Metallphysik und Stoffmodellierung

K. Wegener

Zur Verbesserung der Aussagesicherheit von (makroskopischen) Stoffgesetzen wird vermehrt auf mikromechanische Erkenntnisse zurückgegriffen. Dies erfolgt im wesentlichen auf zwei verschiedene Weisen:

- 1.) Synthese metallphysikalischer Erkenntnisse: Die Beobachtung des Versetzungsverhaltens unter Schubspannung gibt Aufschluß über die Bewegungsgleichung der Versetzungen und damit über elementare plastische Verformungen, die Beobachtung der entstehenden Versetzungsstruktur gibt Aufschluß über die Verfestigung auf der Gleitebene. Aus den auf Gleitsystemebene gültigen Gesetzen wird das Verhalten des Kristallits generiert und aus dem Gesetz für den Kristalliten wird das makroskopische Stoffgesetz über Mittelungstheorien gewonnen.
- 2.) Phänomenologische Berücksichtigung: Hierzu wird zunächst eine auf allgemeingültigen kontinuumsmechanischen und thermodynamischen Prinzipien beruhende makroskopische Stofftheorie aufgestellt. Die Eingliederung der metallphysikalischen Erkenntnisse erfolgt durch die Wahl der inneren Variablen, durch Mittelungsprozesse nach Maßgabe der kontinuumsmechanischen und thermodynamischen Prinzipien oder durch Analogieschluß. Als Beispiel für die Integration mikromechanischer Modellvorstellungen in die Stofftheorie werden die Zeitabhängigkeit plastischen Materialverhaltens sowie daraus abgeleitete diskontinuierliche Fließphänomene beschrieben.

1 Einleitung

Die riesigen Investitionskosten, die mit der Inbetriebnahme einer Umformanlage heute verbunden sind, verlangen deren optimale Nutzung, d.h. die Herstellung qualitativ hochwertiger Teile, lange Laufzeiten, d.h. sichere Prozesse und kurze Verfahrensentwicklungszeiten. Zur Suche des Optimums wird in der Regel nur noch rein empirisch vorgegangen. Zur Simulation von Umformprozessen wie auch zur Vorhersage des Bauteilverhaltens nach einer Kaltverfestigung müssen Stoffgesetze folgendes leisten:

- 1.) Beschreibung des Stoffverhaltens bei hohen Umformgeschwindigkeiten, d.h. Umformgeschwindigkeiten von 10 s^{-1} bis 10^3 s^{-1} , in extremen Fällen sogar bis 10^5 s^{-1}
- 2.) Beschreibung thermomechanischer Kopplungen, da ab Verformungsgeschwindigkeiten von 10^{-2} s⁻¹ deutliche Temperaturerhöhungen festzustellen sind
- 3.) Ungeradlinige Lastpfade, da durch die Umformung in Stufen Knicke im Lastpfad gezielt eingebracht werden
- 4.) Beschreibung großer Deformationen bis zu einigen 1000%
- 5.) Beschreibung der Strukturänderung des Materials, d.h. Verfestigung, Ausbildung von Texturen, Schädigung
- 6.) Beschreibung auch kleiner, d.h. elastischer, thermischer und viskoelastischer Verformungsanteile, da einbaufertige Teile ein Toleranzfeld IT 7 bis IT 9 verlangen.

Eine erhebliche Befruchtung der Materialmodellierung zur Erfüllung der oben genannten Aufgaben erfolgt heute durch die Integration metallphysikalischer Erkenntnisse in die Stoffmodellierung, während die Kontinuumsmechanik in der Vergangenheit diese Ergebnisse als nicht auf das Kontinuum zutreffend unbeachtet ließ. Ein Überblick über metallphysikalische Ergebnisse sowie Methoden zu deren Berücksichtigung in makroskopischen Stoffgesetzen werden vorgestellt.

2 Vorgänge auf der Gleitebene

Obwohl sich die überwältigende Mehrheit aller Mikromechaniker mit der Untersuchung des Versetzungswanderns und -blockiertwerdens beschäftigt, ist dies nur ein Teil der Ursachen für plastische Verformungen. Daneben treten

• Korngrenzengleiten

- Diffusionsverformung
- Zwillingsbildung

auf, die wir aber im folgenden vernachlässigen wollen. In diesem Abschnitt wird eine Gleitebene vorausgesetzt, die mobile Versetzungen mit der Dichte D enthält. Um eine Versetzung zu bewegen, werden Schubspannungen im Gleitsystem benötigt. Diese dienen dazu, die Bindungskräfte einer Atomreihe aufzubrechen. Tatsächlich enthält das Gleitsystem auch Hindernisse, z.B. Fremdatome, Waldversetzungen, Ausscheidungen und Jogs, die unter Zuhilfenahme thermischer Aktivierung überwunden werden. Die Bewegung der Versetzung besteht aus einer freien Bewegung mit einer durch die Spannungen begrenzten Maximalgeschwindigkeit und einer Wartezeit t_w vor diesen Hindernissen. Als mittlere Geschwindigkeit v ergibt sich

$$v = \frac{s_f}{t_w + t_f} \tag{1}$$

Dabei heißt s_f die freie Weglänge zwischen solchen Hindernissen (vgl. Bild 1) und t_f die Zeit der freien



Bild 1. Überwindung von Hindernissen auf der Gleitebene durch eine Versetzung nach Gerdes (1995)

Bewegung. Für übliche Verformungsgeschwindigkeiten, je nach Material zwischen 10 s⁻¹ und 10² s⁻¹, bewegt sich eine Versetzung schlagartig über ihre freie Weglänge s_f bis zum nächsten Hindernis. Die Zeit vergeht im wesentlichen mit Warten vor Hindernissen, $t_w >> t_f$. Die Schubspannung stützt sich in der Zwischenzeit auf den Hindernissen ab. Während der Wartezeit versucht die Versetzung unter Ausnutzung der Gitterschwingungen das Hindernis zu überwinden. t_w ergibt sich als Kehrwert der wahrscheinlichen Überwindungsrate

$$t_w = \frac{1}{p^+ - p^-} \qquad p^+ = \nu_0 \exp\left(-\frac{G(\vartheta^\star, \ \bar{\tau}, \ q_k)}{k\vartheta^\star}\right) \qquad p^- = \nu_0 \exp\left(-\frac{G(\vartheta^\star, \ -\bar{\tau}, \ q_k)}{k\vartheta^\star}\right) \tag{2}$$

Durch den Übergang auf eine andere Grundvariable, nämlich das Aktivierungsvolumen V = bA, kann aus der freien Aktivierungsenthalpie G der spannungsabhängige Anteil isoliert werden. Dadurch ist erkennbar, daß die effektive Scherspannung $\bar{\tau}$ die freie Aktivierungsenthalpie herabsetzt und damit bewegungsfördernd wirkt. Das Aktivierungsvolumen ist der Faktor mit dem eine Scherspannung zu multiplizieren ist, damit die Aktivierungsenergie entsteht. Die Aktivierungsfläche ist das Produkt aus der Breite des Hindernisses d, d.h. der Reichweite seines Spannungsfeldes, und der Länge l des Versetzungsstückes zwischen zwei Hindernissen. Diese Länge kann bei sehr weit gestreuten Hindernissen auch der Durchmesser eines Subkornes oder einer Zelle sein. Nun läßt sich die Schergeschwindigkeit $\dot{\gamma}_p$ ermitteln, indem man die mittlere Scherung pro Überwindung eines Hindernisses durch die Wartezeit teilt. Weiter ist noch zu berücksichtigen, daß der mittlere Abscherbetrag nach Messungen von Mecking et al. (1986) spannungsabhängig ist, nämlich mit steigender Spannung zunimmt (Ausbügeln schwächerer Hindernisse), was in der folgenden Gleichung berücksichtigt ist:

$$\dot{\gamma}_{p} = \bar{\gamma}_{w} \left(\frac{\bar{\tau}}{G}\right)^{n} \nu_{0} \exp\left(-\frac{F - bA\bar{\tau}}{k\vartheta^{\star}}\right) \tag{3}$$

Im Hochgeschwindigkeitsbereich, d.h., wenn die Zeit während der freien Bewegung der Versetzung eine Rolle spielt, muß berücksichtigt werden, daß die Wanderungsgeschwindigkeit der Versetzung zwischen den Hindernissen bei vorhandener Spannung durch viskose Reibung, d.h. durch Phononen-Streuung, Elektronendämpfung, Fremdatome (speziell interstitielle) begrenzt wird. Für die erreichbare Geschwindigkeit gilt

$$v_f = \frac{1}{B} b\bar{\tau} \tag{4}$$

Der Materialparameter B wird Drag-Koeffizient genannt. Für gleichmäßig verteilte Hindernisse ist $l \approx s_f$. Berücksichtigt man nun, daß mit der mittleren Geschwindigkeit v die plastische Scherrate zu

$$\dot{\gamma}_{p} = bDv$$
 (5)

wird, und daß sich die Dichte D schnell an geänderte Bedingungen anpaßt, so daß mit

$$D = D_0 \left(\frac{\bar{\tau}}{G}\right)^n \tag{6}$$

gilt

$$\dot{\gamma}_{p} = \bar{\gamma}_{w} \left(\frac{\bar{\tau}}{G}\right)^{n} \nu_{0} \exp\left(-\frac{F - bA\bar{\tau}}{k\vartheta^{\star}}\right) + \bar{\gamma}_{f} \exp(-\frac{B}{\bar{\tau}}) \tag{7}$$

Bei Raumtemperatur und $\dot{\gamma}_p < 10 \dots 10^2 \ {\rm s}^{-1}$ wird der Reibungsanteil vernachlässigbar klein, $b \approx 0$. Diese Gleichung enthält die Bewegung von mobilen Versetzungen sowie die Änderung ihrer Dichte D. Gleichung (6) beschreibt wie Versetzungen entstehen und wie sie dem Verformungsprozeß verlorengehen. Beide Phänomene sind ohne Betrachtung der Strukturentwicklung auf einer Gleitebene, d.h. der Entwicklung starker Hindernisse, nicht erklärbar. Frank-Read-Quellen sind Modellvorstellungen für die Erzeugung von Versetzungen. Hierbei wird zwischen zwei starken, d.h. thermisch aktiviert nicht überwindbaren Hindernissen ein Versetzungsstück durch die Spannung ausgebogen. Dieses schließt sich hinter den Hindernissen zu einer geschlossenen Versetzungsschleife, wobei zwischen ihnen ein neues Versetzungsstück entsteht, so daß sich der Vorgang wiederholen kann.

Der Verlust einer Versetzung für die Verformung, die Immobilisierung, findet nach einer durchschnittlichen Wanderungslänge statt. Dann wird die mobile Versetzung durch eine Versetzung mit entgegengesetztem Vorzeichen unter Bildung einer Reihe von Leerstellen annihiliert, wenn sich die beiden Versetzungen bis auf den sog. Annihilationsabstand annähern. Andernfalls wird sie in Versetzungswälder, Korngrenzen, Subkorngrenzen oder Zellwände gedrückt, d.h., sie läuft auf Hindernisse, die auch thermisch aktiviert nicht mehr überwindbar sind. Als solche wirken Zellwände, Korngrenzen und dichte Versetzungswälder. Dies beschreibt qualitativ das Modell von Weertmann (1957) (vgl. Hart und Solomon, 1973). Danach wirkt auf die führende Versetzung eines Versetzungsaufstaus mit n Versetzungen eine Schubspannung $n\bar{\tau}$, mit der sie tief und irreversibel in das Hindernis hineingedrückt wird und nunmehr selbst als Verstärkung des Hindernisses wirkt.

Insgesamt wird die Bewegung von Versetzungen durch vier Elemente bestimmt: Bildung von mobilen Versetzungen, Reibung bei freier Bewegung, thermisch aktivierte Überwindung von schwachen Hindernissen und spannungsaktivierte Immobilisierung durch starke Hindernisse.

3 Strukturbildung durch Versetzungen

Die Bildung von Versetzungsstrukturen bei Metallen ist nach Messungen verschiedener Forscher je nach Versuchsbedingungen und Material sehr variantenreich. Wir beschränken uns hier auf eine vereinfachende Darstellung. Für die Entwicklung der Struktur ist entscheidend, bei welcher Temperatur die Verformung stattfindet. Der Hochtemperaturbereich ist durch Diffusionsprozesse und damit durch die Möglichkeit der thermischen Erholung, durch Quergleiten von Schrauben- und Klettern von Stufenversetzungen gekennzeichnet. Daneben spielt die Versuchsart eine wichtige Rolle, so daß der zyklische Versuch separat betrachtet werden muß. Hatten wir vorhin die Bewegung einer einzelnen Versetzung betrachtet, so beruht die Bildung von Versetzungsstrukturen auf deren Wechselwirkungen über Spannungsfelder. In diesem Abschnitt wird geklärt, woher die bisher eingeführten Zustandsvariablen, effektive Schubspannung $\bar{\tau}$ und Aktivierungsfläche A, stammen und aufgezeigt, daß das mikroskopische Materialverhalten ausreichend kompliziert ist, um eine Fülle weiterer Zustandsvariablen zu rechtfertigen.

Generell zeichnet sich folgendes Bild der Strukturentwicklung ab: Bild 2 gibt dazu den typischen Verlauf



Bild 2. Prinzipieller Schubspannungs- und Scherwinkelverlauf bei Metallen

der $\tau - \gamma$ -Kurve wieder. Der Bereich I, der nur bei Einkristallen auftritt, ist durch Einfachgleitung gekennzeichnet. Versetzungen werden auf der Gleitebene durch Frank-Read-Quellen gebildet. Der leichte Anstieg der Spannung ist Folge einer Selbstverfestigung auf dem aktiven Gleitsystem. Bereich II ist durch die Aktivität mehrerer Gleitsysteme gekennzeichnet. Für die Aktivierung der anderen Gleitsysteme ist die zunehmende Verfestigung auf den Systemen des anfänglichen Gleitens die Ursache. Dadurch entstehen in allen Gleitebenen Versetzungslinien, die senkrecht auf der Gleitebene stehen. Im Verlaufe weiterer Verformung werden diese zu Waldversetzungen immobilisiert. Die Waldversetzungen mit der Dichte D_f sind dabei als Versetzungsstücke anzusehen, die senkrecht zur Gleitebene lagen und durch das Schneiden mittels einer durchlaufenden Versetzung einen Jog in der Versetzungslinie bilden. Es zeigt sich, daß durch die Wechselwirkungen zwischen Versetzungen unterschiedlicher Gleitebenen und -systeme eine Anhäufung von Versetzungsstücken an nicht vorherbestimmbaren Orten durch Instabilwerden der homogenen Versetzungsverteilung entsteht, wobei parallel dazu natürlich andere Bereiche von Versetzungen gereinigt werden. Bei weiterer Verformung wird das geometrische Muster dieser unterschiedlichen Bereiche so geändert, daß es zu dem im Anfangsstadium ähnlich bleibt (vgl. Kuhlmann-Wilsdorf (1968)). Die Struktur verfeinert sich, die Versetzungsanhäufungen werden dichter und die versetzungsarmen Bereiche versetzungsärmer. Im Bereich II nimmt die Versetzungsdichte, speziell D_f, kontinuierlich und annähernd linear zu, was eine lineare Verfestigung nach sich zieht. Durch weitere Verformungen werden Versetzungen nach ihrer Bildung und Durchwandern des waldversetzungsarmen Raumes in die Versetzungswälder gedrückt und dort immobilisiert, d.h., sie werden selbst zu Waldversetzungen. Erholung, d.h. Versetzungsannihilation usw., findet praktisch nicht statt. Offenbar sind die Abstände der Versetzungen noch zu groß, um sich gegenseitig zu tilgen. Durch die gerichtete Gleitung entstehen Versetzungswälder mit gleichgerichteten Versetzungsstücken, die den Aufbau weitreichender innerer Spannungen zur Folge haben. Typisch für dieses Stadium der Verfestigung ist die in Bild 3 gezeigte Struktur. Im spannungsfreien Fall wären alle Versetzungsstücke zur Minimierung der inneren Energie der Kristallstörungen gerade. Die Beobachtung der Versetzungen erfolgte im Bild 3 für den lastfreien Fall, so daß die Ausbauchung der einzelnen Versetzungslinien ein Indiz für die verbliebenen mikroskopischen Spannungsfelder darstellt. Im Bereich III tritt nun Erholung hinzu, im Tieftemperaturbereich dynamische Erholung und im Hochtemperaturbereich thermische Erholung. Wie schon für den Bereich II beschrieben, werden weitere Versetzungen in die Versetzungswälder gedrückt. Da diese einigermaßen gleichgerichtet sind, entsteht gemäß dem Weertmann-Modell auf die führende Versetzung des Versetzungsaufstaus eine zunehmende treibende Kraft. Die Versetzungswälder werden dadurch enger zusammengedrückt. Nun bilden dicht nebeneinanderliegende Versetzungen, wegen der Möglichkeit, sich so zu arrangieren, daß die Gitterverspannung minimiert wird, neue Struktureinheiten. Es entsteht z.B. durch die Anlagerung zweier entgegengesetzt gerichteter Versetzungen auf verschiedenen Gleitebenen ein Versetzungsdipol. Solche Di- und Multipole sind nur schwer beweglich, da sie durch eine Abgleitung eigentlich auseinandergerissen werden müßten. Die zunehmende Größe der Versetzungsstaus ermöglicht, im Gegensatz zum Bereich II, das Einsetzen verbesserter Uberwindungsmöglichkeiten von Hindernissen und Versetzungsannihilationen nach Unterschreiten des Annihilationsabstandes durch Versetzungsklettern, Quergleiten von Schraubenversetzungen, Zusammenbrechen von Di- und Multipolen unter Bildung einer Reihe von Leerstellen. Die Erholung tritt auch bei tiefen Temperaturen aber hohen plastischen Verformungen auf, weshalb man dann von dynamischer Erholung im Gegensatz zur thermischen Erholung spricht. Durch die aus Di- und Multipolen gebildeten



Bild 3. Versetzungsstruktur im Cu Einkristall im Bereich II nach Mughrabi (in Kröner und Theodosiu (1974))

Leerstellenanhäufungen wird die Grundlage der Materialschädigung gelegt. Die Wirkung besteht generell im Zusammendrängen der Versetzungswälder zu Zellwänden, während dazwischen versetzungsarme Zellen entstehen. Selbstverständlich bewirken auch die Zellwände, wie vorher die Versetzungswälder, weitreichende innere Rückspannungen, gegen die die weitere Versetzungsbewegung erfolgt und die die Verfestigung bewirken. Mit wachsender Erholung, d.h. bevorzugt bei höheren Temperaturen, können die-



Bild 4. Voll ausgebildete Zellen in Al nach einachsiger Verformung nach McQueen und Hockett (1970)

se Zellwände bis auf die aus Kompatibilitätsgründen erforderlichen, aus gleichgerichteten Versetzungen gebildeten Kleinwinkelkorngrenzen zusammengedrängt werden. Erholungsbedingt nimmt im Bereich III die Verfestigung mit der Spannung wieder linear ab. Aufgrund der Erklärung der Strukturänderung durch Erholungsvorgänge folgt, daß die abnehmende Verformungsgeschwindigkeit und die zunehmende Temperatur die Zellbildung begünstigen, was auch gemessen wird.

Es schließen sich bei sehr hohen Verformungen noch die Bereiche IV und V an, die wie der Bereich II dadurch gekennzeichnet sind, daß sich die Zellen unter Beibehaltung der geometrischen Ähnlichkeit der Substruktur verkleinern. Diese generelle Abfolge von Vorgängen scheint unabhängig von der speziellen Versuchsart und Temperatur stattzufinden. Sie erfolgt jedoch bis zu unterschiedlichen Ausprägungen der Struktur.

Wegen der mit zunehmender Zyklenzahl oder akkumulierter Dehnung eintretenden Sättigung sowie we-

gen des Bauschinger-Effektes sind zyklische Versuche für die Strukturbildung von besonderem Interesse. Demnach muß man aus der Struktur Informationen sowohl zur Sättigung als auch zur momentanen Lage des Dehnungspunktes auf der Hystereseschleife finden. Es zeigt sich, daß die auf der Neukurve erreichte Zell- oder Subkornstruktur bei Lastumkehr mit Ausnahme weniger Reste wieder zerfällt. Diese Überbleibsel eines Zyklus treten mit wachsender Zyklenzahl zunehmend in Erscheinung, so daß sich mit hoher Zyklenzahl eine Struktur einstellt, die bei Erreichung der Sättigung nicht mehr verändert wird. Durch das Zyklieren wird also eine stabile oder metastabile Struktur erzeugt, die unabhängig von der anfänglichen Struktur ist und ausschließlich von der Dehnamplitude und der Temperatur abhängt. Nun ist aber die



Bild 5. Versetzungsstruktur im Cu Einkristall

a.) nach 15 Zyklen, d.h. im ungesättigten Zustand

b.) nach 300 Zyklen, d.h. im gesättigten Zustand nach Mughrabi (in Kröner und Teodosiu, 1974)

Zellstruktur bei zyklischen Versuchen mit der Zellstruktur bei einachsiger Verformung nicht vergleichbar. Bei den Stellen hoher Versetzungsdichte handelt es sich bei kleinen Verformungsamplituden um zumeist senkrecht zur Gleitrichtung orientierte Versetzungsbündel. Diese haben eine aus primären Stufenversetzungen bestehende Aderstruktur, deren Schnitte parallel zu den Gleitebenen als zweidimensionale Zellen interpretiert werden. Bei etwas größeren Amplituden bildet sich nach Bild 6 eine Aderstruktur aus, die mit Leiterstrukturen durchsetzt ist. Diese werden durch persistente Gleitbänder hervorgerufen, d.h. Gleitbänder, die über mehrere Zyklen bestehen bleiben. Die Verformung spielt sich überwiegend in den Gleitbändern ab, ist also stark inhomogen. In den Gleitbändern bilden sich echte dreidimensionale Zellen aus, die in Gleitrichtung durch Wände, die überwiegend aus Stufenversetzungsdipolen bestehen, begrenzt werden. Mit zunehmender Dehnungsamplitude wächst der Volumenanteil des in Gleitbändern verformten Materials, bis z.B. für Kupfereinkristalle nach Grosskreutz und Mughrabi (1975) bei $\gamma_p = 0,002$ bis $\gamma_p = 0,0085$ eine fast reine 2-dimensionale Zellstruktur infolge persistenter Gleitbänder vorliegt. Bei polykristallinem Kupfer wird ab einer Amplitude von $\gamma_p = 0,006$ bis $\gamma_p = 0,06$ eine dreidimensionale Zellstruktur beobachtet. Die stark inhomogene Verformung bei kleinen Amplituden wird mit dem Ende des Dauerfestigkeitsbereiches in Zusammenhang gebracht.

Die plastische Deformation wird dadurch verursacht, daß gleichgerichtete Versetzungsstücke, die bei der Vorwärtsbewegung in die Versetzungsbündel gedrückt werden, mit zunehmender Dehnungsamplitude innere Spannungen auf nachfolgende Versetzungen ausüben, die deren Beweglichkeit in die Vorwärtsrichtung einschränken und zur Verfestigung führen. Bei Lastwechsel wirken diese inneren Spannungen als Erleichterung für entgegengesetzt laufende Versetzungen. Die Versetzungsbündel selbst enthalten Ankerpunkte für Frank-Read-Quellen, so daß sich Versetzungsstücke aus diesen lösen und den versetzungsarmen Bereich durchqueren. Man beobachtet gemäß Bild 5 überwiegend Schraubenversetzungen, die sich bevorzugt an den parallel zur Gleitrichtung liegenden Schmalseiten der länglichen versetzungsarmen Bereiche lösen



Bild 6. Dreidimensionales Bild der bei zyklischer Beanspruchung entstehenden Aderstruktur nach Basinski et al. (1969) sowie Aderstruktur mit eingesprengtem Gleitband nach Lukas et al. (in GrossKreutz und Mughrabi, 1975) an Cu Einkristallen

und sich als Versetzungslinien parallel zur Gleitrichtung zwischen den Versetzungsbündeln erstrecken und je nach Vorzeichen infolge der mikroskopischen Spannungsfelder in unterschiedliche Richtungen gebogen sind. Nach Duchwandern des versetzungsarmen Bereiches lagert sich wiederum eine Stufenversetzung an das Versetzungsbündel an, nun aber mit anderem Vorzeichen, und wird durch die immobilisierten Versetzungen festgesetzt (vgl. Bild 5).

4 Modell für die Strukturbildung

Die Beobachtungen auf der Ebene der Gleitsysteme weisen eine komplizierte Abfolge von noch komplizierteren Wechselwirkungsmechanismen einer gigantischen Zahl von Versetzungen auf. Die Wechselwirkung zwischen zwei Versetzungen ist zwar im ebenen Fall einigermaßen verstanden, die Wechselwirkungen in einem dreidimensionalen Netzwerk von Versetzungsstücken ist aber praktisch aus dem Verhalten einzelner Verstzungen nicht mehr ableitbar. Es zeigt sich in Simulationen der Wechselwirkungen bei ebenen Modellen, daß sich tatsächlich Strukturen bilden und die homogene Verteilung energetisch ungünstig ist. Trotz der Kompliziertheit der Vorgänge zeichnet sich folgendes vereinfachende Bild ab. Im Inneren der versetzungsarmen Bereiche, ob Zellen oder zwischen den Adern oder Wänden, bewegen sich Versetzungen entsprechend der oben angegebenen Gleichung, wobei die Hindernisse durch Waldversetzungen gebildet werden, d.h. einer Strukturkomponente, für die wir somit ein Entwicklungsgesetz anzugeben haben. Die Zellwände sind gerichtet, da in sie Versetzungen gleicher Richtung gedrückt werden. Sie verursachen weitreichende interne Spannungsfelder, die mit den äußeren Spannungen überlagert in die Bewegungsgleichung der Versetzungen eingehen. Die Existenz der inneren Spannungszustände zeigt sich experimentell dadurch, daß nach Verformungen eines Einkristalls und Entlastung auf verschwindende äußere Spannung die Versetzungen im Zellinneren immer noch gebogen sind, so daß sich aus deren Krümmungsradius die inneren Spannungen abschätzen lassen. Die Zunahme der Waldversetzungsstücke mit der Dichte \boldsymbol{D}_f bewirkt eine ungerichtete Verfestigung durch Vergrößerung der Aktivierungsfläche zur Versetzungsbewegung (Bild 1)

$$A = ds = d\frac{1}{\sqrt{D_f}} = M_f d \frac{1}{\sqrt{D_g}}$$
(8)

Die verfestigende Erhöhung der Gesamtversetzungsdichte D_g erfolgt durch Gleiten im Kristall, so daß für den Einfluß von der Gesamtscherrate die Scherrate durch Korngrenzengleiten abgezogen werden muß. Die erholungsbedingte Verringerung der Versetzungsdichte erfolgt durch drei Mechanismen, Klettern, k_3 , Annihilation von Subkorngrenzen, k_4 und Gleiten, k_5 , d.h. Annäherung entgegengerichteter Versetzungen auf Abstände unterhalb des Annihilationsabstandes. Die Entwicklung der Aktivierungsfläche in Abhängigkeit von der plastischen Verformung erhält demnach unter Ausnutzung empirisch gefundener Formeln für die Berechnung der Versetzungsdichte folgende Gestalt:

$$\dot{A} = -k_1 A^2 |\dot{\gamma}_p| + k_2 \frac{1}{A} |\tau| + k_3 D \frac{GV_A}{k \vartheta^*} \frac{1}{A} + k_4 \frac{1}{A} |\tau| + k_5 A \frac{s_R}{b} |\dot{\gamma}_p|$$
(9)

Dabei sind G der Schubmodul, V_A das Atomvolumen und s_R eine charakteristische Auslöschungslänge. Der Großteil der Hindernisse stammt nicht von Gleitungen auf der betrachteten Gleitebene, sondern von Gleitungen auf anderen Ebenen, die die Versetzungslinien zur Bildung der Jogs liefern. Dies ist der Grund, weshalb jede weitere Aussage zur Verfestigung, speziell zur Entwicklung der Versetzungsstruktur, nur durch Betrachtung des gesamten Kristalls und nicht nur der Gleitebene erfolgen kann. Dem Modell entsprechend haben wir es mit 2 strukturbeschreibenden Größen zu tun. Zum einen beschreibt die innere Spannung oder Gegenspannung α die anisotrope Verfestigung und ist Ausdruck der Zellwände und Versetzungshaufwerke. Zum anderen beschreibt die isotrope Verfestigung Gleithindernisse wie Waldversetzungen, aber auch den isotropen Anteil der Zellwände. Die Zellwände sind nämlich unabhängig von ihrer Gitterverspannung ein Hindernis für die Versetzungsbewegung. Diese isotrope Größe hatten wir mit dem Aktivierungsvolumen gleichgesetzt. Eine völlig äquivalente Beschreibungsweise geht statt dessen von einer Größe k mit der Dimension einer Spannung aus. Die auf einem Gleitsystem anliegende Spannung τ wird zur Beschreibung der Gleitgeschwindigkeit auf diesem Gleitsystem mit den Festigkeitswerten verglichen, nämlich

$$\left\{ \begin{array}{ccc} \text{Vorwärtsgleiten} & \tau - \alpha & \sim k \\ \text{Rückwärtsgleiten} & -\tau + \alpha & \sim k \end{array} \right\} \longleftrightarrow \left\{ \begin{array}{ccc} \text{Vorwärtsgleiten} & A(\tau - \alpha) & \sim k_0 \\ \text{Rückwärtsgleiten} & A(-\tau + \alpha) & \sim k_0 \end{array} \right\}$$
(10)

wobe
i k_0 eine Materialkonstante und kein Festigkeitswert mehr ist. Nun können diese Gleichungen als Fließbedingungen interpretiert werden, sofern man eine solche voraussetzt

$$\gamma_{r} = 0 \quad \text{für} \quad |\tau - \alpha| < k \quad \text{oder für} \quad A(\tau - \alpha) < k_{0} \tag{11}$$

Für die Entwicklung der beiden strukturabhängigen Größen gibt es verschiedene Ansätze. Diese berücksichtigen, daß eine latente Verfestigung, d.h. eine Verfestigung auf einem Gleitsystem μ infolge plastischer Verformung auf einem anderen System ν , auftritt. Eine Erweiterung des Gesetzes von Peirce, Asaro und Needleman (1982) liefert

$$\dot{\alpha}_{\mu} = \sum_{\nu=1}^{N} H_{\mu\nu} \dot{\gamma}_{p \nu} \quad \text{und} \quad \dot{k}_{\mu} = \sum_{\nu=1}^{N} M_{\mu\nu} \dot{\gamma}_{p \nu}$$
(12)

$$H_{\mu\nu} = \left\{ \begin{array}{cc} h(\Gamma) & \mu, \ \nu \text{ koplanar} \\ qh(\Gamma) & \text{ sonst} \end{array} \right\} \qquad M_{\mu\nu} = \left\{ \begin{array}{cc} m(\Gamma) & \mu, \ \nu \text{ koplanar} \\ qm(\Gamma) & \text{ sonst} \end{array} \right\} \qquad \Gamma = \sum_{\nu=1}^{N} \int \ | \ \dot{\gamma}_{\nu} \ | \mathrm{d}t$$
(13)

Dabei laufen die Summationen über alle möglichen N Gleitsysteme des Kristalls. Die Verfestigung bezeichnet man als Selbstverfestigung, wenn $\mu = \nu$ ist, und ansonsten als latente Verfestigung. Letztere ist in der Regel um den Faktor $q \approx 1,4$ größer als die Selbstverfestigung. Eine makroskopisch isotrope Verfestigung wird durch k nur beschrieben, wenn $K_{\mu\nu}$ für alle μ und ν den gleichen Wert annimmt. Das Modell von Peirce, Asaro und Needleman berücksichtigt weder Erholung noch Verfestigungsanteile aus der Deformation benachbarter Körner. Beide Effekte werden in einem Modell von Besdo (1991) beschrieben.

5 Der Polykristall

Zur Synthetisierung der Verformungen eines Polykristalls werden Gleittheorien verwendet. Diese beantworten die Fragen, wie die Spannungen τ_{μ} auf den Gleitebenen mit den makroskopischen Cauchy-Spannungen zusammenhängen, und wie eine makroskopische Deformationsgeschwindigkeit aus den Scherungen der einzelnen Gleitebenen in den einzelnen Kristalliten zusammenzusetzen ist. Physikalisch müssen die Spannungen an der Grenze zwischen den einzelnen Körnern das Gleichgewicht erfüllen. Die Verformungen in den einzelnen Körnern müssen kompatibel sein. Über dem einzelnen Korn werden die Spannungen und auch die Deformationen als homogen angenommen. Physikalisch trifft dies aber nicht zu und es folgt, daß entweder die Kompatibilität oder das Gleichgewicht verletzt wird. Man darf also die Gleittheorie nicht als den Versuch werten, eine geometrische Anordnung von zusammenhängenden Kristalliten zu beschreiben. Dieses würde nur durch die Lösung eines Randwertproblems, z.B. mittels finiter Elemente gelingen. Vielmehr handelt es sich um eine Mittelung der Eigenschaften unterschiedlich orientierter Körner an ein und demselben geometrischen Ort. Um zu einem Stoffgesetz zu kommen, muß man daher eine Orientierungsverteilung der Kristallite festlegen und gemäß dieser das Verhalten der einzeln orientierten Körner mitteln.

1.) Sachs-Theorie:

Die Spannungen werden für alle Körner gleich angesetzt. Damit ist a priori die Gleichgewichtsbedingung erfüllt. Zur Verformungsgeschwindigkeit steuert jeder Kristallit nun den Anteil bei, der vom Gleiten auf dem System herrührt, für das die Fließgrenze erreicht ist (Einfachgleiten). Bei Stoffgesetzen auf Kristallebene, die keine Fließbedingung haben (sog. unified models), ist die Summe der Gleitungen auf allen Gleitsystemen der Beitrag des Kristallits zur Verformung. Da in jedem Korn demnach die plastische Deformation unterschiedlich ist, wird die Kompatibilitätsbedingung verletzt. Das makroskopische Stoffgesetz entsteht durch Mittelung der Deformationen entsprechend dem Volumenanteil der Orientierungen. Obwohl jedes Gleitsystem ν eigene innere Variablen $\alpha_{\nu}und A_{\nu}$ hat, die für die Berechnung der Verformung herangezogen werden, können makroskopische Variablen durch Mittelung der Gleitsysteme gebildet werden.

2.) Taylor-Theorie:

Die Deformationen werden für alle Körner gleich angesetzt. Damit sind die Kompatibilitätsbedingungen a priori erfüllt. Es wird nun aus allen möglichen Gleitsystemen des Kristallits die Kombination von 5 Gleitsystemen herausgesucht, die diese makroskopische Verformung mit der geringsten plastischen Dissipation liefert. Die 5 Gleitsysteme konstituieren gerade eindeutig die fünf unterschiedlichen Komponenten des deviatorischen symmetrischen plastischen Geschwindigkeitsgradienten. Die Fließregeln bzw. Fließgrenzen der ausgewählten Gleitsysteme liefern den erforderlichen Spannungszustand, der auf allen aktivierten Gleitsystemen die Fließgrenze ergibt. Es folgt, daß abhängig von dessen Orientierung jedes der Körner andere Spannungen liefert. Die Gleichgewichtsbedingungen sind nicht erfüllt. Die makroskopische Spannung folgt dann durch Mittelung gemäß dem Volumenanteil der Körner unterschiedlicher Orientierung.

In beiden Theorien lassen sich die Gitterdrehungen der einzelnen Kristallite $\underline{\Omega}_{\nu}$ so berechnen, daß der antimetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradienten $\underline{L}_{p} = \underline{L}_{p\nu} + \underline{\Omega}_{\nu}$ zu der Kristallitdrehung und dem antimetrischen Anteil des Geschwindigkeitsgradienten $\underline{L}_{p\nu}$ auf dem Kristalliten kompatibel ist. $\underline{\Omega}_{\nu}$ in Abhängigkeit von der Anfangsorientierung liefert die Texturentwicklung. Der Vergleich der Theorien zeigt nach Müller (1993), daß das Taylorsche Modell mit experimentell ermittelten Texturen besser übereinstimmt als das Sachs-Modell. Das Taylor-Modell ergibt zu scharfe Texturen, da im Vergleich zum Experiment zu viele Gleitsysteme aktiviert werden. Während das Taylorsche Modell eine obere Schranke der Fließspannung liefert, ergibt sich beim Sachs-Modell wegen der Einfachgleitung eine untere Schranke. Neben diesen beiden in der Literatur am häufigsten auftauchenden Modellen existiert eine Reihe weiterer Modelle, mit denen versucht wird die Defekte der beiden Gleitmodelle zu minimieren. Von Lin (1957) stammt eines, das mit der Taylor-Theorie verwandt ist, allerdings elastisch-plastische Deformationen zuläßt. Jedes Korn erfährt die gleiche elastisch-plastische Deformation. Der erste Lastschritt wird elastisch aufgebracht, so daß mittels Hookeschem Gesetz erkennbar ist, in welchem Gleitsystem die Fließbedingung als erstes erfüllt ist. In nachfolgenden Schritten wird die elastisch aufgebaute Spannung relaxiert, wodurch nacheinander die aktiven Gleitsysteme gefunden werden. Folgende Schritte sind für das Vorgehen im Rahmen der Gleittheorien typisch: Betrachtung der Bewegung einzelner Gleitsysteme, Betrachtung einzelner Körner, Mittelung der Körner zum makroskopischen Stoffgesetz, Berechnung der Gitterdrehung in Abhängigkeit von der Anfangsorientierung der Kristallite.

6 Phänomenologische Stofftheorie

Die generelle Frage, wie mikroskopische Erkenntnisse Eingang in die Formulierung makroskopischer Stoffgleichungen finden, kann neben der Synthese der Stoffgleichungen aus Informationen auf dem Gleitsystem auch durch eine analoge oder eine gemittelte Formulierung des Verhaltens direkt in den makroskopischen Stoffgleichungen erfolgen. Ziel ist dabei, die mühevolle Aufbereitung der mikroskopischen Erkenntnisse über die auch nicht ganz zweifelsfreien Gleittheorien zu umgehen. Ungebrochen ist dabei nach wie vor das Interesse an den mikroskopischen Vorgängen. Makroskopische Stoffgleichungen werden durch Mittelung gewonnen oder in direkter Analogie zum mikromechanischen Verhalten konstruiert. Die Analogie läßt sich dadurch rechtfertigen, daß ja auch die mikromechanischen Vorgänge den gleichen physikalischen Prinzipen zu gehorchen haben. Z.B. erfolgt eine Erholung immer so, daß die das Verfestigungsverhalten beschreibende Größe selbst den dafür erforderlichen Antrieb liefert. Jede makroskopische Kontinuumstheorie besteht aus Bilanzgleichungen und Stoffgleichungen, die zusammen den Prinzipen der Thermodynamik zu gehorchen haben. Der Zugang zur Thermodynamik ist die Leistungsbilanz als Bilanzgleichung der inneren Energie

$$\rho \,\dot{u} = -\mathrm{div}\underline{h} + \rho \,r + \underline{T} \cdot \underline{D} \tag{14}$$

Hierbei sind <u>h</u> der Wärmestromdichtevektor, r die Wärmeeinstrahlung, <u>T</u> der gesamte Cauchysche Spannungstensor und <u>D</u> der symmetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradienten. Eine der entscheidenden Grundannahmen der Thermodynamik irreversibler Prozesse ist, daß die Größe u, die die Bilanzierbarkeit der Leistung sicherstellt, eine Zustandsvariable ist, für die eine Fundamentalgleichung gilt

$$u = u(s, \underline{C}_{ed}, q_k, k = 1, ..., \infty)$$

$$(15)$$

s ist die spezifische Entropie, $\underline{C}_{e\vartheta}$ der thermoelastische Cauchysche Streckungstensor und q_k sind die inneren Variablen. Durch Einsetzen ergibt sich die Bilanzgleichung der Entropie, in der Terme für den Entropieaustausch über die Oberflächen und über die Massenelemente sowie ein Produktionsanteil, im wesentlichen die Dissipationsfunktion δ , auftreten

$$\rho \,\dot{s} = -\operatorname{div} \frac{h}{\vartheta^{\star}} + \frac{1}{\vartheta^{\star}} \rho r + \frac{1}{\vartheta^{\star}} \delta \quad \operatorname{mit} \quad \delta = \underline{h} \cdot \vartheta^{\star} \operatorname{grad} \frac{1}{\vartheta^{\star}} + \underline{\underline{T}} \cdot \underline{\underline{D}} - \rho \frac{\partial u}{\partial \underline{\underline{C}}} \cdot \underline{\dot{\underline{C}}} \cdot \vartheta - \rho \sum_{k} \frac{\partial u}{\partial q_{k}} \,\dot{q}_{k} \tag{16}$$

Hier sind ϑ^* die absolute thermodynamische Temperatur und $\underline{\sigma} = \underline{T} - \underline{\zeta}$ der Gleichgewichtsanteil der Cauchyschen Spannungen, für den $\rho \frac{\partial u}{\partial \underline{C}_{e\vartheta}} \cdots \underline{\underline{C}}_{e\vartheta} = \underline{\sigma} \cdots \underline{D}_{e\vartheta}$ gilt. Die unspezifizierte Gesamtheit der inneren Variablen dient zur Beschreibung der inneren Struktur. Sie können Veränderungen von Korngrenzen, Versetzungswäldern und Versetzungsdichten beschreiben. Sie können aber auch Beschreibungsgrößen für einzelne Versetzungen, ja sogar für einzelne Atome sein. Fundamentalannahme unserer Theorie ist, daß sich diese Variablen alle nach dem gleichen Stoffgesetz entwickeln. In Analogie zur chemischen Thermodynamik setzen wir ein lineares Gesetz mit Erholung an

$$\dot{q}_{k} = \underbrace{\nu}_{k} \cdot \underbrace{L}_{p} - \underbrace{\nu}_{k} \cdot \underbrace{\Psi}_{g} \tag{17}$$

Der plastische Geschwindigkeitsgradient \underline{L}_p dient als Reaktionslaufzahl, wobei die Umsetzung der einzelnen Variablen durch die stöchiometrischen Tensoren $\underline{\nu}_k$ gesteuert wird. Für die Erholung (die Umkehrreaktion) wird eine neue Reaktionslaufzahl $\underline{\Psi}_g$ definiert, die auf den negativen stöchiometrischen Tensor wirkt. Der Übergang zur makroskopischen Ebene, d.h. von den inneren Grundvariablen q_k zu makroskopischen Variablen, erfolgt durch eine isodissipative Mittelung. Hinter dieser Mittelung steht die Vorstellung, daß nur die in der Dissipationsfunktion stehenden Terme makroskopische Relevanz haben. Einsetzen der Entwicklungsgleichungen für die q_k in die Dissipationsfunktion liefert einen zweistufigen Zustandstensor $\underline{\alpha}_g$ als makroskopische Variable, die sich in einen symmetrisch deviatorischen Anteil $\underline{\alpha}$, einen antimetrischen Teil $\underline{\chi}$ und einen Kugeltensor aufspalten läßt

$$\underline{\underline{\alpha}}_{g} = \rho \sum_{k} \frac{\partial u}{\partial q_{k}} \underline{\underline{\nu}}_{k} \qquad \underline{\underline{\alpha}}_{g} = \underline{\underline{\alpha}} + \underline{\underline{\chi}} - \alpha_{p} \underline{\underline{1}}$$
(18)

Die Dissipationsfunktion erhält damit folgende Gestalt

$$\delta = \underline{h} \cdot \vartheta^{\star} \operatorname{grad} \frac{1}{\vartheta^{\star}} + \underline{\zeta} \cdot \underline{D} + \underline{\Phi} \cdot (\underline{\tau} - \underline{\alpha}) - \underline{W}_{p} \cdot \underline{\chi} - \dot{G}_{p} (p - \alpha_{p}) \quad \text{Verfestigung} + \underline{\Psi} \cdot \underline{\alpha} + \underline{\Upsilon} \cdot \underline{\chi} - \Psi_{p} \alpha_{p} \quad \text{Erholung}$$

$$\left. \right\}$$

$$(19)$$

aus der erkennbar ist, daß
 $\underline{\alpha}$ eine Gegenspannung ist, da sie die Wirkung der Spannung
en auf die effektive Spannung

$$\bar{\underline{\tau}} = {}^{d}\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\alpha}} \tag{20}$$

reduziert. Sie beschreibt die von den Versetzungswäldern auf die weitere Bewegung von Versetzungen ausgeübte weitreichende innere Spannung. Die Dissipationsfunktion setzt sich als Bilinearform aus Flüssen und Affinitäten zusammen, wobei die Flüsse Funktionen der Affinitäten sind, im mindesten der in der Dissipationsfunktion mit ihnen multiplizierten Affinität. So folgt aus den Onsagerschen Reziprozitätsbedingungen die Fließregel als Potentialgesetz, und in der Verfestigungsregel zur Beschreibung der Strukturentwicklung ergeben sich Einschränkungen durch die Forderung des 2. Hauptsatzes (vgl. Wegener (1991)). Dabei bietet es sich an, ein Prinzip der optimalen Verfestigung zu formulieren, bei dem die Richtung der Gegenspannungsentwicklung in Richtung des steilsten Anstiegs an der Potentialfunktion f erfolgt

$$\begin{split} \stackrel{\nabla}{\underline{\alpha}}_{\underline{\alpha}} &= \kappa \cdot \cdot \underline{\Phi}_{\underline{\alpha}} & \kappa = -\kappa \left(\frac{\partial f}{\partial \underline{\alpha}} \otimes \frac{\partial f}{\partial \underline{\bar{\tau}}} \right) \left[\left\| \frac{\partial f}{\partial \underline{\alpha}} \right\| \left\| \frac{\partial f}{\partial \underline{\bar{\tau}}} \right\| \right]^{-1} \Longrightarrow \quad \stackrel{\nabla}{\underline{\alpha}}_{\underline{\alpha}} \left\| \frac{\partial f}{\partial \underline{\alpha}} \right] \end{split}$$
(21)

sowie eine Erinnerungsfläche einzuführen, die statt der Erinnerungsfläche nach Mroz (1969) im Gegenspannungsraum formuliert ist, d.h. keiner Anlagebedingung mehr bedarf, so daß

$$\kappa = \kappa(x) \quad \text{mit} \quad x = \frac{1}{2} \left[k_{\alpha} + \underline{\alpha} \cdot \cdot \underline{\alpha} \left[2\sqrt{J_2(\underline{\alpha})} \right]^{-1} \right] \quad \text{mit} \quad f_{\alpha} = \frac{1}{2} \underline{\alpha} \cdot \cdot \underline{\alpha} - k_{\alpha}^2 = 0$$
(22)

gilt. Dabei ist $\stackrel{\nabla}{\underline{\alpha}}$ eine mitrotierende Zeitableitung der Gegenspannungen. Zur Wahrung des 2. Hauptsatzes beim Erholungsanteil, ist die Reaktionslaufzahl der Erholung als der Gegenspannung parallel anzusetzen. Je nach Vorfaktor kann dann ein dynamischer und ein thermischer Anteil unterschieden werden, die nach den vorstehenden Betrachtungen zur Mikromechanik beide benötigt werden

$$\begin{cases} \underline{\Psi}_{\vartheta} = a_{\vartheta} \exp(-\frac{Q}{R\vartheta^{\star}}) \underline{\alpha} & \text{thermische Erholung} \\ \underline{\Psi}_{\Phi} = a_{\Phi} \sqrt{\underline{\Phi} \cdot \underline{\Phi}} \underline{\alpha} & \text{dynamische Erholung} \end{cases}$$
(23)

Das so konstruierte Stoffgesetz ist grundsätzlich zeitabhängig, denn die Verformungen lassen sich nicht durch die Spannungen parametrisieren. Für zeitunabhängige Stoffgesetze muß

$$\underline{\underline{D}} = \underbrace{G}_{4}(\underline{\underline{\sigma}} \ , \ \underline{\underline{\alpha}} \ , \ \vartheta) \cdots \ \underline{\underline{\sigma}}$$
(24)

gelten. Zeitunabhängige plastische Stoffgesetze mit Hookeschem Teilstoffgesetz für das elastische Verhalten verlangen die Existenz einer Fließgrenze f = 0 sowie die Erfüllung der Konsistenzbedingung f = 0. Wegen des Hookeschen Teilstoffgesetzes

$$\underline{\dot{\sigma}} = \underset{4}{\underline{C}} \cdots (\underline{\underline{D}} - \underline{\underline{\Phi}}) \tag{25}$$

folgt aus (24), daß auch der plastische Anteil $\underline{\Phi}$ der Verformungsgeschwindigkeit linear und homogen in den Spannungsgeschwindigkeiten $\underline{\sigma}$ ist. Hätte man nun nach reichlich plastischer Verformung f > 0erreicht und würde nun die Belastungsrichtung, d.h. das Vorzeichen von $\underline{\sigma}$, umkehren, so würde sich das Vorzeichen der plastischen Deformationsgeschwindigkeit ebenfalls ändern. Die Folge wäre eine negative plastische Dissipation δ_p , bis der Spannungspunkt wieder den elastischen Bereich erreicht. Dies ist nach dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik nicht zulässig. Im zeitunabhängigen Fall muß also der Spannungspunkt bei Richtungsumkehr der Belastung sofort in den elastischen Bereich eintauchen. Man muß deshalb die Konsistenzbedingung $\dot{f} = 0$ für alle Zustände mit plastischem Verhalten fordern. Ein Stoffgesetz, bei dem die Änderungen $\dot{\underline{\alpha}}$ aller inneren Zustandsgrößen rein zustandsabhängig sind, erfüllt die Konsistenzbedingung

$$\frac{\partial f}{\partial \underline{\sigma}} \cdot \cdot \underline{\dot{\sigma}} + \frac{\partial f}{\partial \underline{\alpha}} \cdot \cdot \underline{\dot{\alpha}} + \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \dot{\vartheta} = 0$$
(26)

nicht für alle Zustände und Prozesse, da die Änderung der Spannungen und der Temperatur nicht zustands-, sondern prozeßbedingt ist. Es kann thermodynamisch konsistent nur zeitabhängiges Verhalten

Status		Bedingung	Wirkung
1.)	elastisch	f < 0 oder	P = 0
		$f = 0$ und $\frac{\partial f}{\underline{\sigma}} \cdots \underline{\dot{\sigma}} + \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \dot{\vartheta} \le 0$	$\varphi \neq 0$
2.)	zeitunabh.	$f = 0$ und $\dot{f} = 0$	$0 < P \le 1$ (Konsistenz)
	plastisch	$\operatorname{mit} \frac{\partial f}{\underline{\sigma}} \cdots \underline{\dot{\sigma}} + \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \dot{\vartheta} > 0$	$\varphi \neq 0$
3.)	zeitabh.	f > 0	P = 1 (keine Konsistenz)
	plastisch		$\varphi \neq 0$

Tabelle 1. Bereiche unterschiedlichen Materialverhaltens

modellieren.

Ein Stoffgesetz, bei dem die plastische Verformungsgeschwindigkeit rein zustandsabhängig ist, kann wegen des Hookeschen Teilstoffgesetzes (25) die Bedingung (24) nicht erfüllen. Sind die Änderungen der inneren Zustandsgrößen lineare und homogene Funktionen der plastischen Verformungsgeschwindigkeit sowie von Anteilen des Geschwindigkeitsgradienten, ist die Konsistenzbedingung auch eine hinreichende Bedingung für spontan-plastisches Verhalten.

Die Erfüllung der Konsistenzbedingung erfordert die Einführung mindestens eines skalaren Freiheitsgrades der plastischen Verformungsgeschwindigkeit, des Reduktionsfaktors P mit

$$\underline{\Phi} = \underline{\tilde{\Phi}}P \tag{27}$$

der aus der Konsistenzbedingung (26) bestimmt wird. Der zustandsabhängige Teil Φ berechnet sich aus dem Potentialgesetz. Mit Hilfe des elastischen Teilstoffgesetzes (25) ergibt sich P aus der Konsistenzbedingung als lineare und homogene Funktion der Spannungszeitableitung und des Wirbeltensors. Setzt man dies in (25) ein, folgt:

$$\underline{\dot{\sigma}} = \underbrace{C}_{A} \cdots \left[\underline{\underline{D}} - \underline{\underline{\Phi}} P(\underline{\dot{\sigma}}, \underline{\underline{W}}) \right]$$
(28)

Das angegebene Stoffgesetz beinhaltet demnach drei Bereiche unterschiedlichen Verhaltens, die in Tabelle 1 zusammengestellt sind. Die Einführung eines Reduktionsfaktors für die plastische Verformungsgeschwindigkeit entspricht dem oben skizzierten Mechanismus, nach dem bei einer Verlangsamung der Deformationsgeschwindigkeit die Wartezeiten t_w der Versetzungen vor Hindernissen verlängert werden, während bei zeitabhängigem Verhalten der Drag-Anteil überwiegt und die Wanderungsgeschwindigkeit der Versetzungen rein zustandsabhängig ist. Bild 7 zeigt zeitabhängige Spannungs-Dehnungslinien bei



Bild 7. Spannungs-Dehnungs-Kurven bei schneller Belastung in den Uberspannungsbereich und anschließender Entlastung. Die unterste Kurve stellt die Spannungs-Dehnungs-Kurve bei zeitunabhängiger Belastung dar.

schneller Zugbelastung und langsamer Entlastung. Erreicht man den Überspannungsbereich, so verformt sich der Zugstab nach Lastumkehr zunächst noch weiter in der bisherigen Belastungsrichtung, bis die Zugspannung durch Verfestigung einerseits und Entlastung andererseits den Fließkörper wieder erreicht.

7 Diskontinuierliches Fließen

Nun beschränkt sich zeitabhängiges Materialverhalten nicht nur auf eine Steigerung der Spannungen mit wachsender Deformationsgeschwindigkeit, sondern umfaßt auch ausgeprägte Streckgrenzen sowie den Portevin-le-Chatelier-Effekt (PLC-Effekt), die sich mit Hilfe des Stoffgesetzes über das Wechselspiel zwischen zeitabhängigem und zeitunabhängigem plastischen sowie elastischem Verhalten modellieren lassen. Beide Effekte beruhen mikroskopisch darauf, daß Versetzungen durch Fremdatome blockiert und nach Überschreiten der Fließgrenze losgerissen werden, worauf sie sich mit zustandsabhängiger, d.h. mittlerer Maximalgeschwindigkeit bewegen, bis die durch sie hervorgerufenen plastischen Deformationen mit der äußeren Deformationsgeschwindigkeit wieder synchronisiert werden. In diesem Bereich liegt zeitabhängiges Verhalten vor. Bei der Synchronisation verlängern sich gemäß einem mikromechanischen Modell von McCormick (1972) die Wartezeiten t_w vor Hindernissen, und es liegt zeitunabhängiges Verhalten vor. Im Falle des PLC-Effektes reichen die Wartezeiten aus, so daß Fremdatome wieder in die energetisch günstige Umgebung der Versetzungen diffundieren können und diese wiederum blockieren, worauf der Prozeß erneut beginnt. Beim Streckgrenzeneffekt findet das Losreißen der Versetzungen nur ein einziges Mal statt. Erst nach längerer Auslagerung zeigt sich erneut eine Streckgrenze. Bild 8 zeigt eine gemessene Fließ-kurve mit PLC-Effekt. Zur Modellierung wird angenommen, daß die Alterung durch Fremdatomdiffusion



Bild 8. PLC-Effekt an AlMg5 nach Heiser (1990)

näherungsweise ein isotroper Effekt ist. Mit einer Fließfunktion der Gestalt

$$f(\underline{\tau}, \ \underline{\alpha}, \ \vartheta, \ k) = \tilde{f}(\underline{\tau}, \ \underline{\alpha}, \ \vartheta) - k^2$$
⁽²⁹⁾

beträgt die maximale Alterung

$$\Delta k_0 = k_o - k_u \tag{30}$$

Dabei korrespondiert k_o mit der oberen Streckgrenze, k_u mit der unteren. Δk_0 wird im Gleichgewichtsfall erreicht, während die momentan erreichte Alterung Δk beträgt. Somit kann $\Delta k_0 - \Delta k$ als treibende Kraft für die Fremdatomdiffusion zur Versetzungslinie aufgefaßt werden. Die Fremdatomdiffusion wird als Diffusionsfluß $\dot{\xi}_{\Delta k}$ beschrieben, so daß die Dissipationsfunktion um den Anteil

$$\delta_{\Delta k} = \dot{\xi}_{\Delta k} \left(\Delta k_0 - \Delta k \right) \tag{31}$$

erweitert werden muß, d.h., einige der inneren Variablen q_j hängen über $\dot{q}_j = \nu_{\Delta k \ j} \dot{\xi}_{\Delta k}$ von dem neu eingeführten Fluß als Reaktionslaufzahl ab. Da nun der Diffusionsfluß wiederum die Affinität reduzieren muß, ergibt sich als Evolutionsgleichung für Δk :

$$(\Delta k)^{\bullet} = A_k + b(\Delta k_0 - \Delta k) \exp(-\frac{Q_k}{R\vartheta^{\star}}) \quad \text{und} \quad A_k = -a_k \Delta k \sqrt{\underline{\Phi} \cdot \underline{\Phi}}$$
(32)

Der Arrhenius-Faktor im Term zur Beschreibung der Alterung rührt daher, daß die Diffusion ein thermisch aktivierter Vorgang ist. Den durch dieses Stoffgesetz modellierten Streckgrenzeneffekt sowie den PLC-Effekt zeigt Bild 9. Mit zunehmender Verformungsgeschwindigkeit wird die Frequenz der Zacken über der Verformung kleiner, bis der PLC-Effekt schließlich wenig oberhalb der Verformungsgeschwindigkeit



Bild 9. Modellierung von Effekten, die auf dem Losreißen von Versetzungen beruhen: a.) Ausgeprägte Streckgrenze

b.) Portevin-le Chatelier-Effekt nach (32)

der unteren Kurve verschwindet, weil dann der Diffusionsfluß zu langsam erfolgt. Der zeitunabhängige Bereich mit seiner langsamen Versetzungsbewegung wird nicht mehr erreicht. Umgekehrt wird mit sinkender Deformationsgeschwindigkeit der verformungsgeschwindigkeitsabhängige Anteil so klein, daß der zeitabhängige Bereich nicht mehr erreicht werden kann. Die Verformung erfolgt so, daß unverändert $f(\underline{\bar{\tau}}, \underline{\alpha}, \vartheta, k_o) = 0$ gilt. Diese Beschränkung des PLC-Effektes auf einen Verformungsgeschwindigkeitsbereich wird experimentell z.B. durch Guillot und Grilhe (1972) und Heiser (1990) beobachtet. Allerdings hat die vorgestellte Beschreibung des PLC-Effektes einen entscheidenden Nachteil. Der PLC-Effekt ist mit einer stark inhomogenen Verformung über der Probe verbunden, während die Kurven nach Bild 9 nur die Vorgänge in einem Materieelement wiedergeben. Eine realistischere Beschreibung muß die Ausbreitung von Lüders-Bändern, d.h. nichtlokale Effekte berücksichtigen. Allerdings wollen wir dabei das kontinuumsmechanische Prinzip der lokalen Wirkung in strenger Form beibehalten. Das bedeutet, daß nichtlokale Effekte ausschließlich durch Bilanzgleichungen hervorgerufen werden dürfen. Sollte die Grenze zwischen einem sich verformenden Bereich und einem unverformten Bereich keine Gleitebene sein, und dies ist bei Polykristallen immer der Fall, so wird durch die Kompatibilität erzwungen, daß Versetzungen in den unverformten Bereich gestreut werden. Die gesuchte Bilanzgleichung beschreibt also den Austausch von mobilen Versetzungen zwischen Volumenelementen. Sie setzt sich wie üblich aus einem Streuterm über die Oberfläche \underline{J}_D , einem Streuterm σ_{Dext} infolge Strahlung und einem Produktionsterm σ_{Dprod} zusammen

$$\rho D = -\operatorname{div} \underline{J}_D + \rho \sigma_{D \, ext} + \rho \sigma_{D \, prod} \tag{33}$$

Dabei ist D die Dichte mobiler Versetzungen. Eine Vereinfachung wurde bereits benutzt, nämlich daß die Versetzungsdichte ein Skalar ist, obwohl sie wie gezeigt gerichtet ist. Als weitere erhebliche Vereinfachung wird angenommen, daß die Übertragung von Versetzungen über die Oberfläche \underline{J}_D verschwindet. Wir gehen also davon aus, daß die gestreuten Versetzungen in praktisch verschwindender Zeit ihre volle Eindringtiefe erreichen und dort stehenbleiben. Damit muß nun auch die Leistungsbilanz sowie die Fundamentalgleichung um die durch die Versetzungen eingetragene Energie r_D bzw. die innere Variable D der mobilen Versetzungen erweitert werden

$$\rho \, \overset{}{u} = -\text{div}\underline{h} + \rho r + \rho \, r_D + \underline{\underline{T}} \cdots \underline{\underline{D}} \quad \text{und} \quad u = u(s, \, \underline{\underline{C}}_{e\vartheta}, \, D, \, q_k, k = 1, ..., \infty) \tag{34}$$

Somit folgt eine modifizierte Bilanzgleichung der Entropie, in der sich die Terme aus Energieaustausch über Versetzungen sowie aus der Änderung der inneren Energie infolge der eingestreuten Versetzungsdichte tilgen

$$\rho \dot{s} = -\operatorname{div} \frac{h}{\vartheta^{\star}} + \frac{1}{\vartheta^{\star}} \rho(r + r_{D}) + \frac{1}{\vartheta^{\star}} \left[\underline{h} \cdot \vartheta^{\star} \operatorname{grad} \frac{1}{\vartheta^{\star}} + \underline{\zeta} \cdots \underline{\underline{D}} \right] \\ + \underline{\Phi} \cdots (\underline{\tau} - \underline{\alpha}) - \underline{W}_{p} \cdots \underline{\chi} - \dot{G}_{p} (p - \alpha_{p}) + \underline{\Psi} \cdots \underline{\alpha} + \underline{\Upsilon} \cdots \underline{\chi} - \Psi_{p} \alpha_{p} \\ + (\Delta k_{0} - \Delta k) \dot{\xi}_{\Delta k} - \rho \frac{\partial u}{\partial D} (\sigma_{D \ ext} + \sigma_{D \ prod}) \right]$$

$$(35)$$

Die plastische Verformung ist nun nicht mehr unabhängig von der Versetzungsproduktion, so daß die Forderung des 2. Hauptsatzes

$$\left\{\delta_{p} = \underline{\Phi} \cdots \underline{\bar{\tau}} - \rho \frac{\partial u}{\partial D} \sigma_{D \ prod} \ge 0 \quad \text{mit} \quad \sigma_{D \ prod} = a_{D} \underline{\Phi} \cdots \underline{\bar{\tau}} \right\} \Longrightarrow \rho \frac{\partial u}{\partial D} a_{D} \ge 1 \tag{36}$$

ergibt. Man findet nun eine modifizierte Entwicklungsgleichung für die isotrope Verfestigung Δk , bei der der Term zur Beschreibung des Losbrechens nicht mehr von der lokalen plastischen Verformungsgeschwindigkeit, sondern von der lokalen Dichte der mobilen Versetzungen abhängt, die auch durch Verformungen in der Nachbarschaft beeinflußt werden kann

$$(\Delta k)^{\bullet} = -b_{\Delta k} \Delta k \, \dot{D} + b(\Delta k_0 - \Delta k) \exp(-\frac{Q_k}{R\vartheta^*}) \tag{37}$$

Zur Beschreibung der Einstrahlung gehört die Festlegung einer Absorptionsregel, für die wir zwei naheliegende Annahmen machen wollen

1.) Für den von Versetzungen zurückgelegten Weg s_i setzen wir eine Gleichung vom Langevin-Typ an, d.h., er besteht aus einem deterministischen Teil s_p infolge der plastischen Verformung sowie einem Streuungsterm $s_{\rm c}$

$$s_i = s_p + s_s \tag{38}$$

2.) Der stochastische Teil s_s soll Gauss-verteilt sein. Damit ergibt sich für eine punktförmige Versetzungsquelle bei $\underline{r} = \underline{0}$ die Entwicklung der Versetzungsdichte in Abhängigkeit vom Ort zu

$$\dot{D}\left(\underline{r}\right) = c_s \exp(-b_s \underline{r}^2) \tag{39}$$

wobei die Versetzungsbilanz eine Abhängigkeit zwischen den Materialparametern a_D und c_s vermittelt

$$c_s = 2a_D \sqrt{\frac{b_s}{\pi}} \bar{\tau} \cdot \underline{\Phi} \tag{40}$$

Als Beispiel für die Auswirkung der nichtlokalen Effekte wollen wir gemäß Bild 10 die Ausbreitungsgeschwindigkeit v_f eines unendlich schmalen Scherbandes in einer zweidimensionalen unendlich breiten Probe untersuchen. An der Stelle $x = x^*$ setzt die plastische Verformung ein, wenn $D(x^*)$ einen kritischen



Bild 10. Geometrie zur Ausbreitung eines unendlich schmalen Scherbandes in einer 2dimensionalen unendlichen Probe.

Wert erreicht, d.h., wenn

$$\Delta k_c = \Delta k_0 \exp(-b_{\Delta k} D_c) \quad \text{mit} \quad f(\underline{\tau}, \ \underline{\underline{\alpha}}, \ k_l + \Delta k_c) = 0 \tag{41}$$

erfüllt sind. Die Integration über die gesamte Länge des Scherbandes sowie über die Zeit ergibt für die Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$v_f = \sqrt{\frac{\pi}{b_s}} \frac{a_D}{D_c} (\underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\alpha}}) \cdots \underline{\underline{\Phi}}$$
(42)

Nach Messungen von Heiser (1990) im Zugversuch zeigt sich tatsächlich, daß die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Lüders-Linie annähernd proportional der plastischen Verformungsgeschwindigkeit ist. Für die Legierung AlMg5 findet man als Zahlenwert

$$\sqrt{\frac{\pi}{b_s}} \frac{a_D}{D_c} \approx 170 \frac{MPa}{m} \tag{43}$$

8 Zusammenfassung

Die Berücksichtigung metallphysikalischer Erkenntnisse in der Formulierung von Stoffgleichungen erfolgt heute im wesentlichen auf zwei verschiedenen Wegen. Zum einen versucht man aus Beobachtungen der Versetzungsbewegung und der Strukturbildung auf der Gleitebene über Gleittheorien makroskopische Stoffgesetze zu synthetisieren, zum anderen werden Verhaltensmuster der Versetzungen direkt in thermodynamisch konsistente Stofftheorien als Ansätze eingebaut. Beide Vorgehensweisen wurden hier skizziert. Als Beispiel für letzteres Vorgehen wurde eine Beschreibung des Portevin-le-Chatelier-Effektes entworfen.

Literatur

- 1. Basinski, S.J.; Basinski, Z.S.; Howie, A.: Early stages of fatigue in copper single crystals. The London and Edinburg Phil. Mag. 19 (1969), 899 924.
- Besdo, D.: Eine Erweiterung der Taylor-Theorie zur Erfassung der kinematischen Verfestigung. ZAMM 71 (1991), T264 - T265.
- Gerdes, R.: Ein stochastisches Werkstoffmodell f
 ür das inelastische Materialverhalten metallischer Werkstoffe im Hoch- und Tieftemperaturbereich. Braunschweiger Schriften zur Mechanik 20-1995, Mechanik Zentrum TU Braunschweig (1991).
- 4. Grosskreutz, J.C. ; Mughrabi, M.: Description of the work-hardened structure at low temperature in cyclic deformation. In A.S. Argon [Hrsg.]: Constitutive Equations in Plasticity. MIT (1975), 251 326.
- 5. Guillot, J.; Grilhe, J.: Phénomène PORTEVIN-LE CHATELIER dans les alliages Al-Mg à hautes temperatures en fonction de la concentration. Acta Metallurgica 20 (1972), 291-295.
- Hart, E.W.; Solomon, H.D.: Load relaxation studies of polycrystalline high purity aluminium. Acta Metall. 21 (1973), 295-307.
- 7. Heiser, M.: Scherbruch in Aluminium Magnesium Legierungen infolge lokaler plastischer Instabilität. PhD Thesis TU Braunschweig (1990).
- Kröner, E. ; Teodosiu, C.: Lattice defect approach to plasticity and viscoplasticity. In A. Sawczuk [Hrsg.]: Problems of Plasticity. Noordhoff Int. Publishing, Leyden (1974), 45 - 88.
- 9. Kuhlmann-Wilsdorf, D.: Unified theorie of stages II and IIIof work hardening in pure f.c.c metal crystals. In J.P. Hirth und J. Weertmann [Hrsg.], Workhardening, New York (1968), 97 147.
- Lin, T.H.: Analysis of elastic and plastic strains of a face-centered cubic crystal. J. Mech. Phys. Solids 5 (1957), 143 - 149.
- 11. McCormick, P.G.: A model for the PORTEVIN-LE-CHATELIER-effect in substitutional alloys. Acta Metallurgica 20 (1972), 351-354.
- McQueen, H.J.; Hockett, J.E.: Microstructure of aluminium compressed at various rates and temperatures. Metallurgical Trans. 1 (1970), 2997 - 3004.
- Mecking, H.; Nicklas, B.; Zarubova, N.; Kocks, U.F.: A universal temperature scale for plastic flow. Acta Metall. 34 (1986), 527 - 536.
- 14. Mroz, Z.: An attempt to describe the behavior of metals under cyclic loads using a more general workhardening model. Acta Mechanica 7 (1969), 199-212.
- 15. Müller, M.: Plastische Anisotropie polykristalliner Materialien als Folge der Texturentwicklung. Fortschrittsberichte VDI, Reihe 18 Nr. 137, VDI-Verlag, Düsseldorf (1993).
- Peirce, D.; Asaro, R.J.; Needleman, A.: An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. Acta Metall. 30 (1982), 1078 - 1119.
- 17. Weertmann, J.: Steady-state creep through dislocation climb. J. Appl. Phys. 28 (1957), 362-364.
- Wegener, K.: Zur Berechnung großer plastischer Deformationen mit einem Stoffgesetz vom Überspannungstyp. Braunschweiger Schriften zur Mechanik 2-1991, Mechanik Zentrum TU Braunschweig (1991).

Anschrift: Dr. K. Wegener, Schuler Pressen GmbH & Co, Bahnhofstraße 41, D-73033 Göppingen.