

Arbeitsbericht zum DFG-Projekt Schm746/42-1

**Simulation des kristallplastischen Verhaltens von
Polykristallen und Metall/Keramik-
Verbundwerkstoffen**

Dr. rer. nat. Ewa Soppa
Staatliche Materialprüfungsanstalt (MPA)
Universität Stuttgart
Berichtszeitraum 01. April 2004 - 30. September 2006

1. Allgemeine Angaben

- *DFG Geschäftszeichen*

Schm746/42-1

- *Antragsteller*

Prof. Dr. rer. nat. Siegfried Schmauder

- *Thema des Projektes*

Simulation des kristallplastischen Verhaltens von Polykristallen und Metall/Keramik - Verbundwerkstoffen

- *Berichtszeitraum, Förderungszeitraum insgesamt*

01. April 2004 - 30. September 2006

- *Liste der Publikationen aus diesem Projekt (bitte Sonderdrücke beifügen)*

Vortrag bei der 7th International Conference on Mesomechanics, Materials for Safety and Health, Montreal, Canada, August 1.- 4., 2005. Titel des Vortrages: Crystal Plasticity Effects in CuMn3 - alloy. Autoren: Ewa Soppa, Ewald Bischoff, Siegfried Schmauder.

Eine Publikation mit den Gesamtergebnissen ist geplant.

2. Arbeits- und Ergebnisbericht (max. 10 DIN-A4-Seiten)

- *Ausgangsfragen und Zielsetzung des Projektes*

Dreidimensionale kristallplastische Berechnungen für polykristalline Flachzugproben aus Kupferlegierung CuMn3 unter Berücksichtigung von kristallplastischen Effekten wurden durchgeführt, um die Korrelation mit den an der Werkstoffoberfläche gemessenen Dehnungen in einzelnen Körnern und deren kristallographischen Orientierung zu untersuchen. Außer dem kristallplastischen Code [1] wurden vereinfachte Modelle nach Schmid und Taylor zur Berechnung von dreidimensionalen Gefügemodellen von einer monolithischen Legierung (Polykristall) und einem Teilchenverbundwerkstoff verwendet und miteinander verglichen. Damit wurden die Aussagen des kristallplastischen Codes (im weiteren Text CP-Modell genannt) mit vereinfachten Modellen verglichen. Dreidimensionale (3D) FE-Modelle von einem Polykristall und einem Teilchenverbundwerkstoff mit künstlichen Korn- und Einschlussgefügen wurden mit den Eigenschaften von CuMn3 bzw. CuMn3 (Matrix) und Al₂O₃ berechnet. An diesen Modellen wurden folgende Situationen analysiert:

- Monolithische Legierung mit unterschiedlich orientierten Körnern (Polykristall)
- Teilchenverbundwerkstoff (Keramik/Metall) mit unterschiedlich orientierten Körnern in einer duktilen Matrixphase (MMC)
- Einfluss der herstellungsbedingten Eigenspannungen, die bei Abkühlung während einer Wärmebehandlung im Verbundwerkstoff entstehen

- *Entwicklung der durchgeführten Arbeiten einschließlich Abweichungen vom ursprünglichen Konzept, ggf. wissenschaftliche Fehlschläge, Probleme in der Projektorganisation oder technischen Durchführung*

- 1) Erstellung eines realgefügebasierten 3D-Modell vom CuMn3 - Polykristall unter Berücksichtigung von Kornorientierungen.
- 2) Die Kornorientierungen in einem ausgewählten Gefügebereich auf der Probenoberfläche wurden mittels der OIM[®] (Orientation Image Microscopy) gemessen [in Zusammenarbeit mit Dr. E. Bischoff, Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart] und als Inputdaten in die FE-Simulationen übernommen. Weiterhin wurden in-situ-Zugversuche an den Flachproben von CuMn3 durchgeführt [in Zusammenarbeit mit Dr. G. Fischer, Dortmunder Initiative zur rechnerintegrierten Fertigung (RIF) e.V., Joseph-von-Fraunhofer-Straße 20, 44227 Dortmund].
- 3) FE-Modelle der ausgewählten Gefügebereiche wurden entsprechend den experimentellen Randbedingungen belastet (gemessene Randverschiebungsvektoren) und die Spannungs- und

- Dehnungsverteilungen berechnet. Zum Vergleich wurden ebenfalls die Berechnungen mit Verschiebungsvektoren gleicher Größe und Richtung (homogene Randbedingungen) durchgeführt und mit dem ersten Modell verglichen.
- 4) Die an der Werkstoffoberfläche mit Hilfe der Mikrogittertechnik gemessenen Dehnungen [*in Zusammenarbeit mit Dr. G. Fischer, Dortmunder Initiative zur rechnerintegrierten Fertigung (RIF) e.V., Joseph-von-Fraunhofer-Straße 20, 44227 Dortmund*] lieferten ein Vergleichsmaterial zu den Simulationsergebnissen.
 - 5) Zum Vergleich mit den Ergebnissen aus der Berechnung mit dem kristallplastischen Code (CP-Modell) wurden zusätzliche Modelle generiert, in denen die Körner sich nur durch die Einfachgleitung verformen konnten (Schmid-Modell). Dadurch sollte geprüft werden, inwieweit die Annahme der Einfachgleitung im Gegensatz zur Mehrfachgleitung (Taylor-Modell) zutrifft. Es ist anzunehmen, dass die Einfachgleitung im Gefüge mit sehr großen Körnern zumindest im Anfangsbereich der Verformung eine große Rolle spielt.
 - 6) Bei den Verbundwerkstoffen wurden herstellungsbedingte, beim Abkühlen entstehende Eigenspannungen berechnet und als Ausgangszustand für eine nachfolgende mechanische Belastung beibehalten, um ihren Einfluss auf die Verformungsmuster und auf eine potentielle Rissinitiierung im Gefüge zu untersuchen.
 - 7) Vier Berechnungsmethoden: (a) **konventionelle FE-Methode** ohne Kristallplastizität (isotrope Matriceigenschaften), (b) mit vereinfachter Kristallplastizität (nur 1 Gleitsystem aktiv, **Schmid-Modell**), (c) mit allgemeiner Kristallplastizität (mehrere Gleitsysteme aktiv, **Taylor-Modell**), und (d) **kristallplastischer Code** nach Huang wurden für einen Verbundwerkstoff ($\text{CuMn}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$) sowie Polykristall aus CuMn_3 angewandt und miteinander verglichen im Hinblick auf ihre Auswirkungen auf das Gesamtdeformationsverhalten dieser Werkstoffe.

- *Darstellung der erreichten Ergebnisse und Diskussion im Hinblick auf den relevanten Forschungsstand, mögliche Anwendungsperspektiven und denkbare Folgeuntersuchungen*

Teil I Modellierung vom Realgefüge

1. Werkstoff: CuMn3-Legierung

Eine monolithische Legierung CuMn_3 bildet im Bereich bis ca. 20%Mn keine Ausscheidungen, die mit Versetzungen wechselwirken können. Aus diesem Grund wurde diese Zusammensetzung für die Untersuchungen ausgewählt. Mn-Atome befinden sich auf den regulären Gitterplätzen (substitutionelle Legierung) [2, 3]. Die Mn-Konzentration von 3% liegt unter der Löslichkeitsgrenze, die Mn-Atome sind statistisch im Wirtsgitter verteilt und bilden einen Mischkristall.

2. Experimente

2.1 Probenpräparation und Gefügeanalyse von CuMn3

Für die experimentellen Untersuchungen wurden gekerbte Flachzugproben, die Herr Dr. G. Fischer, (RIF e.V. Dortmund) zur Verfügung gestellt hat, verwendet. Die Länge der Proben betrug 65 mm, die Breite = 16 mm und die Dicke ca. 0,8 mm. In Quarz luftdicht eingekapselte Proben wurden bei $T=1273\text{ K}$, 24 Stunden geglüht, um das Kornwachstum anzuregen (**Abb. 1**). Das Ziel der Grobkornglühung war es die Korngröße vergleichbar oder größer als die Probendicke zu bekommen. Diese „Grobkornstruktur“ – gleiches Kornmuster auf beiden Probenseiten - hatte eine dreidimensionale FE-Modellierung des Realgefüges erlaubt, ohne dass eine komplexe Rekonstruktion der Mikrostruktur notwendig war. Eine „leichte“ Korngrenzenätzung, die die Kornlage markierte, wurde als Vorbereitung für die Messungen der kristallographischen Orientierung der Körner mittels Orientation Imaging Microscopy (OIM[®]) [*am Max-Planck-Institut für Metallforschung in Stuttgart, in Kooperation mit Herrn Dr. Ewald Bischoff*] vorgenommen.

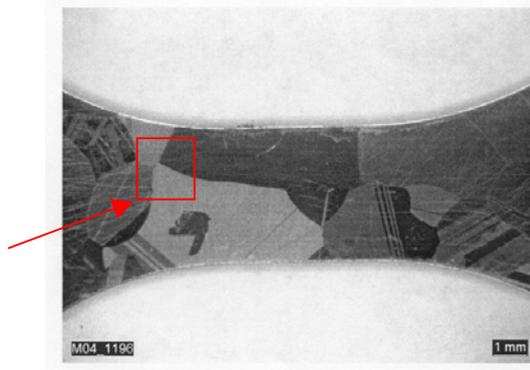


Abb. 1: Flachzugprobe aus CuMn3 mit dem markierten Bereich für die FE-Modellierung. In diesem Bereich wurde die Kornorientierung gemessen.

2.2 Orientation Imaging Microscopy

(in Kooperation mit Herrn Dr. Ewald Bischoff, Max-Planck-Institut für Metallforschung in Stuttgart)

Electron Backscatter Diffraction Patterns (EBSD oder EBSPs) wird benutzt, um die Kristallorientierung, bezogen auf z. B. eine Belastungsachse, zu bestimmen.

| Korn -Nr. (Abb. 6) | Schmidfaktor | Taylorfaktor |
|--------------------|--------------|--------------|
| 1 | 0,45 | 0,43 |
| 2 | 0,38 | 0,28 |
| 3 | 0,47 | 0,39 |
| 4 | 0,48 | 0,32 |
| 5 | 0,44 | 0,41 |

Tab. 1: Orientierungsfaktoren nach Schmid in den entsprechenden Körnern.

In **Abb. 2** sind die gemessenen Kornorientierungen farblich kodiert (a) dargestellt. In Verbindung mit dem „Orientierungs-Standarddreieck“ (b) können die entsprechenden Orientierungsfaktoren nach Schmid bzw. nach Taylor abgelesen werden.

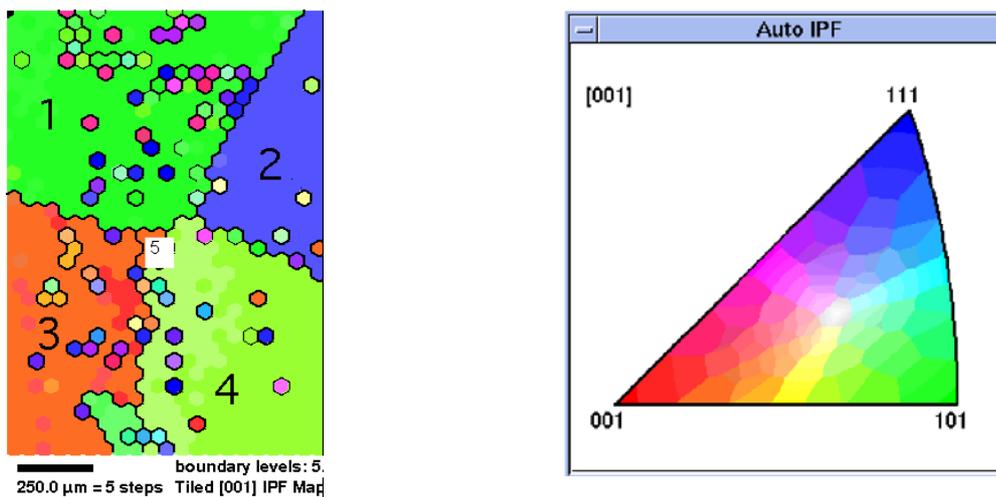


Abb. 2: (a) Gemessene Kornorientierungen in CuMn3 farblich kodiert, (b) Standard – Orientierungsdreieck.

2.3 In-situ-Zugversuche und Mikrogittertechnik

(in Kooperation mit Herrn Dr. Gottfried Fischer, RIF e.V, Dortmund)

Die Flachzugprobe wurde mittels der Mikrogittertechnik auf der Oberfläche markiert und im Rasterelektronenmikroskop (REM) bis zu 3,3% in-situ verformt. Mittels eines Korrelationsalgorithmus [4] wurden die Verschiebungsvektoren und daraus die lokalen Dehnungen bestimmt.

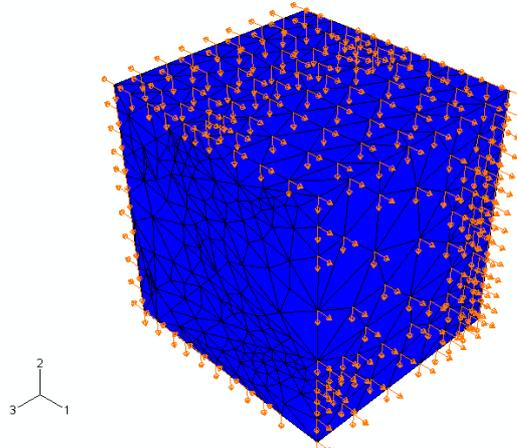
3. FE-Modellierung

3.1 Erstellung des FE-Modells

Ein Ausschnitt des Gefüges (rot markiert in **Abb. 1**) mit den Dimensionen $857 \mu\text{m} \times 888 \mu\text{m} \times 800 \mu\text{m}$ wurde für die Erstellung des FE-Modells ausgewählt.



(a) Kornstruktur auf der xy – Fläche durchgehend in die z-Richtung des Modells



(b) FE-Modell mit Randbedingungen

Abb. 3: Ein dreidimensionales FE-Modell mit der Kornstruktur (a) auf der xy-Fläche, die sich in die z-Richtung durch die Modelldicke, fortsetzt, (b) FE-Modell mit Randbedingungen.

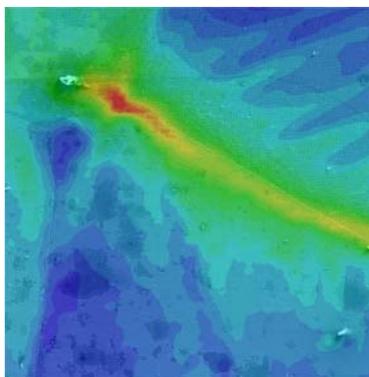
Die **Abb. 3** zeigt die Geometrie des Modells, die Kornstruktur (a), die sich in die z-Richtung fortsetzt sowie die Verschiebungsvektoren, die als Randbedingungen (b) in der Simulation verwendet wurden.

3.2 Orientierung der Körner – Inputdaten

Die Aufgabe bei der Vorbereitung der Inputdaten für das CP-Modell bestand darin, die Ergebnisse der Kornorientierung aus den OIM[®] - Messungen in die Millerschen Indizes umzuwandeln, um das „lokale“ und das „globale Koordinatensystem“ eindeutig zu „orientieren“. Unter dem „lokalen System“ ist eine Elementarzelle im Gitter gemeint. Im kubisch flächenzentrierten Gitter ist jeder der gleichwertigen 12 Gleitsysteme durch die Normale zur Gleitebene von Typ $\{111\}$ und die in dieser Ebene sich befindende Gleitrichtung von Typ $\langle 110 \rangle$ definiert. Das „globale System“ ist durch die Ausrichtung der Belastungsachse sowie die Normale zur Probenoberfläche definiert.

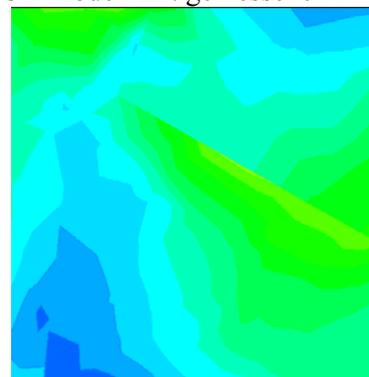
3.3 Vergleich der FE-Berechnungen mit dem Experiment (Skala 1 - 11%)

(a) Experiment



(b) Simulation

CP-Modell mit gemessenen RB*



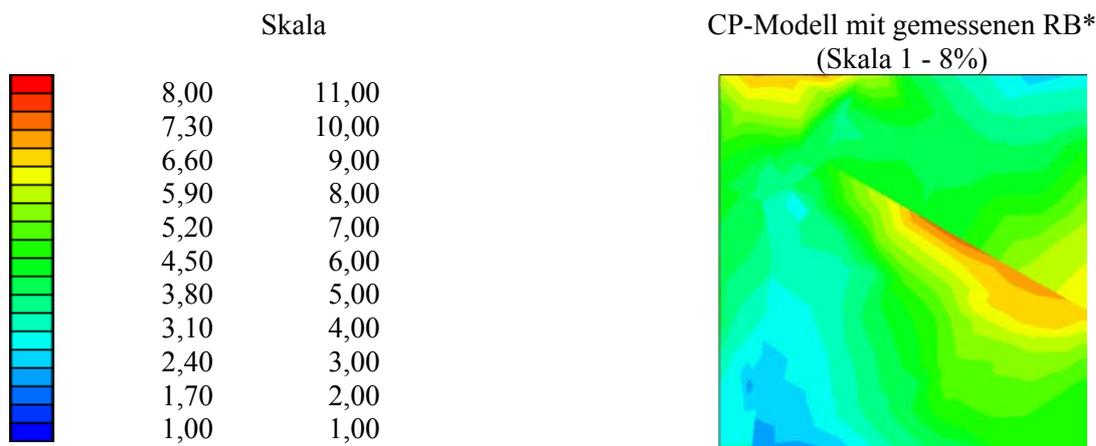


Abb. 4: Zusammenstellung der Dehnungsmuster (a) gemessen und (b) berechnet bei der makroskopischen Dehnung von 3,3 %. RB* = Randbedingungen.

Es wurden bei der Berechnung folgende Modelle verwendet:

- Kristallplastisches Modell (**CP-Modell**) nach Huang (Software von Huang [1])
 - (1) mit homogenen Randverschiebungen – in diesem Modell wurden Verschiebungsvektoren gleicher Länge als Randbedingungen eingesetzt
 - (2) mit experimentell gemessenen Verschiebungen an den Rändern des Gefügeausschnittes als Randbedingungen (*Mikrogittertechnik*)
- **Schmid-Modell** mit Orientierungsfaktoren (Tab. 1, OIM[®]-Messungen)
- **Taylor-Modell** mit Orientierungsfaktoren (Tab. 1, OIM[®]-Messungen)

Die Simulationen an Modellen nach Schmid und Taylor wurden mit den gemessenen Verschiebungsvektoren wie im CP-Modell durchgeführt. Alle Berechnungen wurden zu einer makroskopischen Verformung von 3,3 % durchgeführt. In **Abb. 4** sind die berechneten (FE-Simulationen) sowie gemessenen (Experiment-Mikrogittertechnik) Dehnungsmuster bei einer makroskopischen Dehnung von 3,3 % im Vergleich zusammengestellt. Zum Vergleich wurde das o.g. FE-Modell ebenfalls mit Verschiebungsvektoren gleicher Länge als Randbedingungen gerechnet. Das Dehnungsmuster zeigt aber kaum eine Ähnlichkeit zum experimentellen Ergebnis. Eine mögliche Interpretation dazu ist im weiteren Text gegeben. In **Abb. 5** wurden die berechneten Dehnungsmuster aus den Schmid- und Taylor-Modellen mit dem Ergebnis aus dem CP-Modell verglichen. Die Skalierung beträgt 1% - 8%.

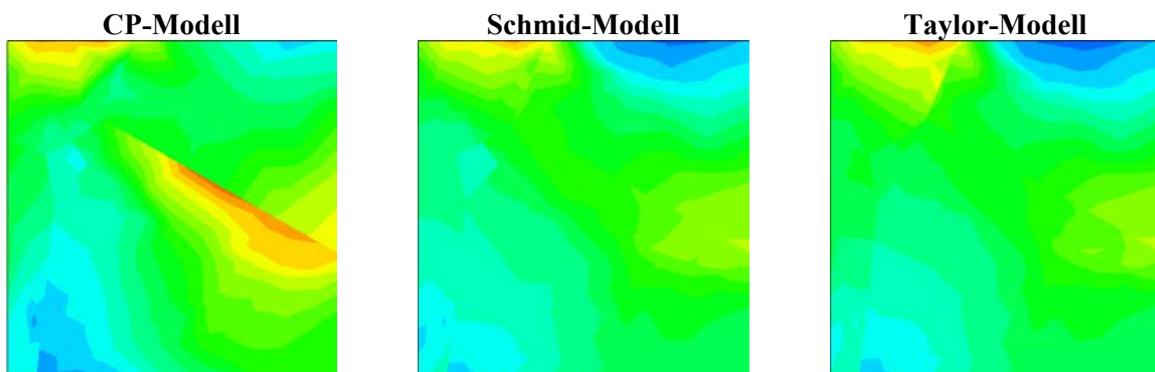


Abb. 5: Zusammenstellung der Dehnungsmuster berechnet mit den Modellen: CP, nach Schmid und nach Taylor bei einer makroskopischen Dehnung von 3,3 % und bei gleichen experimentellen Randbedingungen.

3.4 Kumulierte Häufigkeitsverteilungen der Dehnungen

Die *Kumulierte Häufigkeitsverteilung der Dehnungen* stellt eine bequeme und anschauliche Methode dar, Bilder in quantitativer Weise miteinander zu vergleichen. Die kumulierte Häufigkeitsverteilung wird anhand einer Tabelle berechnet, in der die Werte der Dehnungen aufsteigend sortiert sind und mit

den zugehörigen Häufigkeiten dargestellt werden. Diese Häufigkeiten werden addiert zu der Summe der kumulierten Häufigkeiten bei dem Vorgänger (Summe der vorangehenden Werte) [5]. Der letzte Wert ist gleich der Summe aller Ergebnisse bzw. Observationen und meistens normiert zu 100%. In **Abb. 6** sind die kumulierten Häufigkeitsverteilungen der Dehnungen in den drei 3D-Modellen: CP, nach Schmid und Taylor bei der makroskopischen Dehnung von 3,3% geplottet.

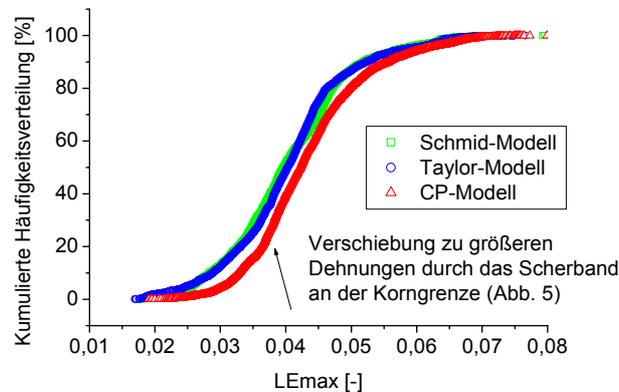


Abb. 6: Kumulierte Häufigkeitsverteilungen der Dehnungen in den drei 3D-Modellen: CP, nach Schmid und Taylor bei der makroskopischen Dehnung von 3,3%.

Teil II Modellierung vom künstlichen Gefüge

(Frau Dr. V. Romanova, Institute of Strength Physics and Materials Science, Tomsk, Russland)

Ein künstliches Korngefüge hat Romanova [7, 8] entwickelt. Dieses Gefüge wurde in Form einer 1D - Matrix für die Arbeiten in diesem Projekt zur Verfügung gestellt und bildete die Grundlage für die 3D - Modelle vom künstlichen Gefüge. Die Matrix beinhaltet Elemente die eine räumliche Verteilung der Körner darstellen: (1) Keime der einzelnen Körnern sind "random" verteilt im Volumen, in dem das Gefüge schrittweise entsprechend dem angenommenen Wachstumsgesetz wächst, (2) Diese Prozedur wird so lange wiederholt, bis die wachsenden Körnern aufeinander stoßen.

4.1 Monolithische Legierung

Ein FE-Modell vom künstlichen Gefüge hat die Dimensionen 40 x 45 x 10 (gemessen in Elementeneinheiten). Das Grundmodell beinhaltet 23 Körner, die mit 18.000 Hexaeder Elementen (C3D8) mit 8 Knoten pro Element vernetzt wurde. Die „Dicke“ des Modells betrug 10 Elementschichten (**Abb. 7**).

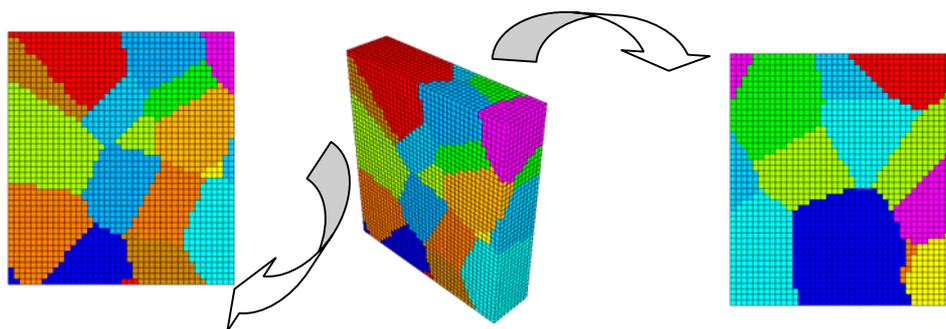


Abb. 7: 3D - Darstellung des Korn-Modells und zweidimensionale Projektion der xy-Flächen.

4.2 Teilchenverbundwerkstoff

Im Basismodell wurden den 5 per Zufallsgenerator ausgewählten Körnern die Eigenschaften der keramischen Phase Al_2O_3 zugeordnet. Dadurch entstand ein Modell vom Teilchenverbundwerkstoff (**Abb. 8**) mit 11,8 vol.% der keramischen Phase. Die Matrixphase hatte nach wie vor die Eigenschaften von CuMn3.

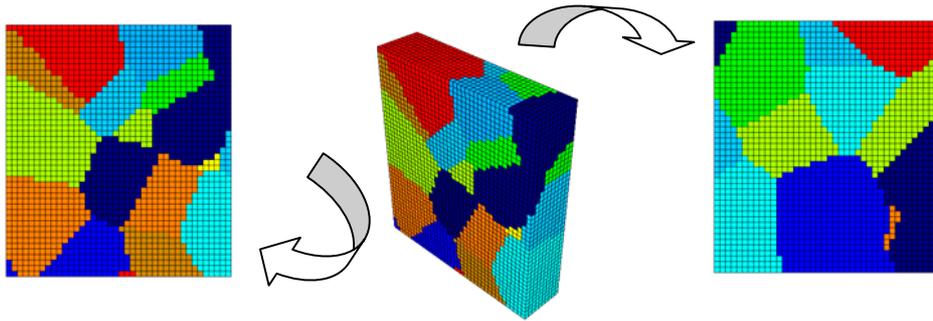


Abb. 8: (a) Dreidimensionale Darstellung der Körner im Verbundwerkstoff und zweidimensionale Projektion der xy-Flächen. Die keramische Phase ist dunkelblau markiert.

In **Tab. 2** sind die Inputdaten für das FE-Modell zusammengestellt. Diese beinhalten Informationen zur Anzahl der Elemente pro Korn und Orientierungsfaktoren nach Schmid, die den Körnern zugeordnet wurden.

| Korn – Nr. | Anzahl der finiten Elemente | Orientierungsfaktor nach Schmid (2,0 – 3,67) | Phase (Verbundwerkstoff) |
|------------|-----------------------------|--|--------------------------|
| 1 (1) | 1754 | 3,17 | Matrix |
| 2 (2) | 442 | 3,2 | Matrix |
| 5 (3) | 882 | 2,7 | Matrix |
| 8 (4) | 4 | 3,22 | Matrix |
| 13 (5) | 380 | 3,44 | Keramik |
| 20 (6) | 1935 | 2,67 | Matrix |
| 22 (7) | 9 | 2,51 | Matrix |
| 24 (8) | 1253 | 2,59 | Matrix |
| 26 (9) | 347 | 2,2 | Matrix |
| 34 (10) | 350 | 3,51 | Matrix |
| 40 (11) | 983 | 3,18 | Matrix |
| 43 (12) | 343 | 3,3 | Keramik |
| 48 (13) | 10 | 2,63 | Matrix |
| 51 (14) | 1890 | 2,18 | Matrix |
| 52 (15) | 1071 | 3,36 | Matrix |
| 58 (16) | 572 | 2,18 | Matrix |
| 59 (17) | 497 | 3,28 | Keramik |
| 62 (18) | 2098 | 2,7 | Matrix |
| 63 (19) | 415 | 3,33 | Keramik |
| 64 (20) | 88 | 3,13 | Matrix |
| 65 (21) | 363 | 3,36 | Matrix |
| 66 (22) | 447 | 2,78 | Keramik |
| 67 (23) | 1867 | 2,69 | Matrix |

Tab. 2: Mit dem Zufallsgenerator ausgewählte Orientierungsfaktoren nach Schmid in den Körnern des fiktiven Modells.

5. FE-Modellierung: Verwendete Modelle vom fiktiven Gefüge

Es wurden folgende Variationen der Gefügemodelle kreiert:

- (1) Monolithisches Material (CuMn3-Polykristall) mit unterschiedlich orientierten Körnern
- (2) Verbundwerkstoff CuMn3/Al₂O₃ mit 11,8vol.% der keramischen Phase
 - (a) unterschiedlich orientierte Körner in der Matrixphase
 - (b) isotrope Matrix (keine Körner in der Matrixphase)

Für die Berechnung der Gefügemodelle standen folgende Methoden zur Verfügung:

- (a) **kristallplastisches Modell** nach Huang [1]
- (b) vereinfachtes kristallplastisches **Modell nach Schmid** [6]
- (c) **konventionelle FE-Methode** (ohne kristallplastische Effekte)

Erklärung der im folgenden verwendeten Nomenklatur:

MonoCP – Modell des Polykristalls gerechnet mit dem kristallplastischen Code

MonoSchmid - Modell des Polykristalls gerechnet mit dem Schmid-Modell

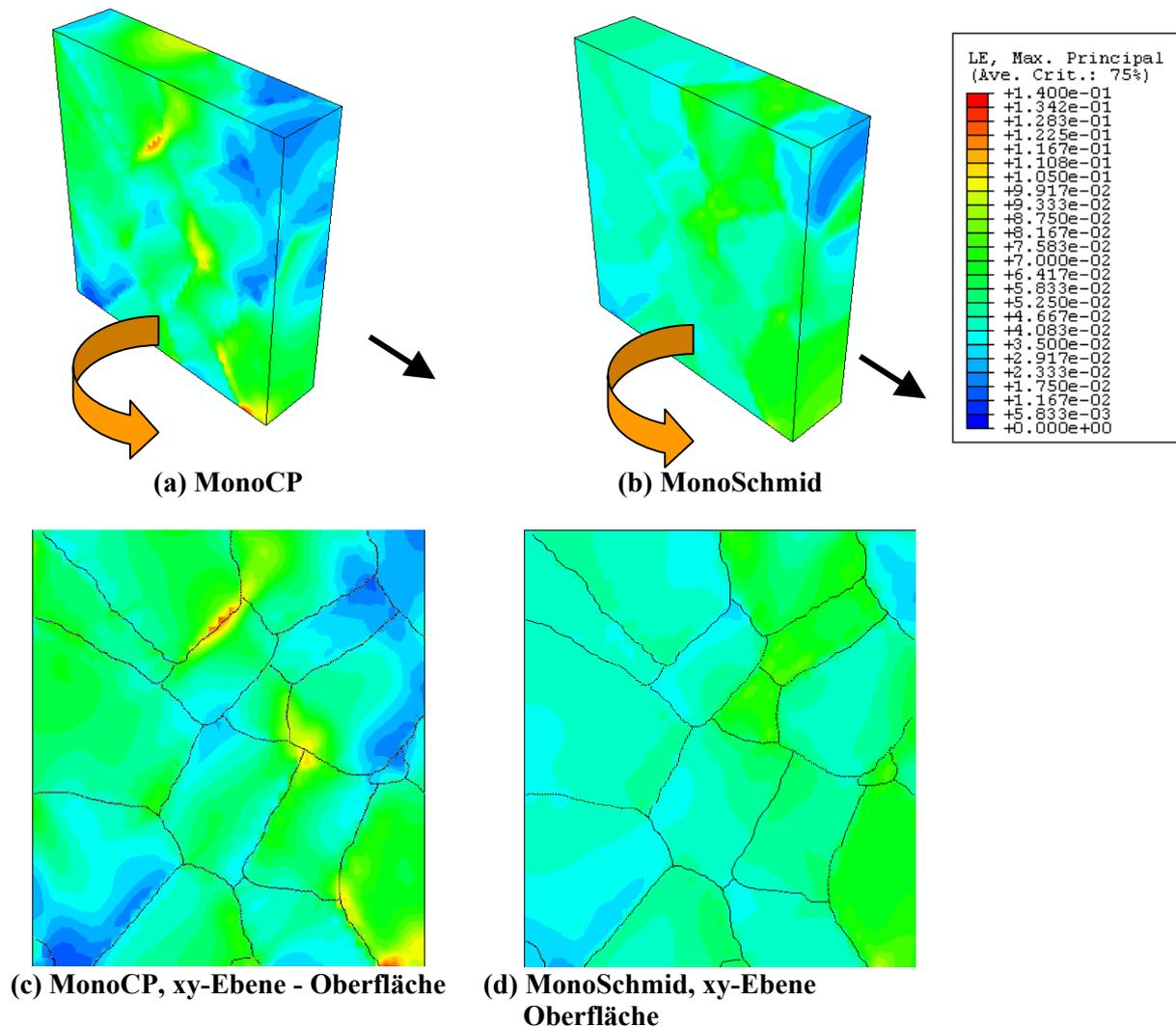
VerbundCP – Modell des Verbundwerkstoffes mit einer polykristallinen Matrixphase gerechnet mit dem kristallplastischen Code

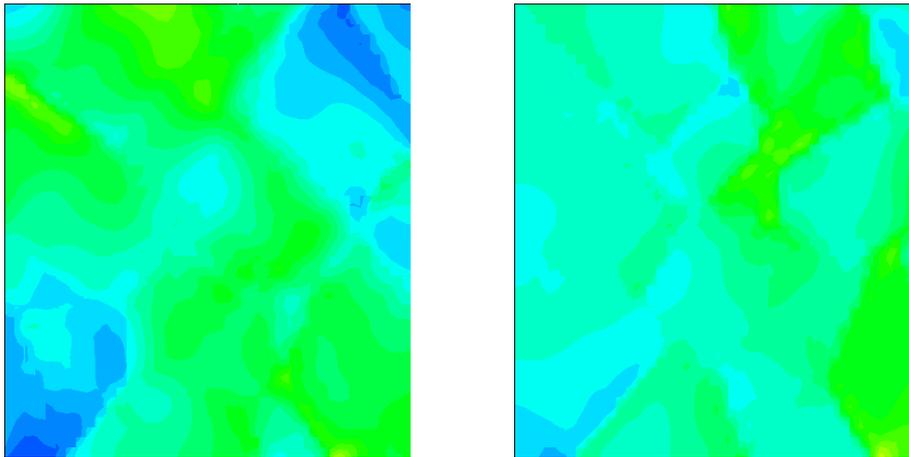
VerbundSchmid - Modell des Verbundwerkstoffes mit einer polykristallinen Matrixphase gerechnet mit dem Schmid-Modell

VerbundIso - Modell des Verbundwerkstoffes mit einer homogenen Matrixphase (keine Körner, isotrope Eigenschaften) gerechnet mit der konventionellen FE-Methode

In **Abb. 9 – 12** sind die wahren Dehnungen in die Belastungsrichtung bzw. die effektiven Dehnungen für alle Modelle zusammengestellt. Die mit dem Zufallsgenerator generierten Orientierungsfaktoren für die Körner sind in **Tab. 2** zusammengefasst. Den einzelnen Körnern wurden entsprechend ihren Orientierungsfaktoren (Schmidfaktoren), die aus der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurve abgeleiteten Einzelkurven zugeordnet. Das Modell wurde in die x-Richtung (markiert) im Zug belastet und bis zu 5% verformt. Es wurde eine gemeinsame Skalierung von 0% – 14% verwendet.

5.1 Berechnete Dehnungsmuster: Vergleich der berechneten Dehnungsmuster für die Modelle des CuMn3-Polykristalls mit unterschiedlich orientierten Körnern (MonoCP und MonoSchmid)





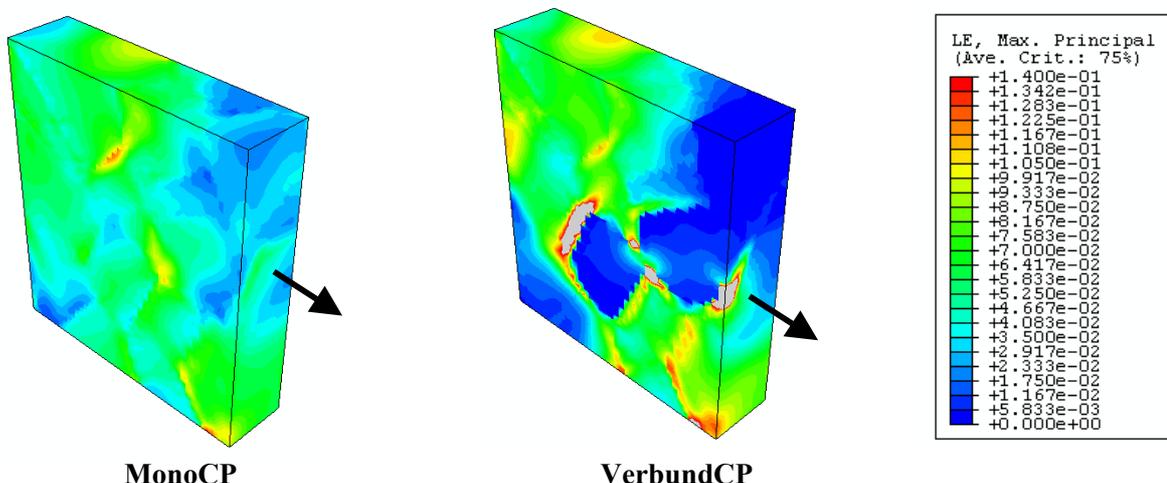
(e) MonoCP, xy-Ebene (Mitte) (f) MonoSchmid, xy-Ebene (Mitte)

Abb. 9: Vergleich der Dehnungsmuster in MonoCP und MonoSchmid nach einer 5%-Zugverformung.

Die Verteilung der Dehnungen im MonoSchmid (Abb. 9 b, d) - Modell ist relativ homogen, die Werte variieren zwischen 0% - max. 5 bis 7%, es sind keine ausgeprägten Dehnungskonzentrationen vorhanden. Je nach Kornorientierung sind die Unterschiede in den Dehnungskonzentrationen jedoch sichtbar. Im MonoCP-Modell (Abb. 9 a, c) dagegen findet man einzelne Stellen mit hohen Dehnungskonzentrationen von etwa 10% - 12%. Diese sind ohne Ausnahme an den Korngrenzen und den Tripelpunkten lokalisiert und nur auf der Modelloberfläche zu finden. Im Inneren des Modells sind diese starken Dehnungskonzentrationen nicht mehr zu finden (Abb. 9 e, f). Ein Vergleich der Dehnungsmuster auf den Oberflächen der Modelle zeigt keine gute Übereinstimmung. Einige Körner zeigen zwar ähnliche Tendenz in der Dehnungsentwicklung, jedoch keine durchgehende Übereinstimmung.

5.2 Vergleich der berechneten Dehnungsmuster für die Modelle des CuMn₃-Polykristalls mit unterschiedlich orientierten Körnern und des Verbundwerkstoffs (MonoCP und VerbundCP)

Die beiden Modelle (MonoCP und VerbundCP) wurden mit dem CP-Code mit gleichen Randbedingungen gerechnet. Der Vergleich der Dehnungsmuster auf der xy-Oberfläche zeigt starke Unterschiede. In Vergleich zum Polykristall weist der Verbundwerkstoff hohe Dehnungskonzentrationen in der duktilen Matrix auf, die in der Nähe der Phasengrenze lokalisiert sind (Abb. 10). Es bilden sich Scherbänder, die in die Richtung von maximalen Scherspannungen, also um etwa 45° zur Belastungsachse geneigt, verlaufen. Zusätzlich werden die bereits existierenden Dehnungskonzentrationen durch die Anwesenheit der harten Phase unter der Oberfläche verstärkt oder es entstehen „neue“ Scherbänder (Abb. 11).



MonoCP

VerbundCP

Abb.10: Vergleich der Dehnungsmuster in MonoCP und VerbundCP nach einer Zugverformung von 5%.

Die Spannungsmuster in diesen beiden Modellen sind ebenfalls sehr unterschiedlich. In MonoCP sind die Spannungen relativ homogen verteilt, wogegen sie sich im VerbundCP vor allem in der harten Phase (Al_2O_3) mit dem höheren E-Modul konzentriert.

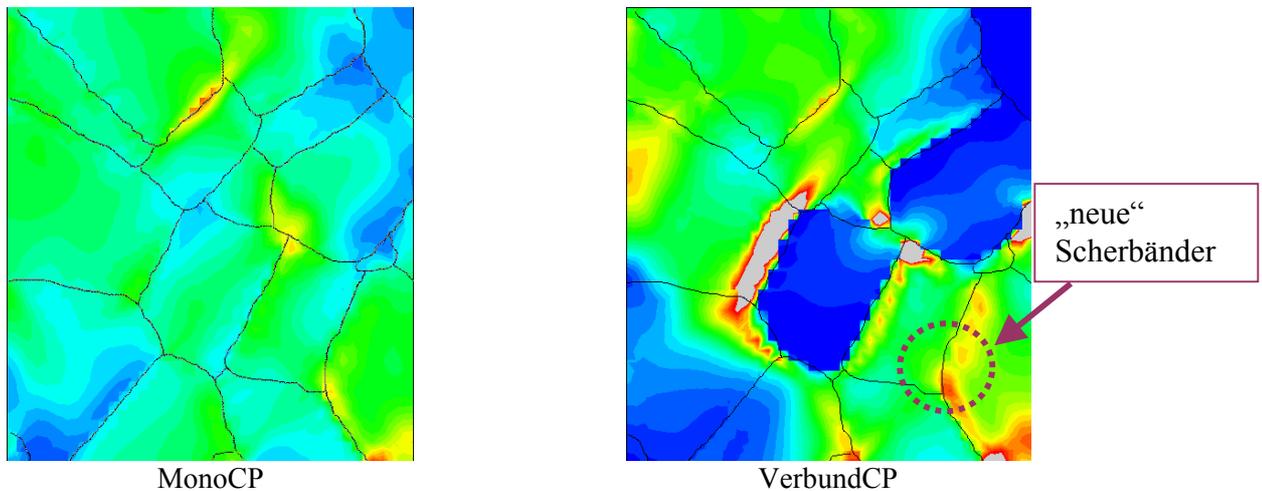


Abb. 11: Dehnungsmuster auf der xy-Oberfläche in den Modellen MonoCP und VerbundCP.

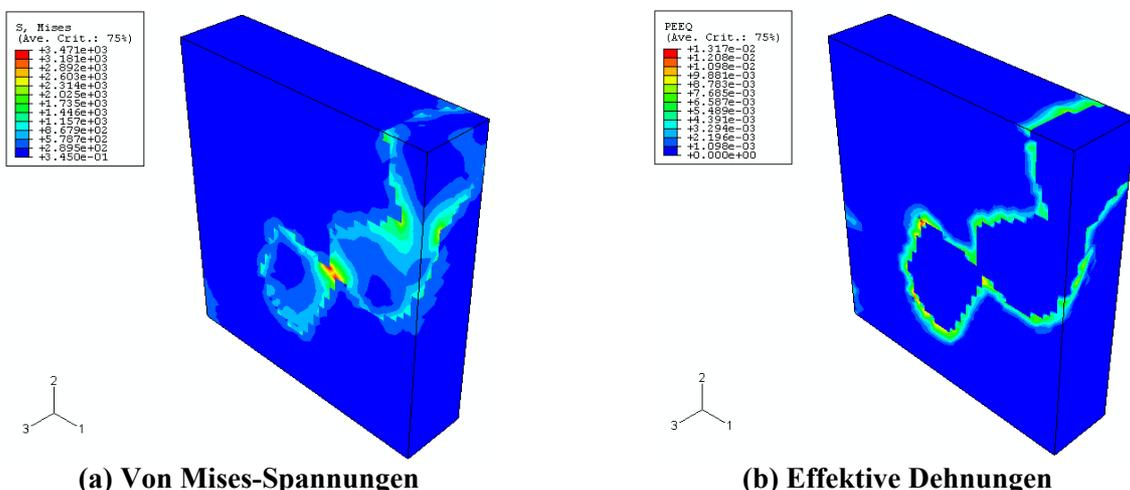
Ein Vergleich der Verbundwerkstoffmodelle VerbundCP, VerbundSchmid und VerbundIso (**Abb. 12 Anhang**) zeigt keine wesentlichen Unterschiede in den Dehnungsmustern. In Modellen mit einer polykristallinen Matrix (VerbundCP und VerbundSchmid) sind mehr Nuancen in der Dehnungsverteilung in der duktilen Phase vorhanden als im Modell VerbundIso, in dem die Matrixphase keine Körner beinhaltet. Die wesentlichen Merkmale der Dehnungsmuster, die vor allem durch die Zweiphasigkeit zustande kommen, sind in allen Modellen ähnlich abgebildet.

5.3 Vergleich der berechneten Dehnungsmuster in Modellen von Verbundwerkstoffen (VerbundCP, VerbundSchmid und VerbundIso)

Der an den Details dieser Arbeit interessierte Leser findet die weiteren Abbildungen (**Abb. 12, 14, 15**) im Anhang.

5.4 Herstellungsbedingte Eigenspannungen

Während der Abkühlung von der Herstellungstemperatur bzw. Wärmebehandlung entstehen in Mehrphasenwerkstoffen Eigenspannungen. Diese resultieren aus den unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten der Phasen und wachsen proportional zum Unterschied bei diesen Koeffizienten. Für die FE-Berechnungen wurde der Wärmeausdehnungskoeffizient für Cu $\alpha = 16,4 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [9] verwendet.



(a) Von Mises-Spannungen

(b) Effektive Dehnungen

Abb. 13: Von Mises-Spannungen im CuMn3/Al₂O₃ – Verbundwerkstoff (a) und plastische Dehnungen im CuMn3/Al₂O₃ – Verbundwerkstoff (b) nach der Abkühlung von 160°C.

Die Temperatur von 160°C wurde für die Berechnung von herstellungbedingten Eigenspannungen für diesen Fall gewählt als Temperatur, die zwischen der Erholungstemperatur ($T_s/4 \approx 60^\circ\text{C}$) und der Rekristallisationstemperatur ($T_s/2 \approx 400^\circ\text{C}$) für Kupferwerkstoffe liegt. Die Berechnungen wurden mit den für Raumtemperatur gültigen Spannungs-Dehnungs-Kurven für die einzelnen Kristallite (Körnern) durchgeführt. Diese Vorgehensweise liefert Werte der Spannungen, die überschätzt sind. Eine korrekte Vorgehensweise wäre die temperaturabhängigen Spannungs-Dehnungs-Kurven als Inputdaten zu benutzen. Diese Daten standen aber nicht zur Verfügung. Das Ergebnis der FE-Berechnungen ist daher als semi-quantitativ zu betrachten und sollte die Tendenz in der Entwicklung der Spannungs- und Dehnungsmuster aufzeigen und nicht einen exakten Wert der Eigenspannungen. Auch die Temperatur, bei der die Wärmebehandlung durchzuführen wäre, sollte an einen konkreten Fall angepasst werden. Die aufgrund der Unterschiede in den Wärmeausdehnungskoeffizienten bei der Abkühlung entstehenden Spannungen konzentrieren sich in der harten keramischen Phase, die einen höheren E-Modul als die duktile Matrix besitzt. Nach der Abkühlung steht die keramische Phase unter Druckspannungen, die weichere Matrixphase dagegen, insbesondere in der Nähe der Phasengrenze, unter Zugspannungen (**Abb. 13**). Die Zugspannungen werden durch plastisches Fließen abgebaut sobald die Fließgrenze überschritten wird. In weiteren FE-Berechnungen wurde der Spannungszustand, der sich während der Abkühlung einstellt, als Ausgangszustand für die nachfolgende mechanische Belastung betrachtet. Je nach Belastungsrichtung können die im Material existierenden Eigenspannungen vorteilhaft oder schädigend wirken. Die unter Druckspannungen stehenden keramischen Teilchen werden bei einer zusätzlichen äußeren Zugspannung weniger Spannung konzentrieren. Die Bereiche der Matrix in denen bereits Zugspannungen herrschen können bei einer weiteren Belastung in die Zugrichtung mit Porenbildung (hohe hydrostatische Zugspannungen) und/oder einem Interfaceriss reagieren. In **Abb. 14** und **15** sind die Dehnungen - LE11 in die Belastungsrichtung, LE max. und effektive plastische Dehnungen in den Modellen VerbundIso und VerbundCP ohne und mit Eigenspannungen dargestellt.

Die Unterschiede in den Dehnungsmustern - berechnet ohne und mit Eigenspannungen - sind geringfügig, sie manifestieren sich vor allem an den Stellen wo bereits hohe Dehnungskonzentrationen vorhanden sind. Ein Beispiel dafür bilden die in **Abb. 14 c, d** sowie in **Abb. 15 e, f** markierten Stellen. Dehnungskonzentrationen in der duktilen Matrixphase, in der Nähe der Phasengrenze werden intensiver und breiter in der Anwesenheit der herstellungsbedingten Eigenspannungen. Bei den Berechnungen von realen Werkstoffen, insbesondere bei den Simulationen der Rissinitiierung sollten die Eigenspannungen stets berücksichtigt werden. Berechnungen mit den temperaturabhängigen Spannungs-Dehnungs-Kurven als Inputdaten sowie einer realistischer Temperatur der Wärmebehandlung werden eine korrekte Ausgangssituation für die weiteren Simulationen der mechanischen Belastung bilden.

5.5 Kumulierte Häufigkeitsverteilungen der Dehnungen

Eine quantitative Beschreibung der Dehnungsverteilungen kann mit Hilfe der kumulierten Häufigkeitsverteilungen gemacht werden, die einen einfachen Vergleich der Muster erlaubt. Die berechneten Dehnungswerte für einen konkreten Fall wurden zusammen mit den zugeordneten Häufigkeiten aufsteigend sortiert. Die Gesamtheit aller Elemente wurde zu 100% normiert.

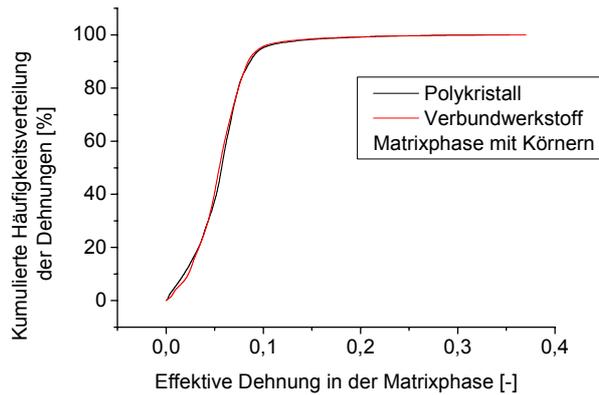


Abb. 16: Vergleich der kumulierten Häufigkeitsverteilungen der Dehnungen im Modell des Polykristalls und des Verbundwerkstoffs.

Die **Abb. 16** zeigt die kumulierten Häufigkeitsverteilungen der effektiven Dehnungen in der duktilen Matrixphase des Verbundwerkstoffs (Körner die Al_2O_3 -Eigenschaften besaßen wurden bei dieser Analyse ausgeschlossen) mit den gleichen Körnern im CuMn3-Polykristall (hier wurden nur die Körner untersucht, die im Verbundwerkstoff Matrixeigenschaften hatten). Der Verlauf der Kurven in **Abb. 16** ist für mehr als 95% der Elemente fast identisch. Ein kleiner Bruchteil der Elemente (weniger als 5%) zeigen aber im Fall vom Verbundwerkstoffmodell viel höhere Dehnungskonzentrationen als die Elemente im Polykristall. Diese Dehnungskonzentrationen, lokalisiert in kleinen Bereichen, z. B. in der Nähe der Phasengrenzen, können potentielle Rissinitiierungsstellen und Ausgang für einen Schädigungsvorgang bedeuten.

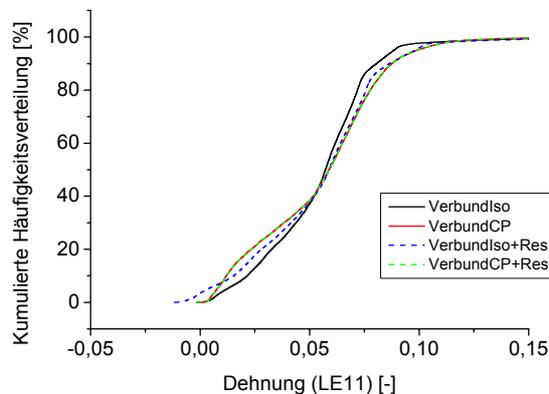


Abb. 17: Vergleich der kumulierten Häufigkeitsverteilungen der Dehnungen in Verbundwerkstoffmodellen (VerbundIso und VerbundCP) ohne und mit Eigenspannungen (+Res).

Erwartungsgemäß liefert eine FE-Berechnung mit dem kristallplastischen Code eine breitere Dehnungsverteilung in der Matrixphase als eine Berechnung mit einer konventionellen FE-Methode in einem Modell ohne Körner, also mit isotroper Matrixphase (**Abb. 17**). Die Berücksichtigung von herstellungsbedingten Eigenspannungen verschiebt die Dehnungen zu höheren Werten; die äußere Zugbelastung und Zugspannungen in der Matrix addieren sich.

- *Stellungnahme, ob Ergebnisse der Vorhaben wirtschaftlich verwertbar sind und ob eine solche Verwertung erfolgt oder zu erwarten ist. Ggf. Angaben zu Patenten, Industriekooperationen o.a.*

Die durchgeführten Forschungsarbeiten haben den Charakter einer Grundlagenforschung und dienen der Klärung der Frage inwieweit die kristallplastischen Effekte in monolithischen bzw. Mehrphasenwerkstoffen bei der Entwicklung von Dehnungsmustern, als Ausgangssituation zur Schädigungs-

initiierung, von Relevanz sind. Im Rahmen diese Projektes sind keine Patente angemeldet und bis jetzt keine Kooperationen mit der Industrie entstanden.

- *Wer hat zu den Ergebnissen des Projektes beigetragen (Kooperationspartner im In- und Ausland, Projektmitarbeiter/innen usw.)*

Das Projekt wurde von Frau Dr. Ewa Soppa bearbeitet, sie ist auch für die FE-Modellierung im Projekt zuständig. Die experimentellen Arbeiten wurden wie folgt durchgeführt:

- (1) Messungen der Kornorientierung wurden von Herrn Dr. Ewald Bischoff, MPI für Metallforschung in Stuttgart vorgenommen.
- (2) Herr Dr. Gottfried Fischer, RIF e.V. Dortmund RIF hat CuMn₃-Proben zur Verfügung gestellt, in-situ-Zugversuche an diesen Proben durchgeführt sowie die Dehnungsverteilungen mittels Mikrogittertechnik an diesen Proben gemessen.
- (3) Frau Dr. Varvara Romanova, Institute of Strength Physics and Materials Science, Tomsk, Russland; sie hat ihren Gefügemodell als Basis für die in diesem Projekt erstellten FE-Modelle zur Verfügung gestellt.

Allen diesen Kollegen gilt an dieser Stelle unser herzlicher Dank für eine gute Zusammenarbeit.

- *Qualifikation des wissenschaftlichen Nachwuchses im Zusammenhang mit dem Projekt (z.B. Diplome, Promotionen, Habilitationen usw.)*

Trifft nicht zu.

3. Zusammenfassung (max. 1 DIN A-4-Seite)

- *Allgemeinverständliche Darstellung der wichtigsten wissenschaftlichen Fortschritte und ggf. ihrer Anwendungsaspekte*

Teil I Realgefüge CuMn₃

(1.1) Alle Modelle (CP-, Schmid- und Taylor-) lieferten ähnliche Dehnungsmuster, die jedoch wesentlich weniger Details als das experimentelle Ergebnis aufzeigen.

(1.2) Eine starke Dehnungslokalisierung (Scherband) an der Phasengrenze zwischen den Körnern 2 und 4 fehlen in den Schmid- und Taylor-Modellen.

(1.3) Das CP-Modell lieferte ein solchens Scherband an dieser Stelle, das jedoch kürzer war und eine andere Lokalisierung der maximalen Dehnung als das Experiment aufzeigt. Im Experiment konzentrieren sich die maximalen Dehnungen im Zwickelbereich (Grenze zwischen 3-Körnern).

(1.4) Die „groben“ Verformungsmuster – die Lage der „blauen“ und „gelben“ – Bereiche bei allen Modellen stimmen gut überein.

(1.5) Das fehlende bzw. ungenau abgebildete Scherband in den Simulationen deutet darauf hin, dass die zukünftigen Modelle um die Information über den Aufbau der Korngrenzen und ihre Eigenschaften sowie Freiheitsgrade die an der Grenze anders als im Korninneren sind, erweitert werden sollten.

(1.6) Das CP-Modell mit den homogenen Randbedingungen lieferte unbrauchbare Ergebnisse, die hier nicht präsentiert werden.

(1.7) Verwendet man dagegen Modelle mit realistischen (gemessenen) Randbedingungen, so sind diese in allen drei Fällen dem Experiment ähnlich. Die betrachtete Korngruppe liegt nicht im parallelen Stegbereich der Probe sondern am Übergang zum Probenkopf und dort wiederum am Probenrand, also im Bereich mit hohen Spannungsmehrsichtigkeiten. Eine Annahme von homogenen Randbedingungen muss daher zu falschen Ergebnissen führen.

(1.8) Die kumulierten Dehnungsverteilungen sind für alle drei Modelle ähnlich, wobei die Kurven für das Taylor- und das Schmid-Modell sehr dicht nebeneinander liegen. Das CP-Modell ist insgesamt zu den höheren Dehnungen verschoben .

Teil II Künstliches Gefüge: Polykristall und Verbundwerkstoff

(2.1) Für die Arbeiten in diesem Teil des Projektes wurde ein Grundmodell auf der Basis einer künstlichen Kornstruktur erstellt. Dieses Modell repräsentierte die Struktur eines Polykristalls mit 23 Körnern.

(2.2) Durch die Zuordnung den Eigenschaften einer keramischen Phase (Al_2O_3) zu den 5 per Zufallsgenerator ausgewählten Körnern wurde das Basismodell zu einem Modell des Verbundwerkstoffs umgewandelt. Das Volumenanteil der keramischen Phase betrug 11,8%.

(2.3) Die elastisch-plastischen Eigenschaften von CuMn₃-Legierung wurden dem Polykristall bzw. der Matrixphase im Verbundwerkstoff zugeordnet.

(2.4) Die Orientierungen der Körner im Polykristall wurden mit einem Zufallsgenerator gewählt.

(2.5) Es wurden folgende Berechnungsmethoden/Modelle verwendet: CP-Code (mit Kristallplastizität), Schmid-Modell und konventionelle FE-Methode (ohne Kristallplastizität).

(2.6) Die Berechnungen des plastischen Verhaltens eines CuMn₃ - Polykristalls zeigen relativ homogene Dehnungsmuster, nur im Falle des CP-Codes sind einzelne Bereiche mit höheren Dehnungskonzentrationen zu sehen. Diese sind ohne Ausnahme an den Korngrenzen und Tripelpunkten lokalisiert. Diese Tatsache erinnert an die Berechnungen der Realstruktur von CuMn₃ (Teil I dieses Berichtes). Auch dort wurde das Scherband an der Korngrenze nur unter Anwendung des CP-Codes sichtbar und ist damit in Übereinstimmung mit dem Experiment. Diese Fakten erlauben die Schlussfolgerung, dass für die Simulationen des Verformungsverhaltens von homogenen Werkstoffen (wie Polykristalle) die Anwendung von CP-Codes vorteilhafter ist als die der konventionellen FE-Methode.

(2.7) In Verbundwerkstoffen sind aufgrund der Zweiphasigkeit hohe Dehnungskonzentrationen, meistens in der Nähe der Phasengrenze zu finden. Diese Werte überschatten die kristallplastischen Effekte in der polykristallinen Matrix. Die Berechnungen mit dem CP-Code liefern zwar mehr Details, diese Vorteile sind jedoch gering im Vergleich mit dem hohem Berechnungsaufwand.

(2.8) Dehnungsmuster in Verbundwerkstoffen sind vor allem durch die Anwesenheit der harten Phase geprägt. Die Scherbänder sind in ihrem Verlauf durch die Verteilung der Zweitphase in der duktilen Matrix modifiziert.

(2.9) Für die Berechnungen der Schädigungsinitiierung in Teilchenverbundwerkstoffen mit stark unterschiedlichen Eigenschaften der beiden Komponenten, würde vermutlich die Anwendung der konventionellen FE-Methode ausreichen. Der CP-Code scheint keine wesentlichen Vorteile zu bringen im Hinblick auf eine korrekte Abbildung der Spannungs- und Dehnungsmustern.

(2.10) Herstellungsbedingte Eigenspannungen sollten dagegen bei den Berechnungen der Schädigung berücksichtigt werden, da diese die maximalen Dehnungswerte in der Matrix noch verstärken.

• „Überraschungen“ im Projektverlauf und bei den Ergebnissen

Die Arbeiten sind ohne größere „Überraschungen“ verlaufen, die erzielten Ergebnisse bestätigten die Annahmen, dass die kristallplastischen Effekte vor allem bei der Modellierung von homogenen Werkstoffen berücksichtigt werden sollten. In den Simulationen des Verformungsverhaltens von Keramik/Metall-Teilchenverbundwerkstoffen kann auf die Anwendung vom aufwendigen CP-Code verzichtet werden. Ein wichtiger Hinweis, der dem Antragsteller sowie der Bearbeiterin dieses Projektes vorher nicht im vollen Umfang bewusst war, ist die Bedeutung der Korngrenzen bei der kristallplastischen Modellierung. Korngrenzen und noch mehr die Phasengrenzen stellen die Barrieren dar für die Fortsetzung von Scherbändern und benötigen eine spezielle Behandlung, durch z.B. Zuordnung von mehr Freiheitsgraden als das Korninnere. Diese Problematik könnte ein Thema für ein separates Projekt sein.

• Hinweise auf mögliche Erfolgsberichte in den Publikumsmedien

entfällt.

4. Literatur

- [1] Yonggang Huang, "A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the Abaqus finite element program", Division of Applied Sciences Harvard University, Cambridge, Massachusetts (1991).
- [2] Smithells, Metals Reference Book, Sixth Edition 1983.
- [3] A. Hilscher, „Röntgenbeugung an plastisch verformten Cu- und CuMn-Einkristallen zur Bestimmung von Versetzungsdichte und inneren Spannungen, Doktorarbeit, MPI für Metallforschung, Institut für Physik (1990) Stuttgart.
- [4] G. Fischer, E. Soppa, S. Schmauder, Y.-L. Liu, "Modelling of Strain Localization in Real Microstructural Areas of the Particle Reinforced Metal-Matrix Composite Al 6061 – 10% Al₂O₃", in: *Proc. 19th Risø International Symposium on Materials Science, Modelling of Structure and Mechanics of Materials From Microscale to Product*, 7.-11. September 1998, Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark, Eds.: J.V. Carstensen, T. Leffers, T. Lorentzen, O.B. Pedersen, B.F. Sørensen, G. Winther, pp. 261-266 (1998).
- [5] <http://www.statcan.ca/english/edu/power/ch10/frequency.htm>
- [6] E. Soppa, D. Amos, S. Schmauder, E. Bischoff, „The Influence of Second Phase and Grain Orientations on Deformation Patterns in Ag and Ag/Ni-Composite“, *Computational Materials Science* 13, pp. 168-176, 1998.
- [7] Romanova V, Balokhonov R, Karpenko N. Numerical simulation of material behavior with explicit consideration for three-dimensional structural heterogeneity. *Physical Mesomechanics* 7, 2004, 71:79.
- [8] V. Romanova, R. Balokhonov, P. Makarov, S. Schmauder, E. Soppa, "Simulation of elastoplastic behaviour of an artificial 3D-structure under dynamic loading", *Comput. Mater. Sci.* 28, 2003, 518:528.
- [9] Merkel, T., Taschenbuch der Werkstoffe, Fachbuchverlag Leipzig-Köln 1994.