

Dipl.-Ing. Markus Vöse

**Mikromechanische Modellierung
der Korngrenzenschädigung in einer
Kupferlegierung unter Kriechbeanspruchung**

Die vorliegende Arbeit entstand an der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung.

Impressum

**Mikromechanische Modellierung
der Korngrenzenschädigung in einer
Kupferlegierung unter Kriechbeanspruchung**

2015

Herausgeber:

BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung

Unter den Eichen 87

12205 Berlin

Telefon: +49 30 8104-0

Telefax: +49 30 8112029

E-Mail: info@bam.de

Internet: www.bam.de

Copyright © 2015 by

BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung

Layout: BAM-Referat Z.8

ISSN 1613-4249

ISBN 978-3-9817149-0-6

Mikromechanische Modellierung der Korngrenzenschädigung in einer Kupferlegierung unter Kriechbeanspruchung

Dissertation
zur
Erlangung des Grades
Doktor-Ingenieur

der
Fakultät für Maschinenbau
der Ruhr-Universität Bochum

von
Markus Vöse
aus Potsdam

Bochum 2014

Dissertation eingereicht am: 1. Dezember 2014
Tag der mündlichen Prüfung: 12. Februar 2015
Erster Referent: Prof. Dr. rer. nat. Alexander Hartmaier
Zweiter Referent: Prof. Dr.-Ing. Gunther Eggeler

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter im Fachbereich 5.2 – Experimentelle und modellbasierte Werkstoffmechanik – der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM). Für die hervorragenden Arbeitsbedingungen in dieser Zeit, welche maßgeblich zum erfolgreichen Abschluss dieser Arbeit beigetragen haben, möchte ich mich ganz herzlich bei meinen BAM-Kollegen bedanken.

Ein besonders großer Dank gilt dabei meinem BAM-Betreuer Dr.-Ing. Bernard Fedelich, welcher das Promotionsthema vorgeschlagen hatte und mir stets persönlich mit Rat und Erfahrung zur Seite stand. Meinem Doktorvater Prof. Dr. rer. nat. Alexander Hartmaier vom Interdisciplinary Centre for Advanced Materials Simulation (ICAMS) an der Ruhr Universität Bochum (RUB) danke ich für die ausgesprochen gute Betreuung des Promotionsverfahrens, für die konstruktiven Anmerkungen zu meinen Arbeiten und für die Begutachtung der Dissertation. Ebenso sage ich Danke an Prof. Dr.-Ing. Gunther Eggeler vom Lehrstuhl Werkstoffwissenschaft des Institutes für Werkstoffe (RUB) für die Übernahme des Zweitgutachtens und an Prof. Dr.-Ing. Marcus Petermann vom Lehrstuhl für Feststoffverfahrenstechnik des Institutes für Thermo- und Fluidodynamik (RUB) für die Übernahme des Vorsitzes der Promotionskommission.

Ganz besonders danke ich auch Dr.-Ing. Frederik Otto für die sehr gute Zusammenarbeit und die hilfreichen Diskussionen. Die von ihm bereitgestellten experimentellen Daten zu durchgeführten Kriechversuchen und Analysen von getesteten Proben waren wichtige Eingangsgrößen für die im Rahmen dieser Arbeit präsentierte Beschreibung des Kriechverhaltens einer Kupfer-Antimon-Legierung. Bezüglich der experimentellen Arbeiten sei auch Dr.-Ing. Andreas Schäfer für die Durchführung der DIC-Messungen zur Bestimmung der Oberflächenverschiebungen an getesteten Proben gedankt. Zudem spreche ich Dipl.-Ing. Kaveh Kianinejad für seine Unterstützung bei der Auswertung der experimentellen Daten und der Erstellung von Finite-Elemente-Modellen meine Dankbarkeit aus. Ebenso danke ich Dieter Noack und Dipl.-Math. Cetin Haftaoglu, welche das Einkristallmodell in das Finite-Elemente-Programm Abaqus implementierten und stets als Ansprechpartner für jegliche computerbezogene Anliegen zur Stelle waren.

Mein ganz besonderer Dank gilt auch Dipl.-Ing. Kerstin Loewenhoff, Dipl.-Ing. Romina Pipke und Dipl.-Ing. (FH) Georgia Künecke sowie meinen Eltern Wolfgang und Annegret Vöse für ihre konstruktiven sprachlichen Anmerkungen zu meinen Dissertationsentwürfen.

Abschließend möchte ich noch dankend auf die finanzielle Förderung der durchgeführten Arbeiten durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen des Projektes *Werkstoffwissenschaftliche Untersuchung und mikromechanische Modellierung der Korngrenzenschädigung in einer Kupferlegierung unter Kriechbeanspruchung* (Geschäftszeichen FE 933/1-1, FE 933/1-2, EG 101/13-1 und EG 101/13-2) und durch das Doktorandenprogramm der BAM hinweisen.

Zusammenfassung

Mit dem Ziel, die auf der Ebene der Kornstruktur ablaufenden Prozesse mit in die Beschreibung des Kriechverhaltens polykristalliner Werkstoffe einzubeziehen, wurde in der vorliegenden Arbeit zunächst die Schädigungsentwicklung einer einzelnen Korngrenze untersucht. Hierfür wurde eine spezielle Simulationsmethode verwendet, deren Lösungsansatz auf holomorphen Funktionen basiert. Die für die Simulationen berücksichtigten Mechanismen umfassten insbesondere Nukleation, Wachstum durch Korngrenzendiffusion, Zusammenwachsen und Schrumpfen bis zum vollständigen Sintern von Korngrenzenporen. Auf Grundlage der Simulationsergebnisse konnte ein vereinfachtes Porositätsmodell entwickelt werden, welches die Korngrenzenschädigung durch zwei Zustandsvariablen und die zeitliche Entwicklung durch eine Mechanismen-orientierte Ratenformulierung beschreibt. Um den Einfluss von Korngrenzen in kontinuumsmechanischen Betrachtungen von Polykristallen berücksichtigen zu können, wurde ein Grenzflächenmodell erarbeitet, welches sowohl Schädigung entsprechend dem vereinfachten Porositätsmodell als auch Korngrenzengleiten in Abhängigkeit von einer phänomenologischen Korngrenzenviskosität umfasst. Darüber hinaus wurde ein mikromechanisches Polykristallmodell entwickelt, welches es im Rahmen von Finite-Elemente-Simulationen erlaubt, das Kriechverhalten unter Einbeziehung der Gefügestruktur eines polykristallinen Werkstoffes zu simulieren. Dabei werden die Deformationen einzelner Körner durch ein viskoplastisches Einkristallmodell und die Korngrenzen durch das entwickelte Grenzflächenmodell beschrieben. Die Gefügestruktur wird durch ein Finite-Elemente-Modell abgebildet, wobei die Korngrenzen durch kohäsive Elemente modelliert werden. Durch Auswertung experimenteller Kriechdaten konnte das Polykristallmodell für eine Kupfer-Antimon-Legierung bei einer Temperatur von 823 K kalibriert werden. Die Anpassung des Einkristallmodells erfolgte dabei anhand der Kriechraten von reinen Kupfereinkristallproben. Die experimentelle Erfassung der Korngrenzenabgleitung und der Korngrenzenporosität für grobkörnige Kupfer-Antimon-Proben konnten hingegen zur Anpassung des Grenzflächenmodells genutzt werden. Das kalibrierte Polykristallmodell wurde abschließend in Kombination mit künstlich erzeugten Kornstrukturen genutzt, um zum einen numerische und modellierungstechnische Einflüsse auf die Simulationsergebnisse zu untersuchen. Dabei zeigte sich, dass die Vernetzungsfineinheit nur zu einer vergleichsweise geringen Beeinflussung des makroskopischen Kriechverhaltens führt. Aufgrund des nahezu inkompressiblen Deformationsverhaltens des Einkristallmodells war aber die Nutzung spezieller Kontinuumselementtypen notwendig, um das Auftreten von Volumenlocking zu verhindern. Zum anderen konnte das Kriechverhalten polykristalliner Werkstoffe, zu welchem insbesondere die versagensrelevante Schädigungsentwicklung zählt, für verschiedene Material- und Belastungsparameter analysiert werden. Speziell für die betrachtete Kupfer-Antimon-Legierung zeigte sich, dass das Kriechverhalten durch Korngrenzengleiten geprägt war. Insbesondere die Spannungsumlagerungen an den Korngrenzen waren vergleichbar mit dem Verhalten für ungehindertes Korngrenzengleiten. Darüber hinaus deuteten Simulationen für mehrachsige Belastungszustände darauf hin, dass die Schädigungsentwicklung maßgeblich durch die maximale Hauptspannung und die von Mises-Spannung beeinflusst wird.

Abstract

In order to include the processes on the scale of the grain structure into the description of the creep behaviour of polycrystalline materials, the damage development of a single grain boundary has been initially investigated in the present work. For this purpose, a special simulation method has been used, whose resolution procedure based on holomorphic functions. The mechanisms taken into account for the simulations include nucleation, growth by grain boundary diffusion, coalescence and shrinkage until complete sintering of grain boundary cavities. These studies have then been used to develop a simplified cavitation model, which describes the grain boundary damage by two state variables and the time-dependent development by a mechanism-oriented rate formulation. To include the influence of grain boundaries within continuum mechanical considerations of polycrystals, an interface model has been developed, that incorporates both damage according to the simplified cavitation model and grain boundary sliding in dependence of a phenomenological grain boundary viscosity. Furthermore a micromechanical model of a polycrystal has been developed that allows to include a material's grain structure into the simulation of the creep behaviour by means of finite element simulations. Thereby, the deformations of individual grains are expressed by a viscoplastic single crystal model and the grain boundaries are described by the proposed interface model. The grain structure is represented by a finite element model, in which the grain boundaries are modelled by cohesive elements. From the evaluation of experimental creep data, the micromechanical model of a polycrystal has been calibrated for a copper-antimony alloy at a temperature of 823 K. Thereby, the adjustment of the single crystal model has been carried out on the basis of creep rates of pure copper single crystal specimens. The experimental determination of grain boundary sliding and grain boundary porosity for coarse-grained copper-antimony specimens, on the other hand, have been used for the adjustment of the interface model. The calibrated model has finally been used in combination with artificially generated grain structures to investigate influences resulting from numerical and modelling issues. It was found that the mesh size has only a relatively small influence on the macroscopic creep behaviour. But because of the nearly incompressible deformation behaviour of the single crystal model, the use of special purpose continuum element types was necessary to avoid the occurrence of volumetric locking. Also the creep behaviour of polycrystalline materials, which includes the damage development leading to failure, has been analysed for different material and loading parameters. Especially for the copper-antimony alloy under consideration, it becomes evident that the creep behaviour was affected by grain boundary sliding. In particular, stress redistributions at the grain boundaries were comparable to the behaviour of free grain boundary sliding. Furthermore, simulations for multiaxial loading conditions indicated that the damage development is significantly influenced by the maximum principal stress and the von Mises stress.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	V
Zusammenfassung	VII
Abstract	IX
Inhaltsverzeichnis	XI
Symbolverzeichnis	XIII
1 Einleitung	1
2 Stand der Kenntnisse	3
2.1 Kriechen von metallischen Werkstoffen	3
2.2 Korngrenzenschädigung	8
2.2.1 Kriechporennukleation	9
2.2.2 Schädigungsentwicklung	11
2.3 Korngrenzengleiten	15
2.4 Korngrenzenschädigung in polykristallinen Mikrostrukturen	16
3 Ziel der Arbeit	19
4 Untersuchungen zum Kriechschädigungsverhalten einer einzelnen Korngrenze	21
4.1 Simulationsmethode für Korngrenzenporosität	21
4.1.1 Porenwachstum durch Korngrenzendiffusion	22
4.1.2 Modellierung der Porositätsentwicklung	32
4.1.3 Dimensionslose Formulierung der Gleichungen	37
4.2 Simulation von Porositätsentwicklungen	38
4.2.1 Relevanter Parameterbereich	38
4.2.2 Simulationsergebnisse	41
4.3 Entwicklung eines vereinfachten Porositätsmodells	45
4.3.1 Wahl von globalen Schädigungsvariablen	45
4.3.2 Entwicklungsgleichungen für globale Schädigungsvariablen	46
4.3.3 Porenwachstum	48
4.3.4 Zusammenwachsen von Poren	49
4.3.5 Direktes Sintern neuer Poren	50
4.3.6 Finales Porositätsmodell	53
4.4 Betrachtung von Porenschrumpfen	56
4.4.1 Angepasste dimensionslose Formulierung der Gleichungen	56
4.4.2 Simulation von Porenschrumpfen	58
4.4.3 Sinterrate für Porenschrumpfen	59
4.5 Porositätsentwicklung unter variablen Spannungen	62
4.6 Diskussion der Ergebnisse	65

5	Entwicklung eines mikromechanischen Polykristallmodells	67
5.1	Deformationsverhalten einzelner Körner	67
5.2	Deformations- und Schädigungsverhalten von Korngrenzen	69
5.2.1	Deformationsbeschreibung einer Korngrenze	69
5.2.2	Kohäsionsmodell für eine durch Poren geschädigte Korngrenze	70
5.3	Polykristalline Mikrostruktur als Finite-Elemente-Modell	75
5.3.1	Geometrische Beschreibung gekrümmter Korngrenzen	76
5.4	Diskussion der Ergebnisse	82
6	Beschreibung des Kriechverhaltens einer Kupfer-Antimon-Legierung	85
6.1	Experimentelle Kriechschädigungsdaten	85
6.1.1	Material- und Probenherstellung	86
6.1.2	Kriechversuche	87
6.1.3	Kornstruktur und Korngrenzenschädigung in Kupfer-Antimon-Proben	88
6.1.4	Bestimmung von Oberflächendeformationen für Kupfer-Antimon-Proben	91
6.1.5	Experimentelle Ergebnisse	93
6.2	Anwendung des mikromechanischen Polykristallmodells	100
6.2.1	Bestimmung von Materialparametern für das Einkristallmodell	100
6.2.2	Finite-Elemente-Modelle der Minikriechproben	101
6.2.3	Bestimmung einer phänomenologischen Korngrenzenviskosität	103
6.2.4	Beschreibung der Korngrenzenschädigung	106
6.3	Diskussion der Ergebnisse	111
7	Kriechschädigungsentwicklung in Polykristallen	119
7.1	Erzeugung von periodischen polykristallinen Finite-Elemente-Modellen	120
7.2	Einfluss der Vernetzung auf Simulationsergebnisse	124
7.2.1	Idealisierte hexagonale Kornstruktur	125
7.2.2	Periodische Voronoi-Struktur	131
7.3	Untersuchungen zum Kriechschädigungsverhalten	138
7.3.1	Spannungsabhängigkeit im einachsigen Zugversuch	140
7.3.2	Einfluss der Korngrenzenviskosität	143
7.3.3	Ausblick auf mehrachsige Belastungszustände	149
7.4	Diskussion der Ergebnisse	152
8	Zusammenfassende Schlussbetrachtung	157
A	Berechnung von Volumenwachstumsraten	161
B	Zufällige Kristallorientierungen	165
	Literaturverzeichnis	167
	Veröffentlichungen	181
	Lebenslauf	183

Symbolverzeichnis

Al		Aluminium
Ar		Argon
Cu		Kupfer
H ₂		Molekularer Wasserstoff
Sb		Antimon
SiO ₂		Siliciumdioxid
$t+\Delta t(\dots)$		Wert von (\dots) zum Zeitpunkt $t + \Delta t$
$t(\dots)$		Wert von (\dots) zum Zeitpunkt t
$(\dots)^*$		Ableitung oder Rate der Größe (\dots) bezüglich der mit t_{Ref} normierten Zeit (siehe Abschnitt 4.1.3)
$\widehat{(\dots)}$		Der mittels a_{Ref} , σ_{Ref} und t_{Ref} normierte Wert der Größe (\dots) (siehe Abschnitt 4.1.3)
$(\dots)^\diamond$		Ableitung oder Rate der Größe (\dots) bezüglich der mit t_{Ref} normierten Zeit (siehe Abschnitt 4.4.1)
$\overline{(\dots)}$		Der mittels a_{Ref} , σ_{Ref} und t_{Ref} normierte Wert der Größe (\dots) (siehe Abschnitt 4.4.1)
A		Kriechkonstante in (4.31)
A		Parameter in (2.1)
$A_{l,0}$	m ²	Kumulierte Schnittflächen von Korngrenzenporen an der Probenoberfläche vor einem Kriechversuch
$A_{l,C}$	m ²	Kumulierte Schnittflächen von Korngrenzenporen an der Probenoberfläche nach einem Kriechversuch
$A_{l,\text{Sim},k}, A_{l,C,k}$	m ²	Simulierter und experimentell bestimmter Wert der kumulierten Schnittfläche von Korngrenzenporen A_l für die k -te Minikriechprobe
$A_{l,\text{Sim}}$	m ²	Aus Simulationen bestimmte kumulierte Schnittfläche von Korngrenzenporen an der Probenoberfläche
A_l	m ²	In einem Schliiffbild sichtbare kumulierte Schnittfläche von Korngrenzenporen
Δa	m	Porenradiuswachstumsinkrement
$\dot{\underline{a}}$	m s ⁻¹	Vektor mit radialen Porenwachstumsraten
\underline{a}	m	Vektor mit Porenradien
a_{Ref}	m	Referenzlänge (siehe Abschnitt 4.4.1)
a_{Ref}	m	Referenzlänge (siehe Abschnitt 4.1.3)
\bar{A}_l	m ²	Über die Probendicke gemittelter Wert von A_l
$\delta \underline{a}$	m	Vektorielle Änderung der Porenradien \underline{a}

\dot{a}	m s^{-1}	Radiale Porenwachstumsrate
\dot{a}_i	m s^{-1}	Radiale Porenwachstumsrate der i -ten Pore einer Porenanordnung
$\overset{\circ}{\bar{a}}$		Die mittels \bar{a}_{Ref} und \bar{t}_{Ref} normierte radiale Porenwachstumsrate
$\overset{*}{\bar{a}}$		Die mittels \widehat{a}_{Ref} und \widehat{t}_{Ref} normierte radiale Porenwachstumsrate
\bar{a}_{max}		Dimensionslose maximale Porengröße einer idealisierten Porengrößenverteilung (siehe Abb. 4.22b)
\widehat{A}		Dimensionslose Korngrenzfläche in Abschnitt 4.3.4
\widehat{a}_S		Dimensionsloser kritischer Radius in (4.72)
a	m	Porenradius in der Korngrenzfläche
a_{init}	m	Porennukleationsradius
a_{Inter}		Parameter in (5.10)
a_P	$\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$	Parameter der Produktionsrate $\dot{\rho}_P$ (siehe (5.14))
a_i	m	Radius der i -ten Pore in einer Porenanordnung
\underline{b}		Rechte Seite des überbestimmten Gleichungssystems
b	m	Burgers-Vektor
b		Parameter in (5.5)
b_P^1, b_P^2		In Abschnitt 6.2.4 festgelegte Werte für b_P
b_{Inter}		Parameter in (5.10)
b_P		Parameter der Produktionsrate $\dot{\rho}_P$ (siehe (5.14))
C_{LM}		Konstante in (2.3)
C_{MG}		Monkman-Grant-Konstante in (2.2)
C_{11}, C_{12}, C_{44}	GPa	Elastische Konstanten für kubische Kristallsymmetrie
$\overset{(4)}{\mathbf{C}}$	GPa	Steifigkeitstensor vierter Ordnung
\mathbf{c}_i	m	Positionsvektor der i -ten Pore in einer Porenanordnung
c	m	Halber Porenabstand in einer achsensymmetrischen Porenanordnung
c_{Inter}		Parameter in (5.10)
D	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Diffusionskonstante in (2.1)
D_{V0}	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Materialkonstante in (4.31)
D_V	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Volumendiffusionskoeffizient
D_{nn}	MPa m^{-1}	Zug-/Drucksteifigkeit einer Korngrenze in Normalenrichtung
D_{ss}, D_{tt}	MPa m^{-1}	Schersteifigkeiten einer Korngrenze entlang der Tangentialrichtungen
D_{KG}	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Korngrenzendiffusionskoeffizient
$D_{\text{KG}0}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Materialkonstante in (4.4)

$\mathbf{D}(\beta, \rho)$	MPa m^{-1}	Vom Schädigungszustand einer Korngrenze abhängige Steifigkeitsmatrix
\tilde{D}_{KG}	$\text{m}^6 \text{J}^{-1} \text{s}^{-1}$	Temperatur- und materialabhängiger Koeffizient zur Beschreibung von Korngrendiffusion (siehe (2.8) und (4.3))
\hat{D}_{KG}		Der mittels a_{Ref} , σ_{Ref} und t_{Ref} normierte Wert der Größe \tilde{D}_{KG} (siehe (4.44))
d	m	Korngröße in (2.1)
d_0	m	Probendicke vor einem Kriechversuch
d_{Inter}		Parameter in (5.10)
E_{Inter}	GPa	Elastizitätsmodul des korngrenzenahen Materials in (5.10)
$\mathbf{e}_n^{\text{Ecke}}$		Vektor der gemittelten Normalenrichtung an einer Ecke einer diskretisierten Korngrenze
\mathbf{e}_n^i		Vektor der Normalenrichtung des i -ten kohäsiven Elements an einer Ecke einer diskretisierten Korngrenze
\mathbf{e}_L		Äußere Belastungsrichtung
\mathbf{e}_n		Einheitsvektor der Korngrenzenormalenrichtung
$\mathbf{e}_s, \mathbf{e}_t$	m	Orthonormale Einheitsvektoren der Korngrenzentangentialrichtungen
e_{Inter}		Parameter in (5.11)
$F_{\text{Res}}^{\text{KGP}}$		Residuumsfunktion für iterative Anpassung der Parameter des Porositätsmodells
$F_{\text{Res}}^{\text{KGG}}$		Residuumsfunktion für iterative Anpassung der Korngrenzenviskosität
F_{Res}		Residuumsfunktion für iterative Parameteranpassungen
$\mathbf{f}(z)$	MPa	Holomorphe Funktion zur Lösung des Diffusionsrandwertproblems
$\underline{f}(t+\Delta t, \underline{a})$	m	Vektorielle Fehlerfunktion des impliziten Euler-Verfahrens in (4.34)
$\delta \underline{f}$	m	Vektorielle Änderung der Fehlerfunktion \underline{f} in Abhängigkeit von $\delta \underline{a}$
f		Wahrscheinlichkeit für direktes Sintern neu nukleierter Poren (siehe (4.76))
G	GPa	Schubmodul
$g(\theta)$		2π -periodische, reellwertige Funktion
H_{gi}		Wechselwirkungsmatrix zwischen Gleitsystemen
$h(\psi)$		Funktion zur Beschreibung des Porenvolumens in Abhängigkeit vom Dihedralwinkel ψ
\mathbf{I}		Einheitsmatrix
i		Imaginäre Einheit

\mathbf{j}_{KG}	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Korngrenzendiffusionsflussvektor
$\underline{\underline{J}}$		Jacobi-Matrix
K	MPa	Parameter in (5.5)
k	J K^{-1}	Boltzmann-Konstante
k_1		Parameter in (2.4)
k_2		Parameter in (2.5)
L_0	m	Porenrandkurve des kreisförmigen Korngrenzenbereiches S_0 (siehe Abb. 4.2)
L_i	m	Porenrandkurve der i -ten Pore in einer Porenanordnung
LM		Larson-Miller-Parameter in (2.3)
\mathcal{L}	m	Diffusionslänge aus [Ric79]
l	m	In einem Schliiffbild sichtbare Korngrenzenlänge
l_0	m	Kumulierte Korngrenzenlänge an der Probenoberfläche vor einem Kriechversuch
l_i	m	Mit dem i -ten Integrationspunkt assoziierte sichtbare Korngrenzenlänge
M_1		Endwert einer Summe in (4.19)
M_2		Endwert einer Summe in (4.19)
\mathbf{m}_g		Gleitrichtung
$\underline{\underline{M}}$		Koeffizientenmatrix des überbestimmten Gleichungssystems
N_E		Anzahl an kohäsiven Elementen an einer Ecke einer diskretisierten Korngrenze
$N_{l,0}$		Korngrenzenporenanzahlen an der Probenoberfläche vor einem Kriechversuch
$N_{l,C}$		Korngrenzenporenanzahlen an der Probenoberfläche nach einem Kriechversuch
$N_{l,\text{Sim},k}, N_{l,C,k}$		Simulierter und experimentell bestimmter Wert der Korngrenzenporenanzahl N_l für die k -te Minikriechprobe
$N_{l,\text{Sim}}$		Aus Simulationen bestimmte Korngrenzenporenanzahl an der Probenoberfläche
N_l		In einem Schliiffbild sichtbare Korngrenzenporenanzahl
N_{S_0}		Anzahl an Poren in einer Porenanordnung
$N_{\hat{S}_0}^{\text{max}}$		Maximale Porenanzahl in einer Simulation
\mathbf{n}_S		Aus dem ungeschädigten Korngrenzenbereich herauszeigender Normalenvektor
\mathbf{n}_{KG}		Lokaler Normalenvektor einer Korngrenzenfläche
\mathbf{n}_g		Normalenvektor einer Gleitebene
$\Delta N_{\hat{S}_0} \Big _{\bar{a} < \bar{a}_{\text{init}}}$		Anzahl an Poren, welche innerhalb eines Zeitinkrements $\Delta \bar{t}$ kleiner als \bar{a}_{init} werden (siehe Abb. 4.22b)

\bar{N}_l		Über die Probendicke gemittelter Wert von N_l
\dot{N}_{S_0}		Porennukleationsrate auf einer Korngrenzenfläche S_0
n		Exponent in (2.1)
n		Parameter in (5.5)
P		Wahrscheinlichkeit
p		Exponent in (2.1)
Q		Anzahl an Auswertungspunkten
Q		Parameter in (5.5)
Q_V	J mol^{-1}	Aktivierungsenergie für Volumendiffusion
Q_{GG}		Anzahl an Punkten für die Auswertung von (4.16) mittels (4.22) und (4.27)
Q_{KG}	J mol^{-1}	Aktivierungsenergie für Korngrenzendiffusion
Q_c	J mol^{-1}	Aktivierungsenergie für Kriechen in (2.4) und (2.5)
Q_{L_0}		Anzahl an Auswertungspunkten in (4.25) und für (4.26)
Q_{L_i}		Anzahl an Auswertungspunkten in (4.24)
\mathbf{Q}^i		Rotationsmatrix für das i -te kohäsive Element an einer Ecke einer diskretisierten Korngrenze
$q(\omega)$		Funktion des geschädigten Flächenanteils in (4.62)
R	m	Radius des kreisförmigen Korngrenzenbereiches S_0 (siehe <i>Abb. 4.2</i>)
R_0	MPa	Parameter in (5.5)
R_g	MPa	Schwellwert für isotrope Verfestigung in (5.5)
$\mathbf{R}(\omega^i, \varphi^i)$		Rotationsmatrix bezüglich der Rotationsachse ω^i und dem Rotationswinkel φ^i
R_{th}	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$	Universelle Gaskonstante
\hat{r}		Dimensionslose Entfernung vom Porenzentrum (siehe (4.71))
r	m	Betrag der komplexen Zahl z
S	m^2	Ungeschädigte Korngrenzenfläche
S_0	m^2	Gesamte Korngrenzenfläche
S_S	m^2	Geschädigte Korngrenzenfläche
$S_{KG.0}$	m^2	Gesamte Korngrenzenfläche im undeformierten Zustand
∂S	m	Rand der ungeschädigten Korngrenzenfläche S
T	K, °C	Temperatur
T_s	K, °C	Schmelztemperatur
\mathbf{t}	MPa	Spannungsvektor an einer Korngrenze
Δt	s	Zeitinkrement
$\overline{t_{\text{Ref}}}$	s	Referenzzeit (siehe Abschnitt 4.4.1)
$\widehat{t_{\text{Ref}}}$	s	Referenzzeit (siehe Abschnitt 4.1.3)
t	s	Zeit

t_f	s	Bruch- bzw. Versagenszeit
$\mathbf{u}^-, \mathbf{u}^+$	m	Verschiebungsvektoren eines Knotenpaares, welches sich auf gegenüberliegenden Randflächen eines periodischen FE-Modells befindet
$\mathbf{u}^{\text{Korn } i}$	m	Für $i = 1, 2$ Verschiebungen von materiellen Punkten der jeweils angrenzenden Körner entlang der Korngrenze
$\mathbf{u}_O^{\text{Ecke}}, \mathbf{u}_U^{\text{Ecke}}$	m	Verschiebungsvektoren des Knotenpaares der angrenzenden Körner an einer Ecke einer diskretisierten Korngrenze
$\mathbf{u}_O^i, \mathbf{u}_U^i$	m	Verschiebungsvektoren des für das i -te kohäsive Element an einer Diskretisierungsecke eingefügten zusätzlichen Knotenpaares
\underline{u}		Vektor mit den reellen Koeffizienten (4.20)
$[[\dot{u}]]_{\text{KGG}}$	m s^{-1}	Korngrenzenabgleichungsrate
$[[\dot{u}]]^{\text{P}}$	m s^{-1}	Korngrenzenaufdickungsrate
$[[\dot{u}]]^{\text{P}*}$	m s^{-1}	Abschätzung der Korngrenzenaufdickungsrate (siehe (4.74))
$[[\hat{u}]]^{\text{P}*}$		Die mittels $a_{\widehat{\text{Ref}}}$ und $t_{\widehat{\text{Ref}}}$ dimensionslos gemachte Abschätzung der Korngrenzenaufdickungsrate $[[\dot{u}]]^{\text{P}*}$
$[[\hat{u}]]^{\text{P}*}$		Die mittels $a_{\widehat{\text{Ref}}}$ und $t_{\widehat{\text{Ref}}}$ dimensionslos gemachte Abschätzung der Korngrenzenaufdickungsrate $[[\dot{u}]]^{\text{P}*}$
$[[u_n]]$	m	Komponente des Verschiebungssprunges normal zur Korngrenze
$[[u_s]], [[u_t]]$	m	Komponenten des Verschiebungssprunges tangential zur Korngrenze
$[[u]]_{\text{KGG}}$	m	Korngrenzenabgleichung
$[[u]]_{\text{KGG}}^{\text{Exp}}$	m	Experimenteller Abgleichungswert an einer Korngrenze
$[[u]]_{\text{KGG}}^{\text{Exp.k.i}}$	m	Experimentell bestimmter Wert der Korngrenzenabgleichung $[[u]]_{\text{KGG}}$ der i -ten Korngrenze der k -ten Minikriechprobe
$[[u]]_{\text{KGG}}^{\text{Sim.k.i}}$	m	Simulierter Wert der Korngrenzenabgleichung $[[u]]_{\text{KGG}}$ der i -ten Korngrenze der k -ten Minikriechprobe
$[[\mathbf{u}]]$	m	Verschiebungssprung
$[[\mathbf{u}]]^{\text{el}}$	m	Elastischer Anteil des Verschiebungssprunges
$[[\mathbf{u}]]^{\text{inel}}$	m	Inelastischer Anteil des Verschiebungssprunges
$[[\mathbf{u}]]_{\text{KGG}}$	m	Lokaler Verschiebungssprungvektor tangential zur Korngrenzenfläche
$[[u]]^{\text{P}}$	m	Korngrenzenaufdickung durch Poren

$\llbracket u \rrbracket_0^P$	m	Die sich aus den Anfangswerten β_0 und ρ_0 ergebende Korngrenzenaufdickung
u		Parameter in (2.4)
u_1, u_2	m	Komponenten des Verschiebungsfeldes auf der Probenoberfläche in <i>Abb. 6.4</i>
V_S	m^3	Korngrenzenporenvolumen
V_i	m^3	Volumen der i -ten Pore in einer Porenanordnung
$V_{K,0}$	m^3	Gesamtvolumen der Körner im undeformierten Zustand
\dot{V}_i	$m^3 s^{-1}$	Volumenwachstumsrate der i -ten Pore einer Porenanordnung
v		Parameter in (2.5)
$X_{i,j}$	MPa	Realteil des komplexwertigen Koeffizienten $Z_{i,j}$
$\mathbf{x}^-, \mathbf{x}^+$	m	Ortsvektoren eines Knotenpaares, welches sich auf gegenüberliegenden Randflächen eines periodischen FE-Modells befindet, bezüglich der Ausgangskonfiguration
x	m	Realteil der komplexen Zahl z
x		Skalierungsfaktor für Kriechkurven in <i>Abb. 6.5</i>
x_1, x_2	m	Koordinaten auf der Probenoberfläche in <i>Abb. 6.4</i>
x_i	m	Komponenten des Ortsvektors \mathbf{x}
$Y_{i,j}$	MPa	Imaginärteil des komplexwertigen Koeffizienten $Z_{i,j}$
y	m	Imaginärteil der komplexen Zahl z
$Z_{i,j}$	MPa	Komplexwertige Koeffizienten in (4.18)
z	m	Komplexe Zahl
α_P	m^{-2}	Materialabhängiger Parameter in (4.30)
$\hat{\alpha}_P$		Der mittels $\widehat{t_{\text{Ref}}}$ normierte Wert der Größe α_P (siehe (4.45))
β		Schädigungsvariable für den Porositätszustand einer Korngrenze (entspricht der Korngrenzenaufdickung pro mittlerem Porenabstand)
β_0		Anfangswert für die Schädigungsvariable β
β_i		Wert der Schädigungsvariable β am i -ten Integrationspunkt
$\beta_{k,i}^{\text{Sim}}, \beta_{k,i}^{\text{Modell}}$		Simulierter und durch das Porositätsmodell bestimmter Wert der Schädigungsvariable β im i -ten Zeitschritt der k -ten Simulation
$\dot{\beta}$	s^{-1}	Änderungsrate der Schädigungsvariable β
$\overset{\circ}{\beta}$		Die mittels $\widehat{t_{\text{Ref}}}$ normierte Änderungsrate der Schädigungsvariable β
$\overset{*}{\beta}$		Die mittels $\widehat{t_{\text{Ref}}}$ normierte Änderungsrate der Schädigungsvariable β

$\dot{\gamma}_g$	s^{-1}	Scherrate des g -ten Gleitsystems
γ_{KG}	$J\ m^{-2}$	Spezifische Oberflächenenergie der freien Porenoberfläche
γ_S	$J\ m^{-2}$	Spezifische Oberflächenenergie der Korngrenze
$\widehat{\gamma}_S$		Der mittels $\widehat{\sigma}_{Ref}$ normierte Wert der Größe γ_S (siehe (4.44))
$\Delta\delta$	m	Breite eines Auswertungsgebietes
δ	m	Korngrenzendicke
δ_1	m	Entfernung zur Korngrenzenposition
δ_1	m	Mindestabstand zwischen Porenrand und dem Rand des kreisförmigen Korngrenzenbereiches S_0
δ_2	m	Entfernung zu den Endpunkten einer Korngrenze
δ_2	m	Mindestabstand zwischen jeweils zwei Porenrändern
$\delta_{A.ZW}$	m	Kritische Entfernung für das Zusammenwachsen zweier Poren
δ_{gi}		Kronecker-Delta
E_K		Der aus den Deformationen der Körner resultierende makroskopische Kriechdehnungsanteil in Belastungsrichtung (siehe (7.2))
E_{KGG}		Der aus Korngrenzengleiten resultierende makroskopische Kriechdehnungsanteil in Belastungsrichtung (siehe (7.3))
$\dot{\epsilon}$	s^{-1}	Kriechdehnrate
$\dot{\epsilon}_S$	s^{-1}	Stationäre Kriechrate in <i>Abb. 2.1</i> und (2.1)
$\dot{\epsilon}_\infty$	s^{-1}	Makroskopische Kriechrate, welche in (4.31) entsprechend dem Nortonschen Kriechgesetz ausgedrückt wird
$\dot{\epsilon}$	s^{-1}	Rate des Dehnungstensors
$\dot{\epsilon}^{el}$	s^{-1}	Rate des elastischen Dehnungstensors
$\dot{\epsilon}^{pl}$	s^{-1}	Rate des plastischen Dehnungstensors
ϵ		Kriechdehnung
ϵ_f		Bruch- bzw. Versagensdehnung
ϵ_∞		Akkumulierte Kriechdehnung in den angrenzenden Körnern eines idealen Bikristalls (siehe Abschnitt 4.2.2)
ϵ_{ij}		Komponenten des Dehnungstensors
\mathbf{E}		Makroskopischer Dehnungstensor
ϵ		Dehnungstensor
η		Verhältnis von Porenradius \widehat{a} zum kritischen Radius \widehat{a}_S
$\eta_{KGG}^1, \eta_{KGG}^2$	$MPa\ m^{-1}\ s$	In Abschnitt 6.2.4 festgelegte Werte für η_{KGG}
η_{KGG}	$MPa\ m^{-1}\ s$	Korngrenzenviskosität
θ		Argument der komplexen Zahl z

A_k	MPa	Reelle Koeffizienten ($k = 1, \dots, N_{S_0}$) in (4.17)
κ	m	Krümmungsradius
κ_{krit}	m	Kritischer Porenkrümmungsradius (siehe (2.7))
μ	J	Chemisches Potential
$\dot{\nu}_g$	s^{-1}	Rate der inneren Variable ν_g
ν_g		Innere Variable pro Gleitsystem innerhalb des Einkristallmodells
$\dot{\rho}$	$m^{-2} s^{-1}$	Änderungsrate der Porendichte
$\dot{\rho}_A$	$m^{-2} s^{-1}$	Anihilationsrate der Porendichte
$\dot{\rho}_{A.ZW}$	$m^{-2} s^{-1}$	Anihilationsrate der Porendichte für das Zusammenwachsen von Poren
$\dot{\rho}_P$	$m^{-2} s^{-1}$	Produktionsrate der Porendichte
$\dot{\rho}_{A.S}$	$m^{-2} s^{-1}$	Anihilationsrate der Porendichte für das Sintern von Poren
$\frac{\dot{\rho}}{\bar{\rho}}$		Die mittels a_{Ref} und t_{Ref} normierte Änderungsrate der Porendichte
$\frac{\dot{\rho}^*}{\bar{\rho}^*}$		Die mittels a_{Ref}^* und t_{Ref}^* normierte Änderungsrate der Porendichte
$\bar{\rho}_a$		Höhe einer idealisierten Porengrößenverteilung (siehe Abb. 4.22b)
ρ	m^{-2}	Porendichte (Anzahl an Poren pro Korngrenzenfläche)
ρ_0	m^{-2}	Anfangswert für die Schädigungsvariable ρ
ρ_i	m^{-2}	Wert der Schädigungsvariable ρ am i -ten Integrationspunkt
$\hat{\rho}_{k,i}^{\text{Sim}}, \hat{\rho}_{k,i}^{\text{Modell}}$		Simulierter und durch das Porositätsmodell bestimmter Wert der Schädigungsvariable ρ im i -ten Zeitschritt der k -ten Simulation
$\Sigma_I, \Sigma_{II}, \Sigma_{III}$	MPa	Hauptspannungen von Σ mit $\Sigma_I \geq \Sigma_{II} \geq \Sigma_{III}$
Σ_P	MPa	Makroskopischer hydrostatischer Spannungsanteil
Σ_V	MPa	Makroskopische von Mises-Spannung
$\text{Sp}(\Sigma)$	MPa	Spur von Σ
$\sigma_{hc}(z)$	MPa	Komplexes Pendant zu $\sigma_h(z)$
$\dot{\sigma}$	MPa s^{-1}	Rate des Spannungstensors
σ	MPa	Spannungstensor
Σ	MPa	Makroskopischer Spannungstensor
$\bar{\sigma}_n^{\text{GG}}$		Dimensionslose Schwellspannung für Porenwachstum (siehe (5.15))
σ	MPa	Skalare Spannung
σ_0	MPa	Partikuläre Lösung der Differentialgleichung (4.5)
σ_{TS}	MPa	Temperaturabhängige Zugfestigkeit in (2.4) und (2.5)
σ_P	MPa	Parameter der Produktionsrate $\dot{\rho}_P$ (siehe (5.14))

σ_{KGG}	MPa	Auf eine Korngrenze einwirkende Schubspannung
$\sigma_{\text{KGG}}^{\text{Sim}}$	MPa	Simulierte Schubspannung an einer Korngrenze
σ_h	MPa	Harmonische Funktion zur Lösung des Diffusionsrandwertproblems
$\sigma_n^{\text{ref1}}, \sigma_n^{\text{ref2}}$	MPa	Referenzspannungen (7.4) und (7.5) für die auf eine Korngrenze einwirkende Normalspannung
σ_s, σ_t	MPa	Spannungskomponenten tangential zur Korngrenze
σ_{ij}	MPa	Komponenten des Spannungstensors
σ_n	MPa	Spannungskomponente senkrecht zur Korngrenze
σ_F	MPa	Facetten-Hauptspannung
σ_{F2}	MPa	Alternative Facetten-Hauptspannung
σ_∞	MPa	Auf eine Korngrenze einwirkende Normalspannung
σ_∞	MPa	Makroskopische Zugspannung in (2.8)
$\sigma_{\infty k}$	MPa	Spannungsniveaus ($k = 1, \dots, 5$) für Porositätsuntersuchungen
$\overline{\sigma_{\text{Ref}}}$	MPa	Referenzspannung (siehe Abschnitt 4.4.1)
$\widehat{\sigma_{\text{Ref}}}$	MPa	Referenzspannung (siehe Abschnitt 4.1.3)
σ_i^{Rand}	MPa	Porenrandspannung der i -ten Pore in einer Porenanordnung
$\widehat{\sigma}_n$		Dimensionslose Normalspannungsverteilung in der ungeschädigten Korngrenzenfläche (siehe (4.71))
τ_g	MPa	Entlang eines Gleitsystems wirkende Schubspannung
φ^i		Rotationswinkel für das i -te kohäsive Element an einer Ecke einer diskretisierten Korngrenze
$\varphi_1, \Phi, \varphi_2$	°	Euler-Winkel nach der Definition von Bunge [Bun68]
χ_i		Fitparameter ($i = 1, \dots, 5$) für das vereinfachte Porositätsmodell (siehe (4.78) bis (4.90) und (4.101) bis (4.114))
ψ	°	Dihedralwinkel
Ω	m ³	Atomvolumen
ω^i		Rotationsachse für das i -te kohäsive Element an einer Ecke einer diskretisierten Korngrenze
ω		Der durch Poren geschädigte Flächenanteil einer Korngrenze
ω_k		Spezifische geschädigte Flächenanteile von Porenanordnungen ($k = 1, \dots, 3$)
Ω		Vollständig geschädigter Korngrenzenflächenanteil in Abschnitt 7
$\widehat{\Omega}$		Dimensionslose Kreisringfläche in Abschnitt 4.3.4

1 Einleitung

Die Einsatzzeiträume von hochtemperaturbeanspruchten Bauteilen sind in vielen Fällen durch die zeitabhängige Entwicklung plastischer Deformationen sowie die bis zum vollständigen Versagen voranschreitende Schädigung des Werkstoffes begrenzt. Dieses als Kriechen bezeichnete Werkstoffverhalten tritt insbesondere bei metallischen Werkstoffen auf, welche in vielfältiger Weise in technischen Anwendungen eingesetzt werden. Die dabei verwendeten Materialien müssen mitunter extremsten thermomechanischen Belastungen standhalten.

So werden beispielsweise Turbinenschaufeln in stationären Gasturbinen durch das in die Turbine geleitete Heißgas mit Temperaturen von bis zu $1\,400\text{ °C}$ [GW09] sowie durch die Fliehkräfte infolge der Rotation stark belastet. Die thermischen Belastungen sind dabei derartig hoch, dass ein Werkstoff ohne eine aufwendige Kühlung schmelzen würde. Entsprechend ergeben sich für stationäre Gasturbinen begrenzte Einsatzzeiträume, welche beispielsweise für eine Siemens SGT-600 Gasturbine zwischen 120 000 und 180 000 äquivalenten Betriebsstunden liegen [Nav13].

Auch die Einsatzbedingungen von Komponenten, welche in konventionellen Kraftwerken im Rahmen der Dampferzeugung eingesetzt werden, führen zu Kriechbeanspruchungen der jeweils verwendeten Werkstoffe [Sch13]. Die derzeitigen Einsatzzeiträume dieser Komponenten liegen dabei in einigen Fällen oberhalb von 30 Jahren [SKKYSO10; NKUK11], wobei je nach Anwendung Temperaturen zwischen 550 °C und $1\,000\text{ °C}$ erreicht werden.

Aber auch bei vergleichsweise niedrigen Temperaturen können Kriechprozesse, welche sich dann jedoch über deutlich größere Zeiträume erstrecken, zu Deformationen und Schädigung führen. Ein Beispiel hierfür sind die für die geplante Endlagerung abgebrannter Brennelemente in einer unterirdischen Lagerstätte zum Einsatz kommenden Behälter [AHVSNL03; RSAHS11; RASHLS12; RSALHS13], welche über einen Zeitraum von 100 000 Jahren einen Austritt radioaktiver Stoffe verhindern sollen. Dabei wird davon ausgegangen, dass die Temperatur der Behälter während der ersten 1 000 Jahre aufgrund der Nachzerfallswärme auf bis zu 90 °C ansteigen kann.

Da Kriechen in metallischen Werkstoffen nicht verhindert, sondern lediglich die zeitliche Entwicklung durch Verwendung spezieller Hochtemperaturwerkstoffe, wie beispielsweise gerichtet erstarrte und einkristalline Werkstoffe, verlangsamt werden kann, stellt die Berücksichtigung des Kriechverhaltens einen wichtigen Punkt für die Bewertung von Einsatzzeiträumen dar. Den genannten Beispielen sowie weiteren technischen Anwendungen ist dabei gemein, dass die Beschreibung des Langzeitkriechverhaltens oft anhand von Labordaten erfolgt, welche gegenüber den tatsächlichen Einsatzbedingungen für erhöhte thermomechanische Belastungen innerhalb kürzerer Versuchszeiten gewonnen werden. Da für die Übertragung des Kriechverhaltens meist phänomenologische Ansätze genutzt werden, ist die Vorhersage des Werkstoffverhaltens umso schwieriger, je größer der jeweils betrachtete Extrapolationszeitraum ist. Speziell für die Beschreibung von Langzeitkriechvorgängen ist es somit von Vorteil, wenn die in einem Werkstoff ablaufenden Deformations- und Schädigungsprozesse, gegebenenfalls auch nur in vereinfachter Form, innerhalb von Modellen berücksichtigt werden.

Mechanismen-orientierte Modelle stellen daher einen interessanten Ansatz für die Beschreibung des Kriechverhaltens dar. Die resultierenden Modellgleichungen besitzen jedoch meist eine komplexere Form und für die Anwendung kann eine aufwendigere Implementierung erforderlich sein. Dennoch ist davon auszugehen, dass Mechanismen-orientierte Modelle eine sinnvolle Beschreibung von Kriechvorgängen unter Belastungsbedingungen ermöglichen, welche experimentell nicht oder nur mit großem Aufwand untersucht werden können. Speziell für die Übertragung des in Laborversuchen beobachtbaren Deformations- und Schädigungsverhaltens auf konkrete Bauteile in technischen Anwendungen, welche oft durch mehrachsige Spannungszustände beansprucht werden, kann dies von Vorteil sein. Soll für die Modellierung des Kriechverhaltens auch der Einfluss der Werkstoffmikrostruktur berücksichtigt werden, so erfordert dies in den meisten Fällen die Betrachtung von mehreren mikromechanischen Mechanismen, welche sich innerhalb der Kornstruktur gegenseitig beeinflussen können.

In der vorliegenden Arbeit liegt der Fokus speziell auf polykristallinen Werkstoffen, welche unter hohen Temperaturen und durch vergleichsweise geringe Lasten beansprucht werden. Für diese Bedingungen sind die an den Korngrenzen ablaufenden Prozesse von besonderer Bedeutung. Das Kriechverhalten wird zudem durch das Zusammenwirken unterschiedlicher Deformations- und Schädigungsmechanismen geprägt. Hierzu zählen in erster Linie zeitabhängige plastische Deformationen einzelner Körner, Schädigung durch Korngrenzenporen und Korngrenzengleiten. Experimentell konnten diese Mechanismen bereits für Kupferwerkstoffe beobachtet werden. Es erscheint daher sinnvoll, die Entwicklung eines mikromechanisch motivierten Modells zur Beschreibung des Kriechverhaltens polykristalliner Werkstoffe an den bereits veröffentlichten Daten für Kupferwerkstoffe auszurichten.

2 Stand der Kenntnisse

2.1 Kriechen von metallischen Werkstoffen

Für metallische Werkstoffe bezeichnet der Begriff des Kriechens zeitabhängige Prozesse in Folge einer konstanten Belastung, welche üblicherweise sowohl mit einer bleibenden Deformation als auch einer Schädigung des Werkstoffes einhergehen. Ein entsprechendes Werkstoffverhalten kann praktisch über den gesamten Spannungsbereich (auch für Belastungen unterhalb der Fließgrenze) beobachtet werden und ist zudem stark temperaturabhängig. In *Abb. 2.1* sind schematisch die zeitliche Entwicklung der Kriechdehnung ϵ über der Zeit t sowie die zugehörigen Kriechdehnraten $\dot{\epsilon}$ (auch Kriechraten genannt) in Abhängigkeit von der Kriechdehnung dargestellt, so wie sie typischerweise in einachsigen Kriechversuchen beobachtet werden. Dabei entspricht es der gängigen Ansicht [Rie87; Bür06], dass der Verlauf einer solchen Kriechkurve entsprechend ihrer Form, aber vor allem wegen der zugrunde liegenden Prozesse in drei Bereiche aufgeteilt werden kann.

Der primäre Kriechbereich (Bereich I) ist durch eine schnelle und deutliche Abnahme der Kriechrate bestimmt, was sich durch eine zunehmende Verfestigung infolge des Aufbaus eines Versetzungsnetzwerkes innerhalb einer Probe erklären lässt. Im sekundären Kriechbereich (Bereich II), welcher meist den wesentlichen Anteil der gesamten Lebensdauer eines Bauteils ausmacht, ist eine näherungsweise stationäre Kriechrate $\dot{\epsilon}_S$ zu beobachten, die sich durch das gemeinsame Auftreten gegensätzlicher Mechanismen erklären lässt. So wirkt beispielsweise die Vernichtung von Versetzungen durch Klettern oder Diffusion von Zwischengitteratomen einem weiteren Aufbau des Versetzungsnetzwerkes entgegen. In der Folge bleibt die Anzahl an mobilen Versetzungen ungefähr konstant, so dass die Bewegung dieser Versetzungen einen gleichmäßigen Beitrag zur Gesamtdeformation beisteuert. Es ist aber auch möglich, dass anstelle eines ausgeprägten stationären Kriechbereiches lediglich ein Mini-

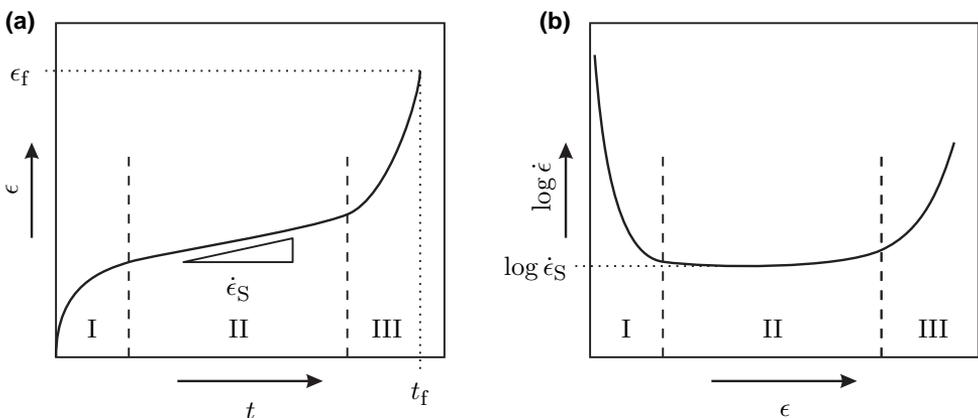


Abb. 2.1: Schematische Darstellungen der Kriechdehnung ϵ über der Zeit t und der logarithmierten Kriechdehnraten $\log \dot{\epsilon}$ über der Kriechdehnung ϵ , wie sie typischerweise in einachsigen Zugversuchen beobachtet werden.

mum in der Kriechrate und somit ein direkter Übergang aus dem primären in den tertiären Kriechbereich zu beobachten ist, so wie beispielsweise in [WBB05] für Kupfer. Im tertiären Kriechbereich (Bereich III) kommt es schließlich zu einem Anstieg der Kriechrate in Folge einer zunehmenden Schädigung des Werkstoffes, wobei die Vereinigung mehrerer kleinerer Defekte (z. B. Kriechporen) zu einem makroskopischen Riss letztendlich das finale Versagen des gesamten Bauteils zur Bruchzeit t_f und bei der Bruchdehnung ϵ_f einleitet. Sowohl die Entstehung als auch das Wachstum von Defekten können dabei bereits im primären und sekundären Kriechbereich stattfinden.

Wie in [Rab65] diskutiert, ist es für die Behandlung von Kriechprozessen sinnvoll, den betrachteten Versuchs- bzw. Einsatzzeitraum in Abhängigkeit von den herrschenden Bedingungen (Last, Temperatur, etc.) zu klassifizieren. Während für kurze bis mittlere Kriechbeanspruchungen, z. B. in Gasturbinen oder Flugzeugtriebwerken, der primäre Kriechbereich und die variierenden Einsatzbedingungen im Vordergrund stehen, erfolgt die Behandlung von langen Kriechbeanspruchungen, z. B. von Rohrleitungen in Kraftwerken mit Einsatzzeiträumen von über 30 Jahren, zumeist im Rahmen einer stationären Betrachtung.

Obwohl die experimentellen Kriechkurven für verschiedene Kombinationen aus mechanischer Belastung und Versuchstemperatur oft eine ähnliche Form aufweisen, so hängt es trotzdem von den jeweiligen Bedingungen ab, welche mikromechanischen Mechanismen aktiv sind und die resultierenden Deformationen erzeugen. Bei der Beschreibung des Werkstoffverhaltens zeigt sich daher [Hol08], dass in Abhängigkeit von den aktiven Mechanismen jeweils unterschiedliche mathematische Formulierungen die Kriechdeformationen am besten beschreiben.

So wird beispielsweise der Nortonsche Potenzansatz oft angewendet, um im Falle eines durch Versetzungskriechen bestimmten Werkstoffverhaltens die stationäre Kriechrate in Abhängigkeit von der Spannung auszudrücken. Für besonders hohe Spannungen lässt sich hingegen das Deformationsverhalten oft nur noch unzureichend durch einen Potenzansatz beschreiben (im Englischen als *Power-Law-Breakdown* bezeichnet) und es wird die Verwendung eines Exponentialansatzes empfohlen [Hol08]. Die Temperaturabhängigkeit wird hingegen fast immer durch einen Arrhenius-Ansatz modelliert. Die größten Einflussfaktoren für die stationäre Kriechrate können zudem genutzt werden, um eine generalisierte Form [MD00; Muk02]

$$\dot{\epsilon}_S = A \frac{DGb}{kT} \left(\frac{b}{d} \right)^p \left(\frac{\sigma}{G} \right)^n \quad (2.1)$$

für $\dot{\epsilon}_S$ zu formulieren, wobei D eine geeignete Diffusionskonstante, G der Schubmodul, b der Burgers-Vektor, k die Boltzmann-Konstante, T die absolute Temperatur, d die Korngröße, p der Korngrößenexponent, σ die aufgebrachte Spannung und n der Spannungsexponent sind. Aus (2.1) ist auch ersichtlich, dass die Hall-Petch-Beziehung unter Kriechbedingungen nicht gilt, sondern dass stattdessen ein grobkörniger Werkstoff einen größeren Widerstand gegen zeitabhängige Deformation aufweist. Durch die Wahl geeigneter Parameter in (2.1) (z. B. D oder n) kann meist das in experimentellen Versuchen beobachtete Verhalten abgebildet werden [MD00]. Jedoch können unterschiedliche Mechanismen ein ähnliches Werkstoffverhalten hervorrufen, so dass eine eindeutige Zuordnung der Parameterwerte zu einzelnen Mecha-

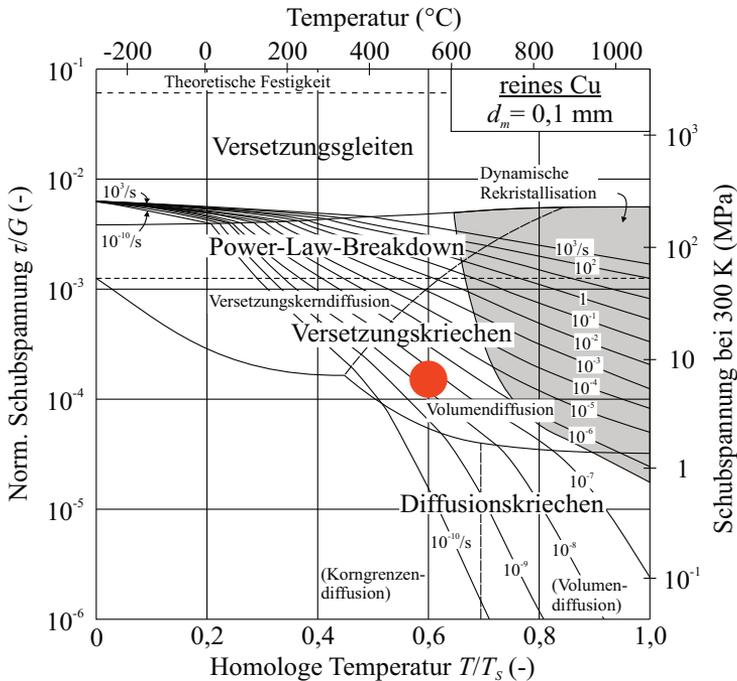


Abb. 2.2: Darstellung der Verformungsmechanismenkarte für reines Kupfer mit einer Korngröße von $100\ \mu\text{m}$ entsprechend der Daten aus [FA82] (Bild übernommen aus [Ott11]). Der rote Punkt markiert die in [Ott11] untersuchten Versuchsparameter, für welche ebenfalls die in Abschnitt 6 präsentierten experimentellen Daten gewonnen wurden.

nismen nur bedingt möglich ist. Eine Veränderung der Parameterwerte in Abhängigkeit von Spannung und Temperatur wird zumeist als Wechsel des dominierenden Kriechmechanismus gedeutet.

Den Arbeiten von Frost und Ashby [FA82] ist es zu verdanken, dass für einige Werkstoffe sogenannte Verformungsmechanismenkarten existieren. In Abb. 2.2 ist eine solche Karte für Kupfer dargestellt, in welcher der jeweils dominierende Verformungsmechanismus in Abhängigkeit von der mechanischen Belastung und der Temperatur aufgetragen ist. Aus Abb. 2.2 ist beispielsweise zu erkennen, dass für Kupfer das Langzeitkriechverhalten bei hohen Temperaturen (homologe Temperatur¹ $> 0,5$) und verhältnismäßig kleinen Lasten durch Versetzungskriechen und Diffusionskriechen bestimmt wird. Beide Mechanismen führen, wie in Abb. 2.3 für die Körner A und B angedeutet, zu einer Streckung der Körner, einerseits durch Versetzungsbewegungen und andererseits durch diffusen Materialtransport.

Das Diffusionskriechen basiert auf der Wanderung von Leerstellen, wobei die Leerstellenkonzentration vom Spannungszustand abhängt und einen Materialfluss aus Bereichen mit Druckspannungen hin zu Bereichen mit Zugspannungen bewirkt. Zudem unterscheidet man be-

¹Als homologe Temperatur bezeichnet man die auf die absolute werkstoffspezifische Schmelztemperatur T_s bezogene absolute Temperatur T .

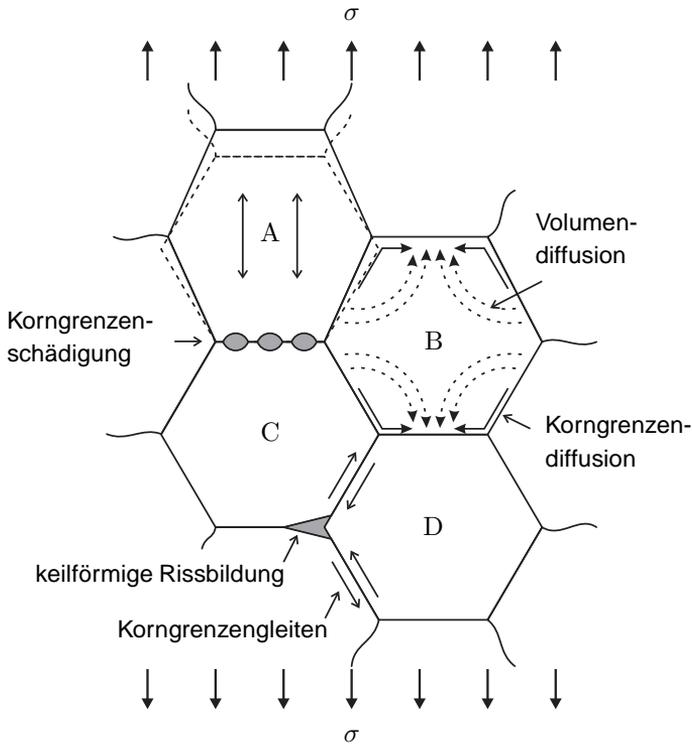


Abb. 2.3: Schematische Darstellung des Zusammenwirkens verschiedener mikromechanischer Mechanismen in einem Polykristall unter Kriechbeanspruchung.

zätzlich zweier unterschiedlicher Diffusionsmechanismen [Bür06]: Beim sogenannten Coble-Kriechen findet die Diffusion entlang von Korngrenzen statt (Korngrenzendiffusion) und ist, verglichen mit dem zweiten Diffusionsmechanismus durch Volumendiffusion (Gitterdiffusion), üblicherweise bereits bei kleineren Temperaturen aktiv. Da mit steigender Temperatur mehr Diffusionswege innerhalb der Körner eines Polykristalls zur Verfügung stehen, ist das Diffusionskriechen für höhere Temperaturen durch Volumendiffusion bestimmt, was auch als Nabarro-Herring-Kriechen bezeichnet wird.

Neben dem Deformationsverhalten infolge von Kriechprozessen spielt auch das Versagen eines Werkstoffes eine große Rolle bei der Auslegung eines Bauteils. Durch empirische Erkenntnisse ist dabei schon seit langem bekannt [Rie87; KH03], dass Kriechverformungen und -versagen in vielen Fällen gekoppelt sind. So wurde die Gültigkeit der Monkman-Grant-Beziehung

$$\dot{\epsilon}_S \cdot t_f = C_{MG} \quad (2.2)$$

bereits für viele Werkstoffe bestätigt, worin C_{MG} eine Konstante für einen breiten Spannungs- und Temperaturbereich ist. Die Monkman-Grant-Beziehung entspricht einem Dehnungskriterium für das Versagen, so dass man das Produkt aus stationärer Kriechrate $\dot{\epsilon}_S$ und Bruchzeit

t_f auch als einen kritischen Dehnungswert ansehen kann. Ein Vergleich mit experimentellen Bruchdehnungen ist jedoch nur sinnvoll, wenn Deformationsbeiträge durch primäres und tertiäres Kriechen vernachlässigt werden können.

Es existieren aber auch Ansätze, die Bruchzeit nicht in Abhängigkeit vom Deformationsverhalten zu beschreiben. Ein Beispiel hierfür ist der spannungsabhängige Larson-Miller-Parameter LM, welcher über die empirische Beziehung

$$LM = T (\log t_f + C_{LM}) \quad \text{mit} \quad C_{LM} \approx 20, \text{ unabhängig vom Material,} \quad (2.3)$$

lediglich eine Beschreibung der Temperaturabhängigkeit erlaubt und dies auch nur für experimentell beobachtete Ergebnisse. Daher ist von einer Extrapolation von Bruchzeiten durch diese Beschreibungsmethode abzuraten.

Als Erklärung für die Beobachtung einer minimalen Kriechrate (direkter Übergang vom primären zum tertiären Bereich) anstelle eines ausgeprägten stationären Kriechbereiches, wurde in [WBB05] das Zusammenwirken zweier gegensätzlicher Mechanismen vorgeschlagen. Dabei ist der eine Mechanismus für ein verfestigendes Deformationsverhalten und der andere ist für einen kontinuierlichen Schädigungsfortschritt verantwortlich. Diese Überlegung bildete die Grundlage für die Formulierung der Wilshire-Gleichungen [WB07; WB08]

$$\left(\frac{\sigma}{\sigma_{TS}} \right) = \exp \left\{ -k_1 \left[t_f \exp \left(\frac{-Q_c}{R_{th}T} \right) \right]^u \right\}, \quad (2.4)$$

$$\left(\frac{\sigma}{\sigma_{TS}} \right) = \exp \left\{ -k_2 \left[\dot{\epsilon}_S \exp \left(\frac{Q_c}{R_{th}T} \right) \right]^v \right\}, \quad (2.5)$$

worin σ_{TS} die temperaturabhängige Zugfestigkeit, Q_c die Aktivierungsenergie für Kriechen, R_{th} die universelle Gaskonstante und k_1 , k_2 , u sowie v anzupassende Materialparameter sind. Die Verwendung von zwei Gleichungen für die Beschreibung der stationären Kriechrate und der Bruchzeit erlaubt eine gute Abbildung von experimentellen Ergebnissen [WW10] und zudem die Extrapolation von Bruchzeiten [HA09], da die Wilshire-Gleichungen als eine Mechanismen-orientierte Methode angesehen werden können.

Ein weiterer Weg zur Beschreibung des Werkstoffversagens besteht in der direkten Einbindung der Schädigungsentwicklung in die konstitutive Beschreibung des Deformationsverhaltens im Rahmen der Kontinuumsschädigungsmechanik, welche ihre Anfänge in den Arbeiten von Kachanov und Rabotnov hat [Kac99; Rab65]. Wie in [HLMKDLN87; Lem92] detailliert beschrieben, werden dabei die konstitutiven Gleichungen durch zusätzliche innere Variablen, welche den Schädigungszustand des Werkstoffes charakterisieren, und zugehörige Entwicklungsgleichungen erweitert.

In den meisten Fällen handelt es sich um phänomenologische Schädigungsvariablen, welche keinen direkten Bezug zu physikalischen Schädigungsvariablen oder metallographischen Schädigungsmaßen, wie beispielsweise der Porenanzahl oder -größe, haben. Von Vorteil bei einer solchen phänomenologischen Beschreibung ist aber, dass ein komplexer Schädigungszustand durch tensorielle Schädigungsvariablen approximiert werden kann und so die Beschreibung einer anisotropen Schädigungsentwicklung ermöglicht wird.

Die Entstehung anisotroper Schädigung unter Kriechbeanspruchungen ist vor allem für die Behandlung mehrachsiger Belastungen von Bedeutung, da die räumliche Verteilung von Kriechporen und anderer Defekte vom Spannungszustand abhängen kann. Für Kupfer ist beispielsweise bekannt [Hay72; Lec86; LKC05], dass Kriechschädigung bevorzugt entlang von Ebenen senkrecht zur maximalen Hauptspannung entsteht und sich das Kriechbruchverhalten ebenfalls gut in Abhängigkeit von der maximalen Hauptspannung beschreiben lässt. Für eine ebenfalls untersuchte Aluminiumlegierung [Hay72; Lec86] zeigte sich hingegen, dass das Kriechbruchverhalten gut durch die von Mises-Spannung beschrieben werden kann.

Am Beispiel von Kupfer lässt sich darüber hinaus zeigen, dass für die Beschreibung der Kriechschädigungsentwicklung unter nicht proportionalen Belastungen [THL81; MO81] ein anisotropes Schädigungsmaß benötigt wird, welches die Schädigungsakkumulation entlang verschiedener Ebenen, jeweils immer senkrecht zur aktuellen maximalen Hauptspannung, abbilden kann. Für mehrachsige Belastungen ist daher zu beobachten [YXWT07], dass es kein vereinheitlichtes Modell gibt, welches Kriechdeformationen und -bruch für beliebige Werkstoffe beschreiben kann. Vielmehr hängt es vom jeweils dominierenden Mechanismus ab, ob sich das Werkstoffverhalten in Abhängigkeit von einem bestimmten Spannungsmaß [NEE189; Hol08] beschreiben lässt.

2.2 Korngrenzenschädigung

In polykristallinen Werkstoffen wird sehr oft beobachtet, dass Kriechporen entlang von Korngrenzen, welche senkrecht zur Lastrichtung orientiert sind (siehe *Abb. 2.3* - zwischen den Körnern *A* und *C*), auftreten [EEN189]. Darüber hinaus zeigte der in [EEN189] untersuchte 12%Cr-Mo-V Stahl einerseits ein duktiler Bruchverhalten mit deutlichen inelastischen Deformationen sowie Porenwachstum durch Deformation des Matrixmaterials bei hohen Spannungen und andererseits ein sprödebrüchähnliches Verhalten mit kleinen Bruchdehnungen sowie Porenbildung und -wachstum entlang von Korngrenzen bei niedrigen Spannungen.

Für Diffusionskriechen, welches bei niedrigen Spannungen dominiert, konnte für Kupfer mit vor Beginn eines Versuchs erzeugten Poren beobachtet werden [HG82], dass die Kriechdehnung proportional zum relativen Porenvolumenwachstum ist. Bei höheren Spannungen setzt sich die Gesamtdehnung hingegen aus Porenwachstum und zeitabhängiger Deformation des Matrixmaterials zusammen.

Zur Erfassung und Charakterisierung der Korngrenzenschädigung, unabhängig vom Deformationszustand, können metallografische Kennwerte wie beispielsweise der *A*-Parameter² oder vom *A*-Parameter abgeleitete Kennwerte [Egg91] verwendet werden. Darüber hinaus konnte durch eine genauere Analyse der metallografisch erfassten Korngrenzenschädigung in Abhängigkeit vom Korngrenzencharakter (insbesondere der Missorientierung³), welcher

²Der *A*-Parameter wurde in Arbeiten von B. J. Cane et al. entwickelt (siehe Diskussionen in [Egg91; MLS92; LMS94]) und ist als das Verhältnis der Anzahl an geschädigten Korngrenzen zur gesamten Anzahl an Korngrenzen, welche jeweils eine vorgegebene Referenzlinie schneiden, definiert.

³Die Missorientierung beschreibt den geometrischen Unterschied zwischen zwei ansonsten gleichen Kristallstrukturen. Oft wird dieser Unterschied durch eine Rotation um eine geeignete Drehachse ausgedrückt [Ott11], wobei der jeweilige Rotationswinkel als Maß für die Missorientierung genutzt wird.

durch orientierungsabbildende Rasterelektronenmikroskopie (gebräuchliche englische Abkürzung: EBSD = Electron Backscatter Diffraction) bestimmt wurde, gezeigt werden [Ott11; OPFE12], dass Korngrenzen mit einer höheren Korngrenzenenergie stärker schädigen.

Metallografische Kennwerte können aber auch genutzt werden, wie beispielsweise in [NC83; Rie89], um eine Vorhersage über die Restlebensdauer zu treffen. Hierzu muss die weitere Entwicklung des metallografischen Kennwertes bis hin zu einem kritischen Wert, bei dem das Versagen eintritt, durch eine geeignete Methode bestimmt werden. Oftmals wird die Schädigungsentwicklung dabei durch die skalare Schädigungsvariable aus der Kachanov-Rabotnov-Kriechschädigungstheorie beschrieben [Egg91; MLS92; LMS94] und anschließend mittels einer geeigneten Relation zum metallografischen Kennwert in Bezug gesetzt. Diese Vorgehensweise trägt der Problematik Rechnung, dass gerade phänomenologische Beschreibungsansätze Schädigungsmaße verwenden, welche aufgrund einer fehlenden physikalischen oder geometrischen Bedeutung nicht direkt messbar sind, und dass metallografische Kennwerte zwar einen empirischen Hintergrund haben, oft jedoch keine Methoden zur direkten Beschreibung der Entwicklung verfügbar sind.

Im Rahmen einer zerstörungsfreien Schädigungsanalyse eines Bauteils ermöglicht die metallografische Bestimmung von Schädigungskennwerten jedoch nur die Charakterisierung an der Oberfläche. Daher wurden auch Ansätze verfolgt [HMF90; MH97; JK02], um den Schädigungszustand eines Werkstoffes durch Messungen von Ultraschallgeschwindigkeiten zu bestimmen. Dabei konnte gezeigt werden [ES92], dass derartige Messungen und metallografische Schädigungskennwerte den Einfluss von Kriechdefekten im Material übereinstimmend abbilden können.

Eine Methode zur zerstörungsfreien Charakterisierung der Kriechschädigung in einem dreidimensionalen Bereich wird durch die Computertomographie bereitgestellt. Der Einsatz von Synchrotronstrahlung [Pin09; Dzi10; BDSIMBKP11] ermöglicht dabei die Detektierung von Hohlräumen bis in den μm -Bereich. Die Identifikation von Korngrenzenporen ist jedoch schwierig, da die Verläufe der Korngrenzen nicht durch die herkömmlichen Tomographieverfahren erfasst werden können. Oftmals werden geclusterte Porenanordnungen senkrecht zur Lastrichtung als Korngrenzenporen interpretiert. In [GTAKSMSHYUST12] wurde daher auf die tomografische Erfassung der Kriechschädigung folgend die Mikrostruktur des Werkstoffes durch orientierungsabbildende Rasterelektronenmikroskopie innerhalb eines Serienschchnittverfahrens erfasst, wobei eine verstärkte Porenbildung in der Nähe von inneren Grenzflächen beobachtet wurde.

2.2.1 Kriechporennukleation

Durch welche Mechanismen Kriechporen auf Korngrenzen entstehen, ist bis heute nicht eindeutig geklärt. Eine ausführliche Diskussion zu verschiedenen Aspekten der Kriechporennukleation wurde in [KH03] geführt, so dass hier nur die wichtigsten Erkenntnisse kurz erläutert werden.

Experimentell wird in den meisten Fällen ein verstärktes Auftreten von Poren auf Korngrenzen, welche senkrecht zur Lastrichtung orientiert sind, beobachtet, wobei sich die Anzahl proportional zur makroskopischen Kriechdehnung entwickelt [Dys83] und die Nukleation neuer

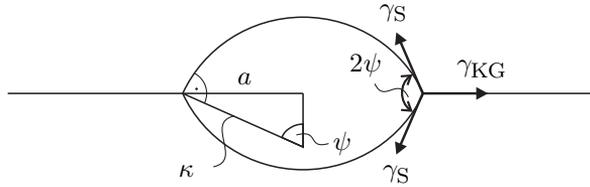


Abb. 2.4: Abbildung der linsenförmigen Gleichgewichtsform einer Korngrenzenpore.

Poren über die gesamte Lebensdauer hinweg beobachtet wird [Rie87; OSY11]. Ausscheidungen scheinen zudem gerade in Legierungen ein bevorzugter Ort für Porennukleation zu sein [FTB75]. Am häufigsten werden Leerstellenakkumulation [Rie87; KH03; NOO12], Aufstauung von Versetzungen an Korngrenzen oder Ausscheidungen [FTB75; Rie87; KH03] und Korngrenzengleiten [WD78; Rie87; CP90; KH03] als Mechanismen für die Entstehung benannt.

Eine typische linsenförmige Korngrenzenpore mit Dihedralwinkel ψ , Krümmungsradius κ und Radius in der Korngrenzenfläche $a = \kappa \sin \psi$ ist in *Abb. 2.4* dargestellt. Der Dihedralwinkel am Rand der Pore ergibt sich dabei aus dem Kräftegleichgewicht der Oberflächenspannungen gemäß

$$\gamma_{KG} = 2\gamma_S \cos \psi, \quad (2.6)$$

worin γ_{KG} und γ_S die spezifischen Oberflächenenergien der Korngrenze und der freien Porenoberfläche sind. Die abgebildete Porenform entspricht einem Gleichgewichtszustand, welcher sich einstellt, wenn lokale Krümmungsunterschiede auf der freien Porenoberfläche durch diffusiven Materialtransport ausgeglichen werden. Bei der Erzeugung einer neuen Pore durch einen Nukleationsmechanismus muss entsprechend der lokalen Bedingungen eine Pore mit hinreichender Mindestgröße entstehen. Wird eine neue Pore erzeugt, so muss Arbeit aufgewendet werden, um die entstehende freie Oberfläche mit spezifischer Oberflächenenergie γ_S zu erzeugen. Im Falle der Leerstellenakkumulation kann die benötigte Arbeit durch eine Zugspannung σ_n normal zur Korngrenze verrichtet werden, wobei sich aus einer Ansammlung von Leerstellen in Korngrenzennähe ein Porenvolumen mit zugehöriger freier Oberfläche bildet. Durch eine Gleichgewichtsbetrachtung der freien Energie [Rie87], welche beide Arbeitsterme berücksichtigt, kann ein kritischer Porenkrümmungsradius

$$\kappa_{\text{krit}} = \frac{2\gamma_S}{\sigma_n} \quad (2.7)$$

in Abhängigkeit von der Normalspannung σ_n angegeben werden. Für die Erzeugung von Poren mit kleinerem Krümmungsradius würde die durch σ_n verrichtete Arbeit nicht ausreichen. Dieser Argumentation folgend wird angenommen, dass die Aufstauung von Versetzungen an Hindernissen (Korngrenze oder Korngrenzenausscheidung) zu Spannungskonzentrationen führt, welche im Stande sind, die benötigte Arbeit zur Bildung stabiler Poren zu leisten.

Im Falle von Korngrenzengleiten wird davon ausgegangen, dass Absätze auf Korngrenzen als Porenkeime dienen [WD78] oder dass Spannungskonzentrationen an Hindernissen Aus-

gangspunkt neuer Poren sind [Rie87]. Dem Vorschlag, dass eine kontinuierliche Porenbildung aus stochastischem Korngrenzgleiten resultiert [CP90], steht allerdings die Beobachtung entgegen, dass Porennukleation bevorzugt auf Korngrenzen auftritt [KH03], welche senkrecht zur Lastichtung liegen und für welche meist nur wenig Korngrenzgleiten beobachtet wird.

2.2.2 Schädigungsentwicklung

Das Wachstum von Korngrenzenporen unter Kriechbedingungen wird überwiegend auf diffusiven Materialtransport und auf zeitabhängige plastische Deformationen der angrenzenden Körner zurückgeführt [KH03]. Die Betrachtung von diffusivem Porenwachstum geht dabei auf die Arbeiten von Hull und Rimmer [HR59] zurück. Wie in *Abb. 2.5* dargestellt, wird davon ausgegangen, dass ein Materialtransport durch Leerstellendiffusion entlang der Porenoberfläche hin zum Porenrand⁴ und vom Porenrand aus entlang der Korngrenze stattfindet. Durch Ablagerung von Atomen an den angrenzenden Körnern entlang der Korngrenze kommt es zu einem Auseinanderdriften der Körner, sofern sich diese frei bewegen können. Treibende Kraft für die Diffusion ist die normal auf die gesamte Korngrenze wirkende Zugspannung σ_∞ , welche bei Anwesenheit von Korngrenzenporen lokale Gradienten im chemischen Potential entlang der ungeschädigten Korngrenzenfläche hervorruft und somit einen Diffusionsfluss bewirkt.

Um eine Porenwachstumsrate zu bestimmen, wurden in [HR59] die Annahmen getroffen, dass nur gleich große, in einem quadratischen Gitter angeordnete Korngrenzenporen vorhanden sind und dass Oberflächendiffusion sehr viel schneller abläuft als Korngrenzendiffusion. Letzteres bewirkt, dass Poren stets in einer Gleichgewichtsform vorliegen, auch dann, wenn, wie in *Abb. 2.6a* skizziert, der Porenradius um Δa anwächst. Darüber hinaus wurde angenommen, dass die angrenzenden Körner starr sind und die Korngrenze als perfekte Leerstellenquelle fungiert, so dass sich entlang der ungeschädigten Korngrenzenflächen stets ein Vielfaches einer kompletten Atomlage ablagert. Die Diffusionsvorgänge in der Korngrenze

⁴Die linienartige Kontur an der die freie Porenoberfläche an die ungeschädigte Korngrenzenfläche grenzt, wird in der vorliegenden Arbeit als Porenrand bezeichnet. Für eine linsenförmige Pore auf einer ebenen Korngrenze ist der zugehörige Porenrand ein Kreis.

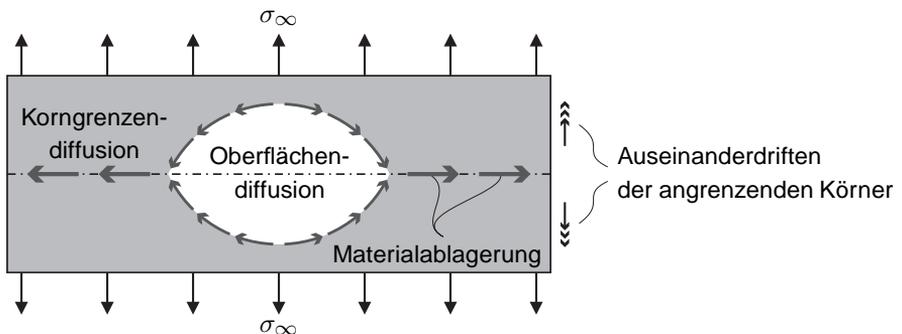


Abb. 2.5: Schematische Darstellung des diffusiven Materialtransports für eine unter Gleichgewichtsbedingungen wachsende Korngrenzenpore.

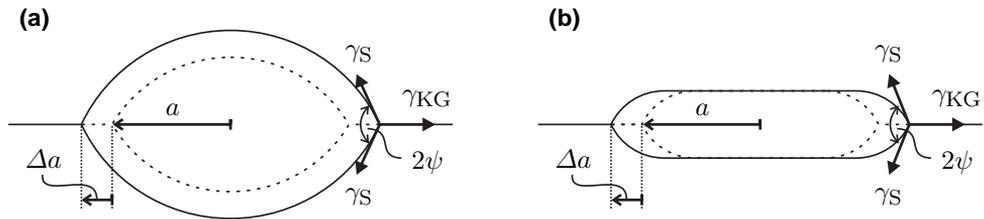


Abb. 2.6: Schematische Darstellung des Gleichgewichtsporenwachstums (a) und des rissartigen Porenwachstums (b). In beiden Fällen wird die Ausbildung einer lokalen Gleichgewichtsform entsprechend (2.6) in der unmittelbaren Nähe zum Porenrand angenommen.

sollen zudem die Massenbilanz und passende Randbedingungen erfüllen. So müssen beispielsweise die lokalen Spannungen in der ungeschädigten Korngrenzfläche mit der über die gesamte Korngrenze wirkenden Spannung σ_∞ in Verbindung gebracht werden. Aufgrund der geometrischen und physikalischen Vereinfachungen ist es möglich, einen analytischen Ausdruck für die Porenwachstumsrate aus der Lösung des Diffusionsrandwertproblems herzuleiten. Durch die Integration der Porenwachstumsrate über die Zeit kann dann eine Versagenszeit bestimmt werden, wobei als Versagenskriterium das Zusammenwachsen zweier benachbarter Poren angenommen wird.

Seit diesem ersten Ansatz wurde die Modellierung des diffusiven Porenwachstums stetig verbessert und erweitert. So wurden zum einen die vereinfachten Randbedingungen aus [HR59] durch physikalische Zusammenhänge ersetzt. Dabei wurde berücksichtigt, dass kein Diffusionsfluss zwischen zwei benachbarten Poren stattfindet [Wee73] (Symmetriebedingung wegen regelmäßiger Porenanordnung) und dass eine Sinterspannung am Porenrand entgegenwirkt [SB75]. Zum anderen wurde auch der Einfluss des Nichtgleichgewichtsporenwachstums untersucht. Unter der Annahme, dass Korngrendiffusion sehr viel schneller ist als Oberflächendiffusion, wurde zunächst der entgegengesetzte Grenzfall zum Gleichgewichtsporenwachstum beschrieben [CKRS79]. In diesem Fall ist die Oberflächendiffusion nicht in der Lage, Krümmungsunterschiede in der Porenoberfläche auszugleichen und es stellt sich ein rissartiges Porenwachstum ein (siehe Abb. 2.6b). Lediglich in der unmittelbaren Nähe des Porenrandes bildet sich aufgrund der kurzen Diffusionswege eine lokale Gleichgewichtsform aus, welche das Kräftegleichgewicht der Oberflächenspannungen erfüllt.

Das in [CKRS79] beschriebene Porenwachstumsverhalten, welches auf einer analytischen Approximation beruht, sowie die sich einstellende Porenform konnten auch durch eine detailliertere Analyse, bei der die zeitliche Entwicklung der Porenform durch ein Finite-Differenzen-Verfahren numerisch bestimmt wurde, bestätigt werden [PN79]. In der Folge wurden ähnliche Finite-Differenzen-Verfahren und Finite-Elemente-Methoden (FE-Methoden) angewendet, um den Einfluss von gekoppelter Oberflächen- und Korngrendiffusion im zweidimensionalen und achsensymmetrischen Fall [MN82], den Einfluss einer von den Kriechdeformationen der umliegenden Körner abhängigen Diffusionslänge [SC87] oder den Einfluss von gekrümmten Korngrenzen und Korngrenzenmigration [KPY00] auf das Porenwachstum zu erfassen. In den meisten Fällen wird dabei ein Verhalten beobachtet, welches zwischen den Grenzfällen des

Gleichgewichtswachstums und des rissartigen Porenwachstums liegt.

Korngrenzenporen können aber nicht nur durch Diffusion wachsen, sondern auch durch plastische Deformationen der angrenzenden Körner [Ric79], wobei oft eine Kopplung beider Mechanismen betrachtet wird. In [BS78; EA79] wurde für die Beschreibung der Kopplung vereinfachend angenommen, dass nur ein begrenzter Bereich der Korngrenze als Leerstellenquelle dient und dass, um eine kompatible Gesamtdeformation zu erzeugen, das Materialverhalten der angrenzenden Körner im übrigen Teil der Korngrenze durch einen Potenzansatz für die Kriechrate beschrieben werden kann. Aus der damit verbundenen Verkürzung des Diffusionsweges resultiert schließlich eine erhöhte Porenwachstumsrate. In [Ric79] wurde die Diffusionslänge

$$\mathcal{L} = \sqrt[3]{\frac{\tilde{D}_{\text{KG}} \sigma_{\infty}}{\dot{\epsilon}_{\infty}(\sigma_{\infty})}} \quad \text{mit} \quad \tilde{D}_{\text{KG}} = \frac{\Omega \delta D_{\text{KG}}}{kT} \quad (2.8)$$

definiert, worin σ_{∞} die makroskopisch wirkende Zugspannung, $\dot{\epsilon}_{\infty}(\sigma_{\infty})$ die resultierende makroskopische Kriechrate, Ω das Atomvolumen, δ die Korngrenzendicke, D_{KG} der Korngrenzendiffusionskoeffizient, k die Boltzmann-Konstante und T die Temperatur sind. Die Kopplung von plastischen Deformationen und Korngrenzendiffusion wird maßgeblich durch \mathcal{L} charakterisiert. Ist \mathcal{L} groß verglichen mit der Porengröße und dem Abstand zwischen zwei Poren, dann ist das Porenwachstum durch Diffusion bestimmt und plastische Deformationen können vernachlässigt werden. Ist \mathcal{L} hingegen klein, so ermöglichen die plastischen Deformationen der angrenzenden Körner eine lokale Akkumulation des durch Diffusion transportierten Materials. Durch eine detaillierte Analyse [NR80], welche beide Mechanismen im Rahmen einer Finite-Elemente-Formulierung berücksichtigte, konnte gezeigt werden, dass, verglichen mit der Wachstumsrate die sich aus der Summe der beiden einzelnen Mechanismen ergeben würde, die Kopplung zu einem schnelleren Porenwachstum führt. In [CA81; LD93] wurden darüber hinaus sowohl Gleichgewichtsporenwachstum als auch rissartiges Porenwachstum jeweils in Abhängigkeit von der sich einstellenden Diffusionslänge \mathcal{L} zur Beschreibung der Schädigungsentwicklung berücksichtigt, wobei ein Wechsel des dominierenden Wachstumsmechanismus während der Schädigungsentwicklung beobachtet wurde.

Die Deformationen des umliegenden Materials beschleunigen aber nicht in jedem Fall das Korngrenzenporenwachstum, sondern nur dann, wenn sich die angrenzenden Körner frei bewegen können. In einem Polykristall müssen aber die verschiedenen mikromechanischen Mechanismen eine kompatible Gesamtdeformation erzeugen, so dass Wechselwirkungen zwischen einzelnen Mechanismen die Schädigungsentwicklung beeinflussen können. Kann das Auseinanderdriften von Körnern nicht durch Deformationen des umliegenden Materials kompensiert werden, so führt dies zu einer Behinderung des Korngrenzenporenwachstums. Bei diesem behinderten Porenwachstum [Dys76; Ric81] wird die Schädigungsentwicklung durch die Geschwindigkeit, mit der das umliegende Material die lokalen Deformationsunterschiede ausgleicht, bestimmt. Die Kompensation des Porenwachstums kann dabei durch unterschiedliche Mechanismen [Tve84], beispielsweise durch elastisch-plastische Deformationen der Körner oder durch Korngrenzengleiten, erfolgen, wobei in vielen Fällen jeweils der langsamste Mechanismus das Schädigungsverhalten prägt.

Darüber hinaus kann auch der Spannungszustand die Entwicklung von Korngrenzenporen beeinflussen. Zum einen wurde ein Absinken von Bruchzeit und -dehnung mit steigendem hydrostatischen Spannungsanteil beim Wachstum von kugelförmigen Poren beobachtet [CA80]. Zum anderen begünstigt eine Zunahme der Mehrachsigkeit den Transport von Material von der Porenoberfläche in die Korngrenzenebene [SN83] und erhöht dadurch die Porenwachstumsraten, wobei der effektive Diffusionsweg nur in geringem Maße eine Rolle spielt. Auf Basis der Simulationsergebnisse konnte in [SN83] eine vereinfachte volumetrische Wachstumsrate angegeben werden, welche im Wesentlichen auf einer angepassten Diffusionslänge innerhalb eines Gleichgewichtswachstumsmodells beruht.

Nutzt man Porenwachstumsmodelle zur Beschreibung des Kriechbruchverhaltens, so zeigt ein Vergleich mit der Kontinuumsschädigungsmechanik deutliche Ähnlichkeiten aber kein exakt übereinstimmendes Verhalten [CA82]. Auf Grundlage dieser Ähnlichkeit kann davon ausgegangen werden, dass die Mechanismen-orientierten Wachstumsraten eine bessere Beschreibung der Schädigungsentwicklung ermöglichen, würde man diese in die Kontinuumschädigungsmechanik einbetten.

Für die Beschreibung der Korngrenzenporosität sind neben dem Porenwachstum auch die Porenanzahl und -anordnung wichtige Faktoren, zumal beides aufgrund von Nukleation und Zusammenwachsen von Poren bestimmten Veränderungen unterworfen ist. Die Berücksichtigung beider Faktoren führt in fast allen Fällen zu geometrisch nicht trivialen Porenanordnungen, was insbesondere die Lösung des Diffusionsrandwertproblems erschwert. Die meisten Porenwachstumsmodelle basieren daher auf der Annahme einer achsensymmetrischen oder einer anderen gleichmäßigen Anordnung von gleich großen Poren. Aus Analysen von Porenwachstumsgeschwindigkeiten für nicht gleichmäßig verteilte Poren auf eindimensionalen Korngrenzen [FHD85; YC90a] und auf zweidimensionalen Korngrenzen [CD88; Wil88; FO09] ist aber bekannt, dass die resultierenden Wachstumsraten im Vergleich mit gleichmäßig angeordneten Poren kleiner sind. Der Effekt ist dabei für stark geclusterte Anordnungen besonders deutlich. In experimentell bestimmten Porenanordnungen [CFDH95] gibt es allerdings keine Hinweise auf eine starke Clusterung. Stattdessen lässt sich die Verteilung der Poren auf einer Korngrenze gut durch einen Hard-Core-Prozess abbilden.

Die Berücksichtigung unterschiedlicher Porengrößen wird in den meisten Fällen durch eine Porengrößenverteilung [XYHD92] oder durch die Betrachtung mehrerer diskreter Poren [WPLKC00; WPC04; FO09] erreicht. Die Beschreibung mittels Porengrößenverteilung liefert direkt statistisch relevante Informationen über den Porositätszustand. Dabei ist jedoch die Beschreibung der zeitlichen Veränderung der Verteilung komplizierter und die Berücksichtigung anderer Effekte, wie beispielsweise das Zusammenwachsen von Poren, kann nur indirekt mittels geeigneter Vereinfachungen erfolgen. Diskrete Porenanordnungen benötigen im Vergleich dazu etwas mehr Nachbereitung, um die entsprechende Korngrenzenporosität repräsentativ zu beschreiben. Zudem sind Untersuchungen, bei denen mehrere Poren betrachtet werden, meist nur durch komplexere numerische Methoden möglich. Dafür ist die Modellierung verschiedener Mechanismen und deren Interaktionen [WPC04] am besten umsetzbar.

Dass das Zusammenwirken verschiedener Mechanismen die Porositätsentwicklung maßgeblich beeinflussen kann, wurde bereits für Porenwachstum und kontinuierliche Porennukleation

gezeigt [FHD86; YC90b], wobei die Entstehung neuer Poren die Porositätsentwicklung dominieren und zu einer schnelleren vollständigen Schädigung einer Korngrenze führen kann. Mittels eines stochastischen Modells [Wil87a; Wil87b], welches Nukleation, Wachstum, Zusammenwachsen und Sintern von achsensymmetrischen Poren berücksichtigt, konnten zudem komplexere zeitliche Schädigungsentwicklungen untersucht werden. Die Ergebnisse zeigten deutlich, dass die Entwicklungen von Porengrößen und Porenanzahlen als gekoppelte Prozesse betrachtet werden müssen. Die Kopplung ergab sich dabei vor allem aus der Abhängigkeit des Zusammenwachsens von der Porenwachstumsgeschwindigkeit.

2.3 Korngrenzengleiten

Unter Korngrenzengleiten wird üblicherweise die relative Bewegung zweier benachbarter Körner tangential zum Verlauf der Korngrenze verstanden. Es handelt sich somit vor allem um einen Deformationsmechanismus, welcher einen signifikanten Anteil an den Gesamtdeformationen eines polykristallinen Werkstoffes ausmachen kann [Lan06]. Dies gilt insbesondere, wenn Diffusionskriechen durch den Nabarro-Herring-Mechanismus das Werkstoffverhalten bestimmt.

In [BTT68] wurde für Zink Bikristalle eine Abnahme der Abgleitungsrate beobachtet, was auf die Entstehung von Unebenheiten entlang einer Korngrenze durch Korngrenzenmigration zurückgeführt wurde. Für polykristallines Kupfer und Messing wurde zudem festgestellt [Raj91], dass, ähnlich wie beim behinderten Porenwachstum, Korngrenzengleiten von den Deformationen des umliegenden Materials abhängt. Darüber hinaus können Korngrenzenpartikel das Abgleiten behindern [MSKM90; MS96]. In [MSKM90; MS96] wurde zudem für einen untersuchten Kupferwerkstoff eine Korrelation zwischen Korngrenzengleiten und der Korngrenzenenergie festgestellt. Für Korngrenzen mit kleinen Energien ergaben sich dabei höhere Widerstände gegen Korngrenzengleiten und der festgestellte Zusammenhang zwischen Korngrenzengleiten und Missorientierung ähnelte dem Zusammenhang zwischen Korngrenzenenergie und Missorientierung.

Versetzungsgleiten innerhalb der angrenzenden Körner wird zudem für Kupferwerkstoffe als eine mögliche Erklärung für das Korngrenzenabgleitungsverhalten betrachtet [Raj91] und darüber hinaus auch als Ursache für die Entstehung von Korngrenzenschädigung angesehen [WD78; Wat83]. Die Entstehung von Spannungskonzentrationen, welche an Korngrenzenunebenheiten (z. B. deformationsbedingte Absätze, Korngrenzenpartikel oder migrationsbedingte Unebenheiten) [Wat83] oder an Tripellinien [Rie87; KH03] auftreten können, gilt dabei als wichtigster Mechanismus für die Schädigungsentwicklung. An Tripellinien führt dies vor allem zu keilförmigen Anrissen von Korngrenzen, welche senkrecht zur Lastrichtung orientiert sind (siehe *Abb. 2.3*).

In [Ash72] wurden verschiedene atomistische Mechanismen, welche für Korngrenzengleiten relevant sind, beschrieben und deren Auswirkungen auf das Werkstoffverhalten diskutiert. Es wurde ein linearer viskoser Zusammenhang zwischen Abgleitungsrate und tangentialer Spannung an einer Korngrenze, charakterisiert durch eine material- und Mechanismen-abhängige Korngrenzenabgleitungsviskosität (auch Korngrenzenviskosität genannt), zur Beschreibung

von Korngrenzengleiten vorgeschlagen. Zur Abschätzung der Korngrenzenviskosität können Abgleichungsvorgänge entlang von nicht ebenen Korngrenzen betrachtet werden [RA71], welche durch einen Ausgleichsmechanismus (z. B. Diffusion oder Korngrenzenmigration) begleitet werden müssen, um eine kompatible Gesamtdeformation zu erzeugen. Dabei bestimmt dann der jeweilige Ausgleichsmechanismus die resultierende Abgleichungsgeschwindigkeit. Ist der Ausgleichsmechanismus beispielsweise rein elastisch, so wird bei konstanter Last die Abgleichungsrate stetig abnehmen, bis ein Gleichgewichtszustand erreicht ist.

Ergebnisse von molekulardynamischen Simulationen zur Untersuchung des Einflusses der aufgewendeten Kraft auf das Abgleichungsverhalten implizieren zudem [QK07], dass es eine Schwellspannung geben könnte, unterhalb welcher kein Korngrenzengleiten stattfindet. Wie anhand der Einflüsse einer Schwellspannung [DBKT08] und heterogener Korngrenzenviskositäten [CBQK09] auf die Fließspannung einer Aluminiumlegierung berichtet wurde, kann Korngrenzengleiten darüber hinaus auch das makroskopische Gesamtverhalten eines Polykristalls beeinflussen.

Die Bedeutung von Korngrenzengleiten für die Kriechschädigungsentwicklung und folglich für die Beschreibung von Kriechbruchzeiten konnte anhand von einfachen Polykristallmodellen demonstriert werden [Tve85; Tve88]. Dabei zeigte sich, dass für ungehindertes Abgleiten (verschwindende Korngrenzenviskosität) an Korngrenzen, welche schräg zur Lastrichtung verlaufen, die Schädigungsentwicklung auf Korngrenzen senkrecht zur Lastrichtung signifikant verstärkt wurde und zu 2,5- bis 6,6-fach kleineren Versagenszeiten führte.

2.4 Korngrenzenschädigung in polykristallinen Mikrostrukturen

Durch die Untersuchung des Porenwachstums von künstlich in einen Kupferwerkstoff eingebrachten Poren konnte gezeigt werden [WMN83], dass für einen polykristallinen Werkstoff nicht die makroskopisch aufgebrachte Last, sondern die lokal an einer Korngrenze wirkende Spannung der ausschlaggebende Faktor für die Entwicklung der Korngrenzenschädigung ist. Somit ist die Kenntnis der auf eine Korngrenze einwirkenden Normalspannung eine wichtige Voraussetzung für die Anwendung von Porenwachstumsmodellen. Anstelle einer einzelnen Korngrenze erfordert dies aber die Betrachtung einer polykristallinen Mikrostruktur, in welcher es durch das Zusammenspiel mehrerer mikromechanischer Mechanismen auch zu zeitlich veränderlichen Spannungsumlagerungen, z. B. infolge von Korngrenzengleiten, kommen kann.

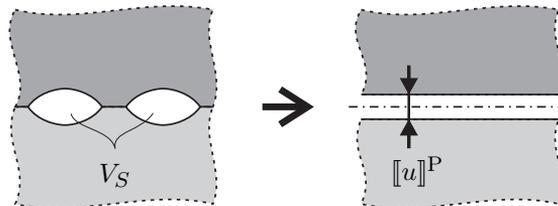


Abb. 2.7: Veranschaulichung des 'smeared out'-Modells aus [GT91], bei dem das Volumen diskreter Poren V_S zu einer kontinuierlichen Korngrenzenaufdickung $[[u]^P$ 'verwischt' wird.

In [GT91] wurde daher eine einfache hexagonale Kornstruktur betrachtet, bei der das Materialverhalten der Körner durch eine Kriechrate entsprechend eines Potenzansatzes bestimmt war. Die Beschreibung der mit einer Korngrenze verbundenen Deformationen, genauer gesagt das Auseinanderdriften der angrenzenden Körner normal zur Korngrenze und das Abgleiten tangential zur Korngrenze, erfolgte dabei durch einen kontinuierlichen Verschiebungssprung⁵. Wie in *Abb. 2.7* angedeutet, entspricht der Anteil des Verschiebungssprunges $[[u]]^P$ senkrecht zur Korngrenze dem aufsummierten Porenvolumen V_S einer diskreten Porenverteilung bezogen auf die gesamte Korngrenzenfläche. In [GT91] wurde dann die Porositätsentwicklung in Abhängigkeit von den sich einstellenden lokalen Normalspannungen durch ein Porenwachstumsmodell und das Verhalten tangential zur Korngrenze durch viskoses Korngrenzengleiten beschrieben. Dabei wurden im Rahmen einer Finite-Elemente-Formulierung sogenannte Korngrenzelemente genutzt [GT91], um die Verschiebungssprünge geometrisch zu beschreiben. Diese Technik erfordert aber eine Diskretisierung der Korngrenzenzone in jedem Zeitinkrement einer Simulation. Dennoch ermöglicht diese Vorgehensweise die Betrachtung von Mikrostrukturen, die aus mehreren, auch unregelmäßig geformten, Körnern bestehen [GT94a; GT94b; GT94c; GOB97; OG97b].

Durch Untersuchung verschiedener Aspekte der Korngrenzenschädigung in Polykristallen konnte festgestellt werden [GT91], dass Korngrenzengleiten die Spannungen auf Korngrenzen senkrecht zur Lastrichtung erhöht und somit die Schädigungsentwicklung beschleunigt. Zudem führt unbehindert Korngrenzengleiten zu verstärkter Schädigung auf Korngrenzen senkrecht zur Lastrichtung, wohingegen die Unterdrückung von Korngrenzengleiten zu einer Verlagerung der Schädigung auf Korngrenzen, welche gegenüber der äußeren Lastrichtung geneigt sind, führt [GT94a]. Weiterhin konnte beobachtet werden, dass heterogene Korngreneigenschaften [GT94b] und unregelmäßige Kornformen [OG97b] zu Spannungserhöhungen auf einzelnen Korngrenzen führen, welche in der Folge schneller schädigen. Dabei war die Schädigung auf kleineren Korngrenzen in der Regel stärker ausgeprägt als auf größeren Korngrenzen. Das Vorhandensein von gekrümmten Korngrenzen führte jedoch in [GT94c] zu einer Vergrößerung der Versagenszeiten, wobei dieser Effekt mit zunehmender Korngrenzenviskosität abnahm.

In [CM04; WA04] wurden, im Gegensatz zur geometrischen Beschreibung von Korngrenzen in [GT94a; GT94b; GT94c; GOB97; OG97b], kohäsive Elemente verwendet, um die Verschiebungssprünge zu modellieren. Bei der Verwendung von kohäsiven Elementen, welche ursprünglich in die Finite-Elemente-Analyse eingeführt wurden, um Rissfortschritt im Rahmen der Bruchmechanik zu beschreiben, entfällt die Notwendigkeit, die Korngrenzenzone in jedem Zeitschritt neu zu diskretisieren, was eine einfache Modellierung komplexerer Kornstrukturen ermöglicht. Dabei wird aber vorausgesetzt, dass die Kornstruktur unverändert erhalten bleibt. Die Betrachtung von Korngrenzenmigration kann daher nicht ohne eine Neuvernetzung erfolgen.

In [BW04] wurde daher eine adaptive Vernetzungsmethode angewendet, um Änderungen in zweidimensionalen Kornstrukturen zu berücksichtigen. Zwar können durch die Vorgehens-

⁵Ein Verschiebungssprung beschreibt im Rahmen einer Kontinuumsformulierung eine diskontinuierliche Relativbewegung entlang einer Grenzfläche. In der vorliegenden Arbeit wird ein Verschiebungssprung genutzt, um die relative Bewegung zweier Körner entlang einer Korngrenze auszudrücken.

weise in [BW04] vergleichsweise viele unterschiedliche Prozesse auf der Ebene der Kornstruktur innerhalb einer Simulationsprozedur betrachtet werden, der numerische Aufwand aufgrund der adaptiven Vernetzung ist jedoch deutlich erhöht.

Mit Blick auf die Bewertung der Kriechschädigungsentwicklung in realen Bauteilen macht es daher Sinn, auch Modellierungen mit vereinfachten Wechselwirkungen zwischen einzelnen Deformations- und Schädigungsmechanismen, wie beispielsweise in [LKM98], zu verwenden, um den Berechnungsaufwand zu begrenzen. Für die Auslegung von Bauteilen wird daher die Simulation der Kriechschädigungsentwicklung in einem Polykristall üblicherweise auch nur an kritischen Stellen einer Konstruktion durchgeführt, so wie es in [Oga12] am Beispiel einer Rohrleitung unter realitätsnahen Belastungen diskutiert wurde.

Da die Mikrostruktur einen signifikanten Einfluss auf das Werkstoffverhalten haben kann, wurden gerade in der jüngeren Vergangenheit verschiedene Ansätze verfolgt, um möglichst realistische Mikrostrukturen innerhalb von Simulationsmethoden zu betrachten. Zum einen wurde die Kornstruktur direkt durch eine auf Synchrotronstrahlung basierenden Tomographie-Methode erfasst [SMCQSZ08; SMCQK09; SC11; SC12]. Hierdurch kann eine Probe sehr detailliert nachmodelliert werden, was einen direkten Vergleich von experimentellen Daten und Simulationsergebnissen ermöglicht. Allerdings ist die Tomographie-Methode durch die Verwendung von Synchrotronstrahlung sehr aufwendig und es können zudem nur verhältnismäßig kleine Proben (Durchmesser $< 1 \text{ mm}$) untersucht werden. Zum anderen wird aber auch versucht, künstliche Mikrostrukturen, sogenannte repräsentative Volumenelemente (RVE), zu erzeugen, welche die zur Beschreibung des Werkstoffverhaltens benötigten charakteristischen Eigenschaften abbilden.

In [GGUD08a; GGUD08b] wurde dabei zunächst eine reale Mikrostruktur durch ein Serienschnittverfahren erfasst und wichtige Kennwerte (z. B. Korngröße, Anzahl an Nachbarkörnern, etc.) statistisch ausgewertet. Anschließend wurde ein Verfahren angewendet, um künstliche Mikrostrukturen zu erzeugen, für welche die statistischen Verteilungen der betrachteten Kennwerte denen der experimentell untersuchten Mikrostruktur entsprachen. Die in [SPHDCBB08] präsentierte Vorgehensweise zur Erzeugung einer realistischen polykristallinen Mikrostruktur basiert ebenfalls auf statistischen Morphologie- und Texturdaten. Im Rahmen der Modellerstellung kann aber zusätzlich eine Mikrostruktur an der Oberfläche eines Modells vorgegeben werden, was eine bessere Vergleichbarkeit von Experimenten und Simulationen ermöglichen soll.

Aufgrund der Ähnlichkeit zu realen Polykristallen wird die Mikrostruktur oft durch eine Voronoi-Struktur⁶ approximiert [WA04; FBS09; MN10; ZKBL12]. In [ZKBL12] wurde dabei eine spezielle Positionierung der Referenzpunkte verwendet, um eine Mikrostruktur mit vorgegebener Korngrößenverteilung zu erzeugen. Für die Betrachtung von Mikrostrukturen im Rahmen der Finite-Elemente-Methode, welche die wohl verbreitetste Simulationsmethode zur Untersuchung von Mikrostrukturen ist, ist zu beachten, dass bei der Vernetzung von komplexeren Mikrostrukturen meist eine höhere Anzahl von verzerrten Elementen im Vergleich zu vereinfachten Mikrostrukturen entstehen [MN10].

⁶Als Voronoi-Struktur bezeichnet man die Unterteilung eines Bereiches in einzelne Zellen ausgehend von einer diskreten Anzahl von Referenzpunkten. Die mit einem Referenzpunkt assoziierte Zelle ergibt sich aus der Menge aller Punkte, deren Entfernung zum Referenzpunkt kleiner ist als die Entfernungen zu allen anderen Referenzpunkten.

3 Ziel der Arbeit

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit soll ein mikromechanisches Modell zur Beschreibung des Kriechverhaltens von polykristallinen Werkstoffen entwickelt werden, welches es erlaubt, das Zusammenwirken mehrerer Mechanismen innerhalb einer konkreten dreidimensionalen Kornstruktur zu simulieren. Trotz der ständig steigenden Berechnungskapazitäten wäre ein Modell, welches sämtliche in einem Polykristall ablaufenden Kriechprozesse einschließt, zu komplex, um das Werkstoffverhalten über hinreichend große Zeiträume zu beschreiben. Die zu berücksichtigenden Mechanismen sollen sich daher am Kriechverhalten von Kupferwerkstoffen unter hohen Temperaturen aber vergleichsweise geringen mechanischen Lasten orientieren. Unter diesen Bedingungen sind vor allem die Deformations- und Schädigungsprozesse an den Korngrenzen von Bedeutung, welche eine voranschreitende Schädigung durch Korngrenzenporen bewirken und somit im Wesentlichen die Zeit bis zum Versagen durch interkristallinen Bruch bestimmen.

Daher soll zunächst das Schädigungsverhalten einer einzelnen Korngrenze untersucht werden, wobei davon ausgegangen wird, dass Korngrenzendiffusion unter den betrachteten Bedingungen der für das Porenwachstum relevante Mechanismus ist. Gegenüber veröffentlichten Studien, welche meist nur eine einzelne Korngrenzenpore unter achsensymmetrischen Bedingungen betrachten, soll hier das zugrunde liegende Diffusionsrandwertproblem für Anordnungen von unterschiedlich großen und ungleichmäßig verteilten Poren gelöst werden. Dies soll es ermöglichen, eine Beeinflussung der Korngrenzenporositätsentwicklung infolge von Wechselwirkungen zwischen den Poren zu erfassen. Dabei muss beachtet werden, dass sich die Porenanordnung aufgrund des Porenwachstums mit der Zeit verändert. Für die Simulation eines vollständigen Porositätsprozesses müssen zudem Porenwachstumsraten, welche sich aus der Lösung des Diffusionsrandwertproblems ergeben, in vielen aufeinanderfolgenden Zeitschritten berechnet werden. Hierzu soll ein auf komplexen Funktionen basierendes Lösungsschema [Owe08; FO09] modifiziert werden, so dass das Diffusionsrandwertproblem für möglichst große Porenanzahlen innerhalb kurzer Berechnungszeiten gelöst werden kann. Das resultierende modifizierte Lösungsschema soll anschließend genutzt werden, um die Schädigungsentwicklung einer Korngrenze für unterschiedliche Belastungen und Materialparameter zu untersuchen.

Um das Schädigungsverhalten von Korngrenzen innerhalb einer polykristallinen Mikrostruktur berücksichtigen zu können, soll, ähnlich wie in den Arbeiten von Van der Giessen et al. [GT91; GT94a; GT94b; GT94c; GOB97; OG97a], ein mikromechanisches Grenzflächenmodell entwickelt werden. Ausgangspunkt hierfür sollen die Ergebnisse der Porositätsuntersuchungen einer einzelnen Korngrenze sein. Darüber hinaus soll auch die Modellierung auf der Ebene der Kornstruktur ähnlich wie in [GT91; GT94a; GT94b; GT94c; GOB97; OG97a] erfolgen. Dabei wird das physikalische Verhalten von Körnern und Korngrenzen zunächst unabhängig voneinander beschrieben. Wechselwirkungen sollen dann durch Betrachtung einer konkreten Kornstruktur berücksichtigt werden, wozu mehrere Körner entlang der Korngrenzen miteinander verbunden werden. Dies soll im Rahmen von FE-Simulationen erfolgen, wozu entsprechende FE-Modelle der Werkstoffmikrostruktur erstellt werden sollen.

Die Implementierung des Polykristallmodells soll mittels des kommerziellen FE-Programmes Abaqus (Dassault Systemes, www.simulia.com) erfolgen, welches auch für die Untersuchungen komplexerer Mikrostrukturen geeignet erscheint. Abaqus bietet dabei Funktionen und Elementtypen, wie beispielsweise kohäsive Elemente, die speziell für die Modellierung der Korngrenzen eingesetzt werden sollen.

Die Anwendung des Polykristallmodells zur Beschreibung des Kriechverhaltens soll schließlich für einen polykristallinen Cu-Sb-Werkstoff demonstriert werden. Dabei soll vor allem eine Strategie zur Anpassung der Materialparameter anhand von verfügbaren experimentellen Daten entwickelt werden. Abschließend soll das für den Cu-Sb-Werkstoff angepasste Modell in weiteren Untersuchungen genutzt werden, um das Kriechverhalten polykristalliner Materialien besser zu verstehen. Dabei ist von besonderem Interesse, inwieweit das makroskopische Kriechverhalten durch Wechselwirkungen unterschiedlicher Mechanismen innerhalb der Kornstruktur beeinflusst wird. Darüber hinaus soll untersucht werden, wie sich makroskopisch mehrachsige Spannungszustände auf die Schädigungsentwicklung und folglich auf die Versagenszeiten auswirken.

4 Untersuchungen zum Kriechschädigungsverhalten einer einzelnen Korngrenze

Um bei der Betrachtung der Kriechschädigungsentwicklung in einem polykristallinen Werkstoff den Einfluss von Korngrenzenschädigung zu berücksichtigen, ist es zunächst zweckmäßig, das Schädigungsverhalten einer einzelnen Korngrenze zu charakterisieren. Dieses ist durch das Zusammenwirken verschiedener Mechanismen bestimmt, zu denen vor allem die Entstehung neuer Korngrenzenporen sowie das Wachsen und Zusammenwachsen vorhandener Poren gehören. Im Folgenden wird eine Simulationsmethode vorgestellt, welche geeignet ist, die Entwicklung einer vollständigen Porenanordnung, bestehend aus einer größeren Anzahl unterschiedlich großer und ungleichmäßig angeordneter Poren, in einem Korngrenzenausschnitt zu beschreiben. Die Simulationsmethode wird anschließend genutzt, um sowohl Porenwachstum als auch Porenschrumpfen zu untersuchen. Basierend auf den Simulationsergebnissen wird ein vereinfachtes Porositätsmodell entwickelt, welches in der Lage ist, das Schädigungsverhalten durch Entwicklungsgleichungen für eine reduzierte Anzahl an Schädigungsvariablen abzubilden. Das vereinfachte Modell wird im späteren Verlauf genutzt, um Korngrenzenschädigung innerhalb eines mikromechanischen Polykristallmodells zu beschreiben.

4.1 Simulationsmethode für Korngrenzenporosität

Für die Abbildung des Kriechschädigungsverhaltens bei hohen Temperaturen und niedrigen Lasten ist eine Fokussierung auf Korngrenzenporenbildung und -wachstum zweckmäßig. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden dabei ausschließlich Poren mit einer linsenförmigen Gleichgewichtsform betrachtet (siehe Abschnitt 2.2.1 und 2.2.2), was für schnelle Oberflächendiffusion oder langsames Porenwachstum gerechtfertigt ist. Die zuletzt genannten Voraussetzungen können für hohe Temperaturen und niedrige Lasten als erfüllt angesehen werden. Im Folgenden beschränken sich die Betrachtungen zudem auf die Entwicklung einer Porenpopulation in einem kreisförmigen Korngrenzenbereich, so wie in *Abb. 4.1* skizziert.

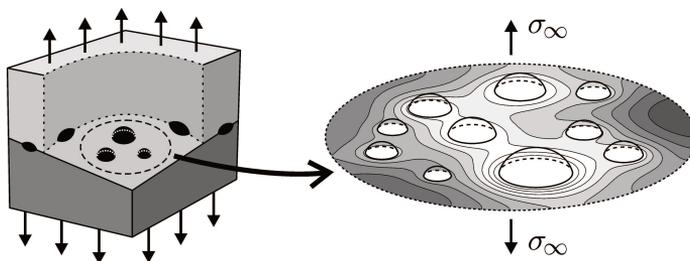


Abb. 4.1: Kreisförmiger Bereich auf einer durch Poren geschädigten Korngrenze. Die Einfärbung der ungeschädigten Korngrenzenfläche in der vergrößerten Darstellung veranschaulicht die lokalen Normalspannungen (je dunkler der Farbton, desto höher ist die lokale Normalspannung), welche sich aus der Lösung des Diffusionsrandwertproblems ergeben.

Der betrachtete Bereich soll eben sein und sich in einem ausreichenden Abstand zu den Rändern einer Korngrenze befinden, so dass Spannungsgradienten, beispielsweise durch Spannungskonzentrationen in der Nähe von Tripellinien, bezüglich des gesamten Bereiches vernachlässigt werden können. Die lokalen Normalspannungen innerhalb des Bereiches sind aber durch die Anwesenheit von Poren inhomogen, wobei der gesamte Korngrenzenbereich effektiv durch die Spannung σ_∞ belastet wird. Die lokalen Unterschiede der Normalspannung in der ungeschädigten Korngrenzenfläche führen zu Gradienten im chemischen Potential, so dass sich ein diffusiver Materialtransport ausbildet. Dieser Diffusionsvorgang entlang der Korngrenze, welcher auf Leerstellendiffusion basiert, bildet den Kern des hier betrachteten Schädigungsmechanismus. Darüber hinaus werden noch die Annahmen getroffen, dass die angrenzenden Körner starr sind und die Korngrenze als perfekte Leerstellenquelle fungiert, so dass das Auseinanderdriften der angrenzenden Körner durch die Ablagerung von Atomen in der Korngrenzebene allein durch Korngrenzendiffusion bestimmt ist. Die im Folgenden präsentierte Simulationemethode ist eine Weiterentwicklung der in [Owe08; FO09] entwickelten Vorgehensweise, welche die Simulation einer vollständigen Schädigungsentwicklung durch Zeitintegration von Porenwachstumsraten ermöglicht.

4.1.1 Porenwachstum durch Korngrenzendiffusion

Formulierung des Randwertproblems für Korngrenzendiffusion

Wie in *Abb. 4.2* dargestellt ist, wird eine Porenanordnung bestehend aus N_{S_0} diskreten Poren mit unterschiedlichen Radien a_i und Positionen c_i in einem kreisförmigen Korngrenzenbereich der Fläche $S_0 = \pi R^2$ betrachtet. Die Fläche S_0 setzt sich dabei aus der geschädigten Korngrenzenfläche $S_S = \sum_{i=1}^{N_{S_0}} \pi a_i^2$ und der ungeschädigten Korngrenzenfläche $S = S_0 - S_S$ zusammen. Die zugehörigen Porenränder L_i dürfen sowohl einander als auch den Rand $L_0 = \partial S_0$ des kreisförmigen Bereiches nicht überlappen. Das Volumen V_i einer einzelnen Pore mit Radius a_i ist entsprechend dem Dihedralwinkel $\psi = \arccos(\gamma_{KG}/(2\gamma_S))$,

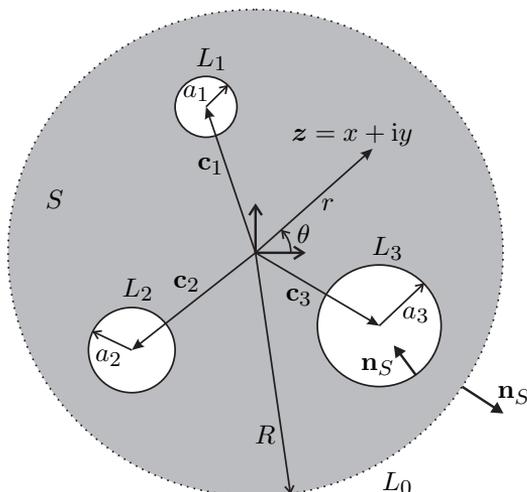


Abb. 4.2: Geometrische Beschreibung eines kreisförmigen, durch Poren geschädigten Korngrenzenbereiches.

mit den spezifischen Oberflächenenergien der Korngrenze γ_{KG} und der freien Porenoberfläche γ_{S} , gegeben durch [Rie87]:

$$V_i = \frac{4}{3}\pi h(\psi)a_i^3 \quad \text{mit} \quad h(\psi) = \left[(1 + \cos \psi)^{-1} - \frac{1}{2} \cos \psi \right] / \sin \psi. \quad (4.1)$$

Das chemische Potential

$$\mu = -\Omega \sigma \quad (4.2)$$

in der ungeschädigten Korngrenzenfläche ergibt sich aus der Arbeit (siehe [Her50]), welche durch die auf die Korngrenze einwirkende Normalspannung σ beim Hinzufügen von Atomen mit Volumen Ω zur Korngrenzenebene verrichtet wird. Folglich ergibt sich der Diffusionsfluss \mathbf{j}_{KG} entlang der Korngrenzenebene entsprechend dem Fickschen Diffusionsgesetz [PC95] zu

$$\mathbf{j}_{\text{KG}} = -\frac{\delta D_{\text{KG}}}{kT} \nabla \mu \quad \mu = -\Omega \sigma \quad \underbrace{\frac{\Omega \delta D_{\text{KG}}}{kT}}_{\tilde{D}_{\text{KG}}} \nabla \sigma \quad (4.3)$$

mit Korngrenzendicke δ , Boltzmann-Konstante k , Temperatur T und Korngrenzendiffusionskoeffizient

$$D_{\text{KG}} = D_{\text{KG}0} \exp \left[-\frac{Q_{\text{KG}}}{R_{\text{th}} T} \right], \quad (4.4)$$

für welchen, wie in [NR80], ein Arrhenius-Ansatz mit Materialkonstante $D_{\text{KG}0}$, universeller Gaskonstante R_{th} und Aktivierungsenergie Q_{KG} angenommen wird.

Durch die Ablagerung von Atomen in der Korngrenzenebene, was hier auch als Korngrenzenaufdickung bezeichnet wird, kommt es zum Auseinanderdriften der angrenzenden Körner. Durch die Annahme, dass die angrenzenden Körner starr sind, ist die Korngrenzenaufdickungsrate $[\dot{u}]^{\text{P}}$ (auch Aufdickungsrate genannt) über den gesamten Korngrenzenbereich hinweg gleich. Unter den getroffenen Annahmen lässt sich die Massenbilanz wie folgt formulieren [Rie87]:

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{j}_{\text{KG}} + [\dot{u}]^{\text{P}} = \tilde{D}_{\text{KG}} \Delta \sigma + [\dot{u}]^{\text{P}} \quad \text{auf } S. \quad (4.5)$$

An jedem Porenrand L_i , also dem Übergang von Korngrenze zur freien Oberfläche einer Pore, muss das chemische Potential in der Korngrenze gleich dem chemischen Potential auf der freien Oberfläche sein. Da hier ausschließlich eine Betrachtung von Gleichgewichtsporenwachstum stattfindet, ist das chemische Potential auf der freien Porenoberfläche durch den Krümmungsradius $\kappa = a / \sin \psi$ der Porenoberfläche und die spezifische Oberflächenenergie γ_{S} bestimmt (siehe [Rie87]):

$$\mu = -2 \frac{\gamma_{\text{S}} \Omega}{\kappa}. \quad (4.6)$$

Aus (4.2) und (4.6) ergibt sich somit an jedem Porenrand eine Randbedingung für die Spannung normal zur Korngrenze:

$$\sigma \stackrel{!}{=} \sigma_i^{\text{Rand}}(a_i) = \frac{2\gamma_S}{a_i} \sin \psi \quad \text{auf } L_i. \quad (4.7)$$

Um ein eindeutig definiertes Diffusionsrandwertproblem zu erhalten, müssen noch zwei weitere Randbedingung formuliert werden. Die zuvor getroffenen Annahmen rechtfertigen dabei die Annahme

$$\mathbf{n}_S \cdot \mathbf{j}_{\text{KG}} = 0 \quad \text{auf } L_0 \quad \iff \quad \frac{\partial \sigma}{\partial r} = 0 \quad \text{auf } L_0, \quad (4.8)$$

mit dem aus dem ungeschädigten Korngrenzenbereich herauszeigenden Normalenvektor \mathbf{n}_S . Gleichung (4.8) entspricht dabei einer lokalen Symmetrie und unterdrückt den Zu- oder Abfluss von Atomen in den betrachteten Korngrenzenbereich. Die letzte Randbedingung folgt aus der Annahme eines Kräftegleichgewichts normal zur Korngrenze, so dass die aufsummierten Normalspannungen σ in der ungeschädigten Korngrenzenfläche S gleich der auf die gesamte Korngrenze wirkenden Spannung σ_∞ sein müssen:

$$\iint_S \sigma \, dS \stackrel{!}{=} S_0 \sigma_\infty = \pi R^2 \sigma_\infty. \quad (4.9)$$

Für die Berechnung der Volumenwachstumsrate der i -ten Pore \dot{V}_i ist zu beachten, dass neben dem Abfluss von Atomen über den Porenrand auch das Auseinanderdriften der angrenzenden Körner zur Vergrößerung des Volumen beiträgt:

$$\dot{V}_i = \oint_{L_i} \mathbf{j}_{\text{KG}} \cdot (-\mathbf{n}_S) \, dL + \pi a_i^2 \llbracket \dot{u} \rrbracket^{\text{P}}. \quad (4.10)$$

Lösung des Diffusionsrandwertproblems mittels analytischen Funktionen

Die Vorgehensweise zur Lösung des im vorangegangenen Abschnitt formulierten Randwertproblems, gegeben durch die Gleichungen (4.5) bis (4.9), orientiert sich im Wesentlichen an dem in [Owe08; FO09] entwickelten Ansatz. Dabei wird für die geometrische Beschreibung davon ausgegangen, dass die Korngrenzenebene einer komplexen Zahlenebene entspricht und jeder Ort, wie in Abb. 4.2 dargestellt, durch eine komplexe Zahl $z = x + iy$ abgebildet wird. Es lässt sich leicht überprüfen, dass

$$\sigma_0 = -\frac{\llbracket \dot{u} \rrbracket^{\text{P}}}{4\tilde{D}_{\text{KG}}} r^2 \quad \text{mit } r = |z| \quad (4.11)$$

eine partikuläre Lösung der Differentialgleichung (4.5) ist. Für die weitere Betrachtung des Randwertproblems wird eine zweckmäßige Umformulierung der zugrunde liegenden Gleichungen durchgeführt, bei der (4.11) genutzt wird, um die neue Funktion

$$\sigma_h = \sigma - \sigma_0 \quad (4.12)$$

zu definieren. Diese neue Funktion muss das durch die Gleichungen

$$\Delta\sigma_h \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{in } S, \quad (4.13)$$

$$\sigma_h \stackrel{!}{=} \sigma_i^{\text{Rand}}(a_i) - \sigma_0 \quad \text{auf } L_i \quad \forall \quad i = 1, 2, \dots, N_{S_0}, \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial\sigma_h}{\partial r} \stackrel{!}{=} -\frac{\partial\sigma_0}{\partial r} = \frac{[[u]]^P}{2\bar{D}_{\text{KG}}} R \quad \text{auf } L_0, \quad (4.15)$$

$$\iint_S \sigma_h \, dS \stackrel{!}{=} \pi R^2 \sigma_{\infty} - \iint_S \sigma_0 \, dS \quad (4.16)$$

bestimmte Randwertproblem erfüllen. Die ungeschädigte Korngrenzenfläche S entspricht dabei einem mehrfach zusammenhängenden Gebiet, für welches in [Ax186] gezeigt wurde, dass eine harmonische Funktion (hier σ_h wegen (4.13)) durch die Darstellung

$$\sigma_h(z) = \text{Re}[\mathbf{f}(z)] + \sum_{k=1}^{N_{S_0}} A_k \ln \frac{|z - \mathbf{c}_k|}{R} \quad (4.17)$$

ausgedrückt werden kann. In (4.17) ist $\mathbf{f}(z)$ eine holomorphe Funktion in S und die reellen Koeffizienten A_k müssen anhand der vorgegebenen Randbedingungen bestimmt werden. Wie in [Owe08] beschrieben, kann $\mathbf{f}(z)$ durch

$$\mathbf{f}(z) = Z_{0,0} + \sum_{m=1}^{+\infty} Z_{0,m} \left(\frac{z}{R}\right)^m + \sum_{k=1}^{N_{S_0}} \sum_{m=1}^{+\infty} Z_{k,m} \left(\frac{z - \mathbf{c}_k}{a_k}\right)^{-m} \quad (4.18)$$

ausgedrückt werden, wobei $Z_{0,0}$, $Z_{0,m}$ und $Z_{k,m}$ komplexwertige Koeffizienten sind ($Z_{i,j} = X_{i,j} + iY_{i,j}$ mit reellen Koeffizienten $X_{i,j}$ und $Y_{i,j}$). Um aus dem Randwertproblem eine Lösung für σ_h zu erhalten, müssen die unbekannt reellen Koeffizienten in (4.17) und (4.18) so gewählt werden, dass die Randbedingungen (4.14), (4.15) und (4.16) erfüllt werden. Diese Anpassung soll durch eine numerische Prozedur erfolgen, für welche es erforderlich ist, in (4.18) nur endliche Summen zu betrachten:

$$\begin{aligned} \sigma_h(z) \approx X_{0,0} + \text{Re} \left[\sum_{m=1}^{M_1} Z_{0,m} \left(\frac{z}{R}\right)^m + \sum_{k=1}^{N_{S_0}} \sum_{m=1}^{M_2} Z_{k,m} \left(\frac{z - \mathbf{c}_k}{a_k}\right)^{-m} \right] \\ + \sum_{k=1}^{N_{S_0}} A_k \ln \frac{|z - \mathbf{c}_k|}{R}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Die Begrenzung der unendlichen Summen bis zu den Ordnungen M_1 und M_2 bedeutet aber auch, dass die vorgegebenen Randbedingungen durch passende Werte für die insgesamt $1 + (2M_1 + 1) + (2M_2 + 1)N_{S_0}$ reellen Koeffizienten

$$[\dot{u}]^P, \Lambda_k, X_{0,0}, X_{0,m}, Y_{0,m}, X_{k,m} \text{ und } Y_{k,m} \quad (4.20)$$

nur näherungsweise erfüllt werden können. Von dieser Vereinfachung abgesehen, kann unter Berücksichtigung der Eigenschaften holomorpher Funktionen für den Lösungsansatz (4.17) gezeigt werden, dass sich die Wachstumsraten einzelner Poren entsprechend (4.10) durch

$$\dot{V}_i = 2\pi \tilde{D}_{\text{KG}} \Lambda_i \quad (4.21)$$

in direkter Abhängigkeit der Koeffizienten Λ_k ausdrücken lassen (zur Herleitung von (4.21) siehe Anhang A).

Um die Auswertung der unterschiedlichen Randbedingungen zu vereinfachen, ist es zudem zweckmäßig, sämtliche Randbedingungen vereinheitlicht auf dem Rand der ungeschädigten Korngrenzfläche ∂S zu betrachten. Da σ_h harmonisch ist, kann die zweite Greensche Identität, angewendet auf σ_h und die Hilfsfunktion $\frac{r^2}{4}$, genutzt werden, um die linke Seite von (4.16) durch Kurvenintegrale auf ∂S auszudrücken

$$\iint_S \sigma_h \underbrace{\Delta \left(\frac{r^2}{4} \right)}_{=1} - \frac{r^2}{4} \underbrace{\Delta \sigma_h}_{=0} \, dS = \frac{1}{4} \oint_{\partial S} \frac{\partial r^2}{\partial n_S} \sigma_h \, dL - \frac{1}{4} \oint_{\partial S} r^2 \frac{\partial \sigma_h}{\partial n_S} \, dL, \quad (4.22)$$

wobei die partielle Ableitung nach n_S der Richtungsableitung entlang von \mathbf{n}_S entspricht. Das Flächenintegral auf der rechten Seite von (4.16) kann darüber hinaus mithilfe des Stokesschen Integralsatzes analytisch ausgewertet werden:

$$\begin{aligned} - \iint_S \sigma_0 \, dS &= \frac{[\dot{u}]^P}{12\tilde{D}_{\text{KG}}} \iint_S \mathbf{rot} \begin{pmatrix} -y^3 \\ x^3 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ dS \end{pmatrix} = \frac{[\dot{u}]^P}{12\tilde{D}_{\text{KG}}} \sum_{i=0}^{N_{S_0}} \oint_{L_i} \begin{pmatrix} -y^3 \\ x^3 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot d\mathbf{L} \\ &= \frac{\pi R^4 [\dot{u}]^P}{8\tilde{D}_{\text{KG}}} - \sum_{i=1}^{N_{S_0}} \frac{\pi [\dot{u}]^P}{4\tilde{D}_{\text{KG}}} a_i^2 \left(|c_i|^2 + \frac{a_i^2}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Numerische Prozedur zur Berücksichtigung der Randbedingungen

In [FO09] wurden zur Lösung des Diffusionsrandwertproblems jeweils die auf ∂S vorgegebenen Randbedingungen und der Lösungsansatz für σ_h in Fourierreihen entwickelt. Aus dem sich ergebenden linearen Gleichungssystem konnten dann die unbekannt reellen Koeffizienten (4.20) bestimmt werden. Obwohl sich diese Vorgehensweise wegen der 2π -periodischen Randbedingungen anbietet, ist die Anwendung nur unter gewissen Einschränkungen möglich. Zum einen müssen die in (4.19) eingeführten Begrenzungen der unendlichen Summen von gleicher Ordnung sein ($M_1 = M_2 = P$) und die Entwicklung der Gleichungen in Fourierreihen muss ebenfalls bis zur Ordnung P ausgeführt werden, um ein bestimmtes lineares Gleichungssystem zu erhalten.

Für den Lösungsansatz wäre aber eine differenzierte Wichtung von Freiheitsgraden durch eine geeignete Wahl von M_1 und M_2 wünschenswert, da die Einflüsse der einzelnen Terme

auf die Gesamtlösung unterschiedlich stark ausgeprägt sind. Wählt man P klein, so reduziert man die Anzahl an Freiheitsgraden im Lösungsansatz und riskiert, dass die so genäherte Lösung zu stark von der tatsächlichen Lösung abweicht. Eine beliebige Erhöhung von P ist hingegen aus praktischen Gründen nicht möglich, da die zur Verfügung stehende Berechnungsleistung für die Auswertung der Randbedingungen begrenzt ist. Den Großteil der Berechnungszeit in [FO09] nimmt die numerische Integration bei der Berechnung der Fourierkoeffizienten in Anspruch. Gerade für Fourierkoeffizienten höherer Ordnung muss aufgrund der stark oszillierenden Sinus- und Cosinus-Terme mit entsprechend kleinen Schrittweiten gearbeitet werden, obwohl deren Einflüsse auf die Gesamtlösung von nachrangiger Bedeutung sind. Eine hinreichend genaue numerische Berechnung der Fourierkoeffizienten ist bei der Vorgehensweise in [FO09] aber unumgänglich und bildet die Grundlage für die anschließende Bestimmung der reellen Koeffizienten (4.20) aus dem sich ergebenden linearen Gleichungssystem.

Um die angesprochenen Nachteile der in [FO09] verwendeten numerischen Lösungsprozedur zu umgehen, wobei die Minimierung der Berechnungszeit vorrangig sein soll, wurde hier eine Kollokationsmethode verwendet, um die Koeffizienten (4.20) zu bestimmen. Hierzu wird zunächst ein überbestimmtes Gleichungssystem erzeugt, indem die Randbedingungen an einer endlichen Anzahl diskreter Punkte entlang von ∂S ausgewertet werden. Die Anzahl an Auswertungspunkten ist dabei sehr viel größer als die Anzahl der zu bestimmenden Koeffizienten, welche letztendlich aus dem resultierenden überbestimmten Gleichungssystem mittels einer Minimierungsmethode berechnet werden.

Die N_{S_0} Randbedingungen (4.14) werden jeweils entlang der einzelnen Porenränder an Q_{L_i} äquidistanten Punkten z_k ausgewertet:

$$\sigma_i^{\text{Rand}}(a_i) \stackrel{!}{=} (\sigma_h + \sigma_0)_{z_k} \quad \text{mit} \quad z_k = c_i + a_i \exp \left[i \frac{2\pi}{Q_{L_i}} k \right] \quad \forall \quad k = 1, 2, \dots, Q_{L_i}. \quad (4.24)$$

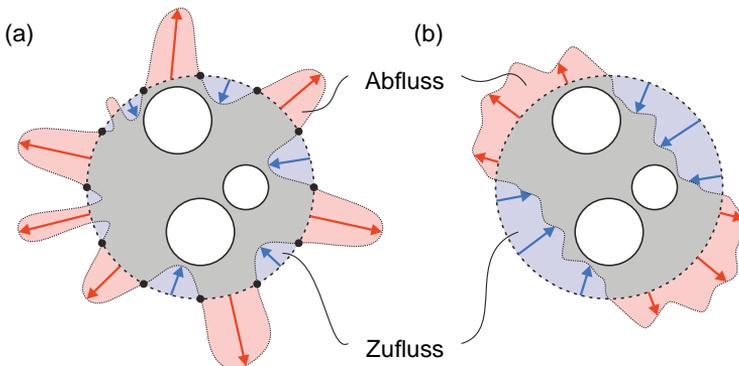


Abb. 4.3: Veranschaulichung von Diffusionsflüssen über den äußeren Rand des betrachteten Korngrenzenbereiches, welche sich bei einer nicht optimalen Anpassung des Lösungsansatzes an die Randbedingung (4.15) ergeben können.

Die Auswertung der Symmetrierandbedingung (4.15) erfordert hingegen eine besondere Behandlung, da ein nicht verschwindender Fluss von Atomen über den äußeren Rand L_0 sämtliche Porenwachstumsraten beeinflussen würde. Bei einer Auswertung von (4.15) an nur einer endlichen Anzahl diskreter Punkte bestünde die Möglichkeit, dass, wie in *Abb. 4.3a* skizziert, der durch die numerische Lösung bestimmte lokale Diffusionsfluss zwischen den Auswertungspunkten nicht verschwindet. Ein in der Summe nicht verschwindender Nettofluss über L_0 würde aber zu einer systematischen Über- oder Unterschätzung von Wachstumsraten führen. Würde man hingegen nur fordern, dass der Nettofluss über L_0 verschwindet, so könnten dennoch lokale Zu- und Abflüsse über L_0 , welche sich in der Summe gegenseitig aufheben, stattfinden (siehe *Abb. 4.3b*). Dies hätte insbesondere eine Verfälschung von Porenwachstumsraten in der Nähe von L_0 zur Folge. Unter Berücksichtigung der partikulären Lösung (4.11) wird daher die Symmetrierandbedingung für den Diffusionsfluss (4.15) im Rahmen der hier angewendeten Kollokationsmethode zunächst lokal an Q_{L_0} äquidistanten Punkten z_k entlang des äußeren Randes L_0 ausgewertet:

$$0 \stackrel{!}{=} \left(\frac{\partial \sigma_h}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_0}{\partial r} \right)_{z_k} \quad \text{mit} \quad z_k = R \exp \left[i \frac{2\pi}{Q_{L_0}} k \right] \quad \forall \quad k = 1, 2, \dots, Q_{L_0}. \quad (4.25)$$

Darüber hinaus soll das Verschwinden des Nettoflusses über L_0 explizit durch die Bedingung

$$\oint_{L_0} \left(\frac{\partial \sigma_h}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_0}{\partial r} \right) dL \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.26)$$

berücksichtigt werden, wobei die Integration in vereinfachter Form durch Anwendung der Simpsonregel

$$\int_0^{2\pi} g(\theta) d\theta \approx \frac{2\pi}{3Q} \sum_{i=1}^Q \left[g \left(\frac{2\pi}{Q} i \right) + 2g \left(\frac{2\pi}{Q} (2i - 1) \right) \right], \quad (4.27)$$

hier spezialisiert auf den Fall einer periodischen Funktion $g(\theta) = g(\theta + 2\pi)$, durch die Auswertung von $\frac{\partial \sigma}{\partial r}$ an $Q = Q_{L_0}$ äquidistanten Punkten entlang von L_0 durchgeführt wird. Auf diese Weise kann die Massenerhaltung für den betrachteten Korngrenzenbereich gezielt im Rahmen der numerischen Prozedur berücksichtigt werden. Für die Auswertung des Kräftegleichgewichts wird ebenfalls (4.27) verwendet, um die Kurvenintegrale, welche sich entsprechend (4.22) auf der linken Seite von (4.16) ergeben, zu bestimmen. Die Anzahl an Auswertungspunkten $Q = Q_{GG}$ in (4.27) ist dabei für alle Teilränder $L_i \in \partial S$ gleich, unabhängig von deren Länge.

Durch die Auswertung der drei Randbedingungen ergeben sich in der Summe $N_{S_0} \cdot Q_{L_i} + (Q_{L_0} + 1) + 1$ Gleichungen. Dabei werden zum einen unterschiedliche Anzahlen an Auswertungspunkten pro Randbedingung verwendet. Zum anderen haben die einzelnen Gleichungen eine unterschiedliche Relevanz für die Bestimmung der numerischen Lösung. Daher wird jede Gleichung zunächst mit einem Wichtungsfaktor multipliziert, bevor anschließend das gesamte Gleichungssystem in Matrixform $\underline{M} \cdot \underline{u} = \underline{b}$ zusammengefasst wird, wobei \underline{M} die Koeffizientenmatrix, \underline{u} der Vektor mit den reellen Koeffizienten (4.20) und \underline{b} die rechte Seite des

überbestimmten Gleichungssysteme sind. Durch Minimierung der Wurzel der aufsummierten Fehlerquadrate, ausgedrückt durch die Norm des Residuenvektors $\|\underline{M} \cdot \underline{u} - \underline{b}\|$, werden schließlich die reellen Koeffizienten bestimmt, welche entsprechend (4.19) eine numerische Näherungslösung für das Randwertproblem (4.13) bis (4.16) bilden.

Eine so bestimmte Lösung ist aber von der Wahl der Wichtungsfaktoren abhängig. Aus dem Vergleich mit Referenzlösungen, welche mit dem in [FO09] beschriebenen numerischen Verfahren für verschiedene Porenanordnungen bestimmt wurden, konnte die im folgenden beschriebene Festlegung der Wichtungsfaktoren entwickelt werden. Der Wichtungsfaktor für die Gleichungen (4.24) wird zu $1/\sqrt{Q_{L_i}}$ gewählt, so dass sich alle quadrierten Faktoren, die aus der Auswertung eines Porenrandes resultieren, jeweils zu 1 aufsummieren. Eine derartige Normierung mit der verwendeten Auswertungspunkteanzahl verhindert, dass Randbedingungen mit mehr Auswertungspunkten innerhalb des Minimierungsverfahrens einen dominierenden Einfluss entwickeln. Gleiches gilt für die Symmetrierandbedingung am äußeren Rand, so dass der Wichtungsfaktor für die Gleichungen (4.25) zu $\sqrt{0,001/Q_{L_0}}$ und für (4.26) zu $\sqrt{0,999}$ gewählt wird. Die deutliche Wichtung zugunsten von (4.26) ergibt sich aus der Beobachtung, dass ein verschwindender Nettofluss einen sehr großen Einfluss auf die Realisierung von (4.15) hat. Im Gegensatz dazu wird das Kräftegleichgewicht nur durch eine einzelne skalare Gleichung repräsentiert. Die Einhaltung des Kräftegleichgewichts ist aber von besonderer Bedeutung, da eventuelle Abweichungen zu einer Verfälschung sämtlicher Porenwachstumsraten führen würde. Der Einfluss von (4.16) auf die numerische Näherungslösung im Rahmen der Minimierungsmethode würde sich aber mit steigender Porenanzahl verringern. Um dem entgegenzuwirken, wird der Wichtungsfaktor für (4.16) zu $N_{S_0} + 1$ gewählt.

Die hier vorgeschlagene Lösungsmethode kann im Vergleich mit der Vorgehensweise in [FO09] signifikant schneller sein. Die benötigte Berechnungszeit hängt dabei im Wesentlichen von der Anzahl an Auswertungspunkten (Q_{L_i} , Q_{L_0} und Q_{GG}) und der Komplexität des Lösungsansatzes (M_1 und M_2) ab. Durch den Vergleich von Lösungen mit verschiedenen Auswertungspunkteanzahlen, bei jeweils vorgegebenen Werten für M_1 und M_2 , konnte beobachtet werden, dass für die Wahl

$$Q_{L_i} = 20 + 3M_2 \quad , \quad Q_{L_0} = 10M_1 \quad \text{und} \quad Q_{GG} = 20 + 3M_2 \quad (4.28)$$

die resultierende Lösung die jeweils vorgegebenen Randbedingungen sehr gut erfüllt. Schließlich wurden verschiedene Porenanordnungen, jeweils mit unterschiedlichen Porenanzahlen und -größen, untersucht, um Werte für M_1 und M_2 festzulegen. Diese sollten einerseits möglichst klein sein, um den Berechnungsvorgang zu beschleunigen. Andererseits sollten die Werte aber auch ausreichend groß sein, um eine hinreichend genaue numerische Lösung zu erhalten, welche die einzelnen Porenwachstumsraten abbilden kann. Dabei zeigte sich, dass der Fall einer einzelnen, sehr kleinen Pore ($N_{S_0} = 1$, $R/a_1 = 120$) mit sehr geringem Abstand zum äußeren Rand L_0 (siehe *Abb. 4.4*) eine besonders kritische Porenanordnung darstellt. Unter allen untersuchten Porenanordnungen ergaben sich aus der resultierenden numerischen Lösung dieser speziellen Anordnung die höchsten Abweichungen bezüglich der vorgegebenen Randbedingungen. Für die Werte $M_1 = 500$ und $M_2 = 100$ sind die relativen Abweichungen von σ bezüglich des vorgegebenen Wertes σ_1^{Rand} in

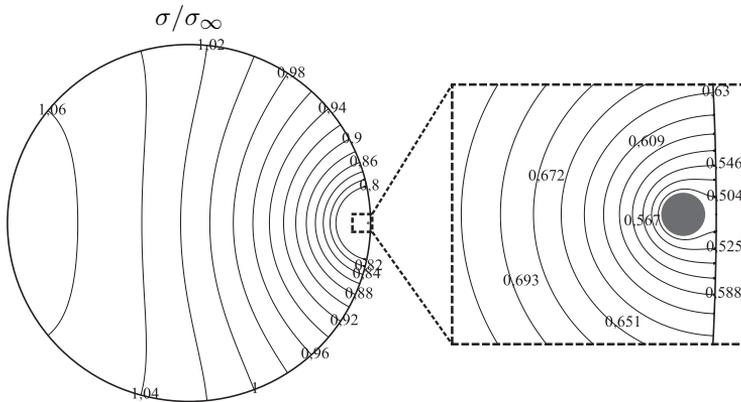


Abb. 4.4: Normalspannungsverteilung in der ungeschädigten Korngrenzenfläche für den Fall einer sehr kleinen Pore in unmittelbarer Nähe zum äußeren Rand.

Abb. 4.5 und der Fluss von Atomen pro Einheitslänge über den äußeren Rand bezogen auf den mittleren Fluss von Atomen pro Einheitslänge über den Rand der einzelnen Pore in Abb. 4.6 dargestellt. Für beide Randbedingungen sind die relativen Abweichungen der numerischen Lösung von den vorgegebenen Randbedingungen sehr klein. Um die Einhaltung des Kräftegleichgewichts zu überprüfen, wurde das Integral auf der linken Seite von (4.9) durch eine Monte-Carlo-Methode ausgewertet. Dabei wurde σ an 50 000 zufälligen Punkten der ungeschädigten Korngrenzenfläche anhand der numerischen Lösung bestimmt und mit der vorgegebenen Spannung σ_∞ verglichen. Für die in Abb. 4.4 gezeigte Einzelporenanordnung sowie für weitere Porenanordnungen mit vielen Poren konnte beobachtet werden, dass der Absolutwert der relativen Abweichung

$$\left| \left(\sigma_\infty - \frac{1-\omega}{Q} \sum_k^Q \sigma(z_k) \right) / \sigma_\infty \right| \quad \text{mit} \quad Q = 50\,000 \quad \text{und} \quad z_k \in S, \quad (4.29)$$

worin ω der geschädigte Flächenanteil ist, immer kleiner als 2×10^{-2} war.

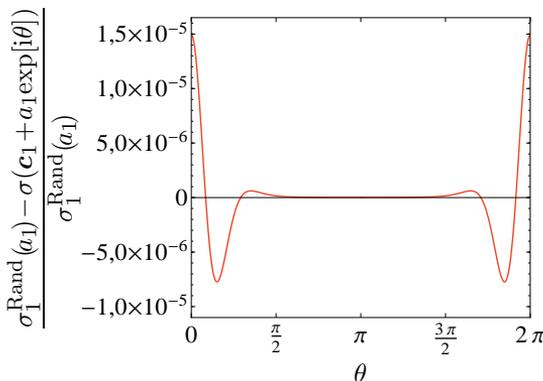
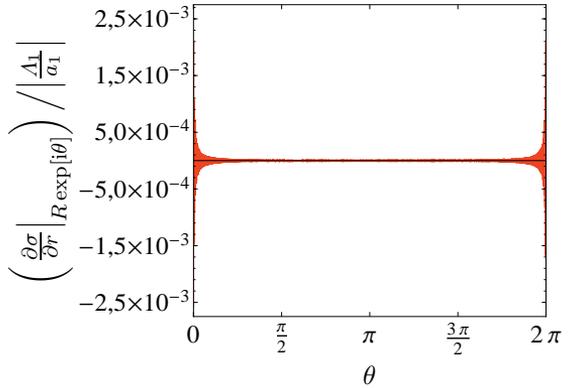


Abb. 4.5: Darstellung der relativen Abweichungen der lokalen Normalspannung von der vorgegebenen Porenrandspannung für den in Abb. 4.4 betrachteten Fall. Der Pfad entlang des Porenrandes wird dabei durch den Winkel θ beschrieben.

Abb. 4.6: Darstellung des lokalen Diffusionsflusses pro Einheitslänge über den äußeren Rand des betrachteten Korngrenzenbereiches bezogen auf den mittleren Diffusionsfluss pro Einheitslänge über den Rand der in Abb. 4.4 dargestellten einzelnen Pore. Der Pfad entlang des äußeren Randes wird dabei durch den Winkel θ beschrieben.



Wegen der sehr kleinen relativen Abweichungen von den vorgegebenen Randbedingungen kann die numerische Lösung für die hohen Werte von M_1 und M_2 als Referenzlösung angesehen werden. Die hohe Genauigkeit der Lösung wird dabei aber durch sehr große Berechnungszeiten erkauft. Für eine hinreichend genaue Bestimmung von Porenwachstumsraten ist eine derartig hohe Komplexität des Lösungsansatzes aber nicht erforderlich. Durch Verringern der Komplexität auf $M_1 = 75$ und $M_2 = 20$ wird die Berechnung signifikant beschleunigt, wobei Abweichungen bezüglich der Porenwachstumsraten in einem akzeptablen Rahmen bleiben. In Abb. 4.7 sind die relativen Abweichungen der Volumenwachstumsraten für zwei verschiedene Porenrößen in Abhängigkeit vom Abstand zum äußeren Rand abgebildet, wobei sich die betrachteten Porendurchmesser um einen Faktor 2 unterscheiden. Es zeigt sich, dass die relative Abweichung umso größer ist, je kleiner der Abstand (zum äußeren Rand) ist. Das beobachtete Betragsmaximum liegt bei 6 %, wobei aus Abb. 4.7 aber klar ersichtlich ist, dass die relative Abweichung mit zunehmender Porenröße und zunehmendem Abstand zum äußeren Rand rasch abnimmt. Darüber hinaus konnte beobachtet werden, dass die relativen Abweichungen für die Volumenwachstumsraten sich nicht erhöh-

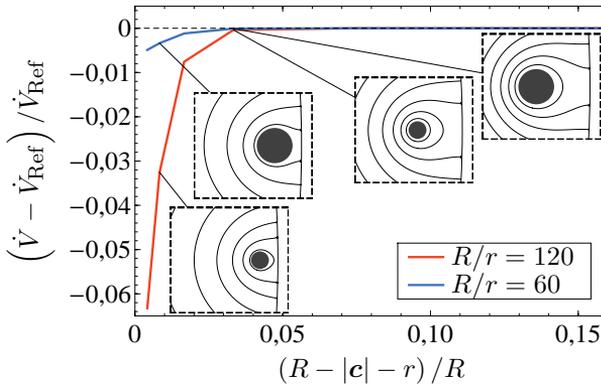


Abb. 4.7: Darstellung der relativen Abweichungen der Volumenwachstumsrate einer einzelnen Pore bezüglich einer numerischen Referenzlösung in Abhängigkeit von der Entfernung zum äußeren Rand L_0 . Dabei wurden jeweils zwei unterschiedliche Porenrößen betrachtet.

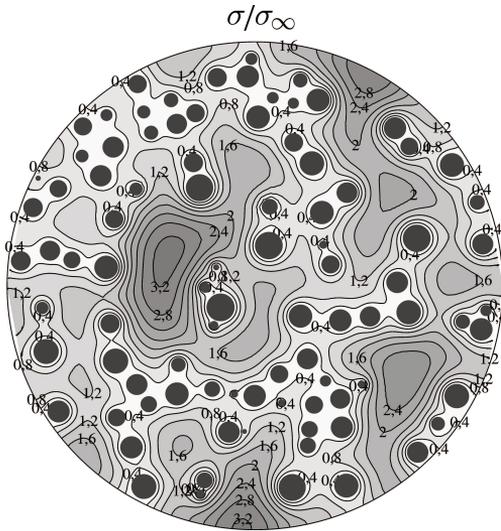


Abb. 4.8: Darstellung der Normalspannungsverteilung in der ungeschädigten Korngrenzenfläche, welche sich aus der Lösung des Diffusionsrandwertproblems (4.5) bis (4.9) für eine große Porenanzahl ergab (je dunkler der Farbton, desto höher ist die lokale Normalspannung).

hen, wenn zusätzliche Poren zur ungeschädigten Korngrenzenfläche hinzugefügt werden. Zudem sei darauf hingewiesen, dass die Abstände zwischen Rändern (sowohl Porenrand \leftrightarrow Porenrand als auch Porenrand \leftrightarrow äußerer Rand) bei den in Abschnitt 4.2 präsentierten Porositätssimulationen überwiegend deutlich größer waren, als die Abstände in der hier betrachteten kritischen Porenanordnung. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass die Abweichungen für die bestimmten Volumenwachstumsraten in den meisten Fällen deutlich kleiner sind.

Letztendlich ermöglicht die beschriebene numerische Lösungsmethode eine hinreichend schnelle und genaue Bestimmung der lokalen Normalspannungen in der ungeschädigten Korngrenzenfläche, so wie in *Abb. 4.8* exemplarisch für eine Porenanordnung gezeigt. Entsprechend (4.21) liefert die Lösungsmethode zudem die Wachstumsraten aller betrachteten Poren. Bei einer Implementierung der numerischen Lösungsprozedur mittels des kommerziellen Softwarepakets Mathematica 7 (Wolfram Research, USA) beträgt die Berechnungszeit für eine Anordnung von 100 Poren ungefähr zwei Minuten auf einer Workstation mit zwei 3 GHz Prozessorkernen.

Für die Simulation eines vollständigen Porositätsprozesses ist darüber hinaus aber noch die Betrachtung weiterer Aspekte, wie z. B. die Nukleation und das Zusammenwachsen von Poren, erforderlich, welche in den folgenden Abschnitten diskutiert werden.

4.1.2 Modellierung der Porositätsentwicklung

Porennukleation

Wie in Abschnitt 2.2.1 bereits diskutiert wurde, ist die Nukleation von Korngrenzenporen bis zum jetzigen Zeitpunkt nicht vollständig verstanden. In Abwesenheit eines allgemein anerkannten Modells soll hier ein auf experimentellen Erkenntnissen beruhender Zusammenhang genutzt werden, um die Entstehung neuer Poren zu berücksichtigen.

In [Dys83] wurde für verschiedene Materialien anhand von Kriechversuchen festgestellt, dass sich die Porendichte¹ auf Korngrenzen proportional zur makroskopischen Kriechdehnung entwickelt. Dementsprechend ergibt sich für die Porennukleationsrate \dot{N}_{S_0} auf einer Korngrenzenfläche S_0 der Zusammenhang

$$\dot{N}_{S_0} = S_0 \alpha_P \dot{\epsilon}_\infty, \quad (4.30)$$

worin $\dot{\epsilon}_\infty$ die makroskopische Kriechrate und α_P ein materialabhängiger Parameter sind. Werte für α_P sind für eine Auswahl an Materialien in [Rie87] aufgeführt, wobei diese typischerweise innerhalb des Intervalls $[10^{10} \text{ m}^{-2}, 4 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}]$ liegen. Treibende Kraft für die Porositätsentwicklung ist die auf eine Korngrenze wirkende Normalspannung σ_∞ , welche innerhalb eines Polykristalls durch mehrere Einflussfaktoren bestimmt ist. Es muss daher eine Vereinfachung getroffen werden, um mittels (4.30) die Porennukleationsrate für eine einzelne Korngrenze in Abhängigkeit von σ_∞ auszudrücken. Hierzu soll $\dot{\epsilon}_\infty$ in (4.30) durch das Nortonsche Kriechgesetz

$$\dot{\epsilon}_\infty(\sigma_\infty) = A \frac{D_V G b}{k T} \left(\frac{\sigma_\infty}{G} \right)^n \quad \text{mit} \quad D_V = D_{V0} \exp \left[-\frac{Q_V}{R_{th} T} \right] \quad (4.31)$$

ersetzt werden. In (4.31) sind A eine Kriechkonstante, D_V der Volumendiffusionskoeffizient, G der Schubmodul, b der Burgers-Vektor und Q_V die Aktivierungsenergie für Volumendiffusion. Zudem wurde die makroskopische Spannung durch σ_∞ ersetzt, so dass sich die Nukleationsrate für eine einzelne Korngrenze zu

$$\dot{N}_{S_0} = S_0 \alpha_P \dot{\epsilon}_\infty(\sigma_\infty) \quad (4.32)$$

ergibt. Dies entspricht dem Fall eines Bikristalls, welcher durch eine Spannung σ_∞ senkrecht zur Korngrenze belastet wird und dessen zwei Körner sich gleichmäßig mit der Kriechrate (4.31) deformieren.

Im Rahmen der Betrachtung einer zeitlichen Porositätsentwicklung werden neue Poren entsprechend (4.32) mit einem Anfangsradius a_{init} an zufällig gewählten Orten der ungeschädigten Korngrenzenfläche zu einer bestehenden Porenanordnung hinzugefügt, wobei keine Überlappungen mit dem äußeren Rand oder anderen Poren erlaubt sind.

Zusammenwachsen und Sintern von Poren

Neben der Entstehung von neuen Poren muss auch eine Abnahme der Porenanzahl bei der Betrachtung einer zeitlichen Porositätsentwicklung berücksichtigt werden, was im Wesentlichen auf zwei Mechanismen zurückgeführt werden kann. Zum einen findet Zusammenwachsen direkt benachbarter Poren infolge von Porenwachstum statt. Zum anderen steht dem Porenwachstum das Bestreben nach Verringerung der freien Oberfläche entgegen. Dies kann zum Schrumpfen von größeren Poren und auch zum vollständigen Sintern von sehr kleinen Poren führen, wenn die durch die lokale Normalspannung bereitgestellte Arbeit nicht aus-

¹Im Rahmen der vorliegenden Arbeit entspricht die Porendichte auf Korngrenzen stets einer Flächendichte, also der Porenanzahl pro Korngrenzenfläche.

reicht, um eine stabile Porengröße zu erhalten (siehe auch Abschnitt 2.2.1).

Das Zusammenwachsen zweier Poren spielt eine Rolle, wenn zumindest eine Wachstumsrate zweier benachbarter Poren positiv ist. Im Rahmen der hier betrachteten Porositätsentwicklungen wird angenommen, dass es zu einer Vereinigung zweier Poren kommt, wenn der Abstand zwischen den Porenrändern kleiner als $\delta_{A.ZW} = a_{\text{init}}/10$ wird. Die dabei entstehende neue Pore soll während des Vorgangs aufgrund der angenommenen sehr schnellen Oberflächendiffusion eine Gleichgewichtsform ausbilden, wobei die Zeit für diesen Prozess vernachlässigbar gegenüber dem Porenwachstum sein soll. Innerhalb der Simulationsmethode wird diese Vereinigung bei konstantem Volumen dadurch berücksichtigt, dass die beiden zusammenwachsenden Poren instantan durch eine neue Pore ersetzt werden. Das Volumen der neuen Pore entspricht dabei der Summe der beiden zusammenwachsenden Poren und das Zentrum der neuen Pore liegt im Volumenschwerpunkt der beiden alten Poren. Die vereinfachenden Annahmen für das Zusammenwachsen bei Erhaltung des Porenvolumens führen allerdings zu einer Verringerung der geschädigten Korngrenzenfläche, da Porenvolumen und -radius durch (4.1) direkt miteinander verbunden sind.

Ist die auf eine Korngrenze wirkende Normalspannung sehr klein oder gar negativ, so können sich aus der Lösung des Randwertproblems (4.5) bis (4.9) negative Porenwachstumsraten ergeben. Dies entspricht einem Diffusionsfluss aus der Korngrenzenebene hin zur Porenoberfläche, welcher zum Schrumpfen einer Pore führt. Entsprechend den in Abschnitt 2.2.2 diskutierten Porenwachstumsmodellen erhöht sich mit abnehmender Porengröße die Geschwindigkeit, mit der eine Pore schrumpft. Folglich kommt es zeitnah zum vollständigen Sintern einer Pore, wenn diese einen kritischen Radius unterschreitet. In der hier betrachteten Simulationsmethode wird daher eine Pore, deren Radius a_i den Wert $0,8 a_{\text{init}}$ unterschreitet, aus der betrachteten Porenanordnung entfernt.

Konsistenz der Geometriebeschreibung

Für die Betrachtung des Diffusionsrandwertproblems wird stets vorausgesetzt, dass die Poren den äußeren Rand L_0 des kreisförmigen Korngrenzenbereiches nicht überlappen. Dies ist eine wichtige Voraussetzung für die Anwendung der Lösungsdarstellung entsprechend (4.17) und (4.18). Daher können Poren, welche über den äußeren Rand L_0 hinauswachsen, nicht ohne weiteres berücksichtigt werden. Um eine mit dem verwendeten Lösungsansatz konsistente Porenanordnung zu gewährleisten, wird das Zentrum einer über L_0 hinausgewachsenen Pore in Richtung des Zentrums von S_0 verschoben, so dass der Abstand zwischen L_0 und dem Porenrand $\delta_1 = R/100$ beträgt (siehe *Abb. 4.9*).

Der Rand L_0 stellt keine physikalische Begrenzung dar, sondern beschreibt vielmehr einen beliebigen aber repräsentativen Ausschnitt der Korngrenze. Daher würden sowohl jene Poren, die innerhalb des betrachteten Bereiches liegen, als auch jene Poren, die außerhalb des betrachteten Bereiches liegen, infolge von Porenwachstum L_0 überlappen. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass das Ausmaß der von innen nach außen überlappenden Poren ungefähr dem Ausmaß der von außen nach innen überlappenden Poren entspricht. Somit würde das künstliche Verschieben von Poren, die L_0 überlappen, den geschädigten Flächenanteil der gesamten Porenanordnung nicht verfälschen.

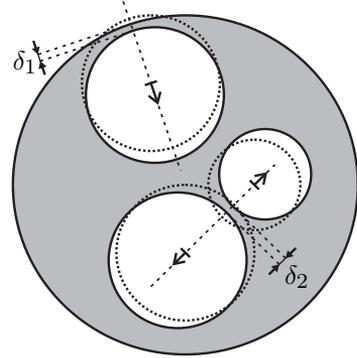


Abb. 4.9: Verschiebung von Poren, welche infolge von Porenwachstum mit dem äußeren Rand des betrachteten kreisförmigen Korngrenzenbereiches oder mit anderen Poren überlappen.

Zeitintegration der Porenwachstumsraten

Aus der Lösung des Diffusionsrandwertproblems für einen kreisförmigen Korngrenzenbereich ergeben sich die radialen Porenwachstumsraten ${}^t\dot{a}_i$ für die betrachteten N_{S_0} Poren zum Zeitpunkt t entsprechend (4.21) zu

$$\underline{{}^t\dot{a}} = \begin{pmatrix} {}^t\dot{a}_1 \\ \vdots \\ {}^t\dot{a}_{N_{S_0}} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad {}^t\dot{a}_i = \frac{{}^t\dot{V}_i}{4\pi h(\psi) {}^t a_i^2} = \frac{\tilde{D}_{\text{KG}}}{2h(\psi)} \frac{{}^t\Lambda_i}{{}^t a_i^2}. \quad (4.33)$$

Hier und im Folgenden stehen ${}^t(\dots)$ für den Wert von (\dots) zum Zeitpunkt t und ${}^{t+\Delta t}(\dots)$ für den Wert von (\dots) zum Zeitpunkt $t + \Delta t$. Die Zeitintegration der N_{S_0} Gleichungen (4.33) wird mittels eines impliziten Euler-Verfahrens mit variablem Zeitinkrement Δt durchgeführt:

$$0 = {}^{t+\Delta t}\underline{a} - {}^t\underline{a} - \Delta t \cdot {}^{t+\Delta t}\underline{\dot{a}} = \underline{f}({}^{t+\Delta t}\underline{a}). \quad (4.34)$$

Dabei ist $\underline{f}({}^{t+\Delta t}\underline{a})$ die vektorielle Fehlerfunktion für das implizite Euler-Verfahren und die Porenradien zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ werden aus dem sich ergebenden nichtlinearen Gleichungssystem (4.34) durch Anwendung eines Newton-Raphson-Verfahrens iterativ bestimmt. Hierzu wird in jedem Iterationsschritt das linearisierte Gleichungssystem

$$0 = {}^{t+\Delta t}\delta\underline{f} - {}^{t+\Delta t}\underline{J} \cdot {}^{t+\Delta t}\delta\underline{a} \quad (4.35)$$

mit

$${}^{t+\Delta t}\delta\underline{f} = \underline{f}({}^{t+\Delta t}\underline{a} + {}^{t+\Delta t}\delta\underline{a}) - \underline{f}({}^{t+\Delta t}\underline{a}) \quad \text{und} \quad {}^{t+\Delta t}\underline{J} = \left. \frac{\partial \underline{f}}{\partial \underline{a}} \right|_{{}^{t+\Delta t}\underline{a}} \quad (4.36)$$

gelöst, wobei davon ausgegangen wird, dass die Komponenten der vektoriellen Fehlerfunktion (4.34) für die neue Abschätzung der Porenradien ${}^{t+\Delta t}\underline{a} + {}^{t+\Delta t}\delta\underline{a}$ verschwinden, also $\underline{f}({}^{t+\Delta t}\underline{a} + {}^{t+\Delta t}\delta\underline{a}) = \underline{0}$ ist. Startwerte für ${}^{t+\Delta t}\underline{a}$ werden vor Beginn des impliziten Verfahrens durch einen einzelnen expliziten Euler-Integrationsschritt berechnet.

Da die Berechnung der Porenwachstumsraten durch das Lösen des Diffusionsrandwertproblems ein komplexer Vorgang ist, besteht die Möglichkeit, dass die Ableitung einer analytischen Jacobi-Matrix ${}^{t+\Delta t}\underline{\underline{J}}^k$ für den k -ten Iterationsschritt nicht existiert oder nur mit unverhältnismäßig großem Aufwand gewonnen werden kann. Daher wurde hier das in [Bro65] vorgeschlagene modifizierte Newton-Raphson-Verfahren angewendet, welches auf einer approximierten Jacobi-Matrix basiert. Im ersten Iterationsschritt wird ${}^{t+\Delta t}\underline{\underline{J}}^1$ durch die Einheitsmatrix abgeschätzt. Für den jeweils folgenden $(k + 1)$ -ten Iterationsschritt wird dann eine neue Approximation aus Größen des k -ten Iterationsschrittes durch

$${}^{t+\Delta t}\underline{\underline{J}}^{k+1} = {}^{t+\Delta t}\underline{\underline{J}}^k + \frac{\left({}^{t+\Delta t}\delta\underline{\underline{f}}^k - {}^{t+\Delta t}\underline{\underline{J}}^k \cdot {}^{t+\Delta t}\delta\underline{\underline{a}}^k \right) \otimes {}^{t+\Delta t}\delta\underline{\underline{a}}^k}{\left({}^{t+\Delta t}\delta\underline{\underline{a}}^k \right) \cdot \left({}^{t+\Delta t}\delta\underline{\underline{a}}^k \right)} \quad (4.37)$$

mit

$${}^{t+\Delta t}\delta\underline{\underline{a}}^k = {}^{t+\Delta t}\underline{\underline{a}}^{k+1} - {}^{t+\Delta t}\underline{\underline{a}}^k \quad \text{und} \quad {}^{t+\Delta t}\delta\underline{\underline{f}}^k = \underline{\underline{f}} \left({}^{t+\Delta t}\underline{\underline{a}}^{k+1} \right) - \underline{\underline{f}} \left({}^{t+\Delta t}\underline{\underline{a}}^k \right) \quad (4.38)$$

berechnet. Speziell im Vergleich mit expliziten Integrationsmethoden erlaubt die Anwendung des impliziten Euler-Verfahrens eine stabile Integration mit größeren Zeitinkrementen. Wie bereits im vorangegangenen Abschnitt diskutiert wurde, muss jedoch sichergestellt sein, dass es innerhalb einer Porenanordnung zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ nicht zu Überlappungen kommt. Dies wird erreicht, indem in jedem Iterationsschritt die Entfernung zwischen jeweils zwei Porenrändern bestimmt wird. Sollten zwei Porenränder einander überlappen, so werden beide entlang der Verbindungslinie der beiden Porenzentren auseinander geschoben, bis die Entfernung $\delta_2 = 0,9 \delta_{A.ZW}$ beträgt (siehe *Abb. 4.9*), wobei $\delta_{A.ZW}$ die kritische Entfernung für das Zusammenwachsen zweier Poren ist.

Das Zeitinkrement Δt wird variabel für jeden Integrationsschritt aus einem vorgegebenen Intervall gewählt, wobei die Intervallobergrenze in Abhängigkeit von σ_∞ und den Materialparametern so vorgegeben wird, dass alle vier Zeitschritte eine neue Pore gemäß (4.32) entsteht. Auf Grundlage der mittleren Porenwachstumsrate aller Poren des letzten Zeitschrittes sowie der minimalen Abstände zwischen benachbarten Porenrändern wird zudem versucht, das Zeitinkrement bis zum nächsten Zusammenwachsen zweier Poren abzuschätzen. Sollte das resultierende Zeitinkrement außerhalb des vorgegebenen Intervalls liegen, so wird die zugehörige Intervallgrenze für Δt gewählt. Konvergiert das modifizierte Newton-Raphson-Verfahren mit einem gewählten Zeitinkrement nicht innerhalb einer vorgegebenen Anzahl von Iterationen, so wird das Zeitinkrement reduziert und der Integrationsschritt mit dem neuen Δt wiederholt. Beim Unterschreiten der Intervalluntergrenze wird eine Simulation vorzeitig beendet. Ein Integrationsschritt wird ebenfalls mit einem verkleinerten Zeitinkrement wiederholt, wenn durch das oben und im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Verschieben von Poren keine überlappungsfreie Anordnung realisiert werden kann. Letzteres kann auftreten, wenn mehrere Poren innerhalb von größeren Zeitinkrementen gleichzeitig einander überlappen. Die Verkleinerung von Δt führt dann dazu, dass das Zusammenwachsen nacheinander und immer nur zwischen zwei Poren stattfindet.

4.1.3 Dimensionslose Formulierung der Gleichungen

Für die numerische Auswertung der Gleichungen, welche die Porositätsentwicklung beschreiben, ist es von Vorteil, wenn dimensionslose Größen betrachtet werden. Daher werden im Folgenden alle Längen und räumlichen Größen (dazu zählen zuallererst Koordinaten) auf eine Referenzlänge $a_{\widehat{\text{Ref}}}$, alle Spannungen auf eine Referenzspannung $\sigma_{\widehat{\text{Ref}}}$ und alle zeitbezogenen Größen auf eine Referenzzeit $t_{\widehat{\text{Ref}}}$ bezogen:

$$\begin{aligned} \widehat{a} &= \frac{a}{a_{\widehat{\text{Ref}}}} \quad , \quad \widehat{\sigma} = \frac{\sigma}{\sigma_{\widehat{\text{Ref}}}} \quad , \quad \widehat{t} = \frac{t}{t_{\widehat{\text{Ref}}}} \quad , \quad \widehat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{a_{\widehat{\text{Ref}}}} \quad , \\ \llbracket \widehat{u} \rrbracket^{\text{P}} &= \frac{\llbracket u \rrbracket^{\text{P}}}{a_{\widehat{\text{Ref}}}} \quad , \quad \widehat{R} = \frac{R}{a_{\widehat{\text{Ref}}}} \quad , \quad \widehat{V} = \frac{V}{a_{\widehat{\text{Ref}}}^3} \quad , \quad \widehat{\mathbf{j}}_{\text{KG}} = \frac{t_{\widehat{\text{Ref}}}}{a_{\widehat{\text{Ref}}}^2} \mathbf{j}_{\text{KG}} \quad . \end{aligned} \quad (4.39)$$

Entsprechend dieser Definitionen müssen ebenfalls ein normierter kreisförmiger Korngrenzenbereich und normierte Ränder

$$\mathbf{x} \in S \iff \widehat{\mathbf{x}} \in \widehat{S} \quad \text{und} \quad \mathbf{x} \in L_i \iff \widehat{\mathbf{x}} \in \widehat{L}_i \quad (4.40)$$

sowie normierte räumliche und zeitliche Ableitungen

$$\widehat{\nabla}(\dots) = a_{\widehat{\text{Ref}}} \nabla(\dots) \quad , \quad \widehat{\Delta}(\dots) = a_{\widehat{\text{Ref}}}^2 \Delta(\dots) \quad \text{und} \quad (\dots)^* = \frac{d(\dots)}{d\widehat{t}} = t_{\widehat{\text{Ref}}} \frac{d(\dots)}{dt} \quad (4.41)$$

betrachtet werden. Die drei Referenzwerte können auf beliebige von Null verschiedene positive Werte festgelegt werden, jedoch kann eine gute Wahl helfen, die für die Porositätsentwicklung relevanten Material- und Belastungsparameter zu identifizieren. Durch Anwendung von (4.39) bis (4.41) kann (4.5) in der Form

$$0 = \widehat{D}_{\text{KG}} \left(\widehat{\Delta} \widehat{\sigma} \right) + \llbracket \widehat{u} \rrbracket^{\text{P}} \quad \text{in} \quad \widehat{S} \quad (4.42)$$

und die Randbedingungen (4.7) bis (4.9) in der Form

$$\begin{aligned} \widehat{\sigma} &\stackrel{!}{=} \widehat{\sigma}_i^{\text{Rand}}(\widehat{a}_i) = \frac{2\widehat{\gamma}_S}{\widehat{a}_i} \sin \psi \quad \text{auf} \quad \widehat{L}_i \quad , \\ \frac{\partial \widehat{\sigma}}{\partial \widehat{r}} &\stackrel{!}{=} 0 \quad \text{auf} \quad \widehat{L}_0 \quad , \\ \iint_{\widehat{S}} \widehat{\sigma} \, d\widehat{S} &\stackrel{!}{=} \widehat{S}_0 \widehat{\sigma}_\infty = \pi \widehat{R}^2 \widehat{\sigma}_\infty \end{aligned} \quad (4.43)$$

angegeben werden, worin die dimensionslosen Parameter \widehat{D}_{KG} und $\widehat{\gamma}_S$ durch

$$\widehat{D}_{\text{KG}} = \widetilde{D}_{\text{KG}} \frac{t_{\widehat{\text{Ref}}} \sigma_{\widehat{\text{Ref}}}}{a_{\widehat{\text{Ref}}}^3} \quad \text{und} \quad \widehat{\gamma}_S = \frac{\gamma_S}{\sigma_{\widehat{\text{Ref}}} a_{\widehat{\text{Ref}}}} \quad (4.44)$$

definiert sind.

In gleicher Weise nimmt (4.32) die Form

$$\widehat{N}_{\widehat{S}_0}^* = \widehat{S}_0 \widehat{\alpha}_P \widehat{t}_{\text{Ref}} \dot{\epsilon}_\infty(\sigma_\infty) \quad \text{mit} \quad \widehat{\alpha}_P = a_{\text{Ref}}^2 \alpha_P \quad (4.45)$$

an. Die so dimensionslos gemachte Beschreibung einer Porositätsentwicklung hängt jetzt nur noch von \widehat{D}_{KG} , $\widehat{\gamma}_S$, $\widehat{\alpha}_P$ und $\dot{\epsilon}_\infty(\sigma_\infty)$ ab. Mit der Wahl

$$a_{\text{Ref}} = a_{\text{init}} \quad , \quad \sigma_{\text{Ref}} = \sigma_\infty \quad \text{und} \quad \widehat{t}_{\text{Ref}} = \frac{1}{\dot{\epsilon}_\infty(\sigma_\infty)} \quad (4.46)$$

wird (4.45) unabhängig von $\dot{\epsilon}_\infty(\sigma_\infty)$. Folglich werden Simulationen für gleiche Werte von \widehat{D}_{KG} , $\widehat{\gamma}_S$ und $\widehat{\alpha}_P$ immer zu einer gleichen Porositätsentwicklung führen, sofern die zeitliche Entwicklung mit der Referenzzeit $\widehat{t}_{\text{Ref}} = 1/\dot{\epsilon}_\infty(\sigma_\infty)$ skaliert wird. Es ist daher möglich, das Zusammenspiel der verschiedenen betrachteten Mechanismen (Wachstum, Nukleation, Zusammenwachsen, ...) anhand von Simulationen mit konstanter Spannung σ_∞ zu betrachten, bei denen nur die Parameter \widehat{D}_{KG} , $\widehat{\gamma}_S$ und $\widehat{\alpha}_P$ variiert werden. Da \widehat{D}_{KG} in nichtlinearer Weise von σ_∞ abhängt, ist es zudem zielführender die Porositätsentwicklung in Abhängigkeit von der Größe $\sqrt[3]{\widehat{D}_{\text{KG}}}$ zu untersuchen.

4.2 Simulation von Porositätsentwicklungen

In diesem Abschnitt werden Porenwachstumssimulationen für Korngrenzen unter Zugspannung präsentiert. Der betrachtete Raum für Parametervariationen bezüglich Spannungen und Materialparametern ist dabei auf Werte reduziert, für welche Kriechen in reinem Kupfer typischerweise beobachtet wird. Das resultierende Schädigungsverhalten wird anschließend in Abschnitt 4.3 genutzt, um ein vereinfachtes Porositätsmodell zu entwickeln. In Abschnitt 4.4 wird in einer weiteren Untersuchung der Fall von Porenschrumpfen für Korngrenzen unter Druckspannung betrachtet.

4.2.1 Relevanter Parameterbereich

Es ist weitgehend akzeptiert, dass diffusionsgesteuertes Korngrenzenporenwachstum vor allem bei niedrigen Lasten der dominierende Schädigungsmechanismus in polykristallinen Werkstoffen ist. Im Folgenden wird daher für σ_∞ ein Spannungsbereich von 6 MPa bis 20 MPa betrachtet. Zudem soll der Parameterraum durch die Wahl der Temperatur $T = 500 \text{ }^\circ\text{C}$ und Materialparameter für Kupfer aus [WMN83], welche in Tab. 4.1 aufgelistet sind,

Tab. 4.1: Materialparameter für Kupfer aus [WMN83]. Für δD_{KG0} wurde in der vorliegenden Arbeit ein leicht veränderter Wert genutzt.

$\Omega = 1,18 \times 10^{-29} \text{ m}^3$	$A = 5,54 \times 10^6$	$G = 42 \text{ GPa}$
$b = 2,56 \times 10^{-10} \text{ m}$	$D_{V0} = 2 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	$Q_V = 1,97 \times 10^5 \text{ J mol}^{-1}$
$\gamma_S = 1,78 \text{ J m}^{-2}$	$\delta D_{\text{KG0}} = 4 \times 10^{-15} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ (vorliegende Arbeit)	$Q_{\text{KG}} = 1,04 \times 10^5 \text{ J mol}^{-1}$

weiter konkretisiert werden. Für diese Werte ergibt sich entsprechend (4.3) zunächst der Wert $\hat{D}_{KG} = 4,163 \times 10^{-31} \text{ m}^6 \text{ J}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Durch die Wahl des Anfangsradius $a_{\text{init}} = 1 \text{ } \mu\text{m}$ für alle Simulationen, welcher sich aus einer Abwägung zwischen messtechnisch beobachtbaren Werten und dem instabilen Verhalten sehr kleiner Poren² innerhalb der numerischen Simulationen ergibt, können aus (4.44) für den betrachteten Spannungsbereich die folgenden Werte bestimmt werden:

$$\sqrt[3]{\hat{D}_{KG}|_{\sigma_{\infty}=6 \text{ MPa}}} = 19,7656 \approx 20 \quad , \quad \sqrt[3]{\hat{D}_{KG}|_{\sigma_{\infty}=20 \text{ MPa}}} = 3,96951 \approx 4. \quad (4.47)$$

Ausgehend von typischen Werten für γ_S , welche in [TM77] für verschiedene Materialien tabelliert sind und in einem Bereich zwischen $0,5 \text{ J m}^{-2}$ und $3,0 \text{ J m}^{-2}$ liegen, ergeben sich unter Berücksichtigung des betrachteten Spannungsbereiches für σ_{∞} folgende Minimal- und Maximalwerte für $\hat{\gamma}_S$:

$$\hat{\gamma}_S|_{\sigma_{\infty}=20 \text{ MPa}, \gamma_S=0,5 \text{ J m}^{-2}} = 0,025 \quad , \quad \hat{\gamma}_S|_{\sigma_{\infty}=6 \text{ MPa}, \gamma_S=3,0 \text{ J m}^{-2}} = 0,5. \quad (4.48)$$

Wie bereits in Abschnitt 4.1.2 zur Porennukleation erwähnt wurde, liegen typische Werte für α_P zwischen 10^{10} m^{-2} und $4 \times 10^{12} \text{ m}^{-2}$. Da dieser Parameter einen sehr starken Einfluss auf die Porenanzahl und folglich auf die Berechnungszeit hat, jedoch nur eine vorgegebene Berechnungskapazität für die Durchführung der Simulationen verwendet werden soll, wird hier nur ein eingeschränkter Wertebereich für α_P zwischen $0,4 \times 10^{11} \text{ m}^{-2}$ und $4,4 \times 10^{11} \text{ m}^{-2}$ betrachtet. Entsprechend (4.45) ergeben sich daraus die Minimal- und Maximalwerte $0,04$ und $0,44$ für $\hat{\alpha}_P$.

Um trotz unterschiedlicher absoluter Porendichten vergleichbare Ergebnisse innerhalb von

²Wegen (2.7) müssen Poren eine gewisse Mindestgröße bei ihrer Entstehung besitzen. Würden Poren mit zu geringer Größe zu einer Porenanordnung hinzugefügt werden, so würden diese sofort schrumpfen und schließlich vollständig sintern.

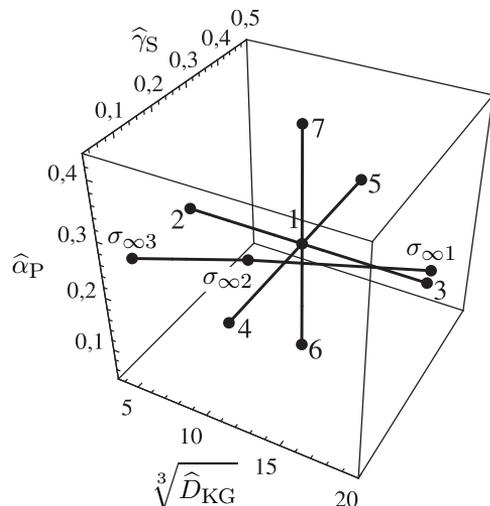


Abb. 4.10: Veranschaulichung der Parameterkombinationen, welche in den beiden Simulationsreihen betrachtet wurden.

Tab. 4.2: Verwendete Parameterkombinationen für Simulationsreihe 1.

Simulation	σ_∞/MPa	$\sqrt[3]{\widehat{D}_{\text{KG}}}$	$\widehat{\gamma}_S$	$\widehat{\alpha}_P$	\widehat{R}	$N_{\widehat{S}_0}^{\text{max}}$
1	10	12	0,2625	0,24	80	105
2	10	4	0,2625	0,24	40	100
3	10	20	0,2625	0,24	109	102
4	10	12	0,025	0,24	82	103
5	10	12	0,5	0,24	79	98
6	10	12	0,2625	0,04	117	106
7	10	12	0,2625	0,44	69	102

Simulationen zu erhalten, wurde für jede durchgeführte Simulation der Radius \widehat{R} der Korngrenzfläche \widehat{S}_0 im voraus abgeschätzt, so dass die maximale Porenanzahl im Laufe einer vollständigen Porositätsentwicklung ungefähr $N_{\widehat{S}_0}^{\text{max}} = 100$ betrug. Bei zu großen Abweichungen von diesem Wert wurde eine Simulation mit angepasstem \widehat{R} wiederholt.

Für eine erste Simulationsreihe (im Folgenden auch als Simulationsreihe 1 bezeichnet) wurde, ausgehend vom Parametersatz $\sqrt[3]{\widehat{D}_{\text{KG}}} = 12$, $\widehat{\gamma}_S = 0,2625$ und $\widehat{\alpha}_P = 0,24$, jeweils immer nur einer der drei Parameter auf die oben betrachteten Grenzen des Parameterraumes gesetzt (siehe *Abb. 4.10*). Die resultierenden sieben Parameterkombinationen sind zusammen mit den verwendeten Werten für \widehat{R} und den erreichten maximalen Porenanzahlen $N_{\widehat{S}_0}^{\text{max}}$ in *Tab. 4.2* aufgelistet. Alle sieben Simulationen sind mit einer Spannung $\sigma_\infty = 10$ MPa durchgeführt worden, so dass die Zeitskalierung entsprechend $t_{\widehat{\text{Ref}}}$ (siehe (4.46)) für alle Simulationen identisch ist.

Da für die Porositätsentwicklungen angenommen wurde, dass neu entstehende Poren an zufälligen Orten zu einer Porenanordnung hinzugefügt werden, wurde in einer zweiten Simulationsreihe (im Folgenden auch als Simulationsreihe 2 bezeichnet) der Einfluss dieser Annahme untersucht. Hierzu wurden Simulationen mit jeweils dem gleichen Parametersatz, aber mit unterschiedlichen Initialisierungen des in der Implementierung verwendeten Zufallsgenerators, welcher für die Nukleationsorte neuer Poren verantwortlich ist, wiederholt. Zudem wurde diese zweite Simulationsreihe dazu genutzt, die Abhängigkeit der Porositätsentwicklung von der Spannung σ_∞ für konstante Materialparameter zu untersuchen. Genutzt wurden hierfür die in *Tab. 4.1* gelisteten Werte für Kupfer bei $T = 500$ °C und die drei Spannungsniveaus $\sigma_{\infty 1} = 6$ MPa, $\sigma_{\infty 2} = 10$ MPa und $\sigma_{\infty 3} = 20$ MPa. Die resultierenden dimensionslosen

Tab. 4.3: Verwendete Parameterkombinationen für Simulationsreihe 2.

Simulation	σ_∞/MPa	$\sqrt[3]{\widehat{D}_{\text{KG}}}$	$\widehat{\gamma}_S$	$\widehat{\alpha}_P$	\widehat{R}
$\sigma_{\infty 1}$	6	19,7656	0,297	0,24	104
$\sigma_{\infty 2}$	10	10,0025	0,178	0,24	70
$\sigma_{\infty 3}$	20	3,9695	0,089	0,24	42

Parameter für $\sqrt[3]{\widehat{D}_{KG}}$ und $\widehat{\gamma}_S$ sowie die verwendeten Werte für $\widehat{\alpha}_P$ und \widehat{R} sind in Tab. 4.3 zusammengetragen. Für die Spannungsniveaus $\sigma_{\infty 1}$ und $\sigma_{\infty 3}$ sind jeweils vier und für $\sigma_{\infty 2}$ fünf Wiederholungssimulationen (jeweils mit unterschiedlich initialisiertem Zufallsgenerator) durchgeführt worden.

4.2.2 Simulationsergebnisse

Alle durchgeführten Porenwachstumssimulationen starteten mit einer einzelnen neu hinzugefügten Pore und wurden beendet, wenn der geschädigte Flächenanteil der Korngrenze 50 % betrug. Letzteres trägt den in [CA82] formulierten Überlegungen Rechnung, dass Korngrenzen durch duktiles Aufreißen deutlich vor dem Erreichen eines geschädigten Flächenanteils von 100 % versagen. In Abb. 4.11 ist stellvertretend für alle Simulationen die zeitliche Porositätsentwicklung für Simulation 1 (siehe Tab. 4.2) anhand mehrerer Momentaufnahmen veranschaulicht. Die sich für Simulationsreihe 1 ergebenden Verläufe des geschädigten Flächenanteils $\omega = 1/\widehat{S}_0 \sum_{i=1}^{N_{S_0}} \pi \widehat{a}_i^2$ und der dimensionslosen Porendichte $\widehat{\rho} = a_{Ref}^2 \rho = N_{\widehat{S}_0} / \widehat{S}_0$ sind in Abb. 4.12 dargestellt.

Der Einfluss von \widehat{D}_{KG} kann anhand der Simulationen 1 bis 3 beobachtet werden. Aus Abb. 4.12a und Abb. 4.12b ist ersichtlich, dass je höher \widehat{D}_{KG} ist, desto schneller wächst der geschädigte Flächenanteil und desto kleiner ist das Maximum der Porendichte. Beides ist direkt mit der Tatsache verbunden, dass ein höherer Wert für \widehat{D}_{KG} zu höheren Porenwachstumsraten aufgrund von schnellerer Korngrendiffusion führt. Das schnellere Wachstum führt zu verstärktem Zusammenwachsen von Poren und ergibt bei konstanter Porennukleationsrate folglich eine Absenkung der maximalen Porendichte. Den genau umgekehrten Effekt kann man bei einer Verringerung von \widehat{D}_{KG} beobachten (siehe Simulation 2 in Abb. 4.12a und Abb. 4.12b).

In Abb. 4.12a und Abb. 4.12c ist der Einfluss von $\widehat{\gamma}_S$ dargestellt (Simulationen 1, 4 und 5). Es ist deutlich zu sehen, dass $\widehat{\gamma}_S$ die Porositätsentwicklung weniger stark beeinflusst als \widehat{D}_{KG} . Dennoch kann für einen hohen Wert für $\widehat{\gamma}_S$ (Simulation 5) eine schwache Verlangsamung der Porositätsentwicklung beobachtet werden. Im Rahmen des Diffusionsrandwertproblems führt ein großes $\widehat{\gamma}_S$ zu erhöhten Randspannungen $\sigma_i^{Rand}(a_i)$ (siehe (4.7)) und folglich bei konstanter Spannung σ_{∞} zu kleineren Gradienten im chemischen Potential, woraus sich letztendlich kleinere Wachstumsraten ergeben. Zudem wird durch die erhöhten Randspannungen das Sintern sehr kleiner Poren begünstigt. Letzteres kann sehr gut in Abb. 4.12c für

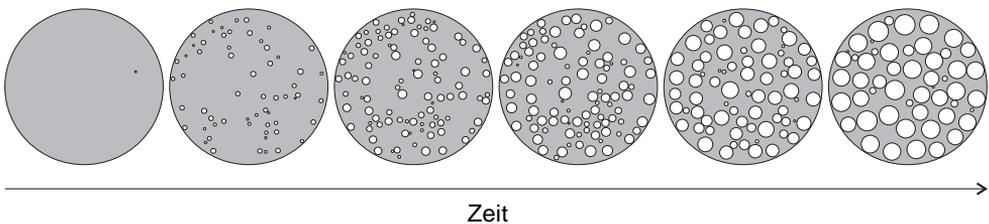


Abb. 4.11: Porositätsentwicklung für Simulation 1 (siehe Tab. 4.2).

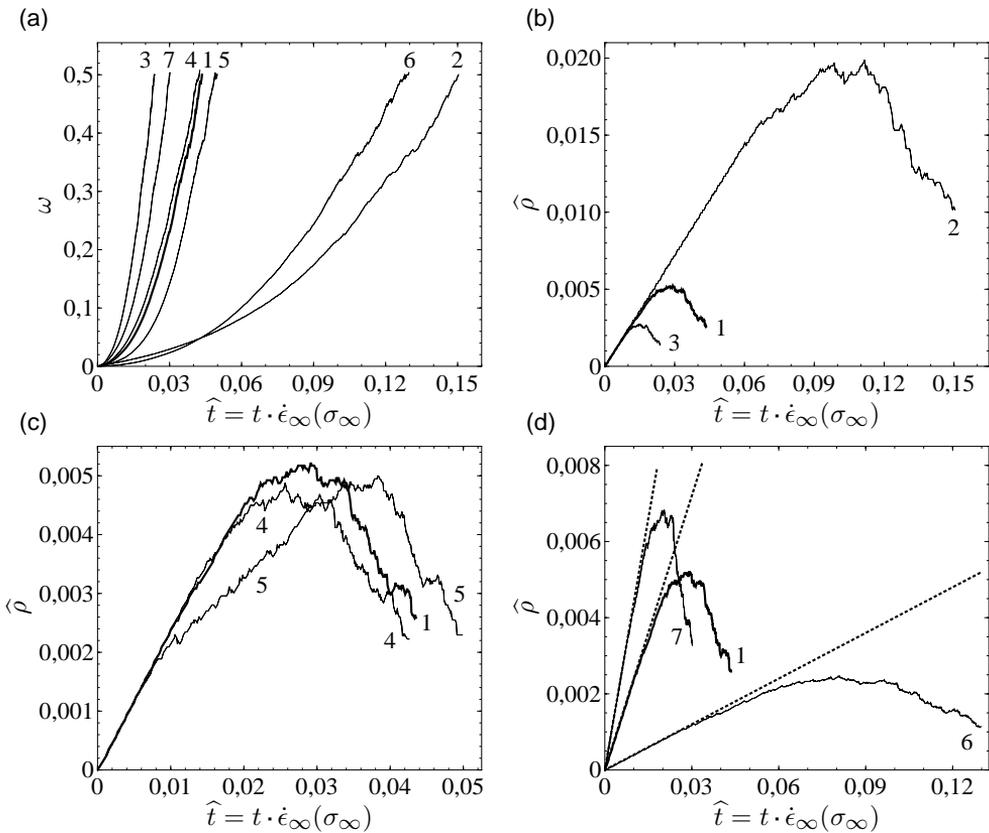


Abb. 4.12: Porositätsentwicklungen für Simulationsreihe 1, für welche jeweils der geschädigte Flächenanteil ω und die dimensionslose Porendichte $\hat{\rho}$ in Abhängigkeit von der skalierten Zeit \hat{t} dargestellt sind.

Simulation 5 bei $\hat{t} \approx 0,01$ beobachtet werden, wo das Sintern neu nukleierter Poren zu einer Verminderung des Anstiegs von $\hat{\rho}$ führt. Die Verringerung von $\hat{\gamma}_S$ in Simulation 4 führt lediglich zu einer minimalen Beschleunigung der Porositätsentwicklung im Vergleich zu Simulation 1, was auf eine geringe Erhöhung der Porenwachstumsraten infolge kleinerer Randspannungen $\sigma_i^{\text{Rand}}(a_i)$ zurückzuführen ist.

Im Gegensatz zu $\hat{\gamma}_S$ ist der Einfluss von $\hat{\alpha}_P$ auf die Porositätsentwicklung deutlich stärker ausgeprägt und für die untersuchten Parametervariationen mit dem Einfluss von \hat{D}_{KG} vergleichbar, wobei sich die Auswirkungen auf die Porendichte aber qualitativ voneinander unterscheiden. Ein höherer Wert für $\hat{\alpha}_P$ führt zu einer beschleunigten Porositätsentwicklung (siehe Simulation 7 in Abb. 4.12a), da zum einen jede neu nukleierte Pore einen kleinen Zuwachs an geschädigter Korngrenzfläche mit sich bringt. Zum anderen erhöht sich auch der Schädigungsbeitrag durch Porenwachstum, da aufgrund der höheren Nukleationsintensität mehr Poren pro Korngrenzfläche vorhanden sind. Der Einfluss von $\hat{\alpha}_P$ auf die Porendichte ist in Abb. 4.12d dargestellt, wobei die gestrichelten Linien zum Vergleich die konstante Nukleationsrate neuer Poren mit der zugehörigen Nukleationsintensität $\hat{\alpha}_P$ zeigen. Obwohl

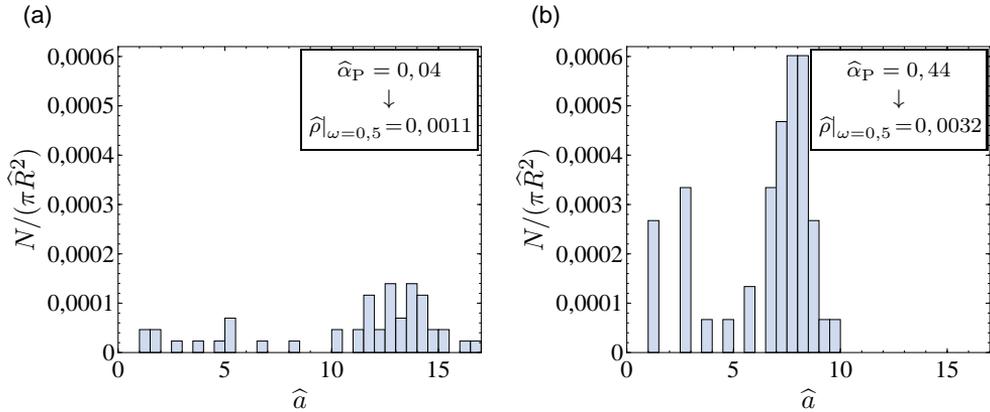


Abb. 4.13: Histogramme der Porengrößen, welche sich jeweils am Ende der zur Simulationsreihe 1 gehörenden Simulation 6 ((a) - niedrige Nukleationsintensität) und Simulation 7 ((b) - hohe Nukleationsintensität) ergaben.

während der gesamten Simulationszeit kontinuierlich neue Poren nukleieren, ist für alle Simulationen zu beobachten, dass die Porendichte im zeitlichen Verlauf zunächst ein Maximum erreicht und anschließend stetig abnimmt. Beides ist direkt mit dem Zusammenwachsen von Poren, was mit zunehmendem geschädigten Flächenanteil verstärkt stattfindet, verbunden. In *Abb. 4.13* sind die Porengrößenverteilungen für die niedrige und die hohe Nukleationsintensität $\hat{\alpha}_P$ (Simulation 6 und 7) jeweils am Ende einer Simulation ($\omega = 0,5$) dargestellt. Es ist deutlich zu sehen, dass sich sowohl die Formen der Verteilungen als auch die kumulierten Häufigkeiten, welche den zugehörigen Porendichten $\hat{\rho}$ entsprechen, voneinander unterscheiden. Für die niedrige Nukleationsintensität ergeben sich erwartungsgemäß weniger, dafür aber größere Poren, da die Porositätsentwicklung durch Porenwachstum geprägt ist. Bei gleichem geschädigten Flächenanteil ergeben sich durch die verstärkte Nukleation kleiner Poren im Falle der hohen Nukleationsintensität hingegen mehr, dafür aber kleine Poren.

Die Ergebnisse von Simulationsreihe 2 sind in *Abb. 4.14* dargestellt. Jede der durchgezogenen schwarzen Linien repräsentiert den Mittelwert von ω bzw. $\hat{\rho}$ für eine Gruppe von Simulationen, die mit den gleichen Materialparametern und der gleichen Spannung σ_∞ durchgeführt wurden. Die zugehörige Standardabweichung wird jeweils durch die gestrichelten Linien, welche eine durchgezogene Linie umschließen, angezeigt. Es ist zu beachten, dass die Ergebnisse in *Abb. 4.14* in Abhängigkeit von der skalierten Zeit $\hat{t} = t \cdot \dot{\epsilon}_\infty(\sigma_\infty)$, welche auch als akkumulierte Kriechdehnung ϵ_∞ in den angrenzenden Körnern eines idealen Biskristalls interpretiert werden kann (siehe Diskussion in Abschnitt 4.1.2), dargestellt sind. Aus *Abb. 4.14* ist ersichtlich, dass ϵ_∞ in Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen für verschiedene Belastungsfälle (siehe beispielsweise [Ils73]) mit abnehmender Spannung σ_∞ ebenfalls abnimmt. Die in *Abb. 4.14* beobachtbare Streuung um die Mittelwerte resultiert aus den zufälligen Porenanordnungen, welche sich innerhalb der unterschiedlichen Simulationen ausbilden. Dabei zeigt sich in *Abb. 4.14b* deutlich, dass die Standardabweichung nach dem Erreichen der maximalen Porendichte stark zunimmt, was direkt mit der Zunahme an zusammenwachsenden Poren und den resultierenden Veränderungen der Porenanordnungen ab

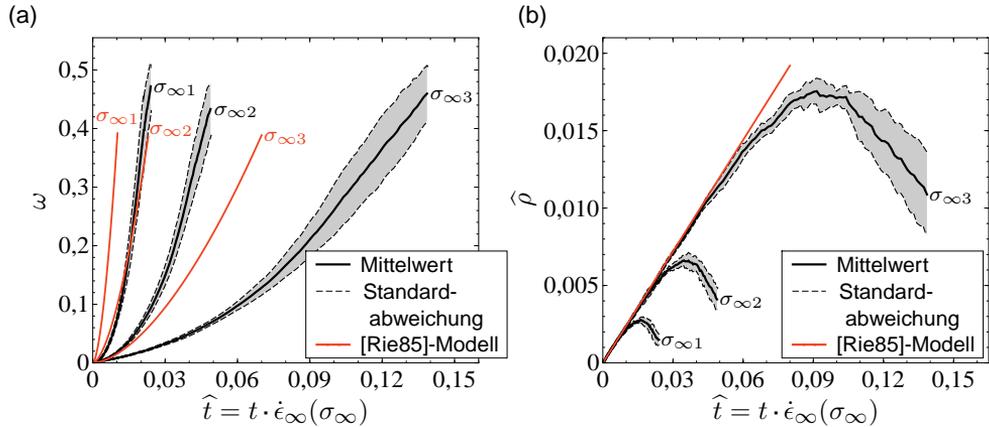


Abb. 4.14: Porositätsentwicklungen für Simulationsreihe 2, für welche jeweils der geschädigte Flächenanteil ω und die dimensionslose Porendichte $\hat{\rho}$ in Abhängigkeit von der skalierten Zeit \hat{t} dargestellt sind. Die in rot eingezeichneten Kurven zeigen die durch das analytische Modell [Rie85] vorhergesagten Porositätsentwicklungen.

diesem Zeitpunkt verbunden ist. Dennoch sind die beobachteten Streubereiche, die sich aus den zufälligen Porenanordnungen ergeben, signifikant kleiner als der Einfluss von σ_∞ .

Es sei noch darauf hingewiesen, dass für fast alle Simulationen eine mehr oder weniger ausgeprägte Abnahme von $\dot{\omega}$ zu beobachtet ist, wenn der geschädigte Flächenanteil sich dem Wert 50 % annähert. Dies ist eine Folge der Annahme, dass das Porenvolumen beim Zusammenwachsen zweier Poren erhalten bleiben soll. Der Effekt auf $\dot{\omega}$ ist dabei umso stärker ist, je größer die zusammenwachsenden Poren sind.

Die Betrachtung einer vollständigen Porenanordnung durch die hier verwendete Simulationsprozedur bringt unter anderem den Vorteil mit sich, dass Wechselwirkungen zwischen unterschiedlich angeordneten Poren berücksichtigt werden können. Dabei ist der Abstand zwischen benachbarten Poren von besonderer Bedeutung. Dies soll durch den Vergleich mit einem analytischen Modell verdeutlicht werden. In Abb. 4.14 sind zusätzlich zu den Simulationsergebnissen von Simulationsreihe 2 die Entwicklungen des geschädigten Flächenanteils und der Porendichte entsprechend dem in [Rie85] vorgeschlagenen Modell für die drei Spannungsniveaus $\sigma_{\infty 1}$, $\sigma_{\infty 2}$ und $\sigma_{\infty 3}$ dargestellt. Das Modell berücksichtigt kontinuierliche Nukleation neuer Poren und das diffusionsgesteuerte Wachstum einer Porenpopulation mit unterschiedlichen Porengrößen durch Betrachtung einer Porengrößenverteilungsfunktion. Durch eine Näherungslösung für die zugehörige Bilanzgleichung kann die zeitliche Entwicklung der Größenverteilung bestimmt und weiterverwendet werden, um den geschädigten Flächenanteil auszudrücken. Unter Berücksichtigung von (4.44) und (4.45) ergibt sich für die hier verwendeten Notationen:

$$\omega(\hat{t}) = 3\pi/5 \cdot \hat{\alpha}_P (6\hat{D}_{KG}/h(\psi))^{2/3} \cdot \hat{t}^{5/3}. \quad (4.49)$$

Da dieses Modell nicht das Zusammenwachsen von Poren berücksichtigt, ist ein Vergleich mit den Simulationsergebnissen nur in den frühen Porositätsstadien sinnvoll, wenn die Ent-

wicklungen der Porendichten keine zu großen Abweichungen voneinander zeigen. Aus *Abb. 4.14* ist ersichtlich, dass das Modell aus [Rie85] die Schädigungsentwicklung deutlich überschätzt, und zwar auch in den sehr frühen Stadien. Die langsamere Schädigungsentwicklung innerhalb der Simulationen ist auf die ungleichmäßigen Porenanordnungen und die daraus resultierenden unterschiedlich großen Diffusionswege zurückzuführen. Je größer der Abstand zwischen benachbarten Poren ist, desto größer sind die Diffusionswege entlang der Korngrenze und desto kleiner sind die Porenwachstumsraten. Da die einzelnen Poren jedoch nicht unabhängig voneinander wachsen können, sondern durch die Annahme starrer Körner gezwungen sind, eine einheitliche Korngrenzenaufdickungsrate $[[u]]^P$ zu realisieren, wird die Schädigungsentwicklung in den Simulationen maßgeblich durch die kleinsten Wachstumsraten begrenzt. Darüber hinaus wird in dem Modell aus [Rie85] der Einfluss der Porenrandspannung vernachlässigt, so dass es unmöglich ist, das Sintern neu nukleierter Poren für hohe Werte von $\hat{\gamma}_S$, so wie in Simulation 5 der ersten Simulationsreihe beobachtet (siehe *Abb. 4.12c*), zu beschreiben.

4.3 Entwicklung eines vereinfachten Porositätsmodells

Die in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen Porositätssimulationen zur Untersuchung der relevanten Material- und Belastungsparameter benötigten auf einem Workstation-Computer mit 3 GHz Dual-Core CPU und 8 GB Arbeitsspeicher jeweils ungefähr einen Tag an Berechnungszeit. Zwar erlaubt die angewendete Simulationsmethode die Berücksichtigung komplexerer Wechselwirkungen innerhalb einer vollständigen Porenpopulation, der benötigte Berechnungsaufwand ist dabei jedoch zu groß, um die Methode zur Beschreibung der Korngrenzenporosität innerhalb eines Polykristallmodells, welches über eine größere Anzahl von Korngrenzen verfügt, anzuwenden. Im Folgenden wird daher ein vereinfachtes Porositätsmodell vorgestellt, welches den in den Simulationen beobachteten Schädigungszustand einer Korngrenze durch globale Zustandsvariablen beschreibt und deren zeitlichen Verlauf durch Entwicklungsgleichungen abbildet.

4.3.1 Wahl von globalen Schädigungsvariablen

Als globale Schädigungsvariablen sollen hier und im Folgenden Variablen verstanden werden, welche einen bestimmten Aspekt des Schädigungszustandes einer durch eine Porenpopulation geschädigten Korngrenze mittels einer einzelnen Variable beschreiben. Mit der Porendichte ρ (bzw. der verwandten dimensionslosen Variable $\hat{\rho}$) und dem geschädigten Flächenanteil ω sind bereits zwei derartige Variablen in den vorangegangenen Abschnitten eingeführt worden. Die ebenfalls bereits eingeführte Korngrenzenaufdickung $[[u]]^P$ zählt auch zu den globalen Variablen und beschreibt das einheitliche Auseinanderdriften der angrenzenden Körner, einem Aspekt, der für die Betrachtung von Spannungsumlagerungen in einem Polykristall berücksichtigt werden muss. Darüber hinaus ist $[[u]]^P$ unter den in Abschnitt 4.1 getroffenen Annahmen nur durch Korngrenzendiffusion bestimmt und bleibt zudem während dem Zusammenwachsen von Poren invariant, da das Porenvolumen erhalten bleiben soll. Für die Beschreibung des Schädigungszustandes einer Korngrenze ist es daher sinnvoll, neben

der Porendichte ρ die auf $[[u]]^P$ basierende dimensionslose Schädigungsvariable β entsprechend der Definitionen

$$\rho = \frac{N_{S_0}}{S_0} \quad N_{S_0} = N_{\hat{S}_0} \quad \hat{\rho} = \frac{N_{\hat{S}_0}}{\hat{S}_0} \quad (4.50)$$

$$\beta = [[u]]^P \cdot \sqrt{\rho} = [[\hat{u}]]^P \cdot \sqrt{\hat{\rho}} \quad (4.51)$$

zu verwenden. Während ω die geschädigte Korngrenzenfläche charakterisiert, sind β und $[[u]]^P$ abhängig vom Volumen der Korngrenzenporen. Wie aber im folgenden Abschnitt gezeigt wird, besteht im achsensymmetrischen Fall ein direkter Zusammenhang zwischen β und ω .

4.3.2 Entwicklungsgleichungen für globale Schädigungsvariablen

Zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklungen von ρ und β sollen im Folgenden Entwicklungsgleichungen abgeleitet werden, welche die in den Porositätssimulationen beobachteten Mechanismen berücksichtigen. Dies ist auf analytischem Wege jedoch nur für eine vereinfachte Porenanordnung möglich. Für die weiteren Betrachtungen wird daher von einer achsensymmetrischen Porenanordnung ausgegangen, welche näherungsweise einer gleichmäßigen Anordnung gleich großer Poren mit Radius \hat{a} und mit konstantem Abstand $2\hat{c}$ voneinander entspricht (siehe *Abb. 4.15*). Der Radius \hat{a} und der Abstand $2\hat{c}$ können dabei im Rahmen der vereinfachten Modellbildung als Effektivwerte einer vollständigen Porenpopulation angesehen werden. Darüber hinaus sollen die Entwicklungsgleichungen hier in dimensionsloser Form bezüglich der Normierung aus Abschnitt 4.1.3 angegeben werden, was die resultierenden Gleichungen vereinfacht. Im folgenden wird daher auch die Notation

$$(\dot{\dots}) = \frac{d(\dots)}{d\hat{t}} \quad (4.52)$$

verwendet (siehe (4.41)), um Zeitableitungen und Raten bezüglich der dimensionslosen Zeit \hat{t} auszudrücken.

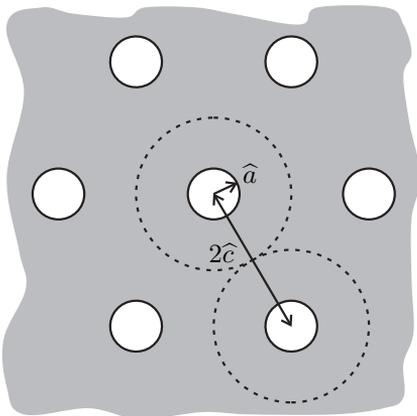


Abb. 4.15: Achsensymmetrische Porenanordnung: Entspricht einer gleichmäßigen Anordnung gleich großer Poren.

Für eine einzelne Pore mit Radius \hat{a} in einer achsensymmetrischen Anordnung beträgt das Volumen $\hat{V} = 4\pi h(\psi)\hat{a}^3/3$ und die mit einer Pore assoziierte Korngrenzfläche $\hat{S}_0 = \pi\hat{c}^2$. Mit diesen beiden Größen ergeben sich die Korngrenzaufdickung und die Porendichte zu

$$[[\hat{u}]]^P = \frac{\hat{V}}{\hat{S}_0} = \frac{4}{3}h(\psi)\frac{\hat{a}^3}{\hat{c}^2} \quad \text{und} \quad \hat{\rho} = \frac{1}{\pi\hat{c}^2}. \quad (4.53)$$

Durch Auflösen von (4.51) und (4.53) nach \hat{a} , \hat{c} und ω ergeben sich weiterhin die Zusammenhänge

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{\hat{\rho}}} \sqrt[3]{\frac{3}{4} \frac{\beta}{h(\psi)\pi}} = \sqrt{\frac{\omega}{\pi\hat{\rho}}}, \quad \hat{c} = \frac{1}{\sqrt{\pi\hat{\rho}}} \quad \text{und} \quad \omega = \omega(\beta) = \frac{\hat{a}^2}{\hat{c}^2} = \sqrt[3]{\frac{9\pi\beta^2}{16h^2(\psi)}}. \quad (4.54)$$

Die letzte Gleichung zeigt im Übrigen, dass, wie bereits angekündigt, der geschädigte Flächenanteil ω im achsensymmetrischen Fall nur von β abhängt ($h(\psi) = \text{konst.}$ wird vorausgesetzt).

In Anlehnung an die Simulationsprozedur und die Simulationsergebnisse soll die Entwicklungsgleichung für die Porendichte $\hat{\rho}$ dem einfachen Zusammenhang

$$\dot{\hat{\rho}} = \dot{\hat{\rho}}_P - \dot{\hat{\rho}}_A \quad (4.55)$$

genügen, worin $\dot{\hat{\rho}}_P$ eine Produktionsrate und $\dot{\hat{\rho}}_A$ eine Annihilationsrate sind. Die Produktionsrate $\dot{\hat{\rho}}_P$ entspricht dabei der in den Simulationen verwendeten Nukleationsrate und ergibt sich unter Berücksichtigung der Zeitskalierung gemäß (4.46) zu

$$\dot{\hat{\rho}}_P = \frac{N^* \hat{S}_0}{\hat{S}_0} = \hat{\alpha}_P. \quad (4.56)$$

Für die Beschreibung der Annihilationsrate $\dot{\hat{\rho}}_A$ muss eine Unterscheidung zwischen Porenwachstum $\hat{a} \geq 0$ und Porenschrumpfen $\hat{a} < 0$ vorgenommen werden:

$$\dot{\hat{\rho}}_A = \begin{cases} \dot{\hat{\rho}}_{A.ZW}^* & , \text{ wenn } \hat{a} \geq 0 \\ \dot{\hat{\rho}}_{A.S}^* & , \text{ wenn } \hat{a} < 0 \end{cases}. \quad (4.57)$$

Wachsen die Poren auf einer Korngrenze, so wird die Porenanzahl durch das Zusammenwachsen reduziert. Eine Annihilationsrate für das Zusammenwachsen von Poren $\dot{\hat{\rho}}_{A.ZW}^*$ wird im übernächsten Abschnitt hergeleitet. Im Falle von Porenschrumpfen wird die Porenanzahl hingegen durch das vollständige Sintern sehr kleiner Poren reduziert. Die Identifikation einer Annihilationsrate für das Sintern von Poren $\dot{\hat{\rho}}_{A.S}^*$ erfolgt anhand von Ergebnissen einer gesonderten, in Abschnitt 4.4 beschriebenen Untersuchung von Porenschrumpfen.

Da die Schädigungsvariable β keine unmittelbare physikalische oder geometrische Bedeutung hat, ist es auf direktem Wege nicht möglich, einen mikromechanisch naheliegenden An-

satz, wie beispielsweise für die Porendichte, zu verfolgen. Entsprechend der Definition (4.51) setzt sich β aber aus der Korngrenzenaufdickung und der Porendichte zusammen, wobei die Korngrenzenaufdickung wiederum durch das Volumen der Poren bestimmt ist. Aufgrund des geometrischen Zusammenhangs zwischen Porenvolumen \widehat{V} und Porenradius \widehat{a} kann das Porenwachstum durch die radiale Wachstumsrate \widehat{a}^* berücksichtigt werden. Um nun eine Entwicklungsgleichung für β anzugeben, wird angenommen, dass β^* eine Funktion von $\widehat{\rho}$ und \widehat{a} ist:

$$\beta^* = \beta^*(\widehat{\rho}, \widehat{a}) . \quad (4.58)$$

Folglich kann β^* auf die zeitliche Veränderung von $\widehat{\rho}$ und die radiale Wachstumsrate \widehat{a}^* zurückgeführt werden:

$$\dot{\beta}^* = \frac{\partial \beta^*}{\partial \widehat{\rho}} \dot{\widehat{\rho}} + \frac{\partial \beta^*}{\partial \widehat{a}} \dot{\widehat{a}} . \quad (4.59)$$

Aus den geometrischen Beziehungen (4.51) und (4.53) lassen sich die beiden partiellen Ableitungen bestimmen und es folgt:

$$\dot{\beta}^* = \frac{3}{2} \frac{\beta^*}{\widehat{\rho}} \dot{\widehat{\rho}} + \frac{3\beta^*}{\widehat{a}} \dot{\widehat{a}} . \quad (4.60)$$

Durch Einsetzen von (4.55) ergibt sich schließlich

$$\dot{\beta}^* = \frac{3}{2} \frac{\beta^*}{\widehat{\rho}} \left(\dot{\widehat{\rho}}_P - \dot{\widehat{\rho}}_A \right) + \frac{3\beta^*}{\widehat{a}} \dot{\widehat{a}} . \quad (4.61)$$

4.3.3 Porenwachstum

Das Porenwachstum ist für die Porositätsentwicklung von zentraler Bedeutung und beeinflusst dabei nicht nur die Porengröße, sondern ist, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, auch ein wesentlicher Aspekt bei der Beschreibung des Zusammenwachsens von Poren. Im Rahmen des vereinfachten Porositätsmodells soll Porenwachstum durch einen analytischen Ausdruck für die radiale Wachstumsrate \widehat{a}^* berücksichtigt werden. Für eine achsensymmetrische Porenanordnung kann das Diffusionsrandwertproblem analytisch gelöst und ein expliziter Ausdruck für \widehat{a}^* abgeleitet werden (siehe [Rie87]). In der hier verwendeten dimensionslosen Formulierung ergibt sich für die radiale Wachstumsrate

$$\widehat{a}^* = \widehat{D}_{\text{KG}} \frac{2}{h(\psi)} \frac{\widehat{\sigma}_\infty - \widehat{\sigma}^{\text{Rand}}(\widehat{a}) \cdot (1 - \omega)}{\widehat{a}^2 q(\omega)} \quad (4.62)$$

mit

$$q(\omega) = -2 \ln \omega - (3 - \omega)(1 - \omega) , \quad (4.63)$$

$$\widehat{\sigma}^{\text{Rand}}(\widehat{a}) = 2\widehat{\gamma}_S \sin \psi / \widehat{a} , \quad (4.64)$$

$$\widehat{\sigma}_\infty = \sigma_\infty / \widehat{\sigma}_{\text{Ref}} = 1 , \text{ entsprechend (4.46) .} \quad (4.65)$$

4.3.4 Zusammenwachsen von Poren

Die Berücksichtigung des Zusammenwachsens von Poren in einem analytischen Modell erfordert mehrere vereinfachende Annahmen, da die Porenanordnung, genauer gesagt die relativen Positionen von Poren zueinander, der wichtigste Aspekt für das Zusammenwachsen ist. Jedoch stehen entsprechende Informationen aufgrund der Annahme einer achsensymmetrischen Porenanordnung nicht zur Verfügung.

Für die Herleitung von $\hat{\rho}_{A.ZW}^*$ wird daher, wie in [Wil87a] und [Fed98], auf eine probabilistische Beschreibung des Zusammenwachsens zurückgegriffen. Hierfür wird angenommen, dass die Porendichte $\hat{\rho}$ homogen und die Positionen von Poren unkorreliert und zufällig entlang der Korngrenze sind. Folglich kann die Wahrscheinlichkeit, dass sich N Poren auf einer Korngrenzenfläche \hat{A} befinden, durch die Poisson-Verteilung

$$P(k = N, \hat{A}) = \frac{(\hat{\rho} \cdot \hat{A})^k}{k!} \exp(-\hat{\rho} \cdot \hat{A}) \quad (4.66)$$

ausgedrückt werden, worin $\hat{\rho} \cdot \hat{A}$ der Erwartungswert der Porenanzahl auf der Fläche \hat{A} ist. Daraus ergibt sich die Wahrscheinlichkeit, dass sich genau eine Pore auf der Korngrenzenfläche \hat{A} befindet, zu

$$P(k = 1, \hat{A}) = \hat{\rho} \cdot \hat{A} \cdot \exp(-\hat{\rho} \cdot \hat{A}) . \quad (4.67)$$

Im Sinne einer vereinfachten Modellbildung soll weiterhin nur das Zusammenwachsen zweier gleich großer Poren betrachtet werden. Die Wahrscheinlichkeiten, dass drei oder mehr Poren gleichzeitig zusammenwachsen, werden als klein angesehen, so dass diese Fälle für die Herleitung von $\hat{\rho}_{A.ZW}^*$ nicht berücksichtigt werden.

Wachsen zwei gleich große Poren mit Radius \hat{a} innerhalb eines Zeitinkrements Δt jeweils

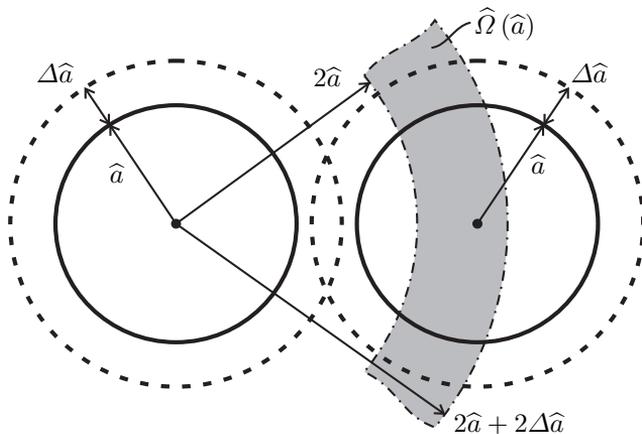


Abb. 4.16: Veranschaulichung der lokalen Porenanordnung unmittelbar vor dem Zusammenwachsen zweier gleich großer Poren.

um $\Delta\hat{a}$, dann kann eine Kreisringfläche

$$\hat{\Omega} = 4\pi \left(2\hat{a} \Delta\hat{a} + \Delta\hat{a}^2 \right) \quad (4.68)$$

definiert werden (siehe *Abb. 4.16*), in dessen Zentrum sich eine der beiden betrachteten Poren befindet. Ein Zusammenwachsen der beiden Poren innerhalb eines Zeitinkrements $\Delta\hat{t}$ findet genau dann und nur dann statt, wenn sich die zweite Pore innerhalb der Kreisringfläche $\hat{\Omega}$ befindet. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich eine Pore im Kreisring $\hat{\Omega}$ befindet, ergibt sich aus (4.67) für $\hat{A} = \hat{\Omega}$. Die Gesamtzahl an Porenpaaren, die pro Einheitsfläche unter homogenen Bedingungen innerhalb von $\Delta\hat{t}$ zusammenwachsen, kann dann durch

$$\begin{aligned} \Delta\hat{t} \cdot \hat{\rho}_{A.ZW}^* &= \frac{1}{2} \cdot \hat{\rho} \cdot P \left(k = 1, \hat{A} = \hat{\Omega}(\hat{a}) \right) \\ &= \frac{1}{2} \cdot \hat{\rho}^2 \cdot 4\pi \left(2\hat{a} \Delta\hat{a} + \Delta\hat{a}^2 \right) \cdot \exp \left(-\hat{\rho} \cdot 4\pi \left(2\hat{a} \Delta\hat{a} + \Delta\hat{a}^2 \right) \right) \\ &= 4\pi \hat{\rho}^2 \hat{a} \Delta\hat{a} + \mathcal{O}(\Delta\hat{a}) \end{aligned} \quad (4.69)$$

abgeschätzt werden, wobei der Faktor $1/2$ der Tatsache Rechnung trägt, dass beim Zusammenwachsen nur eine Pore pro Porenpaar verschwindet. Zudem wurde im letzten Umformschritt eine Entwicklung in eine Potenzreihe bezüglich $\Delta\hat{a}$ durchgeführt. Durch Betrachtung des Grenzfalls $\Delta\hat{t} \rightarrow 0$ und Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung bezüglich $\Delta\hat{a}$ ergibt sich daraus die Annihilationsrate für das Zusammenwachsen von Poren zu

$$\hat{\rho}_{A.ZW}^* = 4\pi \hat{\rho}^2 \hat{a}^*, \quad (4.70)$$

worin $\hat{\rho}$ die aktuelle Porendichte ist. Der Zusammenhang (4.70) ist dabei mit dem in [Wil87a] präsentierten Ausdruck vergleichbar. Während in [Wil87a] aber von einer konstanten Anfangsporendichte ausgegangen wurde, wird in (4.70) die aktuelle Porendichte verwendet.

4.3.5 Direktes Sintern neuer Poren

Innerhalb der durchgeführten Porositätssimulationen wurde oft beobachtet, dass neue Poren direkt nach ihrer Nukleation sehr schnell schrumpfen und schließlich vollständig sintern, wenn der Nukleationsort in der Nähe einer hinreichend großen bereits existierenden Pore liegt. In einem solchen Fall sind in der unmittelbaren Umgebung der größeren Pore die aus dem Diffusionsrandwertproblem resultierenden lokalen Normalspannungen in der ungeschädigten Korngrenzenfläche niedriger als die Randspannung der neuen Pore. Entsprechend der zugehörigen chemischen Potentiale bildet sich ein Diffusionsfluss von Atomen hin zur neuen Pore aus, so dass diese schrumpft.

Eine derartige Situation ist der zufälligen und unkorrelierten Wahl von Nukleationsorten während einer Porositätssimulation geschuldet und spielt für hohe Werte der skalierten Oberflächenenergie $\hat{\gamma}_S$ eine Rolle. Ist die lokale Normalspannung an einem Punkt der ungeschädigten Korngrenzenfläche zu niedrig, als dass sich eine stabile neue Pore bilden kann, so führt dies effektiv zu einer Verringerung der globalen Nukleationsrate, so wie es in *Abb. 4.12c* für Simulation 5 zu beobachten ist.

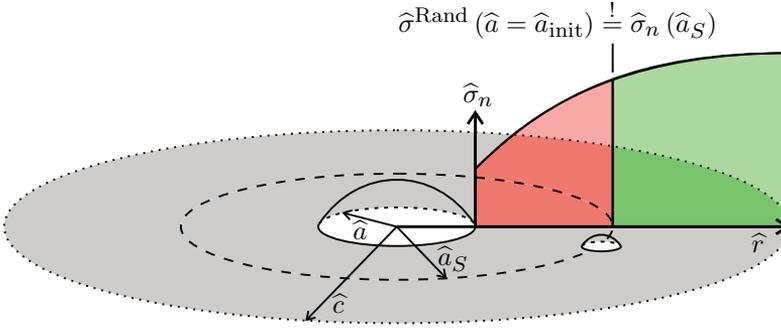


Abb. 4.17: Veranschaulichung der lokalen Normalspannungen in der ungeschädigten Korngrenzenfläche für eine achsensymmetrische Porenanordnung.

Um diesen Effekt innerhalb des vereinfachten Porositätsmodells zu berücksichtigen, soll die vorgegebene Nukleationsrate $\hat{\rho}_P^*$ auf Basis einer Abschätzung für die Wahrscheinlichkeit, dass die zuvor diskutierte Situation eintritt, angepasst werden.

Um die lokalen Normalspannungen in der Umgebung einer existierenden Pore mit Radius \hat{a} abzuschätzen, wird wieder auf die analytische Lösung für die achsensymmetrische Porenanordnung zurückgegriffen. Die Normalspannung $\hat{\sigma}_n$ in der ungeschädigten Korngrenzenfläche in einer Entfernung \hat{r} vom Porenzentrum ist gegeben durch (siehe [Rie87])

$$\hat{\sigma}_n(\hat{r}) = \hat{\sigma}^{\text{Rand}}(\hat{a}) + \frac{1}{8\hat{D}_{\text{KG}}} \llbracket \hat{u} \rrbracket^{\text{P}} \left(4\hat{c}^2 \ln\left(\frac{\hat{r}}{\hat{a}}\right) - 2(\hat{r}^2 - \hat{a}^2) \right). \quad (4.71)$$

Wie in *Abb. 4.17* dargestellt, lässt sich die ungeschädigte Korngrenzenfläche in zwei Kreisringe unterteilen. Innerhalb des Kreisrings mit Innenradius \hat{a}_S und Außenradius \hat{c} ist die lokale Normalspannung größer als die Randspannung $\hat{\sigma}^{\text{Rand}}$ einer neuen Pore mit Radius $\hat{a}_{\text{init}} = a_{\text{init}}/a_{\text{Ref}} = 1$, so dass in diesem Bereich stabile neue Poren nukleieren können. Im Gegensatz dazu würden Poren innerhalb des Kreisrings mit Innenradius \hat{a} und Außenradius \hat{a}_S gar nicht erst entstehen. Der kritische Radius \hat{a}_S ergibt sich entsprechend diesen Überlegungen aus der Bedingung

$$\hat{\sigma}^{\text{Rand}}(\hat{a} = \hat{a}_{\text{init}}) \stackrel{!}{=} \hat{\sigma}_n(\hat{a}_S). \quad (4.72)$$

Um die Größe des inneren Kreisrings abzuschätzen, wird (4.71) in (4.72) eingesetzt und das Verhältnis $\eta = \hat{a}_S/\hat{a}$ eingeführt, so dass sich nach Umformung

$$4\pi\hat{D}_{\text{KG}}\hat{\rho} \left(\hat{\sigma}^{\text{Rand}}(\hat{a}_{\text{init}}) - \hat{\sigma}^{\text{Rand}}(\hat{a}) \right) \left(\llbracket \hat{u} \rrbracket^{\text{P}} \right)^{-1} = 2 \ln \eta - (\eta^2 - 1) \omega \quad (4.73)$$

ergibt. Vereinfachend soll angenommen werden, dass das direkte Sintern neuer Poren nur einen kleinen Einfluss auf $\llbracket \hat{u} \rrbracket^{\text{P}}$ hat. Diese Annahme erscheint gerechtfertigt, da die kleinen Poren innerhalb der Simulationen nur wenig zum Gesamtporenvolumen beitragen.

Eine Abschätzung $\llbracket \hat{u} \rrbracket^{\text{P}*}$ für die Korngrenzenaufdickungsrate kann entsprechend (4.51) mit-

tels der beiden Entwicklungsgleichungen (4.55) und (4.61) durch

$$\llbracket \hat{u} \rrbracket^{P^*} = \frac{\beta}{\sqrt{\hat{\rho}}} \left(\frac{1}{\beta} \hat{\rho}^* - \frac{1}{2\hat{\rho}} \hat{\rho}^* \right) = \frac{\beta}{\sqrt{\hat{\rho}^3}} \left(\hat{\rho}_P^* - \hat{\rho}_A^* \right) + \frac{3\beta}{\hat{a}\sqrt{\hat{\rho}}} \hat{a} \quad (4.74)$$

angegeben werden. Um schließlich die Größe des inneren Kreisrings abzuschätzen, muss η aus (4.73) bestimmt werden. Dies ist auf analytischem Wege jedoch nicht ohne Vereinfachung der rechten Seite von (4.73) möglich. Bei der Untersuchung verschiedener Vereinfachungen zeigte sich, dass das Sintern neuer Poren zufriedenstellend beschrieben werden kann, wenn ausschließlich der logarithmische Term für η berücksichtigt wird. Durch Auflösen nach η folgt somit:

$$\eta = \exp \left(2\pi \hat{D}_{\text{KKG}} \hat{\rho} \left(\hat{\sigma}^{\text{Rand}}(\hat{a}_{\text{init}}) - \hat{\sigma}^{\text{Rand}}(\hat{a}) \right) \left(\llbracket \hat{u} \rrbracket^{P^*} \right)^{-1} \right). \quad (4.75)$$

Da die Nukleationsorte neuer Poren auf der ungeschädigten Korngrenzenfläche zufällig und unabhängig von existierenden Poren sein sollen, ergibt sich die Wahrscheinlichkeit f , dass eine neue Pore im inneren Kreisring nukleiert, aus dem Verhältnis der Fläche des inneren Kreisrings zur gesamten ungeschädigten Korngrenzenfläche:

$$f = \frac{\hat{a}_S^2 - \hat{a}^2}{\hat{c}^2 - \hat{a}^2} = \frac{\omega(\eta - 1)}{1 - \omega}. \quad (4.76)$$

Folglich beträgt die Menge an Poren mit Nukleationsorten innerhalb des inneren Kreisrings $f \cdot \hat{\rho}_P^*$. Das direkte Sintern neuer Poren wird schließlich innerhalb des vereinfachten Modells berücksichtigt, indem die vorgegebene Nukleationsrate für eine ungeschädigte Korngrenzenfläche $\hat{\rho}_P^*$ durch die effektive Nukleationsrate ersetzt wird:

$$\hat{\rho}_P^* \longrightarrow (1 - f) \hat{\rho}_P^*. \quad (4.77)$$

Da das Volumen neuer Poren klein ist, sind die Auswirkungen des direkten Sinterns auf β ebenfalls klein. Daher wird die Modifikation (4.77) nur auf (4.55), nicht jedoch auf (4.61) angewendet.

Bei der Verwendung von (4.75) ist darüber hinaus zu beachten, dass das Argument der Exponentialfunktion größer als Null sein muss, damit $\eta \geq 1$ erfüllt wird. Da $\hat{a}_{\text{init}} \leq \hat{a}$ und folglich $\hat{\sigma}^{\text{Rand}}(\hat{a}_{\text{init}}) - \hat{\sigma}^{\text{Rand}}(\hat{a}) \geq 0$ gilt, kann (4.75) nur angewendet werden, wenn $\llbracket \hat{u} \rrbracket^{P^*} > 0$ erfüllt ist. Dies kann jedoch für die Betrachtung von Porennukleation vorausgesetzt werden, da $\llbracket \hat{u} \rrbracket^P$ durch das Volumen neuer Poren zunimmt. Der Fall, dass neue Poren nukleieren, während gleichzeitig vorhandene Poren schrumpfen, ist aus physikalischer Sicht sehr unwahrscheinlich. Viel mehr würden neue Poren gar nicht erst entstehen, wenn die Bedingungen das Schrumpfen bereits existierender Poren bewirken.

4.3.6 Finales Porositätsmodell

Im Rahmen des vereinfachten Porositätsmodells, welches in den vorangegangenen Abschnitten präsentiert wurde, werden alle Mechanismen, die in den durchgeführten Porositätssimulationen beobachtet wurden, durch analytische Ausdrücke berücksichtigt. Da die Modellgleichungen (4.54), (4.55), (4.61), (4.62), (4.70), (4.74), (4.75), (4.76) und (4.77) unter Zuhilfenahme von notwendigen Vereinfachungen abgeleitet wurden, zu denen vor allem die Annahme einer achsensymmetrischen Porenanordnung gehört, ist die Einführung von vier Fitparametern χ_1 bis χ_4 notwendig, um das Porositätsverhalten der Simulationen bestmöglich abzubilden. Die finalen Modellgleichungen sind einschließlich der Fitparameter in (4.78) bis (4.90) zusammengefasst:

$$\widehat{a_{\text{Ref}}} = a_{\text{init}} \quad , \quad \widehat{\sigma_{\text{Ref}}} = \sigma_{\infty} \quad , \quad \widehat{t_{\text{Ref}}} = \frac{1}{\dot{\epsilon}_{\infty}(\sigma_{\infty})} \quad , \quad (4.78)$$

$$\widehat{\beta}^* = \frac{3}{2} \frac{\beta}{\widehat{\rho}} \left(\widehat{\rho}_{\text{P}}^* - \widehat{\rho}_{\text{A}}^* \right) + \frac{3\beta}{\widehat{a}} \widehat{a}^* \quad , \quad (4.79)$$

$$\widehat{\rho}^* = (1 - f) \widehat{\rho}_{\text{P}}^* - \widehat{\rho}_{\text{A}}^* \quad , \quad (4.80)$$

$$\widehat{a}^* = \chi_1 \cdot \widehat{D}_{\text{KG}} \frac{2}{h(\psi)} \frac{\widehat{\sigma}_{\infty} - \widehat{\sigma}^{\text{Rand}}(\widehat{a}) \cdot (1 - \chi_2 \cdot \omega)}{\widehat{a}^2 q(\chi_2 \cdot \omega)} \quad , \quad (4.81)$$

$$\widehat{\sigma}^{\text{Rand}}(\widehat{a}) = 2\widehat{\gamma}_{\text{S}} \sin \psi / \widehat{a} \quad , \quad (4.82)$$

$$q(\omega) = -2 \ln \omega - (3 - \omega)(1 - \omega) \quad , \quad (4.83)$$

$$h(\psi) = \left[(1 + \cos \psi)^{-1} - \frac{1}{2} \cos \psi \right] / \sin \psi \quad , \quad (4.84)$$

$$\omega = \sqrt[3]{\frac{9\pi\beta^2}{16h^2(\psi)}} \quad , \quad \widehat{a} = \sqrt{\frac{\omega}{\pi\widehat{\rho}}} \quad , \quad (4.85)$$

$$\widehat{\rho}_{\text{A}}^* = \chi_3 \cdot 4\pi\widehat{\rho}^2 \widehat{a} \widehat{a}^* \quad , \quad (4.86)$$

$$f = \min \left\{ 1, \frac{\omega(\eta - 1)}{1 - \omega} \right\} \quad (\text{wegen vereinfachter Bestimmung von } \eta) \quad , \quad (4.87)$$

$$\eta = \exp \left(\chi_4 \cdot 2\pi \widehat{D}_{\text{KG}} \widehat{\rho} \left(\widehat{\sigma}^{\text{Rand}}(\widehat{a}_{\text{init}}) - \widehat{\sigma}^{\text{Rand}}(\widehat{a}) \right) \left(\llbracket \widehat{a} \rrbracket^{\text{P}^*} \right)^{-1} \right) \quad , \quad (4.88)$$

$$\llbracket \widehat{a} \rrbracket^{\text{P}^*} = \frac{\beta}{\sqrt{\widehat{\rho}^3}} \left(\widehat{\rho}_{\text{P}}^* - \widehat{\rho}_{\text{A}}^* \right) + \frac{3\beta}{\widehat{a}\sqrt{\widehat{\rho}}} \widehat{a}^* \quad , \quad (4.89)$$

$$\chi_1 = 0,256 \quad , \quad \chi_2 = 1,230 \quad , \quad \chi_3 = 1,334 \quad , \quad \chi_4 = 1,683 \quad . \quad (4.90)$$

Die Fitparameter wurden durch Anpassung an die Simulationsergebnisse bestimmt, wozu die Residuumsfunktion

$$F_{\text{Res}} = \sum_k^{\text{Simulationen}} \left\{ \sum_i^{\text{Zeitschritte}} \left[\left(\frac{\beta_{k,i}^{\text{Sim}} - \beta_{k,i}^{\text{Modell}}}{\beta_{k,i}^{\text{Sim}}} \right)^2 + \left(\frac{\hat{\rho}_{k,i}^{\text{Sim}} - \hat{\rho}_{k,i}^{\text{Modell}}}{\hat{\rho}_{k,i}^{\text{Sim}}} \right)^2 \right] \right\} \quad (4.91)$$

definiert wurde und worin $\beta_{k,i}^{\text{Sim}}$ der Wert von β in der Simulation und $\beta_{k,i}^{\text{Modell}}$ der Wert des vereinfachten Modells jeweils im i -ten Zeitschritt der k -ten Simulation sind (gleiches gilt für $\hat{\rho}$). Die Anpassung der Fitparameter (4.90) erfolgte dabei in zwei Schritten. Zunächst wurde ein Wert für χ_4 bestimmt, welcher das direkte Sintern neuer Poren beeinflusst. Hierzu wurden die Fitparameter innerhalb eines Anpassungsprozesses iterativ durch Minimierung von F_{Res} bestimmt, wobei ausschließlich die Simulation mit dem größten Wert für $\hat{\gamma}_S$ (Simulation 5 in Tab. 4.2) in F_{Res} betrachtet wurde. Der resultierende Wert $\chi_4 = 1,683$ erlaubte dabei eine gute Beschreibung des direkten Sintern durch das Modell. Anschließend wurden die übrigen Fitparameter in einem zweiten Anpassungsprozess bestimmt, wobei der zuvor bestimmte Wert für χ_4 unverändert beibehalten wurde und dieses Mal alle Simulationen (Simulationsreihe 1 und 2) in F_{Res} betrachtet wurden.

Da die Vereinfachungen und Annahmen während der Herleitung des vereinfachten Modells im Wesentlichen die Betrachtung einer achsensymmetrischen Porenanordnung betreffen und die Fitparameter ohne weitere Modifikation der Gleichungen eingefügt wurden, können Abweichungen der Fitparameter vom Wert 1 als Maß dafür betrachtet werden, inwiefern sich das Porositätsverhalten in den Simulationen von einer rein achsensymmetrischen Modellbeschreibung unterscheidet. Beispielsweise drückt der Wert $\chi_1 = 0,256$ die Reduktion der Porenwachstumsraten innerhalb der Simulationen aufgrund von Wechselwirkungen zwischen unterschiedlich großen und ungleichmäßig angeordneten Poren aus. Dabei handelt es sich um eine Erkenntnis, die bereits aus anderen Studien [FHD85; CD88; YC90a; FO09] bekannt

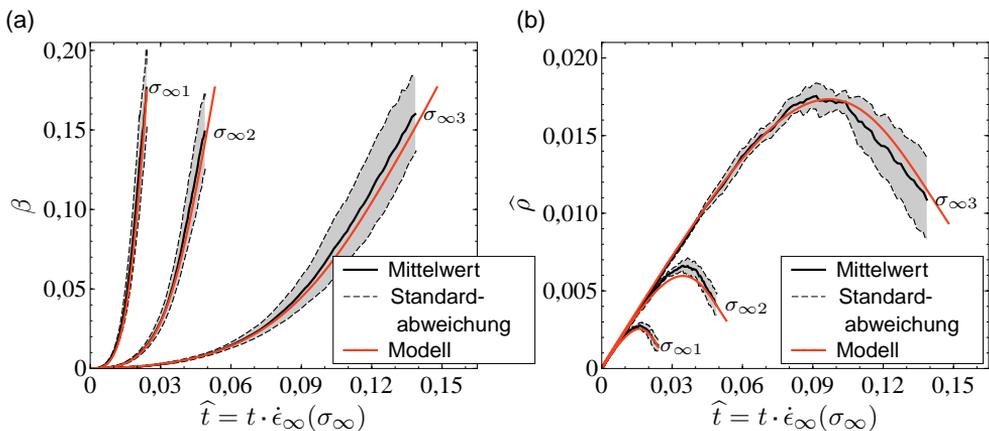


Abb. 4.18: Vergleich der Porositätsentwicklungen zwischen dem vereinfachten Modell (rot) und den Ergebnissen von Simulationsreihe 2 aus Abschnitt 4.2.2.

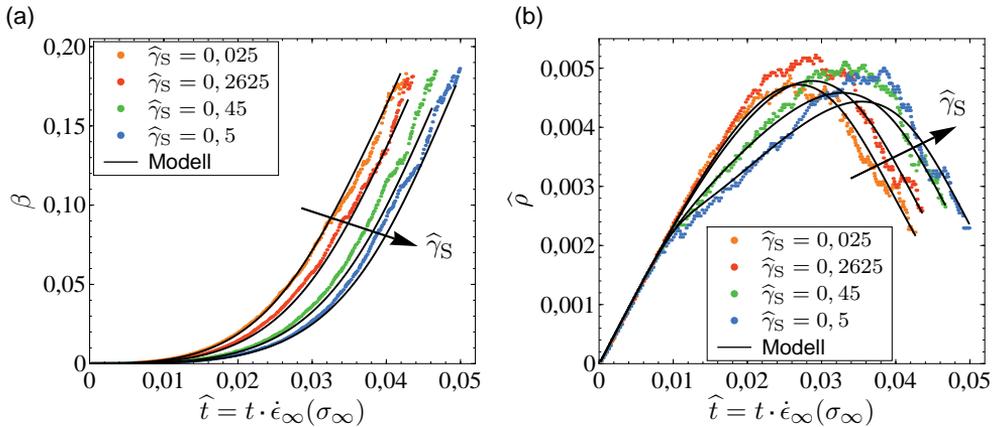


Abb. 4.19: Veranschaulichung des Einflusses von $\hat{\gamma}_S$, welcher durch das vereinfachte Modell (schwarze Linien) gut reproduziert wird.

ist. Ebenso zeigt der Wert $\chi_3 = 1,334$, dass die Häufigkeit, mit der Zusammenwachsen für unterschiedlich große und ungleichmäßig angeordnete Poren stattfindet, durch eine rein achsensymmetrische Beschreibung unterschätzt werden würde.

Das vereinfachte Porositätsmodell ist mit angepassten Fitparametern in der Lage, für alle untersuchten Parameterkombinationen von \hat{D}_{KG} , $\hat{\gamma}_S$ und $\hat{\alpha}_P$ die zeitlichen Entwicklungen der globalen Schädigungsvariablen β und \hat{p} gut zu reproduzieren. Zum Vergleich sind in *Abb. 4.18* die Ergebnisse von Simulationsreihe 2 (siehe Abschnitt 4.2) zusammen mit den zugehörigen Ergebnissen des vereinfachten Modells dargestellt. Weiterhin wird in *Abb. 4.19* der Einfluss von $\hat{\gamma}_S$ auf die Porositätsentwicklung gezeigt, welcher sich hauptsächlich durch das direkte Sintern neuer Poren äußert und gut durch das vereinfachte Modell erfasst wird. Darüber hinaus kann davon ausgegangen werden, dass das vereinfachte Porositätsmodell aufgrund der Mechanismen-orientierten Herleitung in der Lage ist, die Korngrenzschädigung auch für angemessene Parametervariationen außerhalb des untersuchten Bereiches sinnvoll zu beschreiben. Für die acht Parameterraum Eckpunkte, die sich aus der Kombination der in Abschnitt 4.2.1 betrachteten Minimal- und Maximalwerte für \hat{D}_{KG} , $\hat{\gamma}_S$ und $\hat{\alpha}_P$ ergeben, konnte zumindest beobachtet werden, dass zusätzlich durchgeführte Verifikations-simulationen, welche nicht in die Anpassung der Fitparameter eingegangen sind, gut durch das vereinfachte Modell beschrieben werden.

Grenzen der Anwendbarkeit des vereinfachten Modells ergeben sich jedoch aus den Annahmen und Vereinfachungen, welche während der Herleitung der Modellgleichungen und innerhalb der numerischen Porositätssimulationen angewendet wurden. Letztere gehen dabei durch die angepassten Fitparameter in das vereinfachte Modell ein. Vor allem die Annahme der schnellen Oberflächendiffusion, welche das Gleichgewichtsporenwachstum und die Erhaltung des Porenvolumens beim Zusammenwachsen rechtfertigt, ist hier zu benennen. Zudem wird durch das vereinfachte Modell nur Porenwachstum durch Korngrendendiffusion berücksichtigt, nicht jedoch ein Beitrag durch Versetzungskriechen der angrenzenden Körner. Die Vernachlässigung von Letzterem ist jedoch nur für kleine Belastungen zulässig, wenn die

in [Ric79] eingeführte Diffusionslänge \mathcal{L} (siehe (2.8)) groß im Vergleich zu Porenradien und -abständen ist. In Fällen wo dies nicht gegeben ist, müsste die Porenwachstumsrate (4.81) angepasst werden, um beispielsweise den Einfluss von Oberflächendiffusion [CKRS79] oder den Einfluss von Versetzungskriechen [NR80; SN83] zu berücksichtigen. Es sei abschließend noch einmal darauf hingewiesen, dass die in Abschnitt 4.2 durchgeführten Simulationen ausschließlich Porenwachstum für konstante positive Werte von σ_∞ umfassen. Darauf aufbauend wird im folgenden Abschnitt Porenschrumpfen untersucht.

4.4 Betrachtung von Porenschrumpfen

Korngrenzenflächen innerhalb eines Polykristalls sind im Falle einer isotropen Mikrostruktur zufällig im Raum orientiert. Daher stellen sich trotz konstanter äußerer Belastung sehr unterschiedliche Normal- und Schubspannungen an den Korngrenzen, jeweils in Abhängigkeit von der räumlichen Orientierung, ein. Auch können zeitabhängige Prozesse, wie beispielsweise Korngrenzenschädigung und -gleiten, zu Spannungsumlagerungen innerhalb eines Polykristalls führen. Das Zusammenwirken verschiedener Kriechmechanismen muss dabei aber eine kompatible Gesamtdeformation erzeugen, so dass gegebenenfalls schneller ablaufende Prozesse durch langsamer ablaufende Prozesse behindert werden. Folglich besteht die Möglichkeit, dass einige Korngrenzen mit der Zeit stärker belastet werden, während wiederum andere Korngrenzen entlastet werden oder möglicherweise in einen Druckzustand kommen. Letzteres könnte vor allem unter nicht proportionalen äußeren Belastungen eintreten, wenn sich die Hauptspannungsrichtungen verändern.

Für die Porositätsentwicklung ist die lokal auf eine Korngrenze wirkende Normalspannung die treibende Kraft, sowohl im Zug- als auch im Druckbereich. Im Zugbereich verrichtet sie die benötigte Arbeit, um Atome zur Korngrenzenebene hinzuzufügen. Dabei stellt sich ein Diffusionsfluss von der freien Oberfläche der Poren hin zur Korngrenzenebene ein und es findet Porenwachstum statt. Im Gegensatz dazu verrichtet die Normalspannung im Druckbereich die benötigte Arbeit, um Atome aus der Korngrenzenebene zu entfernen. In der Folge kommt es zu einem Diffusionsfluss hin zur freien Porenoberfläche und die Poren schrumpfen. Hinzu kommt das Bestreben zur Minimierung der freien Oberfläche einer Pore. Dies führt dazu, dass sich bereits für sehr kleine, aber positive Normalspannungen ein Diffusionsfluss aus der Korngrenzenebene hin zur freien Porenoberfläche ausbildet und es ebenfalls zum Schrumpfen von Poren kommt.

Im Folgenden wird daher das Porenschrumpfen einer ganzen Porenpopulation mittels der in Abschnitt 4.1 präsentierten Simulationmethode untersucht. Dabei werden Porenanordnungen zu verschiedenen Zeitpunkten aus den in Abschnitt 4.2 durchgeführten Simulationen als Startporenanordnungen verwendet.

4.4.1 Angepasste dimensionslose Formulierung der Gleichungen

Die Wahl der Referenzwerte (4.46), welche für die in Abschnitt 4.1.3 durchgeführte Normierung der dem Porositätsprozess zugrunde liegenden Gleichungen genutzt wurden, war für die Untersuchungen von Porenwachstum bei konstanter Spannung σ_∞ zweckdienlich.

In der Folge konnten relevante Parameter identifiziert und gezielte Studien mit minimiertem Umfang durchgeführt werden. Wie aber im vorangegangenen Abschnitt diskutiert wurde, müssen zur Beschreibung der Korngrenzenporosität innerhalb eines Polykristalls auch veränderliche Belastungen an einer Korngrenze berücksichtigt werden. Die Normierung (4.39) könnte jedoch für Werte $\sigma_\infty \leq 0$ nicht ohne weitere Modifikationen angewendet werden. Daher ist die Wahl von neuen Referenzwerten, welche unabhängig von σ_∞ oder anderen lösungsabhängigen Größen sind, für die Betrachtung zeitlich veränderlicher Belastung von Vorteil. Durch die Wahl der alternativen Referenzwerte

$$a_{\overline{\text{Ref}}} = a_{\text{init}} \quad , \quad \sigma_{\overline{\text{Ref}}} = \frac{\gamma_S}{a_{\text{init}}} \quad \text{und} \quad t_{\overline{\text{Ref}}} = \frac{a_{\text{init}}^4}{\overline{D}_{\text{KG}} \gamma_S} \quad (4.92)$$

kann eine entsprechende Normierung erreicht werden. Diese bringt zudem noch den Vorteil mit sich, dass sämtliche Materialparameter, die mit der Korngrenzendiffusion in Verbindung stehen, aus den jeweiligen Gleichungen des Diffusionsrandwertproblems in die Referenzwerte verlagert werden.

Analog zum Vorgehen in Abschnitt 4.1.3 werden alle Größen entsprechend der physikalischen Bedeutung mittels der Referenzwerte (4.92) normiert:

$$\overline{a} = \frac{a}{a_{\overline{\text{Ref}}}} \quad , \quad \overline{\sigma} = \frac{\sigma}{\sigma_{\overline{\text{Ref}}}} \quad , \quad \overline{t} = \frac{t}{t_{\overline{\text{Ref}}}} \quad (4.93)$$

Gleiches gilt natürlich für die Definitionen des kreisförmigen Korngrenzenbereiches und der zugehörigen Ränder

$$\mathbf{x} \in S \iff \overline{\mathbf{x}} \in \overline{S} \quad \text{und} \quad \mathbf{x} \in L_i \iff \overline{\mathbf{x}} \in \overline{L}_i \quad , \quad (4.94)$$

sowie für die räumlichen und zeitlichen Ableitungen:

$$\overline{\nabla}(\dots) = a_{\overline{\text{Ref}}} \nabla(\dots) \quad , \quad \overline{\Delta}(\dots) = a_{\overline{\text{Ref}}}^2 \Delta(\dots) \quad , \quad (\overset{\circ}{\dots}) = \frac{d(\dots)}{d\overline{t}} = t_{\overline{\text{Ref}}} \frac{d(\dots)}{dt} \quad (4.95)$$

In Analogie zur verwendeten Symbolik in Abschnitt 4.1.3 und Abschnitt 4.3, wo die Normierung von Variablen und Ableitungsoperatoren mit den Referenzwerten (4.46) durch ein Zirkumflex gekennzeichnet wurde, wird die Normierung mit den Referenzwerten (4.92) durch das Überstreichen von Variablen und Ableitungsoperatoren dargestellt. Zudem sei noch speziell auf die Notation

$$(\overset{\circ}{\dots}) = \frac{d(\dots)}{d\overline{t}} \quad (4.96)$$

hingewiesen, welche genutzt wird, um Zeitableitungen und Raten bezüglich der dimensionslosen Zeit \overline{t} auszudrücken.

4.4.2 Simulation von Porenschrumpfen

Eine notwendige Voraussetzung für die Untersuchung von Porenschrumpfen ist das Vorhandensein von Poren auf einer Korngrenze. Für die Durchführung von Schrumpfungssimulationen wurden daher Porenanordnungen zu verschiedenen Zeitpunkten aus den in Abschnitt 4.2 beschriebenen Porenwachstumssimulationen als Startporenanordnungen genutzt. Die resultierenden Simulationen können somit als Fortsetzung der Ursprungssimulation für ein anderes Spannungsniveau angesehen werden. Als Ursprungssimulationen wurden aus Simulationsreihe 2 (siehe Abschnitt 4.2.1) zwei der fünf Wiederholungssimulationen für das Spannungsniveau $\sigma_{\infty 2}$ ausgewählt, welche im folgenden mit den Abkürzungen WDH1 und WDH2 bezeichnet werden. Für beide Simulationen wurden jeweils Porenanordnungen für die drei geschädigten Flächenanteile $\omega_1 = 5\%$, $\omega_2 = 20\%$ und $\omega_3 = 35\%$ bestimmt und als Startporenanordnungen von Schrumpfungssimulationen mit den Spannungsniveaus $\sigma_{\infty 4} = -2$ MPa und $\sigma_{\infty 5} = 0$ MPa verwendet. Die für die Ursprungssimulationen verwendeten Materialparameter (Tab. 4.1) wurden dabei unverändert übernommen. Da unter diesen

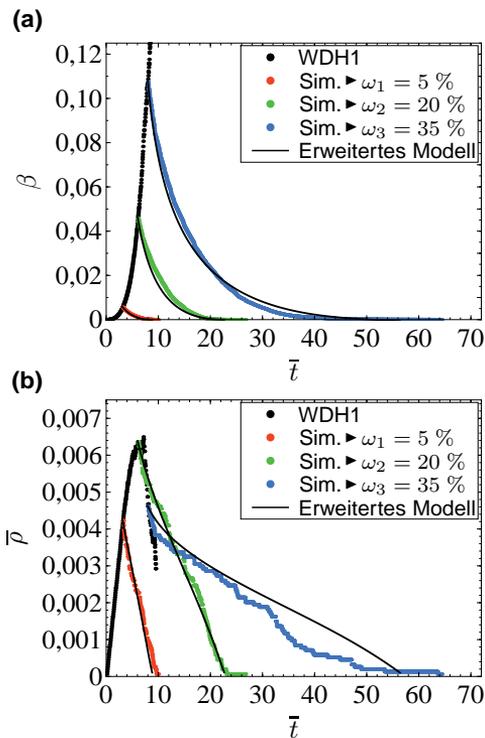


Abb. 4.20: Entwicklungen der Schädigungsvariablen β und \bar{p} für das Spannungsniveau $\sigma_{\infty 4} = -2$ MPa. Die Startporenanordnungen stammten jeweils aus Porenwachstumssimulation WDH1.

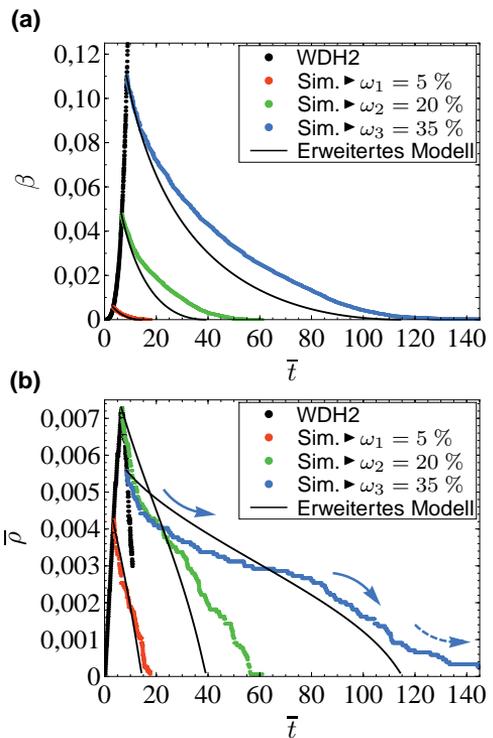


Abb. 4.21: Entwicklungen der Schädigungsvariablen β und \bar{p} für das Spannungsniveau $\sigma_{\infty 5} = 0$ MPa. Die Startporenanordnungen stammten jeweils aus Porenwachstumssimulation WDH2. Die Pfeile in (b) veranschaulichen die Tendenz der Entwicklung von \bar{p} .

Bedingungen alle Poren innerhalb des betrachteten Korngrenzenbereiches schrumpfen, wurde die Nukleation neuer Poren innerhalb der Schrumpfungssimulationen unterdrückt.

Die in Abschnitt 4.1 präsentierte Simulationsmethode wurde jeweils genutzt, um die zeitliche Entwicklung der Korngrenzenporosität zu bestimmen. Aus den Lösungen des Diffusionsrandwertproblems für die beiden Spannungsniveaus $\sigma_{\infty 4}$ und $\sigma_{\infty 5}$ ergaben sich dabei stets Diffusionsflüsse aus der Korngrenzenebene hin zu den Poren. Das daraus folgende Schrumpfen von Poren führte letztendlich über das vollständige Sintern sehr kleiner Poren zu einer Verringerung der Porenanzahl im betrachteten Korngrenzenbereich. Die zeitlichen Entwicklungen der Schädigungsvariablen β und \bar{p} sind in *Abb. 4.20* für die Porenwachstumssimulation WDH1 sowie die zugehörigen Schrumpfungssimulationen, welche sich ausgehend von den drei unterschiedlichen Startporenanordnungen für das Spannungsniveau $\sigma_{\infty 4}$ ergeben, dargestellt. In *Abb. 4.21* sind zudem die Verläufe von β und \bar{p} für die Porenwachstumssimulation WDH2 sowie die jeweils zugehörigen drei Schrumpfungssimulationen für das Spannungsniveau $\sigma_{\infty 5}$ abgebildet. Für alle betrachteten Fälle ist eine kontinuierliche Abnahme von β und \bar{p} zu beobachten. Während die Entwicklung von β jeweils einen verhältnismäßig glatten Verlauf aufweist, variiert in den meisten Simulationen die Rate, mit der \bar{p} abnimmt, über den Simulationsverlauf. Letzteres ist eine direkte Folge von unterschiedlich großen Poren innerhalb der Porenanordnungen. Speziell für jene Schrumpfungssimulationen, deren Startporenanordnungen sich durch einen hohen geschädigten Flächenanteil auszeichnen, ist zu beobachten, dass \bar{p} zu Beginn einer Simulation am stärksten abnimmt, da viele kleine Poren innerhalb kurzer Zeit vollständig sintern. Letzteres ist auch der Tatsache geschuldet, dass die absolute Schrumpfrate umso größer ist, je kleiner die Porengröße ist. Des Weiteren ist zum Ende der Simulationen zu beobachten, dass die Abnahmerate von \bar{p} zunächst leicht ansteigt, bevor es zu einer kontinuierlichen Abnahme bei Annäherung an $\bar{p} = 0$ kommt. Letzteres ist auf wenige große Poren zurückzuführen, welche nur sehr langsam schrumpfen und zum Ende einer Simulation vereinzelt innerhalb größerer Zeitabstände sintern.

4.4.3 Sinterrate für Porenschrumpfen

Um das in den Simulationen beobachtete Porenschrumpfen durch das vereinfachte Porositätsmodell aus Abschnitt 4.3 beschreiben zu können, ist eine Erweiterung der Modellgleichungen nötig. Wie bei der Herleitung der Entwicklungsgleichung für \hat{p} in Abschnitt 4.3 bereits diskutiert wurde, muss im Falle von Porenschrumpfen eine Annihilationsrate berücksichtigt werden, welche die Reduktion der Porendichte \hat{p} durch das vollständige Sintern von Poren beschreibt. Die Herleitung eines entsprechenden Ausdrucks wird im Folgenden bezüglich der in Abschnitt 4.4.1 eingeführten Normierung formuliert. Bei Verwendung von Größen und Gleichungen aus Abschnitt 4.3 erfolgt dabei stets eine Umnormierung entsprechend der unterschiedlichen Referenzwerte (4.46) und (4.92).

Um einen Ausdruck für die Annihilationsrate $\hat{p}_{A.S}$ herzuleiten, welcher das Sintern von Poren beschreibt, wird im Folgenden die Anzahl an Poren abgeschätzt, deren Radien innerhalb eines Zeitinkrements $\Delta \bar{t}$ kleiner als der Anfangsporenradius \bar{a}_{init} werden. Die während der simulierten Schrumpfungsvorgänge beobachteten Veränderungen der Porengrößenverteilungen dienen hierfür als Ausgangspunkt. Wie im vorangegangenen Abschnitt bereits be-

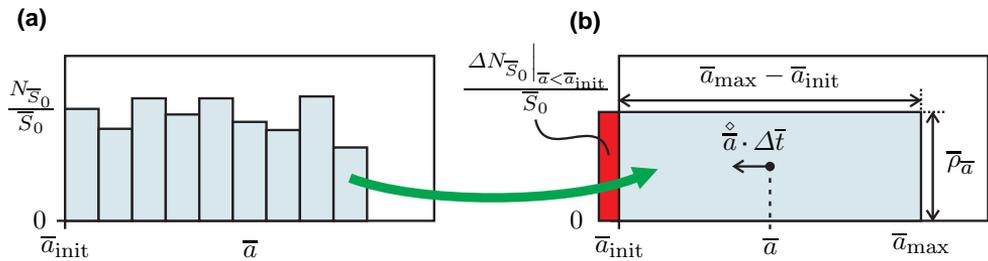


Abb. 4.22: Vereinfachte Betrachtung der Porengrößenverteilung für Porenschrumpfen.

schrieben wurde, ist der Verlauf von $\bar{\rho}$ durch das unterschiedliche Schrumpfungsverhalten von unterschiedlich großen Poren bestimmt. Dabei ergab sich aus einer genaueren Analyse der simulierten Porengrößenverteilungen, dass, wie in Abb. 4.22a skizziert, die Porengrößen zu verschiedenen Zeitpunkten bis zu einer maximalen Porengröße \bar{a}_{\max} näherungsweise gleichmäßig verteilt waren. Im Folgenden wird daher die Porengrößenverteilung, so wie in Abb. 4.22b dargestellt, durch ein Rechteck mit Breite $\bar{a}_{\max} - \bar{a}_{\text{init}}$ und Höhe $\bar{\rho}_{\bar{a}}$ approximiert. Zudem wird die Porenanzahl stets auf die Korngrenzenfläche \bar{S}_0 bezogen.

Die innerhalb der Simulationen beobachteten Veränderungen der Porengrößenverteilungen lassen sich jeweils vereinfacht durch eine Verschiebung des Rechtecks in Richtung der kleineren Porengrößen beschreiben. Aus der Menge an Poren $\Delta N_{\bar{S}_0} \Big|_{\bar{a} < \bar{a}_{\text{init}}}$, welche als Konsequenz der Verschiebung der rechteckförmigen Verteilung kleiner als \bar{a}_{init} werden, ergibt sich schließlich $\overset{\circ}{\rho}_{\text{A.S.}}$. Um Breite, Höhe und Verschiebung der approximierten Verteilung im Rahmen des vereinfachten Porositätsmodells zu bestimmen, wird zunächst angenommen, dass der durch (4.85) gegebene Porenradius \bar{a} dem Mittelwert der rechteckförmigen Verteilung entspricht:

$$\bar{a} = \frac{\bar{a}_{\text{init}} + \bar{a}_{\max}}{2} \quad \implies \quad \bar{a}_{\max} = 2\bar{a} - \bar{a}_{\text{init}} . \quad (4.97)$$

Der sich ergebende Wert für \bar{a}_{\max} beschreibt somit die Breite der Verteilung. Die Höhe $\bar{\rho}_{\bar{a}}$ ergibt sich dann aus der Forderung, dass die über alle Porengrößen aufsummierten Porenanzahlen pro Korngrenzenfläche \bar{S}_0 gleich der Porendichte $\bar{\rho}$ sein sollen. Aus

$$\bar{\rho} = \int_{\bar{a}_{\text{init}}}^{\bar{a}_{\max}} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{a}}(\bar{a}) d\bar{a} \quad \text{mit} \quad \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{a}}(\bar{a}) = \bar{\rho}_{\bar{a}} \quad \text{folgt somit} \quad \bar{\rho}_{\bar{a}} = \frac{\bar{\rho}}{2(\bar{a} - \bar{a}_{\text{init}})} . \quad (4.98)$$

Um die Verschiebung der Verteilung beschreiben zu können, wird schließlich noch angenommen, dass alle Poren unabhängig von ihrer jeweiligen Größe mit der selben Geschwindigkeit $\overset{\circ}{\bar{a}} < 0$ schrumpfen. Diese Annahme erscheint gerechtfertigt, da die Raten, mit denen unterschiedlich große Poren schrumpfen, nur für sehr kleine Poren relevante Abweichungen zeigen. Diese scheinen aber die Veränderung der Verteilung nicht wesentlich zu beeinflussen. Entsprechend ergibt sich die Anzahl an Poren auf der Korngrenzenfläche \bar{S}_0 , deren Radien

innerhalb des Zeitinkrements $\Delta \bar{t}$ kleiner als \bar{a}_{init} werden, zu

$$\Delta N_{\bar{S}_0} \Big|_{\bar{a} < \bar{a}_{\text{init}}} = -\overset{\circ}{\bar{a}} \cdot \Delta \bar{t} \cdot \bar{\rho}_{\bar{a}} \cdot \bar{S}_0 . \quad (4.99)$$

Für den Grenzfall $\Delta \bar{t} \rightarrow 0$ folgt daraus die Annihilationsrate für das Sintern von Poren zu

$$\overset{\circ}{\rho}_{A.S} = \frac{\Delta N_{\bar{S}_0} \Big|_{\bar{a} < \bar{a}_{\text{init}}}}{\Delta \bar{t} \cdot \bar{S}_0} = -\frac{\bar{\rho}}{2(\bar{a} - \bar{a}_{\text{init}})} \overset{\circ}{\bar{a}} . \quad (4.100)$$

Mit (4.100) kann das vereinfachte Porositätsmodell (4.78) bis (4.90) um die Betrachtung von Porenschrumpfen erweitert werden, wobei sich sämtliche Modellgleichungen bezogen auf die in Abschnitt 4.4.1 eingeführte Normierung wie folgt zusammenfassen lassen:

$$a_{\text{Ref}} = a_{\text{init}} \quad , \quad \sigma_{\text{Ref}} = \frac{\gamma S}{a_{\text{init}}} \quad , \quad t_{\text{Ref}} = \frac{a_{\text{init}}^4}{\tilde{D}_{\text{KG}} \gamma S} , \quad (4.101)$$

$$\overset{\circ}{\beta} = \frac{3}{2} \frac{\beta}{\bar{\rho}} \left(\overset{\circ}{\rho}_{\text{P}} - \overset{\circ}{\rho}_{\text{A}} \right) + \frac{3\beta}{\bar{a}} \overset{\circ}{\bar{a}} , \quad (4.102)$$

$$\overset{\circ}{\bar{\rho}} = (1 - f) \overset{\circ}{\rho}_{\text{P}} - \overset{\circ}{\rho}_{\text{A}} , \quad (4.103)$$

$$\overset{\circ}{\bar{a}} = \chi_1 \cdot \frac{2}{h(\psi)} \frac{\bar{\sigma}_{\infty} - \bar{\sigma}^{\text{Rand}}(\bar{a}) \cdot (1 - \chi_2 \cdot \omega)}{\bar{a}^2 q(\chi_2 \cdot \omega)} , \quad (4.104)$$

$$\bar{\sigma}_{\infty} = \sigma_{\infty} / \sigma_{\text{Ref}} , \quad (4.105)$$

$$\bar{\sigma}^{\text{Rand}}(\bar{a}) = 2 \sin \psi / \bar{a} , \quad (4.106)$$

$$q(\omega) = -2 \ln \omega - (3 - \omega)(1 - \omega) , \quad (4.107)$$

$$h(\psi) = \left[(1 + \cos \psi)^{-1} - \frac{1}{2} \cos \psi \right] / \sin \psi , \quad (4.108)$$

$$\omega = \sqrt[3]{\frac{9\pi\beta^2}{16h^2(\psi)}} \quad , \quad \bar{a} = \sqrt{\frac{\omega}{\pi\bar{\rho}}} , \quad (4.109)$$

$$\overset{\circ}{\rho}_{\text{A}} = \begin{cases} \chi_3 \cdot 4\pi\bar{\rho}^2 \bar{a} \overset{\circ}{\bar{a}} & , \text{ wenn } \overset{\circ}{\bar{a}} \geq 0 \\ \chi_5 \cdot \frac{-\bar{\rho}}{2(\bar{a} - \bar{a}_{\text{init}})} \overset{\circ}{\bar{a}} & , \text{ wenn } \overset{\circ}{\bar{a}} < 0 \end{cases} , \quad (4.110)$$

$$f = \min \left\{ 1, \frac{\omega(\eta - 1)}{1 - \omega} \right\} \quad (\text{wegen vereinfachter Bestimmung von } \eta) , \quad (4.111)$$

$$\eta = \exp \left(\chi_4 \cdot 2\pi\bar{\rho} \left(\bar{\sigma}^{\text{Rand}}(\bar{a}_{\text{init}}) - \bar{\sigma}^{\text{Rand}}(\bar{a}) \right) \left([\bar{u}]^{\text{P}^*} \right)^{-1} \right) , \quad (4.112)$$

$$[\bar{u}]^{\text{P}^*} = \frac{\beta}{\sqrt{\bar{\rho}^3}} \left(\overset{\circ}{\rho}_{\text{P}} - \overset{\circ}{\rho}_{\text{A}} \right) + \frac{3\beta}{\bar{a}\sqrt{\bar{\rho}}} \overset{\circ}{\bar{a}} , \quad (4.113)$$

$$\chi_1 = 0,256 \quad , \quad \chi_2 = 1,230 \quad , \quad \chi_3 = 1,334 \quad , \quad \chi_4 = 1,683 \quad , \quad \chi_5 = 2,242 . \quad (4.114)$$

Dabei wurde in (4.110) ein weiterer Fitparameter $\chi_5 = 2,242$ eingefügt. Dieser wurde mittels der bereits in Abschnitt 4.3.6 verwendeten Anpassungsprozedur, jetzt jedoch in Kombination mit dem erweiterten Porositätsmodell, an die Porenschrumpfungssimulationen angepasst.

Zum Vergleich sind in *Abb. 4.20* und *Abb. 4.21* die Verläufe von β und \bar{p} , welche sich aus dem erweiterten Modell für die jeweils zugehörigen Simulationen ergeben, dargestellt. Es zeigt sich, dass das Modell das Porositätsverhalten aus den Simulationen gut abbilden kann. Die speziell in *Abb. 4.21* deutlich zu erkennenden Abweichungen sind dabei auf die zufälligen Porenanordnungen in den betrachteten Ursprungssimulationen zurückzuführen.

Die abgeleitete Annihilationsrate $\overset{\circ}{\rho}_{A,S}$ ist zudem ansatzweise in der Lage, den in Abschnitt 4.4.2 beschriebenen charakteristischen Verlauf von \bar{p} (stärkerer Abfall zu Beginn und zum Ende des Porenschrumpfens) für die Startporenanordnungen mit dem hohen geschädigten Flächenanteil ω_3 abzubilden.

Das erweiterte Porositätsmodell (4.101) bis (4.114) kann somit sowohl für die Beschreibung von Porenwachstum als auch für die Beschreibung von Porenschrumpfen verwendet werden. Es sollte allerdings darauf geachtet werden, dass die Produktionsrate $\overset{\circ}{\rho}_P$ in Entwicklungsgleichung (4.103) einen positiven Beitrag liefert, wenn Porenwachstum ($\overset{\circ}{a} \geq 0$) stattfindet. Im Falle von Porenschrumpfen ($\overset{\circ}{a} < 0$) sollte $\overset{\circ}{\rho}_P$ hingegen verschwinden. Im Rahmen aller durchgeführten Porositätssimulationen war dies immer erfüllt.

4.5 Porositätsentwicklung unter variablen Spannungen

Für die Herleitung der Modellgleichungen (4.101) bis (4.114) wurden mehrere mikromechanische Mechanismen berücksichtigt, welche anhand des Verhaltens vollständiger Porenanordnungen identifiziert wurden. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass das erweiterte Porositätsmodell die Entwicklung der Korngrenzenschädigung für ein breiteres Belastungsspektrum sinnvoll beschreibt. Dies bildet eine gute Grundlage für die Beschreibung der Korngrenzenporosität in Abhängigkeit von zeitlich veränderlichen Normalspannungen an einer Korngrenze, welche, wie bereits diskutiert wurde, in einem Polykristall auftreten können.

Es wurde daher durch Betrachtung mehrerer Verifikationssimulationen, welche mit den konstanten Materialparametern aus *Tab. 4.1* und vorgegeben zeitlich veränderlichen Belastungen durchgeführt wurden, überprüft, ob das erweiterte Porositätsmodell auch unter derartigen Bedingungen in der Lage ist, das Schädigungsverhalten abzubilden. In *Abb. 4.23* und *Abb. 4.24* sind exemplarisch die Ergebnisse zweier Verifikationssimulationen mit den durch das erweiterte Porositätsmodell bestimmten Verläufen der beiden Schädigungsvariablen β und \bar{p} verglichen.

In der ersten Simulation (*Abb. 4.23*) wurden zunächst Porenwachstum für eine konstante Spannung $\sigma_\infty = 10$ MPa und anschließend Porenschrumpfen für eine konstante Spannung $\sigma_\infty = -10$ MPa simuliert, wobei ein sprunghafter Wechsel zwischen den beiden Spannungsniveaus erfolgte. Dieser Fall entspricht weitestgehend den Simulationen, die für die Entwicklung des Porositätsmodells verwendet wurden. Die gute Übereinstimmung zwischen Modell und Simulation ist daher nicht unerwartet.

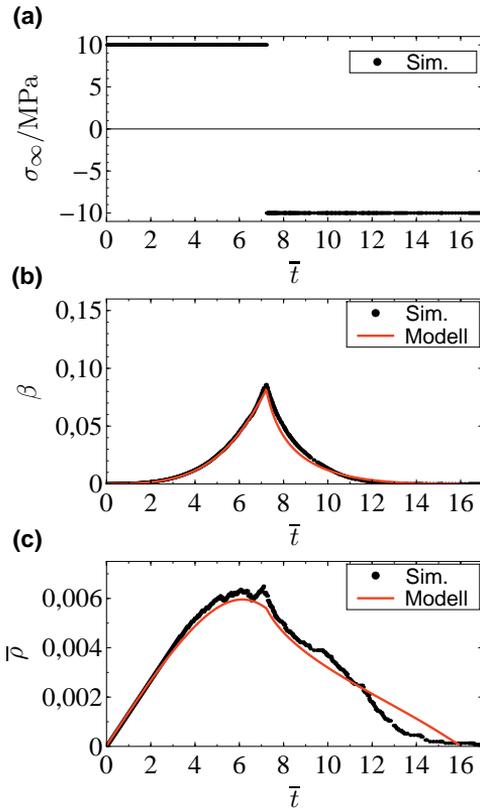


Abb. 4.23: Vergleich der Schädigungsentwicklung zwischen einer Verifikationssimulationen und dem erweiterten Porositätsmodell für einen vorgegebenen Spannungssprung.

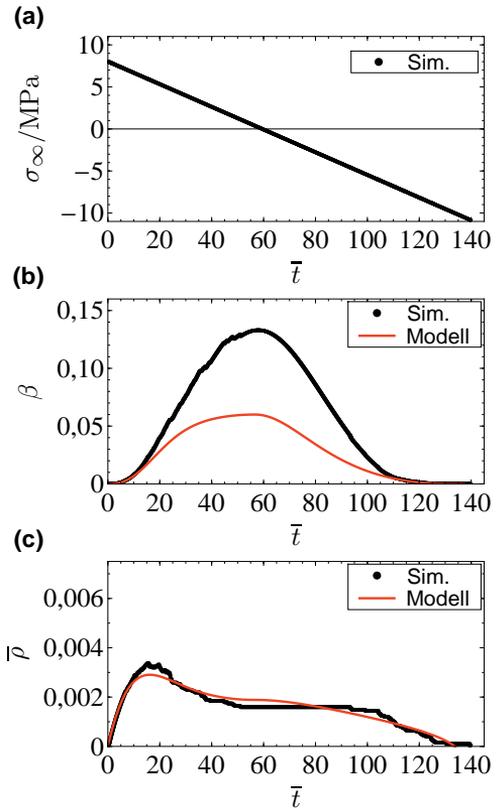


Abb. 4.24: Vergleich der Schädigungsentwicklung zwischen einer Verifikationssimulationen und dem erweiterten Porositätsmodell für eine vorgegebene lineare Absenkung des Spannungsniveaus.

Im Unterschied dazu wurde in der zweiten Simulation (Abb. 4.24) das Spannungsniveau beginnend mit $\sigma_\infty = 8 \text{ MPa}$ linear bis in den negativen Bereich abgesenkt. Obwohl die Entwicklung der Porendichte \bar{p} auch in diesem Fall gut abgebildet wird, so zeigt der durch das Modell beschriebene Verlauf von β eine deutliche Unterschätzung der Schädigungsentwicklung. Ein ähnlich abweichendes Verhalten konnte auch in weiteren Verifikationssimulationen für andere zeitlich veränderliche Belastungen beobachtet werden, insbesondere wenn σ_∞ vergleichbar oder kleiner als die Randspannung $\bar{\sigma}^{\text{Rand}}(\bar{a}_{\text{init}})$ einer neu nukleierten Pore war.

Der Grund hierfür liegt in einer Veränderung der Porengrößenverteilung, welche für niedrige Spannungsniveaus auftritt und nicht durch die vereinfachte Modellierung einer einheitlichen Porengröße (\Leftrightarrow achsensymmetrische Porenanordnung) abgebildet werden kann. Durch den Einfluss der Porengröße auf die Porenwachstumsrate tritt dabei für sehr kleine Spannungsniveaus der Fall ein, dass innerhalb der Simulationen große Poren weiter wachsen können,

während kleinere Poren schrumpfen und schließlich vollständig sintern. Da eine derartige Differenzierung durch das Porositätsmodell nicht beschrieben werden kann, kommt es folglich zu den beobachtbaren Abweichungen in *Abb. 4.24b*.

Innerhalb eines Polykristalls ist die Belastung an einer Korngrenze jedoch nicht beliebig, sondern ergibt sich, wie bereits mehrfach erwähnt, im Zusammenspiel mit den Deformationsbehinderungen des umliegenden Materials. Daher wurde in einer weiteren Verifikationssimulation das Schädigungsverhalten einer deformationsbehinderten Korngrenze untersucht. Hierzu wurde die Spannung σ_∞ innerhalb der Simulation derartig angepasst, dass die Entwicklung der Korngrenzenaufdickung $[\bar{u}]^P$ einem vorgegeben linearen Verlauf entsprach. Die resultierenden Verläufe von σ_∞ , β und \bar{p} sind in *Abb. 4.25* dargestellt. Ebenfalls dargestellt sind zwei Ansätze zur Beschreibung der Korngrenzenschädigung durch das Porositätsmodell. Im ersten Fall wird dem Modell der exakt gleiche Verlauf von σ_∞ wie in der Simulation vorgegeben. Im zweiten Fall wird σ_∞ auf gleiche Weise wie in der Simulation angepasst, um den vorgegebenen linearen Verlauf von $[\bar{u}]^P$ abzubilden.

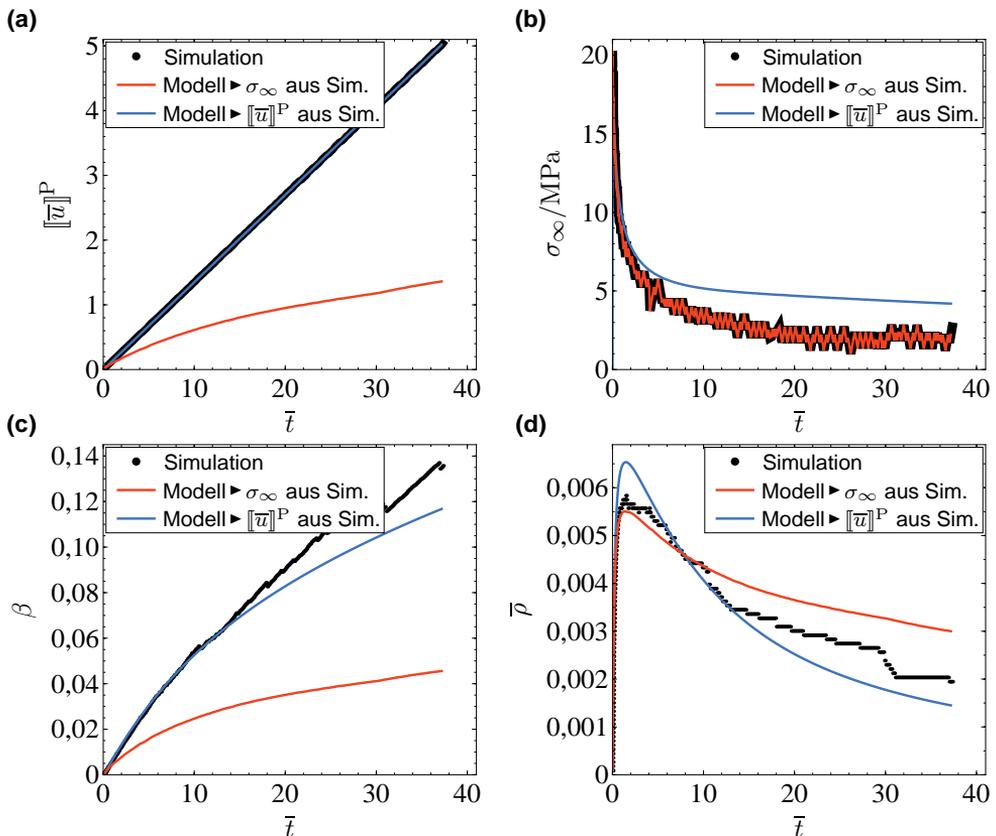


Abb. 4.25: Vergleich der Schädigungsentwicklung zwischen einer Verifikationssimulation und der Beschreibung durch das erweiterte Porositätsmodell für eine vorgegebene lineare Zunahme der Korngrenzenaufdickung $[\bar{u}]^P$.

Sowohl für die Simulation als auch für die beiden Ansätze zur Anwendung des Modells ist jeweils ein rascher Abfall der Normalspannung σ_∞ zu beobachten. Darüber hinaus ist deutlich zu erkennen, dass es zu einer Unterschätzung der Schädigungsentwicklung durch das Modell kommt, wenn der Verlauf von σ_∞ aus der Simulation vorgegeben wird. Wird σ_∞ jedoch innerhalb der Anwendung des Modells angepasst, um den Verlauf von $[\overline{\pi}]^P$ abzubilden, so stellen sich im Vergleich zur Simulation leicht erhöhte Spannungsniveaus ein. Diese beeinflussen wiederum die Schädigungsentwicklung, wobei die resultierenden Verläufe von β und \overline{p} im wesentlichen den Ergebnissen der Simulation entsprechen. Die beobachtbaren Abweichungen liegen dabei im Bereich der simulationsabhängigen Variationen aufgrund der zufälligen Porenanordnung.

4.6 Diskussion der Ergebnisse

In den Abschnitten 4.2 und 4.4 konnte durch die direkte Simulation der Porositätsentwicklung das Schädigungsverhalten einer einzelnen Korngrenze untersucht und charakterisiert werden. Gegenüber anderen Studien [HR59; Wee73; SB75; BS78; EA79; CKRS79; PN79; NR80; MN82; SN83; SC87], welche meist nur eine einzelne Korngrenzenpore unter Symmetrierandbedingungen betrachteten, erlaubte die hier verwendete numerische Simulationsprozedur die Untersuchung von unterschiedlich großen und ungleichmäßig verteilten Korngrenzenporen. Dies ermöglichte es, die Beeinflussung der Porositätsentwicklung zu erfassen, welche aus Wechselwirkungen zwischen den Poren resultierte.

Dabei war zu beobachten, dass die Anordnung von Poren nicht nur einen Einfluss auf die Porenwachstumsraten hat, sondern darüber hinaus auch das Zusammenwachsen von Poren prägt. Dies zeigt sich vor allem in den geometrischen Überlegungen, welche die Basis für die Ableitung der Annihilationsrate für das Zusammenwachsen von Poren in Abschnitt 4.3.4 bildeten.

Aber auch die Nukleation von neuen Poren, ein Prozess der noch nicht vollständig verstanden ist, wird durch die Anordnung von Poren zueinander beeinflusst. Genauer gesagt geht es um die Frage, an welchen Punkten entlang der ungeschädigten Korngrenzenfläche sich neue Poren bilden. Für die durchgeführten Simulationen wurde angenommen, dass neue Poren an zufälligen Positionen entstehen. Alternativ könnten sich neue Poren aber auch bevorzugt dort bilden, wo die lokale Normalspannung maximal ist. Letzteres würde jedoch dazu führen, dass stets Porenanordnungen mit größtmöglichem Abstand der Poren zueinander entstehen. Ausschlaggebend für den tatsächlichen Nukleationsort dürfte hingegen die Frage sein, ob die lokalen Bedingungen die Entstehung einer stabilen Pore ermöglichen.

Innerhalb der Simulationen ergibt sich die Antwort auf diese Frage unmittelbar aus den resultierenden Wachstumsraten, so dass Poren an ungünstigen Nukleationsorten schrumpfen, bis sie durch vollständiges Sintern verschwinden. Dieser Effekt ist eng mit den Positionen der Poren zueinander verknüpft und kann durch das vereinfachte Porositätsmodell mittels einer Korrektur der Nukleationsrate, welche sich aus der Analyse des direkten Sinterns neu nukleierter Poren ergab (siehe Abschnitt 4.3.5), beschrieben werden. In Ermangelung eines allgemein anerkannten Modells erscheint dies als ein sinnvoller Umgang mit den Nukleationsorten von Poren.

Wie bereits in Abschnitt 4.3.6 diskutiert wurde, sind die Porositätssimulationen unter der Annahme von Gleichgewichtsporenwachstum und unter Vernachlässigung von Deformationen der angrenzenden Körner durchgeführt worden. Bei einer möglichen zukünftigen Erweiterung des vereinfachten Porositätsmodells durch die Verwendung von angepassten Porenwachstumsraten [CKRS79; NR80; SN83], wie in Abschnitt 4.3.6 angesprochen, sollte daher hinterfragt werden, ob die Wechselwirkungen zwischen den Poren durch das vereinfachte Porositätsmodell noch in angemessener Weise beschrieben werden. Speziell für den Fall des Nichtgleichgewichtsporenwachstums, für welchen sich kompliziertere Porenformen ausbilden können, muss überprüft werden, ob die geometrischen Überlegungen, welche beispielsweise für die Beschreibung des Zusammenwachsens von Poren genutzt wurden, noch zutreffend sind.

Darüber hinaus deuten die Simulationsergebnisse für die Porositätsentwicklungen unter variablen Belastungen darauf hin, dass es, wie bereits in Abschnitt 4.5 diskutiert, für sehr kleine Spannungsniveaus zu Veränderungen in der Porengrößenverteilung kommt, welche durch das vereinfachte Porositätsmodell nicht im Detail abgebildet werden können. Obwohl davon auszugehen ist, dass dieser Belastungsbereich nur wenig zur versagensrelevanten Schädigungsentwicklung beiträgt, so könnte eine genauere Analyse dennoch für eine Weiterentwicklung der Annihilationsrate (4.110) genutzt werden. Da die jeweils für Porenwachstum und -schrumpfen verwendeten Terme in (4.110) auf unterschiedliche Mechanismen zurückgehen, ist die Annihilationsrate beim Übergang von Porenwachstum zu Porenschrumpfen zwar steigend, aber nicht differenzierbar. Es wäre daher sinnvoll, die Formulierung der Annihilationsrate diesbezüglich zu erweitern und den Übergang differenzierbar zu gestalten. Letzteres wäre speziell aus numerischer Sicht eine vorteilhafte Eigenschaft, welche der Vermeidung von Konvergenzproblemen bei der Simulation von Schädigungsentwicklungen für sehr kleine Spannungsniveaus dienen würde.

5 Entwicklung eines mikromechanischen Polykristallmodells

In diesem Abschnitt wird ein mikromechanisches Polykristallmodell vorgestellt, welches die Beschreibung des Kriechverhaltens eines Werkstoffes unter Berücksichtigung einer expliziten dreidimensionalen Mikrostruktur im Rahmen einer FE-Analyse ermöglicht. Die Modellierung in der vorliegenden Arbeit orientiert sich dabei an den Arbeiten von Van der Giessen et al. [GT91; GT94a; GT94b; GT94c; GOB97; OG97a; OG97b]. Dort wurde das physikalische Verhalten von Körnern und Korngrenzen zunächst als unabhängig voneinander angenommen und jeweils durch geeignete Modellgleichungen beschrieben. Die Berücksichtigung von Wechselwirkungen erfolgte dann durch Betrachtung von zweidimensionalen Modellen der Mikrostruktur, welche jeweils aus einem Verbund mehrerer Körner und Korngrenzen bestanden. Das hier vorgestellte Modell nutzt eine ähnliche Unterteilung des Werkstoffverhaltens in drei Aspekte. Zum einen werden die Deformationen einzelner Körner durch ein viskoplastisches Einkristallmodell beschrieben. Zum anderen werden die Entstehung von Korngrenzenschädigung und das Auftreten von Korngrenzengleiten durch ein speziell hierfür entwickeltes Kohäsionsmodell berücksichtigt. Darüber hinaus wird für die Simulation des Kriechverhaltens eine konkrete polykristalline Mikrostruktur durch ein FE-Modell abgebildet, indem einzelne Körner entlang der Korngrenzen durch kohäsive Elemente miteinander verbunden werden. Die Formulierung der Modellgleichungen erfolgt dabei ausschließlich unter der Annahme von kleinen Deformationen, was für Kriechdeformationen unter geringen Lasten akzeptabel erscheint. Da zudem die Verformungsgeschwindigkeiten von Kriechdeformationen vergleichsweise niedrig sind, können die ablaufenden zeitabhängigen Prozesse als quasi-statisch angesehen werden.

5.1 Deformationsverhalten einzelner Körner

Das Deformationsverhalten einzelner Körner soll durch ein rein mechanisches Einkristallmodell beschrieben werden. Hierfür wird angenommen, dass das Gleiten von Versetzungen für die betrachteten Gleitsysteme unterhalb der Fließspannung stattfindet. Das Überwinden von Hindernissen unter Kriechbedingungen wird dabei durch verstärktes Auftreten thermisch aktivierter Prozesse (z. B. Klettern von Versetzungen) ermöglicht. Vereinfachend wird auf die Betrachtung von Diffusionsvorgängen und den daraus resultierenden Deformationen (Coble-Kriechen und Nabarro-Herring-Kriechen) verzichtet.

Das hier zum Einsatz kommende und im Folgenden kurz beschriebene Modell wurde in [FKL08] entwickelt und entspricht einer vereinfachten Variante des in [MPC91] präsentierten viskoplastischen Kristallmodells. Mit Blick auf das Ziel, das Polykristallmodell im Rahmen der vorliegenden Arbeit zur Beschreibung einer Kupferlegierung anzuwenden, werden hier nur 12 Gleitsysteme ($\{111\}$ -Gleitebenen und $\langle 011 \rangle$ -Gleitrichtungen) betrachtet. Die Gleitebenen sind dabei parallel zu den Atomlagen mit dichtester Packung in einem kubisch flächenzentrierten Kristalliten orientiert (siehe *Abb. 5.1*). Darüber hinaus wird innerhalb des Modells keine kinematische Verfestigung berücksichtigt, was als eine angemessene Vereinfachung für konstante Kriechbelastungen angesehen werden kann.

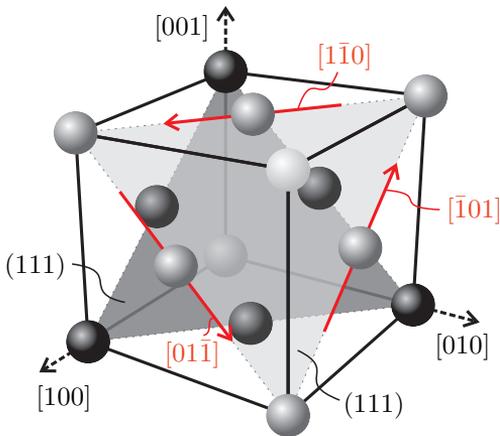


Abb. 5.1: Schematische Darstellung zweier (111)-Gleitebenen eines kubisch flächenzentrierten Kristallits. Ebenfalls dargestellt sind die in einer (111)-Gleitebene liegenden Gleitrichtungen $[\bar{1}01]$, $[0\bar{1}\bar{1}]$ und $[\bar{1}\bar{1}0]$.

Für die Ratenformulierung der Modellgleichungen wird von einer additiven Zerlegung des Gesamtdehnungstensors ϵ in einen elastischen Anteil ϵ^{el} und einen plastischen Anteil ϵ^{pl} ausgegangen:

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^{\text{el}} + \dot{\epsilon}^{\text{pl}}. \quad (5.1)$$

Die Rate des Spannungstensors ergibt sich entsprechend dem Hookeschen Gesetz aus der Verknüpfung der Rate des elastischen Dehnungstensors mit dem Steifigkeitstensor vierter Ordnung $\overset{(4)}{\mathbf{C}}$ gemäß

$$\dot{\sigma} = \overset{(4)}{\mathbf{C}} : \dot{\epsilon}^{\text{el}}, \quad (5.2)$$

wobei $\overset{(4)}{\mathbf{C}}$ entsprechend der kubischen Kristallsymmetrie durch drei unabhängige Materialparameter bestimmt ist. Die Entwicklung des plastischen Dehnungstensors ergibt sich hingegen aus Scherdeformationen, welche aus Versetzungsbewegungen innerhalb der betrachteten 12 Gleitsysteme resultieren. Dementsprechend wird die Rate des plastischen Dehnungstensors durch

$$\dot{\epsilon}^{\text{pl}} = \frac{1}{2} \sum_{g=1}^{12} (\mathbf{n}_g \otimes \mathbf{m}_g + \mathbf{m}_g \otimes \mathbf{n}_g) \cdot \dot{\gamma}_g \quad (5.3)$$

ausgedrückt, wobei \mathbf{n}_g der Normalenvektor der Gleitebene, \mathbf{m}_g die Gleitrichtung und $\dot{\gamma}_g$ die Scherrate des g -ten Gleitsystems sind. Die Scherrate des g -ten Gleitsystems soll sich dabei entsprechend eines viskosen Zusammenhangs mit isotroper Verfestigung in Abhängigkeit von der entlang des Gleitsystems wirkenden Schubspannung τ_g aus

$$\dot{\gamma}_g = \dot{\nu}_g \text{sign}(\tau_g) \quad \text{mit} \quad \tau_g = \mathbf{m}_g \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_g \quad (5.4)$$

ergeben. In (5.4) ist $\dot{\nu}_g$ eine innere Variable pro Gleitsystem, welche der akkumulierten Scher-

deformation entspricht und deren Entwicklung sich aus

$$\dot{\nu}_g = \left\langle \frac{|\tau_g| - R_g}{K} \right\rangle^n \quad \text{mit} \quad R_g = R_0 + Q \sum_{g=1}^{12} H_{gi} [1 - \exp(-b \nu_i)] \quad (5.5)$$

ergibt. Entsprechend der Formulierung mittels McAuley-Klammern wird $\dot{\nu}_g$ nie negativ. Isotrope Verfestigung wird innerhalb der Modellgleichungen durch den Schwellwert R_g berücksichtigt, welcher sich je nach Wahl der Wechselwirkungsmatrix H_{gi} in Abhängigkeit von den akkumulierten Scherdeformationen aller Gleitsysteme verändert. Wird für die Wechselwirkungsmatrix, welche für die betrachteten 12 oktaedrischen Gleitsysteme im Allgemeinen durch vier unabhängige Parameter bestimmt ist [MPC91], vereinfachend reine Selbstverfestigung angenommen, also $H_{gi} = \delta_{gi}$ (δ_{gi} ist das Kronecker-Delta), so ist das Materialverhalten des Modells durch die fünf Parameter K , n , R_0 , Q und b bestimmt.

Um das Materialmodell im Rahmen von FE-Simulationen mit dem FE-Programm Abaqus verwenden zu können, wurde auf eine Implementierung der konstitutiven Gleichungen mittels der benutzerdefinierten Programmschnittstelle UMAT (siehe Abschnitt *Abaqus User Subroutines Reference Manual* in [Aba]) zurückgegriffen, welche durch die Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung bereitgestellt wurde. Die Implementierung nutzt eine implizite Zeitintegration zur Lösung des nichtlinearen Materialverhaltens und liefert über die Schnittstelle eine konsistente Tangentensteifigkeit an das FE-Programm.

5.2 Deformations- und Schädigungsverhalten von Korngrenzen

Die Korngrenzen in einem polykristallinen Werkstoff besitzen bei genauer Betrachtung eine Dicke von mehreren Atomlagen. Da die Korngrenzendicke aber gegenüber anderen Abmessungen in der Mikrostruktur (z. B. der Korngröße oder der Korngrenzenfläche) für gewöhnlich vernachlässigbar ist, können Korngrenzen im Rahmen der Modellierung eines Polykristalls durch scharfe Grenzflächen mit verschwindender Dicke idealisiert werden. Im Folgenden wird zunächst die Beschreibung der Deformationen an einer solchen Grenzfläche diskutiert, bevor anschließend in Abschnitt 5.2.2 ein Kohäsionsmodell für eine durch Poren geschädigte Korngrenze vorgestellt wird.

5.2.1 Deformationsbeschreibung einer Korngrenze

Die Deformationen, die mit den Mechanismen an einer Korngrenze in Zusammenhang stehen (z. B. Schädigung und Korngrenzengleiten), sollen hier im Rahmen einer kontinuumsmechanischen Formulierung durch einen Verschiebungssprung entlang einer scharfen Grenzfläche ausgedrückt werden. Der Verschiebungssprung

$$[[\mathbf{u}]] = \mathbf{u}^{\text{Korn 1}} - \mathbf{u}^{\text{Korn 2}} \quad (5.6)$$

ergibt sich dabei aus der Relativbewegung der angrenzenden Körner. Wie in *Abb. 5.2* dargestellt ist, sind $\mathbf{u}^{\text{Korn 1}}$ und $\mathbf{u}^{\text{Korn 2}}$ in (5.6) die Verschiebungen von materiellen Punkten

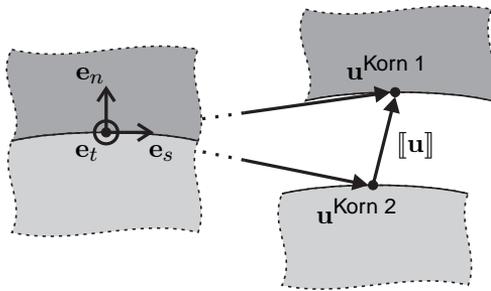


Abb. 5.2: Illustration eines Verschiebungssprungs $[[\mathbf{u}]]$, welcher zur Beschreibung der an einer Korngrenze auftretenden Deformationen genutzt wird.

in den jeweils angrenzenden Körnern. Die Festlegung der Nummerierung der Körner erfolgt dabei bezüglich der Korngrenzennormalenrichtung e_n . Im Rahmen der vorliegenden Arbeit befindet sich Korn 1 stets in Richtung von e_n .

In [GT91] wurden sogenannte Korngrenzelemente genutzt, um den Verschiebungssprung entlang einer Korngrenze zu bestimmen. Die dabei angewendete Vorgehensweise im Rahmen eines numerischen Verfahrens erforderte jedoch eine erneute Diskretisierung der Korngrenze in jedem Zeitschritt. Speziell im Rahmen einer FE-Analyse besteht durch die Nutzung von kohäsiven Elementen [CM04; WA04; Vös10] aber auch die Möglichkeit, einen Verschiebungssprung ohne Neuvernetzung einer Korngrenze zu beschreiben. In beiden Fällen wird der vektorielle Verschiebungssprung $[[\mathbf{u}]]$ bezüglich eines lokalen Koordinatensystems, welches aus der Normalenrichtung e_n sowie den beiden Tangentialrichtungen e_s und e_t der Korngrenze besteht (siehe Abb. 5.2), in drei Komponenten zerlegt:

$$[[\mathbf{u}]] = [[u_n]] \quad [[u_s]] \quad [[u_t]]^T. \quad (5.7)$$

Die Indices n , s und t bezeichnen dabei jeweils die Komponenten entlang der Normalenrichtung und der beiden Tangentialrichtungen. In Abschnitt 5.3.1 werden die Vorgehensweise dieser Zerlegung und die damit verbundenen Probleme an einer gekrümmten Korngrenze ausführlicher diskutiert.

Es sei noch darauf hingewiesen, dass die Zerlegung des Verschiebungssprungs bezüglich eines lokalen Koordinatensystems in der aktuellen Konfiguration erfolgen muss, wenn, wie in [BSG08] für ein Delaminationsproblem diskutiert, eine Grenzfläche großen Rotationen unterworfen ist. Da die Dehnungen für die hier im Fokus stehenden Kriechbedingungen aber als klein angesehen werden, ist davon auszugehen, dass die Rotationen von Korngrenzen vernachlässigbar sind.

5.2.2 Kohäsionsmodell für eine durch Poren geschädigte Korngrenze

Um das physikalische Verhalten von scharfen Grenzflächen zu beschreiben, werden verbreitet Kohäsionsmodelle eingesetzt. Diese wurden ursprünglich im Rahmen von Risswachstumsuntersuchungen entwickelt, wobei die Anfänge auf die Arbeiten von Barenblatt und Dugdale [Bar59; Dug60] zurückgehen. Neben der Beschreibung von Rissausbreitungsvorgängen [TH92] können Kohäsionsmodelle unter anderem auch für die Betrachtung von De-

laminationenvorgängen [TCCD06; BSG08] und für die Berücksichtigung von schädigenden Korngrenzen in Polykristallen [CM04; WA04] genutzt werden. Der Name dieser Modelle leitet sich dabei aus der Vorstellung ab, dass zum Öffnen eines Risses oder zur Delamination an einer Grenzfläche eine bestimmte Arbeit verrichtet werden muss, um Kohäsionskräfte, welche sich beispielsweise aus atomaren Anziehungskräften ergeben, zu überwinden.

Die Formulierung von Kohäsionsmodellen erfolgt in den meisten Fällen durch die Beschreibung eines Spannungsvektors in Abhängigkeit von einem vektoriellen Verschiebungssprung. Der Spannungsvektor charakterisiert dabei die mechanische Belastung der Grenzfläche, während der vektorielle Verschiebungssprung die mit der Grenzfläche assoziierten Deformationen repräsentiert. Für gewöhnlich werden vergleichsweise einfache konstitutive Zusammenhänge zwischen Spannungsvektor und Verschiebungssprung angenommen, welche die tatsächlich ablaufenden Prozesse rein phänomenologisch beschreiben sollen. Zudem kann auch eine Potentialfunktion genutzt werden, um thermodynamisch konsistente Modelle zu formulieren [TCCD06]. Hierbei ergibt sich dann der Spannungsvektor aus dem jeweiligen Potential durch Bildung der Ableitung nach dem Verschiebungssprung.

Im Rahmen von FE-Analysen werden Kohäsionsmodelle in Kombination mit kohäsiven Elementen eingesetzt, um Separationsprozesse entlang von festgelegten Pfaden bzw. Flächen zu simulieren. Dies bietet sich speziell für Vorgänge an, bei denen die Grenzflächen, so wie beispielsweise die Matrix-Faser-Grenzfläche in Faserverbundwerkstoffen oder die Korngrenzen in einem Polykristall, einen physikalischen Ursprung haben.

Im Gegensatz zu den weit verbreiteten phänomenologischen Kohäsionsmodellen soll hier ein mikromechanisch motiviertes konstitutives Grenzflächenmodell genutzt werden, um das Verhalten einer durch Poren geschädigten Korngrenze zu beschreiben. Der im Folgenden beschriebene Zusammenhang zwischen Spannungsvektor und Verschiebungssprung ergibt sich dabei aus der Betrachtung von Korngrenzenschädigung und Korngrenzengleiten. Da das Modell bei der späteren Anwendung im Rahmen einer FE-Analyse in Kombination mit kohäsiven Elementen zum Einsatz kommen soll, wird es in der vorliegenden Arbeit auch als mikromechanisches Kohäsionsmodell bezeichnet.

Um die Einflüsse verschiedener Mechanismen berücksichtigen zu können, wird für die Formulierung der Modellgleichungen eine additive Zerlegung des Verschiebungssprunges

$$[\mathbf{u}] = [\mathbf{u}]^{\text{el}} + [\mathbf{u}]^{\text{inel}} \quad (5.8)$$

in einen elastischen $[\mathbf{u}]^{\text{el}}$ und einen inelastischen Anteil $[\mathbf{u}]^{\text{inel}}$ angenommen, was mit den Herangehensweisen in [WA04; CSCC10; FKL08] vergleichbar ist. Der Spannungsvektor \mathbf{t} wird durch den linearen Zusammenhang

$$\mathbf{t} = \mathbf{D}(\beta, \rho) \cdot [\mathbf{u}]^{\text{el}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{t} = [\sigma_n \quad \sigma_s \quad \sigma_t]^T \quad (5.9)$$

in Abhängigkeit vom elastischen Verschiebungssprung ausgedrückt, wobei $\mathbf{D}(\beta, \rho)$ eine vom Schädigungszustand einer Korngrenze abhängige Steifigkeitsmatrix und σ_n , σ_s und σ_t die Spannungskomponenten bezüglich des in *Abb. 5.2* dargestellten lokalen Koordinatensystems sind. Der Schädigungszustand wird durch die in Abschnitt 4.3.1 eingeführten Schädigungs-

Tab. 5.1: Parameter der Grenzflächensteifigkeitskomponenten (5.10) und (5.11).

a_{Inter}	b_{Inter}	c_{Inter}	d_{Inter}	e_{Inter}^1
0,31003	-0,95611	10^{-6}	0,02587	0,49324

variablen β und ρ charakterisiert, welche sich in Anlehnung an das 'smeared out'-Modell in [GT91] (siehe auch *Abb. 2.7*) entlang der Korngrenze kontinuierlich verändern können.

In [Vös10] wurde die effektive Steifigkeit einer Grenzfläche, welche durch linsenförmige Poren (Dihedralwinkel $\psi = 70^\circ$) geschädigt war, anhand von FE-Simulationen abgeschätzt, wobei das umliegende Material als isotrop elastisch mit einem Elastizitätsmodul E_{Inter} und einer Poissonzahl 0,3 angenommen wurde. Die resultierenden Zusammenhänge für die von Null verschiedenen Komponenten von \mathbf{D} (β, ρ) konnten durch die phänomenologischen Ansätze

$$D_{nn}(\beta, \rho) = E_{\text{Inter}} \cdot \sqrt{\rho} \cdot \left[a_{\text{Inter}} (\beta + c_{\text{Inter}})^{b_{\text{Inter}}} + d_{\text{Inter}} \right], \quad (5.10)$$

$$D_{ss}(\beta, \rho) = D_{tt}(\beta, \rho) = e_{\text{Inter}} \cdot D_{nn}(\beta, \rho) \quad (5.11)$$

abgebildet werden, wobei die Anpassungsparameter a_{Inter} , b_{Inter} , c_{Inter} , d_{Inter} und e_{Inter} in *Tab. 5.1* aufgelistet sind.

Die Beschreibung des inelastischen Anteils des Verschiebungssprunges erfolgt durch eine Mechanismen-orientierte Modellierung. Hierzu wird das in Abschnitt 4.4.3 präsentierte Porositätsmodell genutzt, um die Komponente normal zur Korngrenze $[[u_n]]^{\text{inel}}$ durch die Korngrenzenaufdickung $[[u]]^{\text{P}} = V_S/S_0$, welche dem Volumen von Korngrenzenporen V_S pro Korngrenzenfläche S_0 entspricht, auszudrücken:

$$[[u_n]]^{\text{inel}} = [[u]]^{\text{P}} - [[u]]_0^{\text{P}} = \frac{\beta}{\sqrt{\rho}} - \frac{\beta_0}{\sqrt{\rho_0}}. \quad (5.12)$$

Dabei wird $[[u]]^{\text{P}}$ entsprechend der Definition (4.51) auf die beiden Schädigungsvariablen β und ρ zurückgeführt. Die Korngrenzenaufdickung wurde in (5.12) um den Term $[[u]]_0^{\text{P}} = \beta_0/\sqrt{\rho_0}$ modifiziert, um sicherzustellen, dass $[[u_n]]^{\text{inel}}$ zu Beginn einer Simulation verschwindet. Dabei sind β_0 und ρ_0 Anfangswerte für die beiden Schädigungsvariablen, durch welche beispielsweise eine herstellungsbedingte Vorschädigung eines Werkstoffes berücksichtigt werden kann.

Die Entwicklung von β und ρ ergibt sich aus den Modellgleichungen (4.101) bis (4.114), wobei die auf die Korngrenze einwirkende Normalspannung $\sigma_\infty = \sigma_n$ entsprechend (5.9) bestimmt wird. Da die Herleitung der Modellgleichungen auf die explizite Betrachtung von Porenwachstum zurückgeht, kann die Anwendung des Modells nur dann erfolgen, wenn eine Korngrenzenschädigung durch Poren vorliegt. Daher müssen β und ρ ebenso wie β_0 und ρ_0 von Null verschieden sein.

Um Probleme aufgrund einer Division durch Null bei der späteren numerischen Integration

¹Durch einen Fehler innerhalb der Auswertung der Simulationsergebnisse für die tangentielle Steifigkeit D_{tt} wurde in [Vös10] fälschlicherweise der Wert $e_{\text{Inter}} = 0,59324$ bestimmt.

der Entwicklungsgleichungen zu vermeiden, wurde die Annihilationsrate für das Sintern von Poren $\overset{\circ}{\rho}_A$ durch Einführung eines minimalen Porenradius von $1, 1 \bar{a}_{\text{init}}$ modifiziert:

$$\overset{\circ}{\rho}_A = \chi_5 \cdot \frac{-\bar{\rho}}{2 (\max \{1, 1 \bar{a}_{\text{init}}, \bar{a}\} - \bar{a}_{\text{init}})} \overset{\circ}{\bar{a}} \quad , \text{ wenn } \overset{\circ}{\bar{a}} < 0 . \quad (5.13)$$

Da hierdurch ausschließlich das Schrumpfungsverhalten von gering geschädigten Korngrenzen beeinflusst wird, sind Auswirkungen auf die lebensdauerrelevante Schädigungsentwicklung vernachlässigbar.

Darüber hinaus wird in Ermangelung eines allgemein anerkannten Modells für die lokale Nukleation neuer Korngrenzenporen der in Abschnitt 4.1.2 beschriebene Zusammenhang genutzt, um die Produktionsrate $\dot{\rho}_P$ auszudrücken. Hierbei ist eine Fokussierung auf den funktionalen Zusammenhang zweckmäßig, so dass die Produktionsrate durch den Potenzansatz

$$\dot{\rho}_P = a_P \left(\frac{\sigma_n}{\sigma_P} \right)^{b_P} \quad \stackrel{(4.92)}{\Rightarrow} \quad \overset{\circ}{\rho}_P = \bar{a}_P (\bar{\sigma}_n)^{b_P} \quad (5.14)$$

in Abhängigkeit von der Normalspannung σ_n beschrieben wird. In (5.14) sind a_P und b_P materialabhängige Parameter und σ_P eine beliebige Normierungsspannung. Der Argumentation in Abschnitt 4.1.2 folgend, ist davon auszugehen, dass typische Norton-Exponenten für b_P eingesetzt werden können. Die unterbestimmte Formulierung mit dem Vorfaktor a_P und der Normierungsspannung σ_P erhöht zudem die Flexibilität bei der Variation von Materialparametern. Dabei können beide Parameter im Rahmen der Einbettung in die Modellgleichungen (4.101) bis (4.114) entsprechend der Normierung bezüglich der Referenzwerte (4.92) in dem Vorfaktor $\bar{a}_P = a_P \cdot t_{\text{Ref}} \cdot a_{\text{Ref}}^2 \cdot (\sigma_{\text{Ref}}/\sigma_P)^{b_P}$ zusammengefasst werden.

Wie in Abschnitt 4.4.3 bereits beschrieben wurde, ist darüber hinaus zu berücksichtigen, dass keine neuen Poren entstehen sollen, wenn entsprechend der Modellgleichungen Porenschrumpfen zu erwarten ist. Porenschrumpfen tritt genau dann ein, wenn die Porenwachstumsrate (4.104) negativ wird. Dies ist der Fall, wenn die auf eine Korngrenze einwirkende dimensionslose Normalspannung $\bar{\sigma}_n$ kleiner als die dimensionslose Schwellspannung $\bar{\sigma}_n^{\text{GG}}$ wird:

$$\bar{\sigma}_n < \bar{\sigma}_n^{\text{GG}} = \bar{\sigma}^{\text{Rand}}(\bar{a}) \cdot (1 - \chi_2 \cdot \omega) . \quad (5.15)$$

Um Porennukleation unterhalb der Schwellspannung zu vermeiden, wird die modifizierte Produktionsrate

$$\overset{\circ}{\rho}_P = \begin{cases} \frac{(\bar{a}_P (\bar{\sigma}_n)^{b_P} - \bar{a}_P (\bar{\sigma}_n^{\text{GG}})^{b_P})^2}{\bar{a}_P (\bar{\sigma}_n)^{b_P}} & , \text{ wenn } \overset{\circ}{\bar{a}} \geq 0 \\ 0 & , \text{ wenn } \overset{\circ}{\bar{a}} < 0 \end{cases} \quad (5.16)$$

innerhalb des Porositätsmodells angewendet. Diese stellt zudem sicher, dass die Produktionsrate für $\overset{\circ}{\bar{a}} = 0$ differenzierbar ist. Letzteres hat sich als vorteilhafte Eigenschaft für die numerische Integration erwiesen.

Die physikalische Modellierung des Kohäsionsmodells wird darüber hinaus vervollständigt, indem die beiden inelastischen Verschiebungssprungkomponenten tangential zur Korngrenze für die Beschreibung von Korngrenzengleiten genutzt werden. Verschiedene mikromechanische Aspekte von Korngrenzengleiten wurden in [Ash72] diskutiert, wobei auch detailliert auf die zugrunde liegenden Mechanismen eingegangen wurde. Obwohl Korngrenzengleiten nicht auf einen einzelnen Mechanismus zurückgeführt werden kann, so wird durch die Verwendung eines einfachen Newtonschen Viskositätsgesetzes, welches bereits in mehreren Untersuchungen [GT91; DBKT08; CBQK09] genutzt wurde, eine annehmbare phänomenologische Beschreibung ermöglicht. Auch hier wird die Abgleichungsrate $[[\dot{u}]]_{\text{KGG}}$ gemäß

$$[[\dot{u}]]_{\text{KGG}} = \frac{\sigma_{\text{KGG}}}{\eta_{\text{KGG}}} \quad (5.17)$$

in Abhängigkeit von der auf eine Korngrenze einwirkenden Schubspannung σ_{KGG} beschrieben, wobei die Korngrenzenviskosität η_{KGG} die Proportionalität charakterisiert. Entsprechend gilt für die inelastischen Verschiebungssprungkomponenten tangential zur Korngrenze

$$[[\dot{u}_i]]^{\text{inel}} = \frac{\sigma_i}{\eta_{\text{KGG}}} \quad i = \{s, t\} , \quad (5.18)$$

wobei σ_s und σ_t jeweils die Schubspannungskomponenten entlang der beiden Tangentialrichtungen sind.

Unter entsprechenden Belastungen führt die Schädigungsentwicklung letztendlich zum vollständigen Versagen eines Korngrenzenbereiches, welcher dann keine Kräfte mehr übertragen kann und dem Auseinanderdriften der angrenzenden Körner keinen Widerstand mehr entgegenbringt. In [CA82] wurde aufgezeigt, dass noch deutlich bevor der geschädigte Flächenanteil ω den Wert 1 erreicht, das Versagen einer Korngrenze in den meisten Fällen durch duktile Rissbildung entlang der bis dahin noch ungeschädigten Korngrenzenfläche stattfindet. Diese Problematik wurde auch in [GOB97] diskutiert, wobei dort ein kritischer Wert $\sqrt{\omega} = 0,7$ als Versagenskriterium angenommen wurde. Entsprechend diesen Überlegungen wird das Kohäsionsmodell hier ebenfalls durch ein Versagenskriterium bezüglich des geschädigten Flächenanteils vervollständigt. Hierzu wird angenommen, dass ein Korngrenzenbereich komplett versagt und somit keinerlei Kräfte mehr übertragen kann, wenn der kritische Wert $\omega = 0,5$ erreicht wird. Im Rahmen der Implementierung wird dies realisiert, indem sowohl der Spannungsvektor der Grenzfläche als auch die Tangentensteifigkeit zu Null gesetzt werden.

Das in diesem Abschnitt präsentierte Kohäsionsmodell wurde über die benutzerdefinierte Programmschnittstelle UMAT in das FE-Programm Abaqus implementiert, wobei eine implizite Integrationsprozedur und eine zugehörige konsistente Tangentensteifigkeit verwendet wurden. Die Umsetzung entspricht dabei im Wesentlichen der Vorgehensweise in [Vös10]. Im Rahmen der Implementierung wird darüber hinaus zu Beginn jedes Zeitschrittes überprüft, ob die Schädigungsvariablen β und ρ die Anfangswerte β_0 und ρ_0 unterschreiten. Dies kann beispielsweise als Folge von Porenschrumpfen auf einer Korngrenze unter Druck geschehen. In einem solchen Fall wird jeweils die betroffene Schädigungsvariable auf ihren Anfangswert gesetzt.

5.3 Polykristalline Mikrostruktur als Finite-Elemente-Modell

In den Abschnitten 5.1 und 5.2.2 wurden jeweils konstitutive Modelle zur Beschreibung des physikalischen Verhaltens von einzelnen Körnern und von einzelnen Korngrenzen präsentiert. Um im Rahmen von FE-Analysen das Kriechverhalten von polykristallinen Mikrostrukturen simulieren zu können, muss die jeweilige Kornstruktur durch ein entsprechendes FE-Modell abgebildet werden. Hierzu wird jedes einzelne Korn als ein zusammenhängendes Netz aus Kontinuumelementen aufgebaut. Die Vernetzungen verschiedener Körner können dabei unabhängig voneinander erfolgen. Für die hier beschriebene Vorgehensweise wird aber davon ausgegangen, dass die Oberflächenvernetzungen zweier Körner, die entlang einer Korngrenze zusammenkommen, deckungsgleich sind. Dies kann beispielsweise durch Anwendung der in [FBS09] präsentierten Vernetzungsstrategie erreicht werden, bei welcher zuerst die Korngrenzen und äußeren Ränder diskretisiert werden und anschließend die sich jeweils pro Korn ergebende Oberflächenvernetzung als Ausgangspunkt für die Diskretisierung des Kornvolumens genutzt wird.

Wie bereits erwähnt wurde, sollen kohäsive Elemente genutzt werden, um die einzelnen Körner miteinander zu verbinden. Dies ist mit den Vorgehensweisen in [CM04; WA04] vergleichbar. Wie in *Abb. 5.3a* skizziert, werden die kohäsiven Elemente mit verschwindender Dicke

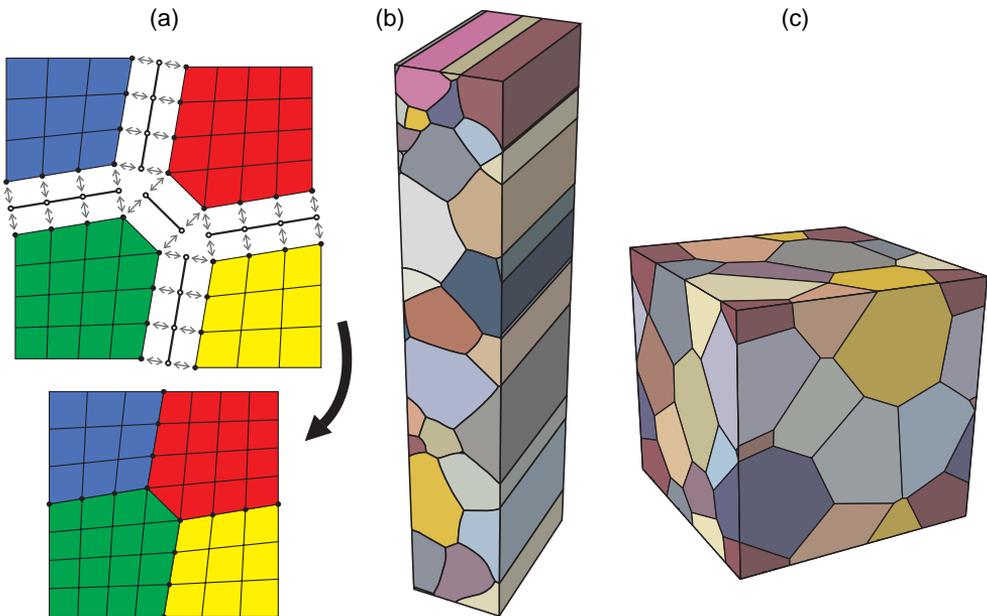


Abb. 5.3: (a) zeigt schematisch die Verknüpfung einzelner Körner entlang der Korngrenzen durch kohäsive Elemente. Die eingezeichneten Doppelpfeile kennzeichnen dabei die Anbindung der den kohäsiven Elementen zugehörigen Knoten (nicht ausgefüllte Kreise) an die Knoten der Körner (ausgefüllte Kreise). (b) zeigt die auf EBSD-Messungen basierende Kornstruktur eines vernetzten FE-Modells. (c) zeigt die Kornstruktur eines vernetzten FE-Modells, welche auf Basis einer periodischen Voronoi-Struktur künstlich erzeugt wurde.

an die Knoten der angrenzenden Körner angebunden. Für ebene Korngrenzen, wie sie typischerweise in einer Voronoi-Struktur auftreten, können die kohäsiven Elemente dabei direkt zwischen den Knoten der angrenzenden Körner aufgespannt werden. Die Betrachtung von unebenen oder gekrümmten Korngrenzen erfordert hingegen eine spezielle Vorgehensweise, welche in Abschnitt 5.3.1 diskutiert wird. In beiden Fällen wird aber von deckungsgleichen Oberflächenvernetzungen entlang der Korngrenzen ausgegangen. Damit das lokale Koordinatensystem entsprechend der Elementdefinition korrekt orientiert ist, muss beim Einfügen eines kohäsiven Elements darauf geachtet werden, dass die mit einem Element assoziierte Grenzfläche parallel zur Korngrenze verläuft.

Die Vorgehensweise zur Erstellung von polykristallinen FE-Modellen ist dabei sehr flexibel und kann auf verschiedenste Mikrostrukturen angewendet werden. So sind in *Abb. 5.3b* und *Abb. 5.3c* exemplarisch die Kornstrukturen zweier vernetzter FE-Modelle dargestellt, welche, wie in den später folgenden Abschnitten 6.2 und 7 beschrieben, für Simulationen des Kriechschädigungsverhaltens einer Kupferlegierung verwendet wurden.

5.3.1 Geometrische Beschreibung gekrümmter Korngrenzen

Die Probleme, die bei der Modellierung von gekrümmten Grenzflächen mittels kohäsiver Elemente im Rahmen einer FE-Analyse bestehen, können anhand eines vereinfachten Beispiels mit rein elastischem Materialverhalten gut veranschaulicht werden. Hierzu wurden FE-Modelle eines Bikristalls mit gekrümmter Korngrenze für verschiedene Vernetzungseinheiten betrachtet. Zwei dieser Modelle, welche sich jeweils durch 5 und 20 kohäsive Elemente entlang der Korngrenze auszeichnen, sind exemplarisch in *Abb. 5.4* und *Abb. 5.5* dargestellt. Das Materialverhalten der beiden Körner wurde als isotrop elastisch mit Elastizitätsmodul

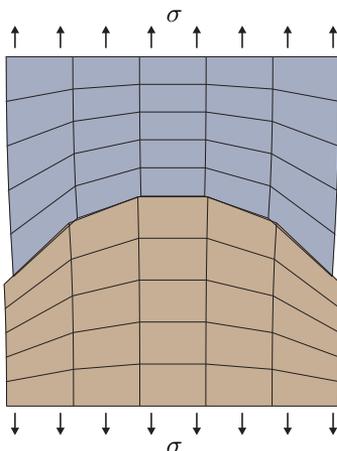


Abb. 5.4: Grob vernetztes FE-Modell eines Bikristalls mit gekrümmter Korngrenze im deformierten Zustand (Deformationsfaktor von 4 000 für Verschiebungsdarstellung).

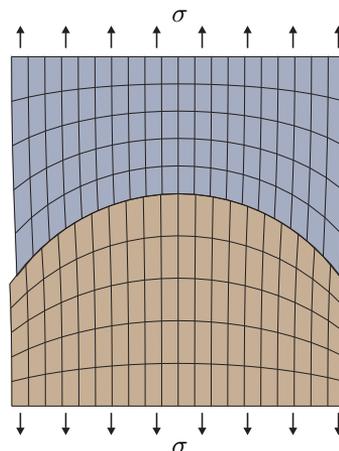


Abb. 5.5: Feiner vernetztes FE-Modell eines Bikristalls mit gekrümmter Korngrenze im deformierten Zustand (Deformationsfaktor von 4 000 für Verschiebungsdarstellung).

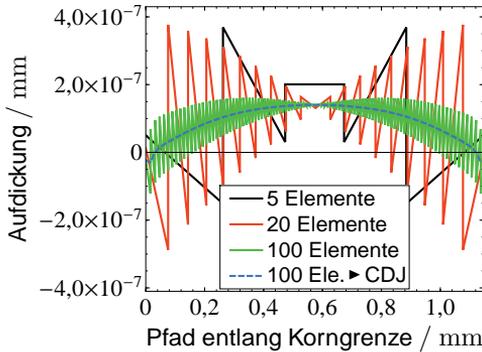


Abb. 5.6: Resultierende Aufdickungen in den Integrationspunkten der kohäsiven Elemente entlang der gekrümmten Korngrenze für den Fall, dass die kohäsiven Elemente direkt zwischen den Knoten der beiden Körner aufgespannt werden. Die in der Legende genannten Elementanzahlen bezeichnen jeweils die Gesamtzahl an kohäsiven Elementen entlang der Korngrenze.

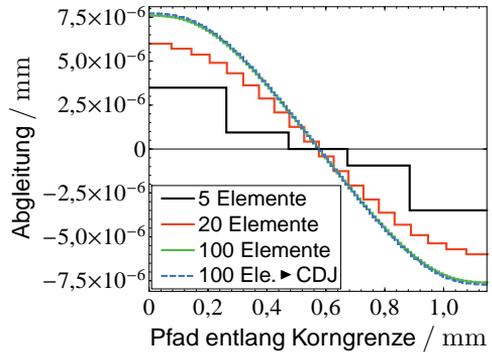


Abb. 5.7: Resultierende Abgleitungen in den Integrationspunkten der kohäsiven Elemente entlang der gekrümmten Korngrenze für den Fall, dass die kohäsiven Elemente direkt zwischen den Knoten der beiden Körner aufgespannt werden.

10^6 N/mm^2 und Poissonzahl 0,3 angenommen. Für die Korngrenze wurde ebenfalls ein rein elastisches Materialverhalten mit konstanten Steifigkeiten $D_{nn} = 10^8 \text{ N/mm}^3$ und $D_{ss} = D_{tt} = 10^4 \text{ N/mm}^3$ verwendet, wobei die niedrigere tangentielle Steifigkeit eine ausgeprägtere Korngrenzenabgleitung ermöglichte. Durch Aufbringung einer Zugbelastung $\sigma = 10 \text{ N/mm}^2$ am oberen und unteren Rand der Modelle stellten sich jeweils Verformungen ein, welche in *Abb. 5.4* und *Abb. 5.5* unter Berücksichtigung eines Deformationsfaktors von 4 000 dargestellt sind. Es ist deutlich zu erkennen, dass es dabei zu einer Abgleitung entlang der Korngrenze kommt, welche umso größer ist, je stärker die lokale Normalenrichtung der Korngrenze von der Belastungsrichtung abweicht.

Die Probleme, welche bezüglich der Deformationsbeschreibung an gekrümmten Grenzflächen bestehen, werden allerdings erst sichtbar, wenn man die Verschiebungssprungkomponenten, also die Aufdickung und Abgleitung, in den Integrationspunkten der kohäsiven Elemente entlang der Korngrenze auswertet. In dem hier betrachteten Beispiel wurden dabei lineare Elemente vom Typ COH3D8 (siehe Abschnitt 31.5 *Cohesive elements* in [Aba]) genutzt. Für den Fall, dass die kohäsiven Elemente direkt zwischen den Knoten der beiden Körner aufgespannt werden, eine Vorgehensweise, die für ebene Korngrenzen problemlos funktioniert, sind die resultierenden Aufdickungen und Abgleitungen entlang der gekrümmten Korngrenze jeweils für verschiedene Vernetzungseinheiten in *Abb. 5.6* und *Abb. 5.7* dargestellt.

Als besonders kritisch sind dabei die sprunghaften Änderungen der Aufdickung zwischen jeweils zwei benachbarten kohäsiven Elementen anzusehen. Die Sprünge in der Aufdickung sind dabei umso ausgeprägter, je stärker die Normalenrichtungen zweier benachbarter Ele-

mente voneinander abweichen und je größer die lokale Abgleitung ist. Die stufenförmigen Verläufe der Abgleitungen sind hingegen auf die linearen Elemente vom Typ COH3D8 zurückzuführen, für welche die Abgleitungen in den Integrationspunkten zu einem konstanten Wert pro Element gemittelt werden. In der Folge ist die Abgleitung beim Übergang zwischen zwei Elementen unstetig, jedoch ohne eine Überhöhung, wie sie im Vergleich mit der Aufdickung zu beobachten ist.

Im Folgenden wird eine spezielle Modellierungstechnik vorgestellt, welche eine verbesserte Beschreibung der Deformationen an der Verbindungsstelle mehrerer kohäsiver Elemente ermöglicht und hier als CDJ-Technik (engl. Continuous Displacement Jump) bezeichnet werden soll. Dabei ist es zunächst zweckmäßig, die Ursache der in *Abb. 5.6* dargestellten Aufdickungsprünge genauer zu verstehen.

Für jeden Punkt entlang einer Korngrenze ist ein lokales Koordinatensystem e_n , e_s und e_t definiert, wobei e_n senkrecht auf der Korngrenze steht. Wie in *Abb. 5.8* für ein einzelnes kohäsives Element skizziert ist, kann bezüglich der Normalenrichtung e_n eine obere und eine untere Fläche definiert werden. Beide Flächen gehören jeweils zu den beiden angrenzenden Körnern und sind exakt deckungsgleich, wenn der Verschiebungssprung verschwindet. Für die Diskretisierung einer kontinuierlich gekrümmten Korngrenze im Rahmen der Erstellung eines FE-Modells werden, wie in *Abb. 5.9* skizziert, Knotenpaare $\{p_i\}$ entlang der Korngrenze definiert. Dabei gehört jeweils ein Knoten zur oberen Fläche und der zugehörige andere Knoten zur unteren Fläche. Der naheliegendste Weg, die untere mit der oberen Fläche durch kohäsive Elemente zu verbinden, ist dadurch gegeben, dass, so wie es in *Abb. 5.9* für die Elemente ① und ② gezeigt ist, für die Elementdefinitionen die Knoten von jeweils benachbarten Knotenpaaren direkt verwendet werden. Die Komponenten des Verschiebungssprunges $[[u_n]]$, $[[u_s]]$ und $[[u_t]]$ ergeben sich dann, wie in *Abb. 5.8* skizziert, durch Zerlegung der Verschiebungsdifferenz eines Knotenpaares bezüglich des lokalen Koordinatensystems innerhalb eines kohäsiven Elements.

Um die unstetigen Verschiebungen an einer Grenzfläche durch einen Verschiebungssprung

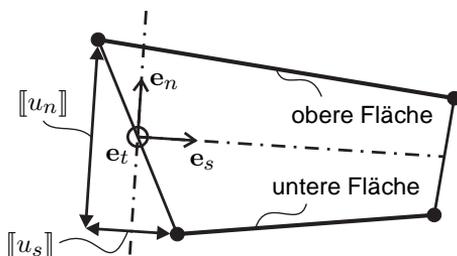


Abb. 5.8: Illustration zur Zerlegung der relativen Bewegung der angrenzenden Körner innerhalb eines kohäsiven Elements in einzelne Verschiebungssprungkomponenten entsprechend dem lokalen Koordinatensystem.

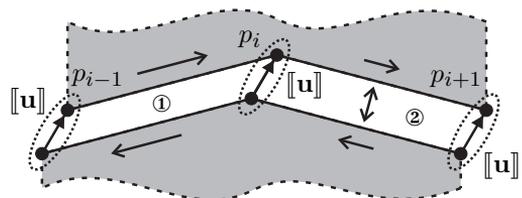


Abb. 5.9: Darstellung einer durch zwei kohäsive Elemente gebildeten Ecke in einer Korngrenze, an welcher der vektorielle Verschiebungssprung $[[u]]$ kontinuierlich ist, die Verläufe der Verschiebungssprungkomponenten in Normal- und Tangentialrichtung zwischen den beiden Elementen jedoch diskontinuierlich sind.

korrekt zu beschreiben, müssen die einzelnen Verschiebungssprungkomponenten stetig entlang der Grenzfläche sein. Diese Voraussetzung kann jedoch durch die Diskretisierung einer gekrümmten Korngrenze innerhalb eines FE-Modells verletzt werden. Wie in *Abb. 5.9* skizziert ist, kann die Diskretisierung einer gekrümmten Korngrenze zu einer Ecke zwischen jeweils benachbarten kohäsiven Elementen führen, für welche sich dann die lokalen Koordinatensysteme voneinander unterscheiden. Speziell bei der Verwendung von linearen Elementen, welche gegenwärtig die einzigen standardmäßig verfügbaren kohäsiven Elementtypen innerhalb des FE-Programmes Abaqus sind, ist dieser Umstand nicht zu vermeiden.

Auch wenn, wie in *Abb. 5.9* dargestellt, der vektorielle Verschiebungssprung $[[\mathbf{u}]]$ an den Knotenpaaren identisch ist, so sind an der Ecke zwischen den beiden Elementen die resultierenden Verschiebungssprungkomponenten unstetig, da $[[\mathbf{u}]]$ innerhalb der beiden kohäsiven Elemente bezüglich zweier unterschiedlicher lokaler Koordinatensysteme zerlegt wird. Entsprechend ergeben sich für Element ② Verschiebungssprungkomponenten, welche sich im Vergleich mit Element ① durch eine verringerte Abgleitung und eine erhöhte Aufdickung auszeichnen. Aus dieser unstetigen Deformationsbeschreibung an einer Ecke ergibt sich schließlich das in *Abb. 5.6* und *Abb. 5.7* dargestellte Verhalten für das betrachtete Beispiel.

Letztendlich lassen sich die Probleme bei der Deformationsbeschreibung darauf zurückführen, dass die Form einer gekrümmten Korngrenze durch die Diskretisierung zwar stetig, jedoch an den Ecken zwischen zwei kohäsiven Elementen nicht differenzierbar ist. Letzteres ergibt sich aus der Tatsache, dass die Normalenrichtung der Korngrenze direkt an einer Ecke nicht eindeutig definiert ist.

Um zu erreichen, dass die Verschiebungssprungkomponenten an den Ecken einer diskretisierten gekrümmten Korngrenze stetig sind, kann die im Folgenden beschriebene CDJ-Technik angewendet werden. Hierfür werden zunächst pro kohäsivem Element neue Freiheitsgrade in Form von zusätzlichen Knoten in das FE-Modell eingefügt. Die zusätzlichen Knoten werden dabei deckungsgleich zu den Knoten der angrenzenden Körner positioniert und für die Elementdefinitionen der kohäsiven Elemente genutzt. An einer Diskretisierungs-

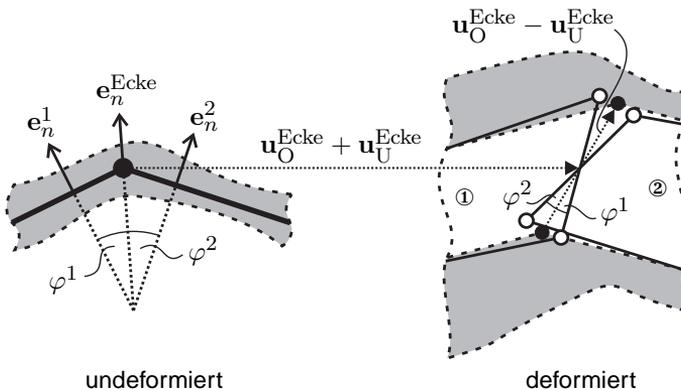


Abb. 5.10: Veranschaulichung der Knotenverschiebungen, welche sich an einer durch mehrere kohäsive Elemente gebildeten Ecke entsprechend der CDJ-Technik zur Wahrung der Kontinuität der Verschiebungssprungkomponenten einstellen.

ecke ergibt sich somit neben dem Knotenpaar der angrenzenden Körner (ausgefüllte Kreise in *Abb. 5.10*) jeweils ein zusätzliches Knotenpaar pro kohäsivem Element (nicht ausgefüllte Kreise in *Abb. 5.10*). Wie in *Abb. 5.10* skizziert, fallen alle Knotenpaare, die zu einer Ecke gehören, im undeformierten Zustand zusammen.

Die Freiheitsgrade der zusätzlichen Knotenpaare werden dann über Zwangsbedingungen, welche die Kontinuität der Verschiebungssprungkomponenten berücksichtigen, in Abhängigkeit von den Freiheitsgraden des Knotenpaares der angrenzenden Körner ausgedrückt. Hierdurch wird der lokale Verschiebungssprung der angrenzenden Körner unter Berücksichtigung der jeweiligen lokalen Koordinatensysteme auf die kohäsiven Elemente übertragen und die Deformationsbeschreibung der Korngrenze signifikant verbessert. Allerdings führt dies auch dazu, dass kohäsive Elemente im deformierten Zustand mit einander und mit den angrenzenden Körnern überlappen (siehe *Abb. 5.10*). Eine Beeinflussung der Simulationsergebnisse durch diese Überlappungen konnte im Rahmen der Anwendung der CDJ-Technik jedoch nicht festgestellt werden. Es ist daher davon auszugehen, dass mögliche Auswirkungen gegenüber anderen Einflussfaktoren (wie beispielsweise der Vernetzungsfinheit) vernachlässigbar sind.

Für die konkrete Umsetzung der CDJ-Technik müssen an einer Ecke eine eindeutige Normalenrichtung definiert und angemessene Zwangsbedingungen formuliert werden. Die hier präsentierte Vorgehensweise wird dabei als sinnvoll und praktikabel angesehen. Es sei aber darauf hingewiesen, dass auch andere Festlegungen (z. B. für die Normalenrichtung an einer Ecke) möglich wären. Wenn N_E kohäsive Elemente eine Ecke in einer diskretisierten Korngrenze bilden, dann wird durch

$$\mathbf{e}_n^{\text{Ecke}} = \sum_{i=1}^{N_E} \mathbf{e}_n^i / \left\| \sum_{i=1}^{N_E} \mathbf{e}_n^i \right\| \quad (5.19)$$

eine gemittelte Normalenrichtung an der Ecke definiert, wobei \mathbf{e}_n^i die Normalenrichtung des i -ten kohäsiven Elements an der Ecke ist und $\mathbf{e}_n^i \cdot \mathbf{e}_n^j > 0$ für alle Kombinationen von kohäsiven Elementen an der Ecke gelten soll. Darüber hinaus wird für jedes kohäsive Element eine Rotation \mathbf{Q}^i definiert, welche die beiden Gleichungen

$$\mathbf{e}_n^i = \mathbf{Q}^i \cdot \mathbf{e}_n^{\text{Ecke}}, \quad (5.20)$$

$$\mathbf{e}_n^{\text{Ecke}} \times \mathbf{e}_n^i = \mathbf{Q}^i \cdot \left(\mathbf{e}_n^{\text{Ecke}} \times \mathbf{e}_n^i \right) \quad (5.21)$$

erfüllt. Die Rotationsachse von \mathbf{Q}^i verläuft somit senkrecht zu den beiden Normalenvektoren $\mathbf{e}_n^{\text{Ecke}}$ und \mathbf{e}_n^i , sofern beide Vektoren linear unabhängig voneinander sind. Für die Anwendung innerhalb einer automatisierten Erstellung von FE-Modellen wird \mathbf{Q}^i durch

$$\mathbf{Q}^i = \begin{cases} \mathbf{I} & , \text{ wenn } \mathbf{e}_n^{\text{Ecke}} \cdot \mathbf{e}_n^i < 1 - \delta \\ \mathbf{R}(\boldsymbol{\omega}^i, \varphi^i) & , \text{ sonst} \end{cases} \quad (5.22)$$

bestimmt, worin \mathbf{I} die Einheitsmatrix, $\delta = 10^{-6}$ und $\mathbf{R}(\boldsymbol{\omega}^i, \varphi^i)$ die Rotation um den Winkel

$$\varphi^i = \arccos \left(\mathbf{e}_n^{\text{Ecke}} \cdot \mathbf{e}_n^i \right) \quad (5.23)$$

bezüglich der Rotationsachse

$$\boldsymbol{\omega}^i = \frac{\mathbf{e}_n^{\text{Ecke}} \times \mathbf{e}_n^i}{\| \mathbf{e}_n^{\text{Ecke}} \times \mathbf{e}_n^i \|} \quad (5.24)$$

sind. Schließlich werden die mit jedem kohäsiven Element eingefügten zusätzlichen Freiheitsgrade über die beiden vektoriellen Zwangsbedingungen

$$\mathbf{u}_O^i + \mathbf{u}_U^i = \mathbf{u}_O^{\text{Ecke}} + \mathbf{u}_U^{\text{Ecke}}, \quad (5.25)$$

$$\mathbf{u}_O^i - \mathbf{u}_U^i = \mathbf{Q}^i \cdot \left(\mathbf{u}_O^{\text{Ecke}} - \mathbf{u}_U^{\text{Ecke}} \right) \quad (5.26)$$

mit den Verschiebungen der angrenzenden Körner verknüpft. In (5.25) und (5.26) sind $\mathbf{u}_O^{\text{Ecke}}$ und $\mathbf{u}_U^{\text{Ecke}}$ die Verschiebungsvektoren des Knotenpaares der angrenzenden Körner und \mathbf{u}_O^i und \mathbf{u}_U^i die Verschiebungsvektoren des zusätzlichen Knotenpaares, welches für das i -te kohäsive Element an der Ecke eingefügt wurde. Die Indizes O und U kennzeichnen dabei jeweils die Zugehörigkeit eines Knotens zur oberen und unteren Fläche (siehe *Abb. 5.8*). Die Kontinuität des Verschiebungssprunges an einer Ecke wird dabei durch (5.26) sichergestellt, während (5.25) eine einheitliche absolute Verschiebung aller Knotenpaare an einer Ecke gewährleistet.

Für kleine Deformationen, also wenn die Verformungen des Modells auf die Ausgangskonfiguration bezogen werden, ist \mathbf{Q}^i konstant. Die Zwangsbedingungen (5.25) und (5.26) sind

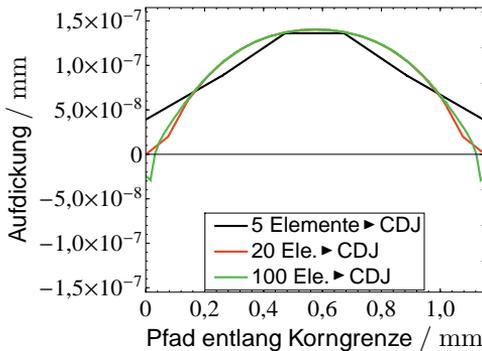


Abb. 5.11: Resultierende Aufdickungen in den Integrationspunkten der kohäsiven Elemente entlang der gekrümmten Korngrenze bei Verwendung der CDJ-Technik. Die in der Legende genannten Elementanzahlen bezeichnen jeweils die Gesamtzahl an kohäsiven Elementen entlang der Korngrenze.

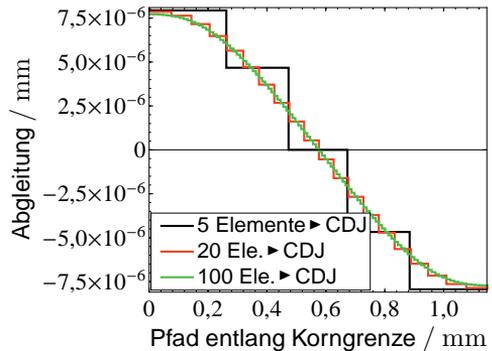


Abb. 5.12: Resultierende Abgleichungen in den Integrationspunkten der kohäsiven Elemente entlang der gekrümmten Korngrenze bei Verwendung der CDJ-Technik.

dann linear und können innerhalb des FE-Programmes Abaqus durch die Option *EQUATION realisiert werden.

In *Abb. 5.11* und *Abb. 5.12* sind die Aufdickungen und Abgleitungen, welche sich unter Verwendung der CDJ-Technik für das zu Beginn dieses Abschnitts diskutierte Beispiel ergeben, dargestellt. Der Vergleich mit *Abb. 5.6* und *Abb. 5.7* zeigt deutlich die verbesserte Deformationsbeschreibung der Korngrenze, welche sich durch stetige Verläufe für die Verschiebungssprungkomponenten und eine deutliche Verringerung des Einflusses der Vernetzungsfineinheit auszeichnet.

Abschließend sei noch ausdrücklich darauf hingewiesen, dass Ecken in diskretisierten gekrümmten Korngrenzen und Tripellinien zwei unterschiedliche Aspekte bei der Erstellung von FE-Modellen für polykristalline Mikrostrukturen sind. Während Tripellinien reale geometrische Charakteristika sind, handelt es sich bei den Ecken um Diskretisierungsartefakte. Innerhalb der FE-Modelle haben daher die zu einer Korngrenze gehörenden kohäsiven Elemente ausschließlich Verbindung zu den Kontinuumelementen der angrenzenden Körner. Das Verhalten an Tripellinien ist somit einzig durch das Verhalten der Körner und Korngrenzen bestimmt, die an einer Tripellinie zusammenkommen.

5.4 Diskussion der Ergebnisse

Das in den vorangegangenen Abschnitten präsentierte mikromechanische Polykristallmodell ermöglicht es, das Kriechverhalten polykristalliner Werkstoffe unter Einbeziehung der tatsächlichen Kornstruktur zu beschreiben. Die Implementierung mittels des leistungsstarken FE-Programmes Abaqus ermöglicht dabei auch die Simulation komplexerer dreidimensionaler Mikrostrukturen. Zudem stehen im Rahmen des Standardumfangs von Abaqus bereits die meisten Funktionen und Elementtypen, welche für die Anwendung des Modells benötigt werden, zur Verfügung. Lediglich die für die Implementierung von benutzerdefinierten Materialmodellen bereitgestellte Programmschnittstelle UMAT wurde verwendet, um die Funktionalität von Abaqus zu erweitern und das physikalische Verhalten der Körner (siehe Abschnitt 5.1) und der Korngrenzen (siehe Abschnitt 5.2.2) für entsprechende FE-Simulationen bereitzustellen.

Der Aufbau der für die Simulationen benötigten FE-Modelle ist zudem vergleichsweise einfach, so dass das Polykristallmodell auf nahezu beliebige Mikrostrukturen anwendbar ist. Allein die Umsetzung der CDJ-Technik (siehe Abschnitt 5.3.1) ist aufgrund der Erstellung zahlreicher Zwangsbedingungen, eine Aufgabe die sich allerdings sehr gut automatisieren lässt, mit etwas größerem Aufwand verbunden. Die präsentierte Vorgehensweise für die Modellierung der Mikrostruktur basiert allerdings auf der Annahme einer unveränderlichen Kornstruktur. Es kann davon ausgegangen werden, dass angesichts der Komplexität von dreidimensionalen FE-Modellen sowie der Beschreibung der Korngrenzen mittels Verschiebungssprüngen die Betrachtung von veränderlichen Kornstrukturen, beispielsweise durch eine adaptive Vernetzung [BW04], eine erhebliche Vergrößerung des Modellierungsaufwandes bedeuten würde.

Zudem müsste das Anwendungskonzept der CDJ-Technik für eine adaptive Vernetzungs-

methode angepasst werden. Grundsätzlich sollte die CDJ-Technik auch für die Beschreibung gekrümmter Korngrenzen bezüglich der aktuellen Konfiguration anwendbar sein. Die Zwangsbedingungen (5.25) und (5.26) würden dann aber in nichtlinearer Weise von den Knotenverschiebungen abhängen und müssten im Rahmen der Gleichgewichtsiterationen stets neu ausgewertet werden.

Darüber hinaus sollte der gegenwärtige Stand des Polykristallmodells bevorzugt für die Beschreibung konstanter Belastungen verwendet werden, da das Einkristallmodell aus Abschnitt 5.1 nur eine isotrope Verfestigung berücksichtigt. Um auch die Beschreibung von Effekten zu ermöglichen, die das Materialverhalten unter nichtproportionalen Belastungen beeinflussen können, wäre eine Erweiterung der Modellgleichungen um eine kinematische Verfestigung sinnvoll.

Darüber hinaus ist die Anwendung des Kohäsionsmodells aus Abschnitt 5.2.2 nicht auf die ausschließliche Beschreibung von Korngrenzen in metallischen Werkstoffen begrenzt. Vielmehr kann das Modell auch zur Beschreibung anderer Grenzflächen eingesetzt werden, solange das Verhalten durch die betrachteten Mechanismen bestimmt ist. Hierzu zählt vor allem die Entwicklung einer Grenzflächenporosität infolge von Diffusionsvorgängen. Eine denkbare Anwendung wäre daher die Beschreibung von Grenzflächen in keramischen Materialien, für welche sich die Porosität durch Sintervorgänge verändert.

Dabei ist es für zukünftige Einsätze durchaus sinnvoll, das Kohäsionsmodell bezüglich verschiedener Punkte zu erweitern. Zum einen wäre anstelle des Potenzansatzes (5.14) bzw. (5.16) eine Mechanismen-orientierte Modellierung der Porennukleation wünschenswert. Trotz erster Ansätze in dieser Richtung [NOO12] gibt es für die Nukleation von Korngrenzenporen noch kein allgemein anerkanntes Modell. Vor der Verwendung einer physikalisch motivierten Nukleationsrate sollte daher stets geprüft werden, ob der zugrunde liegende Mechanismus auch für den jeweils betrachteten Werkstoff relevant ist.

Zum anderen erscheint es auch sinnvoll, die Modellierung des vollständigen Versagens eines lokalen Korngrenzenbereiches zu erweitern. Aus numerischer und physikalischer Sicht wäre hier die Gestaltung eines kontinuierlichen Überganges sinnvoll. Mit Blick auf die Anwendung des Kohäsionsmodells unter nichtproportionalen Belastungen sollte zudem der Fall berücksichtigt werden, dass die angrenzenden Körner entlang einer vollständig geschädigten Korngrenzfläche unter einer Druckbelastung in Kontakt miteinander kommen können. Für konstante Beanspruchungen im Rahmen der hier präsentierten Modellierung ist aber davon auszugehen, dass dieser Fall nicht eintritt.

Darüber hinaus sollten mögliche Erweiterungen des Kohäsionsmodells bezüglich der Beschreibung von Korngrenzengleiten geprüft werden. Hierbei könnten Ergebnisse von atomistischen Simulationen genutzt werden, um relevante Effekte zu identifizieren. So wie sich die Existenz einer Schwellspannung, unterhalb derer kein Korngrenzengleiten stattfindet, aus den Ergebnissen molekuldynamischer Simulationen ergab [QK07], könnten ähnliche Simulationen genutzt werden, um beispielsweise den Einfluss der Normalspannung auf die Abgleitung zu untersuchen.

Schließlich muss auch in Betracht gezogen werden, dass für die Beschreibung bestimmter Effekte eine Erweiterung der Grenzflächenformulierung notwendig sein kann. In [SN83]

wurde beispielsweise der Einfluss mehrachsiger Spannungszustände auf das Wachstum von Korngrenzenporen untersucht und eine modifizierte Porenwachstumsrate vorgeschlagen. Für die Anwendung Letzterer muss im Rahmen der Modellierung aber die Mehrachsigkeit in der Grenzfläche abgebildet werden. Hierzu können erweiterte Elementformulierungen [GSS12; BRV14; SGS14], welche die Deformationen in der Grenzflächenebene berücksichtigen, verwendet werden.

6 Beschreibung des Kriechverhaltens einer Kupfer-Antimon-Legierung

Die Anwendung des in Abschnitt 5 vorgestellten mikromechanischen Polykristallmodells zur Beschreibung des Kriechverhaltens eines Werkstoffes soll im Folgenden für eine polykristalline Cu-Sb-Legierung veranschaulicht werden. Obwohl Kupfer und Kupfer-Legierung in technischen Anwendungen eher selten unter Kriechbedingungen zum Einsatz kommen, so werden diese Materialien dennoch oft als Modellwerkstoffe für werkstoffwissenschaftliche Untersuchungen genutzt, um grundsätzliche Aspekte von Kriechvorgängen in Polykristallen zu untersuchen. Für Kupferwerkstoffe existieren daher bereits zahlreiche Studien, beispielsweise zum Kriechdeformations- und Kriechbruchverhalten [WP02; WBB05; WB07; HA09], zur Entwicklung von Kriechschädigung [FTB75; HG82; WMN83; HMF90; MH97; Dzi10], zur Entwicklung der Korngrenzenporosität [YN84a; YN84b; AL96; Ott11; OVPFE12], zum Auftreten von Korngrenzengleiten [WD78; Raj91; AL96], zum Verhalten unter mehrachsigen Belastungen [Hay72; THL81; Lec86; AHVSNL03; LKC05] oder zum Einfluss vom Legierungselementen und dem Korngrenzencharakter [MS96; MKMM03; OFE11; Ott11; OVPFE12].

Eine Cu-Sb-Legierung erscheint dabei aus zwei Gründen für die Anwendung des mikromechanischen Polykristallmodells gut geeignet zu sein: Zum einen wird die Mikrostruktur unter Kriechbedingungen stabilisiert, da sich die Sb-Atome bevorzugt entlang der Korngrenzen anlagern [TM70; Ott11] und in der Folge die Migration von Korngrenzen behindert wird [Ber03]. Letzteres dürfte auch zu der für Cu-Sb-Werkstoffe beobachteten Reduzierung der Kriechduktilität (Versagen bei kleineren Bruchdehnungen) gegenüber reinem Kupfer [TM70; YN84b] beitragen. Zum anderen konnte für Kriechversuche bei hohen Temperaturen und niedrigen Lasten eine Schädigung der Korngrenzen durch Bildung und Wachstum von Poren nachgewiesen werden [TM70; YN84a].

6.1 Experimentelle Kriechschädigungsdaten

Die im Folgenden präsentierten experimentellen Daten stammen aus Kriechversuchen, welche am Institut für Werkstoffe (Lehrstuhl Werkstoffwissenschaft) der Ruhr-Universität Bochum (RUB) im Rahmen des durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) geförderten Projektes *Werkstoffwissenschaftliche Untersuchung und mikromechanische Modellierung der Korngrenzenschädigung in einer Kupferlegierung unter Kriechbeanspruchung* (Geschäftszeichen EG 101/13-1, EG 101/13-2, FE 933/1-1 und FE 933/1-2) durchgeführt wurden. Basierend auf Informationen, welche durch das Institut für Werkstoffe der RUB zur Verfügung gestellt wurden, werden die Probenherstellung, die Durchführung der Kriechversuche sowie die angewendeten Untersuchungsmethoden hier nur zusammenfassend beschrieben.

In der vorliegenden Arbeit wurden die vom Institut für Werkstoffe der RUB bereitgestellten Daten genutzt, um die Parameter des in Abschnitt 5.1 beschriebenen viskoplastischen Einkristallmodells und des in Abschnitt 5.2.2 vorgestellten Kohäsionsmodells für Korngrenzen anzupassen (siehe Abschnitt 6.2).

6.1.1 Material- und Probenherstellung

Im Folgenden werden die Arbeiten beschrieben, welche am Institut für Werkstoffe der RUB im Rahmen der Material- und Probenherstellung durchgeführt wurden.

In Vorbereitung für die spätere Fertigung von Kriechproben wurde dabei zunächst eine Cu-Sb-Legierung, welche 1,01 Gew.-% Sb enthielt, in Form eines zylinderförmiger Ingots durch ein Vakuuminduktionsschmelzverfahren hergestellt. Detaillierte Informationen zu den Ausgangsmaterialien, zum Herstellungsverfahren und zu den mikrostrukturellen Veränderungen im Werkstoff, welche infolge des Abgießens, der Glühbehandlungen und der weiteren thermomechanischen Bearbeitungsschritte auftraten, sind in [OFE11; Ott11] zu finden.

Der zylindrische Abschnitt des Ingots, dessen äußerer Durchmesser 39,4 mm und dessen Höhe ungefähr 90 mm betragen, wurde unter einer reinen Ar-Atmosphäre mit einem Druck von 500 mbar in eine Quarzampulle eingekapselt und für 192 h bei 1 223 K lösungsgeglüht. Die Glühbehandlung diente zum einen der Beseitigung von dendritischen Gefügestrukturen sowie zum anderen der vollständigen Lösung des Antimons in der Kupfermatrix. Darüber hinaus ergab sich eine Vergrößerung der Kornstruktur, welche zu einem mittleren Korndurchmesser > 1 mm führte.

Eine weitere Glühbehandlung für 48 h bei 823 K wurde durchgeführt, um eine gleichgewichtsnahen Seigerung von Antimon an den Korngrenzen zu erzeugen. Die Anreicherung von Sb-Atomen an Korngrenzen nach einer vergleichbaren Glühbehandlung konnte in [OVPE12] für eine Legierung mit annähernd identischer chemischer Zusammensetzung durch analytische Transmissionselektronenmikroskopie nachgewiesen werden.

Schließlich wurden sogenannte Minikriechproben [KMPEK99] mittels Funkenerosion aus dem äußeren Ring des zylindrischen Ingots entnommen, da in diesem Bereich die Körner beson-

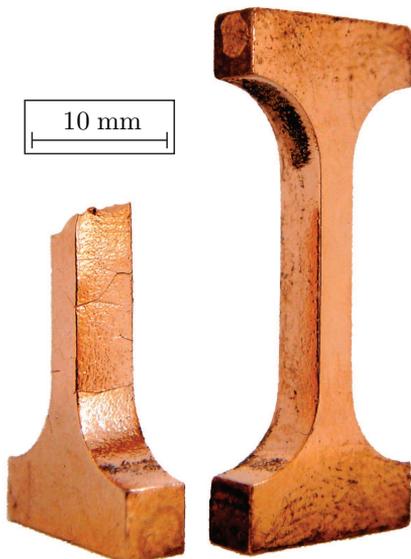


Abb. 6.1: Lichtbildaufnahme zweier Minikriechproben, welche am Institut für Werkstoffe der RUB aus der Cu-Sb-Legierung gefertigt und anschließend getestet wurden. Die linke Probe wurde bis zum Versagen beansprucht, während der Versuch mit der rechten Probe zwecks Charakterisierung der Korngrenzenschädigungsentwicklung vorzeitig unterbrochen wurde.

ders groß und aufgrund der gerichteten Erstarrung während des Abgießens entlang der Radialrichtung gestreckt waren. Die typische Form der verwendeten Minikriechproben, welche sich durch eine rechteckige Querschnittsfläche von $3 \times 2 \text{ mm}^2$ innerhalb der Messlänge von 9 mm zwischen den beiden Probenköpfen auszeichnet, ist in *Abb. 6.1* dargestellt. Die exakten Abmaße der Probengeometrie sind in [Ott11] spezifiziert. Da die Probenabmessungen klein im Vergleich zum mittleren Korndurchmesser der Cu-Sb-Legierung sind, wird im Folgenden auch von grobkörnigen Cu-Sb-Minikriechproben gesprochen.

Bei der Entnahme wurde die Probengeometrie derart ausgerichtet, dass die Messlänge der Minikriechproben parallel zur Axialrichtung des Ingots und die Flächennormale der ebenen Minikriechprobenoberfläche parallel zur Radialrichtung des Ingots orientiert waren.

Des Weiteren wurden zylindrische Einkristalle aus hochreinem Kupfer (nom. Reinheit besser als 99,9 Gew.-%) durch Anwendung des Bridgman-Verfahrens gezüchtet. Das Laue-Verfahren wurde genutzt, um die Einkristalle entlang der $\langle 001 \rangle$ - oder der $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung auszurichten, so dass anschließend einkristalline Minikriechproben, deren Axialrichtungen entweder parallel zu der $\langle 001 \rangle$ - oder der $\langle 111 \rangle$ -Kristallrichtung orientiert waren, mittels Funkenerosion gefertigt werden konnten.

Vor der weiteren Verwendung der Proben wurde die Erodierschicht an der Probenoberfläche mit Schleifpapier (2 500er Körnung) entfernt. Die einkristallinen Proben wurden anschließend bei Raumtemperatur und einer Spannung von 15 bis 20 V in einem Elektrolyten, bestehend aus 500 ml deionisiertem Wasser, 250 ml Ethanol und 250 ml Phosphorsäure (85 %ig), bis zum Erreichen einer spiegelartigen Oberflächenqualität elektropoliert.

Für die Minikriechproben der Cu-Sb-Legierung wurde hingegen ein mechanisches Polierverfahren zur weiteren Aufbereitung angewendet (siehe auch [Ott11]). Hierbei wurden die beiden ebenen Probenoberflächen zunächst unter sukzessiver Verwendung von Diamantsuspensionen mit Partikelgrößen von 6 μm , 3 μm und 1 μm poliert. Für den letzten Polierschritt wurde ein Vibrationspoliergerät vom Typ Vibromet 2 (Buehler, Lake Bluff, USA) zusammen mit einer oxidischen Poliersuspension auf SiO_2 -Basis (Partikelgröße 0,05 μm) eingesetzt. Diese Vorgehensweise war im Vergleich mit dem Elektropolieren zwar zeitintensiver, die resultierende Oberflächenqualität zeichneten sich aber durch nahezu perfekt ebene Oberflächen über die gesamte Probenlänge sowie besonders scharfe Kanten an den Rändern der polierten Oberfläche aus. Darüber hinaus wurde durch das schonende mechanische Polieren eine künstliche Vergrößerung von Kriechporen auf den Korngrenzen verhindert.

6.1.2 Kriechversuche

Um eine Beeinflussung des Kriechverhaltens durch Oxidation der Kupferwerkstoffe zu verhindern, wurden die Kriechversuche am Institut für Werkstoffe der RUB unter einer Schutzgasatmosphäre aus 95 % Ar und 5 % H_2 durchgeführt. Hierzu kam ein modifizierter Kriechversuchsstand vom Typ TC20 (Denison Mayes, Leeds, UK), welcher in [PODNE11; Ott11] beschrieben ist, zum Einsatz. In [PODNE11] konnte ebenfalls demonstriert werden, dass der verwendete Versuchsaufbau für Kupfer unter Kriechbedingungen hervorragende Oberflächenqualitäten ohne erkennbare Oxidationsspuren ermöglicht.

Nachdem eine Probe in das Lastgestänge der Prüfmaschine eingesetzt war, wurde der Ofen innerhalb von 1 h auf die bei allen Versuchen verwendete Temperatur von 823 K, welche der Temperatur der letzten Glühbehandlung der Cu-Sb-Legierung entspricht, aufgeheizt.

Für die Kriechversuche mit den einkristallinen Reinkupferproben wurden Kriechbelastungen von 10, 15 und 20 MPa nach dem Erreichen der Versuchstemperatur aufgebracht, so dass die Spannungsabhängigkeit der Kriechrate untersucht werden konnte. Die polykristallinen Cu-Sb-Proben wurden hingegen mit Kriechbelastungen von 8 und 10 MPa getestet. Diese vergleichsweise geringen Lasten führten zu längeren Kriechbruchzeiten und begünstigten daher die Entwicklung von Korngrenzenporen. Einige der Versuche mit den Cu-Sb-Proben wurden vorzeitig unterbrochen, damit die Korngrenzenschädigung in verschiedenen Entwicklungsstadien untersucht werden konnte.

Zur präzisen Belastung der Proben mit niedrigen Spannungen war der Hebelarm des Versuchstandes arretiert und eine Absenkvorrichtung im inneren des Schutzgasversuchsraumes wurde genutzt, um die jeweilige Versuchslast langsam und stoßfrei am unteren Ende des Lastgestänges aufzubringen. Die Längenänderung einer Probe wurde kontinuierlich anhand der vertikalen Verschiebungen der Probeneinspannungen ermittelt (siehe [PODNE11; Ott11]).

6.1.3 Kornstruktur und Korngrenzenschädigung in Kupfer-Antimon-Proben

Vor und nach der Durchführung eines Kriechversuchs mit einer polykristallinen Cu-Sb-Probe wurden am Institut für Werkstoffe der RUB jeweils die Kornstruktur und die Korngrenzenporosität durch kristallographische und metallografische Analysen des Probenmaterials auf einer der beiden ebenen Probenoberflächen erfasst. Da die Minikriechproben aus einem Bereich mit gestreckten Körnern des zylindrischen Ingots gefertigt wurden (siehe Abschnitt 6.1.1), wird im Folgenden angenommen, dass sich die gemessene Kornstruktur senkrecht zur Oberfläche über die gesamte Dicke einer Probe fortsetzt. Diese Vereinfachung ist für die spätere Auswertung und Modellierung notwendig, auch wenn aus den vorhandenen experimentellen Daten ersichtlich ist, dass die reale Mikrostruktur mitunter deutlich von dieser idealisierten Mikrostruktur, welche im Folgenden als prismatische Mikrostruktur bezeichnet wird, abweichen kann.

Die metallografische Analyse einer Probe am Institut für Werkstoffe der RUB diente primär der Quantifizierung der Korngrenzenporosität, welche bereits vor dem eigentlichen Kriechversuch infolge des Abgießens und der nachfolgenden Bearbeitungsschritte im Material vorhanden war. Zu diesem Zweck wurde pro Probe eine Collage, welche jeweils aus mindestens 134 einzelnen Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen (REM-Aufnahmen) mit einer 250-fachen Vergrößerung bestand, über die gesamte Messlänge der ebenen Probenoberfläche angefertigt. Die Abhängigkeit des Kontrasts von der Kristallorientierung bei der Nutzung von Rückstreuungselektronen ermöglichte dabei eine Unterscheidung zwischen Poren auf Korngrenzen und Poren im Korninneren. Die Bewertung der Korngrenzenporosität für eine solche REM-Collage erfolgte am Institut für Werkstoffe der RUB durch die in [Ott11; OVPFE12] beschriebene halbautomatische Bildsegmentierungstechnik. Aus den gewonnenen Daten konnten die Korngrenzenporenanzahlen vor und nach einem Kriechversuch $N_{l,0}$ und $N_{l,C}$ sowie die kumulierten

sichtbaren Schnittflächen von Korngrenzenporen an der Probenoberfläche vor und nach einem Kriechversuch $A_{L,0}$ und $A_{L,C}$ innerhalb des untersuchten Messbereiches bestimmt werden (siehe experimentelle Ergebnisse für die grobkörnige Kupfer-Antimon-Legierung in Abschnitt 6.1.5). Es sei angemerkt, dass eine Auswertung nur für ungebrochene Proben möglich war.

Auf der selben Probenoberfläche, auf der die gerade beschriebene metallografische Analyse durchgeführt wurde, erfolgte weiterhin eine kristallographische Analyse. Hierzu wurden die Kristallorientierungen am Institut für Werkstoffe der RUB mittels orientierungsabbildender Rasterelektronenmikroskopie (EBSD-Messung) für ungefähr drei Millionen einzelne Punk-

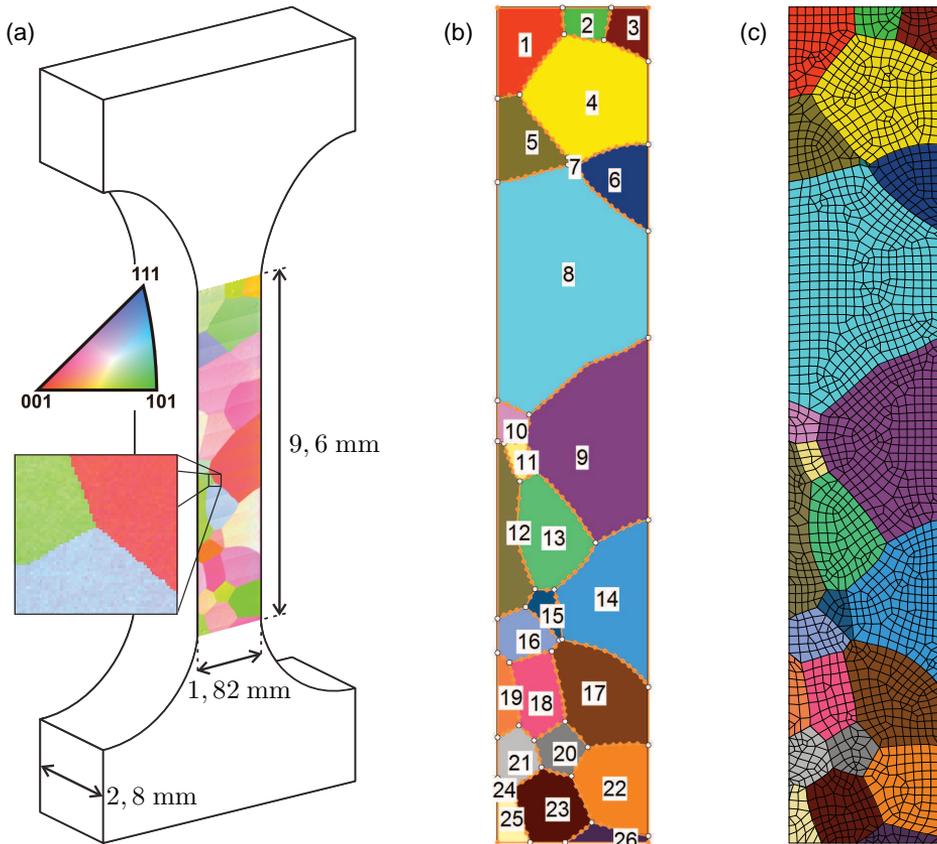


Abb. 6.2: (a) zeigt die schematische Darstellung einer Minikriechprobe. Die Kornstruktur, welche in Form einer inversen Polfigur im Messlängenbereich der ebenen Probenoberfläche dargestellt ist, wurde für Minikriechprobe 3 mittels einer EBSD-Messung bestimmt (Bildmaterial bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB). (b) zeigt die Diskretisierung der in (a) abgebildeten Kornstruktur durch Liniensegmente, wobei die Verläufe der Korngrenzen und der freien Oberflächen durch orange Punkte und Linien repräsentieren werden. Die weißen Punkte kennzeichnen zudem die Positionen von Tripelpunkten und Schnittpunkten von Korngrenzen mit dem Außenrand. (c) zeigt eine zweidimensionale Vernetzung, welche auf Basis der in (b) abgebildeten Mikrostruktur erstellt wurde.

te in einem quadratischen Gitter mit gleichmäßigen Abstand von 2 bis 3 μm entlang der Probenoberfläche bestimmt. Die Erfassung erfolgte dabei durch die in [Ott11] beschriebene automatisierte Prozedur.

In *Abb. 6.2a* ist für eine der untersuchten Minikriechproben die resultierende Orientierungskarte, eine sogenannte inverse Polfigur (IPF), zusammen mit der schematischen Darstellung der Probenrandkonturen abgebildet. In der IPF-Karte, welche in *Abb. 6.2a* dargestellt ist, wird jedem Farbwert eine bestimmte kristallographische Orientierung bezüglich einer vorgegebenen Referenzorientierung zugeordnet. Die Farbuordnung ist jedoch nur bis auf die vorhandenen Kristallsymmetrien eindeutig und erfolgt daher innerhalb des im linken Bildausschnitt dargestellten kristallographischen Standarddreiecks. So kennzeichnet beispielsweise ein roter Punkt eine gemessene Kristallorientierung, für welche der Normalenvektor einer der sechs $\{001\}$ -Netzebenen der kubisch flächenzentrierten Cu -Einheitszelle parallel zur Oberflächennormalen der Minikriechprobe ausgerichtet war.

Wie im vergrößerten Ausschnitt in *Abb. 6.2a* dargestellt ist, entspricht jeder Pixel der IPF-Karte einer gemessenen Orientierung auf der Probenoberfläche. Die einzelnen Körner wurden dann jeweils als Verbund benachbarter Datenpunkte, deren relativer Orientierungsunterschied zueinander (Missorientierung) weniger als 2° betrug, definiert und bekamen eine eindeutige Nummerierung zugeordnet. Die über alle Datenpunkte eines Kornes gemittelte Orientierung wurde schließlich für das gesamte Korn als Kristallorientierung festgelegt. Die sich ergebende Kornstruktur, welche später als Vorlage für die Erstellung von FE-Modellen diente, sowie die Nummerierungen der einzelnen Körner sind in *Abb. 6.2b* für eine Minikriechprobe dargestellt. Es sei darauf hingewiesen, dass die in *Abb. 6.2b* und *Abb. 6.2c* für die einzelnen Körner verwendeten Farben keinen Bezug zur orientierungsabhängigen Färbung der IPF-Karte in *Abb. 6.2a* haben, sondern lediglich der Unterscheidung einzelner Körner dienen.

Für die Diskretisierung einer Kornstruktur im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine ähnliche Herangehensweise wie für die Erzeugung von künstlichen periodischen Kornstrukturen in [FBS09] angewendet. Dabei wurden zunächst für alle Tripelpunkte und alle Schnitt-

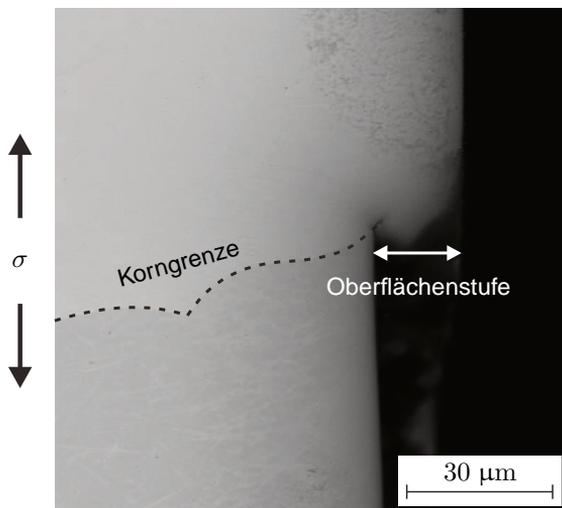


Abb. 6.3: Rückstreuелеktronenbild einer während des Kriechversuchs entstandenen, besonders ausgeprägten Oberflächenstufe in Verlängerung einer Korngrenze (Bildmaterial bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB). Die Belastungsrichtung durch die äußere Zugspannung σ ist durch Pfeile gekennzeichnet.

punkte von Korngrenzen mit dem Außenrand die Positionen bestimmt, welche in *Abb. 6.2b* durch weiße Punkte gekennzeichnet sind. Anschließend wurden die Korngrenzen und Außenränder durch Liniensegmente diskretisiert, welche in *Abb. 6.2b* als orange Punkte und Linien dargestellt sind. Die Anzahl an Unterteilungen pro Korngrenze wurde dabei derart angepasst, dass die Form einer Korngrenze mit einer möglichst kleinen Anzahl an Unterteilungen hinreichend gut abgebildet wird.

Aus der diskretisierten Kornstruktur konnten wichtige Parameter der Mikrostruktur bestimmt werden. Hierzu zählt beispielsweise die kumulierte (an der Probenoberfläche) sichtbare Korngrenzlänge l_0 , welche sich aus der Aufsummierung der einzelnen Liniensegmente der Korngrenzen ergibt und für die ausgewerteten Proben in *Tab. 6.2* aufgelistet ist.

Ausgehend von einer zuvor erstellten Diskretisierung wurde schließlich mittels des Programmes NETGEN (Johannes Kepler Universität Linz, Österreich, www.hpfem.jku.at/netgen/) eine zweidimensionale Vernetzung einer Kornstruktur angefertigt, welche exemplarisch für eine Minikriechprobe in *Abb. 6.2c* abgebildet ist und als Ausgangspunkt für die spätere Erstellung eines FE-Modells diente.

Nach den metallografischen und kristallographischen Analyseschritten wurden die Minikriechproben am Institut für Werkstoffe der RUB entweder bis zum Versagen oder bis zum Erreichen eines vorgegebenen Kriechdehnungsniveaus getestet. Beim Erreichen eines vorgegebenen Kriechdehnungsniveaus wurde ein Versuch unterbrochen und die Probe einer erneuten metallografischen und kristallographischen Analyse unterzogen. Da Korngrenzengleiten und plastische Deformationen einzelner Körner die vor dem Kriechversuch glatte Oberflächentopographie einer Probe signifikant verändert hatten, war eine erneute Präparation der Probenoberfläche vor einer Untersuchung nötig.

Das Rückstreuelektronenbild in *Abb. 6.3* zeigt beispielsweise eine besonders ausgeprägte Oberflächenstufe in Verlängerung einer Korngrenze, welche nach einem Kriechversuch beobachtet werden konnte und die ansonsten glatte Probenoberfläche unterbrach.

Daher wurde die Probenoberfläche um ca. 100 μm abgeschliffen und durch Anwendung des in Abschnitt 6.1.1 beschriebenen mechanischen Polierverfahrens aufbereitet. Die Quantifizierung der Korngrenzenporosität nach einem Kriechversuch erfolgte wieder durch die oben beschriebene metallografische Analyse. Um Abweichungen der Kornstruktur von einer idealisierten prismatischen Mikrostruktur zu erfassen und einzelne Korngrenzen in der vor dem Kriechversuch bestimmten Kornstruktur zuordnen zu können, war zudem eine erneute Durchführung einer EBSD-Messung nötig.

6.1.4 Bestimmung von Oberflächendeformationen für Kupfer-Antimon-Proben

Für ausgewählte Proben wurde am Institut für Werkstoffe der RUB nicht nur die jeweilige Gesamtdehnung einer Probe erfasst, sondern darüber hinaus auch die lokalen Deformationen innerhalb der Messlänge bestimmt. Hierzu wurde eine Ex-situ-Bildkorrelationstechnik genutzt, welche auch als DIC-Technik (engl. Digital Image Correlation) bezeichnet wird und deren Anwendung im Folgenden kurz beschrieben wird.

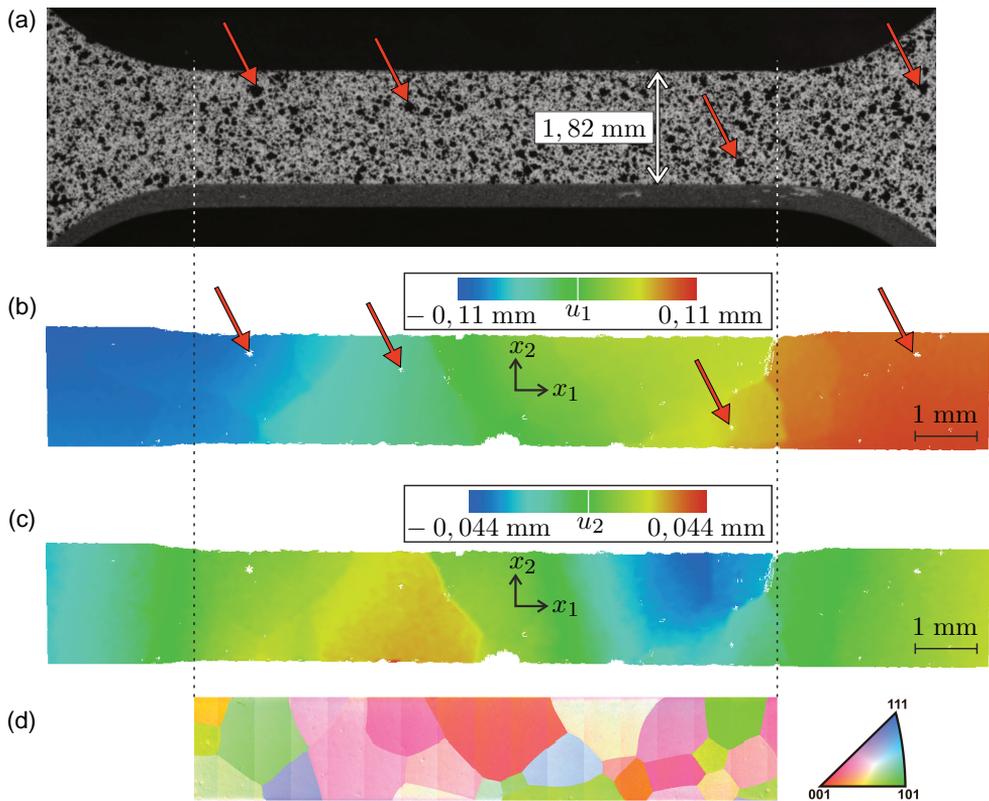


Abb. 6.4: (a) zeigt das für die DIC-Methode benötigte Farbpunktmuster von Minikriechprobe 3, welches vor dem Kriechversuch aufgebracht wurde (Bildmaterial bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB). (b) und (c) zeigen jeweils die aus der DIC-Methode resultierenden Oberflächenverschiebungen u_1 und u_2 für Minikriechprobe 3 (Daten bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB). (d) zeigt zum Vergleich die für Minikriechprobe 3 mittels EBSD-Messung bestimmte Kornstruktur in Form einer inversen Polfigur (siehe auch Abb. 6.2a | Bildmaterial bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB).

Nachdem die in Abschnitt 6.1.3 beschriebenen metallografischen und kristallographischen Analysen einer Probe abgeschlossen waren, wurden vor den jeweiligen Kriechversuchen für drei Minikriechproben die zuvor untersuchten Probenoberflächen mit einem speziellen Punktmuster bemalt. Zuerst wurde eine weiße Grundierung mit einer Airbrush-Farbe auf die Probenoberfläche aufgebracht, um einen homogenen Hintergrund für das im Anschluss aufgebrachte feinverteilte Muster aus schwarzen Airbrush-Farbpunkten zu erzeugen. Letzteres erfolgte mittels einer Airbrush-Pistole (Typ: Evolution Silverline, Harder & Steenbeck, Norderstedt) mit einer 0,15 mm Düsenöffnung.

Das Farbpunktmuster wurde dann jeweils vor und nach einem Kriechversuch mittels eines kommerziellen DIC-Systems der Firma Correlated Solutions Incorporated (Columbia, SC, USA) fotografiert (siehe Abb. 6.4a). Das DIC-System bestand aus einem kalibrierten Auf-

bau von zwei 5 Mpx Digitalkameras (Typ: AVT Stingray F504B), welche auf einem Profilrahmen der Firma item Industrietechnik GmbH (Solingen) montiert und jeweils mit Objektiven des Typs Componon-S (Brennweite 50 mm) bestückt waren. Für die Bildaufnahme sowie die anschließende Bildauswertung wurden die zum DIC-System zugehörigen Correlated Solutions Programme VIC-Snap (Version 2010 build 639M) und VIC-3D (Version 2010.1.3 build 786:787) genutzt. Die verwendeten Bildauflösungen betragen für die Minikriechproben 2 und 3 ungefähr 155 px/mm und für Minikriechprobe 7 ungefähr 170 px/mm.

Die Auswertungssoftware korrelierte die relativen Positionen von einzelnen Farbpunkten vor und nach dem Kriechversuch innerhalb des aufgemalten Musters und lieferte nach Auswertung dieser Daten direkt die Verschiebungs- und Dehnungsverteilungen innerhalb des Messbereiches. Details zur Durchführung einer solchen Auswertung sind in [CRS85; Sch12] beschrieben. Für die Auswertung mit dem Programm VIC-3D wurde für die Minikriechproben 2 und 3 eine Subset-Größe von 29 px und für Minikriechprobe 7 eine Subset-Größe von 21 px verwendet. Für alle drei Proben wurde eine Schrittweite (Stepsize) von 1 px und eine Filtersize von 15 px genutzt.

6.1.5 Experimentelle Ergebnisse

Reine Kupfereinkristalle

In *Abb. 6.5* sind die zeitlichen Kriechdehnungsverläufe für fünf der am Institut für Werkstoffe der RUB getesteten einkristallinen Reinkupferproben (drei $\langle 001 \rangle$ -orientierte und zwei $\langle 111 \rangle$ -orientierte Kristallite) dargestellt. Aus Darstellungsgründen sind die Zeitwerte jeweils mit einem belastungs- und kristallorientierungsabhängigen Faktor x (siehe Legende) skaliert. Aus dem Vergleich der Kriechkurven und unter Berücksichtigung der Skalierungsfaktoren ist ersichtlich, dass die Versuchsdauern über zwei Größenordnungen variieren, was die deutlichen Spannungs- und Kristallorientierungseinflüsse auf das Werkstoffverhalten der einkristallinen Reinkupferproben veranschaulicht.

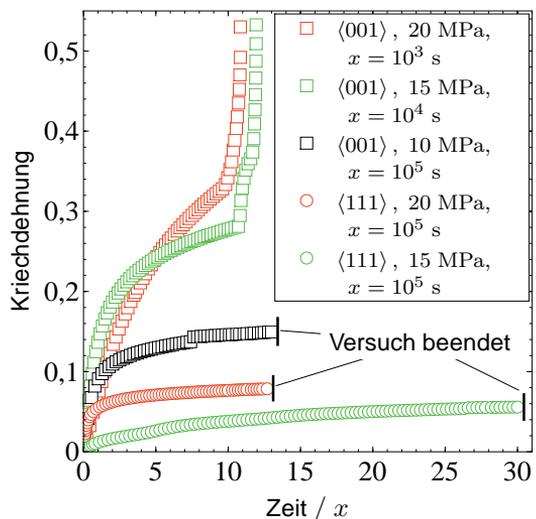


Abb. 6.5: Darstellung der Kriechdehnungen für die getesteten einkristallinen Reinkupferproben in Abhängigkeit von einer skalierten Zeit (Daten bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB). Da die Versuchsdauern über zwei Größenordnungen variieren, wurde die tatsächliche Zeit jeweils mit dem Faktor x (siehe Legende) skaliert.

Nur zwei der fünf Proben wurden bis zum Versagen getestet. Die übrigen drei Kriechversuche wurden nach Versuchsdauern von mehr als zwei Wochen, als die Kriechraten noch kein Minimum erreicht hatten, beendet. Aus *Abb. 6.5* ist vor allem ersichtlich, dass die Kriechdeformationen unter ansonsten gleichen Bedingungen für die $\langle 111 \rangle$ -orientierten Proben stets langsamer abliefen als für die $\langle 001 \rangle$ -orientierten Proben. Die deutliche Beschleunigung der Kriechraten kurz vor dem Bruch für die mit 15 MPa und 20 MPa getesteten $\langle 001 \rangle$ -orientierten Proben ist dabei auf dynamische Rekristallisation zurückzuführen.

Grobkörnige Kupfer-Antimon-Legierung

In *Tab. 6.1* sind sowohl die Bedingungen, unter denen die grobkörnigen Cu-Sb-Minikriechproben am Institut für Werkstoffe der RUB getestet wurden, als auch die Zeiten, zu denen ein Kriechversuch unterbrochen wurde oder eine Probe versagte, zusammengetragen. Die zugehörigen Kriechkurven der in *Tab. 6.1* aufgelisteten acht Proben sind in *Abb. 6.6* dargestellt. Die Proben 4, 5 und 6 wurden bis zum Versagen getestet, während alle übrigen Proben zu verschiedenen Zeitpunkten bzw. Kriechdehnungen unterbrochen wurden. Dabei ist aus dem Vergleich der Versuchsdaten für die Proben 5 und 6 ersichtlich, dass die Versagenszeiten für identische Testbedingungen mitunter signifikant variieren. Es ist naheliegend, dass dieses Verhalten durch die sehr grobe Kornstruktur der Cu-Sb-Legierung bedingt ist.

In *Abb. 6.7* ist eine Lichtmikroskopaufnahme der Bruchfläche von Probe 5, welche nach 209,5 ks versagte, dargestellt. Wie für die vorgegebenen Kriechbedingungen (hohe Temperaturen, niedrige Lasten) zu erwarten war, ist ein intergranulares Bruchverhalten zu beobachten, welches keine nennenswerten plastischen Deformationen auf der Bruchfläche aufweist. Daher sind in *Abb. 6.7* auch die Verläufe von Korngrenzen und Tripellinien gut zu erkennen. Des Weiteren ist aus *Abb. 6.7* ersichtlich, dass die Körner sehr groß im Vergleich zu den Abmessungen der Querschnittsfläche einer Minikriechprobe sind. Das Versagen einer einzelnen größeren Korngrenze führt somit zu einer signifikanten Reduktion des lasttragenden Querschnitts. Letzterem folgt dann meist ein baldiges Versagen der gesamten Probe. Eine weitere Erkenntnis, die sich aus *Abb. 6.7* ergibt, ist, dass sich die Kornstruktur innerhalb eines Probenquerschnitts deutlich verändern kann. Dies spiegelt vor allem die Abweichungen einer

Tab. 6.1: Probenbezeichnungen und Testbedingungen für die grobkörnigen Cu-Sb-Minikriechproben (Daten bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB).

Probe	Versuchsdauer / ks	Spannung / MPa	Temperatur / K
1	Unterbrochen bei 100,1	8	823
2	Unterbrochen bei 16,6	10	823
3	Unterbrochen bei 69,3	10	823
4	Gebrochen bei 59,9	10	823
5	Gebrochen bei 209,9	10	823
6	Gebrochen bei 64,6	10	823
7	Unterbrochen bei 100,1	10	823
8	Unterbrochen bei 45,2	10	823

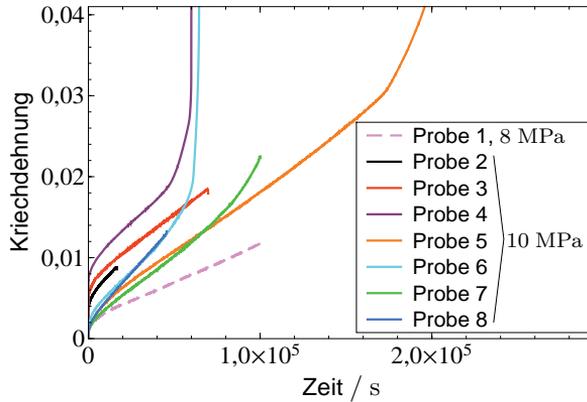


Abb. 6.6: Darstellung der Kriechdehnungen für die getesteten grobkörnigen Cu-Sb-Minikriechproben in Abhängigkeit von der Zeit (Daten bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB).

idealisierten prismatischen Mikrostruktur, welche später für die Erstellung von FE-Modellen genutzt wird, von der realen Kornstruktur wider.

In *Abb. 6.8* ist exemplarisch das Rückstreuелеktronenbild einer Formation von Korngrenzenporen in Probe 3 abgebildet, welches nach dem Kriechversuch im Rahmen der in Abschnitt 6.1.3 beschriebenen metallografischen Analyse aufgenommen wurde. Die aus der Auswertung der erfassten Korngrenzenschädigung resultierenden Porositätswerte sind in *Tab. 6.2* zusammengetragen, wobei nur die ungebrochenen Proben berücksichtigt werden. Aus den Werten ist ersichtlich, dass die Schädigung durch Korngrenzenporen bezüglich Anzahl und Größe nach einem Kriechversuch stets zugenommen hat. Allerdings unterscheidet sich die erfasste Zunahme von Probe zu Probe. Während sich die beobachtete Porenanzahl im Falle von Probe 3 fast versiebenfach hat, ist für Probe 2 nur ein geringer Anstieg zu erkennen. Für

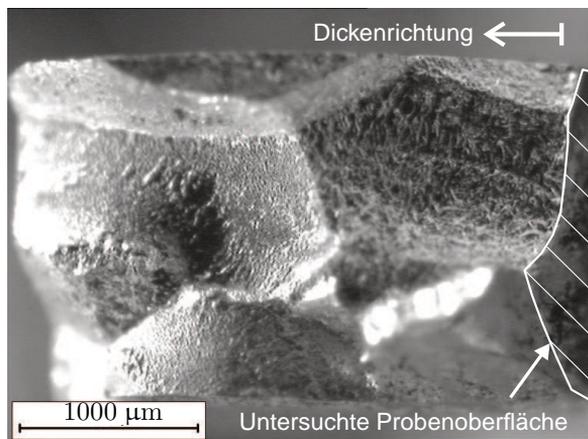


Abb. 6.7: Lichtmikroskopaufnahme der Bruchfläche von Minikriechprobe 5. Aufgrund des intergranularen Versagens sind die Verläufe von Korngrenzen und Trippellinien gut zu erkennen.

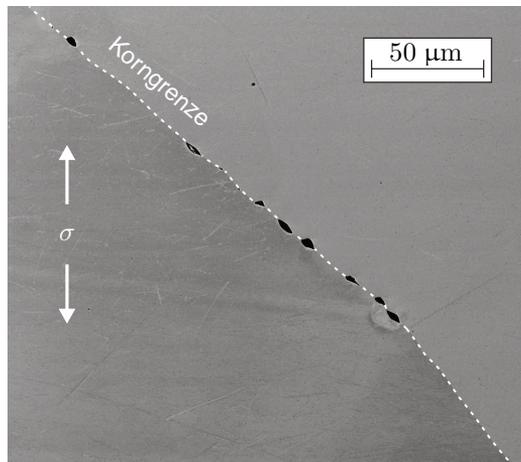


Abb. 6.8: Rückstreuelektronenbild einer Formation von Korngrenzenporen in Minikriechprobe 3 nach dem Kriechversuch (Bildmaterial bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB). Die Belastungsrichtung durch die äußere Zugspannung σ ist durch Pfeile gekennzeichnet.

die Werte der kumulierten sichtbaren Schnittfläche von Korngrenzenporen ($A_{l,0}$ und $A_{l,C}$) ergeben sich ähnliche Beobachtungen.

Wie in Abschnitt 6.1.4 beschrieben, wurden DIC-Messungen auf den Oberflächen der Proben 2, 3 und 7 (siehe Tab. 6.1) durchgeführt. In Abb. 6.4b und c sind für Probe 3 jeweils die Verschiebungsfeldkomponenten u_1 und u_2 , welche sich aus dem DIC-Verfahren ergaben, abgebildet. Die Verschiebungsfelddaten liegen dabei in Form von diskreten Gitterpunkten vor, welche gleichmäßig in einem Abstand von ungefähr 7,5 μm zueinander angeordnet sind. Es ist deutlich zu erkennen, dass das gemessene Deformationsfeld inhomogen ist. Durch einen Vergleich mit der aus der kristallographischen Analyse bestimmten Kornstruktur (siehe IPF-Karte in Abb. 6.4d) lässt sich zeigen, dass Regionen mit hohen Verschiebungsgradienten mit den Verläufen von Korngrenzen zusammenfallen. Zudem ist zu beobachten, dass die Verschiebungsdaten durch leichte Fluktuationen überlagert sind und dass die DIC-Auswertung

Tab. 6.2: Korngrenzenschädigungsdaten für die grobkörnigen Cu-Sb-Minikriechproben (basierend auf Daten, welche durch das Institut für Werkstoffe der RUB bereitgestellt wurden): l_0 - Kumulierte sichtbare Korngrenzenlänge vor einem Kriechversuch | d_0 - Probendicke vor einem Kriechversuch | $N_{l,0}$ und $N_{l,C}$ - Korngrenzenporenanzahl vor und nach einem Kriechversuch | $A_{l,0}$ und $A_{l,C}$ - Kumulierte sichtbare Schnittfläche von Korngrenzenporen vor und nach einem Kriechversuch.

Probe	l_0/mm	d_0/mm	$N_{l,0}$	$A_{l,0}/\text{mm}^2$	$N_{l,C}$	$A_{l,C}/\text{mm}^2$
1	22,6313	2,819	28	$1,081 \times 10^{-5}$	135	$6,833 \times 10^{-4}$
2	28,0056	2,803	64	$9,593 \times 10^{-5}$	87	$1,904 \times 10^{-4}$
3	25,8995	2,812	52	$9,789 \times 10^{-5}$	348	$29,400 \times 10^{-4}$
7	21,6455	2,790	89	$2,340 \times 10^{-5}$	107	$37,240 \times 10^{-4}$
8	29,4931	2,799	66	$16,295 \times 10^{-5}$	140	$14,365 \times 10^{-4}$

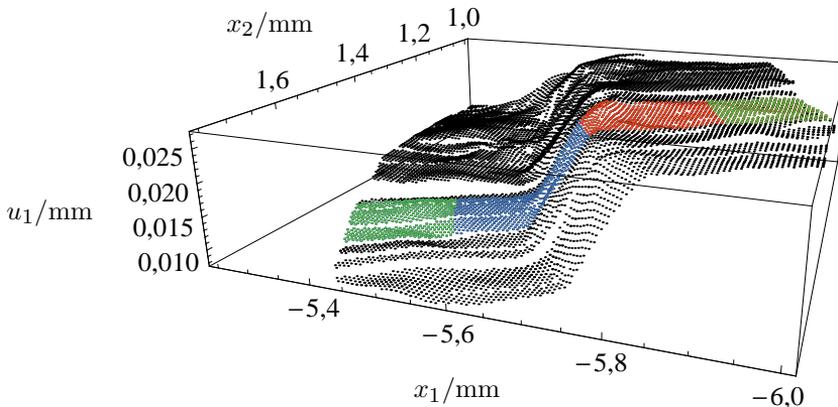


Abb. 6.9: Darstellung der mittels der DIC-Methode erfassten u_1 -Verschiebungen für Minikriechprobe 3 (siehe auch Abb. 6.4b | Daten bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB) in der Nähe von Korngrenze 15 (siehe Abb. 6.11b). Die rot und blau hervorgehobenen Punkte wurden für die Auswertung jeweils den angrenzenden Körnern zugeordnet. Eine grüne Färbung kennzeichnen hingegen die Zugehörigkeit von Punkten zu den definierten Auswertungsgebieten.

an einigen Stellen nicht in der Lage war, die Verschiebungen innerhalb von besonders großen Farbpunkten des aufgemalten Musters zu bestimmen (siehe rote Pfeile in Abb. 6.4a und b). Es ist anzunehmen, dass durch ein feineres und homogeneres Farbpunktmuster sowohl die Fluktuationen als auch die Fehlstellen reduziert werden könnten.

Die Verschiebungsdaten der DIC-Messungen wurden in [Kia12] genutzt, um das Ausmaß an Korngrenzengleiten zu quantifizieren. Da ein kommerzielles DIC-System mit zugehöriger Auswertungssoftware für die Durchführung der Messungen eingesetzt wurde, bestanden nur begrenzte Möglichkeiten zur Einflussnahme auf die Berechnungsprozedur der Verschiebungsfelder. Folglich konnten keine erweiterten Auswertungstechniken, wie beispielsweise

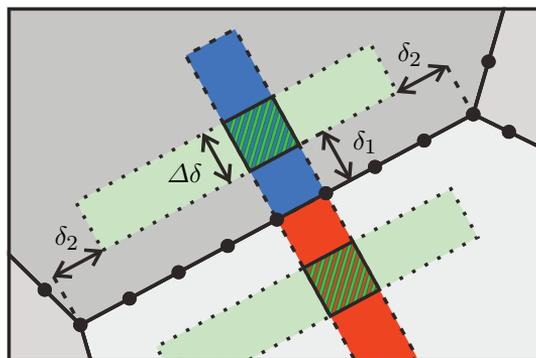


Abb. 6.10: Schematische Abbildung zur Definition der Auswertungsgebiete. Die rot und blau eingefärbten Bereiche kennzeichnen jeweils die beiden angrenzenden Körner, während die Auswertungsgebiete durch eine grüne Färbung hervorgehoben sind.

eine DIC-Methode mit angereicherter Kinematik [RRH07], für die Bestimmung von Abgleichungswerten eingesetzt werden. Die in [Kia12] angewendete Vorgehensweise ist daher im Folgenden noch einmal kurz beschrieben.

Zunächst mussten die Verschiebungen der angrenzenden Körner an einer Korngrenze bestimmt werden. Hierzu wurden in einem ersten Schritt die Gitterpunkte der Verschiebungsfeldern durch Überlagerung mit der in Abschnitt 6.1.3 beschriebenen diskretisierten Kornstruktur einzelnen Körnern zugeordnet. Dies ermöglichte es, den Verlauf von Korngrenzen innerhalb der DIC-Daten zu bestimmen. Dabei war in der Nähe von stark abgleitenden Korngrenzen zu beobachten, dass die Verschiebungsfelder keine scharfen Verschiebungssprünge aufwiesen. Stattdessen ergaben sich stetige Verläufe mit einem mehr oder weniger ausgeprägten Übergangsbereich um eine Korngrenze herum, was in *Abb. 6.9* exemplarisch für die u_1 -Verschiebungskomponente dargestellt ist. Dies ist eine Konsequenz aus dem Auswertungsalgorithmus, welcher bei der DIC-Methode verwendet wird und auf der Annahme von kontinuierlichen Verschiebungen basiert. Darüber hinaus war zu beobachten, dass der Verlauf einer Korngrenze entsprechend der diskretisierten Kornstruktur in den meisten Fäl-

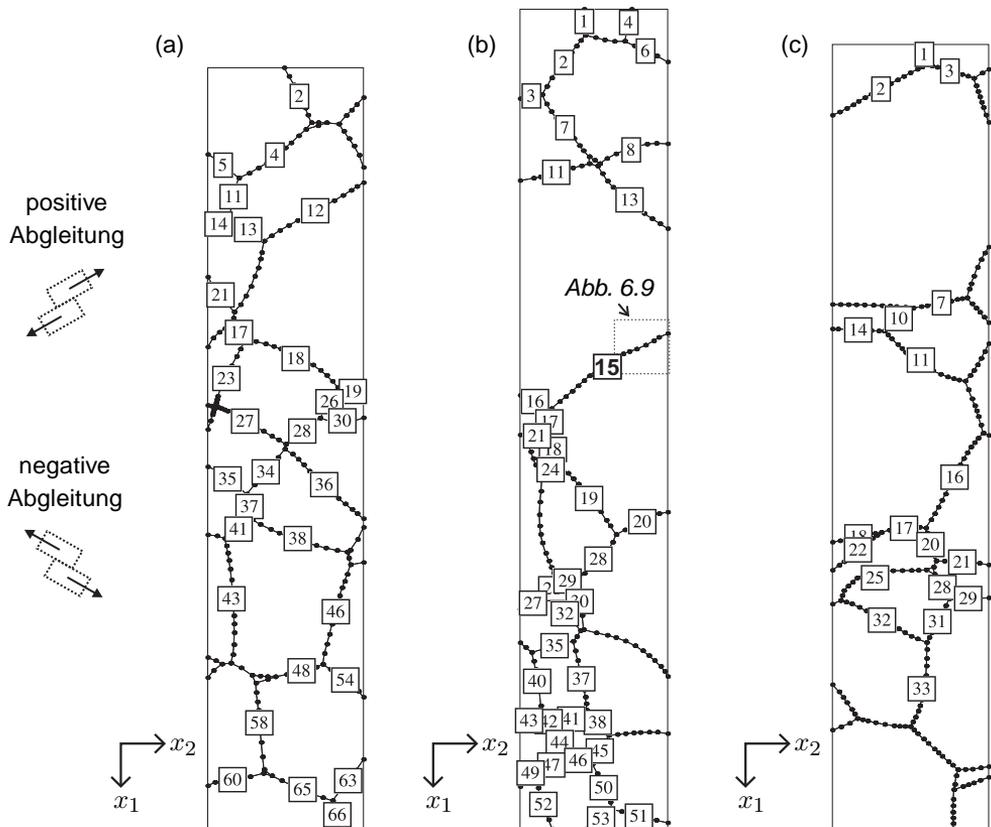


Abb. 6.11: In (a), (b) und (c) sind jeweils die Korngrenzennummerierungen für die Minikriechproben 2, 3 und 7 dargestellt.

len innerhalb des Übergangsbereiches der Verschiebungen lag (siehe beispielsweise *Abb. 6.9*). In wenigen Fällen befand sich der Verlauf einer Korngrenze aber auch außerhalb dieses Bereiches.

Daher wurden die Verschiebungen der angrenzenden Körner in einem zweiten Schritt durch Mittelung der DIC-Daten innerhalb von zwei streifenförmigen Auswertungsgebieten (siehe *Abb. 6.10*), welche sich in einer gewissen Entfernung zur angenommenen Position einer Korngrenze befanden, bestimmt. Mit Blick auf die Unsicherheiten bezüglich der exakten Position einer Korngrenze und der Breite des oben erwähnten Übergangsbereiches befanden sich die Auswertungsgebiete in einer Entfernung von $\delta_1 = 0,17$ mm zur Korngrenzenposition. Weiterhin waren die Auswertungsgebiete durch die Breite $\Delta\delta = 0,16$ mm sowie durch den Abstand $\delta_2 = 0,24$ mm zu den Endpunkten einer Korngrenze (Tripelpunkt oder äußerer Probenrand) begrenzt (siehe *Abb. 6.10*). Die Abgleitung an einer Korngrenze ergab sich schließlich aus der Verschiebungsdifferenz der beiden angrenzenden Körner tangential zur Korngrenze. Entsprechend der in *Abb. 6.11* abgebildeten Korngrenzennummerierungen sind die in [Kia12] bestimmten Korngrenzenabgleitungen und Standardabweichungen in *Abb. 6.12* dargestellt. Die Standardabweichungen wurden dabei pro Korngrenze aus der Quadratwurzel der summierten Varianzen, welche sich jeweils aus den Verschiebungsdaten innerhalb der beiden Auswertungsgebiete ergaben, bestimmt.

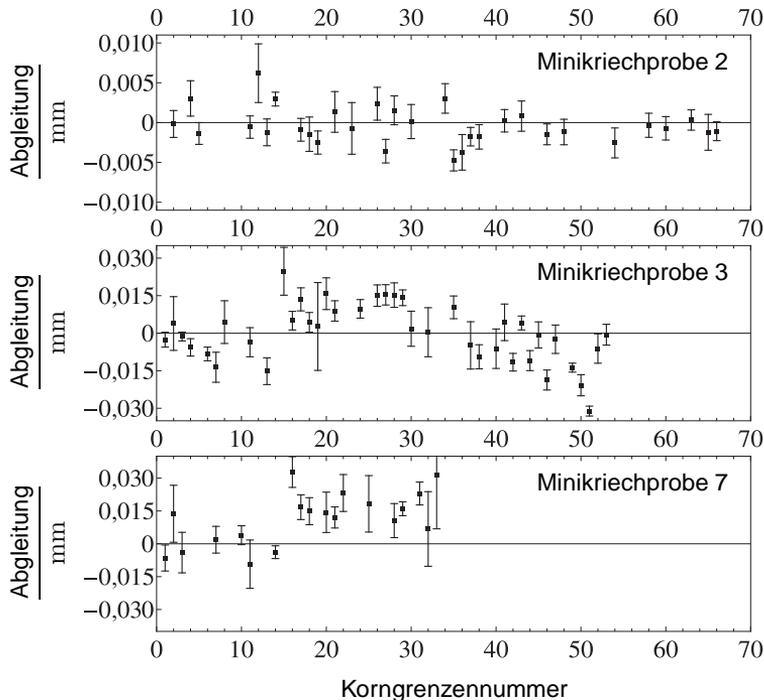


Abb. 6.12: Auflistung der in [Kia12] für die Minikriechproben 2, 3 und 7 bestimmten Mittelwerte (schwarze Quadrate) und Standardabweichungen (Fehlerbalken) der Korngrenzenabgleitungen entsprechend der in *Abb. 6.11* dargestellten Korngrenzennummerierungen.

6.2 Anwendung des mikromechanischen Polykristallmodells

Im Folgenden soll das in Abschnitt 5 vorgestellte mikromechanische Polykristallmodell dazu genutzt werden, das Kriechverhalten der grobkörnigen Cu-Sb-Legierung, welche durch die in Abschnitt 6.1 präsentierten experimentellen Daten charakterisiert ist, zu beschreiben. Das angepasste Modell wird dann in Abschnitt 7 genutzt, um das Kriechverhalten von Polykristallen anhand von künstlich erzeugten Kornstrukturen weiter zu untersuchen.

6.2.1 Bestimmung von Materialparametern für das Einkristallmodell

Wie bereits zu Beginn von Abschnitt 6 erwähnt wurde, kommt es in einer Cu-Sb-Legierung zu einer Anreicherung von Sb-Atomen an den Korngrenzen. Bezüglich der Körner ist aber auch davon auszugehen, dass eine gewisse Menge des Antimons innerhalb der Kupfermatrix als feste Lösung vorhanden ist. Obwohl ein Einfluss der Sb-Atome auf das Werkstoffverhalten der Körner nicht ausgeschlossen werden kann, wurden hier in Ermangelung von experimentellen Daten für einen Cu-Sb-Einkristall vergleichbarer chemischer Zusammensetzungen die in Abschnitt 6.1.5 präsentierten Einkristalldaten für reines Kupfer genutzt, um die Parameter des Einkristallmodells aus Abschnitt 5.1 anzupassen. Dabei wurde angenommen, dass die Wechselwirkungen zwischen den Gleitsystemen durch reine Selbstverfestigung bestimmt sind ($H_{gi} = \delta_{gi}$). Zudem wurden die elastischen Konstanten $C_{11} = 148$ GPa, $C_{12} = 112$ GPa und $C_{44} = 62$ GPa, welche für eine absolute Temperatur von 823 K aus den in [SW71] angegebenen Kupfereinkristalldaten extrapoliert wurden, aus [FKL08] übernommen.

Die zwei in Tab. 6.3 angegebenen Parametersätze MP001 und MP111 wurden jeweils durch Anpassung des Einkristallmodells entweder an die Kriechdaten der $\langle 001 \rangle$ -orientierten Proben oder an die Kriechdaten der $\langle 111 \rangle$ -orientierten Proben bestimmt. Die Bestimmung von MP001 erfolgte bereits in [FKL08]. Dabei wurde versucht, die Verläufe der jeweiligen experimentellen Kriechraten, welche am Institut für Werkstoffe der RUB bestimmt wurden, bestmöglich abzubilden. In Abb. 6.13 sind die experimentellen und die mittels des Einkristallmodells simulierten Kriechraten für die beiden Parametersätze miteinander verglichen. Ein Parametersatz, welcher das Kriechverhalten für alle Proben beider Orientierungen zufriedenstellend beschreibt, konnte nicht gefunden werden.

Aus Abb. 6.13 ist ersichtlich, dass die $\langle 111 \rangle$ -orientierten Proben stets höhere Verfestigungsraten aufweisen als die $\langle 001 \rangle$ -orientierten Proben. Ein derartiges Verhalten wurde für Al- und Cu-Einkristalle bei hohen Temperaturen bereits in [KDH06; KDH08] berichtet. Als Erklärung wurde vorgeschlagen, dass Erholung, welche durch Quergleiten von Versetzungen stattfindet, von der Kristallorientierung abhängt, da der Winkel zwischen alter und neuer Gleit-

Tab. 6.3: Materialparameter für das Einkristallmodell.

Parametersatz	n	K/MPa	R_0/MPa	Q/MPa	b
MP001	5,10	59,7	0,100	6,5	10,30
MP111	8,42	24,9	0,064	11,8	5,99

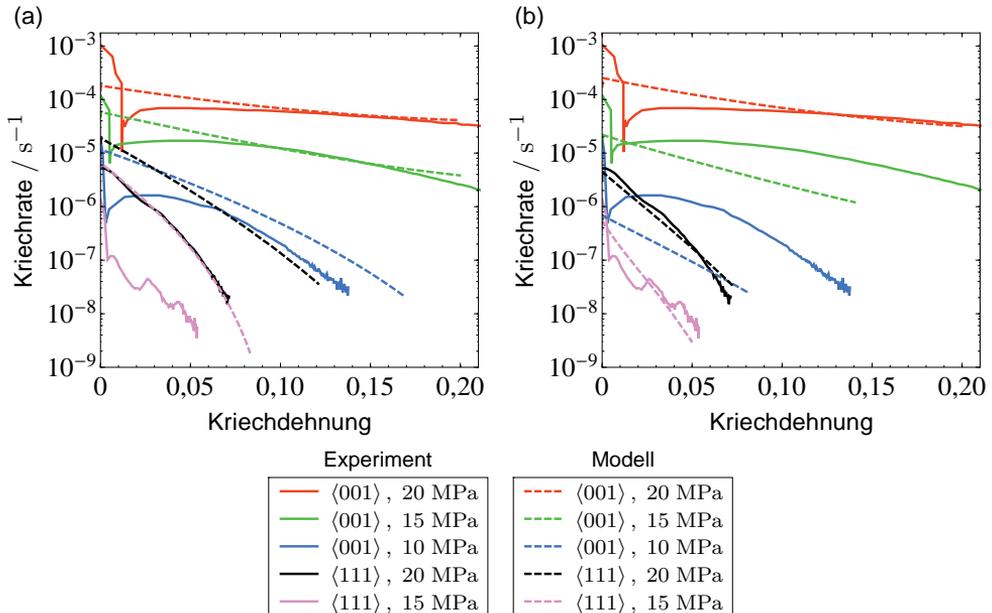


Abb. 6.13: Vergleich von simulierten Kriechraten mit den für die einkristallinen Cu-Proben experimentell bestimmten Kriechraten (siehe auch Abb. 6.5 | experimentelle Daten bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB). In (a) und (b) sind jeweils für die Parametersätze MP001 und MP111 die sich aus dem Einkristallmodell ergebenden Kriechraten dargestellt.

richtung für $\langle 001 \rangle$ - und $\langle 111 \rangle$ -orientierte Proben unterschiedlich ist. Eine Erweiterung des in Abschnitt 5.1 präsentierten Einkristallmodells zur Berücksichtigung dieses Effekts soll jedoch nicht im Rahmen der vorliegenden Arbeit erfolgen, da der voraussichtliche Nutzen bei der Beschreibung des Werkstoffverhaltens den Aufwand für die Erweiterung der Modellgleichungen und die numerische Implementierung übersteigt. Dies gilt insbesondere, da sich für die Beschreibung des Kriechverhaltens der grobkörnigen Cu-Sb-Minikriechproben gezeigt hatte (siehe Abschnitt 6.3), dass durch die Anwendung des Parametersatzes MP111 die Größenordnung der experimentellen Kriechraten gut abgebildet werden kann.

Für die im Folgenden präsentierten Untersuchungen wurde daher stets der Parametersatz MP111 zur Beschreibung des Materialverhaltens einzelner Körner innerhalb von FE-Simulationen verwendet.

6.2.2 Finite-Elemente-Modelle der Minikriechproben

Auf Basis der für die Cu-Sb-Minikriechproben erzeugten diskretisierten Kornstrukturen (siehe Abb. 6.2c) wurden FE-Modelle durch Extrusion der zweidimensionalen Vernetzung senkrecht zur Probenoberfläche (also entlang der Probendickenrichtung) erstellt. Beispiele für die resultierenden FE-Modelle sind in Abb. 6.14 und Abb. 6.21a dargestellt. Die realen Kornstrukturen, welche sich entlang der Probendickenrichtung veränderten (siehe Diskussionen in Abschnitt 6.1.3 und 6.1.5), können aber bei dieser Vorgehensweise durch die FE-Modelle nur approximiert werden.

Tab. 6.4: Vergleich von Kennzahlen, welche sich für die erstellten FE-Modelle der Cu-Sb-Minikriechproben ergaben.

Minikriechprobe	1	2	3	7	8
Gesamtknoten	14 728	16 124	15 152	15 492	17 356
C3D8-Elemente	5 259	5 694	5 364	5 499	5 373
C3D6-Elemente	483	591	498	408	534
COH3D8-Elemente	735	804	759	792	990
Knoten für CDJ-Technik	5 880	6 432	6 072	6 336	7 920
Anzahl an Gleichungen	26 544	29 076	27 240	27 468	28 308

Ein FE-Modell muss sich zudem über die gesamte Probendicke erstrecken, da das anisotrope Materialverhalten der Körner zu nicht ebenen Deformationszuständen, wie beispielsweise Biegung, führen kann. Um aber den Berechnungsaufwand für simulierte Kriechversuche klein zu halten, wurden lediglich drei Elemente in Dickenrichtung verwendet. Folglich sind die Elemente in Dickenrichtung deutlich gestreckt (siehe *Abb. 6.14*). Untersuchungen zum Einfluss der Vernetzungseinheit in [Kia12], für welche Simulationen mit FE-Modellen der Minikriechproben mit bis zu 10 Elementen entlang der Dickenrichtung durchgeführt wurden, deuten aber darauf hin, dass die aus einer größeren Vernetzung resultierende Beeinflussung der Simulationsergebnisse vertretbar im Vergleich mit anderen Unsicherheitsquellen (z. B. der approximierten Kornstruktur) ist.

Details zu einzelnen Schritten der Modellerstellungen sind in [Kia12] beschrieben. Für die hier verwendeten FE-Modelle erfolgte das Einfügen der kohäsiven Elemente jedoch entsprechend der in Abschnitt 5.3.1 beschriebenen CDJ-Technik. Zur Veranschaulichung der entlang der Korngrenzen platzierten kohäsiven Elemente sind in *Abb. 6.15* exemplarisch die berechneten Schubspannungen einer Simulation, welche im Rahmen der Bestimmung der Korngrenzenviskosität durchgeführt wurde (siehe Abschnitt 6.2.3), dargestellt. Die Gesamtzahl an Knoten sowie Anzahl und Typ der in den FE-Modellen verwendeten Elemente sind in *Tab. 6.4* für alle erstellten FE-Modelle zusammengetragen. Die Gesamtknotenanzahl beinhaltet dabei auch die zusätzlichen Knoten, welche durch den Einsatz der CDJ-Technik in ein FE-Modell eingefügt wurden. Diese zusätzlichen Knoten erhöhten jedoch nicht die Anzahl an Gleichungen, da die zusätzlichen Freiheitsgrade durch die zugehörigen Zwangsbedingungen der CDJ-Technik aus der Systemmatrix eliminiert wurden.

Da die resultierenden FE-Modelle jeweils nur die Messlänge der Minikriechproben umfassen, mussten die FE-Modelle mit angemessenen Randbedingungen versehen werden. Hierzu wurden zum einen sechs Freiheitsgrade an ausgewählten Knoten blockiert, um Starrkörperbewegungen zu verhindern. Zum anderen wurde die auf den Messbereich einwirkende Zugspannung mittels Flächenlastrandbedingungen an der oberen und unteren Oberfläche eines FE-Modells (siehe *Abb. 6.14*) aufgebracht. Die seitlichen Oberflächen wurden hingegen als spannungsfrei betrachtet.

Die in den folgenden Abschnitten beschriebenen und diskutierten FE-Simulationen wurden dabei stets mit dem FE-Programm Abaqus durchgeführt.

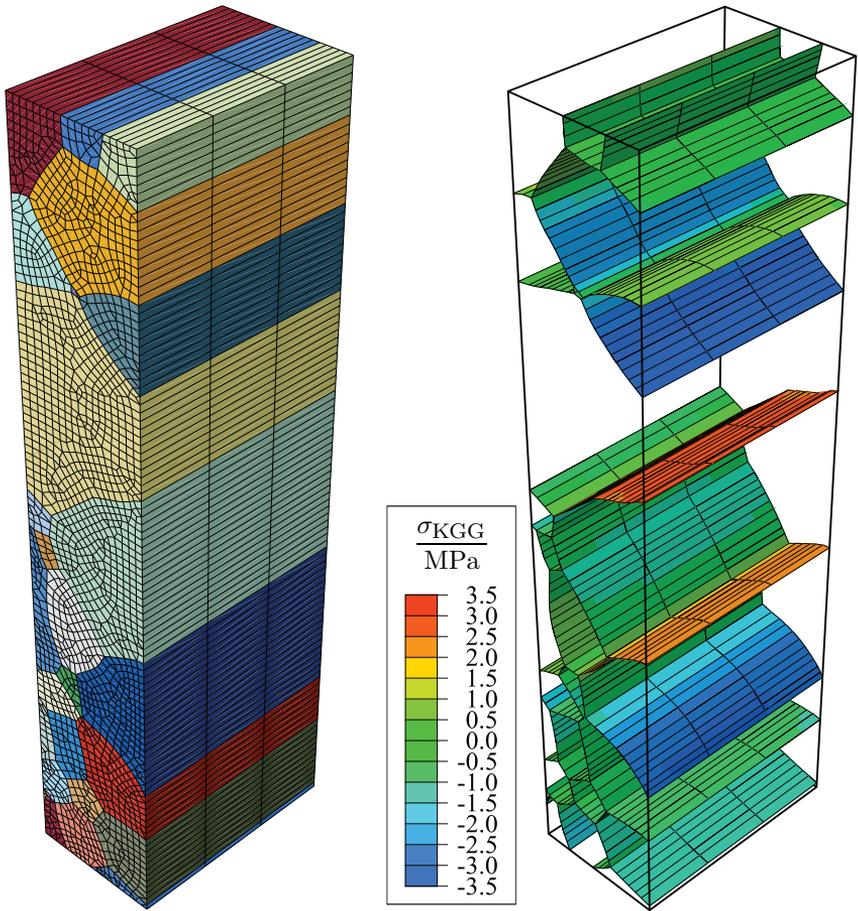


Abb. 6.14: Erstelltes FE-Modell für die mittels einer EBSD-Messung erfassten Kornstruktur von Minikriechprobe 3 (siehe auch Abb. 6.2).

Abb. 6.15: Veranschaulichung der berechneten Schubspannungen σ_{KGG} für die entlang der Korngrenzen platzierten kohäsiven Elemente. Details der Simulationdurchführung sind in Abschnitt 6.2.3 beschrieben.

6.2.3 Bestimmung einer phänomenologischen Korngrenzenviskosität

Die in Abb. 6.12 für die Cu-Sb-Proben dargestellten Korngrenzenabgleitungen, welche in [Kia12] anhand der vom Institut für Werkstoffe der RUB bereitgestellten Daten bestimmt wurden, konnten genutzt werden, um die phänomenologische Korngrenzenviskosität η_{KGG} anzupassen. Eine erste Abschätzung für η_{KGG} konnte bereits in [Kia12] gewonnen werden. Dabei wurden die mittleren Schubspannungen an den Korngrenzen durch Simulationen mit den FE-Modellen der Minikriechproben bestimmt, für welche die Korngrenzen als perfekt betrachtet wurden (keine Abgleitung und keine Aufdickung durch Schädigung).

Gemäß (5.17) kann an einer Korngrenze ein experimenteller Abgleichswert $[[u]]_{\text{KGG}}^{\text{Exp}}$ mit der aus einer Simulation stammenden und über die Versuchsdauer integrierten Schubspannung $\sigma_{\text{KGG}}^{\text{Sim}}$ in Verbindung gesetzt werden:

$$[[u]]_{\text{KGG}}^{\text{Exp}} \cdot \eta_{\text{KGG}} = \int_{\text{Versuchs-}}^{\text{dauer}} \sigma_{\text{KGG}}^{\text{Sim}} dt. \quad (6.1)$$

Durch Anwendung von (6.1) konnten in [Kia12] für mehrere Korngrenzen der Proben 2, 3 und 7 Korngrenzenviskositätswerte bestimmt werden, welche in Abhängigkeit von der betragsmäßigen mittleren Abgleichungsrate (gemessene Abgleichung an Korngrenze pro Versuchsdauer) in Abb. 6.16 dargestellt sind. Für die Bewertung der Ergebnisse ist zu berücksichtigen, dass die Bestimmung der Viskositätswerte in [Kia12] gewissen Unsicherheiten unterworfen war.

Zum einen waren die aus den DIC-Messungen resultierenden Verschiebungsdaten mit leichten Fluktuationen überlagert. Darüber hinaus konnten die Verschiebungen der angrenzenden Körner nicht direkt an einer Korngrenze bestimmt werden, sondern wurden anhand von Auswertungsgebieten ermittelt, welche etwas von der Korngrenze entfernt waren (siehe Abschnitt 6.1.5). Folglich sind die experimentellen Abgleichungswerte mit entsprechenden Unsicherheiten behaftet.

Zum anderen handelt es sich bei der idealisierten prismatischen Kornstruktur eines FE-Modells um eine Approximation der realen Kornstruktur, was möglicherweise die Genauigkeit der berechneten Schubspannungen an den Korngrenzen einer Minikriechprobe beeinflusste.

Der relative Einfluss dieser Unsicherheiten ist dabei umso größer, je weniger Korngrenzgleiten stattfand. Für Korngrenzen mit niedrigen mittleren Abgleichungsraten können daher

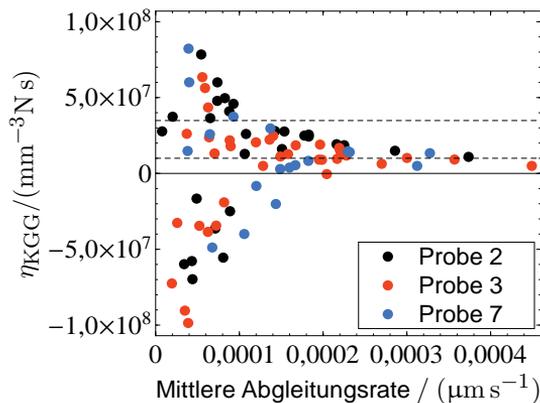


Abb. 6.16: Erste Abschätzung von Korngrenzenviskositäten für die Minikriechproben 2, 3 und 7 aus [Kia12]. Physikalisch falsche negative Viskositätswerte ergeben sich, wenn experimentell bestimmte Abgleichungen und simulierte Schubspannungen unterschiedliche Vorzeichen haben. Die gestrichelten Linien kennzeichnen die Viskositätswerte $\eta_{\text{KGG}}^1 = 3,85 \times 10^7 \text{ mm}^{-3} \text{ N s}$ und $\eta_{\text{KGG}}^2 = 10^7 \text{ mm}^{-3} \text{ N s}$, welche in Abschnitt 6.2.4 für die weitere Anpassung des Porositätsmodells verwendet wurden.

Tab. 6.5: An experimentelle Korngrenzenableitungen iterativ angepasste Korngrenzenviskositäten.

$D_{nn}/(\text{mm}^{-3}\text{N})$	$1,0 \times 10^8$	$1,0 \times 10^{10}$	$1,0 \times 10^{12}$
$\eta_{\text{KGG}}/(\text{mm}^{-3}\text{Ns})$	$1,50 \times 10^7$	$1,38 \times 10^7$	$1,32 \times 10^7$

in Abb. 6.16 eine hohe Streuung und sogar einige physikalisch falsche negative Viskositätswerte beobachtet werden. Korngrenzen, für welche Korngrenzengleiten besonders ausgeprägt war, zeigen darüber hinaus aber ein konsistentes Verhalten. Durch Mittelwertbildung über alle positiven Viskositätswerte konnte der Wert $\eta_{\text{KGG}} = 3,85 \times 10^7 \text{ N s/mm}^3$ bestimmt werden. Wie aus Abb. 6.16 zu erkennen ist, liefert diese Abschätzung einen hohen Viskositätswert, welcher jedoch keine obere Grenze repräsentiert.

Ein realistischerer Viskositätswert wurde in der vorliegenden Arbeit iterativ durch Lösung des inversen Problems für die Proben 2, 3 und 7 bestimmt. Zur vereinfachten Umsetzung wurde hierfür ein reduziertes Kohäsionsmodell verwendet, welches reines Korngrenzengleiten entsprechend (5.17) beschrieb, jedoch keine Korngrenzenschädigung berücksichtigte. Die Korngrenzenaufdickung wurde als rein elastisch mit einer konstanten Steifigkeit D_{nn} betrachtet. Zur Bestimmung von η_{KGG} wurden die Ableitungen unter Verwendung des reduzierten Kohäsionsmodells durch Simulationen mit den FE-Modellen der Minikriechproben innerhalb einer Optimierungsschleife wiederholt berechnet, wobei η_{KGG} jeweils so angepasst wurde, dass die Residuumsfunktion

$$F_{\text{Res}}^{\text{KGG}} = \sum_k^{\text{Proben}} \left[\sum_i^{\text{Korngrenzen}} \left(\frac{[u]_{\text{KGG}}^{\text{Sim.k.i}} - [u]_{\text{KGG}}^{\text{Exp.k.i}}}{[u]_{\text{KGG}}^{\text{Exp.k.i}}} \right)^2 \right] \quad (6.2)$$

minimiert wurde. In (6.2) sind $[u]_{\text{KGG}}^{\text{Exp.k.i}}$ die experimentell bestimmte Ableitung der i -ten Korngrenze in der k -ten Minikriechprobe (siehe Abb. 6.12) und $[u]_{\text{KGG}}^{\text{Sim.k.i}}$ der jeweils aus den FE-Simulationen bestimmte zugehörige Ableitungswert.

Um den Einfluss von D_{nn} auf die Ergebnisse abzuschätzen, wurden drei Optimierungsdurchgänge mit unterschiedlichen Werten für D_{nn} absolviert. Die jeweils verwendeten Werte, welche sich an einer sehr steifen Grenzfläche orientieren und für welche Aufdickung und Durchdringung vernachlässigt werden können, sind zusammen mit den resultierenden Werten für η_{KGG} in Tab. 6.5 aufgelistet.

Zum Vergleich sei darauf hingewiesen, dass sich entsprechend (5.10) ein Steifigkeitswert $D_{nn} = 7,25 \times 10^9 \text{ N/mm}^3$ für die Anfangswerte β_0 und ρ_0 , welche im folgenden Abschnitt anhand der Korngrenzenschädigung der ungetesteten Cu-Sb-Proben bestimmt wurden, berechnen lässt. Die Werte in Tab. 6.5 lassen den Schluss zu, dass die Korngrenzenviskosität im betrachteten Bereich nur in geringem Maße von D_{nn} abhängt.

Unter Berücksichtigung der Erkenntnisse aus Abb. 6.16 lässt sich abschließend festhalten, dass die Korngrenzenviskosität aus den vorliegenden experimentellen Daten nicht exakt bestimmt werden kann. Trotz gewisser Unsicherheiten zeigen die Ergebnisse aber recht deutlich, dass die Korngrenzenviskosität für die Cu-Sb-Proben mit hoher Wahrscheinlichkeit in der Größenordnung $\eta_{\text{KGG}} = 10^7 \text{ N s/mm}^3$ liegt.

6.2.4 Beschreibung der Korngrenzenschädigung

Das in Abschnitt 5.2.2 vorgestellte Kohäsionsmodell beinhaltet die materialabhängigen Parameter ψ , a_{init} , \tilde{D}_{KG} , γ_{S} , a_{P} , b_{P} , E_{Inter} und η_{KGG} sowie darüber hinaus die Anfangswerte β_0 und ρ_0 für die beiden Schädigungsvariablen. Während im vorangegangenen Abschnitt die Größenordnung der Korngrenzenviskosität η_{KGG} abgeschätzt werden konnte, wurden, wie im Folgenden beschrieben, die übrigen Parameter so gewählt bzw. angepasst, dass das Schädigungsverhalten der Korngrenzen, welches für die grobkörnige Cu-Sb-Legierung beobachtet werden konnte (siehe Abschnitt 6.1.5), durch das Kohäsionsmodell beschrieben wird. Dabei musste aber berücksichtigt werden, dass die experimentelle Datenbasis der am Institut für Werkstoffe der RUB getesteten Cu-Sb-Proben nicht breit genug ist, um eine eindeutige Anpassung aller Parameter vorzunehmen.

Da die Schädigungsentwicklung durch das Mechanismen-orientierte Porositätsmodell aus Abschnitt 4.4.3 beschrieben wird, besitzen die meisten Parameter eine geometrische oder physikalische Bedeutung. Dies erlaubte es, mehrere Parameter auf plausible Werte festzulegen und die Anpassung an die experimentellen Daten auf wenige variable Anpassungsparameter zu beschränken. Wegen des hohen Einflusses auf die Porositätsentwicklung wurden der Koeffizient \tilde{D}_{KG} (siehe (4.3)), welcher vor allem die Porenwachstumsgeschwindigkeit und folglich die resultierenden Porengrößen kontrolliert, sowie der Vorfaktor a_{P} in der Produktionsrate (5.14), welcher maßgeblich die Porendichte ρ bestimmt, als variable Anpassungsparameter gewählt. Werte für die übrigen Parameter wurden aus Literaturangaben übernommen oder anderweitig abgeschätzt.

Bezüglich der Porengeometrie wurden eine typische linsenförmige Gleichgewichtsform mit Dihedralwinkel $\psi = 70^\circ$ und ein Anfangsradius $a_{\text{init}} = 1 \mu\text{m}$ für neu nukleierte Poren angenommen. Für die spezifische Oberflächenenergie der freien Porenoberfläche wurde hingegen der Wert $\gamma_{\text{S}} = 1,78 \text{ J m}^{-2}$ aus [WMN83] übernommen. Da a_{P} als Anpassungsparameter gewählt wurde, konnte die Normierungsspannung σ_{P} in (5.14) auf beliebige positive Werte festgelegt werden. Der für die Anpassung verwendete Wert $\sigma_{\text{P}} = 42 \text{ GPa}$ orientierte sich dabei am Schubmodul von Kupfer. Die Wahl der beiden unterschiedlichen Exponenten $b_{\text{P}}^1 = 5$ und $b_{\text{P}}^2 = 1$, welche im Rahmen der Parameteranpassung berücksichtigt wurden, geht wiederum auf typische Werte für den Norton-Exponenten zurück. Ausgehend von dem in [Vös10] verwendeten Elastizitätsmodul für polykristallines Kupfer bei Raumtemperatur, welcher auf den experimentellen Daten aus [MH97] beruhte, wurde weiterhin der Wert $E_{\text{Inter}} = 111,883 \text{ GPa}$ als Elastizitätsmodul des ungeschädigten korngrenzennahen Materials bei einer Temperatur von 823 K extrapoliert. Die dabei verwendete Temperaturabhängigkeit orientierte sich an den elastischen Kupfereinkristallsteifigkeitswerten aus [SW71]. Schließlich wurden noch die beiden Korngrenzenviskositäten $\eta_{\text{KGG}}^1 = 3,85 \times 10^7 \text{ mm}^{-3} \text{ N s}$ und $\eta_{\text{KGG}}^2 = 10^7 \text{ mm}^{-3} \text{ N s}$ (siehe Abb. 6.16) genutzt, um den Einfluss von Korngrenzengleiten auf die Entwicklung der Korngrenzenschädigung zu untersuchen.

Um die Anpassung von \tilde{D}_{KG} und a_{P} durchführen zu können, war es erforderlich, die Schädigungsvariablen des Kohäsionsmodells β und ρ mit den experimentell bestimmten Korngrenzenschädigungen in Verbindung zu bringen. Aufgrund des grobkörnigen Gefüges beinhalteten die Cu-Sb-Proben eine verhältnismäßig geringe Anzahl an Korngrenzen, für welche zudem nur eine begrenzte Anzahl an Poren pro Korngrenze im Rahmen der metallografischen

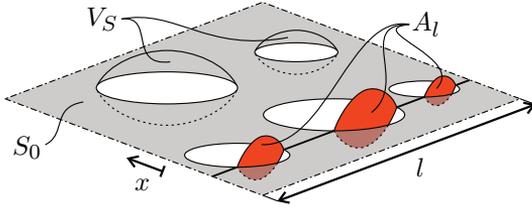


Abb. 6.17: Schematische Darstellung der in einem Schliffbild pro Korngrenzenlänge l sichtbaren Schnittfläche von Korngrenzenporen A_l .

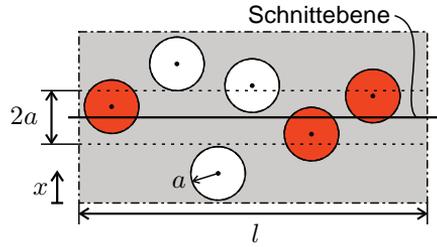


Abb. 6.18: Schematische Darstellung der in einem Schliffbild beobachtbaren Porenanzahl pro Korngrenzenlänge l .

Analyse beobachtet werden konnten. Die Porenanzahlen pro Korngrenze sind vor allem nicht ausreichend, um Porengrößenverteilungen durch eine statistische Auswertung, so wie beispielsweise in [OR96] diskutiert, zu bestimmen. Jedoch kann davon ausgegangen werden, dass die Gesamtheit aller Korngrenzen einer Probe die Entwicklung der mittleren Korngrenzenporosität abbildet. Letztere ist durch die Korngrenzenporenanzahl N_l und die kumulierte sichtbare Schnittfläche von Korngrenzenporen A_l charakterisiert (siehe Tab. 6.2).

Stereologische Betrachtungen, wie sie beispielsweise in [Und70] ausgeführt sind, können durch Spezialisierung auf den Fall von Poren oder Partikeln entlang von inneren Flächen genutzt werden, um Zusammenhänge zwischen den experimentellen Porositätsdaten und den beiden Schädigungsvariablen β und ρ herzustellen. Hierzu müssen allerdings vereinfachende Annahmen getroffen werden. Zum einen wird, wie bei der Erstellung der FE-Modelle, von einer idealisierten prismatischen Mikrostruktur ausgegangen, für welche sich die an der Probenoberfläche beobachtete Mikrostruktur unverändert entlang der Probendicke fortsetzt. Zum anderen wird angenommen, dass die Poren gleich groß mit einem Radius a und auf den Korngrenzenflächen homogen verteilt sind.

Unter diesen Voraussetzungen ergibt sich die Korngrenzenfläche S_0 innerhalb der Messlänge durch Integration der kumulierten sichtbaren Korngrenzenlänge l über die Probendicke:

$$S_0 = l \cdot \int_{\text{Probendicke}} dx. \quad (6.3)$$

In (6.3) und im Folgenden entspricht die x -Richtung jeweils der Probendickenrichtung. Die in einem Schliffbild pro Korngrenzenlänge l sichtbare Schnittfläche von Korngrenzenporen A_l , welche in Abb. 6.17 für einen Schnitt senkrecht zur Probendicke skizziert ist, kann als infinitesimales Porenvolumen betrachtet werden. Das gesamte Volumen von Korngrenzenporen V_S pro Korngrenzenfläche S_0 ergibt sich dann durch Integration von A_l über die Probendicke

$$V_S = \int_{\text{Probendicke}} A_l(x) dx = \bar{A}_l \int_{\text{Probendicke}} dx, \quad (6.4)$$

wobei $A_l = A_l(x)$ im Allgemeinen von der x -Koordinate abhängt und \bar{A}_l der über die Probenbreite gemittelte Wert von A_l ist. Das Verhältnis von V_S zu S_0 , welches gerade der Korngrenzenaufdickung durch Poren $[[u]]^P$ entspricht, ist nach (6.3) und (6.4) gleich dem Verhältnis von \bar{A}_l zu l . Da die Korngrenzenaufdickung nach (4.51) durch β und ρ ausgedrückt werden kann, ergibt sich somit der Zusammenhang

$$\frac{\bar{A}_l}{l} = \frac{V_S}{S_0} = [[u]]^P = \frac{\beta}{\sqrt{\rho}}. \quad (6.5)$$

Darüber hinaus ergibt sich ein weiterer Zusammenhang bezüglich der in einem Schliffbild beobachtbaren Porenanzahl. Hierzu wird, wie in *Abb. 6.18* skizziert, ein Schnitt durch die Probe betrachtet, welcher jeweils senkrecht zur Korngrenze und zur Dickenrichtung verläuft. Im Fall von gleich großen Poren mit Radius a sind nur jene Poren entlang einer Korngrenzenlänge l sichtbar, deren Zentren sich nicht weiter als a von der Schnittebene entfernt befinden. Die im Schliffbild beobachtbare Porenanzahl entspricht dann der Anzahl an Poren in einem Korngrenzenbereich der Länge l und Breite $2a$. Da die Poren entlang der Korngrenzenfläche mit einer konstanten Porendichte ρ homogen verteilt sein sollen, ergibt sich die zu erwartende Porenanzahl zu

$$\bar{N}_l = 2a \cdot l \cdot \rho. \quad (6.6)$$

Wird schließlich (4.54) genutzt, um den Porenradius a in Abhängigkeit von β und ρ auszudrücken, so ergeben sich aus (6.5) und (6.6) die beiden Gleichungen

$$\beta = \sqrt[4]{\frac{\pi h(\psi) \bar{A}_l^3 \bar{N}_l^3}{6l^6}} \quad \text{und} \quad \rho = \frac{1}{l} \sqrt{\frac{\pi h(\psi) \bar{N}_l^3}{6\bar{A}_l}}. \quad (6.7)$$

Unter der Annahme, dass die metallografisch bestimmten Werte für A_l und N_l repräsentativ

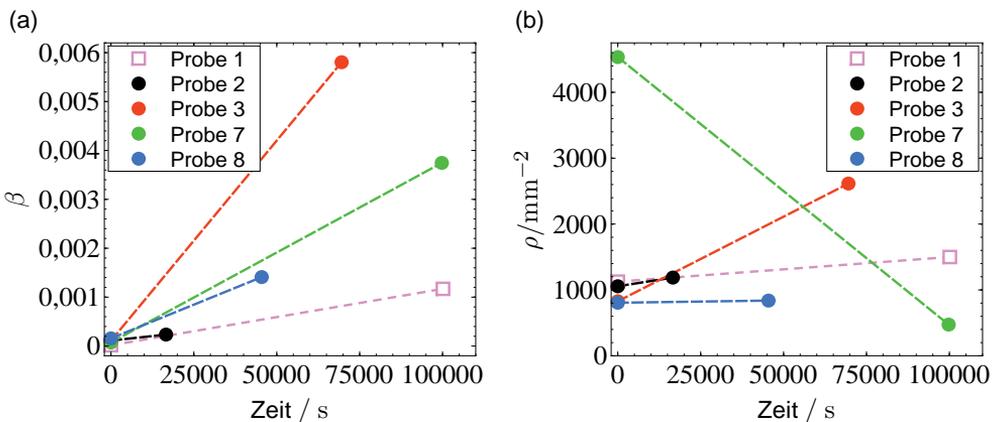


Abb. 6.19: Veranschaulichung der Korngrenzenschädigungsentwicklung durch die beiden Schädigungsvariablen des Porositätsmodells β und ρ , welche sich entsprechend (6.7) aus den in Tab. 6.2 aufgelisteten Werten ergeben.

für den Porositätszustand einer Probe sind, wurden die Gleichungen (6.7) genutzt, um β und ρ jeweils vor und nach einem Kriechversuch abzuschätzen. Hierbei wurden für \bar{A}_l , \bar{N}_l und l die in Tab. 6.2 aufgelisteten Werte eingesetzt, wobei angenommen wurde, dass die kumulierte sichtbare Korngrenzenlänge l vor und nach einem Kriechversuch gleich ist. Die resultierenden Werte für β und ρ sind für die Proben 1, 2, 3, 7 und 8 in Abb. 6.19 dargestellt.

Während sich für die Proben 1, 2, 3 und 8 übereinstimmend jeweils eine Zunahme von β und ρ ergibt, ist für Probe 7 hingegen eine Abnahme der Porendichte ρ zu beobachten. Dieses Verhalten lässt sich durch die Tatsache erklären, dass Probe 7 aufgrund der langen Versuchsdauer besonders stark geschädigt war und im Vergleich mit den anderen am Institut für Werkstoffe der RUB getesteten Proben mehr vollständig geschädigte Korngrenzen aufwies. Für Letztere können aber keine Porenanzahlen und -größen bestimmt werden. Folglich ergibt sich für diese Probe der kleinste Anstieg bezüglich der Porenanzahl. Die entlang der intakten Korngrenzen beobachteten Poren sind aber besonders groß, was sich durch das größte Verhältnis $A_{l,C}/N_{l,C}$ aller Proben äußert. Das Auftreten von wenigen großen Poren führt entsprechend (6.7) zu einer niedrigen Porendichte ρ und entspricht somit dem zu erwartenden Schädigungsbild einer stark geschädigten Probe.

Der Verlust der Eindeutigkeit, welcher mit einer nicht monotonen Entwicklung von Schädigungsvariablen (hier der Porendichte bzw. -anzahl) verbunden ist, würde aber das Lösen des inversen Problems bei der Parameteranpassung deutlich erschweren. Um das Vorgehen zu vereinfachen, wurde Probe 7 daher nicht für die Anpassung von \tilde{D}_{KG} und a_P berücksichtigt. Ausgehend von den Porositätsdaten der vier übrigen Proben (siehe Abb. 6.19) wurden die Anfangswerte der beiden Schädigungsvariablen schließlich auf die Werte $\beta_0 = 10^{-4}$ und $\rho_0 = 10^3 \text{ mm}^{-2}$ gesetzt.

Im Rahmen einer iterativen Optimierung wurden in aufeinanderfolgenden Durchgängen FE-Simulationen der Kriechbelastungen für die Proben 1, 2, 3 und 8 durchgeführt, wobei \tilde{D}_{KG} und a_P jeweils von Durchgang zu Durchgang so angepasst wurden, dass die Residuumsfunktion

$$F_{\text{Res}}^{\text{KGP}} = \sum_k^{\text{Proben}} \left[\left(\frac{N_{l,\text{Sim},k} - N_{l,C,k}}{N_{l,C,k}} \right)^2 + \left(\frac{A_{l,\text{Sim},k} - A_{l,C,k}}{A_{l,C,k}} \right)^2 \right] \quad (6.8)$$

minimiert wurde. In (6.8) sind $N_{l,C,k}$ und $A_{l,C,k}$ jeweils die experimentellen Werte für die k -te Probe aus Tab. 6.2. Die zugehörigen simulierten Werte $N_{l,\text{Sim},k}$ und $A_{l,\text{Sim},k}$ wurden für jede Simulation gemäß (6.5) und (6.6) durch die Beziehungen

$$N_{l,\text{Sim}} = \sum_i^{\text{Integrationspunkte}} 2a(\beta_i, \rho_i) \cdot l_i \cdot \rho_i, \quad (6.9)$$

$$A_{l,\text{Sim}} = \sum_i^{\text{Integrationspunkte}} l_i \cdot \frac{\beta_i}{\sqrt{\rho_i}} \quad (6.10)$$

aus den Integrationspunktwerten an der Probenoberfläche bestimmt, wobei β_i und ρ_i die Schädigungsvariablen und l_i die sichtbare Korngrenzenlänge des i -ten Integrationspunktes

Tab. 6.6: An experimentelle Porositätsdaten iterativ angepasste Parameter des Porositätsmodells.

Parametersatz	$\eta_{\text{KGG}}/(\text{mm}^{-3}\text{N s})$	b_{P}	$\tilde{D}_{\text{KGG}}/(\text{mm}^5\text{N}^{-1}\text{s}^{-1})$	$a_{\text{P}}/(\text{mm}^{-2}\text{s}^{-1})$
COH-1	$3,85 \times 10^7$	5	$7,8936 \times 10^{-15}$	$2,0039 \times 10^{16}$
COH-2	$3,85 \times 10^7$	1	$1,2143 \times 10^{-14}$	$2,6677 \times 10^2$
COH-3	$1,00 \times 10^7$	1	$1,0028 \times 10^{-14}$	$2,2852 \times 10^2$

sind. Dabei wurden nur jene Integrationspunkte berücksichtigt, für welche $\omega(\beta) < 0,5$ erfüllt und somit entsprechend der Modellierung noch kein lokales Versagen eingetreten war.

Für die drei Parameterkombinationen $\{\eta_{\text{KGG}}^1, b_{\text{P}}^1\}$, $\{\eta_{\text{KGG}}^1, b_{\text{P}}^2\}$ und $\{\eta_{\text{KGG}}^2, b_{\text{P}}^2\}$ wurden jeweils voneinander unabhängige Anpassungen durchgeführt. Die resultierenden Werte für \tilde{D}_{KGG} und a_{P} sind in Tab. 6.6 aufgelistet. Darüber hinaus werden in Abb. 6.20 die experimentellen Porositätsdaten aus Tab. 6.2 mit den simulierten Porositätsdaten, welche sich jeweils am Ende eines Anpassungsprozesses ergaben, verglichen. Dabei zeigt sich, dass die Proben 3 und 8, für welche eine erhöhte Korngrenzschädigung beobachtet wurde, die höchsten absoluten Abweichungen zwischen experimentellen und simulierten Porositätsdaten aufweisen. Die Wichtung zugunsten der weniger geschädigten Proben im Rahmen der Anpassung ergibt sich aus der Normierung mit den experimentellen Werten bei der Berechnung der Residuen in (6.8).

Die Ursachen für die Abweichungen bezüglich der Porositätsdaten können nicht eindeutig benannt werden. Es ist jedoch davon auszugehen, dass die begrenzten experimentellen Daten, welche eine Reduktion der frei anpassbaren Parameter erforderlich machten, und die bereits benannten notwendigen Vereinfachungen bei der Modellierung, wozu vor allem die idealisierte prismatische Mikrostruktur zählt, als wichtigste Einflussgrößen anzusehen sind.

Eine Einordnung der angepassten Werte für den Vorfaktor a_{P} der Produktionsrate $\dot{\rho}_{\text{P}}$ erscheint angesichts des phänomenologischen Ansatzes und der resultierenden Unterschiede über mehrere Größenordnungen in Abhängigkeit vom Exponenten b_{P} nicht sinnvoll. Die an-

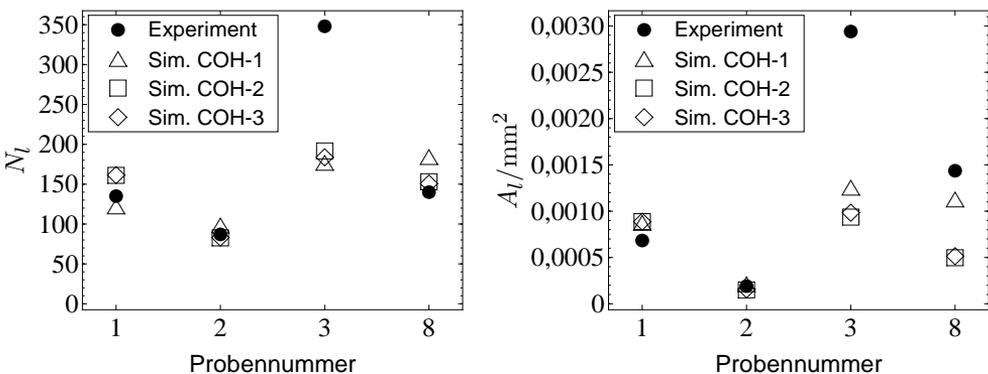


Abb. 6.20: Vergleich der experimentellen Porositätsdaten aus Tab. 6.2 mit den jeweils am Ende eines Anpassungsprozesses aus den Simulationen bestimmten Porositätsdaten für die in Tab. 6.6 aufgeführten Parametersätze.

gepassten Werte für den Koeffizient \tilde{D}_{KG} können im Vergleich mit experimentellen Daten aber als plausibel angesehen werden. So kann aus den in [NR80] angegebenen Daten ein Wert $\tilde{D}_{\text{KG}} = 1,30 \times 10^{-15} \text{ mm}^5 \text{ N}^{-1} \text{ s}^{-1}$ für Kupfer bei 823 K bestimmt werden.

Darüber hinaus ergeben sich aus den in [SH97] für zwei Kupferwerkstoffe mit unterschiedlichen Reinheiten präsentierten Daten die Werte $\delta D_{\text{KG}} = 9,76 \times 10^{-12} \text{ mm}^3/\text{s}$ und $\delta D_{\text{KG}} = 4,97 \times 10^{-12} \text{ mm}^3/\text{s}$ für eine Temperatur von 823 K. Die beiden Produkte aus Korngrenzendicke δ und Korngrenzendiffusionskoeffizient D_{KG} können unter Verwendung von (4.3) und Ω aus *Tab. 4.1* genutzt werden, um die Koeffizienten $\tilde{D}_{\text{KG}} = 1,01 \times 10^{-14} \text{ mm}^5 \text{ N}^{-1} \text{ s}^{-1}$ und $\tilde{D}_{\text{KG}} = 5,17 \times 10^{-15} \text{ mm}^5 \text{ N}^{-1} \text{ s}^{-1}$ zu bestimmen.

Während Letztere in guter Übereinstimmung mit den in *Tab. 6.6* präsentierten Werten sind, ist der auf den Daten aus [NR80] basierende Wert ungefähr eine Größenordnung kleiner als die angepassten Werte.

6.3 Diskussion der Ergebnisse

In Abschnitt 6.2 konnte gezeigt werden, wie verschiedene experimentelle Versuchsdaten, welche am Institut für Werkstoffe der RUB mittels Minikriechproben für reine Kupfereinkristalle sowie für eine grobkörnige Cu-Sb-Legierung gewonnen wurden, genutzt werden können, um das in Abschnitt 5 präsentierte mikromechanische Polykristallmodell zu kalibrieren. Für die angewendete Anpassungsstrategie war es dabei von zentraler Bedeutung, dass die Parameter der im Rahmen des Modells berücksichtigten Mechanismen anhand von gesonderten Deformations- und Schädigungsdaten bestimmt wurden. Letzteres ist eine wichtige Voraussetzung dafür, dass die Beiträge der einzelnen Mechanismen zum makroskopischen Kriechverhalten möglichst eindeutig erfasst werden.

Aus den Simulationen, welche für die Parameteranpassungen durchgeführt wurden, war dabei ersichtlich, dass Korngrenzengleiten das Kriechverhalten wesentlich beeinflusste und für die beiden Korngrenzenviskositäten η_{KGG}^1 und η_{KGG}^2 zu deutlichen Spannungskonzentrationen an Tripellinien führte. Insbesondere für den größeren Exponenten $b_{\text{P}}^1 = 5$ der Produktionsrate $\dot{\rho}_{\text{P}}$ war zu beobachten, dass die Spannungskonzentrationen die Schädigungsentwicklungen in der Nähe von Tripellinien begünstigten und in der Folge zu keilförmigen Korngrenzanrissen führten. In den REM-Aufnahmen, welche am Institut für Werkstoffe der RUB im Rahmen der metallografischen Analyse der Cu-Sb-Proben erfasst wurden, waren auch keilförmige Korngrenzanrisse an Tripellinien vorhanden. Im Vergleich mit den Simulationen war die Häufigkeit, mit der diese Anrisse in den getesteten Proben auftraten, jedoch gering. Die Neigung der Modellierung zum Überschätzen dieser speziellen Art der Korngrenzschädigung kann durch die Verwendung des Exponenten $b_{\text{P}}^2 = 1$ reduziert werden.

Dies wird durch die vergleichenden Darstellungen des geschädigten Flächenanteils ω in *Abb. 6.21b* und *Abb. 6.21c*, welche sich für Probe 8 und die beiden Parametersätze COH-1 und COH-2 (siehe *Tab. 6.6*) ergaben, veranschaulicht. Genauer gesagt führt der Exponent $b_{\text{P}}^2 = 1$ zu homogeneren Schädigungsverteilungen entlang der Korngrenzen bei gleichzeitiger Reduzierung der Maximalwerte an den zugehörigen Tripellinien. Dies ist noch deutlicher in den Detailansichten zweier Korngrenzen von Probe 8 zu erkennen (siehe *Abb. 6.22b,c*

und Abb. 6.23b,c), für welche sich innerhalb der Simulationen jeweils ein fortgeschrittener Schädigungszustand eingestellt hatte.

Obwohl für die Simulationen jeweils idealisierte prismatische Mikrostrukturen betrachtet wurden, kann anhand dieser vereinfachten Kornstrukturen bereits gezeigt werden, inwiefern der Korngrenzenverlauf und die Korngrenzenorientierung innerhalb einer Probe die Schädigungsentwicklung beeinflussen. Hierzu zählt vor allem die Tatsache, dass Korngrenzen, die senkrecht zur Lastrichtung verlaufen, am stärksten schädigen (siehe auch [YN84a]). Aufgrund der vereinfachten Kornstrukturen innerhalb der FE-Modelle, für welche die räumlichen Orientierungen einzelner Korngrenzen nur näherungsweise abgebildet werden konnten, war folglich eine exakte Berechnung der Schädigungsentwicklungen auf jeder Korngrenze nicht möglich. Dies dürfte einer der Hauptgründe für offensichtliche Unterschiede zwischen Simulationen und den experimentellen Daten sein.

So zeigt beispielsweise Abb. 6.22a das Rückstreuелеlektronenbild einer vollständig geschädigten Korngrenze in Probe 8 nach dem Kriechversuch. Zum Vergleich sind in Abb. 6.22b und

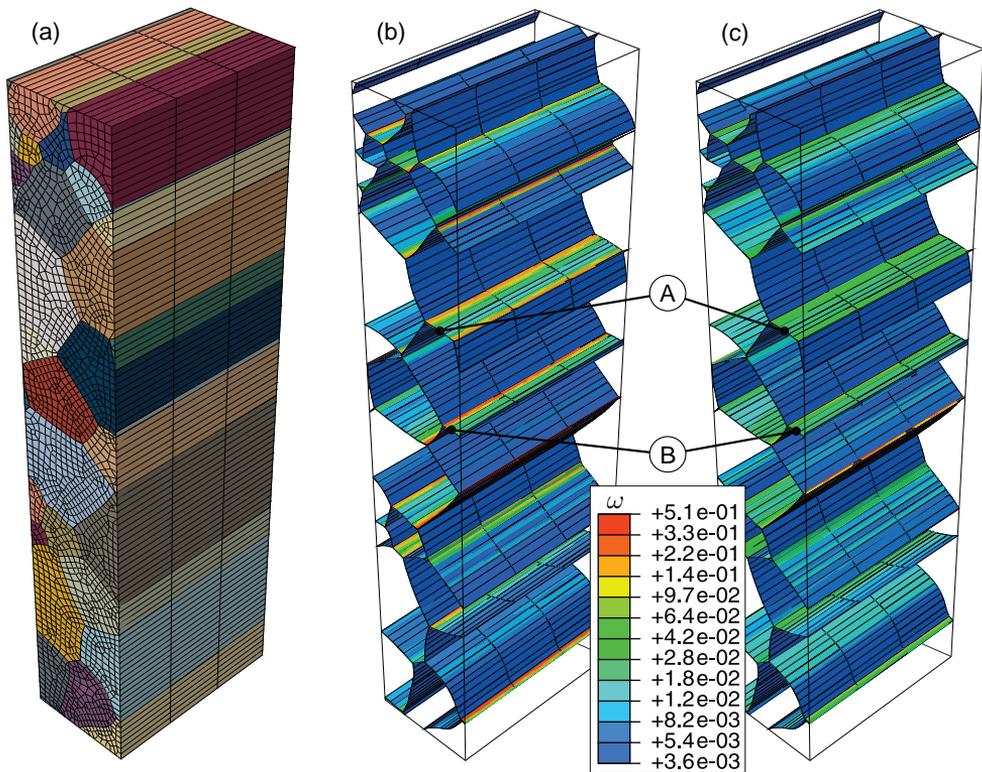


Abb. 6.21: (a) zeigt das für Minikriechprobe 8 erstellte FE-Modell. (b) und (c) zeigen jeweils für die Parametersätze COH-1 und COH-2 den geschädigten Flächenanteil ω (logarithmische Skala) an den Korngrenzen nach Beendigung der Simulationen. Durch die Markierungen A und B sind zwei stärker geschädigte Korngrenzen gekennzeichnet.

Abb. 6.22c die für diese Korngrenze berechneten Schädigungen, jeweils für die beiden Parametersätze COH-1 und COH-2, dargestellt. Zwar war die Korngrenze innerhalb der Simulationen mit am stärksten geschädigt, der geschädigte Flächenanteil an den Integrationspunkten der kohäsiven Elemente blieb jedoch unterhalb von 50 %, so dass kein lokales Versagen eintrat.

Des Weiteren sind die durch die Simulationen bestimmten Schädigungsniveaus für die in Abb. 6.21 mit A und B bezeichneten Korngrenzen vergleichbar (siehe Abb. 6.22b,c und Abb. 6.23b,c). Die experimentell erfassten Schädigungszustände dieser Korngrenzen (Abb. 6.22a und Abb. 6.23a) zeigen jedoch deutliche Unterschiede: Während A vollständig geschädigt ist, kann auf B nur eine einzelne Korngrenzenpore beobachtet werden.

Da Porositätsdaten pro Probe und nicht pro Korngrenze für die Anpassung des Schädigungsverhaltens genutzt wurden, erfolgte unter Vernachlässigung der lokalen Schädigungsverteilungen entlang der Korngrenzen eine Fokussierung auf die Gesamtschädigungszustände der

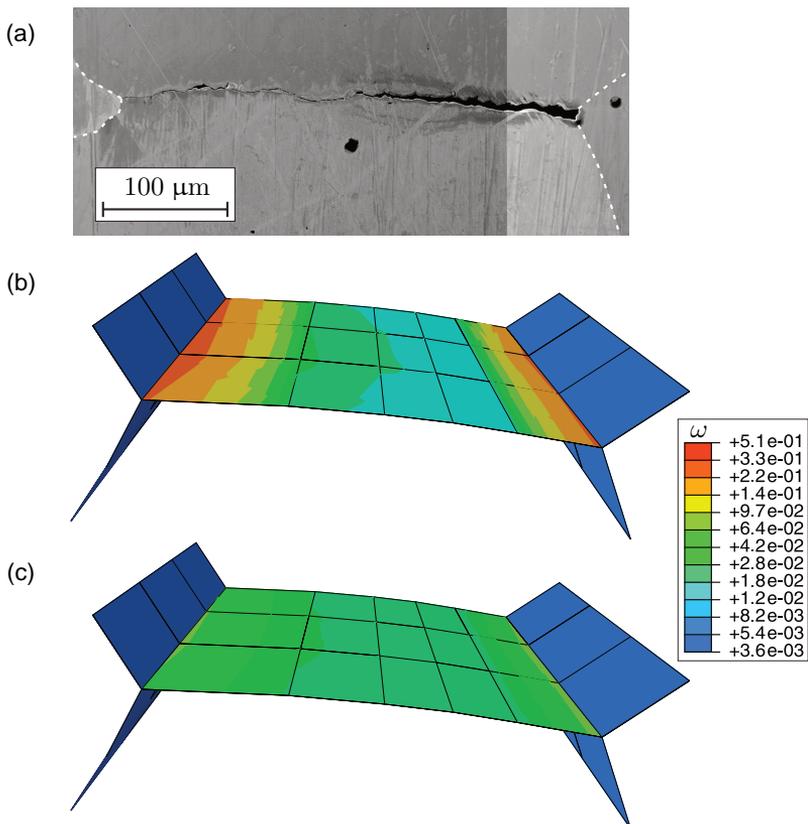


Abb. 6.22: (a) zeigt das Rückstreuungsbild der mit A markierten Korngrenze in Abb. 6.21 nach durchgeführtem Kriechversuch (Bildmaterial bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB). (b) und (c) zeigen jeweils für die Parametersätze COH-1 und COH-2 den geschädigten Flächenanteil ω (logarithmische Skala) für die in (a) betrachtete Korngrenze nach Beendigung der Simulationen.

Proben. Diese Vorgehensweise ermöglichte daher die Bestimmung von Parametern, welche das mittlere Schädigungsverhalten für einen Polykristall beschreiben.

Eine weitere interessante Beobachtung ergab sich bezüglich der Gesamtkriechdeformationen aus dem Vergleich der am Institut für Werkstoffe der RUB getesteten Proben und den jeweils zugehörigen Simulationen, welche im Rahmen der Parameteranpassung in Abschnitt 6.2.4 durchgeführt wurden. Die experimentell erfassten sowie die aus Simulationen bestimmten Kriechraten sind für die Proben 1, 2, 3 und 8 in *Abb. 6.24* dargestellt. Speziell um den Deformationsbeitrag der Korngrenzen besser vergleichen zu können, wurden zusätzliche Kriechsimulationen mit perfekten Korngrenzen, für welche weder Korngrenzengleiten noch Korngrenzenschädigung berücksichtigt wurden, durchgeführt. Eine genauere Analyse der Simulationsdaten offenbarte dabei, dass für die Gesamtkriechdeformationen, welche sich aus den Deformationen der Körner, Korngrenzengleiten und Korngrenzenaufdickung zusammensetzten, der Beitrag durch Korngrenzenaufdickung, welcher dem assoziierten Korngrenzenporenvolumen infolge der Schädigungsentwicklung entspricht, gegenüber den anderen Beiträgen vernachlässigbar klein war.

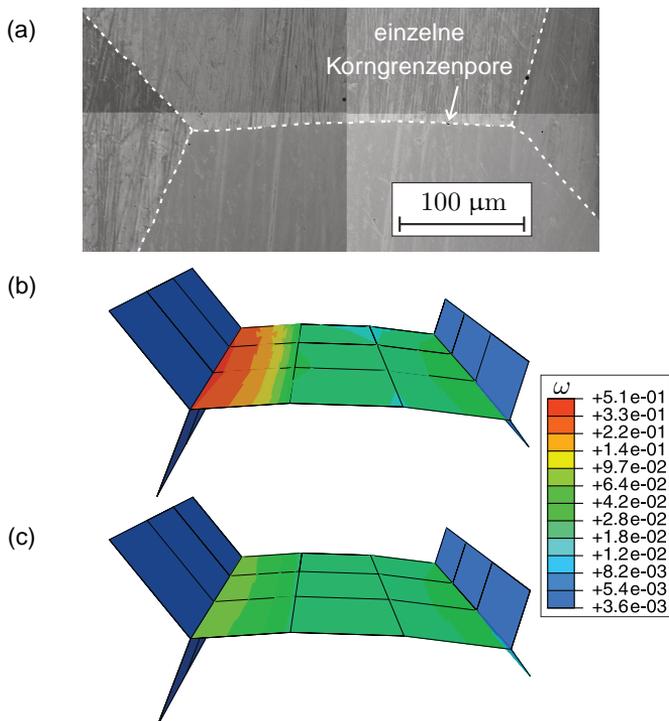


Abb. 6.23: (a) zeigt das Rückstreuелеktronenbild der mit B markierten Korngrenze in *Abb. 6.21* nach durchgeführtem Kriechversuch (Bildmaterial bereitgestellt durch das Institut für Werkstoffe der RUB). (b) und (c) zeigen jeweils für die Parametersätze COH-1 und COH-2 den geschädigten Flächenanteil ω (logarithmische Skala) für die in (a) betrachtete Korngrenze nach Beendigung der Simulationen.

Dies zeigt zum einen, dass eine Anpassung des Schädigungsverhaltens anhand von Deformationsmaßen keine Alternative zu der im vorangegangenen Abschnitt präsentierten Anpassung anhand von Porositätsdaten darstellt. Zum anderen zeigen die simulierten Kriechraten in *Abb. 6.24* deutlich, dass Korngrenzengleiten signifikant zu den Gesamtkriechdeformationen beitragen kann. So führte beispielsweise die Viskosität η_{KGG}^2 für Probe 1 annähernd zu einer Verdreifachung und für Probe 8 zu einer Verdopplung der Kriechraten gegenüber den jeweiligen Simulationen mit perfekten Korngrenzen.

Obwohl die experimentell erfassten Kriechraten der Cu-Sb-Proben zu keinem Zeitpunkt in die Anpassung von Parametern mit eingeflossen sind, so kann dennoch für die Proben 1 und 3 beobachtet werden, dass die Größenordnungen der experimentellen Kriechraten sehr gut mit den Kriechraten zusammenpassen, welche sich für die Viskosität η_{KGG}^1 aus den Simulationen ergeben. In diesem Sinne stützen die in *Abb. 6.24* dargestellten Ergebnisse

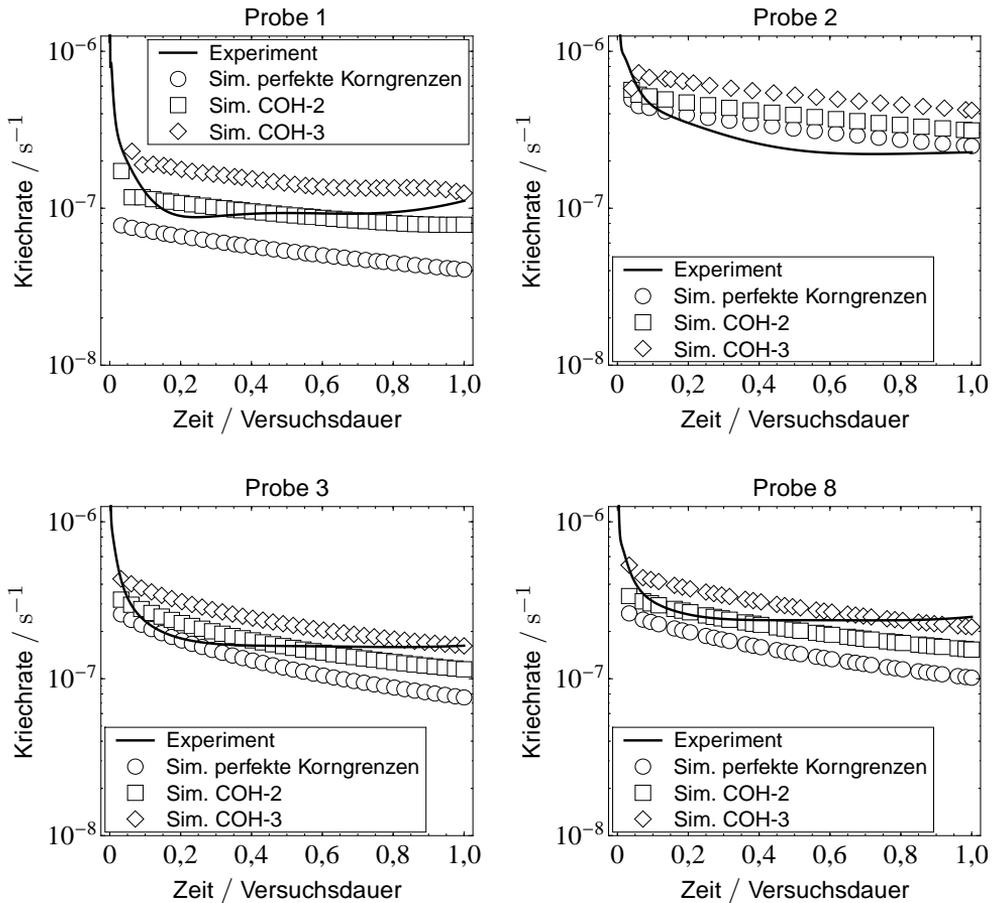


Abb. 6.24: Vergleichende Darstellungen der experimentell erfassten Kriechraten und der aus den Simulationen bestimmten Kriechraten für die Minikriechproben 1, 2, 3 und 8 (die experimentellen Kriechraten basieren auf den in *Abb. 6.6* dargestellten Kriechkurven).

die in Abschnitt 6.2.3 geäußerte Schlussfolgerung, dass die Korngrenzenviskosität für die untersuchte Cu-Sb-Legierung in der Größenordnung $\eta_{\text{KGG}} = 10^7 \text{ N s/mm}^3$ liegt.

Aus dem Vergleich von experimentellen und simulierten Kriechraten ist jedoch auch ersichtlich, dass die Dauer des primären Kriechbereiches, welcher durch eine abnehmende Kriechrate gekennzeichnet ist, durch das angepasste Polykristallmodell überschätzt wird. Da in *Abb. 6.24* die aus den Simulationen resultierenden Kurven stets einen sehr ähnlichen Verlauf für eine Probe aufweisen, und zwar unabhängig von der jeweiligen Modellierung der Korngrenzen, muss die Ursache für diese Überschätzung mit dem Deformationsverhalten der Körner in Zusammenhang stehen. In der Tat ist aus *Abb. 6.13* klar ersichtlich, dass die Kriechraten der am Institut für Werkstoffe der RUB getesteten Kupfereinkristallproben, welche für die Kalibrierung des konstitutiven Materialgesetzes in Abschnitt 6.2.1 genutzt wurden, innerhalb der gesamten Versuchszeiträume abnahmen.

Das unterschiedliche Deformationsverhalten von Kupfereinkristallproben und Cu-Sb-Proben ist wahrscheinlich auf zwei Ursachen zurückzuführen. Zum einen wird im Rahmen der Anwendung des kalibrierten Einkristallmodells zur Beschreibung der Cu-Sb-Proben ein möglicher Einfluss der polykristallinen Mikrostruktur auf das Materialverhalten der einzelnen Körner vernachlässigt. Dabei ist durchaus bekannt (siehe [Ber03]), dass Korngrenzen die Versetzungsbewegungen und folglich das Deformationsverhalten beeinflussen können. Zum anderen muss davon ausgegangen werden, dass, obwohl sich die Sb-Atome bevorzugt an den Korngrenzen anlagern, sich auch eine gewisse Menge an Sb in der Kupfermatrix löst. Die gelösten Fremdatome können dann zu einem Verfestigungseffekt führen, was bereits in [YN84b] als wahrscheinlicher Grund für niedrigere Kriechraten eines Cu-Sb-Werkstoffes gegenüber reinem Kupfer diskutiert wurde.

Eine Berücksichtigung derartiger Effekte, welche gegebenenfalls eine Erweiterung der Modellgleichungen erforderlich machen würden, erfolgt jedoch nicht im Rahmen der vorliegenden Arbeit, da der Fokus auf dem Einfluss und der Modellierung der Korngrenzen liegt.

Letztendlich erfordert die Anpassung der Materialparameter des Polykristallmodells aufgrund der betrachteten Deformations- und Schädigungsmechanismen mehr Information über das Werkstoffverhalten, als in einer einfachen Kriechkurve enthalten sind.

Die zusätzlichen Informationen sind zum einen nötig, um die Beiträge der einzelnen Deformationsmechanismen zu den Gesamtdeformationen zu erfassen. Entsprechende Informationen können beispielsweise durch die Quantifizierung von Korngrenzengleiten mittels DIC-Messungen gewonnen werden, so wie dies in Abschnitt 6.1.5 für die grobkörnige Cu-Sb-Legierung beschrieben wurde. Die Erfassung von Korngrenzengleiten kann aber auch durch andere Techniken erfolgen, beispielsweise durch mittels fokussierten Ionenstrahl an der Probenoberfläche aufgebrachtener Markierungen [KOKSM03] oder durch Auswertung der infolge von Korngrenzengleiten entstandenen Oberflächentopografie [KOKSM03].

Zum anderen wäre eine ausschließliche Anpassung der Schädigungsentwicklung mittels Kriechdehnungen problematisch, da das Wachstum von Korngrenzenporen nur wenig zu den Gesamtdeformationen beiträgt. Die Kombination von grobkörniger Mikrostruktur und kleinen Probenabmessungen hat sich daher als vorteilhaft erwiesen, da für jeden am Institut für Werkstoffe der RUB durchgeführten Kriechversuch sowohl die Korngrenzenschädigung als auch

das Auftreten von Korngrenzengleiten quantifiziert werden konnte. Dennoch sollten in Zukunft auch alternative Anpassungsstrategien entwickelt und getestet werden, so dass das Polykristallmodell mit vertretbarem Aufwand auch anhand von Kriechversuchen mit feinkörnigen Werkstoffen angepasst werden kann.

Speziell mit Blick auf die Beschreibung des Deformationsverhaltens wäre es vermutlich von Vorteil, wenn die Anpassung sämtlicher Parameter nur auf Basis der Kriechdaten eines polykristallinen Werkstoffes erfolgen könnte. In diesem Fall könnte auf zusätzliche Kriechversuche mit Einkristallproben verzichtet werden. Unter der Annahme, dass der Beitrag der Korngrenzenschädigung zu den Gesamtdeformationen vernachlässigbar ist, könnten beispielsweise die Gesamtdehnungen unter Berücksichtigung der zusätzlichen Informationen zum Korngrenzengleiten genutzt werden, um die Parameter des Einkristallmodells anzupassen. Da es sich dabei um die Lösung eines komplexeren inversen Problems handelt, müsste aber geprüft werden, inwiefern die resultierenden Parameter eindeutig sind.

Darüber hinaus sollte ebenfalls geprüft werden, ob für die Anpassung der Parameter des Porositätsmodells auch alternative Schädigungsdaten, wie beispielsweise der A -Parameter [Egg91; MLS92; LMS94], genutzt werden können. Dabei gilt: Je mehr alternative experimentelle Daten für die Anpassung der Modellparameter verwendet werden können, desto flexibler kann das Polykristallmodell für die Beschreibung des Kriechverhaltens von Werkstoffen eingesetzt werden.

7 Kriechschädigungsentwicklung in Polykristallen

In Abschnitt 6.2 wurden FE-Modelle, welche auf Basis der am Institut für Werkstoffe der RUB mittels EBSD-Messungen bestimmten Kornstrukturen erstellt wurden, genutzt, um das Kriechverhalten einer Cu-Sb-Legierung durch das in Abschnitt 5 präsentierte mikromechanische Polykristallmodell zu beschreiben. Aufgrund der im Vergleich zu den Probenabmessungen sehr groben Kornstruktur der Cu-Sb-Legierung, für welche sich einzelne Körner mitunter über den gesamten Probenquerschnitt erstreckten, erscheint die in Abschnitt 6.2.2 beschriebene Erstellung der FE-Modelle geeignet, um die wesentlichen Eigenschaften der Mikrostruktur abzubilden.

Die direkte Erfassung und anschließende Vernetzung von dreidimensionalen Kornstrukturen ist technisch ebenfalls möglich [SMCQSZ08; SMCQK09; SC11; SC12] und stellt eine Möglichkeit zur exakten Nachbildung von Mikrostrukturen dar. Dieser Weg der Modellerstellung ist aber durch die Verwendung von Synchrotronstrahlung sehr aufwendig und auf Proben mit kleinem Durchmesser begrenzt. Für größere Proben oder ganze Bauteile ist somit eine messtechnische Erfassung der Kornstruktur praktisch nicht durchführbar.

Dennoch kann in vielen Fällen eine Aussage oder eine Abschätzung bezüglich der charakteristischen Kennwerte einer Mikrostruktur (hierzu zählen beispielsweise der mittlere Korndurchmesser, die Anzahl direkt benachbarter Körner oder das Verhältnis von Kornoberfläche zu Kornvolumen) getroffen werden. Diese Informationen können dann genutzt werden, um künstliche Modelle einer Mikrostruktur zu generieren [GGUD08a; GGUD08b; SPHDCBB08]. Für gewöhnlich umfasst der modellierte Bereich dabei nur einen Ausschnitt des tatsächlichen Werkstoffgefüges. Oftmals können aber anhand von Modellen, welche nur eine geringe Anzahl an Körnern umfassen, bereits grundlegende Fragestellungen untersucht werden. Allerdings muss für derartige Modelle berücksichtigt werden, dass eine konkrete Mikrostruktur die resultierenden Ergebnisse beeinflussen kann. Erst durch die Betrachtung einer Vielzahl von Körnern, welche die wesentlichen Gefügemerkmale unabhängig von der jeweiligen Mikrostruktur abbilden, kann ein Modell als RVE angesehen werden.

Zur Erstellung entsprechender Modell wird dabei oft auf Voronoi-Strukturen zurückgegriffen [WA04; GGUD08b; FBS09; MN10; ZKBL12]. Diese können genutzt werden, um rechteckige Flächen oder quaderförmige Volumina zu unterteilen, wobei die resultierenden Strukturen der Voronoi-Zellen Ähnlichkeiten zu realen polykristallinen Mikrostrukturen aufweisen.

Im Folgenden soll das in Abschnitt 6.2 kalibrierte Polykristallmodell in Kombination mit künstlich generierten periodischen Voronoi-Modellen genutzt werden, um das Kriechverhalten von Polykristallen genauer zu untersuchen. In Abschnitt 7.1 wird dabei zunächst die Vorgehensweise bei der Erstellung entsprechender FE-Modelle beschrieben. Anschließend wird in Abschnitt 7.2 der Einfluss unterschiedlicher Vernetzungen auf die Simulationsergebnisse diskutiert. In Abschnitt 7.3 werden abschließend verschiedene Aspekte bei der Anwendung des Polykristallmodells zur Beschreibung des Kriechverhaltens anhand von ausgewählten Simulationen betrachtet.

7.1 Erzeugung von periodischen polykristallinen Finite-Elemente-Modellen

Um bei der Simulation des Kriechverhaltens mittels künstlicher Mikrostrukturen eine Beeinflussung der Ergebnisse durch Randeffekte zu vermeiden, empfiehlt sich die Verwendung von periodischen Kornstrukturen. Hierbei ergeben sich die am äußeren Rand eines FE-Modells aufzubringenden Verschiebungsrandbedingungen unmittelbar aus der periodischen Fortsetzung der Mikrostruktur. Für die Implementierung von periodischen Verschiebungsrandbedingungen ist es von Vorteil, wenn ein FE-Modell auf gegenüberliegenden äußeren Randflächen eine exakt gleiche Oberflächenvernetzung aufweist. Dies kann beispielsweise durch Anwendung der in [FBS09] präsentierten Vorgehensweise erreicht werden, bei welcher zuerst die Tripellinien, anschließend die Korngrenzen und zuletzt die Körner diskretisiert werden.

Vor der Erstellung eines FE-Modells muss jedoch zunächst die eigentliche periodische Mikrostruktur erzeugt werden. Im Folgenden sollen dabei periodische Voronoi-Strukturen betrachtet werden. Die Vorgehensweise bei der Erzeugung ist in vereinfachter Form für den zweidimensionalen Fall in *Abb. 7.1* skizziert.

In einem ersten Schritt wird eine Gruppe von Referenzpunkten innerhalb einer quaderförmigen Volumenzelle platziert. Die Randflächen der Volumenzelle entsprechen dabei der Form des späteren FE-Modells. Die Anordnung der Referenzpunkte innerhalb der Volumenzelle bestimmt letztendlich die resultierende Mikrostruktur. So führen beispielsweise clusterförmige Anordnungen typischerweise zu Inhomogenitäten bezüglich der Korngrößen. Um eine periodische Struktur zu erhalten, werden die Referenzpunkte der Volumenzelle in alle benachbarten Volumenzellen kopiert (periodische Fortsetzung). Anschließend wird unter Berücksichtigung aller Referenzpunkte, welche auch die kopierten Punkte umfassen, eine Zerlegung der ursprünglichen Volumenzelle in einzelne Voronoi-Zellen konstruiert.

Hierzu werden zunächst alle Mittelebenen zwischen jeweils zwei Referenzpunkten gebildet. Die Mittelebenen bilden zusammen mit den sechs Randflächen der ursprünglichen Volumenzelle die Begrenzungsflächen einzelner Voronoi-Zellen. Zur Festlegung der Geometrien werden alle Schnittpunkte von jeweils drei Begrenzungsflächen bestimmt, wobei im weiteren Ablauf nur jene Schnittpunkte berücksichtigt werden, die auf den Begrenzungsflächen ein konvexes Polygon mit minimalem Umfang bilden. Aufgrund der periodischen Fortsetzung der Referenzpunktanordnung ergeben sich auf jeweils gegenüberliegenden Randflächen der ursprünglichen Volumenzelle identische Polygone. Eine Voronoi-Zelle ist dann durch eine zu-

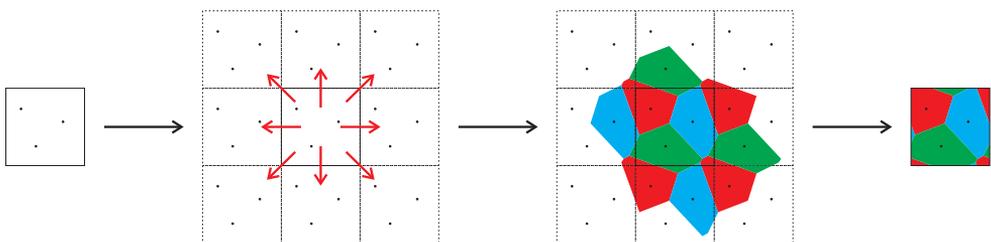


Abb. 7.1: Schematische Darstellung der Konstruktion einer periodischen Voronoi-Struktur.

sammenhängende konvexe Hülle mit minimaler Oberfläche definiert, welche sich stückweise aus einzelnen Polygonen zusammensetzt. Die Summe aller resultierenden Voronoi-Zellen entspricht schließlich wieder der ursprünglichen Volumenzelle.

Bevor eine Voronoi-Struktur durch Diskretisierung in ein FE-Modell überführt wird, werden noch besonders kurze Liniensegmente zu einem einzelnen Punkt reduziert. Dabei wird bei der Umsetzung darauf geachtet, dass die Struktur der Voronoi-Zellen auf gegenüberliegenden Randflächen der ursprünglichen Volumenzelle identisch bleibt. Für Polygone, welche durch diesen Bearbeitungsschritt betroffen sind und nicht auf den Randflächen liegen, führt dies dazu, dass die Liniensegmente nicht mehr exakt in einer Ebene liegen. Dennoch ist diese Anpassung der Voronoi-Struktur sinnvoll, da anderenfalls besonders kurze Liniensegmente zu extrem verzerrten Elementen führen können.

Für die Vernetzung der Voronoi-Zellen im Sinne der Vorgehensweise aus [FBS09] werden zuerst die einzelnen Liniensegmente der Polygone entsprechend einer angestrebten Elementkantenlänge in Unterabschnitte eingeteilt. Da ein Liniensegment stets Teil von mehreren Polygonen ist, muss dabei auf die Eindeutigkeit der Unterteilungen geachtet werden. Auf Basis der diskretisierten Liniensegmente kann für jedes Polygon unabhängig voneinander eine flächenhafte Dreiecksvernetzung erstellt werden. Ausgangspunkt ist dabei stets die aus den unterteilten Liniensegmenten bestehende Randkurve eines Polygons. Durch Anwendung einer deterministischen Vernetzungsstrategie, für welche aus unterschiedlich positionierten, aber gleich geformten Randkurven stets eine übereinstimmende Flächenvernetzung resultiert, kann sichergestellt werden, dass die Vernetzungen auf gegenüberliegenden äußeren Randflächen der Volumenzelle identisch sind.

Wie in *Abb. 7.2* dargestellt ist, beginnt die Vernetzung eines Polygons mit der Erstellung einer trivialen Startvernetzung, für welche ein einzelner Knoten im Zentrum des Polygons hinzugefügt wird und für alle Liniensegmente unter Einbeziehung des neuen Knotens Dreieckselemente definiert werden. Anschließend wird die Vernetzung durch sukzessive Anwendung verschiedener Optimierungsoperationen (siehe [FG00]) verbessert, wobei lokal eine Minimierung des kleinsten Dreiecksinnenwinkels sowie die Einstellung einer vorgegebenen Elementgröße angestrebt werden. Die zur Anwendung kommenden Optimierungsoperationen sind in

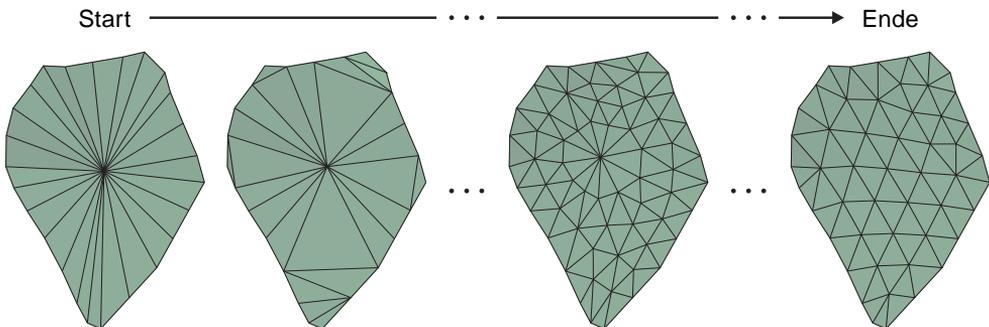


Abb. 7.2: Veranschaulichung der schrittweisen Erstellung einer Flächenvernetzung für ein Beispieldpolygon ausgehend von einer diskretisierten Randkurve.

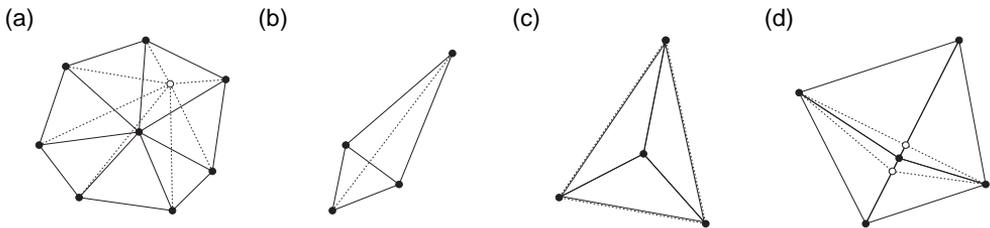


Abb. 7.3: Verwendete Optimierungsoperationen für eine räumliche Dreiecksvernetzung: (a) Neupositionierung von Knoten (engl. *smoothing*). (b) Austausch der gemeinsamen Kante zweier benachbarter Dreieckselemente (engl. *edge swapping*). (c) Unterteilung von zu großen Elementen. (d) Entfernen von zu kleinen Kanten. Die gestrichelten Linien und die nicht ausgefüllten Kreise stellen jeweils die Dreieckselemente und die Knoten vor einer Optimierungsoperation dar.

Abb. 7.3 skizziert und umfassen im Wesentlichen die Neupositionierung von Knoten (engl. *smoothing*), den Austausch der gemeinsamen Kante zweier benachbarter Dreieckselemente (engl. *edge swapping*), die Unterteilung von zu großen Elementen und das Entfernen von zu kleinen Kanten. Dabei wird die Umsetzung sämtlicher Operationen so gestaltet, dass die Diskretisierung der Randkurve stets erhalten bleibt und dass die Dreieckselemente nicht in einer Ebene liegen müssen. Letzteres ist eine Anforderung an die Vernetzungsstrategie, welche der oben beschriebenen Anpassung der Voronoi-Struktur und den resultierenden, nicht ebenen Polygonen Rechnung trägt. Für zukünftige Anwendungen ergibt sich daraus aber auch die Möglichkeit zur gezielten Vernetzung von polykristallinen Mikrostrukturen mit gekrümmten Korngrenzen. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass es sich in dem in Abb. 7.2 dargestellten Beispiel um ein nicht ebenes Polygon mit nicht konvexer Randkurve handelt. Die Optimierung einer Vernetzung wird schließlich beendet, wenn keine der möglichen Operationen zu einer weiteren Verbesserung beitragen kann. Dies ist für gewöhnlich der Fall, wenn, wie in Abb. 7.2 gezeigt, sich eine sehr gleichmäßige Vernetzung eingestellt hat.

Ausgehend von den vernetzten Polygonen kann für jede Voronoi-Zelle eine räumlich geschlossene Oberflächenvernetzung definiert werden. Ein Korn im FE-Modell kann dabei aufgrund der periodischen Fortsetzung der Mikrostruktur aus mehreren Voronoi-Zellen bestehen. Im anschließenden Arbeitsschritt wird das Programm NETGEN genutzt, um für jede Voronoi-Zelle unabhängig voneinander eine Tetraedervernetzung zu erzeugen, wobei die als Ausgangspunkt dienende Oberflächenvernetzung unverändert bleibt. Letzteres stellt beim folgenden Zusammenfügen der einzelnen Tetraedervernetzungen zum finalen polykristallinen FE-Modell sicher, dass die Vernetzungen der einzelnen Körner entlang der Korngrenzen und auch auf den jeweils gegenüberliegenden Randflächen der Volumenzelle identisch sind.

Trotz der oben beschriebenen Anpassung der Voronoi-Struktur beinhalten die resultierenden Vernetzungen einige stärker verzerrte Tetraederelemente. Oft treten diese am äußeren Rand der Volumenzelle auf, wenn eine Korngrenze unter spitzem Winkel eine Randfläche schneidet. Wie in [MN10] diskutiert, lässt sich dieser Umstand aufgrund der komplexen Geometrien dreidimensionaler Voronoi-Strukturen kaum vermeiden. Eine Beeinflussung der Simulationsergebnisse durch stärker verzerrte Tetraederelemente konnte jedoch im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht festgestellt werden.

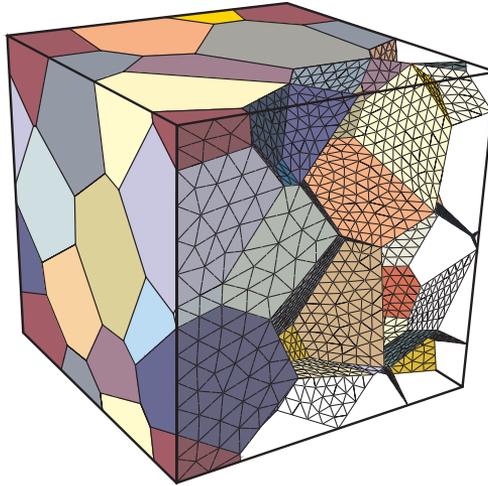


Abb. 7.4: Fertig vernetztes FE-Modell einer aus 16 Körnern bestehenden Mikrostruktur, welche auf einer periodischen Voronoi-Struktur basierte.

Im letzten Schritt wird schließlich auf automatisiertem Wege ein vollständiges FE-Modell erstellt, wobei wahlweise lineare oder quadratische Tetraederelemente verwendet werden können. Im Falle der quadratischen Tetraederelemente muss die Vernetzung um zusätzliche Knoten entsprechend der Elementdefinition erweitert werden. Zur Verknüpfung jeweils zweier benachbarter Körner werden entlang der Korngrenze kohäsive Elemente zwischen den Knoten der identischen Oberflächenvernetzungen aufgespannt. In *Abb. 7.4* ist beispielhaft ein aus 16 Körnern bestehendes FE-Modell abgebildet, wobei einige Teile der Tetraedervernetzung ausgeblendet wurden, um den Verlauf der Korngrenzen zu zeigen. Da der Standardumfang des FE-Programmes Abaqus zum gegenwärtigen Zeitpunkt keine zu quadratischen Tetraederelementen kompatiblen kohäsiven Elemente beinhaltet, werden, wie in *Abb. 7.5* schematisch dargestellt, vier lineare kohäsive Elemente zwischen den sechs Knoten einer Seitenfläche platziert. Obwohl die Deformationsbeschreibungen von linearen und qua-

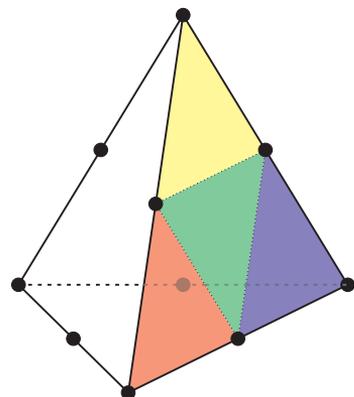


Abb. 7.5: Anordnung von vier linearen kohäsiven Elementen (rot, grün, blau und gelb) zwischen den Knoten eines quadratischen Tetraederelements entlang einer Seitenfläche.

dratischen Elementen streng genommen inkompatibel sind, konnte keine negative Beeinflussung der Simulationsergebnisse durch diese Vorgehensweise festgestellt werden. Darüber hinaus kann auf den Einsatz der in Abschnitt 5.3.1 beschriebenen CDJ-Technik zur verbesserten geometrischen Beschreibung gekrümmter Grenzflächen verzichtet werden, da die aus der oben beschriebenen Anpassung der Voronoi-Struktur resultierenden leicht gekrümmten Korngrenzen ebenfalls keinen Einfluss auf die Simulationsergebnisse erkennen ließen.

Aufgrund der identischen Oberflächenvernetzungen können entlang der äußeren Randflächen der Volumenzelle jeweils gegenüberliegende Knotenpaare identifiziert werden. Durch Definition von jeweils drei Zwangsbedingungen pro Knotenpaar werden schließlich periodische Randverschiebungen an den äußeren Rändern realisiert. Die Zwangsbedingungen können für ein Knotenpaar in vektorieller Form durch

$$\mathbf{0} = \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- - \mathbf{E} \cdot (\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-) \quad (7.1)$$

ausgedrückt werden, worin \mathbf{u}^- und \mathbf{u}^+ die Verschiebungsvektoren der beiden Knoten, \mathbf{x}^- und \mathbf{x}^+ die Ortsvektoren zu den Knoten in der Ausgangskonfiguration und \mathbf{E} der makroskopische Dehnungstensor der Volumenzelle sind. Die Kennzeichnungen $-$ und $+$ stehen dabei für die jeweilige Zugehörigkeit zu den gegenüberliegenden äußeren Randflächen. Die sechs makroskopischen Deformationsfreiheitsgrade, welche durch die Komponenten von \mathbf{E} beschrieben werden, können dabei durch die Verschiebungen zweier zusätzlich eingefügter Knoten, welche nur über die Zwangsbedingungen mit dem übrigen Modell verbunden sind, modelliert werden.

Für die Knotenpaare entlang der Volumenzellenkanten ist zudem zu beachten, dass diese jeweils zu vier Randflächen gehören. Für die Eckpunkte der Volumenzelle müssen schließlich alle sechs Randflächen berücksichtigt werden. Das Aufbringen von Belastungen erfolgt durch die Definition von Oberflächenlasten in Form eines Spannungsvektors pro Randfläche, wobei die auf gegenüberliegenden Randflächen aufgebrachten Belastungen im Gleichgewicht miteinander sein müssen.

7.2 Einfluss der Vernetzung auf Simulationsergebnisse

Für die in Abschnitt 6.2 beschriebenen FE-Modelle wurde bewusst versucht, die Vernetzungseinheiten möglichst klein zu halten, um durch den minimierten Berechnungsaufwand die Durchführung der Simulationen innerhalb von Optimierungsschleifen zu beschleunigen. Diese Vorgehensweise erscheint akzeptabel, da die in [Kia12] durchgeführten Simulationen, welche gegenüber den FE-Modellen in Abschnitt 6.2 feiner vernetzt waren, darauf hindeuteten, dass eine gröbere Vernetzung die Simulationsergebnisse nur in begrenztem Maße beeinflusst. Die in [Kia12] durchgeführten Simulationen berücksichtigten allerdings keine Schädigungsentwicklung an den Korngrenzen.

In den beiden folgenden Abschnitten werden die Auswirkungen unterschiedlicher Vernetzungen anhand von zwei Beispielfällen genauer diskutiert, wobei der Fokus insbesondere auf der Entwicklung der Korngrenzenschädigung liegt. In Abschnitt 7.2.1 wird zunächst eine idealisierte hexagonale Kornstruktur betrachtet. Diese eignet sich gegenüber einer komple-

den dreidimensionalen Voronoi-Struktur besser, um grundlegende Vernetzungseinflüsse zu untersuchen. Anschließend werden in Abschnitt 7.2.2 für eine aus 16 Körnern bestehende Voronoi-Struktur, für welche mittels der in Abschnitt 7.1 beschriebenen Vorgehensweise unterschiedlich fein vernetzte FE-Modelle erstellt wurden, weitere Vernetzungsaspekte diskutiert.

7.2.1 Idealisierte hexagonale Kornstruktur

Aufgrund der bestehenden Symmetrien ist es für die Betrachtung einer idealen hexagonalen Kornstruktur ausreichend, wenn ein FE-Modell nur für einen Ausschnitt aus der gesamten Mikrostruktur erstellt wird. In Abb. 7.6a ist eine aus sieben identisch geformten Sechsecken bestehende Kornstruktur abgebildet. Der durch das gestrichelte Rechteck markierte Bereich kennzeichnet dabei den zu modellierenden Ausschnitt, welcher zwei Viertelkörner, eine schräg verlaufende vollständige Korngrenze und zwei horizontal verlaufende halbe Korngrenzenabschnitte umfasst. In Abb. 7.6b sind der Aufbau eines FE-Modells sowie die verwendeten Verschiebungsrandbedingungen und Zwangsbedingungen skizziert. Die Elementierung wird dabei so gewählt, dass die Korngrenzen gleichmäßig unterteilt und die Vernetzungen der beiden Viertelkörner in der Nähe der Korngrenzen feiner sind.

Die Umsetzung der Symmetrierandbedingungen an den Rändern der Körner kann dabei jeweils durch einfache Verschiebungsrandbedingungen bzw. durch einzelne Zwangsbedingungen realisiert werden. Für die Symmetriebedingungen an den beiden horizontalen Korngrenzen

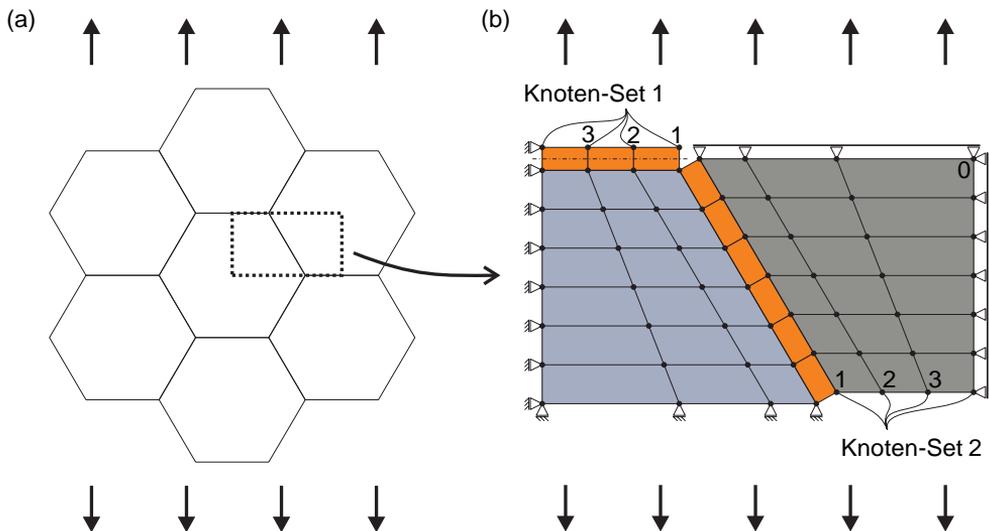


Abb. 7.6: (a) Abbildung einer aus sieben identisch geformten Sechsecken bestehenden Kornstruktur. Der aufgrund der geometrischen Symmetrien zu modellierende Bereich ist durch das gestrichelte Rechteck markiert. (b) Skizzierter Aufbau eines FE-Modells, welches für den in (a) markierten Bereich zu erstellen ist. In orange sind die deformierten kohäsiven Elemente entlang der Korngrenzen dargestellt.

Tab. 7.1: Auflistung von Kennzahlen, welche die Vernetzungseinheiten für die erstellten FE-Modelle mit hexagonaler Kornstruktur veranschaulichen.

Modellbezeichnung	H8x8	H16x16	H32x32	H64x64	H128x128	H256x256
Gesamtknoten	190	630	2 278	8 646	33 670	132 870
C3D8-Elemente	64	256	1 024	4 096	16 384	65 536
COH3D8-Elemente	12	24	48	96	192	384
Anzahl an Gleichungen	432	1 492	5 532	21 292	83 532	330 892

zenabschnitten muss hingegen eine gesonderte Betrachtung der Verschiebungen erfolgen, da für den betrachteten Ausschnitt aus der Kornstruktur die Symmetrielinien mit den Korngrenzenabschnitten zusammenfallen. Wie in *Abb. 7.6b* gezeigt ist, werden nur entlang des oberen horizontalen Korngrenzenabschnitts kohäsive Elemente platziert. Hierzu ist die Definition zusätzlicher Knoten, welche in *Abb. 7.6b* als Knoten-Set 1 markiert sind, erforderlich.

Die Freiheitsgrade dieser zusätzlichen Knoten werden dann mit den Verschiebungen des Knoten-Sets 2 am unteren horizontalen Korngrenzenabschnitt in Verbindung gesetzt. Aufgrund der Symmetrien in der Kornstruktur besteht für jeden Knoten aus Knoten-Set 1 eine Beziehung zu einem Knoten aus Knoten-Set 2. Die jeweils zusammengehörigen Knoten sind in *Abb. 7.6b* durch die Bezeichnungen 1, 2 und 3 markiert. Unter Einbeziehung der absoluten Verschiebung des rechten Viertelnkorns, welche durch die Verschiebung des Knotens in der rechten oberen Ecke (markiert durch eine 0) gegeben ist, können für jedes Knotenpaar geeignete Zwangsbedingungen implementiert werden. Diese gewährleisten dann die Kontinuität der Verschiebungen bezüglich der idealen hexagonalen Kornstruktur.

Für die im Folgenden präsentierten Simulationen wurden durch Extrusion senkrecht zum betrachteten Ausschnitt aus der Kornstruktur dreidimensionale FE-Modelle erstellt. Dabei wurde lediglich ein Element in Dickenrichtung verwendet, für welches die Elementdicke in Abhängigkeit von der Vernetzungseinheit jeweils so angepasst wurde, dass keine stark gestreckten Elemente entstanden. Die Verschiebungen in Dickenrichtung wurden ebenfalls durch Symmetrierandbedingungen modelliert.

Um Vernetzungseinflüsse untersuchen zu können, wurden FE-Modelle mit verschiedenen

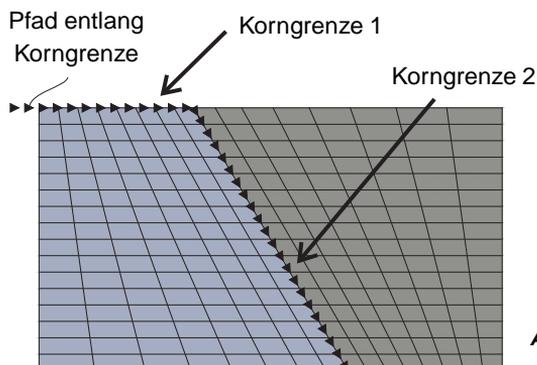


Abb. 7.7: Erstellte Vernetzung für das FE-Modell H16x16 (siehe auch Tab. 7.1).

Tab. 7.2: Übersicht über die Materialparameter für das Einkristallmodell und das Kohäsionsmodell, welche aus den in Abschnitt 6.2 durchgeführten Anpassungen zur Beschreibung des Kriechverhaltens einer Cu-Sb-Legierung bei einer absoluten Temperatur von 823 K resultieren.

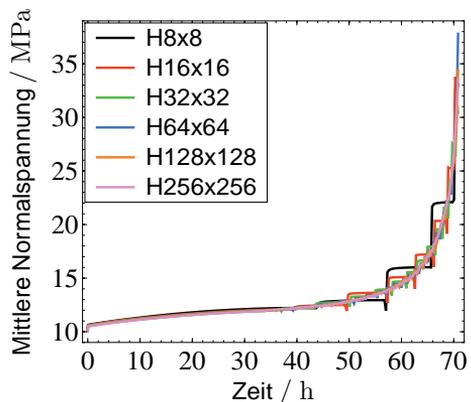
Einkristallmodell	$C_{11} = 148 \text{ GPa}, C_{12} = 112 \text{ GPa}, C_{44} = 62 \text{ GPa},$ $n = 8, 42, K = 24, 9 \text{ MPa}, R_0 = 0, 064 \text{ MPa},$ $Q = 11, 8 \text{ MPa}, b = 5, 99$
Kohäsionsmodell	$\psi = 70^\circ, a_{\text{init}} = 1 \text{ }\mu\text{m}, \gamma_S = 1, 78 \text{ J m}^{-2}, E_{\text{Inter}} = 111, 883 \text{ GPa},$ $\beta_0 = 10^{-4}, \rho_0 = 10^3 \text{ mm}^{-2},$ $\sigma_P = 42 \text{ GPa}, b_P = 1, \tilde{D}_{\text{KGG}} = 1, 2143 \times 10^{-14} \text{ mm}^5 \text{N}^{-1} \text{s}^{-1},$ $a_P = 2, 6677 \times 10^2 \text{ mm}^{-2} \text{s}^{-1}, \eta_{\text{KGG}} = 3, 85 \times 10^7 \text{ mm}^{-3} \text{N s}$

Vernetzungseinheiten erstellt. Der betrachtete rechteckige Ausschnitt wurde dabei stets auf eine Größe von $3 \times \sqrt{3} \text{ mm}$ skaliert. In Tab. 7.1 sind die wichtigsten Eckdaten der FE-Modelle sowie die zugehörigen Bezeichnungen, welche sich aus den jeweils verwendeten Anzahlen an Kontinuumselementen ergeben, zusammengetragen. In Abb. 7.7 ist exemplarisch die für das Modell H16x16 erstellte Vernetzung abgebildet.

Für die Beschreibung des Materialverhaltens wurde beiden Viertelkörnern die gleiche Kristallorientierung zugeordnet, wobei die drei Kristallgitterrichtungen senkrecht zu den drei Symmetrieebenen des FE-Modells ausgerichtet waren. Weiterhin wurden für das Einkristallmodell die in Abschnitt 6.2.1 präsentierten vorgewählten elastischen Konstanten C_{11} , C_{12} und C_{44} sowie der angepasste Parametersatz MP111 aus Tab. 6.3 genutzt. Das physikalische Verhalten der Korngrenzen wurde entsprechend dem mikromechanischen Kohäsionsmodell durch die in Abschnitt 6.2.4 vorgewählten Parameter ψ , a_{init} , γ_S und E_{Inter} , die ebenfalls in Abschnitt 6.2.4 bestimmten Anfangswerte β_0 und ρ_0 und den Parametersatz COH-2 aus Tab. 6.6 beschrieben. Der Übersicht halber sind die verwendeten Parameter noch einmal in Tab. 7.2 zusammengestellt.

Für die hier präsentierten Simulationen ist ausschließlich eine konstante äußere Zugbeanspruchung von 10 MPa senkrecht zu den horizontalen Korngrenzen betrachtet worden. Für eine konstante Zugbelastung parallel zu den horizontalen Korngrenzen ergeben sich qua-

Abb. 7.8: Zeitliche Entwicklungen der auf Korngrenze 1 (siehe Abb. 7.7) einwirkenden mittleren Normalspannung für die mit den in Tab. 7.1 aufgelisteten FE-Modellen durchgeführten Simulationen.



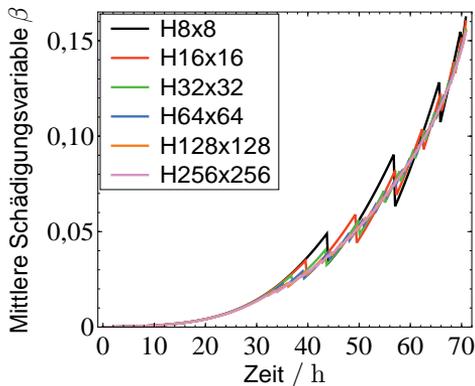


Abb. 7.9: Zeitliche Entwicklungen für die mittlere Schädigungsvariable β auf Korngrenze 1.

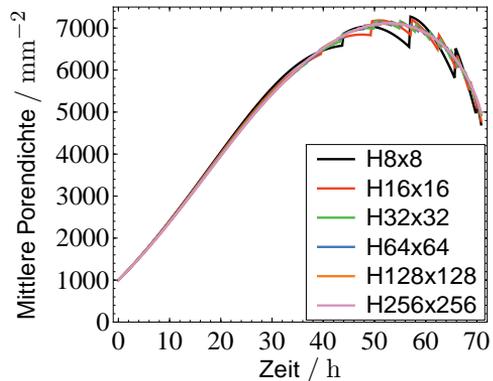


Abb. 7.10: Zeitliche Entwicklungen für die mittlere Porendichte ρ auf Korngrenze 1.

lativ vergleichbare Ergebnisse, welche aber durch die unterschiedlich orientierten Korngrenzen geprägt sind. Alle Simulationen wurden beim Erreichen einer Simulationszeit von $2,55 \times 10^5$ s, für welche Korngrenze 1 kurz vor dem vollständigen Versagen war, beendet.

In *Abb. 7.8* sind die zeitlichen Verläufe der auf Korngrenze 1 einwirkenden mittleren Normalspannung dargestellt, welche sich jeweils für die in *Tab. 7.1* aufgelisteten FE-Modelle ergaben. Weiterhin sind die gemittelten Werte der beiden Schädigungsvariablen β und ρ auf Korngrenze 1 in Abhängigkeit von der Simulationszeit in *Abb. 7.9* und *Abb. 7.10* abgebildet. Es sei darauf hingewiesen, dass die in *Abb. 7.8*, *Abb. 7.9* und *Abb. 7.10* dargestellten Mittelwerte sich immer auf die noch nicht vollständig geschädigte Fläche¹ von Korngrenze 1 beziehen.

Für die in *Abb. 7.8*, *Abb. 7.9* und *Abb. 7.10* dargestellten Größen ist zu beobachten, dass bis zu einer Simulationszeit von ungefähr 32 h die Verläufe aller Kurven unabhängig von der jeweiligen Vernetzung gut übereinstimmen. Im weiteren Simulationsverlauf zeigen die Kurvenverläufe weiterhin ein übereinstimmendes Verhalten, jedoch ergeben sich speziell für die grob vernetzten FE-Modelle Sprünge in den zeitlichen Entwicklungen. Die Ursache dieser Sprünge liegt im lokalen Versagen einzelner Integrationspunkte, welches im Rahmen des Kohäsionsmodells unmittelbar mit dem Erreichen eines geschädigten Flächenanteils von $\omega = 50$ % eintritt. Da ein vollständig geschädigter Integrationspunkt von einem auf den nächsten Moment keine Kräfte mehr überträgt und auch nicht mehr in die Berechnung der in *Abb. 7.8*, *Abb. 7.9* und *Abb. 7.10* dargestellten Mittelwerte eingeht, kommt es zu den beobachteten Sprüngen in den Kurvenverläufen. Diese sind umso ausgeprägter, je größer die mit einem Integrationspunkt assoziierte Korngrenzenlänge ist. Letztere nimmt mit zunehmender Vernetzungseinheit entsprechend ab.

¹Innerhalb einer polykristallinen Mikrostruktur ergibt sich die vollständig geschädigte Korngrenzenfläche aus der Summe aller Korngrenzenbereiche, welche infolge der voranschreitenden Korngrenzenschädigung vollständig versagen und einen Korngrenzenriss oder -anriss bilden. Im Rahmen der FE-Simulationen werden diese Bereiche durch jene Integrationspunkte der kohäsiven Elemente gebildet, für welche $\omega \geq 0,5$ gilt (siehe Abschnitt 5.2.2).

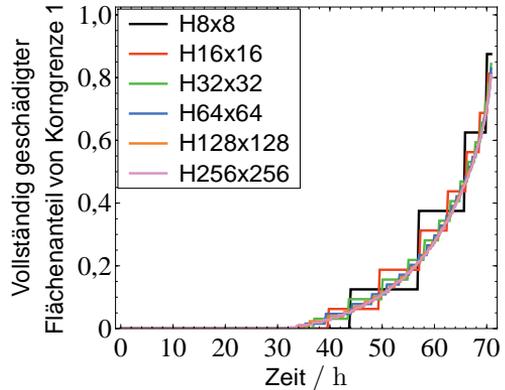


Abb. 7.11: Zeitliche Entwicklungen des vollständig geschädigten Flächenanteils von Korngrenze 1.

Weiterhin ist aus der Entwicklung des vollständig geschädigten Flächenanteils von Korngrenze 1, welcher für die FE-Modelle in *Abb. 7.11* dargestellt ist, zu erkennen, dass das lokale Versagen von Integrationspunkten für die feineren Vernetzungen früher beginnt. Während es für das FE-Modell H256x256 nach ungefähr 32 h zum Versagen des ersten Integrationspunktes kommt, tritt das erste Versagen eines Integrationspunktes im FE-Modell H8x8 erst nach ca. 42 h ein.

Es sei an dieser Stelle ausdrücklich darauf hingewiesen, dass es sich bei dem geschädigten Flächenanteil ω und dem vollständig geschädigten Flächenanteil einer Korngrenze um zwei verschiedene Größen handelt. Während Ersterer ein Maß für die Porosität einer Korngrenze ist, beschreibt Letzterer das Ausmaß an Schädigung durch Korngrenzenrisse.

Für den vollständig geschädigten Flächenanteil von Korngrenze 1 ist zu beobachten, dass, wie bereits für die mittlere Normalspannung und die mittleren Schädigungsvariablen festgestellt werden konnte, der Trend der zeitlichen Entwicklung für alle Vernetzungen übereinstimmend abgebildet wird (siehe *Abb. 7.11*). Dabei ergeben sich speziell für die gröber vernetzten FE-Modelle ausgeprägte stufenförmige Verläufe, welche aus den begrenzten räumlichen Auflösungen dieser Vernetzungen resultieren. Letzteres scheint jedoch keinen wesentlichen Einfluss auf die Entwicklung des vollständig geschädigten Flächenanteils zu haben.

Während die zeitlichen Entwicklungen der über eine Korngrenze gemittelten Größen für die betrachteten FE-Modelle ein übereinstimmendes Bild ergeben, kann ein Einfluss der Vernetzungsfeinheit bezüglich der lokalen Verteilungen von Spannungen und Schädigungsvariablen beobachtet werden. In *Abb. 7.12* und *Abb. 7.13* sind jeweils die lokalen Normalspannungen entlang der Korngrenzen 1 und 2 nach einer Simulationszeit von 15,09 h dargestellt, was ungefähr der halben Zeit bis zum ersten lokalen Versagen eines Integrationspunktes im FE-Modell H256x256 entspricht. Dabei zeigt sich, dass je feiner die Vernetzung eines FE-Modells ist, desto höher sind die sich einstellenden Spannungskonzentrationen am Tripelpunkt, wo Korngrenze 1 und Korngrenze 2 zusammentreffen. Speziell für das am größten vernetzte FE-Modell (H8x8) ist zu beobachten, dass im Vergleich mit den anderen FE-Modellen die Spannungskonzentration unmittelbar am Tripelpunkt von Korngrenze 1 am niedrigsten ist (siehe *Abb. 7.12*). Stattdessen kommt es zu einer Erhöhung der Normalspannungen in Bereichen von Korngrenze 1, welche sich etwas weiter entfernt vom Tripelpunkt befinden.

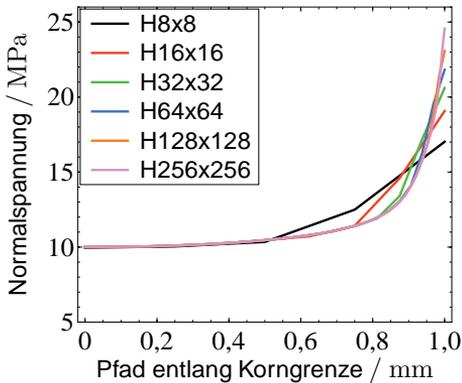


Abb. 7.12: Lokale Verteilungen der Normalspannung entlang von Korngrenze 1 nach einer Simulationszeit von 15,09 h.

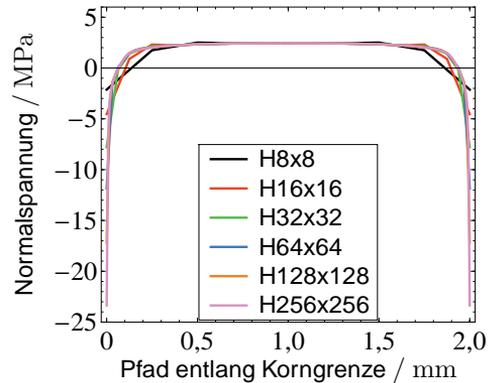


Abb. 7.13: Lokale Verteilungen der Normalspannung entlang von Korngrenze 2 nach einer Simulationszeit von 15,09 h.

Die Ursache für diese Spannungskonzentrationen sind im Wesentlichen Spannungsumlagerungen infolge von Korngrenzengleiten. Da die für die Simulationen verwendete Korngrenzenviskosität $\eta_{\text{KGG}} = 3,85 \times 10^7 \text{ mm}^{-3} \text{Ns}$ eine ausgesprochen schnelle Relaxation der auf Korngrenze 2 einwirkenden Tangentialspannungen bewirkt, kommt es im Rahmen der Modellbildung zu einem Verhalten, welches der Spannungssingularität an einem durch Scherung belasteten Riss ähnelt. Während die Zugspannungskonzentrationen im weiteren Simulationsverlauf sowohl durch Korngrenzenschädigung als auch durch die Deformationen der Körner reduziert werden, können Druckspannungskonzentrationen, deren Intensitäten mit zunehmender Simulationszeit ansteigen, in ihrer Entwicklung nur durch die Deformationen der Körner abgeschwächt werden. Ein umfassender Abbau der Druckspannungskonzentrationen erfolgt dabei jedoch nicht. Letzteres kann zur Entstehung von unnatürlich hohen Druckspannungen in der unmittelbaren Nähe von Tripelpunkten bzw. Tripellinien führen. Hierdurch konnte aber keine signifikante Beeinflussung des Deformations- oder Schädigungsverhaltens festgestellt werden. Zwar kommt es bei einer Entlastung zu einem raschen Abbau von Spannungskonzentrationen innerhalb der FE-Modelle, eine vollständige Verhinderung der Spannungskonzentrationen ist jedoch nur durch die Unterdrückung von Korngrenzengleiten möglich.

Die vernetzungsabhängigen Unterschiede in den lokalen Verteilungen der Normalspannungen an Korngrenze 1 wirken sich dabei auch auf die lokalen Verteilungen der entstehenden Korngrenzenschädigungen aus. In *Abb. 7.14* und *Abb. 7.15* sind die lokalen Werte der beiden Schädigungsvariablen entlang von Korngrenze 1 nach einer Simulationszeit von 15,09 h dargestellt. Aus dem Vergleich mit *Abb. 7.12* ist gut zu erkennen, dass die Entwicklungen von β und ρ mit den Verteilungen der lokalen Normalspannungen in Verbindung stehen. Genauer gesagt führen die Zugspannungskonzentrationen für die feiner vernetzten FE-Modelle zu einer stärkeren Schädigung in der unmittelbaren Nähe des Tripelpunktes, während für die gröber vernetzten FE-Modelle eine Verlagerung der Schädigung in weiter vom Tripelpunkt entfernte Bereiche zu beobachten ist.

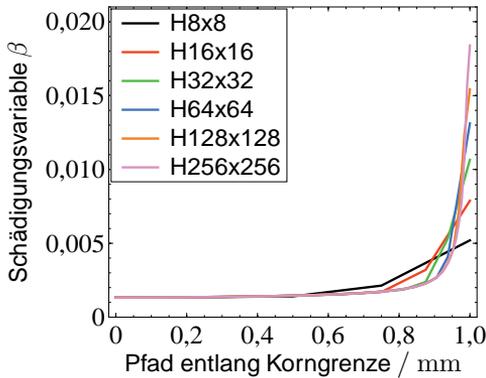


Abb. 7.14: Lokale Verteilungen der Schädigungsvariable β entlang von Korngrenze 1 nach einer Simulationszeit von 15,09 h.

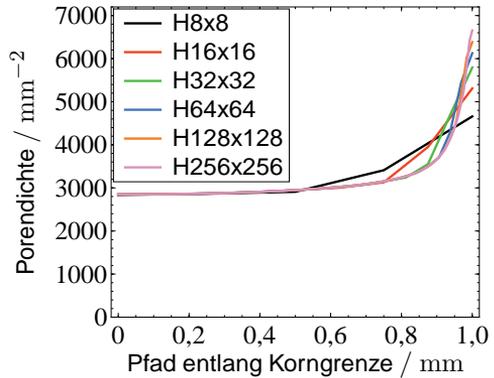


Abb. 7.15: Lokale Verteilungen der Porendichte ρ entlang von Korngrenze 1 nach einer Simulationszeit von 15,09 h.

Wie aber bereits festgestellt wurde, haben diese lokalen Unterschiede in den Schädigungsentwicklungen keinen signifikanten Einfluss auf die zeitlichen Entwicklungen der Mittelwerte (siehe *Abb. 7.9* und *Abb. 7.10*). Auch ist aus den Entwicklungen der vollständig geschädigten Flächenanteile (siehe *Abb. 7.11*) keine Beeinflussung des Aufreißens von Korngrenze 1, welches letztendlich das finale Versagen der Kornstruktur einleitet, ersichtlich. Letzteres ist eine wichtige Voraussetzung für das im folgenden Abschnitt abgeleitete makroskopische Versagenskriterium für eine polykristalline Mikrostruktur.

7.2.2 Periodische Voronoi-Struktur

Während bei den im vorangegangenen Abschnitt präsentierten Simulationen das Hauptaugenmerk einzelnen Korngrenzen galt, liegt der Fokus der im Rahmen dieses Abschnitts durchgeführten Simulationen auf dem makroskopischen Deformations- und Schädigungsverhalten einer gesamten Kornstruktur. Anhand der resultierenden Ergebnisse werden dabei die Einflüsse der Vernetzungseinheit und unterschiedlicher Elementtypen diskutiert. Darüber hinaus sollen die Ergebnisse auch als Grundlage dienen, um eine anzustrebende Vernetzungseinheit abzuschätzen, welche für die Erstellung von FE-Modellen genutzt werden soll.

Mit diesen Zielen wurde eine aus 16 Körnern bestehende periodische Mikrostruktur betrach-

Tab. 7.3: Auflistung von Kennzahlen, welche die Vernetzungseinheiten für die erstellten FE-Modelle mit der aus 16 Körnern bestehenden periodischen Mikrostruktur veranschaulichen.

Modellbezeichnung	16K-1	16K-2	16K-3	16K-4	16K-5
Gesamtknoten	12 885	26 686	51 813	106 208	216 940
C3D10M-Elemente	4 274	9 102	18 010	38 674	79 865
COH3D6-Elemente	3 416	6 604	12 216	20 340	39 396
Anzahl an Gleichungen	23 298	47 757	92 514	187 983	383 232

tet, welche mittels der in Abschnitt 7.1 beschriebenen Vorgehensweise erstellt wurde. Die 16 Referenzpunkte, welche die Grundlage für die Konstruktion der periodischen Voronoi-Struktur bildeten, wurden dabei zufällig in der betrachteten würfelförmigen Volumenzelle mit Kantenlänge $756 \mu\text{m}$ positioniert. Die resultierende Kornstruktur wurde bereits in Abschnitt 5.3 als Beispiel für eine künstlich erzeugten Kornstruktur präsentiert (siehe *Abb. 5.3c*).

Für die Kornstruktur wurden FE-Modelle mit verschiedenen Vernetzungseinheiten erstellt, wobei die für das Programm Abaqus verfügbaren und als numerisch robuster geltenden quadratischen Tetraederelemente vom Typ C3D10M für die Modellierung der Körner verwendet wurden. In *Tab. 7.3* sind die wichtigsten Eckdaten der FE-Modelle sowie die zugehörigen Bezeichnungen zusammengetragen. In *Abb. 7.16* sind stellvertretend für die fünf erstellten FE-Modelle die Vernetzungen der Modelle 16K-1 und 16K-3 abgebildet.

Es sei darauf hingewiesen, dass aufgrund der geringen Anzahl an Körnern kein makroskopisch homogenes Verhalten für die betrachtete Kornstruktur zu erwarten ist. Die 16 Körner umfassende Mikrostruktur kann somit als eine spezielle von vielen möglichen Kornstrukturen betrachtet werden. Da sich Vernetzungseinflüsse aber unabhängig von einer konkreten Kornstruktur auswirken, stellt dieser Umstand keinen Nachteil für die durchgeführten Untersuchungen dar.

Für die Beschreibung des Materialverhaltens wurde jedem Korn eine zufällige Kristallorientierung zugeordnet. Die resultierende Textur muss ebenfalls als eine spezielle von vielen möglichen Texturen angesehen werden. Darüber hinaus wurden für die Durchführung von Simulationen die bereits im vorangegangenen Abschnitt verwendeten Materialparameter, welche in *Tab. 7.2* aufgelistet sind, genutzt. Für alle hier präsentierten Simulationen wurde ausschließ-

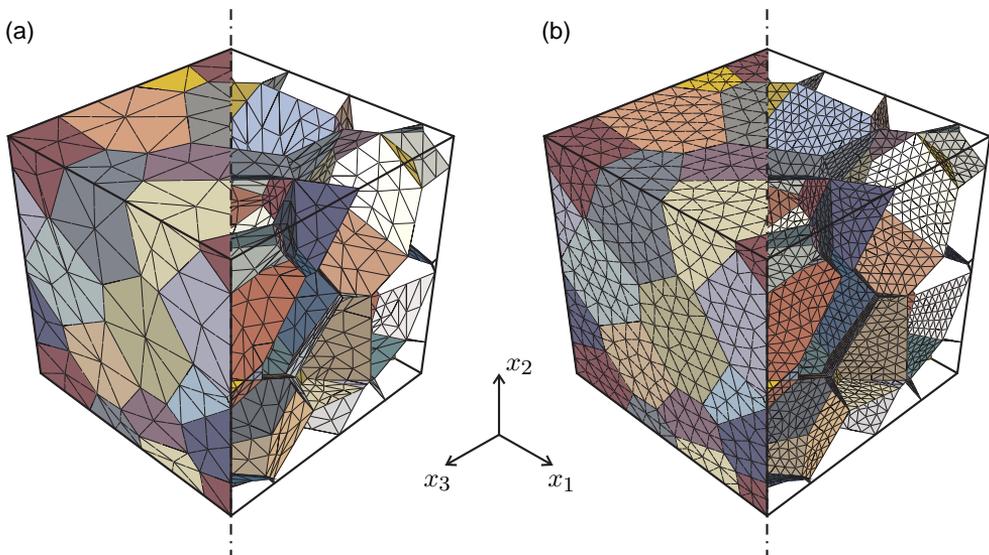


Abb. 7.16: (a) und (b) zeigen die Vernetzungen der FE-Modelle 16K-1 und 16K-3 (siehe *Tab. 7.3*). In den rechten Hälften der beiden Abbildungen wurden jeweils die Körner ausgeblendet, um die kohäsiven Elemente entlang der Korngrenzen sichtbar zu machen.

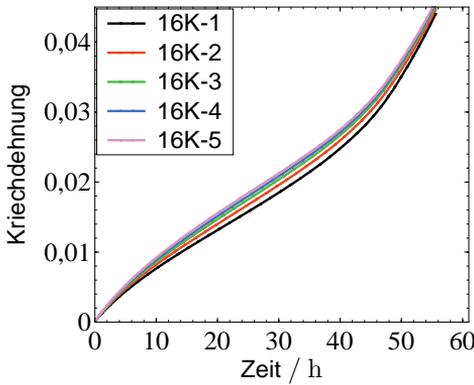


Abb. 7.17: Darstellung der zeitlichen Entwicklungen der Kriechdehnung in Zugrichtung für die mit den in Tab. 7.3 aufgelisteten FE-Modellen durchgeführten Simulationen.

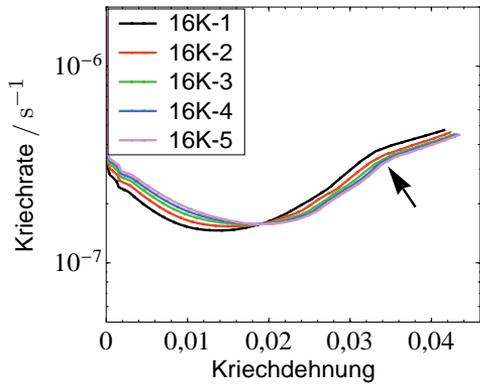


Abb. 7.18: Darstellung der Kriechraten in Abhängigkeit von den Kriechdehnungen für die in Abb. 7.17 betrachteten Simulationen. Ab der durch den Pfeil gekennzeichneten Stelle steigen die simulierten Kriechraten in Abhängigkeit von den Kriechdehnungen weniger stark an.

lich eine einachsige Zugbelastung mit 10 MPa parallel zu der in Abb. 7.16 dargestellten x_3 -Richtung betrachtet.

Die elastischen Dehnungen in Zugrichtung, welche sich unmittelbar nach Aufbringung der äußeren Last einstellen, betragen für alle Simulationen weniger als 0,01 %. Da der Beitrag der elastischen Dehnungen zu den Gesamtdehnungen vernachlässigbar klein war, ist eine Unterscheidung zwischen Gesamtdehnungen und Kriechdehnungen für die Darstellung der hier betrachteten Simulationen nicht von Bedeutung. Stattdessen werden die aus den Simulationen resultierenden Gesamtdehnungen, welche sich aus den Deformationen der Körner, Korngrenzgleiten und Korngrenzenaufdickung zusammensetzen, im Folgenden vereinfachend als Kriechdehnungen angesehen.

In Abb. 7.17 sind die zeitlichen Verläufe der Kriechdehnungen in Zugrichtung, welche jeweils durch die Komponente E_{33} des makroskopischen Dehnungstensors (siehe (7.1)) gegeben waren, für die unterschiedlichen Vernetzungseinheiten abgebildet. Die jeweils zugehörigen Kriechraten sind in Abb. 7.18 dargestellt. Aus Abb. 7.17 ist dabei ersichtlich, dass das makroskopische Deformationsverhalten mit zunehmender Vernetzungseinheit etwas nachgiebiger wird. Allerdings sind die beobachtbaren Unterschiede vergleichsweise moderat. Bedenkt man die Streuungen, welche oft für experimentell erfasste Kriechdehnungen beobachtet werden, so stellt angesichts der absoluten Kriechdehnungen im einstelligen Prozentbereich eine maximale relative Abweichung von ungefähr 15 % zwischen dem größten und dem feinsten FE-Modell keine signifikante Abweichung bezüglich der Beschreibung des makroskopischen Deformationsverhaltens dar. Darüber hinaus zeigen die Kriechkurven in Abb. 7.17 auch keine sonstigen Auffälligkeiten, die auf einen problematischen Vernetzungseinfluss schließen lassen.

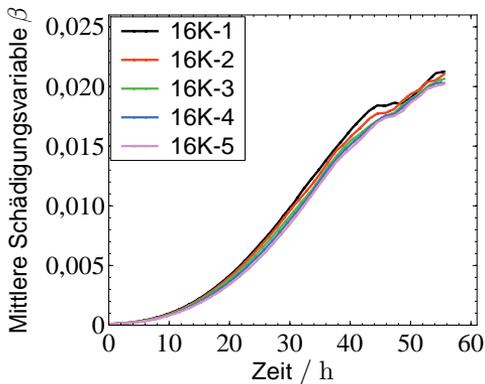


Abb. 7.19: Darstellung der zeitlichen Entwicklungen für die über die noch nicht vollständig geschädigte Korngrenzenfläche gemittelte Schädigungsvariable β .

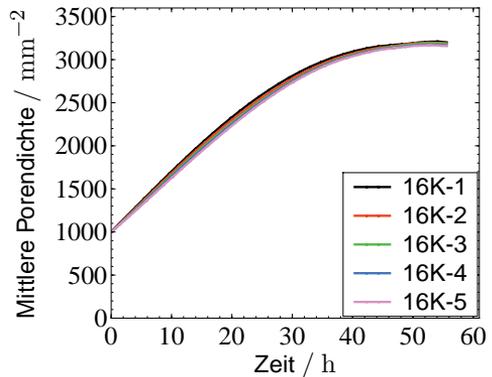


Abb. 7.20: Darstellung der zeitlichen Entwicklungen für die über die noch nicht vollständig geschädigte Korngrenzenfläche gemittelte Porendichte ρ .

Einzig das Auftreten von Druckspannungskonzentrationen in tripelliniennahen kohäsiven Elementen, wie sie bereits im vorangegangenen Abschnitt für eine ideale hexagonale Kornstruktur beobachtet wurden, ist erwähnenswert. Dabei waren die simulierten Druckspannungen in einzelnen Integrationspunkten mitunter zwei bis drei Größenordnungen größer als die makroskopisch aufgebrachte Belastung. Eine wesentliche Beeinflussung des makroskopischen Deformations- und Schädigungsverhaltens durch die Spannungskonzentrationen konnte jedoch nicht festgestellt werden.

Auch das makroskopische Schädigungsverhalten zeigt keine Auffälligkeiten, welche mit den Spannungskonzentrationen in Verbindung stehen könnten. Vielmehr kann anhand von *Abb. 7.19* und *Abb. 7.20* beobachtet werden, dass die zeitlichen Verläufe der Schädigungsvariablen β und ρ , welche jeweils über die noch nicht vollständig geschädigte Korngrenzenfläche gemittelt wurden, nahezu unabhängig von der Vernetzungsfeinheit sind. Eine ähnliche Beobachtung ergibt sich auch für den vollständig geschädigten Korngrenzenflächenanteil Ω . Dieser ergibt sich aus dem Verhältnis der aufsummierten Korngrenzenflächen, für welche lokales Versagen eingetreten ist ($\omega \geq 50\%$, siehe Abschnitt 5.2.2), zur gesamten Korngrenzenfläche in einem FE-Modell. Die in *Abb. 7.21* gezeigten Kurvenverläufe lassen dabei auf ein vernetzungsunabhängiges Verhalten schließen. Daher erscheint Ω als eine geeignete Größe zur Definition eines makroskopischen Versagenskriteriums.

Um einen kritischen Wert für Ω festzulegen, sollen die Kurvenverläufe der in *Abb. 7.18* dargestellten Kriechraten detaillierter ausgewertet werden. Experimentell erfasste Kriechdehnungen zeigen typischerweise eine beschleunigte Zunahme der Kriechraten unmittelbar vor dem finalen Versagen. Im Gegensatz dazu ist aber ab der Stelle, welche durch einen Pfeil in *Abb. 7.18* gekennzeichnet ist, zu beobachten, dass die simulierten Kriechraten in Abhängigkeit von den Kriechdehnungen weniger stark ansteigen.

Dieses Verhalten ergibt sich aufgrund der Tatsache, dass innerhalb des Polykristallmodells nur ein einzelner Schädigungsmechanismus berücksichtigt wird. Das Porositätsmodell, wel-

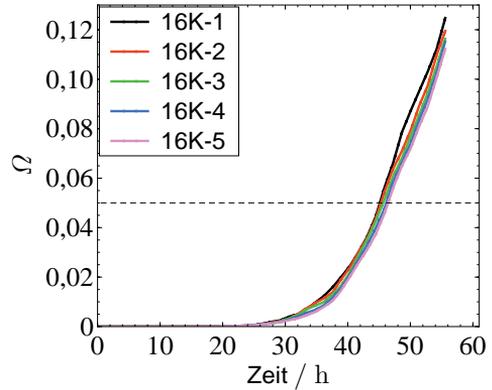


Abb. 7.21: Darstellungen der zeitlichen Entwicklungen des vollständig geschädigten Korngrenzenflächenanteils Ω .

ches im Rahmen des Kohäsionsmodells zur Anwendung kommt, berücksichtigt ausschließlich eine Zunahme der Schädigung durch Nukleation und diffusives Wachstum von Korngrenzenporen. Auch wenn es infolge des vollständigen Versagens von lokalen Korngrenzenbereichen zu Spannungsumlagerungen kommt, welche die Normalspannungen auf den noch nicht vollständig geschädigten Korngrenzen erhöhen, so ist die zeitliche Entwicklung der Schädigung weiterhin durch die Entwicklungsgleichungen des Porositätsmodells bestimmt.

In einem realen Werkstoff würden die erhöhten Spannungen an den Korngrenzen aber zur Aktivierung weiterer Schädigungsmechanismen, wie beispielsweise Porenwachstum durch plastische Deformationen des umliegenden Materials oder Bildung und Wachstum von Mikrorissen, führen. Der resultierenden beschleunigten Schädigungsentwicklung folgt dann meist ein baldiges Werkstoffversagen. Da diese letzte Etappe der Schädigungsentwicklung für gewöhnlich innerhalb kurzer Zeiträume abläuft, ist die Berücksichtigung der zugehörigen Effekte für Lebensdauerbetrachtungen aber von nachrangiger Bedeutung.

Ein Vergleich zwischen *Abb. 7.18*, *Abb. 7.17* und *Abb. 7.21* zeigt auf, dass das Abknicken der Kurven an der durch den Pfeil gekennzeichneten Stelle in *Abb. 7.18* ungefähr bei einem vollständig geschädigten Korngrenzenflächenanteil von $\Omega = 5\%$ auftritt. Weiterhin ist aus *Abb. 7.21* ersichtlich, dass auch die Anstiege der dargestellten Kurven ab einem Wert $\Omega = 5\%$ praktisch nicht mehr zunehmen. Ein vergleichbares Verhalten konnte ebenfalls in weiteren Simulationen, welche für andere Mikrostrukturen und Belastungen zu Testzwecken durchgeführt wurden, jedoch im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht weiter beschrieben sind, beobachtet werden.

Durch das Ausbleiben einer weiteren Beschleunigung der Schädigungsentwicklung können die Simulationen aus rein numerischer Sicht problemlos über $\Omega = 5\%$ hinaus fortgesetzt werden. Für einen realen Werkstoff wäre jedoch ein zeitnahes Versagen zu erwarten. Daher soll das Erreichen des Wertes $\Omega = 5\%$ im Folgenden als makroskopisches Versagenskriterium für eine gesamte Kornstruktur genutzt werden. Dabei ergeben sich aus der Anwendung dieses Kriteriums bezüglich der durchgeführten Simulationen Versagenszeiten von 45,13 h für das FE-Modell 16K-1 bis hin zu 46,44 h für das FE-Modell 16K-5.

Im Rahmen der durchgeführten Untersuchungen hat sich darüber hinaus gezeigt, dass im

Vergleich mit der Vernetzungsfinheit die Wahl der jeweils verwendeten Elementtypen sehr wohl einen bedeutenden Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat. Die Entscheidung für die quadratischen C3D10M-Elemente des Programmes Abaqus soll anhand der im Folgenden präsentierten Ergebnisse genauer diskutiert werden.

Laut der Abaqus-Dokumentation [Aba] umfasst die Implementierung der C3D10M-Elemente zusätzliche Freiheitsgrade, welche eine robustere Beschreibung von Kontaktproblemen und inkompressiblen Deformationen ermöglichen. Allerdings vergrößert sich durch die zusätzlichen Freiheitsgrade auch die zugehörige Systemmatrix für ein FE-Modell, was eine nicht unwesentliche Erhöhung des Berechnungsaufwandes zur Folge hat. Die Verwendung der C3D10M-Elemente für die Modellierung der Körner ist aber aus zweierlei Gründen erforderlich.

Zum einen ergaben sich bei der Nutzung von regulären quadratischen Tetraederelementtypen (z. B. C3D10) Störungen bezüglich der berechneten Deformationen und Spannungen. Diese äußerten sich durch die auffällige Ausbildung regelmäßiger Muster in den entlang der Korngrenzen platzierten kohäsiven Elementen. Die Störungen sind dabei sehr wahrscheinlich eine Folge der Ähnlichkeiten zwischen der Beschreibung von Grenzflächen mittels kohäsiver Elemente und einem Kontaktproblem. Für Letzteres können sich die Kontaktkräfte, welche unter bestimmten Belastungsfällen für reguläre quadratische Tetraederelementtypen in den Knoten einer Elementseitenfläche resultieren, signifikant unterscheiden [Aba]. Bei der Verwendung von Elementen des Typs C3D10M kam es hingegen zu keinen Unregelmäßigkeiten an den Korngrenzen.

Zum anderen kann es bei der Verwendung bestimmter Elementtypen auch zum Auftreten von Volumenlocking infolge von nahezu inkompressiblen Deformationen kommen. Letztere ergeben sich aus den Deformationen der Körner, welche im Wesentlichen durch den viskoplastischen Anteil des Einkristallmodells bestimmt sind. Volumenlocking konnte dabei insbesondere für lineare Tetraederelemente vom Typ C3D4 beobachtet werden.

Eine Vermeidung von Volumenlocking für die hier verwendeten Materialmodelle kann durch die Verwendung von sogenannten hybriden Elementen [Aba] (z. B. C3D4H) oder von modifizierten Elementen [Aba] (z. B. C3D10M) erreicht werden. Um den Einfluss von Volumenlocking zu verdeutlichen, wurden auf Basis der Vernetzung des FE-Modells 16K-5 zwei weitere FE-Modelle erstellt, für welche entweder lineare Tetraederelemente vom Typ C3D4 oder

Tab. 7.4: Auflistung von Kennzahlen, welche die Vernetzungen zweier FE-Modelle für die aus 16 Körnern bestehende periodische Mikrostruktur veranschaulichen. Für das FE-Modell 16K-5-C3D4 wurden lineare Tetraederelemente vom Typ C3D4 und für das FE-Modell 16K-5-C3D4H lineare Tetraederelemente vom Typ C3D4H verwendet.

Modellbezeichnung	16K-5-C3D4	16K-5-C3D4H
Gesamtknoten	21 630	43 258
C3D4-Elemente / C3D4H-Elemente	79 865	79 865
COH3D6-Elemente	9 849	9 849
Anzahl an Gleichungen	57 072	78 700

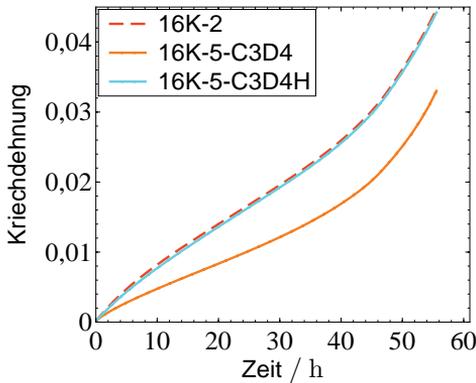


Abb. 7.22: Darstellung der zeitlichen Entwicklungen der Kriechdehnung in Zugrichtung für die mit den in Tab. 7.4 aufgelisteten FE-Modellen durchgeführten Simulationen.

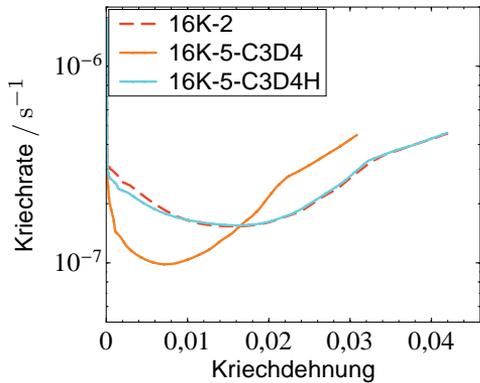


Abb. 7.23: Darstellung der Kriechraten in Abhängigkeit von den Kriechdehnungen für die in Abb. 7.22 betrachteten Simulationen.

vom Typ C3D4H verwendet wurden. Die Eckdaten dieser Modelle sind in Tab. 7.4 aufgelistet.

In Abb. 7.22 sind für die FE-Modelle 16K-5-C3D4 und 16K-5-C3D4H die Kriechdehnungen, welche aus den simulierten einachsigen Zugbelastungen resultieren, mit den Ergebnissen des FE-Modells 16K-2 (siehe Tab. 7.3) verglichen. Die jeweils zugehörigen Kriechraten sind in Abb. 7.23 abgebildet. Während sich für den Elementtyp C3D4H keine wesentlichen Unterschiede zu den Ergebnissen des FE-Modells 16K-2 ergeben, kommt es bei der Verwendung der Tetraederelemente vom Typ C3D4 zu einer deutlichen Beeinflussung des Deformationsverhaltens. Letzteres ist eine Konsequenz der mit dem Auftreten von Volumenlocking einhergehenden Verfälschungen der berechneten Spannungen [Aba]. Genauer gesagt kommt es zu einer deutlichen betragsmäßigen Überschätzung des hydrostatischen Spannungsanteils, was zu einer künstlichen Versteifung eines Elements bezüglich inkompressibler Deformationen führt. In der Folge ergeben sich kleinere Kriechdehnungen und -raten (siehe Abb. 7.22 und Abb. 7.23).

Während sich für die FE-Modelle 16K-2 und 16K-5-C3D4H große Ähnlichkeiten bezüglich des makroskopischen Deformationsverhaltens ergeben (siehe Abb. 7.22), ist die Anzahl an Gleichungen, die in die Systemmatrix eingehen, für das Modell 16K-5-C3D4H mehr als ein- einhalbmal so groß wie für das Modell 16K-2. Um Berechnungszeit einzusparen, empfiehlt sich daher die Verwendung der quadratischen C3D10M-Tetraederelemente.

Es sei noch darauf hingewiesen, dass Volumenlocking-Effekte nicht für C3D8-Elemente, wohl aber für C3D6-Elemente festgestellt werden konnten. Da C3D6-Elemente nur in geringem Umfang für die in Abschnitt 6.2 präsentierten Simulationen verwendet wurden, sind die Auswirkungen auf die Ergebnisse vernachlässigbar. Dies wird auch durch nachträglich durchgeführte Verifikationssimulationen, für welche hybride Elemente vom Typ C3D8H und C3D6H verwendet wurden, untermauert.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass für die Modellierung der Körner die Wahl des verwendeten Elementtyps, welcher für die Beschreibung von inkompressiblen Deformationen und Kontaktproblemen geeignet sein sollte, von besonderer Bedeutung ist. Im Vergleich mit dem Elementtyp führt die Vernetzungsfineinheit zu einer wenig ausgeprägten Beeinflussung der Simulationsergebnisse. Eine konkrete Aussage bezüglich einer benötigten Mindestvernetzungsfineinheit kann daher nicht getroffen werden. Bei der Diskretisierung einer vorgegebenen Mikrostruktur sollte aber versucht werden, extrem verzerrte Elemente zu vermeiden. Es kann zwar davon ausgegangen werden, dass der Einfluss einzelner Elemente auf das makroskopische Gesamtverhalten vernachlässigbar ist. Numerische Probleme einzelner Elemente können aber dennoch zu Konvergenzproblemen führen und in manchen Fällen eine Verkleinerung der jeweils verwendeten Zeitinkrementgröße erforderlich machen.

7.3 Untersuchungen zum Kriechschädigungsverhalten

Für die Untersuchungen von Vernetzungseinflüssen genügte im vorangegangenen Abschnitt 7.2.2 die Betrachtung einer polykristallinen Mikrostruktur mit niedriger Anzahl an Körnern. Wie aber im Folgenden noch gezeigt wird, ergeben sich richtungsabhängige Unterschiede im makroskopischen Deformationsverhalten für die nur 16 Körner umfassende Mikrostruktur. Durch die Betrachtung von Mikrostrukturen mit möglichst vielen Körnern können die Einflüsse der Morphologie einzelner Körner sowie der zugeordneten Kristallorientierungen reduziert werden. Wie viele Körner innerhalb einer Mikrostruktur betrachtet werden müssen, um makroskopisch repräsentative Simulationsergebnisse zu erhalten, ist dabei eine schwierige Frage, welche nicht im Rahmen der vorliegenden Arbeit beantwortet werden soll. Stattdessen soll das Kriechverhalten anhand einer polykristallinen Mikrostruktur, welche möglichst geringe Richtungseinflüsse zeigt, untersucht werden.

Zu diesem Zweck wurde für eine aus 125 Körnern bestehende Mikrostruktur ein FE-Modell mittels der in Abschnitt 7.1 beschriebenen Vorgehensweise erstellt. Dabei wurde zur Positionierung der Referenzpunkte die betrachtete würfelförmige Volumenzelle in 125 gleiche Unter-

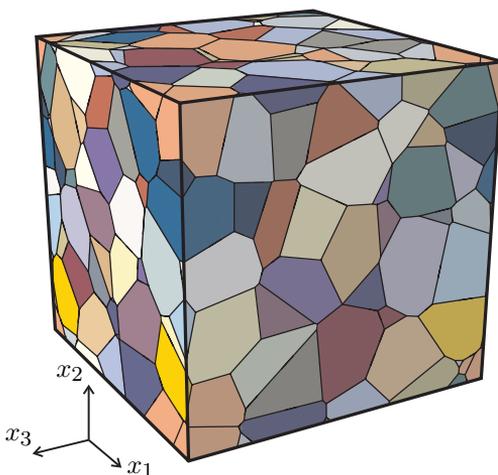


Abb. 7.24: Darstellung der 125 Körner umfassenden Mikrostruktur, welche mittels der in Abschnitt 7.1 beschriebenen Vorgehensweise erstellt wurde.

Tab. 7.5: Vergleich von Kennzahlen, welche sich für die Kornstrukturen und die Vernetzungen der betrachteten 16 und 125 Körner umfassenden Mikrostrukturen ergaben.

Modellbezeichnung	16K	125K
Körner	16	125
Korngrenzen	95	949
Gesamtknoten	18 390	115 288
C3D10M-Elemente	6 191	39 090
COH3D6-Elemente	4 700	33 388
Anzahl an Gleichungen	33 054	215 535

würfel geteilt. In jedem Unterwürfel wurde dann ein einzelner Referenzpunkt zufällig platziert. Die Kornstruktur der resultierenden periodischen Voronoi-Struktur ist in *Abb. 7.24* abgebildet. Für die Vernetzung wurde die Struktur derart skaliert, dass die mittlere Korngröße 300 μm betrug. Die für das FE-Modell verwendete Vernetzungseinheit pro Kornanzahl liegt dabei zwischen denen der FE-Modelle 16K-1 und 16K-2 (siehe *Tab. 7.3*). Zu Vergleichszwecken wurde daher für die im vorangegangenen Abschnitt betrachtete 16 Körner umfassende Mikrostruktur ein weiteres FE-Modell mit einer Vernetzungseinheit, welche ebenfalls zwischen denen der FE-Modelle 16K-1 und 16K-2 einzuordnen ist, erstellt. Die wichtigsten Eckdaten der beiden FE-Modelle sowie die zugehörigen Bezeichnungen sind in *Tab. 7.5* aufgelistet.

Für die Beschreibung des Materialverhaltens wurden zum einen die in *Tab. 7.2* aufgeführten Materialparameter genutzt. Zum anderen wurden mehrere Gruppen von zufälligen Kristallorientierungen generiert, welche jeweils 125 Einzelorientierungen umfassten. Eine einzelne Orientierung war dabei durch Angabe der drei Euler-Winkel φ_1 , Φ und φ_2 nach der Definition von Bunge [Bun68] bestimmt. Für eine zufällige Orientierung müssen die Winkel φ_1 und φ_2 jeweils als zufällige Wert aus einem Intervall $[0, 2\pi]$ und Φ als der Arkuskosinus eines zufälligen Wertes aus einem Intervall $[-1, 1]$ gewählt werden.

Aus den generierten Kristallorientierungsgruppen wurden zwei ausgewählt, welche in Anhang B dokumentiert sind. Während die in *Tab. B.1* aufgelistete und im Folgenden mit ORI1 bezeichnete Gruppe von Orientierungen willkürlich ausgewählt wurde, konnte für die in *Tab. B.2* aufgelistete und im Folgenden mit ORI2 bezeichnete Gruppe von Orientierungen ein makroskopisch gleichmäßiges Kriechverhalten im Rahmen von Kriechsimulationen mit dem FE-Modell 125K beobachtet werden. Zur Beurteilung von Letzterem wurden für das FE-Modell 125K unter Anwendung der Kristallorientierungen ORI1 und ORI2 jeweils einachsige Zugbeanspruchungen von 10 MPa entlang der drei Kantenrichtungen des würfelförmigen FE-Modells simuliert. Zum Vergleich wurden ebenfalls mit dem FE-Modell 16K (siehe *Tab. 7.5*) entsprechende Simulationen durchgeführt, wobei den Körnern jeweils die ersten 16 Orientierungen aus ORI1 und ORI2 zugeordnet wurden.

Die jeweils in Zugrichtung resultierenden makroskopischen Kriechdehnungen sind für das FE-Modell 16K in *Abb. 7.25* und für das FE-Modell 125K in *Abb. 7.26* dargestellt. Für die 16 Körner umfassende Mikrostruktur sind dabei deutliche Streuungen in den Kurvenverläufen beider Kristallorientierungen zu beobachten. Auch die makroskopischen Versagenszeiten zwischen 40, 42 h und 45, 23 h, welche sich entsprechend dem im vorangegangenen

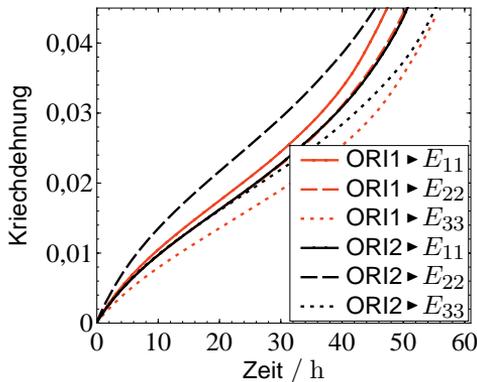


Abb. 7.25: Zeitliche Verläufe der makroskopischen Kriechdehnungen für einachsige Zugversuche mit dem FE-Modell 16K.

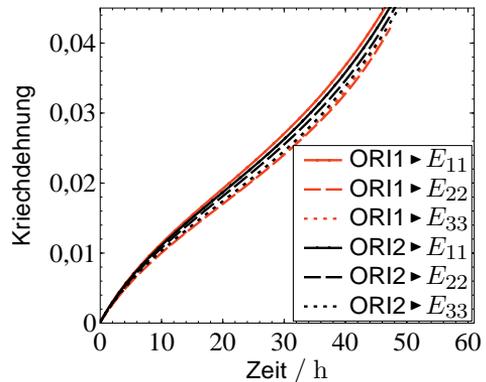


Abb. 7.26: Zeitliche Verläufe der makroskopischen Kriechdehnungen für einachsige Zugversuche mit dem FE-Modell 125K.

Abschnitt festgelegten Kriterium für das FE-Modell 16K und die Kristallorientierungen ORI1 ergeben, kennzeichnen die vorhandenen Unterschiede in den Schädigungsentwicklungen.

Für das FE-Modell 125K ist das makroskopische Deformationsverhalten bereits deutlich unabhängiger von den jeweils verwendeten Kristallorientierungen. Wie bereits erwähnt, ergibt sich für die Kristallorientierungen ORI2 die geringste Streuung zwischen den einzelnen Kurvenverläufen. Auch die Versagenszeiten liegen mit Werten zwischen 42, 30 h und 42, 47 h vergleichsweise dicht beieinander. Aufgrund dieser geringen Beeinflussungen des makroskopischen Kriechverhaltens wurden ausschließlich die Kristallorientierungen ORI2 in Kombination mit dem FE-Modell 125K für die in den folgenden Abschnitten präsentierten Simulationen verwendet.

7.3.1 Spannungsabhängigkeit im einachsigen Zugversuch

Das Ziel der in Abschnitt 6.2 durchgeführten Parameteranpassung war die Beschreibung des Deformations- und Schädigungsverhaltens einer grobkörnigen Cu-Sb-Legierung unter Kriechbedingungen. Dabei standen speziell für die Anpassung des Kohäsionsmodells ausschließlich experimentelle Daten für niedrige Belastungen von 8 MPa und 10 MPa zur Verfügung. Um die Übertragbarkeit des angepassten Polykristallmodells bezüglich anderer Belastungsniveaus zu testen, wurde das FE-Modell 125K (siehe Abb. 7.24) in Kombination mit den in Tab. 7.2 aufgelisteten Materialparametern sowie den Kristallorientierungen ORI2 (siehe Tab. B.2) genutzt, um jeweils einachsige Kriechversuche für Beanspruchungen von 10 MPa, 15 MPa und 20 MPa entlang der x_3 -Richtung des FE-Modells zu simulieren.

Die aus den Simulationen resultierenden Kriechdehnungen sowie die zugehörigen Kriechraten sind in Abb. 7.27 und Abb. 7.28 dargestellt. Zum Vergleich sind in Abb. 7.27 und Abb. 7.28 ebenfalls die Kurvenverläufe aus [Ott11] für experimentell getestete Minikriechproben, welche eine vergleichbare chemische Zusammensetzung wie der in Abschnitt 6.1 beschriebene grobkörnige Cu-Sb-Werkstoff besaßen, abgebildet. Der in [Ott11] verwendete Cu-Sb-

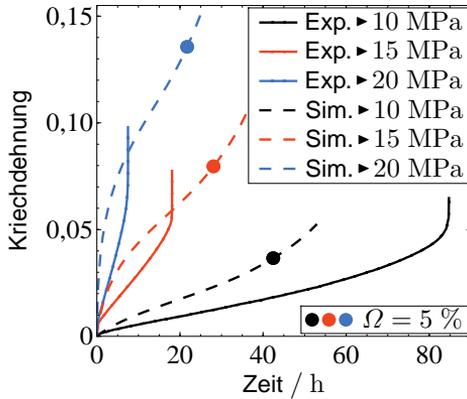


Abb. 7.27: Darstellung der sich für unterschiedliche Spannungsniveaus ergebenden zeitlichen Kriechdehnungsentwicklungen in Zugrichtung für eine Cu-Sb-Legierung [Ott11] (Exp.) und für die mit dem FE-Modell 125K durchgeführten Simulationen (Sim.).

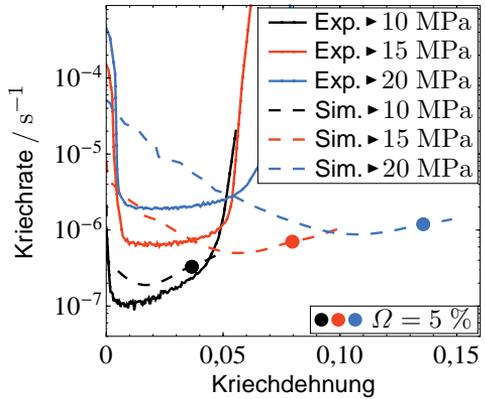


Abb. 7.28: Darstellung der Kriechraten in Abhängigkeit von den Kriechdehnungen für die in Abb. 7.27 betrachteten Kriechversuche und Simulationen.

Werkstoff wurde vor den eigentlichen Kriechversuchen ebenfalls für 48 h bei 823 K ausgelagert, besaß jedoch aufgrund einer vorangegangenen thermomechanischen Behandlung ein feinkörnigeres Gefüge mit einer mittleren Korngröße von $316 \mu\text{m}$. In den simulierten Kurvenverläufen ist zudem jeweils der Punkt markiert, an dem der vollständig geschädigte Korngrenzenflächenanteil Ω das in Abschnitt 7.2.2 definierte Kriterium für makroskopisches Versagen ($\Omega = 5 \%$) erreicht.

In Abb. 7.27 ist für alle betrachteten Spannungsniveaus eine Überschätzung in den zeitlichen Entwicklungen der simulierten Kriechdehnungen gegenüber den Daten aus [Ott11] zu beobachten. Die Ursache für dieses Verhalten liegt vor allem in der bereits in Abschnitt 6.3 festgestellten Überschätzung des primären Kriechbereiches durch das Einkristallmodell, welches mittels Kriechdaten für reines Kupfer angepasst wurde. In der Folge ergibt sich innerhalb der Simulationen nur eine mäßige Verringerung der Kriechraten in Abhängigkeit von den Kriechdehnungen, während für die experimentellen Kriechkurven eine rasche Abnahme der Kriechraten zu Beginn eines Versuchs zu beobachten ist (siehe Abb. 7.28).

Letztendlich spiegelt dies das experimentell erfasste und in Abb. 6.13 dargestellte Deformationsverhalten der einkristallinen Reinkupferproben wider, für welche sich die Abnahme der Kriechraten über einen größeren Kriechdehnungsbereich erstreckt. Für die in [Ott11] getesteten Cu-Sb-Proben endet hingegen die für den primären Kriechbereich typische Verfestigung mit dem Erreichen einer Kriechdehnung von ungefähr 1 % (siehe Abb. 7.28).

Daher wäre es von Vorteil, wenn das Einkristallmodell, beispielsweise durch eine spezialisierte Anpassung der Materialparameter, den Bereich kleiner Dehnungen für die Cu-Sb-Legierung besser beschreiben könnte. Aufgrund der kleinen Dehnung zu Beginn von Kriechversuchen können die zugehörigen Kriechraten jedoch nur mit begrenzter Genauigkeit erfasst

werden. Die Nutzung dieser Daten für eine Anpassung von Materialparametern wäre daher nicht optimal. Es kann folglich auch nur gemutmaßt werden, ob es sich bei den stärker abnehmenden Kriechraten, welche in *Abb. 6.13* für die $\langle 001 \rangle$ -orientierten Proben bei kleinen Kriechdehnungen zu beobachten sind, um das tatsächliche Materialverhalten handelt.

Wie bereits in Abschnitt 6.3 diskutiert wurde, muss bei der Einordnung der Ergebnisse stets berücksichtigt werden, dass sich auch das Deformationsverhalten von Cu-Sb -Kristalliten in einer polykristallinen Mikrostruktur vom Deformationsverhalten reiner Kupfereinkristalle unterscheiden könnte.

Aus den durch das makroskopische Versagenskriterium festgelegten Zeitpunkten ist darüber hinaus ersichtlich, dass die simulierten Versagenszeiten gegenüber den in [Ott11] getesteten Cu-Sb -Proben für eine Beanspruchung mit 10 MPa unterschätzt, jedoch für Beanspruchungen mit 15 MPa und 20 MPa überschätzt werden. Dieses Verhalten kann dabei vielfältige Ursachen haben.

Einerseits führt die Überschätzung der Kriechdehnungsentwicklung durch das Polykristallmodell speziell für die höheren Spannungsniveaus zu einer Veränderung der Spannungsumlagerungen innerhalb der Kornstruktur und folglich zu einer Beeinflussung der Schädigungsentwicklung.

Andererseits besteht die Möglichkeit, dass die tatsächlichen Deformationsbehinderungen durch das umliegende Material innerhalb der idealisierten prismatischen Mikrostrukturen, welche im Rahmen der Anpassung des Korngrenzenschädigungsverhaltens verwendet wurden (siehe Abschnitt 6.2.4), nicht korrekt abgebildet wurden. Da sich dies auf die angepassten Parameter auswirken würde, käme es ebenfalls zu einer Beeinflussung der Schädigungsentwicklung bei Simulationen mit dem FE-Modell 125K, welches aufgrund der unregelmäßigen dreidimensionalen Kornstruktur eine realistischere Modellierung der Deformationsbehinderungen ermöglicht.

Aufgrund der unterschiedlichen thermomechanischen Vorbehandlung des in [Ott11] verwendeten Cu-Sb -Werkstoffes muss zudem davon ausgegangen werden, dass sich für den Werkstoff aus [Ott11] die durch β_0 und ρ_0 beschriebene Anfangsschädigung der Korngrenzen von dem in Abschnitt 6.2.4 bestimmten Zustand unterscheidet. Dabei gilt: Je geringer die Anfangsschädigung ist, desto mehr Zeit benötigt die Schädigungsentwicklung zum Erreichen des Versagenskriteriums.

Darüber hinaus muss berücksichtigt werden, dass für die Anpassung des Schädigungsverhaltens in Abschnitt 6.2.4 nur Kriechdaten von niedrigen Spannungsniveaus (10 MPa und 8 MPa) genutzt wurden. Zwar stellt das Porositätsmodell aufgrund der Mechanismenorientierten Formulierung eine gute Ausgangslage für die Beschreibung der Spannungsabhängigkeit dar. Die Berücksichtigung von Kriechdaten von mehreren unterschiedlichen und vor allem höheren Spannungsniveaus dürfte aber zu einer verbesserten Beschreibung der Spannungsabhängigkeit führen.

Schließlich muss auch in Betracht gezogen werden, dass für höhere Spannungsniveaus nicht nur Porenwachstum durch Korngrenzendiffusion stattfindet. Vielmehr ist mit zunehmender Belastung davon auszugehen, dass das Porenwachstum ebenfalls durch plastische Deformationen des umliegenden Materials beschleunigt wird.

Bedenkt man aber, dass keine Daten aus [Ott11] für die Anpassung des Polykristallmodells genutzt wurden, so werden angesichts der Vielzahl an Einflussgrößen für die Simulationen, der Unsicherheiten bei der Bestimmung der Materialparameter sowie der möglichen mikrostrukturellen Unterschieden zwischen beiden Cu-Sb-Werkstoffen die Abweichungen in *Abb. 7.27* und *Abb. 7.28* teilweise relativiert. Dies gilt insbesondere für das Spannungsniveau von 10 MPa.

Um die Modellierung für Cu-Sb-Werkstoffe zu verbessern, sollte primär die Beschreibung des Deformationsverhaltens durch das Einkristallmodell verbessert werden, da hierfür die Unterschiede zu den experimentellen Kriechversuchen eindeutiger zu erkennen sind. Erst im Anschluss daran sollten Anpassungen am Schädigungsverhalten vorgenommen werden.

7.3.2 Einfluss der Korngrenzenviskosität

Aus den in Abschnitt 6.1.5 präsentierten experimentellen Daten ist ersichtlich, dass Korngrenzengleiten einen nicht vernachlässigbaren Mechanismus für das Kriechverhalten der am Institut für Werkstoffe der RUB getesteten grobkörnigen Cu-Sb-Legierung darstellt. Im Folgenden sollen daher Wechselwirkungen mit anderen Deformationsmechanismen sowie der Einfluss auf das makroskopische Kriechverhalten anhand der Extremfälle von ungehindertem und unterdrücktem Korngrenzengleiten diskutiert werden.

Zu diesem Zweck wurden zwei Simulationen mit dem FE-Modell 125K unter Verwendung der Materialparameter aus *Tab. 7.2* durchgeführt. Im Gegensatz zu den Simulationen aus dem vorangegangenen Abschnitt wurden aber die Werte für die Korngrenzenviskosität η_{KGG} wie folgt angepasst: Durch Verwendung einer Korngrenzenviskosität, welche gegenüber dem Wert in *Tab. 7.2* tausendfach kleiner war, wurde für die erste Simulation ungehindertes Korngrenzengleiten approximiert. Eine tausendfach größere Korngrenzenviskosität wurde hingegen genutzt, um die Auswirkungen von unterdrücktem Korngrenzengleiten innerhalb der zweiten Simulation abzubilden. In beiden Fällen wurde das Kriechverhalten jeweils für eine einachsige Beanspruchung von 10 MPa entlang der x_3 -Richtung des FE-Modells (siehe *Abb. 7.24*) simuliert.

Die aus diesen Simulationen resultierenden Kriechdehnungen sowie die zugehörigen Kriechraten sind in *Abb. 7.29* und *Abb. 7.30* dargestellt. Zum Vergleich sind in *Abb. 7.29* und *Abb. 7.30* ebenfalls die Kurvenverläufe des experimentellen Kriechversuchs aus [Ott11] sowie der zugehörigen Simulation mit den Materialparametern aus *Tab. 7.2* abgebildet, welche bereits im vorangegangenen Abschnitt für das Spannungsniveau von 10 MPa präsentiert wurden.

Wie zu erwarten war, ist für den Fall des ungehinderten Korngrenzengleitens eine beschleunigte Entwicklung der makroskopischen Kriechdehnung zu beobachten. Im Falle der Unterdrückung von Korngrenzengleiten ergibt sich hingegen eine verlangsamte Kriechdehnungsentwicklung. Da im letzteren Fall das Deformationsverhalten für kleine Kriechdehnungen im Wesentlichen durch das Einkristallmodell bestimmt ist, verdeutlicht die in *Abb. 7.30* dargestellte Entwicklung der Kriechrate noch einmal, dass das Verfestigungsverhalten für die Cu-Sb-Legierung bei kleinen Dehnungen weniger gut beschrieben wird. Speziell die experimentell erfasste starke Verfestigung bei Kriechdehnungen kleiner als 0,005 (siehe *Abb. 7.30*) wird durch das Einkristallmodell nicht reproduziert.

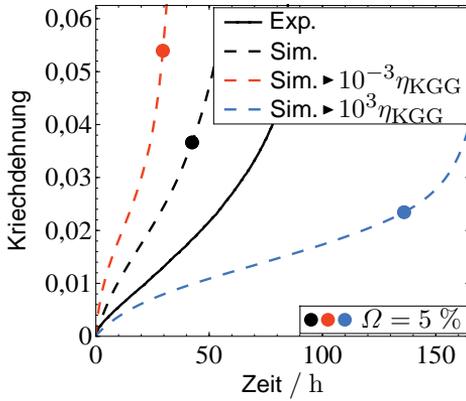


Abb. 7.29: Darstellung der sich unter einer Last von 10 MPa ergebenden zeitlichen Kriechdehnungsentwicklungen in Zugrichtung für eine Cu-Sb-Legierung [Ott11] (Exp.) und für die für unterschiedliche Korngrenzviskositäten jeweils mit dem FE-Modell 125K durchgeführten Simulationen (Sim.).

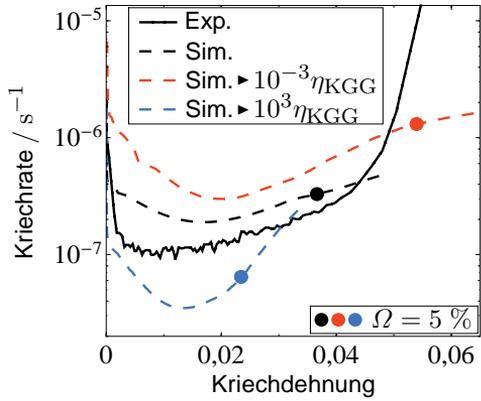


Abb. 7.30: Darstellung der Kriechraten in Abhängigkeit von den Kriechdehnungen für die in Abb. 7.29 betrachteten Kriechkurven.

Aus einer genaueren Analyse der Simulationsergebnisse ist zudem ersichtlich, dass durch die Korngrenzviskosität nicht nur das Ausmaß an Korngrenzgleiten beeinflusst wird. Hierzu wurden gängige Mittelungsverfahren für Kontinua mit inneren Grenzflächen [GS01] genutzt, um die Beiträge der Körner und der Korngrenzen zur Gesamtdeformation einer Kornstruktur zu bestimmen:

$$E_K = \frac{1}{V_{K,0}} \int_{V_{K,0}} \mathbf{e}_L \cdot \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{e}_L \, dV, \quad (7.2)$$

$$E_{KGG} = \frac{1}{2V_{K,0}} \int_{S_{KG,0}} \mathbf{e}_L \cdot ([\mathbf{u}]_{KGG} \otimes \mathbf{n}_{KG} + \mathbf{n}_{KG} \otimes [\mathbf{u}]_{KGG}) \cdot \mathbf{e}_L \, dS. \quad (7.3)$$

In (7.2) und (7.3) sind E_K und E_{KGG} die makroskopischen Kriechdehnungsanteile, welche jeweils entlang der äußeren Belastungsrichtung \mathbf{e}_L aus den Deformationen der Körner und aus Korngrenzgleiten resultieren. Weiterhin sind $V_{K,0}$ das Gesamtvolumen der Körner im undeformierten Zustand, $S_{KG,0}$ die gesamte Korngrenzfläche im undeformierten Zustand, $\boldsymbol{\epsilon}$ der lokale Dehnungstensor der Körner, $[\mathbf{u}]_{KGG}$ der lokale Verschiebungssprungvektor tangential zur Korngrenzfläche und \mathbf{n}_{KG} der lokale Normalenvektor einer Korngrenzfläche. Da die Korngrenzen zu Beginn einer Simulation keine Aufdickung besitzen, entspricht das Gesamtvolumen der Mikrostruktur gerade $V_{K,0}$.

Bezüglich der Korngrenzaufdickung kann eine zu (7.3) vergleichbare Mittelung durchgeführt werden, welche entsprechend dem Kohäsionsmodell den Beitrag von Korngrenzenpo-

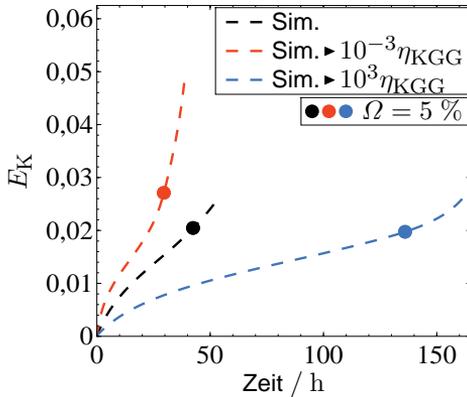


Abb. 7.31: Vergleich der sich entsprechend (7.2) aus den Deformationen der Körner ergebenden mittleren Dehnungsanteile für die in Abb. 7.29 betrachteten Simulationen.

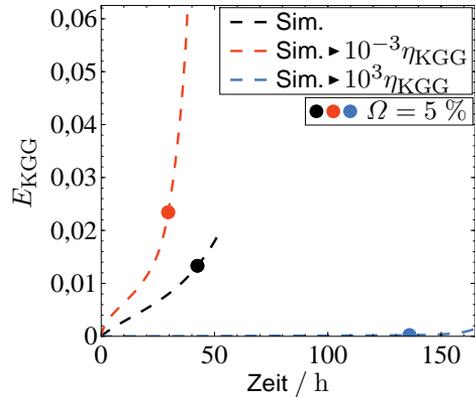


Abb. 7.32: Vergleich der sich entsprechend (7.3) durch Korngrenzengleiten ergebenden mittleren Dehnungsanteile für die in Abb. 7.29 betrachteten Simulationen.

ren zu den Gesamtdeformationen beschreiben würde. Dieser Beitrag ist jedoch gegenüber den Deformationen der Körner und Korngrenzengleiten eine halbe Größenordnung kleiner, so dass Wechselwirkungen primär zwischen dem Deformationsverhalten der Körner und Korngrenzengleiten in Erscheinung treten.

In *Abb. 7.31* und *Abb. 7.32* sind die entsprechend (7.2) und (7.3) bestimmten Dehnungsanteile für die mit unterschiedlichen Korngrenzenviskositäten durchgeführten Simulationen dargestellt. Erwartungsgemäß führt die tausendfach größere Korngrenzenviskosität zu einer fast vollständigen Unterdrückung von Korngrenzengleiten (siehe *Abb. 7.32*). Für die tausendfach kleinere Viskosität ergibt sich hingegen eine beschleunigte Entwicklung der Deformationen. Doch obwohl die Schubspannungen an den Korngrenzen für ungehindertes Korngrenzengleiten praktisch vollständig relaxieren, bleibt das Ausmaß an Korngrenzengleiten beschränkt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass innerhalb der unregelmäßigen dreidimensionalen Kornstruktur des FE-Modells die makroskopischen Deformationen nicht allein durch Korngrenzengleiten realisiert werden können. Stattdessen stellt sich zusammen mit den Deformationen der Körner und der Korngrenzenaufdickung durch Schädigung eine kompatible Gesamtdeformation ein.

Aus *Abb. 7.31* ist darüber hinaus ersichtlich, dass eine Veränderung der Korngrenzenviskosität auch das gemittelte Deformationsverhalten der Körner beeinflusst. Während es für ungehindertes Korngrenzengleiten zu einer Beschleunigung der Korndeformationen kommt, ist für unterdrücktes Korngrenzengleiten eine Verlangsamung zu beobachten. Dieses Verhalten kann dabei auf Deformationsbehinderungen, welche durch das umliegende Material auf einzelne Körner ausgeübt werden, zurückgeführt werden. Da sich mit abnehmender Korngrenzenviskosität auch die auf einzelne Körner einwirkenden Zwangsspannungen verringern, können sich die Körner zunehmend unabhängiger von den jeweiligen Nachbarkörnern verformen. Die sich in der Folge einstellenden Deformationen sind daher stärker durch die äußere

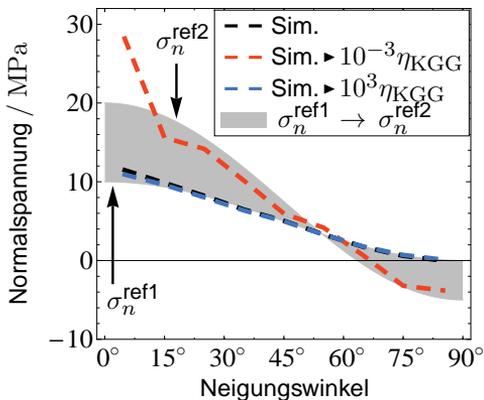


Abb. 7.33: Vergleich der sich nach einer Simulationszeit von 1 s an den Korngrenzen einstellenden mittleren Normalspannungen in Abhängigkeit von der Korngrenzenorientierung bezüglich der äußeren Belastungsrichtung für die in Abb. 7.29 betrachteten Simulationen.

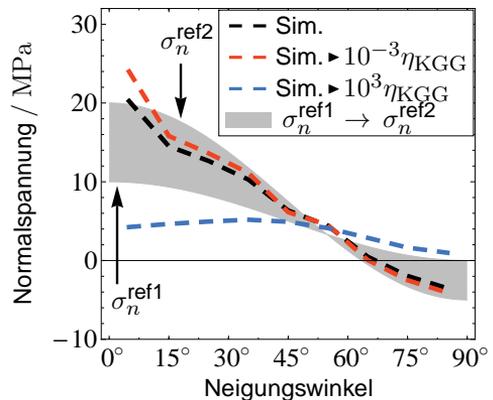


Abb. 7.34: Vergleich der sich unmittelbar vor dem ersten vollständigen Versagen eines Integrationspunktes eines kohäsiven Elements an den Korngrenzen einstellenden mittleren Normalspannungen in Abhängigkeit von der Korngrenzenorientierung bezüglich der äußeren Belastungsrichtung für die in Abb. 7.29 betrachteten Simulationen.

Belastung geprägt, was sich letztendlich in dem beschleunigten Verformungsverhalten der Körner äußert.

Die Wechselwirkungen zwischen mehreren aktiven Verformungsmechanismen sind dabei im Allgemeinen komplexer, aber im Wesentlichen durch die Geschwindigkeiten bestimmt, mit denen die Mechanismen Verformungsunterschiede ausgleichen können. Die Zeit bis zum makroskopischen Versagen hängt aber nicht in jedem Fall nur vom langsamsten Deformationsmechanismus ab. Stattdessen kommt es darauf an, wie die mit fortschreitender Schädigung einhergehende Korngrenzenaufdickung durch andere Deformationsmechanismen ausgeglichen werden kann.

Als treibende Kraft für die Schädigungsentwicklung ist aber vor allem die senkrecht auf eine Korngrenzenfläche einwirkende Zugspannung σ_n von Bedeutung. In [NEE189] wurde daher die sogenannte Facetten-Hauptspannung σ_F , welche der mittleren Zugspannung an einer Korngrenze senkrecht zur größten Hauptspannung entspricht, zur Beschreibung der Versagenszeiten von polykristallinen Werkstoffen unter Kriechbeanspruchungen vorgeschlagen.

Für die mit unterschiedlichen Korngrenzenviskositäten durchgeführten Simulationen sind in Abb. 7.33 und Abb. 7.34 die gemittelten Normalspannungen an den Korngrenzen, welche sich jeweils nach einer Simulationszeit von 1 s und unmittelbar vor dem ersten vollständigen Versagen eines Integrationspunktes der kohäsiven Elemente ergaben, in Abhängigkeit von der Korngrenzenorientierung bezüglich der äußeren Belastungsrichtung dargestellt. Die Orientierung einer Korngrenze wird dabei, wie in Abb. 7.35 skizziert, durch den Neigungswinkel zwischen der Korngrenzennormalenrichtung \mathbf{n}_{KG} und der äußeren Belastungsrichtung

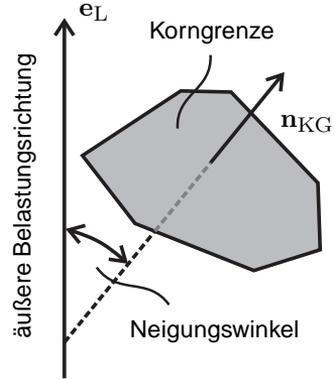


Abb. 7.35: Veranschaulichung der Korngrenzenneigung bezüglich der äußeren Belastungsrichtung.

e_L beschrieben. Die Mittelung der Normalspannungen erfolgte jeweils innerhalb von sechs vorgegebenen, 15° breiten Orientierungsbereichen.

Bei der Bewertung der in *Abb. 7.33* und *Abb. 7.34* dargestellten Normalspannungsverteilungen ist zu beachten, dass die mittels des FE-Modells 125K gewonnenen Simulationsergebnisse bis zu einem gewissen Grad von der konkret betrachteten Kornstruktur abhängen. Aufgrund der unregelmäßigen dreidimensionalen Kornstruktur sowie dem generellen Trend, dass Korngrenzengleiten auf kleineren Korngrenzenflächen zu höheren Spannungskonzentrationen führt [GOB97], ergibt sich für gleich orientierte Korngrenzen eine Streuung in den simulierten Normalspannungen. Die Anzahl von 949 Korngrenzen innerhalb des FE-Modells 125K ist dabei noch zu niedrig, um die Streuung im Rahmen der Mittelung vollständig zu kompensieren. Der Peak, welcher für die nahezu senkrecht zur äußeren Belastungsrichtung orientierten Korngrenzen zu beobachten ist, ergibt sich speziell für die untersuchte Kornstruktur und ist somit kein Effekt, der aus dem Material- oder Schädigungsverhalten resultiert.

Zum Vergleich ist in *Abb. 7.33* und *Abb. 7.34* der Spannungsbereich zwischen den beiden Referenzspannungen

$$\sigma_n^{\text{ref1}} = \mathbf{n}_{\text{KG}} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}_{\text{KG}} , \quad (7.4)$$

$$\sigma_n^{\text{ref2}} = \frac{5}{2} \mathbf{n}_{\text{KG}} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}_{\text{KG}} - \frac{1}{2} \text{Sp}(\boldsymbol{\Sigma}) \quad (7.5)$$

hervorgehoben. Dabei ist zu beachten, dass sich die Kurvenverläufe von σ_n^{ref1} und σ_n^{ref2} bei $54, 74^\circ$ schneiden. In (7.4) und (7.5) ist $\boldsymbol{\Sigma}$ der makroskopische Spannungstensor, welcher für die in den Simulationen betrachtete einachsige Belastung nur die eine von Null verschiedene Komponente $\Sigma_{33} = 10 \text{ MPa}$ besitzt. Die Referenzspannung σ_n^{ref1} beschreibt dabei die Normalspannungsverteilung, welche sich allein entsprechend der Orientierung einer Korngrenze aus $\boldsymbol{\Sigma}$ ergibt. Im Gegensatz dazu wird durch die in [Rod95] abgeleitete Referenzspannung σ_n^{ref2} eine Normalspannungsverteilung beschrieben, welche sich durch Spannungsumlagerungen in einer polykristallinen Kornstruktur unter Berücksichtigung von ungehindertem Korngrenzengleiten und Vernachlässigung von Korngrenzenschädigung einstellt.

Im Fall der in *Tab. 7.2* aufgeführten Korngrenzenviskosität, welche ursprünglich aus der An-

passung an die experimentellen Daten der am Institut für Werkstoffe der RUB getesteten grobkörnigen Cu-Sb-Legierung stammt (siehe Abschnitt 6.2.3), sowie im Fall des unterdrückten Korngrenzengleitens sind die sich unmittelbar nach Simulationsbeginn ergebenden Normalspannungsverteilungen praktisch identisch mit dem Verlauf von σ_n^{ref1} (siehe Abb. 7.33). In beiden Fällen sind die Deformationsgeschwindigkeiten der innerhalb des Polykristallmodells berücksichtigten Mechanismen zu gering, um bereits zu einem so frühen Zeitpunkt Spannungsumlagerungen zu verursachen.

Für ungehindertes Korngrenzengleiten stellt sich hingegen eine Normalspannungsverteilung ein, welche vergleichbar mit dem Verlauf von σ_n^{ref2} ist. Aus den Ergebnissen der für ungehindertes Korngrenzengleiten durchgeführten Simulation ist zudem ersichtlich, dass für den in Abb. 7.33 betrachteten Zeitpunkt die Schubspannungen an den Korngrenzen bereits deutlich relaxiert und somit die Spannungsumlagerungen durch Korngrenzengleiten nahezu vollständig umgesetzt waren.

Wie in Abb. 7.34 beobachtet werden kann, kommt es für die Korngrenzenviskosität aus Tab. 7.2 erst im weiteren Simulationsverlauf zu Spannungsumlagerungen. Diese sind primär durch Korngrenzengleiten bestimmt und führen wie im Falle des ungehinderten Korngrenzengleitens zur Erhöhung der Normalspannungen auf Korngrenzen, welche eher senkrecht zur äußeren Belastungsrichtung orientiert sind. Dabei nähert sich die Normalspannungsverteilung dem Kurvenverlauf der Referenzspannung σ_n^{ref2} an, jedoch nicht so stark wie es für den Fall des ungehinderten Korngrenzengleitens zu beobachten ist. Da somit für ungehindertes Korngrenzengleiten die höchsten Normalspannungen auf die Korngrenzen einwirken, kommt es in der Folge zu einer beschleunigten Schädigungsentwicklung und zu einem früheren Erreichen des makroskopischen Versagenskriteriums.

Für unterdrücktes Korngrenzengleiten ist eine gegensätzliche Umlagerung der Normalspannungen zu beobachten. Während es für die senkrecht zur äußeren Belastungsrichtung orientierten Korngrenzen zu einer Entlastung kommt, ergibt sich auf Korngrenzen, welche gegenüber der äußeren Belastungsrichtung stärker geneigt sind, eine leichte Normalspannungserhöhung (siehe Abb. 7.34). Darüber hinaus findet an den Korngrenzen auch eine partielle Umlagerung der Normalspannungen in Schubspannungen statt, da diese aufgrund der hohen Korngrenzenviskosität nicht durch Korngrenzengleiten abgebaut werden können. Zudem wird innerhalb der Simulation eine keilförmige Schädigungsentwicklung an Tripellinien verhindert, da Korngrenzengleiten auf den jeweils angrenzenden Korngrenzen nicht stattfinden kann. Aufgrund der resultierenden niedrigen Normalspannungen an den Korngrenzen ist die Schädigungsentwicklung für unterdrücktes Korngrenzengleiten entsprechend verlangsamt und das makroskopische Versagenskriterium wird gegenüber den anderen Simulationen später erreicht (siehe Abb. 7.29).

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass sowohl Korngrenzengleiten als auch die Entstehung von Korngrenzenschädigung die Spannungsumlagerungen innerhalb einer polykristallinen Mikrostruktur beeinflussen, jedoch mit gegensätzlichen Auswirkungen. Welcher Mechanismus dabei dominiert, hängt im Wesentlichen von der Geschwindigkeit ab, mit welcher Deformationsunterschiede ausgeglichen werden können. Für die in Tab. 7.2 aufgeführte, auf experimentellen Daten basierende Korngrenzenviskosität sind, abgesehen von der Anfangsphase einer Simulation, die Spannungsumlagerungen durch Korngrenzengleiten bestimmt.

7.3.3 Ausblick auf mehrachsige Belastungszustände

Ein Vorteil des in Abschnitt 5 vorgestellten Polykristallmodells liegt darin begründet, dass die für die Diskretisierung von Kornstrukturen benötigten Elementtypen und Optionen zum gegenwärtigen Zeitpunkt bereits zum Standardumfang des FE-Programmes Abaqus gehören. Gegenüber früheren Untersuchungen [GT91; GT94a; GT94b; GT94c; GOB97; OG97a; OG97b], für welche vergleichsweise einfache zweidimensionale Kornstrukturen betrachtet wurden, ermöglicht dies die Modellierung komplexerer dreidimensionaler Mikrostrukturen. Letztere stellen einen guten Ausgangspunkt für Untersuchungen zum Kriechverhalten polykristalliner Werkstoffe unter mehrachsigen Belastungen dar.

Eine umfassende Studie zu diesem Thema liegt jedoch außerhalb des Fokus der vorliegenden Arbeit. Stattdessen sollen mögliche zukünftige Untersuchungsschwerpunkte durch eine erste Anwendung mit begrenztem Umfang aufgezeigt werden.

Wie bereits im vorangegangenen Abschnitt diskutiert wurde, ist die Schädigungsentwicklung im Wesentlichen durch die auf die Korngrenzen einwirkenden Normalspannungen bestimmt. Angesichts der durch Deformations- und Schädigungsmechanismen verursachten Spannungsumlagerungen innerhalb der Kornstruktur ergibt sich mit Blick auf die Vorhersage von Versagenszeiten die Frage, wie die resultierenden Normalspannungen an den Korngrenzen vom makroskopischen Spannungszustand abhängen.

In [NEE189] wurde vorgeschlagen, die sogenannte Facetten-Hauptspannung σ_F , ausgehend von Ergebnissen der in [AR85] für ungehindertes Korngrenzengleiten durchgeführten Analyse, durch

$$\sigma_F = 2,24 \Sigma_I - 0,62 (\Sigma_{II} + \Sigma_{III}) = 2,86 \Sigma_I - 0,62 \text{Sp}(\boldsymbol{\Sigma}) \quad (7.6)$$

auszudrücken. In (7.6) sind Σ_I , Σ_{II} und Σ_{III} die den makroskopischen Spannungszustand charakterisierenden Hauptspannungen, für welche $\Sigma_I \geq \Sigma_{II} \geq \Sigma_{III}$ gilt.

Die Formulierung der Facetten-Hauptspannung in (7.6) durch eine Kombination von maximaler Hauptspannung und Spur des Spannungstensors soll dabei die Ähnlichkeit zur maximalen Normalspannung an einer Korngrenze, die sich aus der Normalspannungsverteilung (7.5) ergibt (siehe [Rod95]), hervorheben. Unterschiede bestehen dabei lediglich bezüglich der Koeffizienten, welche sich in geringem Maße voneinander unterscheiden. Auf Basis der in [DR93] durchgeführten Untersuchungen wurde hingegen vorgeschlagen, dass die Facetten-Hauptspannung eine Funktion der maximalen Hauptspannung und der von Mises-Spannung sein sollte.

In Ergänzung zu den Simulationen aus Abschnitt 7.3.1 wurden zwei weitere Simulationen für zwei unterschiedliche mehrachsigen Belastungszustände durchgeführt. In beiden Fällen waren σ_F und der makroskopische hydrostatische Spannungsanteil $\Sigma_P = \text{Sp}(\boldsymbol{\Sigma})/3$ identisch zu einer einachsigen Belastung von 10 MPa. Lediglich die von Mises-Spannungen variierten gegenüber der einachsigen Belastung. Für die Simulationen wurden, wie bereits in Abschnitt 7.3.1, das FE-Modell 125K und die Materialparameter aus Tab. 7.2 verwendet.

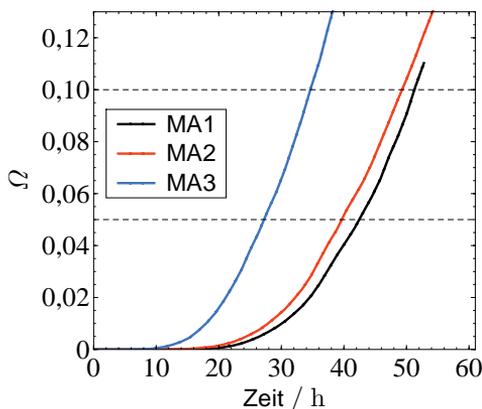
In Tab. 7.6 sind für die simulierte einachsige Belastung mit 10 MPa aus Abschnitt 7.3.1 (Bezeichnung MA1) sowie für die beiden simulierten mehrachsigen Belastungen (Bezeichnung

Tab. 7.6: Auflistung der charakteristischen Spannungen sowie der resultierenden Versagenszeiten t_f für die untersuchten mehrachsigen Spannungszustände.

Bezeichnung	$\frac{\Sigma_I}{\text{MPa}}$	$\frac{\Sigma_{II}}{\text{MPa}}$	$\frac{\Sigma_{III}}{\text{MPa}}$	$\frac{\Sigma_P}{\text{MPa}}$	$\frac{\Sigma_V}{\text{MPa}}$	$\frac{\sigma_F}{\text{MPa}}$	$\frac{t_f}{\text{h}}$
MA1	10,00	0,00	0,00	3,33	10,00	22,40	43,06
MA2	10,00	3,33	-3,33	3,33	11,55	22,40	40,29
MA3	10,00	10,00	-10,00	3,33	20,00	22,40	27,80

MA2 und MA3) jeweils die charakteristischen Spannungen und die makroskopische Versagenszeit t_f , welche sich entsprechend dem in Abschnitt 7.2.2 definierten Kriterium ergab, zusammengetragen. Im Unterschied zur einachsigen Zugbelastung der Simulation MA1 können die Simulationen MA2 und MA3 als Torsionsbelastung und als zweiachsige Zugbelastung, jeweils mit überlagertem hydrostatischen Spannungsanteil, angesehen werden. In *Abb. 7.36* sind für die Simulationen MA1, MA2 und MA3 die resultierenden zeitlichen Entwicklungen des vollständig geschädigten Korngrenzenflächenanteils Ω abgebildet

Obwohl für die drei Simulationen die Facetten-Hauptspannungen nach (7.6) gleich sind, ergeben sich teils deutliche Unterschiede bezüglich der Versagenszeiten. Während sich für Simulation MA2 eine um 6,43 % verkürzte Versagenszeit gegenüber Simulation MA1 einstellt, beträgt für Simulation MA3 die Verringerung der Versagenszeit 35,44 %. Selbst wenn für Simulation MA3 berücksichtigt wird, dass bei einer zweiachsigen Zugbelastung sich die Korngrenzenschädigung entlang von zwei unabhängigen räumlichen Ebenen akkumuliert und somit gegenüber einer einachsigen Belastung über eine größere Korngrenzenfläche erstreckt, so ergibt sich aus der Anwendung eines kritischen Wertes von $\Omega = 10\%$ noch immer eine Verringerung der Versagenszeit um 18,40 % gegenüber dem $\Omega = 5\%$ Kriterium für Simulation MA1 (siehe auch *Abb. 7.36*). Es sei noch angemerkt, dass anhand von Wiederholungssimulationen, für welche die Richtungen der in *Tab. 7.6* aufgelisteten Belastungen variierten, geprüft wurde, dass es sich bei den unterschiedlichen Versagenszeiten der Simulationen MA1, MA2 und MA3 nicht um eine Richtungsabhängigkeit bezüglich der Kornstruktur des FE-Modells 125K handelte.

**Abb. 7.36:** Darstellungen der zeitlichen Entwicklungen des vollständig geschädigten Korngrenzenflächenanteils Ω für die in *Tab. 7.6* aufgelisteten Simulationen.

Aus den in *Tab. 7.6* zusammengetragenen Daten ist dabei eine Abhängigkeit der Versagenszeit von der makroskopischen von Mises-Spannung

$$\Sigma_V = \sqrt{\left[(\Sigma_I - \Sigma_{II})^2 + (\Sigma_{II} - \Sigma_{III})^2 + (\Sigma_{III} - \Sigma_I)^2 \right]} / 2 \quad (7.7)$$

ersichtlich. Dies deutet darauf hin, dass auch die Schädigungsentwicklung und folglich die auf die Korngrenzen einwirkenden Normalspannungen durch Σ_V maßgeblich beeinflusst werden. Die Ergebnisse in *Tab. 7.6* sind allerdings weniger als Widerspruch zu den Betrachtungen in [NEEI89; Rod95] zu werten, sondern sollten stattdessen als eine Ergänzung bezüglich des funktionalen Zusammenhangs zwischen makroskopischem Spannungszustand und Facetten-Hauptspannungen angesehen werden.

Speziell in [NEEI89], wo eine gute Korrelation zwischen experimentellen Versagenszeiten und der Facetten-Hauptspannungen (7.6) beobachtet werden konnte, wurden ausschließlich Spannungszustände betrachtet, welche zu denen der Simulationen MA1 und MA2 vergleichbar sind. Für diese Spannungszustände unterscheidet sich jedoch eine funktionale Beschreibung in Abhängigkeit von maximaler Hauptspannung und Spur des Spannungstensors nicht besonders stark von einer Beschreibung mittels maximaler Hauptspannung und von Mises-Spannung. So kann beispielsweise die alternative Facetten-Hauptspannung

$$\sigma_{F2} = \Sigma_I + 1,24 \Sigma_V \quad (7.8)$$

definiert werden, für welche $\sigma_F(\Sigma_I, \Sigma_{II} = \Sigma_{III}) = \sigma_{F2}(\Sigma_I, \Sigma_{II} = \Sigma_{III})$ unter einachsigen Belastungen gilt. Während die relative Abweichung von (7.8) zu (7.6) für Simulation MA2 8,56 % beträgt, ergibt sich für Simulation MA3 eine relative Abweichung von 55,36 %. Für die in [NEEI89] betrachteten Anwendungsfälle führt daher eine Beschreibung der Versagenszeiten durch (7.8) zu keiner signifikanten Verbesserung oder Verschlechterung. Deutliche Unterschiede könnten sich jedoch für mehrachsige Belastungen ergeben, welche mehr dem Charakter einer zweiachsigen Zugbelastung entsprechen.

Der Umfang der hier durchgeführten Untersuchungen ist jedoch zu gering, um das Kriechschädigungsverhalten unter mehrachsigen Belastungen vollständig zu charakterisieren. Auch muss berücksichtigt werden, dass das Zusammenwirken der unterschiedlichen Deformations- und Schädigungsmechanismen auf der Ebene der Kornstruktur von den verwendeten Materialparametern (siehe *Tab. 7.2*) abhängt.

Ausführlichere Untersuchungen sind daher erforderlich, um die Abhängigkeit der auf die Korngrenzen einwirkenden Normalspannungen besser zu erfassen. Insbesondere das Werkstoffverhalten unter zweiachsigen Belastungen, welches experimentell nur mit größerem Aufwand untersucht werden kann [Kel75], sollte dabei besondere Beachtung finden. Das Polykristallmodell bietet letztendlich eine interessante Möglichkeit, um das Kriechverhalten für Spannungszustände, welche experimentell nur schwer realisierbar sind, zu untersuchen. Darüber hinaus könnte das Modell speziell für die Analyse von komplexeren Spannungszuständen mit negativem hydrostatischen Spannungsanteil angewendet werden.

7.4 Diskussion der Ergebnisse

Durch die gezielte Anwendung des in Abschnitt 6.2 für eine Cu-Sb-Legierung kalibrierten Polykristallmodells in Kombination mit künstlich erzeugten Kornstrukturen konnten verschiedene Aspekte untersucht werden, welche für den Gebrauch des Modells zur Beschreibung des Kriechverhaltens polykristalliner Werkstoffe von Bedeutung sind. Von besonderem Interesse waren hierbei numerische und modellierungstechnische Einflüsse, welche sich auf die Ergebnisse der FE-Simulationen auswirken.

Dabei zeigte sich, dass das nahezu inkompressible Deformationsverhalten der Körner für bestimmte Kontinuumselmenttypen, hierzu zählen vor allem lineare Tetraederelemente, zum Auftreten von Volumenlocking führen kann. Aus Letzterem ergab sich eine deutliche Beeinflussung des Deformationsverhaltens, welche aber durch Verwendung von speziellen Elementtypen, wie beispielsweise C3D4H und C3D10M innerhalb des FE-Programmes Abaqus, vermieden werden kann.

Die Analyse von Simulationsergebnissen, welche mittels verschiedener quadratischer Tetraederelementtypen gewonnen wurden, deuten zudem darauf hin, dass das Verhalten zweier Körner an einer mittels kohäsiver Elemente modellierten Korngrenze mit einem harten Kontaktproblem vergleichbar ist. Um Störungen in den Simulationsergebnissen zu vermeiden, empfiehlt sich für das FE-Programm Abaqus die Verwendung des Elementtyps C3D10M.

Auffälligkeiten in den Simulationsergebnissen, welche aus der gemeinsamen Verwendung von quadratischen Tetraederelementen vom Typ C3D10M und linearen kohäsiven Elementen resultieren, konnten nicht festgestellt werden. Dies dürfte vor allem daran liegen, dass Verschiebungsunterschiede, welche aus den inkompatiblen Deformationsbeschreibungen der unterschiedlichen Elementtypen resultieren, klein im Vergleich mit den inelastischen Deformationen an einer Korngrenze sind. Der Vollständigkeit halber sollte dieser Punkt aber bei zukünftigen Untersuchungen anhand von Simulationen, welche eine Elementformulierung für quadratische kohäsive Elemente [OP99] berücksichtigen, genauer analysiert werden. Unter Umständen könnte sich die Verwendung von kompatiblen Elementformulierungen vorteilhaft auf das Konvergenzverhalten auswirken.

Darüber hinaus zeigen die Ergebnisse der durchgeführten Simulationen bezüglich des makroskopischen Deformations- und Schädigungsverhaltens nur eine vergleichsweise geringe Abhängigkeit von der Vernetzungsfineinheit der FE-Modelle.

Das beobachtbare Zusammenspiel der betrachteten Mechanismen auf der Ebene der Kornstruktur ist qualitativ konsistent mit den Ergebnissen früherer Studien, welche anhand von einfachen zweidimensionalen Mikrostrukturen [Tve85; GT94a; GOB97; OG97b] durchgeführt wurden. Hierzu zählt insbesondere die deutliche Beeinflussung des Kriechverhaltens durch Korngrenzengleiten, welche durch das im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelte Polykristallmodell abgebildet werden kann.

Für die Korngrenzenviskosität, welche anhand experimenteller Daten einer Cu-Sb-Legierung bestimmt wurde (siehe Abschnitt 6.2.3), ist dabei der Beitrag von Korngrenzengleiten zu den Gesamtdeformationen innerhalb der Simulationen nicht vernachlässigbar. Auch die resultierenden Spannungsumlagerungen innerhalb der Kornstruktur, welche sich für die experimen-

tell bestimmte Korngrenzenviskosität mit zunehmender Simulationszeit ähnlich auswirken wie für ungehindertes Korngrenzengleiten, prägen die Schädigungsentwicklung und folglich die Versagenszeiten.

Wie bereits in Abschnitt 6.3 festgestellt wurde, führt Korngrenzengleiten innerhalb der Simulationen zu einer verstärkten Ausbildung von keilförmigen Korngrenzenanrissen an Tripellinien. Dies betrifft nahezu alle Korngrenzen, auf denen es infolge einer Normalspannungsbelastung zu einer Schädigungsentwicklung kommt. Die Häufigkeit des Auftretens deutet dabei aber auf eine überschätzte Ausbildung dieser Schädigungsform durch die Modellierung des Kriechverhaltens hin.

Bei der Bewertung von Spannungsumlagerungen zeigte sich zudem, dass die mittleren Normalspannungen an den Korngrenzen teilweise von der Mikrostruktur des FE-Modells 125K abhängen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Korngrenzen innerhalb der periodischen Voronoi-Struktur (siehe Abschnitt 7.3) eben sind und somit nur eine begrenzte Anzahl unterschiedlicher Korngrenzenorientierungen für die Auswertung zur Verfügung stehen.

Ein Weg, um die Anzahl unterschiedlich orientierter Korngrenzenflächen innerhalb eines FE-Modells zu vergrößern, besteht in der Betrachtung von Mikrostrukturen mit gekrümmten Korngrenzen. Da die Korngrenzen in realen Werkstoffen für gewöhnlich eine gewisse Krümmung aufweisen, wäre ein solches Vorgehen auch im Sinne einer möglichst realitätsnahen Abbildung der tatsächlichen Kornstruktur. Wie bereits erwähnt wurde, stellt die Betrachtung komplizierterer Mikrostrukturen keine Begrenzung für die Anwendung des Polykristallmodells dar. Die Erstellung von FE-Modellen konnte sogar schon für eine Kornstruktur mit gekrümmten Korngrenzen (siehe *Abb. 7.37*), welche gegenüber einer Voronoi-Struktur die Beschreibung einer breiten Korngrößenverteilung ermöglicht, sowie für eine Kornstruktur mit gestreckten Körnern (siehe *Abb. 7.38*) erfolgreich getestet werden.

Gerade mit Blick auf die in *Abb. 7.38* abgebildete Mikrostruktur bietet das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Polykristallmodell einen vielversprechenden Ansatz für die Beschreibung

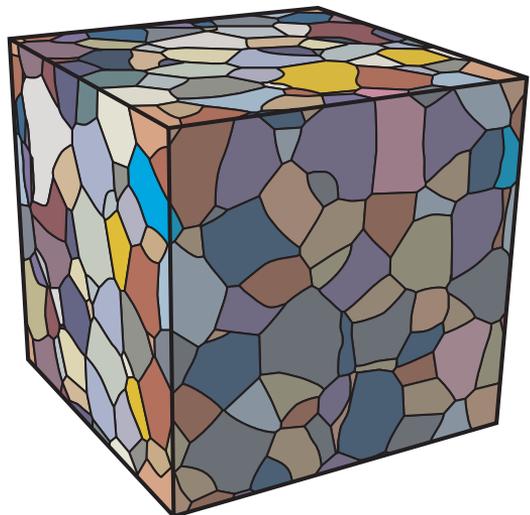


Abb. 7.37: Darstellung einer aus 216 Körnern bestehenden, künstlich erzeugten periodischen Mikrostruktur mit gekrümmten Korngrenzen.

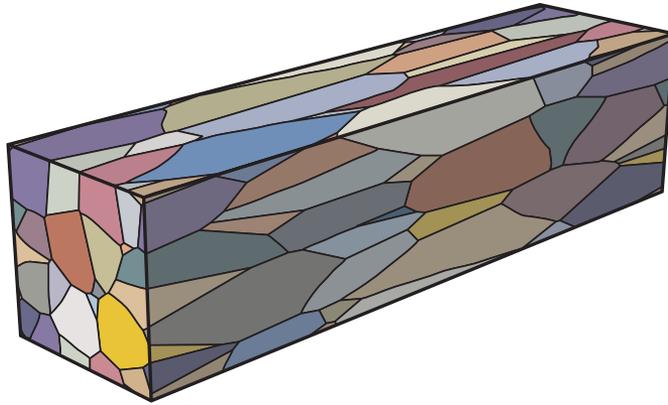


Abb. 7.38: Darstellung einer aus 50 Körnern bestehenden, künstlich erzeugten periodischen Mikrostruktur, deren Körner entlang einer Richtung um das Vierfache gestreckt sind.

des Kriechverhaltens von polykristallinen Werkstoffen mit ungleichmäßigen Kornmorphologien. Für Letztere ist davon auszugehen, dass im Vergleich mit Untersuchungen, welche für gleichmäßig geformte Kornstrukturen durchgeführt wurden [AR85; NEE189; DR93; Rod95], sich Spannungsumlagerungen anders auswirken werden.

Für zukünftige Untersuchungen sollte daher auch der Erstellung von FE-Modellen eine größere Aufmerksamkeit zukommen. Realistischere Kornstrukturen können dabei aus direkten Messungen [SMCQSZ08; SMCQK09; SC11; SC12] oder durch Erzeugung künstlicher Mikrostrukturen, welche auf statistischen Morphologie- und Texturdaten basieren [GGUD08a; GGUD08b; SPHDCBB08], gewonnen werden.

Mit Blick auf die Beschreibung der Kriechschädigungsentwicklung ist es zudem zweckmäßig, nur die am stärksten schädigenden Korngrenzen zu berücksichtigen. Wie in [Ott11] festgestellt wurde, neigen Kleinwinkel- und Koinzidenzkorngrenzen deutlich weniger zur Ausbildung von Kriechschädigung. Eine Gruppe von Körnern, welche beispielsweise durch Zwillingkorngrenzen miteinander verbunden sind, kann daher als ein zusammenhängendes großes Korn angesehen werden. Dies sollte sowohl bei der experimentellen Charakterisierung als auch bei der Erzeugung künstlicher Mikrostrukturen bedacht werden. Die Berücksichtigung des Korngrenzencharakters für die Beschreibung des Kriechverhaltens kann somit entweder über eine angepasste Modellierung der Kornstruktur, für welche nur die stärker schädigenden Korngrenzen berücksichtigt werden, oder durch korngrenzencharakterabhängige Parameter für das Kohäsionsmodell erreicht werden.

Wie bereits in Abschnitt 7.2.2 detailliert diskutiert wurde, wird innerhalb des Kohäsionsmodells nur ein einzelner Schädigungsmechanismus berücksichtigt. Dieser beschreibt die zeitliche Schädigungsentwicklung durch Poren aufgrund von Korngrenzendiffusion und führt mit Erreichen einer kritischen Porosität lokal zum vollständigen Versagen eines Korngrenzenbereiches. Eine Erhöhung der auf eine Korngrenze einwirkenden Normalspannung führt zwar zu einer Beschleunigung der Schädigungsentwicklung, jedoch wird im Rahmen der Modellierung keine kritische Belastung oder Deformation betrachtet, bei deren Überschreitung es instantan zu einer Zunahme der Schädigung kommt.

Speziell im tertiären Kriechbereich wird aber das vollständige Versagen eines Korngrenzenbereiches zunehmend durch andere Mechanismen als durch Korngrenzendiffusion bestimmt. Es erscheint daher sinnvoll, das Kohäsionsmodell um einen passenden Versagensmechanismus zu erweitern. Dieser sollte sich bevorzugt durch einen kontinuierlichen Übergang zum vollständig geschädigten Zustand auszeichnen, um Konvergenzproblemen vorzubeugen.

Darüber hinaus sprechen die Simulationsergebnisse für die untersuchten mehrachsigen Belastungszuständen dafür, dass für einen polykristallinen Werkstoff, dessen Kriechverhalten durch die im Rahmen der vorliegenden Arbeit betrachteten Mechanismen bestimmt ist, die Charakterisierung der Mehrachsigkeit auch anhand von zweiachsigen Zugversuchen erfolgen sollte.

Neben numerischen und modellierungstechnischen Aspekten hat letztendlich die Anpassung der Modellparameter einen sehr großen Einfluss auf das simulierte Kriechverhalten. Dies zeigte sich sehr deutlich im Vergleich der makroskopischen Kriechdehnungen zwischen Experimenten und Simulationen für die betrachteten Cu-Sb-Werkstoffe in den Abschnitten 6.3, 7.3.1 und 7.3.2.

Es stellt sich somit noch einmal die Frage, welche experimentellen Daten am besten für eine Anpassung von Modellparametern geeignet sind. Für zukünftige Untersuchungen sollten daher auch alternative Anpassungsstrategien, welche von der im Rahmen dieser Arbeit angewendeten Vorgehensweise abweichen, in Betracht gezogen werden.

8 Zusammenfassende Schlussbetrachtung

Mit dem Ziel die tatsächlich in einem polykristallinen Werkstoff ablaufenden Prozesse mit in die Beschreibung des Kriechverhaltens unter hohen Temperaturen und geringen Lasten einzufließen zu lassen, wurde in der vorliegenden Arbeit ein mikromechanisches Polykristallmodell entwickelt. Die dabei berücksichtigten Mechanismen orientierten sich vor allem am Kriechverhalten von Kupfer und Kupferlegierungen, für welche eine Vielzahl von veröffentlichten Daten und Erkenntnissen existieren (siehe Abschnitt 6).

Unter Berücksichtigung der für hohe Temperaturen und geringe Lasten als relevant angesehenen Prozesse, welche Nukleation, Wachstum durch Korngrenzendiffusion, Zusammenwachsen und Schrumpfen bis zum vollständigen Sintern von Korngrenzenporen umfassen, wurde dabei zunächst das Schädigungsverhalten einer einzelnen Korngrenze untersucht. Durch Betrachtung von Anordnungen unterschiedlich großer und ungleichmäßig verteilter Korngrenzenporen innerhalb einer speziell hierfür weiterentwickelten Simulationsprozedur, konnte die Schädigungsentwicklung einer Korngrenze für verschiedene Material- und Belastungsparameter untersucht und charakterisiert werden. Für die durchgeführten Untersuchungen wurde dabei angenommen, dass Korngrenzenporen stets eine linsenförmige Gleichgewichtsform besitzen, die angrenzenden Körner starr sind und sich die Korngrenze wie eine perfekte Leerstellenquelle verhält.

Die Auswertung der Simulationsergebnisse zeigte, dass Wechselwirkungen zwischen mehreren Poren oft durch geometrische Aspekte einer Porenanordnung bestimmt werden. Die relative Positionierung von Poren zueinander beeinflusste dabei nicht nur das diffusive Porenwachstum, sondern wirkte sich darüber hinaus auch auf das Zusammenwachsen und die möglichen Nukleationsorte neuer Poren aus. Ungleichmäßigkeiten in einer Porenanordnung führten dabei zu einer Reduzierung der Wachstumsraten, während die Häufigkeit, mit der das Zusammenwachsen von Poren stattfand, mit zunehmenden geschädigten Flächenanteil anstieg. Zudem zeigten die Simulationsergebnisse, dass neue Poren unter den getroffenen Annahmen nicht in der unmittelbaren Nähe zu bereits existierenden großen Poren nukleieren, da für diesen Fall ein stabiles Porenwachstum entsprechend der Lösung des Diffusionsrandwertproblems unwahrscheinlich war.

Durch genauere Analyse der Simulationsergebnisse konnten die für die Schädigungsentwicklung relevanten Prozesse identifiziert und ein vereinfachtes Porositätsmodell entwickelt werden, für welches der Schädigungszustand einer Korngrenze durch die dimensionslose Schädigungsvariable β (Korngrenzenaufdickung pro mittlerem Porenabstand) und die Porendichte ρ ausgedrückt wird. Die zeitliche Schädigungsentwicklung wird im Rahmen des vereinfachten Modells durch Mechanismen-orientierte Entwicklungsgleichungen beschrieben. Eine Erweiterung der Modellgleichungen erfolgte auf Basis von Porenschrumpfungssimulationen, für welche die Poren einer vorgegebenen Porenanordnung infolge einer Druckbelastung jeweils bis zum vollständigen Sintern schrumpften. Dabei zeigte sich, dass für die Beschreibung der Verringerung der Porenanzahl unterschiedliche Porengrößen berücksichtigt werden müssen.

Ein mikromechanisches Polykristallmodell wurde für die Anwendung im Rahmen von FE-Simulationen entwickelt, um die Einflüsse unterschiedlicher Deformations- und Schädigungs-

mechanismen auf der Ebene der Kornstruktur für die Beschreibung des Kriechverhaltens zu nutzen. Das Modell erfordert die Betrachtung einer expliziten Mikrostruktur, so dass auch Wechselwirkungen zwischen mehreren Mechanismen und die aus der Kornmorphologie resultierende Beeinflussung des Kriechverhaltens erfasst werden können. Neben einem Einkristallmodell zur Beschreibung der Deformationen einzelner Körner nutzt das Polykristallmodell ein neu entwickeltes Kohäsionsmodell, um die durch scharfe Grenzflächen modellierten Korngrenzen zu beschreiben. Das Kohäsionsmodell berücksichtigt dabei die Entstehung einer Korngrenzenschädigung entsprechend dem vereinfachten Porositätsmodell. Darüber hinaus wird ein einfacher viskoser Zusammenhang in Abhängigkeit von einer phänomenologischen Korngrenzenviskosität genutzt, um Korngrenzengleiten zu beschreiben. Für die geometrische Modellierung von Kornstrukturen in Form eines FE-Modells werden Kontinuumsselemente für die Körner und kohäsive Elemente entlang der Korngrenzen verwendet. Die Modellierung von gekrümmten Korngrenzen erfordert darüber hinaus die Anwendung einer speziellen Modellierungstechnik zur Verknüpfung jeweils benachbarter Körner, da die geometrische Form einer mittels finiten Elementen diskretisierten gekrümmten Korngrenze nicht in jedem Fall differenzierbar ist.

Mit dem Ziel, das Kriechverhalten eines Cu-Sb-Werkstoffes zu beschreiben, konnten experimentelle Kriechversuchsdaten zur Anpassung der Parameter des Polykristallmodells genutzt werden. Die Kriechdaten wurden am Institut für Werkstoffe der RUB anhand von Versuchen mit Minikriechproben für reine Kupfereinkristalle sowie für eine grobkörnige Cu-Sb-Legierung bei einer Versuchstemperatur von 823 K gewonnen. Die untersuchten Kriechlasten lagen zwischen 8 MPa und 20 MPa.

Es zeigte sich, dass für die Kalibrierung der innerhalb des Polykristallmodells berücksichtigten Mechanismen jeweils unterschiedliche Versuchsdaten genutzt werden müssen. So erfolgte die Anpassung der Parameter des Einkristallmodells ausschließlich anhand der Kriechversuchsdaten der einkristallinen Reinkupferproben. Dabei war festzustellen, dass das Modell die experimentell beobachtete Abhängigkeit des Deformationsverhaltens von der Kristallorientierung nicht im Detail reproduzieren konnte. Im Rahmen der Beschreibung des Kriechverhaltens der am Institut für Werkstoffe der RUB getesteten Cu-Sb-Minikriechproben zeigte sich aber, dass eine Anpassung des Einkristallmodells ausschließlich anhand von $\langle 111 \rangle$ -orientierten Reinkupferproben geeignet war, um die Größenordnung der experimentellen Kriechraten abzubilden. Aus der weiteren Anwendung des so kalibrierten Einkristallmodells ergab sich im Vergleich mit den betrachteten Cu-Sb-Werkstoffen aber eine Überschätzung des primären Kriechbereiches, woraus eine systematische Überschätzung der zeitlichen Kriechdehnungsentwicklung folgte.

Im Rahmen der weiteren Anpassung konnten die am Institut für Werkstoffe der RUB mittels orientierungsabbildender Rasterelektronenmikroskopie an der Oberfläche von Cu-Sb-Proben erfassten Kornstrukturen genutzt werden, um jeweils die tatsächliche Kornstruktur durch eine idealisierte prismatische Mikrostruktur zu approximieren. Letztere wurden dann als Grundlage für die Erstellung von FE-Modellen verwendet. Die FE-Modelle wurden im weiteren Verlauf genutzt, um das Kriechverhalten der am Institut für Werkstoffe der RUB getesteten Cu-Sb-Proben im Rahmen der Parameteranpassung zu simulieren.

Weiterhin waren die mittels Bildkorrelationstechnik am Institut für Werkstoffe der RUB erfass-

ten Oberflächenverschiebungen eine wichtige Voraussetzung für die Anpassung der Korngrenzenviskosität. Durch Auswertung dieser Daten konnte in [Kia12] das Ausmaß an Korngrenzengleiten für ausgewählte Cu-Sb-Minikriechproben bestimmt werden. Durch den Vergleich mit simulierten Korngrenzenabgleitungen konnte die Größenordnung der Korngrenzenviskosität mit $\eta_{\text{KGG}} = 10^7 \text{ N s/mm}^3$ abgeschätzt werden. Angesichts der deutlich beobachtbaren Oberflächentopografien der getesteten grobkörnigen Cu-Sb-Proben steht diese Korngrenzenviskosität für ausgeprägtes Korngrenzengleiten.

Für die Anpassung der Parameter des verwendeten Porositätsmodells wurden hingegen die am Institut für Werkstoffe der RUB mittels REM-Aufnahmen erfasste Korngrenzenschädigung genutzt. Hierbei wurden vereinfachte stereologische Betrachtungen verwendet, um Anzahl und Größe von Korngrenzenporen mit den Zustandsvariablen des Porositätsmodells in Verbindung zu setzen. Aufgrund ihrer physikalischen oder geometrischen Bedeutung konnten mehrere Parameter des Porositätsmodells durch Literaturangaben oder anderweitige Überlegungen auf sinnvolle Werte festgelegt werden, wodurch die Anzahl an anzupassenden Parametern deutlich gesenkt wurde. Mit dem Koeffizient \tilde{D}_{KGG} , welcher das Ausmaß an Korngrenzendiffusion beschreibt, und dem Vorfaktor a_{P} , welcher die Nukleationsintensität repräsentiert, wurden nur zwei anzupassende Parameter betrachtet, welche aber jeweils einen starken Einfluss auf die Korngrenzenporosität haben. Eine derartige Reduktion war auch deshalb nötig, da die Basis an verfügbaren experimentellen Daten im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht breit genug war, um sämtliche Parameter des Porositätsmodells anzupassen. Allerdings führte dies auch dazu, dass die angepassten Parameter nicht eindeutig waren, sondern teilweise von den vorgewählten Parametern abhingen.

Mit dem angepassten Polykristallmodell konnten in weiteren Studien die Beeinflussung der Simulationsergebnisse durch die jeweilige Vernetzung einer Kornstruktur sowie weitere modellierungstechnische Aspekte untersucht werden. Dabei zeigte sich, dass vor allem das Auftreten von Volumenlocking, welches infolge des nahezu inkompressiblen Deformationsverhaltens des Einkristallmodells für bestimmte Elementtypen auftrat, zu einer deutlichen Verfälschung der Ergebnisse führte. Weiterhin deuteten die Ergebnisse von Simulationen mit unterschiedlichen Kontinuumselementtypen daraufhin, dass sich für die Modellierung der Korngrenzen durch scharfe Grenzflächen Ähnlichkeiten zu einem harten Kontaktproblem ergeben. Trotz des höheren Berechnungsaufwandes empfiehlt sich daher im Rahmen der hier präsentierten Modellierung die Verwendung des Elementtyps C3D10M des FE-Programmes Abaqus.

Weiterhin ergab sich nur eine vergleichsweise geringe Beeinflussung der Simulationsergebnisse durch die Vernetzungseinheit, so dass bereits für grob vernetzte FE-Modelle das Kriechverhalten mit tolerierbaren Abweichungen beschrieben werden konnte. Eine Beeinflussung des makroskopischen Kriechverhaltens durch Spannungskonzentrationen, welche infolge von Korngrenzengleiten an Tripellinien innerhalb der Simulationen auftraten, konnte nicht festgestellt werden. Da im Rahmen des mikromechanischen Polykristallmodells die Zunahme der Korngrenzenschädigung ausschließlich durch das entwickelte Porositätsmodell berücksichtigt wird, konnte die Kriechbeschleunigung im tertiären Kriechbereich noch nicht hinreichend gut beschrieben werden. Auf Basis der Simulationsergebnisse konnte aber ein vollständig geschädigter Korngrenzenflächenanteil von 5 % als makroskopisches Versagens-

kriterium identifiziert werden, ab welchem mit größeren Abweichungen zwischen Simulationen und dem tatsächlichen Werkstoffverhalten gerechnet werden muss.

Die Anwendung des kalibrierten Polykristallmodells in Kombination mit künstlich erzeugten Kornstrukturen konnte weiterhin genutzt werden, um das Kriechverhalten polykristalliner Werkstoffe genauer zu untersuchen. Die Betrachtung einer 125 Körner umfassenden Mikrostruktur mit gleichmäßiger Kornmorphologie führte dabei zu einem nahezu richtungsunabhängigen makroskopischen Kriechverhalten. Aus dem Vergleich mit experimentellen Kriechdaten eines feinkörnigeren Cu-Sb-Werkstoffes für verschiedene Spannungsniveaus war zudem ersichtlich, dass die Spannungsabhängigkeit durch das angepasste Polykristallmodell noch nicht zufriedenstellend beschrieben wird.

Die Simulationsergebnisse zeigten darüber hinaus sehr deutlich, dass Korngrenzengleiten in mehrfacher Weise mit anderen Mechanismen wechselwirken kann. Zum einen waren die resultierenden Kriechdehnungen der Körner umso größer, je stärker Korngrenzengleiten ausgeprägt war. Zum anderen ergaben sich durch Korngrenzengleiten ebenso wie durch die Ausbildung der Korngrenzenschädigung Spannungsumlagerungen an den Korngrenzen. Während Korngrenzengleiten dabei zu einer Erhöhung der Normalspannungen an Korngrenzen, welche senkrecht zur äußeren Belastungsrichtung orientiert waren, führte, konnten gegenläufige Umlagerungen infolge der Korngrenzenschädigung beobachtet werden. Welcher Mechanismus die Spannungsumlagerungen prägte, hing letztendlich von den Geschwindigkeiten ab, mit denen Deformationsunterschiede ausgeglichen werden konnten. Für das Polykristallmodell, welches anhand der vom Institut für Werkstoffe der RUB bereitgestellten Daten kalibriert wurde, ergaben sich dabei Spannungsumlagerungen, welche, abgesehen von der unmittelbaren Anfangsphase, mit dem Verhalten für ungehindertes Korngrenzengleiten vergleichbar waren.

Erste Untersuchungen zum Kriechverhalten unter mehrachsigen Belastungszuständen deuteten zudem darauf hin, dass die Versagenszeiten und daher auch die Schädigungsentwicklung durch die maximale Hauptspannung und die von Mises-Spannung maßgeblich beeinflusst werden. Die Unterschiede gegenüber einer Beschreibung der Versagenszeiten mittels maximaler Hauptspannung und Spur des Spannungstensors äußerten sich jedoch im Wesentlichen nur bei einer zweiachsigen Zugbelastung.

A Berechnung von Volumenwachstumsraten

Für die Berechnung der Volumenwachstumsrate der i -ten Pore wird die Definition des Diffusionsflusses (4.3) in Verbindung mit (4.12) in die Berechnungsformel (4.10) eingesetzt:

$$\begin{aligned} \dot{V}_i &= \oint_{L_i} \mathbf{j}_{\text{KG}} \cdot (-\mathbf{n}_S) \, dL + \pi a_i^2 [\dot{u}]^{\text{P}} \\ &= -\tilde{D}_{\text{KG}} \underbrace{\oint_{L_i} \nabla \sigma_h \cdot \mathbf{n}_S \, dL}_{\mathbf{1}} - \tilde{D}_{\text{KG}} \underbrace{\oint_{L_i} \nabla \sigma_0 \cdot \mathbf{n}_S \, dL}_{\mathbf{2}} + \pi a_i^2 [\dot{u}]^{\text{P}}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Für die Auswertung der Integrale $\mathbf{1}$ und $\mathbf{2}$ wird im Folgenden der Normalenvektor \mathbf{n}_S auf dem Rand L_i explizit durch

$$\mathbf{n}_S = [-\cos \theta \quad -\sin \theta]^T \quad (\text{A.2})$$

in Abhängigkeit vom Winkel θ ausgedrückt. Durch direktes Einsetzen der partikulären Lösung (4.11) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mathbf{2} &= \int_0^{2\pi} \left(-\frac{[\dot{u}]^{\text{P}}}{2\tilde{D}_{\text{KG}}} (\text{Re}(\mathbf{c}_i) + a_i \cos \theta) \right) \cdot \begin{pmatrix} -\cos \theta \\ -\sin \theta \end{pmatrix} a_i \, d\theta \\ &= \frac{a_i [\dot{u}]^{\text{P}}}{2\tilde{D}_{\text{KG}}} \int_0^{2\pi} \text{Re}(\mathbf{c}_i) \cos \theta + \text{Im}(\mathbf{c}_i) \sin \theta + a_i \, d\theta \\ &= \frac{a_i^2 \pi [\dot{u}]^{\text{P}}}{\tilde{D}_{\text{KG}}}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Weiterhin kann der Gradient der durch (4.17) und (4.18) definierten reellen Funktion $\sigma_h(z)$ durch

$$\nabla \sigma_h = \begin{pmatrix} \text{Re} \left(\frac{d\sigma_{hc}}{dz} \right) \\ -\text{Im} \left(\frac{d\sigma_{hc}}{dz} \right) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \sigma_{hc}(z) = \mathbf{f}(z) + \sum_{k=1}^{N_{S0}} \Lambda_k \ln \frac{z - \mathbf{c}_k}{R} \quad (\text{A.4})$$

angegeben werden, worin $\sigma_{hc}(z)$ das komplexe Pendant zu $\sigma_h(z)$ ist. Einsetzen von (A.2) und (A.4) in $\mathbf{1}$ ergibt:

$$\mathbf{1} = - \int_0^{2\pi} \left\{ \text{Re} \left(\frac{d\sigma_{hc}}{dz} \right)_{z=\mathbf{c}_i+a_i e^{i\theta}} \cos \theta - \text{Im} \left(\frac{d\sigma_{hc}}{dz} \right)_{z=\mathbf{c}_i+a_i e^{i\theta}} \sin \theta \right\} a_i \, d\theta$$

$$\begin{aligned}
 &= -a_i \int_0^{2\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{d\sigma_{hc}}{dz} e^{i\theta} \right)_{z=c_i+a_i e^{i\theta}} d\theta \\
 &= -a_i \underbrace{\int_0^{2\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{df}{dz} e^{i\theta} \right)_{z=c_i+a_i e^{i\theta}} d\theta}_{\textcircled{3}} - \sum_{k=1}^{N_{S_0}} \Lambda_k \underbrace{\int_0^{2\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{e^{i\theta}}{e^{i\theta} + \frac{c_i - c_k}{a_i}} \right) d\theta}_{\textcircled{4}}. \quad (\text{A.5})
 \end{aligned}$$

Durch direktes Einsetzen von (4.18) in $\textcircled{3}$ folgt

$$\begin{aligned}
 \textcircled{3} &= -\frac{a_i}{2} \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{df}{dz} e^{i\theta} + \overline{\left(\frac{df}{dz} \right)} e^{-i\theta} \right\}_{z=c_i+a_i e^{i\theta}} d\theta \\
 &= -\frac{a_i}{2} \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{m}{R} \int_0^{2\pi} \left\{ Z_{0,m} \left(\frac{z}{R} \right)^{m-1} e^{i\theta} + \overline{Z}_{0,m} \left(\frac{\bar{z}}{R} \right)^{m-1} e^{-i\theta} \right\}_{z=c_i+a_i e^{i\theta}} d\theta \\
 &\quad + \frac{a_i}{2} \sum_{k=1}^{N_{S_0}} \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{m}{a_k} \int_0^{2\pi} \left\{ Z_{k,m} \left(\frac{a_k}{z - c_k} \right)^{m+1} e^{i\theta} \right. \\
 &\quad \quad \left. + \overline{Z}_{k,m} \overline{\left(\frac{a_k}{z - c_k} \right)^{m+1}} e^{-i\theta} \right\}_{z=c_i+a_i e^{i\theta}} d\theta \\
 &= -\sum_{m=1}^{+\infty} \frac{a_i^m}{R^m} \frac{m}{2} \int_0^{2\pi} \left\{ Z_{0,m} \left(\frac{c}{a_i} + e^{i\theta} \right)^{m-1} e^{i\theta} \right. \\
 &\quad \quad \left. + \overline{Z}_{0,m} \left(\frac{\bar{c}_i}{a_i} e^{i\theta} + 1 \right)^{m-1} \left(e^{i\theta} \right)^{-m} \right\} d\theta \\
 &\quad + \sum_{k=1}^{N_{S_0}} \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{a_k^m}{a_i^m} \frac{m}{2} \int_0^{2\pi} \left\{ Z_{k,m} \frac{e^{i\theta}}{\left(e^{i\theta} + \frac{c_i - c_k}{a_i} \right)^{m+1}} \right. \\
 &\quad \quad \left. + \overline{Z}_{k,m} \frac{\left(e^{i\theta} \right)^m}{\left(1 + e^{i\theta} \frac{\bar{c}_i - \bar{c}_k}{a_i} \right)^{m+1}} \right\} d\theta
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{a_i^m}{R^m} \frac{m}{2} \left\{ \underbrace{Z_{0,m} \int_{\mathbb{E}} \left(\frac{c}{a_i} + z \right)^{m-1} dz}_{\textcircled{5}} + \overline{Z}_{0,m} \int_{\mathbb{E}} \underbrace{\frac{\left(\frac{\overline{c}_i}{a_i} z + 1 \right)^{m-1}}{z^{m+1}} dz}_{\textcircled{6}} \right\} \\
&- i \sum_{k=1}^{N_{S_0}} \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{a_k^m}{a_i^m} \frac{m}{2} \left\{ \underbrace{Z_{k,m} \int_{\mathbb{E}} \frac{1}{\left(z + \frac{c_i - c_k}{a_i} \right)^{m+1}} dz}_{\textcircled{7}} \right. \\
&\quad \left. + \overline{Z}_{k,m} \int_{\mathbb{E}} \underbrace{\frac{z^{m-1}}{\left(1 + z \frac{\overline{c}_i - \overline{c}_k}{a_i} \right)^{m+1}} dz}_{\textcircled{8}} \right\}, \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die Substitution $z = e^{i\theta}$ mit $d\theta = -i dz/z$ erfolgte. Da die Integranden von $\textcircled{5}$, $\textcircled{6}$, $\textcircled{7}$ und $\textcircled{8}$ holomorph sind, kann der Residuensatz zur Berechnung genutzt werden. Die Integrale $\textcircled{5}$ und $\textcircled{7}$ verschwinden dabei, da der Integrand von $\textcircled{5}$ keine Polstelle besitzt und die $(m+1)$ -fache Polstelle $z_0 = -(c_i - c_k)/a_i$ des Integranden von $\textcircled{7}$ wegen $|c_i - c_k| = |\overline{c}_i - \overline{c}_k| > a_i + a_k$ außerhalb des Einheitskreises \mathbb{E} liegt. Die Integranden $\textcircled{6}$ und $\textcircled{8}$ besitzen mit $z_0 = 0$ und $z_0 = -a_i/(\overline{c}_i - \overline{c}_k)$ zwar jeweils eine Polstelle $(m+1)$ -ter Ordnung innerhalb des Einheitskreises \mathbb{E} , jedoch ergeben sich die Integrale $\textcircled{6}$ und $\textcircled{8}$ auch zu 0, da die zugehörigen Residuen verschwinden:

$$\begin{aligned}
\text{Res}(\textcircled{6}, z_0 = 0) &= \frac{1}{m!} \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{d^m}{z^m} \left[(z - z_0)^{m+1} \cdot \textcircled{6} \right] \\
&= \frac{1}{m!} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d^m}{z^m} \left[\underbrace{\left(\frac{\overline{c}_i}{a_i} z + 1 \right)^{m-1}}_{=0} \right] \\
&= 0, \quad (\text{A.7})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Res}(\textcircled{8}, z_0 = -\frac{a_i}{\overline{c}_i - \overline{c}_k}) &= \frac{1}{m!} \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{d^m}{z^m} \left[(z - z_0)^{m+1} \cdot \textcircled{8} \right] \\
&= \frac{1}{m!} \lim_{z \rightarrow \left(-\frac{a_i}{\overline{c}_i - \overline{c}_k} \right)} \frac{d^m}{z^m} \left[\underbrace{\left(\frac{a_i}{\overline{c}_i - \overline{c}_k} \right)^{m+1} z^{m-1}}_{=0} \right] \\
&= 0. \quad (\text{A.8})
\end{aligned}$$

Somit ergibt sich ④ ebenfalls zu 0.

Durch die Substitution $z = e^{i\theta}$ mit $d\theta = -i dz/z$ ergibt sich aus ④:

$$\begin{aligned} \textcircled{4} &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{e^{i\theta}}{e^{i\theta} + \frac{c_i - c_k}{a_i}} + \frac{1}{1 + e^{i\theta} \frac{\bar{c}_i - \bar{c}_k}{a_i}} d\theta \\ &= \frac{1}{2i} \int_{\mathbb{E}} \underbrace{\frac{1}{z + \frac{c_i - c_k}{a_i}} + \frac{1}{\left(1 + z \frac{\bar{c}_i - \bar{c}_k}{a_i}\right) z}}_{\textcircled{9}} dz . \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Wenn $i = k$, dann vereinfacht sich ⑨ zu

$$\textcircled{9}|_{i=k} = \frac{2}{z} \quad \text{mit Residuum} \quad \text{Res}\left(\frac{2}{z}, z_0 = 0\right) = 2 . \quad (\text{A.10})$$

Für $i \neq k$ ergeben sich die beiden Polstellen von ⑨ innerhalb des Einheitskreises zu $z_0 = 0$ und $z_0 = -a_i / (\bar{c}_i - \bar{c}_k)$ mit den Residuen

$$\begin{aligned} \text{Res}(\textcircled{9}, z_0 = 0) &= \lim_{z \rightarrow z_0} [(z - z_0) \cdot \textcircled{9}] \\ &= \lim_{z \rightarrow 0} \left[\frac{z}{z + \frac{c_i - c_k}{a_i}} + \frac{1}{\left(1 + z \frac{\bar{c}_i - \bar{c}_k}{a_i}\right)} \right] \\ &= 1 , \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} \text{Res}\left(\textcircled{9}, z_0 = -\frac{a_i}{\bar{c}_i - \bar{c}_k}\right) &= \lim_{z \rightarrow z_0} [(z - z_0) \cdot \textcircled{9}] \\ &= \lim_{z \rightarrow \left(-\frac{a_i}{\bar{c}_i - \bar{c}_k}\right)} \left[\frac{1}{z + \frac{c_i - c_k}{a_i}} \left(z + \frac{a_i}{\bar{c}_i - \bar{c}_k}\right) + \frac{1}{\frac{\bar{c}_i - \bar{c}_k}{a_i} z} \right] \\ &= -1 . \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Entsprechend dem Residuensatz ergibt sich somit

$$\textcircled{4} = \begin{cases} 2\pi & , \text{ wenn } i = k \\ 0 & , \text{ wenn } i \neq k \end{cases} . \quad (\text{A.13})$$

Somit folgt unter Berücksichtigung von (A.5) und (A.3) aus (A.1):

$$\dot{V}_i = 2\pi \tilde{D}_{\text{KG}} A_i . \quad (\text{A.14})$$

B Zufällige Kristallorientierungen

Tab. B.1: Als OR11 bezeichnete Gruppe von 125 generierten Kristallorientierungen, welche jeweils durch die drei Euler-Winkel φ_1 , Φ und φ_2 nach der Definition von Bunge [Bun68] angegeben sind.

Nr.	$\varphi_1/^\circ$	$\Phi/^\circ$	$\varphi_2/^\circ$	Nr.	$\varphi_1/^\circ$	$\Phi/^\circ$	$\varphi_2/^\circ$	Nr.	$\varphi_1/^\circ$	$\Phi/^\circ$	$\varphi_2/^\circ$
1	199,35	134,69	36,48	43	66,73	148,91	232,77	85	225,88	63,92	315,74
2	16,45	93,57	97,23	44	253,62	36,66	57,67	86	239,68	98,51	117,92
3	183,58	133,92	175,25	45	187,22	136,01	284,94	87	145,93	67,17	215,70
4	144,24	121,64	110,84	46	178,25	138,69	332,01	88	347,64	57,86	181,41
5	329,42	44,39	231,32	47	264,73	29,41	90,87	89	31,10	67,52	171,39
6	144,63	84,44	240,25	48	239,38	26,72	79,19	90	28,96	78,74	348,36
7	92,59	54,21	212,69	49	61,17	11,93	71,19	91	30,87	94,04	343,94
8	301,83	97,83	308,75	50	272,74	93,68	187,70	92	107,89	70,15	359,12
9	29,81	36,45	102,59	51	111,86	72,75	330,26	93	328,10	125,26	12,85
10	323,38	124,99	50,65	52	307,09	150,79	340,63	94	28,39	65,94	293,84
11	234,78	60,03	223,42	53	58,92	80,56	176,76	95	9,01	112,04	130,29
12	271,56	87,82	210,56	54	24,09	140,42	120,95	96	354,72	25,33	5,50
13	102,65	63,18	71,86	55	82,54	97,25	79,10	97	83,55	34,22	145,05
14	315,18	35,82	291,05	56	94,73	45,51	300,79	98	18,62	72,13	234,27
15	12,11	109,13	122,38	57	240,99	54,56	134,56	99	12,55	117,77	47,59
16	244,46	141,00	166,58	58	323,56	140,14	357,95	100	165,75	81,46	69,20
17	100,50	129,87	308,66	59	159,31	85,20	249,95	101	288,20	44,75	337,67
18	75,50	62,98	239,47	60	18,43	101,45	155,23	102	268,49	143,61	295,76
19	330,85	128,77	75,76	61	304,38	35,93	117,77	103	236,34	37,10	108,81
20	82,88	121,01	19,85	62	103,76	58,41	205,92	104	356,90	114,87	179,66
21	170,35	115,52	92,26	63	109,34	15,11	68,53	105	232,54	58,57	165,26
22	56,89	162,51	43,73	64	338,39	143,57	201,25	106	46,16	96,48	286,06
23	199,87	144,54	240,65	65	72,24	96,57	298,81	107	190,91	62,75	314,57
24	161,77	7,04	209,44	66	42,95	117,07	311,72	108	184,80	79,20	103,09
25	157,18	72,83	5,06	67	122,30	103,32	75,30	109	249,75	70,01	256,58
26	42,89	89,53	228,59	68	175,09	123,71	176,06	110	28,42	124,43	270,39
27	142,85	71,53	327,07	69	253,75	121,44	221,63	111	298,98	109,20	339,34
28	134,44	37,20	130,89	70	38,97	125,82	330,63	112	116,83	54,44	139,24
29	59,65	27,99	62,80	71	252,83	125,92	89,98	113	98,99	75,94	227,00
30	200,93	121,89	203,84	72	234,69	130,07	317,79	114	167,13	135,16	354,73
31	161,25	65,11	358,86	73	321,07	80,01	40,16	115	268,84	56,27	97,05
32	284,89	101,61	126,94	74	241,57	81,80	282,11	116	323,77	103,31	312,89
33	35,95	52,82	82,73	75	143,56	147,36	256,82	117	324,30	114,10	129,82
34	188,25	112,15	244,24	76	104,92	86,89	14,83	118	327,36	80,83	4,97
35	28,83	118,58	110,52	77	106,42	64,89	155,02	119	59,20	117,54	310,43
36	348,96	124,68	246,42	78	275,87	81,91	286,35	120	254,84	141,76	52,86
37	107,99	90,66	228,67	79	9,67	141,37	254,86	121	121,85	104,30	314,04
38	153,34	28,44	57,45	80	51,06	129,71	129,06	122	334,54	133,08	227,44
39	105,47	94,30	346,92	81	95,34	87,36	93,87	123	16,78	65,01	117,59
40	182,94	97,72	284,11	82	355,73	166,88	21,53	124	171,02	116,69	232,59
41	283,34	80,96	112,11	83	34,40	76,71	11,25	125	238,07	162,69	26,85
42	346,02	119,70	168,20	84	248,29	91,93	226,56				

Tab. B.2: Als OR12 bezeichnete Gruppe von 125 generierten Kristallorientierungen, welche jeweils durch die drei Euler-Winkel φ_1 , Φ und φ_2 nach der Definition von Bunge [Bun68] angegeben sind.

Nr.	$\varphi_1/^\circ$	$\Phi/^\circ$	$\varphi_2/^\circ$	Nr.	$\varphi_1/^\circ$	$\Phi/^\circ$	$\varphi_2/^\circ$	Nr.	$\varphi_1/^\circ$	$\Phi/^\circ$	$\varphi_2/^\circ$
1	78,39	93,69	308,83	43	177,26	115,05	295,86	85	224,49	70,46	178,68
2	105,87	44,84	16,97	44	204,88	31,43	98,20	86	183,82	95,23	138,39
3	123,82	66,25	287,34	45	278,09	168,97	66,09	87	294,17	60,66	278,49
4	172,04	109,46	42,95	46	18,11	111,22	49,14	88	102,45	23,83	198,40
5	300,10	115,41	124,36	47	42,78	32,21	141,24	89	187,00	41,63	298,13
6	93,11	107,42	260,34	48	269,03	78,71	67,34	90	63,23	79,47	292,87
7	6,59	71,10	236,12	49	206,65	107,98	263,44	91	172,42	130,67	187,34
8	82,51	145,50	355,49	50	271,22	163,80	39,42	92	346,39	136,45	115,54
9	164,99	69,89	172,91	51	2,34	23,91	322,42	93	4,04	119,55	113,20
10	203,39	91,69	59,99	52	1,59	126,35	131,54	94	106,11	36,22	52,35
11	181,65	72,97	222,61	53	22,77	94,01	347,27	95	271,60	115,07	230,40
12	256,75	155,53	84,77	54	241,26	99,28	304,58	96	127,89	117,01	138,33
13	78,27	129,47	184,99	55	35,48	73,88	126,20	97	299,02	36,17	181,73
14	37,60	91,52	165,66	56	6,54	133,21	22,53	98	61,93	92,23	283,70
15	73,73	56,14	16,14	57	350,71	105,45	289,73	99	73,34	90,81	117,29
16	309,87	109,61	27,81	58	272,11	35,39	44,66	100	268,81	98,00	189,51
17	74,04	36,05	213,65	59	264,85	75,28	342,00	101	208,72	109,47	39,59
18	294,19	131,25	258,91	60	182,93	42,25	313,26	102	354,49	111,29	97,50
19	244,66	163,37	129,84	61	308,65	143,34	27,62	103	328,66	69,92	23,26
20	72,60	50,83	164,08	62	335,26	54,37	290,82	104	328,70	133,80	2,21
21	340,59	147,93	302,53	63	161,38	115,89	123,77	105	246,64	30,39	18,26
22	109,94	105,95	321,05	64	21,54	98,25	240,12	106	133,95	47,80	144,96
23	50,71	118,24	143,78	65	184,71	43,90	13,03	107	228,52	138,78	124,76
24	136,75	79,24	323,25	66	18,32	58,27	39,35	108	173,76	89,29	298,33
25	262,29	114,85	180,70	67	25,11	58,27	31,98	109	66,75	71,19	22,38
26	320,51	93,18	70,63	68	31,16	39,57	147,91	110	156,68	88,67	7,54
27	7,47	175,06	218,96	69	1,43	146,58	188,46	111	277,95	111,20	36,36
28	228,95	25,26	6,36	70	111,71	56,86	9,26	112	232,49	108,80	277,59
29	87,79	37,20	270,03	71	168,95	7,36	100,79	113	36,36	73,24	67,17
30	71,59	40,01	311,92	72	86,01	47,55	315,58	114	303,38	144,10	305,28
31	302,59	85,82	283,89	73	297,62	65,50	155,78	115	219,99	95,23	33,89
32	285,20	104,62	203,44	74	41,65	66,86	316,63	116	183,98	121,41	172,38
33	323,31	148,74	172,36	75	255,62	136,53	62,25	117	268,50	83,45	346,12
34	127,81	125,58	2,62	76	72,14	17,25	249,43	118	134,94	112,07	198,28
35	193,20	61,92	50,30	77	92,36	146,49	121,28	119	304,71	100,09	58,12
36	287,82	80,68	253,53	78	144,57	56,00	140,26	120	129,36	107,05	348,72
37	344,70	131,44	174,31	79	247,58	96,19	120,17	121	313,44	89,00	84,02
38	287,31	104,28	272,18	80	357,71	103,23	96,35	122	269,66	106,14	357,08
39	199,86	143,78	217,91	81	38,57	102,50	120,33	123	297,26	98,79	200,07
40	289,25	59,84	334,66	82	320,12	130,38	358,30	124	262,03	136,88	136,52
41	70,05	67,35	57,38	83	320,53	104,15	352,24	125	67,93	107,70	207,80
42	189,00	85,07	170,90	84	331,21	109,85	50,45				

Literaturverzeichnis

- [Aba] *Abaqus 6.11 Online Documentation*. Build ID: 2011_04_07-11.54.48 40404. Dassault Systèmes. 2011.
- [AHVSNL03] P. Auerkari, S. Holmström, J. Veivo, J. Salonen, P. Nenonen und A. Laukkanen: *Uniaxial and multiaxial creep testing of copper*. SKI Report 2003:06, SKI, Stockholm. 2003.
- [AL96] A. Ayensu und T. G. Langdon: The inter-relationship between grain boundary sliding and cavitation during creep of polycrystalline copper. *Metallurgical and Materials Transactions A* 27 (1996), S. 901–907.
- [AR85] P. M. Anderson und J. R. Rice: Constrained creep cavitation of grain boundary facets. *Acta Metallurgica* 33 (1985), S. 409–422.
- [Ash72] M. F. Ashby: Boundary defects, and atomistic aspects of boundary sliding and diffusional creep. *Surface Science* 31 (1972), S. 498–542.
- [Axl86] S. Axler: Harmonic functions from a complex analysis viewpoint. *The American Mathematical Monthly* 93 (1986), S. 246–258.
- [Bar59] G. I. Barenblatt: The formation of equilibrium cracks during brittle fracture. General ideas and hypotheses. Axially-symmetric cracks. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics* 23 (1959), S. 622–636.
- [BDSIMBKP11] A. Borbély, K. Dzieciol, F. Sket, A. Isaac, M. di Michiel, T. Buslaps und A. R. Kaysser-Pyzalla: Characterization of creep and creep damage by in-situ microtomography. *JOM* 63 (2011), S. 78–84.
- [Ber03] W. Bergmann: *Werkstofftechnik* 1. 5., verbesserte Auflage. Hanser, 2003.
- [Bro65] C. G. Broyden: A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. *Mathematics of Computations* 19 (1965), S. 557–593.
- [BRV14] R. de Borst, J. J. Remmers und C. V. Verhoose: Evolving Discontinuities and Cohesive Fracture. *Procedia IUTAM* 10 (2014), S. 125–137.
- [BS78] W. Beere und M. V. Speight: Creep cavitation by vacancy diffusion in plastically deforming solid. *Metal Science* 12 (1978), S. 172–176.
- [BSG08] M. J. van den Bosch, P. J. G. Schreurs und M. G. D. Geers: On the development of a 3D cohesive zone element in the presence of large deformations. *Computational Mechanics* 42 (2008), S. 171–180.
- [BTT68] R. L. Bell, N. B. W. Thompson und P. A. Turner: Grain-boundary slide-hardening in zinc bicrystals. *Journal of Materials Science* 3 (1968), S. 524–533.

- [Bun68] H. J. Bunge: Texturbeschreibung durch dreidimensionale Polfiguren. In: *Texturen in Forschung und Praxis*. Hrsg. von J. Grewen und G. Wassermann. Springer, 1968, S. 24–35.
- [BW04] A. F. Bower und E. Wininger: A two-dimensional finite element method for simulating the constitutive response and microstructure of polycrystals during high temperature plastic deformation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 52 (2004), S. 1289–1317.
- [Bür06] R. Bürgel: *Handbuch Hochtemperatur-Werkstofftechnik*. 3., überarb. u. erw. Auflage. Vieweg, 2006.
- [CA80] A. C. F. Cocks und M. F. Ashby: Intergranular fracture during power-law creep under multiaxial stresses. *Metal Science* 14 (1980), S. 395–402.
- [CA81] I.-W. Chen und A. S. Argon: Diffusive growth of grain-boundary cavities. *Acta Metallurgica* 29 (1981), S. 1759–1768.
- [CA82] A. C. F. Cocks und M. F. Ashby: On creep fracture by void growth. *Progress in Materials Science* 27 (1982), S. 189–244.
- [CBQK09] D. E. Cipoletti, A. F. Bower, Y. Qi und P. E. Krajewski: The influence of heterogeneity in grain boundary sliding resistance on the constitutive behavior of AA5083 during high-temperature deformation. *Materials Science and Engineering: A* 504 (2009), S. 175–182.
- [CD88] J. J. Chyou und T. J. Delph: Some effects of random creep cavity placement along a planar grain boundary. *Scripta Metallurgica* 22 (1988), S. 871–875.
- [CFDH95] J. R. Cockman, R. J. Fields, T. J. Delph und D. G. Harlow: Spatial statistics of creep cavities. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 3 (1995), S. 187–200.
- [CKRS79] T. Chuang, K. I. Kagawa, J. R. Rice und L. B. Sills: Non-equilibrium models for diffusive cavitation of grain interfaces. *Acta Metallurgica* 22 (1979), S. 265–284.
- [CM04] J. D. Clayton und D. L. McDowell: Homogenized finite elastoplasticity and damage: theory and computations. *Mechanics of Materials* 36 (2004), S. 799–824.
- [CP90] K. S. Chan und R. A. Page: Continuous creep cavity nucleation by stochastic grain-boundary sliding. *Journal of Materials Science* 25 (1990), S. 4622–4629.
- [CRS85] T. C. Chu, W. F. Ranson und M. A. Sutton: Applications of digital-image-correlation techniques to experimental mechanics. *Experimental Mechanics* 25 (1985), S. 232–244.

- [CSCC10] F. Cazes, A. Simatos, M. Coret und A. Combescure: A cohesive zone model which is energetically equivalent to a gradient-enhanced coupled damage-plasticity model. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 29 (2010), S. 976–989.
- [DBKT08] N. Du, A. F. Bower, P. E. Krajewski und E. M. Taleff: The influence of a threshold stress for grain boundary sliding on constitutive response of polycrystalline Al during high temperature deformation. *Materials Science and Engineering: A* 494 (2008), S. 86–91.
- [DR93] M. W. Dib und G. J. Rodin: Three-dimensional analysis of creeping polycrystals using periodic arrays of truncated octahedra. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 41 (1993), S. 725–747.
- [Dug60] D. S. Dugdale: Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 8 (1960), S. 100–104.
- [Dys76] B. F. Dyson: Constraints on diffusional cavity growth rates. *Metal Science* 10 (1976), S. 349–353.
- [Dys83] B. F. Dyson: Continuous cavity nucleation and creep fracture. *Scripta Metallurgica* 17 (1983), S. 31–37.
- [Dzi10] K. P. Dzieciol: "Four dimensional characterisation of creep cavity growth in copper". Dissertation. Ruhr-Universität Bochum, 2010.
- [EA79] G. H. Edward und M. F. Ashby: Intergranular fracture during power-law creep. *Acta Metallurgica* 27 (1979), S. 1505–1518.
- [EENI89] G. Eggeler, J. C. Earthman, N. Nilsvang und B. Ilshner: Microstructural study of creep rupture in a 12% chromium ferritic steel. *Acta Metallurgica* 37 (1989), S. 49–60.
- [Egg91] G. Eggeler: Microstructural parameters for creep damage quantification. *Acta Metallurgica et Materialia* 39 (1991), S. 221–231.
- [ES92] U. von Estorff und H. Stamm: Determination of creep damage in steels. In: *Creep: Characterization, Damage and Life Assessments - Proceedings of the Fifth International Conference on Creep of Materials*. Florida, USA, May 18-21, 1992.
- [FA82] H. J. Frost und M. F. Ashby: *Deformation-Mechanism Maps: The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics*. Pergamon Press, 1982.
- [FBS09] F. Fritzen, T. Böhlke und E. Schnack: Periodic three-dimensional mesh generation for crystalline aggregates based on Voronoi tessellations. *Computational Mechanics* 43 (2009), S. 701–713.
- [Fed98] B. Fedelich: A stochastic theory for the problem of multiple surface crack coalescence. *International Journal of Fracture* 91 (1998), S. 23–45.
- [FG00] P. J. Frey und P.-L. George: *Mesh generation: application to finite elements*. Hermes, 2000.

- [FHD85] S. J. Fariborz, D. G. Harlow und T. J. Delph: The effects of nonperiodic void spacing upon intergranular creep cavitation. *Acta Metallurgica* 33 (1985), S. 1–9.
- [FHD86] S. J. Fariborz, D. G. Harlow und T. J. Delph: Intergranular creep cavitation with time-discrete stochastic nucleation. *Acta Metallurgica* 34 (1986), S. 1433–1441.
- [FKL08] B. Fedelich, S. Kaßbohm und C. Laun: *Zwischenbericht zum Projekt: Werkstoffwissenschaftliche Untersuchungen und mikromechanische Modellierung der Korngrenzenschädigung in einer Kupferlegierung unter Kriechbeanspruchung - Teilprojekt Kontinuumsmechanik*. Techn. Ber. Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), 2008.
- [FO09] B. Fedelich und J. Owen: Creep damage by multiple cavity growth controlled by grain boundary diffusion. In: *Proceedings of the 12th International Conference on Fracture*. Ottawa, Canada, July 12-17, 2009.
- [FTB75] R. G. Fleck, D. M. R. Taplin und C. J. Beevers: An investigation of the nucleation of creep cavities by 1 MV electron microscopy. *Acta Metallurgica* 23 (1975), S. 415–424.
- [GGUD08a] M. Groeber, S. Ghosh, M. D. Uchic und D. M. Dimiduk: A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 1: Statistical characterization. *Acta Materialia* 56 (2008), S. 1257–1273.
- [GGUD08b] M. Groeber, S. Ghosh, M. D. Uchic und D. M. Dimiduk: A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 2: Synthetic structure generation. *Acta Materialia* 56 (2008), S. 1274–1287.
- [GOB97] E. van der Giessen, P. Onck und M. W. D van der Burg: Some effects of random microstructural variations on creep rupture. *Engineering Fracture Mechanics* 57 (1997), S. 205–226.
- [GS01] D. Gross und T. Seelig: *Bruchmechanik - mit einer Einführung in die Mikromechanik*. 3. Auflage. Springer, 2001.
- [GSS12] G. Giambanco, G. F. Scimemi und A. Spada: The interphase finite element. *Computational Mechanics* 50 (2012), S. 353–366.
- [GT91] E. van der Giessen und V. Tvergaard: A creep rupture model accounting for cavitation at sliding grain boundaries. *International Journal of Fracture* 48 (1991), S. 153–178.
- [GT94a] E. van der Giessen und V. Tvergaard: Development of final creep failure in polycrystalline aggregates. *Acta Metallurgica et Materialia* 42 (1994), S. 959–973.

- [GT94b] E. van der Giessen und V. Tvergaard: Effect of random variations in microstructure on the development of final creep failure in polycrystalline aggregates. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 2* (1994), S. 721–738.
- [GT94c] E. van der Giessen und V. Tvergaard: Simulations of creep failure in polycrystals with random variations in microstructure and with curved grain boundaries. In: *Numerical Predictions of Deformation Processes and the Behaviour of Real Materials*. Hrsg. von S. I. Andersen. Roskilde, Denmark, 1994, S. 313–318.
- [GTAKSMSHYUST12] C. Gupta, H. Toda, Y. Adachi, M. Kobayashi, C. Schlacher, P. Mayr, C. Sommitsch, H. Hoshino, S. Yamauchi, K. Uesugi, Y. Suzuki und A. Takeuchi: Analysis of creep cavitation in advanced 9-12% Cr steels using 3-D characterization techniques. In: *Proceedings of the 12th International Conference on Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures (JIMIS 11)*. Hrsg. von K. Maruyama, F. Abe, M. Igarashi, K. Kishida, M. Suzuki und K. Yoshimi. The Japan Institute of Metals. 2012.
- [GW09] T. B. Gibbons und I. G. Wright: *A review of materials for gas turbines firing syngas fuels*. Techn. Ber. ORNL/TM-2009/137. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), 2009.
- [HA09] S. Holmström und P. Auerkari: Predicting creep rupture from early strain data. *Materials Science and Engineering: A* 510-511 (2009), S. 25–28.
- [Hay72] D. R. Hayhurst: Creep rupture under multi-axial states of stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 20 (1972), S. 381–390.
- [Her50] C. Herring: Diffusional viscosity of a polycrystalline solid. *Journal of Applied Physics* 21 (1950), S. 437–445.
- [HG82] M. D. Hanna und G. W. Greenwood: Cavity growth and creep in copper at low stresses. *Acta Metallurgica* 30 (1982), S. 719–724.
- [HLMKDLN87] J. Hult, J. Lemaître, S. Murakami, D. Krajcinovic, D. Sumarac, F. A. Leckie und J. Najjar: *Continuum Damage Mechanics: Theory And Applications*. Hrsg. von D. Krajcinovic und J. Lemaître. Springer, 1987.
- [HMF90] M. Hirao, T. Morishita und H. Fukuoka: Ultrasonic velocity change with creep damage in copper. *Metallurgical Transactions A* 21 (1990), S. 1725–1732.
- [Hol08] S. R. Holdsworth: Constitutive equations for creep curves and predicting service life. In: *Creep-resistant steels*. Hrsg. von F. Abe, T.-U. Kern und R. Viswanathan. Woodhead Publishing, 2008, S. 403–420.

- [HR59] D. Hull und D. E. Rimmer: The growth of grain-boundary voids under stress. *Philosophical Magazine* 4 (1959), S. 673–687.
- [Ils73] B. Ilschner: *Hochtemperatur-Plastizität*. Springer, 1973.
- [JK02] H. Jeong und D.-H. Kim: A progressive damage model for ultrasonic velocity change caused by creep voids in copper. *Materials Science and Engineering A* 337 (2002), S. 82–87.
- [Kac99] L. M. Kachanov: Rupture time under creep conditions. *International Journal of Fracture* 97 (1999), S. 11–18.
- [KDH06] L. P. Kubin, B. Devincere und T. Hoc: Inhibited dynamic recovery and screw dislocation annihilation in multiple slip of fcc single crystals. *Philosophical Magazine* 86 (2006), S. 4023–4036.
- [KDH08] L. Kubin, B. Devincere und T. Hoc: Toward a physical model for strain hardening in fcc crystals. *Materials Science and Engineering A* 483-484 (2008), S. 19–24.
- [Kel75] D. A. Kelly: Creep cavitation failure in copper subject to biaxial stress systems at 250°C. *Acta Metallurgica* 23 (1975), S. 1267–1275.
- [KH03] M. E. Kassner und T. A. Hayes: Creep cavitation in metals. *International Journal of Plasticity* 19 (2003), S. 1715–1748.
- [Kia12] K. Kianinejad: “Anpassung der Korngrenzenviskosität für eine polykristalline Cu-Sb-Legierung”. Diplomarbeit. Technische Universität Berlin, 2012.
- [KMPEK99] M. Kolbe, J. Murken, D. Pistolek, G. Eggeler und H.-J. Klam: Direct assessment of the creep strength of DS cast turbine blades using miniature creep specimens. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik* 30 (1999), S. 465–472.
- [KOKSM03] J. Koike, R. Ohyama, T. Kobayashi, M. Suzuki und K. Maruyama: Grain-Boundary Sliding in AZ31 Magnesium Alloys at Room Temperature to 523 K. *Materials Transactions* 44 (2003), S. 445–451.
- [KPY00] S. Kucherenko, J. Pan und J. A. Yeomans: A combined finite element and finite difference scheme for computer simulation of microstructure evolution and its application to pore-boundary separation during sintering. *Computational Materials Science* 18 (2000), S. 76–92.
- [Lan06] T. G. Langdon: Grain boundary sliding revisited: Developments in sliding over four decades. *Journal of Materials Science* 41 (2006), S. 597–609.
- [LD93] H. M. Lu und T. J. Delph: Models for coupled diffusive/strain controlled growth of creep cavities. *Scripta Metallurgica et Materialia* 29 (1993), S. 281–285.

- [Lec86] F. A. Leckie: The micro- and macromechanics of creep rupture. *Engineering Fracture Mechanics* 25 (1986), S. 505–521.
- [Lem92] J. Lemaitre: *A Course on Damage Mechanics*. Springer, 1992.
- [LKC05] J. Lin, Z. Kowalewski und J. Cao: Creep rupture of copper and aluminium alloy under combined loadings - experiments and their various descriptions. *International Journal of Mechanical Sciences* 47 (2005), S. 1038–1058.
- [LKM98] Y. Liu, Y. Kageyama und S. Murakami: Creep fracture modeling by use of continuum damage variable based on Voronoi simulation of grain boundary cavity. *International Journal of Mechanical Sciences* 40 (1998), S. 147–158.
- [LMS94] Y. Liu, S. Murakami und Y. Sugita: Identification of creep damage variable from A-parameter by a stochastic analysis. *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 59 (1994), S. 149–159.
- [MD00] M. McLean und B. F. Dyson: Modeling the effects of damage and microstructural evolution on the creep behavior of engineering alloys. *Journal of Engineering Materials and Technology* 122 (2000), S. 273–278.
- [MH97] T. Morishita und M. Hirao: Creep damage modeling based on ultrasonic velocities in copper. *International Journal of Solids and Structures* 34 (1997), S. 1169–1173.
- [MKMM03] R. Monzen, T. Kuze, O. Matsuda und H. Miura: Antimony-induced embrittlement of [011] symmetric tilt boundaries in copper bicrystals. *Metallurgical and Materials Transactions A* 34 (2003), S. 773–779.
- [MLS92] S. Murakami, Y. Liu und Y. Sugita: Interrelation between damage variables of continuum damage mechanics and metallographical parameters in creep damage. *International Journal of Damage Mechanics* 1 (1992), S. 172–190.
- [MN10] T. Marin und G. Nicoletto: Investigation of the grain-scale deformation in a polycrystalline aluminum alloy. *Technische Mechanik* 30 (2010), S. 227–243.
- [MN82] L. Martinez und W. D. Nix: A numerical study of cavity growth controlled by coupled surface and grain boundary diffusion. *Metallurgical Transactions A* 13 (1982), S. 427–437.
- [MO81] S. Murakami und N. Ohno: A continuum theory of creep and creep damage. In: *IUTAM Symposia on Creep in Structures*. Hrsg. von A. R. S. Ponter und D. R. Hayhurst. Springer, 1981, S. 422–444.
- [MPC91] L. Meric, P. Paubanne und G. Cailletaud: Single Crystal Modeling for Structural Calculations: Part 1 - Model Presentation. *Transactions of the ASME* 113 (1991), S. 162–170.

- [MS96] R. Monzen und T. Suzuki: Nanometre-scale grain-boundary sliding in copper bicrystals with [001] twist boundaries. *Philosophical Magazine Letters* 74 (1996), S. 9–15.
- [MSKM90] R. Monzen, Y. Sumi, K. Kitagawa und T. Mori: Nanometer grain boundary sliding in Cu: [011] symmetric tilt boundaries, misorientation dependence and anisotropy. *Acta Metallurgica et Materialia* 38 (1990), S. 2553–2560.
- [Muk02] A. K. Mukherjee: An examination of the constitutive equation for elevated temperature plasticity. *Materials Science and Engineering: A* 322 (2002), S. 1–22.
- [Nav13] V. Navrotsky: *Gas turbine performance and maintenance continuous improvement*. Techn. Ber. Siemens AG. Presented at VGB Conference - Gas Turbines and Operation of Gas Turbines 2013, Friedrichshafen, Germany. 2013.
- [NC83] N. G. Needham und B. J. Cane: Creep strain and rupture predictions by cavitation assessment in 2.25Cr 1Mo steel weldments. In: *ASME Conference on Advances in Life Prediction Methods*. Hrsg. von D. A. Woodford und J. R. Whitehead. 1983, S. 65–73.
- [NEE189] W. D. Nix, J. C. Earthman, G. Eggeler und B. Ilchner: The principal facet stress as a parameter for predicting creep rupture under multiaxial stresses. *Acta Metallurgica* 37 (1989), S. 1067–1077.
- [NKUK11] A. Nagode, L. Kosec, B. Ule und G. Kosec: Review of creep resistant alloys for power plant applications. *Metallurgy* 50 (2011), S. 45–48.
- [NOO12] K. Nakamura, T. Ohnuma und T. Ogata: Modeling of creep void nucleation of 1CrMoV steel. In: *Proceedings of the 12th International Conference on Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures (JIMIS 11)*. Hrsg. von K. Maruyama, F. Abe, M. Igarashi, K. Kishida, M. Suzuki und K. Yoshimi. The Japan Institute of Metals. 2012.
- [NR80] A. Needleman und J. R. Rice: Plastic creep flow effects in the diffusive cavitation of grain boundaries. *Acta Metallurgica* 28 (1980), S. 1315–1332.
- [OFE11] F. Otto, J. Frenzel und G. Eggeler: On the influence of small quantities of Bi and Sb on the evolution of microstructure during swaging and heat treatments in copper. *Journal of Alloys and Compounds* 509 (2011), S. 4073–4080.
- [OG97a] P. Onck und E. van der Giessen: Microstructurally-based modelling of intergranular creep fracture using grain elements. *Mechanics of Materials* 26 (1997), S. 109–126.

- [OG97b] P. Onck und E. van der Giessen: Influence of microstructural variations on steady state creep and facet stresses in 2-D freely sliding polycrystals. *International Journal of Solids and Structures* 34 (1997), S. 703–726.
- [Oga12] T. Ogata: Creep damage assessment for steam turbine and boiler components. In: *Proceedings of the 12th International Conference on Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures (JIMIS 11)*. Hrsg. von K. Maruyama, F. Abe, M. Igarashi, K. Kishida, M. Suzuki und K. Yoshimi. The Japan Institute of Metals. 2012.
- [OP99] M. Ortiz und A. Pandolfi: Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 44 (1999), S. 1267–1282.
- [OPFE12] F. Otto, E. J. Payton, J. Frenzel und G. Eggeler: The effectiveness of coincidence site lattice criteria in predicting creep cavitation resistance. *Journal of Materials Science* 47 (2012), S. 2915–2927.
- [OR96] J. Olfe und B. Rechner: Bestimmung der Porenkonfiguration vor Rispitzen bei Kriechermdung von austenitischem Stahl. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik* 27 (1996), S. 595–600.
- [OSY11] T. Ogata, T. Sakai und M. Yaguchi: Modelling of creep damage in high temperature component life assessment. *Materials at High Temperatures* 28 (2011), S. 147–154.
- [Ott11] F. Otto: “Zum Einfluss von Korngrenzenchemie und -kristallographie auf die Kriechschdigungsentwicklung in Cu”. Dissertation. Ruhr-Universitt Bochum, 2011.
- [OVPFE12] F. Otto, G. B. Viswanathan, E. J. Payton, J. Frenzel und G. Eggeler: On the effect of grain boundary segregation on creep and creep rupture. *Acta Materialia* 60 (2012), S. 2982–2998.
- [Owe08] J. Owen: “Modlisation de la cavitation des joints de grains sous chargement de fluage”. Rapport de stage scientifique (in French). Ecole Nationale des Ponts et Chausses, 2008.
- [PC95] J. Pan und A. C. F. Cocks: A numerical technique for the analysis of coupled surface and grain-boundary diffusion. *Acta Metallurgica et Materialia* 43 (1995), S. 1395–1406.
- [Pin09] A. C. I. N. Pinto: “In-situ tomographic investigation of creep cavity evolution in brass”. Dissertation. Ruhr-Universitt Bochum, 2009.
- [PN79] G. M. Pharr und W. D. Nix: A numerical study of cavity growth controlled by surface diffusion. *Acta Metallurgica* 27 (1979), S. 1615–1631.

- [PODNE11] D. Peter, F. Otto, T. Depka, P. Nörtershäuser und G. Eggeler: High temperature test rig for inert atmosphere miniature specimen creep testing. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik* 42 (2011), S. 493–499.
- [QK07] Y. Qi und P. E. Krajewski: Molecular dynamics simulations of grain boundary sliding: The effect of stress and boundary misorientation. *Acta Materialia* 55 (2007), S. 1555–1563.
- [RA71] R. Raj und M. F. Ashby: On grain boundary sliding and diffusion creep. *Metallurgical Transactions* 2 (1971), S. 1113–1127.
- [Rab65] Y. N. Rabotnov: Experimental data on creep of engineering alloys and phenomenological theories of creep. A review. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics* 6 (1965), S. 137–154.
- [Raj91] S. V. Raj: Grain boundary sliding behaviour of copper and alpha brass at intermediate temperatures. *Journal of Materials Science* 26 (1991), S. 1000–1008.
- [RASHLS12] J. Rantala, P. Auerkari, J. Salonen, S. Holmström, A. Laukkanen und T. Saukkonen: Creep performance of OFP copper for the overpack of repository canisters. In: *Proceedings of the 12th International Conference on Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures (JIMIS 11)*. Hrsg. von K. Maruyama, F. Abe, M. Igarashi, K. Kishida, M. Suzuki und K. Yoshimi. The Japan Institute of Metals. 2012.
- [Ric79] J. R. Rice: Plastic creep flow processes in fracture at elevated temperatures. In: *Time dependent fracture of materials at elevated temperature*. Hrsg. von S. M. Wolf. U.S. Department of Energy - Report CONF 790236 UG-25, Germantown, 1979, S. 130–145.
- [Ric81] J. R. Rice: Constraints on the diffusive cavitation of isolated grain boundary facets in creeping polycrystals. *Acta Metallurgica* 29 (1981), S. 675–681.
- [Rie85] H. Riedel: Continuous nucleation of grain boundary cavities in creep rupture. *Zeitschrift für Metallkunde* 76 (1985), S. 669–675.
- [Rie87] H. Riedel: *Fracture at High Temperatures*. Springer, 1987.
- [Rie89] H. Riedel: Life prediction methods for constrained grain boundary cavitation. *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 39 (1989), S. 119–134.
- [Rod95] G. J. Rodin: Stress transmission in polycrystals with frictionless grain boundaries. *Journal of Applied Mechanics* 62 (1995), S. 1–6.
- [RRH07] J. Réthoré, S. Roux und F. Hild: From pictures to extended finite elements: extended digital image correlation (X-DIC). *C. R. Mecanique* 335 (2007), S. 131–137.

- [RSAHS11] J. Rantala, J. Salonen, P. Auerkari, S. Holmström und T. Saukkonen: *Long-term integrity of copper overpack - Final report 2010*. VTT Research Report VTT-R-01581-11, VTT, Espoo. 2011.
- [RSALHS13] J. Rantala, J. Salonen, P. Auerkari, A. Laukkanen, S. Holmström und T. Saukkonen: *Material integrity of welded copper overpack - Final report 2012*. VTT Research Report VTT-R-01515-13, VTT, Espoo. 2013.
- [SB75] M. V. Speight und W. Beere: Vacancy potential and void growth on grain boundaries. *Metal Science* 9 (1975), S. 190–191.
- [SC11] I. Simonovski und L. Cizelj: Automatic parallel generation of finite element meshes for complex spatial structures. *Computational Materials Science* 50 (2011), S. 1606–1618.
- [SC12] I. Simonovski und L. Cizelj: Towards modeling intergranular stress corrosion cracks on grain size scales. *Nuclear Engineering and Design* 246 (2012), S. 107–114.
- [SC87] J. Svoboda und J. Cadek: Modelling intergranular cavity growth with special reference to the mechanism of coupled diffusion and power-law creep. *Materials Science and Engineering* 93 (1987), S. 135–149.
- [Sch12] A. Schäfer: "Werkstoffwissenschaftliche Untersuchung zur Bildung und Wachstum von Martensit in NiTi-Formgedächtnislegierungen unter Spannung". Dissertation. Ruhr-Universität Bochum, 2012.
- [Sch13] K. H. Schmidt: "Komponentenverhalten im 700 °C-Kraftwerk: Numerische und experimentelle Untersuchungen". Dissertation. Universität Stuttgart, 2013.
- [SGS14] G. F. Scimemi, G. Giambanco und A. Spada: The interphase model applied to the analysis of masonry structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 279 (2014), S. 66–85.
- [SH97] T. Surholt und C. Herzig: Grain boundary self- and solute diffusion and segregation in general large angle grain boundaries in copper. *Defect and Diffusion Forum* 143-147 (1997), S. 1391–1396.
- [SKKYSO10] K. Sasaki, Y. Kawakami, M. Kamibayashi, K. Yamada, S. Satou und N. Osaki: Development of boiler life estimation system. *Mitsubishi Heavy Industries Technical Review* 47 (2010), S. 24–28.
- [SMCQK09] I. Simonovski, J. Marrow, L. Cizelj, J. Quinta da Fonseca und A. King: Towards modelling intergranular stress-corrosion cracks using experimentally obtained grain topologies. In: *Pressure Vessels and Piping*. ASME. Prague, Czech Republic, July, 2009.

- [SMCQSZ08] I. Simonovski, J. Marrow, L. Cizelj, J. Quinta da Fonseca, N. Stevens und Y. Zhang: Modelling of intergranular damage in polycrystalline metals. In: *Proceedings of the International Conference Nuclear Energy for New Europe 2008*. Portoroz, Slovenia, Sept. 8-11, 2008.
- [SN83] T.-L. Sham und A. Needleman: Effects of triaxial stressing on creep cavitation of grain boundaries. *Acta Metallurgica* 31 (1983), S. 919–926.
- [SPHDCBB08] L. St-Pierre, E. Héripré, M. Dexet, J. Crépin, G. Bertolino und N. Bilger: 3D simulations of microstructure and comparison with experimental microstructure coming from O.I.M analysis. *International Journal of Plasticity* 24 (2008), S. 1516–1532.
- [SW71] G. Simmons und H. Wang: *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A handbook*. Second edition. M.I.T. Press, 1971.
- [TCCD06] A. Turon, P. P. Camanho, J. Costa und C. G. Dávila: A damage model for the simulation of delamination in advanced composites under variable-mode loading. *Mechanics of Materials* 38 (2006), S. 1072–1089.
- [TH92] V. Tvergaard und J. W. Hutchinson: The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 40 (1992), S. 1377–1397.
- [THL81] W. A. Trampczynski, D. R. Hayhurst und F. A. Leckie: Creep rupture of copper and aluminium under non-proportional loading. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 29 (1981), S. 353–374.
- [TM70] H. R. Tipler und D. McLean: Influence of interface energy on creep rupture. *Metal Science* 4 (1970), S. 103–107.
- [TM77] W. R. Tyson und W. A. Miller: Surface free energies of solid metals: Estimation from liquid surface tension measurements. *Surface Science* 62 (1977), S. 267–276.
- [Tve84] V. Tvergaard: On the creep constrained diffusive cavitation of grain boundary facets. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 32 (1984), S. 373–393.
- [Tve85] V. Tvergaard: Effect of grain boundary sliding on creep constrained diffusive cavitation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 33 (1985), S. 447–469.
- [Tve88] V. Tvergaard: Mechanical models of the effect of grain boundary sliding on creep and creep rupture. *Revue de Physique Appliquée* 23 (1988), S. 595–604.
- [Und70] E. E. Underwood: *Quantitative stereology*. Addison-Wesley Publishing Co., 1970.

- [Vös10] M. Vöse: "Bestimmung der effektiven Steifigkeit eines an den Korngrenzen geschädigten Polykristalls". Diplomarbeit. Technische Universität Berlin, 2010.
- [WA04] Y. J. Wei und L. Anand: Grain-boundary sliding and separation in polycrystalline metals: application to nanocrystalline fcc metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 52 (2004), S. 2587–2616.
- [Wat83] T. Watanabe: Grain boundary sliding and stress concentration during creep. *Metallurgical Transactions A* 14 (1983), S. 531–545.
- [WB07] B. Wilshire und A. J. Battenbough: Creep and creep fracture of polycrystalline copper. *Materials Science and Engineering: A* 443 (2007), S. 156–166.
- [WB08] B. Wilshire und H. Burt: Damage evolution during creep of steels. *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 85 (2008), S. 47–54.
- [WBB05] B. Wilshire, H. Burt und A. J. Battenbough: Grain and grain boundary zone contributions to strain accumulation during creep of polycrystalline copper. *Materials Science and Engineering: A* 410-411 (2005), S. 16–19.
- [WD78] T. Watanabe und P. W. Davies: Grain boundary sliding and intergranular fracture behaviour of copper bicrystals. *Philosophical Magazine A* 37 (1978), S. 649–681.
- [Wee73] J. Weertman: Hull-Rimmer grain boundary void growth theory - A correction. *Scripta Metallurgica* 7 (1973), S. 1129–1130.
- [Wil87a] D. S. Wilkinson: The effect of time dependent void density on grain boundary creep fracture - I. Continuous void coalescence. *Acta Metallurgica* 35 (1987), S. 1251–1259.
- [Wil87b] D. S. Wilkinson: The effect of time dependent void density on grain boundary creep fracture - II. Continuous nucleation. *Acta Metallurgica* 35 (1987), S. 2791–2799.
- [Wil88] D. Wilkinson: The effect of a non uniform void distribution on grain boundary void growth during creep. *Acta Metallurgica* 36 (1988), S. 2055–2063.
- [WMN83] J. S. Wang, L. Martinez und W. D. Nix: A study of intergranular cavity growth controlled by the coupling of diffusion and power law creep. *Acta Metallurgica* 31 (1983), S. 873–881.
- [WP02] B. Wilshire und C. J. Palmer: Grain size effects during creep of copper. *Scripta Materialia* 46 (2002), S. 483–488.
- [WPC04] C. Westwood, J. Pan und A. D. Crocombe: Nucleation, growth and coalescence of multiple cavities at a grain-boundary. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 23 (2004), S. 579–597.

- [WPLKC00] C. Westwood, J. Pan, H. Le, S. Kucherenko und A. D. Crocombe: A simplified model for cavity growth along a grain-boundary by coupled surface and grain-boundary diffusion. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 19 (2000), S. 17–30.
- [WW10] M. T. Whittaker und B. Wilshire: Creep and creep fracture of 2.25Cr-1.6W steels (Grade 23). *Materials Science and Engineering: A* 527 (2010), S. 4932–4938.
- [XYHD92] D. Xiao, J. E. Yukich, D. G. Harlow und T. J. Delph: A simplified probabilistic model of the growth of creep cavitation. *Philosophical Magazine A* 65 (1992), S. 71–84.
- [YC90a] J. Yu und J. O. Chung: Creep rupture by diffusive growth of randomly distributed cavities - I. Instantaneous cavity nucleation. *Acta Metallurgica et Materialia* 38 (1990), S. 1423–1434.
- [YC90b] J. Yu und J. O. Chung: Creep rupture by diffusive growth of randomly distributed cavities - II. Continuous cavity nucleation. *Acta Metallurgica et Materialia* 38 (1990), S. 1435–1443.
- [YN84a] K. S. Yu und W. D. Nix: On the relation between creep cavitation and grain boundary orientation. *Scripta Metallurgica* 18 (1984), S. 173–178.
- [YN84b] K. S. Yu und W. D. Nix: The effects of pre-existing grain boundary cavities on the creep rupture life of a copper-antimony alloy. *Scripta Metallurgica* 18 (1984), S. 259–264.
- [YXWT07] H.-T. Yao, F.-Z. Xuan, Z. Wang und S.-T. Tu: A review of creep analysis and design under multi-axial stress states. *Nuclear Engineering and Design* 237 (2007), S. 1969–1986.
- [ZKBL12] P. Zhang, M. Karimpour, D. Balint und J. Lin: Three-dimensional virtual grain structure generation with grain size control. *Mechanics of Materials* 55 (2012), S. 89–101.

Veröffentlichungen

Auszüge aus der vorliegenden Arbeit wurden in den folgenden Publikationen veröffentlicht:

- M. Vöse, B. Fedelich und J. Owen: A simplified model for creep induced grain boundary cavitation validated by multiple cavity growth simulations. *Computational Materials Science* 58 (2012), S. 201-213.
- M. Vöse und B. Fedelich: Grain boundary cavitation under time-varying normal stresses. In: *Proceedings of the 12th International Conference on Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures (JIMIS 11)*. Hrsg. von K. Maruyama, F. Abe, M. Igarashi, K. Kishida, M. Suzuki und K. Yoshimi. The Japan Institute of Metals. 2012.
- M. Vöse, F. Otto, B. Fedelich und G. Eggeler: Micromechanical investigations and modelling of a copper-antimony-alloy under creep conditions. *Mechanics of Materials* 69 (2014), S. 41-62.
- M. Vöse, B. Fedelich, F. Otto und G. Eggeler: Micromechanical modeling of creep damage in a copper-antimony alloy. *Procedia Materials Science* 3 (2014), S. 21-26.

Auszüge aus der vorliegenden Arbeit wurden auf den folgenden Veranstaltungen präsentiert:

- M. Vöse und B. Fedelich: 2nd International Conference on Material Modelling, 31.08. - 02.09.2011, Paris, Frankreich.
- M. Vöse und B. Fedelich: 7th Meeting of the TC2 on Micromechanisms of the European Structural Integrity Society, 24.11. - 25.11.2011, Berlin, Deutschland.
- M. Vöse und B. Fedelich: 12th International Conference on Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures, 27.05. - 31.05.2012, Kyoto, Japan.
- M. Vöse, F. Otto, K. Kianinejad, B. Fedelich und G. Eggeler: DGM Arbeitskreis Sitzung *Mechanisches Werkstoffverhalten bei hoher Temperatur*, 21.09.2012, Berlin, Deutschland.
- B. Fedelich, M. Vöse, F. Otto und G. Eggeler: 3rd International Conference on Material Modelling, 08.09. - 11.09.2013, Warschau, Polen.
- M. Vöse, F. Otto, B. Fedelich und G. Eggeler: 23rd International Workshop on Computational Mechanics of Materials, 02.10. - 04.10.2013, Singapur, Singapur.
- M. Vöse und B. Fedelich: Colloquium Materials Modelling am IMWF - Universität Stuttgart, 05.06.2014, Stuttgart, Deutschland.
- B. Fedelich, M. Vöse, F. Otto und G. Eggeler: 20th European Conference on Fracture, 30.06. - 04.07.2014, Trondheim, Norwegen.
- M. Vöse und B. Fedelich: 5th European Conference on Computational Mechanics, 20.07. - 25.07.2014, Barcelona, Spanien.

Lebenslauf

Zur Person

Name Markus Vöse
Geboren 14. Februar 1984 in Potsdam

Schulbildung

1990 - 1996 Grundschule 6, Potsdam
1996 - 2003 Leibniz-Gymnasium, Potsdam

Wehrdienst

10/2003 - 12/2003 7./Marineunteroffizierschule, Plön
01/2004 - 02/2004 Kraffahrausbildungszentrum Kellinghusen, Kellinghusen
02/2004 - 06/2004 Standortsanitätszentrum Potsdam, Potsdam

Hochschulstudium

10/2004 - 02/2010 Technische Universität Berlin (TU Berlin)
Studiengang *Physikalische Ingenieurwissenschaft*

- Philotherm-Preis 2006
- Diplomarbeit: *Bestimmung der effektiven Steifigkeit eines an den Korngrenzen geschädigten Polykristalls*
- Abschluss: Dipl.-Ing. (mit Auszeichnung)

Tätigkeiten

07/2004 - 08/2004 **Praktikum:** Rohrleitungs- und Anlagenbau Königs Wusterhausen
07/2006 - 06/2008 **Studentischer Mitarbeiter:** Institut für Mechanik (TU Berlin)
03/2009 - 06/2009 **Praktikum:** Siemens AG - Corporate Technology, Abteilung *Materials & Microsystems*
08/2009 - 03/2010 **Studentischer Mitarbeiter:** Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Arbeitsgruppe *Modellierung und Simulation in der Werkstoffmechanik*
Seit 01.04.2010 **Wissenschaftlicher Mitarbeiter:** Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Fachbereich 5.2