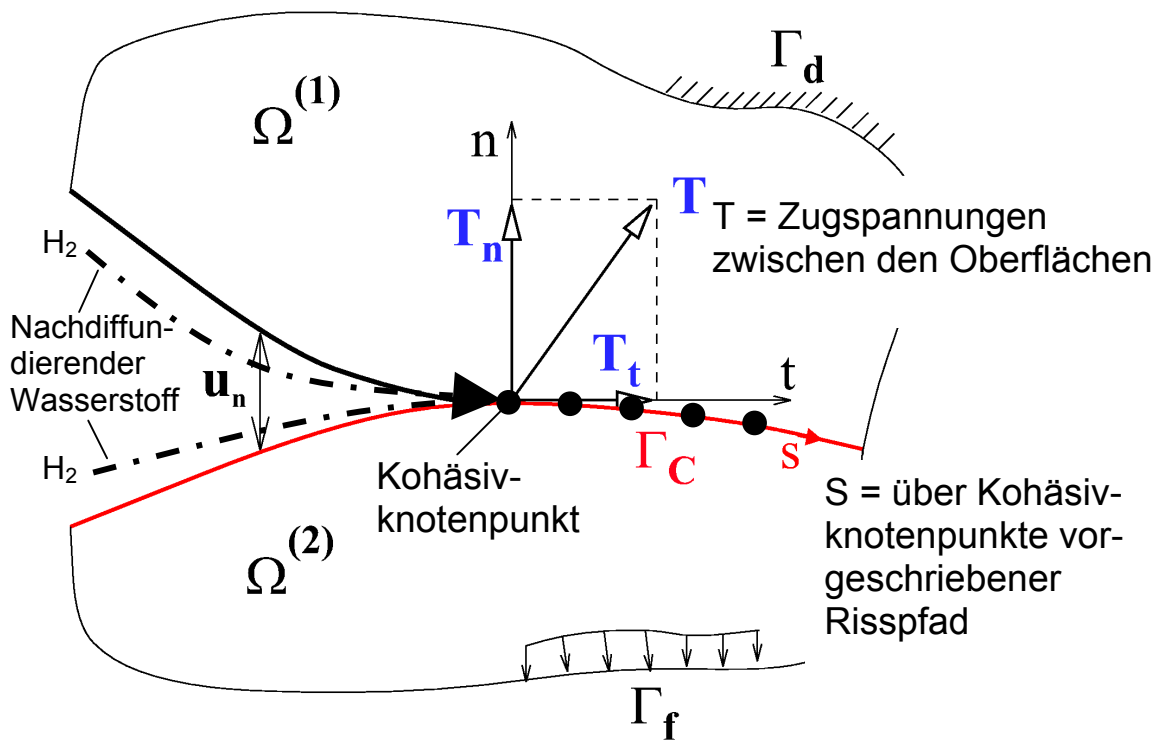
### Realer Werkstoff



**Bild 2.12:** Bildung, Wachstum und Vereinigung von Poren (Hohlräumen) als Stadien des duktilen Risswachstums (a) und Umsetzung in ein Kohäsivzonenmodell (b) unter Anwendung von Kohäsivelementen /Corn1/.

### 2.3.3.2 Das Kohäsivoberflächenmodell

Im Gegensatz zum Kohäsivzonenmodell werden beim Kohäsivoberflächenmodell (**Bild 2.13**) keine speziellen Kohäsivelemente eingesetzt, sondern die zwischen zwei Oberflächen an den Knotenpunkten wirkenden Kohäsionsspannungen betrachtet /Mish/. Im Falle des Mode I Bruchs wird Dekohäsion angenommen, wenn die Normalspannung  $T_n$  eine kritische Größe erreicht. Der Risspfad wird beim Kohäsivoberflächenmodell über Kohäsivknotenpunkte ebenfalls vorweg definiert und die Materialtrennung (Schädigung) wird über die Separation dieser Knotenpunkte simuliert. In /Mish/ wurde das Kohäsivoberflächenmodell bereits erfolgreich für die Schädigungsberechnung einer Dreipunktbiege-Probe aus Al/20vol.%SiC angewendet.



**Bild 2.13:** Beschreibung der Schädigung über Zugspannungen beim Kohäsivoberflächenmodell. Abbildung des Risspfades über Kohäsivknotenpunkte.

In dieser Arbeit wird das Kohäsivoberflächenmodell zur Beschreibung der wasserstoffinduzierten Schädigung eingesetzt. Da der Wasserstoff ständig in das Material nach diffundiert (Bild 2.13), wird das an den Kohäsivknotenpunkten angewendete Separationsgesetz, welches die Abnahme der Zugspannungen bis zur Knotenfreigabe beschreibt, durch eine zeitliche Komponente erweitert. Zur begrifflichen Abgrenzung wird dieses spezielle Kohäsivoberflächenmodell mit einer von der Zeit abhängigen lokalen Kohäsionsspannung im Folgenden als Dekohäsionsmodell (DKM) bezeichnet.

Im FE-Paket ABAQUS /ABA/ ist ein derartiges Dekohäsionsmodell mit der Eingabemöglichkeit eines selbst definierten, zeitabhängigen Separationsgesetzes über die Option DEBOND bereits implementiert. Ist der Risspfad bekannt, so wird entsprechend dem Kohäsivoberflächenmodell über Vorgabe bestimmter Knotenpunkte eine Dekohäsionszone eingeführt. Die Knotenpunkte dieser Zone durchlaufen während der Beanspruchung im Wesentlichen die 3 Stadien, wie sie in **Bild 2.14** schematisch beschrieben sind: Unter Annahme einer reinen Mode I Beanspruchung werden zunächst die Verschiebungen aller in der Dekohäsionszone ausgewiesenen Knotenpunkte in Normalenrichtung unterdrückt. Wird in diesem Stadium am ersten Knotenpunkt des definierten Risspfades ein bestimmtes Kriterium erfüllt (z. B. das Überschreiten einer kritischen Normalspannung  $T_n$ ), so wird an diesem Knotenpunkt die Verschiebungsunterdrückung durch eine Reaktionsspannung  $S_R$ , die zu Beginn des Knotenlösen eine Rissöffnung an entsprechender Stelle verhindert, ersetzt. Im zweiten Stadium wird diese Reaktions-

1. Stadium:  
Normalspannungskriterium ist nicht erfüllt, Material ist noch intakt (Knoten intakt)

$$u_n = 0$$

$$S_R \text{ nicht aktiv}$$

2. Stadium:  
Normalspannungskriterium ist erfüllt, Materialschädigung (Knotenlösen) setzt ein

$$t \geq 0$$

$$u_n \geq 0$$

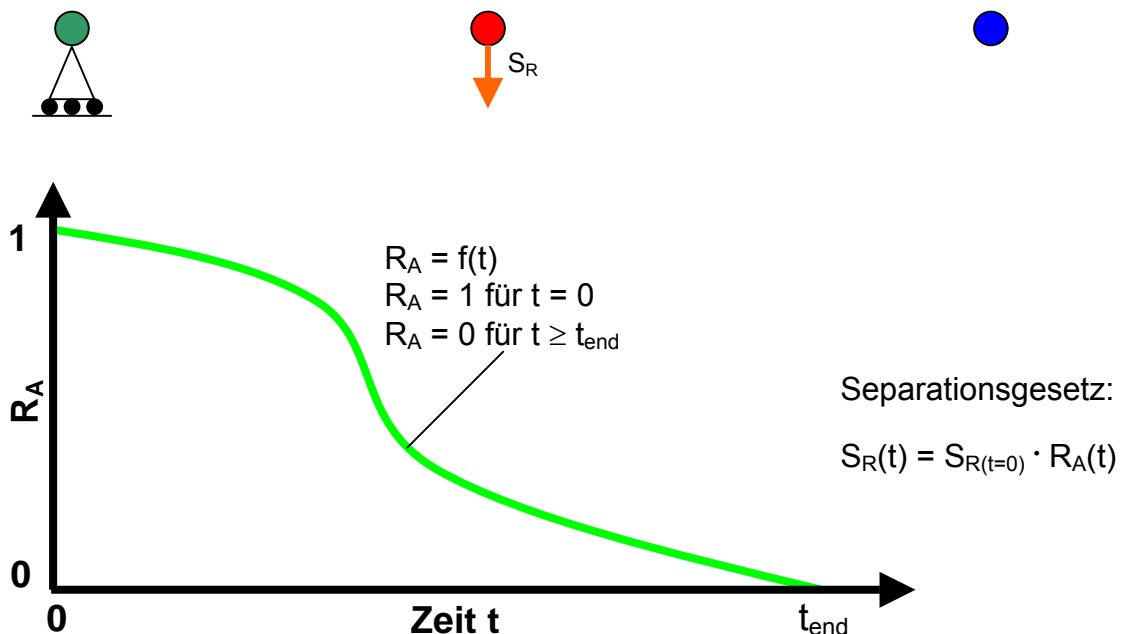
$$S_R \geq 0$$

3. Stadium:  
Reaktionsspannung  $S_R$  vollständig abgebaut, Materialschädigung (Knotenlösen) ist abgeschlossen

$$t \geq t_{\text{end}}$$

$$u_n \geq 0$$

$$S_R = 0$$



**Bild 2.14:** Die 3 Stadien der Verschiebungs ( $u$ )- und Spannungszustände ( $S_R$ ) an den Knotenpunkten einer Dekohäsionszone (Annahme einer Mode I Beanspruchung) und Vorgabe eines zeitabhängigen Dekohäsionsgesetzes.

spannung entsprechend dem eingegebenen zeitabhängigen Separationsgesetzes reduziert und schließlich auf den Wert Null herabgesetzt. Der Knotenpunkt hat nun das 3. Stadium erreicht. Eine eindeutige Rissausbreitungsrichtung wird dadurch definiert, indem das Versagenskriterium (z. B. Normalspannungskriterium) am benachbarten Knotenpunkt  $A_{i+1}$  erst dann überprüft wird, wenn es bereits am Knoten  $A_i$  erfüllt ist. Zu Beginn der Rechnung wird ein außen liegender Knotenpunkt auf dem definierten Risspfad als Anfangsrissspitze festgelegt. Die Zeit  $t_{\text{end}}$  in Bild 2.14 stellt eine relative Zeitgröße dar und beschreibt die Gesamtzeit der numerischen Simulation. Unterteilt man die Berechnung in unterschiedliche Belastungsschritte und wird das DKM während eines Belastungsschrittes definiert, so beschreibt die Größe  $t_{\text{end}}$  die Gesamtzeit dieses Belastungsschrittes. In diesem Fall wird über  $t_{\text{end}}$  der Zeitraum zwischen Wasserstoffeintritt und Versuchsende festgelegt.

In Kapitel 6 wird anhand verschiedener Schädigungsberechnungen von Kerbzugproben mit ISO-V Kerbe und mit Kerbradius  $r = 4$  mm und von C(T)-Proben unter gasförmigem Wasserstoffeinfluss die Anwendung dieses Modells vorgestellt und dessen Tauglichkeit nachgewiesen.

## 2.4 Grundsätzliches zu Berechnungen mit Einheitszellen

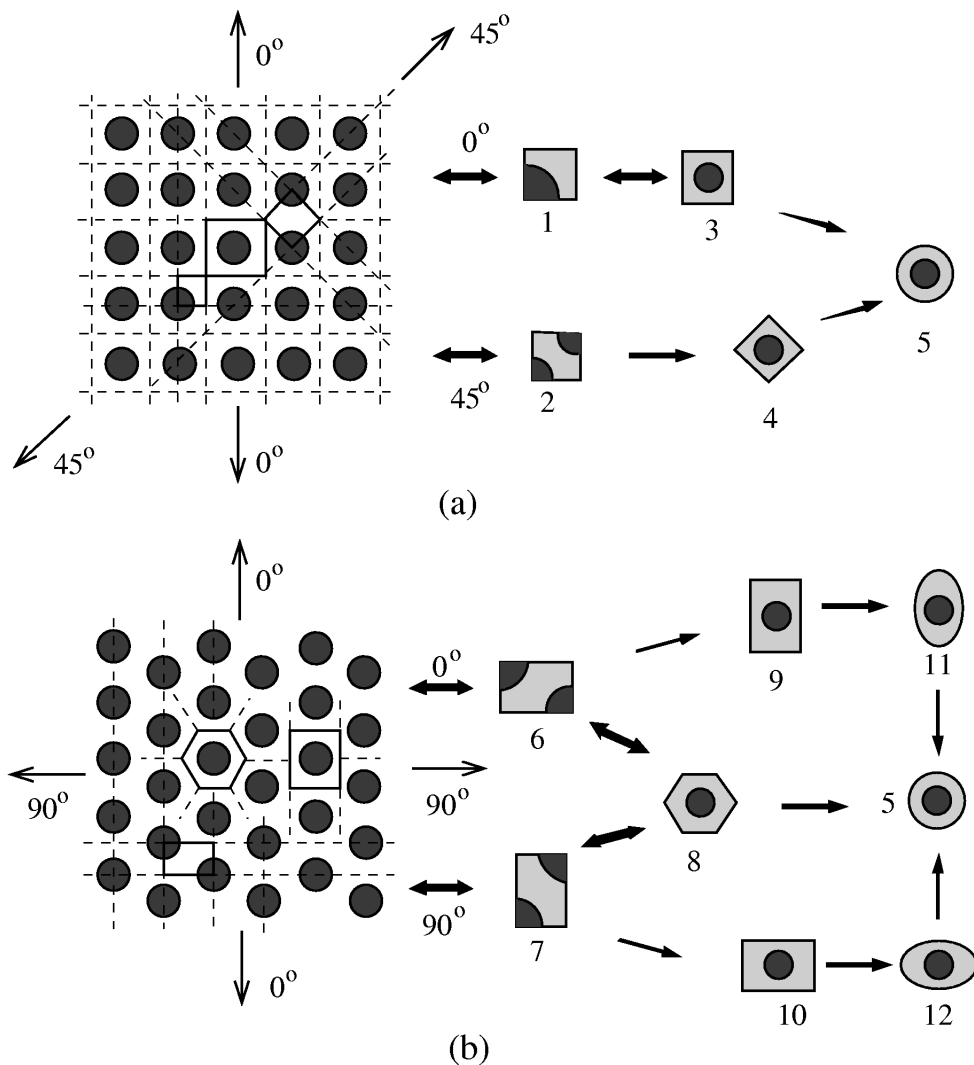
Bei der Modellierung teilchenverstärkter, mehrphasiger Werkstoffe mit Hilfe von finiten Elementen ist es meist nicht möglich, die Mikrostruktur direkt mit all ihren Diskontinuitäten wie Korngrenzen, Einschlüssen, Rissen oder Hohlräumen numerisch abzubilden. Zum einen würde eine derartige Vorgehensweise zu extrem großen Gleichungssystemen führen, zum anderen sind die Details einer konkreten Mikrostruktur häufig nur schwer zu bestimmen. Ein Zugang kann oft nur über statistische Beschreibungen gefunden werden. Mit der Definition von mikrostrukturellen Volumenelementen kann durch Mittelung über diese Volumina die makroskopischen Materialeigenschaften ermittelt werden. Diese repräsentativen, mikrostrukturellen Volumenelemente (RVE) führen die diskontinuierliche Mikrostruktur in ein äquivalentes, homogenes Kontinuum über. Die notwendige Größe der RVEs hängt vom jeweiligen Anwendungsfall ab: Zur Beschreibung des elastischen Verhaltens von statistisch homogenen Verbundwerkstoffen mit gleichgerichteten Einschlüssen sind relativ kleine RVEs ausreichend /Drug/. Wie in dieser Arbeit noch aufgezeigt wird, werden die plastische Verformung und/oder Schädigung der Matrix von der Anordnung der Teilchen beeinflusst. Dies kann nur durch ent-



sprechende RVEs behandelt werden, die verschiedenartige, im Gefüge vorhandene, Teilchenanordnungen repräsentieren /Böh/.

Die Anwendung von repräsentativen Volumenelementen wird unter dem Begriff der Homogenisierung zusammengefasst. Bei der Homogenisierung von periodischen Mikrostrukturen werden diese repräsentativen Volumenelemente als Einheitszellen bezeichnet. Diese Einheitszelle beschreibt als kleinste Volumeneinheit die Periodizität der Mikrostruktur.

Die Vorteile der Anwendung von Einheitszellen oder der daraus abgeleiteten selbstkonsistenten Einheitszellmodelle zur Bestimmung von Spannungs-Dehnungs-Kurven von teilchenverstärkten Verbundwerkstoffen wurden schon früh erkannt /Chris, Tver, Drag, Bao2, Bao3/.

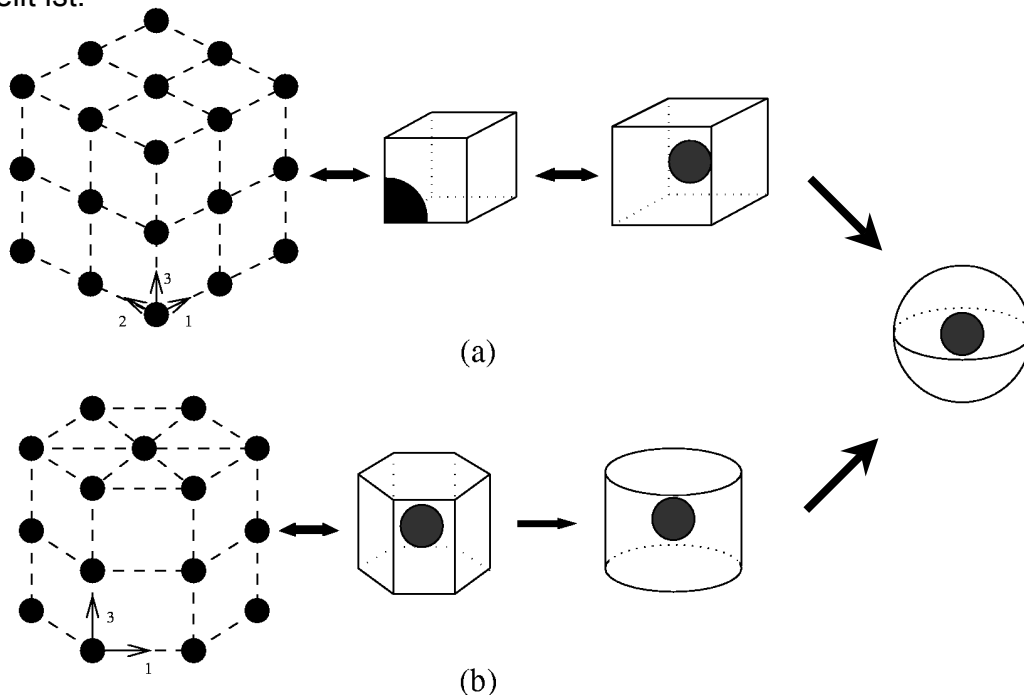


**Bild 2.15:** Idealisierung von faserverstärkten Verbundwerkstoffen über unterschiedliche Grundstrukturen (a = quadratisch, b = hexagonal) und Überleitung zu einer ebenen Einheitszelle.

Deren Vorteil liegt in der einfachen geometrischen und materiellen Idealisierung des Verbundwerkstoffs, die Modelle werden übersichtlicher, die Rechenzeiten werden reduziert. Die Anwendung von Einheitszellen bei der Werkstoffmodellierung legt eine periodische Anordnung identischer Gefügestrukturen zugrunde.

**Bild 2.15** zeigt schematisch einen Verbundwerkstoff mit uniaxial ausgerichteten Fasern in quadratischer (a) bzw. hexagonaler Faseranordnung (b). Diese beiden Anordnungen können ersatzweise durch periodisches Aneinanderreihen verschiedenartiger Einheitszellen (Grundstrukturen) beschrieben werden. Durch geeignete Randbedingungen (wie eben bleibende Zellränder) kann die Periodizität eingestellt und das Gefüge über die vorgestellten Grundstrukturen idealisiert werden. Aus Gründen der einfachen Modellierung werden diese Grundstrukturen meist in eine kreisförmige Einheitszelle (Zelle 5 in Bild 2.15) übergeführt.

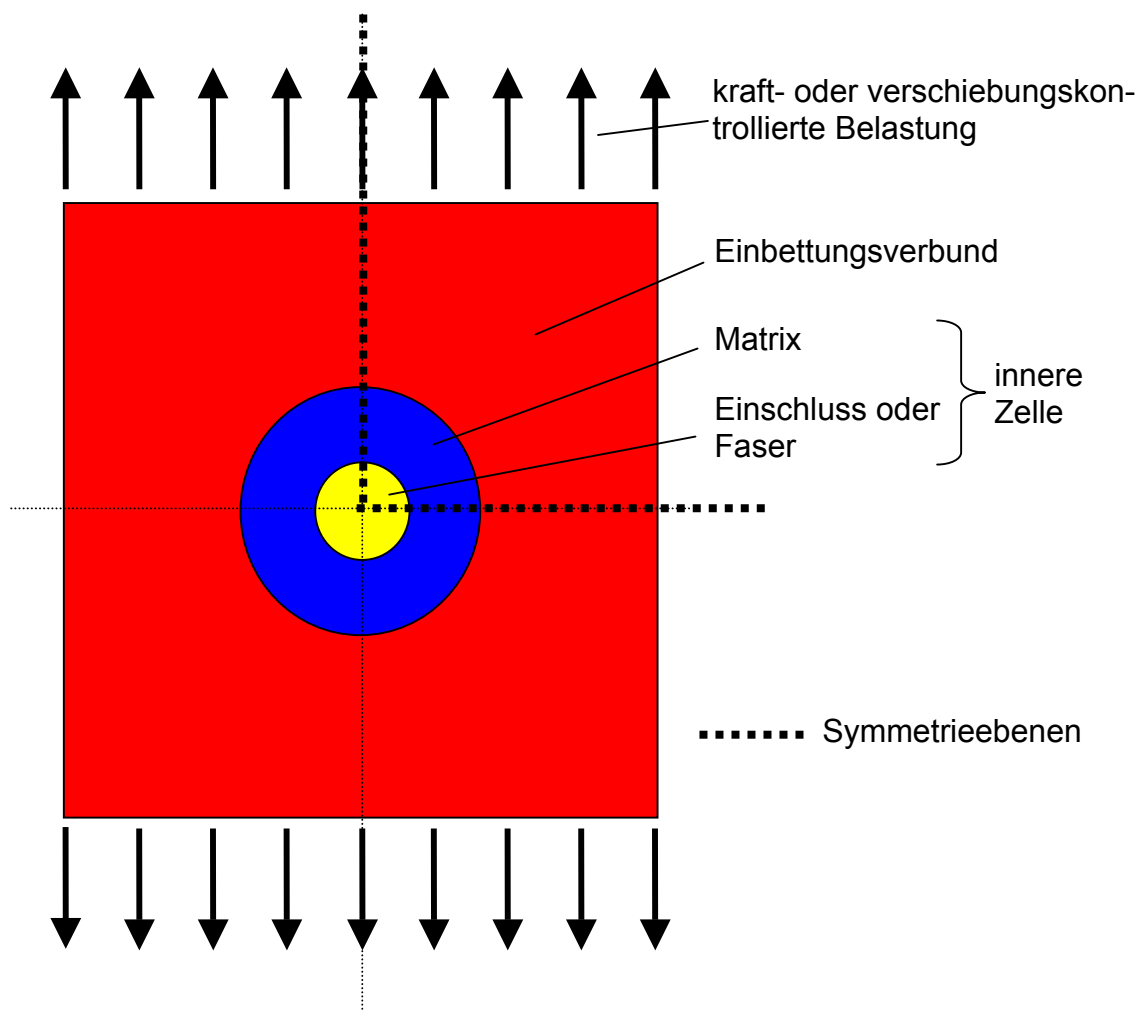
Auch partikelverstärkte Verbundwerkstoffe unter Annahme einer regelmäßigen Verteilung und einheitlichen Größe der Einschlüsse kann über Einheitszellen beschrieben werden, wie dies in **Bild 2.16** für die würfelfartige (a) bzw. hexagonale (b) Verteilung dargestellt ist:



**Bild 2.16:** Idealisierung partikelverstärkter Verbundwerkstoffe über würfelförmige (a) und hexagonale (b) Grundstrukturen und Überleitung zu einer axialsymmetrischen Einheitszelle.

Bei den beiden Partikelanordnungen aus Bild 2.16 werden die Grundstrukturen in eine axialsymmetrisch-modellierbare Form übergeführt. In allen Fällen enthält die Einheitszelle die Minimalinformation über die Anordnung und Form des Einschlusses /Saut/.

Die Grundidee der *selbstkonsistenten Einheitszelle* geht auf Eshelby /Esh/ zurück. Er hat ein Gedankenmodell entwickelt, welches die analytisch-numerische Ermittlung des Spannungs- und Dehnungsfeldes sowie der Verzerrungsenergie eines ellipsenförmigen Einschlusses in einer unendlich ausgedehnten Matrix ermöglicht. Dieser Gedanke wurde permanent weiterentwickelt und es entstanden die selbstkonsistenten Rechenverfahren, bei denen die unbekanntes Verbundeigenschaften über die Einbettung der Einzelphasen in eine unendlich ausgedehnte Matrix berechnet werden. In diesem Zusammenhang sind die Formulierungen selbstkonsistenter Schalenmodelle von Oldroyd /Old/ und Poehch /Poe2/ zu nennen. Nach Eshelby kann die Lösung des Einschlussproblems unter Zuhilfenahme geeigneter Verfahren für die Mittelwertbildung das Materialverhalten des Verbundes liefern. Dabei wird in einer iterativen Prozedur aus der in Verbundmaterial eingebetteten Zelle das Verbundwerkstoffverhalten abgeleitet und im nächsten Iterationsschritt dem Einbettungsmaterial zugewiesen. Dies wird solange wiederholt, bis die eingebettete Zelle und der Einbettungsverbund ein nahezu identisches Werkstoffverhalten aufweisen. Aus dieser Berechnungsvorschrift leitet sich der in **Bild 2.17** sche-

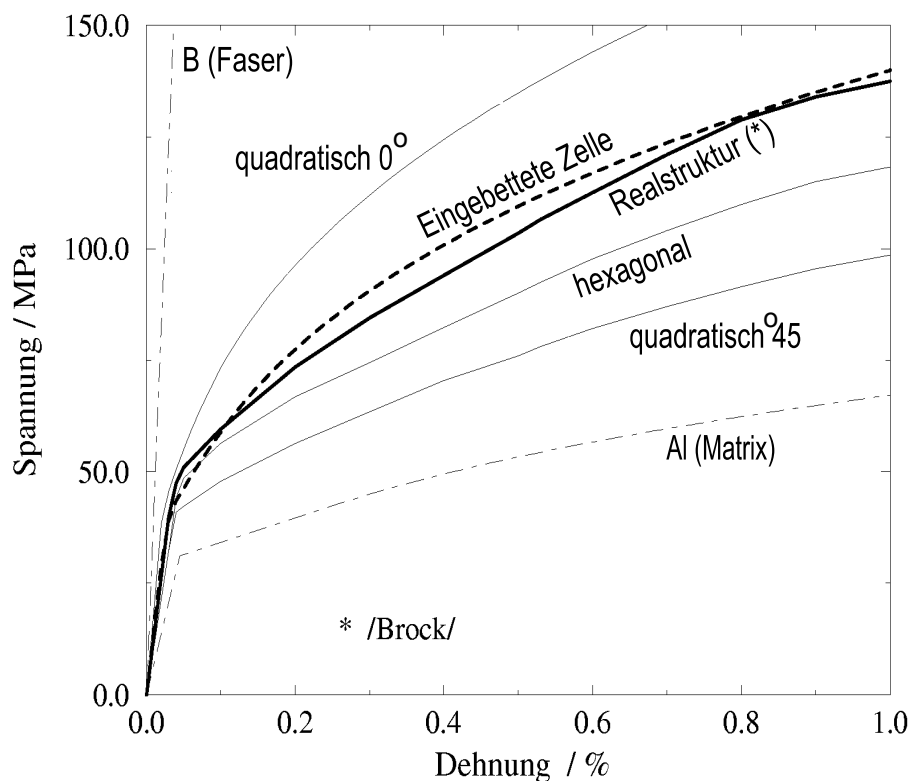


**Bild 2.17:** Schematisches Modell einer selbstkonsistenten Einbettungszelle.

matisch dargestellte Aufbau einer selbstkonsistenten Einheitszelle ab: Eine innere Zelle, welche die Phasenvolumenanteile des Verbundes abbildet, wird in ein Umgebungsmedium eingebettet (Einbettungsverbund). Aus Symmetriegründen muss nur  $\frac{1}{4}$  der Einbettungszelle modelliert werden. Wird dabei ein ebenes Modell gewählt, so werden faserverstärkte Verbunde simuliert, wogegen über eine axialsymmetrische Modellierung partikelverstärkte Verbundwerkstoffe berechnet werden können. Die Beanspruchung der selbstkonsistenten Einheitszelle wird entweder kraft- oder verschiebungskontrolliert aufgebracht, wobei die verschiebungskontrollierte Belastung aus Gründen numerischer Stabilität bevorzugt angewendet wird.

Am Beispiel des uniaxial faserverstärkten Verbundwerkstoffes Al/46vol.%B mit zufälliger Faseranordnung und des teilchenverstärkten Verbundwerkstoffes Ag/58vol.%Ni wird im Folgenden die Tauglichkeit der selbstkonsistenten Einheitszelle gegenüber der Anwendung einfacher, nicht selbstkonsistenter Einheitszellmodelle zur Berechnung des mechanischen Werkstoffverhaltens nachgewiesen.

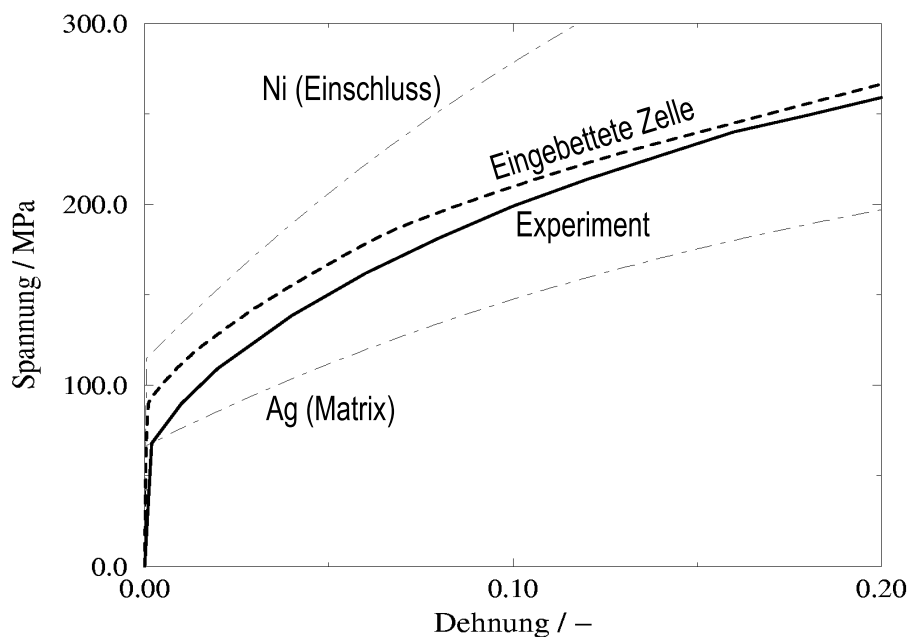
### 2.4.1 Uniaxial faserverstärkter Verbundwerkstoff



**Bild 2.18:** Vergleich von Einheitszellmodellen und eingebetteten Zellmodell mit dem Realstrukturmodell /Brock/ eines Al/46vol.%B Faserverbundes unter transversaler Belastung.

Bei diesem Verbundwerkstoff (Al/46vol.%B) sind unidirektional ausgerichtete Borfasern von einer Aluminiumlegierung AA6061 umgeben. **Bild 2.18** zeigt einen Vergleich von Spannungs-Dehnungskurven des transversal belasteten Verbundes aus Simulationen mit einfachen Einheitszellen und mit selbstkonsistenten Einheitszellen (eingebettete Zelle) zusammen mit einem Realstrukturmodell, welches ein experimentell gestütztes Vielfasermodell mit zufällig angeordneten uniaxial ausgerichteten Fasern abbildet /Brock/. Die mit Hilfe der selbstkonsistenten Einheitszelle gewonnene Spannungs-Dehnungs-Kurve ist sowohl im elastischen als auch im plastischen Bereich in guter Übereinstimmung mit dem Realstrukturmodell. Die Berechnungen mit den einfachen Einheitszellmodellen zeigen dagegen ein festeres (für eine quadratische Anordnung unter  $0^\circ$  zur Belastungsrichtung) oder ein weicherer mechanisches Verhalten (für eine quadratische Anordnung unter  $45^\circ$  zur Belastungsrichtung oder für die hexagonale Einheitszelle). Dies zeigt, dass die Systemantwort der Einheitszellen von der Wahl der gewählten Grundstruktur abhängt und die Anwendung der einfachen, nicht selbstkonsistenten Einheitszellen nicht geeignet sind, das Werkstoffverhalten von Faserverbundwerkstoffen zuverlässig zu beschreiben.

## 2.4.2 Teilchenverstärkter Verbundwerkstoff



**Bild 2.19:** Vergleich des globalen mechanischen Verhaltens aus Berechnungen mit dem selbstkonsistenten Einbettungsmodell und dem Experiment /Sop1/ für einen Ag/58vol.%Ni-Teilchenverbundwerkstoff.

In Hinblick auf die in dieser Arbeit untersuchten teilchenverstärkten Verbundwerkstoffe unter Druckbelastung wird nun die Tauglichkeit der selbstkonsistenten Einheitszelle, und zwar anhand des Ni-teilchenverstärkten Verbundwerkstoffs Ag/58vol.%Ni, zur Beschreibung eines Druckversuchs /Sop1/ untersucht. Auch für diesen Werkstoff ergibt sich im Bereich der plastischen Verformung eine gute Übereinstimmung mit der selbstkonsistenten Einheitszellberechnung (eingebettete Zelle in **Bild 2.19**). Die Ergebnisse zeigen, dass die selbstkonsistente Einbettungsmethode verwendet werden kann, um Verbunde mit zufälliger Einschlussanordnung erfolgreich zu simulieren und das elastisch-plastische Verbundverhalten für beliebige Phasen vorherzusagen.

### 2.4.3 Der Matrixcharakter als Gefügeparameter

Im Folgenden wird auf der Grundlage der zuvor vorgestellten und anhand von Experimenten verifizierten selbstkonsistenten Einheitszellmethode ein Materialmodell vorgestellt, welches Verbundwerkstoffe beschreibt, in dem die Einzelphasen sich gegenseitig umschließen und deren Gefüge als Durchdringungsgefüge bezeichnet wird. Dazu wird mit der Matrixität ein zusätzlicher Gefügeparameter in das Modell eingeführt, der diese gegenseitige Phasenumschließung beschreibt.

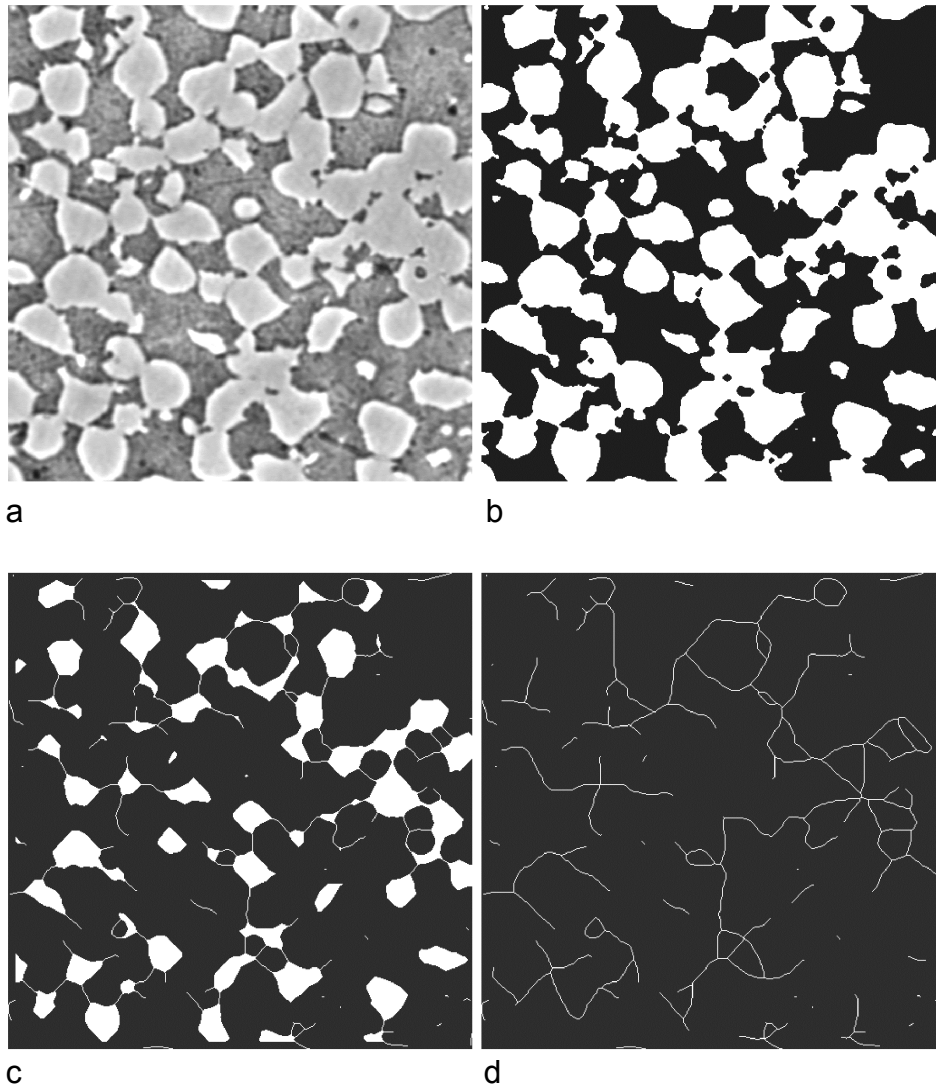
Ein zweiphasiges Durchdringungsgefüge kann vereinfacht als ein paarweise vorhandenes Einschlussgefüge beschrieben werden, wobei sowohl eine Phase  $\alpha$  von der Phase  $\beta$  als auch die Phase  $\beta$  von der Phase  $\alpha$  teilweise oder komplett umschlossen wird. Zur Beschreibung dieser Gefügecharakteristik wird auf den in /Poe1/ vorgestellten Matrixcharakter  $M$  zurückgegriffen. Für die Phase  $\alpha$  wird der Matrixcharakter der Phase ( $M_\alpha$ ) über

$$M_\alpha = \frac{S_\alpha}{S_\alpha + S_\beta} \quad (2.23)$$

definiert. Dabei bezeichnen  $S_\alpha$  und  $S_\beta$  die Längen der Skelettlinien der Phasen, die durch Reduktion der in einem Schliffbild erkennbaren Phasen  $\alpha$  und  $\beta$  zu Linien ermittelt werden. Die Summe der Matrixcharakter der Einzelphasen ist 1:

$$M_\alpha + M_\beta = 1 \quad (2.24)$$

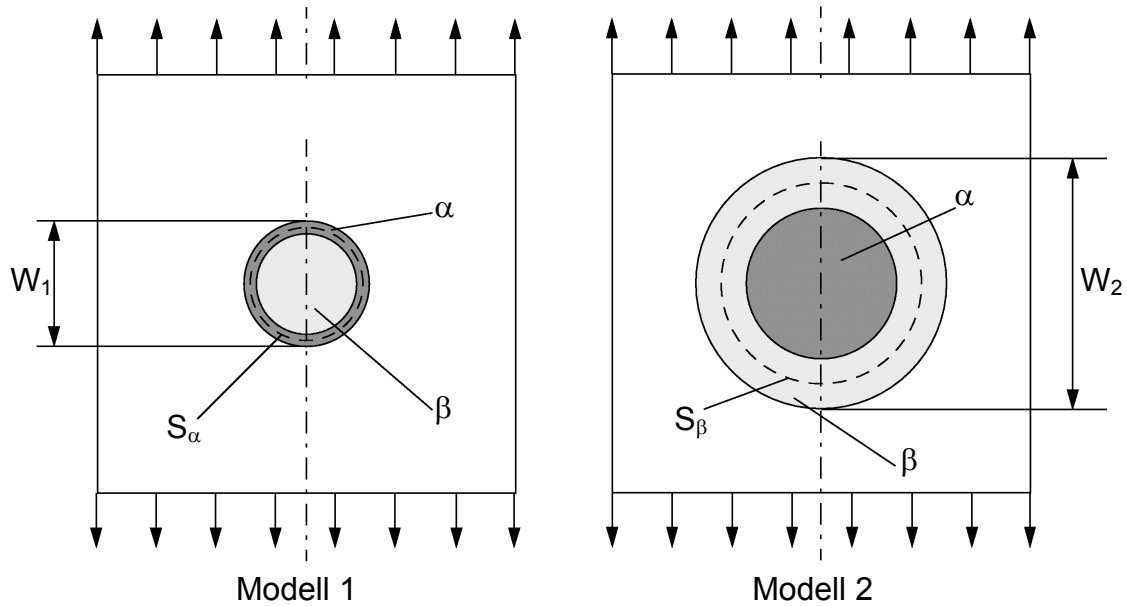
Der Wertebereich des Matrixcharakters einer Phase liegt zwischen 0 und 1. So bedeutet  $M_\alpha = 1$ , dass die Phase  $\beta$  vollständig von der Phase  $\alpha$  umschlossen wird ( $\beta$ -Pha-



**Bild 2.20:** Mikrostruktur eines 40vol.% Ag/Ni-Durchdringungsgefüges (a), Umwandlung in ein Binärbild (b), numerische, stufenweise erosivartige Reduktion der Ag-Phase zu Skelettlinien  $S_{Ag}$  (c+d).

seneinschlüsse in einer  $\alpha$ -Matrix). In **Bild 2.20** ist der Übergang vom Gefügebild zu den Skelettlinien am Beispiel der Ag-Phase eines 40vol.%Ag/Ni Verbundwerkstoffes dargestellt.

Um diesen neu definierten Gefügeparameter in das Zellenmodell mit einzubeziehen, wurde ein Finite-Elemente-Modell entwickelt, das aus zwei selbstkonsistenten Einheitszellen besteht. In Analogie zur Realstruktur werden die Skelettlinien der beiden Phasen in das Modell mit aufgenommen. Das Modell besteht nun aus einem Teil, indem die Phase  $\alpha$  als Einschluss auftritt und einem Teil in dem die Phase  $\beta$  die Einschlussphase darstellt. Dabei ist der Volumenanteil einer Phase in beiden Teilmodellen gleich. Wie **Bild 2.21** zeigt, werden die Skelettlinien der Phasen  $\alpha$  und  $\beta$  als kreisförmige Linien  $S_\alpha$



**Bild 2.21:** Verwendung zweier unabhängiger, selbstkonsistenter Einheitszellen (Modell 1 und Modell 2) mit den Skelettlinien  $S_\alpha$  und  $S_\beta$  zur Einbeziehung des Gefügeparameters Matrizität.

bzw.  $S_\beta$  um die jeweils eingeschlossene Phase eingeführt. Die beiden Teilmodelle können zusammenhängend oder separat modelliert werden, wenn gewährleistet ist, dass die Randbedingungen einen vernachlässigbaren Einfluss auf das Spannungs- und Dehnungsverhalten der eingebetteten Zelle ausüben. In /Dong1/ wird eine Mindestkantenlänge des umgebenden Einbettungsmaterials vom fünffachen Durchmesser des Einschlusses angegeben. Der Vorteil eines zerteilten Modells liegt in der Möglichkeit einer vereinfachten axialsymmetrischen Modellierung. Aus geometrischen Zusammenhängen wird die folgende und für den axialsymmetrischen Fall gültige Beziehung zwischen den Gefügeparametern  $M_\alpha$  bzw.  $M_\beta$  (Matrizität), den Phasenvolumenanteilen  $f_\alpha$  und  $f_\beta$  und den Zelldurchmessern  $W_1$  und  $W_2$  abgeleitet:

$$M_\alpha = \frac{W_1 \cdot (\sqrt[3]{1-f_\alpha} + 1)}{W_1 \cdot (\sqrt[3]{1-f_\alpha} + 1) + W_2 \cdot (\sqrt[3]{f_\alpha} + 1)} \quad (2.25)$$

$$M_\beta = \frac{W_2 \cdot (\sqrt[3]{1-f_\beta} + 1)}{W_2 \cdot (\sqrt[3]{1-f_\beta} + 1) + W_1 \cdot (\sqrt[3]{f_\beta} + 1)}$$

Durch Umstellung der Gl. (2.25) kann nun der für eine bestimmte Matrizität  $M$  und einen bestimmten Phasenvolumenanteil  $f$  (beides Gefügeparameter) der jeweils erforderliche Zelldurchmesser  $W_1$  und  $W_2$  ermittelt werden (in **Anhang A1** ist die Herleitung der Gl. (2.26) ausführlich dargestellt):



$$W_1 = W_2 \cdot \left( \sqrt[3]{1-f_\beta} + 1 \right) \cdot \frac{1-M_\beta}{M_\beta \cdot \left( \sqrt[3]{f_\beta} + 1 \right)} \quad (2.26)$$

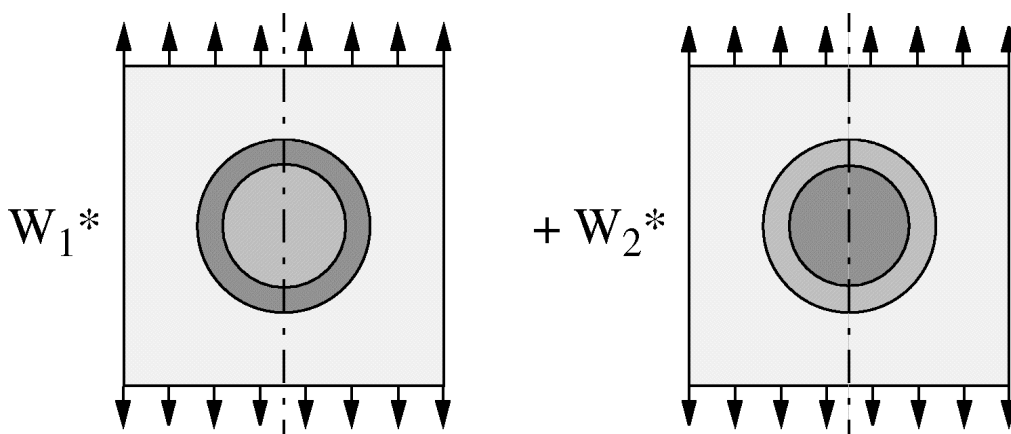
$$W_2 = W_1 \cdot \left( \sqrt[3]{1-f_\alpha} + 1 \right) \cdot \frac{1-M_\alpha}{M_\alpha \cdot \left( \sqrt[3]{f_\alpha} + 1 \right)}$$

Wie Gl. (2.26) erkennen lässt, gibt es keine geschlossene Lösung für die Durchmesser  $W_1$  bzw.  $W_2$  der eingebetteten Zellen. Da in beiden Teilmodellen derselbe Volumenanteil der Phasen vorliegt und das Ergebnis der selbstkonsistenten Einheitszelle unabhängig vom Zelldurchmesser ist (genügend großer Abstand der Ränder vorausgesetzt) kann jeweils ein Zelldurchmesser vorgegeben und der andere aus Gl. (2.26) bestimmt werden. Daher wird Gl. (2.26) durch folgende Vorschrift ergänzt:

$$W_1 = 1,0 \quad \text{für } M_\alpha \geq 0,5 \quad W_2 = 1,0 \quad \text{für } M_\beta \geq 0,5 \quad (2.27)$$

Beschreibt eine Zelle diejenige Phase  $i$  mit überwiegendem Matrixcharakter ( $M_i \geq 0,5$ ) wird dieser Zelle der Durchmesser  $W_i = 1$  zugewiesen.

Eine weitere Vereinfachung des Matrixitätsmodells folgt aus der Überlegung, zwei Einzelmodelle mit identischem Zelldurchmesser  $W_1 = W_2 = W = 1$  zu verwenden. Die Systemantwort der Einzelzellmodelle muss dann gewichtet werden, wobei die eigentlichen Zelldurchmesser  $W_1$  und  $W_2$ , wie sie aus Gl. (2.26) ermittelt wurden, die Wichtungsfaktoren darstellten (**Bild 2.22**). Dadurch ist bei der Modellierung der Einheitszellen nur auf den Volumenanteil der Phasen zu achten und bei vorgegebenen Phasenanteilen kann mit derselben Modellierung jeder beliebige Matrixcharakter ( $0 \leq M \leq 1$ ) berücksichtigt werden.



**Bild 2.22:** Verwendung von zwei Einzelmodellen mit identischem Zelldurchmesser und Wichtung der Systemantwort (schematisch).

Die Berechnung der mechanischen Eigenschaften eines Verbundwerkstoffs erfolgt durch schrittweise Belastung des kombinierten Modells. Für jeden Belastungsschritt werden dann die auftretenden Spannungs- und Dehnungskomponenten in den beiden eingebetteten Zellen ermittelt. Dies erfolgt über eine gewichtete Mittelung aller Spannungen  $\sigma_i$  und Dehnungen  $\varepsilon_i$  der Integrationspunkte der Elemente der eingeschlossenen Zellen. Die Ergebnisse an den Gaußpunkten unterschiedlich großer Elemente werden zusätzlich durch die Gewichtung der Komponenten über das dem Gaußpunkt zugeordnete Volumen  $V_i$  berücksichtigt. Im Falle der Spannungen erhält man:

$$\sigma(x,y,z) = \frac{(\sum \sigma_i(x,y,z) * V_i)_1 + (\sum \sigma_i(x,y,z) * V_i)_2}{(\sum V_i)_1 + (\sum V_i)_2} \quad (2.28)$$

Die Indices 1 und 2 beziehen sich dabei auf die beiden Einzelmodelle in Bild 2.21. Da die beiden Einzelmodelle mit demselben Durchmesser modelliert werden (beide Zellen haben das Volumen  $V_0$ ), muss zusätzlich eine Volumenwichtung bzw. Durchmesserwichtung in die Gl. (2.28) eingeführt werden. Im Falle einer axialsymmetrischen Modellierung (Kugeln eingebettet in Zylinder) erhält man

$$\sigma(x,y,z) = \frac{(\sum \sigma_i(x,y,z) * V_i)_0 * W_1^3 + (\sum \sigma_i(x,y,z) * V_i)_0 * W_2^3}{(\sum V_i)_0 * (W_1^3 + W_2^3)} \quad (2.29)$$

Analoges gilt für die Dehnungskomponenten. Auf der Basis des oben beschriebenen Matrixitätsmodells werden nun unterschiedliche Verbundwerkstoffe mit Durchdringungsgefüge untersucht und deren mechanisches Verhalten bestimmt. Dabei werden sowohl Metall/Keramik-Verbunde als auch Metall/Metall-Verbunde untersucht und hauptsächlich der Einfluss des neu eingeführten Gefügeparameters Matrixität beleuchtet.

## 2.5 Versetzungstheoretische Modelle

### 2.5.1 Die Theorie nach Russell&Brown

Um die Festigkeitssteigerung durch ausgeschiedene Cu-Teilchen in Eisen zu erfassen, wird im Allgemeinen die Theorie von Russell&Brown /RB/ angewendet. Bei diesem versetzungstheoretisch basierten Modell wird über eine energetische Betrachtungsweise die aus der Behinderung von Versetzungen durch Teilchen hervorgerufene Festigkeitssteigerung beschrieben. Bei der Anwendung dieser Theorie werden folgende Annahmen getroffen:

- Die ausgeschiedenen Teilchen haben im Mittel alle den gleichen Radius  $r_{ppt}$
- Die Teilchen haben im Mittel alle den gleichen Abstand  $L$
- Die Teilchen sind regelmäßig angeordnet
- Die Teilchen müssen schneidbar sein.

Aufgrund dieser Annahmen wird zusammen mit gitterspezifischen Größen in /RB/ folgende Beziehung für die Festigkeitssteigerung  $\tau_c$  bzw.  $\Delta\sigma$  abgeleitet:

$$\tau_c = 0,8 \cdot \frac{Gb}{L} \left[ 1 - \frac{P^2}{E^2} \right]^{1/2} \quad \text{für } \varphi/2 = \sin^{-1} \left( \frac{P}{E} \right) \leq 50^\circ$$
$$\tau_c = \frac{Gb}{L} \left[ 1 - \frac{P^2}{E^2} \right]^{3/4} \quad \text{für } \varphi/2 = \sin^{-1} \left( \frac{P}{E} \right) \geq 50^\circ$$

(2.30)

mit

$$\frac{P}{E} = \frac{P^\infty \log \frac{r_{ppt}}{r_0}}{E^\infty \log \frac{R}{r_0}} + \frac{\log \frac{R}{r_{ppt}}}{\log \frac{R}{r_0}}$$

(2.31)

und

$$L = 1,77 \frac{r_{ppt}}{\sqrt{f}} \quad \text{(folgt aus der Annahme einer in der Teilchenebene angenommenen gleichmäßigen Teilchenanordnung)}$$

(2.32)

ergibt

$$\Delta\sigma = 2,5 \tau_c \quad \text{(angepasst in /RB/)}$$

(2.33)

Dabei ist  $G$  der Schubmodul,  $L$  der Teilchenabstand,  $f$  der Volumenanteil,  $\varphi$  der Winkel zwischen den Versetzungsarmen bei Erreichen der kritischen Schubspannung  $\tau_c$  und  $r_{ppt}$  der mittlere Radius der Teilchen  $/RB/$ . Die gitterspezifischen Größen sind  $b$  (Burgersvektor),  $E^\infty$ ,  $P^\infty$  (Energien der Versetzung in einer unendlich angenommenen Matrix und im Teilchen),  $R$  und  $r_0$  (äußerer und innerer Abschneide-Radius).  $\Delta\sigma$  ist die ermittelte Festigkeitserhöhung des Werkstoffs aufgrund ausgeschiedener, schneidbarer Cu-Teilchen. Die Daten für das System Eisen-Kupfer sind in **Tabelle 2.1** zusammengestellt.

G (GPa)	b (nm)	$P^\infty / E^\infty$ (-)	R (nm)	$r_0$ (nm)
83	0,248	0,6	2500b	2,5b

**Tabelle 2.1:** Parameter der Russell&Brown-Theorie für das System Eisen-Kupfer.

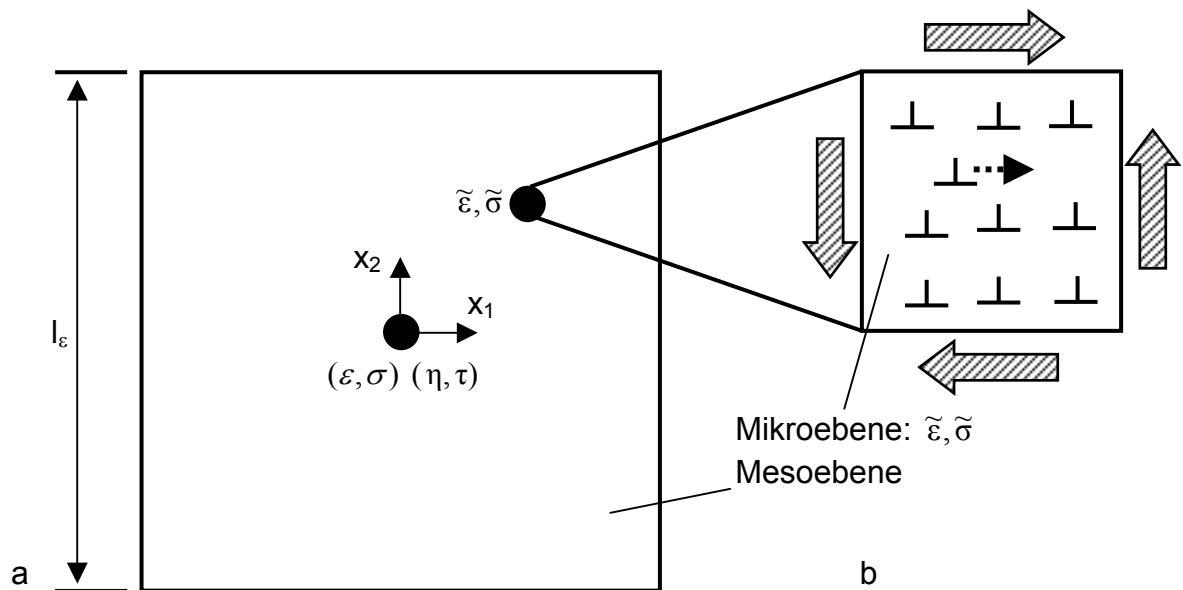
Das in Tabelle 2.1 angegebene Energieverhältnis  $P^\infty / E^\infty$  leitet sich aus dem Verhältnis der Schubmodule von Kupfer ( $G = 48,5$  GPa) und Eisen ( $G = 83$  GPa) ab: Als geeigneter Wert für Stufen- als auch für Schraubenversetzungen wird in  $/RB/$  der in Tabelle 2.1 angegebene Wert von  $P^\infty / E^\infty = 0,6$  verwendet. Der äußere Abschneideradius  $R$  liegt in der Größenordnung des halben Korndurchmessers. Der angegebene Wert für den inneren Abschneideradius  $r_0$  wurde in  $/RB/$  über die Anpassung an Experimente ermittelt. Dieser Wert wird durch neuere theoretische Untersuchungen sowohl für Stufen-  $/Laz1/$  als auch für Schraubenversetzungen  $/Laz2/$  bestätigt.

## 2.5.2 Die Mechanism-based Strain Gradient (MSG) Plasticity-Theorie

Ist der Zugang von Werkstoffkennwerten über Laborproben nicht oder nur unzureichend möglich, wird dieser auch häufig über Härtemessungen erreicht. Auch in dieser Arbeit wird zur Ermittlung der Zugfestigkeit der Phasen des Duplexstahls (vergl. Bild 3.6 in Kap. 3.2.1) diese Methode angewendet. Auf dem Gebiet der Mikroelektronik sind Härtemessungen zur Ermittlung von Materialeigenschaften Stand der Technik. Dabei tritt jedoch das Problem auf, dass die gemessenen Härtewerte wesentlich von der Eindringtiefe abhängen. Bei metallischen Werkstoffen kann der Härtewert um den Faktor 2 bis 3 ansteigen, wenn die Eindringtiefe von  $50 \mu\text{m}$  auf  $1 \mu\text{m}$  herabgesetzt wird  $/Guz/$ .

Zur Ermittlung dieser Größenabhängigkeit der Materialeigenschaften sind die klassischen Plastizitätstheorien ungeeignet, da deren konstitutiven Modelle keine innere Längenskala besitzen. Vielmehr wird auf der Makroebene die Verfestigung von Werkstoffen (Polykristallen) auf statistisch verteilte Versetzungen zurückgeführt.

Auf atomistischer Ebene müssen die durch Versetzungen hervorgerufenen Verzerrungen im Atomgitter in Betracht gezogen werden. In Größenskalen von  $1 \mu\text{m} - 10 \mu\text{m}$  sind noch 100 bis 1000 Versetzungen vorhanden, zu deren Beschreibung eher versetzungstheoretische Ansätze anzuwenden sind. Da wiederum eine vollständige atomistische Modellierung und Simulation der Problematik in einem vernünftigen Zeitrahmen nicht möglich ist, wird mit der MSG-Theorie eine Brücke zwischen der klassischen Plastizitätstheorie und einer Versetzungstheorie geschlagen. Als Ansatz werden innerhalb einer mesoskalen Zelle zusätzlich zu den Spannungen ( $\sigma$ ) und Dehnungen ( $\varepsilon$ ) Spannungen höherer Ordnung ( $\tau$ ) und Dehnungsgradienten ( $\eta$ ) definiert (**Bild 2.23a**). Über die Dehnungsgradienten wird die physikalische Ursache der Gitterstörungen berücksichtigt.



**Bild 2.23:** Mesoskalige Zelle (a) in der MSG-Theorie mit Zellenabmessung  $l_\varepsilon$  /Gao/. Versetzungen werden in der mikroskaligen Zelle (b) abgebildet.

In einem kartesischen System besteht zwischen den Verschiebungen  $u_i$  und dem Dehnungstensor  $\varepsilon_{ij}$  bzw. dem Dehnungsgradiententensor  $\eta_{ijk}$  folgende Beziehung:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad \text{und} \quad \eta_{ijk} = u_{k,ij} \quad (2.34)$$

Unter Vorgabe eines lokalen, kartesischen Koordinatensystems  $x_k$  mit Ursprung im Zentrum der Zelle (Bild 2.23a) wird über folgende Gleichung ein vom Ort linear abhängiges, mikromechanisches Dehnungsfeld

$$\tilde{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_{ij} + \frac{1}{2}(\eta_{kij} + \eta_{kji})x_k \quad (2.35)$$

beschrieben mit den Zelldehnungen  $\varepsilon_{ij}$  und dem Dehnungsgradiententensor  $\eta_{ijk}$ . Die mesoskaligen Spannungen  $\sigma_{ij}$  und die Spannungen höherer Ordnung  $\tau_{ijk}$  werden über das Prinzip der virtuellen Arbeit mit den mikroskaligen Spannungen  $\tilde{\sigma}_{ij}$  verknüpft:

$$\int_{V_{\text{cell}}} \tilde{\sigma}_{ij} \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} dV = (\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} + \tau_{ijk} \delta \eta_{ijk}) V_{\text{cell}} \quad (2.36)$$

Unter Anwendung der Versetzungstheorie nach Taylor [Tayl] wird eine skalenüberbrückende Beziehung zwischen dem Spannungszuwachs (Verfestigung) und dem dafür verantwortlichen Dehnungsgradient  $\eta$  (abgeleitet aus dem Dehnungsgradiententensor  $\eta_{ijk}$ ) hergestellt:

$$\tilde{\sigma} = \sigma_{\text{ref}} \sqrt{f^2(\tilde{\varepsilon}_e) + l\eta} \quad (2.37)$$

Über den Parameter  $l$  wird die geforderte innere, materialabhängige Längenskala eingeführt

$$l = 18\alpha^2 \left( \frac{G}{\sigma_{\text{ref}}} \right)^2 b \quad (2.38)$$

mit  $G$  = Schubmodul und  $b$  = Burgersvektor. Der Parameter  $\alpha$  ist eine empirische Größe in der Größenordnung 0,2 - 0,5. Über die Verdrehung von dünnen Drähten konnte in [Fle] für Kupfer ein Wert von  $l = 4 \mu\text{m}$  ermittelt werden. Über die Spannung  $\sigma_{\text{ref}}$  und der Funktion  $f$  wird die Werkstoffverfestigung ohne Berücksichtigung von Dehnungsgradienten beschrieben ( $\sigma_{\text{ref}}$  und  $f$  werden aus dem Zugversuch abgeleitet):

$$\sigma = \sigma_{\text{ref}} f(\varepsilon) \quad (2.39)$$

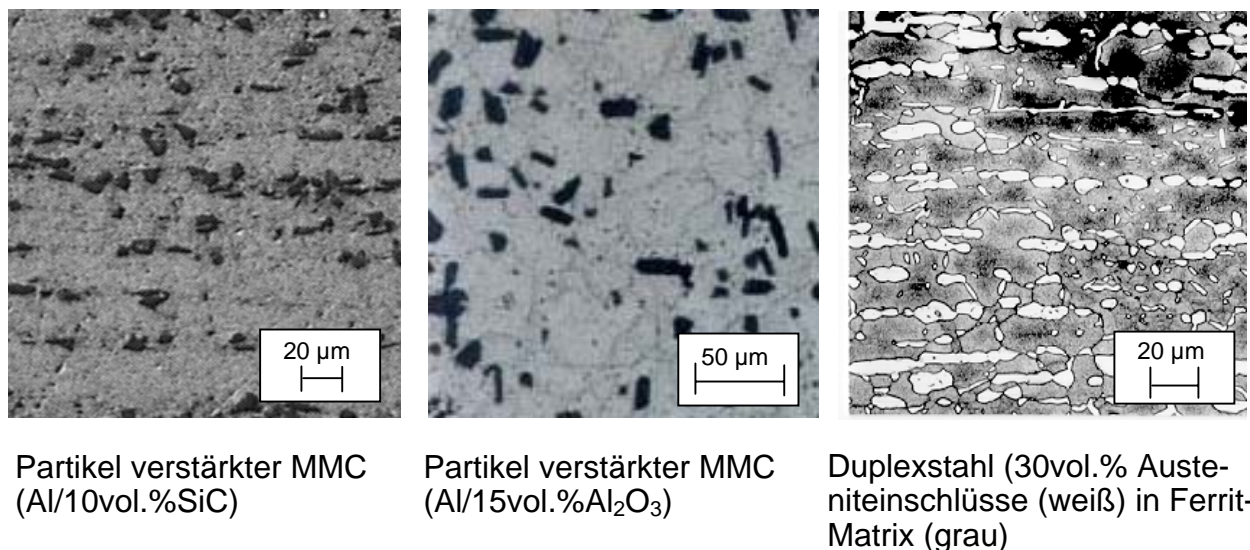
Zur Erfassung der bereits erwähnten Größenabhängigkeit von Materialeigenschaften (z. B. Härte in Abhängigkeit der Eindringtiefe) wurde bereits 1953 von [Nye] das Konzept der geometrisch notwendigen Versetzungen (GNDs) eingeführt: Neben den statistisch verteilten Versetzungen mit der Dichte  $\rho_s$  stellen die GNDs eine zusätzliche Art von Versetzungen dar, welche die Krümmungen im Atomgitter bei ungleichmäßiger plastischer Verformung, d. h. bei vorliegenden Dehnungsgradienten, beschreiben. Von [Nye, Ash] konnte für einen Balken unter reiner Biegung eine Beziehung zwischen der Versetzungsdichte der GNDs ( $\rho_G$ ) und dem effektiven Dehnungsgradienten  $\eta$  abgeleitet werden (mit  $b$  = Burgersvektor):

$$\eta \sim \rho_G b \quad (2.40)$$

GNDs treten hauptsächlich an Korngrenzen, Phasengrenzen und anderen Inhomogenitäten auf und verhindern, dass bei mechanischer Verformung von Polykristallen zwischen den Körnern oder an Teilchen Hohlräume entstehen bzw. eine Überlappung von Körnern stattfindet. Die Wirkung von Versetzungen auf das Werkstoffverhalten wird über die Beschreibung des Fließverhaltens der mikroskaligen Zelle (**Bild 2.23b**) über Gl. (2.37) berücksichtigt.

### 3 Werkstoffe mit Einschlussgefüge

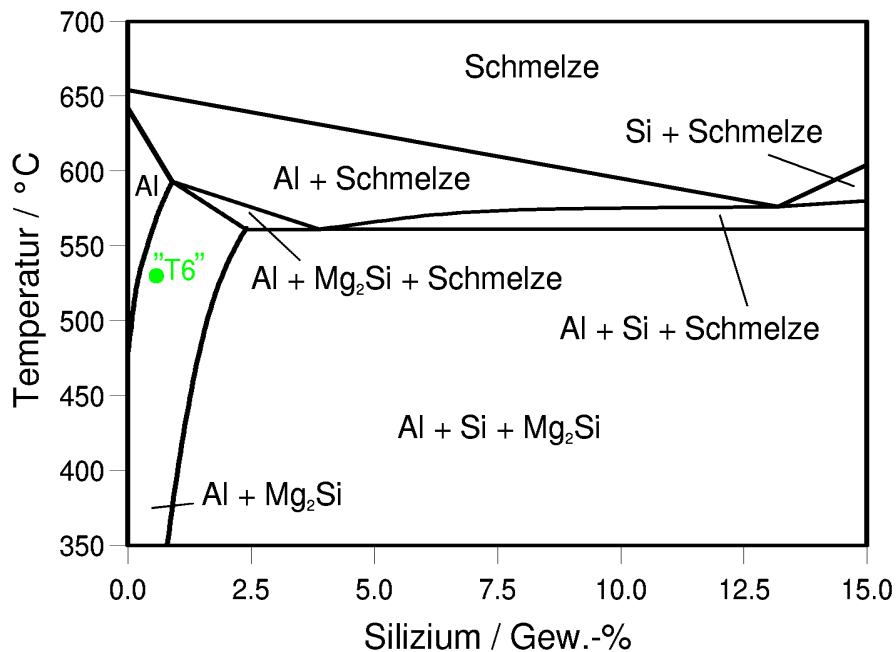
Falls ein einheitlicher Werkstoff den Anforderungen eines Bauteils nicht genügt, dann bieten Materialkombinationen die Chance, neue Eigenschaftsprofile zu verwirklichen. Je nach Anforderungsprofil werden unter dem Begriff *Verbundwerkstoffe* meist metallische Grundmaterialien entweder mit keramischen Partikeln oder mit kurz- oder langfasigen, kohlenstoffhaltigen Bestandteilen kombiniert. Verbundwerkstoffe mit kurz- und langfasigen Verstärkungen werden in dieser Arbeit nicht behandelt. Vielmehr wird eine mit Keramikpartikel verstärkte Al-Legierung bzw. ein Duplexstahl (Austenitphase in Ferrit-Matrix) untersucht, deren Gefüge als Einschlussgefüge bezeichnet wird (**Bild 3.1**).



**Bild 3.1:** Gefügausschnitte von Verbundwerkstoffen mit Einschlussgefüge.

Vor allem im Zusammenhang mit Al-Legierungen gewinnen diese Art der Metall/Keramik-Verbundwerkstoffe immer mehr an Bedeutung. Im Automobilbau und bei Schienenfahrzeugen kann z. B. durch die Fertigung von Bremscheiben aus diesen Werkstoffen eine deutliche Gewichtsreduzierung erzielt werden.

Als Matrixwerkstoff ist die Al-Legierung AA6061 sehr verbreitet, die zu den aushärtbaren Aluminiumlegierungen gehört. Dabei sind im Wesentlichen die Legierungselemente Magnesium und Silizium an der Aushärtung beteiligt. Magnesium und Silizium reichern sich in Mg<sub>2</sub>Si-Ausscheidungen an, die eine Festigkeitssteigerung der Matrix bewirken, wenn sie teilkohärent in die Matrix eingebettet sind. Der binäre Schnitt durch das Dreistoffsystem Al-Mg-Si für die Legierung AA6061 zeigt das Existenzgebiet für die Mg<sub>2</sub>Si-Ausscheidungen (**Bild 3.2**). Durch die gezielte Steuerung der Temperaturen und der Zeit bei der Wärmebehandlung können die Verteilung, die Größe und die Morphologie



**Bild 3.2:** Schnitt durch das Dreistoffsystem für die Legierung AA6061 /Sta/ und Lage der Lösungsglühung bei der Wärmebehandlung T6.

der Ausscheidungen so eingestellt werden, dass die Matrix die maximal mögliche Festigkeit besitzt /Min/. So wird bei der Wärmebehandlung T6 die AA6061-Matrix mit dem Si-Gehalt von 0,58Gew.-% bei 530 °C lösungsgeglüht, damit sich die Legierungselemente gleichmäßig in der Matrix verteilen. Nach dem Abschrecken in Wasser sind die Legierungselemente in der Matrix zwangsgelöst. Über eine anschließende Warmauslagerung bei 160 °C / 24h wird die Bildung kohärenter und teilkohärenter Ausscheidungen begünstigt. Dieses Beispiel zeigt, dass auch bei Al-Legierungen die Werkstoffeigenschaften wesentlich von der durchgeführten Wärmebehandlung abhängen. Derartig unterschiedliche Festigkeitseigenschaften von Al-Matrixlegierungen werden später in Bild 3.5 gezeigt.

Durch Zugabe von SiC- oder Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Partikel wird bei Al-Keramik-Verbundwerkstoffen zusätzlich die Festigkeit des Verbundwerkstoffs erhöht. Dabei entstehen meist Werkstoffe mit Einschlussgefüge, bei denen die zweite Phase (Keramik) vollständig von der Matrix (Al-Legierung) umschlossen wird. Bei der numerischen Modellierung dieser Werkstoffart hat sich vor allem die Anwendung der FE-Methode bewährt, wobei entweder direkt das Realgefüge abgebildet oder über die Anwendung von Einheitszellberechnungen (Einführung siehe Kapitel 2.4) die mechanisch-technologischen Eigenschaften dieser Werkstoffe ermittelt werden.



### 3.1 Realgefügemodellierung

Eine Schwierigkeit der Realgefügemodellierung stellt die meist komplexe Gefügestruktur bei zweiphasigen Werkstoffen mit Einschlussgefüge dar, da zur Abbildung der Phasengrenzen im FE-Modell diese mit den Kanten der finiten Elemente in Deckung gebracht werden müssen.

Ein alternativer Weg zur Abbildung der Gefügestruktur mittels der FEM stellt der Einsatz von mehrphasigen Elementen (MPE) dar. Hierbei wird von der üblichen Vorgehensweise abgegangen, allen Integrationspunkten eines Elements nur eine Materialeigenschaft zuzuordnen, sondern ausgehend von ihrer Lage im Gefüge werden den Integrationspunkten die jeweilige Eigenschaft der entsprechenden Phase zugewiesen. Auf diese Weise können auch sehr komplexe Gefügestrukturen mit vergleichsweise geringem Modellierungsaufwand behandelt werden. Auf der Grundlage von /Stein/ wurde diese Methodik zu Modellierung von Verbundwerkstoffen z. B. in /Saut/ unter Anwendung des FE-Programms LARSTRAN /LAS/ angewendet. Im Rahmen dieser Arbeit wurden derartige Elemente auch für das FE-Programm ABAQUS entwickelt. Durch Vergleich mit vorhandenen LARSTRAN-Berechnungen /Sop2/ konnten diese Elemente verifiziert werden. In den MPE sind elastische als auch elastisch-plastische Phaseneigenschaften innerhalb eines Elements zulässig. Beim Einsatz von mehrphasigen Elementen ist zu beachten, dass der ursprüngliche Verlauf der Phasengrenzen nicht mehr exakt abgebildet wird. Die Anwendung dieser Modellierungsmethode auf schädigungsmechanische Simulationen zeigte jedoch eine deutliche Abhängigkeit der Ergebnisse von der jeweils gewählten FE-Netzfeinheit /Arb1/.

Es wurde daher ein Verfahren entwickelt, mit dem auch komplexere Phasenarrangements und deren Phasengrenzen nahezu original abgebildet werden können, was dann den Einsatz der gegenüber der MPE unkritischen Einphasenelemente (EPE) erlaubt. Im Zusammenspiel mit dem Programm MSC/PATRAN /Pat/ können mit einem zusätzlich entwickelten Programm künstliche Gefüge auf einfache Art und Weise mit EPE vernetzt werden. Die Anwendung dieser Vernetzungsmethodik wurde auch in anderen Vorhaben wie z. B. /Isla, Sop3/ erfolgreich eingesetzt. Trotz vorhandener Software und entwickelten Programmen ist die Abbildung von Realgefügen im Rechner mit Aufwand verbunden. Räumlich kann dies meist nur über die Verwendung von 3D-Mehrphasenelementen (MPE) erreicht werden /Lipp/. In den meisten Fällen kann zudem die 3D-Komplexität des Gefüges bei der Modellierung nicht berücksichtigt werden, denn schon 2D-Modelle erfordern eine Vielzahl von finiten Elementen. In diesem Kapitel werden vergleichend Ersatzmodelle, wie das selbstkonsistente Einbettungsmodell (vergl. Kapitel 2.4) angewendet.

### 3.2 Anwendung und Ergebnisse

Die vorab vorgestellten Modellierungsmethoden werden nun mit dem Ziel angewendet, das Umformverhalten zweiphasiger Werkstoffe unter besonderer Berücksichtigung der Schädigungsmechanismen und des Eigenspannungszustandes numerisch zu modellieren. Das Formänderungsvermögen mehrphasiger Werkstoffe kann aufgrund von Spannungskonzentrationen an Phasengrenzen vergleichsweise frühzeitig überschritten werden, mit der Folge, dass lokale Schädigungen, bis hin zum Versagen, bereits während des Umformvorganges auftreten können. Darüber hinaus führen die Verformungs- und Werkstoffheterogenitäten zur Ausbildung von Umformeigenspannungen. Wegen der weiten Verbreitung der AA6061-Legierung werden in dieser Arbeit ebenfalls Verbundwerkstoffe mit dieser Matrixlegierung untersucht, die zudem mit SiC-Teilchen bzw.  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Teichen verstärkt sind. Abschließend werden die dort angewendeten Rechenmodelle auch auf einen Duplexstahl angewendet. Die Kombination von Rechnung und vergleichbaren Experimenten dient einem verbesserten Verständnis der Wechselwirkung von Gefüge und Verformungsprozess.

Besonders bei der Verformung mehrphasiger Werkstoffe werden die vorhandene Verformungsinhomogenitäten zusätzliche durch Inhomogenitäten aufgrund der unterschiedlichen physikalischen und mechanischen Eigenschaften der Phasen überlagert. Daher entsprechen die Eigenschaften eines umgeformten mehrphasigen Werkstoffes nicht einem ihrem Volumengehalt entsprechend gewichteten Mittelwert der Eigenschaften der einzelnen Phasen. Beispielsweise liegt die Verfestigung eines Duplexstahles nach dem Walzen im Bereich der Verfestigung des reinen Austenits, weil in der weiche- ren Phase Dehnungskonzentrationen auftreten. Erst bei hohen Umformgraden bewirkt eine gleichmäßige Dehnungsverteilung auf beide Phasen, dass die Verfestigung des Duplexstahles zwischen der des Austenits und des Ferrits liegt /Fisch/.

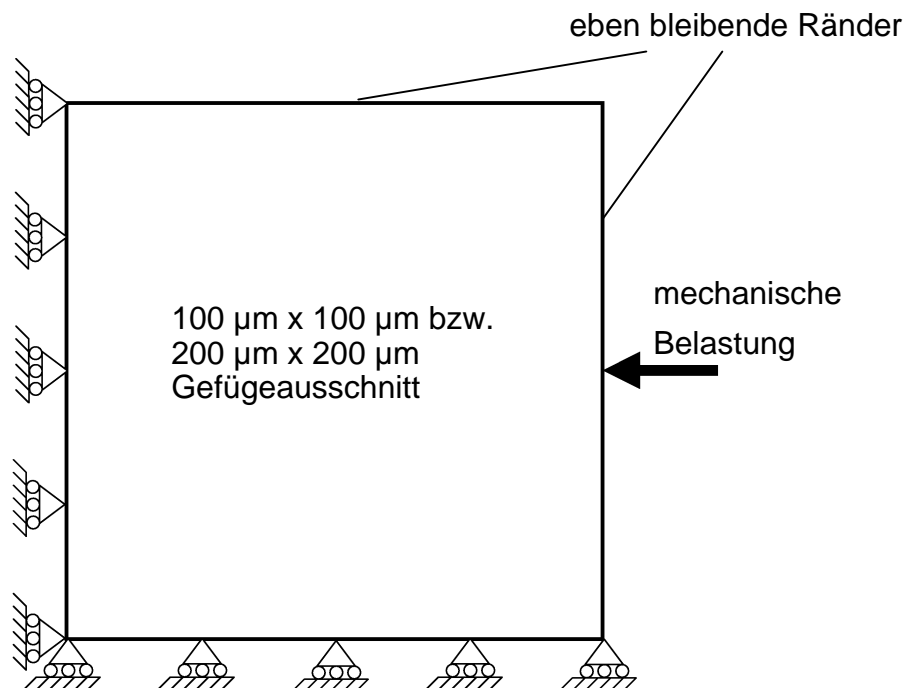
Wird durch Dehnungskonzentrationen an den Werkstoffinhomogenitäten das Formänderungsvermögen des Werkstoffs überschritten, treten lokale Schädigungen des Werkstoffs bis hin zum Versagen auf /Schm1/. Die Beanspruchung innerhalb der einzelnen Phasen, die Entstehung und die Stärke einer Schädigung sowie das Rissausbreitungsverhalten, hängen sowohl von der Höhe und Verteilung der Umformspannungen, den physikalischen und mechanischen Eigenschaften der Phasen als auch erheblich von Gefügeparametern, wie z. B. dem Volumenanteil, der Form und der Größe sowie der Kontinuität der Phasen ab /Brock, Adam/.

Nach dem Verformungsprozess bleiben aufgrund der Inhomogenitäten der Phasen Eigenspannungen im Bauteil zurück /Tver, Levy/. Der Eigenspannungszustand ist da-

durch gekennzeichnet, dass die Eigenspannungen im gesamten Volumen des Bauteils auftreten, und dass sich in mehrphasigen Werkstoffen den Makroeigenspannungen phasenspezifische Mikrospannungen überlagern /Böh1/. Da der Spannungszustand im betrieblichen Einsatz eines Bauteils vom Zusammenwirken von Lastspannungen und Eigenspannungen bestimmt wird, kann der Einfluss der Eigenspannungen auf die Lebensdauer des Bauteils prinzipiell sowohl positiver als auch negativer Natur sein. Beispielsweise ist als gesichert anzusehen, dass Druckeigenspannungen im Randschichtbereich die Dauerschwingfestigkeit von Bauteilen erhöhen und zu einer Verminderung der Rissausbreitungsgeschwindigkeit beitragen /Böh2/.

### 3.2.1 Randbedingungen und Werkstoffkennwerte

Die Werkstoffmodellierung auf der Ebene der Mikrostruktur kann wegen der Komplexität der Gefüge immer nur ausschnittsweise vorgenommen werden. Meist werden dazu quadratische Gefügausschnitte gewählt, die ein repräsentatives Gefügebild darstellen. **Bild 3.3** zeigt schematisch die für die folgenden Berechnungen definierten Randbedingungen. Am unteren und linken Rand des Gefügemodells werden Symmetriebedingungen vorgegeben. Die Belastung setzt sich aus einem thermischen und einem mechanischen Anteil zusammen. Ausgehend von einer oberen Grenztemperatur von  $T_{\text{Ref}} =$



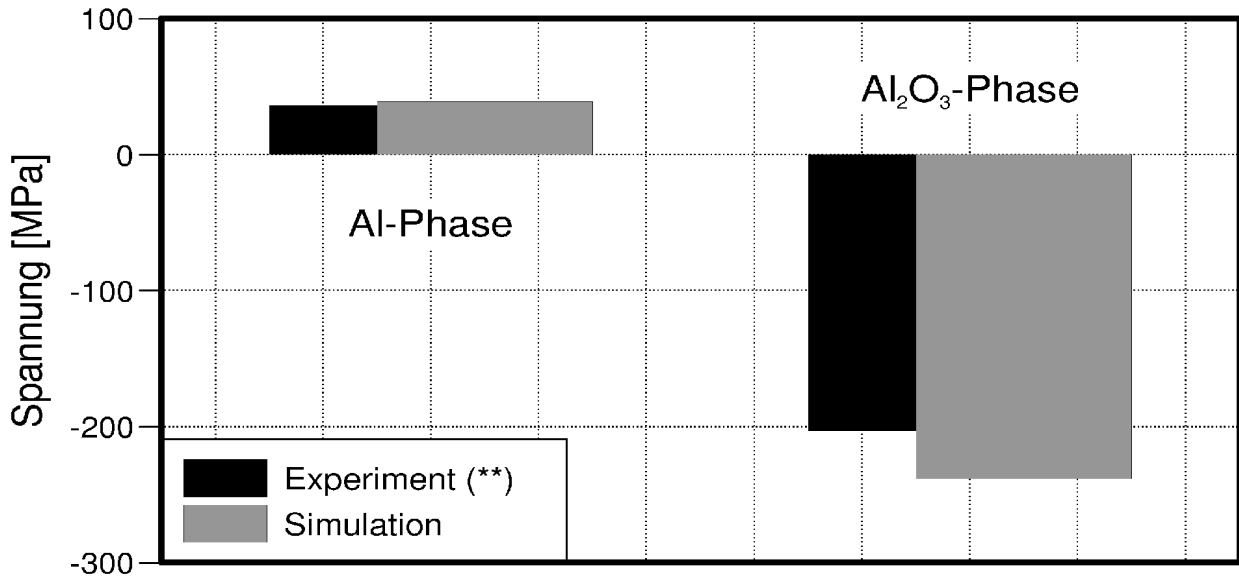
**Bild 3.3:** Gefügausschnitt für die mikromechanischen Modellierung und die dort definierten Randbedingungen.

500 °C (Al/SiC, Angabe des Herstellers) bzw. einer an die gemessenen Eigenspannungen angepassten Temperatur von  $T_{\text{Ref}} = 250 \text{ °C}$  (Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), bei der angenommen wird, dass oberhalb von  $T_{\text{Ref}}$  Eigenspannungen durch Fließvorgänge im Aluminium vollständig abgebaut werden und somit keine Eigenspannungen im Verbundwerkstoff vorliegen, wird das Gefüge auf RT abgekühlt und danach global in X-Richtung durch Verschieben des rechten Randes um 10% gestaucht. Durch die der mechanischen Belastung vorgeschalteten Abkühlung soll die Entstehung der herstellungsspezifischen Eigenspannungen aufgrund unterschiedlicher Wärmeausdehnungskoeffizienten der Einzelphasen

Werkstoff	Phase	E-Modul (GPa)	$\mu$	$\alpha$ (E-6/K)
Al/SiC	Al (AA6061)	73	0,345	23,0
	SiC	483	0,165	4,7
Al/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Al (AA6061)	66	0,330	23,0
	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	380	0,220	6,8
Duplexstahl X3CrNiMoCu26-6	Austenit	201	0,28	16,7
	Ferrit	215	0,28	11,8

**Tabelle 3.1:** Elastische Konstanten und Wärmeausdehnungskoeffizient  $\alpha$  der Einzelphasen der untersuchten Verbundwerkstoffe und des Duplexstahls.

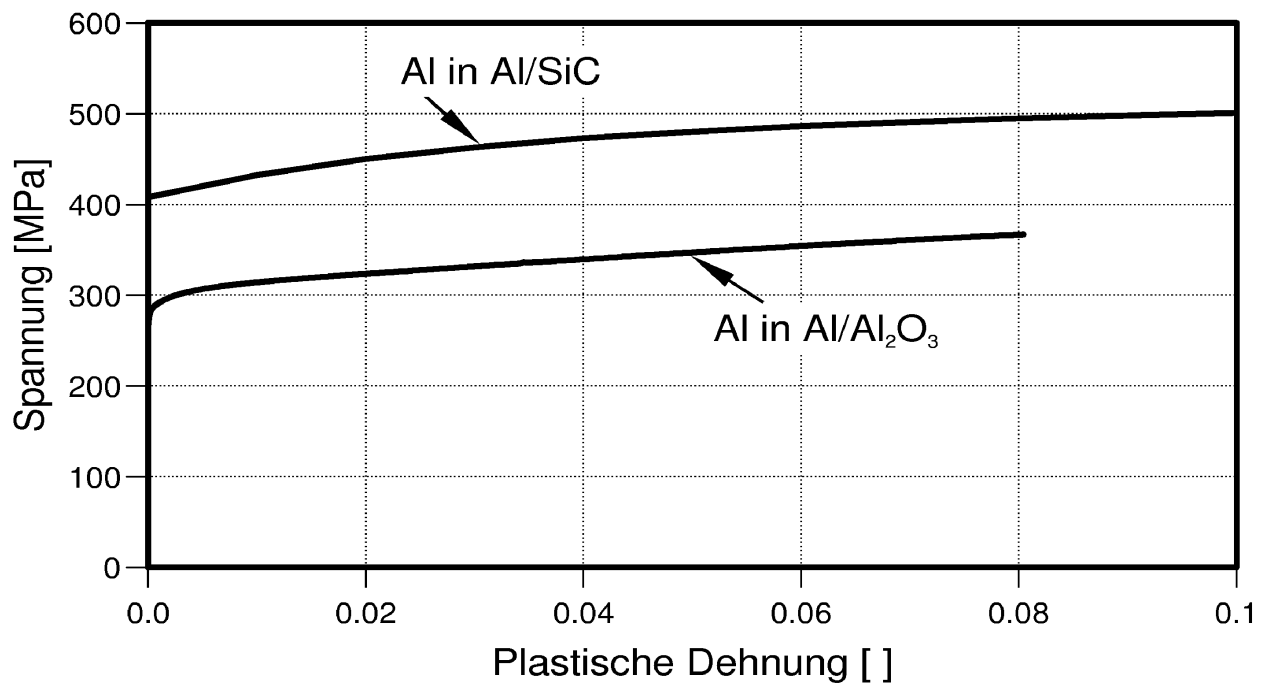
Rechnung getragen werden. Bei den Berechnungen des Duplexstahls wird nur der mechanische Lastfall betrachtet, da aufgrund der ähnlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten der beiden Phasen Austenit und Ferrit bei vergleichbarer Abkühlung vernachlässigbare thermische Eigenspannungen entstehen. Die bereits angesprochene Problematik der in Verbundwerkstoffen auftretenden Werkstoffinhomogenitäten wird aus der Zusammenstellung der elastischen Konstanten und der Wärmeausdehnungskoeffizienten  $\alpha$  in **Tabelle 3.1** deutlich. Neben den unterschiedlichen E-Moduli zwischen der Al-Phase und den jeweiligen keramischen Phasen (SiC und Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) fällt auch der Unterschied im  $\alpha$ -Wert auf, der bei Temperaturbelastung für die Entstehung von thermischen Eigenspannungen verantwortlich ist. In **Bild 3.4** sind diese thermischen Eigenspannungen, getrennt nach Phasen, für den Al/15vol.%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Verbundwerkstoff den am HMI (Hahn-Meitner-Institut, Berlin) gemessenen Eigenspannungen gegenübergestellt. Den Druckspannungen in der Keramikphase stehen Zugspannungen in der Matrix gegenüber. Insgesamt stehen die Phaseneigenspannungen zueinander im Gleichgewicht.



\*\* Hahn-Meitner-Institut (HMI), Berlin

**Bild 3.4:** Phasenspezifische thermische Eigenspannungen im Al/15vol.%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Verbundwerkstoff bei einer Abkühlung von 250°C auf RT.

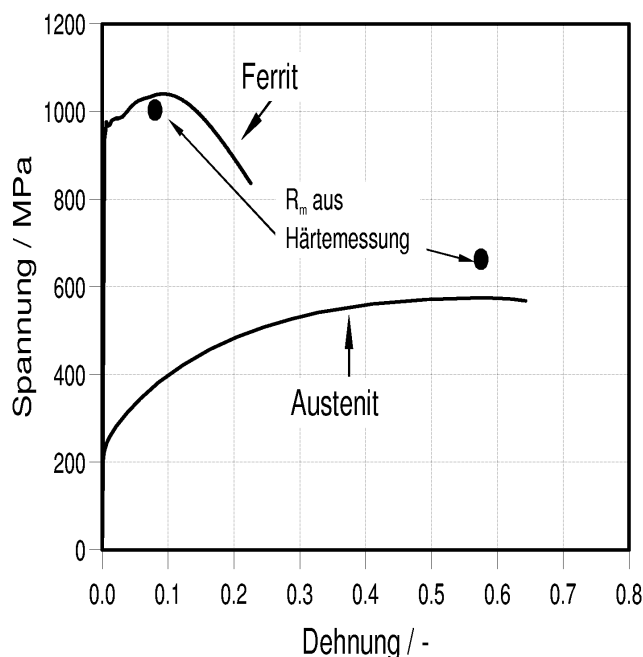
Auch die elastisch-plastischen Eigenschaften der Al-Matrix von Al-Verbundwerkstoffen können sich je nach Legierungselementen und Wärmebehandlung unterschiedlich darstellen. Dies wird in **Bild 3.5** deutlich, wo für beide untersuchten Al-Verbundwerkstoffe die Spannungs-Dehnungskurve der jeweiligen Al-Matrix dargestellt ist.



**Bild 3.5:** Spannungs-Dehnungskurve vom Al-Matrixmaterial in den untersuchten Al/Keramik-Verbundwerkstoffen.

Beim Duplexstahl sind diese Inhomogenitäten wegen der ähnlichen elastischen und thermischen Werkstoffkennwerten von Ferrit und Austenit deutlich geringer. Für diesen Werkstofftyp treten phasenspezifische Unterschiede im Werkstoffverhalten überwiegend im plastischen Bereich auf. In **Bild 3.6** sind die technischen Fließkurven eines austenitischen und eines ferritischen Werkstoffs gegenübergestellt. Wegen der bekanntlich deutlich höheren Verformbarkeit des Austenits gegenüber des Ferrits treten bei Verformungen von Duplexstählen über die Elastizitätsgrenze hinaus ebenfalls Inhomogenitäten im Gefüge auf, die bei Entlastung zu Eigenspannungen führen. Jedoch sind die Werkstoffinhomogenitäten bei Metall/Keramik-Verbunden deutlich höher zu bewerten, da hier die Keramikphase gegenüber der metallischen Phase meist einen hohen E-Modul aufweist (siehe Tabelle 3.1) und nahezu keine plastische Verformung zulässt. Dies führt in MMC-Werkstoffen häufig bei großen Teilchen zu Partikelbruch und/oder Partikelablösung /Ree/.

Über die an den Einzelphasen des hier untersuchten Duplexstahls durchgeführten Härtemessungen und Umrechnung in Zugfestigkeiten nach DIN 50150 /DIN/ lässt sich die Verwendbarkeit der in Bild 3.6 dargestellten Fließkurven nachweisen.

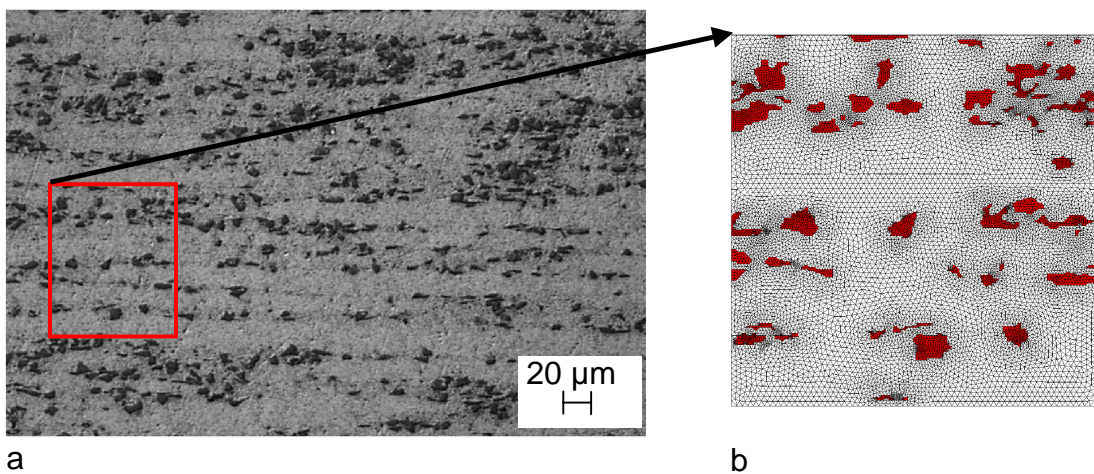


**Bild 3.6:** Technische Fließkurven von Austenit (Probe AQ2 aus /MPA/) und Ferrit (Probe EP5B17 aus /ECO/). Auswahl phasenbezogener Fließkurven über die an den Einzelphasen (Austenit + Ferrit) durchgeführten Härtemessungen und Umrechnung in Zugfestigkeiten  $R_m$  /DIN/.

## 3.2.2 Untersuchungen am Al/10vol.%SiC-Verbundwerkstoff

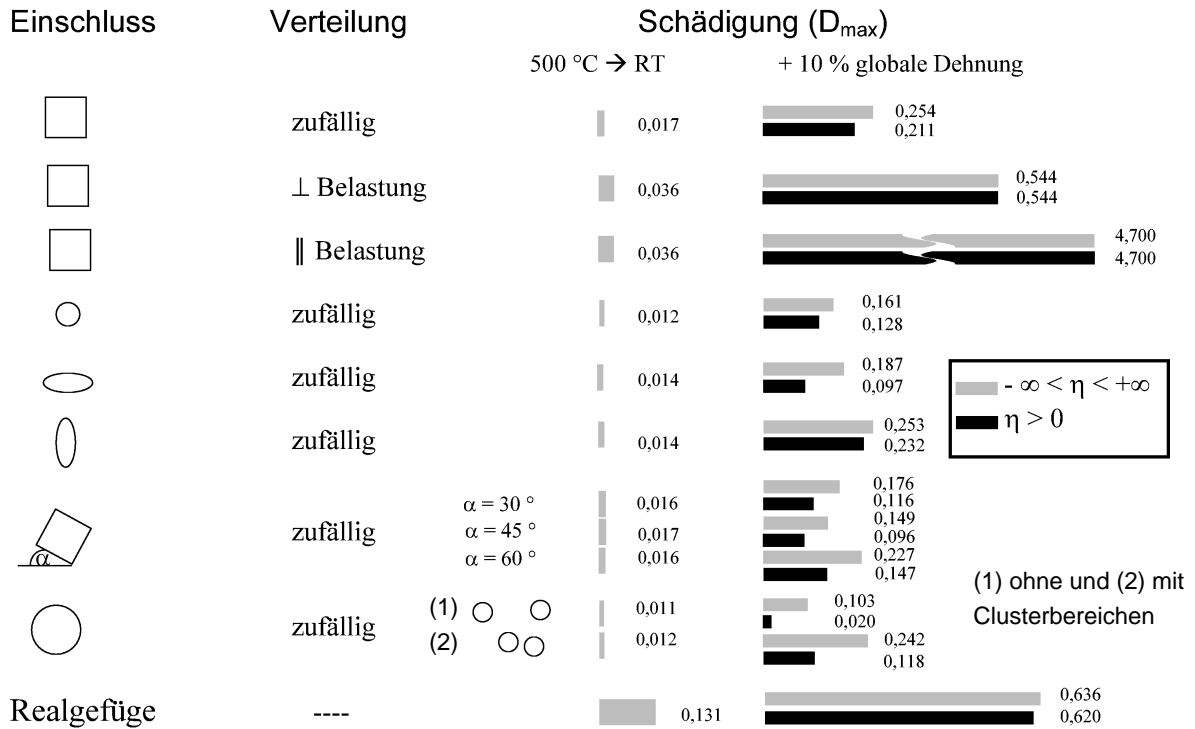
### 3.2.2.1 Künstliche Gefüge und Realgefüge

Zunächst wird anhand des Al/10vol.%SiC-Verbundwerkstoffs mit idealisierten Keramikeinschlüssen die Anwendung des Damage-Parameters  $D$  (vergl. Kap. 2.3.1) aufgezeigt. Dabei wird der Einfluss der Verteilung von nahezu quadratischen Einschlüssen auf den  $D$ -Parameter untersucht und des Weiteren die Einschlussform (quadratisch, rund, elliptisch), die Orientierung und die Größe des Einschlusses variiert. Bei der Formvariation wurde auf Volumenkonstanz geachtet, d.h. jedes Viereck wurde in einen flächengleichen Kreis bzw. in eine flächengleiche Ellipse umgewandelt. Neben den künstlichen Gefügen wurde der  $D$ -Parameter auch auf den in **Bild 3.7** dargestellten Mikrogefüge-



**Bild 3.7:** Al/SiC Realgefüge mit 10vol.% Keramikanteil (dunkel), Gefügeausschnitt (a) und Vernetzung (b).

ausschnitt angewendet. Die FE-Modellierung des Gefüges wurde mit dem in dieser Arbeit entwickelten Vernetzungsverfahren (vergl. Kap. 3.1) durchgeführt. Die Verteilung des  $D$ -Parameters für die verschiedenen künstlichen Gefüge und für das Realgefüge sind im **Anhang A2** für die thermisch-mechanische Belastung (vergl. Kap. 3.2.1) zusammengestellt /Schm2-4, Web, Arb1, Arb2/ und in **Tabelle 3.2** zusammengefasst. Hier sind die jeweils maximal erreichten Damage-Parameterwerte ( $D_{\max}$ ) getrennt für die rein thermische und thermisch-mechanische Belastung in Abhängigkeit der Einschlussform und -orientierung und für das Realgefüge einander gegenübergestellt. Bei der rein thermischen Beanspruchung (Abkühlung von 500 °C auf RT) werden bei den künstlichen Gefügen im Gegensatz zu dem Realgefüge nur sehr niedrige  $D_{\max}$ -Werte erreicht. Sehr kritisch sind quadratische, zeilenförmig angeordnete Einschlüsse, wenn die Zeilen parallel zur Belastung orientiert sind. Das geringste Schädigungspotential tritt generell bei den zufällig verteilten Einschlüssen auf, wobei die runden (großen) Einschlüsse we-



**Tabelle 3.2:** Einfluss der Einschlussform und -verteilung auf den maximalen Damage-Parameter  $D_{max}$ , Vergleich mit dem Al/10vol.%SiC-Realgefüge aus Bild 3.7.

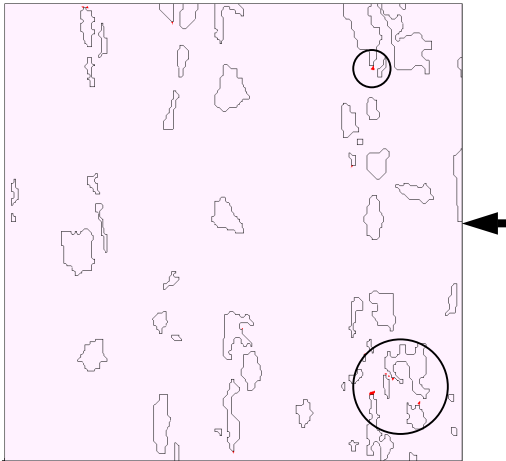
gen den geringsten  $D_{max}$ -Werten den Idealfall darstellen. Im Unterschied zu den hellgrauen Balken in Tabelle 3.2 ist bei den dunklen Balken der Wertebereich der Mehrachsigkeit  $\eta$  auf positive Werte beschränkt, so dass Schädigung nur unter positiver hydrostatischer Spannung auftritt. Der Einfluss auf den D-Parameter ist jedoch (mit Ausnahme bei den zufällig verteilten runden großen Einschlüssen) gering. Die Ergebnisse in Tabelle 3.2 zeigen auch, dass das Schädigungspotential eines Realgefüges durch Gefügeoptimierung deutlich verringert werden kann. Die schwarzen Balken sind in der Spalte der rein thermischen Beanspruchung nicht dargestellt, da die Matrixphase (Al) gegenüber der Einschlussphase (SiC) den größeren Wärmeausdehnungskoeffizienten besitzt (vergl. Tabelle 3.1) und somit bei Abkühlung in der Matrix Zugeigenspannungen entstehen. Eine Abgrenzung der Mehrachsigkeit  $\eta$  in den positiven Wertebereich hat daher keine Auswirkung auf das Ergebnis.



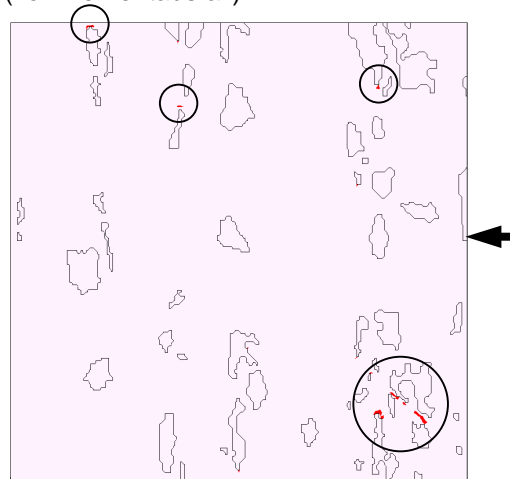
### 3.2.2.2 Numerische Simulation der Schädigung im Realgefüge unter Druckbelastung

In den bisherigen Berechnungen wurde für ein Al/10vol.%SiC-Gefüge der Einfluss unterschiedlicher Einschlussformen auf den Damage-Parameter im Vergleich zum Realgefüge untersucht. Im Folgenden wird nun der D-Parameter als Versagenskriterium eingeführt und eine kritische Größe  $D_c$  definiert, bei deren Überschreitung im Gefüge mit Schädigung zu rechnen ist. Mit der FEM können derartige Mechanismen entweder durch Lösen von Knotenpunkten oder durch Schwächung und Ausfall von einzelnen oder mehreren Elementsteifigkeiten simuliert werden. Da bei Beginn der Belastung weder der Ort noch der weitere Verlauf bekannt ist, an dem die Schädigung initiiert wird bzw. sich ausbreitet, müssen im Falle der Anwendung des KnotenlöSENS an jeder Stelle in der Struktur voneinander unabhängige Knotenpunkte generiert werden, die dann über löSBARE Zwangsbedingungen (= multi point constraints, MPCs) miteinander verbunden sind. Dies hat den Nachteil, dass die Anzahl der Freiheitsgrade und somit der numerische Aufwand als auch die Anforderungen an die Hardware deutlich erhöht werden. Zudem haben Testrechnungen gezeigt, dass bei den in diesem Falle verwendeten kleinen Elementen beim Lösen einzelnen Knoten die Elemente stark verzerrt werden und dann Konvergenzprobleme auftreten können. Aus diesem Grund wurde im Folgenden die Technik des Elementausfalls angewendet. Als Ausfallkriterium wird der in Kap. 2.3.1 definierte Damage-Parameter  $D$  herangezogen. Versagen tritt dann ein, wenn der kritische Wert  $D_c = 1$  erreicht wird. Da für die Aluminiumlegierung AA6061 die Materialkennwerte  $A$  und  $B$  (vergl. Gl. (2.18)) zur werkstoffgetreuen Beschreibung der Schädigung über den D-Parameter nicht vorlagen und ersatzweise die Daten von Cobalt verwendet wurden /Hön/, wird die Versagensbedingung  $D_c = 1$  selbst bei einer äußeren Belastung von 10% auch beim Realgefüge nicht erfüllt (vergl. Tabelle 3.2). Als kritischer Wert wird im weiteren Verlauf der Untersuchung  $D_c = 0,3$  verwendet (andere  $D_c$ -Werte ergeben einen qualitativ ähnlichen Schädigungsverlauf). Nach jedem Belastungsincrement wird nun überprüft, ob im Schwerpunkt eines Elements dieser kritischer Wert überschritten wird und somit das Element aus der Steifigkeitsmatrix eliminiert werden muss. Der beim Ausfall eines jeden Elements auftretende Werkstoffverlust kann wegen der geringen Größe der Elemente vernachlässigt werden. In **Bild 3.8** ist die Entwicklung der Schädigung im Realgefüge unter Druckbelastung bei einem angenommenen kritischen Damage-Parameter-Wert von  $D_c = 0,3$  aufgezeichnet. Bei einer globalen Dehnung von 8% sind erste geschädigte Gefügebereiche deutlich erkennbar. Wie zu erwarten war, liegen die Orte der Schädigung in Bereichen, in denen Teilchenclusterungen vorliegen. Der größte Zuwachs an Schädigung tritt bei einer globalen Dehnung von

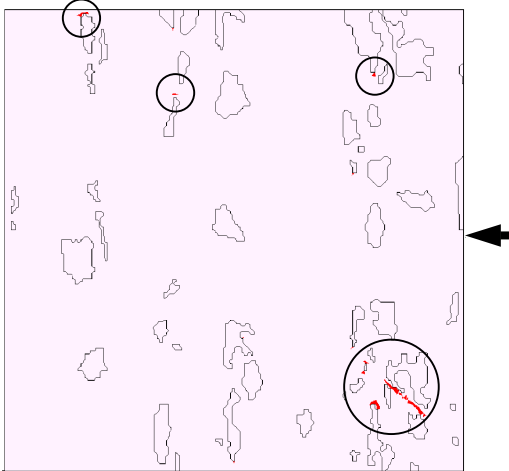
(a): 8% globale Dehnung  
(erste Schädigung)



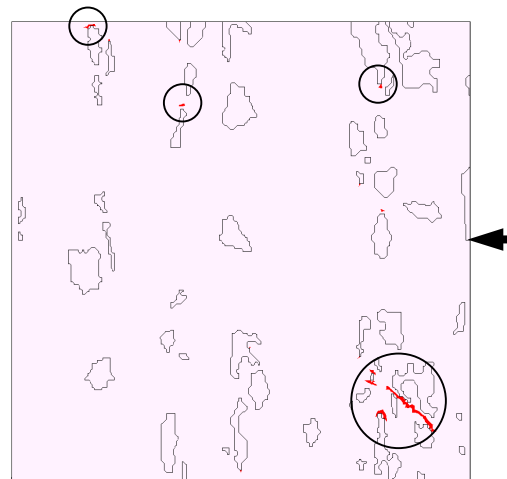
(b): 8,9% glob. Dehnung  
(vor Elementausfall)



(c): 8,9% glob. Dehnung  
(nach Elementausfall)



(d): 10% globale Dehnung

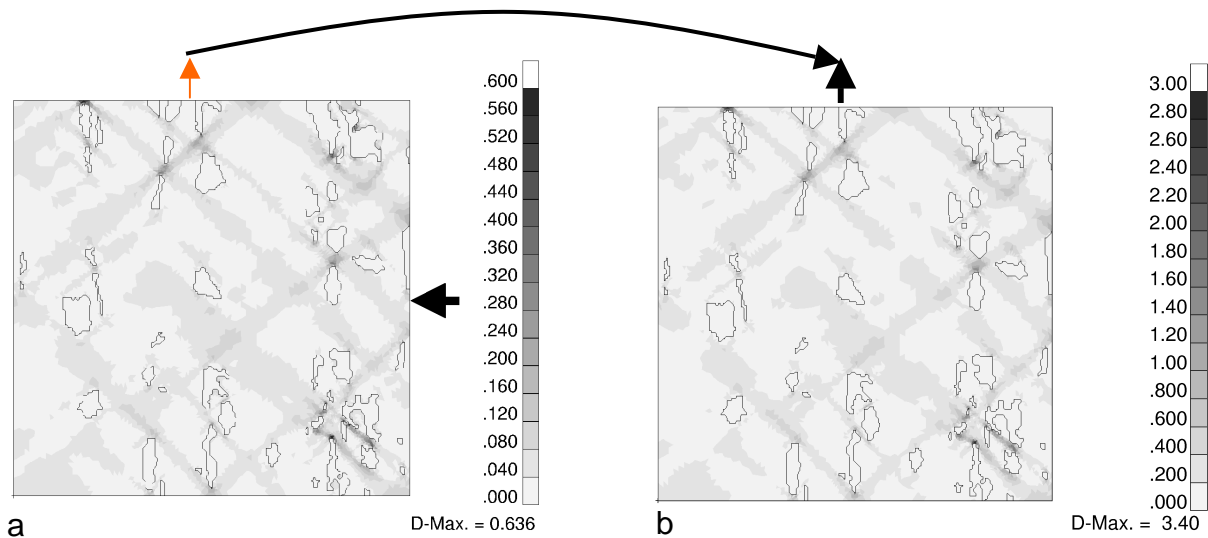


**Bild 3.8:** Simulation der Schädigung im Realgefüge aufgrund von Eigenspannungen und mechanischer Belastung durch Elementausfall (dunkel). Ausfallkriterium:  $D > D_c = 0,3$ : (a) Erste Schädigung bei 8% globaler Dehnung, weitere Schädigung bei 8,9% globaler Dehnung (b) vor und (c) nach Elementausfall, und (d) nach 10% globaler Druckdehnung. (Schädigungsbereiche sind mit  $\bigcirc$  markiert).

8,9% auf. In Bild 3.8 sind die ausgefallenen Elemente (dunkel) unmittelbar vor und nach dem dazugehörigen Belastungsincrement dargestellt. Dabei wachsen die beiden einzeln entstandenen Hauptschädigungsregionen (Bild 3.8b und Bild 3.8c unten rechts) zu einem rissartigen Gebilde zusammen, welches sich dann bei einer Endbelastung von 10% globaler Dehnung weiter verlängert.

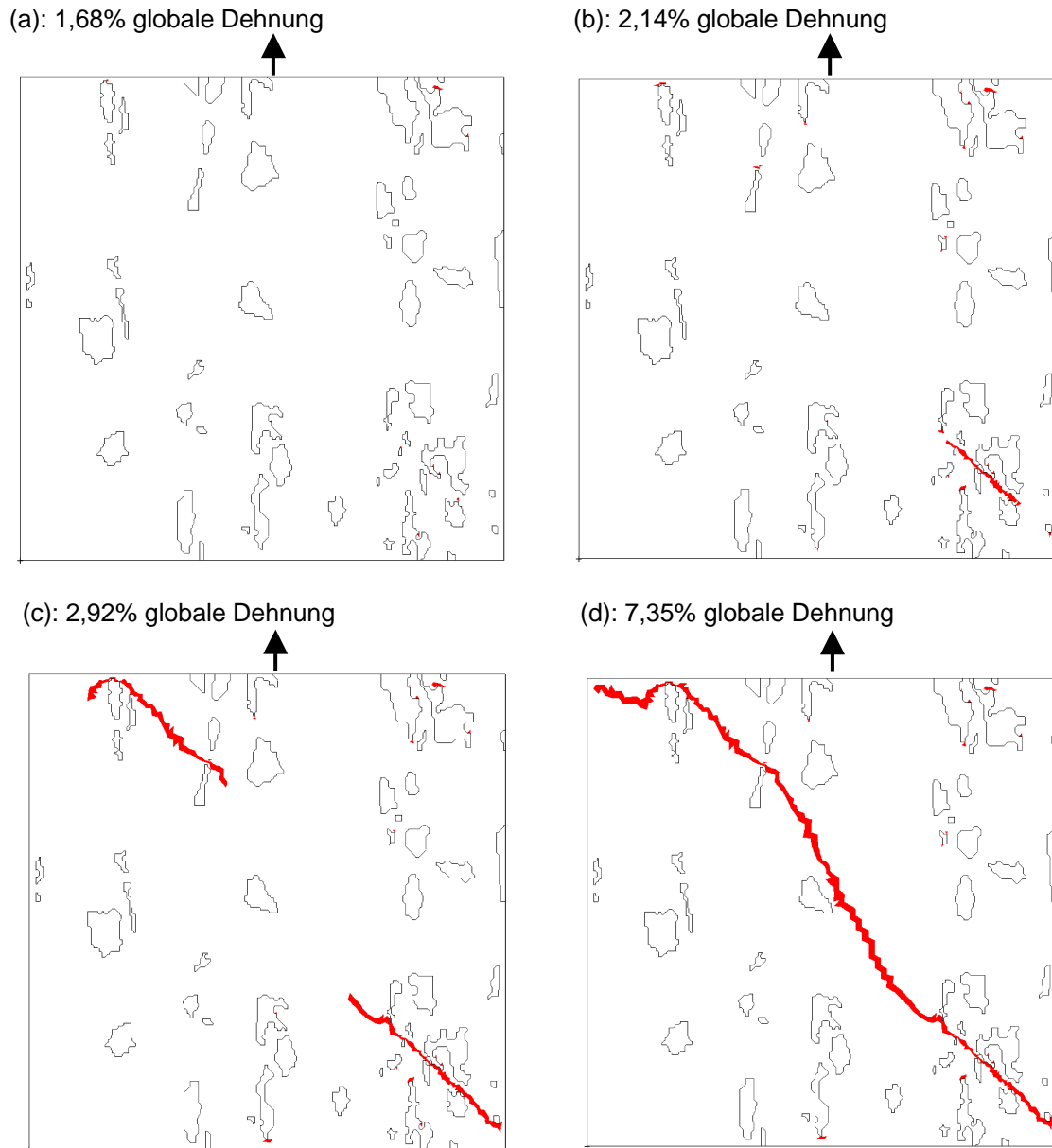
### 3.2.2.3 Numerische Simulation der Schädigung im Realgefüge unter Zugbelastung

Sowohl bei den künstlichen Gefügen als auch beim Realgefüge wurde die Entwicklung des D-Parameters ausschließlich unter Druckbelastung untersucht. Bei komplexen Umformprozessen (z. B. Tiefziehen) treten jedoch auch Bereiche auf, in denen der Werkstoff überwiegend auf Zug belastet wird. Im Folgenden wird nun am Al/10vol.%SiC-Realgefügeausschnitt die während der globalen Druckverformung senkrecht dazu auftretende positive Dehnung am Rand in Höhe von 7,35% als Zugbelastung am gleichen Rand aufgebracht. In **Bild 3.9** ist die Verteilung des D-Parameters für beide Belastun-



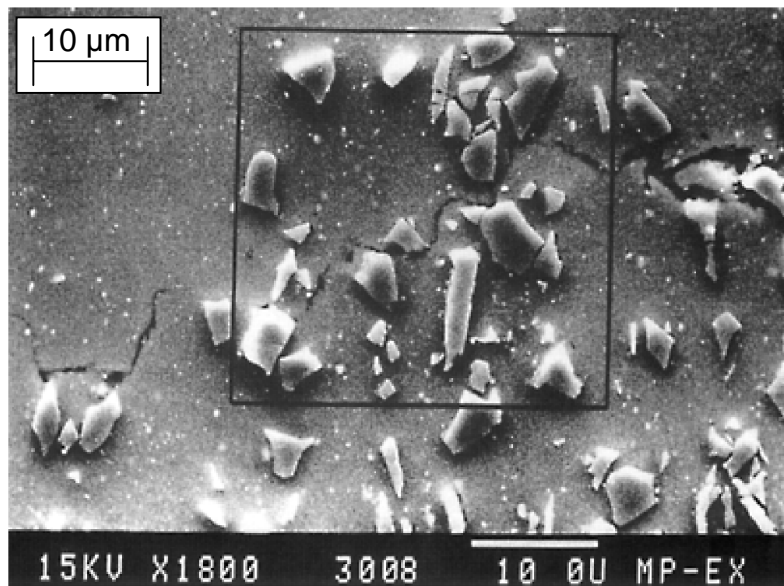
**Bild 3.9:** Verteilung des D-Parameters bei 10% globaler Druckdehnung am (a) rechten Rand und äquivalente globale Zugdehnung in Höhe von 7,35% am (b) oberen Rand des Gefügeausschnitts.

gen gegenübergestellt. Im Gegensatz zur Druckbelastung (Bild 3.9a) stellt sich im Falle der Zugbelastung (Bild 3.9b) ein um den Faktor 5 höherer  $D_{\max}$ -Wert ein. Dies zeigt, dass dieser Werkstoff hinsichtlich der Schädigung auf Zugbelastung deutlich kritischer als auf Druckbelastung reagiert. Die Verteilungsmuster des D-Parameters im Gefüge sind jedoch nahezu identisch. Wie im Falle der Druckbelastung wird auch für die Zugbelastung der D-Parameter als Elementausfallkriterium herangezogen. In **Bild 3.10** ist die Entwicklung der Schädigung während der Zugbelastung dargestellt. Bei 1,68% globaler Zugdehnung tritt bereits erste Schädigung ein. Bei 2,14% globaler Zugdehnung ergibt sich ein ähnlicher Schädigungsverlauf wie bei 10% globaler Druckbelastung (vgl. Bild 3.8d). Wird die Zugbelastung nun noch weiter gesteigert, so tritt zusätzlich im oberen Bereich des Gefüges Schädigung ein, wobei sich die beiden Teilrisse bei der Endbelastung von 7,35% vereinigen. Diese numerische Untersuchung zeigt die extrem hohe An-



**Bild 3.10:** Simulation der Schädigung im Realgefüge aufgrund von Eigenspannungen und mechanischer Belastung über Elementausfall (dunkel). Ausfallkriterium:  $D > D_c = 0,3$ : (a) Erste Schädigung bei 1,68% globaler Zugdehnung, weitere Schädigung bei (b) 2,14%, (c) 2,92% und (d) 7,35% globaler Zugdehnung.

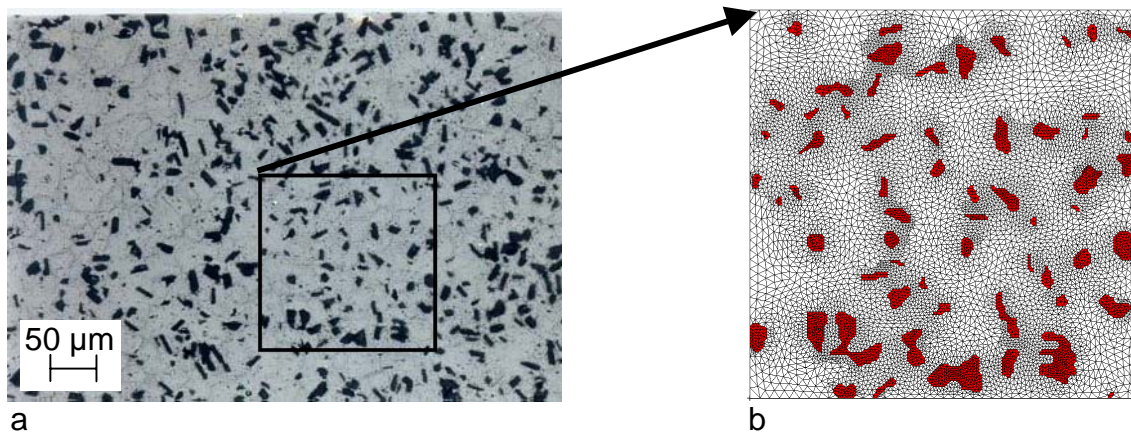
fälligkeit des Werkstoffs auf Zugbelastung, wobei auch in diesem Fall die Orte der Schädigungsinitiierung an den Stellen mit erhöhter Teilchendichte (Cluster) auftreten. Auch experimentelle Untersuchungen an einem vergleichbaren Verbundwerkstoff bestätigen diese Aussage: In **Bild 3.11** ist der Schädigungsverlauf in einer Dreipunktbiegeprobe aus dem Al/20vol.%SiC-Verbundwerkstoff dargestellt. Man erkennt deutlich, wie sich der Risspfad entlang von Teilchenkonzentrationen ausbreitet /Wulf/.



**Bild 3.11:** Riss in der duktilen Al-Matrix eines Al/20vol.%SiC-Verbundwerkstoffs /Wulf/.

### 3.2.3 Untersuchungen am Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Verbundwerkstoff

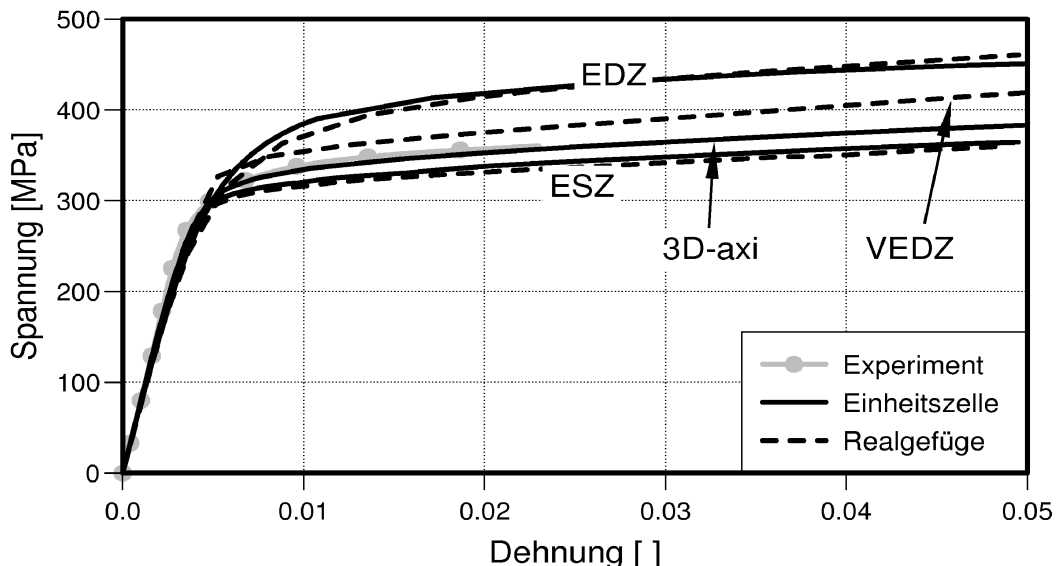
Im Folgenden werden nun ergänzende Untersuchungen am Verbundwerkstoff Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> durchgeführt. Neben der unverstärkten Al(AA6061)-Legierung lag dieser Werkstoff noch in 3 unterschiedlichen Zusammensetzungen mit 10vol.%, 15vol.% und 22vol.% Keramikanteil vor. Die hier dargestellten Ergebnisse beziehen sich auf die Zusammensetzung mit 15vol.% Keramik. In **Bild 3.12** ist das Realgefüge und die ausschnittsweise



**Bild 3.12:** Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Realgefüge mit 15vol.% Keramikanteil (dunkel), Gefügausschnitt (a) und Vernetzung (b).

Vernetzung des Gefüges dargestellt. Der in Bild 3.12a gekennzeichnete Realgefügeausschnitt ( $200\mu\text{m} \times 200\mu\text{m}$ ) repräsentiert ebenfalls einen Keramikanteil von 15%. Das FE-Netz (Bild 3.12b) wurde wieder mit dem in dieser Arbeit entwickelten Vernetzungsverfahren generiert und besteht aus  $\sim 20000$  Dreieckselementen mit quadratischem Verschiebungsansatz. Zur numerischen Bestimmung des werkstoffmechanischen Verhaltens des  $\text{Al}/15\text{vol.}\%\text{Al}_2\text{O}_3$ -Verbundwerkstoffs wird hier zusätzlich zur Realgefügemodellierung (RGM) das in Kapitel 2.4 vorgestellte selbstkonsistente Einheitszellmodell (SKEZM) angewendet. Neben dem ebenen Spannungszustand (ESZ) und dem ebenen Dehnungszustand (EDZ) ist mit den SKEZM auch eine axialsymmetrische Modellierung möglich. Da eine dreidimensionale Realgefügemodellierung wegen der Komplexität einen hohen, numerischen Aufwand erfordert, kommen hierfür der ebene Spannungszustand (ESZ), der ebene Dehnungszustand (EDZ) sowie der verallgemeinerte Dehnungszustand (VEDZ) zur Anwendung. Im VEDZ wird eine (für alle Elemente konstante) Dehnung in Dickenrichtung zugelassen.

Mit den dargestellten Rechenmodellen wurde nun ein an einer  $\text{Al}/15\text{vol.}\%\text{Al}_2\text{O}_3$ -Probe durchgeführter Zugversuch nachgerechnet und mit dem Experiment verglichen (**Bild 3.13**). Wie erwartet führt die EDZ-Formulierung zu einem zu steifen und die ESZ-Formulierung zu einem zu weichen Spannungs-Dehnungs-Verhalten, wohingegen das SKEZM in der axialsymmetrischen Formulierung das Experiment sehr gut beschreibt.

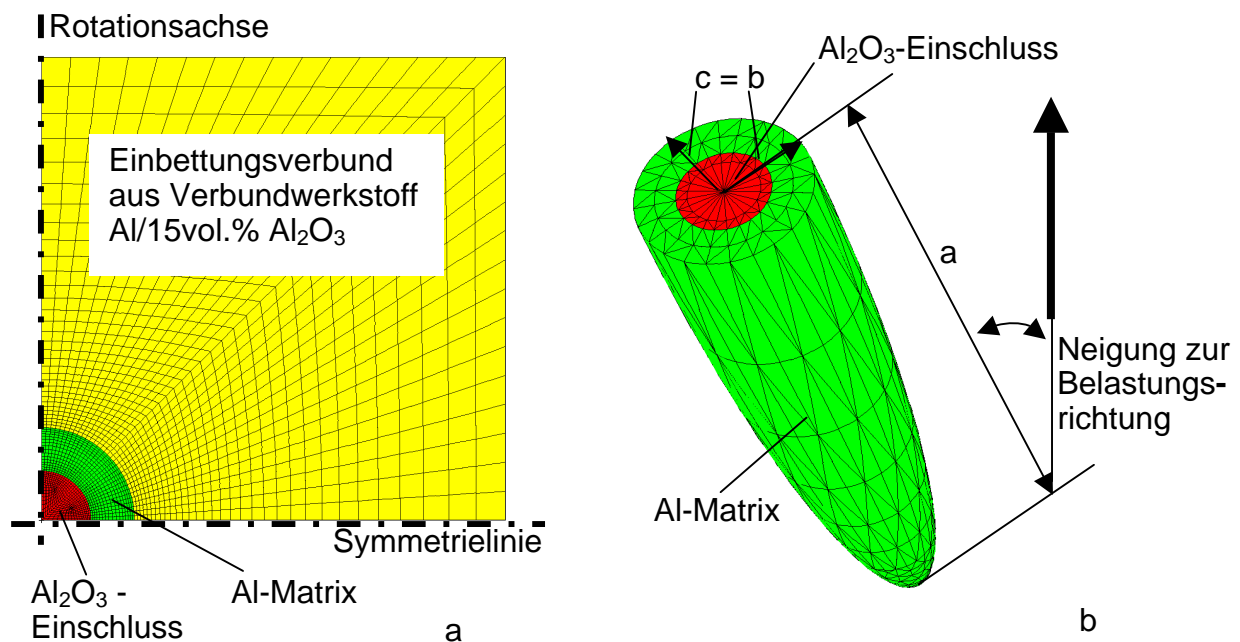


**Bild 3.13:** Zugversuch an einem  $\text{Al}/15\text{vol.}\%\text{Al}_2\text{O}_3$ -Verbundwerkstoff. Vergleich von Rechnung und Experiment. Simulation des Realgefüges aus Bild 3.12 und mit selbstkonsistenter Einheitszelle.

Wie Bild 3.13 zeigt kann durch Anwendung von Elementen im VEDZ mit dem Realgefügemodell eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment gegenüber den EDZ-Elementen erzielt werden. Gegenüber den ESZ-Elementen, die zwar das Experiment ebenfalls gut abbilden, besteht jedoch das Problem, dass diese Elemente sehr schnell numerisch instabil werden, was wiederum zu kleinen Zeitinkrementen während der Rechnung mit deutlich erhöhtem Rechenaufwand führt. Da Elemente mit VEDZ-Formulierung numerisch robuster sind und deswegen weniger Rechenzeit benötigen, sind bei Realgefügemodellierungen VEDZ-Elemente zu bevorzugen. Die numerische Ermittlung der phasenspezifischen Eigenspannungen in der Keramik- und Matrixphase wird im Folgenden untersucht.

### 3.2.3.1 In-situ-Versuche an Zugproben

Am Verbundwerkstoff Al/15vol.%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> wurden während einer zyklischen Verformung bei RT Messungen mit hochenergetischer weißer Synchrotronstrahlung durchgeführt und am Hahn-Meitner-Institut (HMI) Berlin die phasenspezifischen Eigenspannungen ermittelt /Ree/. Im Folgenden wird der erste Halbzyklus (1. Belastung bis zu definierter max. Lastspannung) nachgerechnet und daraus die gemittelten Phasenspannungen er-



**Bild 3.14:** Selbstkonsistente Einheitszellen, (a) axialsymmetrisch und (b) 3D (hier würfelförmiger Einbettungsverbund nicht dargestellt).

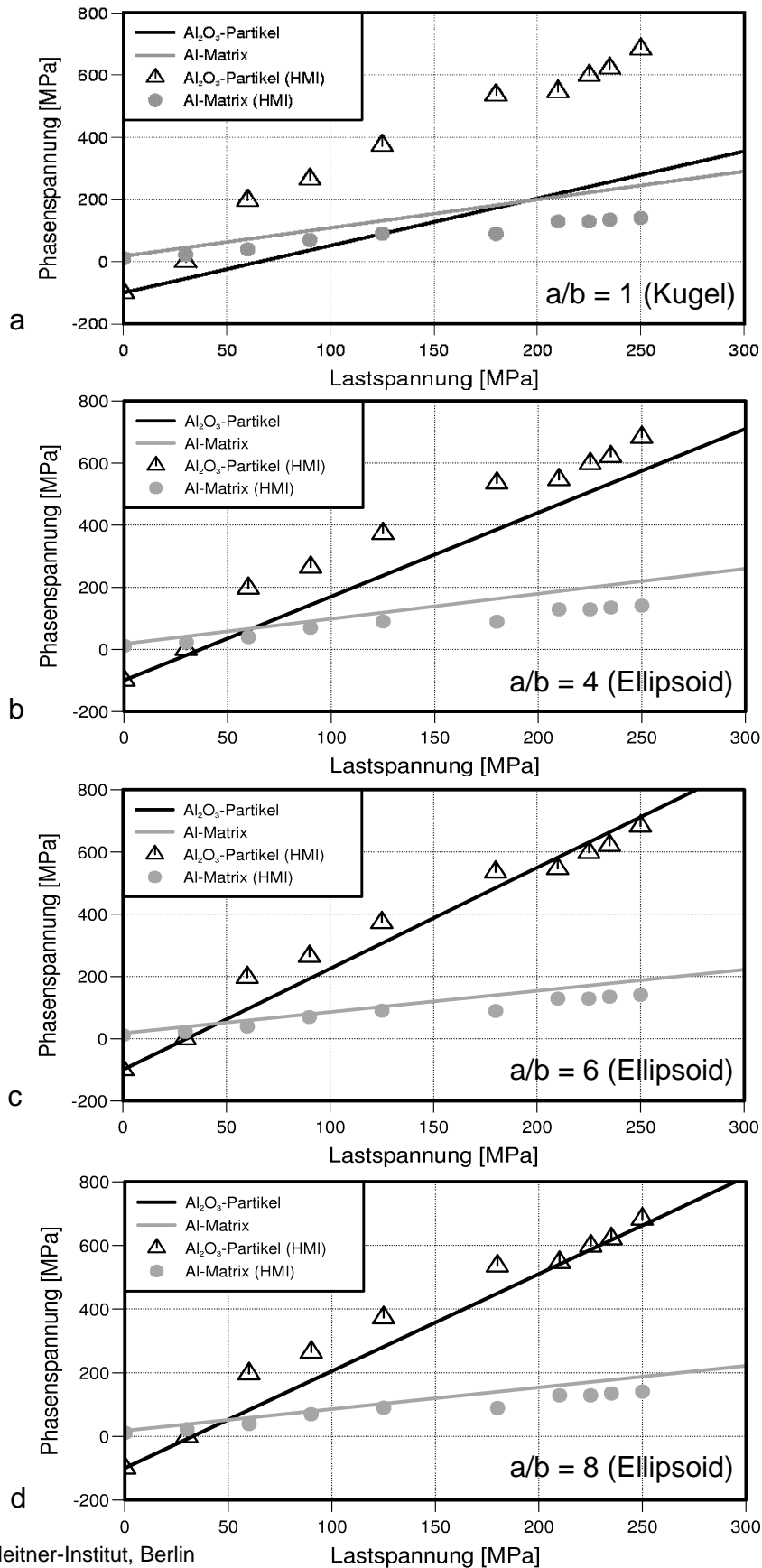


mittelt und dem Experiment gegenübergestellt. Als numerisches Modell wird wiederum die bereits erfolgreich eingesetzte eingebettete Einheitszelle jedoch mit anderen (ellipsoidförmigen) Einschlussgeometrien verwendet (**Bild 3.14**). Die Materialeigenschaften des Verbundes (15% Keramikanteil) und der Matrix wurden in Zugversuchen ermittelt. Für die keramische Phase wird wieder rein elastisches Werkstoffverhalten angenommen. In **Bild 3.15a** ist der Vergleich zwischen den experimentell ermittelten Eigenspannungen und der Rechnung unter Anwendung der axialsymmetrischen Einheitszelle dargestellt. Wie der Vergleich zeigt, entstehen in der kugelförmigen Einheitszelle bei gleicher äußerer Lastspannung deutlich geringere Phasenspannungen als im Experiment ermittelt.

Andererseits zeigen verschiedenartige Schliffe von diesem Verbundwerkstoff /Ree/, dass die Form der Einschlüsse selten ideal rund ist sondern vielmehr längliche Formen annehmen, die wiederum gegenüber der Belastungsrichtung geneigt sind. Diese Einschlussformen werden nun näherungsweise über Ellipsoide mit definiertem Achsenverhältnis  $a/b$  und  $c = b$  abgebildet. Wenn diese Ellipsoide gegenüber der Zugrichtung geneigt sind, ist eine 3D-Analyse erforderlich. Die Berechnungen wurden mit verschiedenen Achsenverhältnissen und Neigungswinkeln durchgeführt. Eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und experimentell ermittelten Eigenspannungen wird unter Anwendung einer Ellipsoid-Einheitszelle mit einem Achsenverhältnis  $a/b = 6$  erzielt (**Bild 3.15c**). Bei einem größeren Achsenverhältnis ( $a/b = 8$ , **Bild 3.15d**) ist die Hauptachse der Ellipsoid-Einheitszelle um  $20^\circ$  gegenüber der Zugbelastung geneigt. Aber auch Ellipsoide mit  $a/b = 4$  (**Bild 3.15b**) ergeben eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment. Im Realgefüge sind Ellipsoide mit verschiedenen Achsenverhältnissen von  $a/b = 4$  bis  $a/b = 8$  vorhanden /Ree/.

Axialsymmetrische Einheitszellmodelle, wie sie bereits zur Ermittlung des globalen Werkstoffverhaltens des Al/15vol.%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Verbundwerkstoffs (Bild 3.13) erfolgreich eingesetzt wurden, sind zur numerischen Ermittlung phasenspezifischer Eigenspannungen in Verbundwerkstoffen nicht generell geeignet: Liegen längliche Einschlussformen vor, die zudem zur Belastungsrichtung geneigt sind, sind dazu dreidimensionale (3D) Einheitszellmodelle (vergl. Bild 3.14b) anzuwenden.



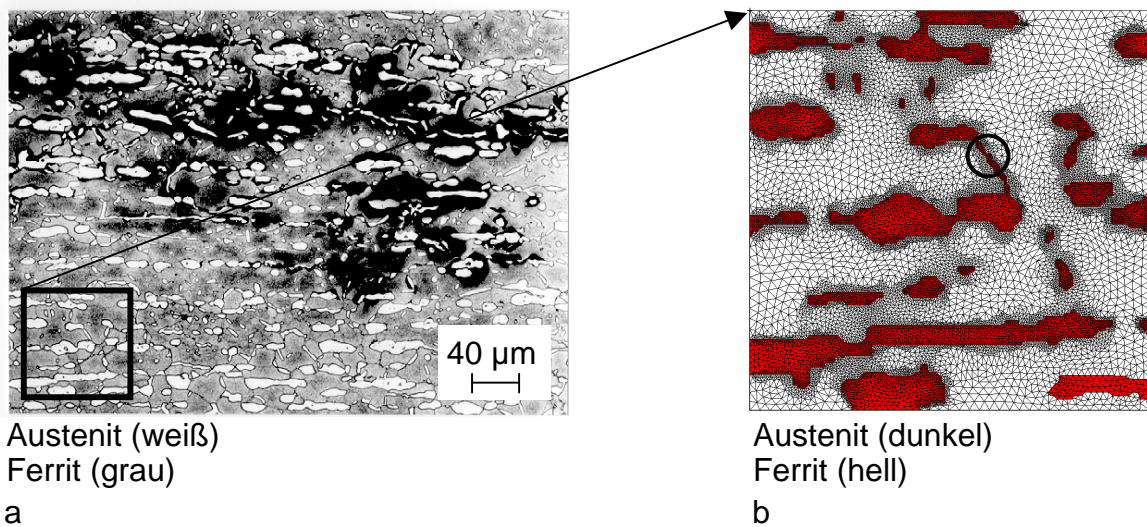


HMI = Hahn-Meitner-Institut, Berlin

**Bild 3.15:** Vergleich von Rechnung und Experiment /Ree/. Phasenspezifische Eigenstressungen: (a) kugelförmige Einheitszelle ( $a/b = 1$ ), (b-d) ellipsoidförmige Einheitszellen mit Achsenverhältnis (b)  $a/b = 4$ , (c)  $a/b = 6$  und (d)  $a/b = 8$ , bei (d) mit Neigungswinkel  $20^\circ$  gegenüber Zugrichtung.

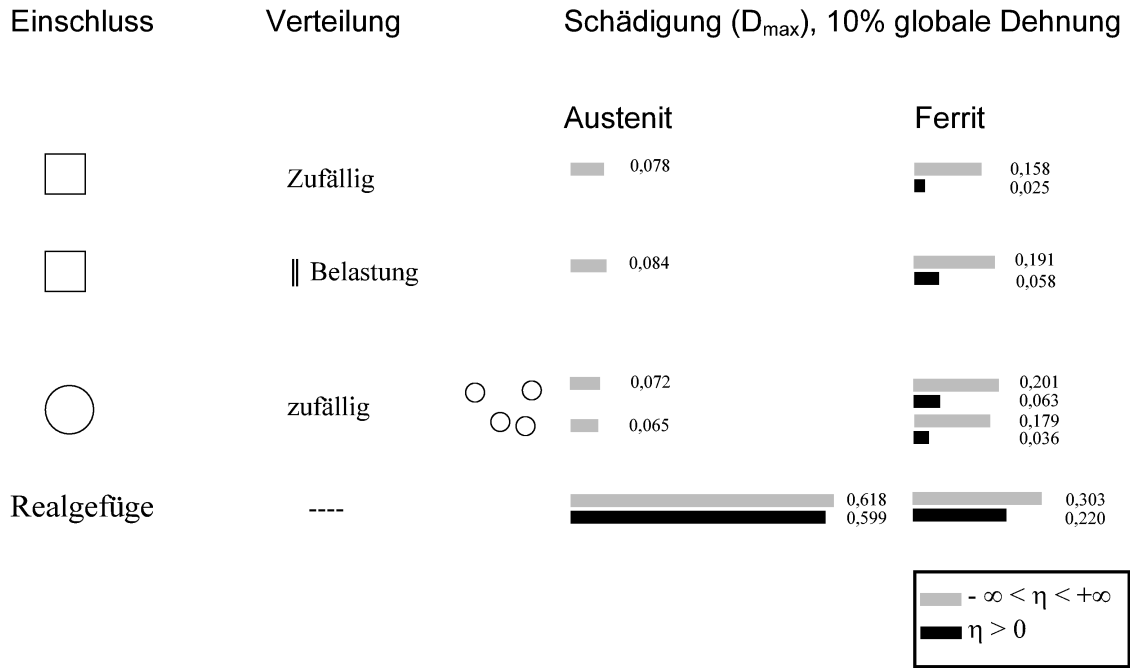
### 3.2.4 Untersuchungen an einem Duplexstahl

Abschließend wird die Anwendung des Damage-Parameters  $D$  auf den austenitisch-ferritischen Zweiphasenstahl (Duplexstahl, X3CrNiMoCu26-6) ausgedehnt. Im Gegensatz zu den bisher untersuchten zweiphasigen Metall/Keramik-Verbundwerkstoffen besteht der Duplexstahl nicht nur aus einer sondern aus zwei duktilen Hauptphasenbestandteilen mit u. U. sehr unterschiedlichem Fließverhalten (vergl. Bild 3.6), wobei im Allgemeinen der Anteil der ferritischen Phase über dem Anteil der austenischen Phase liegt. In **Bild 3.16** ist ein Duplex-Mikrogefüge mit 70 vol.% Ferrit (grau) und 30 vol.% Austenit (weiß) und die ausschnittsweise Vernetzung ( $100\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$ ) des Gefüges



**Bild 3.16:** Austenitisch-ferritisches Duplex-Realgefüge (X3CrNiMoCu26-6) mit 30vol.% Austenit, Gefügausschnitt (a) und Vernetzung (b). (Maximum des D-Parameters für die austenitische Phase ist mit  $\bigcirc$  markiert).

dargestellt. Neben dem Realgefüge werden auswahlweise die künstlichen Gefüge aus den Untersuchungen am Al/SiC-Verbundwerkstoff eingesetzt, wobei hier austenitische Einschlüsse in einer ferritischen Phase eingebettet sind. Testrechnungen haben gezeigt, dass selbst am Realgefüge wegen der ähnlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten beider Phasen (vergl. Tabelle 3.1) die rein thermische Belastung nur einen geringen Beitrag zum Damage-Parameter leistet. Aus diesem Grund werden die folgenden Berechnungen ohne thermischen Belastungsschritt rein mechanisch entsprechend den Randbedingungen aus Bild 3.3 durchgeführt. In **Tabelle 3.3** ist der im Gefüge maximal auftretende Damage-Parameter  $D_{\text{max}}$  für ausgewählte künstliche Gefüge und für das Realgefüge jeweils für die austenitische und ferritische Phase zusammengestellt (**Anhang A2**, Bild A2.5 zeigt die dazugehörigen Verteilungen des D-Parameters). Im Gegensatz zum Metall/Keramik-Verbundwerkstoff (siehe Tabelle 3.2) reagiert beim Du-



**Tabelle 3.3:** Einfluss der Einschlussform und -verteilung auf den Damage-Parameter  $D_{max}$ , Vergleich künstlicher Gefüge mit dem Realgefüge aus Bild 3.16.

plexstahl der  $D_{max}$ -Parameter in den künstlichen Gefügen weniger empfindlich auf die Form und Verteilung der Einschlüsse. Dies trifft sowohl für die austenitische als auch für die ferritische Phase zu. Insgesamt ist die Verteilung des D-Parameters in den beiden duktilen Phasen des Duplexstahls gleichmäßiger als in der Matrix des Metall/Keramik-Verbundwerkstoffs, während im MMC die nicht-duktilen, rein elastischen keramischen Phase örtlich den D-Parameter in der duktilen Matrix beeinflusst. Vergleicht man die künstlichen Gefüge mit dem Realgefüge, so ist der Zuwachs des  $D_{max}$ -Wertes bei zunehmender äußerer Belastung in der austenitischen Phase deutlich ausgeprägter als in der ferritischen Phase, wo der Anstieg des  $D_{max}$ -Parameters beim Übergang vom künstlichen Gefüge zum Realgefüge weniger deutlich ausfällt (hellgraue Balken in Tabelle 3.3). Die Ursache für dieses Verhalten sind lokaler Art. Der Versagensort der austenitischen Phase liegt in dem stegartigen, in Bild 3.16b markierten Bereich, in dem lokal hohe Mehrachsigkeiten auftreten, die zu dem erhöhten  $D_{max}$ -Wert führen (siehe auch Anhang A2, Bild A2.5).

Wird der Wertebereich der Mehrachsigkeit  $\eta$ , der zur Schädigung beiträgt, auf positive Werte beschränkt (dargestellt durch die schwarzen Balken in Tabelle 3.3), so tritt in der austenitischen Phase der künstlichen Gefüge während der Druckverformung keine Schädigung auf und im Realgefüge ist kaum eine Änderung des  $D_{max}$ -Wertes für die austenitische Phase feststellbar. In der ferritischen Phase stellt sich bei den künstlichen Gefügen eine deutliche Verringerung des  $D_{max}$ -Wertes ein, wenn nur positive Werte der

Mehrachsigkeit  $\eta$  zum D-Parameterzuwachs beitragen. Die Abnahme des maximalen D-Wertes in der ferritischen Phase des Realgefüges fällt gegenüber der austenitischen Phase deutlicher aus. Diese Ergebnisse zeigen, dass sowohl in der austenitischen als auch in der ferritischen Phase am Ort der maximalen Schädigung während der Druckverformung der künstlichen Gefüge (vergl. Randbedingungen in Bild 3.3) fast ausschließlich negative hydrostatische Spannungszustände vorliegen. Im Falle der Realgefüge kann für beide Phasen im Duplexstahl festgestellt werden, dass der  $D_{\max}$ -Parameter wesentlich von positiven Mehrachsigkeiten  $\eta$  und weniger von der plastischen Verformung an der Stelle maximaler Schädigung ( $D = D_{\max}$ ) beeinflusst wird.

Die Ergebnisse der zufällig verteilten, runden Einschlüsse ohne und mit Clusteranteil zeigen, dass der D-Parameterwert nur gering von den Teilchenabständen beeinflusst wird und sowohl die austenitische als auch die ferritische Phase sehr viel weniger empfindlich auf Teilchenclusterungen reagiert als der Metall/Keramik-Verbundwerkstoff (vergl. Tabelle 3.2, Balken für mechanisch/thermische Belastung). Im Gegensatz zum Metall/Keramik-Verbundwerkstoff führt die beim Duplex-Werkstoff eingestellte Teilchenclusterung vielmehr zu einer Abnahme des  $D_{\max}$ -Wertes (Teilbild AA+AB, Bild A2.5, Anhang A2). Bei der Umpositionierung der beiden in Teilbild AA markierten, runden Einschlüsse 1+2 variiert der Ort der maximalen Schädigung und befindet sich nicht im Bereich der Teilchenclusterung. Zu Beginn und während der mechanischen Belastung liegen in den austenitischen Phasen der künstlichen Gefüge ausschließlich negative Mehrachsigkeiten  $\eta$  vor, so dass der  $D_{\max}$ -Wert in den künstlichen Gefügen sich generell auf einem niedrigen Niveau bewegt (vergl. Gl. (2.17) mit  $D \sim e^{\eta}$ ). So kann in Teilbild AA für den Austenit noch eine zweite Maximalstelle gefunden werden, was die Unempfindlichkeit der Teilchenanordnung auf den  $D_{\max}$ -Wert in der austenitischen Phase unterstreicht. Hinsichtlich der Ferritphase wird speziell durch das Verschieben des Teilchens 2 in Teilbild AA das Scherband und die Entwicklung der plastischen Dehnung an der zuvor ausgewiesenen Maximalstelle reduziert und ein Ortswechsel der  $D_{\max}$ -Position in der Ferritphase hervorgerufen (Teilbild AB, Bild A2.5, Anhang A2). Unter Abwesenheit von Einschluss 3 wäre die in Teilbild AB ausgewiesene  $D_{\max}$ -Position im Ferrit bereits in Teilbild AA als Ort des maximalen D-Wertes aufgetreten.

Insgesamt sind beim Duplexstahl X3CrNiMoCu26-6 wie auch beim Metall/Keramik-Verbundwerkstoff Al/10vol.%SiC die Realgefüge gegenüber den künstlichen Gefügen schädigungsanfälliger. Somit ist gezeigt, dass auch bei zweiphasig-duktilen Werkstoffen das mikrostrukturelle Schädigungsverhalten durch Gefügeoptimierung positiv beeinflussbar ist. Beim hier untersuchten Duplexstahl könnte dies durch gleichmäßig im Ferritgefüge verteilte Austeniteinschlüsse erreicht werden.

## **4 Werkstoffe mit Durchdringungsgefüge**

### **4.1 Einführung**

Metall/Keramik-Verbundwerkstoffe spielen eine wichtige Rolle u. a. im Maschinenbau, der Elektrotechnik und bei einer Vielzahl von Spezialanwendungen /Zhan/. Unterschiedliche Anforderungen an den Werkstoff, wie z. B. hohe Duktilität bei gleichzeitiger hoher Wärmebeständigkeit führte zu der Entwicklung von Gradientenwerkstoffen, bei denen sich die ortsabhängigen Werkstoffeigenschaften nach der Funktionalität des Bauteils richten, wodurch sich auch der Begriff „Functionally Gradient Materials (FGM)“ etabliert hat. Die Entwicklung von Metall/Keramik-Gradientenwerkstoffen wurde in der Vergangenheit insbesondere in Japan vorangetrieben /Mura/.

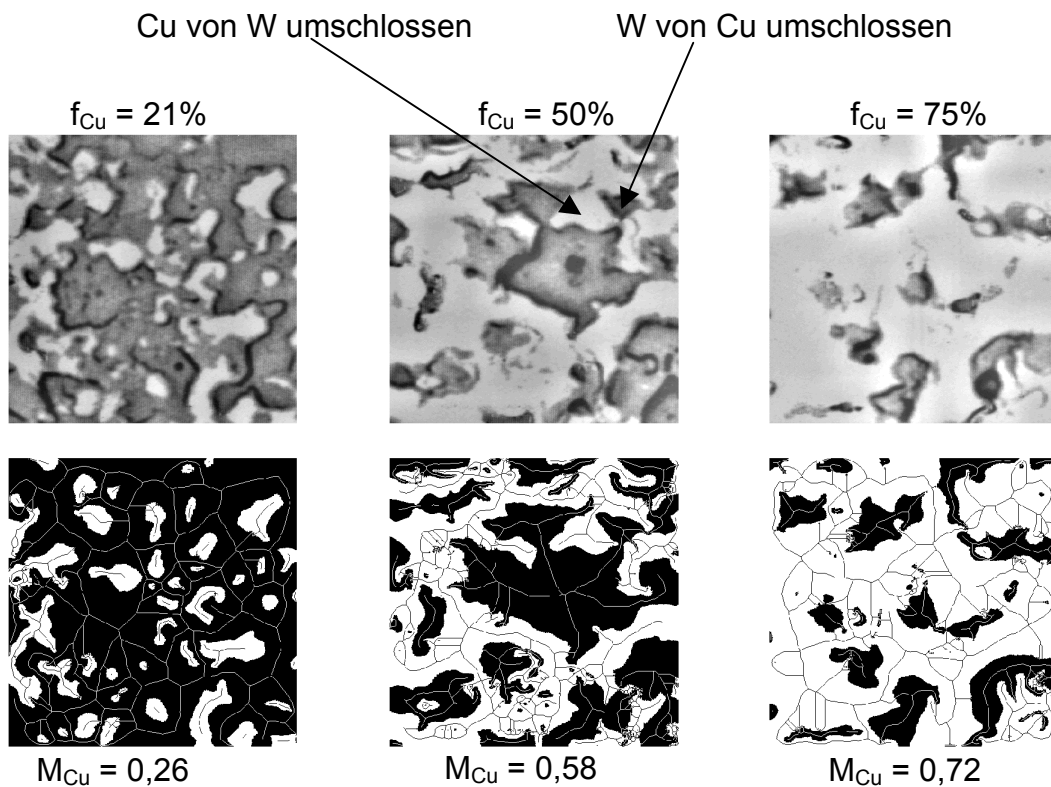
FGM werden durch unterschiedliche physikalische oder chemische Verfahren hergestellt /Sasa/. Die Herstellung auf pulvermetallurgischem Wege ist dabei am meisten verbreitet, da bei diesem Verfahren über eine geeignete Mischung von Metall- und Keramikpulvern durch Sedimentation in Flüssigkeiten oder durch trockene Pulvermischung fast jede beliebige Gefügezusammensetzungen möglich ist. So wird z. B. in /Pora/ ein druckloses Sinterverfahren mit Hilfe von Mikrowellen als Heizquelle vorgestellt. Das meist zweiphasige Gefüge von Gradientenwerkstoffen besitzt in der Regel eine Struktur, die als Einschluss- bzw. Durchdringungsgefüge charakterisiert ist /Sop1/, letztere insbesondere dann, wenn eine der beiden Phasen einen Volumenanteil von 30 % erreicht /Mura/. Zur numerischen Beschreibung von Durchdringungsgefügen wurde in Kap. 2.4.3 das Matrizitätsmodell als Erweiterung des selbstkonsistenten Einheitszellmodells vorgestellt.

### **4.2 Anwendung und Ergebnisse**

#### **4.2.1 Der Verbundwerkstoff W/Cu**

Als erste Anwendung des Matrizitätsmodells wird das thermo-mechanische Verhalten des Verbundwerkstoffs W/Cu untersucht. Dies beinhaltet sowohl die Ermittlung des elastischen als auch des elastisch-plastischen Werkstoffverhaltens als auch die Bestimmung des Wärmeausdehnungskoeffizienten. Bei diesem Verbundwerkstoff werden die hohe Festigkeit von Wolfram und die gute elektrische Leitfähigkeit von Kupfer mit-

einander verknüpf. Der Werkstoff wird u. a. in der Elektrotechnik eingesetzt, wo zusätzlich hohe mechanische Beanspruchungen auftreten. Zur Bestimmung des zusätzlich definierten Gefügeparameters Matrizität sind in **Bild 4.1** für ausgewählte Gefügezusammensetzungen die Mikrostruktur und das Skelettlinienbild zusammengestellt. Im mittleren oberen Teilbild ist der für Durchdringungsgefüge charakteristische Gefügebau zu erkennen, bei dem die Phasen sich gegenseitig umschließen. Das linke bzw.

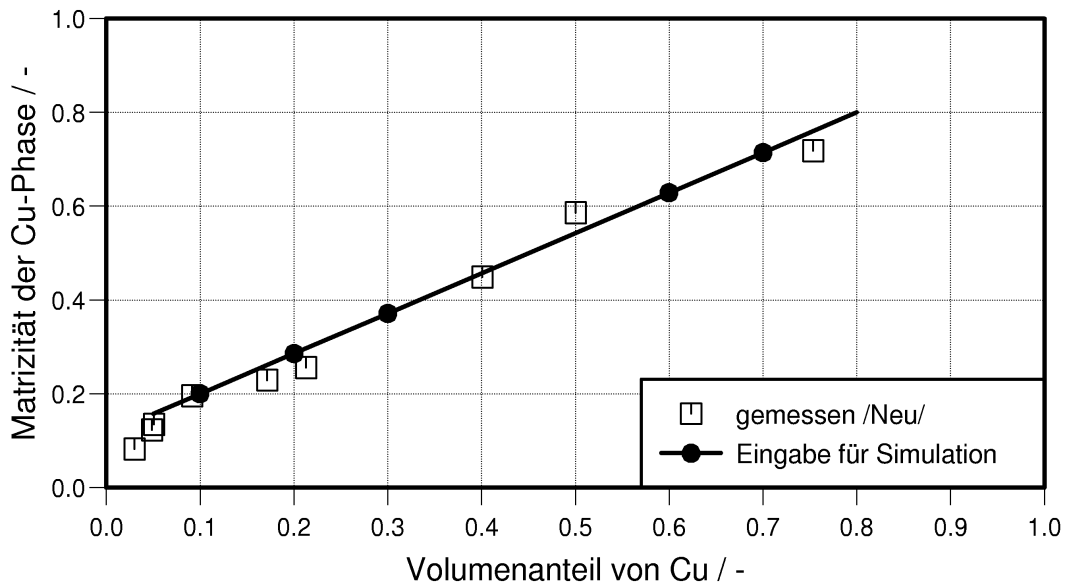


**Bild 4.1:** Mikrostruktur eines W/Cu-Verbundwerkstoffs mit unterschiedlichen Volumenanteilen von Cu ( $f_{Cu}$ ) und unterschiedlichen Werten von Matrizität der Cu-Phase ( $M_{Cu}$ ).

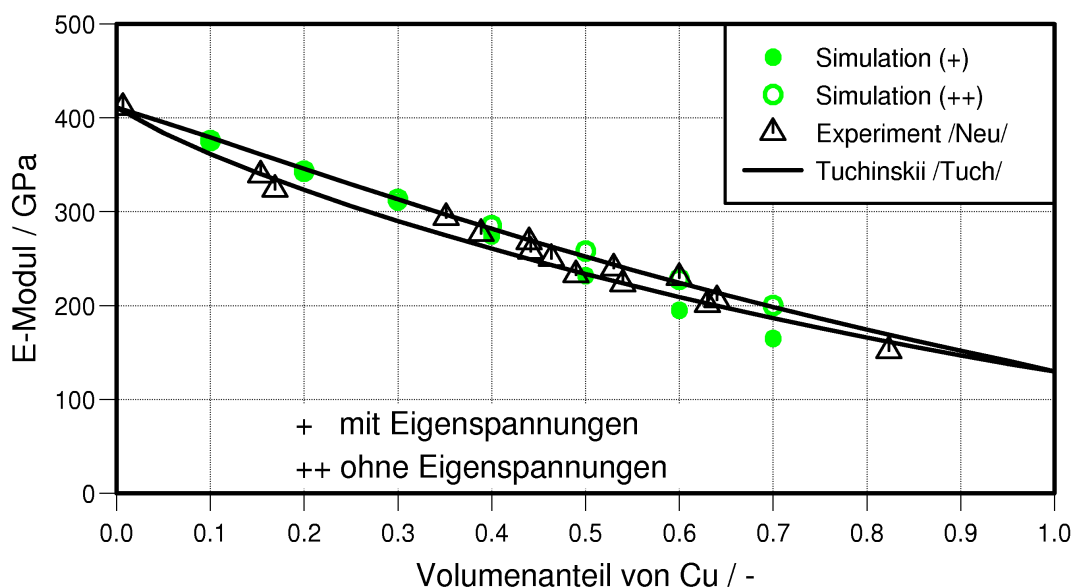
Oben: Gefügebilder (dunkel: W-Phase, hell: Cu-Phase)

Unten: Binärbilder mit Skelettlinien

rechte obere Teilbild zeigen Gefügebauausschnitte mit hohem Volumenanteil einer Phase und deren jeweiliger Matrixcharakter wird deutlich. Dies wird auch durch den Wert der Matrizität ausgedrückt (geringe Matrizität der Kupferphase ( $M_{Cu}$ ) bedeutet hohe Matrizität der Wolfram-Phase (vergl. Gl. (2.24) in Kap. 2.4.3). Des Weiteren fällt auf, dass der Wert der Matrizität einer Phase in der jeweiligen Größenordnung von dessen Volumenanteil liegt. In **Bild 4.2** ist der Matrixcharakter der Cu-Phase über dem Cu-Volumenanteil aufgetragen und man erkennt den nahezu linearen Zusammenhang beider Größen.



**Bild 4.2:** Der aus dem Mikrogefüge abgeleitete Matrixcharakter der Cu-Phase in Abhängigkeit des Cu-Volumenanteils für den Verbundwerkstoff W/Cu.



**Bild 4.3:** Vergleich Simulation und Experiment /Neu/: Elastizitätsmodul in Abhängigkeit des Cu-Volumenanteils für den Verbundwerkstoff W/Cu. Rechnung mit und ohne Eigenspannungen. Gegenüberstellung des analytischen Modells von Tuchinskii /Tuch/.

In der Ermittlung der mechanisch-technologischen Kennwerte für Verbundwerkstoffe mit Durchdringungsgefüge liegt die wesentliche Anwendung des Matrixitätsmodells. In **Bild 4.3** ist der Elastizitätsmodul des Verbundwerkstoffs W/Cu über dem Cu-Volumenanteil dargestellt. Bei der Simulation wurden Berechnungen mit und ohne Berücksichtigung von thermischen Eigenspannungen, die sich während des Herstellungsprozesses aufgrund der unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten der Einzelphasen auf-

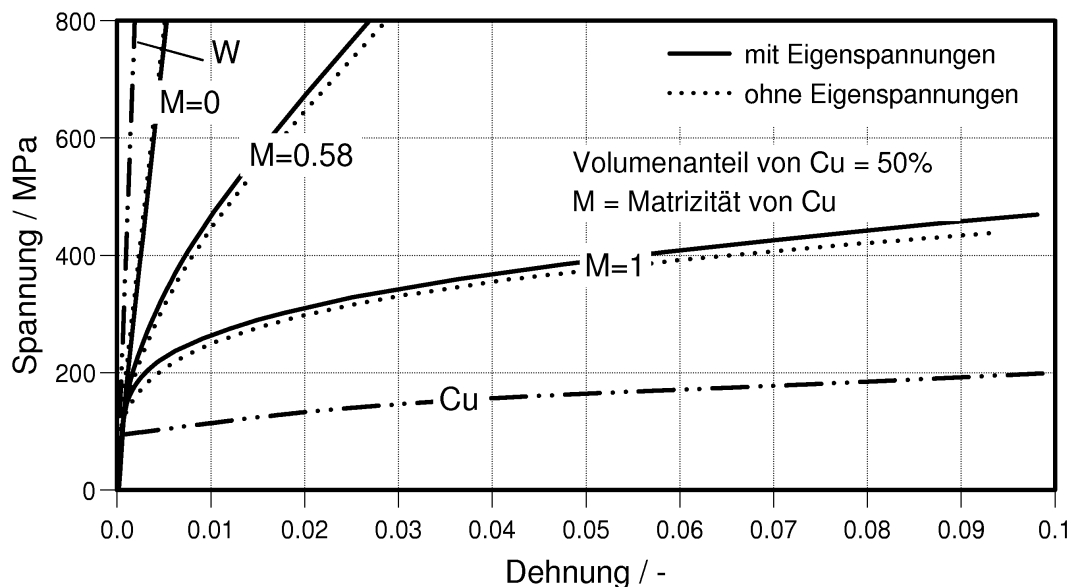
bauen, durchgeführt. Die experimentellen Daten werden durch die Simulation mit Eigenspannungen etwas besser beschrieben, der Einfluss von Eigenspannungen kann insgesamt aber als gering bezeichnet werden. Neben der numerischen Methode leitet /Tuch/ aus geometrischen Betrachtungen auch ein analytisches Modell zur Ermittlung von Elastizitätskonstanten von Verbundwerkstoffen ab. Über folgende Beziehungen werden eine untere und obere Grenzkurve definiert mit  $E_i$  = E-Modul von Phase  $i$ ,  $f_i$  = Volumenanteil der Phase  $i$  ( $i = A, B; C$  = Verbundwerkstoff):

$$\frac{E_C}{E_A} = (1 - c^2) + \left(\frac{E_B}{E_A}\right)c^2 + \frac{2(E_B/E_A)c(1-c)}{c + (E_B/E_A)(1-c)} \quad \text{untere Grenzkurve} \quad (4.1)$$

$$\frac{E_C}{E_A} = \left[ \frac{1-c}{(1-c^2) + (E_B/E_A)c^2} + \frac{c}{(1-c)^2 + (E_B/E_A)(2-c)c} \right]^{-1} \quad \text{obere Grenzkurve}$$

$$f_B = (3 - 2c)c^2 \quad \text{Beziehung zwischen Volumenanteil und Geometriefaktor } c$$

Das Modell von /Tuch/ beschreibt analytisch den Elastizitätsmodell des W/Cu-Verbundwerkstoffs, wobei sowohl die experimentellen als auch die Simulationsergebnisse durch die beiden Grenzkurven des Modells eingegrenzt werden. Was dieses Modell nicht leisten kann, ist die Ermittlung der plastischen Werkstoffeigenschaften. In **Bild 4.4** ist wieder mit und ohne Berücksichtigung von Eigenspannungen das mit dem Matri- zitätsmodell numerisch ermittelte Werkstoffverhalten bei einem Cu-Gehalt von 50% dar-

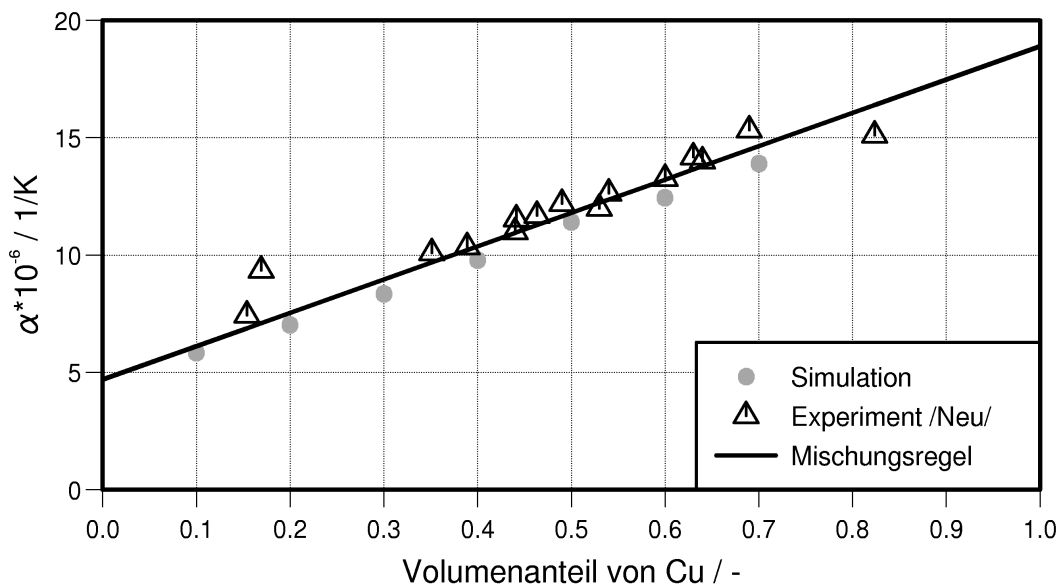


**Bild 4.4:** Elastisch-plastisches Werkstoffverhalten des Verbundwerkstoffs W/50vol.% Cu für unterschiedliche Matrixcharakter der Kupferphase ( $M_{Cu}$ ).

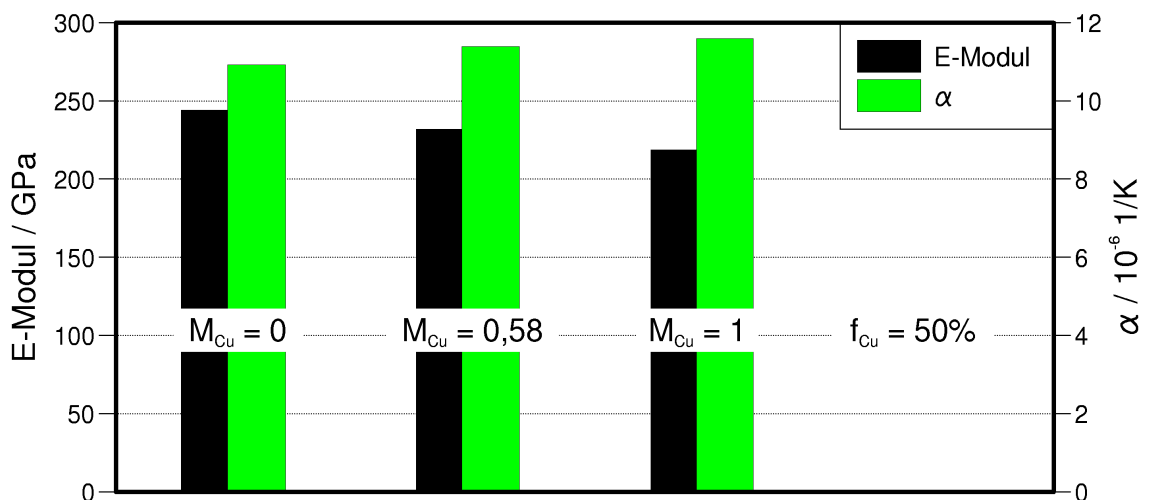


gestellt und der Einfluss der Eigenspannungen kann ebenfalls als gering bezeichnet werden. Vielmehr werden die Materialeigenschaften von dem Gefügeparameter Matrixität beeinflusst. Wird die Matrixität der Kupferphase mit  $M_{Cu} = 1$  vorgegeben (Kupfer ist die Matrixphase) so stellt sich, wie erwartet, ein kupferähnliches Werkstoffverhalten ein. Wird dagegen die Wolframphase als Matrix definiert ( $M_{Cu} = 0$  somit  $M_W = 1$ ) wird nahezu die Materialeigenschaft der Wolframphase erreicht. Die tatsächlich gemessene Matrixität ( $M_{Cu} = 0,58$  für  $f_{Cu} = 0,5$ , vergl. Bild 4.2) ergibt trotz des hohen Cu-Gehaltes von 50% einen Werkstoff mit relativ hoher Verfestigung.

Das hier angewendete Matrixitätsmodell ist auch in der Lage, die Wärmeausdehnungskoeffizienten von Verbundwerkstoffen zu ermitteln. Diese sind in **Bild 4.5** zusammen



**Bild 4.5:** Vergleich zwischen Simulation und Experiment /Neu/: Wärmeausdehnungskoeffizient  $\alpha$  des Verbundwerkstoffs W/Cu in Abhängigkeit des Cu-Volumenanteils.

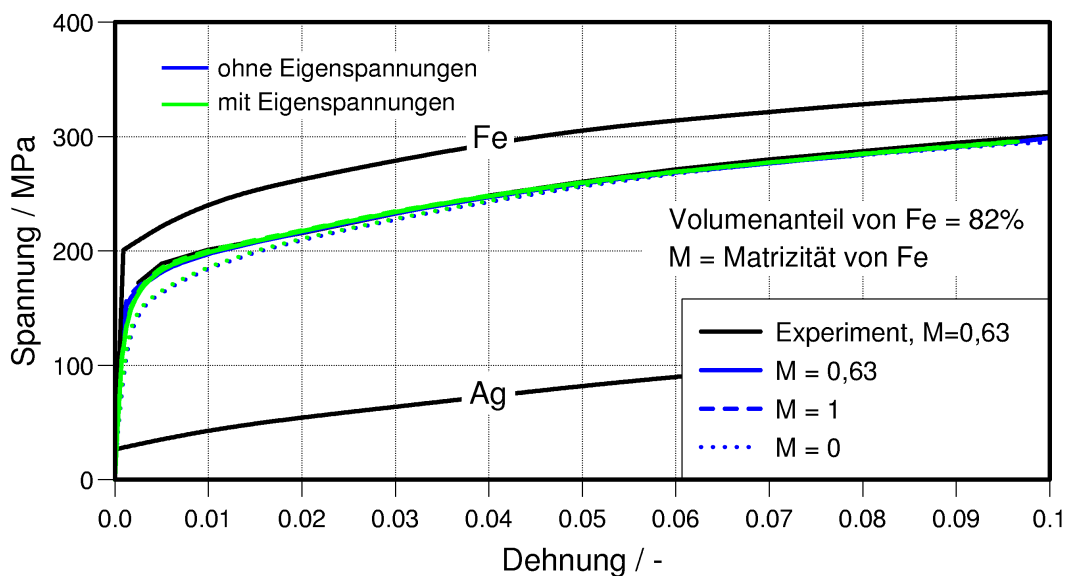


**Bild 4.6:** Einfluss der Matrixität der Kupferphase ( $M_{Cu}$ ) auf den E-Modul und auf den Wärmeausdehnungskoeffizienten  $\alpha$  des Verbundwerkstoffes W/50vol.%Cu.

mit experimentell ermittelten Daten zusammengestellt. Die gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment kann aber auch unter Anwendung einer einfachen Mischungsregel erzielt werden, die ebenfalls über das gesamte Volumenspektrum und somit auch für unterschiedliche Matrixcharakter den Wärmeausdehnungskoeffizienten  $\alpha$  sehr gut abbildet. Da in der Mischungsregel der Matrixcharakter aber keine Berücksichtigung findet, wird der  $\alpha$ -Wert nur sehr gering vom Gefügeparameter Matrizität beeinflusst. Dies ist in **Bild 4.6** dokumentiert. Etwas deutlicher fällt der Einfluss des Matrixcharakters auf den E-Modul des Verbundwerkstoffes W/50vol.%Cu aus. Insgesamt beeinflusst der Gefügeparameter Matrizität im Wesentlichen das plastische Werkstoffverhalten von Verbundwerkstoffen mit keramischer Phase.

#### 4.2.2 Der Verbundwerkstoff 82vol.%Fe/Ag

Das Matrizitätsmodell wird im Folgenden dazu verwendet, um das mechanische Verhalten eines Fe(82%)/Ag-Verbundwerkstoffs zu berechnen. Im Gegensatz zum Verbundwerkstoff W/Cu besteht dieser Werkstoff aus zwei duktilen Phasen. Der Matrixcharakter für diesen Verbundwerkstoff wurde mit  $M_{Fe} = 0,63$  ermittelt /Leß1/. In **Bild 4.7** werden die berechneten Spannungs-Dehnungskurven mit der experimentell ermittelten Kurve aus /Born/ verglichen. Neben der guten Übereinstimmung mit dem Experiment fällt auf, dass sowohl die Berücksichtigung von Eigenspannungen als auch der Matrixcharakter bei der Anwendung einer axialsymmetrischen Anwendung des Matrizitätsmodells keinen wesentlichen Einfluss auf das Materialverhalten des Verbundwerkstoffes 82vol.%



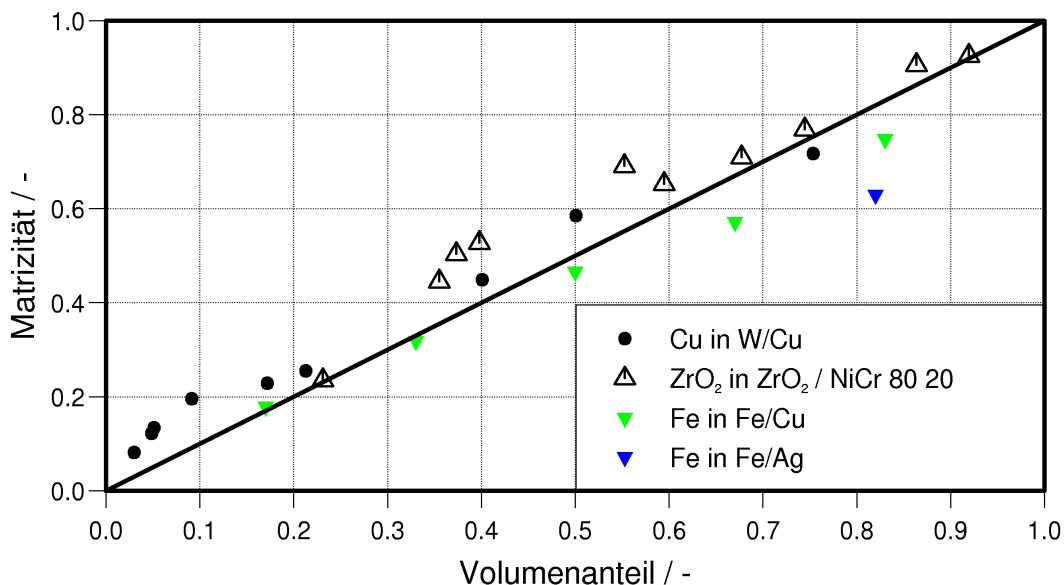
**Bild 4.7:** Vergleich Simulation mit Experiment: Spannungs-Dehnungs-Kurven eines 82vol.%Fe/Ag Verbundwerkstoffes für unterschiedliche Matrixcharakter der Eisenphase ( $M_{Fe}$ ).

Fe/Ag ausüben. Der Gefügeparameter Matrixität ist somit im Wesentlichen bei Durchdringungsgefügen von Metall-Keramik-Verbundwerkstoffen zu berücksichtigen.

In den bisherigen Berechnungen der Materialeigenschaften von Verbundwerkstoffen ist das Versagen der Einzelphasen nicht berücksichtigt worden. Vor allem bei Metall/Keramik-Verbundwerkstoffen kann bei hohen Verformungen die Keramikphase versagen oder bestimmte Einsatzgebiete des Verbundwerkstoffes lassen es nicht zu, dass die duktile Phase sich plastisch verformt. In /Willer/ wurde deswegen für das Matrixitätsmodell ein Abbruchkriterium definiert und auf den Werkstoff Al/TiO<sub>2</sub> angewendet. Dieses vereinfachte und meist konservative Abbruchkriterium wurde in dieser Arbeit weiterentwickelt.

### 4.2.3 Der Verbundwerkstoff Al/TiO<sub>2</sub>

In einem dritten Anwendungsfall wird das Matrixitätsmodell zu Beschreibung der mechanischen Eigenschaften eines Al/Keramik-Verbundwerkstoffs herangezogen. Für die Matrixität wurde in /Willer/ der bereits beim Verbundwerkstoff W/Cu erkennbare lineare Zusammenhang zwischen Matrixcharakter und Volumenanteil einer Phase (vergl. Bild 4.2) angenommen mit der Eigenschaft  $f_{\alpha} = M_{\alpha}$ . Wie **Bild 4.8** zeigt, kann diese Annahme in erster Näherung getroffen werden. Für die in Bild 4.8 dargestellten Verbundwerkstoffe kann die Abweichung von der angenommenen Geraden  $f = M$  als gering bezeichnet werden.



**Bild 4.8:** Zusammenhang zwischen dem Matrixcharakter M und dem Volumenanteil einer Phase für unterschiedliche Verbundwerkstoffe mit Durchdringungsgefüge.

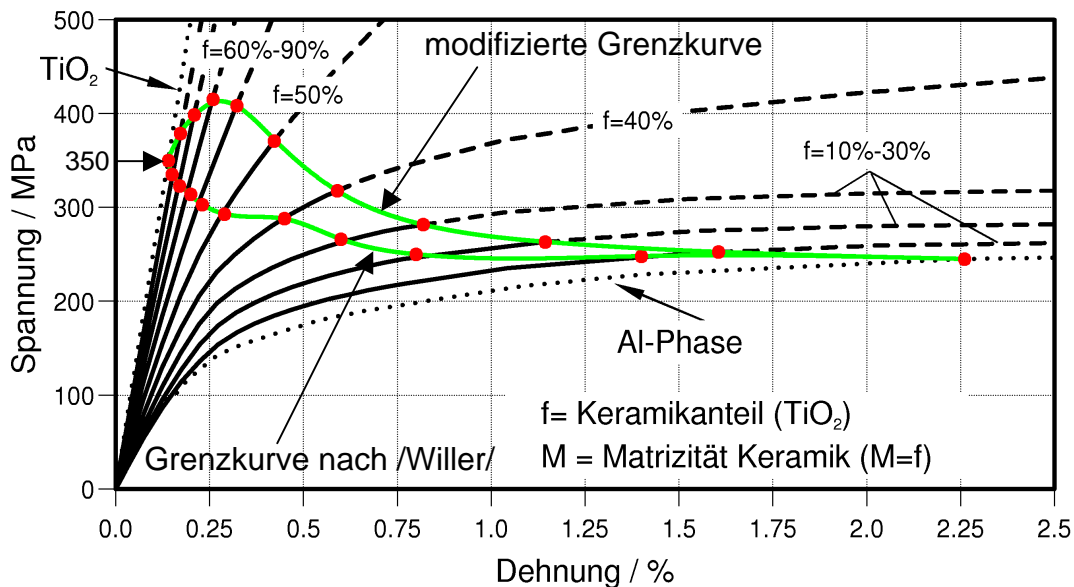
Bei der Suche nach einem Abbruchkriterium der berechneten Fließkurve stellt sich die Frage, welche Größe für das Gefügeversagen verantwortlich ist. Die Antwort gibt das mechanische Verhalten der keramischen und der metallischen Phase. Da keramische Bestandteile meist spröde und die metallischen Bestandteile meist duktile Eigenschaften aufweisen, kommen für das Durchdringungsgefüge zunächst zwei Versagenshypothesen in Frage: Für die spröden Werkstoffanteile ist dies die Normalspannungshypothese (NH) und für die zähen Werkstoffanteile ist dies die Gestaltänderungsenergiehypothese (GEH). Nach der NH ist für die Beanspruchung des Werkstoffs allein die betragsmäßig größte Normalspannung maßgebend. Der Versagensfall tritt bei statischer Beanspruchung ein sobald  $\sigma_1$  die Zugfestigkeit  $R_m$  bzw.  $\sigma_3$  die Druckfestigkeit  $\sigma_{dB}$  erreicht.

Bei duktilen Werkstoffen ist für die Werkstoffbeanspruchung allein die in einem elastisch verformten Körperelement gespeicherte Gestaltänderungsenergie maßgebend. Sobald diese einen werkstoffspezifischen Grenzwert erreicht, der aus einachsigen Zugversuchen ermittelt wird, versagt der Werkstoff unter plastischer Verformung. Der Wert der Gestaltänderungsenergie wird auch als von Mises-Vergleichsspannung  $\sigma_v$  bezeichnet mit

$$\sigma_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2} \quad (4.2)$$

Der Werkstoff wird plastisch, wenn  $\sigma_v$  den Wert der Streckgrenze ( $R_e$ ) erreicht oder überschreitet.

Als Versagensgrenze für die keramische Phase ( $TiO_2$ ) wird die Zugfestigkeit von 350 MPa festgelegt. Die Spannung wurde in /Willer/ auf der  $TiO_2$ -Werkstoffkurve als erster Fixpunkt definiert (**Bild 4.9**). Bei der Berechnung der Fließkurven in /Willer/ wurde die Belastung so lange gesteigert, bis in der Keramikphase eine mittlere Spannung von 350 MPa erreicht wurde. Für diesen Lastschritt wurde wiederum eine gemittelte Vergleichsspannung in der Al-Phase bestimmt und auf der Al-Werkstoffkurve markiert. Diese lag mit wenigen Ausnahmen unterhalb der Streckgrenze der Al-Phase. Durch Verbinden des keramischen Fixpunktes mit dem Punkt auf der Al-Phasenwerkstoffkurve wurde der Schnittpunkt mit der entsprechenden numerisch bestimmten Fließkurve des Verbundwerkstoffes gefunden. Dieser Schnittpunkt wurde in /Willer/ als obere Grenze der Fließkurve definiert. In dieser Arbeit wird eine andere Vorgehensweise gewählt. Im Gegensatz zu /Willer/ werden hier während der Belastung der selbstkonsistenten Einheitszelle auch in der Keramikphase die gemittelten Eigenspannungen berechnet und daraus die



**Bild 4.9:** Abbruchkriterium nach /Willer/ und ein modifiziertes Abbruchkriterium zur Ermittlung der Versagensgrenze des Verbundwerkstoffs Al/TiO<sub>2</sub>.

größte Hauptspannung ermittelt. Der vorgeschaltete thermische Lastfall zur Simulation des Herstellungsprozesses führt zu Druckeigenspannungen in der Keramikphase. Diese müssen erst durch die Lastspannungen kompensiert werden, so dass der für die Keramikphase kritische Wert von 350 MPa im Vergleich zu /Willer/ erst später erreicht wird. Vor allem für hohe Keramikanteile kann das Versagenskriterium somit zu deutlich höheren Spannungen verschoben werden. Für geringe Keramikanteile verschiebt sich dagegen das Versagenskriterium zu höheren Dehnungen. In Bild 4.9 ist dieser Sachverhalt dargestellt.

Über das in dieser Arbeit modifizierte Abbruchkriterium wird wegen der Berücksichtigung von herstellungsbedingten (thermischen) Druckeigenspannungen in der Keramikphase eine realitätsnähere Begrenzung der Spannungs-Dehnungskurve ermittelt, welche vor allem bei hohen Keramikanteilen gegenüber dem Willer-Kriterium /Willer/ deutlich höher Lastspannungen zulässt und somit den Werkstoff besser ausschöpft.

Das in dieser Arbeit modifizierte Abbruchkriterium ist vor allem dann vorzuziehen, wenn in der Keramikphase aufgrund thermischer Vorbelastung (z. B. Aufheizen des Verbundwerkstoffs) Zugspannungen vorliegen. Dann verliert die in /Willer/ vorgestellte Vorgehensweise ihre Konservativität, da durch zusätzliche Lastspannungen der kritische Wert von 350 MPa nun früher erreicht wird.

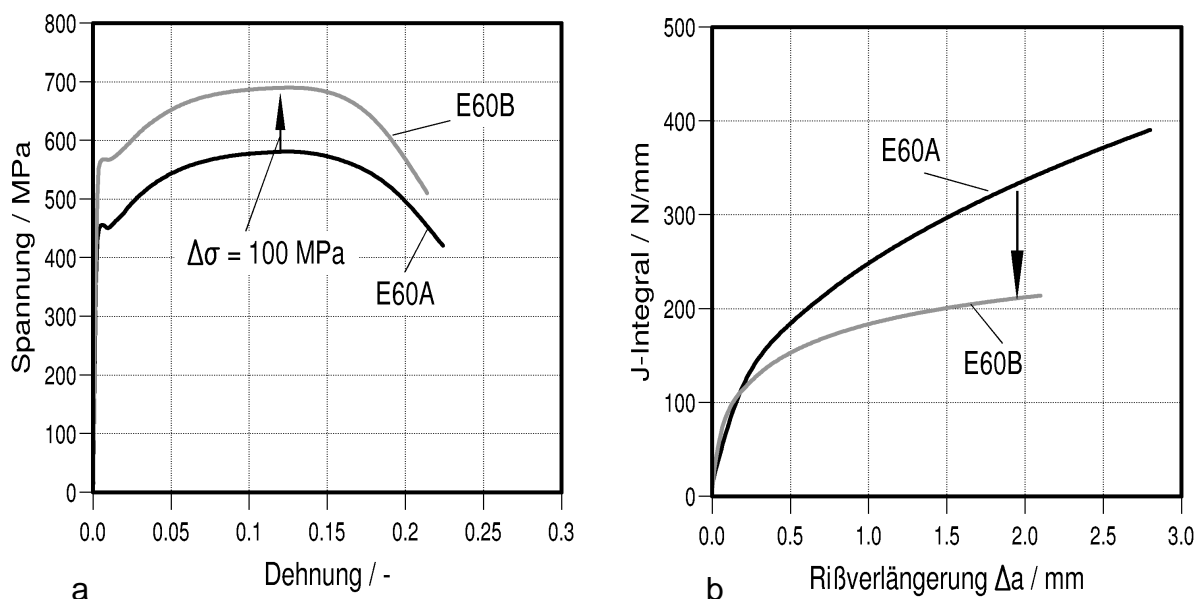
In /Absch1, Danz, Dong2, Leß2-Leß4, Schm5-Schm9/ sind die hier dargestellten Anwendungsfälle des Matrizitätsmodells ausführlich beschrieben bzw. Anwendungen auf weitere Verbundwerkstoffe mit Durchdringungsgefüge dokumentiert.

## 5 Werkstoffe mit Ausscheidungen und Teilchen

### 5.1 Problemstellung

Im Gegensatz zu den bisher vorgestellten Werkstoffen mit Einschluss- bzw. Durchdringungsgefüge, bei denen gezielt Teilchen einer zweiten Phase in das Gefüge eingebracht werden, sind in realen Werkstoffen bereits Teilchen vorhanden, die das Festigkeits- und Schädigungsverhalten des Materials ebenfalls positiv, in den meisten Fällen aber negativ, beeinflussen. Auch äußere Einflüsse, wie z. B. Temperatur, können durch Bildung von Ausscheidungen zu Veränderungen des Werkstoffverhaltens führen. Dies zu erfassen und zu modellieren ist Gegenstand dieses Kapitels.

Der in dieser Arbeit untersuchte kupferlegierte ferritische Stahl 15NiCuMoNb5 (WB36) wird in der Kraftwerkstechnik sowohl als Rohrleitungs- als auch als Behälterwerkstoff eingesetzt. Sein Vorteil gegenüber anderen niedriglegierten Werkstoffen liegt in seiner hohen Zähigkeit und seinen günstigen Festigkeitswerten, insbesondere auch bei hohen Temperaturen. Nach langzeitigem Betrieb (57000 h) bei Temperaturen zwischen 320 °C und 350 °C wird jedoch eine Erhöhung der Festigkeit und eine Abnahme der Zähigkeit festgestellt, was die Schadensanfälligkeit des Werkstoffs erhöht. In **Bild 5.1** ist dieses Werkstoffverhalten für den Ausgangszustand E60A und für den betriebsbeanspruchten Werkstoffzustand E60B dargestellt. Umfangreiche Gefügeuntersuchungen



**Bild 5.1:** Zunahme der Festigkeit (a) und Abnahme des Risswiderstandes (b) zwischen Ausgangszustand E60A und betriebsbeanspruchtem Zustand E60B.

weisen darauf hin, dass im vorliegenden Fall im Werkstoff WB36 Teilchen unterschiedlicher Größe für die Eigenschaftsänderungen verantwortlich sind. Dabei können die Teilchen hinsichtlich ihrer Größe in drei Klassen eingeteilt werden. Zur Behandlung der im Gefüge vorhandenen Cu-Ausscheidungen im nm-Bereich wird die Theorie nach Russell&Brown /RB/ aus Kap. 2.5.1 angewendet. Die vereinzelt im Gefüge vorkommenden Keramikeilchen ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) und deren Größeneinfluss auf die Festigkeit werden mit der MSG (Mechanism-based Strain Gradient) Plasticity-Theorie aus Kap. 2.5.2 /Gao, Hua1, Hua2/ untersucht. Als dritte Klasse sind die nichtmetallischen Einschlüsse zu nennen, die wegen ihrer Größe und ihrer Tendenz des Ablösens vom Grundwerkstoff zum duktilen Rissfortschritt beitragen können. Als schädigungsmechanischer Ansatz wird hierzu das Rousselier-Modell /Rous1/ herangezogen (vergl. Kap. 2.3.2). Im Wesentlichen handelt es sich dabei um Mangansulfid-Einschlüsse. **Tabelle 5.1** gibt eine Übersicht der Teilchen und die zur ihrer skalengerechten Beschreibung jeweils angewandte Methode.

Teilchenart	Größenskala ( $\varnothing$ -Mittelwerte)	Volumenanteil	Angewendete Theorie / Modell
Cu-Ausscheidungen	2 nm – 9 nm	< 0,8 %	Russell&Brown (schneidbare Teilchen)
Aluminiumoxid	1 $\mu\text{m}$ bis 15 $\mu\text{m}$	$\ll$ 1 %	MSG (Mechanism-based Strain Gradient)
Nichtmetallische MnS-Einschlüsse	1,2 $\mu\text{m}$ bis 100 $\mu\text{m}$	0,07 %	Rousselier (Schädigung)

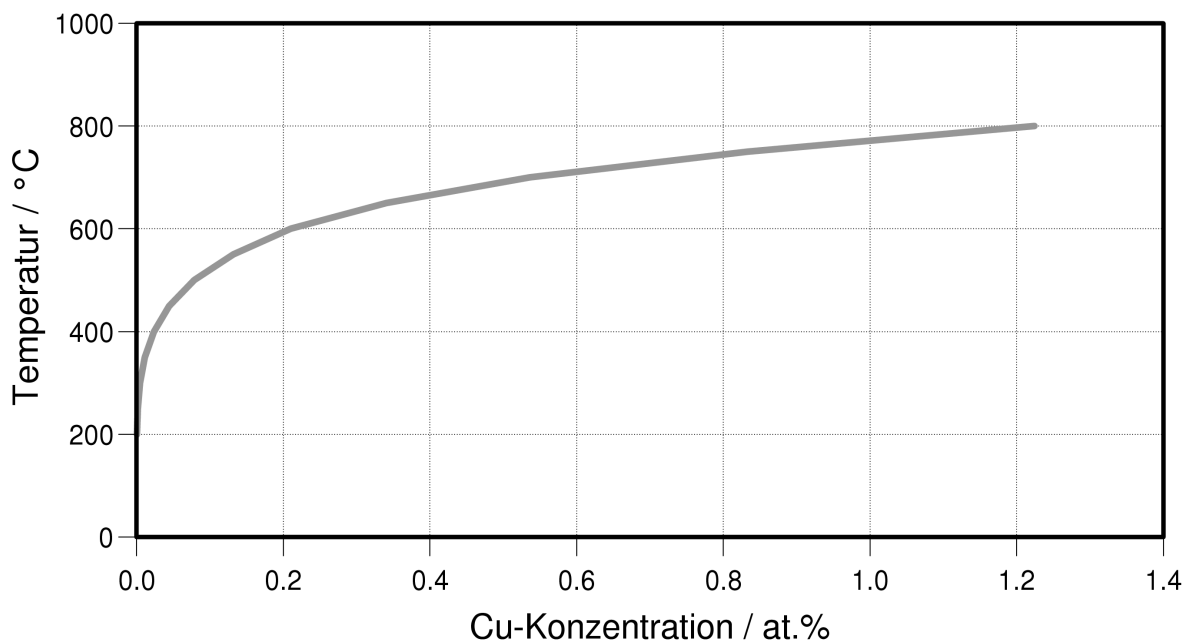
**Tabelle 5.1:** Anwendung verschiedener skalengerechter Modelle und Theorien auf die im Werkstoff WB36 enthaltenen Teilchenarten.

Soll der Einfluss von Teilchen auf das Festigkeitsverhalten von Werkstoffen untersucht werden, so sind, vor allem für Teilchen im nm-Bereich, leistungsfähige Analysesysteme erforderlich. In der Vergangenheit wurden zur Erfassung derartiger Teilchen TEM-Untersuchungen durchgeführt. Neuere Entwicklungen, wie die hier eingesetzte SANS-Technologie (Small Angle Neutron Scattering), haben eine größere Auflösung und können auch Teilchen im Größenbereich von 1 nm erfassen. Das Teilchengrößenspektrum wird somit besser berücksichtigt. In den folgenden Abschnitten wird untersucht, inwiefern die in Tabelle 5.1 zusammengestellten Theorien und Modelle analytischer bzw. numerischer Art die in Tabelle 5.1 zusammengestellten Teilchenarten beschreiben. Die durch deren Anwendung abgeleiteten Methoden und durchgeführten Modellverbesserungen werden ebenfalls dargestellt.

## 5.2 Zum Einfluss von Cu-Ausscheidungen im nm-Bereich

### 5.2.1 Allgemeines

In diesem Abschnitt soll ein Zusammenhang zwischen der eingetretenen Festigkeitssteigerung und dem Ausscheidungszustand kleiner Cu-Teilchen hergestellt werden. Dazu werden jeweils zwei hinsichtlich ihrer Ausscheidungspopulationen unterschiedliche Werkstoffzustände verglichen. Diese unterschiedlichen Ausscheidungszustände ergeben sich aus der temperaturabhängigen Löslichkeit von Kupfer in Eisen. Mit dem Programm Thermo-Calc /The/ können genauere Informationen über die Löslichkeit von Kupfer in  $\alpha$ -Eisen gewonnen werden /Zie/. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in **Bild 5.2** dargestellt. Es wird deutlich, dass bei RT nahezu keine Löslichkeit von Cu in

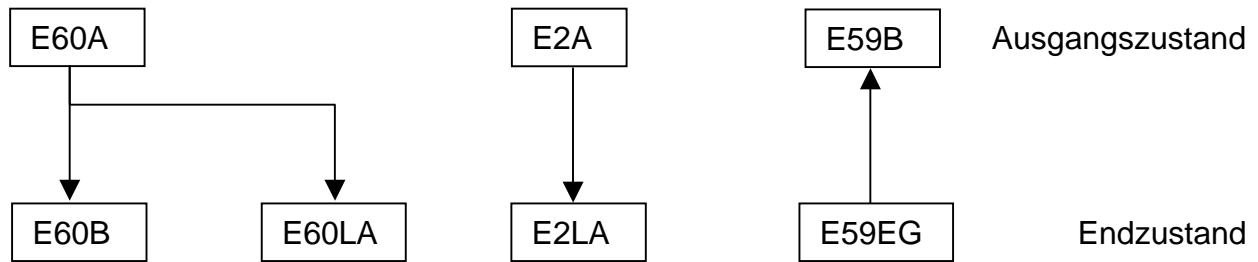


**Bild 5.2:** Mit dem Programm Thermo-Calc /The/ berechnete Löslichkeit von Cu in  $\alpha$ -Fe in Abhängigkeit von der Temperatur /Zie/.

$\alpha$ -Fe besteht und diese nur über gezielte Wärmebehandlung erzwungen werden kann. Dabei entstehen übersättigte Mischkristalle und die zwangsweise gelösten Cu-Atome werden je nach Umgebungsbedingungen (Temperatur) über einen kürzeren oder längeren Zeitraum in Form von feindispersen Teilchen wieder ausgeschieden. Dieser Vorgang wird als thermische Alterung bezeichnet und besitzt bei derart kupferlegierten Stählen wegen der Abnahme der Zähigkeit (Bild 5.1b) eine sicherheitsrelevante Bedeutung. Durch verschiedenartige Wärmebehandlungen wurden in /Will/ derartige Ausscheidungsvorgänge angeregt und Werkstoffzustände unterschiedlicher Festigkeiten



erzeugt. In **Bild 5.3** sind die jeweiligen Ausgangszustände und die durch Wärmebehandlung erzielten Endzustände zusammengestellt.



**Bild 5.3:** Untersuchte Werkstoffzustände und Werkstoffübergänge.

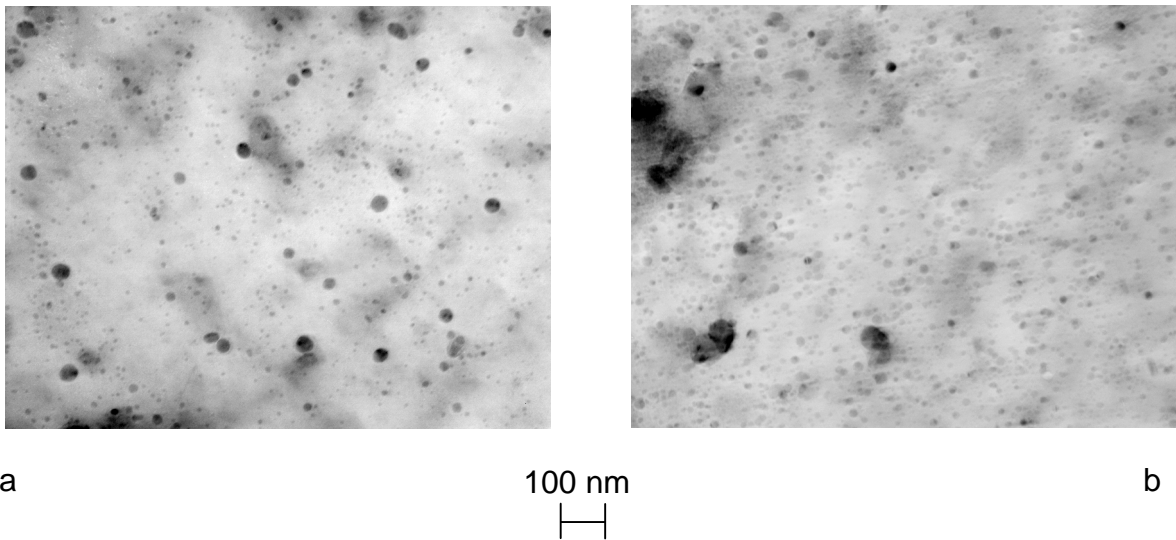
Der vergütete Ausgangszustand der Schmelze E60 (E60A) wird mit dem betriebsbeanspruchten Zustand (E60B, 57000 h bei 350 °C) und mit dem durch Langzeitauslagerung (400 °C, 19757 h) erzeugten Werkstoffzustand E60LA verglichen. Der Ausgangszustand der Schmelze E2 (E2A) wird dem, ebenfalls mittels einer Langzeitauslagerung (400 °C, 15500 h) erzeugten, Werkstoffzustand E2LA gegenübergestellt. Abschließend wird der Betriebszustand E59B mit dem durch eine Erholungsglühung (600 °C, 3 h) erzeugten Ausgangszustand E59EG verglichen. Bei dieser Temperatur stellt sich eine deutlich verbesserte Löslichkeit von Cu in  $\alpha$ -Eisen ein (Bild 5.2). Hinsichtlich der Kupferauscheidungen ist dieser Werkstoffübergang daher vom Endzustand hin zum Ausgangszustand zu betrachten, da wegen der im Zustand E59EG durchgeführten Erholungsglühung Kupferteilchen in Lösung gehen und somit im Endzustand (E59EG) gegenüber dem Ausgangszustand (E59B) weniger Teilchen ausgeschieden sind.

Bei derartigen Ausscheidungs Vorgängen entstehen in der Regel Teilchen unterschiedlicher Größe und unterschiedlicher Häufigkeit, zu deren Bestimmung mikrostrukturelle Untersuchungen oder Computersimulationen /Bink/ notwendig sind. Die aus den SANS-Messungen ermittelten Teilchenhäufigkeiten wurden über eine log. Verteilung angepasst und daraus der mittlere Teilchenradius bestimmt. Diese Teilchengröße ist für die im Folgenden angewandte Theorie neben dem Volumenanteil und dem Teilchenabstand ein maßgebender Parameter.

### 5.2.2 Anwendung und Ergebnisse

Die Russell&Brown-Theorie kann streng genommen nur für den Fall gleich großer, schneidbarer Ausscheidungen bei gleichen Abständen von Teilchen, die in der Ebene quadratisch angeordnet sind, angewendet werden. Dies ist ein gegenüber dem realen

Werkstoffgefüge idealisierter Zustand, denn sowohl die Teilchenradien als auch die Abstände zu den nächsten-Nachbar-Teilchen weisen eine Streuung auf. **Bild 5.4** zeigt TEM (Transmissionselektronenmikroskopie)-Aufnahmen /Pan, Schi/ der Kupferausscheidungen im untersuchten Stahl sowohl für den Ausgangszustand (Bild 5.4a) als auch im thermisch gealterten Zustand (Bild 5.4b). In beiden Fällen sind ungleichgroße Cu-Ausscheidungen mit unterschiedlichen Teilchenabständen erkennbar. Die Annah-



**Bild 5.4:** TEM-Aufnahme der Kupferausscheidungen im Werkstoff WB36 im Ausgangszustand (a) und im thermisch gealterten Zustand (b). Die Kupferausscheidungen sind als kleine dunkle Punkte erkennbar /Pan, Schi/.

men der Russell&Brown-Theorie (gleich große Teilchen und regelmäßiger Teilchenabstand) stellen eine Vereinfachung der Realität dar. Jedoch können Monte-Carlo-Simulationen /Bink/ zeitabhängige Radienverteilungen sowie zeitabhängig die räumliche Verteilung der Ausscheidungen zu Verfügung stellen. Des Weiteren werden in Zukunft u. a. mesoskopische Simulationsrechnungen die Fragen zur Ausscheidungsverfestigung beantworten. In Arbeiten von Mohles /Mohl1, Mohl2/ durchlaufen Versetzungen großflächige Anordnungen von behindernden Ausscheidungen mit unterschiedlichen Größen und Abständen. Das Ausmaß der Variation entspricht experimentellen Beobachtungen. Aus Untersuchungen der Dynamik der Versetzungsbewegung in solch einem komplexen Beispiel mit unterschiedlichsten Kombinationen von nicht schneidbaren Teilchen konnte gezeigt werden, dass bei einem Arrangement aus realistisch verteilten Ausscheidungen die Verfestigung gegenüber einer absolut homogenen Verteilung um etwa 10% abgesenkt wird /Mohl3/. Vergleichbare Berechnungen unter Annahme schneidbarer Teilchen stehen derzeit noch aus.

Die im Werkstoff WB36 experimentell festgestellte Festigkeitszunahme und die damit verbundene Abnahme der Werkstoffduktilität ist fast ausschließlich auf ausgeschiedene

Kupferteilchen zurückzuführen. In **Tabelle 5.2** sind die aus SANS-Messungen ermittelten Cu-Ausscheidungen und die dadurch hervorgerufene (experimentell ermittelte) Fes-

Werkstoffübergang (Bild 5.3)		Bereits vorhandene Cu-Teilchen in A	Zusätzlich neu ausgeschiedene Cu-Teilchen in E	Gegenüber A expe- rimentell ermittelte Festigkeitszu- nahme in E (MPa)
A	E	$r_{\text{ppt}} / L / N$ nm / nm / $10^{16}\text{cm}^{-3}$	$r_{\text{ppt}} / L / N$ nm / nm / $10^{16}\text{cm}^{-3}$	
1	E60A / E60B	3,87 / 63,2 / 0,397	1,90 / 21,4 / 10,2	100
2	E60A / E60LA	3,87 / 63,2 / 0,397	2,62 / 41,4 / 1,41	43
3	E2A / E2LA	4,69 / 83,6 / 0,171	3,72 / 50,5 / 0,775	62
4	E59EG / E59B	4,59 / 56,7 / 0,548	1,54 / 18,2 / 16,6	109

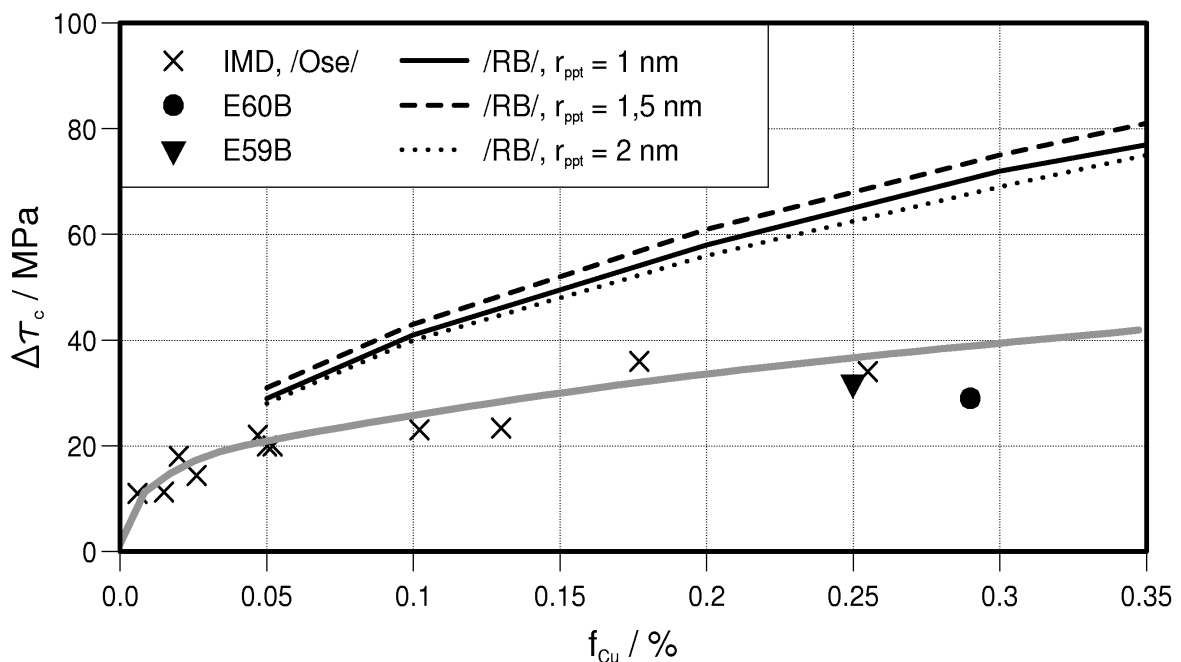
**Tabelle 5.2:** Im Zustand A ausgeschiedene Cu-Teilchen und im Zustand E neu ausgeschiedene Cu-Teilchen ( $r_{\text{ppt}}$  = mittl. Teilchenradius,  $L$  = mittl. Teilchenabstand,  $N$  = Anzahl der Teilchen je  $\text{cm}^3$ ). Auf den Zustand A bezogene experimentell ermittelte Festigkeitszunahme im Zustand E für die betrachteten Werkstoffübergänge aus Bild 5.3 /Will/.

tigkeitszunahme für die in Bild 5.3 enthaltenen Werkstoffübergänge zusammengestellt. Hauptsächlich bei Werkstoffübergang 1 und 4 spielen Cu-Teilchen mit einem Radius von  $r_{\text{ppt}} \leq 2 \text{ nm}$  die wesentliche Rolle /Will/, da diese im Vergleich zu den bereits vorhandenen Cu-Teilchen in großer Anzahl neu ausgeschieden werden /Will/. Jedoch wird in /RB/ als auch in /Ose/ darauf hingewiesen, dass die Versetzungsenergie „kleiner“ Cu-Teilchen nicht mehr zu ermitteln ist und Gl. (2.30) in Kap. 2.5.1 eine obere Grenze der Festigkeitserhöhung darstellt.

Zur numerischen Ermittlung der aufgrund ausschließlich neu ausgeschiedener „kleiner“ Cu-Teilchen hervorgerufenen Festigkeitszunahme im Werkstoff WB36 wird neben den in /Ose/ dargestellten Resultaten zusätzlich auf die in /GRS/ (mit dem Molekulardynamikprogramm IMD) berechneten Ergebnisse bei 0 K zurückgegriffen. Auch bei Ausscheidungsvorgängen „kleiner“ Cu-Teilchen treten Schwankungen in der Teilchengröße und im Teilchenabstand auf (Bild 5.4b). Zur Berücksichtigung ungleich großer Teilchen bei ungleicher Teilchenanordnung, der Temperatur sowie der Zusammensetzung und der Streuung der Cu-Ausscheidungen parallel zur Richtung der Versetzungsbewegung wird in /GRS/ ein Korrekturfaktor von 0,09 angegeben. In **Bild 5.5** sind die korrigierten Festigkeitszunahmen  $\tau_c$  aller Berechnungen über dem Volumenanteil der Cu-Teilchen aufgetragen. Unter der Annahme von auf Würfecken gelegenen, kugelförmigen Cu-Ausscheidungen besteht zwischen Volumenanteil  $f$ , Teilchenradius  $r_{\text{ppt}}$  und Teilchenabstand  $L$  folgender Zusammenhang:

$$f = 4,19 \frac{r_{\text{ppt}}^3}{L^3} \quad (5.1)$$

Zusätzlich ist in Bild 5.5 eine an alle Rechenpunkte angepasste Ausgleichskurve dargestellt. Diese Bezugskurve beschreibt die Festigkeitserhöhung aufgrund von ausgeschiedenen „kleinen“ Cu-Teilchen mit Radius  $r_{\text{ppt}} \leq 2$  nm, sofern diese gegenüber dem Ausgangszustand in großer Anzahl neu ausgeschieden werden. Diese Cu-Teilchen bewirken in Werkstoffzustand E60B bzw. E59B gegenüber E60A bzw. E59EG eine Festigkeitserhöhung um  $\Delta\sigma = 100$  MPa bzw. 109 MPa (vergl. Tabelle 5.2), was bei einem reziproken Schmid-Faktor<sup>1</sup> von 3 einer Erhöhung der Schubspannung um  $\Delta\tau_c = 100 \text{ MPa} / 3 = 33 \text{ MPa}$  bzw.  $109 \text{ MPa} / 3 = 36,3 \text{ MPa}$  entspricht. Da in beiden Endzuständen (E60B und E59B) alle Cu-Teilchen ausgeschieden sind /Will/, ist von diesen Werten die wegfallende Mischkristallverfestigung mit  $\sim 4$  MPa zu subtrahieren /GRS/. Beide Werkstoffzustände (E60B + E59G) werden durch diese Ausgleichskurve gut beschrieben (Bild 5.5).



**Bild 5.5:** Mit dem Molekulardynamikprogramm IMD /GRS/ und mit dem Modell in /Ose/ berechnete Zunahme der kritischen Schubspannung  $\Delta\tau_c$ . Vergleich mit dem für den Endzustand E60B und E59B experimentell ermittelten Wert (E60B bezogen auf E60A, E59B bezogen auf E59EG, vergl. Bild 5.3). Mit eingetragen sind Russell&Brown-Berechnungen (Gl. (2.30)-(2.32) aus Kap. 2.5.1) für 3 Teilchenradien  $r_{\text{ppt}}$  (1 nm, 1,5 nm und 2 nm).

In Bild 5.5 sind zusätzlich für drei Cu-Teilchenradien  $r_{\text{ppt}}$  (1 nm, 1,5 nm und 2 nm) die Russell&Brown Ergebnisse aus Gl. (2.30)-(2.32) über dem Volumenanteil der Kupferpartikel aufgetragen. Auch bei Russell&Brown /RB/ wird die Zunahme der kritischen Schubspannung  $\Delta\tau_c$  bei Teilchen mit Radien  $r_{\text{ppt}} \leq 2$  nm hauptsächlich über dem Volu-

<sup>1</sup> In /Koc/ wird für kubisch raumzentriertes Eisen der Wert 3,06 angegeben.

menanteil der Cu-Teilchen ( $f_{Cu}$ ) und weniger über den Teilchenradius  $r_{ppt}$  beschrieben. Werden zu bereits vorhandenen großen Cu-Teilchen ( $r_{ppt} > 3,5$  nm) zusätzlich kleine Cu-Teilchen in großer Menge ausgeschieden (vergl. N für Werkstoffübergang 1 und 4 in Tabelle 5.2), wird die daraus resultierende Festigkeitszunahme des Werkstoffs durch die Anwendung der Russell&Brown-Theorie z. T. stark überschätzt (Bild 5.5).

In Zukunft wird die Nanosimulation wegen der Berücksichtigung von ungleich großen, zufällig verteilten Teilchen die Wechselwirkung dieser Teilchen mit Versetzungen realistischer beschreiben und deren Auswirkungen auf die Festigkeitserhöhung des Werkstoffs besser erfassen. In diesem Zusammenhang sind darüber hinaus insbesondere die von /Mohl1, Mohl2/ entwickelten mesoskopischen Versetzungsdynamik-Simulationen der Versetzungsbewegung durch beliebig angeordnete Ausscheidungen und deren zukünftige Anwendung auf schneidbare Teilchen zu nennen. Die Wirkungsweise der im Werkstoff WB36 ausgeschiedenen, vornehmlich schneidbaren Cu-Teilchen kann somit in ihrer tatsächlichen Größenverteilung realistischer berücksichtigt werden.

Anhand der Anzahl N (Cu-Teilchen/cm<sup>3</sup>) kann bei den Werkstoffübergängen 2 und 3 (Tabelle 5.2) die Zahl der bereits vorhandenen Ausscheidungen gegenüber den neu ausgeschiedenen Cu-Teilchen nicht vernachlässigt werden. Die neu ausgeschiedenen Cu-Teilchen sind von der selben Größenordnung wie die bereits vorhandenen Cu-Teilchen und treten mit den bereits vorhandenen Cu-Teilchen in Wechselwirkung. Somit sind für die Werkstoffübergänge 2 und 3 alle Cu-Teilchen bei der Ermittlung der Festigkeitserhöhung des Werkstoffs WB36 zu berücksichtigen /Will/. Dieser dort vorliegende Cu-Volumenanteil von  $f_{Cu} > 0,6\%$  wird über die atomistischen Berechnungen bisher nicht abgedeckt. Zudem sind bei den beiden Ausscheidungsvorgängen (2 und 3) Cu-Teilchen beteiligt, deren Größe ( $r_{ppt} > 2,5$  nm) ebenfalls nicht über die atomistischen Modelle beschrieben werden /GRS/. Diese beiden Werkstoffübergänge (2 und 3 aus Tabelle 5.2) werden in **Anhang A3** über die Russell&Brown-Theorie bewertet: Die Ergebnisse zeigen, dass in Fällen, bei denen zu bereits vorhandenen „großen“ Teilchen ( $r_{ppt} > 3,5$  nm) zusätzlich Teilchen in ähnlicher Größenordnung und in vergleichbarer Anzahl ausgeschieden werden (vergl.  $r_{ppt}$  und N in Tabelle 5.2 für Werkstoffübergang 2 und 3), die Anwendung der Russell&Brown-Theorie die daraus resultierende Festigkeitszunahme des Werkstoffs WB36 gut beschreibt (vergl. Tabelle A3.1, Anhang A3). Hingegen wird, wie bereits erläutert, die experimentell ermittelte Festigkeitserhöhung des Werkstoffs WB36 bei der Anwendung der Russell&Brown-Theorie überschätzt (Bild 5.5), wenn gegenüber dem Ausgangszustand im Endzustand sehr viele „kleine“ Teilchen ( $r_{ppt} < 2$  nm) zusätzlich ausgeschieden werden.

## 5.3 Zum Einfluss von Teilchen mittlerer Größe

### 5.3.1 Allgemeines

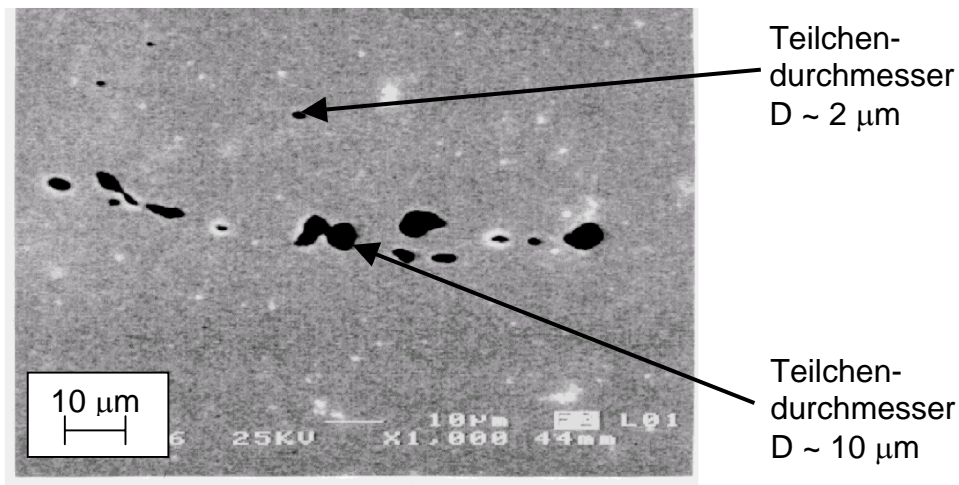
Neben ausgeschiedenen Kupferteilchen, wie sie in dem hier untersuchten und speziell kupferlegierten Werkstoff WB36 auftreten, sind in technischen Werkstoffen meist auch Teilchen anderer Größenskalen vorhanden. In diesen Zusammenhang sind die Metallkarbide und die nichtmetallischen Einschlüsse zu nennen. Im Gegensatz zu den in Kap. 3 vorgestellten Verbundwerkstoffen können Keramikpartikel auch ohne gezielte Zugabe im Gefüge vorhanden sein. Die festigkeitssteigernde Wirkung von Teilchen, die als zweite Phase im Werkstoff auftreten hat ihre Ursache darin, dass diese ausgeschiedenen Teilchen einer plastischen Verformung Widerstand leisten. Dieser Effekt wird mikrostrukturell durch die Verankerung von Versetzungen an den Teilchen hervorgerufen, die einer Versetzungsbewegung entgegenwirkt und durch eine äußere Spannung überwunden werden muss. Vor allem große Teilchen dieser Art können von den Versetzungen nicht geschnitten werden, sondern sie werden umgangen, wobei sich die Versetzungen unter der angelegten Spannung zwischen den Teilchen ausbauchen und unter Zurücklassen eines Versetzungsringes weiter laufen (Orowan-Mechanismus).

Wegen der Teilchengröße im  $\mu\text{m}$ -Bereich sind zur deren Beschreibung andere Theorien und Mechanismen anzuwenden. Große Teilchen tendieren zudem zum Teilchenbruch, zu deren Beschreibung die Theorie von Nan&Clarke /Clark/ angewendet werden kann. Über ausführliche TEM-Untersuchungen /Will/ konnten im Werkstoff WB36 aber keine Anzeichen auf gebrochene Teilchen gefunden werden. In dieser Arbeit wird daher die bereits erfolgreich zur Beschreibung des Größeneffekts von SiC-Teilchen in einer Al-Matrix eingesetzte und in Kap. 2.5.2 vorgestellte Mechanism-based Strain Gradient (MSG) Plasticity-Theorie /Xue/) auf den vorliegenden Werkstoff und speziell auf die darin vorhandenen Aluminiumoxidpartikel angewendet.

### 5.3.2 Anwendung und Ergebnisse

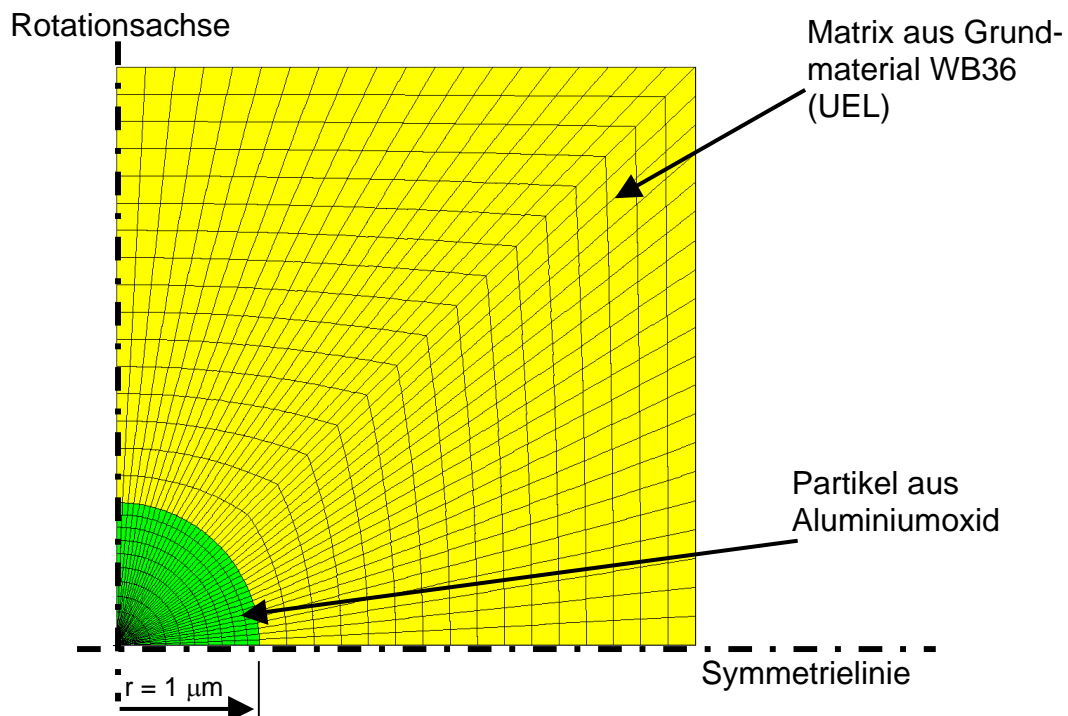
Die Volumenanteile der Metallkarbide und der Keramikeinschlüsse im Werkstoff WB36 sind sehr gering ( $\ll 1\%$ ) und deren Einfluss auf das Festigkeitsverhalten des Werkstoffs könnte aus diesem Grund vernachlässigt werden. So haben Gefügeuntersuchungen in /Uhl/ nur vereinzelt  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Partikel nachgewiesen. Um dennoch den Einfluss dieser Teilchenklasse zu erfassen, wird nun angenommen, dass die Keramikpartikel mit  $f = 0,07\%$  den selben Volumenanteil aufweisen wie die Mangansulfid-Einschlüsse (vergl. Tabelle 5.1). **Bild 5.6** zeigt die im Gefüge vorhandenen Aluminiumoxideinschlüs-

se in der LT-Entnahmerichtung. Die Größenskala reicht von Teilchen mit einem Durchmesser von  $2\ \mu\text{m}$  bis  $10\ \mu\text{m}$ . Vereinzelt wurden auch Teilchen bis zu  $15\ \mu\text{m}$  gefunden /Uhl/. Die MSG-Theorie wurde ähnlich wie das Rousselier-Modell numerisch umge-



**Bild 5.6:** Aluminiumoxideinschlüsse im Werkstoff WB36 in der LT-Ebene /Uhl/.

setzt und in das FE-System ABAQUS über die Definition eines User-Defined-Element (UEL) implementiert /Xue/. Zusammen mit konventionellen Elementen wird daraus eine Einheitszelle modelliert, wobei mit konventionellen Elementen (8-knotig, axialsymmetrisch) die linear-elastisch angenommene  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Phase und mit dem User-Defined-Element die umschließende elastisch-plastische Matrix vernetzt wird. **Bild 5.7** zeigt bei-



**Bild 5.7:** Einheitszellmodell (axialsymmetrisch) für Berechnungen nach /Xue/: Beispiel für Partikelradius =  $2\ \mu\text{m}$  und Partikelanteil = 1 %.

spielhaft das axialsymmetrische FE-Netz einer Einheitszelle für einen Partikeldurchmesser von 2  $\mu\text{m}$  und einem Partikelanteil von 1 %.

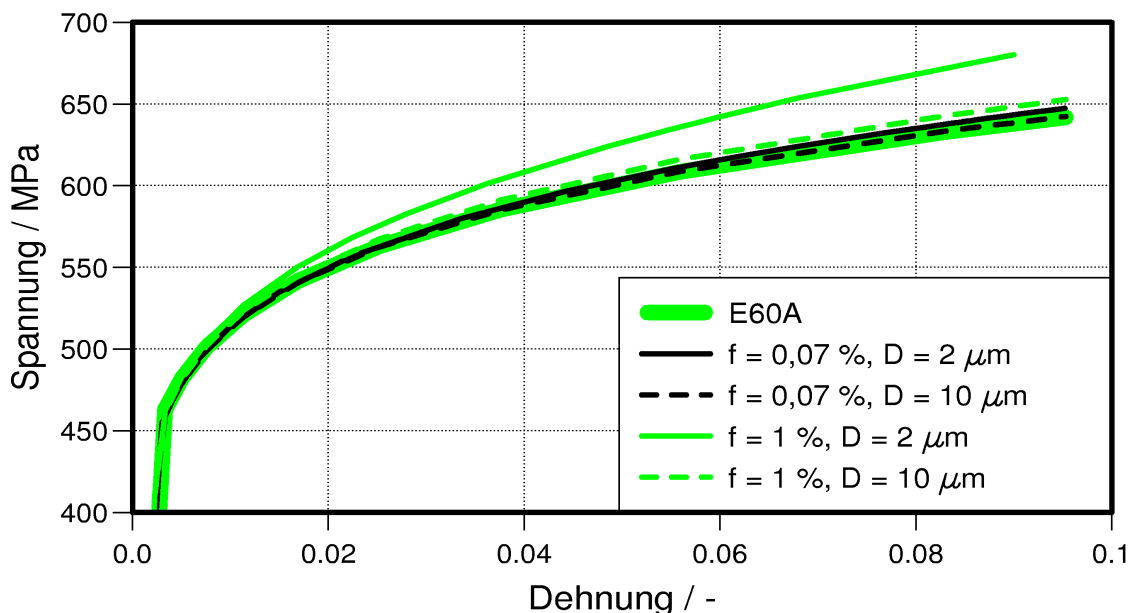
Aus dem Werkstoffverhalten des Ausgangszustandes E60A werden über die Anpassung

$$\sigma = k\varepsilon^n \quad (5.2)$$

die Parameter k und n für die Matrix ermittelt. In **Tabelle 5.3** sind die für die MSG-Berechnung notwendigen Daten zusammengestellt. Zunächst wurde ein Volumenanteil der Keramiktellen von  $f = 0,07\%$  angenommen und die in Bild 5.6 ausgewiesenen Teilchendurchmesser untersucht. Wie **Bild 5.8** zeigt, ist der Einfluss dieser Keramik-

Phase	E-Modul (GPa)	$\mu$ (-)	n (-)	k (MPa)	b (nm)
$\text{Al}_2\text{O}_3$	380	0,22	-	-	-
Matrix	201,8	0,33	0,0958	800	0,248

**Tabelle 5.3:** Materialkennwerte der Einzelphasen und Gefügeparameter b (Burgersvektor) für die Einheitszellberechnungen nach /Hua1, Hua2, Xue/.



**Bild 5.8:** Einfluss von  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Partikel auf die Festigkeit des Werkstoffs WB36. Berechnungen nach der MSG-Theorie /Hua1, Hua2, Xue/ mit  $f$  = Volumenanteil und  $D$  = Teilchendurchmesser (Daten aus Tabelle 5.3).

teilchen auf die Festigkeit im Vergleich zum Grundmaterial (E60A) bei dem angenommenen Volumenanteil als gering einzustufen. Tendenziell ist aber erkennbar, dass bei gleichem Volumengehalt die kleineren Teilchen die Festigkeit mehr erhöhen als die



großen Teilchen. Diese Tendenz wird deutlich, wenn als Volumengehalt der Keramikteilchen  $f = 1\%$  angenommen wird. Dann führen die  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Teilchen mit Durchmesser  $D = 2\ \mu\text{m}$  zu einer Festigkeitszunahme von  $\sim 25\ \text{MPa}$  bei einer globalen Dehnung von 0,08. Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die keramischen Einschlüsse im Werkstoff bei derart kleinen Volumenanteilen keine festigkeitssteigernde Wirkung haben und diese allein durch die Cu-Ausscheidungen hervorgerufen werden.

Untersuchungen zum Größeneffekt von SiC-Partikeln in einem Al/15vol.%SiC-Verbundwerkstoff zeigen ebenfalls /Xue/, dass erst bei Teilchendurchmessern  $< 2\ \mu\text{m}$  der Dehnungsgradient bzw. die geometrisch notwendigen Versetzungen gemäß der MSG-Theorie einen deutlichen Einfluss auf das Spannungs-Dehnungsverhalten ausüben.

## **5.4 Zum Einfluss von großen Teilchen mit länglicher Form**

### **5.4.1 Allgemeines**

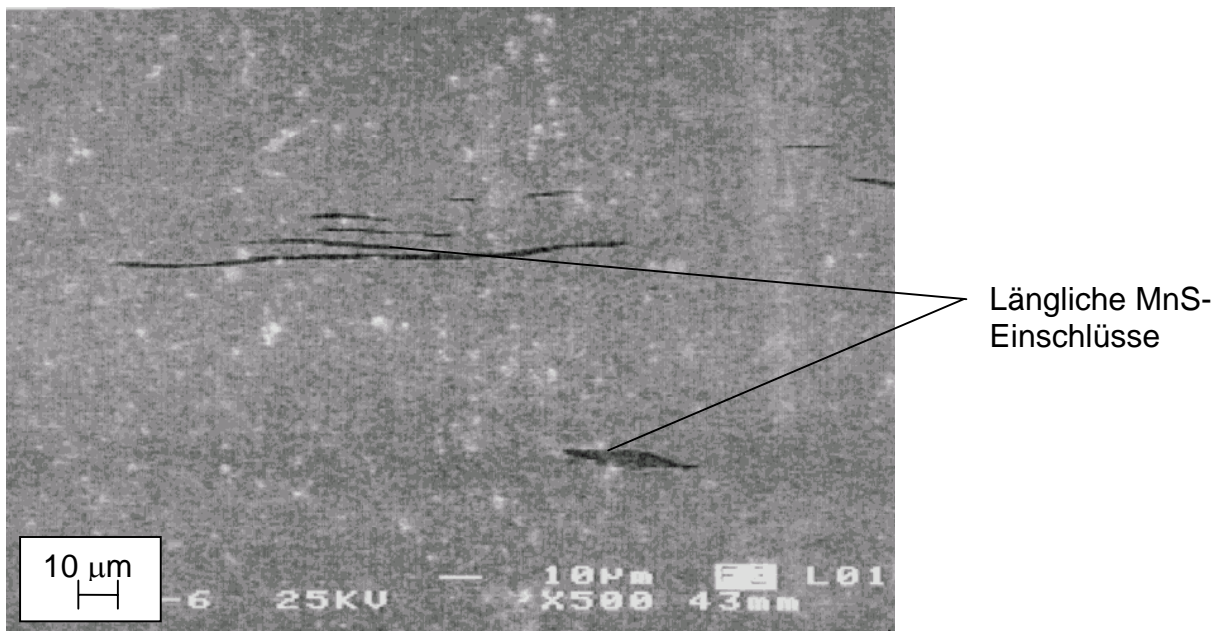
In den bisherigen Untersuchungen wurde die Ursache für den Festigkeitszuwachs des Werkstoffs den kleinen Teilchen im nm-Bereich zugewiesen. Dazu kamen versetzungsmechanische Ansätze zur Anwendung. Eine weitere Klasse von Werkstoffeinschlüssen sind nicht-metallische Teilchen, die wegen ihrer Größe und vor allem wegen ihrer schlechten Anbindung an den umgebenden Werkstoff und ihrer geringen Duktilität Quellen für die Hohlrumbildung und somit maßgebend verantwortlich für die Schädigung des Gefüges sind. Dementsprechend sind zur Problembehandlung derartiger Teilchen schädigungsmechanische Ansätze erforderlich. In Kapitel 2.3.2 wurde das dafür angewendete Rousselier-Modell bereits vorgestellt. Durch Einführung von Korrekturfaktoren wird die längliche Form der in dem Werkstoff 15NiCuMoNb5 (WB36) enthaltenen Mangansulfid-Teilchen berücksichtigt.

### **5.4.2 Anwendung und Ergebnisse**

Im Folgenden wird das Rousselier-Modell zur schädigungsmechanischen Beschreibung des Werkstoffs WB36 verwendet. In diesem Gefüge werden die schädigungsauslösenden Hohlräume hauptsächlich durch die im Werkstoff vorhandenen Mangansulfid (MnS)-Einschlüsse verursacht. Der in Vorzugsrichtung L gewalzte Werkstoff weist

hauptsächlich längliche MnS-Teichenformen auf, wie sie in **Bild 5.9** beispielhaft anhand der LS-Ebene gezeigt sind.

Die Anwendung des Rousselier-Modells zur Beurteilung des schädigungsmechanischen Verhaltens von Werkstoffen erfordert werkstoffspezifische Material- bzw. Gefügekennwerte (vergl. Bild 2.10). Diese werden üblicherweise an gekerbten Zugproben und an Bruchmechanik (C(T))-Proben ermittelt. Für das kritische Hohlraumvolumen konnte anhand schädigungsmechanischer Berechnungen von Zugproben der Wert  $f_c = 0,05$  abgeleitet werden /Seid, Kuß/. Somit sind mit  $f_0$  (Anfangshohlraumvolumen),  $\sigma_k$  (Spannung) und  $l_c$  (Porenabstand) insgesamt 3 Parameter anzupassen. Die Parameter  $\sigma_k$  und  $f_0$  beeinflussen jedoch beide die Lage des Knickpunktes in der Kraft-Einschnürungskurve von gekerbten Zugproben (siehe Bild 2.10b und c), so dass eine gleichzeitige Anpassung dieser beiden Parameter nicht sinnvoll ist.



**Bild 5.9:** Im Werkstoff WB36 vorhandene, längliche Mangansulfid (MnS)-Einschlüsse in der LS-Ebene, Werkstoffzustand E60A.

Bei der Anpassung in /Uhl/ wurde der Parameter  $\sigma_k = 445$  MPa vorgegeben und die Parameter  $f_0$  und  $l_c$  numerisch an vorhandene Experimente (gekerbte Zugproben und C(T)-Proben) für den Werkstoffzustand E60A und E60B angepasst. Neben den numerisch ermittelten Daten liegen aus umfangreichen REM-Untersuchungen /Uhl/ auch metallographisch ermittelte Werte aus der LT-Entnahmerichtung für  $f_0$  und  $l_c$  vor. Die LT-Ebene ist aus Gründen der Belastungsrichtung sowohl für die Zugproben als auch für die C(T)-Proben die für die Rissausbreitung maßgebende Entnahmerichtung.

In **Tabelle 5.4** sind die Gefügedaten für beide Werkstoffzustände E60A und E60B und die in /Uhl/ numerisch angepassten Daten zusammengestellt.

Werkstoffzustand	Anfangshohlraum- volumen $f_0$ (%)	mittlerer Teilchenabstand $l_c$ (mm)
E60A	0,06849	0,050
E60B	0,06121	0,044
In /Uhl/ numerisch angepasste Werte	0,2	0,1

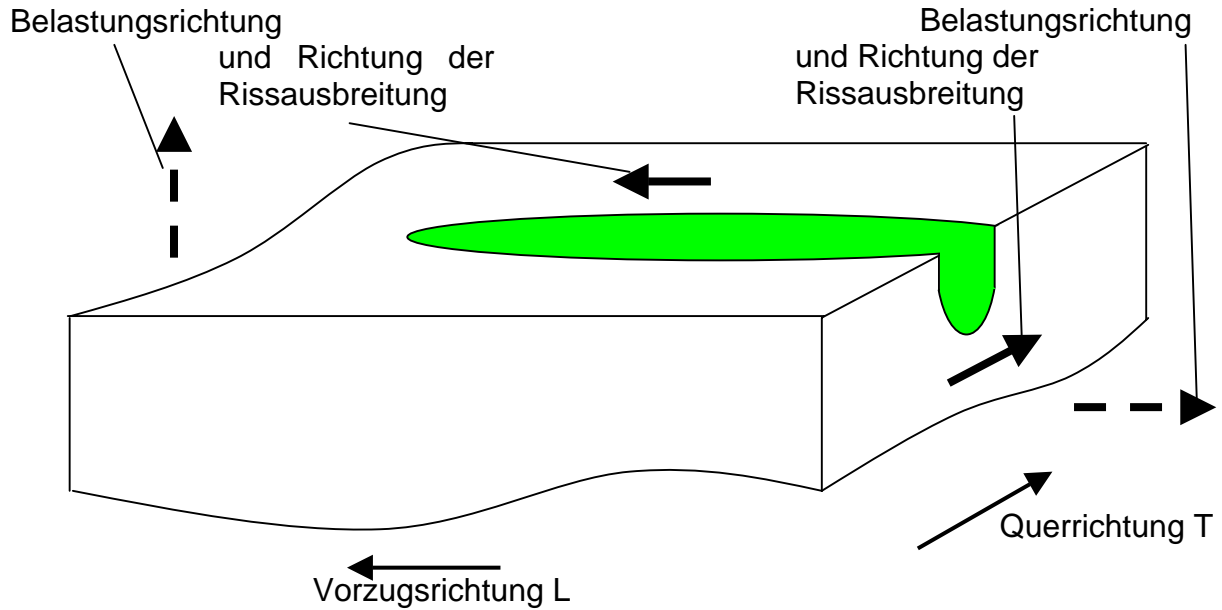
**Tabelle 5.4:** Aus REM-Untersuchungen /Uhl/ ermittelte und die für die Anwendung des Rousselier-Modells maßgebenden Gefügeparameter  $f_0$  und  $l_c$  (LT-Ebene) im Vergleich zu den in /Uhl/ numerisch angepassten Werten.

Der aus dem Gefüge ermittelte Wert des Anfangshohlraumvolumens  $f_0$  wird zusätzlich über die Beziehung nach /Frank/ unter Berücksichtigung der Mangan- und Schwefelanteile mit  $f_0 = 0,07 \%$  bestätigt /Uhl/.

Wie Tabelle 5.4 zeigt, konnten die aus dem Gefüge gewonnenen Werte über die numerische Anpassung in /Uhl/ nicht bestätigt werden.

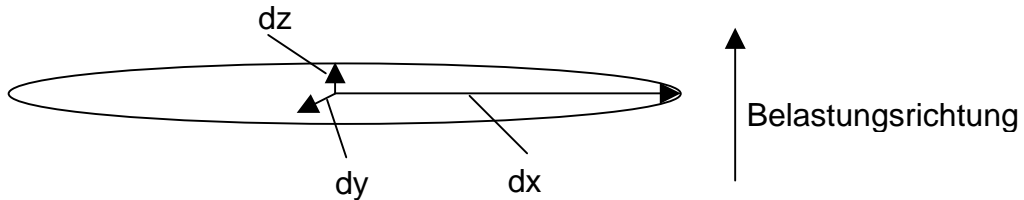
Unter dem Aspekt des zu untersuchenden Einflusses der Teilchengröße auf das Festigkeitsverhalten werden in dieser Arbeit die aus dem Gefüge abgeleiteten Parameter  $f_0$  und  $l_c$  als bekannt vorausgesetzt und der Parameter  $\sigma_k$  als die eigentliche Anpassungsgröße festgelegt. Neben dem Anfangshohlraumvolumen  $f_0$  ist auch die Gestalt des Hohlraums und seine Lage relativ zur Belastungsrichtung bzw. zur Rissausbreitungsrichtung maßgebend für das Schädigungsverhalten des Werkstoffs. In **Bild 5.10** ist schematisch ein in Vorzugsrichtung L orientierter, nadelförmiger und metallographisch geschnittener Einschluss bzw. Hohlraum dargestellt. Dabei wird deutlich, dass bei einer Rissausbreitung in Vorzugsrichtung L ein Riss mehr Hohlraumvolumen durchläuft, als wenn sich der Riss quer dazu in T-Richtung ausbreitet. Um die Abhängigkeit der Hohlraumbildung von der Teilchenfläche senkrecht zur Belastungsrichtung zu berücksichtigen, wird in /Rous2/ ein Korrekturfaktor F vorgeschlagen, durch den das fiktiv größere Hohlraumvolumen  $f_0^*$  von länglichen, senkrecht zur Belastungsrichtung orientierten, Einschlüssen berücksichtigt wird:

$$F = (dx \cdot dy)^{0.5} / dz \quad \text{mit } f_0^* = F \cdot f_0 \quad (5.3)$$



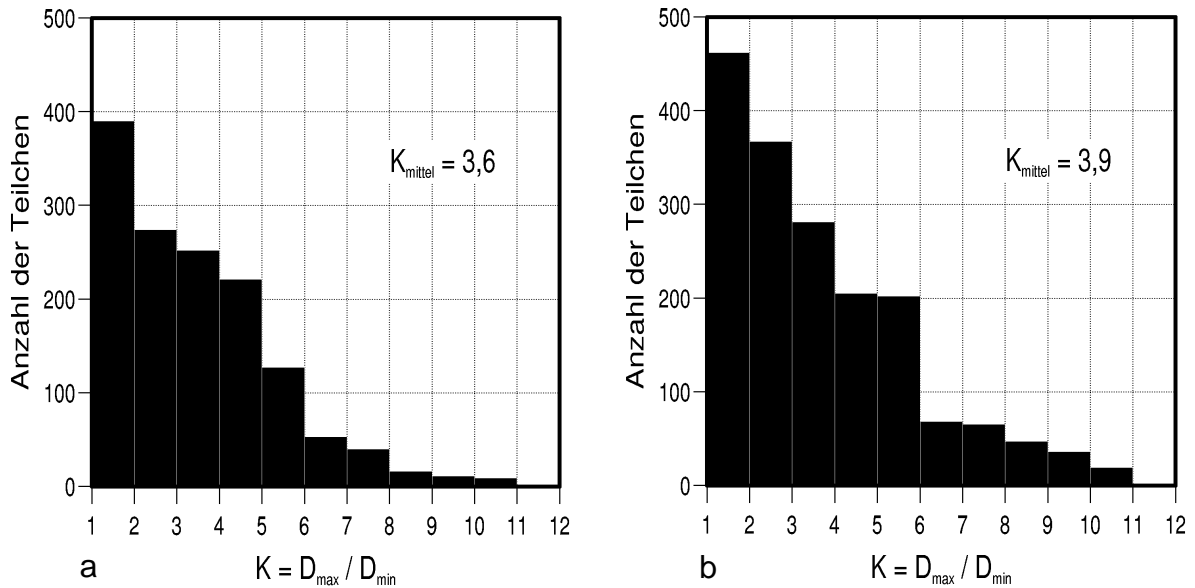
**Bild 5.10:** In Vorzugsrichtung L orientierter nadelförmiger Einschluss bzw. Hohlraum (schematisch, metallographisch geschnitten).

Dabei sind  $dx$ ,  $dy$  und  $dz$  die Abmessungen des Einschlusses, wobei die  $z$ -Richtung in Belastungsrichtung orientiert ist (**Bild 5.11**). Sind in der metallographischen Schiffebene



**Bild 5.11:** Geometrische Beschreibung von nicht-kugelförmigen Einschlüssen und deren Lage zur Belastungsrichtung.

ellipsenförmige Einschlüsse erkennbar, können räumlich zwei Sonderfälle unterschieden werden: Eine plattenförmige Einschlussform liegt vor, wenn die beiden Abmessungen  $dx$  und  $dy$  denselben Wert annehmen. Führt man zudem den Parameter  $K$  als Verhältnis von maximaler und minimaler Abmessung ein (für Platten ist  $K = dx / dz$ ), so leitet sich aus Gl. (5.3) ein Korrekturfaktor von  $F = K$  ab. Bei nadelförmigen Einschlussformen sind dagegen die beiden Abmessungen  $dy$  und  $dz$  identisch und Gl. (5.3) ergibt mit  $K = dx / dz$  einen Korrekturfaktor  $F = K^{0,5}$ . Bei den in /Uhl/ durchgeführten, umfangreichen Gefügeuntersuchungen wurden die MnS-Einschlüsse vermessen, ausgezählt und deren Verhältnisse  $K$  (maximale zur minimalen Ausdehnung) in Klassen eingeteilt. Diese Klasseneinteilungen sind in **Bild 5.12** für die beiden hier untersuchten Werkstoff-



**Bild 5.12:** Einteilung der Mangansulfideinschlüsse in Teilchenklassen K (K= maximale/minimale Abmessung des Einschlusses) und mittlere K-Werte für die Entnahmerichtung LT für den Werkstoffzustand E60A (a) und den Werkstoffzustand E60B (b).

zustände E60A (a) und E60B (b) für die Entnahmerichtung LT dargestellt. Eine Mittelung über alle Klassen ergibt für den Werkstoffzustand E60A und für den Werkstoffzustand E60B einen mittleren Wert von  $K_{\text{mittel}} = 3,6$  (E60A) bzw.  $K_{\text{mittel}} = 3,9$  (E60B). Mit den Werten aus Tabelle 5.4 ergeben sich daraus die in **Tabelle 5.5** zusammengestellten und gemäß Gl. (5.3) korrigierten Hohlraumvolumenwerte  $f_0^*$ .

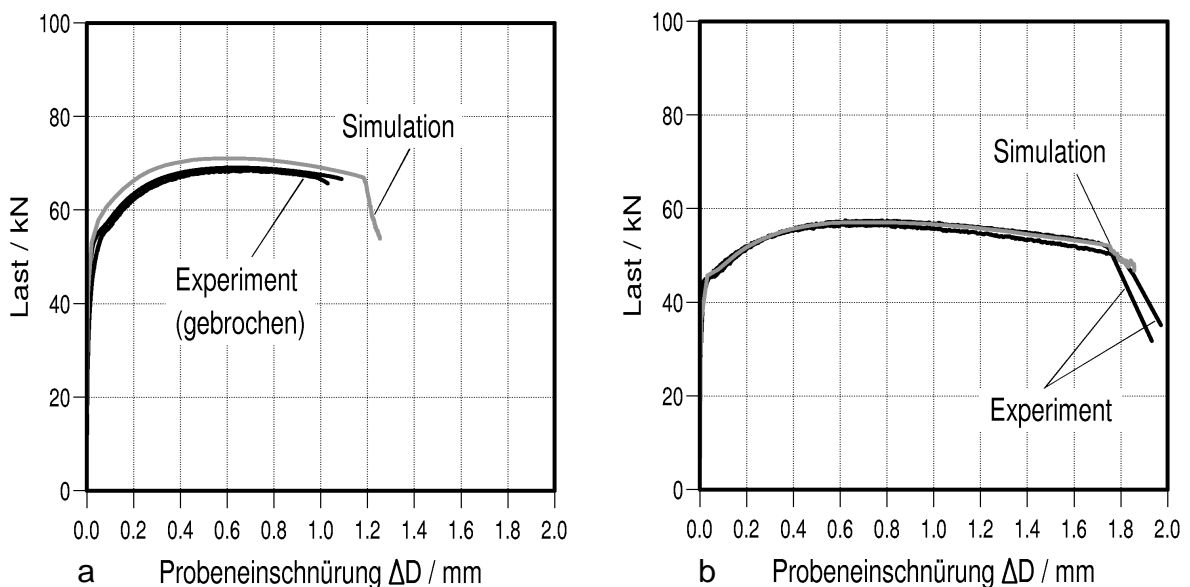
Werkstoffzustand	$K_{\text{mittel}}$ (Bild 5.12)	Korrekturfaktor F ( $F = K_{\text{mittel}}^{0,5}$ für Nadel) ( $F = K_{\text{mittel}}$ für Platte)	Korrigiertes Anfangshohlraumvolumen $f_0^* = F \cdot f_0$ ( $f_0$ aus Tabelle 5.4) (%)
E60A	3,6	1,9 (Nadel) 3,6 (Platte)	0,13 0,24
E60B	3,9	1,97 (Nadel) 3,9 (Platte)	0,12 0,24

**Tabelle 5.5:** Gestalt- und lageabhängige Korrektur des Anfangshohlraumvolumens  $f_0$  für die Werkstoffzustände E60A und E60B nach /Rous1/.

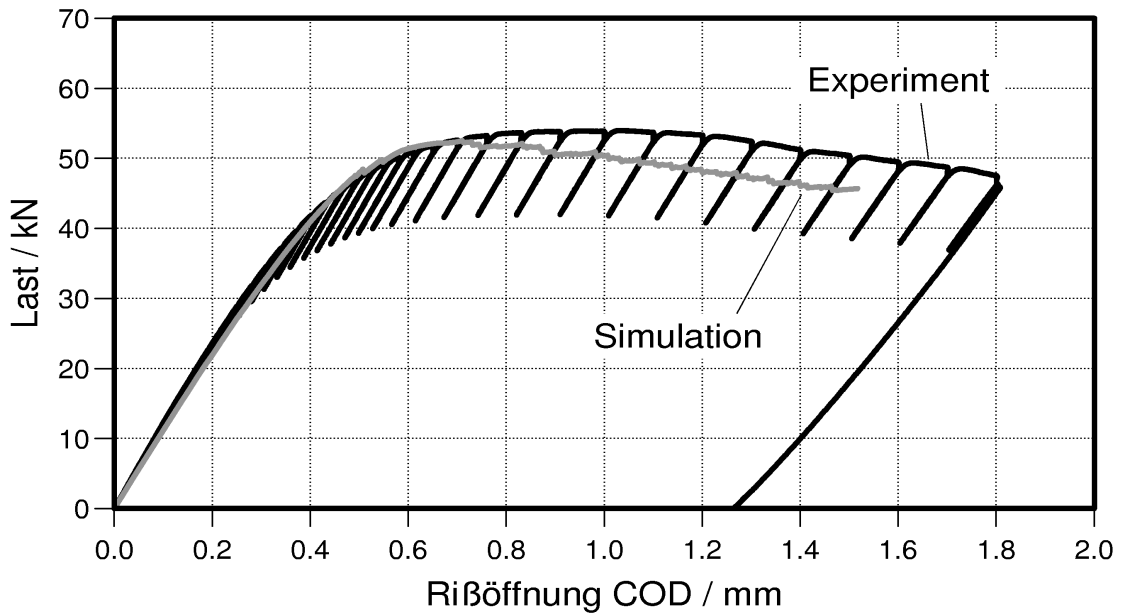
Der aus REM-Untersuchungen ermittelte mittlere Teilchenabstand von  $l_c = 0,05$  mm (vergl. Tabelle 5.4) wird im Modell durch eine Elementkantenlänge von  $2 \cdot l_c = 0,1$  mm abgebildet. Im Folgenden werden nacheinander beide Grenzfälle (Nadel und Platte) als Einschlussform für die nichtmetallischen MnS-Einschlüsse angenommen.

### Die nadelförmige Einschlussform

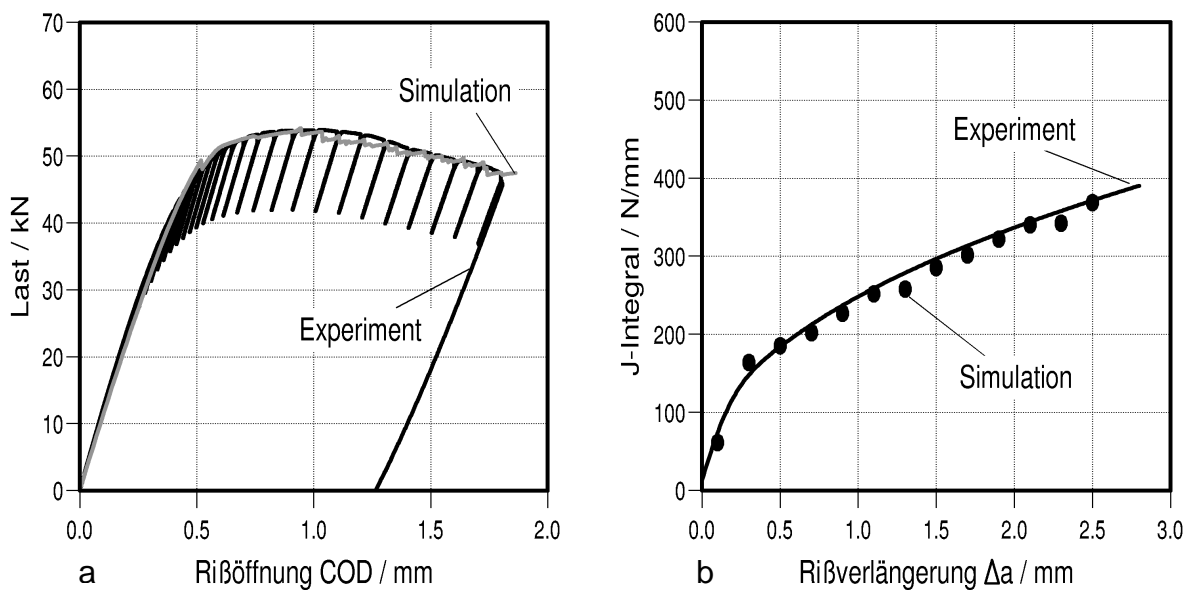
Zunächst wird eine nadelförmige Einschlussform mit dem Anfangshohlraumvolumen  $f_0^* = 0,13\%$  untersucht (vergl. Tabelle 5.5). Die elastisch-plastischen, geometrisch nichtlinearen schädigungsmechanischen FE-Analysen erfolgen für die gekerbten Rundzugproben axialsymmetrisch und für die C(T)-Proben zweidimensional unter der Annahme des ebenen Dehnungszustandes (EDZ). Die Schädigungszone wurde dabei jeweils mit quadratförmigen Elementen vernetzt. Alle Berechnungen wurden verschiebungskontrolliert durchgeführt. Zunächst wird der Werkstoffzustand E60A betrachtet. Die Berechnungen zu den gekerbten Zugproben sind in **Bild 5.13** dargestellt. Der Vergleich mit dem experimentellen Befund zeigt eine gute Übereinstimmung bei dem Spannungsparemeter von  $\sigma_k = 420$  MPa, sowohl für den Kerbradius  $r_k = 2$  mm (Bild 5.13a) als auch für den Kerbradius  $r_k = 8$  mm (Bild 5.13b). In **Bild 5.14** ist die Last/Rissöffnungs (COD)-Kurve abgebildet. Die schlechte Übereinstimmung mit dem Experiment macht eine zusätzliche Anpassung des Parameters  $l_c$  (mittlerer Hohlraumabstand) erforderlich. In **Bild 5.15** ist die Berechnung der C(T)-Probe mit dem Wert  $l_c = 0,1$  mm dargestellt. Die nun gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment hinsichtlich der F-COD Kurve (Bild 5.15a) wird auch bei der Risswiderstandkurve (Bild 5.15b) erreicht.



**Bild 5.13:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Einschnürungskurven von gekerbten Zugproben mit Kerbradius  $r_k = 2$  mm (a) und  $r_k = 8$  mm (b),  $f_0 = 0,13\%$ ,  $l_c = 0,05$  mm,  $\sigma_k = 420$  MPa, Werkstoffzustand E60A (Prüf temperatur = 90 °C).



**Bild 5.14:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Rissöffnungskurve einer C(T)25-Probe (20%sk) ( $f_0 = 0,13\%$ ,  $l_c = 0,05$  mm,  $\sigma_k = 420$  MPa), Werkstoffzustand E60A (Prüftemperatur = 90 °C).



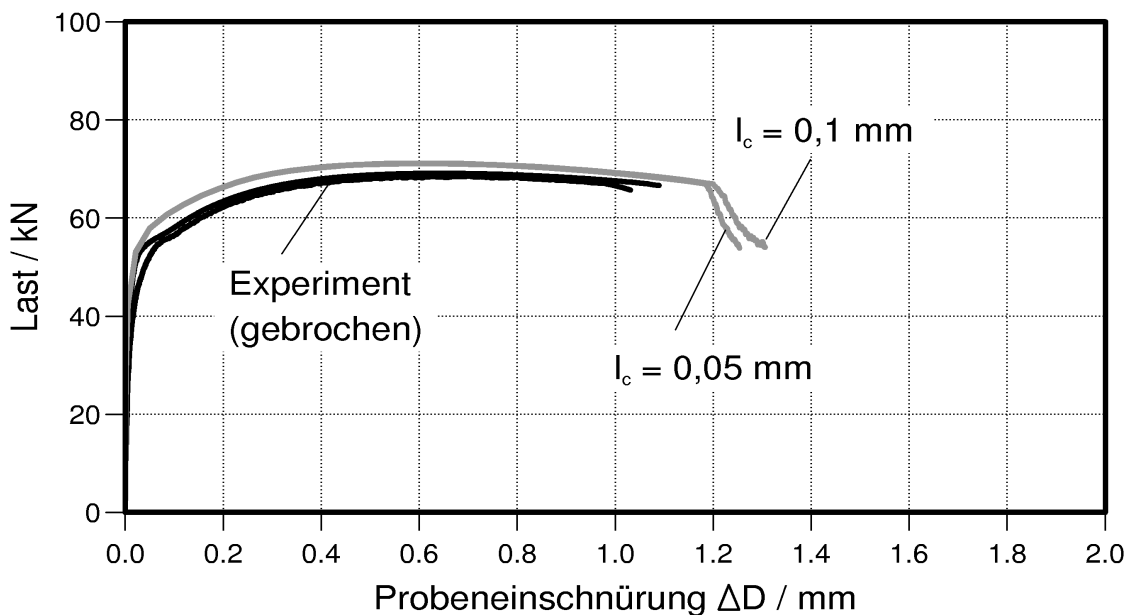
**Bild 5.15:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Rissöffnungskurve (a) und Risswiderstandskurve (b) einer C(T)25-Probe (20%sk) ( $f_0 = 0,13\%$ ,  $l_c = 0,1$  mm,  $\sigma_k = 420$  MPa), Werkstoffzustand E60A (Prüftemperatur = 90 °C).

Die proportionale Vergrößerung der quadratischen Elemente von der Kantenlänge  $l_E = 2 \cdot l_c = 0,1$  mm auf  $l_E = 2 \cdot l_c = 0,2$  mm führt zu einer Erhöhung der simulierten Last-COD-Kurve (vergl. Bild 5.14 mit Bild 5.15a) und daher zu einer Erhöhung der Energiefreisetzungsrates als Maß für die Fläche unter dieser Kurve. Dieser Effekt resultiert aus der in

den versagenden Elementen dissipierten Energie, die proportional zum Elementvolumen  $V_E = l_E \cdot h_E \cdot T_E$  ( $h_E$  = Elementhöhe,  $T_E$  = Elementdicke) ist. Da die Energiefreisetzungsrates gleich der dissipierten Arbeit pro Rissfläche  $\Delta a \cdot T_E$  ist, muss sie für ein Risswachstum von  $\Delta a = l_E$  proportional zur Elementhöhe  $h_E$  sein. Da die Energiefreisetzungsrates auch vom Verfestigungsverhalten des Werkstoffs abhängt, kann die Größe  $l_c$  nicht ausschließlich aus mikrostrukturellen Längen (mittlerer Hohlraumabstand) abgeleitet werden sondern ist neben der Größe  $\sigma_k$  zusätzlich über C(T)-Proben anzupassen.

Das Problem der Abhängigkeit der erzielten Ergebnisse von der Strukturdiskretisierung bei der Anwendung von lokalen, inelastischen Schädigungsmodellen ist ausreichend bekannt /Sun, Tver2, Absch3, Bern1/. In Anlehnung eines thermodynamischen Ansatzes nach /Sven, Sven1/ wird in /Reu, Reu1, Reu2/ die Entwicklung einer nicht-lokalen, gradientenabhängigen Erweiterung des lokalen Gurson-Modells vorgestellt mit dem Ziel, die Anwendungsgrenzen des Modells bzgl. Netzabhängigkeit zu überwinden. Die Netzabhängigkeit der Simulationsergebnisse kann damit zwar deutlich verringert aber nicht vollständig eliminiert werden.

Bei der schädigungsmechanischen Berechnung komplexer Bauteile mit dem Rousellier-Modell ist eine feine,  $l_c$ -konforme Diskretisierung wegen des hohen Modellierungsaufwandes nicht überall möglich. Bei der Berechnung von Bauteilen ist daher eine kritische Vorauswahl der möglichen Schädigungszonen erforderlich, welche dann mit der numerisch angepassten Elementkantenlänge  $l_E = 2 \cdot l_c$  vernetzt werden. Diese Vorge-

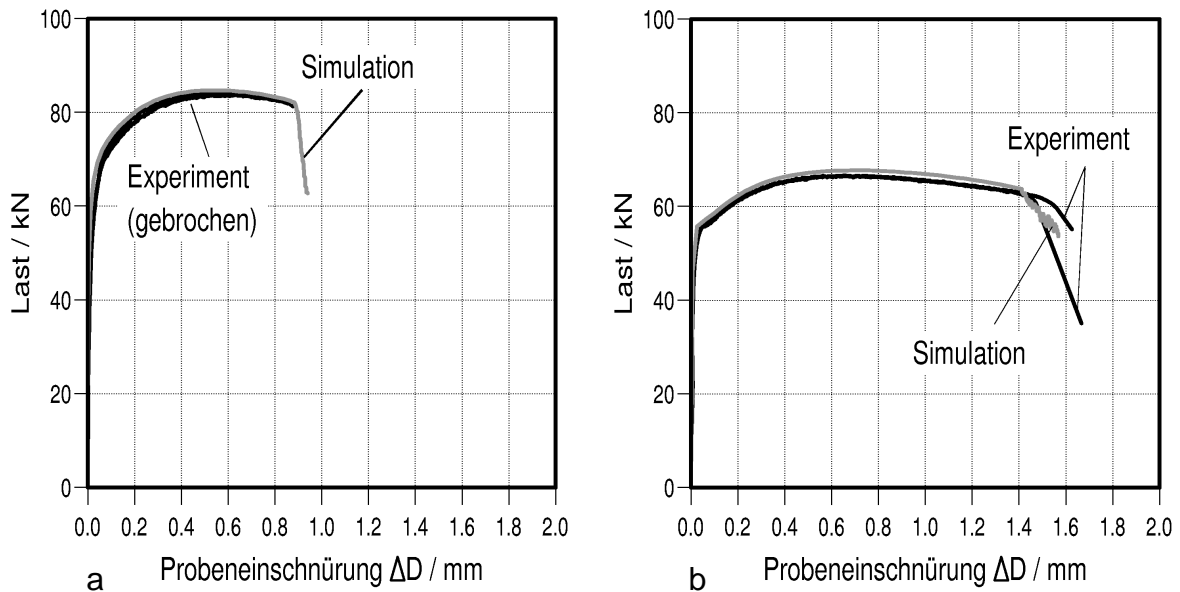


**Bild 5.16:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Einschnürungskurve einer gekerbten Zugprobe mit Kerbradius  $r_k = 2$  mm. Einfluss des Porenabstandes  $l_c$  ( $f_0 = 0,13\%$ ,  $\sigma_k = 420$  MPa), Werkstoffzustand E60A (Prüf Temperatur = 90 °C).

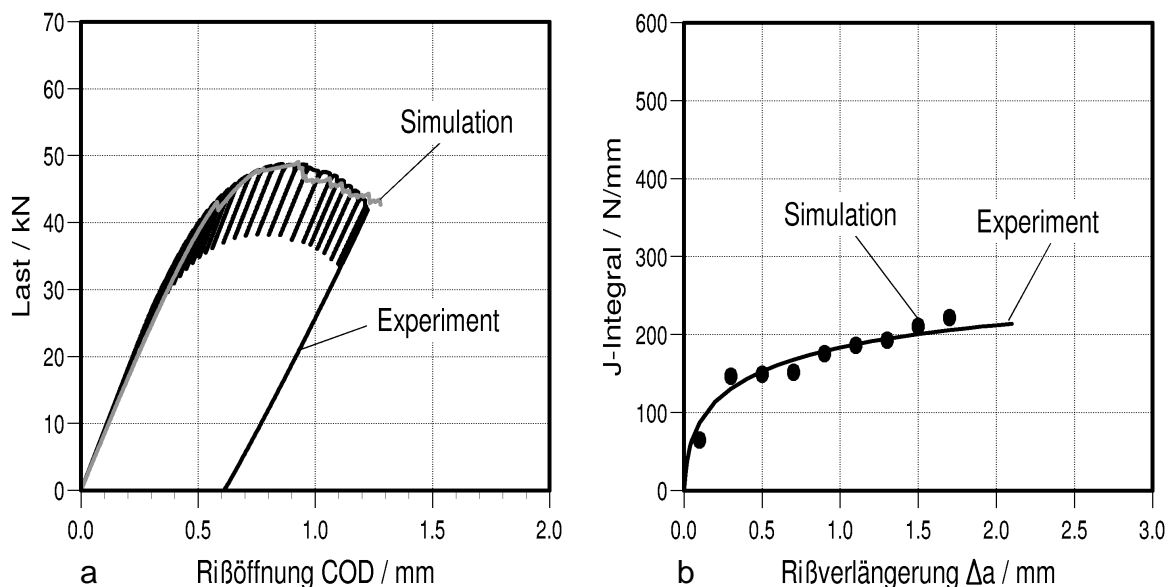


hensweise ist auch bei der Anwendung des nicht-lokalen Gurson-Modells zur Reduktion der Rechenzeiten ratsam.

Im Falle von gekerbten Zugproben beeinflusst der Parameter  $l_c$  im Bereich  $0,05 < l_c < 0,1$  das Probenverhalten nur unwesentlich. Dies ist in **Bild 5.16** für eine gekerbte Zugprobe mit Kerbradius  $r_k = 2$  mm dargestellt. Eine erneute Anpassung der Größe  $l_c$  an die gekerbten Zugproben ist daher nicht erforderlich. Auch für den Werkstoffzustand E60B wird für diese Größe der Wert  $l_c = 0,1$  mm vorgegeben.

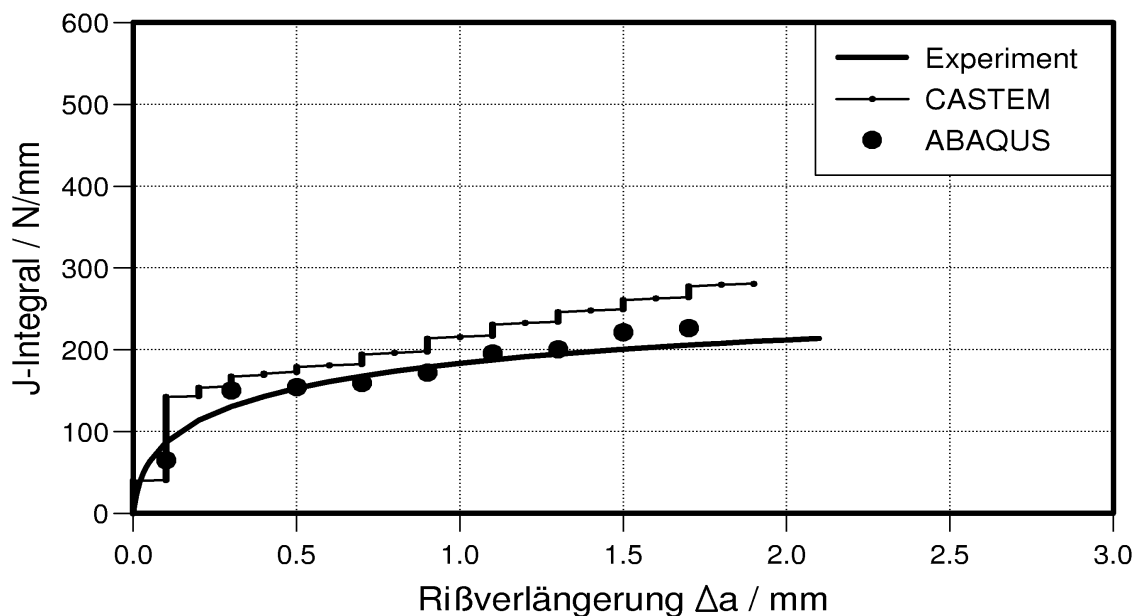


**Bild 5.17:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Einschnürungskurven von gekerbten Zugproben mit Kerbradius  $r_k = 2$  mm (a) und  $r_k = 8$  mm (b) ( $f_0 = 0,13\%$ ,  $l_c = 0,1$  mm,  $\sigma_k = 420$  MPa), Werkstoffzustand E60B (Prüf­temperatur = 90 °C).



**Bild 5.18:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Rissöffnungskurve (a) und Riss­widerstandskurve (b) für eine C(T)25-Probe (20%sk), ( $f_0 = 0,13\%$ ,  $l_c = 0,1$  mm,  $\sigma_k = 420$  MPa), Werkstoffzustand E60B (Prüf­temperatur = 90 °C).

In **Bild 5.17** sind für beide Kerbradien die Berechnung der Last-Einschnürungskurven mit dem Experiment verglichen. Auch für den betriebsbeanspruchten Werkstoffzustand (E60B) konnte mit dem Spannungsparameter  $\sigma_k = 420$  MPa eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden. Durch die schädigungsmechanische Berechnung werden sowohl das Last/Aufweitungs- als auch das Risswiderstandsverhalten ( $J_R$ -Kurve) der C(T)25-Probe gut wiedergeben (**Bild 5.18a** und **b**). Vor allem die  $J_R$ -Kurve des Werkstoffzustandes E60B wird im Gegensatz zur Anpassung in /Uhl/ nun deutlich besser beschrieben. Die Ursache dieser nicht zufriedenstellenden Anpassung in /Uhl/ liegt aber nicht nur in der Parameterwahl von  $f_0$  und  $l_c$ , sondern ist vielmehr in der schon erwähnten problematischen Berechnung des J-Wertes mittels des J-Prozessors begründet. Dies wird in **Bild 5.19** deutlich. Hier sind für die in /Uhl/ angepassten Rousseilier-Parameter ( $\sigma_k = 445$  MPa,  $f_0 = 0,2$  %) die CASTEM-Daten und die hier dargestellte J-Ermittlung direkt aus der berechneten F-COD-Kurve gegenübergestellt. Entsprechend dem Werkstoffzustand E60A (vergl. Bild 5.15b) wird auch für den Werkstoffzustand E60B durch die hier vorgestellte numerisch / analytische  $J_R$ -Kurvenbestimmung auf der Basis der berechneten F-COD-Kurve das Experiment deutlich besser beschrieben als durch die Anwendung des im Programm CASTEM implementierten J-Prozessors.



**Bild 5.19:** Vergleich Experiment-Simulation: Risswiderstandskurve einer C(T)25-Probe (20%sk) über den J-Prozessor (CASTEM) und aus der Last-COD-Kurve (ABAQUS) bestimmt, ( $f_0 = 0,2\%$ ,  $l_c = 0,1$  mm,  $\sigma_k = 445$  MPa, Anpassung aus /Uhl/), Werkstoffzustand E60B (Prüftemperatur = 90 °C).

*Die plattenförmige Einschlussform*

Neben der Annahme nadelförmiger MnS-Einschlüsse wird im Folgenden als zweiter Grenzfall von in der Ebene sichtbar länglichen, elliptischen Teilchen die räumlich plattenförmige Einschlussform betrachtet. Aus Tabelle 5.5 kann für die Platte ein mit dem Faktor F korrigiertes Anfangshohlraumvolumen  $f_0^* = 0,24\%$  entnommen werden. Die erneute Anpassung des Spannungsparameters  $\sigma_k$  an die Laborproben sind graphisch in **Anhang A4** zusammengestellt und ergibt für beide Werkstoffzustände E60A und E60B einen Wert von  $\sigma_k = 470$  MPa.

Welche Einschlussform die Mangansulfide im Werkstoff WB36 tatsächlich aufweisen, ist nicht eindeutig bekannt. Rein anschaulich wird ein nadelförmiger Einschluss in der Ebene nur dann als lang gestreckte Ellipse mit hohem K-Faktor erscheinen ( $K = \text{Verhältnis grösste/kleinste Längenausdehnung}$ ), wenn der metallographische Schliff die Nadel parallel zur Nadelachse schneidet. Werden ellipsoide Nadeln in einem konkreten Winkel zu Nadelachse geschnitten, sind Ellipsen mit geringen K-Verhältnissen in der Schliffebene zu erkennen. Bei Schnitten  $\perp$  zur Nadelachse entstehen Kreise. Im Gegensatz dazu werden metallographisch geschnittene, plattenförmige Einschlüsse sich im Schliffbild fast ausschließlich als Ellipsen mit hohen K-Faktoren darstellen. Wie in Bild 5.12 zu erkennen ist, sind in beiden Werkstoffzuständen E60A und E60B in der LT-Schliffebene sowohl Formen mit geringen K-Faktoren ( $\sim 1$ ) als auch Formen mit erhöhten K-Faktoren in ausreichender Zahl vorhanden. Dies lässt den Schluss zu, dass zur Beschreibung der Einschlussform der Mn-Sulfide im Werkstoff WB36 beide Grenzformen (Nadel und Platte) herangezogen werden müssen.

Anpassung	Anfangshohlraumvolumen $f_0$ (%)	Teilchenabstand $l_c$ (mm)	Spannung $\sigma_k$ (MPa)	Kritisches Hohlraumvolumen $f_c$ (%)
Gemäß /Uhl/	<b>0,2(*)</b>	<b>0,1(*)</b>	445	5(**)
Unter Berücksichtigung der länglichen Teilchenform	0,13 (1) 0,24 (2)	<b>0,1(*)</b>	<b>420(*) (1)</b> <b>470(*) (2)</b>	5(**)

(\*) Diese **Parameter** wurden jeweils angepasst; (1) für Nadeln (2) für Platten

(\*\*) übernommen aus /Seid, Kuß/

**Tabelle 5.6:** Ermittlung der Rousselier-Parameter im Vergleich zu den in /Uhl/ angepassten Parametern bei Berücksichtigung länglicher Teilchenformen.

In **Tabelle 5.6** sind die vorgegebenen und numerisch ermittelten Rousselier-Parameter der durchgeführten Anpassungen gegenübergestellt. Diese Zusammenstellung zeigt, dass die in /Uhl/ gewählten und angepassten Werte ( $f_0 = 0,2\%$ ,  $\sigma_k = 445$  MPa) einen aus beiden Grenzformen ( $f_0^* = 0,13\%$ ,  $\sigma_k = 420$  MPa für Nadel und  $f_0^* = 0,24\%$ ,  $\sigma_k = 470$  MPa für Platte) für die LT-Entnahmerichtung abgeleiteten Mittelwert darstellen. Damit konnte der in /Uhl/ bisher noch fehlende Zusammenhang zwischen dem numerisch angepassten und dem aus den Gefügedaten ermittelten Anfangshohlraumvolumen  $f_0$  geliefert werden. Da in den beiden anderen Entnahmerichtungen (LS und ST) mit der LT-Ebene vergleichbare Teilchengrößenverteilungen vorliegen /Uhl/, kann der Spannungswert  $\sigma_k = 445$  MPa, wie er bereits für verschiedene Stahlsorten ermittelt wurde /Kuß, Seid/ auch auf diesen hier untersuchten Werkstoff 15NiCuMoNb5 (WB36) übertragen werden.

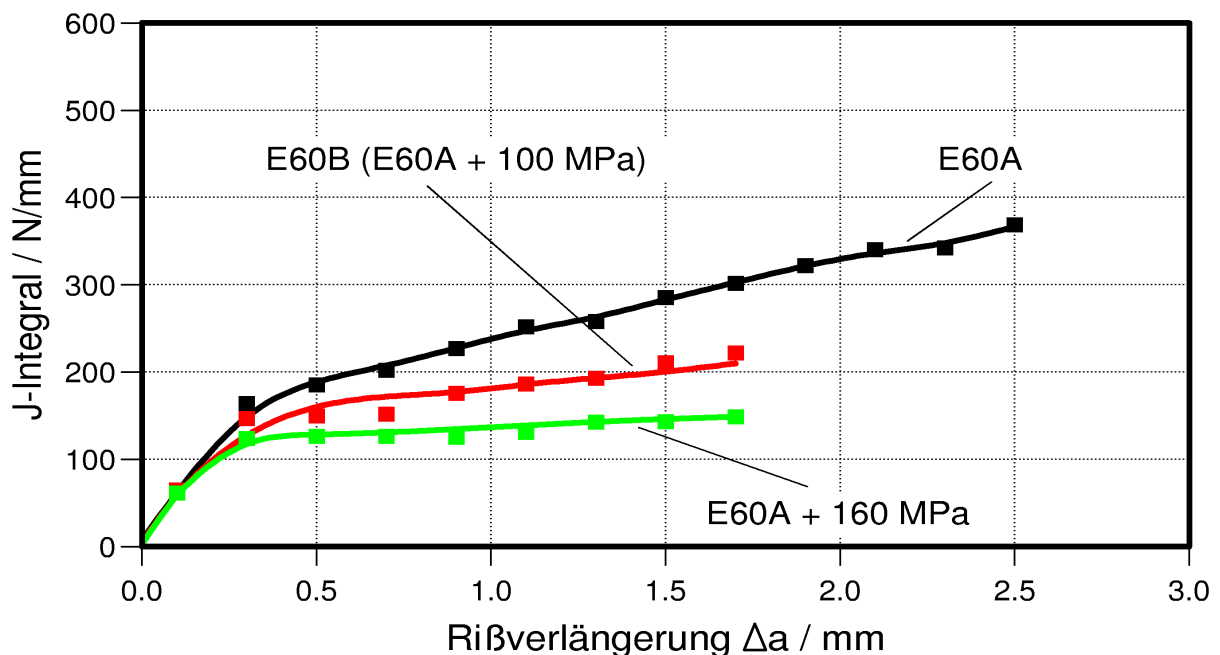
Die in diesem Abschnitt durchgeführten Berechnungen zeigen, dass bei der Anwendung des Rousselier-Modells neben dem Anfangshohlraumvolumen  $f_0$  auch die Teilchenform bei der Anpassung des Spannungswertes  $\sigma_k$  zu berücksichtigen ist. Bei Gefügen mit länglichen, uniaxial ausgerichteten Einschlüssen sind die Rousselier-Parameter richtungsabhängig zu bestimmen. Dazu sind die erforderlichen Kerb- und C(T)-Proben aus entsprechenden Ebenen zu entnehmen. Liegen im Bauteil derartige Gefüge vor, so sind die angepassten, richtungsabhängigen Rousselier-Parameter bei der schädigungsmechanischen Bauteilberechnung ebenfalls richtungsabhängig einzusetzen.

## 5.5 Numerische Abschätzung eines minimierten Risswiderstandes

In den bisherigen Untersuchungen wurden die aktuellen Werkstoffzustände in ihrem Ist-Zustand betrachtet. Jedoch können unterschiedliche Ausscheidungsvorgänge der Cu-Teilchen zu unterschiedlichen Teilchengrößen und diese wiederum zu einer unterschiedlichen Festigkeitszunahme im Werkstoff führen. Obwohl die Anwendung der Russell&Brown-Theorie bei Cu-Teilchen mit  $r_{ppt} < 2$  nm eingeschränkt ist (vergl. Kap. 5.2.2) wird sie hier zur Abschätzung einer minimalen Risswiderstandskurve angewendet. Für einen vorgegebenen Volumenanteil wird in /RB/ die maximale Festigkeitszunahme erreicht, wenn die Cu-Teilchen in der Größenordnung von  $2 \cdot r_0$  liegen. Mit den Daten aus Tabelle 2.1 in Kap. 2.5.1 ergibt dies einen Teilchenradius  $r_{ppt} = 1,24$  nm. Für den Betriebszustand E60B erhält man bei einem Cu-Volumenanteil von  $f_{Cu} = 0,762$  %

eine auf den Ausgangszustand E60A bezogene Festigkeitserhöhung von  $\Delta\sigma = 160$  MPa.

Um dieser nach Russell&Brown ermittelten maximalen Festigkeitszunahme Rechnung zutragen, ist bei den anschließenden schädigungsmechanischen Berechnungen der C(T)-Probe die Fließkurve des Ausgangszustandes E60A um den Wert  $\Delta\sigma_{rel} = 160$  MPa erhöht. Die Risswiderstandskurve ( $J_R$ -Kurve) wird im Folgenden numerisch durch erneute Anwendung des Rousselier-Modells und dem in dieser Arbeit entwickelten (F-COD basierten) J-Prozessors ermittelt. In **Bild 5.20** ist das Ergebnis der numerisch ermittelten Risswiderstandskurve für diesen Fall und für die Werkstoffzustände E60A und E60B gegenübergestellt. Zusätzlich zur bereits bekannten Absenkung der Risszähigkeit von Werkstoffzustand E60A zu Werkstoffzustand E60B stellt sich bei einer Festigkeitszunahme des Zustandes E60A von  $\Delta\sigma_{rel} = 160$  MPa eine weitere Absenkung der Risszähigkeit von  $\sim 50$  N/mm ein. Im Vergleich zum Ausgangszustand E60A wird die Risszähigkeit nahezu halbiert.



**Bild 5.20:** Numerisch ermittelte Risswiderstandskurven einer C(T)25-Probe für den Werkstoffzustand E60A und E60B sowie die nach Russell&Brown maximal mögliche Absenkung des Risswiderstandes.

Diese Anwendung der Russell&Brown-Theorie in Verbindung mit dem Rousselier-Modell zeigt, dass über eine sinnvolle Kombination von Modellen aus unterschiedlichen Längenskalen eine numerische Abschätzung von Materialgrenzkurven ( $J_R$ -Kurve mit einem minimalem Risswiderstand), möglich ist. Die Vorgehensweise, unterschiedliche Längenskalen miteinander zu verknüpfen, wird auch unter dem Begriff der „hierarchischen“ Werkstoffmodellierung zusammengefasst.

Wie bereits in Kap. 5.2.2 dargestellt, wird in Zukunft die Festigkeitszunahme des Werkstoffs aufgrund ausgeschiedener Cu-Teilchen durch verbesserte atomistische Modelle beschrieben und somit in Kombination mit dem Rousselier-Modell eine bessere numerische Abschätzung der Zähigkeitsabnahme möglich sein.

In Kapitel 6 wird unter Anwendung des Dekohäsionsmodells in Verbindung mit dem Rousselier-Modell ebenfalls eine Kombination von unterschiedlichen Schädigungsmodellen zur Beschreibung des ferritischen Werkstoffs 15MnNi6-3 unter Wasserstoffeinfluss verwendet.

## 6 Der Werkstoff 15MnNi6-3 unter Wasserstoffeinfluss

Die Wechselwirkung von Wasserstoff mit metallischen Werkstoffen ist schon lange bekannt und führte bereits bei der von Carl Bosch entwickelten Ammoniaksynthese zu Schäden im Kontaktofen /Bos/. Bei der Untersuchung der geplatzten Rohre zeigte sich, dass der unlegierte Stahl entkohlte: Dabei reagierte der Wasserstoff mit Zementitausscheidungen, wobei Methan gebildet wurde und die dadurch entstehenden hohen Gasdrücke führten an den Korngrenzen zur Werkstoffschädigung. Bis heute stellt die H-induzierte Werkstoffschädigung ein betriebliches Problem dar, da die Wechselwirkung sowohl von gasförmigem als auch elektrolytisch erzeugtem Wasserstoff mit metallischen Werkstoffen in verschiedenen Bereichen der Technik gegeben ist und unter jeweils spezifisch kritischen Bedingungen zu einer Beeinträchtigung des Werkstoffverhaltens führen kann.

Die experimentelle und rechnerische Beschreibung zum Einfluss von gasförmigem Wasserstoff auf das Verformungs- und Schädigungsverhalten des ferritischen Werkstoffes 15MnNi6-3 ist Inhalt dieses Kapitels. Dabei soll nicht die Wechselwirkung von Wasserstoff mit Metallen in all seiner Komplexität behandelt werden. Diese Thematik allein wäre Inhalt für mehrere wissenschaftliche Arbeiten. Vielmehr wird hier aufgezeigt, wie die schädigungsmechanische Wirkung von Wasserstoff auf den Werkstoff experimentell erfasst und numerisch beschrieben werden kann.

Hinsichtlich der metallphysikalischen Vorgänge der wasserstoffinduzierten Schädigung werden im Wesentlichen 4 Theorien diskutiert: Von Zapffe und Sims /Zap/ wurde bereits 1941 die Drucktheorie aufgestellt, die darauf basiert, dass atomar gelöster Wasserstoff an inneren Einschlüssen rekombiniert und dadurch Drücke entstehen, die Porenbildung auslösen. In /Fri/ wird jedoch ein derartiger Versagensmechanismus für die in dieser Arbeit bei geringem Druck (9 MPa) durchgeführten Zugversuche unter gasförmigem Wasserstoff ausgeschlossen.

Bei der Adsorptionstheorie /Eng/ wird angenommen, dass atomarer Wasserstoff an der Rissspitze die Oberflächenenergie herabsetzt und nach Griffith die kritische, für den Rissfortschritt erforderliche Spannung erniedrigt wird. Diese Theorie ist jedoch eingeschränkt, da Wasserstoff nicht nur an der Oberfläche der Rissspitze, sondern auch im rissspitzennahen Bereich wirkt.

Die Versetzungstheorie /Tien/ geht davon aus, dass sich der Wasserstoff entlang der Versetzungslinie anreichert und somit die Versetzungsbewegung behindert. Auch in /Birn/ wird sowohl theoretisch als auch experimentell die Wirkung von Wasserstoff auf

die Bewegung von Versetzungen behandelt. An einem atomistischen Modell wird in Kap. 6.3 untersucht, ob die Beweglichkeit von Versetzungen durch Wasserstoff eingeschränkt oder völlig unterbunden werden kann.

Als vierte Theorie wird im Folgenden die in /Troi/ eingeführte und in /Ori1/ weiterentwickelte Dekohäsionstheorie als Grundlage für die schädigungsmechanischen Berechnungen der Laborproben eingesetzt. Der Grundgedanke dieses Modells besteht darin, dass die Bindungskraft der Metallatome im Metallgitter durch Wechselwirkung mit atomarem Wasserstoff herabgesetzt wird, was im Zusammenwirken mit hohen mechanischen Spannungen die Trennung des Materials bewirkt. Diese auf atomarer Ebene entwickelte Theorie wird in dieser Arbeit kontinuumsmechanisch mit der FE-Methode über Knotenlöstechniken umgesetzt. Die Auswahl dieses Schädigungsmodells zur numerischen Beschreibung des Werkstoffs 15MnNi6-3 unter Wasserstoffeinfluss basiert auch auf den in /Absch2/ durchgeführten umfangreichen, experimentellen Untersuchungen. Die für die Auswahl wichtigen Ergebnisse aus /Absch2/ werden im Folgenden zusammengestellt.<sup>1</sup>

## 6.1 Einfluss des Wasserstoffs auf das Verformungs- und Bruchverhalten

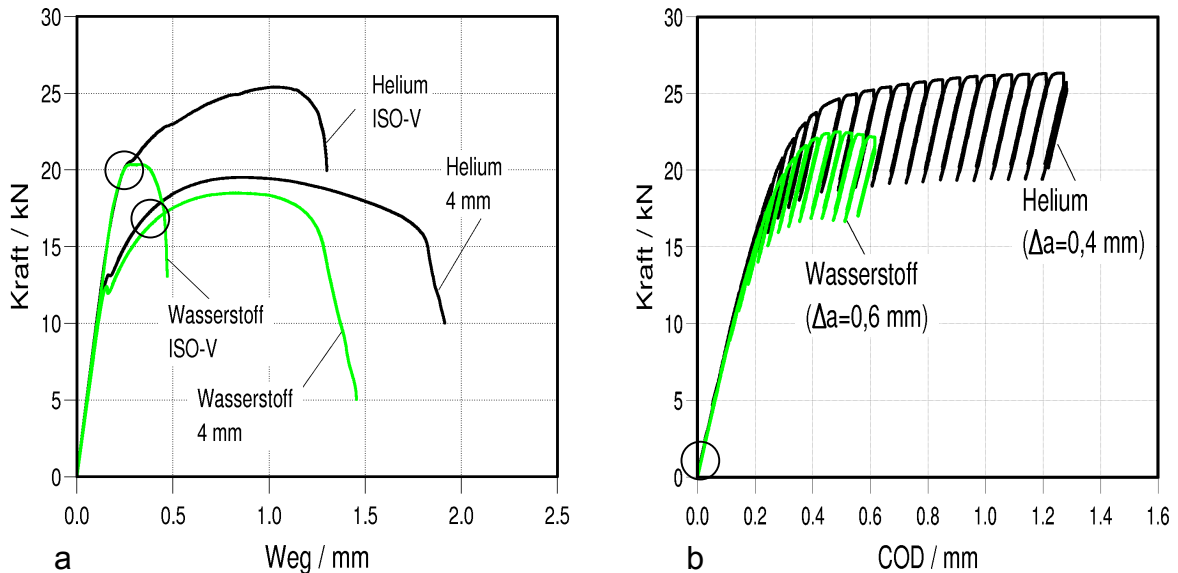
Als ersten experimentellen Nachweis des Wasserstoffeinflusses auf das Verformungsverhalten des Werkstoffs 15MnNi6-3 sind in **Bild 6.1** die Kraft-Verschiebungskurven von gekerbten Rundzugproben und die Kraft-COD-Kurven von C(T)-Proben unter einem inerten Medium (Helium) und unter Wasserstoff dargestellt. Die Reduzierung des Verformungsvermögens wird vor allem bei den ISO-V-gekerbten Zugproben anhand der Abnahme der maximalen Kraft und der Abnahme der Probenverlängerung (Weg) unter Wasserstoff deutlich. Bei den Proben mit milderer Kerbe (Kerbradius = 4 mm) ist dagegen nur eine ausgeprägte Abnahme der maximalen Probenverlängerung unter Wasserstoffatmosphäre zu erkennen (Bild 6.1a). Des Weiteren fällt auf, dass der Wasserstoff nicht unmittelbar bei Belastungsbeginn Einfluss auf das Verformungsverhalten der Kerbzugproben ausübt, sondern erst nachdem eine bestimmte Probenbelastung erreicht ist. Dieses Verhalten wird aufgrund des Vorliegens einer Oxidschicht auf der Probenoberfläche hervorgerufen, welche die Wasserstoffaufnahme behindert /Zwick/. Erst durch die Verformung der Oberfläche reißen diese Oxidschichten auf und der Wasserstoff kann in den Werkstoff eindringen. Zudem steigt bei plastischer Verformung die

<sup>1</sup> Für die Bereitstellung der experimentellen Ergebnisse sei an dieser Stelle Herrn Dr. phil. Peter Deimel und Herrn Dipl.-Ing. Erich Sattler gedankt. Für die Bereitschaft von Herrn Dr. rer. nat. Denis Saraev, durch atomistische Simulationen das Gesamtergebnis abzurunden, sei ebenfalls gedankt.



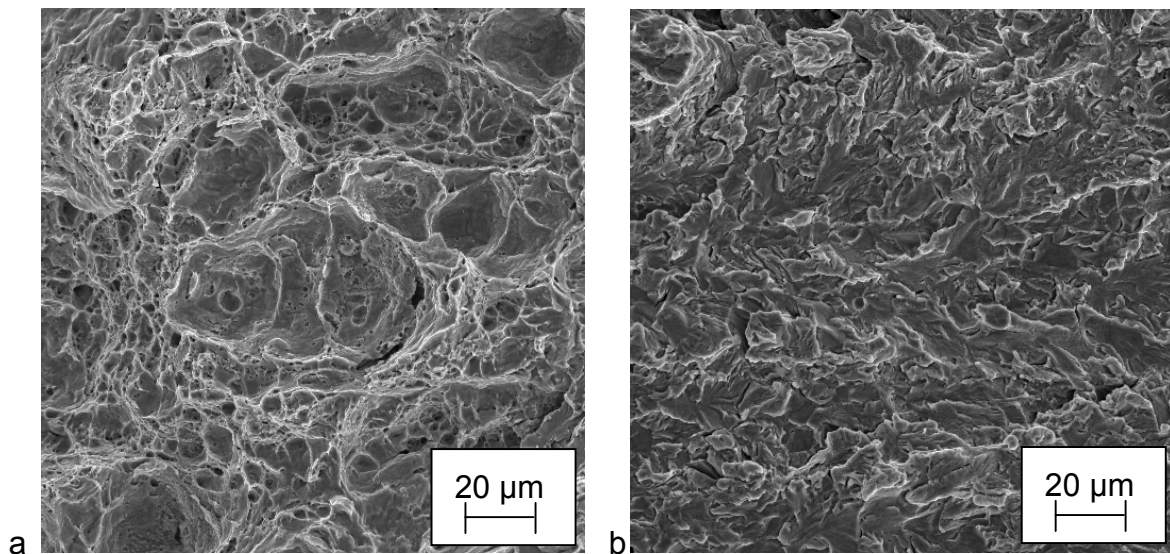
Dichte wandernder Versetzungen stark an und kann durch sogenannte „Pipe-Diffusion“ entlang der Versetzungslinie die Wasserstoffabsorption begünstigen /Got/.

Werden Bruchmechanikproben aus dem Werkstoff 15MnNi6-3 unter Wasserstoffeinfluss gesetzt, so ist eine deutliche Abnahme der notwendigen Bruchenergie (Fläche unter der F-COD-Kurve) bei vergleichbar geringem Risswachstum  $\Delta a$  zu erkennen (Bild 6.1b).



○ Postulierter Wasserstoffeintritt in die Probe (Begründung siehe Kap. 6.4)

**Bild 6.1:** (a) Kraft-Verlängerungs-Kurven von gekerbten Rundzugproben (ISO-V-Kerbe und Kerbe mit Radius=4mm) unter Helium und Wasserstoffeinfluss und (b) Kraft-COD-Kurven von C(T)20-Proben mit Seitenkerbe (20%) mit vergleichbar geringem Risswachstum  $\Delta a$  unter dem Einfluss beider Medien /Absch2/.



**Bild 6.2:** Bruchfläche von C(T)20-Proben unter Helium (a) und Wasserstoffeinfluss (b) /Absch2/.

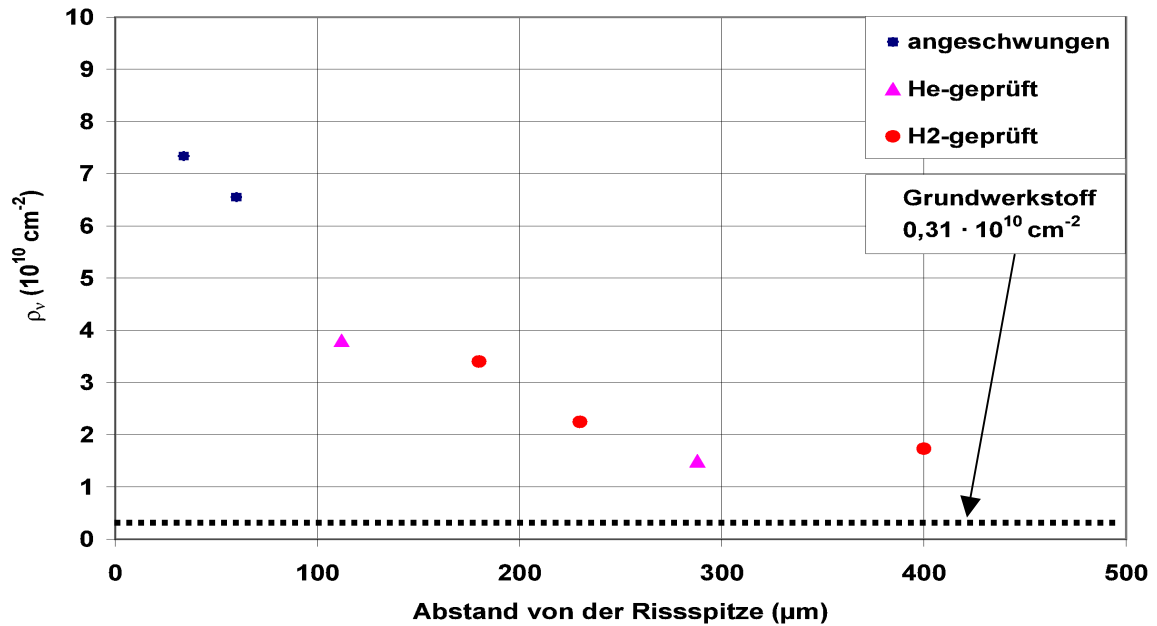
Dieses unterschiedliche Schädigungsverhalten des Werkstoffs 15MnNi6-3 unter den verschiedenen Medien Helium und Wasserstoff zeigt sich auch anhand der Bruchflächen von C(T)20-Proben. Während die in Helium geprüfte Probe einen fein gegliederten, durch Hohlraumbildung an nicht metallischen Einschlüssen initiierten Wabenbruch erkennen lässt (**Bild 6.2a**), zeigt die in Wasserstoff geprüfte Probe einen verformungsarmen Bruch mit stark reduzierter Wabenbildung (**Bild 6.2b**).

Diese verminderte Verformungsfähigkeit des Werkstoffs unter Wasserstoffeinfluss wurde in /Absch2/ an C(T)20-Proben auch anhand von Fließlinien, Härtemessungen sowie über Rekristallisationsglühungen bestätigt. Dabei wurde jeweils eine deutliche Abnahme der plastischen Zone unter Wasserstoffeinfluss festgestellt.

Die experimentellen Untersuchungen /Absch2/ ergeben einen deutlichen Eindruck der Wirkung von Wasserstoff auf das Verformungs- und Bruchverhalten des Werkstoffs 15MnNi6-3. Dabei fällt vor allem die durch Wasserstoffeinfluss hervorgerufene Abnahme der Werkstoffduktilität auf. Die Ursache für derartige Veränderungen im Werkstoffverhalten können meist auf Veränderungen im Kristallgitter zurückgeführt werden. Im Zusammenhang mit einer veränderten Verformungsfähigkeit des Werkstoffs sind dabei Einwirkungen auf die Dichte und Beweglichkeit von Versetzungen zu nennen /Nel/. Auch Veränderungen bzw. Schwächungen von Atombindungen können das Werkstoffverhalten wesentlich beeinflussen /Ori1/. Experimentelle Untersuchungen und atomistische Modellrechnungen sollen im Folgenden dazu beitragen, ein geeignetes Schädigungsmodell zur Beschreibung des Wasserstoffeinflusses aufzustellen und im Rahmen der oben vorgestellten Modelle die Wirkung von Wasserstoff zu überprüfen.

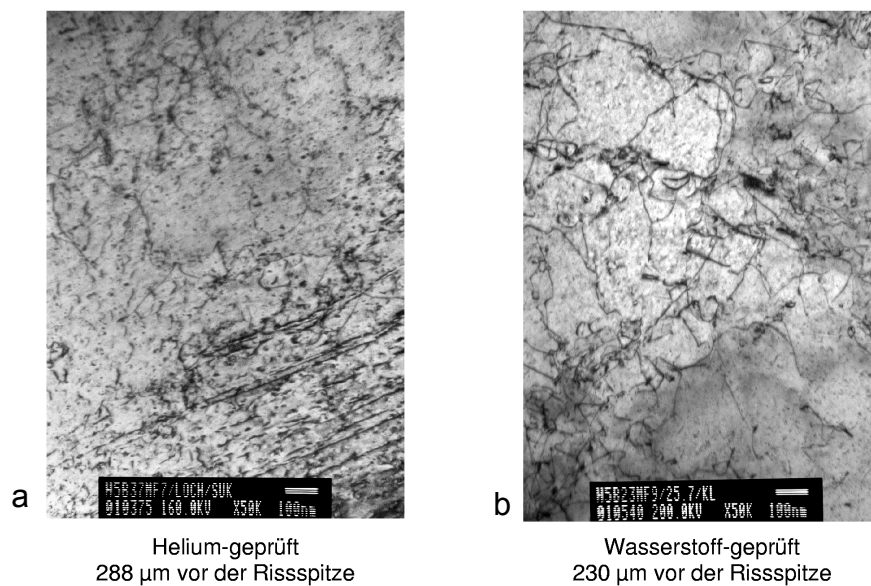
## **6.2 Einfluss des Wasserstoffs auf die Versetzungsdichte**

An gedünnten Metallfolien kann die Ausbildung der Versetzungsanordnung sowie die Versetzungsdichte im TEM (Transmissionselektronenmikroskopie) ermittelt werden /Absch2/. Für drei unterschiedliche, mit Rissen versehene Proben (angeschwungen; Helium-geprüft; Wasserstoff-geprüft) wird die Untersuchung der Versetzungsstrukturen in geringem Abstand (von 30µm bis 400µm) vor der Rissspitze durchgeführt. Der unbeanspruchte Grundwerkstoff wird als Referenz in die Untersuchung mit einbezogen. Die Entnahme der Metallfolien aus den Bruchmechanikproben und die experimentelle Vorgehensweise sind in /Absch2/ ausführlich beschrieben. Die ermittelten Versetzungs-



**Bild 6.3:** Versetzungsdichten nach /Ham/ im Werkstoff 15MnNi6-3 unter Helium und Wasserstoffeinfluss für unterschiedliche Belastungszustände in Abhängigkeit von der Entfernung zur Risspitze. Mit angegeben ist die Versetzungsdichte für den unbeanspruchten Grundwerkstoff /Absch2/.

dichten für die untersuchten Werkstoffzustände sind in **Bild 6.3** grafisch über dem Abstand von der Risspitze dargestellt. Wie zu erkennen ist, wird die Versetzungsdichte durch das Prüfmedium nicht wesentlich beeinflusst. Insgesamt tendieren die Versetzungsdichten für beide Proben (Helium-geprüft und Wasserstoff-geprüft) mit zunehmendem Abstand von der Risspitze hin zum unverformten Grundwerkstoff. In **Bild 6.4**



**Bild 6.4:** Versetzungsstrukturen im Ferrit für die Probenzustände Helium-geprüft (a) und Wasserstoff-geprüft (b) bei ähnlichem Abstand vor der Risspitze (20 % seitengekerbte C(T)20-Proben aus 15MnNi6-3 bei vergleichbar geringem Risswachstum ( $\Delta a = 0,4$  mm in Helium,  $\Delta a = 0,6$  mm in Wasserstoff)).

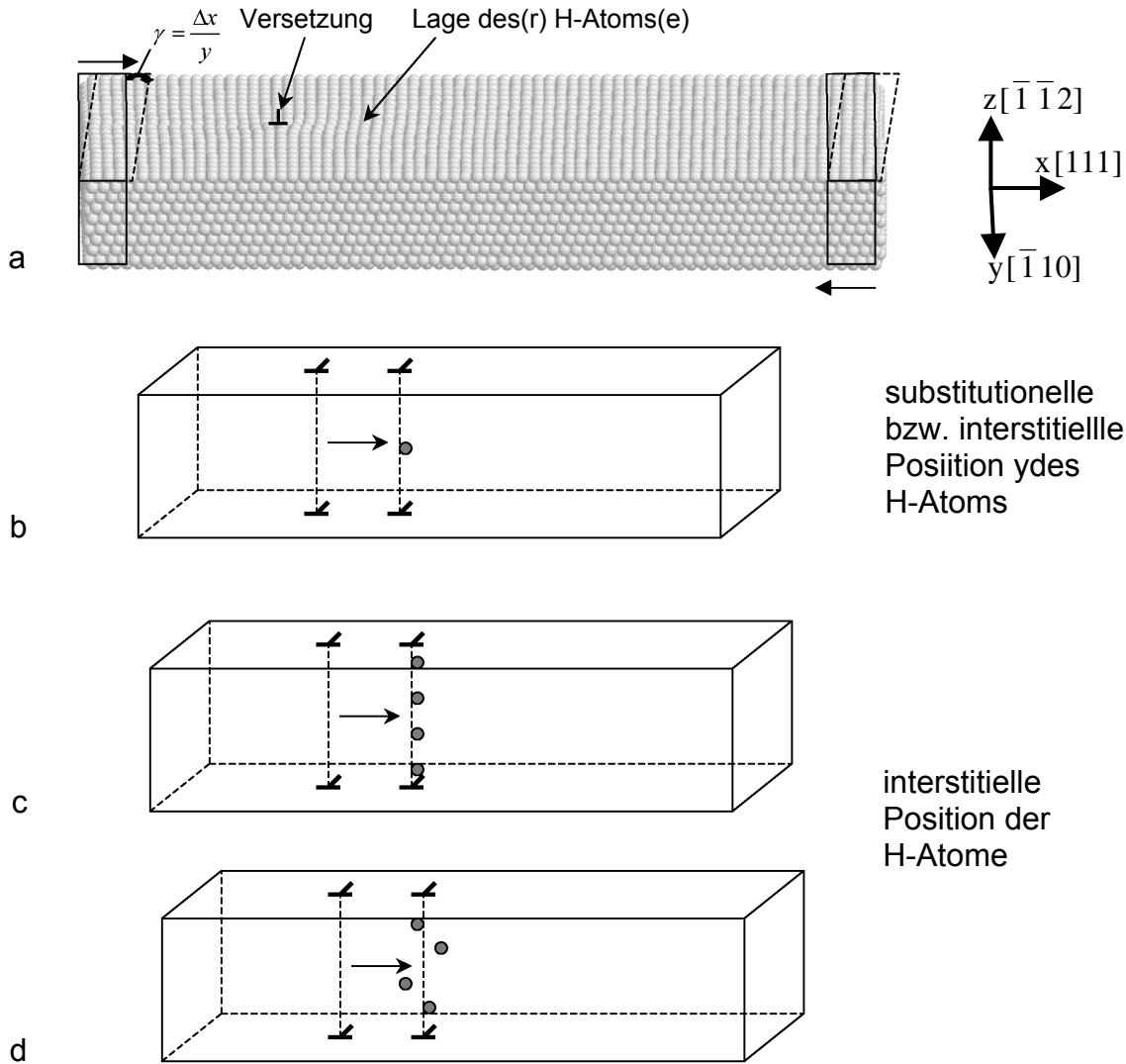
sind die Versetzungsstrukturen im Ferrit für die Probenzustände Helium-geprüft und Wasserstoff-geprüft bei ähnlichem Abstand vor der Rissspitze (288  $\mu\text{m}$  bzw. 230  $\mu\text{m}$ ) dokumentiert. Es ist zu erkennen, dass die Anordnung der Versetzungen für die in Wasserstoff geprüfte Probe im Vergleich zu der in Helium geprüften Probe weitgehend knäuelartige Versetzungslinien mit lokal versetzungsfreien Bereichen aufweist. Die Auswirkung derartiger Umordnungen von Versetzungen auf die Werkstoffzähigkeit ist nicht eindeutig geklärt.

Nach dem derzeitigen Kenntnisstand besteht jedoch kein Zweifel, dass der aus der Gasphase über Adsorption, Dissoziation und Absorption aufgenommene und atomar gelöste Wasserstoff sich in Bereichen hoher Versetzungskonzentration anreichert und bei Zugbeanspruchung metallischer Werkstoffe entlang von Versetzungen durch das Metallgitter transportiert wird /Tien/. Andererseits sind Versetzungen wegen ihrer hohen Bindungsenergie zum Wasserstoff wirkungsvolle Wasserstofffallen /Kes/.

Ein wesentlicher Einfluss auf den Wasserstofffluss im Material geht von dem in der Probe vorliegenden Spannungszustand aus: Der Wasserstoff diffundiert in Richtung zunehmender hydrostatischer Spannung  $\sigma_h$ , wobei der Wasserstofffluss vom  $\sigma_h$ -Gradient abhängt /Ori2/. Dies wird in Kapitel 6.4 diskutiert. Ob die Beweglichkeit von Versetzungen durch Wasserstoff eingeschränkt oder völlig unterbunden werden kann, soll anhand der folgenden atomistischen Berechnungen untersucht werden.

### 6.3 Einfluss des Wasserstoffs auf die Versetzungsbewegung

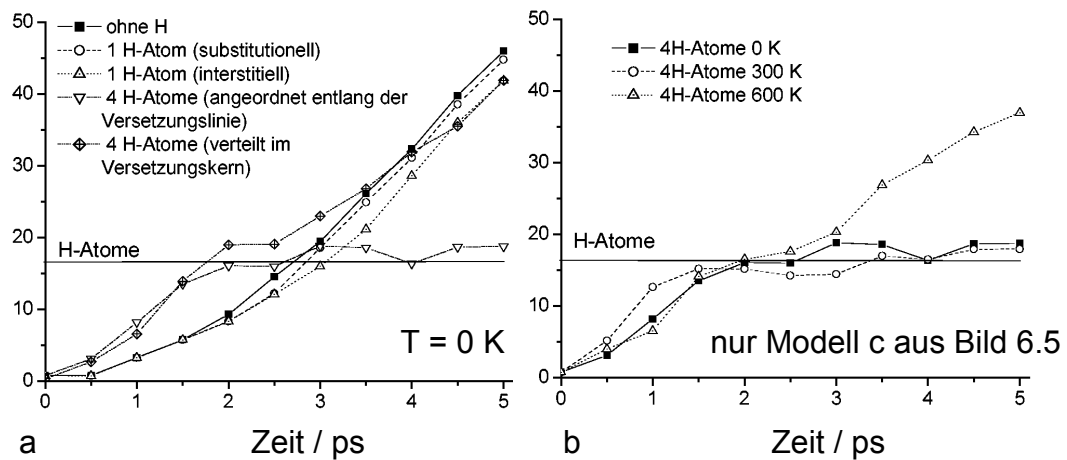
Von Saraev wurde in /Web1/ ein Modell von kubisch-raumzentriertem Eisen als quaderförmiges Volumen aufgebaut, das eine  $a_0/2[111](-110)$ -Stufenversetzung enthält (**Bild 6.5a**). Die x-, y- und z-Koordinatenachsen sind entlang [111], [-110] und [-1-12] ausgerichtet. Periodische Randbedingungen werden entlang der z-Richtung, das heißt entlang der Richtung der Versetzungslinie aufgebracht. Die Versetzung besitzt daher eine unendliche Länge. Die Außenseiten senkrecht zu den x- und y-Achsen sind frei. Die Maße der Simulationszelle entlang der x-, y- und z-Achsen betragen 172,5, 79,4 und 21,1 Å. Die Bewegung der Versetzung wurde durch Aufbringen einer äußeren Scherverformung angeregt. Die Wasserstoffatome werden in den Versetzungsweg gesetzt, so dass die Mitte der sich bewegenden Versetzung die H-Atome durchschneidet. Der



**Bild 6.5:** Das Simulationsmodell (a) und die Anordnung der Wasserstoffatome: Ein substitutionelles oder interstitielles Wasserstoffatom (b); vier interstitielle Wasserstoffatome entlang der Versetzungslinie angeordnet (c); vier interstitielle Wasserstoffatome um die Versetzungslinie verteilt (d).

Abstand zwischen der Mitte des Versetzungskerns und den Wasserstoffatomen beträgt  $\sim 16 \text{ \AA}$ . Es werden die folgenden H-Modelle betrachtet: Im ersten Modell (**Bild 6.5b**) besetzt ein Wasserstoffatom eine Leerstelle im Eisengitter (substitutionelles Atom). Im zweiten Modell besetzt das Wasserstoffatom einen Zwischengitterplatz (ebenfalls Bild 6.5b). Wegen der geringen Größe des H-Atoms tritt diese interstitielle Lage im Metallgitter bevorzugt auf. Das dritte und das vierte Modell enthalten je vier Wasserstoffatome (interstitiell). Im dritten Modell sind die Wasserstoffatome wie in den ersten zwei Modellen entlang der Versetzungslinie (**Bild 6.5c**) angeordnet. Im vierten Modell werden die Wasserstoffatome so verteilt, dass keines von ihnen im Versetzungskern liegt (**Bild 6.5d**). Die ersten zwei Modelle entsprechen einer Wasserstoffdichte entlang der Versetzungslinie von über  $0,47 \text{ nm}^{-1}$ , die zweiten zwei der Dichte  $1,9 \text{ nm}^{-1}$ . Wegen der Perio-

dizität in z-Richtung enthalten die Modelle nicht nur ein bzw. vier Wasserstoffatome, sondern eine unendliche Zahl von Wasserstoffatomen, die entlang der Versetzungslinie angeordnet sind. Alle aufgestellten Modelle werden einer dynamischen Belastung mit einer Belastungsrate von  $2,42 \times 10^{-2} \text{ ps}^{-1}$  unter der Annahme interatomarer EAM-Potentiale /Rud/ unterworfen. Die Position der Versetzung wird im Folgenden zu unterschiedlichen Simulationszeiten dargestellt. Der Algorithmus zur Kennzeichnung der Versetzungsposition basiert auf der Auswahl der energiereichsten Atome des Systems. Die Position der Versetzung als Funktion der Zeit wird in **Bild 6.6a** für alle Modelle gezeigt. Die Volllinie mit ausgefülltem Quadrat zeigt die Ausbreitung der Versetzung unter



**Bild 6.6:** Die x-Position der Versetzung als Funktion der Zeit für die unterschiedlichen Wasserstoffmodelle (a) bei 0 K und für das Modell mit hoher Wasserstoffkonzentration und der starken Ausrichtung von H entlang der Versetzungslinie bei 0 K, 300 K und 600 K (b).

Scherverformung in einem idealen Eisengitter. Die Anwesenheit eines substitutionellen Wasserstoffatoms verlangsamt die Versetzungsbewegung geringfügig, wenn die Versetzung sich seiner Position nähert (gestrichelte Linie mit Kreisen, Bild 6.6a). Ein interstitielles Wasserstoffatom scheint ein wirkungsvolleres Hindernis für die Versetzungsbewegung als ein substitutionelles zu sein (punktirierte Linie mit Dreiecken in Bild 6.6a). Eine Zunahme der Wasserstoffkonzentration nahe des Versetzungskerns ändert das Verhalten der Versetzung deutlich: Die Wasserstoffatome ziehen die Versetzung an. Diese Anziehung beschleunigt die Versetzungsbewegung, wenn sich die Versetzung den Wasserstoffatomen nähert und ihre Bewegung wird verlangsamt, wenn die Versetzung die Position der Wasserstoffatome erreicht hat. Solch hohe Konzentrationen von Wasserstoffatomen beeinflussen das Versetzungsgleiten nicht wesentlich, wenn die Wasserstoffatome nahe dem Versetzungskern verteilt werden (Bild 6.6a, die Linie mit gekreuzten Rhomben). Jedoch kann die starke Ausrichtung der Wasserstoffatome entlang einer Linie, die von der Versetzung direkt passiert wird, die Versetzungsbewegung

zurückhalten (die Linie mit den umgekehrten Dreiecken in Bild 6.6a). Alle Berechnungen wurden bei der Temperatur von 0 K durchgeführt.

Um einen Temperatureffekt auf das Versetzungsquergleiten zu untersuchen, wird das Modell mit hoher Wasserstoffkonzentration und mit starker Ausrichtung der H-Atome entlang der Versetzungslinie (Modell c in Bild 6.5) bei Raum- und erhöhten Temperaturen behandelt. Die Resultate sind in **Bild 6.6b** gezeigt. Wie bei 0 K wurde bei Raumtemperatur ein ähnliches Verhalten gefunden - die Versetzung wird durch die Wasserstoffatome zurückgehalten. Allerdings können die Wasserstoffatome bei einer Temperatur von 600 K wegen ihrer eigenen erhöhten Mobilität die Versetzungsbewegung nicht effektiv behindern (Bild 6.6b).

Die atomistischen Simulationen zeigen, dass Wasserstoffatome in dem betrachteten Fall nur dann als Hindernisse für die Versetzungsbewegung dienen können, wenn die Wasserstoffatome in hoher Konzentration auftreten. Bei erhöhten Temperaturen ist jedoch auch diese Behinderung außer Kraft gesetzt. Insgesamt kann aus den atomistischen Simulationen geschlossen werden, dass die verformungsreduzierende Wirkung des Wasserstoffs auf den Werkstoff nicht aus der Behinderung von Versetzungsbewegungen abzuleiten ist. Vielmehr sind Schwächungen von Atombindungen als Ursache für die reduzierte Verformungsfähigkeit des Werkstoffs unter Wasserstoffeinfluss anzunehmen. Damit wird die von /Troii/ vorgeschlagene und von /Ori1/ weiterentwickelte Dekohäsionstheorie bestätigt.

Für die nun anschließende schädigungsmechanische Simulationen der Modellproben unter Wasserstoffeinfluss und der Wahl eines geeigneten Schädigungsmodells kann aus den bisher dargestellten experimentellen Untersuchungen an Metallfolien und den atomistischen Simulationen folgendes abgeleitet werden: Das verwendete Schädigungsmodell sollte in möglichst einfacher Form die Mechanismen einer Materialschädigung über die Schwächung von Atombindungen darstellen. Auf kontinuumsmechanischer Ebene kann dies in der FE-Methode über Knotenlöstechniken realisiert werden. Ein nach diffundierender Wasserstoff kann zusätzlich über zeitabhängige Gesetzmäßigkeiten der Materialtrennung beschrieben werden. Beide Anforderungen werden von dem im folgenden Kapitel angewendeten und in Kapitel 2.3.3.2 anhand Bild 2.14 vorgestellten Dekohäsionsmodell (DKM) erfüllt.

## 6.4 Numerische Schädigungssimulationen

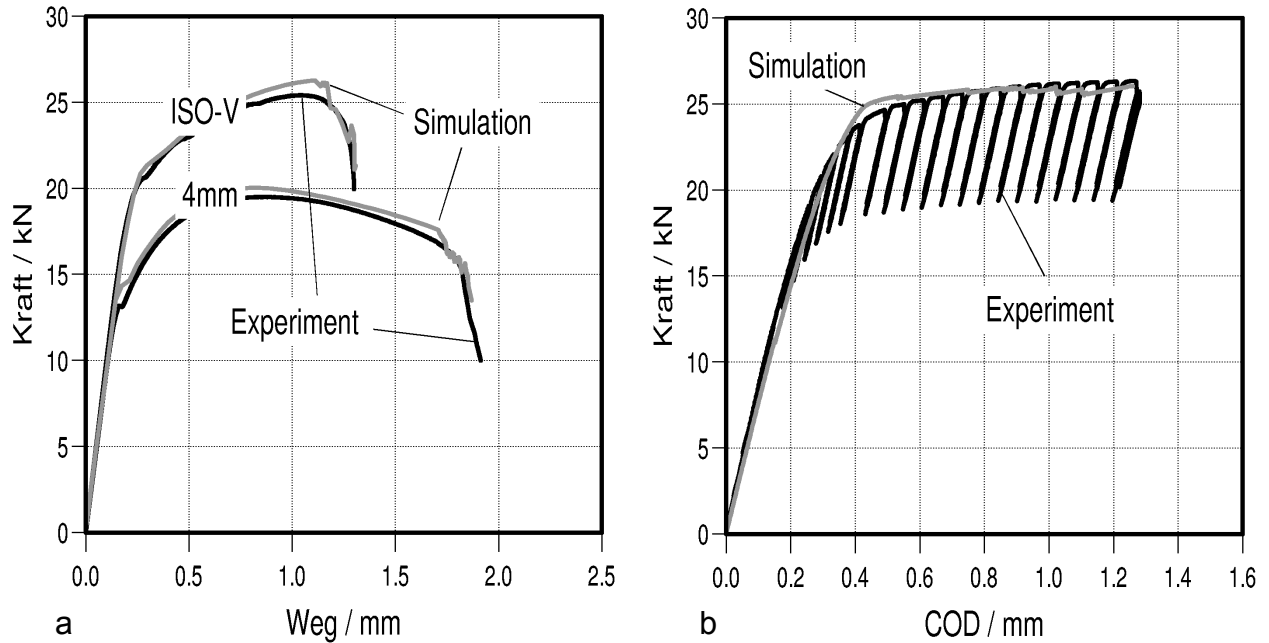
Die numerischen Untersuchungen umfassen schädigungsmechanische Berechnungen zum Wasserstoffeinfluss auf das Verformungs- und Bruchverhalten des untersuchten Werkstoffs 15MnNi6-3. Die experimentellen Untersuchungen an C(T)20-Proben zeigen hinsichtlich des Wasserstoffeinflusses eine verformungsreduzierende Wirkung, die über ein Schädigungsmodell zu beschreiben ist, welches verformungsarme Versagensmechanismen beinhaltet. Durch die Wahl des Dekohäsionsmodells (vergl. Kap. 2.3.3.2, Bild 2.14) kann dieser Anforderung Rechnung getragen werden. Werkstoffbereiche, die auf duktilen Versagen hinweisen, werden über das in Kap. 2.3.2. vorgestellte und in Kap. 5 für den Werkstoff 15NiCuMoNb5 (WB36) bereits erfolgreich eingesetzte Rousselier-Modell numerisch modelliert.

Ziel der schädigungsmechanischen Berechnung unter Berücksichtigung lokaler Größen wie Spannungen und Dehnungen („local approach“) ist die Erweiterung dieser Rechenmodelle auf den Fall der Beanspruchung von Werkstoffen unter gasförmigem Wasserstoffeinfluss.

Das in Kombination mit dem Dekohäsionsmodell angewendete Rousselier-Modell erfordert zunächst eine numerische Anpassung der Rousselier-Modellparameter für diesen Werkstoff. Dazu werden die in inertem Medium (Helium) geprüften Kerbzugproben und die C(T)-Probe herangezogen. Da für den Werkstoff 15MnNi6-3 keine ausführlichen metallographischen Untersuchungen und somit keine Kenntnis über das Anfangshohlraumvolumen  $f_0$  vorliegen, wird der in Kap. 5.4.2 für Stahl erneut bestätigte Wert von  $\sigma_k = 445$  MPa auch auf diesen Werkstoff übertragen und das unbekannte Anfangshohlraumvolumen  $f_0$  wird aus den schädigungsmechanischen Berechnungen von gekerbten Zugproben abgeleitet. Für den hier untersuchten Werkstoff liegen Kerbzugversuche an unterschiedlich gekerbten Proben (ISO-V, 2 mm, 4 mm und 8 mm Kerbradius) vor. Stellvertretend für diese Proben ist in **Bild 6.7a** der Vergleich zwischen Experiment und Simulation für eine Kerbzugprobe mit ISO-V-Kerbe und mit Kerbradius  $r = 4$  mm dargestellt. Bei Vorgabe eines Anfangshohlraumvolumens von  $f_0 = 0,05$  % wird das Probenverhalten numerisch gut abgebildet. Das Anfangshohlraumvolumen  $f_0$  kann, wie bereits in Kap. 5.4.2 vorgestellt, auch aus der chemischen Zusammensetzung ermittelt werden. In die Beziehung nach /Frank/ geht dabei der Mangan- und Schwefelgehalt des Werkstoffs ein:

$$f_0 = 0,054 (S\% - (0,001/Mn\%)). \quad (6.1)$$





**Bild 6.7:** Numerische Anpassung der Rousselier Modellparameter an eine Kerbzugprobe mit ISO-V-Kerbe und mit Kerbradius  $r = 4$  mm (a) und an eine C(T)20-Probe (20 %sk, b), Prüfmedium Helium:  $f_0 = 0,05$  %,  $l_c = 0,05$  mm.  $\sigma_k = 445$  MPa.

Mit den Angaben der Stückanalyse (S% = 0,008, Mn% = 1,49, /Arb3/) ergibt sich damit nach Gl. (6.1) /Frank/ ein Anfangshohlraumvolumen von  $f_0 = 0,04$  %, welches den numerisch ermittelten Wert von  $f_0 = 0,05$ % bestätigt. Eine Formkorrektur von  $f_0$ , wie dies in Kapitel 5.4.2 für den Werkstoff WB36 erforderlich war, ist in diesem Fall nicht durchzuführen, da angenommen werden kann, dass im 15MnNi6-3-Gefüge hauptsächlich Einschlüsse mit einer nahezu kugelförmigen Teilchenform vorliegen.

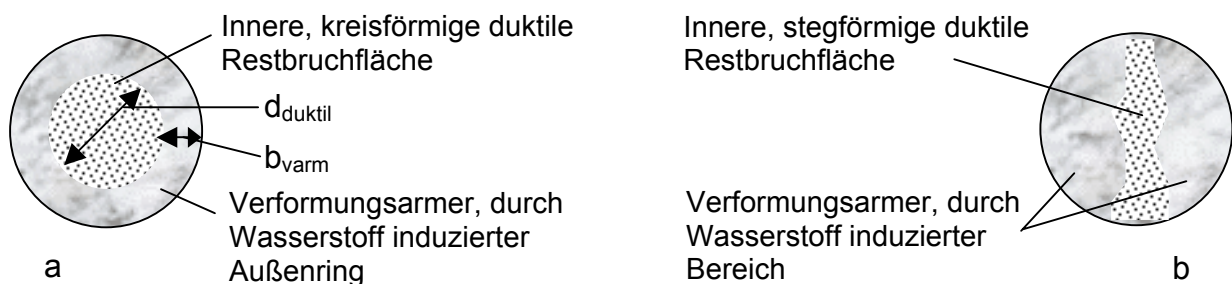
Der mittlere Abstand der Poren ( $l_c$ ), ebenfalls ein Parameter des Rousselier-Modells, wird über eine entsprechende Wahl der Elementkantenlänge in das Berechnungsmodell eingebracht. Die Ermittlung dieser geometrischen Größe erfolgt über die Anpassung des numerisch ermittelten Kraft-COD-Verlaufs an die in Helium geprüfte C(T)20-Probe. Wird ein mittlerer Porenabstand von  $l_c = 0,05$  mm vorgegeben, wird das Kraft-COD-Verhalten der C(T)20-Probe numerisch gut beschrieben (**Bild 6.7b**). In /Arb3/ wird für die nichtmetallischen Einschlüsse ein mittlerer Teilchendurchmesser von  $D = 1,8$   $\mu\text{m}$  angegeben. Bei einem Volumenanteil von  $f_0 = 0,05$  % erhält man aus der in /Seid/ dokumentierten geometrischen Beziehung

$$l_c = 0,806 \cdot \frac{D}{\sqrt[3]{f_0}} \quad (6.2)$$

einen mittleren Porenabstand von  $l_c = 0,02$  mm.

Die Problematik des Unterschieds zwischen numerisch angepasstem und gefügerelevantem Wert des Porenabstandes  $l_c$  ist bereits in Kapitel 5.4.2 diskutiert. Sie besteht darin, dass durch diese Größe die Energieaufnahme im Element beeinflusst wird und somit die Größe  $l_c$  nicht ausschließlich aus mikrostrukturellen Abmessungen (mittlere Hohlraumabstand) abgeleitet werden kann. Entsprechend dem Werkstoff WB36 (Kap. 5.4.2) ist auch im Falle des Werkstoffs 15MnNi6-3 der numerisch angepasste Wert  $l_c$  nahezu doppelt so groß wie der aus dem Gefüge abgeleitete Wert.

Zunächst werden die beiden Kerbzugproben (Probe mit ISO-V-Kerbe und Probe mit Kerbradius  $r = 4$  mm) unter Wasserstoffeinfluss und unter Anwendung des Dekohäsionsmodells (DKM) in Kombination mit dem Rousselier-Modell schädigungsmechanisch simuliert. Das im Experiment gefundene und in Bild 6.1a dargestellte, von der Kerbform abhängige Verformungsverhalten der Kerbzugproben unter Wasserstoffeinfluss äußert sich auch in unterschiedlichen Bruchflächen. Bei der Probe mit ISO-V-Kerbe (**Bild 6.8a**) kann die Bruchfläche über zwei konzentrische Kreise beschrieben werden, wobei der innere Kreis der duktilen Restbruchfläche einen Durchmesser  $d_{\text{duktil}} = 3,7$  mm und der verformungsarme durch Wasserstoffeinfluss hervorgerufene Außenring eine Breite von  $b_{\text{varm}} = 1,15$  mm aufweist. Im Gegensatz dazu wird bei der Kerbzugprobe mit Kerbradius

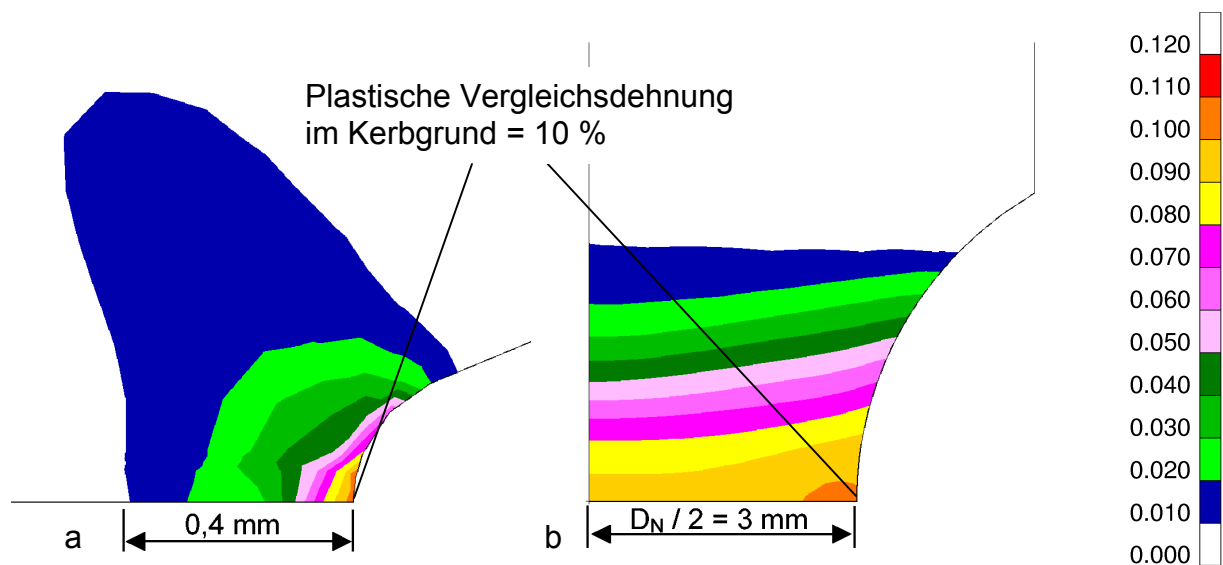


**Bild 6.8:** Bruchfläche (schematisch) bei den Kerbzugproben unter Wasserstoffeinfluss: Probe mit ISO-V-Kerbe (a) und Probe mit Kerbradius  $r = 4$  mm (b).

$r = 4$  mm die wasserstoffinduzierte verformungsarme Bruchfläche durch einen zähen, stegartigen Bereich von duktiler Restbruchfläche aufgeteilt (**Bild 6.8b**). Um auch diese Probe axialsymmetrisch modellieren zu können, wird die stegartige Fläche in eine äquivalente Kreisfläche überführt. Im Rechenmodell können somit wieder zwei konzentrische Kreise angenommen werden mit einem duktilen Innenkreis von  $d_{\text{duktil}} = 3$  mm und einem verformungsarmen Außenring mit der Breite  $b_{\text{varm}} = 1,5$  mm. Die stegförmige Bruchfläche der Kerbzugprobe mit Kerbradius  $r = 4$  mm (Bild 6.8b) deutet auf einen ungleichförmigen Wasserstoffeintritt hin. Die Ursache dafür kann in der Entwicklung von Nebenrissen auf der Probenoberfläche mit zunehmender Dehnung liegen, wie dies auch an in Wasserstoff geprüften glatten Zugproben beobachtet wurde /Absch2/.

Zur Beschreibung der Schädigung im verformungsarmen Außenbereich der Kerbzugproben wird das Dekohäsionsmodell angewendet. (vergl. Kap. 2.3.3.2, Bild 2.14). Dieser Außenbereich wird über Vorgabe bestimmter Knotenpunkte als Dekohäsionszone definiert. Nach Einsetzen der Schädigung und Lösen des Knotenpunktes wird die Verschiebungsunterdrückung durch eine Reaktionsspannung (Kohäsionsspannung  $S_R$ ) ersetzt. Im weiteren Verlauf der Berechnung wird die Abnahme der Kohäsionsspannung über einen zeitabhängigen Reduktionsfaktor  $R_A = f(t)$  beschrieben. Über eine Anpassung mit Hilfe der Experimente wird der zeitliche Verlauf der Reduktion der Kohäsionsspannung bestimmt.

Wie bereits erläutert (Kap. 6.1), kann gasförmiger Wasserstoff in metallischen Oberflächen erst dann eindringen, wenn die meist vorhandene Oxidschicht durch Verformung aufgebrochen wird. Dieser Verformungs- bzw. Belastungszustand, bei dem der Wasserstoff in den Werkstoff eintritt und Schädigung initiiert, wird über den Vergleich der in Helium und in Wasserstoff geprüften Kerbzugproben mit ISO-V-Kerbe abgeleitet: In Bild 6.1a sind die Kraft-Weg-Verläufe beider Proben dargestellt und der erste Unterschied im Kraft-Weg-Verhalten beider Proben ist als postulierter Wasserstoffeintritt gekennzeichnet. Die Auswertung der plastischen Zone ergibt für diesen Belastungszeitpunkt im Kerbgrund der ISO-V-Probe eine plastische Vergleichsdehnung von 10%. Dieser im Kerbgrund vorliegende Verformungszustand wird auch für die Kerbzugprobe mit 4 mm-Kerbe als Zeitpunkt für den Wasserstoffeintritt angenommen (vergl. Bild 6.1a). In **Bild 6.9** sind die plastischen Zonen zum postulierten Wasserstoffeintritt für beide Kerbzugproben dargestellt. Gegenüber der lokalen plastischen Zone bei der ISO-V-Probe (Bild 6.9a) ist bei der Kerbzugprobe mit 4 mm Kerbradius bei gleicher plastischer Verformung

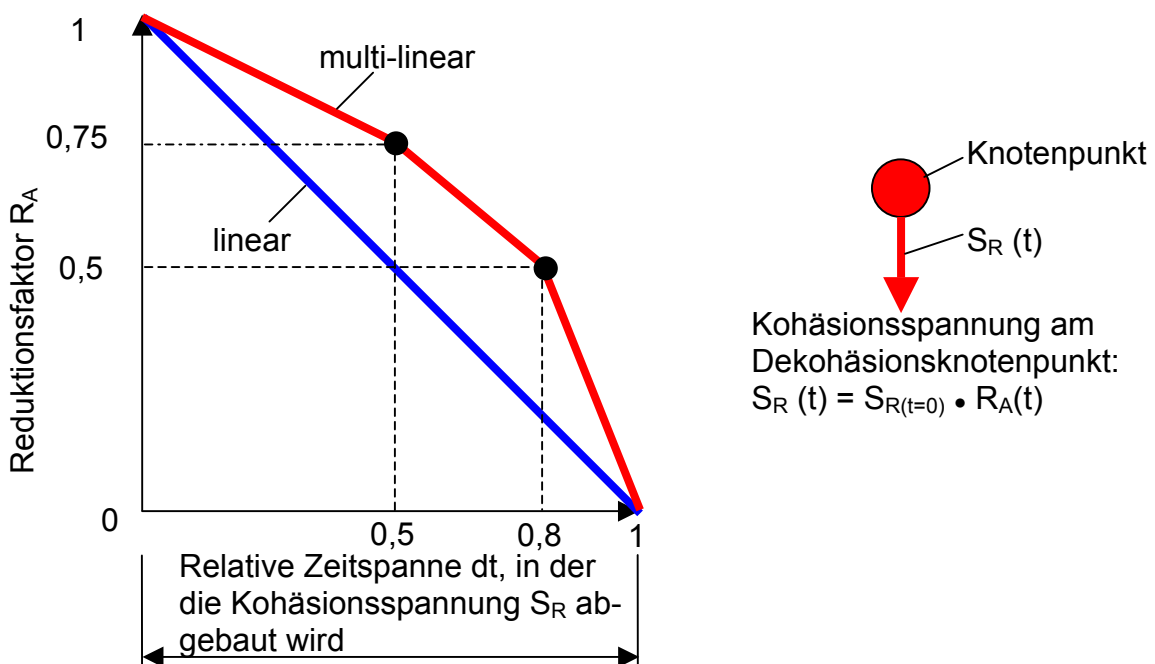


**Bild 6.9:** Plastische Vergleichsdehnung bei postulierte Wasserstoffeintritt: Probe mit ISO-V-Kerbe (a) und Probe mit Kerbradius  $r = 4 \text{ mm}$  (b).

im Kerbgrund (10 %) bereits der gesamte Probenquerschnitt plastisch verformt. Des Weiteren ist aus Bild 6.1a zu erkennen, dass der Wasserstoff bei der Kerbzugprobe mit 4 mm Kerbradius gegenüber der ISO-V-Probe deutlich später das Probenverhalten beeinflusst. Wegen der bei allen Kerbzugproben gewählten konstanten Belastungsgeschwindigkeit von 0,1 mm/min sind die beiden Proben unterschiedlich lang dem gasförmigen Wasserstoffeinfluss ausgesetzt.

Bei der C(T)-Probe wird aufgrund des vorliegenden Schwingrisses der Wasserstoffeintritt unmittelbar nach Versuchsbeginn angenommen (vergl.  $\bigcirc$  in Bild 6.1b).

Um dem Wasserstoffeintritt zu berücksichtigen, wurde die Simulation der beiden Kerbzugproben unter Wasserstoffeinfluss in zwei Belastungsschritten durchgeführt: Im ersten Belastungsschritt wird zunächst nur das Rousselier-Modell als Schädigungsmodell angewendet. Erst nachdem die (aus dem Experiment abgeleitete) plastische Verformung von 10 % im Kerbgrund erreicht ist, kommt im zweiten Belastungsschritt zusätzlich das Dekohäsionsmodell zur Anwendung. Für die Abhängigkeit der Kohäsionsspannung  $S_R$  von Zeit wird sowohl eine lineare als auch eine multi-lineare Abhängigkeit des Reduktionsfaktors  $R_A$  von der relativen Zeit vorgegeben (**Bild 6.10**). Zum relativen Zeitpunkt  $t = 0$  (Beginn des zweiten Belastungsschritts bzw. Wasserstoffeintritt) wird das Dekohäsionsmodell am 1. Dekohäsionspunkt (Kerbgrund) angewendet. Die relative Zeit  $t = 1$  beschreibt das Ende des zweiten Belastungsschrittes bzw. das Ende der Simulation. In der relativen Zeitspanne  $dt$  wird die Kohäsionsspannung  $S_R$  am jeweiligen Dekohäsionspunkt abgebaut.



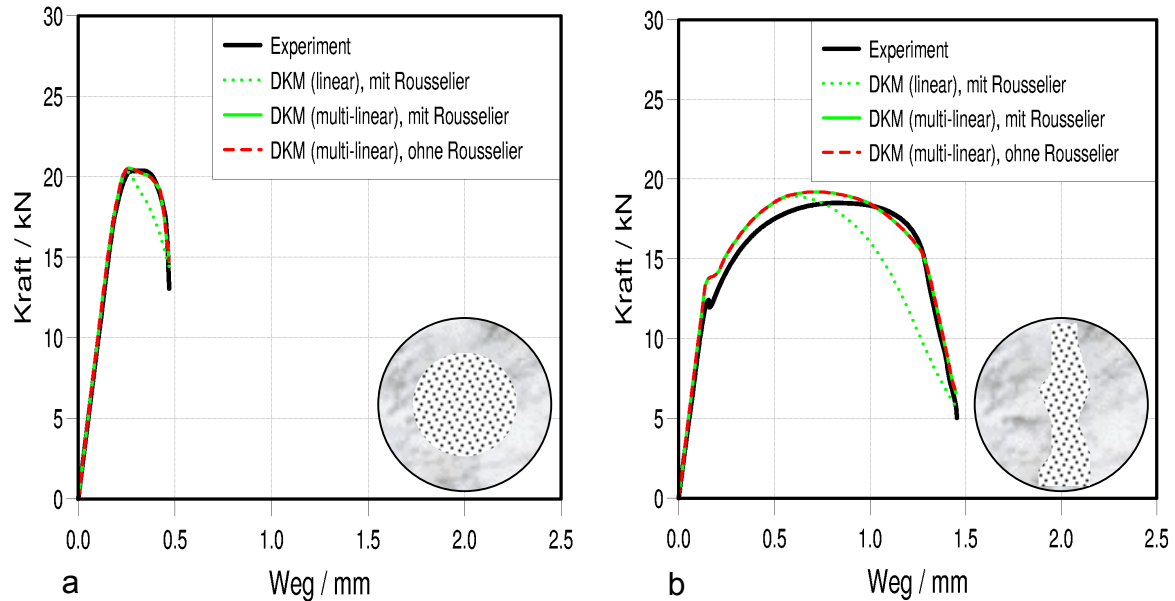
**Bild 6.10:** Vorgabe einer linearen und einer multi-linearen Reduktion-Zeit-Funktion  $R_A(t)$  zur Bestimmung der Kohäsionsspannung  $S_R$  bei Anwendung des Dekohäsionsmodells.

Nach /Ori2/ liegt das interstitiell gelöste Wasserstoffatom als ladungsmäßig abgeschirmtes Proton vor, das sein Elektron an das Elektronengas des Metalls abgibt. Wegen des geringen Atomdurchmessers, der interstitiellen Lage und der hohen Beweglichkeit von Protonen kann von einer hohen Diffusionsgeschwindigkeit des Wasserstoffs im Metallgitter ausgegangen werden. Für die Simulation wird daraus eine nahezu gleichzeitige Ausbreitung des Wasserstoffs in der Dekohäsionszone abgeleitet, so dass an allen restlichen Dekohäsionsknotenpunkten die Kohäsionsspannung  $S_R$  im Laufe der Simulation nahezu gleichzeitig und vollständig auf Null reduziert wird (vergl. später Bild 6.13).

Die in Bild 6.10 angegebene relative Zeitspanne  $dt = 1$  zwischen Wasserstoffeintritt und Versuchsende ist im realen Zeitmaßstab für die durchgeführten Versuche unterschiedlich: Bei einer konstanten Belastungsgeschwindigkeit von 0,1 mm/min kann aus Bild 6.1a für die ISO-V Probe eine Zeit von 2,4 min und für die Kerbzugprobe mit 4 mm Kerbradius ein Zeitraum von 11,6 min zwischen Wasserstoffeintritt und Versuchsende ermittelt werden. Bei der C(T)-Probe mit einer Belastungsgeschwindigkeit von  $\dot{C}OD = 0,003$  mm/s liegt zwischen Wasserstoffeintritt und Versuchsende ohne Berücksichtigung der Teilentlastungen ein Zeitraum von 3,3 min. Über die in Bild 6.10 abgebildete Reduktion-Zeit-Funktion  $R_A(t)$  ist somit die zeitliche unterschiedliche Wirkung des Wasserstoffs auf die jeweiligen Proben enthalten.

Für beide Kerbzugproben (ISO-V Kerbe, **Bild 6.11a** und mit Kerbradius 4 mm, **Bild 6.11b**) wird das Experiment durch die Vorgabe einer linearen (zeitlichen) Abnahme der Kohäsionsspannung nur unzureichend beschrieben. Dabei wird das Schädigungsverhalten der Proben deutlich überschätzt. Gute Übereinstimmung mit dem Versuch wird erst bei Annahme der multi-linearen Reduktion-Funktion erreicht. Die aus dem Vergleich mit dem Experiment numerisch abgeleitete multi-lineare Reduktion-Zeit-Funktion spiegelt die Wirkung des Wasserstoffs an den einzelnen Dekohäsionsknotenpunkten wider und zeigt auf, dass der am Materialpunkt angreifende Wasserstoff nicht kontinuierlich die Bindungskraft der Metallatome im Metallgitter herabsetzt. Erst nachdem ausreichend Wasserstoff am jeweiligen Materialpunkt vorliegt, setzt eine beschleunigte, wasserstoffinduzierte Schädigung ein.

Dabei spielt die Art und Weise der Schädigungsmodellierung im ersten Belastungsschritt (Berechnung bis Wasserstoffeintritt) und die Modellierung des zähen Restbruchbereichs im zweiten Belastungsschritt eine untergeordnete Rolle: Auch ohne Anwendung des Rousselier-Modells in beiden Belastungsschritten ergeben sich nahezu identische Kraft-Weg-Kurvenverläufe. Erwartungsgemäß ist im ersten Belastungsschritt kein Einfluss des Rousselier-Modells auf das Schädigungsverhalten der Kerbzugproben zu



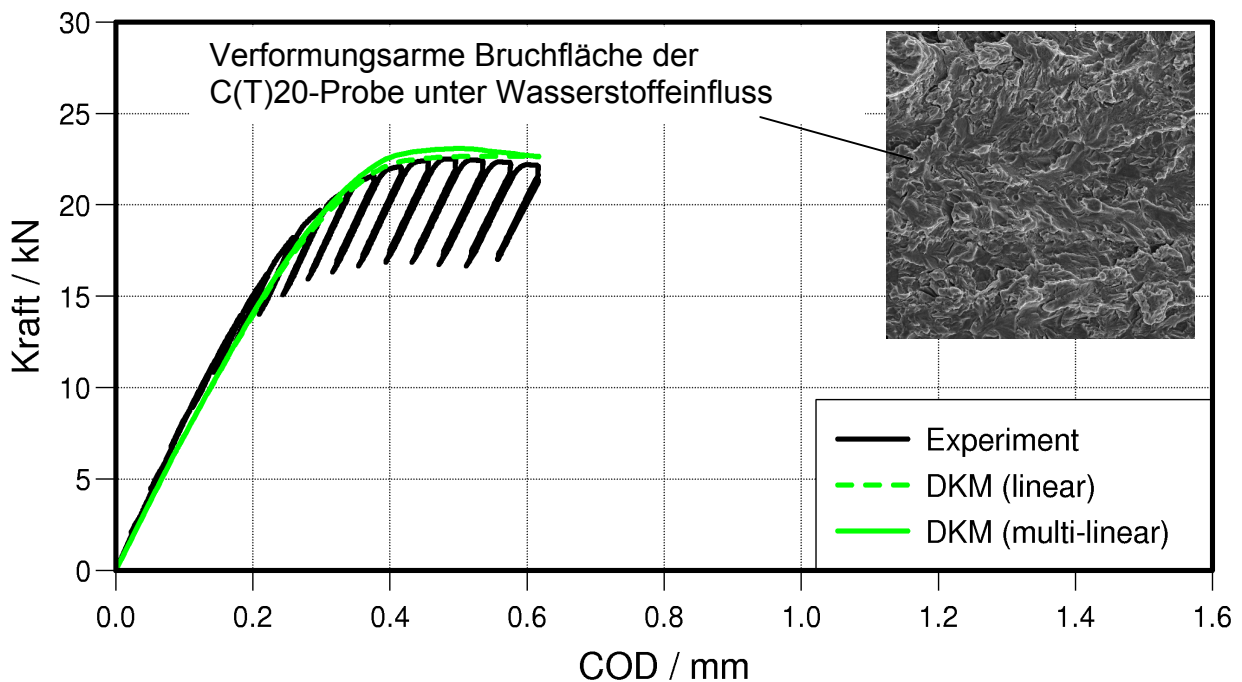
**Bild 6.11:** Vergleich Experiment-Simulation: Kraft-Weg-Diagramm für Kerbzugproben mit ISO-V-Kerbe (a) und mit Kerbradius  $r = 4$  mm (b) unter Wasserstoffeinfluss. Schädigungssimulation über Kombination aus Dekohäsionsmodell (DKM) und Rousselier-Modell. (Lineare und multi-lineare Kohäsionsspannung-Zeit-Funktion gemäß Bild 6.10).

erkennen, da ausgeprägtes Porenwachstum und Porenvereinigung erst nach Überschreitung der Maximallast stattfindet, diese aber in diesem Stadium der Berechnung nicht erreicht wird. Der geringe Einfluss der Anwendung des Rousselier-Modells auf das numerische Probenverhalten, vor allem am Ende des zweiten Belastungsschritts, weist darauf hin, dass im duktilen Restbereich ein Porenwachstum nicht in der Form stattfindet, so dass es im globalen Probenverhalten erkennbar und über das Rousselier-Modell numerisch beschreibbar wäre.

Im Gegensatz zu den Kerbzugproben wird die C(T)-Probe unter Wasserstoffeinfluss nicht bis zum kompletten Versagen geprüft, sondern es wird nur bis zum Erreichen eines mit der Heliumprobe vergleichbaren (geringen) stabilen Risswachstums belastet. Bei der Nachauswertung der Probenbruchfläche sind ausschließlich verformungsarme Bereiche zu erkennen (vergl. Bild 6.2b), so dass zur schädigungsmechanischen Berechnung der C(T)-Probe unter Wasserstoffeinfluss nur das Dekohäsionsmodell (ohne Rousselier-Modell) zu Anwendung kommt. Da in der C(T)-Probe bereits bei Versuchsbeginn ein Anriss vorhanden ist, wird angenommen, dass die Gitterdehnung unmittelbar nach Versuchsbeginn genügend groß ist und der Wasserstoff in die C(T)-Probe in die Probe eindringen kann. Das Dekohäsionsmodell wird bei der Schädigungssimulation der C(T)-Probe deshalb unmittelbar nach Belastungsbeginn angewendet. Somit stellt in Bild 6.10 die relative Zeit  $t = 0$  den Belastungsbeginn und die relative Zeit  $t = 1$  das En-

de der C(T)-Probenbelastung dar. Bei der C(T)-Probe wird des Weiteren vereinfachend angenommen, dass während der Probenteilentlastungen keine schädigende Wirkung des Wasserstoffs auftritt.

**Bild 6.12** zeigt den Vergleich zwischen Experiment und Simulation, wobei wieder beide in Bild 6.10 dargestellte Spannung-Zeit-Funktionen vorgegeben wurden. Im Falle der C(T)-Probe ist nur ein geringer Einfluss der beiden verwendeten Zeitfunktionen auf den Kraft-COD-Verlauf zu erkennen. Wegen des geringen Risswachstums von  $\Delta a = 0,6$  mm kann für die C(T)-Probe aus dem Experiment keine eindeutige Spannung-Zeit-Funktion



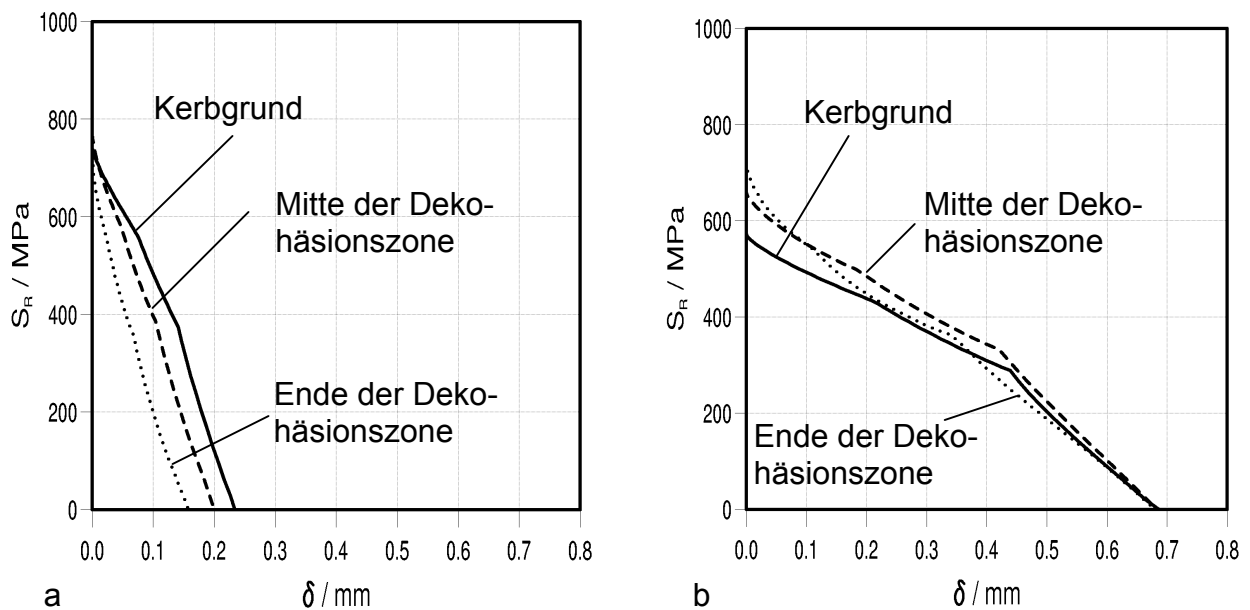
**Bild 6.12:** Vergleich Experiment-Simulation: Kraft-COD (Rissöffnung)-Kurve für eine C(T)20-Probe (20 %sk) unter Wasserstoffeinfluss. Schädigungssimulation über Dekohäsionsmodell (DKM). Variation der Kohäsionsspannung-Zeit-Funktion gemäß Bild 6.10.

für das DKM abgeleitet werden. Insgesamt wird über das DKM die F-COD-Kurve und somit die Abnahme der Bruchzähigkeit des Werkstoffs unter Wasserstoffeinfluss sehr gut beschrieben.

Die schädigungsmechanischen Berechnungen machen deutlich, dass auf der Grundlage des Dekohäsionsmodells mit einer Spannung-Zeit-Funktion, welche die Wirkungsweise des Wasserstoffs im Bereich der Schädigung abbildet, Laborproben unter Wasserstoffeinfluss numerisch gut beschrieben werden. Über die Aufnahme einer Zeitabhängigkeit in das Dekohäsionsgesetz wird der Tatsache Rechnung getragen, dass durch den in die Probe eindiffundierenden Wasserstoff die örtlichen Materialeigenschaften einer zeitlichen Veränderung unterworfen sind.

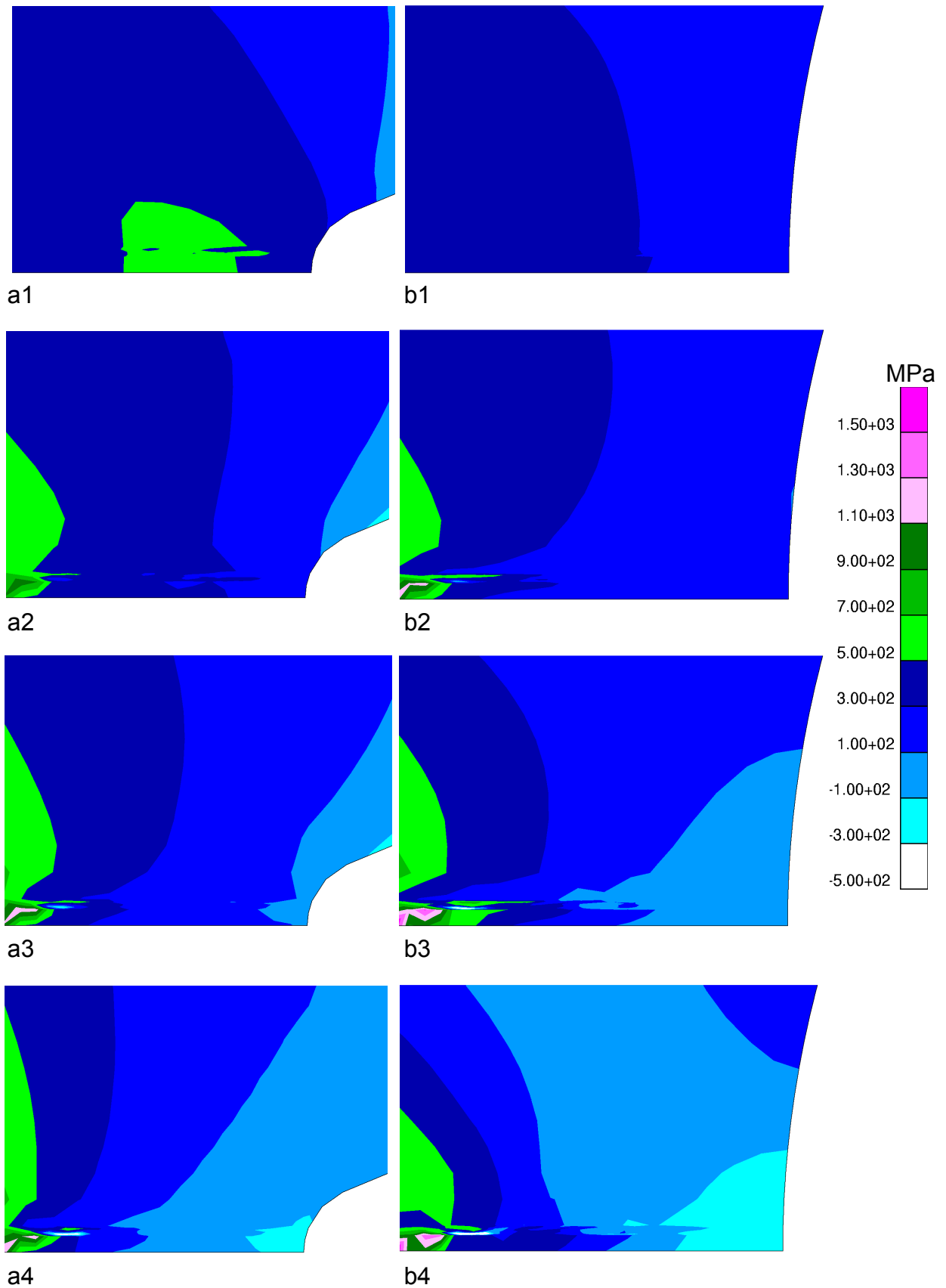
Bei den in Kapitel 2.3.3 vorgestellten Kohäsivmodellen wird die Schädigung in der Kohäsivzone (hier der durch Wasserstoffeinfluss geschädigte Bereich) über ein werkstoffspezifisches Separationsgesetz beschrieben, welches die Kohäsivspannung an jedem Kohäsivknotenpunkt mit dessen Aufweitung in Beziehung stellt. Welche Auswirkung die beim Dekohäsionsmodell angewendete Spannung-Zeit-Funktion auf das Separationsverhalten ausübt, ist in **Bild 6.13** für die Kerbzugproben mit ISO-V-Kerbe und mit Kerbradius  $r = 4$  mm für ausgewählte Knotenpunkte der Dekohäsionszone dargestellt. Es zeigt sich, dass sich bei Werkstoffen unter Wasserstoffeinfluss kein werkstoffspezifisches Separationsgesetz ableiten lässt: Sowohl die maximal auftretende Kohäsivspannung zu Beginn der Schädigung (bei Aufweitung  $\delta = 0$ ) als auch die Aufweitung  $\delta$  bei Materialtrennung ( $S_R = 0$ ) und somit die bis zur Schädigung benötigte Energie (Fläche unter den  $S_R$ - $\delta$ -Kurven) werden deutlich von der Kerbform beeinflusst: Der bis zur Schädigung der Probe mit ISO-V-Kerbe (Bild 6.13a) notwendige Energieeintrag ist deutlich geringer als bei der Probe mit Kerbradius  $r = 4$  mm und ist konform mit den im Experiment ermittelten Energien (Fläche unter den Kraft-Weg-Kurven in Bild 6.1a).

Die ungleichmäßige Aufweitung in der Dekohäsionszone der ISO-V-Probe bei vollzogener Schädigung ( $S_R = 0$  in Bild 6.13a) folgt aus der lokal unterschiedlichen plastischen Verformung in dieser Wasserstoff geschädigten Zone (vergl. Bild 6.9a). Bei der bereits bei postuliertem Wasserstoffeintritt im gesamten Probenquerschnitt plastifizierten Probe mit Kerbradius  $r = 4$  mm (vergl. Bild 6.9b) stellt sich bei abgeschlossener Schädigung (bei  $S_R = 0$  in Bild 6.13b) eine konstante Aufweitung ein.



**Bild 6.13:** Separation von in der Dekohäsionszone ausgewiesenen Knotenpunkten: (a) Kerbzugprobe mit ISO-V-Kerbe und (b) Kerbzugprobe mit Kerbradius  $r = 4$  mm.





**Bild 6.14:** Verteilung der hydrostatischen Spannung  $\sigma_h$  in der Dekohäsionszone der Kerbzugprobe mit ISO-V-Kerbe (a1-a4) und in der Kerbzugprobe mit Kerbradius  $r = 4$  mm (b1-b4) für die in Bild 6.10 ausgewiesenen relativen Zeitpunkten  $t = 0$  (1),  $t = 0,5$  (2),  $t = 0,8$  (3) und  $t = 1$  (4).

Wie bereits erwähnt (Kap. 6.2) wird die Wasserstoffdiffusion im Werkstoff durch hohe Gradienten der hydrostatischen Spannung  $\sigma_h$  begünstigt /Ori2/. **Bild 6.14** zeigt die Verteilung der hydrostatischen Spannung  $\sigma_h$  in der Dekohäsionszone der ISO-V-Probe (Bild 6.14a1-a4) und für die Kerbzugprobe mit Kerbradius  $r = 4$  mm (Bild 6.14b1-b4) für die in der Spannung-Zeit-Funktion (Bild 6.10) ausgewiesenen relativen Zeitpunkte  $t = 0, 0,5, 0,8$  und  $t = 1$ . Es ist eine stetige und für entsprechende relative Zeitpunkte vergleichbare Zunahme des Gradienten der hydrostatischen Spannung  $\sigma_h$  in der Dekohäsionszone in beiden Kerbzugproben zu erkennen, was wiederum einen im relativen Zeitmaßstab  $t$  gleichzeitig zunehmenden Wasserstofffluss in die Probe verursacht. Je schneller die Wasserstoffatome nachdiffundieren können, desto eher können sie die Atombindungen schwächen, was durch die in Bild 6.10 dargestellte nicht-lineare Spannung-Zeit-Funktion zum Ausdruck gebracht wird.

Mit der erfolgreichen Anwendung des Dekohäsionsmodells (DKM) auf Laborproben wird in dieser Arbeit in erster Linie nachgewiesen, dass über eine Knotenlösetechnik unter Anwendung einer zeitabhängigen Reduzierung der Kohäsionsspannung (vergl. Bild 6.10) die Wirkung des Wasserstoffeinflusses auf das Verformungs- und Schädigungsverhalten des Werkstoffs 15MnNi6-3 numerisch gut abgebildet wird. Darüber hinaus wird aufgezeigt, dass beide Modelle (DKM und Rousselier) gleichzeitig bei schädigungsmechanischen Berechnungen von Proben und Bauteilen unter Wasserstoffeinfluss eingesetzt werden können.

Der in Bild 6.10 über der relativen Zeitspanne dargestellte kontinuumsmechanische Abbau der Kohäsionsspannung an einem Knotenpunkt bis zum vollständigen Lösen des Knotens beschreibt in einfacher Weise die durch Wasserstoff hervorgerufene Schwächung der Metallbindung auf der atomarer Ebene. Dies ist im Einklang mit den Experimenten und den atomistischen Simulationen, welche beide die Wirkung von Wasserstoff auf die Versetzungen als gering bewerten und somit ebenfalls darauf deuten, dass die Abnahme der Werkstoffduktilität hauptsächlich über die Schwächung von Atombindungen zu erklären ist.

Ausblickend ist die in Bild 6.10 für beide Kerbzugproben (ISO-V und Kerbradius  $r = 4$  mm) dargestellte und von der Zeit abhängige Gesetzmäßigkeit für die aufgrund von Wasserstoffeinfluss hervorgerufene Reduktion der Kohäsionsspannung anhand weiterer Versuche an Kerbzugproben mit unterschiedlicher Kerbschärfe und über Kerbzug-Versuchsreihen mit unterschiedlichen (ebenfalls quasi-statischen) Belastungsgeschwindigkeiten jeweils unter vergleichbarem Wasserstoffeinfluss zu untermauern.

Bei der Anwendung des Dekohäsionsmodells (DKM) auf Laborproben wurde sowohl der Zeitpunkt des Eintritts des Wasserstoffs in die Proben (Bild 6.1) als auch die Ausdehnung der durch Wasserstoff geschädigten Zonen (Bild 6.8) als Annahme bzw. Eingabe in die schädigungsmechanische Berechnung eingebracht. In Zukunft sind durch Diffusionsberechnungen auch der Wasserstoffeintritt und dessen Ausbreitung, insbesondere in Abhängigkeit vom hydrostatischen Spannungszustand, im Werkstoff numerisch zu beschreiben. Damit kann die noch ungelöste Frage geklärt werden, die in der nicht vollständigen Schädigung der Probenquerschnitte der Kerbzugproben durch Wasserstoff besteht.

Wenn die durch äußere Belastung begünstigte Ausbreitung von Wasserstoff im Werkstoff numerisch erfasst ist, steht mit dem DKM (Dekohäsionsmodell) ein leistungsfähiges Werkzeug zur schädigungsmechanischen Berechnung von Bauteilen unter Wasserstoffeinfluss zur Verfügung. Erste Ansätze zur quantitativen Berücksichtigung der spannungsinduzierten Wasserstoffdiffusion sind in einer neueren Arbeit /Ser/ zu finden, wo ebenfalls ein Kohäsivmodell zur schädigungsmechanischen Beschreibung einer Platte mit Mittelriss unter Wasserstoffeinfluss angewendet wird.

## 7 Literaturverzeichnis

- /ABA/ ABAQUS User Manual, Version 5.4; 5.8; 6.2 und Online-Manual, Version 6.3.
- /Absch1/ Weber, U., Schmauder, S.  
Abschlußbericht zum DFG-Forschungsvorhaben „Mikro/Mesomechanische Modellierung des mechanischen Verhaltens von Metall/Keramik-Gradientenwerkstoffen“ im SPP Gradientenwerkstoffe, DFG-Förderzeichen Schm 746/12-1 und Schm 746/12-2 (1998).
- /Absch2/ Deimel, P, Schmauder, S.  
Abschlußbericht zum DFG-Forschungsvorhaben „Einfluss von Wasserstoff auf die Versetzungen und das Verformungsverhalten im Bereich der Risspitze von Bruchmechanikproben“, DFG-Förderzeichen Schm 746/28-1 und Schm 746/28-3 (2003).
- /Absch3/ Klingbeil, D., Brocks, W.  
Abschlußbericht zum DFG-Forschungsvorhaben „Verifikation von Schädigungsmodellen zur Vorhersage von Risswiderstandskurven für verschiedene Probengeometrien und Materialien im Rissinitiierungsbereich und bei großem Risswachstum“, DFG-Förderzeichen Br 521/5 (1998).
- /Adam/ Adams, D.  
„Inelastic analysis of a unidirectional composite subjected to transverse normal loading“, J. Compos. Mater., Vol.4 , pp. 310-328 (1970).
- /Arb1/ Arbeitsbericht zum Fortsetzungsantrag (Schm 746/25-1) im DFG Schwerpunktprogramm „Erweiterung der Formgebungsgrenzen bei Umformprozessen“, MPA Stuttgart (1999).
- /Arb2/ Arbeitsbericht zum Fortsetzungsantrag (Schm 746/25-2) im DFG-Schwerpunktprogramm „Erweiterung der Formgebungsgrenzen bei Umformprozessen“, MPA Stuttgart (2000).
- /Arb3/ Arbeitsbericht zum DFG-Forschungsvorhaben „Einfluss von Wasserstoff auf die Versetzungen und das Verformungsverhalten im Bereich der Risspitze von Bruchmechanikproben“ für den Zeitraum vom 01.10.1999 – 30.04.2001
- /Arg1/ Argon, A.S., Im, J., Safoglu, R.  
„Cavity formation from inclusions in ductile fracture“, Metallurgical Transactions 6a, pp. 825-837 (1975).

- /Arg2/ Argon, A.S., Im, J.  
„Separation of Second Phase Particles in Spheroidized 1045 Steel, Cu-0.6Pct Cr Alloy, and Maraging Steel in Plastic Straining”, Metallurgical Transactions 6a, pp. 839-851 (1975).
- /Argy/ Argyris, J., Mlejnek, H.P.  
„Die Methode der Finiten Elemente in der elementaren Strukturmechanik”, Band II: Kraft- und gemischte Methoden, Nichtlinearitäten, Verlag Friedr. Vieweg&Sohn, Braunschweig (1987).
- /Arndt/ Arndt, J., Majedi, H., Dahl, W.  
„Influence of strain history on ductile failure of steel”, J. de Physique IV C6, pp. 23-32 (1996).
- /Ash/ Ashby, M.F.  
„The deformation of plastically non-homogeneous materials”, Phil. Mag. 21, pp. 399-424 (1970).
- /ASTM/ ASTM E1820 –99a  
Standard Test Method for Measurement of Fracture Toughness.
- /Bao1/ Bao, G., Suo, Z.  
„Remarks on crack-bridging concepts”, Appl. Mech. Rev. 45 (8) (1992).
- /Bao2/ Bao, G., Hutchinson, J.W., McMeeking, R.M.  
„Particle reinforcement of ductile matrices against plastic flow and creep”, Acta metall. mater. 39, No. 8, pp. 1871-1882 (1991).
- /Bao3/ Bao, G.  
„Damage due to fracture of brittle reinforcements in a ductile matrix”, Acta metall. mater. 40, No. 10, pp. 2547-2555 (1992).
- /Bar/ Barenblatt, G.I.  
„The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture”, Advan. Appl. Mech. 7, pp. 55-129 (1962).
- /Bat/ Batische, R., Bethmont, M., Devesa, G. and Rousselier, G.  
„Ductile fracture of a A508 Cl.3 steel in relation with inclusion content: The benefit of the local approach of fracture and continuum damage mechanics”, Nuclear Engineering and Design, pp. 113-120 (1987).
- /Bath/ Bathe, K.J.  
„Finite-Elemente-Methoden”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo (1986).

- /Ber1/ Beremin, F.M.  
„Study of fracture criteria for ductile rupture of A 508 steel”, in: Francois, D. (Ed.), Proceedings of the ICF5, Cannes, Advances in Fracture Research, Vol. 2, pp. 809-816 (1981).
- /Ber2/ Beremin, F.M.  
„A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel”, Metallurgical Transactions A, Vol. 14A, pp. 2277-2287 (1983).
- /Bern/ Bernauer, G., Brocks, W.  
„Micromechanical Modelling of Ductile Damage and Tearing – Results of an European Numerical Round Robin”, GKSS Forschungszentrum, GKSS 2000/15 (2000).
- /Bern1/ Bernauer, G., Brocks, W., Mühlich, U., Werwer, M.  
„Hinweise zur Anwendung des Gurson-Tvergaard-Needleman-Modells”, GKSS Forschungszentrum, interner Bericht GKSS/WMG/99/10 (1999).
- /Bes/ Beson, J., Steglich, D., Brocks, W.  
„Modelling of crack growth in round bars and plane strain specimens“, Int. J. Sol. Struct. 38, pp. 8259-8284 (2001).
- /Bink/ Binkele, P.  
BMBF-Vorhaben 1501029, Entwicklung von Softwarebausteinen zur Modellierung von Schädigungsvorgängen mit Besonderer Berücksichtigung der Nanosimulation, Teilvorhaben „Computersimulation der Ostwaldreifung von Cu-Ausscheidungen in Reaktorstählen und deren schädigungsmechanische Auswertung“.
- /Birn/ Birnbaum, H.K., Sofronis, P.  
„Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture”, Mater. Sci. Engng., A176, pp. 191-202 (1994).
- /Böh/ Böhm, H.J., Han, W.  
„Comparisons between three-dimensional and two-dimensional multi-particle unit cell models for particle reinforced metal matrix composites”, Modell. Simul. Mater. Sci. Engng., 9, pp. 47-65 (2001).
- /Böh1/ Böhm, H.J., Rammerstorfer, F.G., Weissenbek, E.  
„Some simple models for micromechanical investigations of fiber arrangement effects in MMCs”, Comput. Mat. Sci., Vol. 1, No. 3, pp. 177-194 (1993).

- /Böh2/ Böhm, H.J.  
„Computer Based Micromechanical Investigations of the Thermomechanical Behavior of Metal Matrix Composites“, Dissertation, Technische Universität Wien (1991).
- /Born/ Bornert, M., Herve, E., Stolz, C., Zaoui, A.  
„Self consistent approaches and strain heterogeneities in two-phase elastoplastic materials“, Appl. Mech. Rev., Vol. 47, no. 1, Part 2, pp. 66-76 (1994).
- /Bos/ Bosch, C.  
„Über die Entwicklung der chemischen Hochdrucktechnik bei dem Aufbau der neuen Ammoniakindustrie“, in Z. VDI 77, pp. 305-317 (1933).
- /Brock/ Brockenbrough, J.R., Suresh, S., Wienecke, H.A.  
„Deformation of metal-matrix composites with continuous fibers: geometrical effects of fiber distribution and shape“, Acta metall. mater. 39, No. 5, pp. 735-752 (1991).
- /Brown/ Brown, L.M., Embury, J.D.  
„The initiation and growth of voids at second phase particles“, in Proc. 3<sup>rd</sup> Int. Conf. on Strength of Metals and Alloys, pp. 164-169 (1973).
- /Cast/ Castigliano, C.A.  
„Théorie de l'équilibre des systèmes élastique“, (1879).
- /Chris/ Christman, T., Needleman, A., Suresh, S.  
„An experimental and numerical study of deformation in metal-ceramic composites“, Acta metall. mater. 37, No. 11, pp. 3029-3050 (1989).
- /Clark/ Nan, C.W., Clarke, D.R.  
„The Influence of Particle Size and Particle Fracture on the Elastic/Plastic Deformation of Metal Matrix Composites“, Acta mater. 44, pp. 3801-3811 (1996).
- /Corn1/ Cornec, A., Schneider, I.  
„Modellierungskonzept für die Versagensbewertung von Laserschweißverbindungen“, GKSS Forschungsbericht, GKSS 2001/21 (2001).
- /Corn2/ Cornec, A., Schneider, I., Schwalbe, K.H.  
„On the practical application of the cohesive model“, Eng. Frac. Mech. 70, pp. 1963-1987 (2003).
- /Cou1/ Courant, R.  
„Über ein konvergenzerzeugendes Prinzip der Variationsrechnung“, Nachrichten von der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen (1922).

- /Cou2/ Courant, R.  
„Variational Methods for the Solution of Problems of Equilibrium and Vibrations“, Bull. Amer. Math. Soc. 49, (1943).
- /Cris/ Crisfield, M.A., Willis, J.  
„Solution strategies and softening materials“, Comp. Method in App. Mech. Eng. 66, pp. 267-289 (1988).
- /Danz/ Dantz, D., Genzel, Ch., Reimers, W., Weber, U., Schmauder, S.  
„Analyse von Makro- und Mikroeigenstressungen in Gradientenwerkstoffen (FGM)“, in: Verbundwerkstoffe und Werkstoffverbunde, Hrsg.: K. Schulte und K.U. Kainer, Wiley-VCH, Weinheim, pp. 704-709 (1999).
- /DIN/ Umwertung von Härtewerten, Deutsche Norm, DIN 50150, Ausgabe Oktober 2000.
- /Dong1/ Dong, M., Schmauder, S.  
„Transverse mechanical behaviour of fiber reinforced composites - FE modelling with embedded cell models“, Comput. Mat. Sci. 5, pp. 53-66 (1996).
- /Dong2/ Dong, M., Leßle, P., Weber, U., Schmauder, S.  
„Mesomechanical Modelling of Composites Containing FGMs Related Interpenetrating Microstructures Based on Micromechanical Matrixity Models“, Materials Science Forum Vols. 308-311, pp. 1000-1005 (1999).
- /Drag/ Dragone, T.L., Nix, W.D.  
„Geometric factors affecting the internal stress distribution and high temperature creep rate of discontinuous fiber reinforced metals“, Acta metall. mater. 38, No. 10, pp. 1941-1953 (1990).
- /Drug/ Drugan, W., Willis, J.  
„A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites“, J. Mech. Phys. Sol. 44, pp. 497-524 (1996).
- /Duan/ Duan, K., Mai, Y.-W., Cotterell, B.  
„R-curve effect on strength and reliability of toughened ceramic materials“, J. Mat. Sci. 30 (6), pp. 1405-1408 (1995).
- /Dug/ Dugdale, D.S.  
„Yielding of steel sheets containing slits“, J. Mech. Phys. Solids 8, pp. 100-104 (1960).



- /ECO/ „Material and Welding Data: Properties and Test Results”, Background Document No. 3, Annex C, ECOPRESS, European Research 5<sup>th</sup> Framework Sponsored Research Project No. GRD1-1999-10640 (GROWTH) 01.01.2000 – 31.05.2003.
- /Elic/ Elices, M., Planas, J., Guinea, G.V.  
„Fracture mechanics applied to concrete”, in: Freutes, M., Elices, M., Martin-Meizoso, A., Martmez-Esnaola, J.M. (Eds.), Fracture Mechanics: Applications and challenges, ESIS publication 26, Elsevier (2000).
- /Eng/ Engell, H.J., Speidel, M.O.  
„Ursachen und Mechanismen der Spannungsrisskorrosion“, Werkstoffe und Korrosion 20, pp. 281-300, (1969).
- /Esh/ Eshelby, J.D.:  
„The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion and Related Problems”, Proc. Roy. Soc. A241, pp. 376-396 (1957).
- /Fisch/ Fischmeister, H.F, Hjalmered, J.O., Karlsson, B., Linden, G., Sundström, B.  
Proc. 3rd Int. Conf. on the Strength of Materials and Alloys, Cambridge, Institute of Metals, London, pp. 621-625 (1973).
- /Fle/ Fleck, N.A., Muller, G.M. Ashby, M.F., Hutchinson, J.W.  
„Strain gradient plasticity: Theory and experiment”, Acta metall. mater. 42, pp. 475-487 (1994).
- /Frank/ Franklin, A.G.  
„Comparison between a Quantitative Microscope and Chemical Methods for Assessment of non-Metallic Inclusions”, Journal of the Iron and Steel Institute, February (1969).
- /Fri/ Fricke, E.  
„Plastische Verformung und Wasserstoffaufnahme von Stahl in Druckwasserstoff bei Raumtemperatur”, Dissertation, Technische Universität Braunschweig (1970).
- /Gao/ Gao, H., Huang, Y., Nix, W.D., Hutchinson, J.W.  
„Mechanism-based strain gradient plasticity – I. Theory”, J. Mech. Phys. Solids 47, pp. 1239-1263 (1999).
- /GKSS/ Mühlich, U., Steglich, D., Besson, J. und Brocks, W.  
„A User-Material Subroutine of the Rousselier-Model of Porous Metal Plasticity”, GKSS Forschungszentrum, Technical Note GKSS/WMS/00/02 (2000).

- /Good/ Goods, S.H., Brown, L.M.  
„The nucleation of cavities by plastic deformation”, Acta metall. mater. 27, pp. 1-15 (1979).
- /Got/ Gottstein, G.  
„Physikalische Grundlagen der Materialkunde”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York (2001).
- /GRS/ Schmauder, S., Kizler, P., Binkele, P., Kohler, C.  
BMBF-Vorhaben 1501228, Anwendungsorientierte Entwicklung der nanomechanisch basierten Simulation von Änderungen des Werkstoffverhaltens von Stählen aufgrund von Ausscheidungen, MPA Stuttgart, (2004).
- /Gur/ Gurland, J.  
„Observations on the fracture of cementite particles in a spheroidized 1.05% C steel deformed at room temperature”, Acta metall. mater. 20, pp. 735-746 (1972).
- /Gurs/ Gurson, A.L.  
„Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth—I. Yield criteria and flow rules for porous ductile media”, J. Eng. Mater. Technol. 99, pp.2-15 (1977).
- /Guz/ de Guzman, M.S., Neubauer, G., Filinn, P., Nix, W.D.  
„The role of indentation depth on the measured hardness of materials“, in: Townsend, P.H., Weihs, T.P., J.E. Sanchez (Jr.) J.E. (Eds.), Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 308, Pittsburgh, PA (1993), pp.613-618 (1993).
- /Ham/ Ham, R.K.  
„The Determination of Dislocation Densities in Thin Films”, Phil. Mag. 6, pp. 1183-1184 (1961).
- /Hill/ Hillerborg, A., Modeer, M., Petersson, P.  
„Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements”, Cement Concrete Res. 6 pp. 773-782 (1976).
- /Hön/ Hönle, S.  
„Micromechanical Modelling of Deformation and Fracture of Graded WC/Co Hard Metals”, Dissertation an der Universität Stuttgart, Max-Planck-Institut (MPI) für Metallforschung (Stuttgart), Bericht Nr. 67 (1998).

- /Holl1/ Holland, D., Kong, X., Schlüter, N., Dahl, W.  
„Investigations concerning quantitative determination of local damage in ductile materials”, Steel Research, Vol. 63, No. 8, pp. 361-367 (1992).
- /Holl2/ Holland, D.  
„Einfluss des Spannungszustandes auf die Bruchvorgänge beim Gleitbruch von Baustählen”, Dissertation, IEHK, RWTH Aachen (1992).
- /Hua1/ Huang, Y., Gao, H., Nix, W.D., Hutchinson, J.W.  
„Mechanism-based strain gradient plasticity – II Analysis”, J. Mech. Phys. Solids 48, pp. 99-128 (2000).
- /Hua2/ Huang, Y., Xue, Z., Gao, H., Xia, Z.C.  
„A Study of micro-indentation hardness tests by mechanism-based strain gradient plasticity”, J. mater. 15, pp. 1786-1796 (2000).
- /Ilsch/ Ilschner, B.  
Tagungsband „Gefüge und Bruch“ Leoben (März 1996).
- /Isla/ Islam, S.  
„Micromechanical Modelling of the Deformation Behaviour of Hard Metal Composite Materials during Monotonous Increasing and Cyclic Load”, Master Thesis am IMWF Universität Stuttgart (2003).
- /Kes/ Kesten, M., Gräfen, H.  
„Druckwasserstoffangriff auf unlegierte und niedriglegierte Stähle im Temperaturbereich unterhalb 200 °C“, in Wasserstoff und Korrosion, Dieter Kuron (Ed.), Verlag Irene Kuron, Bonn, pp. 101-126 (2000).
- /Koc/ Kocks, U.F.  
„The Relation between Polycrystal Deformation and Single-Crystal Deformation”, Metallurgical Transactions 1, pp. 1121-1142 (1970).
- /Kong/ Kong, X., Schlüter, N., Arndt, J.  
„Effects of the constraint parameter triaxiality stress on the failure behaviour of steels”, Steel Research, Vol. 64, No. 8-9, pp. 401-406 (1993).
- /Kuna/ Kuna, M., Sun, D.Z.  
„Three-dimensional cell model analyses of void growth in ductile materials”, Int. Journal of Fracture 81, pp. 235-258 (1996).

- /Kuß/ Kußmaul, K., Seidenfuß, M.  
„Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Beschreibung des Versagensverhaltens von Stählen unterschiedlicher Zähigkeit mit Hilfe von Schädigungsmodellen“, BMFT-Fördernummer 1500913, MPA Universität Stuttgart (1995).
- /LAS/ LASSO Ingenieurgesellschaft, Stuttgart.
- /Laz1/ Lazar, M.  
„A nonsingular solution of the edge dislocation in the gauge theory of dislocations“, J. Phys. A: Math. Gen. 36, pp.1415-1437 (2003).
- /Laz2/ Lazar, M.  
„Screw dislocations in the field theory of elastoplasticity“, Ann. Phys. (Liebzig) 11, pp. 635-649 (2002).
- /Leß1/ Leßle, P., Dong, M., Soppa, E., Schmauder, S.  
„Selbstkonsistente Matrizitätsmodelle zur Simulation des mechanischen Verhaltens von Verbundwerkstoffen, Verbundwerkstoffe und Werkstoffverbunde“, Hrsg.: K. Friedrich, DGM-Informationsgesellschaft mbH, Oberursel, pp. 765-770 (1997).
- /Leß2/ Leßle, P, Dong, M, Soppa, E, Schmauder, S.  
„Simulation of Interpenetrating Microstructures by Self Consistent Matricity Models“, Scripta mater. 38, pp. 1327-1332 (1998).
- /Leß3/ Leßle, P., Dong, M., Soppa, E., Schmauder, S.  
„Simulation of Interpenetrating Microstructures by Self Consistent Matricity Models“, in: Winkler, T., Schubert, A. (Eds.), Materials Mechanics, Fracture Mechanics, Micro Mechanics, an Anniversary Volume in Honour of B. Michels 50<sup>th</sup> Birthday, Fraunhofer IZM Berlin, Chemnitzer Werkstoffmechanik GmbH, Chemnitz, pp. 456-461 (1999).
- /Leß4/ Leßle, P, Dong, M., Soppa, E., Schmauder, S.  
„Selbstkonsistente Matrizitätsmodelle zur Simulation des mechanischen Verhaltens von Verbundwerkstoffen“, Proc. Tagung Gefüge und Bruch, 17.-19.03.99, Ruhr-Universität Bochum, Hrsg.: M. Pohl, Ruhr-Universität Bochum, Institut für Werkstoffe, Bochum, pp. 29-39 (1999).
- /Leß5/ Leßle, P., Dong, M., Schmauder, S.  
„Self-Consistent Matricity Model to Simulate the Mechanical Behaviour of Interpenetrating Microstructures“, Comput. Mat. Sci. 15, pp. 455-465 (1999).

- /Levy/ A. Levy, A., Papazian, J.M.  
„Tensile properties of short fiber-reinforced SiC/Al composites. II. Finite-element analysis”, Metall. Trans., Vol. 21A, No. 2, pp. 411-420 (1990).
- /Lif/ Lifshitz, I.M., Slyozov, V.V.  
„The Kinetics of Precipitation from Supersaturated Solid-Solutions”, J. Phys. Chem. Solids 19, pp. 35-50 (1961).
- /Lipp/ Lippmann, N., Steinkopff, Th., Schmauder, S., Gumbsch, P.  
„3D-Finite-Element-Modelling of Microstructures with the Method of Multi-phase Elements”, Comput. Mat. Sci. 9, pp. 28-35 (1997).
- /Llo/ Lloyd, D.  
„Aspects of Particle Fracture in Particulate Reinforced MMCs”, Acta metall. mater. 38, pp. 489-496 (1991).
- /Mel/ Mellert, R.  
„Automatische Netzgenerierung von Pixelbildern mit PATRAN“, Kurzdokumentation, MPA Stuttgart, 2001.
- /Min/ Mingler, B., Karnthaler, H.-P.  
„TEM Investigations of Al6061 and of Composites Reinforced with Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Particles”, Zeitschrift für Metallkunde 84, Nr.5, pp. 313-319 (1993).
- /Mish/ Mishnaevsky Jr, L., Mintchev, O., Schmauder, S.  
„FE-Simulation of crack growth using damage parameter and cohesive surface concept”, in: Brown, M.W., los Rios, E.R., Miller, K.J. (Eds.), ECF 12- Fracture from Defects, Proc. 12<sup>th</sup> Europ. Conf Fracture (Sheffield), pp. 1053-1058 (1998).
- /Moha/ Mohanta, A.  
„Numerical Determination of Failure Curves”, Master Thesis am IMWF Universität Stuttgart (2003).
- /Mohl1/ Mohles, V., Nembach, E.  
„Computer Simulations of the Dislocation Glide in a  $\gamma'$ -strengthened Superalloy: The Effects of the Dislocation Character”, Zeitschrift für Metallkunde 90, pp. 896-900 (1999).
- /Mohl2/ Mohles, V., Nembach, E.  
„The Peak- and Overaged States of Particle Strengthened Materials”, Computer Simulations, Acta mater. 49, pp. 2405-2417 (2001).

- /Mohl3/ Mohles, V., Fruhstorfer, B.  
„Computer simulations of Orowan process controlled dislocation glide in particle arrangements of various randomness”, Acta mater. 50, pp. 2503-2516 (2002).
- /MPA/ Interne, nicht veröffentlichte Untersuchungen.
- /Mura/ Muramatsu, K., Kawasaki, A., Taya, M., Watanabe, R.  
„Fractal Analysis of the Microstructural Transition in P/M Functionally Gradient Materials“, in: Yamanouchi, M., Koizumi, M., Hirai, T., Shiota, I. (Eds.), Proceedings of the First International Symposium on Functionally Gradient Materials, FGM'90, Sendai, pp. 53-58 (1990).
- /Nel/ Nelson, H.G.  
„Hydrogen Embrittlement”, in: Briant, C.L., Banerji, S.K. (Ed.), Treatise on Materials Science and Technology, Vol. 25, pp. 275-359 (1983).
- /Neu/ Neubrand, A., Jedamzik, R.  
Experimentell Untersuchungen an der Technischen Universität Darmstadt.
- /Nye/ Nye, J.F.  
„Some geometrical relations in dislocated solids“, Acta metall. 1, pp.153-162 (1953).
- /Old/ Oldroyd, J.G.  
„The elastic and viscous properties of emulsions and suspensions”, Proc. Roy. Soc., Series A, Vol. 218, pp. 122-132 (1953).
- /Ori1/ Oriani, R.A.  
„A mechanistic theory of hydrogen embrittlement of steels”, Ber. Bunsengesellschaft, Vol. 76, pp. 848-857 (1972).
- /Ori2/ Oriani, R.A.  
„Hydrogen in Metals”, in: Staehle, R.W. et.al (Ed.), Proc. Conf. Fundamental Aspects of SCC, NACE, Houston, pp. 32-50 (1969).
- /Ose/ Osetsky, Y.N., Bacon, D.J., Mohles, V.  
„Atomic modelling of strengthening mechanisms due to voids and copper precipitates in  $\alpha$ -iron”, Phil. Magazine 83, pp. 3623-3641 (2003).
- /Pan/ Pan, F., Ruoff, H., Willer, D., Katerbau, K.H.  
„Investigation on the Microstructure of a Pressure Vessel/Pipe Steel 15NiCu MoNb5 (WB36)”, MPA Report, Stuttgart (1996).
- /Pat/ MSC/PATRAN, Version 8.0, User's Manual.

- /Poe1/ Poech, M.H., Ruhr, D.  
„Die quantitative Charakterisierung der Gefügeanordnung“, Prakt. Met. Sonderband 24, pp. 385-391 (1993).
- /Poe2/ Poech, M.H.  
„Deformation of two-phase materials: application of analytical elastic solutions to plasticity“, Scripta Metall. Mater., Vol. 27, No. 8, pp. 1027-1031 (1992).
- /Pora/ Willert-Porada, M.  
„Herstellung, Be- und Verarbeitung sowie Prüfung von metallischen und metall/keramischen Verbundwerkstoffen“, Tagungsband, Universität Dortmund, 491 (1995).
- /RB/ Russell, K.C., Brown, L.M.  
„A Dispersion Strengthening Model Based on Differing Elastic Moduli Applied to The Iron-Copper System“, Acta met. 20, pp. 969-974 (1972).
- /Ree/ Reetz, B.  
„Untersuchungen zur Verformung von partikelverstärkten Metallmatrix-Teilchenverbundwerkstoffen am Beispiel von AA60661 + Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>“, Diplomarbeit am Hahn-Meitner-Institut (HMI) Berlin (2001).
- /Reu/ Reusch, F.  
„Entwicklung und Anwendung eines nicht-lokalen Materialmodells zur Simulation duktiler Schädigung in metallischen Werkstoffen“, Dissertation, Fakultät Maschinenbau, Lehrstuhl für Mechanik, Universität Dortmund (2003).
- /Reu1/ Reusch, F., Svendsen, B., Klingbeil, D.  
„Local and non-local Gurson-based ductile damage and failure modelling at large deformation“, European Journal of Mechanics A/Solids 22, pp. 779-792 (2003).
- /Reu2/ Reusch, F., Svendsen, B., Klingbeil, D.  
„A non-local extension of Gurson-based ductile damage modeling“ Comput. Mat. Sci., Vol 26, pp. 219-229 (2003).
- /Ric/ Rice, J.R., Tracey, D.M.  
„On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields“, J. Mech. Phys. Solids 17, pp. 201-217 (1969).
- /Ritz/ Ritz, W.  
„Über eine neue Methode zur Lösung gewisser Variationsproblem der mathematischen Physik“, ges. Werke, pp. 192 (1911).

- /Roos/ Roos, E., Maile, K.  
„Werkstoffkunde für Ingenieure“, Grundlagen, Anwendung, Prüfung, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York (2002).
- /Rous1/ Rousselier, G.  
„Ductile Fracture Models and their Potential in Local Approach of Fracture“, Nuclear Engineering and Design 105, pp. 97-111 (1987).
- /Rous2/ Batische, R, Bethmont, M., Devesa, G. and Rousselier, G.  
„Ductile Fracture of a 508 CI 3 Steel in Relation with Inclusion Content: The Benefit of the Local Approach of Fracture and Continuum Damage Mechanics“, Nuclear Engineering and Design 105, pp. 113-120 (1987).
- /Roy/ Le Roy, G., Embury, J.D., Edwards, G., Ashby, M.F.  
„A model of ductile fracture based on the nucleation and growth of voids“, Acta metall. mater. 29, pp. 1509-1522 (1981).
- /Rud/ Ruda, M., Farkas, D., Abriata, J.  
„Embedded-atom interatomic potentials for hydrogen in metals and intermetallic alloys“, Phys. Rev. B 54(14), pp. 9765-9774 (1996).
- /Sasa/ Sasaki, M., Hirai, T.  
„Fabrication and Properties of Functionally Gradient Materials“, Journal of the Ceramic Society of Japan, Int. Edition, Vol. 99, 970 (1997).
- /Saut/ Sautter, M.  
„Modellierung des Verformungsverhaltens mehrphasiger Werkstoffe mit der Methode der Finiten Elemente“, Dissertation, Max-Planck-Institut für Metallforschung, Institut für Werkstoffwissenschaft, Stuttgart, Reihe 5: Grund- und Werkstoffe Nr. 398, VDI-Verlag GmbH Düsseldorf (1995).
- /Schi/ Schick, M., Wiedemann, J., Willer, D.  
„Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Bewertung von geschweissten Komponenten aus Werkstoff 15NiCuMoNb5 (WB36) im Hinblick auf die Zähigkeitsabnahme unter Betriebsbeanspruchung“, Technischer Bericht, MPA Stuttgart (1997).
- /Schlo/ Schloz, E.  
„Finite Elemente Berechnungen zum Verhalten von Mikroporen bei Wechselbeanspruchung“, Studienarbeit am Lehrstuhl für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre, Nr. 755 258 (1997).



- /Schm1/ Schmauder, S.  
„Die Modellierung zähigkeitsbestimmender Prozesse in Mikrogefügen mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode“, Fortschrittsberichte VDI-Reihe 5, Nr. 146, VDI-Verlag, Düsseldorf (1988).
- /Schm2/ Schmauder, S., Soppa, E., Weber, U.  
„Computersimulationen der Verformung von Metall/Keramik-Verbundwerkstoffen“, MPA-Nachrichten Nr. 03/2000, pp. 2-4 (2000).
- /Schm3/ Schmauder, S., Weber, U., Soppa, E.  
„Simulation of the Mechanical Behaviour of Ductile Matrix Composites“, Symposium on Structured Media in Memory of Prof. Ekkehart Kröner, Posen/Poland 16.-21.09.2001 (Proceedings of the International Symposium TRECOP`01), pp. 232-244 (2001).
- /Schm4/ Schmauder, S., Weber, U., Soppa, E.  
„Computational mechanics of heterogeneous materials - influence of residual stresses -“, Comput. Mat. Sci. 26, pp. 142-153 (2003).
- /Schm5/ Schmauder, S., Dong, M., Leßle, P.  
„Verbundwerkstoffe mikromechanisch simuliert“, Metall 7-8/97, pp. 404-410 (1997).
- /Schm6/ Schmauder, S., Dong, M., Leßle, P.  
„Simulation von Verbundwerkstoffen mit Teilchen und Fasern“, XXIV. FEM-Kongreß in Baden-Baden, 17.-18. November 1997, Tagungsband, Hrsg.: A. Streckhardt, Kongreßorganisation, Ennigerloh, pp. 445-462 (1997).
- /Schm7/ Schmauder, S., Weber, U., Hofinger, I., Neubrand, A.  
„Modelling the Deformation Behaviour of W/Cu Composites by a Self-Consistent Matricity Model“, Technische Mechanik 19, pp. 313-330 (1999).
- /Schm8/ Schmauder, S., Weber, U.  
„Modelling the Deformation Behaviour of W/Cu Composites by a Self-Consistent Matricity Model“, in: Zhu, D., Kikuchi, M., Shen, Y., Geni, M. (Eds.), ECM'99, Progress in Experimental and Computational Mechanics in Engineering and Material Behaviour, Northwestern Polytechnical University Press, Xi'an, China, pp. 54-60 (1999).
- /Schm9/ Schmauder, S., Weber, U.  
„Modelling of Functionally Graded Materials by Numerical Homogenization“, Arch. Appl. Mech. 71, pp. 182-192 (2001).

- /Seid/ Seidenfuß, M.  
„Untersuchungen zur Beschreibung des Versagensverhaltens mit Hilfe von Schädigungsmodellen am Beispiel des Werkstoffs 20 MnMoNi 5 5“, Dissertation, Universität Stuttgart (1992).
- /Ser/ Serebrinsky, S., Carter, E.A., Ortiz, M.  
„A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement“, J. Mech. Phys. Sol. 52, pp. 2403-2430 (2004).
- /Sieg1/ Siegmund, T. Brocks, W.  
„The role of cohesive strength and separation energy for modeling of ductile fracture“, in: Paris, P.C., Jerina, K.L. (Eds.), Fatigue and Fracture Mechanics: 30<sup>th</sup> Volume, ASTM STP 1360,. American Society for Testing and Materials, pp. 139-151 (2000).
- /Sieg2/ Siegmund, T., Brocks, W.  
„Local fracture criteria: Lengthscales and applications“, J. Phys. IV 8, pp.349-356 (1998).
- /Sop1/ Soppa, E.  
„Experimentelle Untersuchung des Verformungsverhaltens zweiphasiger Werkstoffe“, Dissertation, Max-Planck-Institut für Metallforschung, Institut für Werkstoffwissenschaft, Stuttgart, Reihe 5: Grund- und Werkstoffe Nr. 408, VDI-Verlag GmbH Düsseldorf (1995).
- /Sop2/ Soppa, E., Schmauder, S., Fischer, G.  
„Numerical and Experimental Investigations of the Influence of Particle Alignment on Shear Band Formation in Al/SiC“, in: Carstensen, J.V., Leffers, T., Lorentzen, T., Pedersen, O.B., Sørensen, B.F., Winther, G. (Eds.), Proc. 19<sup>th</sup> Risø International Symposium on Materials Science, Modelling of Structure and Mechanics of Materials From Microscale to Product, Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark, pp. 499-504 (1998).
- /Sop3/ Soppa, E., Weber, U., Schmauder, S., Fischer, G.  
„Spannungs- und Dehnungskonzentrationen in Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Verbundwerkstoffen verursacht durch Schädigungsprozesse“, in: Degischer, H.P. (Ed.), Verbundwerkstoffe, Wiley-VCH, Weinheim, pp. 581-586 (2003).
- /Spieg/ Spiegler, R.  
„Untersuchungen zum Bruchmechanismus in Teilchenverbundwerkstoffen“, Dissertation, MPI für Metallforschung, Universität Stuttgart (1990).

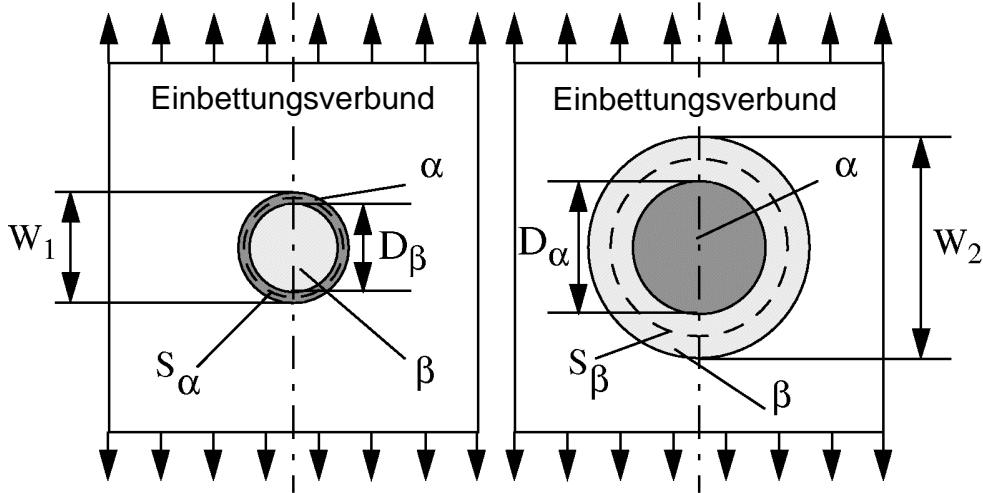
- /Sta/ Starzer, B.  
„Lebensdauer- und Schadensanalyse teilchenverstärkter Al-Matrix-Verbund- und Hybridwerkstoffe“, Dissertation, Montanuniversität Leoben.
- /Stein/ Steinkopff, Th., Sautter, M.  
„Simulating the elasto-plastic behavior of multiphase materials by advanced finite element techniques“, Comput. Mat. Sci., Vol. 4, No 1, Part I pp. 10-14, Part II pp. 15-22 (1995).
- /Sun/ Sun, D.Z., Voss, B., Schmitt, W.  
„Numerical prediction of ductile fracture resistance behaviour based on micromechanical models“, in: Blauel, H., Schwalbe, K.H. (Eds.), Defect Assessment in Components – Fundamentals and Applications, ESIS/EGF 9. Mechanical Engineering Publications, London, pp. 447-458 (1991).
- /Suo/ Suo, Z., Bao, G., Fan, B.  
„Delamination R-curve phenomena due to damage“, J. Mech. Phys. Solids 40, pp. 1-16 (1992).
- /Sven/ Svendsen, B.  
„On the thermodynamics of thermoelastic materials with additional scalar degree of freedom“, Cont. Mech. Thermodyn. 4, pp. 247-262 (1999).
- /Sven1/ Svendsen, B.  
„Formulation of balance relations and configurational fields for materials with microstructure via invariance“, Int. J. Sol. Struct. 38, pp. 1183-1200 (2001).
- /Tayl/ Taylor, G.I.  
„Plastic strain in metals“, J. Inst. Metals 62, pp. 307-324 (1938).
- /The/ Thermo-Calc AB, Stockholm Technology Park, Björnnesvägen 21, SE-11347 Stockholm, Schweden.
- /Tien/ Tien, J.K., Thompson, A.W., Bernstein, I.M., Richards, R.J.  
„Hydrogen transport by dislocations“, Metallurgical Transactions 7A, pp. 821-829 (1976).
- /Tip/ Tipper, C.F.  
„The Fracture of Metals“, Metallurgia, Vol. 39, pp. 133-138 (1949).
- /Troii/ Troiano, R.  
in Trans. ASM 52, pp. 54-80 (1960).

- /Tuch/ Tuchinskii, L.I.  
„Elastic constants of pseudoalloys with a skeletal structure“, Soviet Powder Metallurgy and Metal Ceramics, Vol. 22, No. 7, pp. 588-595 (1983).
- /Tver/ Tvergaard, V.  
„Analysis of tensile properties for a whisker-reinforced metal-matrix composite“, Acta metall. mater. 38, No. 2, pp. 185-194 (1990).
- /Tver1/ Tvergaard, V.  
„Studies of void growth in a thin ductile layer between ceramics“, Comput. Mech. 20, pp. 184-191 (1997).
- /Tver2/ Tvergaard, V., Needleman, A.  
„Effects of non-local damage in porous plastic solids“, Int. J. Sol. Struct. 32, pp. 1063-1077 (1995).
- /Uhl/ Uhlmann, D.  
„Werkstoffcharakterisierung des Werkstoffs 15NiCuMoNb5 einschließlich der Ermittlung schädigungsmechanischer Parameter für das Rousselier-Modell für zwei Werkstoffzustände“, Technischer Fachbericht MPA Stuttgart, Auftrags Nr. 878 701 004.
- /Wag/ Wagner, C.  
„Theorie der Alterung von Niederschlägen durch Umlösen (Ostwald-Reifung)“, Zeitschrift Elektrochemie 65, pp. 327-339 (1961).
- /Web/ Weber, U., Soppa, E., Schmauder, S.  
„Mikrostrukturelle Modellierung zum Einfluss der Eigenspannungsentwicklung auf die Schädigung bei der Kaltmassivumformung mehrphasiger Werkstoffe“, DFG-Kolloquium im SPP 1074 „Erweiterung der Formgebungsgrenzen bei Umformprozessen“, 11.-12.09.2001, Bonn, pp. 191-195 (2001).
- /Web1/ Weber, U., Deimel, P., Saraev, D., Sattler, E., Schmauder, S., Soppa, E.  
„Influence of hydrogen on the deformation behaviour of a ferritic fine-grained low alloy steel“, Comput. Mat. Sci. 32, pp. 577-587 (2004).
- /Will/ Willer, D., Zies, G., Kuppler, D., Föhl, J., Katerbau, K.H.  
„Betriebsbedingte Eigenschaftsänderungen kupferhaltiger ferritischer Behälter- und Rohrleitungsbaustähle“, Abschlussbericht MPA Stuttgart, Auftrags-Nr. 882 001 001, (Oktober 2001).

- /Willer/ Willert, M.  
„Simulation der mechanischen Eigenschaften von Metall/Keramik-Durchdringungsgefügen“, Diplomarbeit am Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF) (1999).
- /Wulf/ Wulf, J.  
„Neue Finite-Elemente-Methoden zur Simulation des Duktilbruchs in Al/SiC“, Fortschrittsberichte VDI, Reihe 18: Mechanik/Bruchmechanik, Nr. 173, VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf (1995).
- /Xue/ Xue, Z., Huang, Y, Li, M.  
„Particle size effect in metallic materials: a study by the theory of mechanism-based strain gradient plasticity“, Acta mater. 50, pp. 149-160 (2002).
- /Zap/ Zapffe, C.A., Sims, C.E.  
in Trans. AIME 145, pp. 225-259 (1941).
- /Zhan/ Zhang, W.  
„Einfluss metallischer Zwischenschichten auf das Diffusionsschweißen von  $\text{Si}_3\text{N}_4$  mit der Superlegierung MA6000“, Dissertation, Universität Stuttgart (1992).
- /Zie/ Ziegler, S.  
MPA interne und nicht veröffentlichte Berechnungen mit Thermo-Calc (2002).
- /Zwick/ Zwicker, U.  
„Wasserstoffversprödung von Titan und Titanlegierungen“, Zeitschrift für Werkstofftechnik 5, pp. 233-241 (1974).

## ANHANG A1: Beziehung zwischen Einheitszellendurchmesser, Matrizität und Volumenanteil

Die folgende Darstellung zeigt für das in Kapitel 4 vorgestellte Matrizitätsmodell die Herleitung der Beziehung zwischen den Einheitszellendurchmesser  $W_1$  und  $W_2$  und dem Gefügeparameter  $M$  (Matrizität), beispielhaft für die Phase  $\alpha$  ( $M_\alpha$ ) /Leß5/.



$$D_\alpha = W_2 \cdot \left( \sqrt[3]{f_\alpha} \right) \quad D_\beta = W_1 \cdot \left( \sqrt[3]{f_\beta} \right)$$

$$S_\alpha = \pi \cdot W_1 \cdot \frac{\left( \sqrt[3]{f_\beta} + 1 \right)}{2} \quad S_\beta = \pi \cdot W_2 \cdot \frac{\left( \sqrt[3]{f_\alpha} + 1 \right)}{2}$$

$$f_\alpha + f_\beta = 1$$

$f_\alpha$  und  $f_\beta$  sind die Volumenanteile der Phasen  $\alpha$  und  $\beta$

$$M_\alpha = \frac{S_\alpha}{S_\alpha + S_\beta} = \frac{\pi \cdot W_1 \cdot \frac{\left( \sqrt[3]{f_\beta} + 1 \right)}{2}}{\pi \cdot W_1 \cdot \frac{\left( \sqrt[3]{f_\beta} + 1 \right)}{2} + \pi \cdot W_2 \cdot \frac{\left( \sqrt[3]{f_\alpha} + 1 \right)}{2}}$$

$$M_\alpha = \frac{W_1 \cdot \left( \sqrt[3]{1-f_\alpha} + 1 \right)}{W_1 \cdot \left( \sqrt[3]{1-f_\alpha} + 1 \right) + W_2 \cdot \left( \sqrt[3]{f_\alpha} + 1 \right)}$$

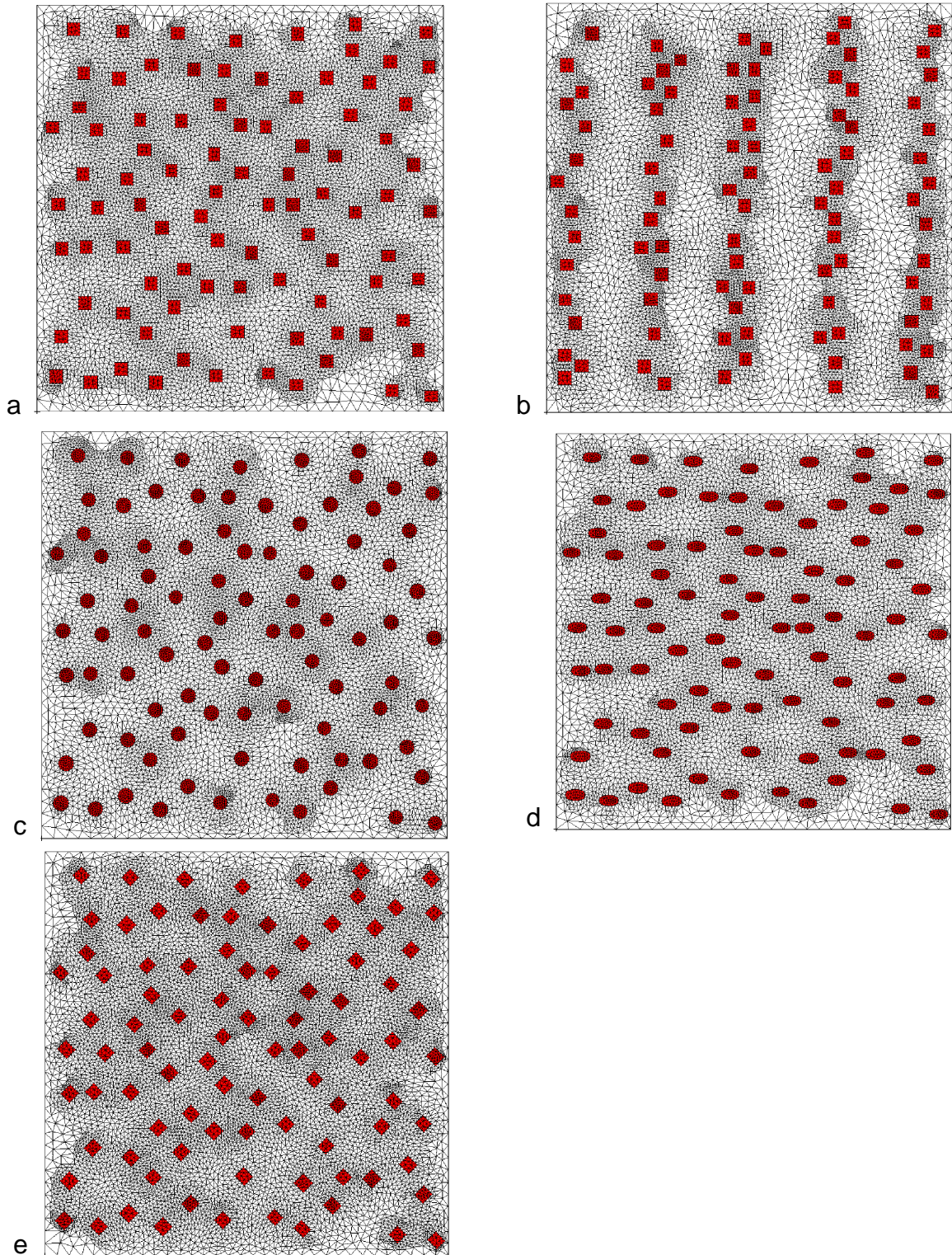
$$W_1 = W_2 \left( \sqrt[3]{1-f_\beta} + 1 \right) \cdot \frac{1-M_\beta}{M_\beta \left( \sqrt[3]{f_\beta} + 1 \right)} \quad W_2 = 1,0 \text{ for } M_\beta \geq 0,5$$

$$W_2 = W_1 \left( \sqrt[3]{1-f_\alpha} + 1 \right) \cdot \frac{1-M_\alpha}{M_\alpha \left( \sqrt[3]{f_\alpha} + 1 \right)} \quad W_1 = 1,0 \text{ for } M_\alpha \geq 0,5$$

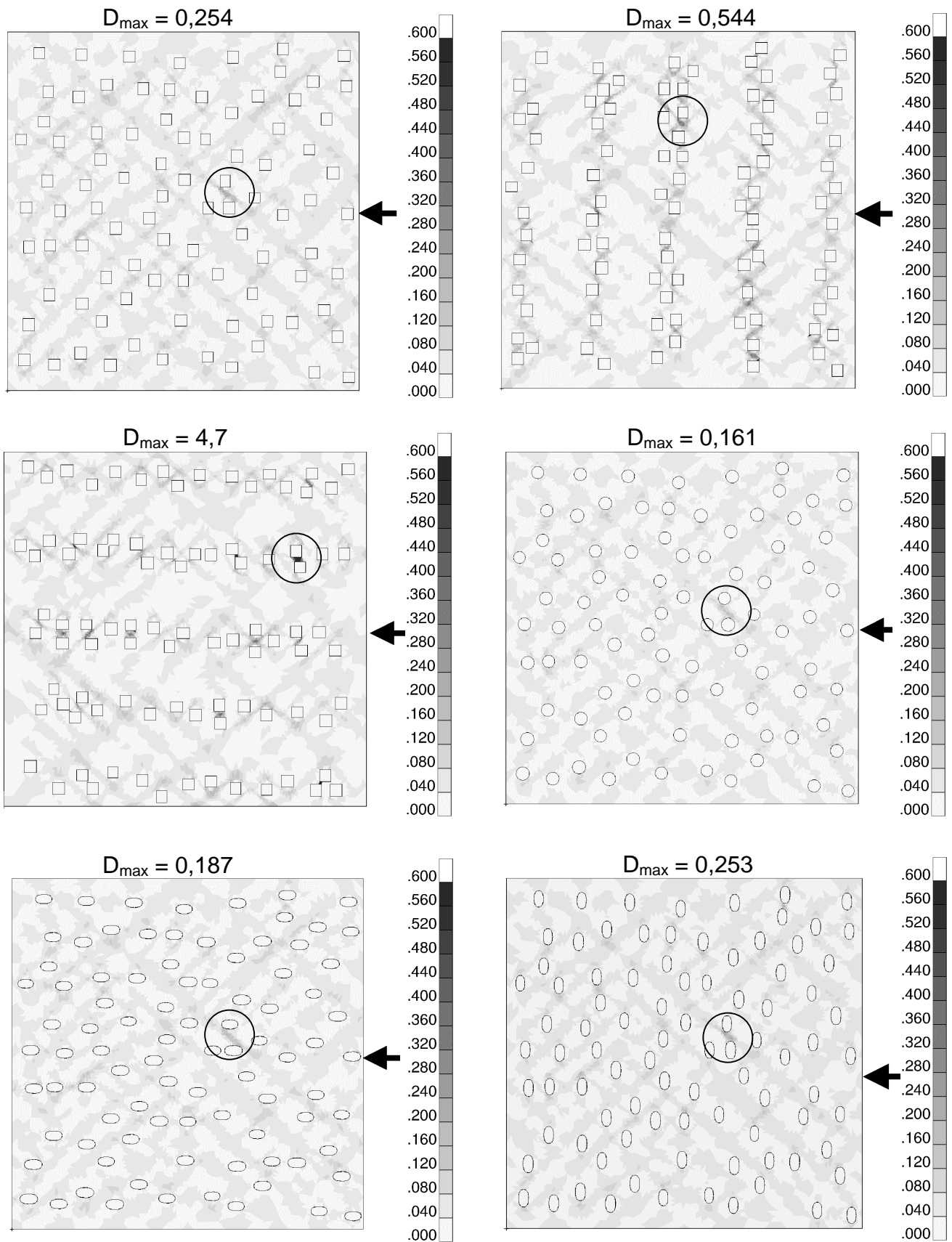


## ANHANG A2: Vernetzung und Verteilung von Damage-Werten

Die folgenden Darstellungen zeigen die Vernetzung der künstlichen Gefüge und die Verteilung des Damage-Parameters  $D$  für die künstlichen Gefüge und für das Realgefüge aus dem Verbundwerkstoff Al/10vol.% SiC (**Bild A2.2 bis Bild A2.4**) und aus dem Duplexstahl X3CrNiMoCu26-6 (**Bild A2.5**).

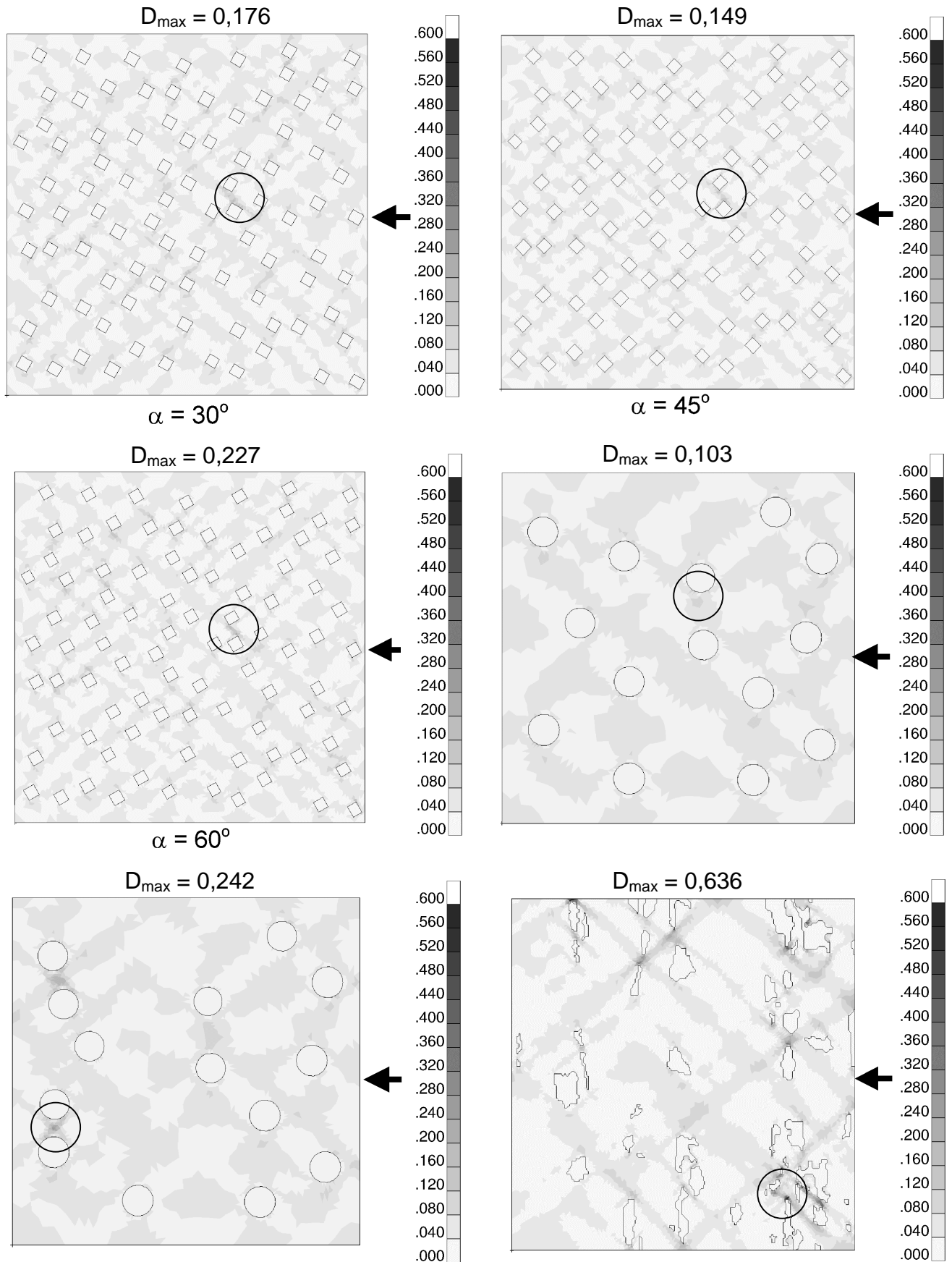


**Bild A2.1:** Vernetzung von künstlichen Gefügen (a-e) mit dem in dieser Arbeit entwickelten Programm RASTER\_2\_P3 /Mel/.

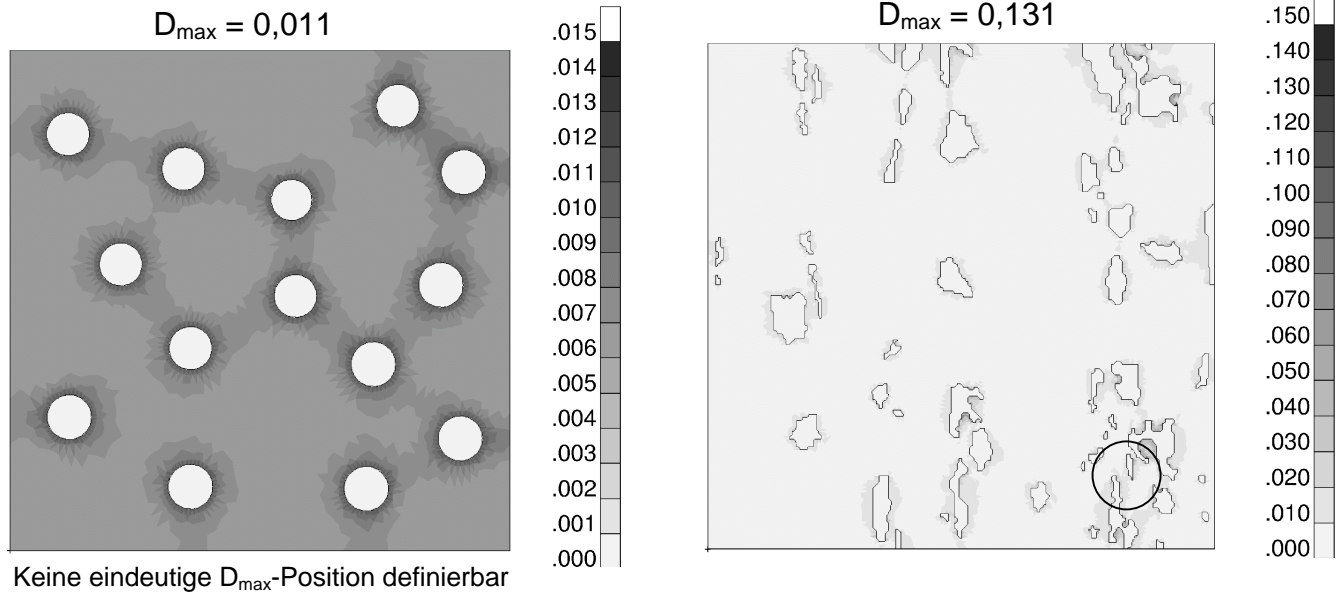


**Bild A2.2:** Verteilung des Damage-Parameters (D) bei thermisch-mechanischer Belastung (Abkühlung von 500 auf RT und 10% globaler Dehnung, ← Belastungsrichtung).  $D_{\max}$ -Position sind mit  $\bigcirc$  markiert (Al/10vol.%SiC).

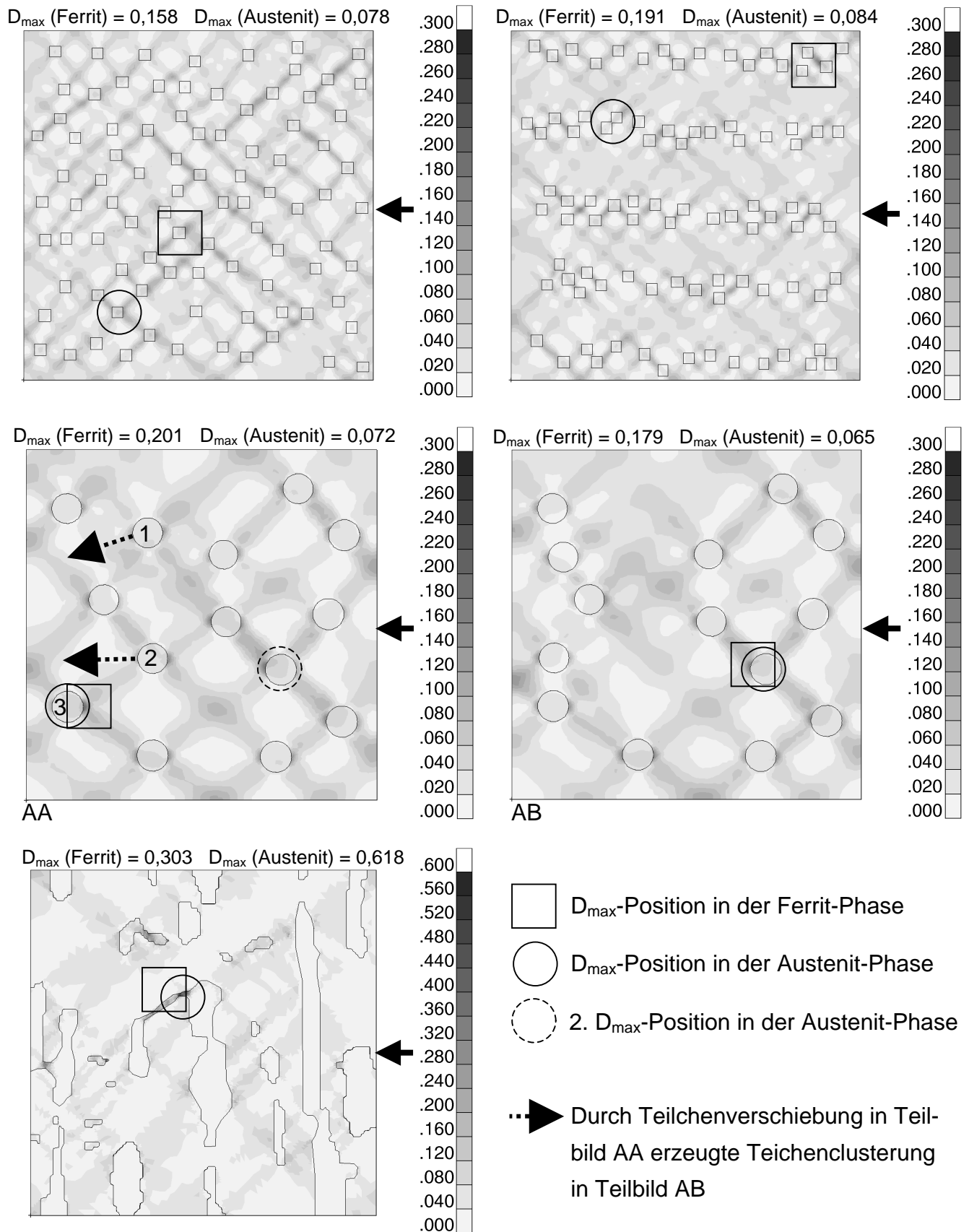




**Bild A2.3:** Verteilung des Damage-Parameters bei thermisch-mechanischer Belastung (Abkühlung von 500 auf RT und 10% globaler Dehnung,  $\leftarrow$  Belastungsrichtung).  $D_{max}$ -Position sind mit  $\bigcirc$  markiert (Al/10vol.%SiC).



**Bild A2.4:** Verteilung des Damage-Parameters bei rein thermischer Belastung (Abkühlung von 500 auf RT).  $D_{\max}$ -Position sind mit  $\bigcirc$  markiert (Al/10vol.%SiC).



**Bild A2.5:** Verteilung des Damage-Parameters bei mechanischer Belastung (10% globale Dehnung,  $\leftarrow$  Belastungsrichtung (Duplexstahl X3CrNiMoCu26-6, Austeniteinschlüsse und Ferrit-Matrix).

## ANHANG A3: Anwendung der Russell&Brown-Theorie

Im Folgenden wird die Russell&Brown-Theorie auf die in Kapitel 5.2.2 (Tabelle 5.2) aufgeführten Werkstoffübergänge 2 und 3 des Werkstoffs 15NiCuMoNb5 (WB36) angewendet. Dabei werden jeweils zwei Werkstoffzustände mit unterschiedlichem Ausscheidungsgrad an Cu-Teilchen miteinander verglichen und der Festigkeitszuwachs jeweils bestimmt. In den Ausgangszuständen (E60A und E2A) sind bereits Cu-Ausscheidungen vorhanden und über die Wärmebehandlungen (E60LA und E2LA) wird eine zweite Teilchenklasse an Kupferteilchen ausgeschieden. Die Berücksichtigung einer zweiten Teilchenklasse ist in den Beziehungen nach Russell&Brown (Gl. (2.30) – (2.33) in Kap. 2.5.1) nicht vorgesehen. Aus diesem Grund wird aus beiden Teilchenklassen bzw. Teilchenradien ( $r_{ppt1}$  und  $r_{ppt2}$ ) ein Ersatzmittelwert des Teilchenradius ( $r_{ppt}$ ) bestimmt. Bei der Mittelung werden die Teilchen gemäß ihrem Volumenanteil ( $f_{Cu1}$  und  $f_{Cu2}$ ) berücksichtigt:

$$r_{ppt} = \frac{\sum_{i=1}^n f_{Cu,i} \cdot r_{ppt,i}}{\sum_{i=1}^n f_{Cu,i}} \quad (A3.1)$$

mit  $n$  = Anzahl der Teilchenklassen (hier  $n = 2$ ).

Die für die Anwendung der Russell&Brown-Theorie notwendige Kenntnis über mittlere Teilchenradien und Volumenanteile wird aus den am Werkstoff 15NiCuMoNb5 (WB36) durchgeführten SANS Messungen /Will/ entnommen.

Werkstoffübergang	Bereits vorhandene Teilchen $r_{ppt, 1} / f_{Cu, 1}$ (nm / %)	+ neue Teilchen $r_{ppt, 2} / f_{Cu, 2}$ (nm / %)	ergibt $r_{ppt} (*) / f_{Cu}$ (nm / %)	$\Delta\sigma (**)$ (MPa)
2. <b>E60A</b> zu E60LA	3,87 / 0,402	2,62 / 0,18	3,48 / 0,582	40 (43)
3. <b>E2A</b> zu E2LA	4,69 / 0,253	3,72 / 0,29	4,17 / 0,543	58 (62)

(\* aus Gl. (A3.1))

(\*\* aus Gl. (2.30)-(2.33) in Kap. 2.5.1)

**Tabelle A3.1:** Nach Russell&Brown ermittelte und auf den jeweiligen **Ausgangszustand** bezogene Festigkeitsänderung für die Werkstoffzustände 2 und 3 aus Tabelle 5.2 (Kap. 5.2.2) unter Anwendung der aus SANS-Messungen /Will/ ermittelten Mittelradien  $r_{ppt, 1+2}$  und Volumenanteile  $f_{Cu, 1+2}$ . In Klammer die experimentell ermittelte Festigkeitszunahme /Will/.

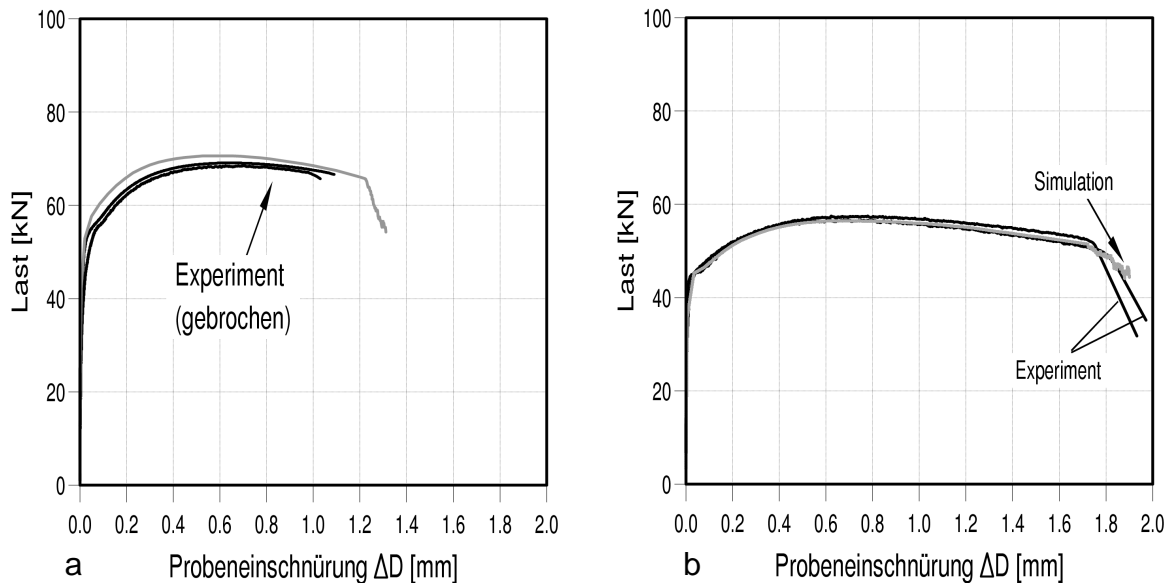
Die Anwendung der Russell&Brown-Theorie auf die in Kapitel 5.2.2 (Tabelle 5.2) definierten Werkstoffübergänge 2 und 3, die Größe und der Anteil der jeweils ausgeschiedenen Cu-Teilchen sowie die im Experiment gefundene Festigkeitszunahme sind in **Tabelle A3.1** zusammengestellt.

Obwohl bei der Russell&Brown-Theorie vereinfachte Annahmen getroffen werden (gleiche Teilchengröße  $r_{ppt} > 2,5$  nm, gleichmäßiger Teilchenabstand) und verschiedene Gegebenheiten nicht berücksichtigt sind (Teilchenzusammensetzung und Streuung der Ausscheidungen parallel zur Versetzungsbewegung), stellt sich dennoch für die Werkstoffübergänge 2 und 3 eine relativ gute Übereinstimmung mit den jeweils experimentell ermittelten Festigkeitszunahmen der betrachteten Werkstoffzustände ein.

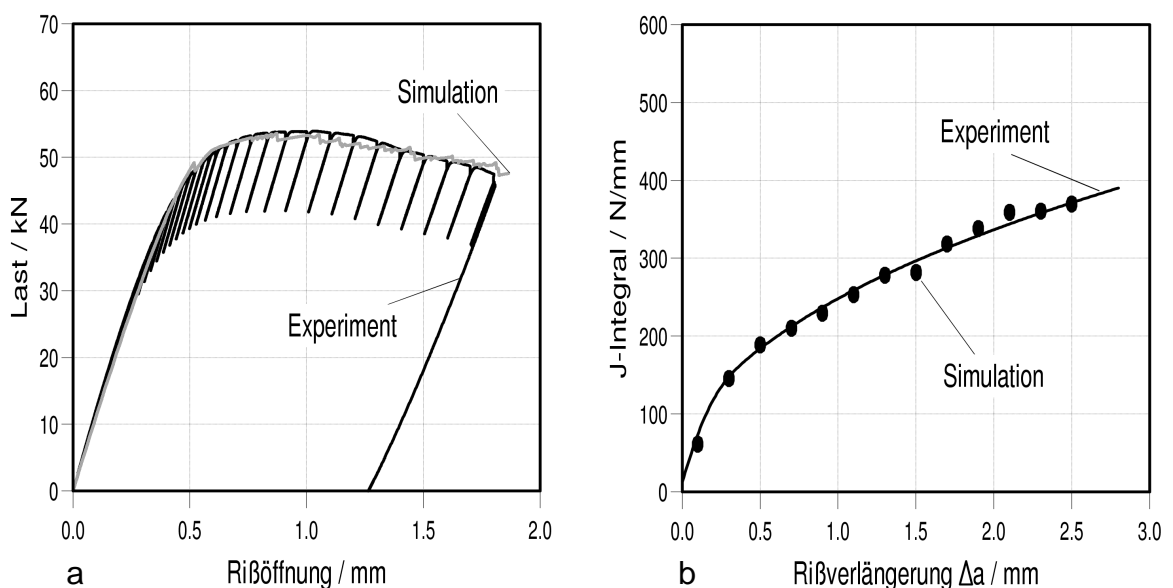
Für diesen hier untersuchten Werkstoff 15NiCuMoNb5 (WB36) ist die Anwendbarkeit der Russell&Brown-Theorie dann gegeben, wenn „große“ Cu-Teilchen vorhanden sind und wenn zusätzlich etwa gleich große Cu-Teilchen in vergleichbarer Volumenmenge hinzukommen (vergl.  $r_{ppt}$  und  $f_{Cu}$  für 3. Werkstoffübergang in Tabelle A3.1), oder wenn Cu-Teilchen „mittlerer“ Größe in etwas geringerer Volumenmenge zusätzlich ausgeschieden werden (vergl.  $r_{ppt}$  und  $f_{Cu}$  für 2. Werkstoffübergang in Tabelle A3.1): Somit treten in beiden Fällen die neu ausgeschiedenen Teilchen in Wechselwirkung mit den bereits vorhandenen Cu-Teilchen und wegen der ähnlichen Teilchendurchmesser kann über Gl. (A3.1) ein für die Russell&Brown-Theorie repräsentativer Ersatz-Teilchenradius ermittelt werden, mit dem der Endzustand (E60LA bzw. E2LA) zusammen mit dem Volumenanteil beider Teilchenklassen abgebildet und in Bezug zum jeweiligen Ausgangszustand (E60A bzw. E2A) die Festigkeitserhöhung  $\Delta\sigma$  des Werkstoffs WB36 über die Gl. (2.30) – (2.33) aus Kap. 2.5.1 ermittelt werden kann.

## ANHANG A4: Anpassung von Rousselier-Parametern

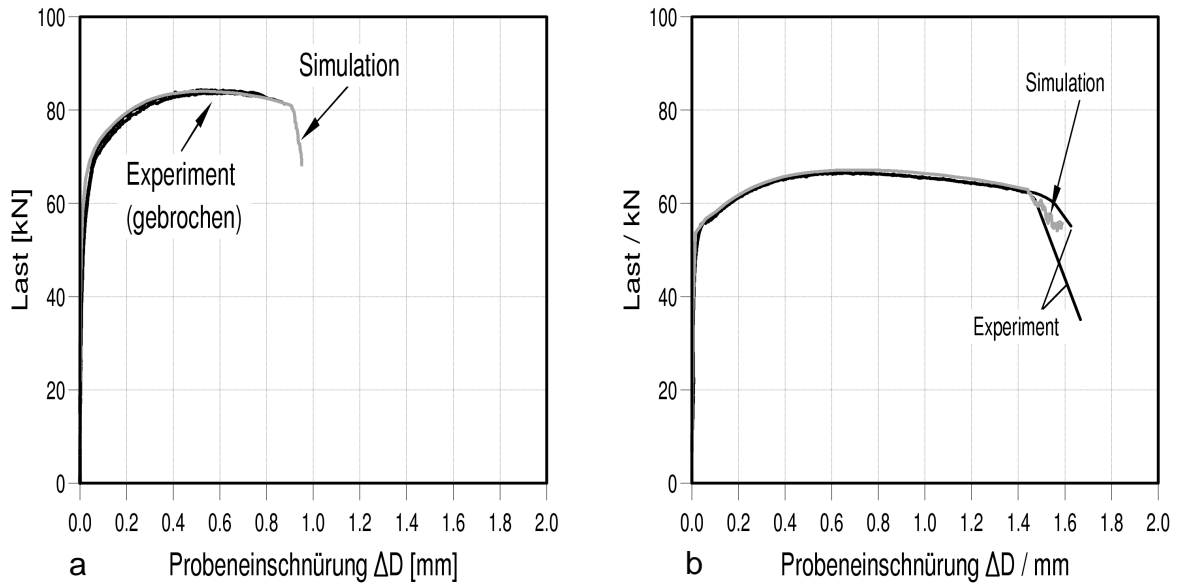
Die folgenden **Bilder A4.1** bis **A4.4** zeigen die Anpassung des Rousselier-Parameters  $\sigma_k$  für den Werkstoff WB36 unter der Annahme von plattenförmigen MnS-Einschlüssen gemäß Kapitel 5.4.2. Darin wird für diese Einschlussform ein formbereinigtes Anfangshohlraumvolumen von  $f_0 = 0,24 \%$  abgeleitet (vergl. Tab. 5.5, Kap. 5.4.2). Die Anpassung des Werkstoffparameters  $\sigma_k$  an die Experimente ergibt einen Wert von  $\sigma_k = 470$  MPa.



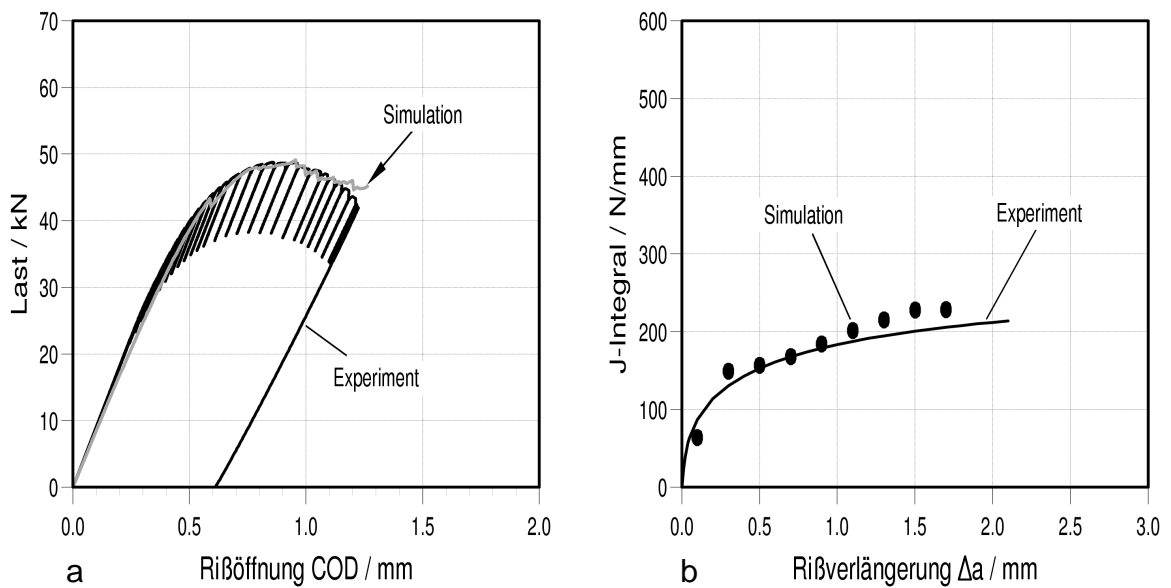
**Bild A4.1:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Einschnürungskurven von gekerbten Zugproben mit Kerbradius  $r_k = 2$  mm (a) und  $r_k = 8$  mm (b),  $f_0 = 0,24 \%$ ,  $l_c = 0,1$  mm,  $\sigma_k = 470$  MPa, Werkstoffzustand E60A (Prüf­temperatur = 90 °C).



**Bild A4.2:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Rissöffnungskurve (a) und Risswiderstandskurve (b) für eine C(T)25-Probe (20%sk), ( $f_0 = 0,24 \%$ ,  $l_c = 0,1$  mm,  $\sigma_k = 470$  MPa), Werkstoffzustand E60A (Prüf­temperatur = 90 °C).



**Bild A4.3:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Einschnürungskurven von gekerbten Zugproben mit Kerbradius  $r_k = 2$  mm (a) und  $r_k = 8$  mm (b),  $f_0 = 0,24$  %,  $l_c = 0,1$  mm,  $\sigma_k = 470$  MPa, Werkstoffzustand E60B (Prüf­temperatur = 90 °C).



**Bild A4.4:** Vergleich Experiment-Simulation: Last-Rissöffnungskurve (a) und Risswiderstandskurve (b) für eine C(T)25-Probe (20%sk), ( $f_0 = 0,24$  %,  $l_c = 0,1$  mm,  $\sigma_k = 470$  MPa), Werkstoffzustand E60B (Prüf­temperatur = 90 °C).





# Lebenslauf

Dipl.-Ing. Ulrich Weber

Geburt	7.1.1959 in Leonberg	
Eltern	Walter Weber und Gertrud Weber, geb. Ulmer	
Familienstand	verheiratet mit Claudia Weber, geb. Fink, zwei Kinder	
Nationalität	deutsch	
Schulbildung	1966 – 1969	Grundschule Leonberg
	1969 – 1978	Gymnasium Leonberg
	4.1978	Allgemeine Hochschulreife
Studium	1978 – 1984	Studiengang Maschinenwesen an der Universität Stuttgart
	1982 – 1984	hilfswissenschaftlicher Assistent an der Staatlichen Materialprüfungsanstalt Universität Stuttgart (MPA)
Praktika	1.8. – 25.9.1978	Fa. Stohrer GmbH
	18.2. – 11.4.1980	Robert Bosch GmbH
	23.3. – 30.4.1981	Fa. GEZE GmbH
	2.1. – 27.1.1984	Robert Bosch GmbH
Berufstätigkeit	Seit 1.1985	wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Materialprüfungsanstalt Universität Stuttgart (MPA, ehemals Staatliche Materialprüfungsanstalt Universität Stuttgart)