

MM 5 - Modellierung des Materialverhaltens mehrphasiger Legierungen durch Evolutionsgleichungen für Versetzungsdichten verschiedener Gleitsysteme mit gegenseitiger Wechselwirkung

Projektleitung

Prof. Dr. Uwe Glatzel, Dr. Rainer Völkl

Lehrstuhl Metallische Werkstoffe, Fakultät für Angewandte Naturwissenschaften, Universität Bayreuth

Fragestellungen des Projekts

Das mechanische Verhalten kristalliner Werkstoffe ist von der Orientierung der Hauptlastachsen bezüglich des Kristallsystems abhängig. Ursache dafür sind die unterschiedlichen Lagen der möglichen Gleitsysteme zu den Hauptbelastungsrichtungen und die gegenseitige Beeinflussung der Versetzungen untereinander. Ein am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe entwickeltes Modell zur Beschreibung des Hochtemperaturverhaltens einkristalliner, einphasiger Legierungen, welches das Wechselwirkungsverhalten verschiedener Gleitsysteme miteinander berücksichtigt, soll erweitert werden auf verschiedene Kristallsysteme und durch Einbettung in ein Finite Elemente Programm auch komplexe, mehrphasige und/oder polykristalliner Systeme beschreiben können. Dabei wird für die jeweilige Phase, bzw. Kristallite ein Materialgesetz mit spezifischen, von der Kristallographie abhängigen Parametern implementiert. Ziel ist die Beschreibung des zeitabhängigen Verformungs- und Spannungszustandes sowie der Versetzungsdichten auf den einzelnen Gleitsystemen in allen Bereichen des Materials. Eine Vorhersage des makroskopischen Materialverhaltens von mehrphasigen und/oder polykristallinen Materialien wird dann, ausgehend von Vorgängen auf atomarer Ebene, möglich sein.

Stand der Forschung

Die Modellierung von werkstoffwissenschaftlichen Fragestellungen und deren Berechnung wird in nahezu allen Bereichen der Technik angewendet und gefordert. So gibt es eine Vielzahl von Modellen, die Probleme auf verschiedenen Längen- und Zeitskalen abbilden und untersuchen. Ein umfassender Überblick über verschiedene Simulationsmethoden der Materialwissenschaft ist von Raabe [1] gegeben. In den letzten Jahren hat es einen enormen Fort-

schritt in der Modellierung des Zusammenhangs zwischen dem mikroskopischen und dem makroskopischen Verhalten einkristalliner Nickelbasissuperlegierungen über konstitutive Modelle gegeben [2]. Aktuell werden zahlreiche Modelle in der Forschung diskutiert, die das anisotrope Kriechverhalten dieser Legierungen beschreiben. Ziel ist es hierbei oftmals nicht nur die Lebensdauer vorherzusagen, sondern das Verformungsverhalten abzubilden und zu verstehen.

Vereinfacht lassen sich drei Richtungen zur Modellierung des Verformungsverhaltens von Einkristallen unterscheiden [3]:

- Erweiterung phänomenologischer isotroper Kriechmodelle auf anisotrope Materialien durch Richtungsfunktionen [4,5].
- Einkristallmodelle werden auf einzelne Phasen angewandt. Die plastische Verformung erfolgt auf individuellen Gleitsystemen [3,6-8].
- Die dritte Methode umfasst die Modellierung von Einheitszellen, die Einflüsse der Kristallographie und der zweiphasigen Mikrostruktur vereint. So können Einflüsse der Kristallographie (also die Einflüsse einzelner Gleitebenen) und Effekte der Ausscheidungsorientierung und -geometrie auf das Kriechverhalten in verschiedenen Lastrichtungen quantifiziert und analysiert werden [9,10].

Das hier vorgeschlagene Forschungsprojekt ist der dritten Methode zuzuordnen, mit dem Vorteil, dass die verwendeten Parameter alle physikalisch motiviert sind. Als Nachteil ergibt sich zwangsweise, dass durch die relativ geringe Anzahl an Parametern das Materialverhalten nicht mit sehr hoher Genauigkeit vorhergesagt werden kann. Allerdings lassen sich Rückschlüsse zur Verbesserung des Materialverhaltens einfacher ziehen. Es wird also nicht eine hohe Anzahl von Schadensparametern oder Verfestigungsfaktoren, sondern die Versetzungsdichte, -geschwindigkeit, -wechselwirkungen und Kristallstruktur verwendet.

Eigene Vorarbeiten

Ein Materialmodell ausgehend von Alexander und Haasen, welches die Gesamtversetzungsdichte und Geschwindigkeiten der mobilen Versetzungen berücksichtigt, wurde erweitert auf individuelle Gleitsysteme [8].

Abhängig vom Kristallsystem werden N Gleitsysteme, definiert durch Burgersvektor \vec{b} und Gleitebene \vec{n} , berücksichtigt. Die Wahrscheinlichkeit, dass das Gleitsystem i aktiviert wird, hängt von der Größe des Burgersvektors \vec{b}_i und der Packungsdichte ab. Abhängig vom Spannungstensor $\vec{\sigma}$ in einem bestimmten Volumenelement kann die resultierende Scherspannung τ für das System i berechnet werden.

$$\tau_i = \left| \hat{\mathbf{b}}_i \bar{\sigma} \hat{\mathbf{n}}_i \right| \quad (1)$$

Die zeitabhängige Entwicklung der Gleitsysteme ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_i(t) = \rho_i(t) k \left[\tau_i - \alpha_1 G b_i \sqrt{\sum_{j=1}^N c_{ij} \rho_j(t)} \right]^m \cdot \\ \sum_{k=1}^N \rho_k(t) \left| v_{i0} \left(\tau_i - \alpha_2 G b_i \sqrt{\sum_{j=1}^N c_{ij} \rho_j(t)} \right) - v_{k0} \left(\tau_k - \alpha_2 G b_k \sqrt{\sum_{j=1}^N c_{kj} \rho_j(t)} \right) \right|^n \end{aligned} \quad (2)$$

In obiger Gleichung ist die Multiplikationsrate δ_i enthalten:

$$\delta_i(t) = k \left[\tau_i - \alpha_1 G b_i \sqrt{\sum_{j=1}^N c_{ij} \rho_j(t)} \right]^m \quad (3)$$

Die relative Geschwindigkeit des Systems i zum System k ist gegeben durch die Unterschiede der individuellen Geschwindigkeiten $v_i(t)$:

$$v_i(t) = v_{i0} \left[\tau_i - \alpha_2 G b_i \sqrt{\sum_{j=1}^N c_{ij} \rho_j(t)} \right]^m \quad (4)$$

Die Koeffizienten c_{ij} bilden eine (N x N) Wechselwirkungsmatrix. Diese Wechselwirkungsmatrix bestimmt zusammen mit der Anfangsversetzungsgeschwindigkeit der individuellen Gleitsysteme die Abhängigkeit des mechanischen Verhaltens von dem gegebenen Spannungszustand, z.B. die Orientierungsabhängigkeit von der Richtung der Spannungsachse im einachsigen Spannungszustand in einkristallinen Proben. Gleichung (2) ist ein System von N gekoppelten Differentialgleichungen.

Der Tensor der makroskopischen Dehnrate wird über die Summation der Scherdehnraten der individuellen Gleitsysteme gebildet:

$$\dot{\gamma}_i(t) = \rho_i(t) v_i(t) (\hat{\mathbf{b}}_i \otimes \hat{\mathbf{n}}_i) \quad (5)$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \sum_{i=1}^N \dot{\gamma}_i \quad (6)$$

Mit $\hat{\sigma}_0$ als normierte Lastachse zum Zeitpunkt $t = 0$ ergibt sich aus der Gleichung (6) die zeitabhängige makroskopische skalare Dehnrate $\dot{\varepsilon}(t)$:

$$\dot{\varepsilon}(t) = \frac{\partial}{\partial t} |\bar{\sigma}_{\text{new}}| = \frac{\partial}{\partial t} \left| \left(\int_{t'=0}^t \sum_{i=1}^{18} \dot{\gamma}_i dt' \right) \hat{\sigma}_0 + \hat{\sigma}_0 \right| \approx \left| \sum_{i=1}^{18} \dot{\gamma}_i \hat{\sigma}_0 \right| \quad (7)$$

Die letzte Näherung in Gleichung (7) ist für kleine Scherdehnungen oder für einen Spannungszustand gültig, bei dem eine symmetrische Aktivierung der Gleitsysteme gegeben ist und kann mit dem makroskopischen mechanischen Verhalten der Probe, also mit der gemessenen Kriechrate, verglichen werden.

Die Parameter zur Wechselwirkung der Gleitsysteme miteinander (die Koeffizienten c_{ij}) wurden im ersten Ansatz nur grob geschätzt. Eine Einbindung als "user-defined-material-model" in das Programmpaket ANSYS ist bisher nicht befriedigend gelungen [11,12].

Ziele des Projekts

Das Modell hat ein hohes Potential zur Vorhersage des Materialverhaltens bei hohen Anwendungstemperaturen. Von besonderem Interesse sind Berechnungen des orientierungsabhängigen Kriechverhaltens verschiedener Kristallstrukturen in einkristalliner Form, der Berechnung einkristalliner mehrphasiger Materialien (z.B. Ni- und Pt-Basis-Superlegierungen) sowie der Berechnung polykristalliner einphasiger Materialien. Im Falle von mehrphasigen und/oder polykristallinen Werkstoffen muss eine Übergabemöglichkeit von Versetzungsdichten von einem Korn/Phase zum benachbarten Korn/Phase geschaffen werden. Zusätzlich sollen zukünftig Versetzungsreaktionen berücksichtigt werden an denen insgesamt drei verschiedene Gleitsysteme ($\vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \vec{b}_3$) beteiligt sind, wobei sich für die Systeme 1 und 2 eine Senke bildet, System 3 wird zusätzlich gebildet. In Spezialfällen sollen Vorhersagen von Versetzungsdichten auf individuellen Gleitsystemen mittels Kriechexperimenten und anschließender transmissionselektronenmikroskopischer Untersuchung der verformten Proben verifiziert werden.

Literatur zum Thema

- [1] D. Raabe: Computational Materials Science, Wiley-VCH (1998).
- [2] D.W. MacLachlan, G.S.K. Gunturi, D.M. Knowles: Comp. Mat. Sci. **25** (2002) 129.
- [3] D.W. MacLachlan, L.W. Wright, S. Gunturi, D. Knowles: Int. J. Plast. **17** (2001) 441.
- [4] S. Li, D. Smith: Int. J. Mech. Sci **40** (1998) 937.
- [5] W. Qi, A. Bertram: Comp. Mat. Sci., **13** (1998) 132.
- [6] R.N. Gosh, R.V. Curtis, M. McLean: Acta metall. mater. **38** (1990) 1977.
- [7] L. Meric, P. Poubanne, G. Cailletaud: Trans. ASME 113 (1991) 162.

- [8] H. Brehm, U. Glatzel: Int. J. Plast. **15** (1998), 285.
- [9] D. Nouailhas, G. Cailletaud: Scripta Mater. **34** (1996) 565.
- [10] L. Müller, U. Glatzel, M. Feller-Kniepmeier: Acta Metall. Mater, **41** (1993) 3401.
- [11] H. Brehm: Dissertation, Friedrich-Schiller-Universität Jena (2000).
- [12] H. Brehm, U. Glatzel: Proc. 9. Int. Symp on Plasticity and Its Current Applications, eds. A.S. Khan and O. Lopez-Pamies (2002), 236.

Dissertationsthemen

Für die ersten 3 Jahre der Laufzeit des Graduiertenkollegs wird folgendes Thema vorgeschlagen: "Simulation des Hochtemperaturverformungsverhaltens einkristalliner Materialien verschiedener Kristallstrukturen sowie zweiphasiger einkristalliner Materialien über Evolutionsgleichungen von Versetzungsdichten".

Im weiteren Verlauf ist folgendes Dissertationsthema möglich: "Simulation der Hochtemperaturverformung und Verifikation des Materialmodells durch Bestimmung der lokalen Versetzungsdichten individueller Gleitsysteme im Transmissionselektronenmikroskop".

Übergreifende Projektbetreuung - Verknüpfungen mit anderen Projekten

Der/die Kollegiat/in wird von Dr. Völkl, und Prof. Glatzel intensiv betreut werden.

Verknüpfungen dieses Projekts ist mit allen Projektenegeben, die sich mit Ni- und Pt-Legierungen befassen. Dies sind im Einzelnen die Projekte **MW1** (Singer/Volek), **MW2** (Pyczak/Göken), **MM1** (Völkl/Glatzel), **MM2** (Göken), **MM3** (Volek/Singer) und **MM4** (Glatzel/Völkl).

Kooperationen sind zahlreich vorhanden und können für das Graduiertenkolleg intensiv genutzt werden. Mit dem MPI für Eisenforschung in Düsseldorf (Prof. Raabe), wo ähnlich gelagerte Modelle entwickelt werden, findet ein intensiver Austausch statt. Als Beispiele für internationale Kooperationen sind zu nennen:

- Südafrika: CSIR, Pretoria und MINTEK, Johannesburg.
- Ohio State University: Profs. H. Fraser, G. Daehn und M.J. Mills.
- Oak Ridge Nat. Lab.: Prof. E. George und Dr. J. Schneibel