

Lehrstuhl für Werkstoffkunde und Werkstoffmechanik
mit Materialprüfamt für den Maschinenbau
Technische Universität München

Anfangsverformungs- und Alterungsverhalten von Dual-Phasen Stahl

Urs Liedl

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Th. Sattelmayer

Prüfer der Dissertation:

1. Univ.-Prof. Dr. mont. habil. E. Werner
2. Univ.-Prof. Dr.-Ing. H. Grundmann

Die Dissertation wurde am 11.12.2002 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Maschinenwesen am 15.04.2003 angenommen.

Synopsis

Tensile tests on dual-phase steels with a volume content of 5-15% martensite carried out right after cooling from the intercritical anneal show a lower initial slope in the stress-strain diagram and an increasing yield strength with an increasing volume content of martensite. The initial slope is restored to the Young's modulus of the material within a few days. By means of a micromechanical finite element model, experiments and a calculation of carbon diffusion to dislocations it is shown, that prestrains and -stresses due to the accommodation of the volume expansion associated with the austenite to martensite phase transformation during quenching and pinning of mobile dislocations by diffusing carbon during aging are the main causes for the observed mechanical behavior of dual-phase steels.

Dual-Phasen Stähle mit etwa 5-15% Volumenanteil Martensit zeigen einen nahezu linearen Anstieg der Streckgrenze mit dem Martensit-Gehalt und eine verminderte Anfangssteifigkeit im Zugversuch unmittelbar nach dem Herstellen. Mit Hilfe von Experimenten, mikromechanischen Finite-Elemente Simulationen und einer Berechnung der Kohlenstoffdiffusion zu Versetzungen wird gezeigt, dass während der Herstellung durch die Austenit-Martensit Phasentransformation Eigenspannungs- und Vordehnungszustände im Material entstehen, die entscheidenden Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften haben. Durch Kohlenstoffdiffusion kommt es innerhalb von Tagen zu einem Abbau elastischer Energie und einem Anstieg der Anfangssteifigkeit.

Vorwort

Diese Arbeit entstand im Laufe meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Assistent am Lehrstuhl für Werkstoffkunde und Werkstoffmechanik der Technischen Universität München.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Univ.-Prof. Dr. mont. habil. E. Werner für die stete Unterstützung und Diskussionsbereitschaft, für die großzügige Gewährung wissenschaftlichen Freiraums zur Anfertigung der Dissertation und für die Übernahme des Hauptreferats. Bei Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. H. Grundmann, Ordinarius am Lehrstuhl für Baumechanik, bedanke ich mich herzlich für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Koreferats. Ferner gilt mein Dank Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. Th. Sattelmayer, Leiter des Lehrstuhls für Thermodynamik, für die freundliche Bereitschaft zur Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Der Voestalpine Stahl, Linz sei für die freundliche Unterstützung der Forschungsarbeiten gedankt. Bei Herrn Dr.-Ing. A. Pichler bedanke ich mich herzlich für wertvolle fachliche Diskussionen und Anregungen.

Bei meinen derzeitigen und ehemaligen Kollegen am Lehrstuhl für Werkstoffkunde und Werkstoffmechanik mit Materialprüfamt für den Maschinenbau bedanke ich mich für die kollegiale und angenehme Atmosphäre am Arbeitsplatz. Insbesondere möchte ich mich bei Herrn Dr.-Ing. C. Kremaszky, Herrn Univ.-Prof. Dr. rer. nat., Dr. mont. h. c. H. Lippmann, em., Herrn Dipl.-Ing. C. Messner, Herrn PhD F. Nishimura, Herrn Dr. mont. G. Reisner, Frau Dr.-Ing. S. Traint und bei Herrn Dr.-Ing. Q. Truong für die große Bereitschaft zu konstruktiven Diskussionen bedanken. Bei Herrn Dr.-Ing. S. Guserle und bei Herrn Obergeringieur Dr.-Ing. V. Mannl bedanke ich mich für die organisatorische Unterstützung.

Ferner bedanke ich mich herzlich bei Herrn ao. Univ.-Prof. Dr. techn. habil. H. Böhm und bei Herrn Dr. mont. H. Weinhandl für wertvolle Anregungen.

München, im Dezember 2002

Urs Liedl

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Experimente	8
2.1	Herstellprozess	8
2.2	Streckgrenze	10
2.3	Erstbelastungssteifigkeit und Altern	10
2.4	Drehpendelversuche	14
2.5	Transmissionselektronenmikroskopie	16
2.6	Ultramikrohärtemessungen	16
3	Mikromechanische Berechnung	24
3.1	Geometrische Modellierung	25
3.1.1	Periodische Randbedingungen	26
3.1.2	Zweidimensionale Netze	28
3.1.3	Dreidimensionale Netze	31
3.2	Materialmodellierung	35
3.3	Ergebnisse der zweidimensionalen Berechnung	38
3.4	Ergebnisse des einfachen 3D-Inklusionsmodells	41
3.4.1	Berechnungen ohne Phasenumwandlung	41
3.4.2	Belastung unter Berücksichtigung der thermischen Vorgeschichte . . .	43
3.5	Ergebnisse des 3D-Modells mit mehreren Inklusionen	50
4	Reduktion der elastischen Energie durch Diffusion von Kohlenstoffatomen zu Versetzungen	54
4.1	Berechnung der Kohlenstoffsättigungskonzentration	58

4.1.1	Schraubenversetzung	58
4.1.2	Stufenversetzung	61
4.2	Finite-Elemente-Modell der Diffusion	63
4.3	Ergebnisse	69
4.3.1	Kohlenstoffkonzentration und Anzahl der Kohlenstoffatome nahe der Versetzung	70
4.3.2	Zeitliche Entwicklung der Versetzungsverankerung	75
5	Diskussion	77
5.1	Berechnung des mechanischen Verhaltens	77
5.2	Diffusionsberechnung	78
5.3	Schlussfolgerungen	80
5.4	Ausblick	82
6	Zusammenfassung	85
A	Materialparameter für die Diffusionsberechnung	87
B	Bezeichnungen	88

Kapitel 1

Einleitung

Durch vermehrten Einbau von Komfortausrüstungen in Personenkraftwägen wie beispielsweise Klimaanlage oder Stellmotoren für früher manuell bediente Teile ist es nötig geworden, Masse an der Karosserie und am Antriebsstrang einzusparen, um das Gesamtgewicht im bisher üblichen Rahmen zu halten. In der Kleinwagen-Klasse ist außerdem ein niedriger Verbrauch bei guten Fahrleistungen ein beherrschendes Verkaufsargument, dies ist mit schweren Karosserien nicht zu erreichen. Um Masse am Auto einzusparen, werden zur Zeit hauptsächlich drei Möglichkeiten ausgeschöpft: Erstens Strukturoptimierung, zweitens die Verwendung leichter Materialien wie Aluminium oder Kunststoff für Teile, die früher aus Stahl gefertigt wurden, und drittens die Verwendung von höherfesten Stahlsorten wie Dual-Phasen Stahl, um mit niedrigeren Querschnitten Masse einzusparen.

In den letzten Jahrzehnten wurden einige höherfeste Stahlsorten für die Automobilindustrie entwickelt. Dabei ist das vorherrschende Problem die Forderung nach gleichbleibend hoher Duktilität bei höheren Streckgrenzen und Festigkeiten. Die hohe Duktilität des Stahles und damit die Fähigkeit zur Energieabsorption ist für ein gutes Crash-Verhalten der Karosserie unabdingbar. Durch die mit den höheren Festigkeiten möglich gewordenen geringeren Blechstärken richtet sich die Aufmerksamkeit auch auf den Widerstand gegen Beulenbildung bei kleineren mechanischen Belastungen („dent resistance“) an großflächigen Bauteilen, wie z. B. der Tür. Die Steifigkeit dieser Teile nimmt mit sinkender Dicke überproportional ab; ein hoher E-Modul des Materials ist deshalb wichtig.

Ein Meilenstein in der Entwicklung neuer Automobilbau-Stähle waren die Bake-Hardening-Stähle, bei ihnen macht man sich die klassischen Härtungsmechanismen wie Ausscheidungshärtung und Kornfeinung zu Nutze. Das Besondere an diesen Stählen ist eine deutliche Zunahme der Streckgrenze während des Einbrennprozesses bei der Lackierung der Karosserie („Bake-Hardening“). Außerdem haben sie nach dem Einbrennen eine sehr hohe Steifigkeit, weswegen diese Stähle zur Zeit in großem Umfang für großflächige Außenteile eingesetzt werden. Eine weitere Steigerung der Festigkeit bei gleicher Duktilität brachten die Mehrphasenstähle. Sie besitzen eine hohe Duktilität aufgrund der duktilen Matrix und eine hohe

Festigkeit aufgrund des Zusammenspiels der Matrix mit den harten Einschlüssen.

Einer dieser Mehrphasenstähle ist der Dual-Phasen Stahl, er besteht üblicherweise aus Ferrit (α) und etwa 5 bis 20 vol.% Martensit (α'). Der harte Martensit ist dabei in eine Matrix aus Ferrit eingelagert [7]. Bei der großtechnischen Herstellung von Dual-Phasen Stahl wird kaltgewalzter ferritisch-perlitischer Stahl mit einem Kohlenstoffgehalt von ungefähr 0,1% bei etwa 800 °C interkritisch gegläht. Anschließend erfolgt eine sehr schnelle Abkühlung auf Raumtemperatur. Während des interkritischen Glühens liegt der Stahl als Austenit-Ferrit-Gemisch vor. Beim schnellen Abkühlen wird zumindest ein Teil des Austenits in Martensit umgewandelt. Bild 1.1 zeigt ein Schlibbild eines Dual-Phasen Stahles mit etwa 11% Volumenanteil Martensit, das Material ist nach LePera [48] geätzt worden, Ferrit erscheint dunkel und Martensit hell. Deutlich ist eine Matrix-Inklusions-Struktur zu erkennen, Martensit-Inseln werden von einer ferritischen Matrix eingeschlossen.

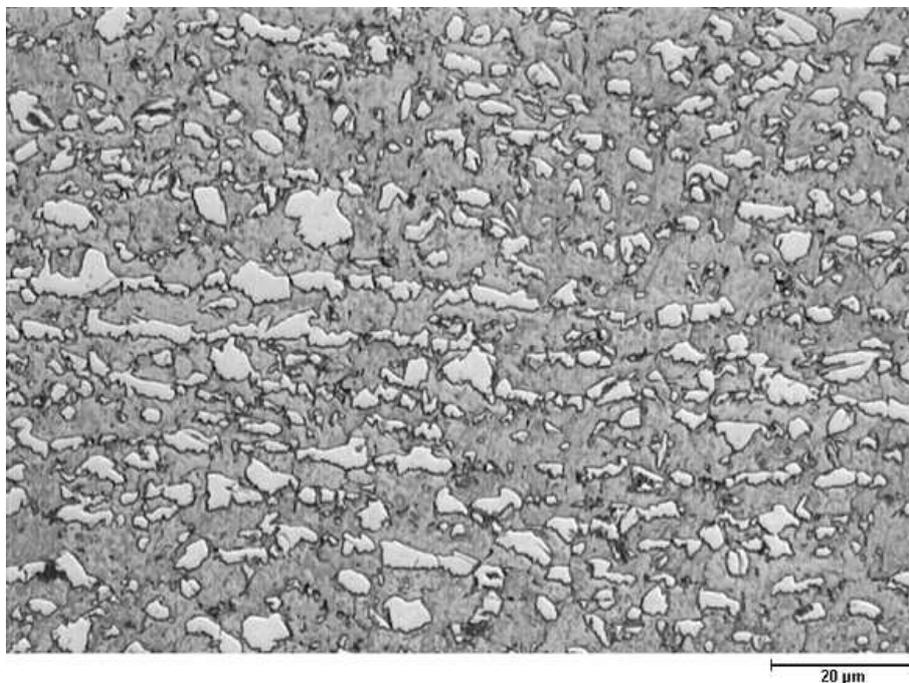


Bild 1.1: Schlibbild eines Dual-Phasen-Stahles, er besteht aus einer Ferrit-Matrix (dunkel) und Martensit-Einschlüssen (hell), Volumenanteil etwa 11%.

Im Zugversuch fällt beim Dual-Phasen-Stahl im Vergleich mit konventionellen Automobilbau-Stahlsorten ein kontinuierlicher Fließbeginn und eine relativ niedrige Streckgrenze in Verbindung mit einer hohen Verfestigungsrate auf, in Bild 1.2 sind die Spannungs-Dehnungs-Kurven eines Dual-Phasen Stahles (DP500) und zweier einphasig ferritischen Automobilbau-Stähle (H180B: Bake-Hardening Stahl, H320LA: mikrolegierter Stahl) gegenübergestellt. Verschiedene experimentelle Arbeiten haben gezeigt, dass plastisches Fließen von Dual-Phasen Stählen bereits bei extrem niedrigen Spannungen einsetzt und dass außerdem die Streckgrenze und die Zugfestigkeit mit dem Volumenanteil Martensit ansteigt [22, 23, 72, 73].

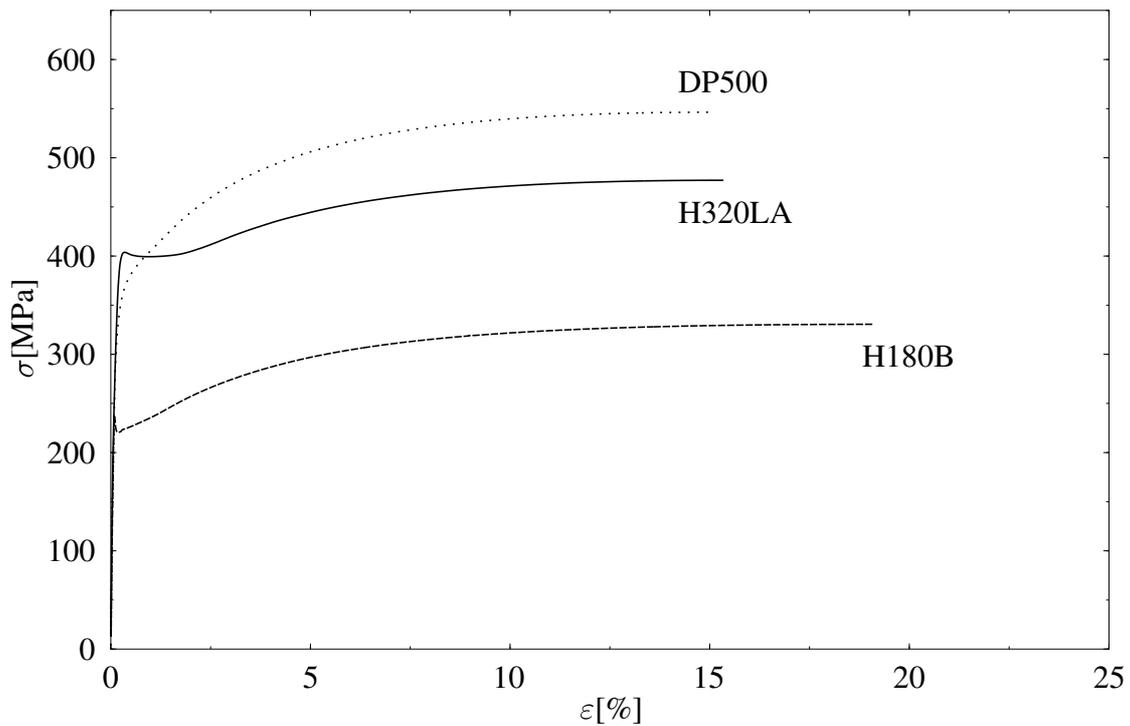


Bild 1.2: Spannungs-Dehnungs-Kurven eines Dual-Phasen-Stahles (DP500) und zweier einphasig-ferritischen Automobilbau-Stähle (H180B: Bake-Hardening Stahl, H320LA: mikrolegierter Stahl).

Es existieren eine Reihe von Erklärungsmodellen für die mechanischen Eigenschaften der Dual-Phasen Stähle. Auf Ashby [2] gehen Theorien zurück, die die hohe Verfestigung mit Versetzungsbildung aufgrund der inhomogenen Verformung der beiden Phasen während der plastischen Verformung des Verbundes erklären („geometrically necessary dislocations“). Einfache Mischungsregeln sind den empirischen Modellen zuzurechnen, mit ihnen wird sowohl die hohe Verfestigungsrate während des Fließens als auch der lineare Anstieg der Streckgrenze mit dem Martensitgehalt beschrieben [65, 72]. Dabei wird angenommen, dass das Spannungs-Dehnungs-Diagramm des Dual-Phasen Stahles der nach dem Volumen der Konstituenten gewichtete Durchschnitt der Spannungs-Dehnungs-Diagramme der beiden Phasen ist.

Die Mischungstheorien stehen allerdings in grundsätzlichem Widerspruch zu klassischen Modellen für die Streckgrenze von Materialien mit weicher Matrix und harten Inklusionen. Unter der Voraussetzung, dass beide Konstituenten den gleichen E-Modul haben, ist die Streckgrenze des Verbundes gleich der des Matrix-Materials [33, 81]. Im Zugversuch verformt sich der Verbund zuerst homogen und elastisch; plastische Verformung setzt ein, sobald die Streckgrenze der weichen Phase erreicht ist. Ist die weiche Phase die Matrixphase, beginnt diese um die härteren Einschlüsse herum zu fließen, im Zugversuch ist dann die Fließgrenze des Verbundes erreicht.

Eine andere Erklärungsmöglichkeit für die mit dem Martensitgehalt variierende Streckgren-

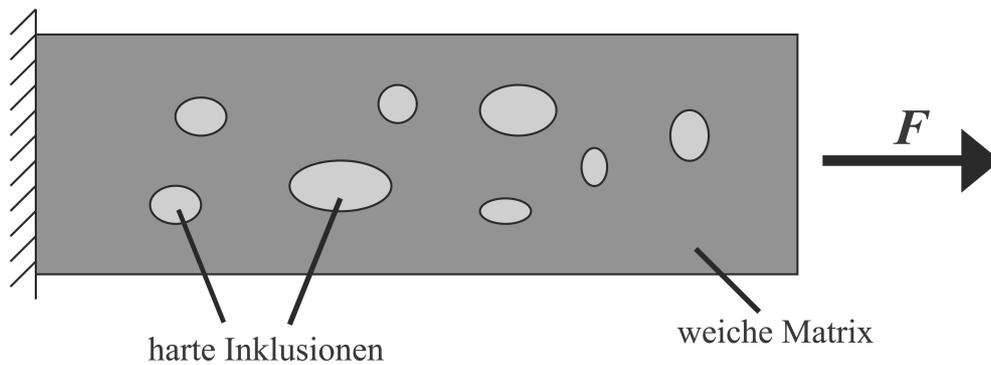


Bild 1.3: Schematische Darstellung eines Verbundes mit weicher Matrix und harten Inklusionen im Zugversuch: bei gleichem E-Modul ist die Fließgrenze des Verbundes gleich der der Matrix.

ze ist eine Hall-Petch-Beziehung, d. h. durch eine unterschiedliche Korngröße des Matrix-Materials Ferrit bei unterschiedlichen Martensit-Gehalten könnte die Fließspannung des Ferrits beeinflusst sein und damit die Streckgrenze des Verbundes verändern. Dieser Zusammenhang ist für Dual-Phasen Stahl experimentell bestätigt [43]. Der lineare Anstieg der Streckgrenze mit dem Martensit-Gehalt zeigt sich allerdings auch in Versuchsreihen mit gleichbleibender Korngröße des Ferrits.

Speich [72] wies bereits auf den möglichen Einfluss des Volumensprungs der Inklusionen bei der Phasenumwandlung des Austenits in Martensit hin. Er stellte fest, dass aufgrund der Phasenumwandlung sowohl interne Spannungs- als auch Dehnungszustände in der Matrix existieren sollten. So konnte in Dual-Phasen Stählen auch eine höhere Versetzungsdichte, ein Indiz für plastische Vorverformung, in der Nähe von Martensit-Einschlüssen nachgewiesen werden [76]. Jüngere, theoretische Arbeiten bestätigen, dass die Ausdehnung der Inklusionen tatsächlich ausreicht, um in der Matrix einen Vorspannungs- und Dehnungszustand hervorzurufen [9, 63].

In verschiedenen Arbeiten wird das Verformungsverhalten mit den freien Versetzungen in der Nähe des Martensits, dem internen Vorspannungs- oder dem Vordehnungszustand erklärt. So wird mit der Theorie der freien Versetzungen [54], die sich aufgrund der Vordehnung des Ferrits durch die sich ausdehnenden Martensit-Körner gebildet haben, die niedrige, kontinuierliche Streckgrenze erklärt, z. B. [65]. Das würde allerdings bedeuten, dass die Streckgrenze mit höherem Martensit-Gehalt weiter absinken oder zumindest nicht ansteigen würde, da mehr freie Versetzungen im Ferrit während der Austenit-Martensit Phasenumwandlung gebildet werden. Dies steht im Widerspruch zu den Experimenten, die zeigen, dass die Streckgrenze mit dem Volumenanteil Martensit im Verbund ansteigt.

In dieser Arbeit wird versucht, die internen Spannungen und Vordehnungen nachzuweisen und deren Bedeutung für das Anfangsverformungsverhalten von Dual-Phasen Stahl nachzugehen. Dabei wird insbesondere darauf Wert gelegt, die mechanischen Eigenschaften am Beginn der plastischen Verformung auf bestimmte Ursachen zurückzuführen.

Dazu werden an verschiedenen Dual-Phasen Stählen, die im Labor hergestellt wurden, Experimente durchgeführt. In Zugversuchen wird der Einfluss des Martensit-Gehalts auf die Streckgrenze überprüft und der Frage nachgegangen, unter welchen Umständen Dual-Phasen Stahl eine niedrigere Anfangsteifigkeit aufweist. Durch Aufnahmen mit einem Transmissionselektronenmikroskop und Messungen mit dem Ultramikrohärtemessgerät wird untersucht, ob der Ferrit bereits während der Herstellung plastisch verformt und ob er dabei verfestigt wird. Mit Hilfe von Drehpendel-Versuchen und mit einer Simulation des Diffusionsverhaltens von Kohlenstoff zu Versetzungen soll geklärt werden, ob freie Versetzungen, die sich in der Nähe von Martensit-Inklusionen gebildet haben, gefangen werden können und in welchem Zeitraum dies geschieht. Mit zwei- und dreidimensionalen Finite-Element Modellen wird außerdem das Entstehen des internen Spannungs- und Dehnungszustandes und dessen Auswirkungen auf das Anfangsverformungsverhalten im Zugversuch berechnet.

Kapitel 2

Experimente

2.1 Herstellprozess

Die Rohbleche für die Versuche wurden von der Voest-Alpine Stahl Linz zur Verfügung gestellt, siehe Tabelle 2.1 für die chemische Zusammensetzung des Materials. Die Bleche wurden mit einem Glühzyklus hergestellt, wie er schematisch in Bild 2.1 dargestellt ist.

Tabelle 2.1: Zusammensetzung des verwendeten Materials [Massen-%], Rest Fe

C	Mn	Si	Cr+Mo
0.09	1.0-1.5	0.1	0.5-1.0

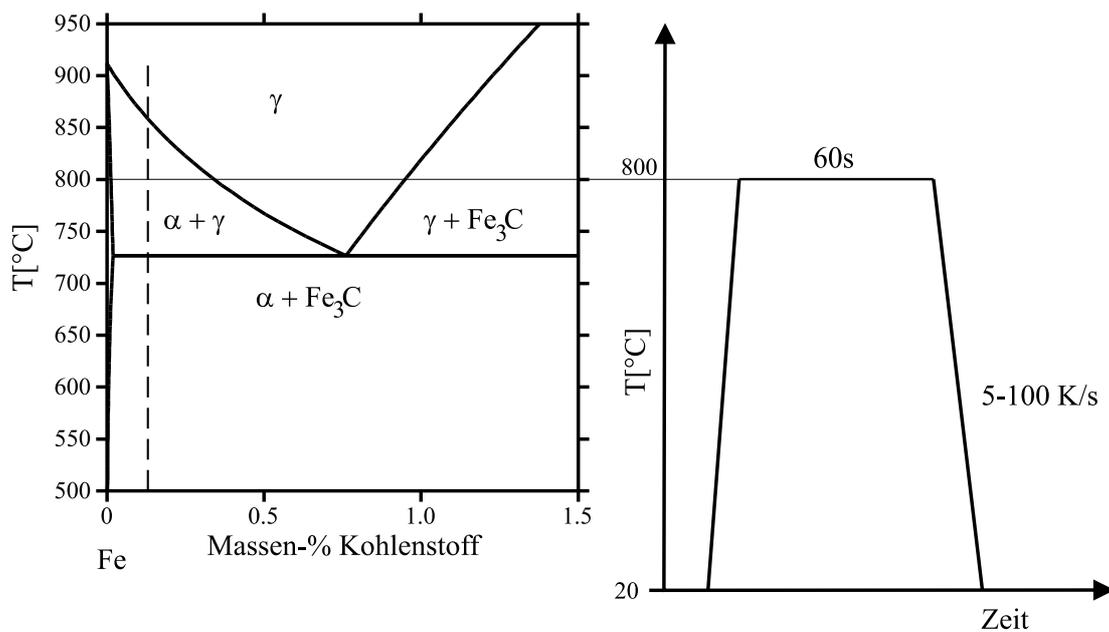


Bild 2.1: Verwendeter Glühzyklus zum Herstellen des Dual-Phasen-Gefüges.

Kaltgewalzter ferritisch-perlitischer Stahl wird für eine Minute bei 800 °C gegläht („intercritical annealing“) und danach mit Abkühlraten von 5 bis 100 K/s auf Raumtemperatur abgekühlt („intermediate quenching“ [78]). Während der Glühung löst sich der Zementit auf und es entsteht ein austenitisch-ferritisches Inklusions-Matrix-Gefüge aus der ursprünglichen ferritisch-perlitischen Mikrostruktur. Während der Abkühlung bildet sich Martensit in den Austenit-Körnern, es entstehen also Martensit-Inklusionen, die in eine Ferrit-Matrix eingebettet sind. Durch die Variation der Kühlrate kann die Menge an Martensit, die sich während des Abkühlens bildet, beeinflusst werden. Mit den Abkühlraten zwischen 5 und 100 K/s ergeben sich Volumenanteile des Martensits zwischen 6 und 18 % am Ende der Wärmebehandlung, siehe Tabelle 2.2. Da die Konzentration des Kohlenstoffs im Ausgangs-

Tabelle 2.2: Volumenanteil des Martensits in einer Probe in Abhängigkeit der Abkühlgeschwindigkeit.

Abkühlrate [K/s]	5	10	25	50	100
Martensitgehalt [vol.-%]	6	10	11	14	18

material bei allen Versuchen die gleiche ist und außerdem immer bei 800 °C gegläht wurde, ist natürlich die Konzentration des Kohlenstoffs im Martensit abhängig vom Volumenanteil Martensit im Gefüge, wodurch die Festigkeit des Martensits beeinflusst wird. Allerdings ist dies für die hier durchgeführten Untersuchungen über das Anfangsverformungsverhalten des Dual-Phasen Stahles unerheblich, da am Beginn der plastischen Verformung der Martensit nicht plastifiziert. Er hat in jedem Fall eine wesentlich höhere Streckgrenze, als der ihn umgebende Ferrit.

Für die Versuche wurden alle Bleche nochmal im Labor interkritisch gegläht, um einen definierten Ausgangszustand zu erhalten. Die Proben für die Alterungsversuche wurden mit einer einheitlichen Abkühlrate von 25K/s hergestellt, damit ergab sich ein Volumenanteil Martensit von etwa 11 %. Anschließend wurden sie unterschiedlichen Alterungsbedingungen ausgesetzt: entweder Kochen (170 °C, 20 min.), oder einer definierten Raumtemperaturalterung. Dabei ist das Alter die Zeit bei Raumtemperaturalterung ab Ende des Glühzyklus. Die Zugproben für die Alterungsuntersuchung wurden direkt nach der Glühung bei Raumtemperatur gebeizt. Zwischen den Bearbeitungsschritten wurden sie in flüssigem Stickstoff gelagert, um die Kohlenstoffdiffusion zu unterbinden. Jede dieser Proben wurde mindestens einmal in Stickstoff eingelagert, um etwaige Einflüsse aus der Abkühlung in Stickstoff auf die mechanischen Eigenschaften auszugleichen.

Um den möglichen Einfluss von Zwangsdehnungen zu klären, wurden die Laborglühungen mit zwei unterschiedlichen Glüheinrichtungen durchgeführt. Ein Apparat („calsim“ [74]) erlaubt die Einstellung eines definierten Bandzuges, wobei auch ein sehr geringer Bandzug (in der Probe etwa 10N/mm²) einstellbar ist. Der andere („glühsim“) arbeitet mit zwei feststehenden Einspannvorrichtungen, wodurch es während des Abkühlvorganges zu thermischen Zwangsdehnungen in der Probe kommt.

2.2 Streckgrenze

In Standard-Zugversuchen wird die Abhängigkeit der Dehngrenze vom Martensitvolumen ermittelt, die Spannungs- Dehnungs-Diagramme einiger Versuche sind in Bild 2.2(a) dargestellt. Auffällig ist, dass die unterschiedlichen Martensit-Gehalte einen sehr starken Einfluss

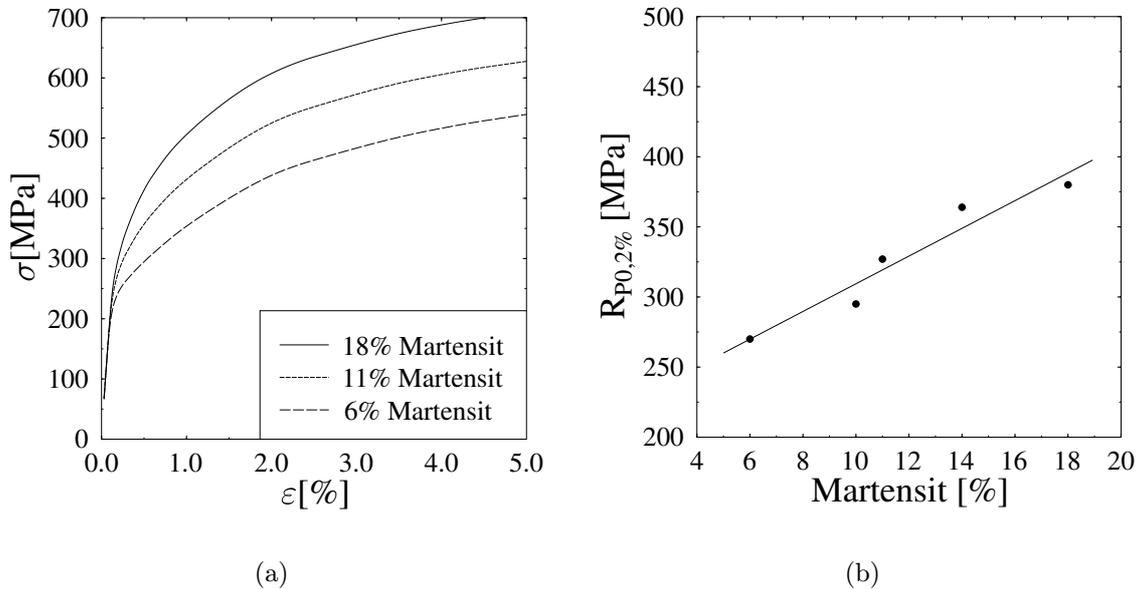


Bild 2.2: Ergebnisse der Zugversuche an Dual-Phasen Stählen mit unterschiedlichem Martensitgehalt: (a) Spannungs- Dehnungsdiagramme und (b) 0,2% Streckgrenze ($R_{P0,2\%}$) in Abhängigkeit des Martensit-Volumenanteils.

auf das mechanische Verhalten zu Beginn der plastischen Verformung haben. Die Probe mit 18% Volumenanteil Martensit zeigt eine höhere Verfestigung im Bereich bis etwa 0,5% Gesamtdehnung als die Probe mit 6% Volumenanteil Martensit.

Bei einem Vergleich der 0,2%-Dehngrenze der Proben mit den fünf unterschiedlichen Martensit-Gehalten aus Tabelle 2.2 zeigt sich ein nahezu linearer Anstieg der Dehngrenze mit dem Volumenanteil der Inklusionsphase, siehe Bild 2.2(b).

2.3 Erstbelastungssteifigkeit und Altern

Die Proben mit den unterschiedlichen Alterungsbedingungen Kochen (170 °C, 20 min.) oder Raumtemperaturalterung (≈ 100 Minuten, 3h, 5h, 1d, 5d, 12d, 28d) zeigen Unterschiede im mechanischen Verhalten. Es wurden jeweils zwei Standard-Zugproben für jede Alterungsbedingung hergestellt. In der Zugprüfung wurde eine der beiden Proben vollständig bis zum Bruch belastet. Die andere Probe wurde in Schritten (0,3%, 0,7% und 1,0%) gedehnt, um die Anfangssteifigkeit bei unmittelbarer Wiederbelastung nach Entlastung zu ermitteln.

In Bild 2.3 sind die Spannungs-Dehnungs-Diagramme aus drei Zugversuchen an Proben mit unterschiedlicher Vorbehandlung dargestellt. Die Probe, die nur 3 Stunden nach dem

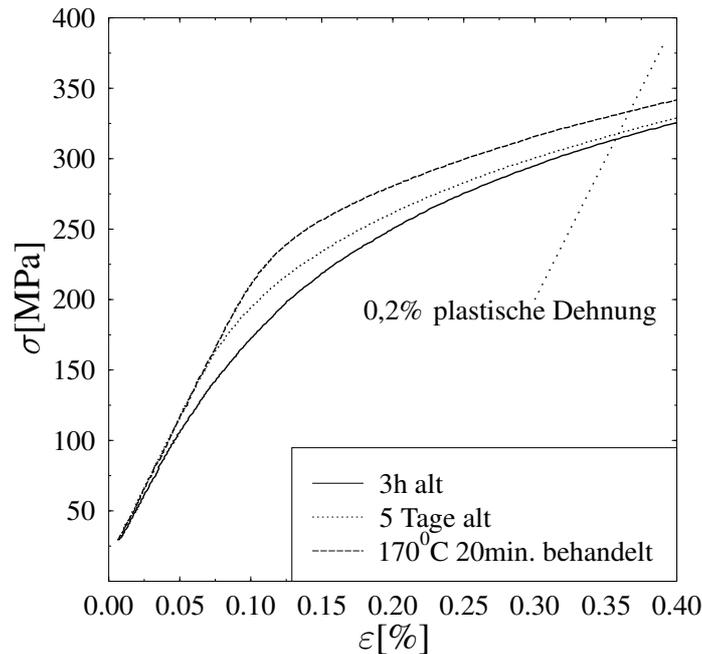


Bild 2.3: Gemessene Fließkurven aus Zugversuchen an Proben, die unterschiedlich lange nach dem Herstellen bei Raumtemperatur gelagert wurden (3 Stunden und 5 Tage), und von einer gekochten Probe.

Herstellen getestet wurde, zeigt eine niedrigere Steigung im Spannungs-Dehnungs-Diagramm zu Beginn des Versuches als die beiden anderen Proben. Die 5 Tage alte und die gekochte Probe haben eine Anfangssteifigkeit, die dem E-Modul des Dual-Phasen Stahls entspricht. Die Kurven der Zugproben, die 5 bzw. 24 Stunden bei Raumtemperatur gelagert wurden, lagen zwischen den Kurven der 3 Stunden und der 5 Tage alten Probe. Bei Proben, die älter als 5 Tage waren, wurde keine Veränderung der Eigenschaften im Zugversuch gegenüber der 5 Tage alten Probe festgestellt.

Auffällig ist, dass die 0,2%-Dehngrenze der 5 Tage alten Probe nahezu unverändert gegenüber der Dehngrenze der 3 Stunden alten Probe ist. Die Wärmebehandlung bei 170°C für 20 Minuten zeigte den stärksten Effekt, dabei stieg auch die 0,2%-Dehngrenze merklich gegenüber den bei Raumtemperatur gealterten Proben an. Es tritt also ein Bake-Hardening-Effekt ($BH_0 \approx 20 \text{ N/mm}^2$) auf.

Um die unterschiedlichen Anfangssteifigkeiten besser vergleichen zu können, mussten sie quantifiziert werden. Bei den Proben mit einer deutlichen elastischen Geraden ist dies unproblematisch. Die Fließkurven der Proben, die weniger als 5 Tage der Raumtemperaturalterung ausgesetzt waren, zeigten allerdings keine eindeutige elastische Gerade, siehe Bild 2.3. Mit Hilfe eines mathematischen Näherungsverfahrens konnten Anfangssteifigkeiten

berechnet werden. Die zwei Hauptanforderungen an das Programm sind das Ausschalten von Zufallsfehlern und die Definition eines geeigneten Bereiches der Messwerte unterhalb der einsetzenden plastischen Verformung. Es wurde ein Verfahren von Hesse *et al.* [37] in leicht vereinfachter Form verwendet.

Die N Messwertpaare $(\varepsilon_j, \sigma_j)$ eines manuell ausgewählten Bereiches des Spannungs-Dehnungs-Diagramms, der in jedem Fall noch einen Teil des plastischen Verformungsbereiches einschließt, werden durch ein kubisches Polynom $\hat{\sigma}$ angenähert.

$$\hat{\sigma} = a_0 + a_1\varepsilon + a_2\varepsilon^2 + a_3\varepsilon^3 \quad (2.1)$$

Die Koeffizienten a_i sind Schätzwerte für die Regressionskoeffizienten α_i , sie werden nach der Methode der kleinsten Quadrate errechnet:

$$\sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=0}^3 a_i (\varepsilon_j)^i - \sigma_j \right)^2 \rightarrow \text{Minimum.} \quad (2.2)$$

Aus dieser Forderung ergibt sich ein lineares Gleichungssystem zum Berechnen der Koeffizienten a_i :

$$\begin{pmatrix} c_{00} & c_{01} & \cdot & \cdot \\ c_{10} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & c_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

$$\text{mit} \quad c_{ik} = \sum_{j=1}^N (\varepsilon_j)^{i+k} \quad \text{und} \quad b_i = \sum_{j=1}^N (\varepsilon_j)^i \cdot \sigma_j, \quad i, k = 0, 1, 2, 3.$$

Es wird die mittlere quadratische Abweichung s^2 des Schätzpolsynoms $\hat{\sigma}$ gegenüber dem tatsächlichen Messwertverlauf im ausgewählten Bereich berechnet.

$$s^2 = \frac{1}{N-4} \sum_{j=1}^N (\hat{\sigma}_j - \sigma_j)^2 \quad (2.4)$$

$\hat{\sigma}_t$ ist der zu σ_t korrespondierende Näherungswert des Ansatzpolynoms. Mit s werden 95 %-Vertrauensintervalle für den quadratischen und den kubischen Regressionskoeffizienten (α_2 und α_3) errechnet. Falls weniger als 30 Messwerte zur Verfügung stehen, wird bei der Ermittlung des 95 %-Fraktils $t_{95\%}$ die Studentsche t-Verteilung zu Grunde gelegt, sonst die Standardnormalverteilung.

$$a_i - \delta_i \leq \alpha_i \leq a_i + \delta_i \quad \text{mit} \quad \delta_i = s\sqrt{\bar{c}_{ii}} \cdot t_{95\%}, \quad i = 2, 3. \quad (2.5)$$

\bar{c}_{ii} sind Hauptdiagonalelemente der zur Matrix (c_{ik}) aus Gleichung (2.3) inversen Matrix. Enthalten die 95 %-Vertrauensintervalle für den quadratischen und den kubischen Koeffizienten Null, so wird angenommen, dass der gewählte Bereich ausreichend linear ist. Der lineare Koeffizient ist dann die gesuchte Tangentensteifigkeit. Andernfalls wird der höchste Dehnungswert des Intervalls aus dem Untersuchungsbereich gestrichen und es werden wieder

neue Schätzwerte a_i berechnet. Eine genauere Differenzierung beim Streichen der Werte (am oberen oder unteren Ende des Intervalls), wie sie in [37] vorgenommen wird, ist hier nicht nötig, da die Messwerte am Beginn des Zugversuchs im Spannungs-Dehnungs-Diagramm keine Krümmung aufweisen.

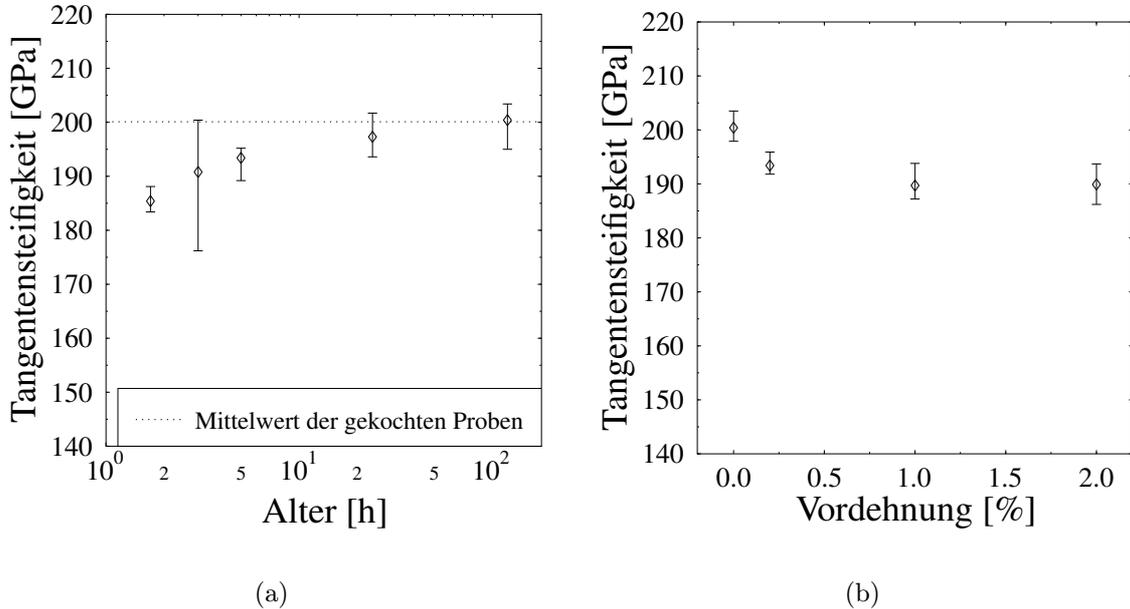


Bild 2.4: (a) Tangentensteifigkeiten der Proben in Abhängigkeit der Lagerungsdauer bei Raumtemperatur nach dem Herstellen. (b) Tangentensteifigkeiten der Proben in Abhängigkeit der Vordehnung: Es wurden Ergebnisse von Proben verwendet, die älter als fünf Tage waren; der an die Vordehnung angeschlossene Zugversuch fand unmittelbar nach dem Vordehnen statt. Dargestellt sind in beiden Diagrammen Minimal-, Maximal- und Durchschnittswerte.

Die Anfangssteifigkeit nimmt in den ersten Tagen nach dem Herstellen deutlich zu, insbesondere in den ersten Stunden, siehe Bild 2.4(a). Nach 5 Tagen Alterung bei Raumtemperatur ist die Anfangssteifigkeit etwa gleich dem E-Modul der gekochten Proben. Die Anfangssteifigkeit der Proben, die noch länger bei Raumtemperatur gelagert wurden, entspricht auch etwa dem E-Modul der gekochten Proben.

Wird die Anfangssteifigkeit in Abhängigkeit der Vordehnung betrachtet, so erkennt man eine Abnahme der Steifigkeit mit steigender Vordehnung, siehe Bild 2.4(b). Bei Vordehnungen über 1 % nimmt die Anfangssteifigkeit nicht mehr weiter ab.

Es zeigte sich kein Einfluss der thermischen Zwangsdehnungen während des Abkühlprozesses auf die mechanischen Eigenschaften der Proben. Die Fließkurven aus Zugversuchen an Proben gleichen Alters waren deckungsgleich, obwohl die einen größeren thermischen Zwangsdehnungen ausgesetzt waren (hergestellt mit „glühsim“) als die anderen („calsim“).

2.4 Drehpendelversuche

Durch Platzwechsel von interstitiell gelösten Kohlenstoffatomen kommt es im Material zu Relaxationsvorgängen („Snoek relaxation“ [71]), d.i. inelastischer Spannungsabbau. Als gelöster Kohlenstoff wird hier der Kohlenstoff-Anteil bezeichnet, der frei im Gitter diffundieren kann und weder durch Ausscheidungen noch durch Spannungsfelder von Versetzungen oder an Korngrenzen festgehalten wird. Die beim inelastischen Spannungsabbau stattfindende Energiedissipation äußert sich bei einer Schwingungsbelastung als Dämpfung. Diese Schwingungsdämpfung wird üblicherweise in Abhängigkeit der Temperatur bei einer vordefinierten und konstanten Schwingungsfrequenz in Drehpendelversuchen ermittelt. Die Höhe der Dämpfung ist von der Konzentration der gelösten Kohlenstoffatome abhängig.

Bei der Auswertung der Messung muss berücksichtigt werden, dass auch andere Effekte die Schwingung dämpfen können. Dadurch entsteht ein Dämpfungsuntergrund, von dem angenommen wird, dass er mit der Temperatur linear ansteigt, siehe gestrichelte Linie in Bild 2.5. Nach Abzug dieses Untergrundes erhält man ein Dämpfungsmaximum, das der

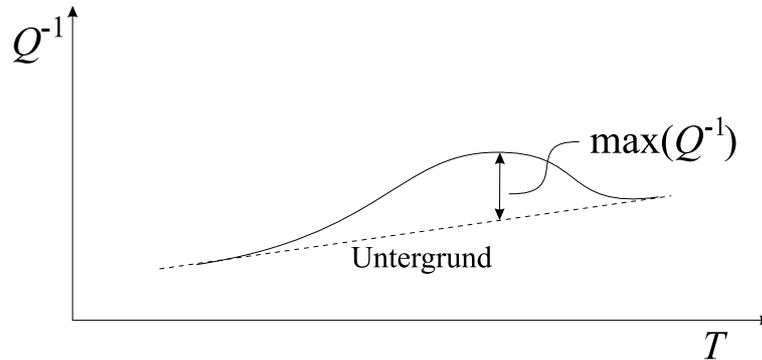


Bild 2.5: Nach Abzug des Untergrundes (gestrichelt) von den Messwerten der Drehpendelmessung (durchgezogen) kann ein Dämpfungsmaximum Q_{\max}^{-1} ermittelt werden.

Dämpfung durch den Kohlenstoff zugeordnet wird. Der Gehalt an gelöstem Kohlenstoff c_s im Material ist direkt proportional zum Dämpfungsmaximum Q_{\max}^{-1} .

$$c_s = p_C \cdot Q_{\max}^{-1} \quad (2.6)$$

Der Korrekturfaktor p_C ist bei polykristallinem Material stark von der Korngröße, der Textur und Verunreinigungen (Fremdatomen) abhängig [38]. In dieser Arbeit ist jedoch nur die relative Abnahme der Konzentration der gelösten Kohlenstoffatome interessant, da nur der Zeithorizont des Einfangens der Atome durch Versetzungsspannungsfelder ermittelt wird. Der verwendete Wert $p_C = 0,5$ wurde der Literatur entnommen [13].

Für die Drehpendel-Messungen wurden Proben auf dem Glühsimulator „glühsim“ hergestellt. Dabei wurde sowohl das gleiche Ausgangsmaterial als auch die gleiche Temperaturführung verwendet wie bei den Proben für die Anfangssteifigkeits-Experimente, siehe Abschnitt 2.3.

Die Proben wurden bei Raumtemperatur unterschiedlichen Alterungszeiten ausgesetzt. Die freie Pendellänge der Proben betrug 250 mm, die Torsionsfrequenz des Pendels konstant 0.5 Hz und die Temperatur wurde während der Experimente von $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$ auf $+60\text{ }^{\circ}\text{C}$ erhöht. Eine Messung, die 20 Minuten nach dem Herstellen der Probe begonnen wurde, konnte nicht für die weitere Auswertung verwendet werden; die Probe alterte während der Messung aufgrund der langen Versuchsdauer, diese beträgt mindestens 20 Minuten zwischen $+20\text{ }^{\circ}\text{C}$ und $+40\text{ }^{\circ}\text{C}$. Es konnte deshalb keine klares Dämpfungsmaximum ermittelt werden, siehe die oberste Kurve in Bild 2.6. Die anderen Proben, die mindestens 80 Minuten dem

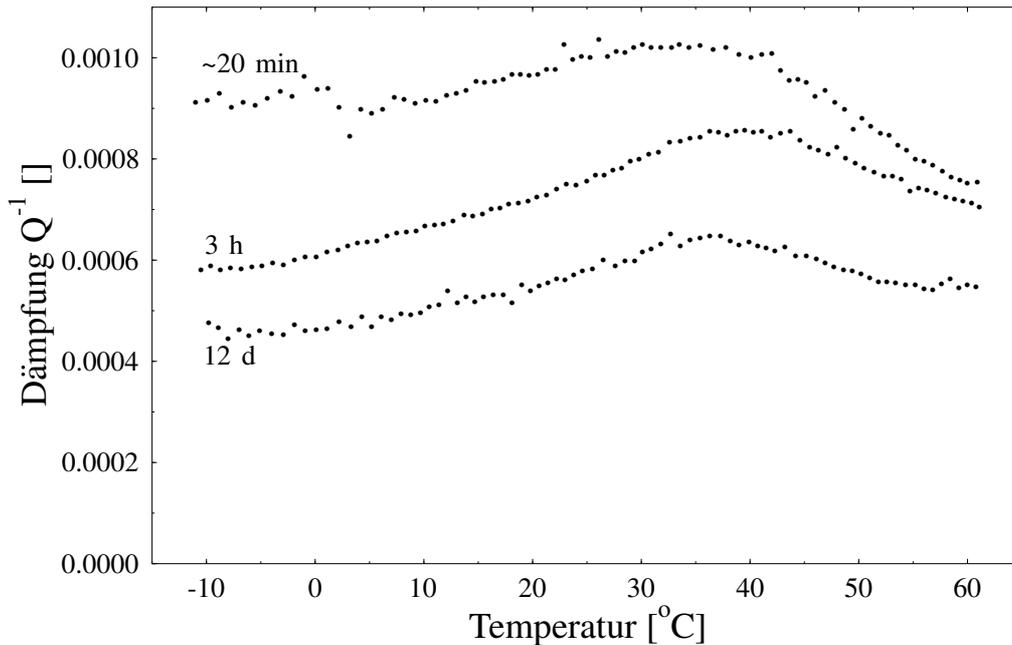


Bild 2.6: Vergleich der Ergebnisse von Dämpfungsmessungen an Dual-Phasen Stählen, die unterschiedlichen Alterungszeiten bei Raumtemperatur ausgesetzt waren (≈ 20 Minuten, 3 Stunden und 12 Tage).

Alterungsprozess ausgesetzt waren, zeigen einen abnehmenden Hintergrund und ein klares Dämpfungsmaximum. Der Gehalt an gelöstem Kohlenstoff mit nimmt zunehmender Alterungsdauer bei Raumtemperatur ab, siehe Bild 2.7.

Die Drehpendelmessung an einer Probe, die 12 Tage der Raumtemperaturalterung ausgesetzt war, ergab keine signifikanten Unterschiede zur Messung an der 5 Tage alten Probe. Die Konzentration an gelöstem Kohlenstoff ändert sich also nicht mehr, die Diffusion von Kohlenstoffatomen zu Versetzungsspannungsfeldern kommt zum Erliegen. Um den Gehalt an gelöstem Kohlenstoff weiter zu reduzieren, ist ein Kochen der Probe notwendig (hier: 20 Minuten bei $170\text{ }^{\circ}\text{C}$, gestrichelte Linie in Bild 2.7).

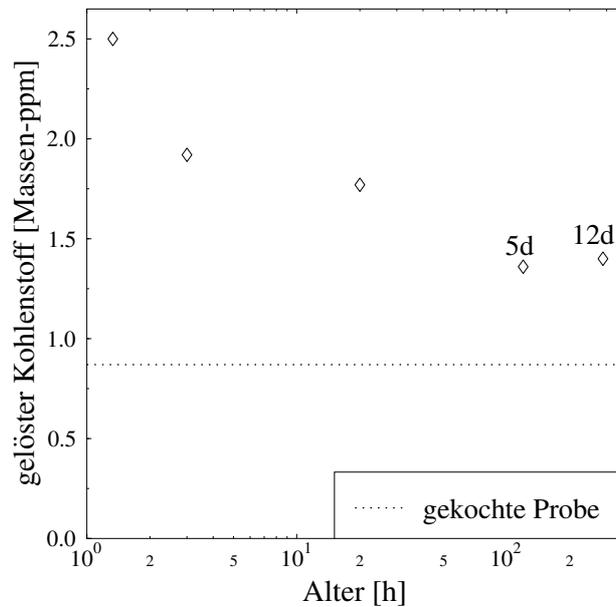


Bild 2.7: Ergebnisse der Dämpfungsmessungen. Der Gehalt an gelöstem Kohlenstoff nimmt mit steigender Lagerungszeit bei Raumtemperatur (hier 1,5 Stunden bis 12 Tage) ab. Die gestrichelte Linie repräsentiert den Messwert einer Referenzprobe, die bei 170 °C 20 Minuten lang behandelt wurde.

2.5 Transmissionselektronenmikroskopie

Plastische Verformungen erhöhen die Anzahl der Versetzungen in metallischen Werkstoffen. Versetzungen sind Gitterfehler, die man im Transmissionselektronenmikroskop (TEM) als schwarze Linien sichtbar machen kann. Bild 2.8 zeigt die TEM-Aufnahme eines unverformten Dual-Phasen Stahles. Der Ferrit erscheint hell, der Martensit schwarz. Die schwarzen Linien im Ferritkorn rühren von Versetzungen her, man sieht deutlich die höhere Versetzungsdichte am Rand zum Martensit gegenüber dem Inneren des Kornes. Die höhere Versetzungsdichte lässt auf höhere plastische Verformungen in der Nähe des Martensitkorns schließen.

2.6 Ultramikrohärtemessungen

Bei Ultramikrohärtemessungen im Rasterelektronenmikroskop (REM) wird eine pyramidenförmige Nadel in das zu prüfende Material gedrückt. Dabei wird die Kraft, mit der der Diamant niedergedrückt wird, aufgenommen. Die Ultramikrohärte wird analog der Vickers-Härte berechnet.

$$HV = \frac{189,1 \cdot F}{\left(\frac{D_1 + D_2}{2}\right)^2} \quad [\text{MPa}] \quad (2.7)$$

Dabei ist F die Kraft in [mN], mit der die Nadel eingedrückt wurde und D_1 bzw. D_2 sind die gemessenen Längen der Diagonalen des Eindrucks in [μm]. Der dabei ermittelte

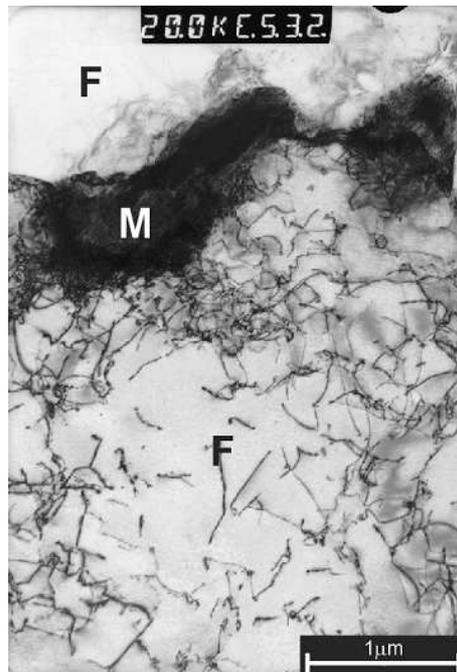


Bild 2.8: TEM-Aufnahme eines Dual-Phasen Stahles nach dem Abkühlen, Ferrit erscheint hell (F) und Martensit dunkel (M), Versetzungen sind als schwarze Linien erkennbar.

Wert steht mit mechanischen Kennwerten, die im Zugversuch ermittelt wurden, nicht in direktem Zusammenhang. Ein Material mit einer höheren Streckgrenze aber niedrigerer Verfestigungsrate kann durchaus eine niedrigere Ultramikrohärte aufweisen als ein Material mit geringerer Streckgrenze und höherer Verfestigungsrate. Hier wird mit Hilfe der Ultramikrohärtemessungen einer möglichen Verformungsverfestigung des Ferrits in der Umgebung von Martensit-Einschlüssen in Abhängigkeit des Volumenanteils des Martensits nachgegangen. Dabei kann mit Sicherheit angenommen werden, dass die gemessene Ultramikrohärte mit zunehmender Verfestigung durch Vorverformung des Materials ansteigt, da immer das gleiche Ausgangsmaterial den Messungen zugrunde liegt.

Ultramikrohärtemessungen in der Nähe von Korngrenzen sind problematisch, da die Korngrenze eine Verformungsbehinderung darstellt. Beim Eindrücken der Diamantpyramide verformt sich nicht nur das genau unter der Pyramide liegende Material plastisch, das Material fließt auch zur Seite und weicht dadurch aus. Wird dieses seitliche Ausweichen durch die Anwesenheit einer Korngrenze erschwert, so ist auch die Eindringtiefe der Pyramide bei gleicher Kraft geringer, dadurch wird eine höhere Härte gemessen als ohne Einfluss der Korngrenze. Die hier ermittelten Werte eignen sich deshalb nur zum Vergleich untereinander. Es wurden drei Messreihen durchgeführt: Die Ferrit-Härte wurde

- unmittelbar neben anderen Martensit-Körnern (F/M),
- neben anderen Ferrit-Körnern (F/F, siehe Bild 2.9) und
- in der Mitte großer Ferrit-Körner, weitab von einer Korngrenze (F)

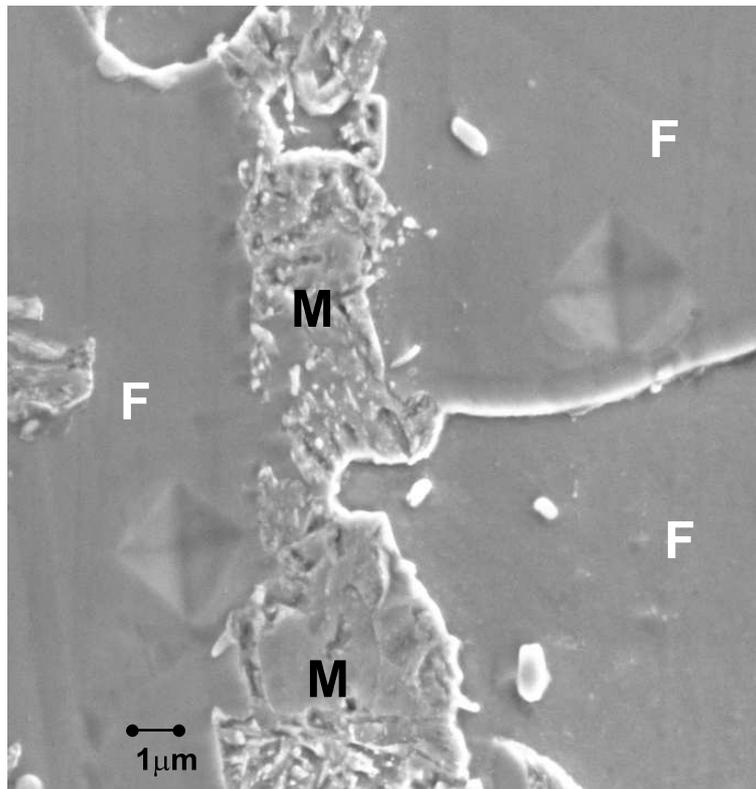


Bild 2.9: REM-Aufnahme von Ultramikrohärte-Eindrücken in einem Dual-Phasen Stahl, Ferrit(F) erscheint gleichmäßig und Martensit(M) unregelmäßig. Es sind Eindrücke in der Nähe von Ferrit/Ferrit-Korngrenzen und in der Nähe von Ferrit/Martensit(M)-Phasengrenzen sichtbar.

gemessen. Dabei setzt u. U. die (F/M)-Phasengrenze der Verformung des Materials den höheren Widerstand entgegen als die (F/F)-Korngrenze, allerdings kann davon ausgegangen werden, dass der Verformungswiderstand der (F/M)-Phasengrenzen bzw. (F/F)-Korngrenzen in den Proben mit unterschiedlichem Martensitgehalt der gleiche ist und daher die Messwerte einer Messreihe vergleichbar sind.

Durch die Zweiphasigkeit des Materials kann sich direkt unterhalb des Eindrucks in ein relativ weiches Ferrit-Korn ein Korn der relativ harten Martensit-Phase befinden und das Messergebnis beeinflussen, siehe Skizze in Bild 2.10. Ein solches hartes Korn wirkt als Verformungsbehinderung, eine zu hohe ermittelte Härte kann die Folge sein. Beim Vergleich zweier Messreihen von Dual-Phasen Stählen mit unterschiedlichem Martensitgehalt würde dies auch bei vielen Einzelmessungen das Ergebnis beeinflussen: Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein hartes Korn unmittelbar unterhalb der Eindruckspitze befindet, ist bei einem Stahl mit hohem Volumenanteil der harten Phase größer. Solche Messungen müssen also von der Ergebnisermittlung ausgeschlossen werden. Dazu ist es notwendig, das Material nach einer Messreihe abzuschleifen (gestrichelte Linie in Bild 2.10), um das Gefüge unter dem gemessenen Eindruck zu überprüfen.

Die Messungen werden mit einem pyramidenförmigen Diamanten mit einem Öffnungswin-

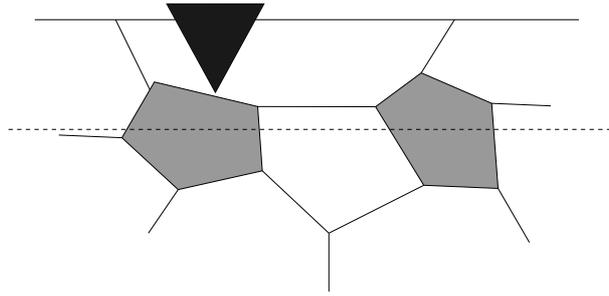


Bild 2.10: Beim Eindringen der Diamantpyramide (schwarz) des Ultramikrohärtemessgerätes in ein Ferritkorn (weiß) kann es passieren, dass sich direkt darunter ein Martensitkorn (grau) befindet und die Messung beeinflusst. Das Material wird etwa bis zur gestrichelten Linie abgetragen, um diese systematischen Messfehler auszuschließen.

kel von 136° durchgeführt, die Lastkraft beträgt in allen Versuchsreihen 5 mN. Alle Proben werden vor der Versuchsdurchführung mit einer Anreißnadel angeritzt, die dabei entstehende Markierung von etwa $30\ \mu\text{m}$ Breite verschwindet später beim Abtragen der obersten Schicht nicht und dient als Orientierung beim Wiederauffinden der Stellen an denen Eindruckversuche unternommen wurden. Im Kratzer werden zwei relativ tiefliegende und markante Punkte als Endpunkte für eine Referenzstrecke gewählt, von einem Ende der Strecke kann dann jeder Eindruck-Punkt in einem Polarkoordinatensystem vermessen werden, siehe Bild 2.11.

Das Abtragen einer dünnen Schicht geschieht durch Schleifen für ca. 20 s bei 1000 Umdrehungen/min mit $1\ \mu\text{m}$ Diamantstaub-Suspension und anschließendem Polieren für eine Minute. Dabei wird die Oberfläche gerade etwas weiter abgetragen, als ein Eindruck tief ist. Falls unter einem Eindruck Martensit auftritt, ist dies nach dem Abschleifen zu erkennen: Bild 2.12(a) zeigt eine Probe mit vermessenen Eindruckpunkten. Im Bild, das nach dem Abschleifen aufgenommen wurde (Bild 2.12(b)) sieht man deutlich, dass sich unter dem Eindruck „Pa2“ Martensit befindet. Solche Messungen werden von der Ergebnisermittlung ausgeschlossen. Die Vermutung, dass ein unter dem Eindruck liegendes Martensit-Korn die Messung beeinflusst, bestätigte sich auch; die Ergebnisse der ausgeschlossenen Messungen lagen meist weit über oder zumindest am oberen Rand des Bereiches der übrigen ermittelten Werte.

Ergebnisse

Die drei Versuchsreihen (F/M, F/F und F) wurden jeweils an drei Proben mit unterschiedlichem Ferrit-Gehalt (6%, 11% und 18%) durchgeführt. Jede Versuchsreihe lieferte mindestens 35 Messungen, die nicht aufgrund darunter liegender Korngrenzen oder Martensit-Inklusionen ausgeschlossen werden mussten. Die Ergebnisse sind in Bild 2.13 dargestellt. Die gemessene Härte ist in den Mitten der großen Ferrit-Körner nahezu konstant für verschiede-

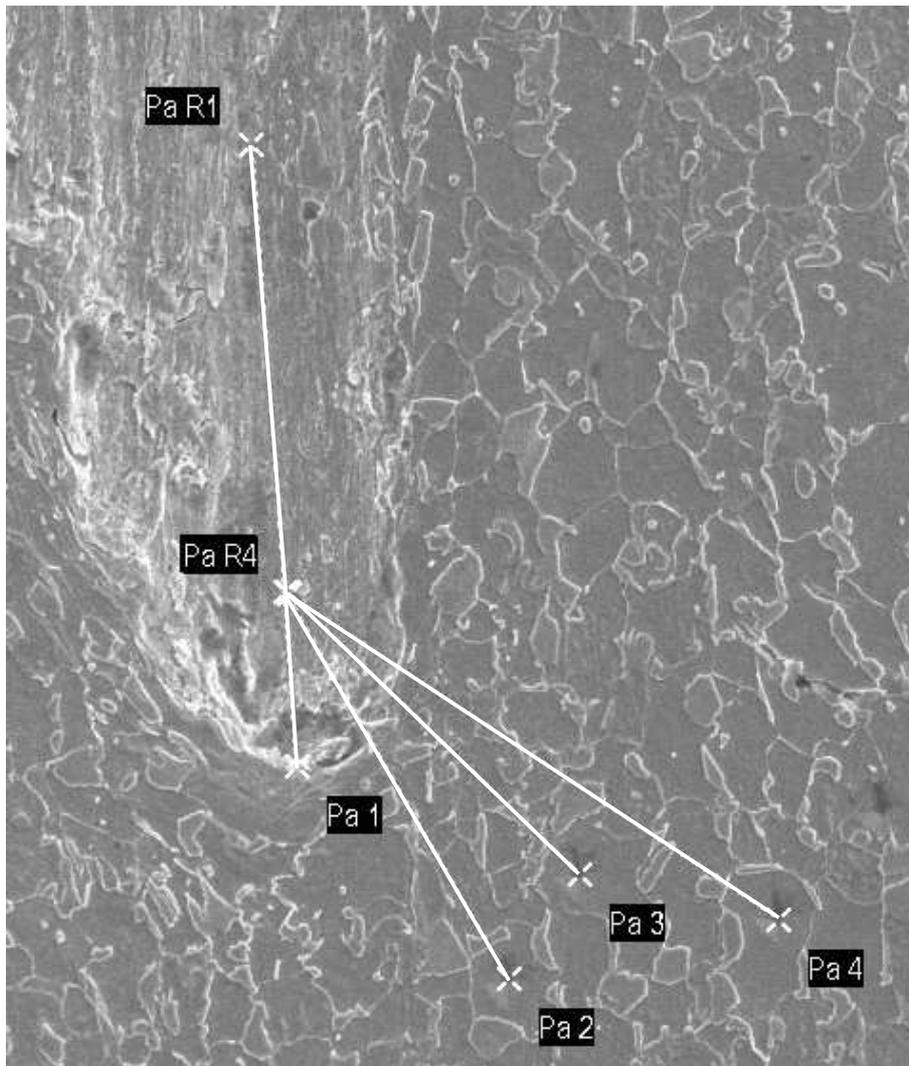


Bild 2.11: Zur Orientierung im REM wurde das Material mit einer Anreißnadel angeritzt, zu sehen ist das Ende eines Kratzers. PaR1 und PaR4 sind die Endpunkte einer Referenzgeraden, die benützt wurde, um die Positionen der Eindrücke in einem Polarkoordinatensystem zu vermessen.

ne Volumenanteile Martensit, die Unterschiede sind nicht signifikant. Die durchschnittliche Ferrit-Härte in den großen Körnern ist als durchgezogene Linie in Bild 2.13 eingezeichnet, der höchste und niedrigste gemessene Wert wird durch die unterbrochenen Linien markiert. Die Härtemessungen in der Nähe der Ferrit/Ferrit-Korngrenzen (F/F) ergeben eine leicht ansteigende Tendenz der Härte mit dem Volumenanteil Martensit der Probe. Die stärkste Zunahme der Härte der Ferrit-Körner ist in der Nähe von Ferrit/Martensit-Phasengrenzen (F/M) zu verzeichnen. Auffällig ist insbesondere der sehr starke Anstieg der höchsten gemessenen Härten für die größeren Volumenanteile Martensit in den Proben. Die geringsten gemessenen Härten unterscheiden sich geringfügig für alle Proben in allen Versuchsreihen. Eine Verfestigung in den Ferrit-Körnern findet hauptsächlich in der Nähe der Martensit-Inklusionen statt, insgesamt ist die Verfestigung sehr inhomogen.

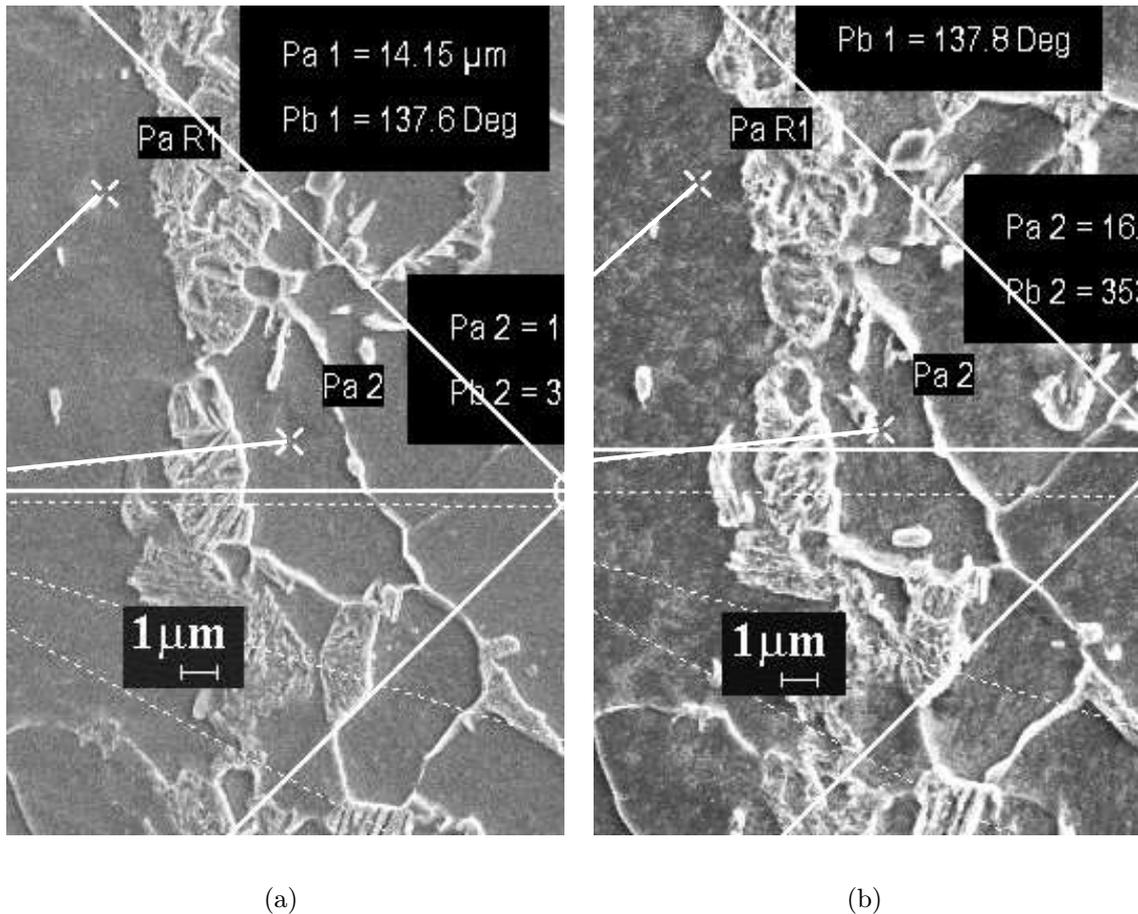


Bild 2.12: Liegt unter einem Eindruck (a) ein Martensit-Korn (die hellen Bereiche in den Aufnahmen sind Martensit), wie hier beim Eindruck „Pa2“, so wird dies nach dem Abschleifen erkannt: Das Bild (b) wurde nach Abtragen der obersten Schicht aufgenommen.

Diskussion der Ultramikrohärte-Messergebnisse

Traint [82] hat an denselben Dual-Phasen Stählen, wie sie hier verwendet werden, Untersuchungen durchgeführt. In ihrer Arbeit entspricht die hier verwendete Legierung der Legierung DP7. Es wurde in die Mitte großer Ferrit-Körner von Stählen mit 7 verschiedenen Martensit-Gehalten gedrückt. Die Ergebnisse, dargestellt in Bild 2.14, sind nicht mit den hier ermittelten direkt vergleichbar, da die Eindrücke nicht mit 5 mN sondern mit 10 mN Last durchgeführt wurden. Deutlich wird wie in den für diese Arbeit durchgeführten Untersuchungen, dass die Ferrit-Härte in der Mitte der großen Körner unabhängig vom Martensit-Gehalt des Verbundes ist.

Durch Ultramikrohärtemessungen an Ferrit-Körnern verschiedener Dual-Phasen Stähle mit unterschiedlichem Martensit-Gehalt kommen El-Sesy *et al.* [29] zu dem Ergebnis, dass die Ferrit-Härte abhängig vom Martensit-Gehalt ist. Sie ermitteln im Durchschnitt eine mit dem Martensit-Gehalt steigende Ferrit-Härte. Allerdings differenzieren sie nicht nach dem Ort der Eindrücke. Würden die Durchschnitte über alle hier durchgeführten Ferrit-Härtemessungen

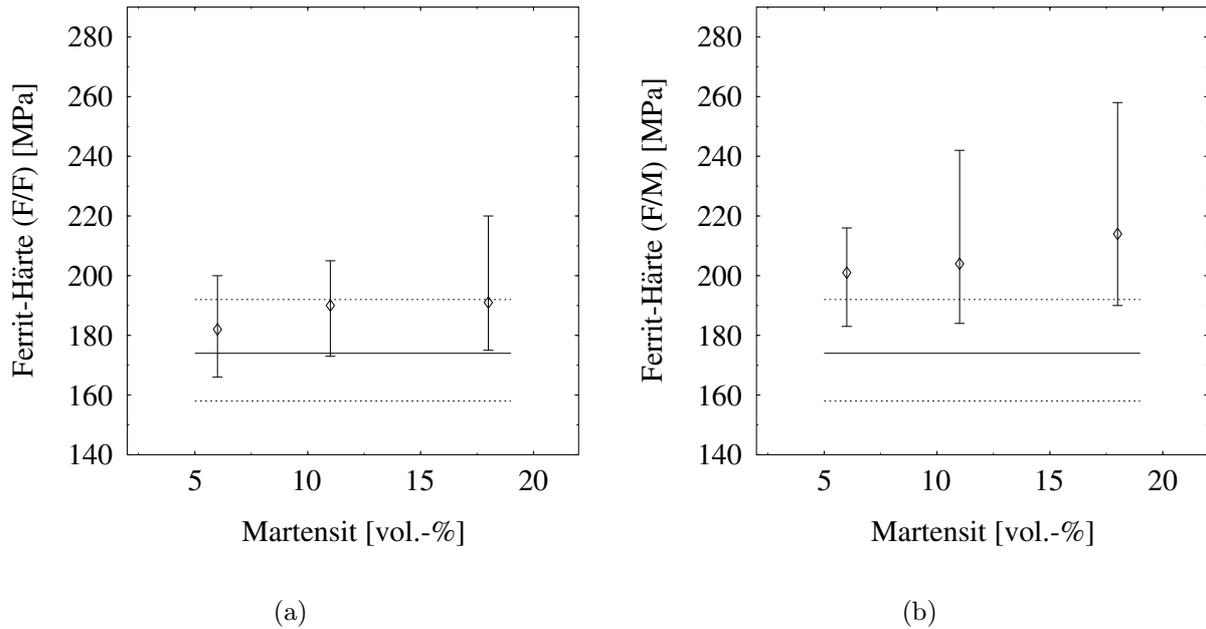


Bild 2.13: Ferrit-Härte in Proben mit unterschiedlichem Martensit-Gehalt. Dargestellt sind in beiden Diagrammen Minimal-, Maximal- und Durchschnittswerte. (a) Härte in der Nähe von Ferrit/Ferrit-Korngrenzen. (b) Ferrit-Härte in der Nähe von Ferrit/Martensit-Phasengrenzen. Die Linien stellen jeweils die Härte in der Mitte großer Ferrit-Körner dar.

an Proben eines Martensit-Gehalts verglichen, würde man auch eine mit dem Martensit-Gehalt steigende Ferrit-Härte ermitteln.

Die Ferrit-Härte wird durch den Kohlenstoffgehalt im Ferrit beeinflusst, Kohlenstoffatome behindern bei plastischer Verformung die Versetzungsbewegung. Die Ferrit-Härtung durch Kohlenstoffatome steigt mit der Wurzel der Kohlenstoff-Konzentration Γ im Eisen-Gitter [34]:

$$\Delta\tau_0 \sim \sqrt{\Gamma} . \quad (2.8)$$

$\Delta\tau_0$ ist der Anstieg der Spannung, die nötig ist, um Versetzungen im Gitter zu bewegen. Diese Beziehung wurde mehrfach experimentell bestätigt.

Es ist davon auszugehen, dass der Kohlenstoff-Gehalt im Ferrit in dieser Untersuchung nicht in großem Ausmaß durch die Kühlrate beeinflusst wird, d. h. im Ferrit ist die Kohlenstoff-Konzentration nahezu unabhängig vom Martensit-Volumenanteil der Probe. In der Mitte der großen Ferrit-Körner ist die Kohlenstoff-Konzentration in allen Proben gleich, sie entspricht der Konzentration, die dort während der interkritischen Glühung vorliegt. Während der schnellen Abkühlprozesse ist nicht genügend Zeit für eine maßgebliche Änderung der Konzentration durch Diffusion. In den Ferrit-Bereichen, die während der Abkühlung aus Austenit entstehen, ist die Konzentration auch nicht in besonderem Ausmaß von der Abkühlrate abhängig. Die Austenit-Ferrit Phasenumwandlung geschieht bereits kurz nach Beginn der Abkühlung bis etwa 700 °C. Der entstehende Ferrit ist maximal bis zur Löslichkeitsgrenze mit

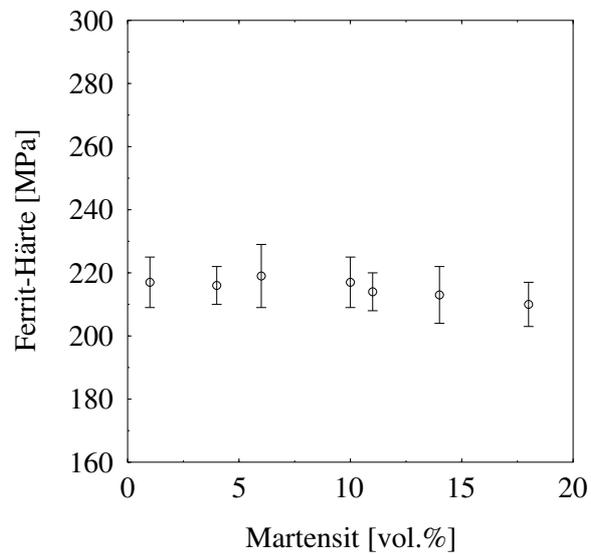


Bild 2.14: Ergebnisse von Eindrücken an Dual-Phasen Stählen mit unterschiedlichen Martensitgehalten. Dargestellt ist jeweils der Mittelwert und die Standardabweichung. Die Eindrücke wurden mit jeweils 10 mN unternommen.

Kohlenstoff angereichert, diese verändert sich für unterschiedliche Temperaturen in diesem Bereich nur geringfügig. Unter der realistischen Annahme, dass der Kohlenstoffgehalt um maximal 10% variiert, ändert sich die Härte des Ferrits dennoch nur um 5%. Im Zusammenhang mit der nahezu konstanten Untergrenze der gemessenen Härten für unterschiedliche Martensit-Gehalte wird ein maßgeblicher Einfluss des Kohlenstoffgehalts auf die Ergebnisse ausgeschlossen.

Kapitel 3

Mikromechanische Berechnung

Dual-Phasen Stahl besteht aus einer Ferrit-Matrix mit eingeschlossenen Martensit-Inseln. In einer mikromechanischen Berechnung zur Simulation des Materialverhaltens muss diese Struktur in der geometrischen Modellierung abgebildet werden. Die Entstehungsgeschichte des Stahles soll berücksichtigt werden, insbesondere die Volumenzunahme der Inklusionen während der Abkühlung durch die Phasenumwandlung von Austenit zu Martensit. Zur Berechnung der Abkühlung und des anschließenden Belastungsversuchs werden Finite Elemente verwendet, mit ihnen lässt sich elastisch-plastisches Materialverhalten unter thermisch-mechanischer Belastung simulieren. Zur geometrischen Modellierung eignet sich die Einheitszellentechnik, dabei wird ein kleiner, repräsentativer Ausschnitt des Materials im Modell dargestellt. Das Modell muss ausreichend fein aufgelöst sein, um die Mikrostruktur (Inklusionen in Matrix) korrekt wiederzugeben. Außerdem sollte das von der Einheitszelle abgebildete Volumen so groß sein, dass die Einheitszelle nach außen homogene Materialeigenschaften aufweist. Einheitszellen können in beliebig vielen Dimensionen erstellt werden, für dreidimensionale Aufgabenstellungen wie das Matrix-Inklusions-Problem ist eine dreidimensionale Zelle sinnvoll. Gelingt es, ein dreidimensionales Problem in zwei Dimensionen darzustellen, kann eine zweidimensionale Zelle vorteilhaft sein, da dadurch der Rechenaufwand deutlich vermindert wird und in Folge größere Bereiche des Materials abgebildet werden können. Durch periodische Randbedingungen wird gewährleistet, dass keine Effekte durch freie Ränder auftreten. Dazu wird die Verformung der Knoten der Finiten Elemente einer Oberfläche mit der Verformung der Knoten der anderen Seite in Beziehung gesetzt. Für die Vernetzung der Modelle mit Finiten Elementen wird das Programm-Paket MSC.Patran verwendet, die Berechnungen werden mit ABAQUS durchgeführt.

3.1 Geometrische Modellierung

Das Ziel bei der Netzbildung ist eine Gefügesimulation, die topologisch und geometrisch wirklichkeitsgetreu ist [55]. Voronoi-Netze [27, 84] eignen sich gut zur künstlichen Erzeugung von Gefügestrukturen: Sie sind einfach mit dem Computer zu generieren und zu behandeln, da sie nur ebene Begrenzungsflächen aufweisen, im Gegensatz z. B. zu Johnson-Mehl-Modellen [44], bei denen gekrümmte Oberflächen die Zellen begrenzen. In Bild 3.1 ist ein zweidimensionales Voronoi-Netz mit 100 Zellen dargestellt. Voronoi-Netze werden erstellt, indem jedem vorher

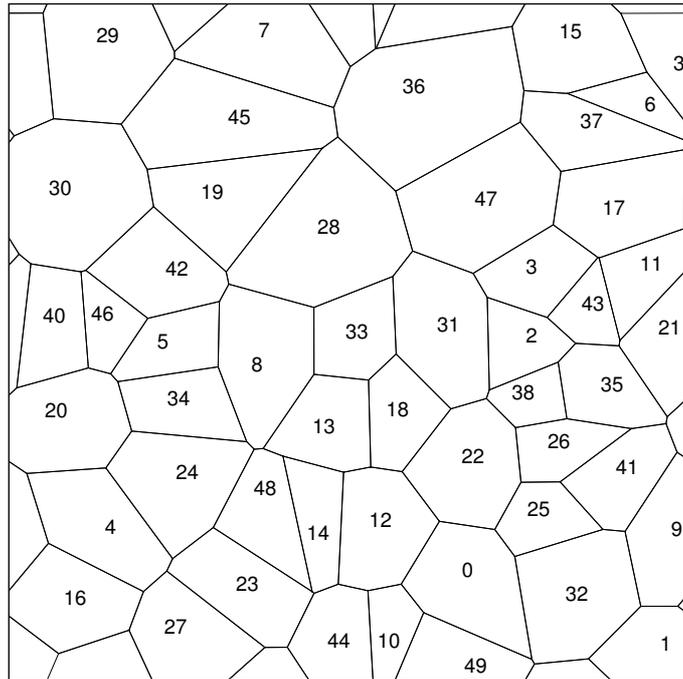


Bild 3.1: 2D-Voronoi-Netz.

festgelegtem Voronoi-Zentrum eine Voronoi-Zelle zugeordnet wird. Für jede Zelle gilt, dass jeder Punkt innerhalb dieser Zelle dem Zentrum dieser Zelle näher ist als jedem anderen Zentrum. Um ein dreidimensionales Gefüge mit zufrieden stellenden Parametern zu erhalten, sind etwa 8000 Voronoi-Zellen nötig [86]. Dabei wird gefordert, dass die gemittelten geometrischen Eigenschaften wie z. B. Kanten und Ecken pro Zelle für verschiedene zufallsgenerierte Netze nicht signifikant divergieren und dass der ebene Schnitt durch das Gefüge repräsentativ für das räumliche Gefüge ist.

Die Erfüllung dieser Bedingungen ist nicht hinreichend dafür, dass tatsächlich ein realitätsähnliches Netz generiert wurde. Zum Beispiel treten in zufallsgenerierten Voronoi-Netzen extrem kurze Kanten auf, die um einige Größenordnungen unterhalb der durchschnittlichen Kantenlänge der Zellen liegen können. Solche kurzen Kanten kommen in einem realen Gefüge nicht vor, da sie energetisch sehr ungünstig sind. Während des Rekristallisationsprozesses kommt es durch Kornwachstum zur Verschiebung von Korngrenzflächen, wobei

kurze Kanten und kleine Korngrenzflächen eliminiert werden. Außerdem sind die Grenzflächen von Körnern in Metallgefügen oft gekrümmt, um an einer gemeinsamen Kante von drei Körnern energetisch günstige Winkel zwischen den Grenzflächen zu bilden [68, 69].

Bei der Verwendung von dreidimensionalen Voronoi-Netzen stellen sich vor allem zwei Probleme:

- Das Vernetzen von 8000 Voronoi-Zellen würde Finite-Element-Netze erzeugen, die mit den momentan zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten sehr schwierig zu bewältigen sind.
- Beim Vernetzen von kurzen Kanten zwischen drei Voronoi-Zellen entstehen extrem viele Elemente, da das Netz zu dieser Kante hin extrem verfeinert werden muss [88].

Analytische mikromechanische Berechnungen an dreidimensionalen Netzen mit immerhin über 1000 Zellen gibt es [91], allerdings sind die dort verwendeten Methoden auf das hier behandelte Problem nicht anwendbar, da die Berechnungen des Herstellprozesses des Dual-Phasen Stahles ein elastisch-plastisches und temperaturabhängiges Materialgesetz erfordern.

Unter Umständen kann eine Aufgabenstellung auch sinnvoll in zwei Dimensionen modelliert werden, wodurch die Anzahl der erforderlichen Voronoi-Zellen auf einige hundert reduziert wird. Simulationsrechnungen für einen Duplex-Stahl haben gezeigt, dass 100 Voronoi-Zellen in der Ebene nicht ausreichen um konvergierende Ergebnisse bei der mechanischen Berechnung zu erhalten. Bei gleichen stereologischen Parametern und zufälligen Einfärbungen ergaben sich bei 100 Zellen noch starke Schwankungen des thermo-mechanischen Verhaltens, d. h. die Geometrie hatte einen großen Einfluss auf das Ergebnis [56]. Bei Verwendung von 500 Voronoi-Zellen trat das Problem nicht mehr auf. Es wird davon ausgegangen, dass 500 Zellen, und nicht wie in drei Dimensionen 8000 Zellen, eine ausreichende Größe für ein zweidimensionales Netz darstellen.

3.1.1 Periodische Randbedingungen

Für periodische Randbedingungen werden die Verschiebungen der Finite-Element-Knoten einer Oberfläche der Einheitszelle mit den Knotenverschiebungen der gegenüberliegenden Fläche (Kante bei einer zweidimensionalen Zelle) über einen Vektor verbunden:

$$\underline{u}^{O_i} - \underline{u}^{U_i} = \underline{c}^i \quad \text{mit } i = 1, 2, 3 \text{ (3D)} \quad \text{oder } i = 1, 2 \text{ (2D)}; \quad (3.1)$$

O und U stehen für zwei gegenüberliegende Flächen (Kanten) der Einheitszelle, die „obere“ und „untere“ Fläche (Kante) in Richtung i ; die Differenz \underline{c}^i ist die Verschiebung der beiden Flächen (Kanten) relativ zueinander. In Bild 3.2 ist das Prinzip an Hand einer einfachen zweidimensionalen Einheitszelle mit viereckigen Finiten Elementen dargestellt. Durch

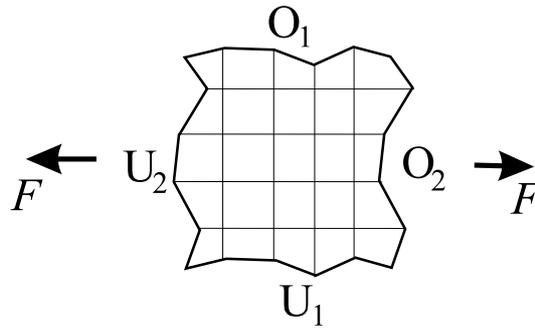


Bild 3.2: Schematische Darstellung einer zweidimensionalen Einheitszelle. Zwei gegenüberliegende Kanten sind über einen Verformungsvektor miteinander verbunden, jeder Knoten auf einer Kante kann sich zu seinem jeweiligen Gegenüber nur so bewegen, wie alle Knoten dieser Kante zu ihrem jeweiligen Gegenüber.

Änderungen des Vektors \underline{c}^i können Verformungen aufgebracht werden. Auch kraftgesteuerte Modellrechnungen sind über diesen Steuervektor mit seinen Koppelknoten, an denen die Oberflächenknoten angeschlossen sind, möglich. Dazu wird die Kraft auf den Koppelknoten in Form einer Einzellast aufgebracht. Um Verzerrungen zu erhalten, sind die Knotenverschiebungen \underline{c}^i noch durch die entsprechende Abmessung der Zelle in Richtung i zu dividieren.

Bei dreidimensionalen Rechnungen an kubischen Einheitszellen werden alle sechs Oberflächen auf diese Weise gekoppelt und bei zweidimensionalen Rechnungen die vier Seitenkanten der dabei verwendeten rechteckigen Einheitszelle. Ein Problem stellt die Behandlung der Richtung aus der Ebene bei zweidimensionalen Rechnungen dar. Mit den Verschiebungsbedingungen in diese Richtung müssen in Kombination mit einem modifizierten Materialgesetz die mechanischen Eigenschaften in die dritte Dimension ersetzt werden. Es stehen drei Elemente mit unterschiedlichen Ansätzen zur Lösung dieses Problems zur Verfügung [42]:

- *plane strain*: feste Randbedingungen quer zur Elementebene, d. h. die Verformungen in diese Richtung werden zu Null gesetzt.
- *plane stress*: lose Ränder quer zur Elementebene, damit werden die Spannungen in diese Richtung zu Null gesetzt.
- *generalized plain strain*: Die Verschiebungen quer zur Elementebene werden für alle Elemente gekoppelt, d. h. das gesamte System kann sich in diese Richtung gleichmäßig bewegen.

Generalized Plane Strain Elemente können ein Material mit Fasern gut abbilden, die Richtung der Fasern wird dabei in Querrichtung zur Ebene („out of plane“) angenommen. Sie sind geeignet, beispielsweise die Struktur von Duplex-Stählen in einem mikromechanischen Modell darzustellen. Für Dual-Phasen Stahl kommen sie nicht in Frage, da die Inklusionen dort nicht in Form von Fasern auftreten. Der Matrix-Inklusions-Charakter würde mit diesen

Elementen in die dritte Richtung nicht wiedergegeben. Die Inklusionen würden die Querdehnung der gesamten Zelle behindern, ein höherer Martensit-Anteil hätte automatisch ein steiferes Materialverhalten zur Folge. Auch Plane Stress Elemente können für die Simulation des Dual-Phasen Stahls nicht verwendet werden. Sie sind ungeeignet, den Abkühlprozess zu berechnen: Die sich ausdehnenden Inklusionen würden sich nur quer zur Ebene ausdehnen, da diese Richtung nicht behindert ist. Damit könnte nicht studiert werden, wie die Volumenzunahme auf die umliegende Matrix wirkt. Der Abkühlvorgang alleine kann in zwei Dimensionen mit festen Rändern (Plane Strain Elemente) modelliert werden. Sowohl die Temperaturdehnung als auch die Phasenumwandlungsausdehnung werden für die dritte Richtung zu Null gesetzt. Diese Dehnungen würden sonst über die Querdehnzahl die Dehnung der Inklusionen in der Ebene beeinflussen, anisotrope Querdehnzahlen sind mit dem Programmpaket ABAQUS[42] nicht möglich. Mit den unterdrückten Ausdehnungen in die dritte Richtung wird zwar nicht das Materialverhalten korrekt simuliert, für die Analyse der Verfestigung der Matrix ist es aber ein brauchbares Modell. Im Zugversuch kommt es durch die festen Ränder über die behinderte Querdehnung zu einem zu steifen Materialverhalten. Da Schwierigkeiten bestünden, die einzelnen versteifenden Effekte (Verformungsverfestigung des Matrix-Materials, behinderte Querdehnung und Einfluss der Inklusionen auf das umliegende Material während des Zugversuchs in Zusammenhang mit den festen Rändern) zu trennen, wird mit den ebenen Voronoi-Netzen nur der Abkühlvorgang mit Plane Strain Elementen berechnet.

3.1.2 Zweidimensionale Netze

Um die kurzen Kanten zwischen Voronoi-Zellen eines zweidimensionalen Netzes zu entfernen, bieten sich drei Möglichkeiten an:

- Die Keimpunkte des Netzes werden so gelegt, dass bei der Vernetzung keine kurzen Kanten entstehen. Das kann a priori geschehen, indem die Keimzellen nur an bestimmten Punkten zugelassen werden. Das daraus generierte Netz ist allerdings je nach Methode sehr gleichmäßig, die stereologischen Parameter entsprechen mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht denen eines zufälligen Netzes. Netze, die regelmäßige Anordnungen von Keimzellen benutzen, bestehen im Ergebnis z.B. nur aus Sechsecken, je nachdem welches Muster verwendet wird. Diese Sechsecke lassen sich dann zwar noch leicht modifizieren, allerdings bleibt das Netz sehr gleichmäßig.
- Die Keimstellen eines bereits generierten Netzes werden so verschoben, dass in einem neuen Lauf ein Netz mit weniger oder gar keinen kurzen Kanten entsteht. Dabei entsteht wieder ein Voronoi-Netz. Falls diese Eingriffe nur punktuell vorgenommen werden, ist keine signifikante Änderung der stereologischen Parameter zu erwarten.
- Kornwachstum wird simuliert, um die kurzen Kanten zu eliminieren.

In dieser Arbeit wird die zweite Möglichkeit verfolgt. Hochgradig regelmäßige Netze können zur Ausbildung von Vorzugsrichtungen bei den mechanischen Eigenschaften führen. Bei der zweiten Möglichkeit besteht diese Gefahr nicht, außerdem wird die Realitätsnähe der Modellierung mit einem Voronoi-Netz ausgenützt. Das Kornwachstum wird nicht weiter verfolgt, da dadurch das Modell unnötig verkompliziert würde.

Es wurde eine Methode entwickelt, bei der durch Verschieben von Keimzellen in iterativen Schritten eine Voronoi-Struktur für die Finite-Elemente-Vernetzung erzeugt wird. Die Keimzellen (Voronoi-Zentren) zweier Zellen, die eine kurze Kante zwischen sich haben, werden entweder ein wenig voneinander weg oder ein wenig aufeinander zu verschoben, wobei immer nur eine Keimzelle verschoben wird. Zuerst wird eine Vergrößerung des Abstandes versucht und falls das bei dem nächsten Erzeugen des Voronoi-Netzes nicht zum Erfolg führt, wird der Abstand verringert. Dieser Prozess wird so lange wiederholt bis keine kurze Kante mehr auftritt. Bild 3.3(a) zeigt ein zufällig generiertes Voronoi-Netz mit 100 Zellen. Einige

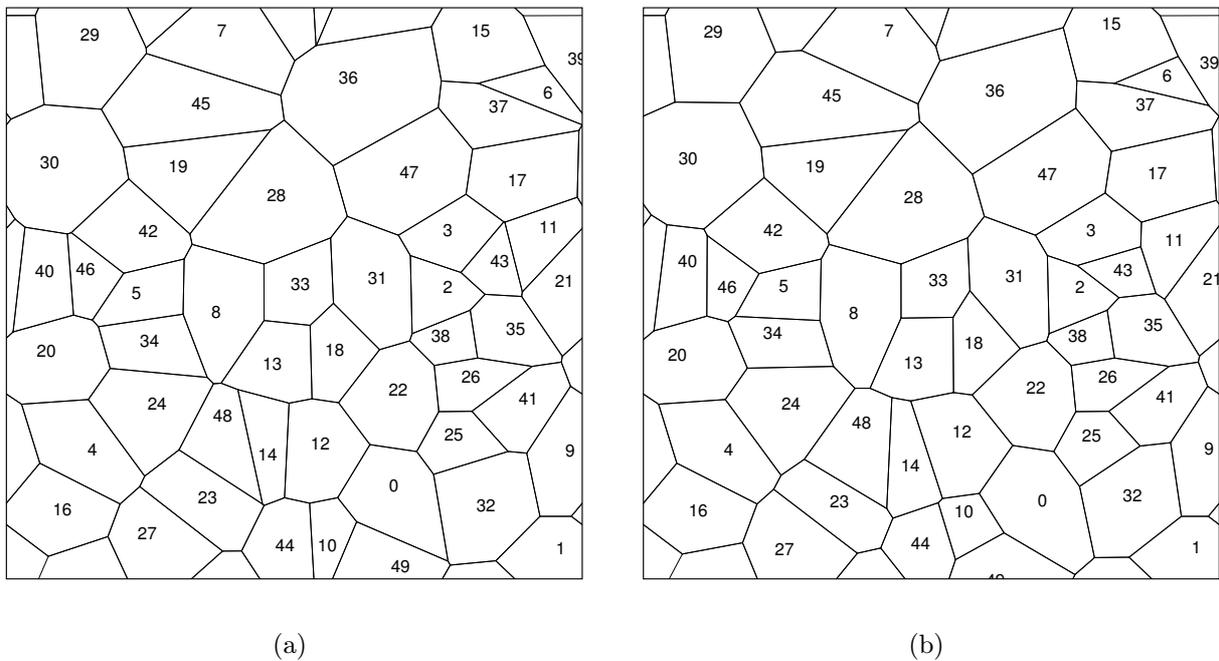


Bild 3.3: (a) Originales Voronoi-Netz mit kurzen Kanten. (b) Nach einigen iterativen Schritten entsteht ein modifiziertes Netz ohne kurze Kanten.

Kanten sind für eine Vernetzung ungünstig, z. B. die zwischen Zelle 46 und 30. Nach drei iterativen Schritten entsteht ein modifiziertes Netz ohne Kanten mit Längen unterhalb des Schwellenwertes, dargestellt in Bild 3.3(b). Durch auseinander ziehen der Zellen 46 und 30 wurde z. B. erreicht, dass die Kante zwischen diesen beiden Zellen nicht mehr besteht.

Der Schwellenwert für die Kantenlänge wird bei 100 Zellen üblicherweise auf das 0,01-fache der Größe der gesamten Einheitszelle gesetzt, bei 500 Zellen auf das 0,002-fache. Ein höherer Schwellenwert führt zu weniger Finiten Elementen, allerdings sinkt damit die Wahrchein-

lichkeit, dass das Verfahren konvergiert. Zur Verbesserung der Konvergenz-Eigenschaften werden die Zellen nicht in jedem Schritt um das gleiche Mass verschoben. Die Verschiebungslänge wird zufällig generiert, die maximale Verschiebung ist der Schwellenwert. Um Rückkoppelungen zu vermeiden, werden nicht zwei Nachbarn auf einmal verschoben, sondern nur einer von beiden, der zufällig ausgewählt wird. Wird nach 5 Iterationen kein geeignetes Netz erzeugt, beginnt der Prozess nochmal von vorn. Mit dieser Methode wurden auch Netze mit 500 Zellen erzeugt, siehe Bild 3.4.

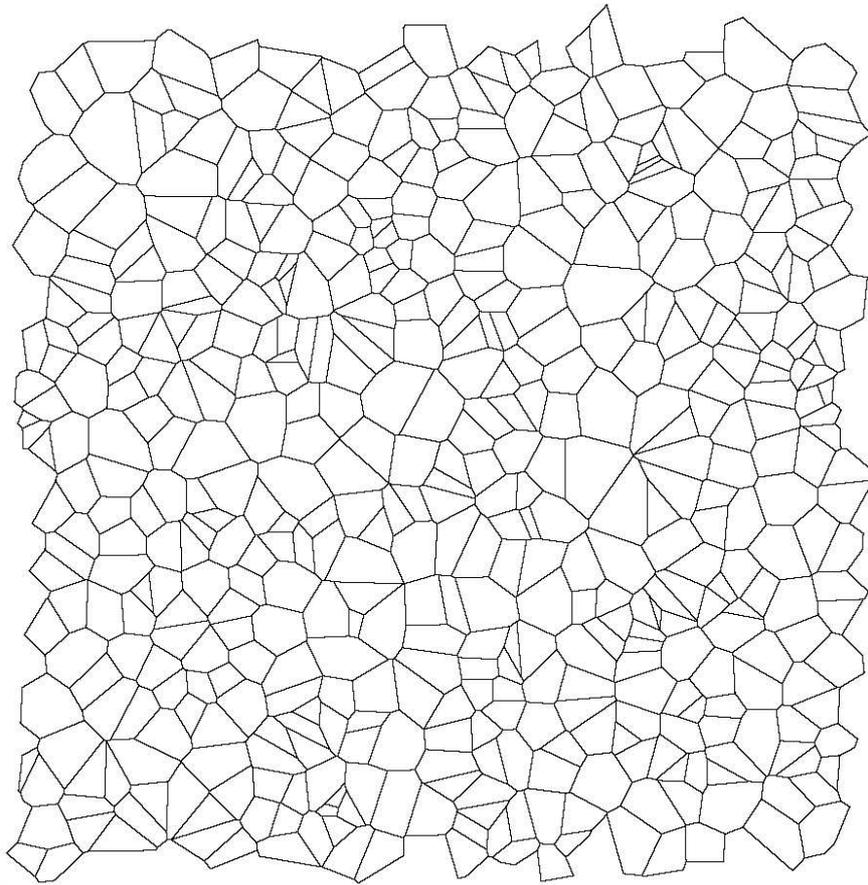


Bild 3.4: Zweidimensionales Voronoi-Netz mit 500 Zellen, wie es für eine FE-Diskretisierung verwendet wurde.

Die Vernetzung mit Finiten Elementen geschieht mit dem kommerziellen Programmpaket MSC.Patran. Um Koppelknoten für die periodischen Randbedingungen zu erhalten, müssen die Knoten auf gegenüberliegenden Rändern relativ auf den gleichen Positionen sein, d. h. sie müssen sich in einer Koordinate genau um die Breite oder Höhe der Einheitszelle unterscheiden. Dies wird erreicht durch Vorgabe der Knoten auf gegenüberliegenden Rändern vor der Vernetzung. Diese Knoten bilden jeweils Paare für die Koppelgleichungen, die entsprechenden Knotennummern wurden durch ein Computer-Programm ausgelesen.

Bei der Zuweisung der Voronoi-Zellen zu den beiden Materialphasen muss ein bestimmter Volumenanteil bzw. Flächenanteil mit der Inklusionsphase eingefärbt werden. Dazu beste-

hen verschiedene Möglichkeiten: Aufteilung von Hand, Zufallsverteilungen und Verteilungen mittels Quasizufalls-Sequenzen, etwa nach Halton [35], bis der geforderte Flächenanteil eingefärbt ist. Die reinen Zufallsverteilungen führen zu subjektiv weniger homogenen Verteilungen, d. h. die Inklusionen sind nicht sehr gleichmäßig auf die gesamte Zelle verteilt, siehe Bild 3.5(a) für eine reine Zufallseinfärbung. Unter den Realisationen der reinen Zu-

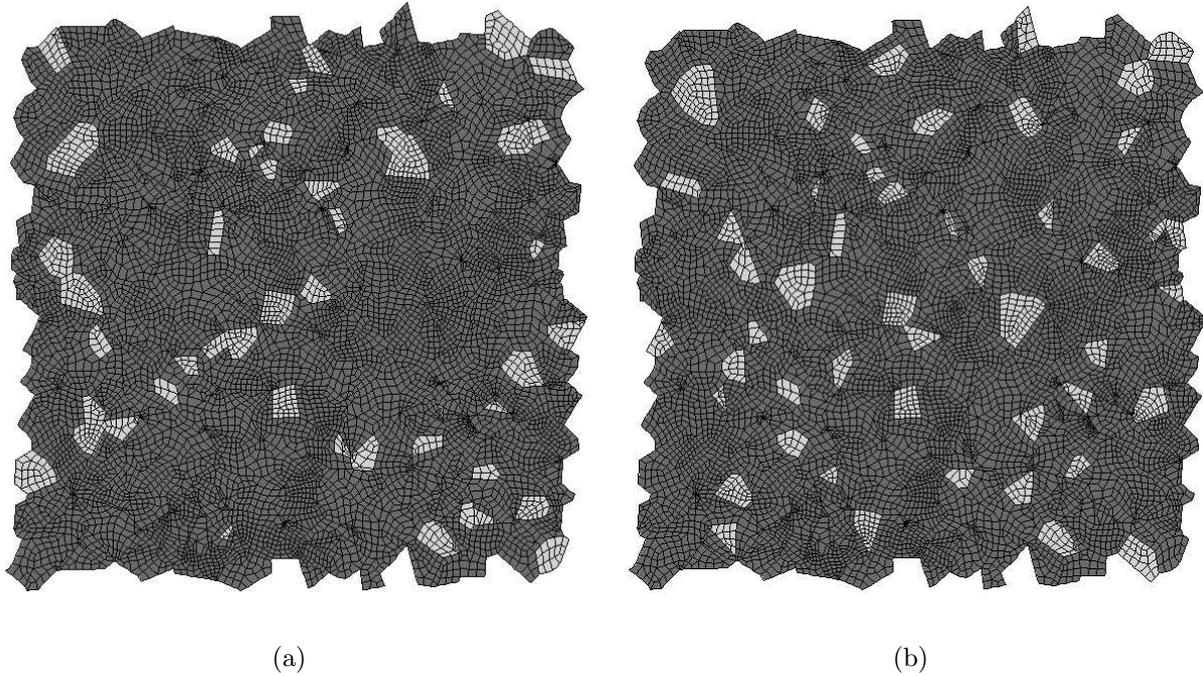


Bild 3.5: (a) Reine Zufallseinfärbung und (b) eine Einfärbung mit Hilfe des Halton-Algorithmus eines 2D-Voronoi-Netzes, der Volumenanteil der Inklusionen beträgt bei beiden Netzen etwa 10 %.

fallsverteilungen befinden sich natürlich auch gleichmäßigere Einfärbungen als in Bild 3.5(a). Um zu überprüfen, ob die Gleichmäßigkeit der Einfärbung einen signifikanten Einfluss auf das Ergebnis hat, wurden sowohl reine Zufallsverteilungen mit subjektiv inhomogenen Verteilungen als auch Verteilungen von Hand und Halton-Verteilungen, siehe Bild 3.5(b), für die Simulationen verwendet. Der Halton-Algorithmus lieferte homogene Verteilungen, sie unterschieden sich in ihrer Gleichmäßigkeit subjektiv nicht von den Handverteilungen.

3.1.3 Dreidimensionale Netze

Einfaches Matrix-Inklusions-Modell

Für die Abbildung des Matrix-Inklusions-Systems in einem Dual-Phasen-Stahl bietet sich als einfaches dreidimensionales Modell eine einzelne Inklusion in einer würfelförmigen Einheitszelle an. Mit den periodischen Randbedingungen wird eine periodische Anordnung der Inklusionen simuliert, wobei die Inklusionen jeweils in einer Richtung auf einer Achse liegen,

siehe Bild 3.6. Mit der Größe der Inklusion kann der Volumenanteil der eingeschlossenen Phase festgelegt werden.

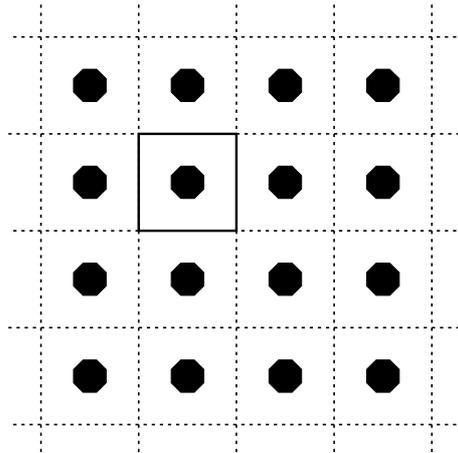


Bild 3.6: Für das einfache Matrix-Inklusions-Modell wird eine regelmäßige Anordnung der Inklusionen in jede Richtung zugrundegelegt.

Als Geometrie für den Einschluss kann bei einer Modellierung mit Finiten Elementen eine fast beliebige Form gewählt werden. Hier wird ein α -Tetrakaidekaeder [46] verwendet. Dieser Körper ist, falls man ihn periodisch anordnet, raumfüllend. Die Oberfläche besteht aus sechs Vierecken und acht Sechsecken. Die Eckenwinkel betragen $109^\circ 28'$ und entsprechen damit der Forderung nach Minimierung der Oberflächenenergie des Körpers. Die durchschnittliche Anzahl von Ecken pro Oberfläche ist mit einem Wert von $n = 5,143$ etwa so groß wie die experimentell an Seifenblasen ($n = 5,111$) [53] oder β -Messingkörnern ($n = 5,142$) [26] ermittelten Werte. Allerdings kommen in diesen und anderen natürlichen Strukturen hauptsächlich fünfeckige Oberflächen vor, der α -Tetrakaidekaeder hat keine solche. Eine von Williams vorgestellte Modifikation des α -Tetrakaidekaeder, der β - oder auch Williams-Tetrakaidekaeder, besitzt auch fünfeckige Oberflächen. Aufgrund seiner länglichen Form könnte er bei einem großen Inklusionsvolumen nicht in einen würfelförmigen Kubus eingebaut werden. In Bild 3.7 ist ein Teil des Finite-Elemente-Netzes eines Matrix-Inklusions-Modelles mit einem α -Tetrakaidekaeder dargestellt. Von der Matrix ist nur die untere Hälfte abgebildet, die Inklusion in der Mitte hat ein relatives Volumen von 10%. Das relative Volumen der Inklusionsphase wird über die Größe des α -Tetrakaidekaeders in der Mitte gesteuert. Dieser Modellierung ist eine Grenze gesetzt: Die Inklusion darf in Ihrem Durchmesser nicht so groß werden wie der umgebende Kubus, im betrachteten Bereich bis 17% ist das kein Problem.

Bei der Vernetzung ist zu beachten, dass gegenüberliegende Flächen gleiche Finite-Elemente-Netze haben, damit für die periodischen Randbedingungen immer Knotenpaare vorliegen. Den Vernetzungsroutinen können keine Netze auf den Oberflächen vorgegeben werden, des-

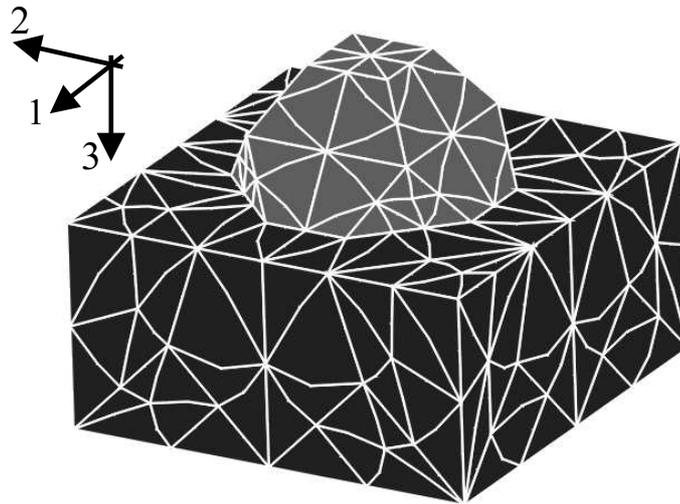


Bild 3.7: FE-Vernetzung eines Matrix-Inklusions-Modelles mit einem α -Tetrakaidekaeder in der Mitte, relatives Volumen: 10%. Von der Matrix ist nur die untere Hälfte dargestellt.

halb müssen die Knotenpaare auf eine andere Weise generiert werden. In dem einfachen Inklusionsmodell wird dies erreicht, indem zuerst nur ein Viertel des Modells vernetzt wird und dann das Netz dieses Viertels gespiegelt wird, um die anderen Viertel zu erzeugen.

Mehrkörnermodell

Die hochgradige Periodizität der Anordnung der Inklusionen aufgrund der Randbedingungen in dem einfachen Inklusionsmodell entspricht natürlich nicht der Realität. Der nächste Nachbar einer Inklusion in diesem Modell ist dieselbe Inklusion wieder, d. h. die Inklusion interagiert u. U. direkt mit sich selbst. Es wurde versucht, ein realitätsnäheres Modell zu erstellen, in dem mehrere Inklusionen in einer Einheitszelle vorkommen. Da auch diese Zelle periodische Randbedingungen besitzt, ist die Anordnung der Inklusionen über die Zellenränder hinaus letztendlich auch periodisch. Bei ausreichender Zellengröße kann aber mit Sicherheit ausgeschlossen werden, dass die einzelnen Inklusionen über die periodischen Randbedingungen direkte Wechselwirkungen mit sich selbst aufbauen. Wegen der großen Zellenabmessungen konnte hier auch der β -Tetrakaidekaeder [90] verwendet werden. Er wird in einer raumfüllenden Packung in verschiedenen Richtungen eingebaut. Er weist damit eine geringere Packungsregelmäßigkeit auf als der α -Tetrakaidekaeder.

Die fünfeckigen Oberflächen des β -Tetrakaidekaeder müssen gekrümmt sein, damit eine raumfüllende Packung entstehen kann. Für eine Implementierung in ein Netz aus Finiten Elementen werden die gekrümmten Flächen mit ebenen Elementoberflächen angenähert. Dazu wird bei den Fünfecken eine zusätzliche Kante eingeführt. In Bild 3.8 ist die Annäherung der Geometrie der gekrümmten Oberflächen durch die Finiten Elemente zu erkennen. Da die Vernetzung aus anderen Gründen (z. B. Geometrie der Finiten Elemente) nicht engma-

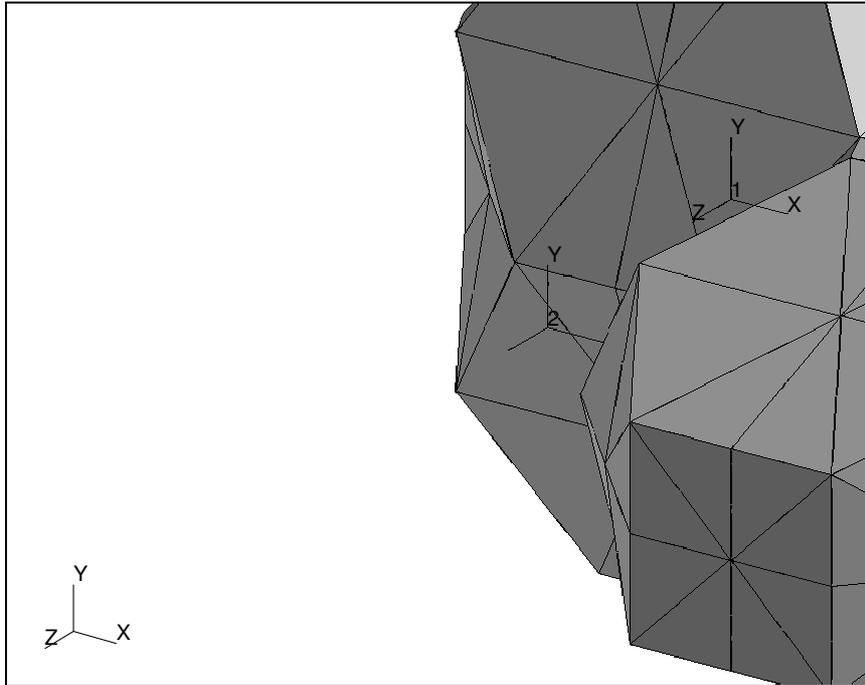


Bild 3.8: Ausschnitt von zwei β -Tetrakaidekaedern, auf den beiden linken Seitenflächen ist die Annäherung der gekrümmten Oberflächen mit Finiten Elementen zu erkennen.

schiger durchgeführt werden musste, wurde auf eine genauere Annäherung der schwachen Oberflächenkrümmung der Fünfecke verzichtet.

Um die spätere periodische Vernetzung über die Modellgrenzen zu vereinfachen, wird jeder Körper aus 8 Teilkörpern zusammengesetzt. Der β -Tetrakaidekaeder hat drei aufeinander senkrecht stehende Symmetrieebenen, weswegen er sich in 8 gleiche Teilkörper zerlegen lässt. Wird ein Gesamtkörper aus gespiegelten Teilkörpern zusammengesetzt, ist gewährleistet, dass an den Schnittflächen auch jeweils Knotenpaare aufeinander treffen. In Bild 3.9 ist eine raumfüllende Packung mit mehreren β -Tetrakaidekaedern dargestellt.

Bei dem Einfärben dieser Packungen für die Darstellung eines Zweiphasengefüges müssen zusammenhängende Bereiche der Inklusionsphase, die von einer Oberfläche der Einheitszelle zur anderen reichen, vermieden werden. Mit den periodischen Randbedingungen kommt es sonst zu einer Brücke, die einer durchgehenden Faser im simulierten Werkstoff entspräche und das globale mechanische Verhalten unrealistisch versteifen würde. Das Einfärben der Zellen erfolgt per Hand.

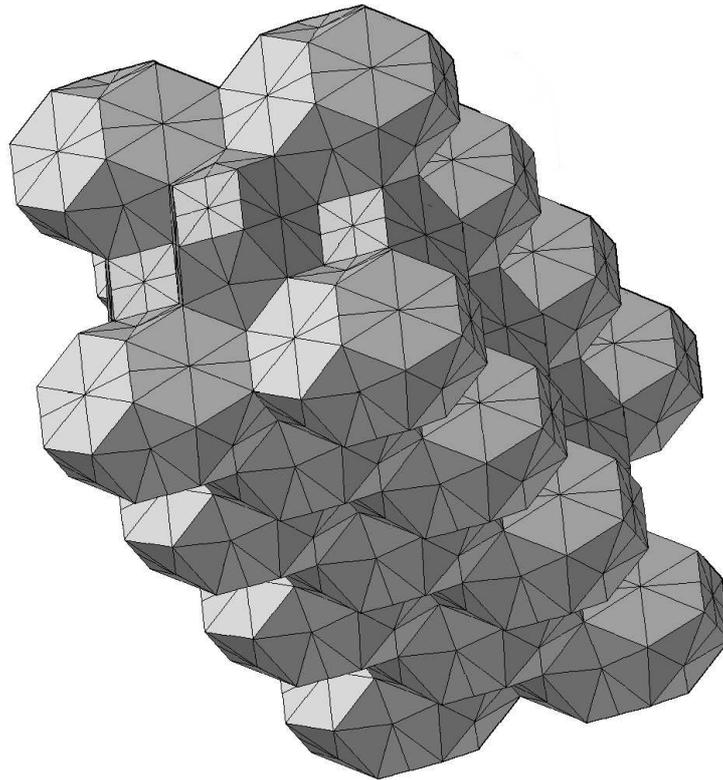


Bild 3.9: Finite-Element-Vernetzung von 64 zusammengeführten β -Tetrakaidekaedern.

3.2 Materialmodellierung

Materialgesetz

Beide Phasen werden als homogen angenommen und mit einem isotropen Materialgesetz modelliert, das Plastizitätsgesetz nach von Mises wird verwendet. Auf die Programmierung von Kristallplastizität wird verzichtet, da dadurch unnötige Unsicherheiten bei der Festlegung der Eingangsparameter entstanden wären. Um die Auswirkungen der Phasenumwandlung auf eine eventuelle Verformungsverfestigung des Ferrits zu untersuchen, ist es außerdem nicht notwendig, die Modellierung auf Kristall-Längenmaßstab durchzuführen. Die Materialgesetze müssen temperaturabhängig implementiert werden, da die Umwandlung ($\gamma \rightarrow \alpha'$) und damit eine eventuelle Plastifizierung deutlich über Raumtemperatur einsetzt. Der Martensit wird mit einer Streckgrenze von 800 MPa und einer linearen Verfestigung von 40 MPa pro 1% plastischer Dehnung bei Raumtemperatur und einer Streckgrenze von 450 MPa und einer Verfestigung von 35 MPa pro 1% plastischer Dehnung bei 400 °C angenommen. Die angenommene Streckgrenze entspricht etwa den Werten von rein martensitischen Stählen. Die genaue Höhe der Streckgrenze und auch das Verfestigungsverhalten spielen für die hier durchgeführten Berechnungen keine Rolle, da die Untersuchung auf das Anfangsfließverhalten des Dual-Phasen-Stahles abzielt; aufgrund der stark unterschiedlichen Streckgrenzen der Materialien sollte der Martensit zu Beginn der plastischen Verformung nicht an die-

ser teilnehmen. Dies wird in der Berechnung überprüft. Um die Werte der Ferrit-Phase zu ermitteln, hätten Zugversuche an rein ferritischen Stählen durchgeführt werden können. Dieses Vorgehen ist allerdings mit Unwägbarkeiten verbunden: Im Dual-Phasen-Stahl befindet sich der überwiegende Teil des Kohlenstoffes im Austenit bzw. Martensit, die genaue Aufteilung des Kohlenstoffes auf die Phasen ist allerdings nicht bekannt. Auch von einer gleichmäßigen Verteilung der anderen Legierungselemente über beide Phasen kann nicht ohne weiteres ausgegangen werden. Für einen rein ferritischen Stahl wäre u. U. auch eine völlig andere Wärmebehandlung nötig gewesen, wodurch auch die mechanischen Eigenschaften des Ferrits beeinflusst worden wären. Aus diesen Gründen wird das Materialverhalten des Ferrits für die Berechnungen aus den Spannungs-Dehnungs-Diagrammen der Zugversuche an Dual-Phasen-Stählen mit unterschiedlichen Martensitgehalten extrapoliert. Die Implementierung geschah durch eine Approximation der Spannungs-Dehnungs-Kurve mittels polygonaler Stützstellen. Das Fließverhalten des Ferrits bei 400 °C wurde berechnet, indem aus Warmzugversuchen an ferritischen Stählen Faktoren für die Abnahme der Spannung bei jeder Dehnung ermittelt wurden. Der E-Modul beider Phasen wurde bei RT mit 200000 MPa und bei 400 °C mit 170000 MPa angesetzt, die Querkontraktionszahl ist konstant $\nu = 0,3$. Das Materialverhalten bei Temperaturen zwischen Raumtemperatur und 400 °C wird linear interpoliert.

Phasenumwandlung Austenit - Martensit

Dual-Phasen-Stahl liegt während des Glühens oberhalb von 723 °C als Gemisch aus Ferrit und Austenit vor, wobei über die Glühtemperatur und den Kohlenstoffgehalt das Verhältnis Austenit zu Ferrit gesteuert werden kann. Bei schnellen Abkühlvorgängen bildet sich aus dem Austenit α' -Martensit und Ferrit, wobei das Verhältnis Martensit zu Ferrit von der Geschwindigkeit des Abkühlvorgangs abhängt. Ferrit kann wesentlich weniger Kohlenstoffatome lösen als Austenit, wodurch es bei ausreichend langsamen Abkühlraten zur Konzentration von Kohlenstoffatomen in den kleiner werdenden Austenit-Inseln kommt. Die entstehenden Martensit-Inseln sind deswegen bei langsameren Abkühlraten kleiner. Die Phasenumwandlung setzt etwa bei 400 °C (Martensit-Start-Temperatur M_S) ein, wobei in der Simulation angenommen wird, dass die Umwandlungskinetik linear bis 20 °C verläuft, siehe Bild 3.10.

Die $\gamma \rightarrow \alpha'$ Umwandlung ist eine Transformation, bei der es nicht zum Abscheren von Atomschichten kommt sondern nur zu Verzerrungen im Gitter, den Bain-Verzerrungen. Dadurch entsteht aus dem kubisch-flächenzentrierten Gitter des Austenits das tetragonal verzerrte raumzentrierte Gitter des α' -Martensits. Die Transformationsdehnung $\underline{\underline{\epsilon}}^{\text{tr}}$ lässt sich auf eine einfache Scherung γ_0 und eine Volumenzunahme δ reduzieren [85].

$$\underline{\underline{\epsilon}}^{\text{tr}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2}\gamma_0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\gamma_0 & 0 & \delta \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

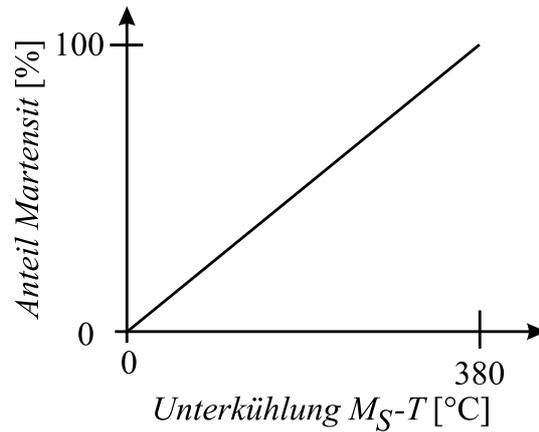


Bild 3.10: Angenommene Kinetik der Austenit-Martensit-Phasentransformation.

Der Deviator-Anteil kann bei der Simulation vernachlässigt werden, da sich in einer Martensit-Inklusion viele verschiedene Martensit-Varianten bilden und es außerdem zu Zwillingsbildung kommt, wodurch sich die Scherungen über den gesamten Einschluss aufheben und die Ausdehnung in alle Raumrichtungen gleichmäßig erfolgt [10]. Bei einer einheitlichen Abscherung würde es zu größeren Verformungsinkompatibilitäten mit dem umgebenden Material kommen, dazu wäre mehr Energie nötig. Für die Berechnungen wird die modifizierte Transformationsmatrix $\underline{\underline{\epsilon}}^{\text{tr}*}$ verwendet.

$$\underline{\underline{\epsilon}}^{\text{tr}*} = \begin{pmatrix} \delta/3 & 0 & 0 \\ 0 & \delta/3 & 0 \\ 0 & 0 & \delta/3 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Durch den Vergleich der relativen Dichten von Austenit und Martensit ($0,1265 \text{ cm}^3/\text{g}$ zu $0,1298 \text{ cm}^3/\text{g}$) in Dual-Phasen-Stahl ergibt sich eine Volumenzunahme $\delta = 2,6 \%$ [18] während der Phasentransformation.

Umgesetzt wird die Phasenumwandlung in der FE-Berechnung durch unterschiedliche Temperatureausdehnungskoeffizienten der beiden Bereiche. Die Ferrit-Matrix hat den Temperatureausdehnungskoeffizienten $\alpha_{T, \text{Matrix}} = 1,2 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, die Inklusion den um die Volumenzunahme korrigierten $\alpha_{T \text{ korr, Inklusion}} = 1,2 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1} - (\delta/3)/\Delta T = -1,08 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$.

3.3 Ergebnisse der zweidimensionalen Berechnung

An ebenen Voronoi-Netzen mit 500 Zellen kann der Einfluss der Volumenausdehnung der Inklusionen während der Abkühlung auf das umliegende Material studiert werden, ein anschließender Zugversuch wird aus den oben genannten Gründen nicht durchgeführt. In Bild 3.11 ist die plastische Vergleichsdehnung $\varepsilon_{\text{peeq}}$ („plastic equivalent strain“) in einem Netz mit 10% Flächenanteil Martensit nach dem Abkühlprozess dargestellt. Helle Bereiche haben während der Abkühlung eine starke Verformung erfahren, dunkle Bereiche nicht. Es ist deutlich zu erkennen, wie die plastisch verformten und damit verfestigten Bereiche des Ferrits zwischen den harten Inklusionen zu einem Skelett zusammenwachsen. Die Martensit-Inklusionen, dies sind die dunklen Inseln in helleren Bereichen, wurden nicht signifikant plastisch verformt, wodurch die Annahme eines nicht näher ermittelten Verfestigungsverhaltens des Martensits gerechtfertigt ist. In den Bildern 3.12 (a)-(d) sind die Ergebnisse von berechneten Abkühlprozessen an verschiedenen Einfärbungen dargestellt, die Skala entspricht der aus Bild 3.11. Die Netze in den Bildern 3.12 (a) und (b) wurden zufällig eingefärbt, Bild 3.12 (c) ist mit dem Halton-Algorithmus und Bild 3.12 (d) von Hand eingefärbt worden. Obwohl in den zufällig eingefärbten Netzen größere Bereiche ohne Inklusion sind, bilden sich dennoch durchgehende Brücken zwischen den gegenüberliegenden Rändern. Die unverformten und nicht verfestigten Bereiche haben nun Inklusionscharakter. Die Bilder zeigen, dass sich die Brücken zwischen den Martensit-Inklusionen unabhängig von der Kornform des Martensits bilden, vorausgesetzt, die Inklusionen haben einen Abstand der kleiner ist als ihr Durchmesser, wobei hier keine allgemein gültige Regel abgelesen werden kann. Es ist auch in Frage zu stellen, ob ein solcher kritischer Abstand in einem zweidimensionalen Netz Schlüsse auf die Verhältnisse in drei Dimensionen zulässt. Die Spannungen nach dem Abkühlen erreichen dort, wo plastische Verformung stattgefunden hat, die Fließgrenze.

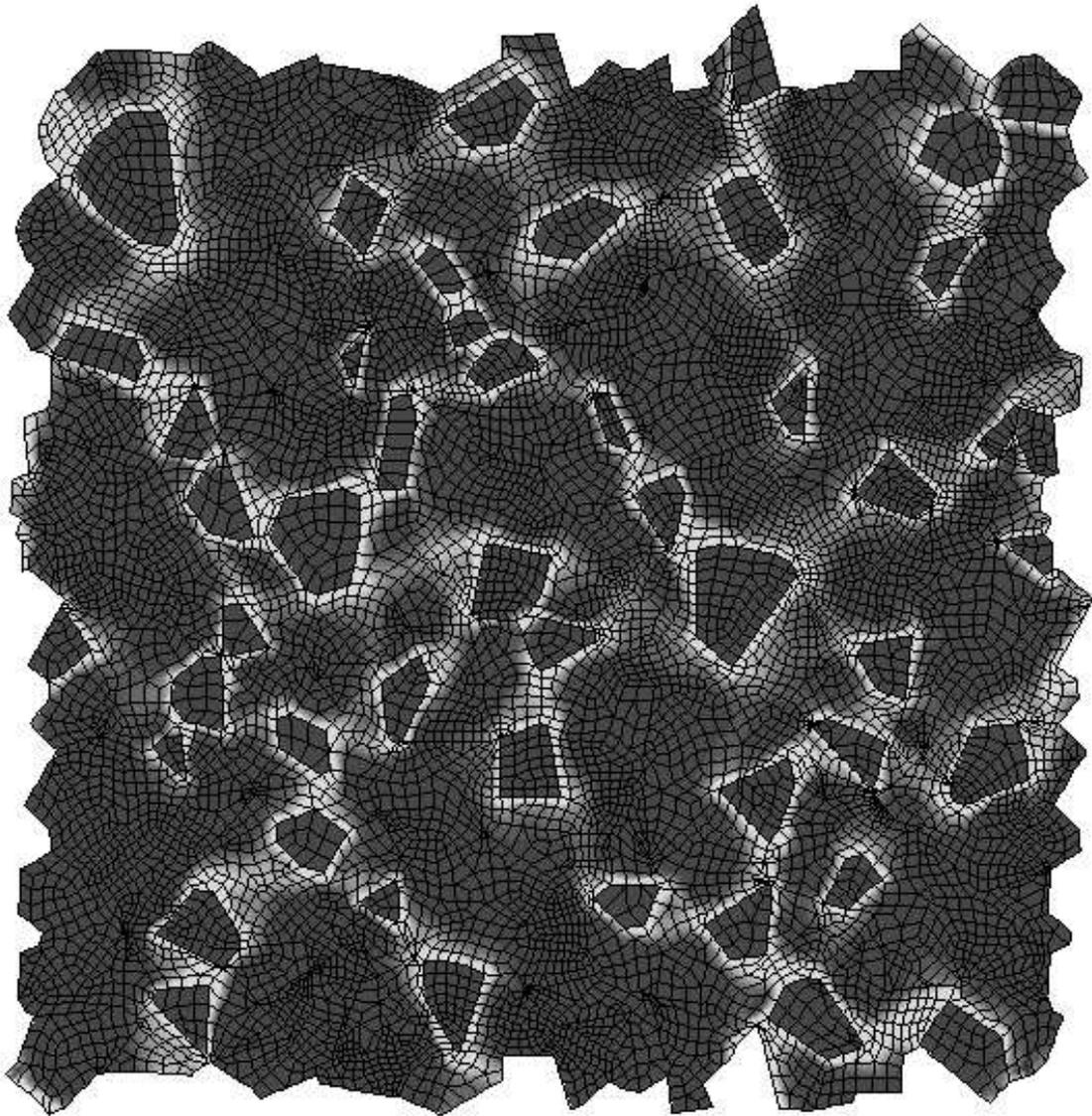
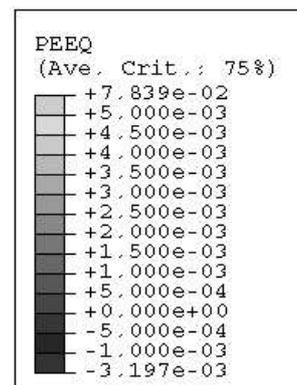
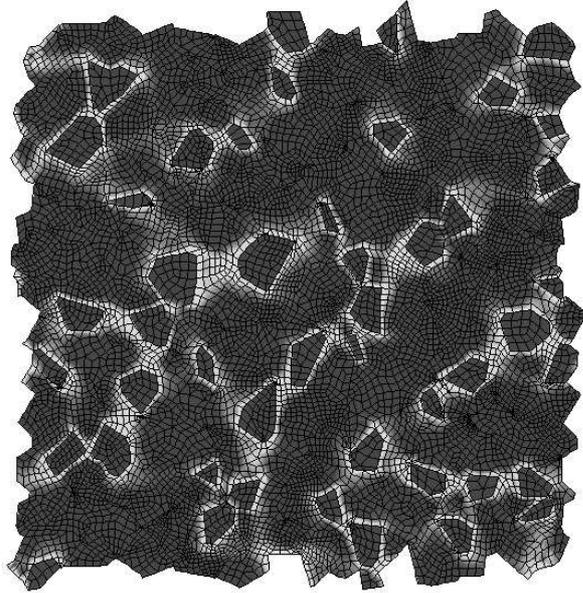
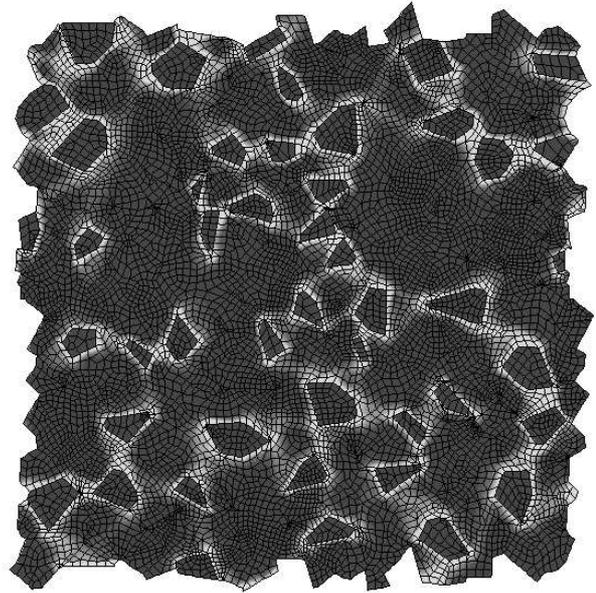


Bild 3.11: Plastische Vergleichsdehnung nach der simulierten Abkühlung in einem zweidimensionalen Voronoi-Netz mit 500 Zellen (siehe Bild 3.5(b)), der Volumenanteil der Inklusionsphase Martensit beträgt 10 %.

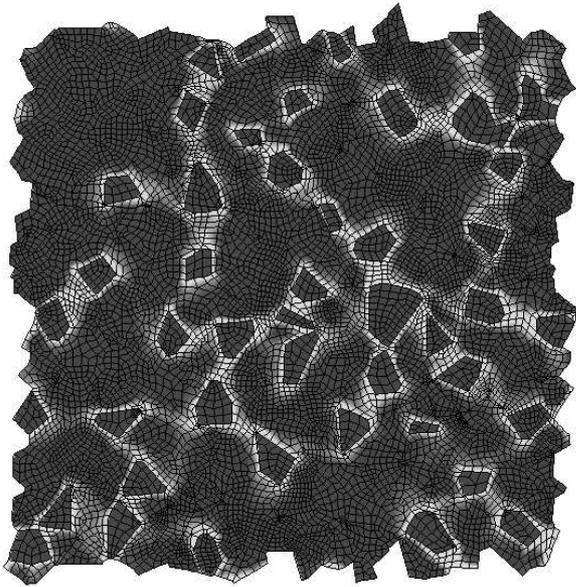




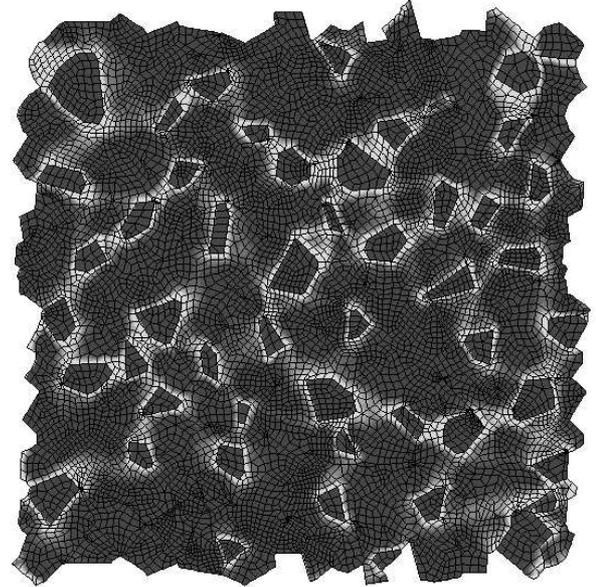
(a)



(b)



(c)



(d)

Bild 3.12: Ergebnisse von berechneten Abkühlprozessen an verschiedenen Einfärbungen, dargestellt ist die plastische Vergleichsdehnung.

3.4 Ergebnisse des einfachen 3D-Inklusionsmodells

An der Einheitszelle können sowohl globale Zug- als auch Schubbelastungen simuliert werden. Diese können unterschiedlich als lokale Belastung auf die Zelle aufgebracht werden, dadurch kann eine unterschiedliche Lage der Zelle relativ zur globalen Belastung simuliert werden. Hier werden die zwei Sonderfälle globaler Belastung uniaxialer Zug und reiner Schub betrachtet. Uniaxialer Zug entspricht der Belastung im Zugversuch und ist deswegen mit Experimenten gut vergleichbar, die Belastung reiner Schub ist ähnlich der Belastung wie sie beim Walzen von Flachband auftritt und soll hier stellvertretend für Formgebungsprozesse stehen, um zu überprüfen, ob die festgestellten Effekte in analoger Form auch bei anderen Belastungen auftreten. Um Theorien zu überprüfen, die davon ausgehen, dass der Eigenspannungszustand im Material mit einer unterschiedlichen Fließkurve bei Zug- oder Druckbelastung nachgewiesen werden kann [30], werden auch Druckbelastungen an der Einheitszelle berechnet.

In Bild 3.13 sind für globalen uniaxialen Zug exemplarisch zwei der Lage- und Belastungsmöglichkeiten der Zelle dargestellt, dazwischen ist jede Winkellage mit den nach Mohr aufgeteilten Spannungen denkbar. Entweder der Würfel liegt mit einer Achse in Belastungs-

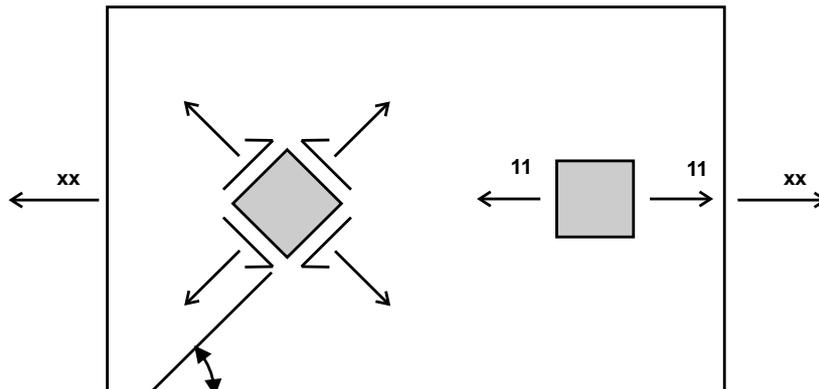


Bild 3.13: Zwei mögliche Belastungen und Lagen der Einheitszelle für globalen uniaxialen Zug (σ_{xx}).

richtung, dann ist die Belastung an den Koppelknoten einfacher Zug in eine Richtung, oder die Zelle ist aus dieser Lage verdreht, dann muss die globale Belastung in Zug- und Schubbelastungen auf die Knoten entsprechend der angenommenen Lage verteilt werden. Genauso kann auch eine globale Schubbelastung auf unterschiedliche Arten dargestellt werden, siehe Bild 3.14.

3.4.1 Berechnungen ohne Phasenumwandlung

Um beurteilen zu können, ob und wie sich die Phasenumwandlung und der damit einhergehende Volumenzuwachs der Austenit-Martensit-Inklusionen auf das mechanische Verhalten

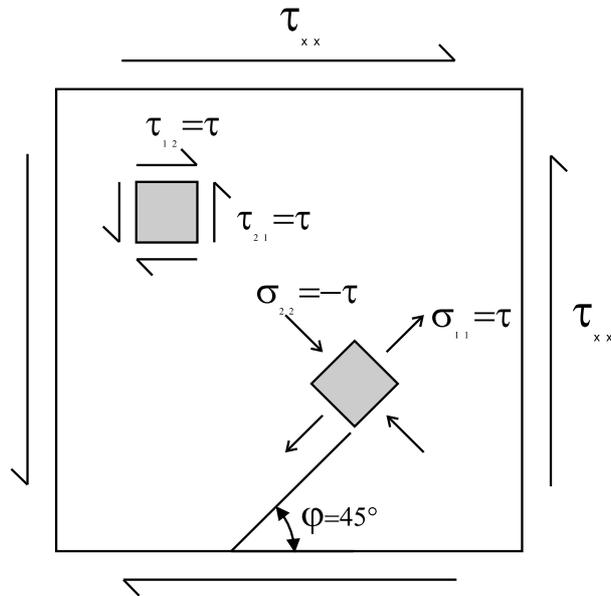


Bild 3.14: Zwei mögliche Belastungen und Lagen der Einheitszelle für globalen Schub.

des Materials auswirkt, werden zum Vergleich mechanische Berechnungen an der Einheitszelle ohne Simulation der vorangehenden Phasenumwandlung durchgeführt. Diese Berechnungen zeigen für globalen Schub und globalen Zug jeweils die gleichen Ergebnisse unabhängig von der lokalen Orientierung der Zelle. Außerdem wurde zum Vergleich auch ein Zugversuch an einer homogenen Zelle berechnet, dabei wurde auch die Inklusion mit dem Materialgesetz des Ferrits modelliert. Die Ergebnisse sind in den Bildern 3.15 (a) und (b) dargestellt. Fließen beginnt unabhängig vom Martensitgehalt immer bei der Dehngrenze des reinen Ferrits, etwa 180 N/mm^2 . Die Kurve für eine homogene Ferrit-Zelle entspricht genau dem für Ferrit implementierten Materialgesetz. Auch bei Schubbelastung wird der Fließbeginn von der Matrix bestimmt, Fließen beginnt genau bei dem $1/\sqrt{3}$ -fachen der Dehngrenze bei Zugbelastung. Das Rechenmodell bestätigt die Aussagen von Fischmeister *et al.* [33], die harten Inklusionen nehmen zu Beginn der plastischen Verformung nicht an dieser Teil, die Dehngrenze wird von der Dehngrenze der Matrix bestimmt. Erst bei fortschreitender Plastifizierung und Verfestigung der Matrix macht sich der Einfluss der Inklusionen auf das Verfestigungsverhalten des Verbundes bemerkbar. In diesem Modell sind keine Effekte aus Versetzungsbildung an Phasengrenzen (geometrisch notwendige Versetzungen) berücksichtigt. Im realen Material entstehen diese Versetzungen allerdings in großem Umfang erst bei unterschiedlicher Verformung der beiden Phasen, bis zur Fließgrenze ist dies für Ferrit und Martensit aufgrund des etwa gleichen E-Moduls nicht der Fall. Die Versetzungsbildung beeinflusst die Verfestigung während der plastischen Verformung aber nicht die Fließgrenze des Verbundes.

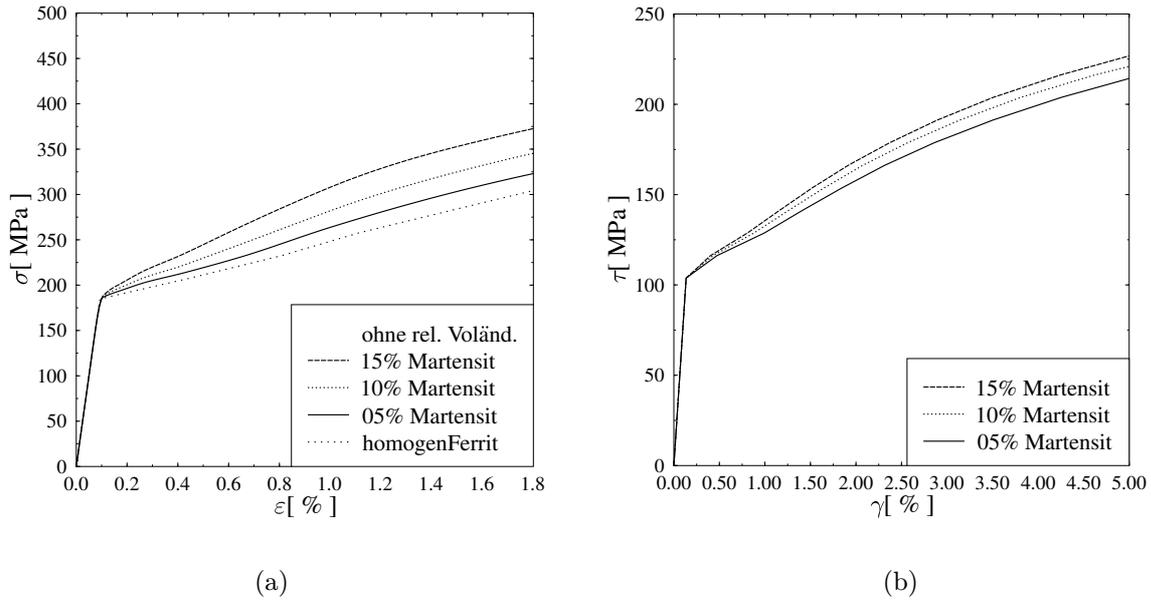


Bild 3.15: Ergebnisse der Berechnungen ohne Simulation der Phasenumwandlung an Zellen mit unterschiedlichem Martensit-Anteil: (a) Zugbelastung und (b) Schubbelastung.

3.4.2 Belastung unter Berücksichtigung der thermischen Vorgesichte

Durch den relativen Volumenzuwachs der Inklusion während der Phasenumwandlung kommt es auch im 3D-Modell zu plastischen Verformungen in der Matrix beim Abkühlvorgang. Bild 3.16 (a) zeigt die plastische Vergleichsdehnung ε_{peq} in einem mittigen Schnitt durch das Modell nach dem simulierten Abkühlprozess. Bereiche mit hoher plastischer Dehnung sind dunkel eingefärbt. Die Matrix lässt sich grob in zwei Gruppen einteilen: Bereiche, in denen der Ferrit stärker verformt und damit verfestigt wurde (F_h , „harter Ferrit“) und solche Bereiche, die kaum oder gar keine plastische Verformung erlitten haben und deswegen nicht nennenswert verfestigt wurden (F_w , „weicher Ferrit“). Dem verwendeten geometrischen Modell liegt eine Mikrostruktur zu Grunde, die sich durch einfaches Verschieben der Einheitszelle in einem kubischen Gitter ergibt, siehe Bild 3.6. Berücksichtigt man dies, erkennt man, dass die verfestigten Bereiche der Matrix die harten Inklusionen verbinden. Es bildet sich wie im zweidimensionalen Fall ein Skelett aus den verfestigten Bereichen der Matrix und harten Inklusionen. In dieses Skelett eingebettet sind relativ weiche Regionen des Ferrits. Bild 3.16 (b) zeigt die plastische Vergleichsdehnung entlang einer Kante des Modells von Bild 3.16 (a) für unterschiedliche Volumenanteile der Martensit-Phase. Die knapp 0,2% plastische Vordehnung am Rand der Zelle mit 5 vol.-% Martensit entsprechen einer Verfestigung um etwa 20 MPa im $\sigma - \varepsilon$ -Diagramm des Ferrits, wodurch ein Anstieg der Streckgrenze im Zugversuch erklärt werden kann. Das Ausmaß der plastischen Verformung der Ferrit-Matrix ist stark von dem Volumenanteil der Inklusion abhängig. Auf den Eigenspannungszustand in der Matrix wird im Rahmen des simulierten Zugversuchs eingegangen.

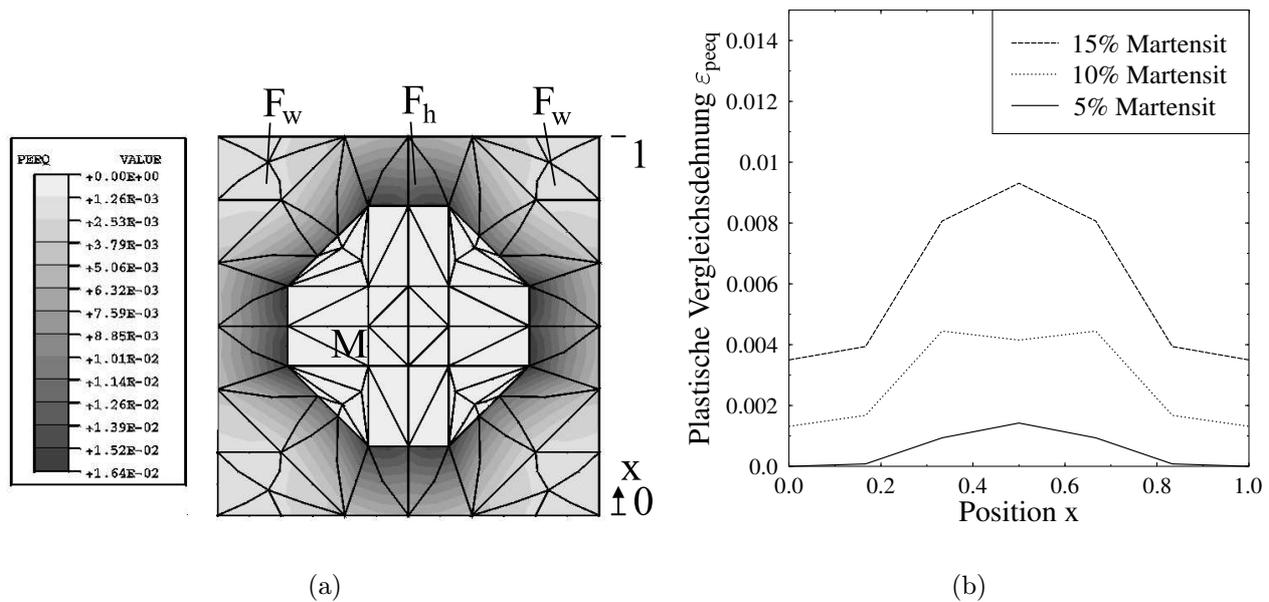


Bild 3.16: (a) Plastische Vergleichsdehnung nach dem Abkühlprozess in einem mittigen Schnitt durch die Einheitszelle, 11 % Volumenanteil Martensit (F_h : „harter Ferrit“, F_w : „weicher Ferrit“, M: Martensit). (b) Plastische Vergleichsdehnung an einem Rand des Modells aus Bild (a) für unterschiedliche Volumenanteile Martensit.

Zug in Achsenrichtung der Einheitszelle

Die Ergebnisse von numerischen Zugversuchen nach dem simulierten Abkühlprozess an Einheitszellen mit unterschiedlichem Volumenanteil Martensit sind in Bild 3.17 (a) dargestellt. Die Zugrichtung ist parallel zu einer der Achsenrichtungen. Die 0,2%-Dehngrenze steigt deutlich mit dem Volumenanteil des Martensits, siehe Bild 3.17 (b).

An den berechneten Spannungs-Dehnungs-Kurven fällt auf, dass die Anfangssteifigkeit niedriger ist als der E-Modul der beiden Materialien ($E=200000 \text{ N/mm}^2$), die für die Einheitszelle definiert wurden. Bild 3.18 zeigt den Vergleich zwischen einer Berechnung mit und ohne Berücksichtigung der thermischen Vorgeschichte an einer Einheitszelle mit 10 % Volumenanteil Martensit. Wird ohne Abkühlung und Volumenzuwachs gerechnet, ergibt sich eine Anfangssteifigkeit, die gleich dem E-Modul ist.

Lokal begrenzte Bereiche im Ferrit haben nach dem Abkühlen Eigenspannungszustände nahe der Dehngrenze, diese Bereiche werden je nach ihrer Lage relativ zur globalen Belastung unmittelbar bei Belastungsbeginn plastisch verformt. Da bereits bei der Zelle mit 5 % Martensit-Gehalt in großen Bereichen Eigenspannungen in Höhe der Streckgrenze vorliegen, ist der Effekt im betrachteten Bereich unabhängig vom Martensit-Gehalt. Die Unterschiede in den Berechnungen für unterschiedliche Volumenanteile Martensit sind nicht signifikant. An der Einheitszelle lassen sich die Gründe für die verminderte Anfangssteifigkeit aufgrund der einfachen Geometrie gut studieren. In Bild 3.19 ist die untere Hälfte einer Einheitszelle

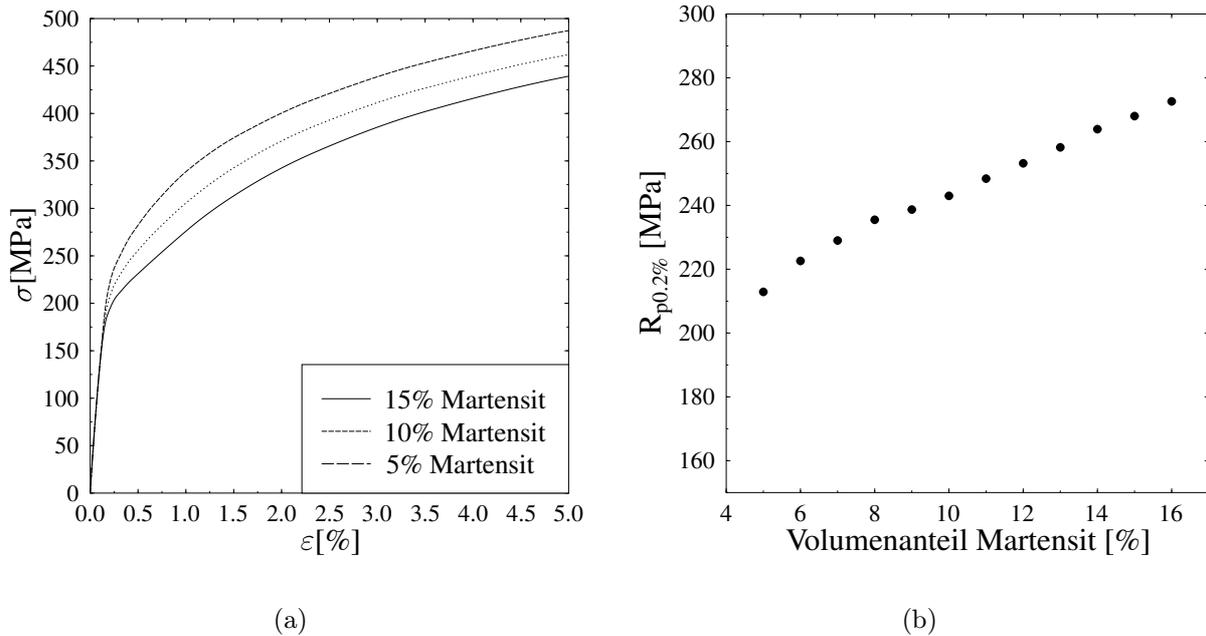


Bild 3.17: Ergebnisse von berechneten Zugversuchen an Einheitszellen mit unterschiedlichem Martensitgehalt nach dem Abkühlprozess: (a) Spannungs-Dehnungsdiagramme und (b) 0,2%-Dehngrenze in Abhängigkeit des Volumenanteils Martensit.

mit 10% Volumenanteil Martensit dargestellt. An dieser Einheitszelle wird die lokale Belastungsgeschichte an jeweils einem der vier Integrationspunkte von fünf Elementen a bis e während eines globalen Zugversuchs in 1-Richtung untersucht. Drei der Integrationspunkte liegen in Elementen der Matrix an der Phasengrenze (a bis c), die anderen zwei Integrationspunkte (in den Elementen d und e) liegen weiter entfernt von der Inklusion.

Das Element a liegt in Zugrichtung mit der Inklusion, bei Belastungsbeginn wird die anfängliche Druckspannung in 1-Richtung abgebaut, das Element nimmt sehr spät an der plastischen Verformung teil, siehe Bild 3.20. Ganz anders stellt sich die Situation bei Element c dar: Im simulierten Gitter liegt es in 3-Richtung zwischen zwei Inklusionen quer zur Zugrichtung. Nach dem Abkühlprozess herrscht Druck in 3-Richtung ($\sigma_{33} < 0$), in Richtung des nächsten Nachbarn. Bei Aufbringen der Zuglast in 1-Richtung steigt die Spannung σ_{11} , das Element wird sofort plastisch verformt, da die Druckspannung quer zur Zugrichtung (σ_{33}) so groß ist, dass die von Mises Plastizitätsgrenze unmittelbar erreicht wird. Wegen der Lage des Elements wird diese Druckspannung auch nicht im Laufe der Belastung völlig abgebaut.

Aufgrund der sehr unterschiedlichen Eigenspannungszustände und Verformungsgeschichten der Elemente einerseits und der verschiedenen Lagen relativ zur Inklusion und zur globalen Belastung andererseits beginnt die plastische Verformung in den Elementen bei unterschiedlichen globalen Dehnungen. Bei allen Elementen setzt jedoch unabhängig vom Vordehnungs- und Eigenspannungszustand spätestens bei etwa 0,3% Dehnung, was etwa 0,2% plastischer Dehnung am Gesamtmodell entspricht, die plastische Verformung ein, d. h. bereits an dieser

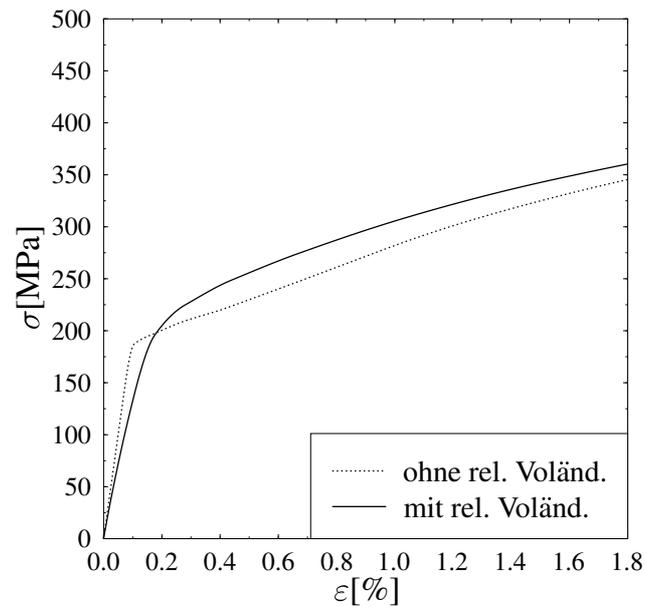


Bild 3.18: Auswirkung der thermischen Vorgeschichte auf das Spannungs-Dehnungs-Diagramm im numerischen Zugversuch: Berechnungen an einer Einheitszelle mit 10 % Volumenanteil Martensit.

Stelle haben die Eigenspannungszustände aus der Herstellung keinen Einfluss mehr auf das Verfestigungsverhalten. Die niedrigere Anfangssteifigkeit lässt sich im numerischen Zugversuch an der Einheitszelle eindeutig auf den Eigenspannungszustand in der Matrix nach dem Abkühlen vor der Belastung zurückführen.

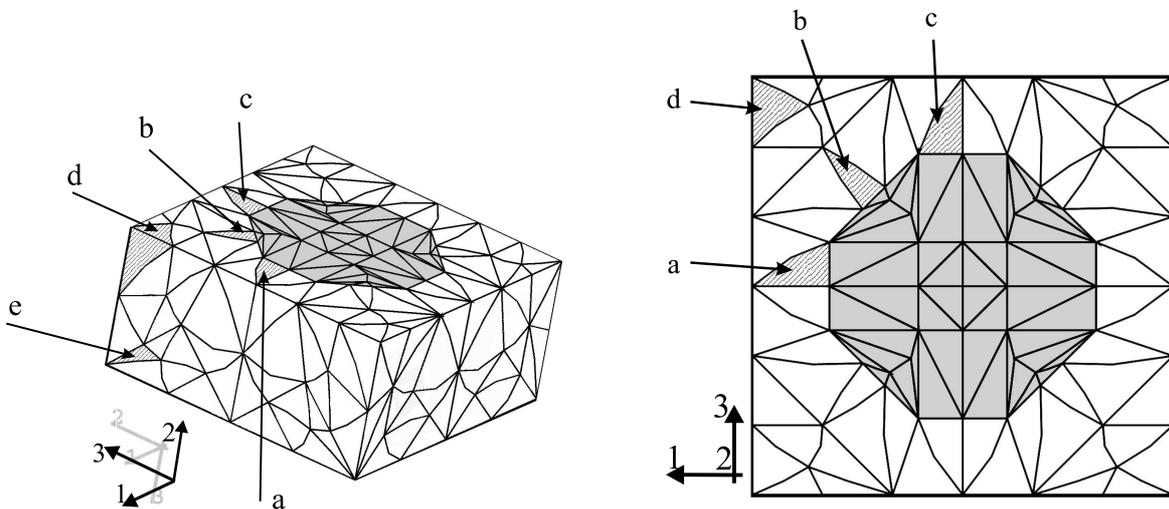


Bild 3.19: Lage der Elemente *a* bis *e* in der unteren Hälfte der Einheitszelle.

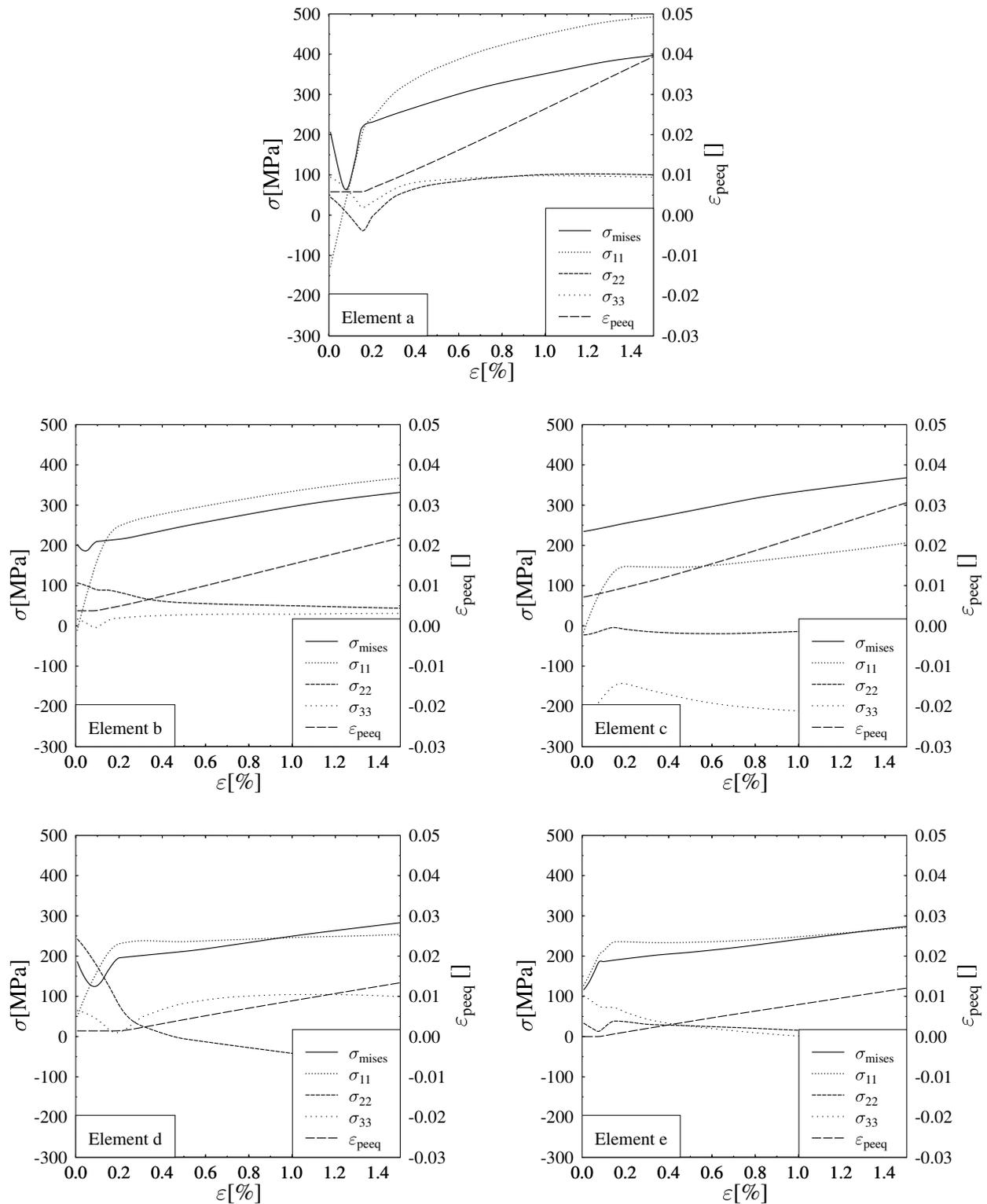


Bild 3.20: Hauptspannungen, Vergleichsspannung nach von Mises und plastische Vergleichsdehnung in jeweils einem der Integrationspunkte der Elemente *a* bis *e* aus Bild 3.19 während eines numerischen Zugversuchs in Achsenrichtung 1.

Zug in beliebiger Richtung

Mit numerischen Zugversuchen in verschiedenen Belastungsrichtungen kann festgestellt werden, ob die Einheitszelle sich isotrop verhält. Dazu wurde das Modell in der 1-2-Ebene unter Winkeln zwischen 0° und 45° bezogen auf die 1-Achse mit Zug belastet. Dies geschieht über eine Aufteilung der Last auf die Koppelknoten, für die Auswertung werden die Ergebnisse wieder ins globale Koordinatensystem transformiert.

Die Bilder 3.21 (a) und (b) zeigen die berechneten Spannungs-Dehnungs-Diagramme für 5 % und 15 % Volumenanteil Martensit für Zug unter verschiedenen Winkeln bis 45° . Für 5 %

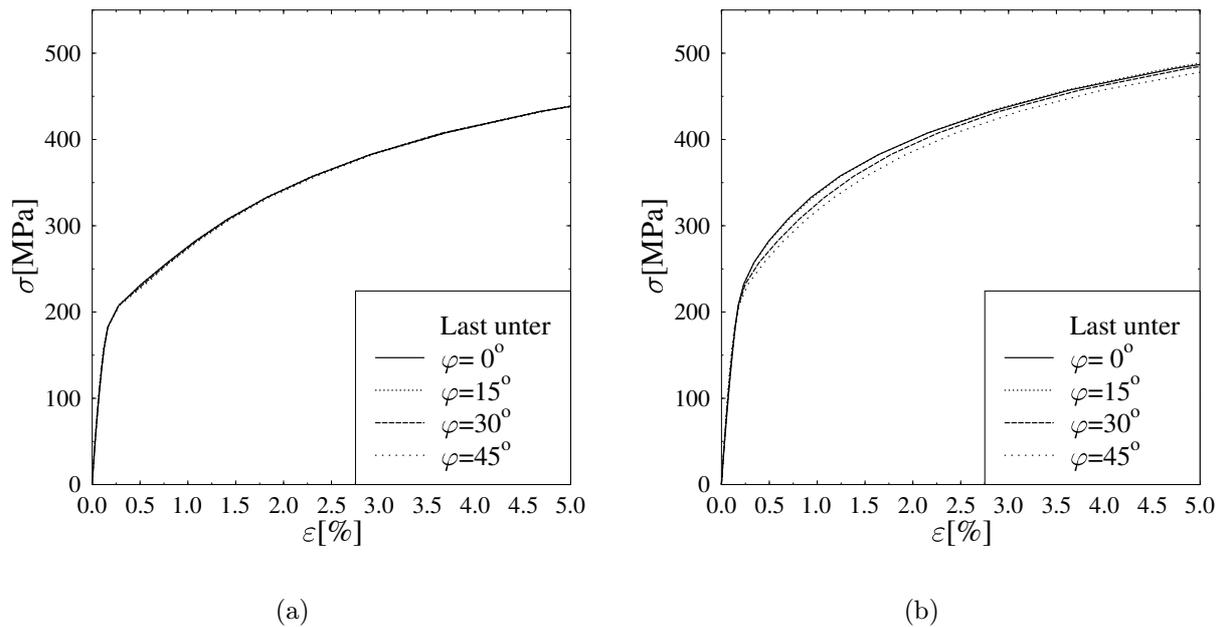


Bild 3.21: Spannungs-Dehnungs-Diagramme für Zug unter unterschiedlichen Winkeln an der Einheitszelle, 0° entspricht der 1-Achse. (a) 5 % Volumenanteil Martensit und (b) 15 % Volumenanteil Martensit.

Volumenanteil der Inklusion ist nur ein geringer Unterschied in den Spannungs-Dehnungs-Diagrammen für unterschiedliche Zugrichtungen zu erkennen. Dagegen verhält sich die Einheitszelle mit 15 % Volumenanteil Martensit eindeutig anisotrop. Dies ist auf die hohe Regelmäßigkeit der Anordnung der Inklusionen im periodisch fortgesetzten Gitter zurückzuführen, es kommt zur Ausbildung einer Vorzugsrichtung: In Richtung der kürzesten Abstände zur nächsten Inklusion ist das Material steifer als 45° dazu.

Reine Schubbelastung

Die Ergebnisse bei Berechnungen mit globaler Schubbelastung unterscheiden sich stark, je nachdem welche Lage die Einheitszelle relativ zur globalen Last hat, siehe Bild 3.14 für die zwei Extremfälle des Ergebnisses. Dies weist auf eine Anisotropie des Modells hin; da die

globale Belastung dieselbe ist, sollten auch die Ergebnisse übereinstimmen. In Bild 3.22 (a) sind die Ergebnisse für die Belastung $\tau_{12} = \tau_{21} = \tau$ an Einheitszellen mit unterschiedlichem Martensitgehalt dargestellt. Wird die Belastung als Zug-Druck-Kombination ($\sigma_{11} = -\sigma_{22} =$

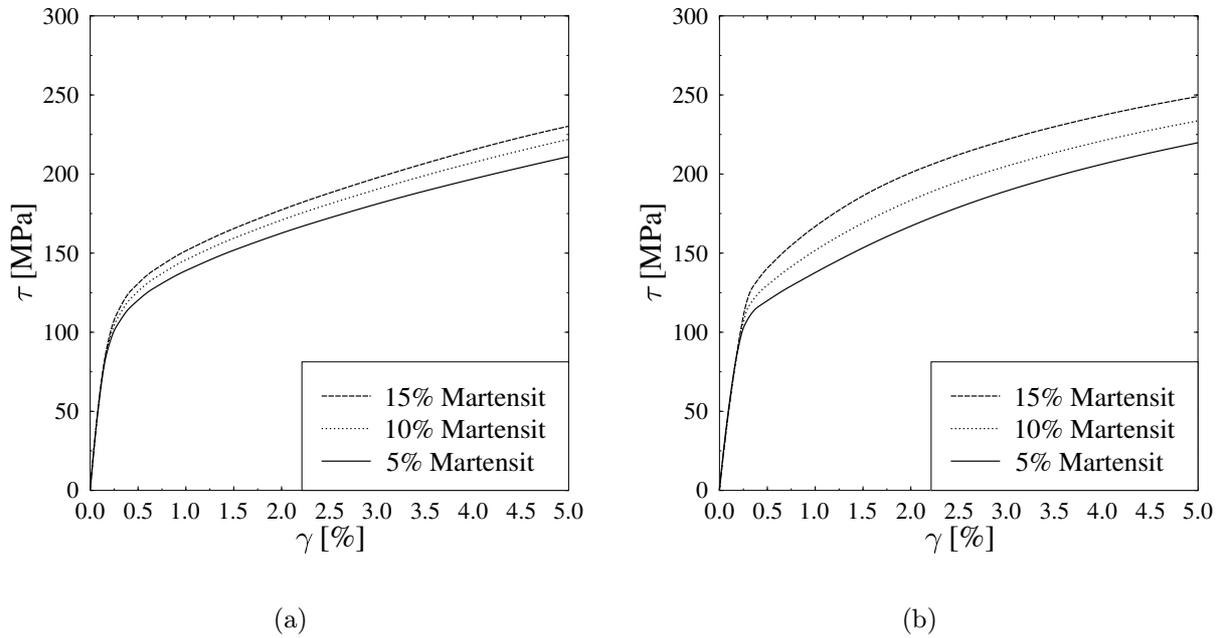


Bild 3.22: An Einheitszellen mit unterschiedlichem Volumenanteil Martensit berechnete Schubspannungs-Scherungs-Diagramme für unterschiedliche Lagen der Einheitszelle: (a) Schubspannung auf den Oberflächen der Einheitszelle ($\tau_{12} = \tau_{21} = \tau_{\text{global}}$) und (b) Zug-Druck-Spannungen auf den Oberflächen ($\sigma_{11} = -\sigma_{22} = \tau_{\text{global}}$).

τ_{global}) aufgebracht, ist der Einfluss des Martensit-Anteils deutlich höher, siehe Bild 3.22 (b). Die Einheitszelle mit einer Inklusion reagiert wie bei globaler Zugbelastung stark anisotrop. Gemeinsam ist den Ergebnissen aus den Berechnungen mit unterschiedlicher Belastungsart der kontinuierliche Fließbeginn bei Berücksichtigung der thermischen Vorgeschichte, zum Vergleich siehe Bild 3.15 (b).

Druckbelastung

Wird die Einheitszelle anstatt mit Zug durch Druck belastet, sind die Ergebnisse analog denen der Zugversuchsberechnungen. Sie sind nicht dargestellt.

3.5 Ergebnisse des 3D-Modells mit mehreren Inklusionen

Die oben beschriebene Anisotropie der Einheitszelle im numerischen Belastungsversuch ist auf die hohe Regelmäßigkeit der Anordnung der Inklusionen im angenommenen Gitter zurückzuführen. Um dies zu überprüfen, werden an einem 32-Körner- und einem 256-Körner-Modell die selben Belastungen (Zug, reiner Schub und Druck) berechnet wie an der Einheitszelle mit einer Inklusion.

Zug

Da die Mehrkörpermodelle keine Symmetrien aufweisen, kann nicht a priori davon ausgegangen werden, dass sie beispielsweise auf Zug in die 2-Richtung genauso reagieren wie auf Zug in die 1-Richtung. Deswegen werden in allen Richtungen (1,2 und 3) Zugversuche berechnet. Die Ergebnisse für Zugversuche an den Einheitszellen mit 256 Körnern zeigen keine unterschiedlichen Ergebnisse für Zug in unterschiedliche Richtungen. In Bild 3.23 (a) sind die Spannungs-Dehnungs-Diagramme für unterschiedliche Volumenanteile Martensit in der Zelle dargestellt. Es zeigt sich wie bei dem Modell mit einer Inklusion eine deutliche

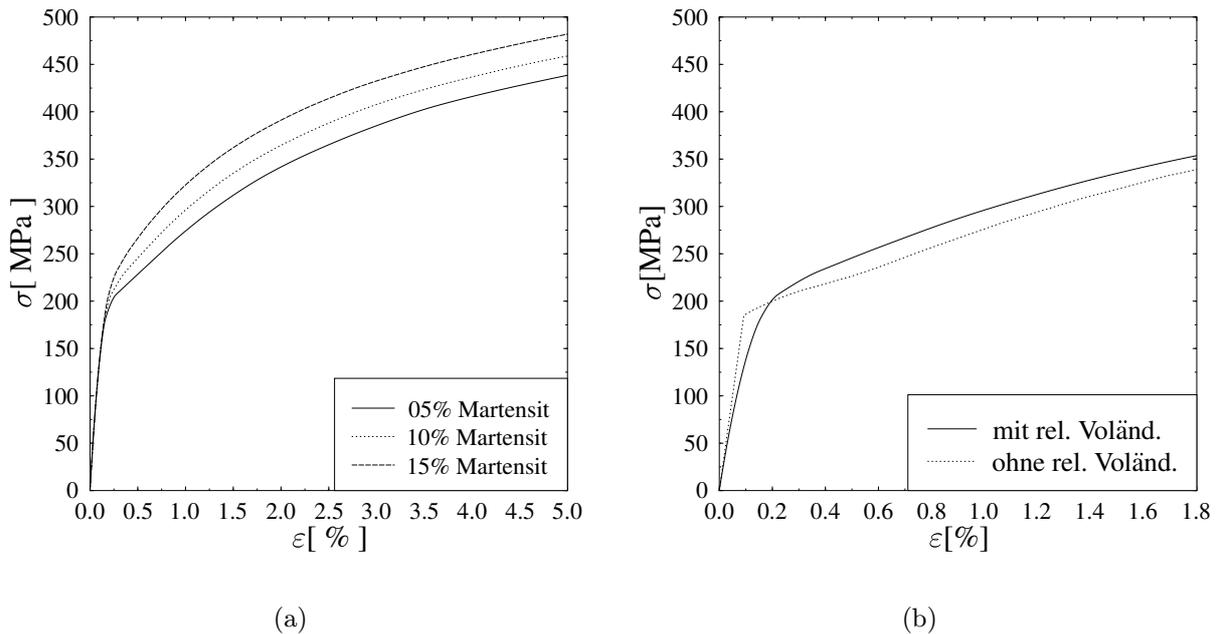


Bild 3.23: Spannungs-Dehnungs-Diagramme von numerischen Zugversuchen an einer Zelle mit 256 Körnern: (a) Berechnungen an Zellen mit unterschiedlichem Volumenanteil Martensit unter Berücksichtigung der thermischen Vorgeschichte und (b) Vergleich mit dem Ergebnis einer Rechnung ohne relative Volumenänderung der Inklusionen (Volumen der Inklusion: 10 %).

Abhängigkeit des Fließbeginns vom Martensit-Anteil. Eine Zelle, an der die Abkühlung

mit der Volumenzunahme der Inklusionen nicht berechnet wurde, zeigt die scharfe Fließgrenze des Matrixmaterials, siehe Bild 3.23 (b). Die Berechnungen für Zugbelastungen an Zellen mit 32 Körnern zeigen im Gegensatz zu denen an Zellen mit 256 Körnern leichte Richtungsabhängigkeiten. Die Abweichungen sind jedoch gering und auch kleiner als bei der Schubbelastung, dort sind Ergebnisse für Belastungen aus unterschiedlichen Richtungen dargestellt.

Die 0,2%-Dehngrenze steigt bei Berücksichtigung der thermischen Vorgeschichte auch bei den Modellen mit mehreren Inklusionen etwa linear mit dem Volumenanteil Martensit an, siehe Bild 3.24 (a). Der Anstieg ist geringer als bei dem einfachen Modell unter Zugbe-

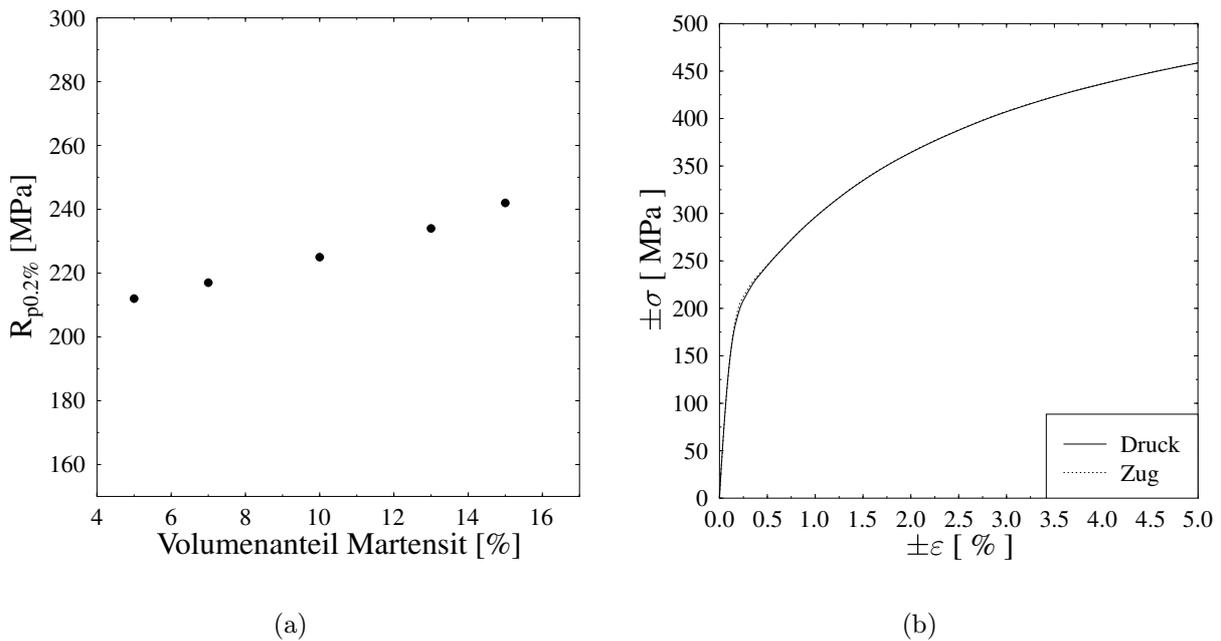


Bild 3.24: (a) Anstieg der Streckgrenze mit dem Martensitgehalt bei dem Modell mit 256 Körnern. (b) Vergleich der berechneten Fließkurven für Druck- und Zugbelastung an einer 256-Körner Einheitszelle mit 10 vol.-% Martensit.

lastung in Achsenrichtung der Einheitszelle. Wenn das Modell mit einer Inklusion unter 45° zu einer seiner Achsen belastet wird, ist die Streckgrenze bei 15% Martensit-Gehalt geringfügig höher als die des Modells mit mehreren Inklusionen bei demselben Martensit-Gehalt. Offensichtlich führt die regelmäßige Anordnung der Inklusionen nicht nur zu einer Vorzugsrichtung des sich bildenden Skeletts, sondern zu einem generell stärkeren Skelett. Dies ist durch die relativ geringen Abstände der Inklusionen untereinander im regelmäßigen Netz zu erklären. Bei 5% Volumenanteil Martensit sind die Streckgrenzen der Einheitszellen nach dem Abkühlen nahezu gleich, bei den kleineren Inklusionen spielt die regelmäßige Anordnung eine untergeordnete Rolle.

Schub

An beiden Modellen werden Schubbelastungen in unterschiedliche Richtungen (τ_{12} , τ_{13} und τ_{23}) simuliert, wobei wie bei dem einfachen Inklusionsmodell Schub sowohl als Schubbelastung auf den jeweiligen Koppelknoten als auch in Form einer Zug-Druck-Kombination dargestellt wird, siehe Bild 3.14. Die Einheitszelle mit 32 Körnern reagiert auf Schubbelastungen in unterschiedliche Richtungen leicht anisotrop, siehe Bild 3.25 (a) für Last-Verformungs-Diagramme einer Zelle mit etwa 10% Volumenanteil Martensit. Die größte Differenz ist

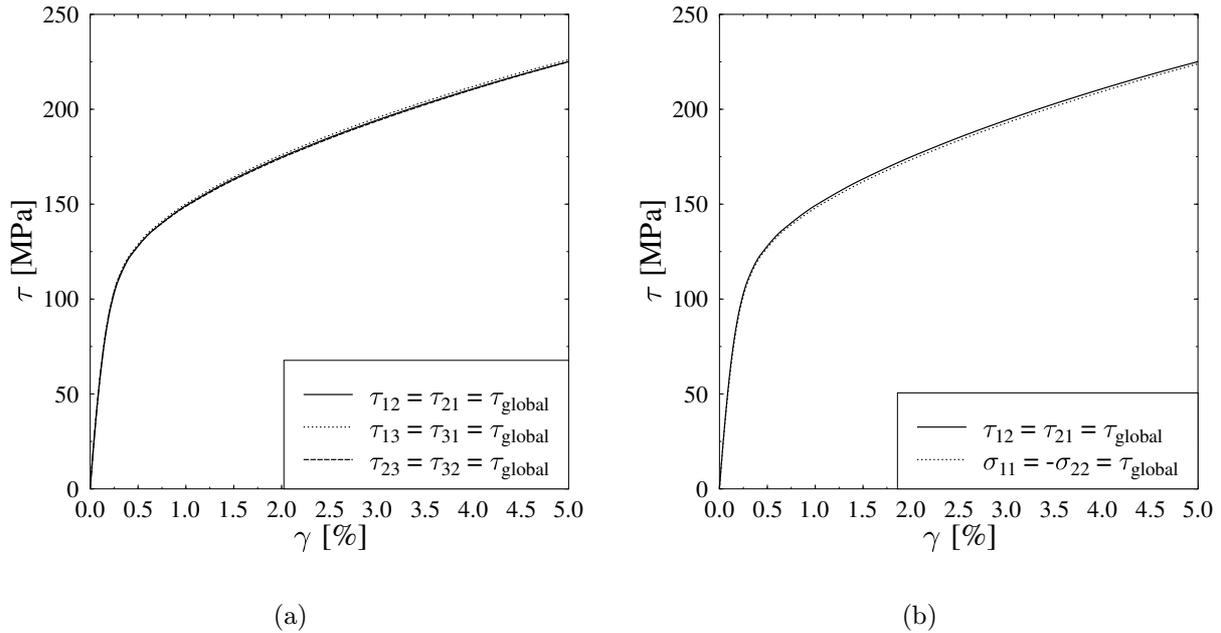


Bild 3.25: Eine Einheitszelle mit 32 Körnern und einem Volumenanteil Martensit von etwa 10% reagiert auf Schubbelastung leicht anisotrop: (a) Simulation der Schubbelastung über Schub auf unterschiedlichen Koppelknoten und (b) Vergleich mit dem Ergebnis einer Rechnung mit einer gleichwertigen Belastung in Form einer Zug-Druck-Kombination.

zwischen den Kurven, die mit verschiedenen Belastungsarten berechnet werden, festzustellen. Sie ist mit $\Delta\sigma \approx 1.5$ N sehr gering. In Bild 3.25 (b) sind die Rechenergebnisse für eine Schubbelastung in 12-Richtung mit den Ergebnissen einer Rechnung mit Zug in 1-Richtung und Druck in 2-Richtung gegenübergestellt. Für die anderen möglichen Richtungen ergeben sich ähnliche Abweichungen.

Die Einheitszelle mit 256 Körnern zeigt keine Abweichungen der Schub-Verzerrungs-Diagramme für Schubbelastungen in den drei Richtungen, vorausgesetzt die Belastung wird im numerischen Versuch als Schub auf die Koppelknoten aufgebracht. Für Schub unter 45° zu einer ihrer Achsen (Zug-Druck-Belastung) ist die Zelle geringfügig weicher, genau wie die Zelle mit 32 Körnern, Bild 3.25 (b). Eine Verfeinerung des Finite-Element-Netzes führt nicht zu einer Veränderung der Ergebnisse. Außerdem tritt der Effekt bei unterschiedlichen Einfärbungen und unterschiedlichen Martensitgehalten auf. Referenz-Berechnungen mit ei-

nem homogenen Materialgesetz für die gesamte Zelle zeigen weder bei 32 Körnern noch bei 256 Körnern einen Unterschied im Spannungs-Dehnungs-Diagramm für unterschiedlich aufgebrachte Schubbelastungen. Die Berechnungen zeigen, dass eine Vernetzung mit 32 Körnern bereits ein hinlänglich isotropes Materialverhalten der Einheitszelle gewährleistet, die Zelle mit 256 Körnern ist geringfügig besser.

Druck

An der selben Einheitszelle mit 256 Körnern und 10 % Volumenanteil Martensit wurde nach der Abkühlung jeweils ein Zugversuch und ein Druckversuch durchgeführt. Die Ergebnisse sind annähernd gleich, die Unterschiede in Bild 3.24 (b) sind so gering, dass sie im Bereich numerischer Unsicherheiten der Rechnung liegen.

Kapitel 4

Reduktion der elastischen Energie durch Diffusion von Kohlenstoffatomen zu Versetzungen

Durch Umlagern von Kohlenstoffatomen aus ansonsten nicht verzerrten Bereichen des Eisenatomgitters in bereits verzerrte Regionen kann die elastische Gesamtenergie des Gitters reduziert werden. Um ein Kohlenstoffatom auf einem Zwischengitterplatz des kubisch-raumzentrierten Eisengitters aufzunehmen, muss das Wirtsgitter verzerrt werden damit genügend Platz für das Kohlenstoffatom bereitgestellt wird. In der Umgebung von Versetzungen ist das Eisengitter bereits verzerrt, daher können dort Kohlenstoffatome auf bestimmten Zwischengitterplätzen mit geringerer Wirtsgitterverzerrung eingelagert werden. Gelangen Kohlenstoffatome vom ansonsten ungestörten Gitter in das Verzerrungsfeld von Versetzungen, kommt es zu einer Reduktion der elastischen Energie des Gesamtsystems. Versetzungen werden bei diesem Prozess durch Cottrell-Wolken „gefangen“, d. h. bei Vorhandensein einer Wolke von Kohlenstoffatomen um die Versetzung wird eine höhere Schubspannung zum Bewegen der Versetzung benötigt, wodurch es zu einem Anstieg und zu einer Ausprägung der Streckgrenze kommen kann [20]. Um zu untersuchen, ob Kohlenstoffdiffusion zum Alterungsprozess eines ferritisch-martensitischen Dual-Phasen Stahles beiträgt, wird eine Simulationsrechnung der Diffusion von Kohlenstoffatomen zu einer Versetzung durchgeführt. Mit den zeitabhängigen Kohlenstoffkonzentrationen im Spannungsfeld der Versetzung wird dann für verschiedene Zeitpunkte die nötige Schubspannung zum Losreißen der Versetzung von der Cottrell-Wolke berechnet.

Die treibende Kraft bei der Diffusion von Kohlenstoffatomen zu Versetzungen ist das Spannungsfeld der Versetzungen [6, 21]. Das Eisengitter ist in der Umgebung der Versetzungen verzerrt, Kohlenstoffatome werden dort leichter ins Gitter eingelagert, dabei kommt es zu einer Reduktion der Interaktionsenergie zwischen Atom und Versetzung. Diese Interaktionsenergie wurde erstmals von Cottrell und Bilby [20] berechnet, wobei sie von einem

hydrostatischen Verzerrungszustand des Eisengitters durch das Kohlenstoffatom ausgingen. Damit konnte zwar die Segregation von Kohlenstoffatomen in der Umgebung von Stufenversetzungen erklärt werden, bei Schraubenversetzungen versagt dieser Ansatz allerdings als Erklärung für das Zustandekommen von Kohlenstoffansammlungen in Versetzungsnähe. Hier wird auf den erweiterten Ansatz von Cochardt *et al.* [19] zurückgegriffen. Diese Autoren beachten den tatsächlichen tetragonalen Verzerrungszustand des Eisengitters bei Einbau eines Kohlenstoffatoms in das Gitter, womit sich auch die Bildung von Cottrell-Wolken an Schraubenversetzungen erklären lässt.

Kohlenstoffatom im Eisengitter

Die Ferrit-Phase im Dual-Phasen Stahl besteht aus kubisch-raumzentriertem (krz) α -Eisen. Kohlenstoffatome werden auf den Oktaeder-Zwischengitterplätzen eingelagert, siehe Bild 4.1. Eine Einheitszelle des krz-Gitters mit eingelagertem Kohlenstoffatom hat den tetragonalen

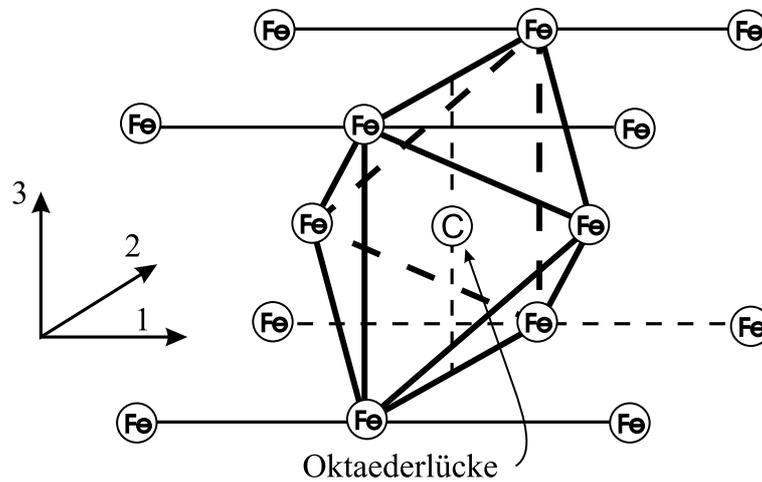


Bild 4.1: Oktaederlücke im kubisch-raumzentrierten Gitter. Im dargestellten Fall ist das Gitter in Richtung der 1-Achse gedehnt ($e_1 = 0,38$) und in Richtung der beiden anderen Gitterachsen gestaucht ($e_2 = e_3 = -0,026$).

Verzerrungstensor \mathbf{S}_C [19, 47].

$$\mathbf{S}_C = \begin{pmatrix} e_1 & 0 & 0 \\ 0 & e_2 & 0 \\ 0 & 0 & e_3 \end{pmatrix} \quad \text{wobei } e_1 = 0,38 \quad \text{und } e_2 = e_3 = -0,026 . \quad (4.1)$$

e_1 , e_2 und e_3 sind die Dehnungen der Gitterachsen aufgrund des Einbaus des Kohlenstoffatoms. Der Tensor \mathbf{S}_C ist im Gitterkoordinatensystem angeschrieben, wobei die 1-Achse die gedehnte ist, also die, in deren Richtung das Fremdatom mit den beiden nächsten Eisenatomen auf einer Achse liegt, siehe Bild 4.1.

Energieminimierung und Sättigungskonzentration

Der gesamte Energieinhalt einer Versetzung mit einem gefangenen Kohlenstoffatom ergibt sich zu (D = Versetzung bzw. dislocation, C = Kohlenstoffatom) [19]

$$U = U_D + U_{DC} + U_C \quad \text{mit} \quad (4.2)$$

$$U_D = -\frac{1}{2} \int_V \sum_{i,k} \sigma_{ik}^D \varepsilon_{ik}^D dV, \quad (4.3)$$

$$U_{DC} = -\int_V \sum_{i,k} \sigma_{ik}^D \varepsilon_{ik}^C dV \quad \text{und} \quad (4.4)$$

$$U_C = -\frac{1}{2} \int_V \sum_{i,k} \sigma_{ik}^C \varepsilon_{ik}^C dV, \quad (4.5)$$

wobei U_D die Eigenenergie des Verzerrungsfelds der Versetzung, U_C die Eigenenergie der Verzerrung des Eisengitters aufgrund der Einlagerung des Kohlenstoffatoms und U_{DC} die Interaktionsenergie der beiden Verzerrungsfelder ist. ε_{ik}^D und ε_{ik}^C sind die Verzerrungstensoren der Versetzung resp. des Gitters um das Kohlenstoffatom und σ_{ik}^D bzw. σ_{ik}^C die Spannungstensoren.

Im hier betrachteten Bereich der Kohlenstoffkonzentration bis etwa 6 Atom% ist die durchschnittliche elastische Verzerrung des Eisengitters aufgrund der Einlagerung von Kohlenstoffatomen proportional zur Anzahl der Kohlenstoffatome im betrachteten Volumen [47]. Die Gleichung (4.2) lässt sich damit in eine Gleichung für eine Energiedichte u weiterentwickeln:

$$u(\Gamma) = u_D + \Gamma \cdot u_{DC} + \Gamma^2 \cdot u_C. \quad (4.6)$$

Dabei ist Γ die Anzahl der Kohlenstoffatome pro krz-Einheitszelle. Die Eigenenergiedichte u_C geht mit Γ^2 ein, da sowohl das Spannungsfeld als auch das Verzerrungsfeld aufgrund des eingelagerten Kohlenstoffs proportional zu Γ sind. Ein Energieminimum der Energiedichte $u(\Gamma)$ stellt sich bei dem Γ ein, für welches die Ableitung

$$\frac{\partial u}{\partial \Gamma} = u_{DC} + 2\Gamma u_C \quad (4.7)$$

gleich Null ist. Beim Energieminimum ist das verzerrte Eisengitter mit Kohlenstoffatomen gesättigt, $\Gamma = \Gamma_S$:

$$\Gamma_S = -\frac{u_{DC}}{2u_C}. \quad (4.8)$$

Simulation des Diffusionsprozesses mit Finiten Elementen

Mit Hilfe von Γ_S lässt sich eine Sättigungskonzentration c_S der Kohlenstoffatome in Abhängigkeit vom Ort im Gitter und damit die Diffusion der Kohlenstoffatome zu den Versetzungen berechnen. Zu Beginn der Rechnung wird eine gleichmäßige Verteilung der Kohlenstoffatome im Gitter nach dem Abkühlen von der interkritischen Glühung angenommen. Für

den mit Finiten Elementen simulierten Diffusionsprozess ist die unterschiedliche Löslichkeit der Kohlenstoffatome im verzerrten Gitter die treibende Größe. Es wird eine spezifische Löslichkeit für jedes Element errechnet und mit Hilfe der Finiten Elemente die Diffusions-Differentialgleichung

$$\frac{dc}{dt} = \nabla \left(c_S \cdot D \cdot \nabla \left(\frac{c}{c_S} \right) \right) \quad (4.9)$$

gelöst [42]. c ist die Konzentration der Kohlenstoffatome bezogen auf die Sättigungskonzentration c_S und D die Diffusionskonstante. Nachteil dabei ist die von der Vernetzung abhängige Abstufung der Löslichkeit, deshalb ist auf eine ausreichend feine Vernetzung zu achten.

Es wird ein isotropes Stoffgesetz verwendet. Sowohl der Spannungs- und Verzerrungszustand der Versetzung wird unter Annahme eines isotropen Materialverhaltens ermittelt als auch die Interaktionsenergie mit dem Kohlenstoffatom. Berechnungen mit anisotropem Stoffgesetz [28] kommen zu Ergebnissen mit nur geringen quantitativen Unterschieden, bedingt durch den niedrigen Anisotropiefaktor des raumzentrierten α -Eisens ($\delta = 0,113$). Angesichts der großen Unsicherheiten bei der Berechnung des Verzerrungszustandes um eine Versetzung, insbesondere im hier interessanten Bereich nahe des Versetzungskerns, ist eine Berücksichtigung der geringen Anisotropie nicht notwendig.

Festhaltungsspannung

Die im Zugversuch nötige Zugspannung zur irreversiblen Versetzungsbewegung (plastische Verformung) ist für reines α -Eisen sehr niedrig. Für den Einzelkristall gibt die Literatur einen Wert von 27,6 MPa für die notwendige Schubspannung in der Gleitebene (critical resolved shear stress, CRSS) an [77]. Dies entspricht mit einem Schmid-Faktor von SF=0,5 einer Zugspannung von 55,2 MPa am Einzelkristall. Für den Polykristall aus α -Eisen ist der maximale gemittelte Schmid-Faktor aufgrund der vielen möglichen Gleitsysteme im krz-Gitter ebenso 0,5 [40, 77]. Allerdings ist die zur Versetzungsbewegung notwendige Zugspannung am Polykristall aufgrund des Versetzungsaufstaus an Korngrenzen höher: Je kleiner die Körner, desto höher die Fließspannung.

Die Hauptursache für die wesentlich höheren Zugfestigkeiten von Stahl im Gegensatz zu reinem Eisen ist allerdings die durch die Kohlenstoffdiffusion entstehende Cottrell-Wolke. Sie stellt ein Hindernis für die Versetzungsbewegung dar, da die Gesamtenergie des Systems Versetzung - Kohlenstoffatome einen niedrigeren Energieinhalt hat, wenn die Kohlenstoffatome nahe der Versetzung eingelagert sind anstatt sich im Gitter weit weg vom Spannungsfeld der Versetzung zu befinden. Hier wird davon ausgegangen, dass eine Versetzung verankert (gepinnt) ist, wenn alleine die Spannung, die nötig ist, um sie von der Cottrell-Wolke loszureißen, größer ist als 100 MPa. Das würde mit dem Schmid-Faktor 0,5 einer Zugspannung von 200 MPa entsprechen. Dabei wird bewusst darauf verzichtet, diese Spannung zur Spannung des reinen α -Eisens, korrigiert um den Korngrößen-Effekt, zu addieren, da nicht sicher

davon ausgegangen werden kann, dass sich diese Spannungen linear superponieren lassen.

Die Kraft, die zum Losreißen der Versetzung von der Kohlenstoff-Wolke aufgebracht werden muss, ist gleich der ersten Ableitung der Gesamtenergie Versetzung-Kohlenstoffatome nach der Position Ξ relativ zur Wolke:

$$F(\Xi) = \frac{du_{DC}(\Xi)}{d\Xi}. \quad (4.10)$$

Bei den folgenden Berechnungen wird davon ausgegangen, dass die Wolke der Versetzung nicht folgen kann [64, 75], d. h. die Kohlenstoffatome bleiben während des Losreißen an ihrem Platz und die Versetzung wird bewegt, siehe Bild 4.2. Diese Annahme ist bei Zugversuchen bei Raumtemperatur richtig [40].

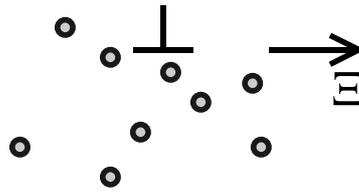


Bild 4.2: Für die Berechnung der Festhaltungsspannung wird die Position der Versetzung relativ zu den Fremdatomen variiert.

4.1 Berechnung der Kohlenstoffsättigungskonzentration

4.1.1 Schraubenversetzung

Es wird eine Schraubenversetzung angenommen, deren Burgersvektor \mathbf{b} in die $[111]$ -Richtung der Einheitszelle des Eisengitters zeigt, siehe Bild 4.3. Die Schraubenversetzung hat vom Ursprung des Koordinatensystems der durch das Kohlenstoffatom verzerrten Einheitszelle den zum Burgersvektor lotrechten Abstand r . Es wird ein xyz -Koordinatensystem eingeführt, um den Spannungstensor $\mathbf{T}_{\mathbf{D}}$ der Schraubenversetzung anzuschreiben. Die z -Achse dieses Koordinatensystems ist parallel zur $[111]$ -Richtung, die y -Achse steht senkrecht auf dem Burgersvektor \mathbf{b} . Die Projektion der 1-Achse ($[100]$ -Richtung) in die xy -Ebene ist durch den Winkel Φ gekennzeichnet, siehe Bild 4.3. In einem ausreichenden Abstand vom Kern ($r > b$) ist der Spannungstensor $\mathbf{T}_{\mathbf{D}}^{xyz}$ der Schraubenversetzung:

$$\mathbf{T}_{\mathbf{D}}^{xyz} = \frac{Gb}{2\pi r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad r > b. \quad (4.11)$$

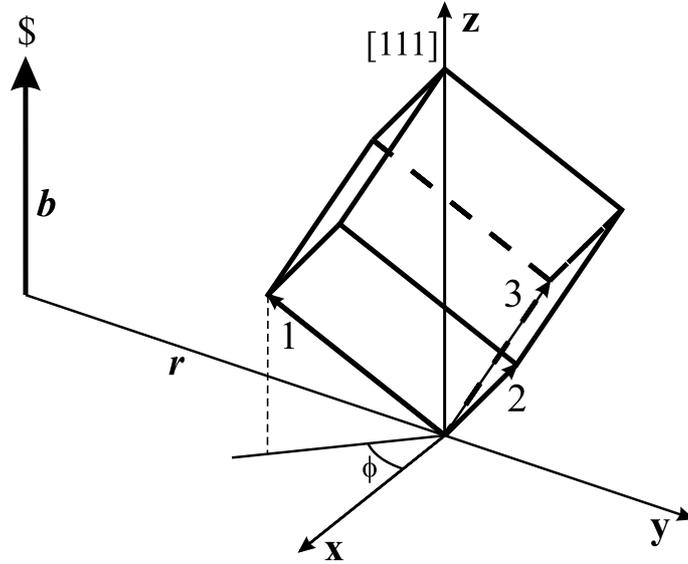


Bild 4.3: Angenommene Lage der Schraubenversetzung im α -Eisen-Gitter.

Der dazugehörige Verzerrungszustand der Schraubenversetzung \mathbf{S}_D^{xyz} lässt sich über das Stoffgesetz Gl. (A.1) ermitteln:

$$\mathbf{S}_D^{xyz} = \frac{b}{4\pi r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad r > b. \quad (4.12)$$

Der Verzerrungstensor (4.1) des Kohlenstoffatoms wird mit Hilfe der Drehmatrix \mathbf{A} ins Koordinatensystem der Schraubenversetzung (xyz) transformiert.

$$\mathbf{S}_C^{xyz} = \mathbf{A} \mathbf{S}_C^{123} \mathbf{A}^T \quad (4.13)$$

$$\text{mit } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{3}} \cos \Phi & \sqrt{\frac{2}{3}} \cos(\Phi + \frac{2}{3}\pi) & \sqrt{\frac{2}{3}} \cos(\Phi + \frac{4}{3}\pi) \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \sin \Phi & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin(\Phi + \frac{2}{3}\pi) & \sqrt{\frac{2}{3}} \sin(\Phi + \frac{4}{3}\pi) \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Der Verzerrungstensor des Kohlenstoffatoms im Koordinatensystem der Schraubenversetzung \mathbf{S}_C^{xyz} ist ein umfangreicher Ausdruck, weswegen hier nur die Elemente, die zum Überschieben (4.4) mit dem Spannungstensor (4.11) wichtig sind, aufgeführt sind.

$$\mathbf{S}_C^{xyz} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \frac{\sqrt{2}}{3}(e_1 \cos \Phi + e_2 \cos(\frac{2\pi}{3} + \Phi) + e_3 \cos(\frac{4\pi}{3} + \Phi)) \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{\sqrt{2}}{3}(e_1 \cos \Phi + e_2 \cos(\frac{2\pi}{3} + \Phi) + e_3 \cos(\frac{4\pi}{3} + \Phi)) & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

Je nachdem auf welcher Oktaederlücke sich das Kohlenstoffatom im Eisengitter befindet, ist entweder e_1 , e_2 oder e_3 gleich 0,38; die beiden anderen Verzerrungen sind gleich -0,026. Die Elemente, die in Gl. (4.15) aufgeführt sind, wiederholen sich mit den unterschiedlichen Kombinationen für e_1 , e_2 und e_3 somit alle 120° . Es wird mit einer Kombination weitergerechnet

($e_1 = 0,38$ und $e_2 = e_3 = -0,026$) und später dann mit drei um jeweils 120° versetzten Winkellagen für Φ gearbeitet. Dadurch vereinfacht sich der Tensor \mathbf{S}_C^{xyz} .

$$\mathbf{S}_C^{xyz} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \frac{\sqrt{2}}{3}(e_1 - e_2) \cos \Phi \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{\sqrt{2}}{3}(e_1 - e_2) \cos \Phi & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad \text{für } e_3 = e_2 \quad (4.16)$$

Durch Überschieben der Verzerrungen mit den Spannungen erhält man folgende Energien (D = Versetzung bzw. dislocation, C = Kohlenstoffatom):

- Die Energie der Schraubenversetzung durch Überschieben mit sich selbst:

$$U_D^{\text{Schraube}} = -\frac{a^3}{2} \sum_{i,k} \sigma_{ik}^D \varepsilon_{ik}^D = -\frac{a^3}{2} \cdot \frac{b^2 G}{8\pi^2 r^2} . \quad (4.17)$$

- Die Interaktionsenergie der Schraube mit dem Kohlenstoffatom:

$$U_{DC}^{\text{Schraube}} = -a^3 \sum_{i,k} \sigma_{ik}^D \varepsilon_{ik}^C = -a^3 \cdot \frac{\sqrt{2}b(e_1 - e_2)G \cos \Phi}{3\pi r} \quad \text{für } e_3 = e_2 . \quad (4.18)$$

- Die Gitterenergie des aufgrund des Kohlenstoffatoms verzerrten Gitters:

$$U_C^{\text{Schraube}} = -\frac{a^3}{2} \sum_{i,k} \sigma_{ik}^C \varepsilon_{ik}^C = -\frac{a^3}{2} \cdot \frac{G(-2e_2^2 + e_1^2(\nu - 1) - 4e_1e_2\nu)}{-1 + 2\nu} \quad \text{für } e_3 = e_2 . \quad (4.19)$$

Für die Löslichkeit der Kohlenstoffatome nahe der Versetzung sind nur U_C^{Schraube} und U_{DC}^{Schraube} entscheidend. U_C^{Schraube} ist unabhängig vom Ort relativ zur Versetzung, also hier konstant. Die Interaktionsenergie U_{DC}^{Schraube} ist abhängig von der Entfernung r und der Winkellage Φ relativ zur Versetzung. In Bild 4.4 ist die Interaktionsenergie für alle drei möglichen Oktaeder-Positionen eines Kohlenstoffatoms im Abstand eines Burgers-Vektors von der Schraubenversetzung dargestellt.

Zur Berechnung von $\Gamma_S^{\text{Schraube}}$ werden die Interaktionsenergien (4.18) und (4.19) in die Gleichung (4.8) eingesetzt.

$$\Gamma_S^{\text{Schraube}} = -\frac{b(e_1 - e_2)(-1 + 2\nu) \cos \Phi}{3\sqrt{2}\pi r(-2e_2^2 + e_1^2(-1 + \nu) - 4e_1e_2\nu)} \quad (4.20)$$

Um die Atomsättigungskonzentration c_S^A zu berechnen, muss berücksichtigt werden, dass sich Γ_S auf die Anzahl der Wirtsgitteratome in einer raumzentrierten Einheitszelle, also zwei, und nicht auf die Gesamtanzahl der Atome, Gitter- und Fremdatome, bezieht.

$$c_S^A = \frac{\Gamma_S/2}{\Gamma_S/2 + 1} \quad (4.21)$$

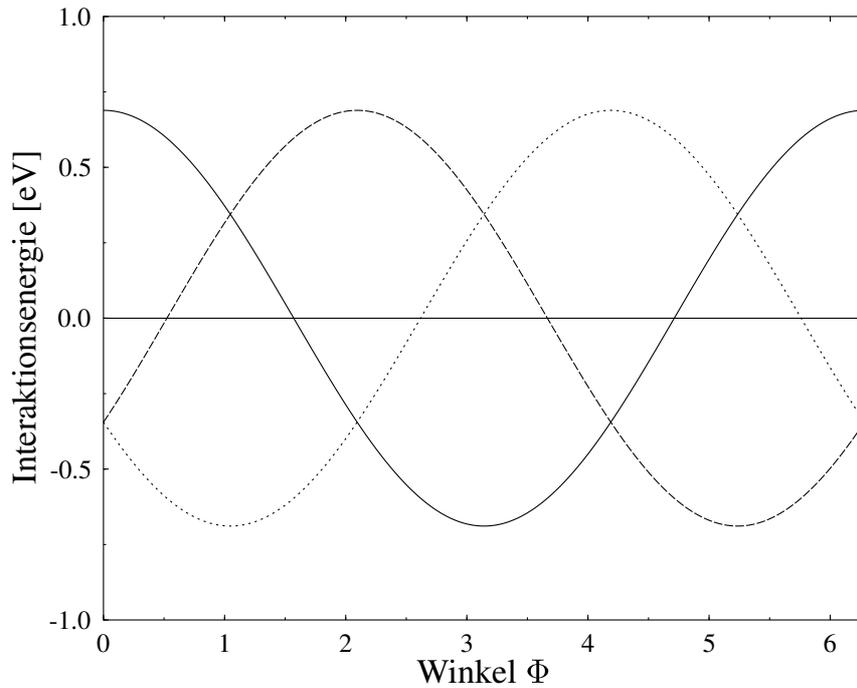


Bild 4.4: Interaktionsenergie eines Kohlenstoffatoms mit einer Schraubenversetzung im Abstand eines Burgersvektors von der Versetzung, dargestellt sind die Energien für alle drei möglichen Oktaeder-Positionen des Kohlenstoffatoms.

In der Finite-Elemente-Simulation wird mit Massenkonzentrationen gerechnet. Zur Berechnung der Massenlöslichkeit c muss noch das Verhältnis der beiden relativen Atommassen berücksichtigt werden:

$$c = \frac{A_{\text{r}}^{\text{Fe}}}{A_{\text{r}}^{\text{C}}} \cdot c_{\text{S}}^{\text{A}}. \quad (4.22)$$

Für Kohlenstoff ist die relative Atommasse $A_{\text{r}}^{\text{C}} = 12,01$, für Eisen $A_{\text{r}}^{\text{Fe}} = 55,85$. Für die Rückwärtsrechnung von Massenkonzentration zu Atom% ergibt sich $c^{\text{A}} = 0,215 \cdot c$.

Mit der Gleichung (4.22) und eingesetzten Zahlenwerten wird aus $\Gamma_{\text{S}}^{\text{Schraube}}$ die Massenlöslichkeit $c_{\text{S}}^{\text{Schraube}}$ in der Umgebung der Schraubenversetzung errechnet. Die Löslichkeit wird von der am leichtesten zu besetzenden Oktaeder-Position im Gitter bestimmt. In der numerischen Umsetzung wird die jeweils höchste Löslichkeit für die Löslichkeit des finiten Elements verwendet.

4.1.2 Stufenversetzung

Für Stufenversetzungen in α -Eisen stellen die $\{110\}$ -Ebenen bevorzugte Gleitebenen dar. Hier wird beispielhaft von der $(0\bar{1}1)$ -Ebene als Gleitebene ausgegangen [66]. Die Versetzungslinie der hier angenommenen Versetzung ist parallel zur $\langle 211 \rangle$ -Richtung und der Burgersvektor \mathbf{b} zeigt in die $\langle \bar{1}11 \rangle$ -Richtung. Der Winkel zwischen der $\langle \bar{1}11 \rangle$ -Richtung (Burgersvektor) und dem Ortsvektor \mathbf{r} der betrachteten Elementarzelle wird mit ψ bezeichnet, siehe Bild 4.5.

Die Tensoren werden in einem kartesischen xyz -Koordinatensystem angeschrieben, dieses Sy-

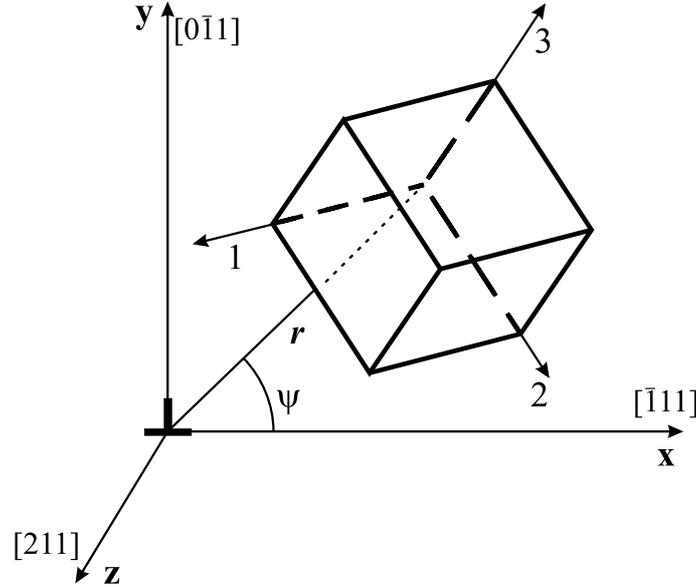


Bild 4.5: Angenommene Lage der Stufenversetzung im α -Eisen-Gitter.

stem hat seinen Ursprung in der Versetzungslinie. Die xz -Ebene ist dabei die Gleitebene und x die Richtung des Burgersvektors.

Der Spannungstensor \mathbf{T}_D^{xyz} der Stufenversetzung im xyz -Koordinatensystem ist:

$$\mathbf{T}_D^{xyz} = \frac{Gb}{2\pi r(1-\nu)} \begin{pmatrix} -\sin\psi(1+2\cos^2\psi) & \cos\psi\cos 2\psi & 0 \\ \cos\psi\cos 2\psi & \sin\psi\cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & -2\nu\sin\psi \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Der dazugehörige Verzerrungszustand \mathbf{S}_D^{xyz} der Versetzung (4.24) ergibt sich aus dem Stoffgesetz Gl. (A.1).

$$\mathbf{S}_D^{xyz} = \frac{b}{4\pi r(\nu-1)} \begin{pmatrix} (2-2\nu+\cos 2\psi)\sin\psi & -\cos\psi\cos 2\psi & 0 \\ -\cos\psi\cos 2\psi & (2\nu+\cos 2\psi)\sin\psi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

Der Verzerrungstensor des Kohlenstoffatoms wird mit Hilfe der Drehmatrix \mathbf{B} ins Koordinatensystem der Stufenversetzung (xyz) transformiert.

$$\mathbf{S}_C^{xyz} = \mathbf{B}\mathbf{S}_C^{123}\mathbf{B}^T \quad (4.25)$$

$$\text{mit } \mathbf{B} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ 0 & -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{6}} & \sqrt{\frac{1}{6}} \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

Mit dem Verzerrungstensor

$$\mathbf{S}_C^{xyz} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}(e_1+e_2+e_3) & \frac{1}{\sqrt{6}}(e_3-e_2) & \frac{1}{3\sqrt{2}}(e_2-2e_1+e_3) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(e_3-e_2) & \frac{1}{2}(e_2+e_3) & \frac{1}{2\sqrt{3}}(e_3-e_2) \\ \frac{1}{3\sqrt{2}}(e_2-2e_1+e_3) & \frac{1}{2\sqrt{3}}(e_3-e_2) & \frac{1}{6}(4e_1+e_2+e_3) \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

des Kohlenstoffatoms im Koordinatensystem (xyz) können die folgenden Energien berechnet werden:

- Die Energie der Stufenversetzung durch Überschieben mit sich selbst:

$$U_D^{\text{Stufe}} = -\frac{a^3}{2} \sum_{i,k} \sigma_{ik}^D \varepsilon_{ik}^D = -\frac{a^3}{2} \cdot \frac{b^2 G (1 - \nu + \nu \cos(2\psi))}{8\pi^2 r^2 (\nu - 1)^2}. \quad (4.28)$$

- Die Interaktionsenergie der Stufenversetzung mit dem Kohlenstoffatom:

$$\begin{aligned} U_{DC}^{\text{Stufe}} &= -a^3 \sum_{i,k} \sigma_{ik}^D \varepsilon_{ik}^C = \\ &= -a^3 \cdot \frac{bG}{12\pi r(1-\nu)} \cdot ((\sqrt{6}(e_2 - e_3)) \cdot (\cos \psi + \cos(3\psi)) + \\ &+ (2((e_2 + e_3)(2 + \nu) + e_1(2 + 4\nu)) + (2e_1 - e_2 - e_3) \cos(2\psi)) \sin \psi). \end{aligned} \quad (4.29)$$

- Die Gitterenergie des aufgrund des Kohlenstoffatoms verzerrten Gitters:

$$\begin{aligned} U_C^{\text{Stufe}} &= -\frac{a^3}{2} \sum_{i,k} \sigma_{ik}^C \varepsilon_{ik}^C = \\ &= -\frac{a^3}{2} \cdot \frac{G((e_1^2 + e_2^2 + e_3^2) \cdot (\nu - 1) - 2e_2 e_3 \nu - 2e_1(e_2 + e_3))}{2\nu - 1}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Die Interaktionsenergien für ein Kohlenstoffatom auf einem der möglichen Zwischengitterplätze im Eisengitter mit einer Stufenversetzung sind in Bild 4.6 dargestellt.

Analog zur Schraubenversetzung wird auch für die Stufenversetzung Γ_S^{Stufe} nach Gl. (4.8) mit Hilfe der Energien U_{DC}^{Stufe} und U_C^{Stufe} in Abhängigkeit des Ortes berechnet.

$$\begin{aligned} \Gamma_S^{\text{Stufe}} &= \\ &= -\frac{b}{24\pi r(\nu - 1)((e_1^2 + e_2^2 + e_3^2) \cdot (\nu - 1) - 2e_2 e_3 \nu - 2e_1(e_2 + e_3)\nu)} \cdot \\ &\quad \cdot ((\sqrt{6}(e_2 - e_3)) \cdot (\cos \psi + \cos(3\psi)) + \\ &\quad + (2((e_2 + e_3)(2 + \nu) + e_1(2 + 4\nu)) + (2e_1 - e_2 - e_3) \cos(2\psi)) \sin \psi) \end{aligned} \quad (4.31)$$

Die Massen-Löslichkeit c_S^{Stufe} in der Umgebung der Stufenversetzung wird nach den Gleichungen (4.21) und (4.22) berechnet. Es müssen wieder alle drei möglichen durch das Kohlenstoffatom hervorgerufenen Gitterverzerrungen berücksichtigt werden.

4.2 Finite-Elemente-Modell der Diffusion

In der Simulation wird von einer unendlich langen Versetzung ausgegangen. Außerdem wird die Annahme gemacht, dass parallel zur Versetzung kein Nettofluss von Kohlenstoffatomen

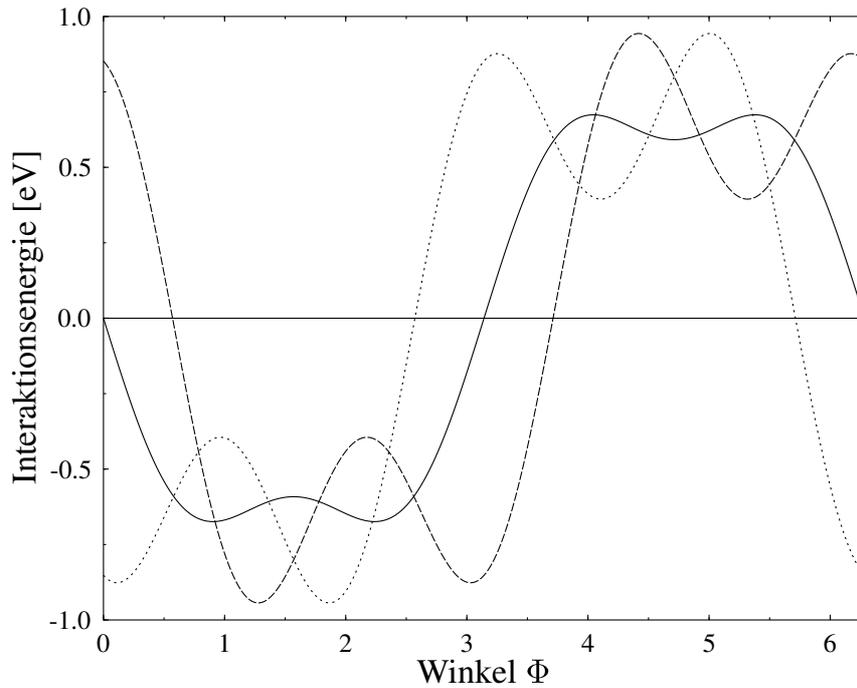


Bild 4.6: Interaktionsenergie eines Kohlenstoffatoms mit einer Stufenversetzung im Abstand eines Burgersvektors von der Versetzung. Dargestellt sind jeweils die Energien für ein Kohlenstoffatom auf einem der möglichen Zwischengitterplätze im Eisengitter.

stattfindet. Dadurch kann der Diffusionsprozess der Fremdatome zur Versetzung mit einem zweidimensionalen Modell dargestellt werden, siehe Bild 4.7. Es wird eine Scheibe senkrecht zur Versetzung aus dem Material geschnitten und keine Diffusion senkrecht zu den Oberflächen zugelassen, d. h. die Gesamtanzahl der Kohlenstoffatome im simulierten Bereich ist während der Berechnung konstant. Innerhalb der Scheibe findet die Diffusion aufgrund der unterschiedlichen Löslichkeiten in den einzelnen Elementen statt.

Skalierung des Modells

In den Koordinaten der finiten Elemente hat das Modell die Größe $2 \cdot 2$. In der Mitte ist die Versetzung, die Vernetzung ist zur Versetzung hin stark verfeinert, um dem höheren Gradienten in der Löslichkeit in der Nähe der Versetzung Rechnung zu tragen. Dadurch ist eine sehr große Gitterfläche, die Scheibe ist bis zu etwa $10^7 a^2$ groß, mit einem Netz aus ungefähr 20.000 Knoten und 5.000 Elementen darstellbar. Dabei bleibt der minimale Knotenabstand nahe des Versetzungskerns deutlich unterhalb der Gitterkonstante a .

Im Modell wird mit einer Skalierung $scale$ gearbeitet, wobei die Skalierung die Anzahl der Gitterabstände pro Finite-Elemente-Einheit, also der halben Modellgröße, angibt. Das heißt, ein Gitterabstand a hat im Modell die Länge $a_{FE} = 1/scale$. Der dabei angenommene Abstand zwischen zwei Versetzungen ist dann etwa $2 \cdot scale \cdot a$. Die Versetzungsdichte ρ wird in Versetzungslänge aller Versetzungen pro Volumen angegeben [LE^{-2}]. Damit ergibt sich für die Kantenlänge des betrachteten Ausschnittes $1/\sqrt{\rho} = 2 \cdot scale \cdot a$. Für die Umrechnung

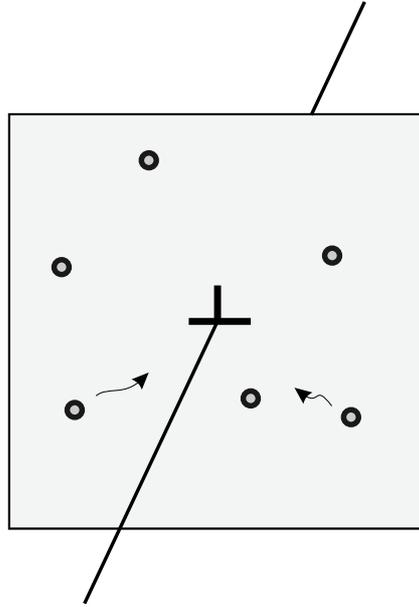


Bild 4.7: FE-Modell für die Diffusionsberechnung: senkrecht zur Versetzung wird eine Scheibe herausgeschnitten, innerhalb der die Diffusion stattfindet.

von einer Versetzungsdichte auf die Skalierung gilt:

$$scale = \frac{1}{2a\sqrt{\rho}} = 1,7445 \cdot 10^9 \cdot \rho^{-\frac{1}{2}} \quad \text{in [m]} . \quad (4.32)$$

Ein Burgersvektor hat im α -Eisen die Länge $b = 2,4822 \cdot 10^{-10}$ m. Damit ergibt sich mit dem Gitterabstand $a = 2,8662 \cdot 10^{-10}$ m für den Burgersvektor b_{FE} im Koordinatensystem der finiten Elemente eine Länge von

$$b_{FE} = \frac{b}{a} \cdot a_{FE} = \frac{2,4822}{2,8662 \cdot scale} . \quad (4.33)$$

Die Diffusionskonstante D_{FE} im Koordinatensystem des Modells beträgt

$$D_{FE} = D_C \cdot \frac{1}{(scale \cdot a)^2} \cdot 3600\text{s/h} \cdot 24\text{h/d} , \quad (4.34)$$

wobei in der Berechnung dann die Zeiteinheit ein Tag ist.

Versetzungsdichte

Die Versetzungsdichte im Dual-Phasen Stahl lässt sich experimentell sehr schwer und nur größenordnungsmäßig im Transmissionselektronenmikroskop bestimmen. Im Fall des Dual-Phasen Stahles kommt die mit dem Ort stark schwankende Versetzungsdichte hinzu, siehe Kapitel 2.5. Die Berechnungen wurden deshalb für verschiedene Versetzungsdichten durchgeführt (zwischen 10^8 und 10^{10} cm^{-2}). In der Tabelle 4.1 sind einige Umrechnungswerte exemplarisch dargestellt.

Tabelle 4.1: Umrechnung vom FE-Maßstab auf die Versetzungsdichte.

<i>scale</i>	175	552	1745
ρ [cm ⁻²]	10 ¹⁰	10 ⁹	10 ⁸

Anfangskonzentration des gelösten Kohlenstoffs

Zu Beginn der Rechnung muss eine Anfangskonzentration des Kohlenstoffs im Ferrit festgelegt werden. Bei langsam abgekühlten, einphasigen ferritischen Stählen mit niedrigem Kohlenstoffgehalt ist es relativ einfach, die Konzentration des gelösten Kohlenstoffes im Gitter anzugeben: Aus dem chemischen Gleichgewicht lässt sich sofort auf den gelösten Kohlenstoff schließen, da man davon ausgehen kann, dass bei genügend langsamer Abkühlgeschwindigkeit überschüssiger Kohlenstoff in Form von Karbid ausgeschieden wird. Nach einem schnellen Abkühlprozess kann die Kohlenstoffkonzentration im Gitter deutlich über der Gleichgewichtskonzentration von etwa 1 ppm liegen, da der Kohlenstoff nicht genügend Zeit zur Karbid-Bildung hat; er ist dann im Gitter zwangsgelöst. Karbide scheiden sich bei Raumtemperatur in den hier betrachteten Zeiträumen sicher nicht in signifikanten Mengen aus.

Beim Dual-Phasen Stahl kommt als weitere Unsicherheit hinzu, dass nur abgeschätzt werden kann, wie sich der Kohlenstoff über die zwei Phasen des Verbundes verteilt. Bei der Glühung im Zweiphasengebiet bei 800 °C ist die Gleichgewichtslöslichkeit für Kohlenstoff im Austenit wesentlich höher als im Ferrit. Während der Abkühlung wird bei langsameren Abkühlgeschwindigkeiten nicht der gesamte Austenit in Ferrit umgewandelt, es liegt also der Schluss nahe, dass der Kohlenstoff dabei in kleiner werdenden Austenit/Martensit-Inseln höher konzentriert ist. Es ist aber auch anzunehmen, dass die Bereiche, die während der Glühung austenitisch waren und später ferritisch sind, einen höheren Anteil an zwangsgelöstem Kohlenstoff haben als die Bereiche, die während der Glühung ferritisch waren. Es muss also davon ausgegangen werden, dass Ferrit deutlich mit Kohlenstoff übersättigt ist, wobei die Kohlenstoffkonzentration in den versetzungsreichen Gebieten in der Nähe des Martensits besonders hoch sein könnte.

Es wird eine Abschätzung vorgenommen und mit unterschiedlichen Kohlenstoff-Konzentrationen gerechnet, um diese Unsicherheiten zu berücksichtigen. Als Obergrenze für die maximale Löslichkeit des Ferrits für Kohlenstoff im Zweiphasengebiet nahe 723 °C lässt sich etwa 20 ppm annehmen. Die Simulationen werden mit verschiedenen Anfangskonzentrationen zwischen 10 und 25 ppm durchgeführt.

Numerische Berechnung der Festhaltungsspannung

Fremdatome können nur dann von einer Versetzung als gefangen angesehen werden, falls die Interaktionsenergie zwischen Versetzung und Atom größer als die thermische Energie des Gitters ist, d.h.: $U_{DC} > \beta kT$. Mit $\beta = 1$ [19] bedeutet dies etwa $r = 30b$. Das heißt, nur innerhalb eines Radius von ungefähr 30 Burgers-Vektoren wechselwirkt die Versetzung mit den Kohlenstoffatomen. Für die weiteren Betrachtungen kommt es nicht auf eine exakte Ermittlung dieses Abstandes an, da die meisten Atome wegen der dort höheren Löslichkeit nahe an der Versetzung sind und außerdem die entfernteren Atome auch die wesentlich niedrigere Interaktionsenergie mit der Versetzung freisetzen, also zur gesamten Energieminimierung nur einen unwesentlichen Beitrag leisten.

Für jedes Element i im versetzungsnahen Bereich ($r < 30b$) wird für jeden Zeitschritt die aktuelle Atomkonzentration des Kohlenstoffs c_i errechnet. Mit den Flächen A_i (in Gittereinheiten a^2) der Elemente lässt sich die gesamte Interaktionsenergie $U_{DC, \text{gesamt}}$ der Versetzung in ihrer Ursprungslage ($\xi = 0; \eta = 0$) durch Summation über alle Elemente n berechnen. Dazu wird ein kartesisches Koordinatensystem $\xi\eta$ eingeführt, das seinen Ursprung im Durchstoßpunkt der unverrückten Versetzungslinie in der Mitte der FE-Scheibe hat.

$$U_{DC, \text{gesamt}}(\xi = 0; \eta = 0) = \sum_{i=1}^n 2 \cdot c_i \cdot A_i \cdot U_{DC}(\xi_i, \eta_i) \quad (4.35)$$

ξ_i und η_i bezeichnen die Position des finiten Elements i relativ zur Versetzung. Der Faktor 2 resultiert aus dem Verhältnis der Atomkonzentration c_i zu der Anzahl der Atome pro Einheitszelle Γ , siehe Gl. (4.21). $U_{DC}(\xi_i, \eta_i)$ ist die Interaktionsenergie eines Kohlenstoffatoms in einer krz-Einheitszelle auf der Position (ξ_i, η_i) mit der Versetzung in der Lage ($\xi = 0; \eta = 0$). Im Falle der Stufenversetzung ist das $\xi\eta$ -Koordinatensystem gleich dem xy -System der Versetzung aus Kapitel 4.1.2, wobei die ξ -Achse der x -Achse entspricht. Bei der Schraubenversetzung (Kapitel 4.1.1) entspricht das $\xi\eta$ -System dem xy -System bei $\Phi = 0^\circ$.

Die Interaktionsenergie der Versetzung mit der Kohlenstoff-Wolke verändert sich bei einem Verrücken der Versetzung aus der ursprünglichen Lage. In der Berechnung kann die Versetzung im $\xi\eta$ -System beliebig verschoben werden. Für die Stufenversetzung wird das im Vergleich zum Klettern energetisch günstigere Quergleiten beim Berechnen der Festhaltungsspannung angenommen. Die Stufenversetzung wird aus ihrer ursprünglichen Lage entlang der ξ - bzw. x -Achse verschoben, dies entspricht Gleiten in $\langle \bar{1}11 \rangle$ -Richtung. Da vollständige Schraubenversetzungen keine ausgezeichneten Gleitebenen haben, lässt sich auch anders als bei der Stufenversetzung keine Schnittgerade der Gleitebene und der $\xi\eta$ -Ebene angeben. Dennoch ist es nicht nötig, Losreißspannungen für Gleiten in sämtliche Richtungen zu berechnen. Aufgrund der Geometrie des Spannungsfelds einer Schraubenversetzung und der Anordnung der Kohlenstoffatome in der Cottrell-Wolke ist die Festhaltungsspannung richtungsunabhängig für um 120° gegeneinander verdrehte Bewegungsrichtungen der Versetzung. Versetzungsbewegungen in genau gegenüberliegende Richtungen liefern in der Berechnung dasselbe Ergebnis, die Festhaltungsspannung wiederholt sich damit alle 60° . Die Unterschiede der

Festhaltekräfte für eine Bewegung in 0°- (entsprechend der positiven Richtung der ξ -Achse), 15°- und 30°-Richtung sind geringer als 10%, weswegen nicht näher auf die tatsächlichen Gleitrichtungen einer Schraubenversetzung im Gitter eingegangen wird. Im Folgenden sind nur die Ergebnisse für die 0°-Richtung dargestellt.

Um die Festhaltekraft zu berechnen, muss die Interaktionsenergie für jede neue Position k der Versetzung mit dem veränderten Positionsvektor $(\Delta\xi_k; \Delta\eta_k)$ ermittelt werden.

$$U_{DC, \text{gesamt}}(\Delta\xi_k; \Delta\eta_k) = \sum_{i=1}^n 2c_i \cdot A_i \cdot U_{DC}(\xi_i - \Delta\xi_k; \eta_i - \Delta\eta_k) \quad (4.36)$$

Die Interaktionsenergie wird für verschiedene $\Delta\xi_k$ und $\Delta\eta_k$ ermittelt. Das Ableiten zur Berechnung der Festhaltekraft geschieht numerisch.

$$F_k = \frac{U_{DC, \text{gesamt}}(\Delta\xi_k; \Delta\eta_k) - U_{DC, \text{gesamt}}(\Delta\xi_{k-1}; \Delta\eta_{k-1})}{\sqrt{(\Delta\xi_k - \Delta\xi_{k-1})^2 + (\Delta\eta_k - \Delta\eta_{k-1})^2}} \quad (4.37)$$

F_k ist die Kraft, die aufgrund der Cottrell-Wolke benötigt wird, um die Versetzung von der Position $k - 1$ auf die Position k zu verschieben. Wird die Versetzung aus ihrer Ursprungslage über mehrere Positionen verschoben, dann ist die dabei maximal auftretende Kraft $F_{k, \text{max}}$ die Festhaltekraft. Da die Energie als Linienenergie berechnet wird, hat $F_{k, \text{max}}$ die Einheit [Kraft/Länge]. Die Festhaltekraft wird bei jedem Zeitschritt der Diffusionssimulation ermittelt, dadurch lässt sich eine Festhaltespannung in Abhängigkeit der Alterungszeit berechnen.

Thermischer Aktivierungsansatz

Die mit Gl. (4.37) berechnete Kraft zum Losreißen der Versetzung von ihrer Cottrell-Wolke berücksichtigt keine thermischen Effekte, es wird also eine theoretische Festhaltekraft F_{max} bei 0 K berechnet. Bei höheren Temperaturen können Versetzungen aufgrund thermischer Aktivierung leichter Hindernisse im Gitter überwinden [36, 41], d. h. bereits bei geringerer Kraft $F < F_{\text{max}}$ beginnt sich die Versetzung zu bewegen. In Bild 4.8 ist die Kraft auf die Versetzung in Abhängigkeit ihrer Lage relativ zur Ausgangslage dargestellt. Beim Losreißen der Versetzung von einer Cottrell-Wolke muss eine bestimmte Energie pro Versetzungslänge aufgebracht werden. Diese Energie vermindert sich um einen Teil, der thermischen Aktivierungsenergie, sie ist als schraffierte Fläche in Bild 4.8 dargestellt, bei $T > 0$ K.

Dadurch wird die nötige Losreißkraft bzw. -spannung herabgesetzt. Unter der Annahme, dass der Verlauf der auf die Versetzung wirkenden Rückstellkraft $F(x)$ ungefähr einen parabolischen Verlauf um das Maximum hat, lässt sich der Einfluss der thermischen Aktivierung abschätzen [36].

$$F(T > 0 \text{ K}) = F_{\text{max}} \cdot \left(1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{2}{3}}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (4.38)$$

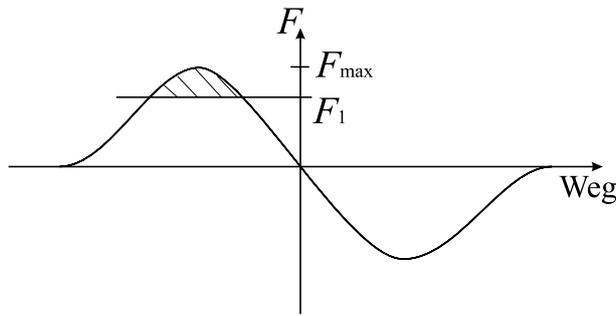


Bild 4.8: Bei Temperaturen über 0 K ist zum Losreißen der Versetzung eine niedrigere Kraft $F_1 < F_{\max}$ nötig.

Dabei ist T die Temperatur des Materials, also hier Raumtemperatur und T_0 die Temperatur, bei der kein Verankern (Pinning) der Versetzungen durch Kohlenstoffatome mehr festzustellen ist, also auch kein Portevin-LeChatelier-Effekt. Dies ist bei Eisen etwa bei $T_0 = 600$ K der Fall [40]. F ist dann die bei der Temperatur T tatsächlich benötigte Kraft um eine Versetzung von einer Cottrell-Wolke loszureißen.

4.3 Ergebnisse

Aufgrund der verschiedenen Verläufe der Interaktionsenergien von Kohlenstoffatomen mit einer Schrauben- bzw. einer Stufenversetzung unterscheidet sich das Diffusionsverhalten der Fremdatome in den Spannungsfeldern dieser Versetzungen. In den Bildern 4.9 bis 4.11 ist der Massenfluss der Kohlenstoffatome dargestellt. Die Größe der Modelle beträgt etwa $500 \cdot 500$ Burgers-Vektoren. Die Netzverfeinerung in Richtung des Versetzungskerns in der Mitte ist deutlich zu erkennen.

Bei der Schraubenversetzung diffundieren die Kohlenstoffatome in Richtung der Positionen der drei Energieminima, die um den Versetzungskern im Winkel von jeweils 120° angeordnet sind, Bild 4.9. Der innere Bereich um den Versetzungskern ist noch einmal vergrößert in Bild 4.10 abgebildet, auch hier sind die drei Einzugsbereiche zu sehen.

Bei der Stufenversetzung diffundieren die Fremdatome von oberhalb der Gleitebene, dort wo die Extra-Halbebene ist, auf die Unterseite der Gleitebene und außerdem auf der gesamten Unterseite und in der Gleitebene zur Versetzung, siehe Bild 4.11. In Bild 4.12 ist die berechnete Kohlenstoffkonzentration um eine Stufenversetzung nach einem Tag dargestellt. Man erkennt, dass die Kohlenstoffatome auf vier Keulen konzentriert sind, die Lage der Keulen entspricht der Lage der Energieminima in Bild 4.6. Zwei der Keulen liegen genau in der Gleitebene, d. h. viele der Kohlenstoffatome in der Nähe einer Stufenversetzung sind knapp über oder unter der Gleitebene seitlich des Versetzungskerns angeordnet.

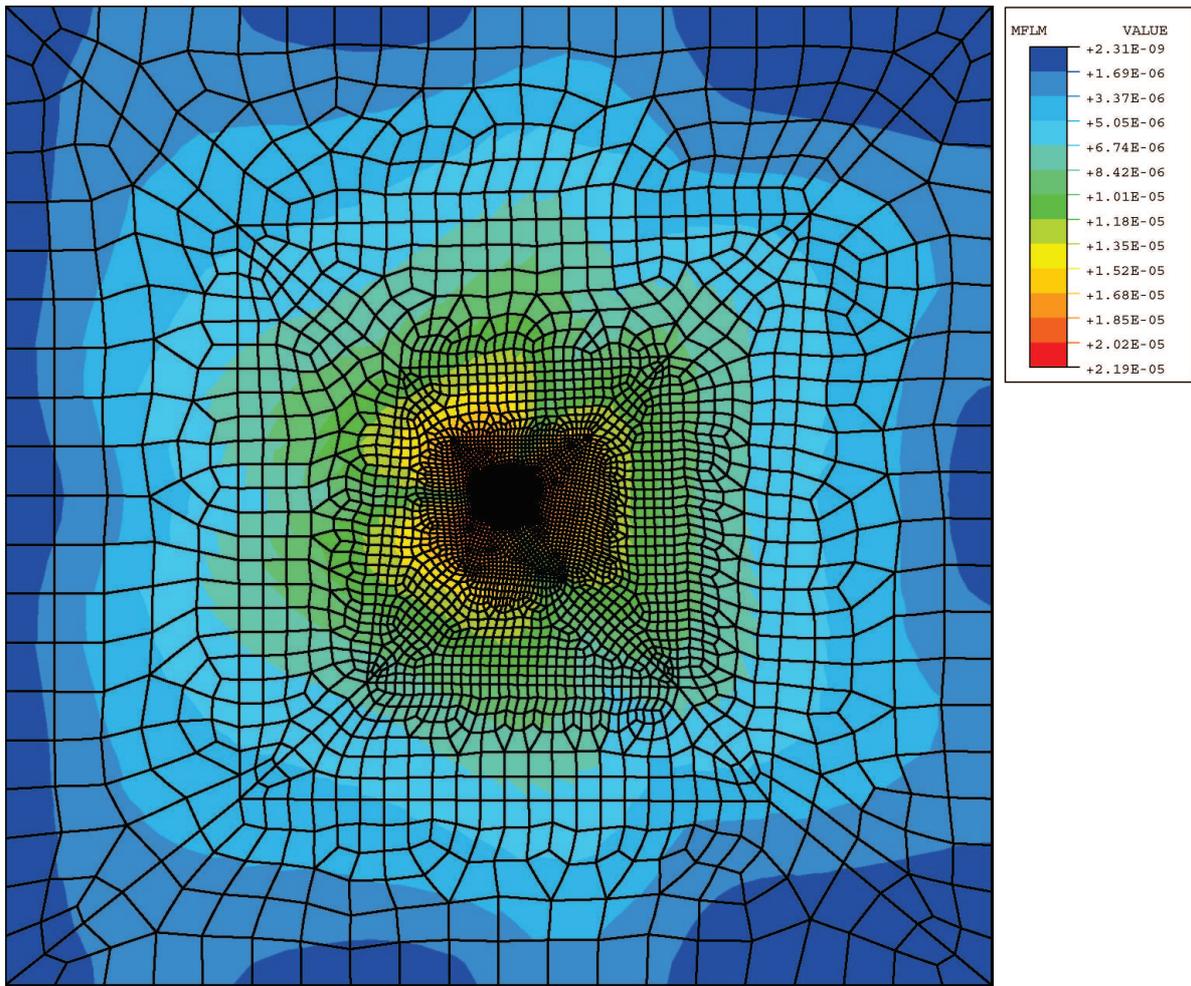


Bild 4.9: Diffusion von Kohlenstoffatomen zu einer Schraubenversetzung, dargestellt ist der Massenfluss in einem Modell der Größe $\approx 500 \cdot 500$ Burgers-Vektoren.

4.3.1 Kohlenstoffkonzentration und Anzahl der Kohlenstoffatome nahe der Versetzung

Die Kohlenstoffkonzentration im Abstand eines Burgers-Vektors b wird in der Literatur oftmals verwendet, um Theorien und Messungen zur Bildung von Cottrell-Wolken zu vergleichen. Der hier verwendete Ansatz sagt eine maximale Konzentration von etwa 7 Atom% Kohlenstoff voraus. Eine andere Vergleichsmöglichkeit sind die gefangenen Kohlenstoffatome pro senkrecht auf der Versetzungslinie stehenden Ebene, wobei auch hier ein Kohlenstoffatom als gefangen gilt, wenn die Interaktionsenergie mit der Versetzung größer ist als die thermische Energie des Gitters. Mit dem verwendeten Ansatz werden etwa 15 Atome pro Ebene bei einer Schraubenversetzung und 13 bei einer Stufenversetzung ermittelt, das Verhältnis ist etwa $N_{C, \max}^{\text{Stufe}} / N_{C, \max}^{\text{Schraube}} = 0,86$. Für diese Berechnung wird für jede Winkellage von der Versetzung ausgehend über die Kohlenstoff-Löslichkeit integriert; die obere Integrationsgrenze ist dort, wo die Interaktionsenergie Versetzung-Kohlenstoffatom gleich der thermischen Energie des Gitters ist.

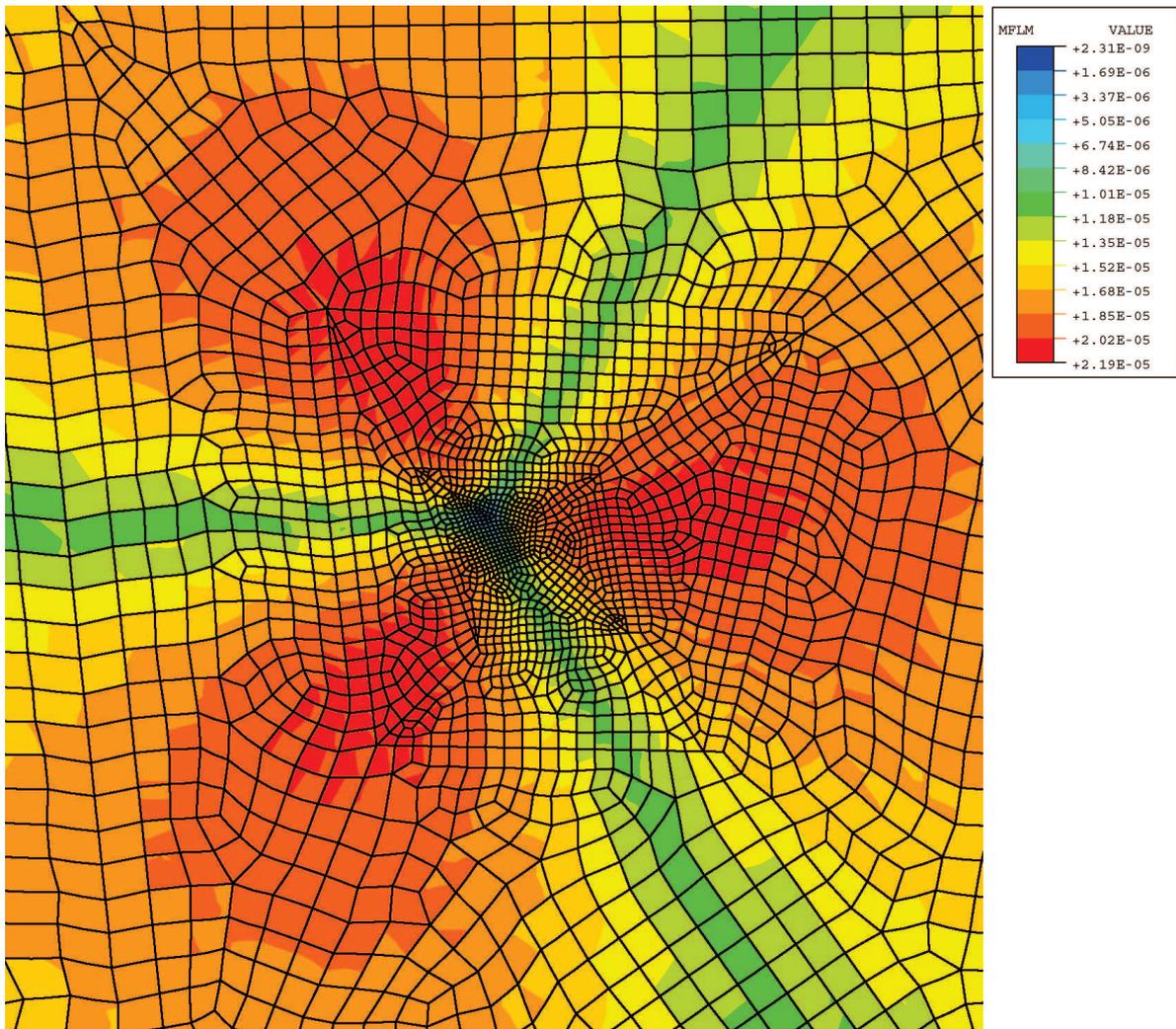


Bild 4.10: Ausschnitt des versetzungsnahen Bereichs aus der FE-Scheibe der Diffusionsberechnung an einer Schraubensetzung. Die Elemente nahe des Kerns haben eine Kantenlänge deutlich unter einem Burgers-Vektor.

Es ist aber nicht nur die maximale Anzahl der Kohlenstoffatome pro Ebene in der Umgebung einer Versetzung interessant, sondern auch die zeitliche Entwicklung, insbesondere wie lange es dauert, bis der Diffusionsprozess zum Erliegen kommt. Nur diese Größe lässt sich mit den Ergebnissen der Drehpendelversuche (Kapitel 2.4) vergleichen. Wird bei Drehpendelversuchen keine signifikante Veränderung des Anteils an gelöstem Kohlenstoff mehr festgestellt, werden sicher auch keine Kohlenstoffatome mehr in nennenswertem Umfang in den Versetzungsspannungsfeldern gefangen. Umgekehrt ist es allerdings möglich, dass die Versetzungsspannungsfelder gesättigt sind, aber die Menge an gelöstem Kohlenstoff dennoch weiter abnimmt, so z. B. durch Karbid-Ausscheidungen während einer Wärmebehandlung. Das Ende des Diffusionsprozesses kann entweder durch das Erreichen der Sättigungskonzentration in Versetzungsnähe ausgelöst werden oder im Eisengitter befinden sich nicht ausreichend Kohlenstoffatome, um die Spannungsfelder der Versetzungen vollständig zu sättigen. Bei diesen Betrachtungen ist zu berücksichtigen, dass auch das ungestörte Eisengitter selbst in gerin-

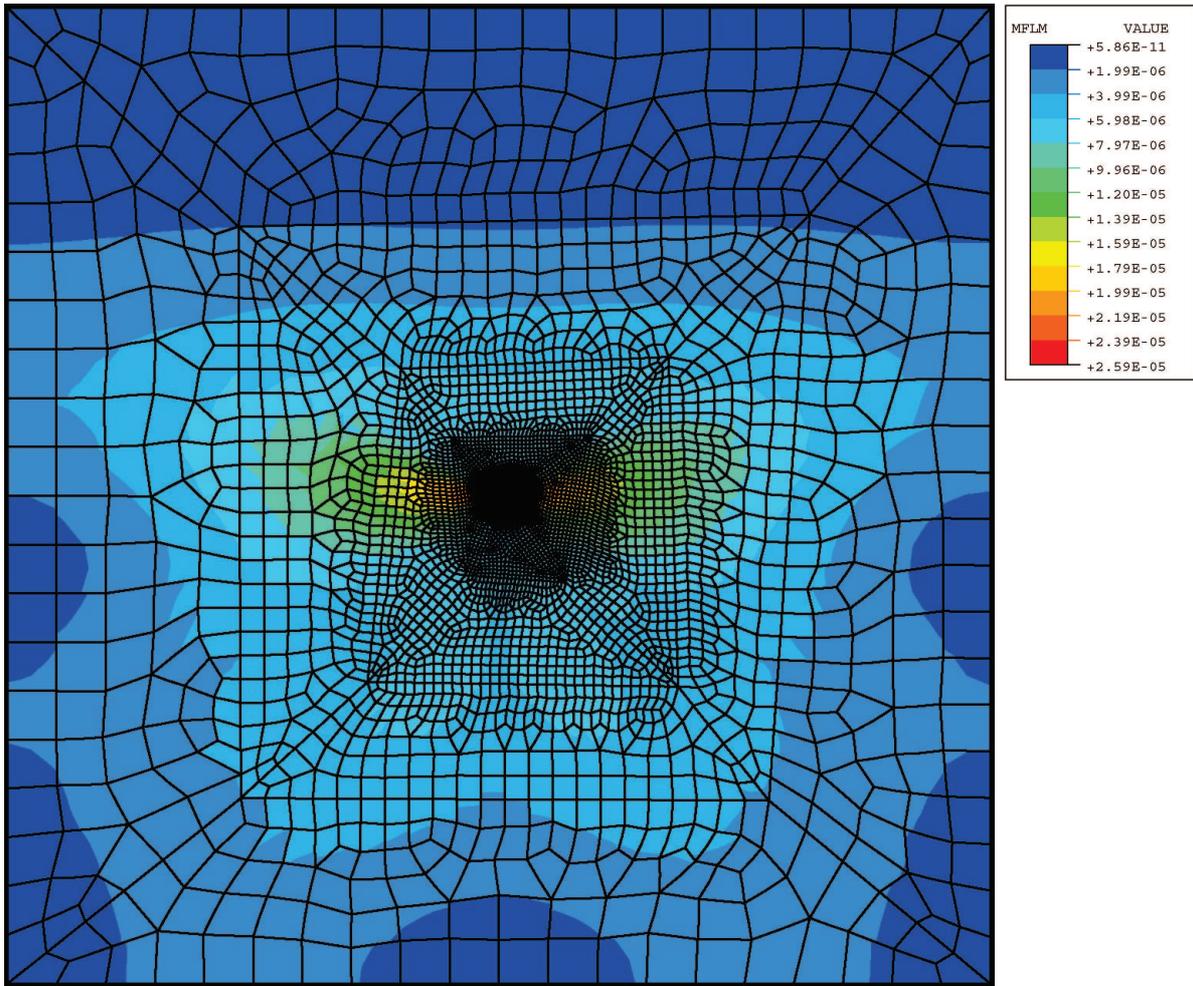


Bild 4.11: Diffusion in einem FE-Modell mit einer Stufenversetzung in der Mitte, dargestellt ist der Massenfluss.

gem Umfang Kohlenstoffatome aufnehmen kann, bevor es gesättigt ist, d. h. es werden auch immer noch gelöste Kohlenstoffatome im Gitter vorhanden sein, die im Drehpendelversuch Dämpfung hervorrufen.

Bei der Auswertung der Berechnungen wurden die Kohlenstoff-Konzentrationen innerhalb von 30 Burgers-Vektoren um die Versetzungen berücksichtigt.

$$N_C = \sum_{i=1}^{n(r < 30b)} c_i \cdot A_i \quad (4.39)$$

In den Bildern 4.13 (a) bis (d) ist jeweils für zwei unterschiedliche Anfangskonzentrationen des Kohlenstoffs (10 ppm und 25 ppm) die durchschnittliche Anzahl Kohlenstoffatome im Spannungsfeld der Versetzung in einer Ebene dargestellt. Den Diagrammen in den Bildern 4.13 (a) und (c) ist eine sehr hohe Versetzungsdichte von 10^{10} cm^{-2} zugrunde gelegt. Man erkennt, dass sich der Diffusionsprozess bereits früh vor Erreichen der Sättigungskonzentration sehr stark verlangsamt. Der Einzugsbereich für die Kohlenstoffatome in einer Ebene um die Versetzung herum ist aufgrund der hohen Versetzungsdichte

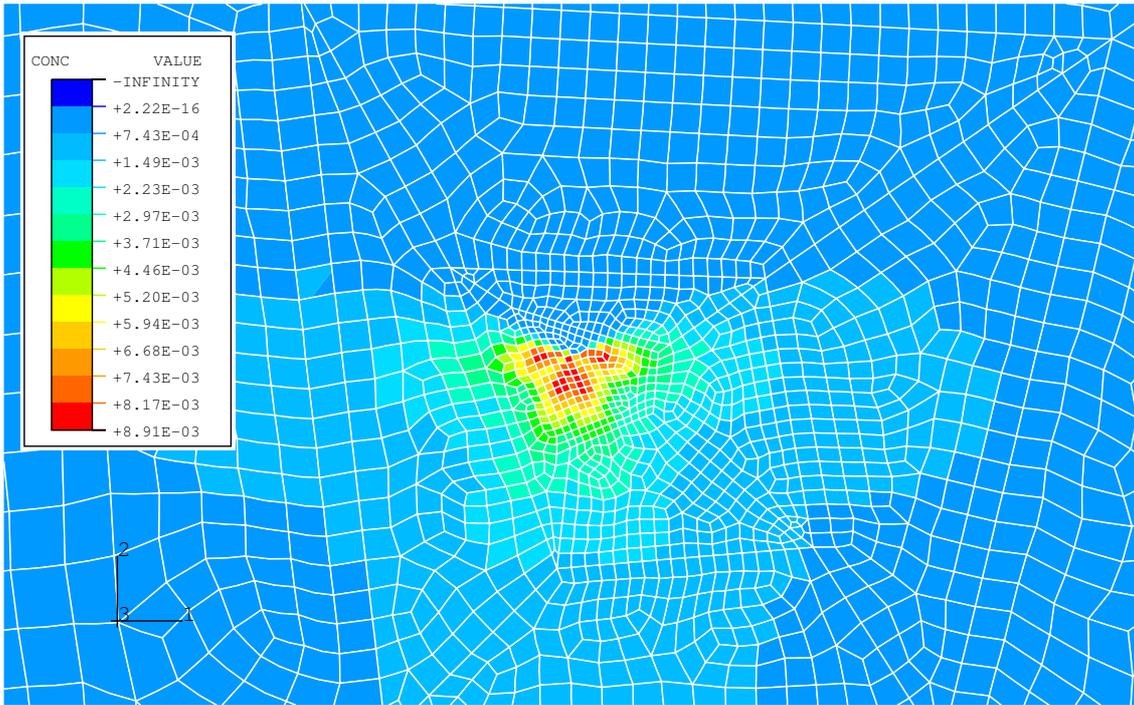
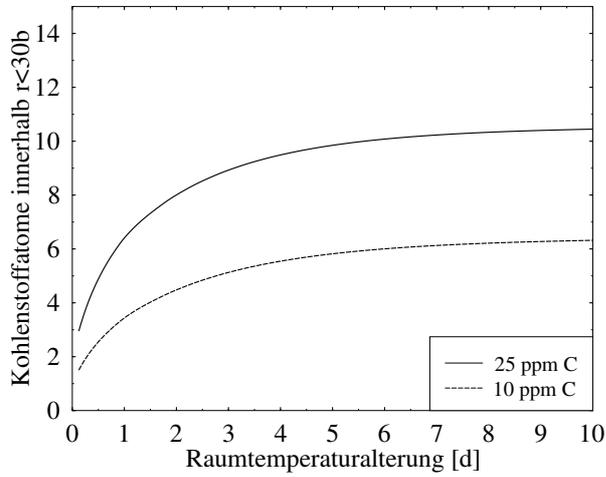
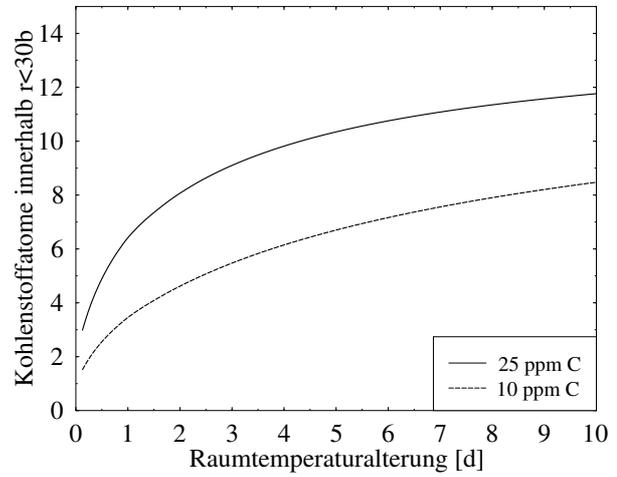


Bild 4.12: Kohlenstoffkonzentration nach einem Tag um eine Stufenversetzung, angenommene Anfangskonzentration des Kohlenstoffs: 25 ppm. Der Bildausschnitt ist etwa 50 Burgers-Vektoren breit.

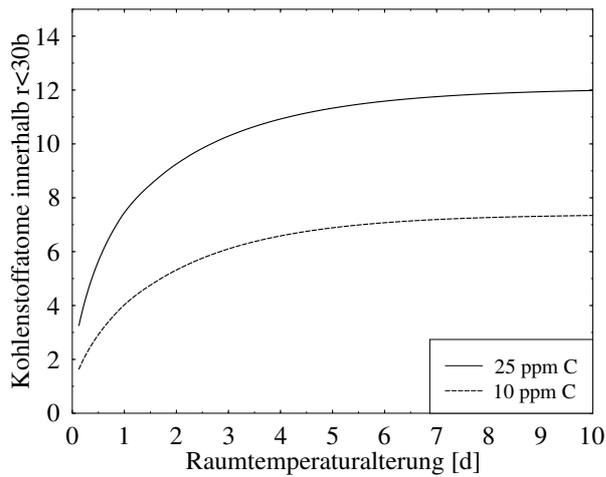
zu klein um das Spannungsfeld der Versetzung zu sättigen. Für eine Versetzungsdichte von 10^8 cm^{-2} ergibt sich für die ersten Tage dasselbe Bild: Die Anzahl der gefangenen Kohlenstoffatome nimmt am Anfang sehr stark zu, siehe Bild 4.13 (b) und (d). Obwohl ausreichend Kohlenstoffatome vorhanden sind, verlangsamt sich der Diffusionsprozess im weiteren Verlauf der Alterung. Der Grund hierfür ist, dass die Kohlenstoffatome von weiter entfernten Gebieten erst durch die Abnahme der Konzentration in ihrem Umfeld zur gerichteten Bewegung angeregt werden, von dem Spannungsfeld der Versetzung spüren sie direkt nichts. Dies bestätigt Ergebnisse älterer Untersuchungen [14, 45]. Trotz der sehr großen Spannweite der Eingangsparameter lässt sich feststellen, dass der Diffusionsprozess nach einigen Tagen zumindest annähernd zum Erliegen kommt.



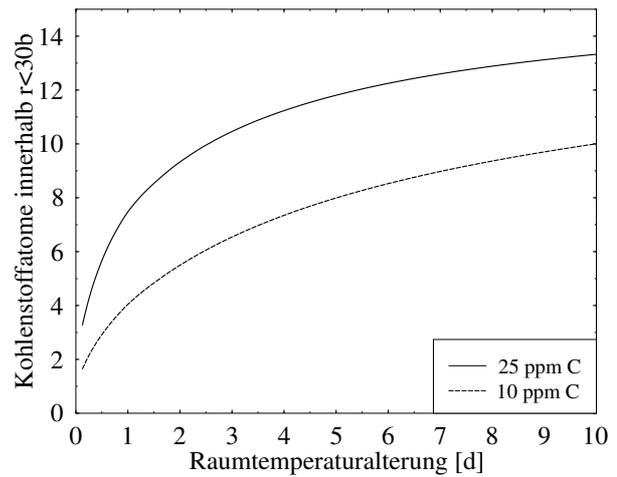
(a)



(b)



(c)



(d)

Bild 4.13: Durchschnittliche Anzahl an Kohlenstoffatomen in einer Atomebene im Spannungsfeld der Versetzung bei unterschiedlichen Anfangskonzentrationen des Kohlenstoffs (10 ppm und 25 ppm): (a) Stufenversetzung, Versetzungsdichte 10^{10} cm^{-2} ; (b) Stufenversetzung, Versetzungsdichte 10^8 cm^{-2} ; (c) Schraubenversetzung, Versetzungsdichte 10^{10} cm^{-2} ; (d) Schraubenversetzung, Versetzungsdichte 10^8 cm^{-2} .

4.3.2 Zeitliche Entwicklung der Versetzungsverankerung

Für die oben beschriebenen Kombinationen von Versetzungsdichten und Anfangskonzentrationen wurde die Festhaltespannung für eine Versetzung aufgrund der sich bildenden Cottrell-Wolke in Abhängigkeit der Zeit berechnet. Die Ergebnisse sind in den Bildern 4.14 (a)-(d) dargestellt. Zu Beginn des Diffusionsprozesses sind die Kurven für die unter-

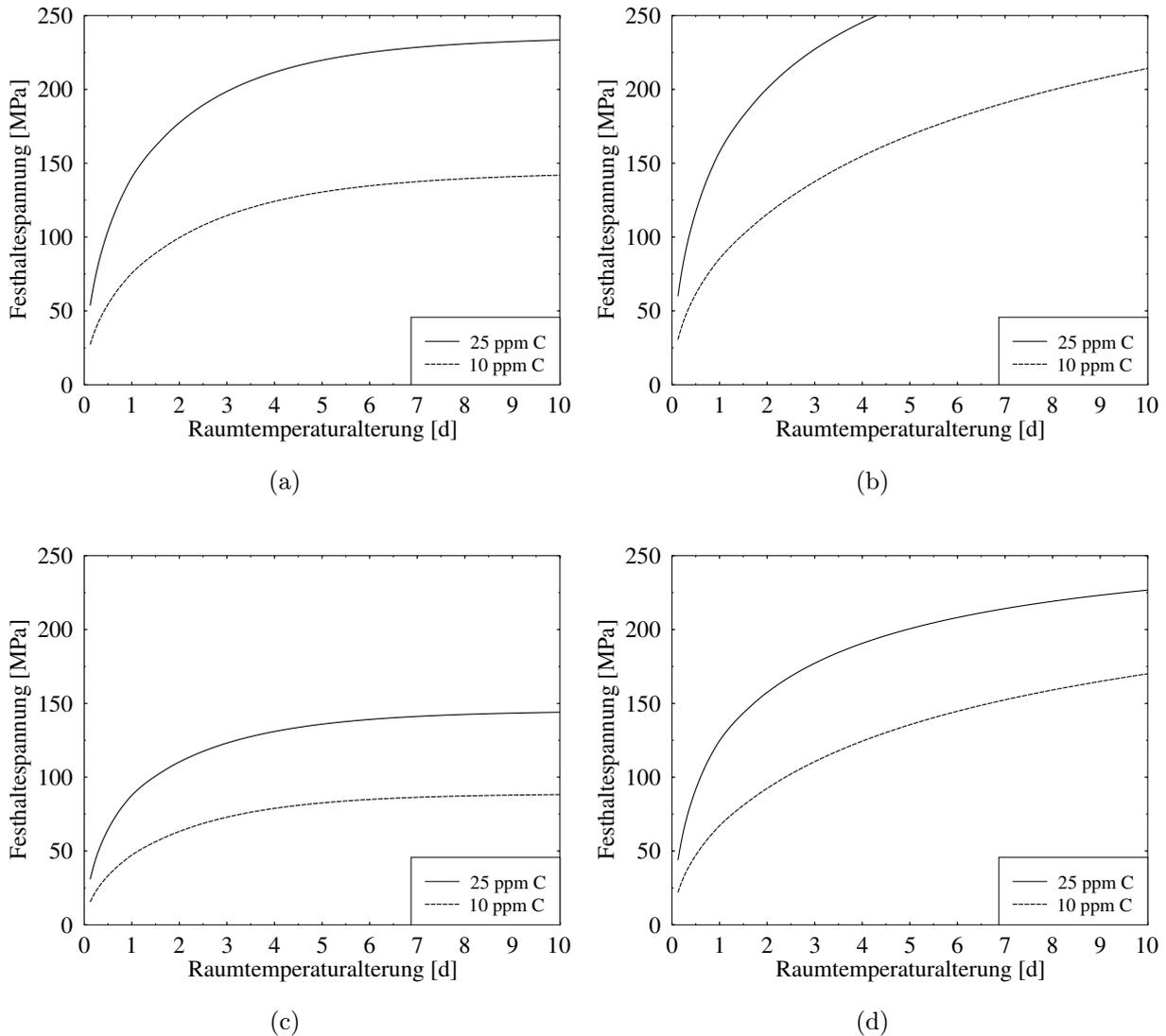


Bild 4.14: Festhaltespannungen für Versetzungen aufgrund der sich bildenden Cottrell-Wolke bei Raumtemperatur für unterschiedliche Anfangskonzentrationen des Kohlenstoffs (10 ppm und 25 ppm): (a) Stufenversetzung, Versetzungsdichte 10¹⁰ cm⁻²; (b) Stufenversetzung, Versetzungsdichte 10⁸ cm⁻²; (c) Schraubenversetzung, Versetzungsdichte 10¹⁰ cm⁻²; (d) Schraubenversetzung, Versetzungsdichte 10⁸ cm⁻².

schiedlichen Versetzungsdichten noch etwa gleich, später sind sie stark unterschiedlich. Die Festhaltespannung steigt bei der hohen Versetzungsdichte bereits nach etwa 5 Tagen nicht mehr signifikant an, während sie bei der niedrigen Versetzungsdichte länger steigt. Dies

ist nicht überraschend, da der Diffusionsprozess bei der hohen Versetzungsdichte aufgrund der kürzeren Wege auch früher zum Erliegen kommt. Auch nicht überraschend ist die von Beginn an höhere Festhaltespannung bei einer höheren Anfangskonzentration des Kohlenstoffes: Das Spannungsfeld um die Versetzung kann deutlich schneller mit Fremdatomen angefüllt werden, da in der Umgebung mehr Kohlenstoffatome zur Verfügung stehen. Die Festhaltespannung steigt bei der Stufenversetzung wesentlich stärker an als bei der Schraubenversetzung, obwohl die Energieverminderung bei der Stufenversetzung nur 86% jener der Schraubenversetzung ist. Dies ist allerdings nicht das allein entscheidende Kriterium für den Energieaufwand beim Verschieben des Spannungsfelds der Versetzung in der vorhandenen Kohlenstoffwolke. Der Grund für die höhere Festhaltespannung der Stufenversetzung ist die schlechtere Übereinstimmung des Spannungsfelds nach einem Verschieben um z.B. einen Burgers-Vektor in der Gleitebene mit dem Spannungsfeld vor der Verschiebung.

In jedem Fall ist die Festhaltespannung nach einigen Tagen über 100 MPa, außer für die Schraubenversetzung bei der niedrigsten Kohlenstoffkonzentration in Verbindung mit der extrem hohen Versetzungsdichte von 10^{10} cm^{-2} . Selbst hier werden aber noch über 75 MPa erreicht. Die Versetzungen sind also nach einigen Tagen mit großer Sicherheit von einer Wolke von Kohlenstoffatomen umgeben.

Kapitel 5

Diskussion

Da zur Berechnung des mechanischen Verhaltens von Matrix-Inklusions-Strukturen verschiedene Ansätze existieren, soll der in dieser Arbeit gewählte Weg diskutiert und Alternativen oder Weiterentwicklungen aufgezeigt werden. Die Diffusion von Kohlenstoffatomen in die Spannungsfelder von Versetzungen und auch die Spannungsfelder der Versetzungen selbst sind in der Literatur häufig behandelte Themen, deshalb wird ein Vergleich mit anderen Lösungsstrategien und Lösungen durchgeführt. Abschließend werden die Ergebnisse aus den verschiedenen Untersuchungen in Zusammenhang gebracht.

5.1 Berechnung des mechanischen Verhaltens

Analytische Lösungen sind für die Simulation des Abkühlprozesses mit der Austenit-Martensit Phasenumwandlung und der Berechnung der Auswirkung der dabei initiierten Dehnungen und Spannungen auf das mechanische Verhalten von Dual-Phasen Stahl nur bedingt geeignet. Mit Näherungslösungen aufbauend auf der Theorie von Eshelby [31, 32] kann die Ausdehnung einer ovalen, harten Inklusion in einer weichen Matrix berechnet werden, z. B. [63]. Die Möglichkeiten zur Simulation eines anschließenden Zugversuchs sind jedoch begrenzt, es kann nur der Beginn der plastischen Verformung berechnet werden. Weitergehende Berechnungen würden wie bei den Finiten Elementen ein schrittweises Vorgehen erforderlich machen. Für Finite Elemente bestehen seit langem erprobte Verfahrensweisen für plastische Berechnungen [61, 97], außerdem erlauben Modellierungen mit Finiten Elementen auch wesentlich komplexere geometrische Formen.

Eine interessante Erweiterung der Mikrostruktur-Modellierung von mehrphasigem Material mit Finiten Elementen stellt sicher die Verwendung von dreidimensionalen Voronoi-Netzen dar. Die Ansätze in diese Richtung sind allerdings auf Grund der begrenzten Computerleistung noch unbefriedigend. So haben Barbe *et al.* [3] für eine Einheitszelle ein Finite-Element-Netz aus regelmäßigen Würfeln verwendet und dieses Netz gemäß eines Voronoi-Diagramms eingefärbt. Für die Berechnungen wird ein Netz aus 200 Voronoi-Körnern in einem Würfel

aus $18 \cdot 18 \cdot 18$ Finiten Elementen abgebildet [4]. Problematisch ist bei dieser Methode die nicht untersuchte Auswirkung der gestuften Ränder der Körner. Es können an den Korngrenzen Verformungsinkompatibilitäten auftreten die bei einer exakten Modellierung der Voronoi Geometrie nicht auftreten würden. Nygård *et al.* [60] vernetzen Voronoi-Zellen exakt, allerdings benötigen sie aufgrund der kurzen Kanten in den Voronoi-Netzen für nur fünf Zellen bereits mehrere Tausend Tetraeder-Elemente. Dabei kommt Ihnen noch zugute, dass die Wahrscheinlichkeit extremer Kantenverhältnisse, die das Vernetzen erschweren, mit der Zellenanzahl abnimmt. Die Rechnerleistung ist die entscheidende Schranke, in naher Zukunft sind auf diesem Gebiet entscheidende Verbesserungen zu erwarten.

5.2 Diffusionsberechnung

Cochardt *et al.* [19] behaupten, wohl ohne Rechnung, dass die Stufenversetzung aufgrund ihres unsymmetrischen Spannungsfelds nur etwa halb so viele Atome wie eine Schraubenversetzung fangen kann. Dies steht im Widerspruch zu dem hier errechneten Verhältnis der Sättigungslöslichkeiten von 0,86, obwohl die Berechnungen auf den Theorien von Cochardt aufbauen. Auch in den Berechnungsergebnissen ist das Verhältnis der Kohlenstoffatome um eine Stufenversetzung einerseits und eine Schraubenversetzung andererseits zu jedem Zeitpunkt etwa 0,86, siehe Bild 4.13. Von Cochardt wird angeführt, dass die Stufenversetzung im Gegensatz zur Schraubenversetzung nur unterhalb der Gleitebene Atome fängt und dass die maximale Interaktionsenergie in einem Burgers-Vektor Abstand von der Versetzung zwischen dem Spannungsfeld der Stufen- bzw. Schraubenversetzung und dem Fremdatom etwa gleich groß ist. Dabei wird allerdings übersehen, dass die Kohlenstoffatome auch auf Gitterplätzen oberhalb der Gleitebene der Stufenversetzung, also im Bereich der Extra-Halbebene, unter Verminderung der Gesamtenergie eingelagert werden können, siehe Bild 4.6. Tatsächlich können sich auf etwa 70% des gesamten Winkelspektrums um die Versetzungslinie Kohlenstoffatome anordnen. Außerdem sind die maximalen Interaktionsenergien nicht gleich, im Abstand $r = b$ wird für die Schraubenversetzung 0,77 eV und für die Stufenversetzung 0,98 eV berechnet.

Die ersten lokalen Messergebnisse von Kohlenstoff-Konzentrationen in Stahl wurden von Miller *et al.* [57] veröffentlicht, allerdings gelang es nur die Konzentrationsunterschiede an Zwillingsgrenzen und in der Nähe von Korngrenzen zu untersuchen. Chang [17] konnte die Kohlenstoff-Anreicherungen um Versetzungen darstellen, er schätzte die Anzahl der Kohlenstoffatome in einer zur Versetzungslinie senkrecht stehenden Atomebene auf etwa 5-15. Die Berechnungen mit dem hier verwendeten Modell sagen etwa 15 Atome voraus. In jüngerer Zeit gelang es Wilde *et al.* [89] einzelne Kohlenstoffatome um Versetzungen zu lokalisieren. Sie ermittelten 21 ± 1 Atome pro senkrecht auf der Versetzungslinie stehenden Ebene des Wirtsgitters. In der selben Studie wird außerdem eine maximale Konzentration von 8 ± 2 Atom-% des Kohlenstoffes in Versetzungsnähe gemessen.

Messungen im Feldionenmikroskop bestätigten die Vorhersage, dass die Kohlenstoffatome um eine Stufenversetzung diffus verteilt sind. Die Fremdatome sind nicht, wie ursprünglich von Cottrell und Bilby [20] angenommen, in Form einer Linie unter der Versetzung aufgereiht, sondern verteilen sich über einen großen Winkel um die Versetzung. Hochauflösende Feldionenmikroskopie-Untersuchungen von Blavette *et al.* [12] an einer Eisen-Aluminium-Legierung (40 Atom-% Aluminium) mit 400 Atom-ppm Bor lassen für das interstitiell gelöste Bor denselben Schluss zu. In dieser Untersuchung konnten allerdings auch Bor-Atome direkt über der Versetzung, also dort wo die Extra-Halbebene über der Gleitebene ist, nachgewiesen werden. Dies steht im Widerspruch zu anderen Ergebnissen und wird von den Autoren mit einer Substitution von Aluminium-Atomen durch Bor-Atome aufgrund der starken Gitterstauchung im Bereich der Extra-Halbebene erklärt. Dieser Effekt ist für das System Fe-C nicht bekannt.

Die experimentellen Ergebnisse zeigen, dass die Rechnungen von Cochardt *et al.* sowohl für die Konzentration der Fremdatome in der Nähe des Kerns als auch für die Gesamtzahl Kohlenstoffatome gute Vorhersagen liefern. Einzig das Ergebnis, dass die Stufen- und die Schraubenversetzung etwa gleich viel Atome binden können, wurde damals nicht erkannt, wohl aufgrund der nicht zur Verfügung stehenden Computer-Rechenleistung.

Als Alternative zu dem hier verwendeten Rechenverfahren wäre auch ein Finite-Differenzen-Verfahren für die Diffusions-Differentialgleichung in Frage gekommen, wie es Sakamoto angewandt hat [64]:

$$-\frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div} \left(-\frac{Dc(1-c)}{kT} \cdot \nabla U - D\nabla c \right) . \quad (5.1)$$

c ist die Konzentration der Lösung bezogen auf die gesamte Masse des Materials einschließlich der Eisenatome, D der Diffusionsquotient und U die Interaktionsenergie. Die Treibkraft der Diffusion ist nicht wie in der hier durchgeführten FE-Rechnung ein Löslichkeitsgefälle, das aus der ortsabhängigen Interaktionsenergie berechnet wurde, sondern die Interaktionsenergie selbst. Der Faktor $(1 - c)$ in Gl. (5.1) wird eingeführt, um dem geometrischen Ausschlussprinzip, auch als Fermi-Dirac-Prinzip bezeichnet, zu genügen [5, 8]. Bei kleinen Konzentrationen, wie sie hier vorkommen, kann dies sicher vernachlässigt werden. Aber auch für die auf diese Art vereinfachte Differentialgleichung ist bis jetzt keine analytische oder wenigstens halbanalytische Lösung bekannt.

Sowohl beim Finite-Elemente- als auch bei dem Finite-Differenzen-Verfahren muss diskretisiert werden. Eine Netzverfeinerung, wie sie hier mit den Finiten Elementen vorgenommen wurde, ist bei dem Finite-Differenzen-Verfahren nicht so einfach möglich. Im Zusammenhang mit der begrenzten zur Verfügung stehenden Rechenleistung sind die modellierbaren Bereiche nicht sehr groß oder es werden starke Vereinfachungen vorgenommen [11, 14]. Außerdem ist das Finite-Differenzen-Verfahren eine explizite Vorgehensweise, bei der in Zeitschritten vom jetzigen Zustand „0“ auf den Zustand „1“ der Zukunft extrapoliert wird. Die dabei auftretenden Instabilitäten sind ein großer Unsicherheitsfaktor, unter Umständen konvergiert

die Rechnung nicht. Aus diesen Gründen wurde in dieser Arbeit mit Finiten Elementen gerechnet. Auch Monte-Carlo-Simulationen mit einer diskreten Modellierung des Eisen-Gitters und den darin eingelagerten Kohlenstoffatomen können zur Lösung des Problems verwendet werden [24, 94, 95, 96]. Hier bleibt allerdings der Nachteil des wesentlich höheren Rechenaufwandes für den dargestellten Gitterausschnitt. Die zitierten Rechnungen verwenden den Ansatz von Cottrell und Bilby, wodurch ein geringerer Rechenaufwand entsteht, allerdings sind die Ergebnisse mit den oben aufgeführten Schwächen der zugrunde gelegten Theorie behaftet.

5.3 Schlussfolgerungen

In dieser Arbeit wird der Frage nach den Gründen für die verschiedenen Besonderheiten der mechanischen Eigenschaften von Dual-Phasen Stahl wie niedrigere Anfangssteifigkeit, kontinuierliche Streckgrenze und Abhängigkeit der Höhe der Streckgrenze vom Martensitgehalt mit verschiedenen Methoden nachgegangen. Die Antwort ergibt sich aus einer Kombination der Ergebnisse der verschiedenen Untersuchungen.

Anfangssteifigkeit

An wenige Stunden alten, im Labor hergestellten Proben wird im Zugversuch eine niedrigere Anfangssteifigkeit gemessen. Dabei bedeutet eine niedrigere Anfangssteifigkeit, dass der Verbund bei der ersten Belastung eine Steifigkeit geringer als sein E-Modul aufweist. Wird Dual-Phasen Stahl vorgedehnt, so hat er bei sofortiger Wiederbelastung auch eine niedrigere Anfangssteifigkeit, diese ist allerdings höher als die kurz nach dem Herstellen gemessene. Die niedrigere Steifigkeit bei Wiederbelastung wird auch bei einphasigen Stählen festgestellt [11] und wird üblicherweise auf das Ausbauchen von Versetzungen zurückgeführt [59]. Zugversuche an Proben, die einige Tage bei Raumtemperatur gelagert werden, ergeben eine Anfangssteifigkeit gleich dem E-Modul von Dual-Phasen Stahl ($\approx 200000 \text{ MN/m}^2$). Nur wenn in der thermo-mechanischen Simulation die Austenit-Martensit Phasenumwandlung der Inklusionen während der Herstellung berücksichtigt wird, zeigt sich, dass auch die Einheitszellen bei der ersten Belastung eine niedrigere Anfangssteifigkeit aufweisen. Durch die Volumenausdehnung der Inklusionen während der Phasenumwandlung entstehen Eigenspannungen, je nach Richtung und Lage der Eigenspannungen relativ zu den Inklusionen und der globalen Belastung verformt sich dort das Material unmittelbar bei Belastungsbeginn plastisch. Dadurch wird die Gesamtsteifigkeit des Materials herabgesetzt, es kommt zu einer niedrigeren Anfangssteifigkeit des Verbundes. Die im Experiment gegenüber den vorgedehnten Proben niedrigere Anfangssteifigkeit lässt darauf schließen, dass nicht nur freie (nicht durch Kohlenstoff festgesetzte) Versetzungen im Experiment für diesen Effekt verantwortlich sind, sondern auch die in der Simulation berechneten Eigenspannungen. Da bereits bei 5 %

Volumenanteil Martensit nahezu die gesamte Ferrit-Matrix des Modells durch die Volumenzunahme der Inklusionen plastisch verformt wird, ist der Spannungszustand in der Matrix nach dem Abkühlen nicht linear vom Martensit-Volumen im Dual-Phasen Stahl abhängig, sondern erreicht in allen Modellen mit dem betrachteten Anteilen Martensit in vielen Bereichen die Dehngrenze. Dies wird durch analytische Näherungsberechnungen bestätigt [63]. Da der für die niedrige Anfangssteifigkeit verantwortliche Spannungszustand in der Matrix nahezu unabhängig vom Martensitvolumen (zwischen 5 % und etwa 15 % Volumenanteil) ist, ist auch die niedrige Anfangssteifigkeit für alle betrachteten Martensitgehalte gleich.

Die nach einigen Tagen Lagerung höhere Anfangssteifigkeit, gleich dem E-Modul, ist auf Spannungsabbau der lokalen Eigenspannungen und auf das Festsetzen von Versetzungen zurückzuführen. Die Annahme, dass dafür die Diffusion von Kohlenstoff verantwortlich ist wird durch verschiedene Indizien gestützt: Die Abnahme des freien, also nicht in Versetzungsspannungsfeldern oder sonstwie gefangenem Kohlenstoff lässt sich mit Drehpendelversuchen messen. Die für diese Untersuchung durchgeführten Versuche an jungen Dual-Phasen Stählen zeigen eine signifikante Abnahme des freien Kohlenstoffes während der ersten Tage bei Raumtemperatur-Lagerung. Später ist keine Abnahme mehr festzustellen, was darauf schließen lässt, dass der Diffusionsprozess von Kohlenstoffatomen zu Versetzungen und zu Spannungsfeldern abgeschlossen ist. Dass bei Raumtemperatur der Zeitraum von einigen Tagen auch tatsächlich ausreicht, um Spannungsfelder von Versetzungen im Ferrit durch Diffusion mit Kohlenstoff anzureichern und die Versetzungen dadurch festzusetzen, zeigen die in Kapitel 4 angestellten Modellrechnungen. Außerdem kommen andere Prozesse wie Korngrenzen-Verschiebung oder Karbid-Bildung bei Raumtemperatur nicht in Betracht.

0,2 %-Dehngrenze

In Experimenten wird eine lineare Zunahme der Dehngrenze von Dual-Phasen Stahl mit dem Volumenanteil Martensit in der Probe festgestellt. Wird in einem einfachen mikro-mechanischen Modell das Fließverhalten einer weichen ferritischen Matrix mit harten martensitischen Inklusionen simuliert, wobei beide Materialien den selben E-Modul haben, so ist der Fließbeginn unabhängig vom Volumenanteil der harten Inklusionsphase. Dies stimmt mit den klassischen Modellen über das Verformungsverhalten von solchen Matrix-Inklusions-Materialien überein [33, 81], ist jedoch im Widerspruch zu den Experimenten. In Aufnahmen von Dual-Phasen Stahl, die mit einem Transmissions-Elektronen-Mikroskop gemacht wurden, sind im Ferrit in der Nähe von Martensit-Inseln deutlich mehr Versetzungen zu erkennen als in Bereichen, die weiter entfernt liegen. Die höhere Versetzungsdichte kann nur von plastischen Verformungen während des vorangegangenen Herstellprozesses stammen. Plastische Verformungen führen im Ferrit zu einer Verfestigung. Mit Ultramikrohärtemessungen konnte experimentell bestätigt werden, dass tatsächlich nahe der Martensit-Einschlüsse die Ferrit-Matrix eine höhere Festigkeit besitzt, wobei das Ausmaß vom Volumenanteil Martensit der Probe abhängt. Wird bei der Simulation die Abkühlung mit der Phasenumwandlung

berücksichtigt, so sind auch in der Einheitszelle große Teile der Matrix plastisch verformt und dadurch verfestigt bevor die Belastung im simulierten Zugversuch beginnt. Die Ergebnisse der zwei- und dreidimensionalen Finite-Element-Studien in Kapitel 3 zeigen außerdem, dass sich ein Skelett aus Martensit-Körnern mit Brücken aus verformungsverfestigtem Ferrit bildet. Aufgrund dieses Skeletts ist die Streckgrenze des Verbundmaterials aus Martensit-Inklusionen und verfestigtem Ferrit höher als die des unverformten Ferrits. Da das Ausmaß der Verformungsverfestigung vom Volumenanteil der Inklusionen abhängt, steigt die Streckgrenze des Dual-Phasen Stahles mit dem Martensitgehalt.

Der Eigenspannungszustand nach dem Herstellen hat keinen Einfluss auf die Streckgrenze. In der Berechnung setzt bei allen Finiten Elementen des Ferrits spätestens bei etwa 0,3% Dehnung, was etwa 0,2% plastischer Dehnung am Gesamtmodell entspricht, die plastische Verformung ein, d. h. bereits an dieser Stelle haben die Eigenspannungszustände aus der Herstellung keinen Einfluss mehr auf das Verfestigungsverhalten.

Kontinuierlicher Fließbeginn

Der kontinuierliche Fließbeginn von Dual-Phasen Stahl ist Folge des Eigenspannungs- und Vordehnungszustands in der Matrix. Dabei ist der Eigenspannungszustand für die sehr früh einsetzende plastische Verformung (etwa bei 50 MPa Zugspannung) in Zugversuchen von unbehandelten und nicht gealterten Proben verantwortlich. Die Vordehnungen erhöhen die Festigkeit in lokalen Bereichen der Matrix, dieser inhomogene Vorverfestigungszustand geht auch bei einer Raumtemperaturalterung nicht verloren. Im Zugversuch beginnen verschiedene Bereiche bei unterschiedlichen globalen Spannungen zu Fließen, wodurch eine ausgeprägte Streckgrenze unterdrückt wird. Die Gründe, warum einige Dual-Phasen Stähle nach einer thermischen Behandlung bei etwa 160 °C für 20 min. eine ausgeprägte Streckgrenze im Zugversuch zeigen [18] und andere, wie die für diese Arbeit hergestellten, nicht, können hier nicht eindeutig identifiziert werden. Die Ergebnisse der Drehpendel-Versuche lassen darauf schließen, dass bei der thermischen Behandlung Karbide ausgeschieden werden. Die Menge und die Art dieser Karbide und damit das Ausmaß der Ausscheidungshärtung der Matrix sind von der Legierungszusammensetzung der Matrix abhängig. Dies legt die Vermutung nahe, dass das Auftreten einer ausgeprägten Streckgrenze durch die Art der Legierung des Dual-Phasen Stahles bedingt ist.

5.4 Ausblick

Die Spannungs-Dehnungs Diagramme aus den Berechnungen zeigen bei plastischen Dehnungen deutlich über 0,2% eine wesentlich niedrigere Verfestigungsrate als die in den Experimenten gemessene. Der Vordehnungszustand in der Ferrit-Matrix spielt bei solchen Verformungen im Zugversuch eine untergeordnete Rolle, hier dominieren offensichtlich die

Effekte auf Gitterebene (Versetzungen) aus der Verformungsinkompatibilität zwischen weicher Matrix und harten Inklusionen. Aufgrund der stark unterschiedlichen Verformungen der beiden Konstituenten bilden sich in der weicheren Phase (Ferrit) starke Verformungsgradienten aus, dies bedeutet die Bildung von hohen Versetzungsdichten nahe der Inklusionen („geometrically necessary dislocations“) wodurch es zu einer sehr hohen Verfestigung des Ferrits kommt [2]. In der Simulation ist die Versetzungsbildung nicht abgebildet.

Erdogan *et al.* [30] haben in Experimenten eine unterschiedliche 0,2%-Dehngrenze für Druck- und Zugbelastung an Dual-Phasen Stählen gemessen. Dies steht im Widerspruch zu den hier angestellten Berechnungen. Sie führen den Unterschied auf einen „mean tensile residual stress“ in der Ferrit-Matrix zurück. Da in der Matrix im Mittel Zugspannungen überwiegen, soll die Dehngrenze bei Zugbelastung früher erreicht sein, da aufgrund der Vorspannung in der Matrix eine geringere äußere Last ausreicht, um in der Matrix Fließen hervorzurufen. Diese Annahme wird durch die Simulationsrechnungen nicht bestätigt: Der frühe Fließbeginn des Verbundes ist, wie von Chen *et al.* [18] angenommen, Folge von Druckspannungen in der Matrix. So sind die von Erdogan *et al.* [30] festgestellten Unterschiede in den Zug- und Druckversuchen auch sehr gering. Dies wird auf eine nicht näher beschriebene alterungsbedingte Spannungsabnahme in der Matrix zurückgeführt, leider fehlen Angaben zum Alter der Proben.

Zu der Beantwortung der Frage, ob sich bei Raumtemperatur im Dual-Phasen Stahl so genannte Niedrig-Temperatur Karbide ausscheiden, wie z. B. von De [25] festgestellt, tragen die hier ermittelten Ergebnisse nur bedingt bei. Nachdem Cottrell und Bilby [20] davon ausgegangen sind, dass eine Versetzung auf einer zu ihr senkrecht stehenden Atomebene nur etwa 1 bis 2 Kohlenstoffatome fangen kann, wurde bereits früh aufgrund von Messungen, die etwa 10-15 Atome ermittelten, angenommen, dass sich Kohlenstoff in Versetzungsnähe als Karbid ausscheidet [79]. Inzwischen ist bekannt, dass Versetzungen wesentlich mehr Atome fangen können [19] ohne dabei Karbide zu bilden. Die bei thermischen Behandlungen um etwa 200 °C gebildeten ϵ -Karbide werden bei Raumtemperatur sicher nicht ausgeschieden [1, 25]. Als Beweis für die Bildung der Niedrig-Temperatur Karbide wird von De [25] die unterschiedliche Zunahme der 0,2%-Dehngrenze bei unterschiedlichen Alterungsbedingungen angeführt. Diese Größe ist aber schon für den tatsächlichen Fließbeginn u. U. wenig aussagekräftig [49]. Es bleibt festzustellen, dass für die Abnahme an freiem Kohlenstoff in der Matrix, wie sie in Drehpendel-Versuchen festgestellt wird, keine Karbid-Bildung notwendig ist.

In dieser Arbeit wurde das Verformungsverhalten von Dual-Phasen Stahl am Beginn der plastischen Verformung untersucht. Das Materialverhalten bei der Entlastung ist allerdings in Hinblick auf die Berechnung von Tiefziehprozessen auch beachtenswert: Der Entlastungsast folgt im Diagramm eines Zugversuchs keineswegs einer Geraden sondern biegt von der Geraden, der er zu Beginn folgt, ab [92]. Dieses Verhalten kann Probleme bei der Vorhersage des Spring-Back-Effekts beim Tiefziehen bereiten. Bekannt ist, dass Stahl bei einer Wieder-

belastung in die andere Richtung, also Druck anstelle von Zug, sich deutlich früher, also bei niedrigerem Lastniveau plastisch verformt. Dass dieser Bauschinger-Effekt allerdings bei der Entlastung auftritt, deutet darauf hin, dass die weiche Matrix-Phase des Dual-Phasen Stahles bereits an dieser Stelle plastischen Verformungen ausgesetzt ist.

Kapitel 6

Zusammenfassung

Das Anfangsverformungsverhalten von Dual-Phasen Stählen ist entscheidend von der Austenit-Martensit Phasenumwandlung während des schnellen Abkühlens nach der interkritischen Glühung beeinflusst. Die Abhängigkeit der Streckgrenze vom Martensitgehalt, der kontinuierliche Fließbeginn und das Verfestigungsverhalten zu Beginn der plastischen Verformung lassen sich nur mit den Auswirkungen der Phasenumwandlung erklären. Die hohen Verfestigungsrate im weiteren Verlauf der plastischen Verformung ist dagegen nicht direkte Folge der Phasenumwandlung; das Verhalten bei plastischen Dehnungen über 0,2% wird durch das klassische Modell der geometrisch notwendigen Versetzungen gut beschrieben.

Unmittelbar nach dem Herstellen weist Dual-Phasen Stahl eine niedrigere Anfangssteifigkeit als sein E-Modul auf. Dies beruht auf lokalen Eigenspannungszuständen in Verbindung mit freien mobilen Versetzungen („free mobile dislocations“) im Ferrit in der Nähe der Martensit-Inklusionen. Die Eigenspannungszustände und die Versetzungen entstehen aufgrund der Volumenzunahme der Inklusionen bei der Phasenumwandlung, die Eigenspannungen können dabei die Fließgrenze des Ferrits erreichen. Je nach Richtung und Lage der Eigenspannungen relativ zu den Inklusionen und der globalen Belastung verformt sich die Ferrit-Matrix in manchen Bereichen unmittelbar bei Belastungsbeginn plastisch. Dadurch wird die Gesamtsteifigkeit des Materials herabgesetzt, der Verbund hat eine niedrigere Anfangssteifigkeit. Innerhalb von Tagen nach dem Herstellen kommt es bei Raumtemperatur durch Kohlenstoffdiffusion zu einem Abbau der lokalen Eigenspannungen und zu einem Festsetzen der freien Versetzungen. Nach einigen Tagen Lagerung hat der Dual-Phasen Stahl im Zugversuch eine Anfangssteifigkeit gleich seinem E-Modul.

Die lineare Zunahme der 0,2%-Dehngrenze mit dem Martensitgehalt ist Folge der plastischen Verformung und der damit einhergehenden Verfestigung der Matrix aufgrund des Volumensprungs der Austenit-Martensit-Inklusionen bei der Phasenumwandlung während der Abkühlung. Es bildet sich ein Skelett aus verformungsverfestigtem Ferrit zwischen den Martensit-Körnern. Die Streckgrenze des Verbundmaterials ist höher als die des unverformten Ferrits. Da das Ausmaß der Verformungsverfestigung von dem Volumenanteil der

Inklusionen abhängt, steigt die Streckgrenze des Dual-Phasen Stahles mit dem Martensitgehalt. Aufgrund des sehr inhomogenen Vordehnungszustands im Ferrit bildet sich je nach Legierung auch nach einer thermischen Behandlung (170 °C, 20 min.) keine ausgeprägte Streckgrenze aus.

Anhang A

Materialparameter für die Diffusionsberechnung

Tabelle A.1: Konstanten und Parameter

Raumtemperatur (RT)	T	293	K
Boltzmannkonstante	k	$1,3807 \cdot 10^{-23}$	J/K
Gaskonstante	R_m	8,31451	J/(mol · K)
Gitterkonstante (krz-Fe)	a	$2,8662 \cdot 10^{-10}$	m
Burgersvektor (krz: $a/2\langle 111 \rangle$)	b	$2,4822 \cdot 10^{-10}$	m
Diffusionskonstante von Kohlenstoff (293K, α -Fe)	D_C	$2,12 \cdot 10^{-21}$	$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$
Schubmodul, α -Fe	G	$8,6 \cdot 10^4$	N mm^{-2}
Querdehnzahl, α -Fe	ν	0,291	□

Für die Diffusionskonstante von Kohlenstoff in α -Eisen wird hier das Gesetz $D_C = 2 \cdot 10^{-6} \cdot e^{-\frac{Q}{R_m T}} \text{m}^2/\text{s}$ mit $Q = 84,0 \cdot 10^3 \text{ J/mol}$ verwendet, ermittelt von Wert [87]. Der Schubmodul G und die Querdehnzahl ν sind [52] entnommen.

Stoffgesetz

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \end{pmatrix} = \frac{1}{2G(1+\nu)} \begin{pmatrix} 1 & -\nu & -\nu & 0 & 0 & 0 \\ -\nu & 1 & -\nu & 0 & 0 & 0 \\ -\nu & -\nu & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+\nu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1+\nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1+\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \tau_{12} \\ \tau_{23} \\ \tau_{31} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

Anhang B

Bezeichnungen

σ	Zug- oder Druckspannung
τ	Schubspannung
ϵ	Dehnung
ϵ_{peeq}	plastische Vergleichsdehnung
γ	Scherung
σ_{ik}	Spannungen
e_i, ϵ_{ik}	Verzerrungen
T	Spannungstensor
S	Verzerrungstensor
U	Energie
u	Energiedichte
Γ	Konzentration
c	Löslichkeit
c^A	Atomkonzentration
A_r	Atommasse
F	Kraft
ρ	Versetzungsdichte
T	Temperatur
Ξ	Ortskoordinate
r	Ortskoordinate (Radius)
Φ	Ortskoordinate (Winkel)
xyz	kartesisches Koordinatensystem
A, B	Drehmatrizen
$\xi\eta$	kartesische Ortskoordinaten
A_i	Flächen der i Finiten Elemente
N_C	Anzahl Kohlenstoffatome

Literaturverzeichnis

- [1] Abe, H.: *Carbide precipitation during ageing treatments*, Scan. J. of Met. 13, (1984), S. 226-239.
- [2] Ashby, M. F.: *The deformation of plastically non-homogeneous materials*, Phil. Mag. 21, (1969), S. 399-424.
- [3] Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D. und Cailletaud, G.: *Intergranular and intragranular behaviour of polycrystalline aggregates. Part 1: F. E. model*, Int. J. Plast. 17, (2001), S. 513-536.
- [4] Barbe, F., Forest, S. und Cailletaud, G.: *Intergranular and intragranular behaviour of polycrystalline aggregates. Part 2: Results*, Int. J. Plast. 17, (2001), S. 537-563.
- [5] Barnett, D. M., Wong, G. und Nix, D.: *The binding force between a Peierls-Nabarro edge dislocation and a Fermi-Dirac solute atmosphere*, Acta Met. 30, (1982), S. 2035-2041.
- [6] Barrand, P. und Leak, G. M.: *On the density of dislocation atmospheres*, Acta Met. 11, (1963), S. 158-160.
- [7] Becker, J., Hornbogen, E. und Stratmann, P.: *Dualphasen-Gefüge*, Z. Metallkunde 71, (1980), S. 27-31.
- [8] Beshers, D. N.: *On the distribution of impurity atoms in the stress field of a dislocation*, Acta Met. 6, (1958), S. 521-523.
- [9] Bhattacharyya, A., Sakaki, T. und Weng, G. J.: *The influence of martensite shape, concentration and phase transformation strain on the deformation behaviour of stable dual-phase steels*, Met. Trans. A 24A, (1993), S. 301-314.
- [10] Bilby, B. A. und Christian, J. W.: *The crystallography of martensitic transformations*, J. Iron Steel Inst. 197, (1961), S. 122-131.
- [11] Blaimschein, M., Radlmayr, K. M., Pichler, A., Till, E. und Stiaszny, P.: *Bake hardening effect in components*, Proceedings of the 19th IDDRG Biennial Congress, (1996), S. 445-458.

- [12] Blavette, D., Cadel, E., Fraczkiewicz, A. und Menand, A.: *Three-dimensional atomic-scale imaging of impurity segregation to line defects*, Science 286, (1999), S. 2317-2319.
- [13] Borst, G.: *Determination of nitrogen and carbon interstitially dissolved in continuously-annealed steel sheets by means of a fully automatic torsional pendulum*, Steel Research 61, (1990), S. 121-130.
- [14] Bullough, R. und Newman, R. C.: *The growth of impurity atmospheres around dislocations*, Proc. Roy. Soc. London A266, (1962), S. 198-208.
- [15] Bullough, R. und Newman, R. C.: *Impurity precipitation on dislocations - a theory of strain ageing* Proc. Roy. Soc. London A266, (1962), S. 209-221.
- [16] Cadel, E., Fraczkiewicz, A. und Blavette, D.: *Atomic scale observation of Cottrell atmospheres in B-doped FeAl (B2) by 3D atom probe field ion microscopy*, Mat. Sci. Eng. A A309-310, (2001), S. 32-37.
- [17] Chang, L., Barnard, S. J., und Smith G. D. W.: *The segregation of carbon atoms to dislocations in low-carbon martensites: Studies by field ion microscopy and atom probe microanalysis* in: *Fundamentals of ageing and tempering in bainitic and martensitic steel products*, Krauss, G. und Repas, P. E. (Herausgeber), Iron and Steel Society, Warrendale, PA, USA, (1992), S. 19-28.
- [18] Chen, Q., Pawelski, O. und Kaspar, R.: *Contribution to the deformation characteristics of dual-phase steels*, Z. Metallkunde 76, (1985), S. 348-352.
- [19] Cocharadt, A. W., Schoeck, G. und Wiedersich, H.: *Interaction between dislocations and interstitial atoms in body-centered cubic metals*, Acta Met. 3, (1955), S. 533-537.
- [20] Cottrell, A. H. und Bilby, B. A.: *Dislocation theory of yielding and strain ageing of iron*, Proc. Phys. Soc. London A62, (1949), S. 49-62.
- [21] Cottrell, A. H.: *Dislocations and plastic flow in crystals*, Oxford Univ. Press London, (1953)
- [22] Davies, R. G.: *Influence of martensite composition and content on the properties of dual-phase steels*, Met. Trans. A 9A, (1978), S. 671-679.
- [23] Davies, R. G. und Magee, C. L.: *Physical metallurgy of automotive high strength steels* in: *Structure and properties of dual-phase steels*, Kot, R. A. und Morris, J. W. (Herausgeber), AIME, New York, (1979), S. 1-19.
- [24] De, A. K., Soenen, B., De Cooman, B. C. und Vandeputte, S.: *Carbon distribution between matrix, grain boundaries and dislocations in ultra low carbone bake hardenable steels*, 42. MWSP Conf. Proc., ISS 38, (2000), S. 595-606.

- [25] De, A. K.: *Static strain aging in ultra low carbon steels: Effect of interstitial content, dislocation density and grain boundaries*, Doktorarbeit an der Universität Gent, Belgien, (2001).
- [26] Desch, C. H.: *Solidification of metals from liquid state*, Mat. Trans. JIM 22, (1919), S. 241-276.
- [27] Dirichlet, G. L.: *Über die Reduktion der positiven quadratischen Formen mit drei unbestimmten ganzen Zahlen*, J. Reine u. Angew. Math. 40, (1850), S. 209-227.
- [28] Douthwaite, R. M. und Evans, J. T.: *Interaction between a tetragonal distortion and a $\langle 111 \rangle$ screw dislocation in an anisotropic cubic crystal*, Scripta Met. 7, (1973), S. 1019-1026.
- [29] El-Sesy, I. A. und El-Baradie, Z. M.: *Influence of carbon and/or iron carbide on the structure and properties of dual-phase steels*, Mat. Letters, (2002), in Druck.
- [30] Erdogan, M. und Priestner, R.: *Effect of epitaxial ferrite on yielding and plastic flow in dual phase steel in tension and compression*, Mat. Sci. and Technology 15, (1999), S. 1273-1284.
- [31] Eshelby, J. D.: *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems*, Proc. Roy. Soc. A241, (1957), S. 376-396.
- [32] Eshelby, J. D.: *The elastic field outside an ellipsoidal inclusion*, Proc. Roy. Soc. A252, (1959), S. 561-569.
- [33] Fischmeister, H. und Karlsson, B.: *Plastizitätseigenschaften grob-zweiphasiger Werkstoffe*, Z. Metallkunde 68, (1977), S. 311-327.
- [34] Fleischer, R. L.: *Solid-solution hardening* in: Peckner, D.: *The strengthening of metals*, Reinhold, New York, (1964), S. 93-140.
- [35] Halton, J. H.: *On the efficiency of certain quasi random sequences of points in evaluating multi dimensional integrals*, Numerische Mathematik 2, (1960), S. 84-90.
- [36] Haasen, P. in Nabarro, F. R. N. (Herausgeber): *Dislocations in solids Vol. 4*, North-Holland, Amsterdam, (1979), S. 155-189.
- [37] Hesse, B., Sonne, H.-M. und Robiller, G.: *Zuverlässige Dehngrenzen im rechnergesteuerten Zugversuch ermitteln*, Materialprüfung 33, (1991), S. 208-211.
- [38] Hettwer, K.-J.: *Untersuchung von Alterungsvorgängen in unlegierten Stählen mit Hilfe von Dämpfung und Elektronenmikroskopie*, Dissertation an der TU Braunschweig, (1976).

- [39] Heumann, T.: *Diffusion in Metallen*, Springer, Berlin, (1992).
- [40] Honeycombe, R. W. K.: *The plastic deformation of metals*, St. Martin's Press, New York, (1968).
- [41] Hull, D. und Bacon, D. J.: *Introduction to dislocations, 3. ed.*, Pergamon Press, Oxford, (1984), S. 210-250.
- [42] Hibbit, Karlsson, Sorensen: *ABAQUS theory manual, version 5.8*, (1998).
- [43] Jiang, Z., Guan, Z. und Lian, J.: *Effects of microstructural variables on the deformation behaviour of dual-phase steel*, Mat. Sci. Eng. A A190, (1995), S. 55-64.
- [44] Johnson, W. A. und Mehl, R. F.: *Reaction kinetics in processes of nucleation and growth*, Metals Technology 140, (1939), S. 416-458.
- [45] Kalish, D. und Cohen, M.: *Structural changes and strengthening in the tempering of martensite*, Mat. Sci. Eng. 6, (1970), S. 156-166.
- [46] Kelvin, W. T.: *On homogeneous division of space*, Proc. Roy. Soc. London 55, (1894), S. 1-17.
- [47] Kurdjumov, G. und Kaminsky, E.: *Eine röntgenographische Untersuchung der Struktur des gehärteten Kohlenstoffstahls*, Z. Phys. 53, (1929), S. 696-707.
- [48] LePera, F. S.: *Improved etching technique to emphasize martensite and bainite in high-strength dual-phase steel*, J. Metals 32, (1980), S. 38-39.
- [49] Liedl, U., Traint, S. und Werner, E. A.: *Forschungsbericht A1/7 aus dem Christian Doppler Laboratorium für moderne Mehrphasenstähle*, Lehrstuhl für Mechanik, TU München, (2001).
- [50] Liedl, U., Traint, S. und Werner, E. A.: *An unexpected feature of the stress-strain diagram of dual-phase steels*, Comp. Mat. Sci. 25, (2002), S. 122-128.
- [51] Liedl, U., Werner, E. A., Pichler, A. und Stiaszny, P.: *Initial flow behaviour of dual-phase steels*, 43. MWSP Conf. Proc., ISS 39, (2001), S. 175-184.,
- [52] Mason, W. P.: *Piezoelectric crystals and their applications to ultrasonics*, Van Nostrand, New York, (1950).
- [53] Matzke, E. B.: *The three-dimensional shape of bubbles in foam - An analysis of the role of surface forces in three-dimensional cell shape determination*, American J. Botany 33, (1946), S. 58-80.

- [54] Matlock, D. K., Krauss, G., Ramos, L. F. und Huppi, G. S.: *A correlation of processing variables with deformation behaviour of dual-phase steels* in: *Structure and properties of dual-phase steels*, Kot, R. A. und Morris, J. W. (Herausgeber), AIME, New York, (1979), S. 62-90.
- [55] Meijering, J. L.: *Interface area, edge length, and number of vertices in crystal aggregates with random nucleation*, Philips Res. Rep. 8, (1953), S. 270-290.
- [56] Messner, C. und Liedl, U.: *Mikromechanische Berechnungen eines Duplex-Stahles mit Finiten Elementen auf Basis eines Voronoi-Netzes*, Lehrstuhl für Werkstoffkunde und Werkstoffmechanik, TU München, (2002), unveröffentlicht.
- [57] Miller, M. K., Beaven, P. A. und Smith, G. D. W.: *A study of the early stages of tempering of iron-carbon martensites by atom probe field ion microscopy*, Met. Trans. A 12, (1981), S. 1197-1204.
- [58] Nabarro, F. R. N.: *Dislocations in a simple cubic lattice*, Proc. Phys. Soc. 59, (1947), S. 256-272.
- [59] Nowick, A. S. und Berry, B. S.: *Anelastic relaxation in crystalline solid*, Academic Press, Amsterdam, (1972).
- [60] Nygård, M. und Gudmundson, P.: *Three-dimensional periodic Voronoi grain models and micromechanical FE-simulations of a two-phase steel*, Comp. Mat. Sci. 24, (2002), S. 513-519.
- [61] Owen, D. R. J. und Hinton, E.: *Finite Elements in plasticity: Theory and practice*, Pinridge, Swansea (UK), (1980).
- [62] Peierls, R.: *The size of a dislocation*, Proc. Phys. Soc. 52, (1940), S. 34-37.
- [63] Sakaki, T., Sugimoto, K., Fukuzato, T.: *Role of internal stress for continuous yielding of dual-phase steel*, Acta Met. 31, (1983), S. 1737-1746.
- [64] Sakamoto, M.: *Diffusion equation and Cottrell atmosphere dragging of edge dislocations in high concentration solid solutions*, Mat. Trans. JIM 30, (1989), S. 337-344.
- [65] Sarosiek, A. M., Grujicic, M. und Owen, W. S.: *The importance of the heterogeneity of the deformation in the ferrite phase of a dual-phase steel*, Scripta Met. 18, (1984), S. 353-356.
- [66] Schmid, E. und Boas, W.: *Kristallplastizität mit besonderer Berücksichtigung der Metalle*, Springer, Berlin, (1935).

- [67] Seeger, A.: *The mechanism of glide and work hardening in face-centered cubic and hexagonal close-packed metals* in: *Dislocations and mechanical properties of crystals*, Fisher, C. (Herausgeber), Wiley, New York, (1956), S. 243-329.
- [68] Smith, C. S.: *Grain shapes and other metallurgical applications of topology in Metal interfaces*, American Society of Metals, New York, (1952), S. 65-113.
- [69] Smith, C. S.: *Some elementary principles of polycrystalline microstructure*, Metallurgical Reviews 9, (1964), S. 1-48.
- [70] Van Snick, A., Lips, K., Vandeputte, S., De Cooman, B. C. und Dilewijns, J.: *Effect of carbon content, dislocation density and carbon mobility on bake hardening* in: *Modern LC and ULC sheet steels for cold forming: Processing and properties*, Conference book, Bleck, E. (Herausgeber), RWTH Aachen, (1998), S. 413-424.
- [71] Snoek, J.: *Effect of small quantities of carbon and nitrogen on the elastic and plastic properties of iron*, Physica 8, (1941), S. 711-733.
- [72] Speich, G. R. und Miller, R. L.: *Mechanical properties of ferrite-martensite steels* in: *structure and properties of dual-phase steels*, Kot, R. A. und Morris, J. W. (Herausgeber), AIME, New York, (1979), S. 145-182.
- [73] Speich, G. R.: *Physical metallurgy of dual-phase steels* in: *Fundamentals of dual-phase steels*, Kot, R. A. und Bramfitt, B. L. (Herausgeber), AIME, New York, (1981), S. 3-45.
- [74] Stiaszny, P., Tragl, E., Pichler, A., Angerer, R., Hackl, M. und Hackl, W.: *Development and application of a modern and effective annealing simulation equipment for process and material development* in: *Conference Proceedings TERMIC 2000*, Las Vegas.
- [75] Takeuchi, S. und Argon, A. S.: *Glide and climb resistance to the motion of an edge dislocation due to dragging a Cottrell atmosphere*, Phil. Mag. A 40, (1979), S. 65-75.
- [76] Tanaka, T., Nishida, M., Hashiguchi, K. und Kato, T.: *Formation and properties of ferrite plus martensite dual-phase structures* in: *Structure and properties of dual-phase steels*, Kot, R. A. und Morris, J. W. (Herausgeber), AIME, New York, (1979), S. 221-241.
- [77] Tegat, W. J. M.: *Elements of mechanical metallurgy*, Macmillan, New York, (1966).
- [78] Thomas, G. und Koo, J. K.: *Developments in strong, ductile ferritic-martensitic steels* in: *Structure and properties of dual-phase steels*, Kot, R. A. und Morris, J. W. (Herausgeber), AIME, New York, (1979), S. 183-201.
- [79] Thomas, W. R., und Leak, G. M.: *The strain ageing of alpha-iron*, J. Iron and Steel Inst. 180, (1955), S. 155-161.

- [80] Thomson, W.: *On the division of space with minimum partial area*, Phil. Mag. J. Sci. 24, (1887), S. 503-514.
- [81] Tomota, Y., Kuroki, K., Mori, T., Tamura, I.: *Tensile deformation of two-ductile-phase alloys—Flow curves of alpha-gamma Fe-Cr-Ni alloys*, Mat. Sci. Eng. 24, (1976), S. 85-94.
- [82] Traint, S.: *Phase transformations and mechanical properties of low-alloyed dual-phase and TRIP-Steels*, Dissertation am Lehrstuhl für Werkstoffe und Werkstoffmechanik, TU München, (2002).
- [83] Verhoeven, J. D.: *Fundamentals of physical metallurgy*, Wiley, New York, (1975).
- [84] Voronoi, G.: *Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques*, J. Reine u. Angew. Math. 134, (1908), S. 198-287.
- [85] Wechsler, M. S., Lieberman, D. S. und Read, T. A.: *On the theory on the formation of martensite*, J. Metals 197, (1953), S. 1503-1515.
- [86] Weinhandl, H.: *Über die Computer Simulation von Nachbarschaftsverhältnissen in Zweiphasengefügen*, Dissertation Montanuniversität Leoben, (1996).
- [87] Wert, C. A.: *Diffusion coefficient of C in α -iron*, Physical Review 79, (1950), S. 601-605.
- [88] Weyer, S., Fröhlich, A., Riesch-Oppermann, H., Cizelji, L. und Kovac, M.: *Automatic finite element meshing of planar Voronoi tessellations*, Eng. Frac. Mech. 69, (2002), S. 945-958.
- [89] Wilde, J., Cerezo, A. und Smith, G. D. W.: *Three-dimensional atomic-scale mapping of a Cottrell atmosphere around a dislocation in iron*, Scripta Mat. 43, (2000), S. 39-48.
- [90] Williams, R. E.: *Space-filling polyhedron: Its relation to aggregates of soap bubbles, plant cells, and metal crystallites*, Science 161, (1968), S. 276-277.
- [91] Wu, M. S. und Guo, J.: *Analysis of a sector crack in a three-dimensional Voronoi polycrystal with microstructural stresses*, Trans. of the ASME 67, (2000), S. 50-58.
- [92] Yoshida, F., Uemori, T. und Fujiwara, K.: *Elastic-plastic behaviour of steel sheets under in-plane cyclic tension-compression at large strain*, J. Plasticity 18, (2002), S. 633-659.
- [93] Zander, R.: *FE-Analyse des Verformungsverhaltens eines Dual-Phasen Stahles*, Semesterarbeit am Lehrstuhl für Mechanik, TU München, (2001).

- [94] Zhao, J. Z., De, A. K. und De Cooman, B. C.: *A model for the Cottrell atmosphere formation during aging of ultra low carbon bake hardening steels*, ISIJ International 40, (2000), S. 725-730.
- [95] Zhao, J. Z., De, A. K. und De Cooman, B. C.: *Kinetics of Cottrell atmosphere formation during strain aging of ultra-low carbon steels*, Materials Letters 44, (2000), S. 374-378.
- [96] Zhao, J. Z., De, A. K. und De Cooman, B. C.: *Formation of the Cottrell atmosphere during strain aging of bake-hardenable steels*, Met. Mat. Trans. A 32, (2001), S. 417-423.
- [97] Zienkiewicz, O. C.: *The finite element method*, McGraw-Hill, London, (1977).