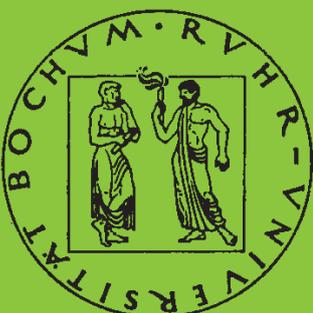


Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik

Claus Oberste-Brandenburg

**Ein Materialmodell zur Beschreibung
der Austenit-Martensit Phasentransformation
unter Berücksichtigung der
transformationsinduzierten Plastizität**

Heft Nr. 117



RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

INSTITUT FÜR MECHANIK
RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

Claus Oberste-Brandenburg

Ein Materialmodell zur Beschreibung der Austenit-Martensit
Phasentransformation unter Berücksichtigung der
transformationsinduzierten Plastizität.

Herausgeber: Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum und wurde von der dortigen Fakultät für Maschinenbau als Dissertation angenommen.

Für die Anregung zu dieser Arbeit, die Betreuung und die Übernahme des Referats danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Bruhns. Herrn Prof. Dr.-Ing. Waller danke ich für sein Interesse und die Übernahme des zweiten Referates.

Für die angenehme Arbeitsatmosphäre und gute Zusammenarbeit möchte ich mich bei allen aktuellen und ehemaligen Mitarbeitern des Lehrstuhls für Technische Mechanik herzlich bedanken. Die zahlreichen fachlichen Diskussionen haben die vorliegende Arbeit entscheidend geprägt.

Essen, im Juni 1999

Claus Oberste-Brandenburg

Referenten: Prof. Dr.-Ing. Otto-T. Bruhns
Prof. Dr.-Ing. Heinz Waller

Tag der Einreichung: 07.04.1999

Tag der mündlichen Prüfung: 21.06.1999

©1999 Dr.-Ing. Claus Oberste-Brandenburg
Kirchstr. 65
45289 Essen

Alle Rechte vorbehalten. Auch die fotomechanische Vervielfältigung des Werkes (Fotokopie, Mikrokopie) oder von Teilen daraus bedarf der vorherigen Zustimmung des Autors.

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Materialmodell zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasenumwandlung unter Berücksichtigung der transformationsinduzierten Plastizität (TRIP) entwickelt. Das Modell ist zur Berechnung ausgedehnter Strukturen einsetzbar.

Eine lokale Betrachtung der Energie- und Entropiebilanz an der Phasengrenze bildet den Ausgangspunkt zur Identifikation der thermodynamischen Kraft und des thermodynamischen Flusses bei Beschreibung der Transformationskinetik. Für beide Größen muß für den allgemein nichthydrostatischen Spannungszustand eine tensorielle Beschreibung verwendet werden. Im zweiten Teil der Arbeit bilden diese Größen die Basis zur Entwicklung eines Stoffgesetzes zur Beschreibung des TRIP-Phänomens. Es wird das unterschiedliche mechanische Verhalten der Phasen, insbesondere die stark unterschiedlichen Fließgrenzen, berücksichtigt.

Das entwickelte Modell wurde in das Finite Elemente Programm MARC implementiert, womit sowohl das Material- als auch das Strukturverhalten simuliert wurde. Es konnten sowohl die experimentell beobachtete starke Abhängigkeit der Transformationskinetik von dem elasto-plastischen Verhalten der Phasen als auch die Orientierungsabhängigkeit der Martensiteinschlüsse von dem global herrschenden Spannungszustand aufgezeigt werden.

Summary

In this thesis, a model to describe the austenite martensite transformation was developed. The transformation induced plasticity (TRIP) was taken into consideration. The model can be used to design complex structures.

A local examination of the energy and entropy balance at the phase boundary serves as the starting point for the identification of the thermodynamical driving force and the thermodynamic flow. For both, a tensorial description is necessary for a general non-hydrostatically stressed solid. In the second part, a material law for the description of TRIP-Steels was developed based on the values derived in the first part. The different mechanical behavior of the phases, especially the differing yield stresses, was taken into account.

The model developed was implemented into the finite element program MARC. Simulations of the material and the structural behavior were performed. The experimentally observed strong dependence of the transformation kinetics on the yield stress of the austenite and the dependence of the orientation of the martensite inclusion on the stress state could be verified.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Zum Begriff der transformationsinduzierten Plastizität	3
2.1	Klassifikation von Phasenübergängen in Feststoffen	3
2.2	Klassifizierung der Austenit-Martensit Transformation	7
2.3	Modelle zur Beschreibung der Austenit-Martensit Transformation	8
2.3.1	Modellierungskonzepte	9
2.3.2	Beschreibung der Transformationskinetik	10
2.3.3	Beschreibung der transformationsinduzierten Plastizität	13
3	Thermomechanischer Rahmen	16
3.1	Allgemeine Betrachtungen	16
3.1.1	Kinematik und Spannungsmaße	16
3.1.2	Differentiation nach der Zeit	17
3.1.3	LEGENDRE-Transformation	18
3.2	Thermomechanik eines homogenen Stoffes	21
3.2.1	Bilanzgleichungen	21
3.2.2	Thermodynamische Konsistenz	23
3.2.3	Thermomechanische Kopplung	25
3.3	Betrachtungen an der Phasengrenze	26
3.3.1	Bezeichnungen	26
3.3.2	Bilanzgleichungen	28
3.3.3	Beschreibung der Transformationskinetik	28
3.4	Thermomechanik eines heterogenen Stoffes	34
3.4.1	Mittelungsvorschriften	34
3.4.2	Bilanzgleichungen	37
3.4.3	Beschreibung der Transformationskinetik	39
3.4.4	Aufspaltung der Phasentransformationstensoren	45
3.4.5	Erweiterung auf einen mehrphasigen Körper	46

4	Konstitutive Beziehungen	50
4.1	Mittelung	51
4.1.1	Mittelung der Verzerrungen	52
4.1.2	Mittelung der Spannungen	54
4.2	Beschreibung der Transformationskinetik	58
4.3	Materialmodell der Meso-Ebene	65
4.4	Wärmeleitungsproblem	68
4.5	Thermodynamische Konsistenz	68
4.6	Spezifikation der Materialfunktionen und Beispielrechnungen	71
4.6.1	Transformationskinetik	71
4.6.2	Meso-Stoffgesetz	74
4.6.3	Ausgewählte Aspekte des Stoffgesetzverhaltens	89
5	Strukturverhalten	97
5.1	Stirnabschreckversuch	97
5.2	Oberflächenhärtung eines Zylinders	101
6	Zusammenfassung und Ausblick	104
A	Aufbereitung des Stoffgesetzes zur Verwendung in dem FEM-System MARC/Mentat	106
A.1	Allgemeines	106
A.2	Programmierung der MAXWELL-CATTANEO Wärmeleitungsgleichung . . .	107
B	Zusammenstellung des Differentialgleichungssystems und der Parame- ter zur Berechnung der Strukturen im Kapitel 5	109
B.1	Differentialgleichungssystem	109
B.2	Parameter	112
	Literaturverzeichnis	113

Verwendete Symbole

lateinische Symbole

c_p	spezifische isobare Wärmekapazität
c_v	spezifische isochore Wärmekapazität
$c_1^\alpha, c_2^\alpha, c_4^\alpha, c_5^\alpha$	Materialparameter des plastischen Basismodells, Phase α
f^α	Anteil an Fließbedingung der Phase α
\bar{f}^α	Anteil an Fließbedingung der Phase α im Gleichgewichtszustand
g	spezifische GIBBS-Energie
g^α	isotroper Anteil an Fließbedingung der Phase α
h	spezifische Enthalpie
\dot{h}	latenter Wärmestrom (allgemein)
r	volumenhaft verteilte Energiequellen
s	spezifische Entropie
s_0	spezifische Entropie bei $T = T_0$
$s_\alpha \quad \alpha \in \{r, i, w, m\}$	Anteile der spezifischen Entropie (s. Text)
\dot{s}_Λ	flächenbehafte Entropieproduktion an der Phasengrenze
s_*	spezifische Entropie bei $T = T_0$ und $\epsilon_r = \mathbf{0}$
t	Zeit
u	spezifische innere Energie
u_n	Geschwindigkeit der Phasengrenze in Normalenrichtung
w	spezifische Formänderungsenergie
$w_\alpha \quad \alpha \in \{i, d, h\}$	Anteile der spezifischen Formänderungsenergie (s. Text)

E	Elastizitätsmodul
F^α	Fließbedingung der Phase α
\bar{F}^α	Fließbedingung des Gleichgewichtszustandes der Phase α
G	GIBBS-Energie
J	relative Volumenänderung
\dot{Q}	Verlust an Wärmestrom
\dot{Q}_{hom}	Aus homogenen Körper ausströmender Wärmestrom
\dot{Q}_Λ	Wärmestrom aufgrund der Phasentransformation
R	spezielle Gaskonstante
R_m	allgemeine Gaskonstante
T	Temperatur
U	innere Energie
U_n	Geschwindigkeit der Phasengrenze in Normalenrichtung in der Referenzkonfiguration
\dot{U}_{pt}	Änderung der inneren Energie aufgrund Phasentransformation
\dot{W}	Formänderungsleistung
\dot{W}_{hom}	Formänderungsleistung homogener Körper
\dot{W}_{pt}	Formänderungsleistung aufgrund Phasentransformation

fettgedruckte lateinische Symbole

1	Eins-Tensor
1^R	Eins-Tensor in der Referenzkonfiguration
<i>b</i>	Linker Cauchy-Green-Tensor
<i>b</i>	ESHELBY-Tensor (MAUGIN)
<i>m</i>	Tensorielle Größe zur Beschreibung der Masse einer Phase
<i>m^R</i>	Tensorielle Größe zur Beschreibung der Masseänderung einer Phase an der Phasengrenze in der Referenzkonfiguration
<i>n</i>	Normalenvektor (allgemein)
<i>n_p</i>	Richtung der viskoplastischen Deformation
<i>n̄_p</i>	Richtung der plastischen Deformation
<i>k</i>	volumenhaft angreifende Kräfte
<i>x</i>	Position eines Punktes in der aktuellen Konfiguration
<i>q</i>	Wärmestrom
<i>v</i>	Geschwindigkeit eines Massenpunktes
<i>v_Λ</i>	Geschwindigkeit der Phasengrenze
<i>v_Λ^R</i>	Geschwindigkeit der Phasengrenze in der Ausgangskonfiguration
<i>C</i>	Rechter Cauchy-Green-Tensor
<i>D</i>	Deformationsgeschwindigkeitstensor
<i>E</i>	Green-Verzerrungstensor
<i>E_r</i>	reversibler Anteil des Green-Verzerrungstensor
<i>F</i>	Deformationsgradient
<i>L</i>	Geschwindigkeitsgradiententensor Kapitel 3.1.1
<i>L</i>	Tensor der elastischen Nachgiebigkeit Kapitel 4.3
<i>L⁰</i>	Tensor der elastischen Nachgiebigkeit bei $T = T_0$ Kapitel 4.3
<i>L_Θ⁽ⁱ⁾</i>	negierte partielle i -te Ableitung des Tensors der elastischen Nachgiebigkeit nach T bei $T = T_0$, Kapitel 4.3
<i>L_Θ</i>	partielle Ableitung des Tensors der elastischen Nachgiebigkeit nach T bei $T = T_0$, Kapitel 4.3
<i>M</i>	Tensor der elastischen Steifigkeit
<i>M^R</i>	Tensorielle Größe zur Beschreibung der Masse einer Phase in der Referenzkonfiguration
<i>N</i>	Normalenvektor in der Ausgangskonfiguration
<i>N_⊥</i>	Vektor orthogonal zu \mathbf{N} mit $ \mathbf{N}_{\perp} = 1$
<i>P</i>	Erster Piola-Kirchhoff Spannungstensor
<i>P̄</i>	(isothermer) referenzieller ESHELBY-Tensor
<i>Q</i>	Wärmestrom in der Ausgangskonfiguration dargestellt
<i>Q</i>	Rotationsmatrix
<i>Q̄</i>	(spatial) ESHELBY-Tensor
<i>S</i>	gewichteter CAUCHY-Spannungstensor
<i>S̄</i>	Überspannungsanteil des gewichteten CAUCHY-Spannungstensor
<i>S̄</i>	Gleichgewichtsanteil des gewichteten CAUCHY-Spannungstensor
<i>S_K</i>	Zweiter Piola-Kirchhoff Spannungstensor
<i>R</i>	rotatorischer Anteil des Deformationsgradienten
<i>U</i>	Rechts-Strecktensor
<i>V</i>	Links-Strecktensor
<i>W</i>	Spintensor
<i>X</i>	Position eines Punktes in der Referenzkonfiguration

griechische Symbole

α	Wärmeausdehnungskoeffizient
β	Materialparameter thermodynamische Konsistenz
δ	Dehnung bei spannungsfreier Phasentransformation
φ	spezifische freie-HELMHOLTZ-Energie
φ_0	spezifische freie-HELMHOLTZ-Energie bei $T = T_0$
γ	Scherung bei spannungsfreier Phasentransformation
γ^α	Materialparameter des viskoplastischen Modells, Phase α
$\dot{\eta}$	Entropieproduktion aufgrund interner Strukturänderungen.
λ	LAMÉ-Parameter
λ^0	LAMÉ-Parameter λ bei $T = T_0$
λ^\ominus	Ableitung des LAMÉ-Parameters λ nach T bei $T = T_0$
λ_q	Materialparameter Wärmeleitungsgesetz
ρ	Dichte in der aktuellen Konfiguration
ρ_0	Dichte in der Ausgangskonfiguration
κ^α	isotrope Verfestigung, Phase α
μ	LAMÉ-Parameter
μ^0	LAMÉ-Parameter μ bei $T = T_0$
μ^\ominus	Ableitung des LAMÉ-Parameters μ nach T bei $T = T_0$
ν	Querkontraktionszahl
τ_q	Materialparameter Wärmeleitungsgesetz
ξ	Massenanteil einer Phase
Λ	Beschreibung der Phasengrenze in der aktuellen Konfiguration
Λ_0	Beschreibung der Phasengrenze in der Ausgangskonfiguration
Λ^α	Überspannung der Phase α
Φ	freie-HELMHOLTZ-Energie
Φ_p^α	Überspannungsfunktion der Phase α
Θ_D	DEBYE-Temperatur

fettgedruckte griechische Symbole

$\boldsymbol{\alpha}$	Wärmeausdehnungstensor
β_0	Integrationskonstante
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Almansi-Verzerrungstensor
$\boldsymbol{\varepsilon}_r$	reversibler Anteil des Almansi-Verzerrungstensors
$\boldsymbol{\varepsilon}^*$	Dehnungstensor bei spannungsfreier Phasentransformation
$\boldsymbol{\xi}_i^\alpha \quad \alpha \in \{i, h, p, q\}$	Satz interner Variablen
$\boldsymbol{\mu}$	Tensor des chemischen Potentials
$\boldsymbol{\mu}^R$	Tensor des chemischen Potentials in der Referenzkonfiguration
$\boldsymbol{\xi}^R$	bezogene tensorielle Größe zur Beschreibung der Masse einer Phase in der Referenzkonfiguration
ζ^α	kinematische Verfestigung, Phase α
$\boldsymbol{\Omega}$	Rotationsgeschwindigkeitstensor
$\boldsymbol{\Omega}$	Schädigungstensor Kapitel 4.1.2

kalligraphische Symbole

\mathcal{B}	aktuelle Konfiguration
\mathcal{B}_0	Referenzkonfiguration
\mathcal{R}	von Phasengrenze durchschnittenes Gebiet
\mathcal{R}^-	Produktphase
\mathcal{R}^+	Matrixphase
\mathcal{R}_0	von Phasengrenze durchschnittenes Gebiet in der Referenzkonfiguration
\mathcal{R}_0^-	Produktphase in der Referenzkonfiguration
\mathcal{R}_0^+	Matrixphase in der Referenzkonfiguration

Vorschriften und Operatoren

$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_{ij} B_{jk} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$	einfach skalare Multiplikation
$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ji}$	doppelt skalare Multiplikation
$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = A_{ij} B_{kl} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_l \epsilon_{jkm} \mathbf{e}_m$	Spatprodukt zwischen Tensoren zweiter Stufe (ϵ_{jkm} Permutationssymbol)
$\mathbf{A} \times \times \mathbf{B} = A_{ij} B_{kl} \epsilon_{jkm} \mathbf{e}_m \epsilon_{ilm} \mathbf{e}_n$	doppeltes Spatprodukt zwischen Tensoren zweiter Stufe
$\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$	
$\nabla_{\mathbf{x}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}}$	
$\dot{(\)}$	materielle Zeitableitung
$\overset{\nabla}{(\)}$	objektive Zeitableitung
$\frac{D}{Dt}$	totale Zeitableitung
\mathbf{A}^T	Transponierte der Größe \mathbf{A}
\mathbf{A}^{-1}	Inverse der Größe \mathbf{A}
\mathbf{A}'	deviatorischer Anteil der Größe \mathbf{A}
$\text{sym}(\mathbf{A}) = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)/2$	Symmetrischer Anteil von \mathbf{A}
$[\phi]$	Sprung der Größe ϕ an der Phasengrenze
$\langle \phi \rangle$	Mittelwert der Größe ϕ an der Phasengrenze

1. Einleitung

Die Austenit-Martensit Phasentransformation ist ein in der Technik schon recht lange bekannter und verwendeter Vorgang. Das klassische Anwendungsbeispiel ist das Härten eines Werkstücks. Dabei wird ein auf hinreichend hohe Temperatur erhitztes Werkstück in ein Abkühlmedium, oftmals Öl oder Wasser, getaucht. Dadurch wird die hohe Abkühlgeschwindigkeit zum Erreichen der gewünschten Strukturänderung, der Austenit-Martensit Transformation, erreicht. Das Martensit hat aufgrund seiner Kristallstruktur eine deutlich höhere Fließgrenze als das Austenit. Durch die hohe Temperaturdifferenz entsteht aber auch ein hoher Temperaturgradient im Innern des Werkstücks. Dieser führt zu Eigenspannungen, die so hoch sein können, daß der Werkstoff plastifiziert oder sogar reißt. Nicht nur die Eigenspannungen führen zu plastischen Deformationen, auch die Umwandlung bedingt durch die Strukturänderung eine Deformation des umgewandelten Materials und damit auch eine unter Umständen plastische Deformation des Gesamtwerkstoffes.

Eine weiteres Anwendungsfeld der Austenit-Martensit Umwandlung stellen die Formgedächtnismetalle dar. Diese sind in der Lage, sich nach einer Deformation durch Erwärmen wieder an ihre ursprüngliche Form zu „erinnern“. Dieser Effekt wird dadurch erreicht, daß es sich bei den auf den ersten Blick bleibenden Verformungen um keine plastischen Deformationen handelt, sondern die Austenit-Martensit Transformation mit den dabei auftretenden Deformationen durchlaufen wird. Durch das Erhitzen wird die Rücktransformation eingeleitet, wodurch bei diesen Werkstoffen auch die Deformation aufgrund der Transformation rückgängig gemacht wird. Ähnlich ist der Vorgang bei „superelastischen“ Materialien. Bei diesen reicht die Wegnahme der Last als Kriterium für die Rücktransformation aus. Der Werkstoff zeigt dadurch ein scheinbar gummielastisches Verhalten.

Obwohl Phasentransformationen bei technisch wichtigen Vorgängen wie dem Härten oder Schweißen von Werkstoffen auftreten, ist die Beschäftigung aus kontinuumsmechanischer Sicht mit diesem Thema noch jung. So bestehen einerseits phänomenologische Modelle, die zur Berechnung konkreter Strukturen eingesetzt werden können, aber in der Regel nur Teilaspekte der Umwandlung modellieren. Andererseits gibt es mikromechanische Modelle, die das lokale Verhalten des Werkstoffes gut abbilden, sich aber aufgrund des numerischen Aufwands nicht zur Berechnung ausgedehnter Bauteile eignen.

Ziel dieser Arbeit ist es, die Vorgänge während der Austenit-Martensit Umwandlung unter Berücksichtigung der thermodynamischen Randbedingungen und der dissipativen Effekte zu beschreiben. Sie soll ein Beitrag zu dem Ziel sein, ein Entwurf eines Bauteils unter Berücksichtigung der Form- und Gefügeänderung während der Abkühlung zu erreichen. Zur Berechnung beliebiger Bauteilformen ist die Implementation des Materialmodells in die Methode der finiten Elemente essentiell. Ein weiterer, aus diesem Argument folgender Aspekt, ist die Frage der Identifikation der Modellparameter. Bei der Anpassung von Materialmodellen an experimentelle Daten stellt sich das Problem, daß die Modelle

zur Anpassung einen homogenen, genau definierten Temperatur und Spannungszustand verlangen. Dieser ist aber aufgrund des gekoppelt thermomechanischen Problems experimentell nur sehr schwer erreichbar. Eine Lösungsmöglichkeit stellt hier die Methode der finiten Elemente dar. Mit dieser steht eine Möglichkeit zur Verfügung, den durchgeführten Versuch soweit zu modellieren, daß eine Anpassung an die gemessenen Daten, wie z.B. der Temperatur auf der Oberfläche der Probe oder der resultierenden Normalkraft in der Probe möglich ist.

Im folgenden Kapitel wird eine Einordnung der im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Phänomene sowohl unter thermodynamischen als auch unter mechanischen Gesichtspunkten in das allgemeine Gebiet der Phasentransformationen vorgenommen.

Im dritten Kapitel werden zunächst grundlegende Betrachtungen an einer Phasengrenze gemacht und darauf basierend eine eindeutige Identifikation der thermodynamisch treibenden Größe der Phasentransformation vorgenommen. Diese Überlegung und die zur Übertragung der lokalen Beschreibung notwendige Homogenisierung führt auf die Erweiterung der skalaren Beschreibung der Massenanteile der Phasen auf eine auf einer tensoriellen Größe basierenden Beschreibung der Transformationskinetik.

Darauf aufbauend wird im vierten Kapitel ein makroskopisches Stoffgesetz zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation vorgestellt. Es berücksichtigt getrennt das Verhalten des Austenits und des Martensits, so daß das stark unterschiedliche Materialverhalten der Phasen modelliert werden kann.

Im fünften Kapitel wird das Strukturverhalten anhand zweier klassischer Versuche der Härtereitechnik demonstriert. Besonderes Augenmerk wird dabei auf die Anwendung des hier entwickelten Konzeptes gelegt.

2. Zum Begriff der transformationsinduzierten Plastizität

2.1 Klassifikation von Phasenübergängen in Feststoffen

Zunächst soll hier zur Definition des behandelten Themenbereichs ein kurzer Überblick über Phasenumwandlungen in Feststoffen sowohl aus thermodynamischer als auch materialtechnologischer Sicht gegeben werden. Die zur Einteilung der Phasenübergänge führenden Kriterien und die Charakteristika der Arten der Phasentransformationen in Feststoffen sind in zahlreichen Lehrbüchern zu finden ([Ber93],[Haa84],[HW91]). Sie sollen hier nur soweit dargestellt werden, wie es zum Verständnis des in dieser Arbeit gewählten Vorgehen von Bedeutung ist.

Besonderes Augenmerk wird im folgenden auf die Austenit-Martensit Umwandlung gelegt. Die oftmals verwendete Unterscheidung von thermodynamischen und mechanischen Aspekten ist nicht immer eindeutig. Einige Vorgänge lassen sich nicht eindeutig einem Bereich zuordnen. Weiterhin interagieren thermomechanische und mechanische Phänomene. Trotzdem, insbesondere im Hinblick auf die historische Entwicklung der Beschäftigung mit diesem Gebiet, kann die Unterteilung aber doch als sinnvoll erachtet werden.

Der Begriff der Phase basiert auf der Möglichkeit eines Feststoffes bei gleicher chemischer Zusammensetzung in verschiedenen Kristallgitterstrukturen zu existieren. So gibt es bei Eisen (s. BERNIS[Ber93])

- kubisch raumzentriertes α -Eisen (Martensit, Ferrit, Perlit),
- kubisch flächenzentriertes γ -Eisen (Austenit),
- kubisch raumzentriertes δ -Eisen (δ -Ferrit),
- ϵ -Eisen in hexagonal dichtester Kugelpackung.

Zur Beschreibung von Phasenumwandlungen werden in der Regel die Volumenanteile oder die Massenanteile der Phasen am Gesamtkörper verwendet. Im Gegensatz dazu verwendet man bei der Beschreibung einer chemischen Umwandlung die Molanteile der beteiligten Komponenten. Oftmals findet man in Abhandlungen zur Beschreibung der Phasentransformation auch die Einbeziehung der Komponenten. Dies soll hier nicht weiter verfolgt werden, wenn im folgenden von einem Anteil einer Phase gesprochen wird ist damit der Massenanteil der Phase am Gesamtkörper gemeint

Die thermodynamische Beschreibung von Phasentransformationen basiert auf der Identifikation bestimmter energetischer Größen als die die Umwandlung bestimmenden Faktoren. Als die für Phasenübergänge bestimmende Größe kann die freie GIBBS-Energie G (auch freie Enthalpie)¹ identifiziert werden. Das Verhalten der freien GIBBS-Energie und der freien HELMHOLTZ-Energie H führt zu einer Einteilung der Umwandlungsarten, die entscheidende Aspekte der Transformationskinetik beschreibt.

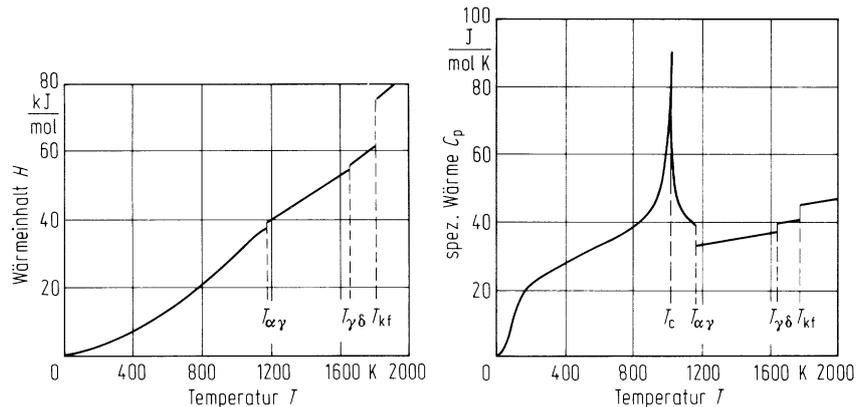


Abb. 2.1: links: Freie HELMHOLTZ-Energie $H(T)$ des reinen Eisens.
rechts: Spezifische Wärmekapazität $c_p(T)$ des reinen Eisens.
Gekennzeichnet sind die magnetische Umwandlung (T_c), Strukturumwandlungen ($T_{\alpha\gamma}$, $T_{\gamma\delta}$) und Schmelzpunkt (T_{kf}). (nach HORNBÖGEN & WARLIMONT[HW91])

Betrachtet man die Abhängigkeit der freien HELMHOLTZ-Energie von der Temperatur in Abb.2.1, ist bei der Änderung des magnetischen Verhaltens bei der CURIE-Temperatur T_c mit dem dort stetigen Verhalten ein anderer Verlauf als bei den Phasenübergängen $\alpha \rightleftharpoons \gamma$ und $\gamma \rightleftharpoons \delta$ zu beobachten. An diesen Stellen liegt ein Sprung vor. Der Unterschied wird noch deutlicher, wenn man die spezifische Wärmekapazität $c_p = (\partial H / \partial T)_p$ betrachtet. Hier findet man bei der magnetischen Umwandlung ein Maximum, während sowohl bei dem Übergang zwischen α -Eisen und γ -Eisen, als auch bei dem $\gamma \rightleftharpoons \delta$ -Übergang Unstetigkeiten vorliegen. Diese Unterschiede im Verlauf der freien Energie bilden die Grundlage der EHRENFEST-Einteilung. Diese Einteilung besagt, daß eine Phasentransformation n -ter Ordnung vorliegt, wenn für die n -te Ableitung der Zustandsfunktion (hier die freie HELMHOLTZ-Energie) zum ersten Mal eine Unstetigkeit auftritt. Umwandlungen erster Ordnung laufen mit Hysterese ab, die durch den Energie- und Zeitbedarf von Keimbildung und Wachstum bedingt ist, während die Umwandlung zweiter Ordnung spontan den Änderungen der Zustandsgröße folgt.

Zur Klasse der Umwandlungen erster Ordnung gehören die strukturellen Umwandlungen, d.h. die Phasentransformationen. Im folgenden werden Umwandlungen dieser Art näher untersucht. Dabei ist zunächst wichtig auf die Anfänge der Untersuchungen dieser

¹Eine Definition der hier genannten Größen wird im Kapitel 3 vorgenommen.

Umwandlungen zurück zu blicken. Eine der ersten Beschreibungen der Gefügeeigenschaften eines Werkstoffes in Abhängigkeit der thermischen Randbedingungen basierte auf einem Abschreckversuch. Dabei wird die zu untersuchende Werkstoffprobe zunächst auf eine Temperatur erhitzt, bei der nach hinreichend langer Haltezeit anzunehmen ist, daß eine homogene Phase vorliegt. Danach wird mit maximal erreichbarer Geschwindigkeit auf eine bestimmte Temperatur abgekühlt und diese gehalten. Abhängig von der Haltezeit stellt sich ein bestimmtes Gefüge ein. Die Gefügeanteile in Abhängigkeit von der Haltezeit werden für verschiedene Temperaturen in einem isothermen Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubild (ZTU-Diagramm) zusammengefaßt. In Abb.2.2 ist dies für einen typischen Stahl zu sehen. Ein Schwachpunkt dieser Darstellungsart wird deutlich, wenn man den Bereich der Martensitbildung betrachtet. Dort ist bereits für den Zeitpunkt $t = 1\text{ s}$ ein Martensitanteil vorhanden, der sich auch bei weiterem Halten der Temperatur nicht verändert. Der Martensitanteil hatte sich bereits während des in diesem Diagramm nicht dargestellten Abkühlungsvorgangs gebildet.

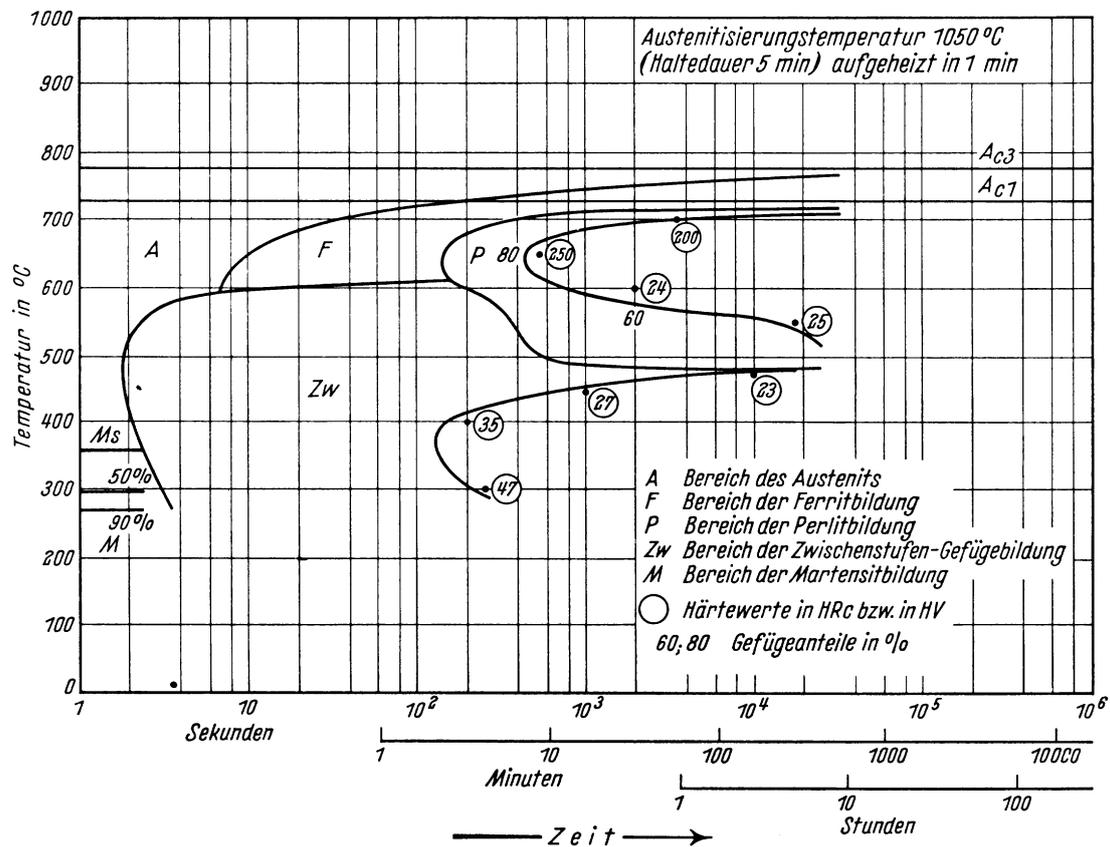


Abb. 2.2: isothermes Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubild 42CrMo4 (nach WEVER & ROSE[WR58])

Abhilfe schafft hier die Einführung des kontinuierlichen Zeit-Temperatur-Umwandlungs-Schaubilds (s. Abb.2.3). In diesem wird eine Probe monoton abgekühlt, die Abkühlungsverläufe sind für verschiedene Geschwindigkeiten in dem Diagramm dargestellt. An den Abkühlungskurven werden die Gefügeanteile vermerkt und die 1% bzw. 99%-Werte der Phasenanteile besonders gekennzeichnet. Durch Verbinden dieser Punkte erhält man die Bereiche der einzelnen Phasen. Durch das Miteinbeziehen der Information über den Temperaturverlauf ermöglicht diese Darstellung, eine schon kurz angesprochene Besonderheit der Austenit-Martensit Transformation darzustellen: Die Transformation schreitet nur bei weiterem Unterkühlen voran, wird die Temperatur konstant gehalten, bleibt der Martensitanteil konstant.

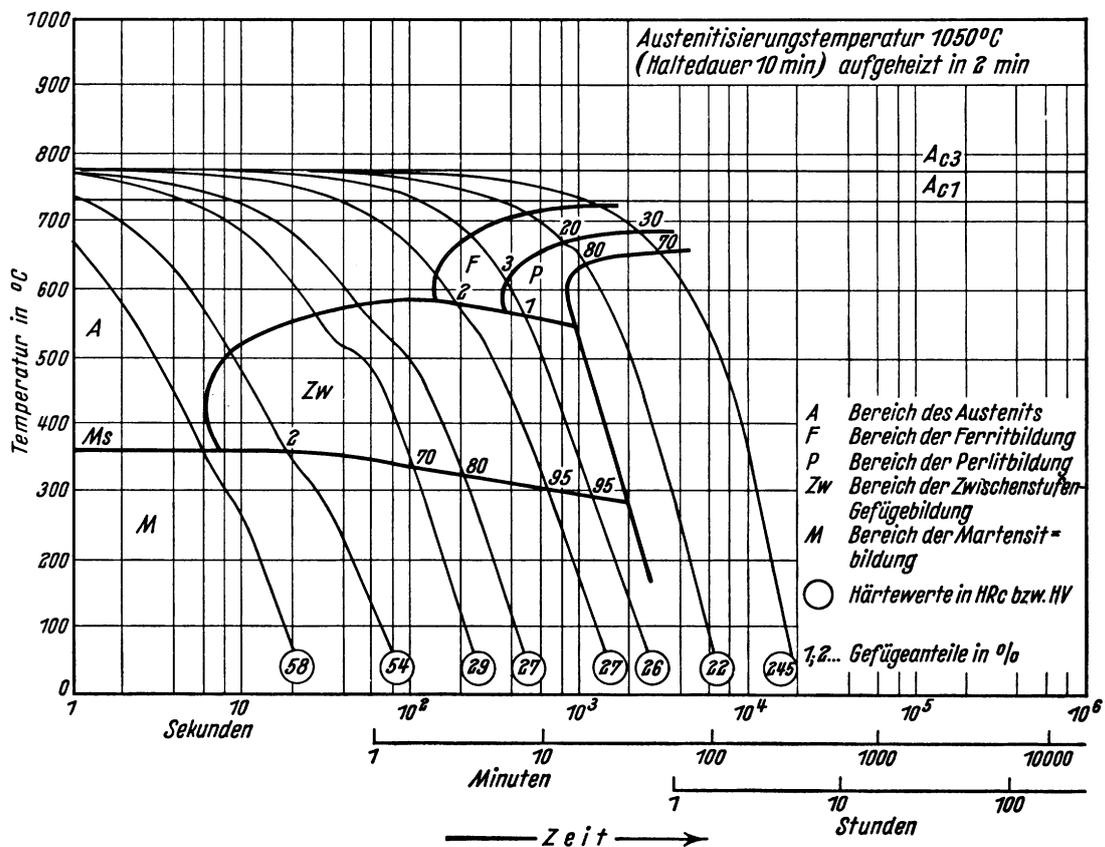


Abb. 2.3: kontinuierliches Zeit-Temperatur-Umwandlungs-Schaubild 42CrMo4 (nach WEVER & ROSE[WR58])

2.2 Klassifizierung der Austenit-Martensit Transformation

Die Austenit-Martensit-Transformation läßt sich aufgrund der thermomechanischen Gegebenheiten und der Bedeutung in der Anwendung in zwei Teilbereiche aufteilen:

- die weitgehend reversible Umwandlung
(in Formgedächtnismetallen, *engl. shape memory alloys, SMA* oder superelastischen Materialien)
- die mit Plastifizierung der Matrixphase einhergehende Umwandlung
(Umwandlungsplastizität, *engl. transformation induced plasticity, TRIP*)

Der aus thermodynamischer Sicht entscheidende Unterschied ist schon bei der Beschreibung der SMA-Metalle genannt worden: Die Umwandlung in Formgedächtnismetallen geschieht weitestgehend reversibel während, die bei TRIP-Stählen vorhandene Plastifizierung der Matrixphase zu dissipativen Effekten führt.

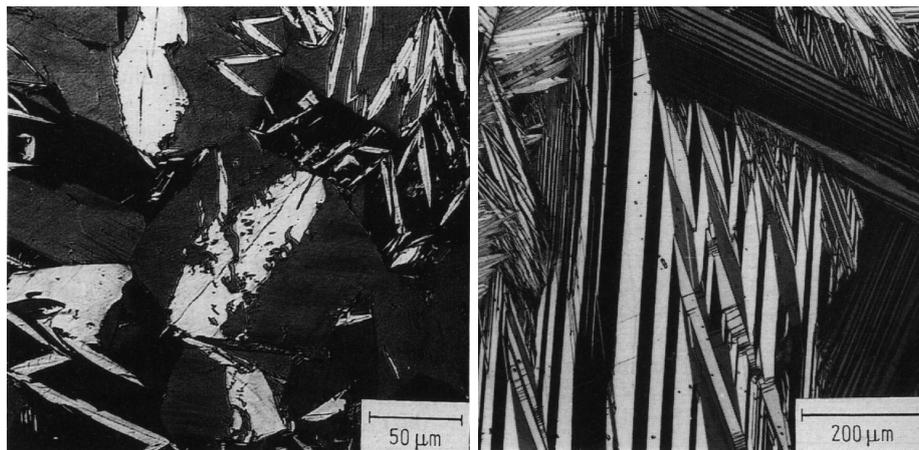


Abb. 2.4: links: Martensitplatten (weiß) in Austenitmatrix in einer Fe-C-Ni Legierung, die aus dem Austenitbereich auf Raumtemperatur abgeschreckt wurden.
rechts: Martensitplatten in der Anordnung selbstakkommodierender Gruppen in einer Cu-Zn-Al-Legierung (nach [HW91])

Der mechanische Vorgang bei einer Austenit-Martensit-Umwandlung kann in drei Teilvorgänge unterteilt werden:

- 1) Mit der Austenit-Martensit-Umwandlung geht eine Deformation des umgewandelten Gebietes einher, die sog. BAIN-Verzerrung. Diese basiert auf dem Umklappen der Gitterstruktur von einer kubisch flächenzentrierten (kfz) in eine kubisch raumzentrierte (krz) Struktur. Zu beachten ist hier, daß die beiden Gitterstrukturen

unterschiedliche Atomabstände aufweisen. Daher hat die krz-Gitterstruktur eine geringere Löslichkeit für Kohlenstoff. Dadurch ist die Umwandlung nicht unbehindert möglich, die eingelagerten Kohlenstoffatome sorgen für große interne Verzerrungen.

- 2) Da die BAIN-Verzerrung eine große Deformation des umgebenden Gebietes bedingen würde, ist es energetisch günstiger, diese durch Zwillingsbildung oder Gleitung abzufedern (s. Abb. 2.4)
- 3) Zur Erhaltung der Kristallgitterstruktur ist weiterhin eine Drehung des umgewandelten Gebietes notwendig.

Diese drei Vorgänge führen zu unterschiedlichen Orientierungsformen des Martensits: dem Lattenmartensit, dem Plattenmartensit und dem ϵ -Martensit.

Die BAIN-Verzerrung läßt sich in einem lokalen Koordinatensystem auf der Habitusebene durch

$$\boldsymbol{\epsilon}^* = \begin{pmatrix} \delta & \gamma/2 & 0 \\ \gamma/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

beschreiben. Die Unterteilung der Austenit-Martensit-Transformation findet sich in den Komponenten dieses Tensors wieder. Bei der Transformation in SMA-Metallen ist der Scheranteil γ dominant, der Volumenanteil δ kann vernachlässigt werden. Diese Vernachlässigbarkeit des Volumenanteils trifft für die Umwandlung in TRIP-Stählen nicht zu und ist der Grund für die plastische Verzerrung der Matrixphase.

Abschließend soll hier, nach der theoretischen Beschreibung der Unterteilung, auf die Konsequenzen für die praktische Anwendung eingegangen werden. Die scherdominierte Umwandlung hat in Formgedächtnismetallen und superelastischen Werkstoffen inzwischen eine weite Verbreitung gefunden. Diese Entwicklung hat erst kürzlich eingesetzt und entwickelt zur Zeit eine große Dynamik in verschiedenen Anwendungsgebieten. Die Wurzeln der Anwendung der volumendominierten Umwandlung liegen deutlich weiter in der Vergangenheit. Dieser Vorgang ist in der Anwendung als das Abschrecken des Metalls schon seit den Anfängen der Industrialisierung bekannt. Trotzdem findet man nur wenige Modelle zur Beschreibung dieses Vorgangs. So gibt es bisher nur eine Monographie, daß sich ausschließlich mit dem Effekt der transformationsinduzierten Plastizität auseinandersetzt (MITTER[Mit87]). Es ist zu hoffen, daß verbesserte Modelle zur Beschreibung der bei der Umwandlung auftretenden Vorgänge zu einem diesen Vorgang stärker berücksichtigenden Design sowohl der Materialien als auch der Strukturen führt.

2.3 Modelle zur Beschreibung der Austenit-Martensit Transformation

Die Beschreibung der transformationsinduzierten Plastizität und der Vorgänge in Formgedächtnismetallen lassen sich insbesondere im Hinblick auf die Transformationskinetik,

d.h. der Beschreibung der Phasenanteile und deren Veränderung, nicht immer eindeutig trennen. Es wird daher nicht immer explizit auf Unterschiede verwiesen.

2.3.1 Modellierungskonzepte

Bei der Beschreibung der Austenit-Martensit Transformation kann man grob zwei Modellierungskonzepte unterscheiden:

- phänomenologische Modelle
- mikromechanisch begründete Ansätze.

Die phänomenologischen Modellansätze nehmen die Betrachtungen der Mikromechanik als Basis zur Formulierung makroskopischer Modellansätze. Aufbauend auf diesen Betrachtungen und dem makroskopischen Materialverhalten werden Evolutionsgleichungen zur Beschreibung des Materialverhaltens aufgebaut. Da das makroskopische Materialverhalten oft sehr komplex ist, ist auch das Finden geeigneter Beschreibungen unter Umständen nicht unproblematisch.

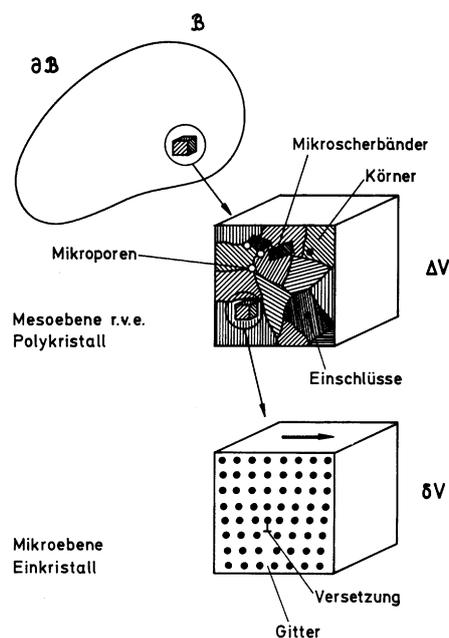


Abb. 2.5: Verschiedene Ebenen der Betrachtung eines Körpers (nach BRUHNS[Bru93])

Bei den mikromechanisch begründeten Modellen wird von verschiedenen Modellierungsebenen ausgegangen (s. Abb. 2.5):

- der Mikro-Skale des Kristalls

- der Meso-Skale des polykristallinen Korngefüges mit Korngrenzen und Körnern in unterschiedlichen Phasenzuständen
- der Makro-Skale der zu beschreibenden Struktur.

Die Modellbildung ist bei richtiger Wahl der Beschreibungsebene in der Regel einfacher als bei den phänomenologischen Modellen. Als Problem erweist sich aber die Übertragung der Ergebnisse von einer Ebene zur Nächsthöheren zum letztendlichen Erreichen der Makro-Skale. Zur Lösung bieten sich folgende Möglichkeiten an:

- Annahme eines konstanten Spannungsfeldes (SACHS-Ansatz)
(SACHS[Sac24], REUSS[Reu29])
- Annahme eines konstanten Verzerrungsfeldes (TAYLOR-Ansatz)
(TAYLOR[Tay38], VOIGT[Voi89], FISCHER[Fis92])
- selbstkonsistente Formulierungen
(KRÖNER[Kro58], HILL[Hil65], MORI & TANAKA[MT73], MURA[Mur87], BERVEILLER, PATOOR ET AL. [PEB88][LB89][PSB99][DSB95], BUSSINK ET AL.[BIOV95], WEN ET AL.[WDG99])
- FEM-Simulation der Mikrostruktur im repräsentativen Volumenelement (RVE)
(REISNER ET AL.[RWF98][RYF99], LEVITAS ET AL.[LIS98][ILS99][LS99], SIMONSON & SJÖSTRÖM[SS99])

Ein Nachteil der selbstkonsistenten Formulierungen ist, daß von einer konkreten Geometrie der Einschlüsse ausgegangen werden muß. Weiterhin sind die Ergebnisse von dem verwendeten Materialmodell abhängig. Unter Verwendung der Methode der FEM-Simulation der Mikrostruktur können detaillierte Aussagen über Verzerrungen und Eigenspannungszustände im RVE gemacht werden. Der numerische Aufwand ist unter Berücksichtigung der momentan verfügbaren Rechnerkapazitäten zu hoch, um Strukturen mit Ausdehnungen weit über der Größe des RVE zu berechnen. Daher dienen diese Analysen eher der fundierteren Beschreibung des Meso-Makro Übergangs und können somit eine Hilfestellung bei der Beschreibung des makroskopischen Materialverhaltens geben.

2.3.2 Beschreibung der Transformationskinetik

Ein entscheidender Baustein für ein eine Phasenumwandlung beschreibendes Stoffgesetz ist die Transformationskinetik, d.h. die Beschreibung der Anteile der betrachteten Phasen am Gesamtkörper und deren Änderung.

Einleitend sollen hier einige bei der Austenit-Martensit Transformation wichtige Punkte genannt werden:

- a) Die Transformation schreitet bei der Abkühlung nur bei weiterem Erniedrigen der Temperatur voran. Im Gegensatz dazu steht z.B. die Umwandlung von Austenit nach Perlit oder Ferrit.
- b) Die Transformation startet erst bei Überschreiten einer gewissen Energiebarriere. Dadurch ist eine Hysterese bei thermomechanisch zyklischen Prozessen gegeben. Diese zur Überwindung der Energiebarriere notwendige Energie kann als thermodynamisch treibende Kraft der Phasentransformation identifiziert werden.
- c) In TRIP-Stählen ist eine Mindestgeschwindigkeit der Änderung der energetisch treibenden Größe notwendig. Ist diese nicht gegeben, werden sich statt Martensit andere Gefügeformen bilden. In manchen Werkstoffen, insbesondere bei Formdächtnismetallen (s. VIDEAU ET AL.[VCP96], dort mit sehr geringer minimaler Abkühlungsrate) stockt dann nur die Austenit-Martensit Transformation und es bilden sich keine andere Gefügeformen. Diese Arten von Werkstoffen eignen sich daher besonders gut zur experimentellen Untersuchung der Martensit-Austenit Phasentransformation.

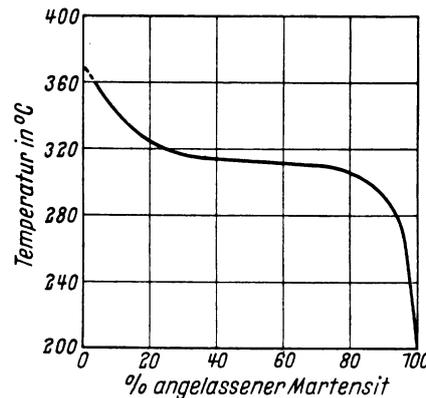


Abb. 2.6: Martensitanteil in Abhängigkeit von der Temperatur für den Stahl 34 Cr 4 (nach WEVER & ROSE[WR58])

Die Beschreibung des Massenanteils ξ der Martensitphase an der Gesamtmasse wurde zunächst als direkte Funktion von Temperatur und später auch der Spannung ausgedrückt. Hier seien stellvertretend

$$\text{KOISTINEN \& MARBURGER[KM59]} \quad \xi = 1 - \exp(-\alpha(M_s - T))$$

$$\text{BESSERDICH[Bes93]} \quad \xi = 1 - ((T - M_f)/(M_s - M_f))^n$$

$$\text{TANAKA[Tan91]} \quad \xi = 1 - \exp(-\alpha(M_s - T)) \exp(-\alpha(AI_1 + B\sqrt{I_2}))$$

genannt (s. auch [Tam82]). Die Bezeichnungen sollen hier nur kurz erläutert werden. Es bezeichnet M_s die Martensit-Start-Temperatur, d.h. die Temperatur, bei der bei Abkühlung die Transformation einsetzt, M_f die Martensit-Finish-Temperatur, also die Temperatur am Ende der Umwandlung und I_1, I_2 die ersten zwei Invarianten des Spannungstensors. Das Einsetzen der Transformation ist nicht nur von der Temperatur, sondern auch von der globalen Spannung abhängig (Dies ist im Ansatz von TANAKA berücksichtigt). In

Abb.2.7 ist für eine Fe-Ni-C Legierung und einen Stahl die Spannung, die zu einem Einsetzen der Transformation führt in Abhängigkeit von der Temperatur aufgetragen. Es ist zu erkennen, daß die Fließgrenze des Austenits ein wesentlicher Einflußfaktor ist.

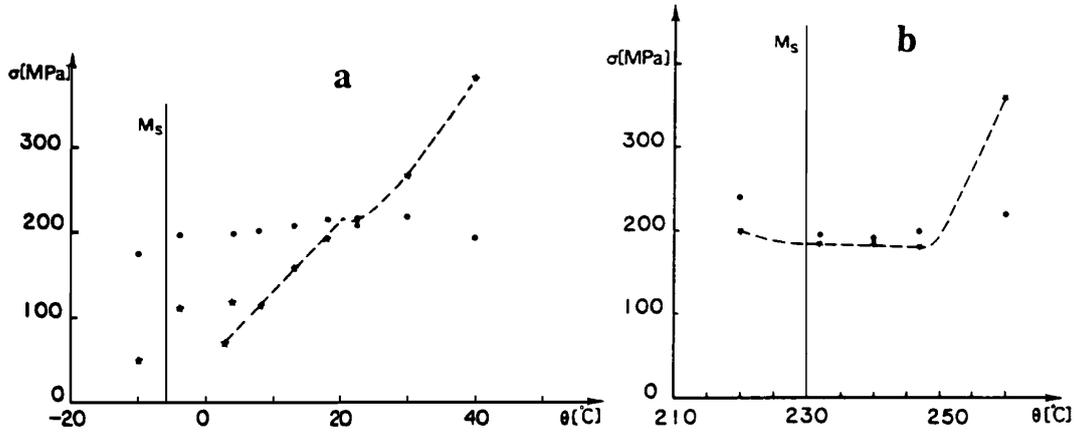


Abb. 2.7: Abhängigkeit der zum Einsetzen der Transformation notwendigen Spannung von der Temperatur. Zusätzlich ist die Fließspannung durch die runden Punkte gekennzeichnet.

- a) eine Fe-Ni-C Legierung.
 - b) der Stahl 60NCD11 (franz. Bezeichnung).
- (nach GAUTIER & PATOOR[GP97])

Diese Erkenntnisse haben zur einer stärkeren Berücksichtigung der thermodynamischen Zusammenhänge geführt. Zusammen mit den im vorangegangenen Abschnitt erwähnten Überlegungen zur energetisch treibenden Größe der Umwandlung führten diese zur Entwicklung energetischer Konzepte. Diese basieren auf einer Betrachtung der treibenden Energie und bauen auf dieser Größe ein Evolutionsgesetz für den Massenanteil ξ auf. Exemplarisch seien hier TANAKA ET AL. [Tan91][OFT93] mit

$$\dot{\xi} = -kV(1 - \xi)(\delta\dot{G} - \delta\dot{G}_0) \quad (2.2)$$

genannt. δG kennzeichnet hier die Energiedifferenz der freien GIBBS-Energie bei der Umwandlung, das Produkt kV kann als Materialparameter interpretiert werden.

Moderne Konzepte nutzen weitergehende energetische Überlegungen auf Basis des ersten und zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik zur Herleitung der Beschreibung der Transformationskinetik. Es werden zur genaueren Beschreibung des Vorgangs interne Variablen eingeführt, insgesamt folgt man dem Konzept der sog. *unified laws*. (PATOOR ET AL.[PEB88], SUN, HWANG ET AL. [WH91],[SHY91],[SH93a],[SH93b],[SL96], SOUZA ET AL.[SMZ98], TANAKA ET AL.[TFO99]). Ein Überblick über thermodynamische Konzepte zur Modellierung der Phasentransformation ist bei FISCHER ET AL.[FBTO94] zu finden.

2.3.3 Beschreibung der transformationsinduzierten Plastizität

Der Begriff Umwandlungsplastizität wurde erstmals 1937 von WASSERMANN[Was37] und 1967 von ZACKAY[ZPFB67] mit der Bezeichnung TRIP verwendet. Der Vorgang beschreibt nach MITTER[Mit87] die plastische Deformation des Materials während der Umwandlung bei Spannungen, die unterhalb der normalerweise gemessenen Fließgrenze liegen. Diese Deformation ist lastabhängig und zeigt einen Orientierungseffekt. Zwei Beispiele für den Zusammenhang zwischen dem Verlauf der transformationsinduzierten Dehnung während der Umwandlung und der angelegten Spannung finden sich in Abb.2.8.

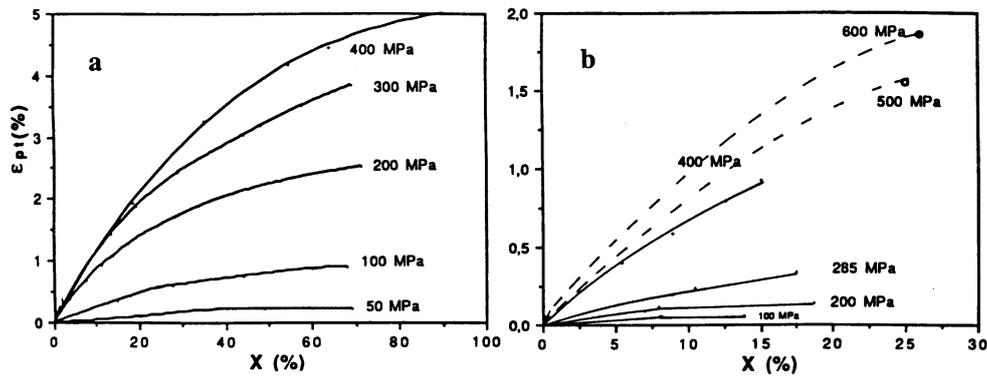


Abb. 2.8: Transformationsinduzierte Deformation in Abhängigkeit des Martensitanteils für verschiedene Spannungen
a) Fe-20Ni-0.5C, b) Fe-25Ni-0.66C, nach GAUTIER & PATOOR[GP97])

MITTER gibt in [Mit87] einen Überblick über Modellierungskonzepte der transformationsinduzierten Deformation, eine Diskussion unter Einbeziehung neuerer Konzepte findet sich in [FST96]. Hier daher nur ein kurzer Abriß.

Oftmals wird eine Aufspaltung der Dehnungsrate nach

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^e + \dot{\epsilon}^p + \dot{\epsilon}^{pt} \quad , \quad (2.3)$$

(s. z.B. [SS99],[LS99]) vorgenommen, wobei $\dot{\epsilon}^e$ die elastische Dehnungsrate, $\dot{\epsilon}^p$ die inelastische Dehnungsrate aufgrund „klassischer“ Plastizität und $\dot{\epsilon}^{pt}$ die inelastische Dehnungsrate infolge der Phasentransformation kennzeichnen. FISCHER hat in [Fis92] unter Annahme idealplastischen Materialverhaltens den Term

$$\epsilon^{pt} = \frac{3}{2} K^* \sigma' \quad (2.4)$$

zur Beschreibung der transformationsinduzierten Deformation bei voller Umwandlung hergeleitet. σ' kennzeichnet den deviatorischen Anteil der makroskopischen Spannung. Der Parameter K^* ist ein von der BAIN-Verzerrung und der Fließspannung der einbettenden Matrix

abhängige Größe. Obwohl ein expliziter Wert vom Autor angegeben wird, empfiehlt er eine experimentelle Anpassung. Der Ausdruck (2.4) ist eine Erweiterung des für den einaxialen Spannungszustand von GREENWOOD & JOHNSON[GJ65] hergeleiteten Ansatz. Gleichung (2.4) wurde vor der auf mikromechanischen Überlegungen basierenden Arbeit FISCHERS unter Zuhilfenahme rein heuristischer Argumente aufgestellt (FRANITZA[Fra72], LEBLOND ET AL.[LDD89]). Zur Berücksichtigung des Umwandlungsvorgangs ist Gleichung (2.4) noch um eine Funktion $f^\xi(\xi)$ auf

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{pt}(\xi) = \frac{3}{2} K^* \boldsymbol{\sigma}' f^\xi(\xi) \quad (2.5)$$

zu erweitern. Diese soll Phänomene wie das Zusammenwachsen der einzelnen Phasengebiete oder die Geometrie der „Phaseninseln“ berücksichtigen. Diese Funktion muß den Bedingungen $f^\xi(\xi = 0) = 0$, $f^\xi(\xi = 1) = 1$ und $0 \leq f^\xi(\xi) \leq 1$ genügen. Eine Diskussion verschiedener Ansätze findet man in DENIS ET AL.[DGS89]. Ohne Anspruch auf Vollständigkeit sollen hier

$$f^\xi(\xi) = \xi(1 - \log \xi) \quad \text{LEBLOND ET AL.}[LDD89] \quad (2.6)$$

$$f^\xi(\xi) = \xi(2 - \xi) \quad \text{DENIS ET AL.}[DSB83], \text{ SJÖSTRÖM}[Sjö83] \quad (2.7)$$

genannt werden. Diese Ansätze wurden in einer Studie von VIDEAU ET AL.[VCP96] mit experimentellen Untersuchungen verglichen. Im Rahmen der Experimente wurde der Einfluß des Spannungszustandes und dessen Orientierung auf die transformationsinduzierte Plastizität untersucht. Es zeigte sich im allgemeinen eine relativ gute Übereinstimmung der Ansätze (2.6) und (2.7) mit den experimentellen Daten, allerdings war ein starker Einfluß des Vorzeichens der Belastung zu beobachten. Dies impliziert eine Funktion der Form $f^\xi = f^\xi(\xi, \boldsymbol{\sigma})$.

Zur Erlangung einer Formulierung in Raten ist Gleichung (2.5) nach der Zeit abzuleiten. Unter Verwendung der Annahme einer konstanten globalen Spannung folgt

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{pt} = \frac{3}{2} K^* \boldsymbol{\sigma}' \frac{\partial f^\xi(\xi)}{\partial \xi} \dot{\xi} \quad (2.8)$$

Ein bisher bei der Modellierung mittels phänomenologischer Konzepte oftmals nicht eingehend abgebildeter Effekt stellt die Orientierung der Martensitinseln bei Überschreiten der Fließspannung des Austenits dar. Dieses Phänomen ist in Abb.2.9 verdeutlicht. Die Fließgrenze des dort dargestellten Materials liegt bei ca. 400 MPa. Zunächst ist die Richtung der herrschenden Spannung für die Orientierung der Martensitinseln nicht wichtig, es ist keine Vorzugsrichtung der Einschlüsse bemerkbar. Dies ändert sich schlagartig bei Erreichen der Fließspannung; nun richten sich einige Nadeln nach der angelegten Spannung aus. Andere stehen als deren Zwillinge einen festen Winkel zur Spannungsrichtung.

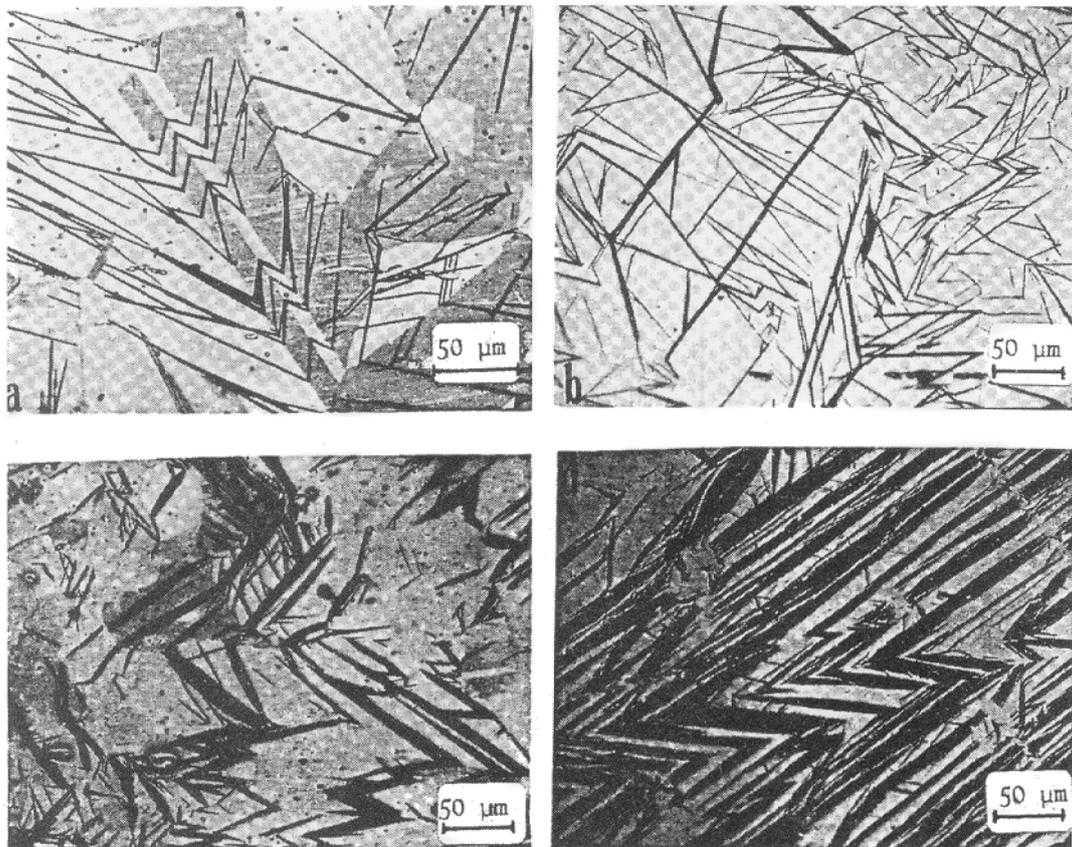


Abb. 2.9: Schliffbilder einer Fe-25Ni-0.66C Legierung für verschiedene Spannungen. Die Belastungsrichtung war horizontal. (nach GAUTIER & PATOOR[GP97])

links-oben	0 MPa	rechts-oben	285 MPa
links-unten	500 MPa	rechts-unten	600 MPa

3. Thermomechanischer Rahmen

Im Rahmen dieses Kapitels werden die materialunabhängigen Gleichungen zur Beschreibung eines heterogenen Körpers hergeleitet. Materialunabhängig heißt hier, daß kein explizites konstitutives Gesetz angenommen wird. Es werden allgemein plastische Deformationen zugelassen. Außerdem habe der zu betrachtende Werkstoff eine grob mehrphasige Struktur, die chemische Zusammensetzung soll sich nicht ändern.

Den betrogenen Körper kann man sich als aus verschiedenen Untermengen zusammengesetzt vorstellen:

- Es lassen sich in einem mehrphasigen Körper Bereiche homogenen Materials identifizieren.
- Diese Bereiche homogenen Materials sind durch Unstetigkeitsflächen getrennt.

Durch das gedankliche Zusammenfügen dieser Komponenten entsteht in seiner Gesamtheit der heterogene Körper. Diesem Gedankenmodell entsprechend gestaltet sich der Aufbau dieses Kapitels: Nach einer allgemeinen Einführung und Vereinbarung der Bezeichnungen werden die Bilanzgleichungen sowie die thermodynamischen Restriktionen eines homogenen Körpers präsentiert. Danach werden die Gegebenheiten an den Phasengrenzen näher untersucht um abschließend diese Einzelbetrachtungen zu einer Gesamtbeschreibung des heterogenen Körpers zusammenzuführen.

3.1 Allgemeine Betrachtungen

3.1.1 Kinematik und Spannungsmaße

Die Position \boldsymbol{x} eines Massenpunktes in der aktuellen Konfiguration \mathcal{B} kann durch die eindeutige, invertierbare Abbildung

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{X}, t) \quad (3.1)$$

in Abhängigkeit von der Position \boldsymbol{X} in der Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 beschrieben werden. Ausgehend von dem Deformationsgradienten

$$\boldsymbol{F} = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial \boldsymbol{X}} = \nabla_{\boldsymbol{X}} \boldsymbol{x} \quad (3.2)$$

sollen im folgenden die in der Tabelle 3.1 zusammengefaßten Bezeichnungen zur Beschreibung der Deformation und Spannungsmaße verwendet werden.

Deformationsgradient \mathbf{F}	$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{x}$
relative Volumenänderung J	$J = \det(\mathbf{F})$
Rechts-Strecktensor \mathbf{U}	$\mathbf{U} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$
Links-Strecktensor \mathbf{V}	$\mathbf{V} \cdot \mathbf{V} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T$
Rechter CAUCHY-GREEN-Tensor \mathbf{C}	$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{U}$
Linker CAUCHY-GREEN-Tensor \mathbf{b}	$\mathbf{b} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T = \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}$
GREEN-Verzerrungstensor \mathbf{E}	$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{1})$
ALMANZI-Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$	$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{b}^{-1})$
Geschwindigkeitsgradiententensor \mathbf{L}	$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{v}$
Deformationsgeschwindigkeitstensor \mathbf{D}	$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T)$
Spintensor \mathbf{W}	$\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T)$
Rotationsgeschwindigkeitstensor $\boldsymbol{\Omega}$	$\boldsymbol{\Omega} = \dot{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{R}^T$
CAUCHY-Spannung $\boldsymbol{\sigma}$	
gewichtete CAUCHY-Spannung \mathbf{S}	$\mathbf{S} = J \boldsymbol{\sigma}$
Erster PIOLA-KIRCHHOFF Spannungstensor \mathbf{P}	$\mathbf{P} = J \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{-T}$
Zweiter PIOLA-KIRCHHOFF Spannungstensor \mathbf{S}_K	$\mathbf{S}_K = J \mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{-T}$

Tabelle 3.1: Allgemeine Bezeichnungen

3.1.2 Differentiation nach der Zeit

Zur Sicherstellung der Forderung der Objektivität der das Stoffverhalten beschreibenden EULERSchen Größen wird für diese eine objektive Zeitableitung verwendet.

Ein möglicher Weg zur Herleitung einer objektiven Zeitableitung ist das LIE-Konzept (MARSDEN & HUGHES[MH83]). Hierbei wird die abzuleitende Größe in einen gegen das ursprüngliche Koordinatensystem nicht rotierten Raum transformiert, dort die Zeitableitung durchgeführt und wieder zurücktransformiert. Nutzt man die Referenzkonfiguration als diesen nicht rotierten Raum, stellt sich das Problem, daß die Transformationsoperationen (*Pull-Back* bzw. *Push-Forward*) abhängig von der Darstellung des Tensors in ko- oder kontravarianten Komponenten sind. Wird dagegen die Transformation bzgl. des durch die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten $\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}$ in einen rein rotatorischen Anteil \mathbf{R} und den Rechts-Strecktensor \mathbf{U} definierten Raums durchgeführt, führt die Anwendung des Lie-Konzepts für einen beliebigen Tensor \mathbf{A} auf die GREEN-NAGHDI-Ableitung ([NW61],[GN65])

$$\overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad . \quad (3.3)$$

WICHTMANN[Wic96] nennt als Forderungen an eine objektive Zeitableitung die Eigenschaften der Invarianz, der Symmetrie, der Produktregel bzgl. einfachem und doppel-

tem Skalarprodukt und der Isotropie-Eigenschaft. Diese sind für die GREEN-NAGHDI-Ableitung erfüllt. Zusätzlich ist sie unabhängig von dem verwendeten Stoffgesetz. Betrachtet man die Frage nach einer objektiven Zeitableitung eher an die Größe der Verformungen und Verschiebungen als an ein bestimmtes Stoffverhalten gekoppelt, so sollte diese Eigenschaft ein weiteres zu erfüllendes Kriterium bei der Wahl der Zeitableitung sein. Eine weitergehende Diskussion zu der Frage der objektiven Zeitableitung findet sich bei XIAO ET AL.[XBM98] oder SCHIESSE[Sch98].

3.1.3 LEGENDRE-Transformation

Die spezifische innere Energie u eines Massenpunktes kann als Funktion $u = u(s, \boldsymbol{\varepsilon}_r, \boldsymbol{\xi}_i)$ in Abhängigkeit von der Entropie s , des reversiblen Anteils der Dehnung $\boldsymbol{\varepsilon}_r$ und einem geeigneten Satz interner Variablen $\boldsymbol{\xi}_i$ beschrieben werden. Diese internen Variablen sollen sowohl zur mechanischen als auch zur thermischen Beschreibung des Materialverhaltens verwendet werden. Da die Größen s und $\boldsymbol{\varepsilon}_r$ schlecht meßbar sind, ist es wünschenswert, sie durch die Temperatur T und die Spannung $\boldsymbol{\sigma}$ zu ersetzen. Dies kann mit Hilfe der im folgenden beschriebenen LEGENDRE-Transformation erreicht werden.

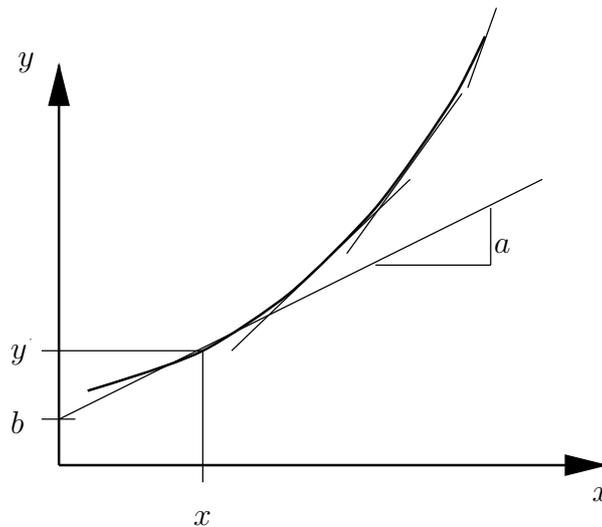


Abb. 3.1: Tangenten an Kurve $y = f(x)$

Diese soll hier exemplarisch für den eindimensionalen Fall beschrieben werden. Eine weitergehende Beschreibung findet sich z.B bei AAVATSMARK[Aav95].

Ein als gegeben angenommener funktionaler Zusammenhang zwischen einer Größe x und einer Größe y sei durch

$$y = f(x) \quad (3.4)$$

gegeben. Nun soll die Größe x ersetzt werden. Für jedes x mit $\partial f / \partial x \neq \infty$ kann eine eindeutige Tangente mit der Steigung

$$a = \frac{\partial f}{\partial x} \quad (3.5)$$

und dem Achsenabschnitt

$$b = f(x) - \frac{\partial f}{\partial x} x = y - ax \quad (3.6)$$

an die Funktion angelegt werden. Abb.3.1 verdeutlicht dieses Vorgehen. Es wurde dadurch eine neue Funktion $b = b(a)$ definiert; das Argument dieser Funktion ist nun a statt x . Der gegebene Zusammenhang wird nun nicht mehr durch den Wert der Funktion an einer bestimmten Stelle definiert, sondern durch die Größe der Steigung der Tangente in Abhängigkeit des Achsenabschnittes der Tangente.

Bezogen auf die innere Energie, kann man ausgehend von

$$u = u(s, \boldsymbol{\varepsilon}_r, \boldsymbol{\xi}_i) \quad (3.7)$$

die spezifische Entropie s mittels der LEGENDRE-Transformation ersetzen. Man erhält die spezifische freie-HELMHOLTZ-Energie

$$\varphi := u - \frac{\partial u}{\partial s} s \quad (3.8)$$

Führt man die Temperatur als

$$T := \frac{\partial u}{\partial s} \quad (3.9)$$

ein, folgt somit

$$\varphi = \varphi(\boldsymbol{\varepsilon}_r, T, \boldsymbol{\xi}_i) = u - Ts \quad (3.10)$$

Ersetzt man die reversiblen Formänderungen $\boldsymbol{\varepsilon}_r$ in Gleichung (3.10), gelangt man zur spezifischen GIBBS-Energie

$$g := \varphi - \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r} : \boldsymbol{\varepsilon}_r \quad (3.11)$$

Führt man die gewichtete CAUCHY-Spannung $\mathbf{S} = \rho_0/\rho \boldsymbol{\sigma}$ mit der Definition

$$\mathbf{S} := \rho_0 \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r} \quad (3.12)$$

ein, folgt

$$g = g(T, \mathbf{S}, \boldsymbol{\xi}_i) = \varphi - \frac{1}{\rho_0} \mathbf{S} : \boldsymbol{\varepsilon}_r \quad (3.13)$$

Unter Verwendung der Transformationsregeln aus der Tabelle 3.1 können alternative Formen der Gleichung (3.13) hergeleitet werden (s. auch MC VEAN[Mac68])¹:

$$g = \varphi - \frac{1}{\rho} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}_r = \varphi - \frac{1}{\rho_0} \mathbf{S}_K : \mathbf{E}_r \quad (3.14)$$

Eine LEGENDRE-Transformation der GIBBS-Energie bzgl. der Temperatur führt auf die Enthalpie h mit

$$h := g - \frac{\partial g}{\partial T} T \quad (3.15)$$

¹Die Definition von \mathbf{E}_r folgt aus thermodynamischen Überlegungen.

Nutzt man

$$s := -\frac{\partial g}{\partial T} \quad (3.16)$$

folgt

$$h = g + sT \quad (3.17)$$

Eine weitere Legendre-Transformation bzgl. der gewichteten CAUCHY-Spannung führt wiederum auf die innere Energie über

$$u = h - \frac{\partial h}{\partial \mathbf{S}} : \mathbf{S} \quad (3.18)$$

und mit

$$\boldsymbol{\varepsilon}_r = -\rho_0 \frac{\partial h}{\partial \mathbf{S}} \quad (3.19)$$

auf

$$u = h + \frac{1}{\rho_0} \boldsymbol{\varepsilon}_r : \mathbf{S} \quad (3.20)$$

Für die Entwicklung der Stoffgesetze wichtige Bedingungen sind die auf der Annahme des Vorhandenseins einer Integrabilitätsbasis basierenden und somit die Gleichheit der gemischt partiellen Ableitungen voraussetzenden MAXWELL-Beziehungen

$$\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial s} \right)_{\boldsymbol{\varepsilon}_r} = \left(\frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r} \right)_s \quad (3.21)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial T} \right)_{\boldsymbol{\varepsilon}_r} = - \left(\frac{\partial s}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r} \right)_T \quad (3.22)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r}{\partial T} \right)_{\mathbf{S}} = - \left(\frac{\partial s}{\partial \mathbf{S}} \right)_T \quad (3.23)$$

$$\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r}{\partial s} \right)_{\mathbf{S}} = \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{S}} \right)_s \quad (3.24)$$

Die MAXWELL-Beziehungen bzgl. der internen Variablen $\boldsymbol{\xi}_i$ bilden wichtige Einschränkungen für die Entwicklung eines thermodynamisch konsistenten Stoffgesetzes (s. u.a. [Sze89],[Wic96]).

Zusammenfassend sollen hier nochmals zur späteren Referenz alle auf die Variablen s , T , \mathbf{S} und $\boldsymbol{\varepsilon}_r$ führenden Ableitungen aufgeführt werden:

$$s = -\frac{\partial g}{\partial T} = -\frac{\partial \varphi}{\partial T} \quad (3.25)$$

$$T = \frac{\partial u}{\partial s} = \frac{\partial h}{\partial s} \quad (3.26)$$

$$\mathbf{S} = \rho_0 \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r} = \rho_0 \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r} \quad (3.27)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_r = -\rho_0 \frac{\partial h}{\partial \mathbf{S}} = -\rho_0 \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} \quad (3.28)$$

3.2 Thermomechanik eines homogenen Stoffes

3.2.1 Bilanzgleichungen

Im folgenden Abschnitt werden die Bilanzgleichungen eines materiell homogenen Stoffes in lokaler und nichtlokaler Form jeweils für die LAGRANGESche die EULERSchen Betrachtungsweise² kurz aufgeführt. Die Gleichungen finden sich in diversen Lehrbüchern zur Kontinuumsmechanik (s. u.a. ALTENBACH & ALTENBACH[AA94], BECKER & BÜRGER[BB75], BETTEN[Bet93], MARSDEN & HUGHES[MH83]) und sind hier zur späteren Referenz aufgeführt.

Die Bilanzgleichungen in lokaler Form sind in Tabelle 3.2 zusammengestellt. Es seien ρ die Dichte in der aktuellen Konfiguration, ρ_0 die Dichte in der Referenzkonfiguration, $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$ die Geschwindigkeit eines Massenpunktes, \dot{w} die Formänderungsleistung in ihren verschiedenen Darstellungsformen (vgl. MC VEAN[Mac68])

$$\dot{w} = \frac{1}{\rho} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} = \frac{1}{\rho_0} \mathbf{S} : \mathbf{D} = \frac{1}{\rho_0} \mathbf{S}_K : \dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{\rho_0} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} = \frac{1}{\rho_0} \mathbf{P} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{v}) \quad , \quad (3.29)$$

\mathbf{q} (bzw. $\mathbf{Q} = J\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{q}$) der gerichtete Wärmestrom, \mathbf{k} volumenhaft angreifende Kräfte und r volumenhaft verteilte Energiequellen. Der Drallsatz ist hier nicht explizit aufgeführt, da dessen Auswertung unter Annahme eines klassischen Kontinuums zu der Bedingung der Symmetrie des CAUCHY-Spannungstensors und damit auch des zweiten PIOLA-KIRCHHOFF-Spannungstensors führt. Die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Energie und Entropie sind in der Tabelle 3.3 zusammengefaßt, die Darstellung in der Referenzkonfiguration in der Tabelle 3.4. Die Umformung zwischen Randformulierungen und Volumenformulierungen folgt mit Hilfe des GAUSSschen Integralsatzes (vgl. [AA94]):

$$\int_{\mathcal{B}} \nabla \phi \, dV = \int_{\partial \mathcal{B}} \mathbf{n} \phi \, dA \quad . \quad (3.30)$$

	aktuelle Konfiguration	Referenzkonfiguration
Masse	$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$	
Impuls	$\rho \dot{\mathbf{v}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{k}$	$\rho_0 \dot{\mathbf{v}} = \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{P}^T + \rho_0 \mathbf{k}$
Energie	$\dot{u} = \dot{w} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q} + r$	$\dot{u} = \dot{w} - \frac{1}{\rho_0} \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{Q} + r$
Entropie	$\dot{s} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) - \frac{r}{T} \geq 0$	$\dot{s} + \frac{1}{\rho_0} \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \left(\frac{\mathbf{Q}}{T} \right) - \frac{r}{T} \geq 0$

Tabelle 3.2: Bilanzgleichungen für einen homogenen Stoff

²Die LAGRANGESche Betrachtungsweise wird im folgenden auch als Darstellung in der Ausgangskonfiguration bezeichnet, die EULERSchen Betrachtungsweise als Darstellung in der aktuellen Konfiguration

Masse	$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} \rho \, dV = \int_{\mathcal{B}} \frac{\partial}{\partial t} \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} \, dV$ $= \int_{\mathcal{B}} \frac{\partial \rho}{\partial t} \, dV + \int_{\partial \mathcal{B}} (\rho \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} \, dA$
Impuls	$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} \rho \mathbf{v} \, dV = \int_{\mathcal{B}} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{k} \, dV$ $= \int_{\partial \mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \mathbf{n} \, dA + \int_{\mathcal{B}} \rho \mathbf{k} \, dV$
Energie	$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} \rho u \, dV = \int_{\mathcal{B}} \rho \dot{w} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho r \, dV$ $\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} \rho \left(u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) \, dV = \int_{\partial \mathcal{B}} (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma}^T - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{n} \, dA + \int_{\mathcal{B}} \rho (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + r) \, dV$
Entropie	$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} \rho s \, dV \geq \int_{\mathcal{B}} -\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) + \rho \left(\frac{r}{T} \right) \, dV$ $= - \int_{\partial \mathcal{B}} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \mathbf{n} \, dA + \int_{\mathcal{B}} \rho \left(\frac{r}{T} \right) \, dV$

Tabelle 3.3: Bilanzgleichungen für einen homogenen Stoff in der aktuellen Konfiguration

Masse	$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \, dV_0 = \int_{\partial \mathcal{B}_0} (\rho_0 \mathbf{v}) \cdot \mathbf{N} \, dA_0$
Impuls	$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \mathbf{v} \, dV_0 = \int_{\mathcal{B}_0} \nabla_X \cdot \mathbf{P}^T + \rho_0 \mathbf{k} \, dV_0$ $= \int_{\partial \mathcal{B}_0} \mathbf{P} \cdot \mathbf{N} \, dA_0 + \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \mathbf{k} \, dV_0$
Energie	$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 u \, dV_0 = \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \dot{w} - \nabla_X \cdot \mathbf{Q} + \rho_0 r \, dV_0$ $\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \left(u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) \, dV_0 = \int_{\partial \mathcal{B}_0} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{Q}) \cdot \mathbf{N} \, dA_0 + \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + r) \, dV_0$
Entropie	$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 s \, dV_0 \geq \int_{\mathcal{B}_0} -\nabla_X \cdot \left(\frac{\mathbf{Q}}{T} \right) + \rho_0 \left(\frac{r}{T} \right) \, dV_0$ $= - \int_{\partial \mathcal{B}_0} \frac{\mathbf{Q}}{T} \cdot \mathbf{N} \, dA_0 + \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \left(\frac{r}{T} \right) \, dV_0$

Tabelle 3.4: Bilanzgleichungen für einen homogenen Stoff in der Referenzkonfiguration

3.2.2 Thermodynamische Konsistenz

Das hier verwendete Vorgehen entspricht dem von LEHMANN in [Leh89]. In zahlreichen Arbeiten ([Rot91], [Poh93], [Wic96], [And97]) wurde dieser Rahmen erfolgreich zur Formulierung inelastischer Stoffgesetze angewandt.

Mittels der LEGENDRE-Transformationen (3.10) und (3.14) kann die Rate der inneren Energie \dot{u} durch die Rate der GIBBS-Energie \dot{g} als

$$\dot{u} = \dot{g} + \dot{T}s + \dot{s}T + \frac{1}{\rho_0} \overset{\nabla}{\mathbf{S}} : \boldsymbol{\varepsilon}_r + \frac{1}{\rho_0} \mathbf{S} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{\varepsilon}}_r . \quad (3.31)$$

ersetzt werden. Damit folgt für die Energiebilanz aus Tabelle 3.2

$$\dot{g} + \dot{T}s + \dot{s}T + \frac{1}{\rho_0} \overset{\nabla}{\mathbf{S}} : \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{\rho_0} \mathbf{S} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{w} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q} + r . \quad (3.32)$$

Spaltet man die Formänderungsleistung \dot{w} in einen reversiblen Anteil \dot{w}_r und einen irreversiblen Anteil \dot{w}_i auf, d.h.

$$\dot{w} = \dot{w}_r + \dot{w}_i \quad (3.33)$$

und wählt als Ansatz für die reversible Formänderungsleistung

$$\dot{w}_r = \frac{1}{\rho_0} \mathbf{S} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{\varepsilon}}_r , \quad (3.34)$$

setzt das totale Differential der GIBBS-Energie $g = g(\mathbf{S}, T, \boldsymbol{\xi}_i^h)$ ³ bezüglich eines homogenen Stoffes

$$\dot{g} = \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} : \overset{\nabla}{\mathbf{S}} + \frac{\partial g}{\partial T} \dot{T} + \sum_i \frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\xi}_i^h} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{\xi}}_i^h \quad (3.35)$$

unter Berücksichtigung der Definitionen der reversiblen Formänderung

$$\boldsymbol{\varepsilon}_r = -\rho_0 \frac{\partial g}{\partial \mathbf{S}} \quad (3.36)$$

und der Entropie

$$s = -\frac{\partial g}{\partial T} \quad (3.37)$$

in Gleichung (3.32) ein, folgt unter Ausnutzung der Symmetrie der Spannungs- bzw. Dehnungstensoren

$$T\dot{s} = \dot{w}_i - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q} + r - \sum_i \frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\xi}_i^h} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{\xi}}_i^h . \quad (3.38)$$

³Die GIBBS-Energie ist hier nur von den das mechanische und thermische Verhalten eines homogenen Stoffes beschreibenden Satzes interner Variablen $\boldsymbol{\xi}_i^h$ abhängig, da von einer Beschreibung eines Stoffes mit festem Komponentenverhältnis ausgegangen wird bzw. eine Beschreibung der Änderung des Verhältnisses hier nicht vorgenommen werden soll.

Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik stellt ein Postulat aufgrund von Erfahrungswerten dar: Er besagt, daß die interne Entropieproduktion immer größer oder gleich Null sein muß, d.h.

$$\dot{s}_i \geq 0 \quad , \quad (3.39)$$

wobei die Aufspaltung

$$\dot{s} = \dot{s}_i + \dot{s}_r \quad (3.40)$$

vorgenommen wurde. Der reversible Anteil \dot{s}_r in Gleichung (3.40) wird durch die Berücksichtigung des Spezialfalles der Ungleichung (3.39) identifiziert, bei dem diese gerade als Gleichung erfüllt ist. Es gelte daher

$$\dot{s}_r + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) - \frac{r}{T} = 0 \quad . \quad (3.41)$$

Unter Ausnutzung der Differentiation

$$\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) = \frac{T \nabla \cdot \mathbf{q} - \mathbf{q} \cdot (\nabla T)}{T^2} \quad (3.42)$$

und dem Ausdruck (3.38) gelangt man zu

$$T \dot{s}_i = \dot{w}_i - \sum_i \frac{\partial g}{\partial \xi_i^h} : \overset{\nabla}{\xi}_i^h - \frac{1}{\rho} \frac{\nabla T}{T} \cdot \mathbf{q} \geq 0 \quad . \quad (3.43)$$

Folgt man der Argumentation KOSIŃSKIS[Kos75], kann der allgemeine Satz interner Variablen ξ_i^h in den das mechanische Verhalten beschreibenden Satz ξ_i^p und den das thermische Verhalten beschreibenden Satz ξ_i^q als

$$\xi_i^h = \{ \xi_i^p, \xi_i^q \} \quad (3.44)$$

aufgeteilt werden. Nutzt man dies, folgt aus Gleichung (3.43)

$$T \dot{s}_i = \dot{w}_i - \sum_i \frac{\partial g}{\partial \xi_i^p} : \overset{\nabla}{\xi}_i^p - \sum_i \frac{\partial g}{\partial \xi_i^q} : \overset{\nabla}{\xi}_i^q - \frac{1}{\rho} \frac{\nabla T}{T} \cdot \mathbf{q} \geq 0 \quad . \quad (3.45)$$

Die irreversible Leistung \dot{w}_i kann in einen dissipativen Anteil \dot{w}_d und einen nichtdissipativen Anteil \dot{w}_h mit

$$\dot{w}_i = \dot{w}_d + \dot{w}_h \quad (3.46)$$

und

$$\dot{w}_d \geq 0 \quad (3.47)$$

aufgespaltet werden. Für den nichtdissipativen Anteil der irreversiblen Formänderungsleistung wird der Ansatz

$$\dot{w}_h = T \dot{\eta} + \sum_i \frac{\partial g}{\partial \xi_i^p} : \overset{\nabla}{\xi}_i^p \quad (3.48)$$

gewählt. Der Term $\dot{\eta}$ beschreibt laut Pape[Pap88] die Entropieproduktion aufgrund interner Strukturänderungen. Wird (3.48) in die Gleichung (3.43) eingesetzt, folgt

$$T\dot{s}_i = \dot{w}_d + T\dot{\eta} - \sum_i \frac{\partial g}{\partial \xi_i^q} : \overset{\nabla}{\xi}_i^q - \frac{1}{\rho} \frac{\nabla T}{T} \cdot \mathbf{q} \geq 0 \quad . \quad (3.49)$$

Die konstitutiven Beziehungen sind so zu wählen, daß Gleichung (3.49) erfüllt wird. Es soll bereits hier vereinfachend gefordert werden, daß eine Aufteilung der Entropieungleichung in einen dem thermischen Problem zugehörigen Anteil

$$T\dot{s}_w = - \sum_i \frac{\partial g}{\partial \xi_i^q} : \overset{\nabla}{\xi}_i^q - \frac{1}{\rho} \frac{\nabla T}{T} \cdot \mathbf{q} \geq 0 \quad (3.50)$$

und einen dem mechanischen Problem zuzuordnenden Anteil

$$T\dot{s}_m = \dot{w}_d + T\dot{\eta} \geq 0 \quad (3.51)$$

möglich ist. Statt der Erfüllung der Ungleichung (3.49) wird als striktere Forderung die Erfüllung der Ungleichungen (3.50) und (3.51) verlangt.

3.2.3 Thermomechanische Kopplung

Die das thermische Problem beschreibende Differentialgleichung soll hier hergeleitet werden. Ausgehend von der kalorischen Zustandsgleichung (3.37) kann die Entropieänderung als

$$-\dot{s} = \frac{\partial^2 g}{\partial T \partial \mathbf{S}} \overset{\nabla}{\mathbf{S}} + \frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \dot{T} + \sum_i \frac{\partial^2 g}{\partial T \partial \xi_i^h} : \overset{\nabla}{\xi}_i^h \quad (3.52)$$

ausgedrückt werden. Definiert man die spezifische isobare Wärmekapazität als

$$c_p := \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_{\mathbf{S}} \quad (3.53)$$

erhält man, unter Verwendung von (3.17) und (3.16)

$$c_p = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_{\mathbf{S}} \quad . \quad (3.54)$$

Zusammen mit den Ausdrücken (3.38) und (3.52) kann dies verwendet werden, um

$$\dot{w}_i - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q} + r - \sum_i \frac{\partial g}{\partial \xi_i^h} : \overset{\nabla}{\xi}_i^h = c_p \dot{T} - T \left\{ \frac{\partial^2 g}{\partial T \partial \mathbf{S}} \overset{\nabla}{\mathbf{S}} + \sum_i \frac{\partial^2 g}{\partial T \partial \xi_i^h} : \overset{\nabla}{\xi}_i^h \right\} \quad (3.55)$$

als die das thermische Problem beschreibende Differentialgleichung herzuleiten. Führt man die Abkürzung

$$\dot{h}_{hom} = \dot{w}_i - \sum_i \frac{\partial g}{\partial \xi_i^h} : \overset{\nabla}{\xi}_i^h + T \left\{ \frac{\partial^2 g}{\partial T \partial \mathbf{S}} \overset{\nabla}{\mathbf{S}} + \sum_i \frac{\partial^2 g}{\partial T \partial \xi_i^h} : \overset{\nabla}{\xi}_i^h \right\} + r \quad (3.56)$$

ein, kann (3.55) in die Form

$$c_p \dot{T} = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q} + \dot{h}_{hom} \quad (3.57)$$

gebracht werden. Aus Gleichung (3.56) folgt unter Verwendung der Ausdrücke (3.46) und (3.48)

$$\dot{h}_{hom} = \dot{w}_d + T\dot{\eta} + T \left\{ \frac{\partial^2 g}{\partial T \partial \mathbf{S}} : \bar{\mathbf{S}} + \sum_i \frac{\partial^2 g}{\partial T \partial \xi_i^h} : \bar{\xi}_i^h \right\} + r \quad (3.58)$$

Zur konkreten Berechnung dieser Gleichung sind konstitutive Beziehungen für \dot{w}_d und $\dot{\eta}$ zu finden, die zusammen mit dem Wärmeleitungsgesetz die thermodynamischen Restriktion (3.49) (bzw. (3.50) und (3.51)) erfüllen. In der Regel sind die Koppelterme in den geschweiften Klammern vernachlässigbar.

3.3 Betrachtungen an der Phasengrenze

3.3.1 Bezeichnungen

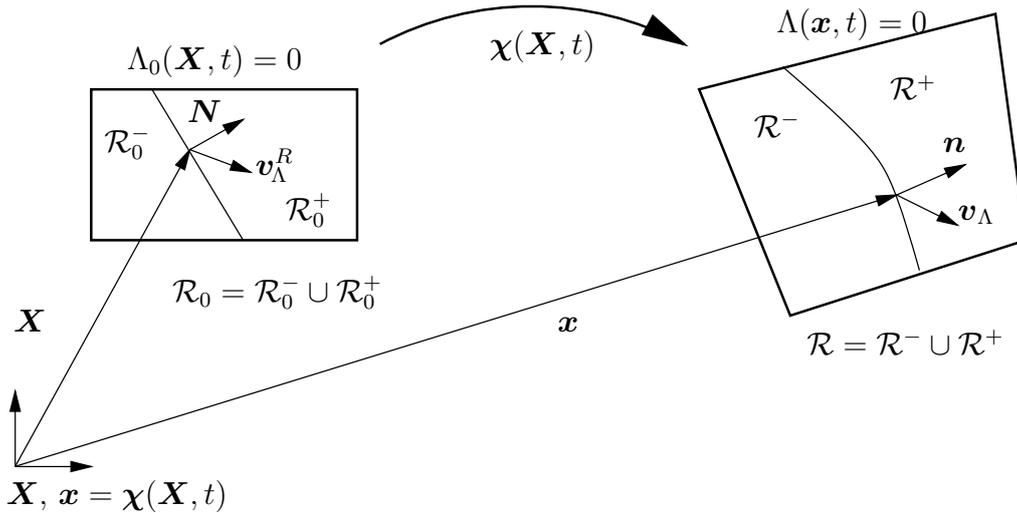


Abb. 3.2: Darstellung der Umgebung einer Phasengrenze in der Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 und der aktuellen Konfiguration \mathcal{B}

Zunächst sollen in diesem Abschnitt einige grundlegende Größen definiert und Zusammenhänge erläutert werden. Diese Ausführungen finden sich in verschiedenen Schriften zur lokalen Betrachtung an Phasengrenzen (z.B. KOSIŃSKI[Kos86], ERINGEN & ŞUHUBI[Ec74], TRUESDELL & TOUPIN[TT60]).

In Abb. 3.2 ist für die Referenzkonfiguration und die aktuelle Konfiguration die Umgebung einer Phasengrenze dargestellt. Die Matrix- oder „Mutterphase“ soll durch einen hochgestellten „-“ Index gekennzeichnet werden, die Produktphase entsprechend durch ein hochgestelltes „+“. Während im vorangegangenen \mathcal{B} bzw. \mathcal{B}_0 zur Kennzeichnung homogener

Gebiete verwendet wurde, soll zur Kennzeichnung eines durch eine Unstetigkeitsfläche durchschnittenen Körpers die Bezeichnung \mathcal{R} bzw. \mathcal{R}_0 verwendet werden. Die Umrandungen der betrachteten Gebiete werden durch ein vorangestelltes „ ∂ “ gekennzeichnet. In den Gleichungen, speziell in den Integralgleichungen zur Mittelung, soll ein Λ bzw. Λ_0 die Phasengrenze kennzeichnen. Dies ist eine verkürzte Schreibweise der die Phasengrenze bestimmenden Gleichung: Die Position der Phasengrenze sei durch eine Funktion $\Lambda(\mathbf{x}, t) = 0$ in der aktuellen Konfiguration bzw. $\Lambda_0(\mathbf{X}, t) = 0$ mit $\Lambda_0(\mathbf{X}, t) = \Lambda(\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}), t)$ in der Referenzkonfiguration beschreibbar.

Der Vektor \mathbf{n} soll, falls im Zusammenhang einer Phasengrenze benutzt, normal auf der Phasengrenze in Richtung der „Mutterphase“ stehen und durch

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \Lambda(\mathbf{x}, t)}{|\nabla \Lambda|} \quad (3.59)$$

definiert sein. Für eine Darstellung in der Referenzkonfiguration ergibt sich für den entsprechenden Vektor \mathbf{N}

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla_{\mathbf{X}} \Lambda_0(\mathbf{X}, t)}{|\nabla_{\mathbf{X}} \Lambda_0|} . \quad (3.60)$$

Die Geschwindigkeit der Phasengrenze wird durch den Vektor \mathbf{v}_Λ (bzw. \mathbf{v}_Λ^R für die Darstellung in der Referenzkonfiguration) beschrieben, die Relativgeschwindigkeit normal zur Phasengrenze berechnet sich in der aktuellen Konfiguration zu

$$u_n = (\mathbf{v}_\Lambda - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} \quad (3.61)$$

und in der Referenzkonfiguration zu

$$U_N = \mathbf{v}_\Lambda^R \cdot \mathbf{N} = -\frac{\partial \Lambda_0 / \partial t}{|\nabla_{\mathbf{X}} \Lambda_0|} \quad (3.62)$$

Der Sprung einer nicht notwendigerweise skalaren Größe ϕ wird mit

$$[\phi] := \phi^+ - \phi^- \quad (3.63)$$

bezeichnet. Das Mittel der beiden Werte wird durch

$$\langle \phi \rangle := \frac{1}{2} (\phi^+ + \phi^-) \quad (3.64)$$

gekennzeichnet. Ist der Sprung $[\phi] = 0$ und somit $\phi^+ = \phi^- = \langle \phi \rangle$, werden in den folgenden Gleichungen die MCCAULEY-Klammern weggelassen. Eine grundlegende, im folgenden oftmals ohne weitere Erwähnung verwendete, Rechenregel soll an dieser Stelle noch kurz benannt werden:

$$[\phi_1 \phi_2] = \langle \phi_1 \rangle [\phi_2] + [\phi_1] \langle \phi_2 \rangle . \quad (3.65)$$

3.3.2 Bilanzgleichungen

Das ausgehend von den integralen Bilanzgleichungen der Tabellen 3.3 und 3.4 zu den Sprungebedingungen führende Prozedere ist z.B. von BECKER & BÜRGER[BB75], CHADWICK[Cha76], MARSDEN & HUGHES[MH83] oder TRUESDELL & TOUPIN[TT60] ausführlich erläutert worden und soll hier nur kurz skizziert werden.

Die in den folgenden vier Gleichungen verwendeten Symbole stellen nur Platzhalter dar. Sie stehen in keinem Zusammenhang mit anderen in der Arbeit verwendeten Symbole. Die Bilanzgleichungen der aktuellen Konfiguration aus Tabelle 3.3 können in die allgemeine Form

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} \rho \phi \, dV = - \int_{\partial \mathcal{B}} \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} \, dA + \int_{\mathcal{B}} \rho \varphi \, dV \quad (3.66)$$

gebracht werden, wobei für φ , \mathbf{w} und ϕ die entsprechenden Ausdrücke einzusetzen sind. Berücksichtigt man die Vorschrift zur vollständigen Differentiation einer Größe $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$

$$\frac{D}{Dt} \phi = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \quad (3.67)$$

folgt unter Verwendung des GAUSSchen Integralsatzes (3.30) das REYNOLDSsche-Transporttheorem

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} \phi \, dV = \int_{\mathcal{B}} \frac{\partial \phi}{\partial t} \, dV + \int_{\partial \mathcal{B}} (\phi \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} \, dA \quad (3.68)$$

Denkt man sich den untersuchten Körper als ein durch zwei, durch die Phasengrenze Λ getrennte, Einzelphasen zusammengesetzten Körper und formuliert die Bilanzgleichungen sowohl für die beiden Phasen als auch für den Gesamtkörper, ergibt sich die Bedingung

$$[\rho \phi (\mathbf{v}_\Lambda - \mathbf{v}) - \mathbf{w}] \cdot \mathbf{n} + \psi = 0 \quad (3.69)$$

an der Phasengrenze. ψ bezeichnet eine flächenhafte Produktion auf der Unstetigkeitsfläche. Setzt man nun die Bilanzgleichungen aus Tabelle 3.3 ein, erhält man die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, innere Energie und Entropie an der Phasengrenze in der aktuellen Konfiguration.

Dieses Prozedere kann völlig analog auch in der Referenzkonfiguration durchgeführt werden. Es führt unter Verwendung der Gleichungen der Tabelle 3.4 auf die entsprechenden Bilanzgleichungen in der Referenzkonfiguration.

In der Tabelle 3.5 sind die Sprungbedingungen für beide Konfigurationen zusammengefaßt. In den Gleichungen für Impuls, Energie und Entropie wurde die Massenbilanz schon ausgewertet.

3.3.3 Beschreibung der Transformationskinetik

In diesem Abschnitt soll für eine lokale Betrachtung an der Phasengrenze ausgehend von den Bilanzgleichungen eine Bedingung für das Fortschreiten der Transformation erarbeitet

	aktuelle Konfiguration	Referenzkonfiguration
Masse	$[\rho u_n] = 0$	$[\rho_0 U_N] = 0$
Impuls	$\rho u_n [\mathbf{v}] + [\boldsymbol{\sigma}^T \cdot \mathbf{n}] = \mathbf{0}$	$\rho_0 U_N [\mathbf{v}] + [\mathbf{P} \cdot \mathbf{N}] = \mathbf{0}$
Energie	$\rho u_n [u] + [\boldsymbol{\sigma}^T \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q}] \cdot \mathbf{n} = 0$	$\rho_0 U_N [u] + [\mathbf{v} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{Q}] \cdot \mathbf{N} = 0$
Entropie	$\rho u_n [s] - \left[\frac{\mathbf{q}}{T} \right] \cdot \mathbf{n} = -\dot{s}_\Lambda \leq 0$	$\rho_0 U_N [s] - \left[\frac{\mathbf{Q}}{T} \right] \cdot \mathbf{N} = -\dot{s}_\Lambda \leq 0$

Tabelle 3.5: Sprungbedingungen in aktueller und Referenzkonfiguration

werden. Das hier beschriebene Vorgehen entspricht, soweit es die Herleitung des Tensors des chemischen Potentials betrifft, dem von HEIDUG & LEHNER in [HL85] gewähltem. Darauf aufbauend wird eine Erweiterung der Beschreibung der Transformationskinetik auf tensorielle Größen vorgeschlagen.

3.3.3.1 HADAMARD-Bedingung

Ein entscheidender Schritt im Rahmen des hier verwendeten Vorgehens ist die Anwendung der HADAMARD-Bedingung. Daher soll hier zunächst eine Möglichkeit zu deren Herleitung kurz skizziert werden. Ausgehend von der Definition (3.2) des Deformationgradienten

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{x} \quad (3.70)$$

kann die schwache Form dieser Gleichung durch Integration über das Gebiet des untersuchten Körpers als

$$\int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{F} \, dV_0 = \int_{\mathcal{B}_0} \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{x} \, dV_0 \quad (3.71)$$

formuliert werden. Wendet man den GAUSSchen Integralsatz (3.30) auf den rechten Teil der Gleichung an (s. auch OGDEN[Ogd97]), folgt

$$\int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{F} \, dV_0 = \int_{\partial \mathcal{B}_0} \mathbf{x} \otimes \mathbf{N} \, dA_0 \quad . \quad (3.72)$$

Für die zeitliche Ableitung ergibt sich

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{F} \, dV_0 = \int_{\partial \mathcal{B}_0} \frac{D\mathbf{x}}{Dt} \otimes \mathbf{N} + \mathbf{x} \otimes \frac{D\mathbf{N}}{Dt} \, dA_0 \quad . \quad (3.73)$$

Verallgemeinert man den von Gleichung (3.66) auf (3.69) führenden Gedankengang auf allgemeine tensorielle Größen, folgt bei Annahme einer Bilanzgleichung in der LAGRAN-GESEN Darstellung der Form

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{A} \, dV_0 = - \int_{\partial \mathcal{B}_0} \mathbf{B} \, dA_0 + \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{C} \, dV_0 \quad (3.74)$$

mit den zu spezifizierenden Größen \mathbf{A} , \mathbf{B} und \mathbf{C} , eine Sprungbedingung

$$[\mathbf{A}]U_N - [\mathbf{B}] = \mathbf{0} \quad , \quad (3.75)$$

wobei angenommen wurde, daß keine Produktion der untersuchten Größe an der Phasengrenze vorliegt. Wendet man diese Gleichung auf (3.73) an, folgt unter Verwendung der Kohärenzbedingung

$$[\mathbf{x}] = \mathbf{0} \quad (3.76)$$

der Ausdruck

$$[\mathbf{F}]U_N + \left[\mathbf{v} \otimes \mathbf{N} + \mathbf{x} \otimes \frac{D\mathbf{N}}{Dt} \right] = \mathbf{0} \quad . \quad (3.77)$$

Multipliziert man nun von rechts mit \mathbf{N} folgt unter Berücksichtigung der Orthogonalität zwischen dem Normalenvektor \mathbf{N} und seiner zeitlichen Ableitung die HADAMARD-Bedingung

$$[\mathbf{v}] = -[\mathbf{F} \cdot \mathbf{N}]U_N \quad . \quad (3.78)$$

3.3.3.2 Herleitung der Tensors des chemischen Potentials

Setzt man die Energie-Bilanzgleichung der Referenzkonfiguration aus Tabelle 3.5 in die Bilanzgleichung für die Entropie ein, erhält man unter Berücksichtigung der Definition der freien HELMHOLTZ-Energie (3.8) und der Annahme

$$[T] = 0 \quad (3.79)$$

den Ausdruck

$$[\mathbf{v} \cdot \mathbf{P}] \cdot \mathbf{N} + \rho_0 U_N [\varphi] = T \dot{s}_\Lambda \geq 0 \quad . \quad (3.80)$$

Unter Berücksichtigung der Impulsbilanz und der HADAMARD-Bedingung (3.78) folgt bei Beschränkung auf quasistatische Vorgänge

$$\begin{aligned} T \dot{s}_\Lambda &= \rho_0 U_N \left[\varphi - \frac{1}{\rho_0} \mathbf{F} \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{N} \right] \\ &= \rho_0 U_N \mathbf{N} \cdot \left[\varphi \mathbf{1}^R - \frac{1}{\rho_0} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{P} \right] \cdot \mathbf{N} \quad . \end{aligned} \quad (3.81)$$

Dies stimmt mit dem von HEIDUG & LEHNER[HL85] erarbeiteten Resultat überein, wobei von ihnen die Dichte der freien Energie $\psi = \rho_0 \varphi$ verwendet wurde.

Setzt man die Definition des zweiten PIOLA-KIRCHHOFF-Spannungstensors ein, gelangt man zu der Form

$$T \dot{s}_\Lambda = \rho_0 U_N \mathbf{N} \cdot [\boldsymbol{\mu}^R] \cdot \mathbf{N} \quad (3.82)$$

wobei die Definition des Tensors des chemischen Potentials

$$\boldsymbol{\mu}^R := \varphi \mathbf{1}^R - \frac{1}{\rho_0} \mathbf{C} \cdot \mathbf{S}_K \quad (3.83)$$

verwendet wurde. ABEYARATNE & KNOWLES[AK90] und RANIECKI & TANAKA[RT92] haben den Ausdruck (3.83) so erweitert, daß Trägheitseffekte des Materials berücksichtigt werden. Dies soll hier nicht weiter verfolgt werden, es bedeutet aber keine grundsätzliche Einschränkung der folgenden Ausführungen. Eine ebenfalls von dem Stoffgesetzverhalten unabhängige Herleitung hat für den isothermen Fall GURTIN in [Gur95] gegeben. Er spricht dabei aber vom ESHELBY-Tensor. Auf die Zusammenhänge zwischen dieser Bezeichnung und der des Tensors des chemischen Potentials wird noch eingegangen.

HEIDUG & LEHNER haben in [HL85] gezeigt, daß an der Phasengrenze die Projektion des Tensors des chemischen Potentials $\mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\mu}^R \cdot \mathbf{N}$ im Gleichgewicht Null ist und somit als die treibende Kraft der Phasentransformation identifiziert werden kann. Diese Formulierung ist aber an die lokale Orientierung der Phasengrenze gekoppelt. Sucht man nach einer Beschreibung der treibenden Größe der Phasentransformation, die von der lokalen Orientierung der Phasengrenze unabhängig ist, kann diese Projektion nicht durchgeführt werden. Als von der Orientierung der Phasengrenze unabhängige Größe verbleibt daher der Tensor des chemischen Potentials.

Es soll daher postuliert werden, daß der Tensor des chemischen Potentials die Erweiterung der skalaren thermodynamischen Kraft der Phasentransformation im hydrostatischen Fall auf den allgemeinen Spannungszustand ist.

Die ersten Überlegungen zur Erweiterung des chemischen Potentials wurden im Bereich der Geophysik durchgeführt. Im Rahmen der Entwicklung eines phänomenologischen Stoffgesetzes zur Beschreibung von Festkörpermischungen hat BOWEN([Bow67],[Bow76]) diese Erweiterung vorgenommen. Daher schlägt GRINFELD in [Gri91] den Term *Bowen's chemical potential tensor* für diese neu eingeführte Größe vor.

Ein verwandter Zweig, der auch auf eine tensorielle Beschreibung von Unstetigkeiten führt, findet sich bei der Untersuchung von Materialdefekten. Wie schon angedeutet ähnelt der Tensor des chemischen Potentials $\boldsymbol{\mu}^R$ in seiner Form dem oftmals im Rahmen dieser Untersuchungen verwendeten ESHELBY-Tensor (von ESHELBY selbst auch als *elastic energy-momentum tensor* bezeichnet ([Esh70])). MAUGIN[Mau93] definiert den quasistatischen ESHELBY-Tensor \mathbf{b} als

$$\mathbf{b} = \rho_0 w \mathbf{1}^R - \mathbf{C} \cdot \mathbf{S}_K \quad . \quad (3.84)$$

Dieser Tensor ist i.a. nichtsymmetrisch, MAUGIN spricht aber von einer Symmetrie bzgl. \mathbf{C} , d.h.

$$\boldsymbol{\mu}^R \cdot \mathbf{C} = \mathbf{C} \cdot (\boldsymbol{\mu}^R)^T \quad . \quad (3.85)$$

Die Dualität zwischen dem modifizierten *energy-momentum tensor*

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{b}^T - \mathbf{P} \quad (3.86)$$

und der CAUCHY-Spannung führte zur Interpretation des Tensors $\boldsymbol{\Sigma}$ als *material-force* ([Cha75]) und zum Konzept der *Eshelbian mechanics* (MAUGIN[MT95]), laut MAUGIN eine Mechanik im Materialraum im Gegensatz zur NEWTONSchen Mechanik im physikalischen Raum. Ähnlich argumentieren GURTIN[Gur95] und SIMHA &

BHATTACHARYA[SB98], diese sehen in der Projektion des ESHELBY-Tensors auf die Phasengrenze die „Kraft“ in der Referenzkonfiguration, die eine Veränderung der Position der Phasengrenze hervorruft. So werden in Analogie zur Impulsbilanzgleichungen Bilanzgleichungen für diese Größe sowohl in integraler als auch in lokaler Form aufgestellt. Die integrale Form ähnelt dabei der Formulierung des „J-Integrals“. Die Form der lokalen Formulierung entspricht der Form der Impulsbilanz, so wird das Gleichgewicht zwischen der Divergenz des ESHELBY-Tensors und den volumenhaft verteilten Anteilen⁴ in der Form

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad (3.87)$$

gefordert. Aufgrund der Ähnlichkeit mit der Spannung verwenden SIMHA & BHATTACHARYA auch den Ausdruck *configurational bulk stress*.

KIENZLER & HERRMANN haben in [KH97] die Eigenschaften dieses Tensors wie die physikalische Interpretation der Komponenten, Invarianten und Eigenwerte mit Eigenrichtungen und Extremwerte für den ebenen Fall näher untersucht. Sie zeigen, daß sich die Komponenten b_{ij} des ESHELBY-Tensors als die Änderungen der Energiedichte $\rho_0 w$ aufgrund der Translation eines Materialpunktes auf einer Materialgrenze mit Normalenrichtung x_i in x_j -Richtung interpretieren lassen. Überträgt man diese Aussage auf den Tensor des chemischen Potentials, können die Komponenten μ_{ij}^R des Tensors des chemischen Potentials $\boldsymbol{\mu}^R$ als die Änderung der spezifischen freien HELMHOLTZ-Energie aufgrund der Bewegung einer Phasengrenze mit der Normalenrichtung x_i in Richtung x_j interpretiert werden.

Unter Berücksichtigung der Herleitung der Größen $\boldsymbol{\mu}^R$ und \mathbf{b} scheint die Aussage, daß der Tensor des chemischen Potentials die Verallgemeinerung des ESHELBY-Tensors auf einen allgemein nichtisothermen Prozess ist, tragbar zu sein. Diese Aussage wird durch die von ŠILHAVÝ in [Šil97] verwendete Bezeichnung unterstützt. Er definiert dort den isothermen referenziellen ESHELBY-Tensor als

$$\bar{\mathbf{P}} = \varphi \mathbf{1}^R - \frac{1}{\rho_0} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{P} = -J \mathbf{F}^T \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}} \left(\frac{\varphi}{J} \right) , \quad (3.88)$$

was mit der hier verwendeten Definition des Tensors des chemischen Potentials übereinstimmt (s. auch [SP97],[Sam97]). Dem widerspricht jedoch GRINFELD in [Gri91], der sich auf die ursprünglich von ESHELBY selbst eingeführte Definition ([Esh57],[Esh61]) bezieht. Auf eine weitergehende Diskussion dieser Frage soll hier verzichtet werden.

3.3.3.3 Beschreibung der Phasenkinetik

Verwendet man als Verallgemeinerung des chemischen Potentials den Tensor des chemischen Potentials, so stellt sich die Frage nach der thermodynamisch konjugierten Größe.

⁴Diese volumenhaft verteilten Anteile werden laut GURTIN[Gur95] nicht durch ein Materialgesetz sondern durch Gleichung (3.87) bestimmt. Weiter geht der Autor nicht auf diese Größe ein, er bezeichnet sie als in dem Rahmen der der von ihm in [Gur95] diskutierten Theorien als „generally unimportant“.

Folgt man dem LEGENDRESchen-Algorithmus, so sollte sie ein Tensor gleicher Stufe wie der Tensor des chemischen Potentials sein. Führt man den Tensor

$$\dot{\mathbf{m}}^R := \rho_0 U_N \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} \quad (3.89)$$

ein, so läßt sich Gleichung (3.81) in der Form

$$T \dot{s}_\Lambda = [\boldsymbol{\mu}^R] : \dot{\mathbf{m}}^R \geq 0 \quad (3.90)$$

darstellen.

Dies kann zur Definition der Dissipationsenergie aufgrund der Umwandlung bezogen auf ein Flächenelement in der Referenzkonfiguration

$$d\varphi_{\Lambda_0} := T \dot{s}_\Lambda dA_0 \quad (3.91)$$

genutzt werden. Unter Berücksichtigung dieser Definition kann folgende Interpretation des Tensors $\dot{\mathbf{m}}^R$ vorgenommen werden: der Anteil $\rho_0 U_N \mathbf{N}$ repräsentiert die umgewandelte Masse pro Zeiteinheit. Die Richtung \mathbf{N} kann als Richtung, in die sich ein auf der Phasengrenze positionierter mitbewegter Beobachter befindet, interpretiert werden. Für diesen Beobachter ist die Größe $\rho_0 U_N \mathbf{N}$ daher ein an ihm vorbeilaufender Massenstrom. Der Anteil $\mathbf{N} dA_0$ ist das orientierte Flächenelement.

Es soll im folgenden ein auf der Beschreibung der Phasentransformation mittels des Tensors des chemischen Potentials $\boldsymbol{\mu}^R$ und der hier neu eingeführten kinematischen Größe $\dot{\mathbf{m}}^R$ basierendes Stoffgesetz entwickelt werden.

Zur Einordnung der hergeleiteten tensoriellen Größen in klassische skalarwertige Beschreibungen soll bereits hier auf eine Eigenschaft des Tensors $\dot{\mathbf{m}}^R$ hingewiesen werden. Die Größe

$$\text{tr} (\dot{\mathbf{m}}^R dA_0) dt = \rho_0 U_N dA_0 dt \quad (3.92)$$

entspricht dem in der Zeit dt von der durch die Bewegung der Phasengrenze durch dA_0 umgewandelten Masse. Weiterhin kann der Tensor $\boldsymbol{\mu}^R$ für den hydrostatischen Spannungszustand $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{1}$ auf das skalare chemische Potential $\mu = \varphi + p/\rho$ zurückgeführt werden. Bei Beschränkung auf den hydrostatischen Spannungszustand fällt die tensorielle Beschreibung auf eine klassische Beschreibung mit der GIBBS-Energie als thermodynamisch treibender Kraft und der Änderung der Massenanteile als kinetische Größe zurück. Dieser Umstand wird später weiter genutzt. Auf weitere Eigenschaften wird im Rahmen der globalen Betrachtung eines heterogenen Stoffes eingegangen.

3.3.3.4 Beschreibung der transformationsinduzierten Deformation

Es soll in diesem Abschnitt untersucht werden, inwieweit die in den vorangegangenen Ausführungen erarbeiteten Tensoren die lokale Beschreibung der transformationsinduzierten Dehnung, der BAIN-Dehnung, ermöglichen.

Die spannungsfreie Deformation aufgrund der Transformation des umgewandelten Gebietes kann, bei Beschränkung auf infinitesimale Formänderungen, durch

$$\boldsymbol{\varepsilon}^* = \delta \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} + \frac{\gamma}{2} (\mathbf{N} \otimes \mathbf{N}_\perp + \mathbf{N}_\perp \otimes \mathbf{N}) \quad (3.93)$$

mit den Konstanten δ und γ beschrieben werden. Da in diesem Tensor ein Vektor \mathbf{N}_\perp zur Beschreibung der Richtung der Scherung enthalten ist, reicht der Tensor \mathbf{m}^R nicht aus, um die Deformation zu beschreiben. Es muß daher zur vollständigen Beschreibung noch eine Bestimmungsgleichung für die Richtung \mathbf{N}_\perp in der Habitusebene gefunden werden. Eine Möglichkeit der Festlegung könnte analog zur Überlegung MAGEES[Mag66] zu einer Abhängigkeit der Ausrichtung der Deformation vom herrschenden Spannungszustand sein. Weiterhin denkbar ist auch eine von $\boldsymbol{\mu}^R$ abhängige Beschreibung.

An dieser Stelle soll auf diese Betrachtungen nicht weiter eingegangen werden, da im weiteren Verlauf ein makroskopisches Stoffgesetz zur Beschreibung der Austenit-Martensit Transformation von TRIP-Stählen erarbeitet werden soll. Da die gegenseitige Beeinflussung der Martensiteinschlüsse in weiten Bereichen der Umwandlung einen nicht vernachlässigbaren Effekt darstellt, soll bei der Modellierung des makroskopischen Materialverhaltens ein phänomenologischer Ansatz verwendet werden. Die vorangegangenen Ausführungen sollten nur verdeutlichen, daß der Tensor \mathbf{m}^R allein nicht zur Beschreibung der transformationsinduzierten Dehnung ausreicht.

Es sei hier noch erwähnt, daß eine andere Möglichkeit die Beschreibung der transformationsinduzierten Dehnung in Abhängigkeit vom chemischen Potential und Formulierung des Massenumsatzes in Abhängigkeit von der transformationsinduzierten Dehnung darstellt (LUSK[Lus96]).

3.4 Thermomechanik eines heterogenen Stoffes

In diesem Abschnitt werden die bisher erarbeiteten Größen durch Mittelung auf einen ausgedehnten, heterogenen Körper übertragen. Zunächst werden diese auf einen durch eine Phasengrenze durchschnittenen Körper bezogen, um dann auf einen allgemein mehrphasigen Körper übertragen zu werden. Der Begriff „ausgedehnter Körper“ soll sich hier zunächst auf eine Umgebung nahe der Phasengrenze beziehen. Der Schritt zum repräsentativen Volumenelement wird dann durch die Vereinigung der heterogenen und homogenen Untermengen erreicht.

3.4.1 Mittelungsvorschriften

In Kapitel 3.4.2 werden die Energie- und Entropiebilanzgleichungen eines heterogenen Körpers in der Referenzkonfiguration erarbeitet. Dazu sollen hier einige Vorüberlegungen angestellt werden. Diese wurden implizit schon bei der Herleitung der Sprungbedingungen

in der Referenzkonfiguration verwendet? Hier soll zum Verständnis der hergeleiteten Formeln nochmals ein Teil des zu den Sprungbedingungen führenden Vorgehens vorgestellt werden.

Der aus einem homogenen Körper ausströmende Anteil eines allgemeinen Flusses $\boldsymbol{\phi}$ berechnet sich in Größen der aktuellen Konfiguration mittels des Integrals über die Körperoberfläche $\partial\mathcal{B}$ zu

$$\dot{\Phi}_{hom} = \int_{\partial\mathcal{B}} \boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{n} \, dA \quad . \quad (3.94)$$

Verwendet man die Transformation des Flächenelementes von der aktuellen in die Ausgangskonfiguration (s. u.a. [Kos86])

$$\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{n} \, dA = J \mathbf{N} \, dA_0 \quad , \quad (3.95)$$

folgt für die Darstellung in den Größen der Referenzkonfiguration

$$\dot{\Phi}_{hom} = \int_{\partial\mathcal{B}_0} J \boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{N} \, dA_0 \quad . \quad (3.96)$$

Wendet man Gleichung (3.96) auf durch die Grenze Λ_0 getrennte, homogene Körper \mathcal{R}_0^+ und \mathcal{R}_0^- unter Beachtung des Vorzeichens wie in Abb. 3.2 gekennzeichnet an, gelangt man zu dem Ausdruck für einen heterogenen Körper

$$\dot{\Phi} = \int_{\partial\mathcal{R}_0} (J \boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{F}^{-T}) \cdot \mathbf{N} \, dA_0 - \int_{\Lambda_0} [J \boldsymbol{\phi} \mathbf{F}^{-T}] \cdot \mathbf{N} \, dA_0 \quad . \quad (3.97)$$

Zu einer analogen Formulierung für eine skalare Größe ϕ gelangt man ausgehend von einer alternativen Formulierung des REYNOLDSschen-Transporttheorem (3.68) und dem Zusammenhang (3.95) als

$$\begin{aligned} \dot{\Phi}_{hom} &= \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} \rho \phi \, dV = \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} \, dV_0 + \int_{\partial\mathcal{B}_0} \rho_0 \phi \mathbf{v} \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \, dA_0 \\ &= \int_{\mathcal{B}_0} \rho_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} \, dV_0 + \int_{\partial\mathcal{B}_0} \rho_0 \phi \mathbf{v}^R \mathbf{N} \, dA_0 \quad . \end{aligned} \quad (3.98)$$

Erweitert man dies auf einen heterogenen Körper folgt unter Beachtung von (3.62)

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 \phi \, dV_0 = \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} \, dV_0 - \int_{\Lambda_0} \rho_0 U_N [\phi] \, dA_0 \quad . \quad (3.99)$$

Die Anwendung der Gleichungen (3.97) und (3.99) soll hier für einige Größen demonstriert werden. Für die Formänderungsleistung eines homogenen Körpers

$$\dot{W}_{hom} = \int_{\partial\mathcal{B}_0} \mathbf{v} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{N} \, dA_0 \quad (3.100)$$

führt die Anwendung der Gleichung (3.97) unter Einsetzen von $J\phi\mathbf{F}^{-T} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{P}$ zu dem Ausdruck

$$\dot{W} = \int_{\partial\mathcal{R}_0} \mathbf{v} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{N} \, dA_0 - \int_{\Lambda_0} [\mathbf{v} \cdot \mathbf{P}] \cdot \mathbf{N} \, dA_0 \quad . \quad (3.101)$$

Der Vergleich von (3.100) und (3.101) verdeutlicht, daß der erste Term die Formänderungsleistung aufgrund der von außen angreifenden Kräfte widerspiegelt, während der zweite Term den durch die Phasentransformation bedingten Anteil repräsentiert. Daher wird im weiteren die Definition der Formänderungsleistung der Phasentransformation

$$\dot{W}_{pt} := - \int_{\Lambda_0} [\mathbf{v} \cdot \mathbf{P}] \cdot \mathbf{N} \, dA_0 \quad (3.102)$$

verwendet. Somit läßt sich (3.101) auch in der Form

$$\dot{W} = \dot{W}_{hom} + \dot{W}_{pt} \quad (3.103)$$

darstellen.

Eine analoge Überlegung führt für den aus einem homogenen Körper ausfließenden Wärmestrom

$$\dot{Q}_{hom} = \int_{\partial\mathcal{B}_0} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \, dA_0 \quad (3.104)$$

bei Anwendung der Gleichung (3.97) unter Einsetzen von $J\phi\mathbf{F}^{-T} = \mathbf{Q}$ zu

$$\dot{Q} = \int_{\partial\mathcal{R}_0} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \, dA_0 - \int_{\Lambda_0} [\mathbf{Q}] \cdot \mathbf{N} \, dA_0 \quad . \quad (3.105)$$

Darauf basierend kann die zur Phasentransformation notwendige Wärme als

$$\dot{Q}_\Lambda := - \int_{\Lambda_0} [\mathbf{Q}] \cdot \mathbf{N} \, dA_0 \quad (3.106)$$

definiert und Gleichung (3.105) in der Form

$$\dot{Q} = \dot{Q}_{hom} + \dot{Q}_\Lambda \quad (3.107)$$

neu formuliert werden.

Definiert man eine mittlere GREEN-LAGRANGESCHE Dehnung als

$$\bar{\mathbf{E}} := \frac{1}{M} \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 \mathbf{E} \, dV_0 \quad , \quad (3.108)$$

folgt für deren zeitliche Ableitung unter Beachtung der Gleichung (3.99)

$$\dot{\bar{\mathbf{E}}} := \frac{D}{Dt} \bar{\mathbf{E}} = \frac{1}{M} \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 \dot{\mathbf{E}} \, dV_0 - \frac{1}{M} \int_{\Lambda_0} \rho_0 U_N [\mathbf{E}] \, dA_0 \quad . \quad (3.109)$$

Nimmt man an, daß die unmittelbar der Phasentransformation zugeordnete Deformation die bisher erwähnte spannungsfreie Deformation \mathbf{E}^* ist, folgt

$$\dot{\bar{\mathbf{E}}} := \frac{D}{Dt} \bar{\mathbf{E}} = \frac{1}{M} \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 \dot{\mathbf{E}} dV_0 - \int_{\Lambda_0} \frac{\rho_0 U_N}{M} \mathbf{E}^* dA_0 . \quad (3.110)$$

Dies stellt zu diesem Zeitpunkt noch keine Einschränkung dar. Es kann z.B. die plastische Deformation aufgrund der Phasentransformation auch mit diesem Ansatz beschrieben werden, da diese eher das umgebende Material betrifft als die Phasengrenze selbst.

Für den zweiten PIOLA-KIRCHHOFF Spannungstensor kann die Mittelung

$$\bar{\mathbf{S}}_K := \frac{1}{M} \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 \mathbf{S}_K dV_0 \quad (3.111)$$

und somit die Zeitableitung

$$\dot{\bar{\mathbf{S}}}_K := \frac{D}{Dt} \bar{\mathbf{S}}_K = \frac{1}{M} \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 \dot{\mathbf{S}}_K dV_0 - \int_{\Lambda_0} \frac{\rho_0 U_N}{M} [\mathbf{S}_K] dA_0 . \quad (3.112)$$

verwendet werden. Eine Diskussion zur Frage der Verwendbarkeit der Volumenmittelung der Spannungen findet sich im Abschnitt 4.1.2.

3.4.2 Bilanzgleichungen

Hier soll das im Abschnitt 3.3.2 zur Herleitung der Sprungbedingungen an der Phasengrenze verwendete Verfahren benutzt werden, um integrale Bilanzgleichungen für Energie und Entropie zu erarbeiten.

Formuliert man die Bilanzgleichung für die Energie aus Tabelle 3.4 für zwei nicht von Unstetigkeitsflächen durchschnitene Phasen \mathcal{R}_0^+ und \mathcal{R}_0^- und addiert die beiden Gleichungen, gelangt man zu

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \frac{D}{Dt} U = \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 u dV_0 \\ &= \int_{\partial \mathcal{R}_0} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{Q}) \cdot \mathbf{N} dA_0 + \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + r) dV_0 - \int_{\Lambda_0} [\mathbf{v} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{Q}] \cdot \mathbf{N} dA_0 \\ &= \int_{\partial \mathcal{R}_0} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{Q}) \cdot \mathbf{N} dA_0 + \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + r) dV_0 + \dot{W}_{pt} - \dot{Q}_\Lambda \end{aligned} \quad (3.113)$$

mit den Vereinbarungen (3.102) und (3.106). Vergleicht man diesen Ausdruck mit dem für einen homogenen Körper aus Tabelle 3.4 unter Vernachlässigung der dynamischen Anteile

$$\dot{U} = \int_{\partial \mathcal{R}_0} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{Q}) \cdot \mathbf{N} dA_0 + \int_{\mathcal{R}_0} \rho_0 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + r) dV_0 \quad (3.114)$$

wird offensichtlich, daß die beiden Terme \dot{W}_{pt} und \dot{Q}_Λ die Änderung der inneren Energie aufgrund der Phasentransformation, die sog. „latente Wärme der Phasentransformation“ darstellen.

ŠILHAVÝ[Šil97] bezeichnet die gesamte, während der Transformation aus Gleichung (3.113) resultierende Wärme als latente Wärme der Phasentransformation⁵. Hier soll aber als latente Wärme der Term

$$\dot{U}_{pt} := \dot{Q}_\Lambda - \dot{W}_{pt} \quad (3.115)$$

aufgefaßt werden; dies entspricht der von WEVER & ROSE[WR58] implizit verwendeten Definition.

Betrachtet man für die Referenzkonfiguration (s. Tabelle 3.4) den zweiten Hauptsatz, kann unter Verwendung der Energiebilanz, der Transformation des REYNOLDSSchen-Transporttheorems (3.68) in die Referenzkonfiguration und der Gleichung (3.80) unter der Annahme konstanter Temperatur der Ausdruck

$$\int_{\mathcal{R}_0} \rho_0(T\dot{s} - \dot{u}) dV_0 + \int_{\partial\mathcal{R}_0} \mathbf{N} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{v} dA_0 + \int_{\Lambda_0} [\boldsymbol{\mu}^R] : \dot{\mathbf{m}}^R dA_0 \geq 0 \quad (3.116)$$

erarbeitet werden. Analoges Vorgehen auf der Basis der Gleichungen für Energie und Entropie aus Tabelle 3.4 führt unter Vernachlässigung der Volumenanteile \mathbf{k} auf

$$\int_{\mathcal{R}_0} \rho_0(T\dot{s} - \dot{u}) dV_0 + \int_{\partial\mathcal{R}_0} \mathbf{N} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{v} dA_0 \geq 0 \quad (3.117)$$

Der Ausdruck für einen homogenen Körper wurde also gerade um den Term

$$\int_{\Lambda_0} [\boldsymbol{\mu}^R] : \dot{\mathbf{m}}^R dA_0 \quad (3.118)$$

erweitert.

Soll ein eine Phasentransformation beschreibendes Stoffgesetz formuliert werden, so muß diese Ungleichung insgesamt erfüllt werden. In der Ungleichung repräsentieren die ersten beiden Terme die Bedingung der thermodynamischen Konsistenz des Stoffgesetzes auf der Meso-Ebene. Ist dieses thermodynamisch konsistent formuliert, so werden die ersten beiden Terme größer oder gleich Null sein. Der dritte Term spiegelt die Bedingung der thermodynamisch konsistenten Beschreibung der Transformationskinetik wider. Im weiteren soll angenommen werden, daß sowohl der Anteil der Meso-Stoffgesetze als auch der Phasentransformation die Ungleichung jeweils getrennt erfüllen. Berücksichtigt man eine Abhängigkeit der plastischen Deformationen der einzelnen Phasen von der Transformation, so kann dies in der Ungleichung berücksichtigt werden.

Auf der Basis dieser Bedingung wird in Kapitel 4.2 ein den letzten Term maximierendes Stoffgesetz zur Beschreibung der Phasentransformation aufgebaut.

⁵In der angegebenen Literaturstelle wird die spezifische latente Wärme sowie ein anderes Vorzeichen benutzt.

3.4.3 Beschreibung der Transformationskinetik

Die im Abschnitt 3.4.1 eingeführten Mittelungsvorschriften können auch auf den Tensor $\dot{\mathbf{m}}^R$ angewendet werden. So soll

$$\dot{\mathbf{M}}^R := \int_{\Lambda_0} \dot{\mathbf{m}}^R \, dA_0 \quad (3.119)$$

definiert werden. Λ_0 kennzeichnet nun hier die Grenze der betrachteten Phase zu allen Nachbarphasen. Weiterhin kann ein Tensor $\dot{\xi}^R$ mit

$$\dot{\xi}^R := \frac{\dot{\mathbf{M}}^R}{M^{tot}} \quad (3.120)$$

definiert werden, wobei M^{tot} die Gesamtmasse des betrachteten heterogenen Körpers und hier als konstant anzusehen ist. Aufgrund der Definition (3.120) folgt, daß die Ausführungen der Eigenschaften des Tensors $\dot{\mathbf{M}}^R$ auch in der Regel für den Tensor $\dot{\xi}^R$ gelten.

Nachfolgend sollen einige Eigenschaften dieser Größe aufgezeigt und deren Konsequenzen für eine Implementation des Massenstromtensors in eine Formulierung zur Beschreibung einer Phasentransformation gezeigt werden.

3.4.3.1 Bedingung der Konstanz der Gesamtmasse

Ändert sich die Gesamtmasse eines heterogenen Körpers während einer Phasentransformation nicht, ist dies mit in die Konstitutivgleichungen einzubeziehen. Diese Forderung kann in der Form

$$\sum_{\alpha} \dot{\xi}^{\alpha} = 0 \quad (3.121)$$

formuliert werden, wobei $\xi^{\alpha} = M^{\alpha}/M^{tot}$ der Massenanteil der Phase α an der Gesamtmasse ist (siehe auch Kapitel 3.4.5). Diese Bedingung sollte daher auch bei einer Beschreibung mit Hilfe des Tensors $\dot{\mathbf{M}}^R$ erfüllt werden. Dazu soll seine Spur berechnet werden:

$$\begin{aligned} \text{tr}(\dot{\mathbf{M}}^R) &= \text{tr} \left(\int_{\Lambda_0} \dot{\mathbf{m}}^R \, dA_0 \right) \\ &= \int_{\Lambda_0} \rho_0 U_N \text{tr}(\mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \, dA_0 \\ &= \int_{\Lambda_0} \rho_0 U_N \, dA_0 \\ &= \dot{M} \end{aligned} \quad (3.122)$$

wobei der Ausdruck zur Berechnung der Massenänderung der untersuchten Phase

$$\dot{M} = \int_{\Lambda_0} \rho_0 U_N dA_0 \quad (3.123)$$

benutzt wurde. Aus Gleichung (3.122) folgt, daß die Spur des Tensors $\dot{\mathbf{M}}^R$ ein Maß für die Massenänderung der Phase ist. Daher kann

$$\dot{M} = \text{tr} \left(\dot{\mathbf{M}}^R \right) \quad (3.124)$$

formuliert werden. Berücksichtigt man dies, läßt sich (3.121) in der Form

$$\sum_{\alpha} \text{tr} \left(\dot{\boldsymbol{\xi}}^{R,\alpha} \right) = 0 \quad (3.125)$$

reformulieren, der Index α kennzeichnet entsprechend die Phase α .

3.4.3.2 Anfangsbedingungen für die Transformation

In den bisherigen Ausführungen ist davon ausgegangen worden, daß eine Phasengrenze existiert. Sollte aber ein homogener Stoff vorliegen, können die eine Phasengrenze voraussetzenden Gleichungen nicht angewendet werden. Daher soll an dieser Stelle eine Betrachtung dieses Zustandes vorgenommen werden.

Es wird im folgenden davon ausgegangen, daß ein materieller Punkt als Sonderfall einer Kugel mit gegen Null strebenden Radius angesehen wird. Es soll daher hier der Tensor $\dot{\mathbf{M}}^R$ eines kugelförmigen Einschlusses mit dem Radius R und einer homogenen Normalausbreitungsgeschwindigkeit U_N berechnet werden. Mit $\mathbf{N} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta)^T$ ergibt sich für $\dot{\mathbf{M}}^R$

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{M}} &= \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \dot{\mathbf{m}}^R R^2 \sin \theta d\varphi d\theta \\ &= \frac{4}{3} \pi \rho_0 U_N R^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{3} \dot{M} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (3.126)$$

Daraus folgt, daß der deviatorische Anteil von \mathbf{M}^R einer Phase bei gegen Null gehenden Kugelanteil auch gegen Null streben muß. Man kann postulieren, daß dies für den Fall eines zweiphasigen Stoffes daher sowohl für den Beginn der Transformation als auch für deren Ende gilt. Eine Abschwächung dieses Postulats kann über die Argumentation erreicht

werden, daß die zusammenwachsenden Inseln gleicher Phase nicht einen homogenen Stoff ergeben sondern intern noch Phasengrenzen zwischen den zusammengewachsenen Inseln der Produktphase existieren. Ein mögliches Beispiel sind Martensit-Martensit Phasengrenzen bei der Austenit-Martensit Umwandlung.

3.4.3.3 Symmetrieeigenschaften des Tensors \dot{M}^R

Für den lokalen Tensor

$$\dot{m}^R := \rho_0 U_N \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} \quad (3.127)$$

gilt aufgrund seiner Definition offensichtlich die Symmetrieeigenschaft

$$\left(\dot{m}^R\right)^T = \dot{m}^R \quad (3.128)$$

Da die Symmetrieeigenschaft zweier Tensoren auch bei deren Addition und somit auch bei der Integration erhalten bleibt, kann man daraus auch auf die Symmetrie des globalen Tensors \dot{M}^R als

$$\left(\dot{M}^R\right)^T = \dot{M}^R \quad (3.129)$$

schließen. Auf die Symmetrieeigenschaften wird bei den Präsentation des konkreten Stoffgesetzes und der Diskussion der Ergebnisse nochmals näher eingegangen.

3.4.3.4 Ein Beispiel zur Berechnung des Tensors \dot{M}^R

Zur Verdeutlichung der Eigenschaften des Tensors \dot{M}^R soll ein ebenes Problem wie in Abb. 3.3 dargestellt näher untersucht werden.

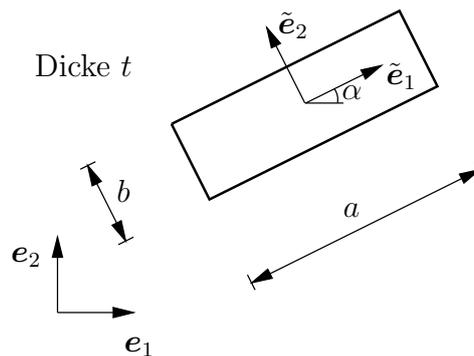


Abb. 3.3: Einschluss einer Phase α

Die Dicke t sei konstant, der Einschluß dehnt sich mit der Geschwindigkeit $\dot{a}/2$ jeweils an den kurz dargestellten Kanten und mit $\dot{b}/2$ an den langen Kanten orthogonal zu den Kanten aus. Die Berechnung des globalen Tensors \dot{M}^R kann mit der bekannten Geometrie

konkret erfolgen. In dem lokalen Koordinatensystem $(\tilde{\mathbf{e}}_1, \tilde{\mathbf{e}}_2)$ werden die Komponenten von $\dot{\mathbf{M}}^R$ zu

$$\dot{\mathbf{M}}^R = \rho_0 t \begin{pmatrix} \dot{a}b & 0 \\ 0 & \dot{b}a \end{pmatrix}. \quad (3.130)$$

Die Darstellung des Tensors in Komponenten des globalen Koordinatensystems $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ ergibt sich über die Drehmatrix \mathbf{Q} als

$$\dot{\mathbf{M}}^R = \mathbf{Q}^T \cdot \dot{\mathbf{M}}^R \cdot \mathbf{Q} \quad (3.131)$$

mit

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (3.132)$$

Aufgrund der Struktur der Gleichung (3.132) selbstverständlich, aber hier doch erwähnenswert ist der Umstand, daß die Tensorkomponenten von $\dot{\mathbf{M}}^R$ gerade die Komponenten durch die Eigenwerte der Matrix $\dot{\mathbf{M}}^R$ aufspannbaren Diagonalmatrix sind und die Richtungen der Eigenvektoren denen der Einheitsvektoren des lokalen Koordinatensystem $(\tilde{\mathbf{e}}_1, \tilde{\mathbf{e}}_2)$ entsprechen.

Basierend auf diesem Grundmodell werden nun einige Fallbeispiele untersucht:

- (I) Es soll nun angenommen werden, daß der Winkel α den Wert von $\alpha = 45^\circ$ annimmt. Die Komponenten des Tensors $\dot{\mathbf{M}}^R$ lauten in diesem Fall

$$\dot{\mathbf{M}}^R = \rho_0 t \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \dot{a}b + \dot{b}a & \dot{a}b - \dot{b}a \\ \dot{a}b - \dot{b}a & \dot{a}b + \dot{b}a \end{pmatrix} \quad (3.133)$$

Es soll zu diesem Beispiel nur festgestellt werden, daß die sonst eher einfache Form mit wenigen besetzten Komponenten des Tensors auf der Hauptdiagonalen verlorengegangen ist und alle für das ebene Problem relevanten Komponenten besetzt sind.

- (II) Vereinfacht man das vorhergehende Beispiel auf den Fall eines isotropen Einschlusses, d.h. setzt man $b = a$, können die Tensorkomponenten zu

$$\dot{\mathbf{M}}^R = \rho_0 t \begin{pmatrix} \dot{a}a & 0 \\ 0 & \dot{a}a \end{pmatrix} \quad (3.134)$$

berechnet werden. Dieses Beispiel deutet darauf hin, daß bei isotropem Materialverhalten und Orientierungsverteilung der Phasengrenzen der Kugelanteil des Tensors $\dot{\mathbf{M}}^R$ ausreicht, um die Transformationskinetik zu beschreiben.

- (III) Nimmt man eine gleichverteilte Menge von Einschlüssen in der umgebenden Matrix an und berechnet die Mittelung über alle Orientierungen, folgt ausgehend von dem

Tensor des ersten Fallbeispiels

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \dot{\mathbf{M}}^R d\alpha = \rho_0 t \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \dot{a}b + \dot{b}a & 0 \\ 0 & \dot{a}b + \dot{b}a \end{pmatrix}. \quad (3.135)$$

Es ist also auch bei einer lokalen Anisotropie der Einschlüsse bei einer gleichverteilten Orientierung von einem gegen Null strebenden deviatorischen Anteil des Tensors $\dot{\mathbf{M}}^R$ auszugehen.

3.4.3.5 Einschränkungen bei der Verwendung des Tensors $\dot{\mathbf{M}}^R$

Es soll hier bereits auf ein Problem bei der Verwendung des Tensors $\dot{\mathbf{M}}^R$ hingewiesen werden. Da der Tensor Informationen über die Geometrie der Einschlüsse beinhaltet, hat er auch den sich ergebenden geometrischen Restriktionen zu unterliegen. Dies soll an einem Beispiel erläutert werden. Es existiere zum Zeitpunkt $t = 0$ eine Menge gleichverteilter, würfelförmiger Einschlüsse mit den Kantenlängen x_0 und mit dem Mittelpunktsabstand l_0 in allen drei Dimensionen (s. Abb. 3.4). Es habe bisher gleichmäßiges Wachstum in allen drei Richtungen geherrscht, daher berechnet sich \mathbf{M}^R zu

$$\mathbf{M}^R = \int \dot{\mathbf{M}}^R dt = \frac{\rho_0 x_0^3}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.136)$$

Es wird nun angenommen, daß die Einschlüsse in x_1 -Richtung wachsen, die anderen Richtungen verändern sich nicht. Es kann der Tensor $\dot{\mathbf{M}}^R$ zu

$$\dot{\mathbf{M}}^R = \rho_0 x_0^2 \dot{x}_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.137)$$

berechnet werden. Integriert man die 11-Komponente, folgt

$$\mathbf{M}^R = \frac{\rho_0 x_0^3}{3} \begin{pmatrix} 3x_1/x_0 - 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.138)$$

Das Wachstum in dieser Richtung kann aber nur so lange vorherrschen, bis die Einschlüsse zusammenwachsen. Dies ist bei $x_1 = l_0$ gegeben. Der Tensor \mathbf{M}^R sollte daher zu diesem Zeitpunkt diese Beschränkung des weiteren Wachstum widerspiegeln. \mathbf{M}^R hat den Wert

$$\mathbf{M}^R = \frac{\rho_0 x_0^3}{3} \begin{pmatrix} 3l_0/x_0 - 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.139)$$

und ξ^R den Wert

$$\xi^R = \frac{x_0^3}{3l_0^3} \begin{pmatrix} 3l_0/x_0 - 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.140)$$

Bisher ist es nicht gelungen, in der Struktur dieser Tensoren die geometrische Restriktion zu identifizieren. Daher kann sie auch bei der Erarbeitung der Evolutionsgesetze nicht berücksichtigt werden.

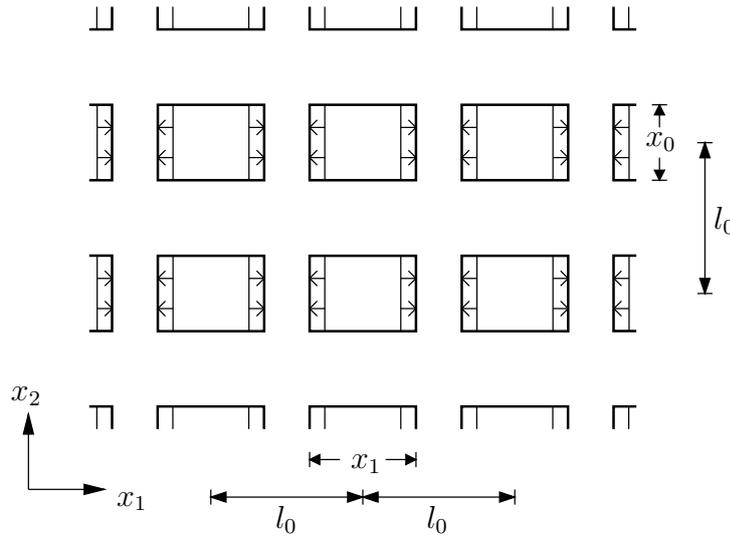


Abb. 3.4: Gleichverteilte Einschlüsse mit Mittelpunktsabstand. Der Abstand der Einschlüsse orthogonal zur dargestellten Ebene sei ebenfalls l_0 , deren Länge in dieser Richtung x_3 . Angedeutet ist die Ausdehnung der Einschlüsse in x_1 -Richtung.

Weiterhin sind die bei der Integration erlangten Ergebnisse für den Tensor ξ^R nicht pfadunabhängig. Es können daher bei gleicher Gestalt zweier Einschlüsse unterschiedliche Werte des jeweiligen Tensors ξ^R aufgrund der unter Umständen unterschiedlichen Gestalt zu einem früheren Zeitpunkt existieren⁶. Es ist daher eher die Rate $\dot{\xi}^R$ ein Maß für die Veränderung der Gestalt des Einschlusses als ξ^R ein absolutes Maß für die momentane Gestalt.

Ein möglicher Ausweg aus diesem Dilemma kann die Einführung einer relativen Größe bieten. Definiert man

$$\dot{\xi}^R = \frac{\dot{M}^R}{\text{tr}(M^R)} \quad (3.141)$$

⁶Das gleiche Problem stellt sich aber auch z.B. bei der Verwendung des GREEN-LAGRANGE-Tensors als Dehnungsmaß. Vor diesem Hintergrund ist auch der Vorschlag der relativen Größe $\dot{\xi}^R$ zu sehen, die bei Integration auf ein logarithmisches Maß führt.

folgt für das vorangegangene Beispiel bei allgemeiner Ausdehnung in alle drei Richtungen

$$\dot{\xi}^R = \begin{pmatrix} \dot{x}_1/x_1 & 0 & 0 \\ 0 & \dot{x}_2/x_2 & 0 \\ 0 & 0 & \dot{x}_3/x_3 \end{pmatrix}. \quad (3.142)$$

Für diese Größe besteht in diesem Beispiel das Problem der Pfadabhängigkeit nicht. Allerdings besteht bei erst gerade einsetzender Transformation das Problem, das der Nenner der Bestimmungsgleichung Null ist. Unter Berücksichtigung der Ähnlichkeit der Beschreibung der Deformation eines Körpers mit den dort eingeführten Maßen und den hier zur Beschreibung der Phasengrenze eingeführten Größen scheint die Übertragung der Konzepte auf das hier vorliegende Problem ein möglicher Weg zur Lösung der aufgezeigten Dilemmata sein.

Es soll aber hier, trotz der angesprochenen Probleme, zur Erlangung erster Ergebnisse weiterhin die Größe ξ^R verwendet werden.

3.4.4 Aufspaltung der Phasentransformationstensoren

Die vorangegangenen Ausführungen haben gezeigt, daß der Tensor \dot{M}^R und somit auch der Tensor $\dot{\xi}^R$ zwei Charakteristika beinhalten: einerseits die direkt physikalisch, als zum Massenzuwachs proportionale Größe interpretierbare Spur; andererseits die Richtungsinformation im deviatorischen Anteil. Daher soll hier eine Aufspaltung des Tensors $\dot{\xi}^R$ in diese Anteile vorgenommen werden. Es soll

$$\dot{\xi}^R = \mathbf{1} \frac{1}{3} \dot{\xi} + \dot{\xi}'^R \quad (3.143)$$

gelten, wobei die Rate des Massenanteils $\dot{\xi}$ durch

$$\dot{\xi} = \text{tr} \left(\dot{\xi}^R \right) \quad (3.144)$$

definiert wird und somit für $\dot{\xi}'^R$

$$\dot{\xi}'^R = \dot{\xi}^R - \mathbf{1} \frac{1}{3} \text{tr} \left(\dot{\xi}^R \right) \quad (3.145)$$

folgt.

Wie bereits im Abschnitt 3.3.3 erwähnt läßt sich für den hydrostatischen Spannungszustand der Tensor des chemischen Potentials auf das skalare chemische Potential zurückführen. Setzt man den hydrostatischen Spannungszustand mit

$$\sigma = \sigma \mathbf{1} \quad (3.146)$$

an, folgt für den Tensor des chemischen Potentials

$$\boldsymbol{\mu}^R = \mathbf{1} \left(\varphi - \frac{\sigma}{\rho} \right) . \quad (3.147)$$

Dies verwendet läßt sich das skalare chemische Potential als

$$\mu := \varphi - \frac{\sigma}{\rho} \quad (3.148)$$

definieren. Berechnet man die Spur des Tensors des chemischen Potentials und setzt den CAUCHY-Spannungstensor ein, folgt

$$\text{tr}(\boldsymbol{\mu}^R) = \varphi \text{tr}(\mathbf{1}) - \frac{1}{\rho} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) . \quad (3.149)$$

Für den hydrostatischen Spannungszustand folgt

$$\mu = \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\mu}^R) . \quad (3.150)$$

Es liegt daher auch eine Aufspaltung des Tensors des chemischen Potentials in einen skalaren und einen deviatorischen Anteil nahe. Es soll daher

$$\boldsymbol{\mu}^R = \mathbf{1}\mu + \boldsymbol{\mu}'^R \quad (3.151)$$

mit

$$\boldsymbol{\mu}'^R = \boldsymbol{\mu}^R - \mathbf{1} \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\mu}^R) \quad (3.152)$$

und μ wie in (3.150) definiert gelten.

3.4.5 Erweiterung auf einen mehrphasigen Körper

Die im Kapitel 3.4 durchgeführten Untersuchungen eines ausgedehnten, von einer Phasengrenze durchschnittenen Körper sollen in diesem Kapitel auf einen allgemein mehrphasigen Körper übertragen werden. Dazu wird vereinfachend angenommen, daß die örtlichen Fluktuationen der Größen innerhalb einer Phase gegenüber den Unterschieden zwischen den Phasen vernachlässigbar sind, und daher von homogenen Phasengrößen ausgegangen werden kann. Im folgenden wird daher die Größe einer Phase durch einen hochgestellten griechischen Index gekennzeichnet.

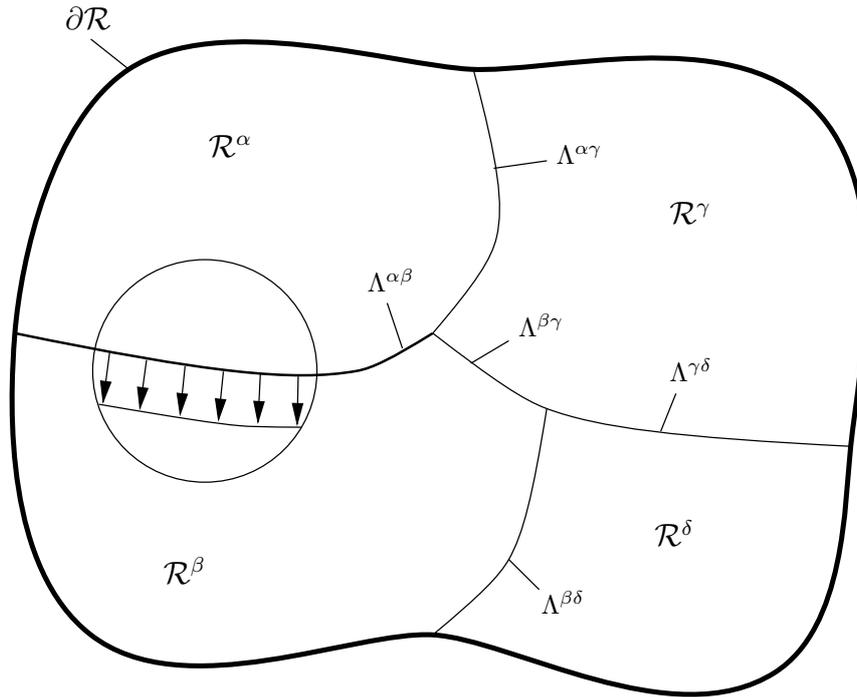


Abb. 3.5: Heterogener Körper mit vier Phasen $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ in aktueller Konfiguration. Hervorgehoben ist die Definition der Richtung des Normalenvektors \mathbf{n} auf der Phasengrenze $\Lambda^{\alpha\beta}$

In Abb.3.5 sind die nachfolgend verwendeten Bezeichnungen verdeutlicht. So bestehe das Gebiet des gesamten heterogenen Körpers \mathcal{R} aus den Teilgebieten \mathcal{R}^α mit

$$\mathcal{R} = \bigcup_{\alpha} \mathcal{R}^\alpha . \quad (3.153)$$

Die einzelnen Teilgebiete \mathcal{R}^α seien durch ihren Rand $\partial\mathcal{R}^\alpha$ begrenzt, analoges gelte für das Gesamtgebiet \mathcal{R} mit $\partial\mathcal{R}$. Aus der Definition der Begrenzung der Phasen folgt die Definition der Phasengrenze zwischen zwei beliebigen Phasen α und β als

$$\Lambda^{\alpha\beta} = \partial\mathcal{R}^\alpha \cap \partial\mathcal{R}^\beta . \quad (3.154)$$

Diese Definition soll noch durch die Unterscheidung von $\Lambda^{\alpha\beta}$ und $\Lambda^{\beta\alpha}$ erweitert werden, welche über die Richtung des auf der Phasengrenze stehenden Normalenvektors definiert wird. Für eine Phasengrenze $\Lambda^{\alpha\beta}$ soll dieser in Richtung der Phase β zeigen, was für diese Phasengrenze in Abb.3.5 verdeutlicht ist. Insofern beeinflusst die Wahl der Integrationsgrenze den Integranden bei den Mittelungsvorschriften.

Für eine nicht notwendigerweise skalare Größe $\phi(\mathbf{X}, t)$ wird mit dieser Definition das gewichtete Volumenintegral in der Referenzkonfiguration über die Phase α zu

$$\phi^\alpha(t) := \frac{1}{M^\alpha} \int_{\mathcal{R}_0^\alpha} \rho_0 \phi(\mathbf{X}, t) dV_0 \quad (3.155)$$

mit

$$M^\alpha := \int_{\mathcal{R}_0^\alpha} \rho_0 \, dV_0 \quad . \quad (3.156)$$

Diese Definition ist nur zur Überführung der im vorangegangenen Kapitel aufgeführten Integralformeln wichtig. Da die Größe $\phi(\mathbf{X}, t)$ des Integranden konstant in der Phase ist, könnte sie auch vor das Integral gezogen werden.

Weiterhin soll die Verwendung eines doppelten griechischen Index definiert werden: Diese Schreibweise soll eine zwei benachbarte Phasen betreffende Größe kennzeichnen. Sie soll in der Form der Differenz zweier durch (3.155) definierter Phasengrößen verwendet werden, d.h.

$$\phi^{\alpha\beta} := \phi^\beta - \phi^\alpha \quad . \quad (3.157)$$

Die zweite Verwendung eines doppelten griechischen Index soll zur Beschreibung eines Flusses zwischen zwei Phasen dienen. Allgemein soll für eine Größe $\tilde{\phi}$

$$\tilde{\Phi}^{\alpha\beta} := \int_{\Lambda_0^{\alpha\beta}} \tilde{\phi}(\mathbf{X}) \, dA_0 \quad (3.158)$$

gelten. $\tilde{\Phi}^{\alpha\beta}$ ist somit ein Maß für den Zuwachs des Volumenintegrals über \mathcal{R}_0^α der spezifischen Größe $\tilde{\phi}$ in der Phase α aufgrund des Zuwachses aus der Phase β . Ein Beispiel hierfür ist die pro Zeiteinheit von der Phase β in die Phase α umgewandelte Masse, wenn $\tilde{\phi} = \rho_0 U_N$ gesetzt wird.

Verwendet man diese Vereinbarungen, kann die tensorielle Größe zur Beschreibung des Massenstroms zwischen den Phasen durch

$$\dot{M}^{R,\alpha\beta} := \int_{\Lambda_0^{\alpha\beta}} \dot{m}^R(\mathbf{X}) \, dA_0 \quad (3.159)$$

beschrieben werden. Es folgt daraus sofort, daß

$$\dot{M}^{R,\alpha\beta} = -\dot{M}^{R,\beta\alpha} \quad (3.160)$$

gilt. Der Gesamtzuwachs für die Phase α berechnet sich dann über die Summation aller Einzelzuwächse

$$\dot{M}^{R,\alpha} = \sum_{\beta} \dot{M}^{R,\alpha\beta} \quad . \quad (3.161)$$

In Analogie zur Definition im Abschnitt 3.3.3 soll

$$\dot{\xi}^{R,\alpha\beta} := \frac{\dot{M}^{R,\alpha\beta}}{M^{tot}} \quad (3.162)$$

mit

$$\dot{\xi}^\alpha = \sum_{\beta} \dot{\xi}^{\alpha\beta} \quad (3.163)$$

und der Massenteil der Phase α als

$$\xi^\alpha = \text{tr}(\boldsymbol{\xi}^\alpha) \quad (3.164)$$

definiert werden.

Der Definition (3.157) folgend soll hier als Beispiel die Differenz des Tensors des chemischen Potentials zweier Phasen spezifiziert werden. Es soll

$$\boldsymbol{\mu}^{R,\alpha\beta} := \boldsymbol{\mu}^{R,\beta} - \boldsymbol{\mu}^{R,\alpha} \quad (3.165)$$

mit den Größen der entsprechenden Phasen $\boldsymbol{\mu}^{R,\alpha}$ und $\boldsymbol{\mu}^{R,\beta}$ gelten.

Unter Verwendung der o.g. Vereinbarungen können sowohl die Energie- als auch die Entropiebilanz neuformuliert werden. Es folgt aus (3.116) unter Berücksichtigung der korrekten Umwandlung des Flächenintegrals der Formänderungsleistung in ein Volumenintegral

$$\sum_{\alpha} \xi^{\alpha} [T \dot{s}^{\alpha} - \dot{u}^{\alpha} + \dot{w}^{\alpha}] + \sum_{\{\alpha\beta\}} \boldsymbol{\mu}^{R,\alpha\beta} : \dot{\boldsymbol{\xi}}^{R,\alpha\beta} \geq 0 \quad . \quad (3.166)$$

Die Notation $\{\alpha\beta\}$ soll hier die Summation über alle Phasengrenzen symbolisieren. Es wird hierbei nur einfach über die Phasengrenzen summiert, d.h. wenn der Term $\{\alpha\beta\}$ in der Summation bereits vorhanden ist, so darf $\{\beta\alpha\}$ nicht vorkommen.

Aus der Energiebilanz (3.113) folgt unter Berücksichtigung von (3.114) für die Änderung der mittleren spezifischen inneren Energie

$$\dot{u} = \frac{\dot{U}}{M} = \sum_{\alpha} \xi^{\alpha} \dot{u}^{\alpha} + \sum_{\{\alpha\beta\}} \dot{\xi}^{\alpha\beta} h^{\xi,\alpha\beta} \quad , \quad (3.167)$$

wobei $h^{\xi,\alpha\beta}$ die bei der Phasentransformation pro umgewandelte Masse freiwerdende Energie darstellt. Es ist möglich, diese Größe auf die im Abschnitt 3.4.2 definierten Größen zu beziehen. Da $h^{\xi,\alpha\beta}$ aber experimentell relativ leicht zu bestimmen ist, soll dieser Weg hier nicht weiter verfolgt werden.

4. Konstitutive Beziehungen

In diesem Kapitel werden die bisher hergeleiteten Größen in ein Stoffgesetz zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasenumwandlung unter Berücksichtigung der plastischen Deformation der einbettenden Matrix implementiert.

Das Modell beschränkt sich ausschließlich auf die Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation und ist somit ein Zweiphasenmodell. Es wird angenommen, daß die Fluktuationen der Größen innerhalb der einzelnen Phasen vernachlässigbar gegenüber den Unterschieden zwischen den Phasen sind. Daher wird von homogenen Phasengrößen ausgegangen.

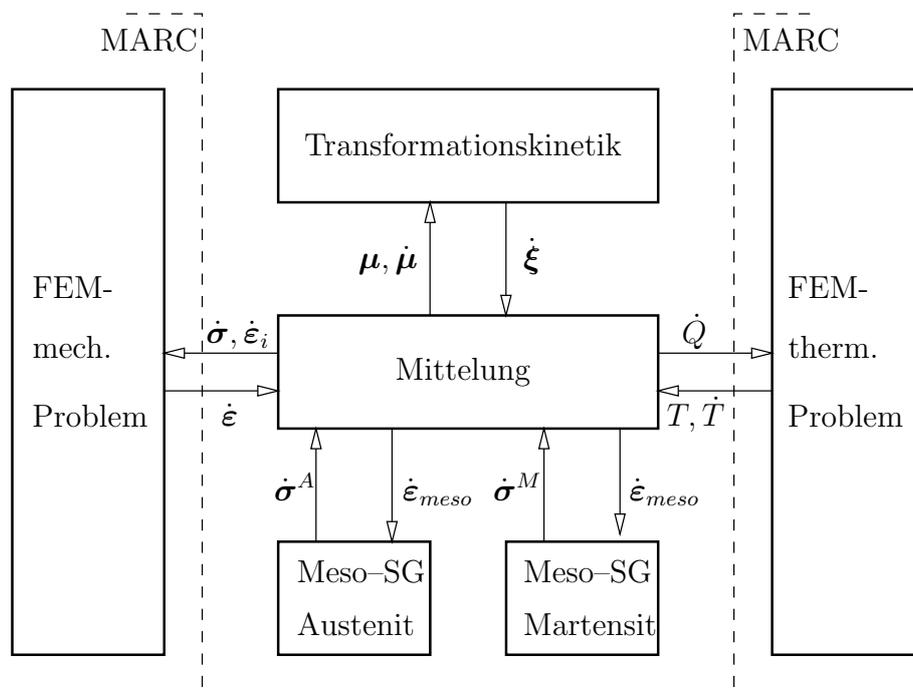


Abb. 4.1: Schematische Darstellung der Zusammenhänge der Komponenten des Stoffgesetzes

Abbildung 4.1 verdeutlicht das Zusammenspiel der Komponenten. Die Symbole an den Pfeilen verdeutlichen mehr den Informationsfluß zwischen den Komponenten und repräsentieren nicht die real ausgetauschten Größen. Auf die konkrete Implementation wird im Anhang näher eingegangen. Weiterhin sind schon vorgreifend die von dem FEM-System MARC übernommenen Aufgaben gekennzeichnet worden.

Die Problembeschreibung läßt sich in folgende Bereiche unterteilen:

- Mittelung
- Transformationskinetik
- Meso-Stoffgesetz
- thermisches Stoffgesetz.

Der Aufbau des Kapitels folgt weitestgehend dieser Unterteilung. In den einzelnen Sektionen werden zunächst die Gleichungen der Komponenten aufgeführt, um im Anschluß daran deren Verhalten bei Variation der Bedingungen bzw. der Materialparameter zu demonstrieren.

Die Phasen werden getrennt modelliert (Meso-Stoffgesetze). Somit können die stark unterschiedlichen Fließgrenzen des Austenits und Martensits berücksichtigt werden. Die Antworten der Meso-Stoffgesetze werden über eine geeignete Mittelungsregel auf die makroskopische Ebene transformiert.

Auf eine Unterscheidung der Austenit- und der Martensitphase bei der Behandlung des thermischen Problems soll verzichtet werden, da die Unterschiede der thermischen Eigenschaften der Phasen als vernachlässigbar angenommen werden.

Das hier formulierte Stoffgesetz soll zur Beschreibung der umwandlungsbedingten Plastizität (TRIP) während der Austenit-Martensit Phasentransformation verwendet werden. Aufgrund der technischen Bedeutung liegt das hauptsächliche Augenmerk auf der Umwandlung von Austenit nach Martensit. Die Umwandlung in Gegenrichtung und die Austenit-Martensit Phasentransformation in Formgedächtnismetallen wird nur am Rande und nur zur Erläuterung der Motivation einiger verwendeter Ansätze behandelt. Die Umwandlung des Austenits in andere Gefügeformen als Martensit wird, wie bereits erwähnt, ebenfalls nicht berücksichtigt. Weiterhin wird bei der Formulierung der Umwandlungskinetik angenommen, daß die kritische Abkühl- bzw. Deformationsgeschwindigkeit zur Bildung von Martensit erreicht wird.

4.1 Mittelung

In diesem Kapitel wird eine andere Bezeichnungsweise als in den vorangegangenen Ausführungen verwendet. Eine nicht indizierte Größe soll nicht mehr eine lokale, auch im RVE positionsabhängige, Größe sondern die makroskopische, gemittelte Größe des RVE darstellen. Dies ist möglich, da die Phasen als homogen angenommen wurden und somit eine Größe in den Phasen durch den Index der entsprechenden Phase gekennzeichnet wird. Beispielsweise wird im nachfolgenden die Größe $\dot{\mathbf{E}}$ in Gleichung (3.110) als $\dot{\mathbf{E}}$ bezeichnet.

In dem untersuchten Zweiphasensystem kennzeichnet ein hochgestellter Index „ A “ eine Größe der Austenit- und ein Index „ M “ eine Größe der Martensitphase. Weiterhin wird vereinfachend zur Beschreibung der Transformationskinetik die Schreibweise

$$\dot{\xi} := \dot{\xi}^{R,AM} \quad (4.1)$$

und somit

$$\dot{\xi} := -\dot{\xi}^{R,MA} \quad (4.2)$$

und unter Erfüllung der Massenbilanz

$$\xi^{R,M} = \xi \quad (4.3)$$

und

$$\xi^{R,A} = \mathbf{1}^R - \xi \quad (4.4)$$

verwendet. Analoge Vereinbarungen gelten dann auch für den Massenanteil $\xi = \text{tr}(\xi)$. Für die Differenz des chemischen Potentials soll die vereinfachende Schreibweise

$$\mu := \mu^{R,A} - \mu^{M,A} \quad (4.5)$$

verwendet werden.

4.1.1 Mittelung der Verzerrungen

In Kapitel 2.3 wurden bereits einige Vor- und Nachteile verschiedener Homogenisierungsmöglichkeiten erörtert. Hier soll ein modifizierter TAYLOR-Ansatz wie von RANIECKI & BRUHNS[RB91] vorgeschlagen verwendet werden. Adaptiert man dieses Konzept auf die vorliegende Beschreibung in der Referenzkonfiguration, gilt für die Phasen α mit $\alpha \in \{A, M\}$

$$\mathbf{E}^\alpha = \mathbf{A}^\alpha : \mathbf{E} + \mathbf{B}^\alpha(T - T_0) + \mathbf{E}^{r1,\alpha} \quad (4.6)$$

mit der Eigendehnung $\mathbf{E}^{r1,\alpha}$ und den Tensoren \mathbf{A}^α und \mathbf{B}^α . In [RB91] werden einige Spezialisierungen und Restriktionen bei der Wahl dieser Größen aufgeführt. Das Konzept soll hier mit $\mathbf{A}^\alpha = \mathbf{1}$ und $\mathbf{B}^\alpha = \mathbf{0}$, d.h. in der Form

$$\mathbf{E}^\alpha = \mathbf{E} + \mathbf{E}^{r1,\alpha} \quad (4.7)$$

verwendet werden. Es gelte somit

$$[\mathbf{E}] = \mathbf{E}^{r1,A} - \mathbf{E}^{r1,M} \quad (4.8)$$

Es wird angenommen, daß die Terme $\mathbf{E}^{r1,A}$ und $\mathbf{E}^{r1,M}$ konstant sind.

Unter Berücksichtigung von Gleichung (3.109) und der Homogenitätsannahme gelte für die globale GREENSche Dehnungsrate $\dot{\mathbf{E}}$ (für kleine Formänderungen siehe z.B. [BCA99]):

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{E}} &= \xi \dot{\mathbf{E}}^M + (1 - \xi) \dot{\mathbf{E}}^A - \frac{1}{M} \int_{\Lambda_0} \rho_0 U_N[\mathbf{E}] \, dA_0 \\ &= \dot{\mathbf{E}}^{AM} + \dot{\mathbf{E}}^{PT} \end{aligned} \quad (4.9)$$

wobei unter Berücksichtigung des verwendeten modifizierten TAYLOR-Ansatzes $\dot{\mathbf{E}}^{AM} = \dot{\mathbf{E}}^M = \dot{\mathbf{E}}^{PT}$ gelte. Die Größe $\dot{\mathbf{E}}^{PT}$ sei durch

$$\dot{\mathbf{E}}^{PT} := -\frac{1}{M} \int_{\Lambda_0} \rho_0 U_N [\mathbf{E}] \, dA_0 \quad (4.10)$$

definiert, $\dot{\mathbf{E}}^{AM}$ wird über die Meso-Stoffgesetze berechnet. Für $\dot{\mathbf{E}}^{PT}$ sollen hier drei Möglichkeiten aufgezeigt werden.

Die erste Möglichkeit besteht in der direkten Integration des Terms (4.10). Dazu ist aber eine konkrete Kenntnis der Geometrie der Phaseneinschlüsse notwendig. Weiterhin wird nur die transformationsinduzierte Dehnung berücksichtigt, die Deformation der umgebenden Matrix und der sich bildenden Phase wird durch diesen Ausdruck nicht erfaßt. Daher ist dieser Ausdruck eher für Modelle interessant, die explizit die Mikrostruktur¹ untersuchen und die Deformation der Phasen explizit erfassen

Eine weitere Möglichkeit der Beschreibung basiert auf der Verwendung der auf Basis der additiven Aufspaltung der infinitesimalen Dehnungsrate nach Gleichung (2.3) für den Term $\dot{\mathbf{e}}^{PT}$ erarbeiteten Formulierung. Zunächst soll hier auf die Frage der Verwendbarkeit dieser additiven Aufspaltung eingegangen werden, um im Anschluß die Adaption an das hier verwendete Zweiphasen-Konzept zu zeigen.

Vergleicht man die Struktur der zur Herleitung von Gleichung (2.4) verwendeten additiven Aufspaltung der Dehnungsraten mit der Form des verwendeten Modells (4.9), wird offensichtlich, daß Gleichung (2.3) auch für das Zweiphasenmodell gilt. Bei beiden Modellen wird in der Ratenformulierung der Anteil der transformationsinduzierten Dehnung zu einem, wie auch immer gearteten, Anteil hinzu addiert.

Adaptiert man dieses Konzept auf das in dieser Arbeit vorgestellte Zweiphasenmodell, ist eine Näherung für die globale Größe $\boldsymbol{\sigma}'$ zu finden. Diese soll durch das Mittel der Spannungen der Einzelphasen angenähert werden. Weiterhin ist das für infinitesimale Deformationen erarbeitete Ergebnis auf große Formänderungen zu übertragen. Dies soll hier, ohne weitere Interpretation der Größen, durch Ersetzen der Spannung durch den zweiten PIOLA-KIRCHHOFF-Spannungstensor und der Dehnung durch den GREENSchen Verzerrungstensor geschehen. Es gelte

$$\dot{\mathbf{E}}^{PT} = \frac{3}{2} K^* \frac{\mathbf{S}'_K{}^A + \mathbf{S}'_K{}^M}{2} \frac{\partial f^\xi(\xi)}{\partial \xi} \dot{\xi} \quad (4.11)$$

wobei für die Funktion $f^\xi(\xi)$ der Ausdruck

$$f^\xi(\xi) = (2 - \xi)\xi \quad (4.12)$$

verwendet werden soll. Die gleichgewichtige Mittelung der Spannungen basiert auf der Überlegung, daß die transformationsinduzierte Deformation eine an der Phasengrenze

¹Im Rahmen der bisher verwendeten Nomenklatur wäre der Ausdruck Mesostruktur passender.

definierte Größe ist und daher von dem lokalen Spannungsmittel abhängt. Bei homogenen Phasengrößen folgt damit (4.11). Aus (4.11) und (4.12) folgt

$$\dot{\mathbf{E}}^{PT} = 3 K^* \frac{\mathbf{S}'_K{}^A + \mathbf{S}'_K{}^M}{2} (1 - \xi) \dot{\xi} . \quad (4.13)$$

Es ist bei diesem Ansatz zu bemerken, daß er einen Bruch im thermomechanischen Gesamtkonzept darstellt, da seine Herleitung rein auf mikromechanischen Überlegungen basiert. Ein eher in das Gesamtkonzept zu passen scheinender Ansatz ist die Formulierung der transformationsinduzierten Plastizität auf Basis der Tensors des chemischen Potentials $\boldsymbol{\mu}$ und der kinetischen Variable $\dot{\xi}$. Der Tensor des chemischen Potentials enthält durch den in seiner Bestimmungsgleichung vorkommenden rechten CAUCHY-GREEN-Tensor \mathbf{C} Informationen über den Sprung der Deformation an der Phasengrenze und somit der transformationsinduzierten Dehnung.

Überlegungen dieser Art können aber nur unter Verwendung einer breiten experimentellen Datenbasis mehraxialer Untersuchungen vorgenommen werden. Da bisher nicht ausreichend Untersuchungen dieser Art vorliegen, soll an dieser Stelle dieser Ansatz nicht weiter verfolgt werden.

4.1.2 Mittelung der Spannungen

Zur Mittelung der Spannungen sollen hier drei mögliche Konzepte vorgestellt werden. Diese sind nur als erste Anregungen zu verstehen. Zur Verifikation der Gültigkeit der Annahmen sind weitergehende experimentelle Untersuchungen unter besonderer Berücksichtigung der hier angeführten Gegebenheiten notwendig.

4.1.2.1 Reine Volumenmittelung

Als erste Möglichkeit sei die Volumenmittelung der Spannung nach (3.111) genannt. Es folgt damit

$$\mathbf{S}_K = \xi \mathbf{S}_K^M + (1 - \xi) \mathbf{S}_K^A \quad (4.14)$$

und daraus

$$\dot{\mathbf{S}}_K = \xi \dot{\mathbf{S}}_K^M + (1 - \xi) \dot{\mathbf{S}}_K^A + \dot{\xi} (\mathbf{S}_K^M - \mathbf{S}_K^A) \quad (4.15)$$

Bei dieser Art der Mittelung geht durch die Volumenmittelung die im Tensor $\boldsymbol{\xi}$ enthaltene Information über die Orientierung der Einschlüsse verloren. Das globale mechanische Verhalten ist das eines Stoffes in einer Beschreibung mit skalaren Größen μ und ξ . Es stellt sich die Frage, inwieweit es sinnvoll ist, eine Volumenmittelung für die intensive Größe Spannung durchzuführen.

4.1.2.2 Isotrope Tensorfunktion

Als eine Möglichkeit der Berücksichtigung der Anisotropie soll hier die unter Berücksichtigung der Eigenschaften der Größe $\boldsymbol{\xi}$ natürlich erscheinende Erweiterung der Beziehung (4.14) ohne mikromechanische Begründung

$$\mathbf{S}_K = \text{sym} \left(3 \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{S}_K^M + (\mathbf{1} - 3 \boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{S}_K^A \right) \quad (4.16)$$

und daraus

$$\dot{\mathbf{S}}_K = \text{sym} \left(3 \dot{\boldsymbol{\xi}} \cdot \mathbf{S}_K^M + (\mathbf{1} - 3 \dot{\boldsymbol{\xi}}) \cdot \dot{\mathbf{S}}_K^M + 3 \dot{\boldsymbol{\xi}} \cdot (\mathbf{S}_K^M - \mathbf{S}_K^A) \right) \quad (4.17)$$

eingeführt werden.

Für den hydrostatischen Fall führt (4.16) wieder auf (4.14). Ein Problem bei der Formulierung (4.16)/(4.17) ist, daß auch bei Ende der Transformation mit $\text{tr}(\boldsymbol{\xi}) = 1$ das Materialverhalten des Austenits weiter Einfluß auf des Gesamtverhalten des Materials haben kann wenn $\boldsymbol{\xi}' \neq \mathbf{0}$ gilt.

Es soll daher ein alternatives Konzept auf Basis einer isotropen Tensorfunktion erarbeitet werden (s. u.a. BETTEN[Bet93]). Aufgrund der physikalisch eindeutig trennbaren Bedeutung von kugel- und deviatorischen Anteil sollen diese getrennt behandelt werden. Es ist daher die gemittelte Spannung \mathbf{S}_K als isotrope Tensorfunktion von dem Skalar ξ und den symmetrischen Argumenttensoren \mathbf{S}_K^A , \mathbf{S}_K^M und $\boldsymbol{\xi}'$ darzustellen. Ein möglicher Ansatz stellt

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_K &= \xi \mathbf{S}_K^M + (1 - \xi) \mathbf{S}_K^A + K^\xi \xi \frac{1}{2} (\boldsymbol{\xi}' \cdot \mathbf{S}_K^M + \mathbf{S}_K^M \cdot \boldsymbol{\xi}') + K^\xi (1 - \xi) \frac{1}{2} (\boldsymbol{\xi}' \cdot \mathbf{S}_K^A + \mathbf{S}_K^A \cdot \boldsymbol{\xi}') \\ &= \xi \mathbf{S}_K^M + (1 - \xi) \mathbf{S}_K^A + K^\xi \xi \text{sym} (\boldsymbol{\xi}' \cdot \mathbf{S}_K^M) + K^\xi (1 - \xi) \text{sym} (\boldsymbol{\xi}' \cdot \mathbf{S}_K^A) \end{aligned} \quad (4.18)$$

dar. K^ξ ist ein an Versuche anzupassender Parameter. Der deviatorische Anteil hat in dieser Formulierung einen reinen Orientierungscharakter. Da die Orientierung der Phasen bei zwei Phasen aufgrund der gemeinsamen Grenze gleich ist, wurde $\boldsymbol{\xi}'$ in gleicher Art auf die Spannungstensoren der Phasen angewendet. Die Wichtung geschieht ausschließlich über die Spur ξ . Es tritt allerdings bei dieser Art der Formulierung die physikalische Bedeutung der Größen unter Umständen in den Hintergrund.

Bei Verifikationsrechnungen hat sich gezeigt, daß eine große Abhängigkeit des Materialverhaltens von dem Parameter K^ξ zu beobachten ist. Eine Anpassung kann nur auf Basis experimenteller Untersuchungen erfolgen. Eine Schätzung ist nur sehr schwer möglich.

4.1.2.3 Adaption des Effektivspannungskonzeptes

Als dritte Möglichkeit sei hier eine Adaption des aus der Bruch- und Schädigungsmechanik bekannten Effektivspannungskonzeptes (s. u.a. KACHANOV[Kac58], KACHANOV[Kac86], RABOTNOV[Rab59]) genannt. Dazu hier zunächst eine kurze Erläuterung des Vorschlages

von MURAKAMI([MO81],[MR88]) und BETTEN[Bet82] zur Erweiterung des Konzeptes auf allgemein mehrdimensionale Spannungszustände.

Der die Schädigung beschreibende Tensor zweiter Stufe $\mathbf{\Omega}$ berücksichtigt laut SCHIESSE[Sch94] „die Fläche der Projektionen aller in ΔV^* enthaltenen N Defekte mit der jeweiligen Größe $dA_g^{*(k)}$ aus eine Ebene“. Für näherungsweise ebene Hohlräume sei er durch

$$\mathbf{\Omega} = \frac{3}{\Delta A_g^*} \sum_{k=1}^N \int_{\Delta V^*} \mathbf{n}^{*(k)} \otimes \mathbf{n}^{*(k)} dA_g^{*(k)} \quad (4.19)$$

definiert, wobei $dA_g^{*(k)}$ die Fläche, die der k -te Hohlraum auf der Korngrenze einnimmt, $\mathbf{n}^{*(k)}$ den Normalenvektor der Ebene $dA_g^{*(k)}$ und ΔA_g^* die gesamte Fläche der Korngrenzen in ΔV^* bezeichnet. SCHIESSE diskutiert in [Sch94] die Definition dieses Tensors. Er merkt an, daß $\mathbf{\Omega}$ durch die fehlende Volumenmittelung über ΔV^* immer noch ein Mikrofeld und durch die Verwendung von ΔA_g^* als Bezugsfläche noch von der Korngröße ΔV^* abhängt. MURAKAMI verwendet diesen Tensor als Transformationstensor zwischen der aktuellen geschädigten Konfiguration und der fiktiven ungeschädigten Konfiguration. Im Rahmen des von den Autoren entwickelten Konzeptes wird die Belastung der fiktiven ungeschädigten Konfiguration $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ durch

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = (\mathbf{1} - \mathbf{\Omega})^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.20)$$

berechnet.

Die Übertragung der Schädigungskonzepte auf die Beschreibung einer Phasentransformation kann gedanklich durch das Ersetzen des Hohlräume im Schädigungsmodell durch die Produktphase (hier die Martensitphase) und des vorhanden Materials durch die Matrixphase (hier die Austenitphase) geschehen. Der Hohlraum beim Schädigungsmodell trägt nicht zur Tragwirkung des Materials bei, insofern findet der Hohlraum kein Equivalent in Gleichung (4.20).

Ziel der folgenden Ausführungen ist es, die Relation zwischen dem Tensor $\mathbf{\Omega}$ des Effektivspannungskonzeptes und dem Tensor $\boldsymbol{\xi}$ zu finden. Weiterhin wird Gleichung (4.20) so erweitert, daß eine Anwendung bei der Beschreibung von Phasentransformationen möglich ist. Die Herleitung orientiert sich an dem Beispiel des quaderförmigen Einschlusses im Abschnitt 3.4.3.5. Die hergeleiteten Gleichungen sind daher auch nur für den Fall quaderförmiger Einschlüsse gültig.

Zunächst soll die Größe

$$\boldsymbol{\lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

im Hauptachsensystem des Tensors $\boldsymbol{\xi}$ definiert werden. Die Größen λ_i entsprechen den auf den Quaderabstand bezogenen Längen des Quader in der entsprechenden Koordina-

tenrichtung (vergl. auch Abb.3.4). Aufbauend auf (4.21) kann der Tensor

$$\mathbf{\Omega} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\lambda} \times \times \boldsymbol{\lambda} \quad (4.22)$$

definiert werden. Dieser entspricht in dem untersuchten Beispiel dem Tensor $\mathbf{\Omega}$ des Effektivspannungskonzeptes bei Anwendung des von BETTEN in [Bet82] präsentierten Konzeptes da

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \lambda_2 \lambda_3 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

gilt.

Dem oben beschriebenen Gedankengang zur Anwendung des Effektivspannungskonzeptes auf Phasentransformationen folgend soll die Spannungsmittelung durch

$$\mathbf{S}_K = \text{sym} \left(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{S}_K^M + (\mathbf{1} - \mathbf{\Omega}) \cdot \mathbf{S}_K^A \right) \quad (4.24)$$

definiert sein. Daraus folgt für die Spannungsrate

$$\dot{\mathbf{S}}_K = \text{sym} \left(\mathbf{\Omega} \cdot \dot{\mathbf{S}}_K^M + (\mathbf{1} - \mathbf{\Omega}) \cdot \dot{\mathbf{S}}_K^A + \dot{\mathbf{\Omega}} \cdot (\mathbf{S}_K^M - \mathbf{S}_K^A) \right) . \quad (4.25)$$

Für die bisher unbekannte Größe $\boldsymbol{\lambda}$ kann eine Evolutionsgleichung formuliert werden. Berücksichtigt man, daß in dem untersuchten Beispiel

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{\Omega} \cdot \dot{\boldsymbol{\lambda}} = \begin{pmatrix} \dot{\lambda}_1 \lambda_2 \lambda_3 & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\lambda}_2 \lambda_1 \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & \dot{\lambda}_3 \lambda_1 \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

gilt, kann für $\det(\mathbf{\Omega}) \neq 0$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{\Omega}^{-1} \cdot \dot{\boldsymbol{\xi}} \quad (4.27)$$

formuliert werden. Für den Beginn der Transformation ist aber $\mathbf{\Omega} = \mathbf{0}$, die Umformung kann also nicht durchgeführt werden. Dieses Problem kann durch Ausnutzung des Umstandes, daß zu Beginn der Transformation der deviatorische Anteil von $\boldsymbol{\xi}$ Null ist, umgangen werden. Setzt man $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{1}\xi/3$ und entsprechend $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{1}\lambda$, folgt aus (4.26)

$$\frac{1}{3} \dot{\boldsymbol{\xi}} = \lambda^2 \dot{\lambda} . \quad (4.28)$$

Integriert man dies, folgt unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen $\xi(0) = 0$ und $\lambda(0) = 0$

$$\lambda^3 = \xi . \quad (4.29)$$

Es kann also bei vernachlässigbarem deviatorischen Anteil von $\boldsymbol{\xi}$ die Größe $\boldsymbol{\lambda}$ direkt berechnet werden. Wird im Verlauf der Berechnung der deviatorische Anteil zu groß, kann die weitere Entwicklung von $\boldsymbol{\lambda}$ über (4.27) berechnet werden.

Zum Vergleich der Konzepte soll hier ebenfalls der Fall $\xi' = \mathbf{0}$ untersucht werden. Es folgt aus (4.24) mit (4.22) und (4.29)

$$\mathbf{S}_K = \xi^{2/3} \mathbf{S}_K^M + (1 - \xi^{2/3}) \mathbf{S}_K^A . \quad (4.30)$$

Diese Gleichung erscheint einleuchtend, da eine einen Volumenanteil beschreibende Größe zur Flächenmittelung verwendet wurde. Aus Abb. 4.2 wird ersichtlich, daß bei dieser Art der Beschreibung die Spannung im Einschluß einen relativ stärkeren Einfluß als bei der reinen Volumenmittelung auf das Gesamtverhalten hat.

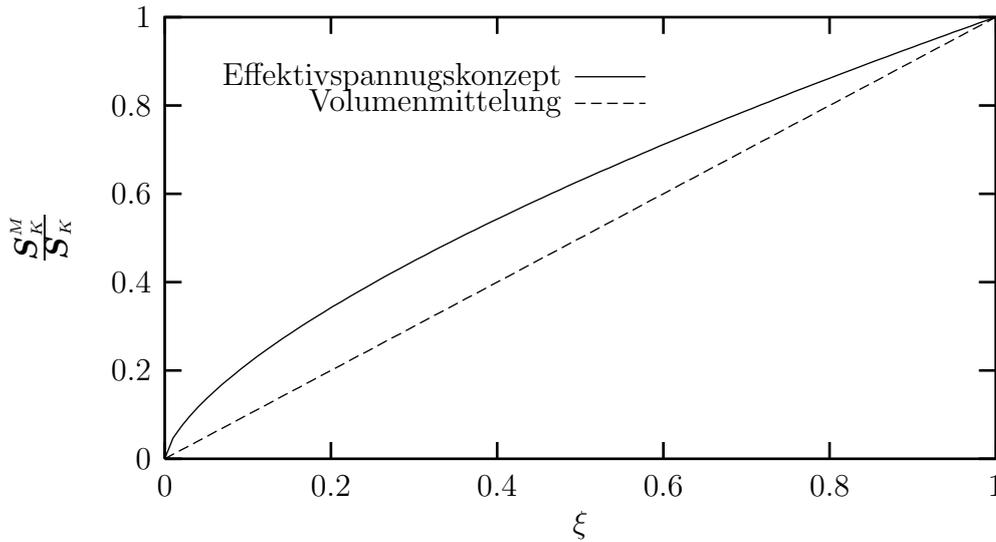


Abb. 4.2: Verdeutlichung des Einflusses der Spannungen der einzelnen Phasen

Abschließend ist gerade bei den bei der Verwendung des Effektivspannungskonzept zahlreich auftauchenden Kritikpunkten (s. SCHIESSE[Sch94]) nochmals anzumerken, daß die hier präsentierten Konzepte nur mögliche Implementationen der thermomechanischen Größen der Phasentransformation darstellen. Im Hinblick auf Verfahren wie z.B. die der selbstkonsistenten Formulierungen ([BZ79],[BB92]) oder der Adaption von Schädigungskonzepten mit tensoriellen Fourierreihenentwicklungen ([Ona81],[Ona86],[OL88], [Sch94]) sind vielfältige andere Möglichkeiten denkbar. Nochmals ist aber, wie schon bei der Mittelung der Verzerrungen, auf die Notwendigkeit des Bezugs auf eine experimentelle Datenbasis hinzuweisen.

4.2 Beschreibung der Transformationskinetik

Ein möglicher Ausgangspunkt zur Beschreibung der Transformationskinetik ist die Bedingung der Maximierung der Dissipation (ZIEGLER & WEHRLI[ZW87]). Dieses Konzept

begründet sich auf der Annahme, daß immer ein Zustand maximaler Entropie angestrebt wird. Als klassisches Beispiel der Anwendung dieses Prinzips ist die Herleitung der assoziierten Fließregel der Plastizität zu nennen. Weiterhin bauen die sog. „*unified-laws*“ zur Beschreibung von Schädigung (LEMAITRE[Lem92]) oder auch die zur Beschreibung thermo-viskoelastischer Vorgänge (HASLACH ET AL.[HJZ99]) verwendeten Stoffgesetze auf diesem Postulat auf. FISCHER ET AL. haben in [FBTO94] das zu einer Evolutionsgleichung für den Massenanteil führende Prozedere kurz beschrieben. Als weitere Motivation zur Anwendung des Konzepts sollen hier die Ähnlichkeiten zwischen den Größen der Beschreibung plastischen Materialverhaltens und denen der Austenit-Martensit Phasentransformation zusammengefaßt werden²:

- Es muß ein Energieniveau überschritten werden, damit die Evolution des Prozesses fortschreiten kann. Dieses Niveau wird bei der Beschreibung plastischer Deformationen durch die Fließgrenze mit der Fließfunktion repräsentiert. In der klassischen Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation muß eine Minimaldifferenz der GIBBS-Energie der Phasen vorliegen.
- Die Struktur der zu erfüllenden Dissipationsungleichung ist gleich. Der thermodynamische Fluß ist die plastische Deformation bzw. das Fortschreiten der Transformation, die thermodynamische Kraft der Spannungsdeviator bzw. die Differenz der chemischen Potentiale.

Als zusätzliche Restriktion bei der Beschreibung der Phasentransformation sind die Grenzen der die Massenanteile der Phasen beschreibenden Größe zu beachten. Mögliche Schwierigkeiten bei Einhaltung dieser Restriktion sind bereits im Abschnitt 3.4.3 aufgezeigt worden.

Vernachlässigt man den Einfluß der Phasentransformation auf die Beschreibung der Meso-Stoffgesetze, kann die Bedingung der Maximierung der Dissipation basierend auf (3.166) in der Form

$$\boldsymbol{\mu} : \dot{\boldsymbol{\xi}} \longrightarrow \text{Max} \quad (4.31)$$

unter Beachtung von

$$\boldsymbol{\mu} : \dot{\boldsymbol{\xi}} \geq 0 \quad (4.32)$$

beschrieben werden. Führt man unter Berücksichtigung der Analogie des zu überschreitenden Energiepotentials eine Funktion $F^\xi = F^\xi(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\xi}_i^\xi)$ mit der bei fortschreitender Transformation zu erfüllender Bedingung

$$F^\xi = 0 \quad (4.33)$$

und dem Satz interner Variablen zur Beschreibung der Phasentransformation $\boldsymbol{\xi}_i^\xi$ ein, kann das durch (4.31) und (4.33) definierte Maximierungsproblem unter Verwendung der LAGRANGESchen Multiplikatorenmethode durch

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}} [\boldsymbol{\mu} : \dot{\boldsymbol{\xi}} - \lambda^\xi F^\xi] = 0 \quad (4.34)$$

²LEVITAS & STEIN haben in [LS97] einen ähnlichen Vergleich angestellt, dabei aber andere Größen verglichen.

beschrieben werden. Führt man die partielle Differentiation durch, erhält man die Normalenregel

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = \langle \lambda^\xi \rangle^\xi \frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\mu}} \quad . \quad (4.35)$$

Die MCCAULEY-Klammern $\langle \cdot \rangle^\xi$ wurden zur notwendigen Berücksichtigung der Bedingung des zweiten Hauptsatzes (4.32) eingeführt. Es gelte

$$\langle x \rangle^\xi = \begin{cases} x & \text{wenn } LC^\xi \geq 0 \text{ und } F^\xi = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.36)$$

mit

$$LC^\xi = \frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\mu}} : \dot{\boldsymbol{\mu}} \quad . \quad (4.37)$$

Diese Bedingung entspricht der als Belastungsbedingung bekannten Nebenbedingung der Plastizitätstheorie.

Der Satz interner Variablen, der die Transformationskinetik beschreibt, soll zunächst auf zwei tensorielle und eine skalare Variablen spezialisiert werden:

$$\boldsymbol{\xi}_i^\xi = \{ \boldsymbol{\gamma}^\xi, \boldsymbol{\alpha}^\xi, \kappa^\xi \} \quad . \quad (4.38)$$

Für die Funktion $F^\xi = F^\xi(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\gamma}^\xi, \boldsymbol{\alpha}^\xi, \kappa^\xi)$ soll hier der Ansatz

$$F^\xi = (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) - g^\xi(\kappa^\xi) = 0 \quad (4.39)$$

verwendet werden. Für das totale Differential folgt

$$\dot{F}^\xi = \frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\mu}} : \dot{\boldsymbol{\mu}} + \frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\gamma}^\xi} : \dot{\boldsymbol{\gamma}}^\xi + \frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\alpha}^\xi} : \dot{\boldsymbol{\alpha}}^\xi + \frac{\partial F^\xi}{\partial \kappa^\xi} \dot{\kappa}^\xi = 0 \quad . \quad (4.40)$$

Unter Verwendung der partiellen Ableitungen

$$\frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\mu}} = 2\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) \quad (4.41)$$

$$\frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\gamma}^\xi} = 2\boldsymbol{\mu} \cdot (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\alpha}^\xi} = -2(\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) \quad (4.43)$$

$$\frac{\partial F^\xi}{\partial \kappa^\xi} = -\frac{\partial g^\xi}{\partial \kappa^\xi} \quad (4.44)$$

und unter Berücksichtigung von $g^\xi = g^\xi(\kappa^\xi)$ folgt

$$\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : \dot{\boldsymbol{\mu}} + \boldsymbol{\mu} \cdot (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : \dot{\boldsymbol{\gamma}}^\xi = (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : \dot{\boldsymbol{\alpha}}^\xi + \frac{1}{2} \frac{\partial g^\xi}{\partial \kappa^\xi} \dot{\kappa}^\xi \quad . \quad (4.45)$$

In der Formulierung (4.39) sind α^ξ und κ^ξ Variablen, die auch bei zyklischen Belastungs- bzw. Temperaturpfaden eine Modellierung des Einsetzens der Phasentransformation und deren Transformationskinetik ermöglichen. Sie finden in der Plastizitätstheorie ihre äquivalenten Größen in der kinematischen und der isotropen Verfestigung. Die Größe γ^ξ soll sicherstellen, daß die globale Massenkonstanz $0 \leq \text{tr}(\boldsymbol{\xi}) \leq 1$ gewährleistet ist. Es wird daher verlangt, daß für den Fall $\text{tr}(\boldsymbol{\xi}) = 1$ die Änderung von F^ξ nur von γ^ξ kompensiert wird und sich die internen Variablen α^ξ und κ^ξ nicht ändern. Es gelte daher für $\text{tr}(\boldsymbol{\xi}) = 1$

$$\dot{F}^\xi = \frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\mu}} : \dot{\boldsymbol{\mu}} + \frac{\partial F^\xi}{\partial \gamma^\xi} : \dot{\gamma}^\xi = 0 \quad (4.46)$$

und mit (4.41) und (4.42)

$$\gamma^\xi \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \alpha^\xi) : \dot{\boldsymbol{\mu}} + \boldsymbol{\mu} \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \alpha^\xi) : \dot{\gamma}^\xi = 0 \quad (4.47)$$

Da dies für beliebige $\boldsymbol{\mu}, \gamma^\xi$ und α^ξ gelten soll, muß

$$\dot{\boldsymbol{\mu}} \cdot \gamma^\xi + \boldsymbol{\mu} \cdot \dot{\gamma}^\xi = \mathbf{0} \quad (4.48)$$

erfüllt werden. Somit folgt die für diesen Fall zu erfüllende Evolutionsgleichung für γ^ξ als

$$\dot{\gamma}^\xi = -\boldsymbol{\mu}^{-1} \cdot \dot{\boldsymbol{\mu}} \cdot \gamma^\xi \quad (4.49)$$

Eine Möglichkeit zur Erfüllung dieser Bedingung ist die Formulierung der Evolutionsgleichung für γ^ξ als

$$\dot{\gamma}^\xi = -\boldsymbol{\mu}^{-1} \cdot \dot{\boldsymbol{\mu}} \cdot \gamma^\xi \text{tr}(\boldsymbol{\xi}) \quad (4.50)$$

Zunächst soll weiterhin angenommen werden, daß γ^ξ bei einsetzender Transformation keinen Einfluß auf die Transformationskinetik hat. Daher soll die Anfangsbedingung

$$\gamma^\xi(t_0^\xi) = \mathbf{1} \quad (4.51)$$

mit dem den Beginn der Phasentransformation kennzeichnenden Zeitpunkt t_0^ξ gelten. Weiterhin soll für γ^ξ ein Update-Algorithmus bei wiedereinsetzender Phasentransformation verwendet werden. Eine Möglichkeit mit ihren Implikationen für die Transformationskinetik wird am Ende dieses Kapitels erörtert.

Die weiteren Evolutionsgleichungen der internen Variablen sind so zu wählen, daß sich eine Änderung der Variablen auch zu einer Änderung von $\boldsymbol{\xi}$ führt. Es soll hier die Form

$$\dot{\alpha}^\xi = c^\xi \dot{\boldsymbol{\xi}} \quad (4.52)$$

$$\dot{\kappa}^\xi = (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \alpha^\xi) : \dot{\boldsymbol{\xi}} \quad (4.53)$$

mit den Anfangsbedingungen

$$\alpha^\xi(t_0) = \mathbf{0} \quad (4.54)$$

und

$$\kappa^\xi(t_0) = 0 \quad (4.55)$$

angenommen werden. Die Anfangsbedingungen beziehen sich auf den Beginn der Beschreibung. Auch bei wiederholter zyklischer Belastung gehorchen diese internen Variablen nur ihren Evolutionsgesetzen. Mit diesen Ansätzen folgt aus (4.45)

$$\begin{aligned} \gamma^\xi \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : \dot{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu} \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : (\boldsymbol{\mu}^{-1} \cdot \dot{\boldsymbol{\mu}} \cdot \gamma^\xi) \operatorname{tr}(\boldsymbol{\xi}) = \\ \left(c^\xi + \frac{1}{2} \frac{\partial g^\xi}{\partial \kappa^\xi} \right) (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : \dot{\boldsymbol{\xi}} \quad . \end{aligned} \quad (4.56)$$

Mit der Normalenregel (4.35) und der partiellen Ableitung (4.41) folgt für λ^ξ

$$\lambda^\xi = \frac{1}{2} \frac{\gamma^\xi \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : \dot{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu} \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : (\boldsymbol{\mu}^{-1} \cdot \dot{\boldsymbol{\mu}} \cdot \gamma^\xi) \operatorname{tr}(\boldsymbol{\xi})}{\left(c^\xi + \frac{1}{2} \frac{\partial g^\xi}{\partial \kappa^\xi} \right) (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : \gamma^\xi \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi)} \quad (4.57)$$

und somit für $\dot{\boldsymbol{\xi}}$

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = \gamma^\xi \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) \left\langle \frac{\gamma^\xi \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : \dot{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu} \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : (\boldsymbol{\mu}^{-1} \cdot \dot{\boldsymbol{\mu}} \cdot \gamma^\xi) \operatorname{tr}(\boldsymbol{\xi})}{\left(c^\xi + \frac{1}{2} \frac{\partial g^\xi}{\partial \kappa^\xi} \right) (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi) : \gamma^\xi \cdot (\gamma^\xi \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\alpha}^\xi)} \right\rangle^\xi . \quad (4.58)$$

Dieses Stoffgesetz ähnelt in seinem Verhalten dem rein elasto-plastischer Stoffgesetze ohne viskose Einflüsse. Es muß für ein Fortschreiten der Transformation die thermodynamisch treibende Kraft weiter in die entsprechende Richtung verändert werden. Somit spiegelt es das Verhalten bei einer Austenit-Martensit Umwandlung wider. Im Gegensatz dazu ist z.B. bei einer Austenit-Perlit Umwandlung bei gleichbleibender thermodynamisch treibender Kraft ein weiteres Fortschreiten der Transformation zu beobachten. Zur Beschreibung dieses Verhaltens wäre ein viskoser oder viskoplastischer Ansatz für das Stoffgesetz angemessen gewesen.

Für die Anpassung an experimentelle Daten ist die Spezialisierung des Stoffgesetzes auf den hydrostatischen Spannungszustand sinnvoll. Setzt man

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{1} \mu, \quad \gamma^\xi = \mathbf{1} \gamma^\xi, \quad \boldsymbol{\alpha}^\xi = \mathbf{1} \alpha^\xi \quad \text{und} \quad \dot{\boldsymbol{\xi}} = \frac{1}{3} \mathbf{1} \dot{\xi}, \quad (4.59)$$

folgt für die Transformationsbedingung (4.39)

$$F^\xi = (\gamma^\xi \mu - \alpha^\xi)^2 - g^\xi \quad (4.60)$$

und (4.58)

$$\dot{\xi} = 3 \frac{\gamma^\xi (1 - \xi) \dot{\mu}}{c^\xi + \frac{1}{2} \frac{\partial g^\xi}{\partial \kappa^\xi}} . \quad (4.61)$$

Für die Evolutionsgleichungen der internen Variablen folgt

$$\dot{\gamma}^\xi = -\mu^{-1} \dot{\mu} \gamma^\xi \xi \quad (4.62)$$

$$\dot{\alpha}^\xi = \frac{1}{3} c^\xi \dot{\xi} \quad (4.63)$$

$$\dot{\kappa}^\xi = (\gamma^\xi \mu - \alpha^\xi) \dot{\xi} . \quad (4.64)$$

Offensichtlich wird in (4.61), daß der gewählte Ansatz für γ^ξ zu einem die Bedingung der globalen Massenkonstanz erfüllenden Evolutionsgesetz geführt hat.

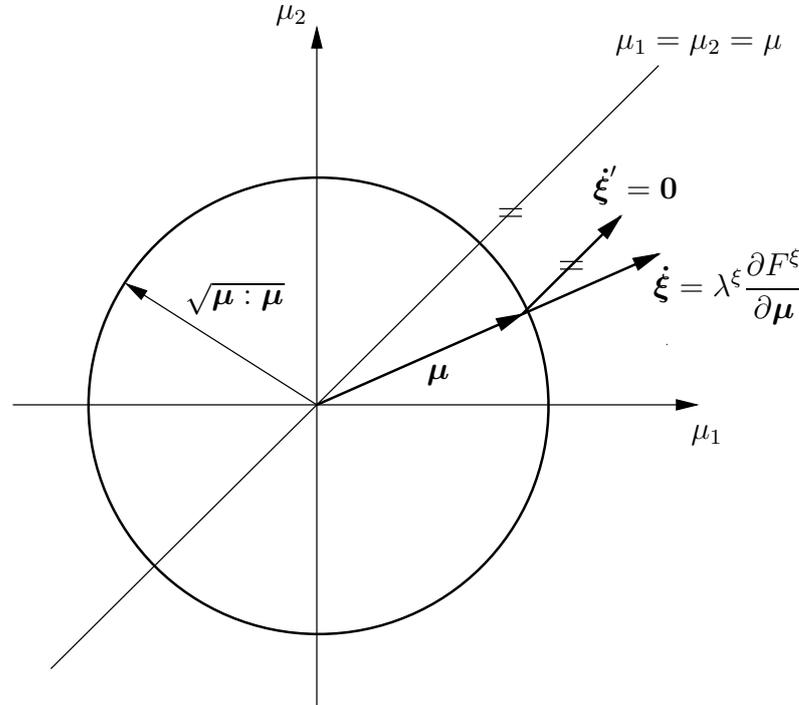


Abb. 4.3: Darstellung der Fließkurve F^ξ im (μ_1, μ_2) -Raum

Als Nachteil des Ansatzes für F^ξ ist zu sehen, daß die Randrestriktionen, unter denen eine Beschreibung für ξ zu erarbeiten ist, unter Umständen nicht erfüllt werden: zum einen ist $\xi'(\xi = 0) \neq \mathbf{0}$, zum anderen ist nicht sichergestellt, daß $\xi'(\xi = 1) = \mathbf{0}$ gilt. Eine graphische Interpretation dieses Umstandes findet man in Abb.4.3. Es ist für den ebenen Fall im Raum der Hauptwerte (μ_1, μ_2) von μ der Zustand der gerade einsetzenden Transformation mit $\xi = \mathbf{0}$ dargestellt. Die Bedingung (4.39) beschreibt für $\gamma^\xi = \mathbf{1}$, $\alpha^\xi = \mathbf{0}$ und $\kappa^\xi = 0$ einen Kreis im Raum der Hauptwerte (μ_1, μ_2) . Für jeden Wert von μ mit $\mu' \neq \mathbf{0}$ muß wegen der Normalenregel (4.35) ein Wert für ξ mit $\xi' \neq \mathbf{0}$ berechnet werden. Das gleiche Dilemma gilt für das Ende der Phasentransformation; geht man von einer rein isotropen Beschreibung aus, kann der deviatorische Anteil nur weiter wachsen und z.B. der Zustand $\xi'(\xi = 1) = \mathbf{0}$ nicht erreicht werden.

Ein möglicher Ansatz zur Umgehung diese Problems besteht in der Einführung eines weiteren Terms in der Bedingung für das Einsetzen der Transformation (4.39) in der Form

$$F^\xi = (\gamma^\xi \cdot \mu - \alpha^\xi) : \mathbf{A}^\xi : (\gamma^\xi \cdot \mu - \alpha^\xi) - g^\xi(\kappa^\xi) = 0 \quad (4.65)$$

mit dem Tensor vierter Stufe $\mathbf{A}^\xi = \mathbf{A}^\xi(\xi_i^\xi)$. Mit diesem ist es, unter Umständen unter Einführung weiterer interner Variablen, möglich, den aufgestellten Bedingungen zu folgen. Eine graphische Interpretation ist Abb.4.4 dargestellt.

Hier soll abschließend eine Möglichkeit zur Realisierung des Update-Algorithmus diskutiert werden. Die Minimalanforderung an den Algorithmus ist, daß nach vollständig vollzogener Umwandlung bei Negation der Richtung der thermodynamisch relevanten Größen die interne Variable γ^ξ bei Einsetzen der Transformation wieder den Wert $\mathbf{1}$ hat. Eine Möglichkeit für diesen Algorithmus orientiert sich an dem von BRUHNS[Bru84] im Rahmen eines viskoplastischen Stoffgesetzes für eine interne Variable verwendeten Ansatz. Diese interne Variable soll eine verbesserte Erfassung des Materialverhaltens bei Belastungsrichtungsänderung bei plastischen Deformationen ermöglichen. Ob dies auch so auf die Gegebenheiten einer Phasentransformation anzuwenden ist, ist experimentell zu überprüfen.

Falls bei vorherigem Schritt LC^ξ nicht erfüllt war, wird γ^ξ wie folgt belegt:

$$\gamma^\xi = \begin{cases} \mathbf{1} & \text{falls Probe jungfräulich} \\ \frac{1}{2}\gamma_o^\xi \left(\text{sgn}(\beta^\xi) \sqrt{|\beta^\xi|} + 1 \right) & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.66)$$

wobei der Index o den Wert der Variablen bei letzter Erfüllung von LC^ξ und F^ξ kennzeichnet. Für β^ξ soll

$$\beta^\xi = \frac{\dot{\xi} : \dot{\xi}_o}{|\dot{\xi}| |\dot{\xi}_o|} \quad (4.67)$$

gelten. Es muß hier nochmals darauf hingewiesen werden, daß dies nur eine mögliche Form des Update-Algorithmus darstellt. Genauere Aussagen lassen sich erst nach experimenteller Untermauerung des Gesamtkonzepts machen.

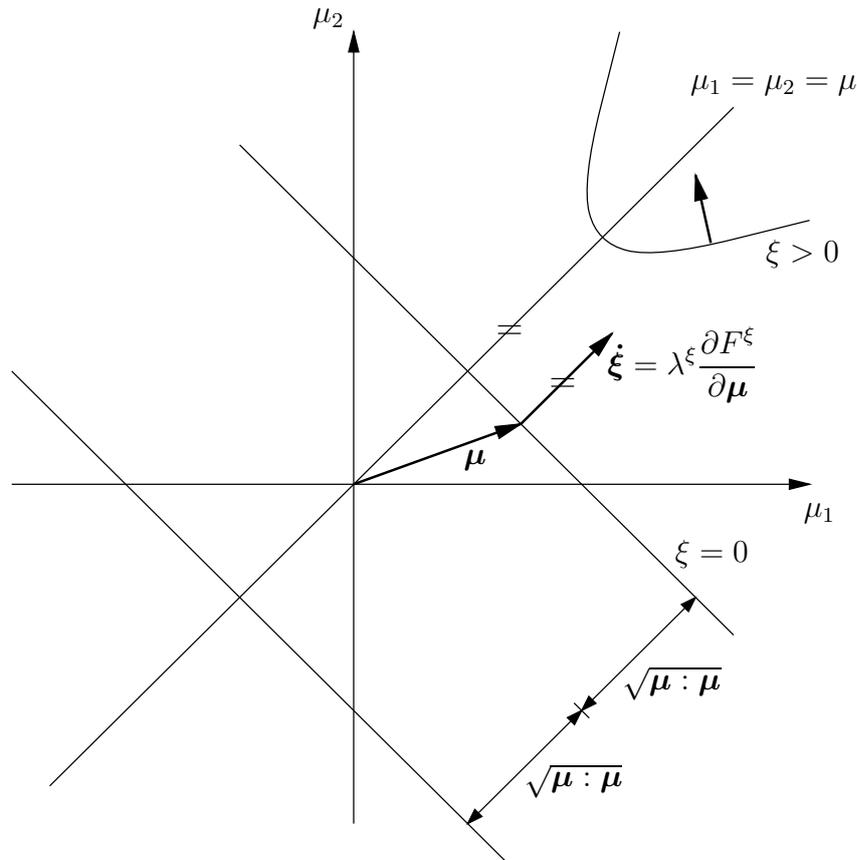


Abb. 4.4: Darstellung der Fließkurve F^ξ im (μ_1, μ_2) -Raum, revidierte Form

4.3 Materialmodell der Meso-Ebene

Es wird im Rahmen dieser Arbeit ein elasto-viskoplastisches Materialmodell vom Über-
spannungstyp, wie von BRUHNS ET AL. (s. z.B. [Bru84], [BP87]) vorgeschlagen, ver-
wendet. Aufbauend auf diesem Modell wurden einige Erweiterungen, z.B. zur verbesser-
ten Beschreibung von Kriech- und Relaxationsversuchen, vorgenommen ([Rot91], [BR94],
[Wes95]). Diese sollen aber hier nicht berücksichtigt werden, da die Untersuchung die-
ser Vorgänge nicht im Mittelpunkt dieser Arbeit steht. Eine Implementation sollte aber
aufgrund der modularen Struktur des entwickelten Gesamtstoffgesetzes ohne Probleme
möglich sein. Das Stoffgesetz wird hier in der von o.g. Autoren verwendeten EULERSCHEN
Formulierung präsentiert. Die Berechnungen, die mit Hilfe des FEM-Programms MARC
durchgeführt wurden, verlangen eine Reformulierung der Gleichungen in der LAGRAN-
GESCHEN Darstellungsweise. Auf das notwendige Prozedere und die bei der Implementa-
tion in das Programmpaket zu beachtenden Besonderheiten wird im Anhang A näher
eingegangen.

Ausgehend von der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten wird eine ad-

ditive Zerlegung der Deformationsgeschwindigkeiten

$$\mathbf{D}^\alpha = \mathbf{D}_r^\alpha + \mathbf{D}_p^\alpha \quad (4.68)$$

angenommen. Der elastische Anteil wird durch ein linear-elastisches, temperaturabhängiges Materialmodell

$$\mathbf{D}_r^\alpha = \mathbf{M}^\alpha : \overset{\nabla}{\mathbf{S}}^\alpha + \overset{\nabla}{\mathbf{M}}^\alpha : \mathbf{S}^\alpha + \boldsymbol{\alpha}^\alpha \dot{T} + \overset{\nabla}{\boldsymbol{\alpha}}^\alpha T \quad (4.69)$$

beschrieben, wobei $\mathbf{M}^\alpha = \mathbf{M}^\alpha(T)$ den Tensor der elastischen Nachgiebigkeit für die Phase α und $\boldsymbol{\alpha}^\alpha = \boldsymbol{\alpha}^\alpha(T)$ die thermische Ausdehnung der Phase α beschreibt.

Das Konzept des Überspannungsmodells basiert auf der additiven Zerlegung der gewichteten CAUCHY-Spannung \mathbf{S} in eine Gleichgewichtsspannung bei quasistatischer Prozeßführung $\bar{\mathbf{S}}$ und eine Überspannung $\bar{\bar{\mathbf{S}}}$ nach

$$\mathbf{S} = \bar{\mathbf{S}} + \bar{\bar{\mathbf{S}}} \quad (4.70)$$

Es wird nun postuliert, daß die Konsistenzbedingung der Plastizitätstheorie nicht durch den aktuellen Spannungszustand \mathbf{S} , sondern durch die Gleichgewichtsspannung $\bar{\mathbf{S}}$ erfüllt wird.

Weiterhin wird angenommen, daß das plastische und das viskoplastischen Dehnungsincrements die gleiche Richtung haben. Die Richtung des viskoplastischen Dehnungsincrements wird durch

$$\mathbf{n}_p^\alpha = \frac{\partial F^\alpha}{\partial \mathbf{S}^\alpha} \left(\left| \frac{\partial F^\alpha}{\partial \mathbf{S}^\alpha} \right| \right)^{-1} \quad (4.71)$$

und die des plastischen Dehnungsincrements durch

$$\bar{\mathbf{n}}_p^\alpha = \frac{\partial \bar{F}^\alpha}{\partial \bar{\mathbf{S}}^\alpha} \left(\left| \frac{\partial \bar{F}^\alpha}{\partial \bar{\mathbf{S}}^\alpha} \right| \right)^{-1} \quad (4.72)$$

definiert. Es wurden dabei die Vereinbarung der Fließbedingung

$$F^\alpha = f^\alpha - g^\alpha(\kappa^\alpha, T) \geq 0 \quad (4.73)$$

mit

$$f^\alpha = (\mathbf{S}'^\alpha - \boldsymbol{\zeta}^\alpha) : (\mathbf{S}'^\alpha - \boldsymbol{\zeta}^\alpha) \quad (4.74)$$

und die Konsistenzbedingung des Gleichgewichtszustandes

$$\bar{F}^\alpha = \bar{f}^\alpha - g^\alpha(\kappa^\alpha, T) = 0 \quad (4.75)$$

mit

$$\bar{f}^\alpha = (\bar{\mathbf{S}}'^\alpha - \boldsymbol{\zeta}^\alpha) : (\bar{\mathbf{S}}'^\alpha - \boldsymbol{\zeta}^\alpha) \quad , \quad (4.76)$$

verwendet. Weiterhin wurden die internen Variablen zur Beschreibung des inelastischen Werkstoffverhaltens eingeführt: die kinematische Verfestigung ζ^α und die isotrope Verfestigung κ^α mit der Funktion $g^\alpha = g^\alpha(\kappa^\alpha, T)$. Die Erfüllung dieser Gleichungen führt zu der Form

$$\mathbf{D}_p^\alpha = \langle \Phi_p^\alpha \rangle_p^\alpha \mathbf{n}_p^\alpha \quad (4.77)$$

für die viskoplastische Verzerrungsrate. $\Phi_p^\alpha = \Phi_p^\alpha(\Lambda^\alpha, T)$ kennzeichnet eine Überspannungsfunktion, welche im allgemeinen eine Funktion der Temperatur und der Überspannung

$$\Lambda^\alpha = \sqrt{f^\alpha} - \sqrt{g^\alpha} \quad (4.78)$$

ist und der Bedingung

$$\Phi_p^\alpha(\Lambda^\alpha = 0, T) = 0 \quad (4.79)$$

genügt. Die MCCAULEY-Klammern in (4.77) werden durch

$$\langle x \rangle_p^\alpha = \begin{cases} x & \text{wenn } \Lambda^\alpha \geq 0 \text{ und } x \geq 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.80)$$

definiert.

Das Evolutionsgesetz für die kinematische Verfestigung laute

$$\dot{\zeta}^\alpha = c^\alpha \mathbf{D}_p^\alpha, \quad (4.81)$$

das für die isotrope Verfestigung

$$\dot{\kappa}^\alpha = (\bar{\mathbf{S}}' - \zeta^\alpha) : \mathbf{D}_p^\alpha. \quad (4.82)$$

Die Annahme der Richtungsgleichheit der inelastischen Deformationen (4.71) und (4.72) führt zu einem Ausdruck der Form

$$\frac{\bar{\mathbf{S}}' - \zeta^\alpha}{\sqrt{(\bar{\mathbf{S}}' - \zeta^\alpha) : (\bar{\mathbf{S}}' - \zeta^\alpha)}} = \frac{\mathbf{S}'^\alpha - \zeta^\alpha}{\sqrt{(\mathbf{S}'^\alpha - \zeta^\alpha) : (\mathbf{S}'^\alpha - \zeta^\alpha)}} \quad (4.83)$$

oder auch

$$\bar{\mathbf{S}}' - \zeta^\alpha = \sqrt{\frac{g^\alpha}{f^\alpha}} (\mathbf{S}'^\alpha - \zeta^\alpha). \quad (4.84)$$

Unter Zuhilfenahme dieser Gleichung kann die Evolutionsgleichung der isotropen Verfestigung (4.82) auch in den Form

$$\dot{\kappa}^\alpha = \sqrt{\frac{g^\alpha}{f^\alpha}} (\mathbf{S}'^\alpha - \zeta^\alpha) : \mathbf{D}_p^\alpha = \sqrt{g^\alpha} \langle \Phi_p^\alpha \rangle_p^\alpha \quad (4.85)$$

dargestellt werden.

Im Abschnitt 4.6.2 finden sich Spezifikationen der Größe c^α und der Funktion Φ_p^α zusammen mit einer kurzen Darstellung des Stoffgesetzverhaltens.

4.4 Wärmeleitungsproblem

Es wird angenommen, daß die thermischen Eigenschaften der betrachteten Phasen näherungsweise gleich sind. Daher kann sowohl für Austenit als auch für Martensit das gleiche Modell zur Beschreibung des Wärmeleitungsproblems verwendet werden. Da die Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Austenit-Martensit Transformation in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeit des Werkstoffes liegen können, soll hier das die endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wärme berücksichtigende Wärmeleitungsgesetz von MAXWELL-CATTANEO([Die89],[Mit95],[Ner97]) in der Form

$$\tau_q \overset{\nabla}{\dot{\mathbf{q}}} + \mathbf{q} = -\lambda_q \nabla T \quad (4.86)$$

verwendet werden. λ_q und τ_q sind temperaturabhängige Materialparameter. Dies ist die von den o.g. Autoren in der aktuellen Konfiguration verwendete Darstellung. Es wird hier die Darstellung in der Referenzkonfiguration

$$\tau_q \dot{\mathbf{Q}} + \mathbf{Q} = -\lambda_q \nabla_X T \quad (4.87)$$

verwendet. Es soll angenommen werden, daß der bei der Übernahme der Parameter gemachte Fehler vernachlässigbar ist.

Weiterhin soll vereinfachend angenommen werden, daß der Anteil der inelastischen Formänderungen an der thermomechanischen Koppelung verglichen mit denen der Phasentransformation klein und daher vernachlässigbar ist. Dies ist keine grundsätzliche Einschränkung des vorgestellten Modells, sie ist hier nur zur besseren Identifikation der die Phasentransformation betreffenden thermomechanischen Effekte vorgenommen worden. Ferner wird eine direkte Proportionalität zwischen dem umgewandelten Massenanteil und der dabei dem thermischen Prozeß „zugeführten“ Wärme angenommen. Es gelte daher

$$\dot{h}_m = \Delta Q \dot{\xi} \quad (4.88)$$

ΔQ ist eine kalorimetrisch gut bestimmbare Größe (s. BENDICK & PEPPERHOFF[BP82]), Zahlenwerte sind im Anhang aufgeführt.

4.5 Thermodynamische Konsistenz

Vor der Spezifikation der Materialfunktionen soll in diesem Abschnitt auf die Frage der thermodynamischen Konsistenz des entwickelten Stoffgesetzes eingegangen werden. Es wurde im Kapitel 3 gezeigt, daß das Gesamtstoffgesetz konsistent formuliert ist, wenn die einzelnen Komponenten, d.h. jedes Meso-Stoffgesetz, das das thermische Problem beschreibende Gesetz und die Beschreibung der Transformationskinetik thermodynamisch konsistent formuliert ist.

Im Abschnitt 4.2 wurde die die Transformationskinetik beschreibende Formulierung unter Ausnutzung der Maximierung der Dissipation hergeleitet. Sie erfüllt durch Verwendung

der MC-CAULEY-Klammern die Bedingung der thermodynamischen Konsistenz falls der Nullpunkt des $\boldsymbol{\mu}$ -Koordinatensystems innerhalb des durch F^ξ definierten Raums liegt. Dies ist z.B. bei $\boldsymbol{\alpha}^\xi = \mathbf{0}$ der Fall.

Hier soll daher noch auf die Erfüllung der thermodynamischen Konsistenz des Meso-Stoffgesetzes und des thermischen Stoffgesetzes eingegangen werden.

Wie in den Abschnitten 3.2.2 und 3.2.3 dargelegt, sind die Ansätze für \dot{w}_d und $\dot{\eta}$ so zu wählen, daß die Ungleichung (3.49) unter Berücksichtigung von (3.48) erfüllt ist.

Der Satz interner Variablen $\boldsymbol{\xi}_i^p$, der das mechanische Verhalten beschreibt, soll hier dazu verwendet werden, eine Beschreibung des inelastischen Materialverhaltens zu ermöglichen. Daher sollen die in dem vorangegangenen Abschnitt eingeführte isotrope und kinematische Verfestigung zu dieser Menge gehören, d.h.

$$\boldsymbol{\xi}_i^p = \{\boldsymbol{\zeta}, \kappa\} \quad . \quad (4.89)$$

Bezieht man diese Spezialisierungen auf eine Phase α , kann für den dissipierenden Anteil der inelastischen Arbeitsrate laut WICHTMANN[Wic96] der Ansatz

$$\dot{w}_d^\alpha = \frac{\beta^\alpha}{\rho_0} (\bar{\boldsymbol{S}}^\alpha - \boldsymbol{\zeta}^\alpha) : \boldsymbol{D}_i^\alpha + \frac{1}{\rho_0} (\boldsymbol{S}^\alpha - \bar{\boldsymbol{S}}^\alpha) : \boldsymbol{D}_i^\alpha \quad (4.90)$$

gewählt werden. Der Parameter β^α ist im allgemeinen von der Phase und allen Zustandsgrößen abhängig. Für metallische Werkstoffe kann nach POHE[Poh93] der Wert $\beta^\alpha = 0.9$ angesetzt werden. Dieser Ansatz erfüllt die Vorzeichenbedingung (3.47) für \dot{w}_d^α unter Berücksichtigung der Evolutionsgleichung für \boldsymbol{D}_i^α in der Form

$$\dot{w}_d^\alpha = \langle \Phi_p^\alpha \rangle_p^\alpha \frac{1}{\rho_0} (\Lambda^\alpha + \beta^\alpha \sqrt{g^\alpha}) \geq 0 \quad . \quad (4.91)$$

Berechnet man damit \dot{w}_h^α unter Verwendung von (3.46), gelangt man zu

$$\dot{w}_h^\alpha = \frac{1 - \beta^\alpha}{\rho_0} \bar{\boldsymbol{S}}^\alpha : \boldsymbol{D}_i^\alpha + \frac{\beta^\alpha}{\rho_0} \boldsymbol{\zeta}^\alpha : \boldsymbol{D}_i^\alpha \quad . \quad (4.92)$$

Setzt man diesen Ausdruck für \dot{w}_h mit (3.48) gleich, erhält man

$$\frac{1 - \beta^\alpha}{\rho_0} \bar{\boldsymbol{S}}^\alpha : \boldsymbol{D}_i^\alpha + \frac{\beta^\alpha}{\rho_0} \boldsymbol{\zeta}^\alpha : \boldsymbol{D}_i^\alpha = T\dot{\eta}^\alpha + \frac{\partial g^\alpha}{\partial \boldsymbol{\zeta}^\alpha} : \boldsymbol{\zeta}^\alpha + \frac{\partial g^\alpha}{\partial \kappa^\alpha} \dot{\kappa}^\alpha \quad (4.93)$$

ANDING nennt in [And97] als eine Möglichkeit für $\dot{\eta}^\alpha$

$$T\dot{\eta}^\alpha = \frac{1}{\rho_0} \left(1 - \frac{c^\alpha(\kappa^\alpha)}{c_0^\alpha} \right) \boldsymbol{\zeta}^\alpha : \boldsymbol{D}_p^\alpha \quad , \quad (4.94)$$

wobei $c_0^\alpha = c^\alpha(\kappa^\alpha = 0)$ ist. Hier kann die Forderung der thermodynamischen Konsistenz im allgemeinen nur erfüllt werden, wenn die Größe c^α streng monoton ist. Es sei hier schon

im Vorgriff auf den Abschnitt 4.6.2.2 darauf hingewiesen, daß dies auf eine Beschränkung für die Parameter c_1^α und c_2^α in der Form

$$0 < c_1^\alpha < \frac{E^\alpha}{(c_2^\alpha - 1)(\sigma_0^\alpha)^2} \left[\frac{2\Psi_0^\alpha}{1 - \Psi_0^\alpha} - 2\Psi_\infty^\alpha \right] \quad (4.95)$$

und

$$c_2^\alpha > 1 \quad (4.96)$$

führt. Die Definition der Größen Ψ_0^α , Ψ_∞^α und σ_0^α findet sich im Abschnitt 4.6.2.2.

Eine Möglichkeit zur Lösung der Gleichung (4.93) unter Berücksichtigung der Evolutionsgleichungen der internen Variablen ζ^α und κ^α (4.81) und (4.82) ist

$$\frac{\partial g^\alpha}{\partial \zeta^\alpha} = \frac{1}{\rho_0 c_0^\alpha} \zeta^\alpha \quad (4.97)$$

$$\frac{\partial g^\alpha}{\partial \kappa^\alpha} = \frac{1 - \beta^\alpha}{\rho_0} . \quad (4.98)$$

Damit ist der Nachweis der thermodynamischen Konsistenz des viskoplastischen Basismodells erbracht.

Zur Vervollständigung des Nachweises der thermodynamischen Konsistenz fehlt nach den Definitionen (4.92) und (4.94) noch der Nachweis, daß Ungleichung (3.50) erfüllt ist, d.h. es soll

$$- \sum_i \frac{\partial g}{\partial \xi_i^q} : \xi_i^q - \frac{1}{\rho} \frac{\nabla T}{T} \cdot \mathbf{q} \geq 0 \quad (4.99)$$

gelten. Der Index α wurde in dieser Gleichung weggelassen, da, wie im Abschnitt 4.4 schon angesprochen, die Beschreibung des thermischen Problems als phasenunabhängig angenommen werden soll. Verwendet man

$$\frac{\partial g}{\partial \xi_i^q} = \frac{\lambda_q}{\rho \tau_q T} \xi_i^q \quad (4.100)$$

und spezialisiert den Satz interner Variablen ξ_i^q nach KOSIŃSKI[Kos75] auf eine vektorielle Variable ξ^q mit

$$\xi^q = -\frac{\tau_q}{\lambda_q} \mathbf{q} , \quad (4.101)$$

folgt

$$-\frac{\lambda_q}{\tau_q} \mathbf{q} \cdot \bar{\mathbf{q}} - \frac{1}{\rho} \frac{\nabla T}{T} \cdot \mathbf{q} \geq 0 . \quad (4.102)$$

Setzt man das verwendete Gesetz von MAXWELL-CATTANEO (4.86) ein, folgt die Bedingung

$$\frac{1}{\lambda_q} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q} \geq 0 . \quad (4.103)$$

Mit $\lambda_q \geq 0$ kann die Gültigkeit dieser Ungleichung sichergestellt werden.

Somit ist der Nachweis der thermodynamischen Konsistenz des Stoffgesetzes erbracht.

4.6 Spezifikation der Materialfunktionen und Beispielrechnungen

In diesem Abschnitt werden die noch offenen Materialfunktionen spezifiziert und deren Einfluß anhand von Beispielen verdeutlicht. Zunächst wird dies für die Einzelkomponenten des Stoffgesetzes vorgenommen, um im Anschluß daran ausgesuchte Aspekte des Gesamtverhaltens des Stoffgesetzes zu illustrieren.

4.6.1 Transformationskinetik

Das besondere Augenmerk soll hier auf der Transformation von Austenit nach Martensit liegen während die Rücktransformation nicht modelliert wird. Daher ist eine gleichzeitige Verwendung eines isotropen und eines kinematischen Anteils in den Evolutionsgleichungen nicht sinnvoll und experimentell auch nicht anpaßbar. Es soll daher die Beschreibung des kinematischen Anteils nicht verwendet werden. Dies stellt keine Wertung dar, ein Verzicht auf die isotropen Anteil wäre ebenfalls möglich gewesen. Somit gelte $c^\xi = 0$ und damit unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung für α^ξ (4.54) auch

$$\alpha^\xi = \mathbf{0} \quad . \quad (4.104)$$

Der Ansatz der Funktion $g^\xi(\kappa^\xi)$ ist rein phänomenologisch begründet. Wie in Abb.2.6 zu sehen, setzt die Transformation nicht schlagartig ein. Nach einer Anfangsphase mit langsamer Transformationsgeschwindigkeit wird die höchste Geschwindigkeit bei etwa gleichverteilten Anteilen der Phasen erreicht um dann gegen Ende der Transformation wieder langsamer abzulaufen. Ein möglicher Ansatz für g^ξ ist

$$g^\xi = g_0^\xi + \frac{c_1^\xi}{c_2^\xi} \left((1 - c_3^\xi) \left(1 - \exp(-c_2^\xi \kappa^\xi) \right) + c_2^\xi c_3^\xi \kappa^\xi \right) \quad . \quad (4.105)$$

Der Parameter g_0^ξ dient zur Beschreibung des Einsetzens der Transformation. Zu Beginn einer hydrostatischen Transformation muß der Grenzwert

$$\mu = \sqrt{\frac{g_0^\xi}{3}} \quad (4.106)$$

überschritten werden, um den Transformationsprozess zuzulassen. Für die in den Berechnungen im Kapitel 5 verwendete Form der freien HELMHOLTZ-Energie folgt für eine spannungsfreie Umwandlung die in der Abb. 4.5 dargestellte Abhängigkeit der Martensit-Start-Temperatur M_S von dem Parameter g_0^ξ .

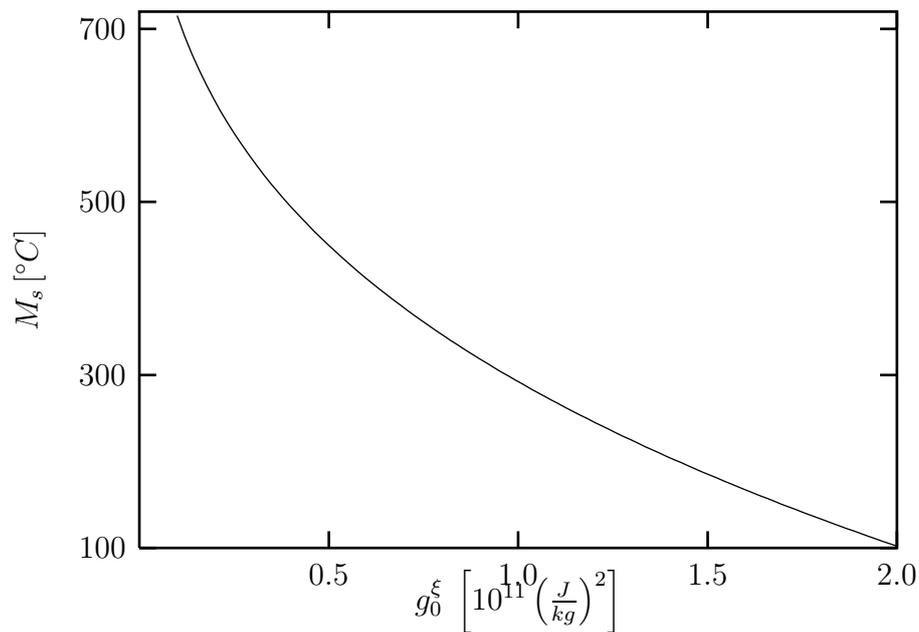


Abb. 4.5: Abhängigkeit der Martensit-Starttemperatur M_s von g_0^ξ

In den Abbildungen 4.6, 4.7 und 4.8 wird die Einfluß der Parameter c_1^ξ , c_2^ξ und c_3^ξ auf das Transformationsverhalten demonstriert. Es sind dort Verhältnisse wie bei einem üblichen TRIP-Stahl angenommen mit $g_0^\xi = 8.0 \cdot 10^{10} (J/kg)^2$. Die Parameter c_1^ξ , c_2^ξ und c_3^ξ bestimmen die Geschwindigkeit und den Verlauf der Transformation. c_1^ξ skaliert die Geschwindigkeit der Transformation für den gesamten Bereich der Umwandlung. c_2^ξ und c_3^ξ dienen der Beschreibung bei zunächst verzögert, aber dann mit wachsender Phasengrenze, schneller ablaufenden Phasenübergang.

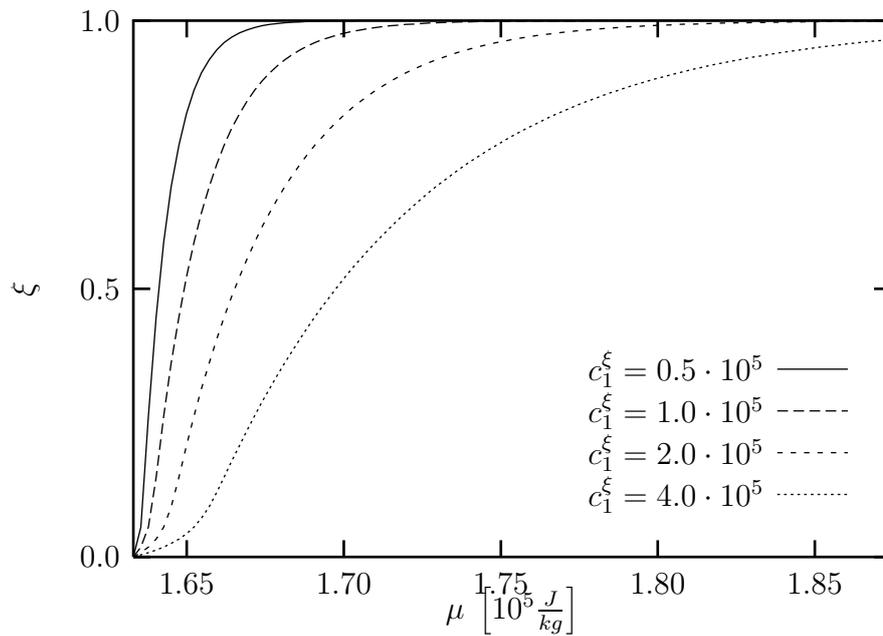


Abb. 4.6: Abhängigkeit der Transformationskinetik von c_1^ξ für $c_2^\xi = 2.0 \cdot 10^{-4} (J/kg)^{-1}$ und $c_3^\xi = 0.1$ (c_1^ξ in J/kg)

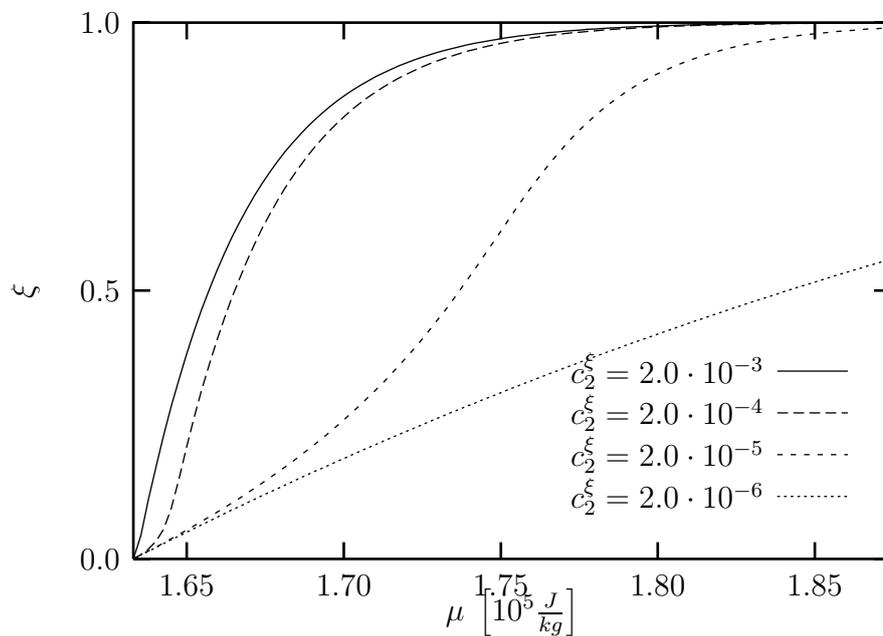


Abb. 4.7: Abhängigkeit der Transformationskinetik von c_2^ξ für $c_1^\xi = 2.0 \cdot 10^5 J/kg$ und $c_3^\xi = 0.1$ (c_2^ξ in $(N\,mm/kg)^{-1}$)

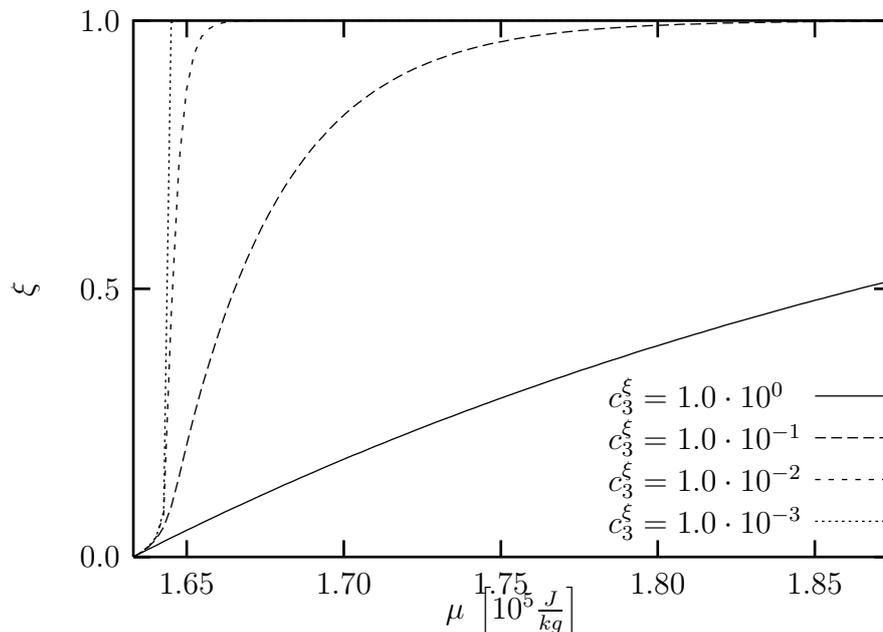


Abb. 4.8: Abhängigkeit der Transformationskinetik von c_3^ξ für $c_1^\xi = 2.0 \cdot 10^5 \text{ J/kg}$ und $c_2^\xi = 2.0 \cdot 10^{-3} (\text{J/kg})^{-1}$

4.6.2 Meso-Stoffgesetz

In diesem Abschnitt werden die noch fehlenden Gleichungen und Parameter der Meso-Stoffgesetze spezifiziert. Es wird hier, falls der Ausdruck für beide Phasen gültig ist, zur Vereinfachung der Schreibweise auf den griechischen Index zur Kennzeichnung einer Phasengröße verzichtet.

4.6.2.1 Herleitung der spezifischen freien HELMHOLTZ-Energie

In der Gleichung für den Tensor des chemischen Potentials (3.81) ist die freie HELMHOLTZ-Energie enthalten. Da diese keine Prozeßvariable ist und nicht direkt bestimmbar ist, muß bei deren Verwendung eine nähere Untersuchung zur deren Herleitung unternommen werden. Das hier vorgestellte Prozedere orientiert sich an dem von RANIECKI und BRUHNS in [RB91] vorgestellten Vorgehen. Dort wurde ausgehend von der Annahme der Konstanz der isochoren Wärmekapazität ein expliziter Ausdruck der freien HELMHOLTZ-Energie erarbeitet. Dabei wurde von elastischem Materialverhalten ausgegangen. Da in diesem Rahmen der hier hergeleitete Ausdruck nur zur Beschreibung der Transformationskinetik verwendet werden soll, ist der Einfluß der inelastischen Formänderungen auf die freie HELMHOLTZ-Energie in der Regel vernachlässigbar. Sollte aber eine Abhängigkeit der Transformationskinetik von der Belastungsvorgeschichte bestehen, ist am Ende dieses Abschnittes ein Hinweis auf die mögliche Erweiterung des hier verwendeten Konzepts zur Berücksichtigung dieser Phänomene gegeben.

Die isochore spezifische Wärmekapazität kann für Feststoffe nach der DEBYE-Theorie ([Cal70],[Mor72]) durch

$$c_v = 3R \left[4D\left(\frac{\Theta_D}{T}\right) - \frac{3\Theta_D/T}{\exp(\Theta_D/T) - 1} \right] \quad (4.107)$$

mit der DEBYE-Temperatur Θ_D und der DEBYE-Funktion³

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{y^3}{\exp(y) - 1} dy \quad (4.108)$$

ausgedrückt werden. Die Konstante R ist die spezielle Gaskonstante mit

$$R = \frac{R_m}{M} \quad (4.109)$$

und der allgemeinen Gaskonstante $R_m = 8.3143 J/(mol K)$ und der Molmasse M des untersuchten Feststoffes. Betrachtet man den in Abb. 4.9 dargestellten Verlauf, ist schon bei niedrigen Temperaturen eine geringe Abweichung der Wärmekapazität von dem Grenzwert für $T \rightarrow \infty$ von $c_v = 3R$ festzustellen. So beträgt für Reineisen mit der DEBYE-Temperatur von $\Theta_D = 430K$ ([BP82]) der relative Fehler bei Annahme einer konstanten isochoren Wärmekapazität bei $300K$

$$e_{300} = \left(\frac{3R - c_v(300K)}{c_v(300K)} \right) \cdot 100\% = 9.56\% \quad (4.110)$$

Betrachtet man den Temperaturbereich, in dem die Phasentransformation stattfinden kann, ist der Fehler noch geringer. Bei $600K$ beträgt er

$$e_{600} = 2.52\% \quad (4.111)$$

Eine weitere Verringerung des Fehlers kann durch die Verwendung der Reihenentwicklung der Gleichung (4.107) erreicht werden. Schon bei Verwendung der Näherung

$$c_v = 3R \left[1 - \frac{1}{20} \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^2 \right] \quad (4.112)$$

liegen die Abweichungen bei $e_{300} = 0.7835\%$ und $e_{600} = 0.0475\%$.

Dieser Ansatz der isochoren Wärmekapazität berücksichtigt nur die chemische Zusammensetzung des Werkstoffes. In der Praxis sind für Eisen oder Stahl auch die magnetischen Eigenschaften relevant. Diese führen zu deutlich unterschiedlichen Verläufen für die einzelnen Phasen (vergl. HAASEN[Haa84]) und sind dafür verantwortlich, daß bei hohen

³Es scheint bei CALLEN[Cal70] ein Druckfehler vorzuliegen; es wird hier die von MORILL[Mor72] abgedruckte Gleichung verwendet. Diese führt auch auf den Verlauf der Wärmekapazität in dem von CALLEN präsentierten Diagramm

Temperaturen das γ -Eisen nicht mehr stabil ist und δ -Eisen vorliegt. Die folgende Herleitung basiert auf der Annahme, daß c_v konstant ist. Dies schränkt die Verwendbarkeit der hergeleiteten Zusammenhänge nur teilweise ein. Vielfach sind die Ergebnisse auch bei einer beliebigen Funktion $c_v = c_v(T)$ verwendbar. Auf diese Frage wird im weiteren Verlauf im Bedarfsfall eingegangen.

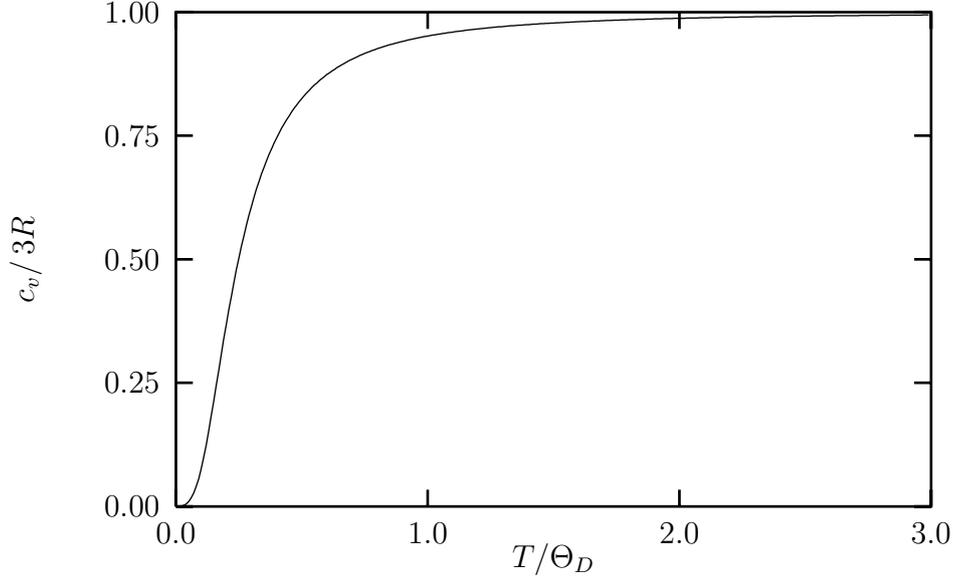


Abb. 4.9: Abhängigkeit der isochoren spezifischen Wärmekapazität von der Temperatur

Die Definition der spezifischen isochoren Wärmekapazität lautet (siehe u.a. BAEHR[Bae66])

$$c_v := \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_V . \quad (4.113)$$

Die Definition der Entropie (3.16) läßt sich unter Berücksichtigung von (3.12) in der Form

$$s = - \frac{\partial \varphi}{\partial T} \quad (4.114)$$

ausdrücken. Nutzt man dies und setzt die Definition der freien HELMHOLTZ-Energie (3.10) ein, erhält man

$$c_v = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_V \quad (4.115)$$

Die in diesem Rahmen benutzten internen Variablen ξ_i^p beschreiben die plastische Deformation auf der Meso-Ebene. Da diese hier als isochor angenommen werden, ist die Bedingung der Volumenkonstanz äquivalent zu der Bedingung der Konstanz der reversiblen Formänderungen, d.h. (4.115) und wird zu

$$c_v = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_{\epsilon_r} . \quad (4.116)$$

Integriert man diese Gleichung erhält man

$$s = c_v \ln \frac{T}{T_0} + s_0 \quad (4.117)$$

mit der Integrationskonstante

$$s_0 = s_0(\boldsymbol{\varepsilon}_r, \boldsymbol{\xi}_i^p) \quad (4.118)$$

Mit (4.114) kann die Form

$$\varphi = c_v(T - T_0) - c_v T \ln \frac{T}{T_0} - s_0(T - T_0) + \varphi_0 \quad (4.119)$$

mit der Integrationskonstante

$$\varphi_0 = \varphi_0(\boldsymbol{\varepsilon}_r, \boldsymbol{\xi}_i^p) \quad (4.120)$$

für die freie HELMHOLTZ-Energie gefunden werden.

Zu bestimmen sind nun noch die Integrationskonstanten φ_0 und s_0 .

Dazu wird angenommen, daß sich das elastische Materialverhalten durch den Zusammenhang

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r} = \mathbf{L} \quad (4.121)$$

beschreiben läßt. Es soll hier \mathbf{L} in eine Taylorreihe um T_0 mit

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^0 - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i!} (T - T_0)^i \mathbf{L}_{\Theta}^{(i)} \quad (4.122)$$

mit

$$\mathbf{L}^0 = \mathbf{L}(T = T_0) \quad (4.123)$$

und

$$\mathbf{L}_{\Theta}^{(i)} = - \left(\frac{\partial^i \mathbf{L}}{\partial T^i} \right)_{T=T_0} \quad (4.124)$$

entwickelt werden. Gleichung (4.122) führt unter Benutzung der MAXWELL-Beziehung (3.22) und Beachtung der bisher hergeleiteten Form der Entropie (4.117) zur Bestimmungsdifferentialgleichung für s_0

$$\frac{\partial^2 s_0}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r^2} = \frac{1}{\rho_0} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{(i-1)!} (T - T_0)^{i-1} \mathbf{L}_{\Theta}^{(i)} \quad (4.125)$$

Aus dieser kann nach zweimaliger Integration bzgl. $\boldsymbol{\varepsilon}_r$ die Größe s_0 näher als

$$s_0 = \frac{1}{2\rho_0} \boldsymbol{\varepsilon}_r : \left(\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{(i-1)!} (T - T_0)^{i-1} \mathbf{L}_{\Theta}^{(i)} \right) : \boldsymbol{\varepsilon}_r + \boldsymbol{\beta}_0 : \boldsymbol{\varepsilon}_r + s_* \quad (4.126)$$

spezifiziert werden, wobei die Integrationskonstanten $\beta_0 = \beta_0(\xi_i^p)$ und $s_* = s_*(\xi_i^p)$ eingeführt wurden. Beachtet man in Gleichung (4.126), daß $s_0 = s_0(\epsilon_r, \xi_i^p)$ und somit

$$\frac{\partial s_0}{\partial T} = 0 \quad , \quad (4.127)$$

kann diese als

$$s_0 = \frac{1}{2\rho_0} \epsilon_r : \mathbf{L}_\Theta : \epsilon_r + \beta_0 : \epsilon_r + s_* \quad (4.128)$$

mit

$$\mathbf{L}_\Theta = \mathbf{L}_\Theta^{(1)} \quad (4.129)$$

und somit \mathbf{L} als

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^0 - (T - T_0) \mathbf{L}^\Theta \quad . \quad (4.130)$$

ausgedrückt werden. Es ist also maximal eine lineare Abhängigkeit der Elastizitätsmoduls von der Temperatur möglich. Es sei hier auch darauf verwiesen, daß die Annahme einer konstanten isochoren Wärmekapazität zur Herleitung dieser Tatsache nicht notwendig war.

Zur Bestimmungsdifferentialgleichung für φ_0 gelangt man, indem man die Definition der Spannung (3.12) in Gleichung (4.121) unter Berücksichtigung von (4.119), (4.128) und (4.130) einsetzt:

$$\frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial \epsilon_r^2} = \frac{1}{\rho_0} \mathbf{L}_0 \quad . \quad (4.131)$$

Integriert man (4.131) gelangt man unter Annahme der Anfangsbedingungen

$$\varphi_0(\epsilon_r = \mathbf{0}) = 0 \quad , \quad \frac{\partial \varphi_0}{\partial \epsilon_r}(\epsilon_r = \mathbf{0}) = \mathbf{0} \quad (4.132)$$

zur Form für φ_0 :

$$\varphi_0 = \frac{1}{2\rho_0} \epsilon_r : \mathbf{L}_0 : \epsilon_r \quad (4.133)$$

Unter Benutzung von (4.133), (4.128) und (4.119) gelangt man zur Form für die freie HELMHOLTZ-Energie:

$$\varphi = \frac{1}{2\rho_0} \epsilon_r : \mathbf{L} : \epsilon_r - (T - T_0) \beta_0 : \epsilon_r + c_v (T - T_0) - c_v T \ln \frac{T}{T_0} - s_* (T - T_0) \quad (4.134)$$

Sollte der Einfluß der inelastischen Formänderungen vernachlässigbar sein, sind β_0 und s_* Konstanten. Die hier gezeigte Vorgehensweise läßt sich auf eine den Einfluß der inelastischen Belastungsgeschichte berücksichtigende Beschreibung erweitern, indem für β_0 und s_* analoge Überlegungen wie für s_0 und φ_0 vorgenommen werden. Basierend darauf und den im Abschnitt 3.1.3 aufgeführten partiellen Ableitungen der GIBBS-Energie können diese Parameter weiter spezifiziert werden.

Die kalorische und die thermische Zustandsgleichung werden somit zu

$$-\frac{\partial\varphi}{\partial T} = s = c_v \ln \frac{T}{T_0} + \frac{1}{2\rho_0} \boldsymbol{\varepsilon}_r : \mathbf{L}_\Theta : \boldsymbol{\varepsilon}_r + \boldsymbol{\beta}_0 : \boldsymbol{\varepsilon}_r + s_* \quad (4.135)$$

$$\rho_0 \frac{\partial\varphi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_r} = \mathbf{S} = \mathbf{L} : \boldsymbol{\varepsilon}_r - (T - T_0) \boldsymbol{\beta}_0 \rho_0 \quad (4.136)$$

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß die Einführung des Steifigkeitstensors \mathbf{M} mit

$$\mathbf{M} := \mathbf{L}^{-1} \quad (4.137)$$

und des Tensor der Wärmeausdehnung $\boldsymbol{\alpha}$ mit

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{M} : \boldsymbol{\beta}_0 \rho_0 \quad (4.138)$$

auf die bekanntere Form der Gleichung (4.136) als

$$\boldsymbol{\varepsilon}_r = \mathbf{M} : \mathbf{S} + (T - T_0) \boldsymbol{\alpha} \quad (4.139)$$

führt.

Im folgenden sollen die bisher hergeleiteten Zusammenhänge zur Beschreibung der isobaren Wärmekapazität c_p genutzt werden. Unter Verwendung der Definition der isobaren spezifischen Wärmekapazität (3.53) und der Transformationsbeziehung zwischen der freien Enthalpie h und der freien GIBBS-Energie g

$$h = g + Ts \quad (4.140)$$

und der Darstellung der Entropie in Abhängigkeit von der GIBBS-Energie und der Temperatur

$$s = -\frac{\partial g}{\partial T} \quad (4.141)$$

gelangt man zu der Bestimmungsgleichung für c_p als

$$c_p = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_{\mathbf{S}} \quad (4.142)$$

Verwendet man die Gleichungen (4.135) und (4.139) gelangt man zu

$$c_p = c_v + \frac{1}{\rho_0} T [(\mathbf{M} : \mathbf{S} + (T - T_0) \boldsymbol{\alpha}) : \mathbf{L}_\Theta : \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{L} : \boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{\alpha}] \quad (4.143)$$

und unter Berücksichtigung von (4.130) zu

$$c_p = c_v + \frac{1}{\rho_0} T (\mathbf{M} : \mathbf{S} : \mathbf{L}_\Theta : \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha} : \mathbf{L}_0 : \boldsymbol{\alpha}) \quad (4.144)$$

Dieser Zusammenhang gilt für beliebige $c_v = c_v(T)$.

Berücksichtigt man zunächst nur die Temperaturabhängigkeit von c_p und setzt $\mathbf{S} = \mathbf{0}$ in (4.144), gelangt man zu

$$c_p = c_v + \frac{1}{\rho_0} T \boldsymbol{\alpha} : \mathbf{L}_0 : \boldsymbol{\alpha} . \quad (4.145)$$

Um die Möglichkeit zu einer Anpassung an Versuchsdaten zu geben, wird nun Isotropie sowohl bzgl. der thermischen Ausdehnung in der Form

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{1}\alpha \quad (4.146)$$

als auch bzgl. der elastischen Spannung-Dehnungsbeziehung mit (s. BETTEN[Bet93]) den Komponenten von \mathbf{L} als

$$L_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (4.147)$$

wobei $\mathbf{L} = L_{ijkl} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l$ mit den LAMÉ-„Konstanten“ λ und μ angenommen. Aus (4.130) folgt für diese

$$\lambda = \lambda^0 - (T - T_0) \lambda^\ominus \quad (4.148)$$

und

$$\mu = \mu^0 - (T - T_0) \mu^\ominus . \quad (4.149)$$

mit den Konstanten λ^0 , λ^\ominus , μ^0 und μ^\ominus . Der Elastizitätsmodul $E = E(T)$ und die Querkontraktionszahl $\nu = \nu(T)$ lassen sich in Abhängigkeit dieser Parameter durch

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad \text{und} \quad \nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} \quad (4.150)$$

ausdrücken, die Inversion von (4.150) liefert

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad \text{und} \quad \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} . \quad (4.151)$$

Unter Verwendung dieser Annahmen folgt aus (4.138)

$$\mathbf{L} : \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{1}\alpha(3\lambda + 2\mu) = \boldsymbol{\beta}_0 \rho_0 \quad (4.152)$$

und impliziert somit die Form

$$\boldsymbol{\beta}_0 = \mathbf{1}\beta_0 \quad (4.153)$$

für $\boldsymbol{\beta}_0$. Der skalare Parameter β_0 kann somit durch

$$\alpha = \frac{1}{3\lambda + 2\mu} \beta_0 \rho_0 \quad (4.154)$$

mit der Wärmeausdehnung α in Verbindung gebracht werden. Verwendet man den Elastizitätsmodul und die Querkontraktionszahl ergibt sich

$$\alpha = \frac{1 - 2\nu}{E} \beta_0 \rho_0 . \quad (4.155)$$

Gleichung (4.145) wird zu

$$c_p = c_v + \frac{1}{\rho_0} T \, 3(3\lambda^0 + 2\mu^0) \left(\frac{\beta_0 \rho_0}{3\lambda + 2\mu} \right)^2 \quad (4.156)$$

oder

$$c_p = c_v + \frac{1}{\rho_0} T \frac{3E_0}{1 - 2\nu^0} \left(\frac{1 - 2\nu}{E} \right)^2 \beta_0^2 \rho_0^2 \quad (4.157)$$

mit $E_0 = E(T = T_0)$ und $\nu^0 = \nu(T = T_0)$.

Zur Berechnung des spannungsabhängigen Anteils in (4.144) wird die Variable

$$\boldsymbol{\varepsilon}_e = \mathbf{M} : \mathbf{S} \quad (4.158)$$

verwendet, die im Verlauf der Berechnung des elasto-plastischen Verhaltens des Materials bestimmt werden kann. Weiterhin sollen die Annahmen bzgl. der Materialisotropie (4.146) und (4.147) gelten. Berücksichtigt man dies, folgt

$$\frac{1}{\rho_0} T \mathbf{M} : \mathbf{S} : \mathbf{L}_\Theta : \boldsymbol{\alpha} = T \beta_0 \frac{3\lambda^\Theta + 2\mu^\Theta}{3\lambda + 2\mu} \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_e) \quad (4.159)$$

Faßt man diese Überlegungen zusammen, folgt für die isobare spezifische Wärmekapazität

$$c_p = c_v + \frac{1}{\rho_0} T \, 3(3\lambda^0 + 2\mu^0) \left(\frac{\beta_0 \rho_0}{3\lambda + 2\mu} \right)^2 + T \beta_0 \frac{3\lambda^\Theta + 2\mu^\Theta}{3\lambda + 2\mu} \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_e) \quad (4.160)$$

Zur Berechnung der Differenz des chemischen Potentials zweier Phasen ist nicht der absolute Wert, sondern nur die Differenz der freien HELMHOLTZ-Energie notwendig. Die Differenz der isochoren Wärmekapazitäten der Phasen um den Umwandlungspunkt ist vernachlässigbar gering. Da für den Bereich um diesen Punkt eine Näherung erarbeitet werden soll, werden diese hier als gleich angenommen. Es folgt für die Differenz der freien HELMHOLTZ-Energie $\Delta\varphi = \varphi^\alpha - \varphi^\beta$ der Phasen α und β aus Gleichung (4.134)

$$\begin{aligned} \Delta\varphi &= \frac{1}{2\rho_0} \boldsymbol{\varepsilon}_r^\alpha : \mathbf{L}^\alpha : \boldsymbol{\varepsilon}_r^\alpha - (T - T_0) \boldsymbol{\beta}_0^\alpha : \boldsymbol{\varepsilon}_r^\alpha \\ &\quad - \frac{1}{2\rho_0} \boldsymbol{\varepsilon}_r^\beta : \mathbf{L}^\beta : \boldsymbol{\varepsilon}_r^\beta + (T - T_0) \boldsymbol{\beta}_0^\beta : \boldsymbol{\varepsilon}_r^\beta \\ &\quad - \Delta s_*(T - T_0) \end{aligned} \quad (4.161)$$

mit $\Delta s_* = s_*^\alpha - s_*^\beta$.

Eine Aufteilung der freien HELMHOLTZ-Energie in einen chemischen Anteil $\varphi_{chem} = \varphi(\boldsymbol{\varepsilon}_r = \mathbf{0})$ und einen mechanischen Anteil $\varphi_{mech} = \varphi - \varphi_{chem}$ ist hier sinnvoll. Es gelte, einem Vorschlag FISCHERS[Fis97] folgend⁴, für den chemischen Anteil

⁴Hierbei wird der Koppelterm vernachlässigt.

$$\Delta\varphi_{chem} = (c_1^\varphi + c_2^\varphi(T - T_0))(T - T_0) \quad (4.162)$$

und für den mechanischen Anteil

$$\begin{aligned} \Delta\varphi_{mech} &= \frac{1}{2\rho_0} \mathbf{S}^\alpha : \mathbf{M}^\alpha : \mathbf{S}^\alpha - \frac{1}{2\rho_0} \mathbf{S}^\beta : \mathbf{M}^\beta : \mathbf{S}^\beta \\ &= \frac{1}{2\rho_0} \mathbf{S}^\alpha : \boldsymbol{\varepsilon}_e^\alpha - \frac{1}{2\rho_0} \mathbf{S}^\beta : \boldsymbol{\varepsilon}_e^\beta \end{aligned} \quad (4.163)$$

mit $\boldsymbol{\varepsilon}_e = \boldsymbol{\varepsilon}_r - (T - T_0)\boldsymbol{\alpha}$.

4.6.2.2 Spezifikation der Parameter des Meso-Stoffgesetzes

Die Anpassung der Materialparameter kann durch Auswertung des Verlaufs der Spannungs-Dehnungskurve bei einem einaxialen Spannungszustand erfolgen.

Im folgenden wird, um die Notation zu vereinfachen, der die Phase kennzeichnende Index weggelassen. Die in diesem Abschnitt präsentierten Beziehungen lassen sich für jede Phase aufstellen.

Im Rahmen dieser Arbeit wird der Ansatz

$$\Phi_p = 2\gamma \frac{\Lambda}{E} \left(1 + \frac{\Lambda}{c_4}\right)^{c_5} \quad (4.164)$$

verwendet, wobei γ , c_4 und c_5 im allgemeinen phasen- und temperaturabhängige Parameter und E der Elastizitätsmodul der Phase α sind. Die Größe g in Gleichung (4.73) wird durch

$$g(\kappa) = g_0 \left(1 + (c_2 - 1)(1 - e^{-c_1\kappa})\right) \quad (4.165)$$

mit den phasen- und temperaturabhängigen Konstanten c_1 und c_2 berechnet.

Der Parameter c der Gleichung (4.81) soll durch die Beziehung

$$c = \frac{2}{3} \frac{EE_t}{E - E_t} - \frac{1}{2} g_0 (c_2 - 1) c_1 e^{-c_1\kappa} \quad (4.166)$$

ausgedrückt werden. Als neuer Parameter wurde hier E_t eingeführt. Dieser kann aus der einaxialen Spannungs-Dehnungskurve durch

$$E_t(\varepsilon) = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \quad (4.167)$$

bestimmt werden (siehe auch Abb.4.10). Nimmt man an, daß sich für den inelastischen Bereich die Beziehung zwischen Spannungen und Dehnungen durch den Ausdruck

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{k_1\varepsilon^2 + k_2\varepsilon + k_3}{\varepsilon + k_4} \quad (4.168)$$

beschreiben läßt, wird E_t zu

$$E_t(\varepsilon) = \frac{k_1\varepsilon^2 + 2k_1k_4\varepsilon + k_2k_4 - k_3}{(\varepsilon + k_4)^2} . \quad (4.169)$$

Die Parameter k_1 bis k_4 sind i.a. temperaturabhängig und von der Fließspannung σ_0 abhängig. Diese Abhängigkeit kann bei ähnlichem Verlauf der plastischen Deformation bei verschiedenen Temperaturen näher spezifiziert werden, wenn die Parameter

$$E_t^\infty = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} E_t(\varepsilon) \quad (4.170)$$

$$E_t^0 = E_t\left(\frac{\sigma_0}{E}\right) \quad (4.171)$$

$$c_\sigma = \frac{1}{\sigma_0} \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} (\sigma(\varepsilon) - E_t^\infty \varepsilon) \quad (4.172)$$

eingeführt werden. Nimmt man zusätzlich die Kontinuitätsbedingung

$$\sigma\left(\frac{\sigma_0}{E}\right) = \sigma_0 \quad (4.173)$$

hinzu, liegt ein System von vier Gleichungen zur Bestimmung der Parameter k_1 bis k_4 vor. Um die Abhängigkeit der Parameter von dem Elastizitätsmodul zu minimieren, werden die dimensionslosen Parameter

$$\Psi_0 = \frac{E_t^0}{E} \quad (4.174)$$

und

$$\Psi_\infty = \frac{E_t^\infty}{E} \quad (4.175)$$

eingeführt. Mit diesen folgt

$$k_1 = E \Psi_\infty \quad (4.176)$$

$$k_2 = \sigma_0 \frac{c_\sigma \Psi_0 + \Psi_\infty (2\Psi_\infty - \Psi_0 - 1)}{\Psi_0 - \Psi_\infty} \quad (4.177)$$

$$k_3 = \frac{\sigma_0^2}{E} \frac{c_\sigma (1 - \Psi_0) - (1 - \Psi_\infty)^2}{\Psi_0 - \Psi_\infty} \quad (4.178)$$

$$k_4 = \frac{\sigma_0}{E} \frac{c_\sigma - \Psi_0 + 2\Psi_\infty - 1}{\Psi_0 - \Psi_\infty} \quad (4.179)$$

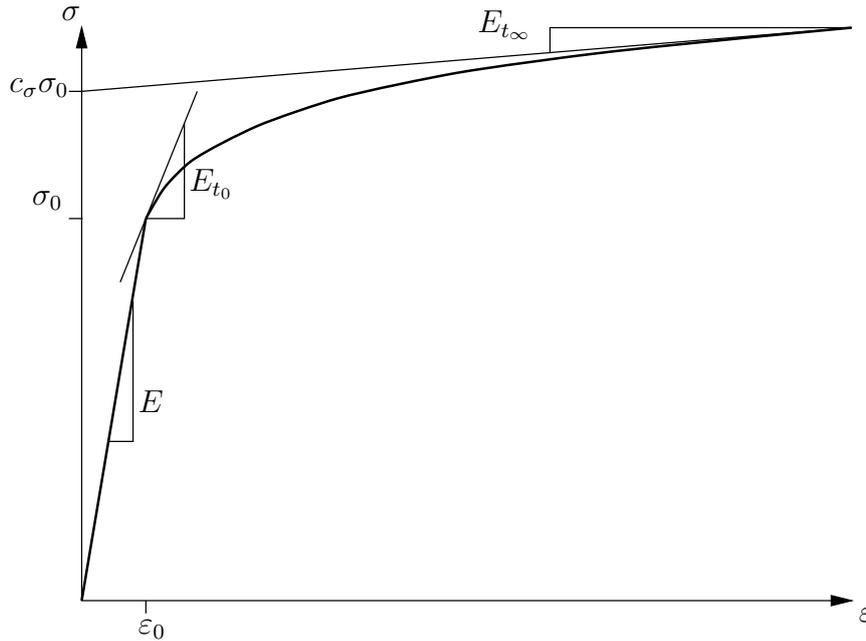


Abb. 4.10: Bedeutung der Parameter E_t^0 , E_t^∞ und c_σ , die Größe E_t^∞ ist nur zur Verdeutlichung der Zusammenhänge für $\epsilon \neq \infty$ eingezeichnet worden.

4.6.2.3 Fließgrenze

Der temperaturabhängige Parameter σ_0 soll an Meßdaten angepaßt werden. BESSERDICH[Bes93] gibt die Fließgrenze von Austenit und Martensit des Werkstoffes 42CrMo4 bei verschiedenen Temperaturen an (Abb. 4.11 und 4.12). Es wurde ein Polynomansatz zweiten Grades zur Beschreibung der Meßdaten verwendet. Die Anpassung liefert gute Ergebnisse im Falle des Austenits. Beim Martensit ist ein unphysikalisches Maximum der Fließgrenze zu beobachten. Dies kann auch durch einen Polynomansatz höherer Ordnung nicht unterbunden werden. Daher ist ein Polynomansatz für diese Größe nur bedingt nutzbar. Hier

soll aber, um die Implementation des Stoffmodells vertretbar einfach zu halten, der in Abb. 4.11 gezeichnete Ansatz verwendet werden. Die maximale relative Abweichung dieser Funktion von einem angenommenen linearen Verlauf zwischen 20 °C und 200 °C beträgt für diesen Temperaturbereich 2.37%.

Die in den Abbildungen 4.11 und 4.12 dargestellten Funktionen lauten

$$\sigma_0^M(T) = \left(1577 + 0.98885 \frac{T}{^\circ\text{C}} - 5.7835 \cdot 10^{-3} \frac{T^2}{^\circ\text{C}^2} \right) \frac{N}{\text{mm}^2} \quad (4.180)$$

und

$$\sigma_0^A(T) = \left(336 - 0.55009 \frac{T}{^\circ\text{C}} + 2.3068 \cdot 10^{-4} \frac{T^2}{^\circ\text{C}^2} \right) \frac{N}{\text{mm}^2} . \quad (4.181)$$

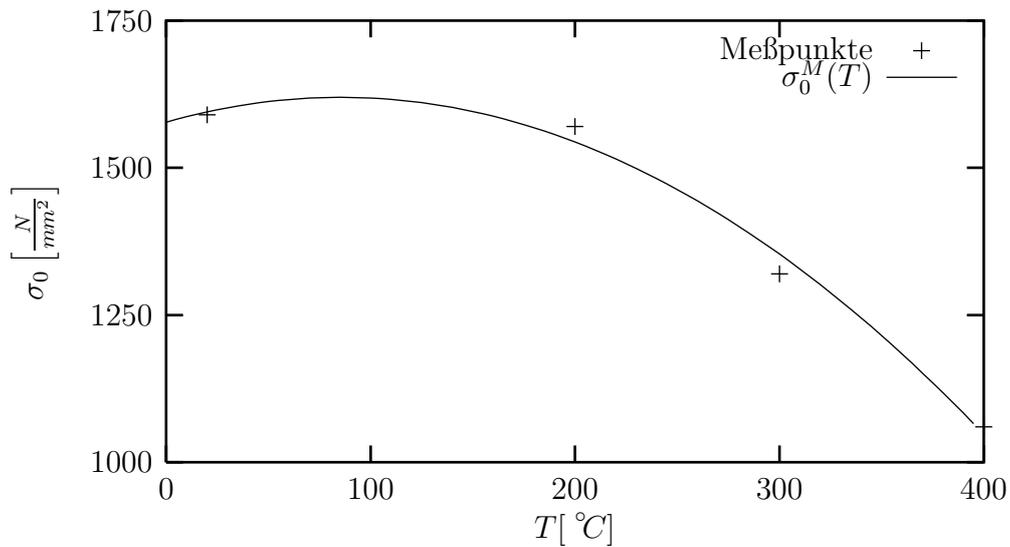


Abb. 4.11: Fließgrenze in Abhängigkeit von der Temperatur nach BESSERDICH[Bes93] und angepaßte Funktion $\sigma_0^M(T)$

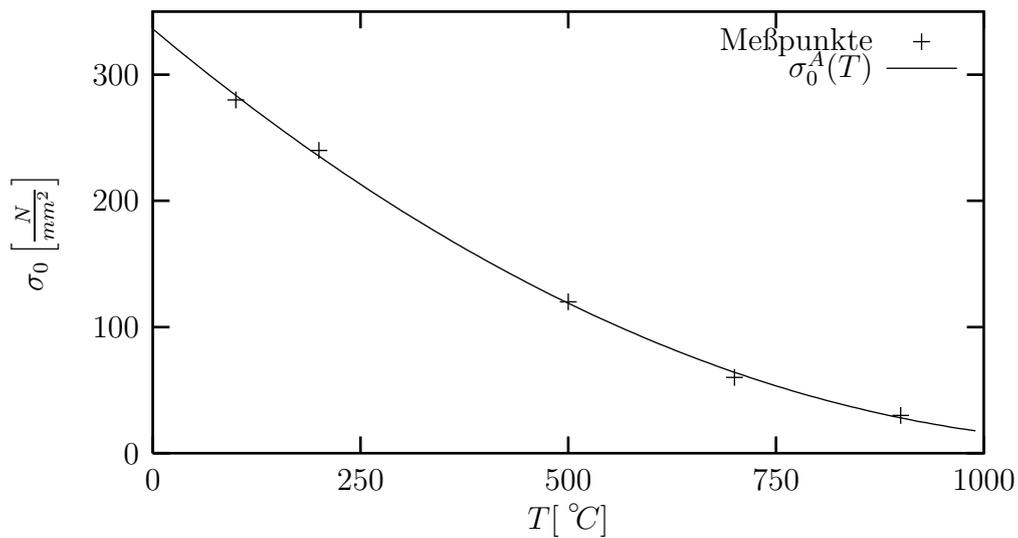


Abb. 4.12: Fließgrenze des Austenits in Abhängigkeit von der Temperatur nach BESSERDICH[Bes93] und angepaßte Funktion $\sigma_0^A(T)$

4.6.2.4 Darstellung des Stoffgesetzverhaltens

Das Verhalten des Meso-Stoffgesetzes mit den verwendeten Parametern soll hier Anhand ausgesuchter Beispiele erläutert werden. Die Wahl der Parameter ist hier aufgrund fehlender experimenteller Daten weitestgehend auf Basis von Untersuchungen anderer Stähle

vorgenommen worden (s. u.a. WESTERHOFF[Wes95]). Sie orientiert sich aber an dem bei 42CrMo4 zu beobachteten Verhalten. Die Parameter wurden so gewählt, daß bei verschiedenen Temperaturen ähnliches plastisches Verhalten zu beobachten ist. Für eine bessere Abbildung des Materialverhaltens, insbesondere bei zyklischen Versuchen, ist eine Temperaturabhängigkeit aller elastisch-viskoplastischer Parameter vorzusehen. Die hier gewählten Parameter sind im Anhang B zusammengestellt.

In den Abbildungen 4.14, 4.15 und 4.16 ist das Stoffgesetzverhalten des Austenits im elastischen Bereich und für leichte Plastifizierung für einen zyklischen Versuch, für verschiedene Temperaturen und für verschiedene Dehngeschwindigkeiten dargestellt. Da sich das Verhalten des Martensits mit den gewählten Parametern nur durch die Fließgrenze unterscheidet, ist für Martensit nur die Temperaturabhängigkeit des Materialverhaltens in Abb. 4.17 dargestellt. Die Versuche wurde mit der FEM-Implementation durchgeführt. Es wurde ein Element wie in Abb. 4.13 dargestellt verwendet, die Belastung wurde durch eine veränderliche geometrische Randbedingung an der Oberkante der Elements aufgebracht. Die Querkontraktion wurde nicht behindert, wodurch ein einaxialer Spannungszustand erreicht wurde. In den o.g. Abbildungen ist daher $\sigma = \sigma_{xx}$ und $\varepsilon = \varepsilon_{xx}$ zu setzen.

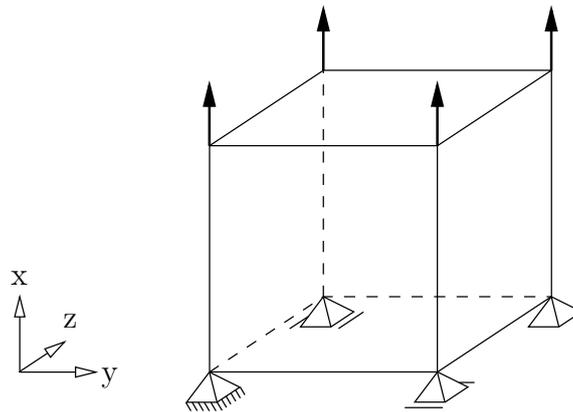


Abb. 4.13: Modell zur Verdeutlichung des Verhaltens der Meso-Stoffgesetzes

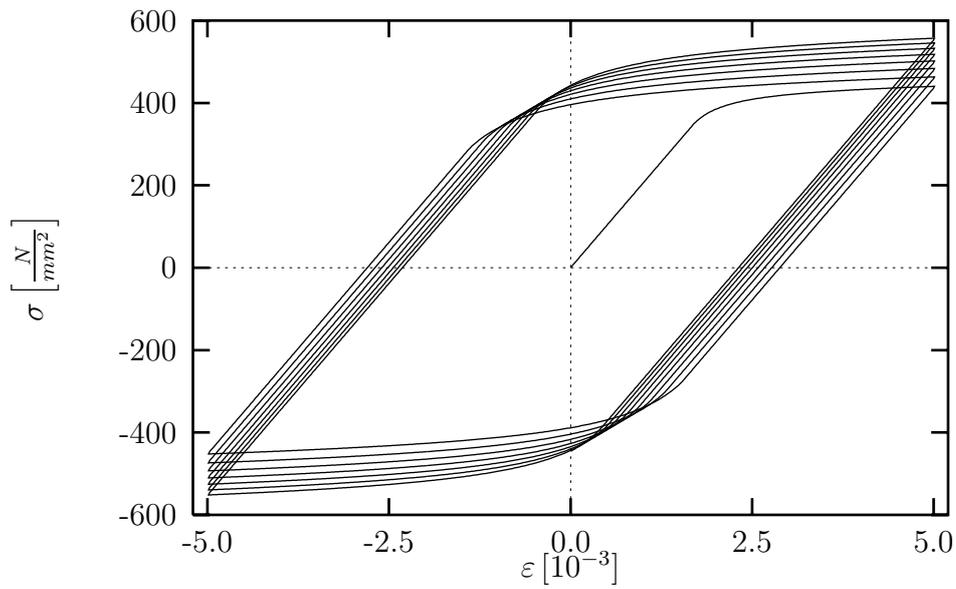


Abb. 4.14: Zyklisches Verhalten des Meso-Stoffgesetzes für Austenit bei $T = 20\text{ °C}$ und $\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^{-3}\text{ s}^{-1}$

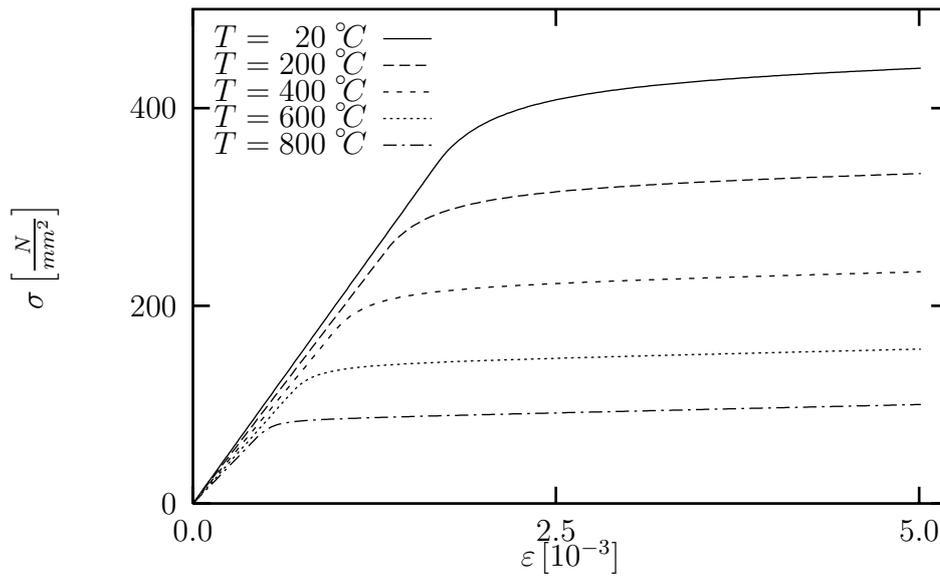


Abb. 4.15: Temperaturabhängigkeit des Meso-Stoffgesetzes für Austenit bei $\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^{-3}\text{ s}^{-1}$

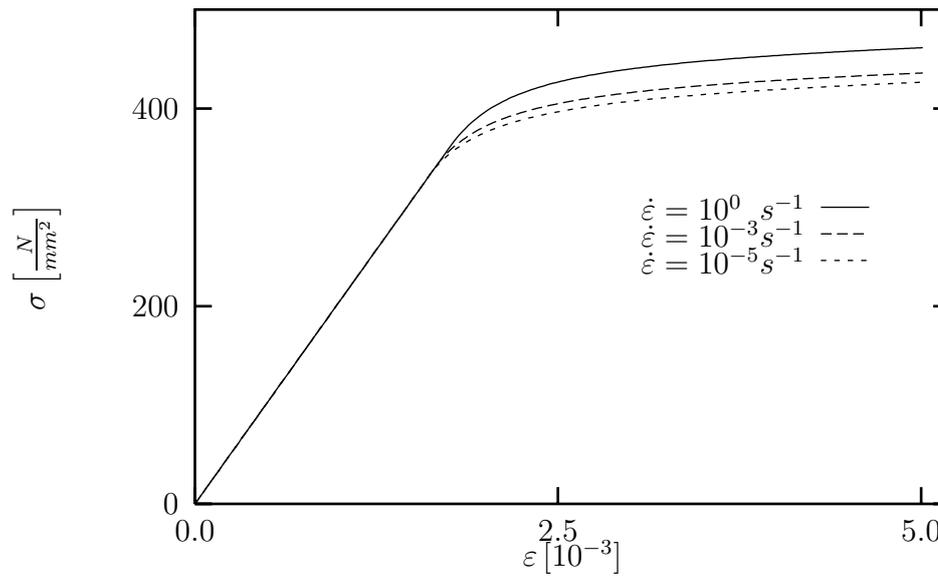


Abb. 4.16: Spannung-Dehnungsverhalten des Meso-Stoffgesetzes für Austenit bei $T = 20\text{ °C}$ für verschiedene Dehngeschwindigkeiten

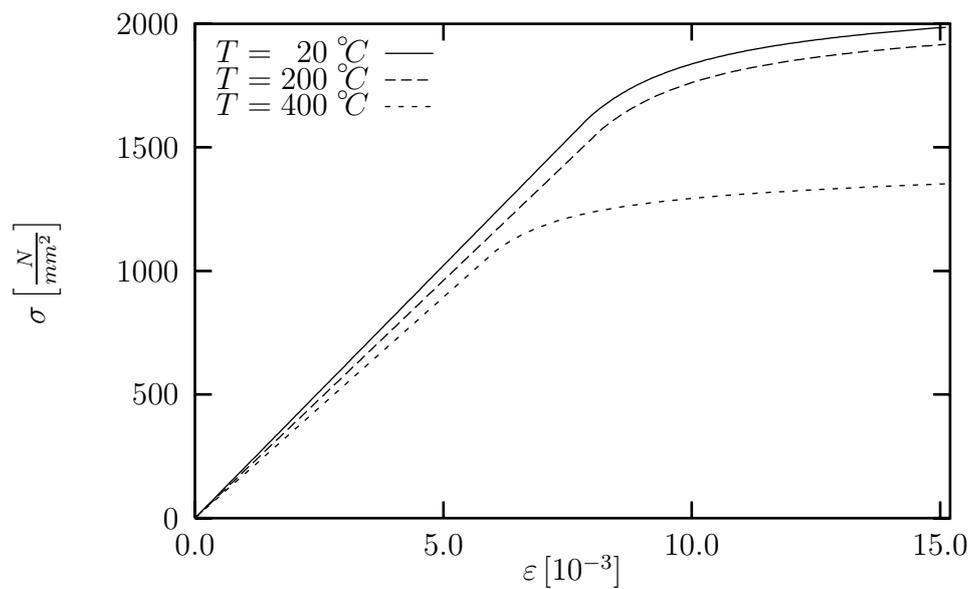


Abb. 4.17: Temperaturabhängigkeit des Meso-Stoffgesetzes für Martensit bei $\dot{\varepsilon} = 1.5 \cdot 10^{-2}\text{ s}^{-1}$

4.6.3 Ausgewählte Aspekte des Stoffgesetzverhaltens

Die folgenden Untersuchungen wurden mit einem axialsymmetrischen Modell einer Rohrprobe, wie in Abb.4.18 dargestellt, durchgeführt. Die Randbedingungen wurden so gewählt, daß ein reiner biaxialer Spannungszustand in der Form

$$\mathbf{S}_K = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & \sigma_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ \sigma_{13} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.182)$$

erreicht wurde.

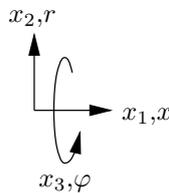
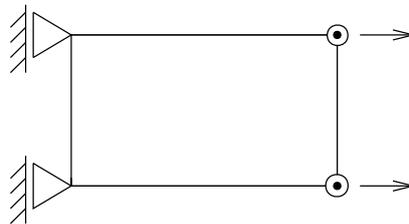


Abb. 4.18: Modell zur Simulation kombinierter Zug/Torsionsversuche

4.6.3.1 Martensit-Start-Temperatur

Zur Ermittlung der Abhängigkeit des Einsetzens der Transformation von Temperatur und Spannung ist der in Abb.4.19 dargestellte Versuchsablauf simuliert worden. Es wurde dazu zunächst bei einer Temperatur von $T = 560 \text{ }^\circ\text{C}$ eine Zug- bzw. Torsionsbelastung aufgebracht. Das Materialverhalten im Zugversuch bei dieser Temperatur ist in Abb.4.20 dargestellt. Als Definition der von Mises-Vergleichsspannung wurde

$$\sigma_v = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{S}'_K : \mathbf{S}'_K} = \sqrt{\sigma_{11}^2 + 3\sigma_{13}^2} \quad (4.183)$$

verwendet (BETTEN[Bet85]).

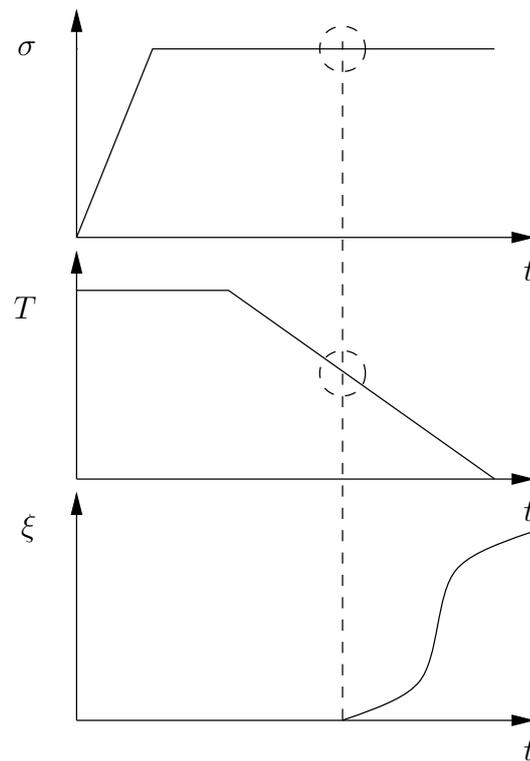


Abb. 4.19: Schematische Darstellung des Versuchsablaufs zur Bestimmung der Abhängigkeit des Einsetzens der Phasentransformation von Temperatur und Spannung. Umkreist sind die in den Abbildungen 4.21 und 4.22 dargestellten Werte.

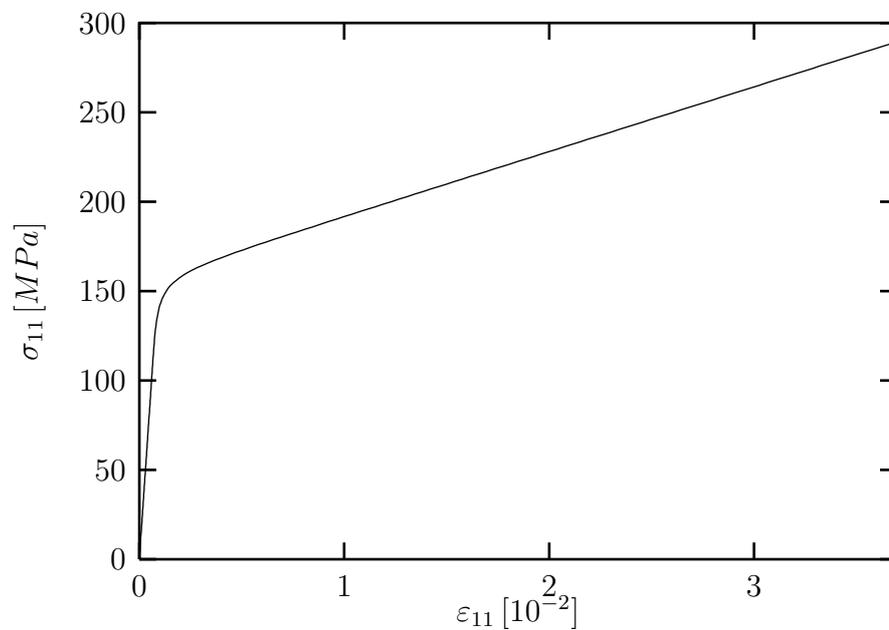


Abb. 4.20: Materialverhalten des Austenits bei $T = 560 \text{ }^\circ\text{C}$ im Zugversuch.

Das Diagramm 4.21 stellt die Martensit-Starttemperatur M_s in Abhängigkeit von einer Zugspannung dar. Die chemische Anteil der freien HELMHOLTZ-Energie wurde durch

$$\Delta\varphi_{chem} = ((-108.34 + 0.167122(\frac{T}{^\circ C} - 600))(\frac{T}{^\circ C} - 600))\frac{J}{kg} \quad (4.184)$$

modelliert. Der Parameter g_0^ξ wurde zu

$$g_0^\xi = 1.45 \cdot 10^9 \left(\frac{J}{kg}\right)^2 \quad (4.185)$$

gewählt.

Es läßt sich, solange die aufgebrachte Spannung unterhalb der Fließgrenze des Austenits ist, eine lineare Abhängigkeit der transformationsinduzierenden Spannung von der Temperatur beobachten. Dieses Verhalten kann mit den unterschiedlichen elastischen Eigenschaften des Austenits und des Martensits begründet werden. In diesem Fall wurde für den Elastizitätsmodul des Martensits ein um 10% höherer Wert als für das Austenit angenommen. Dieser linearer Zusammenhang ist sowohl bei Zug- als auch bei Schubspannung zu beobachten. Bei Torsionsbelastung ist die Veränderung der Temperatur aber deutlich geringer. Dieser Effekt konnte bei experimentellen Untersuchungen beobachtet werden (vgl. [VCP96]).

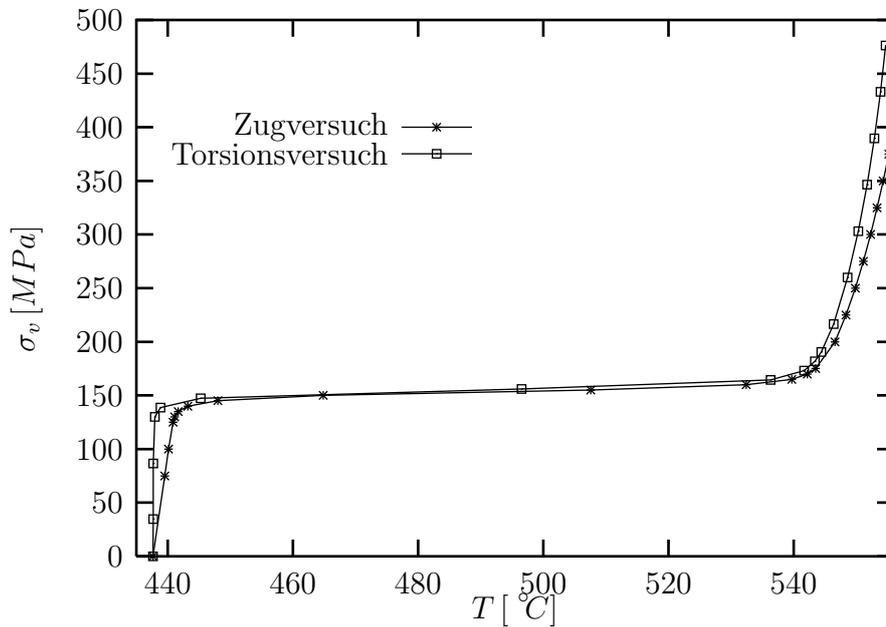


Abb. 4.21: Abhängigkeit der Martensit-Starttemperatur M_s von der angelegten Spannung für Zug und Torsion. Es wurden die Parameter (4.184) und (4.185) verwendet.

Ist eine Spannung erreicht, die bei weiterer Belastung zu einer merklichen plastischen Deformation führt, kann eine starke Abhängigkeit der Temperatur von der angelegten

Spannung beobachtet werden. Erreicht das plastische Verhalten des Austenits den linearen Grenzfall, ist wiederum eine stärkere Veränderung der Spannung zu beobachten. Der Verlauf scheint auf eine Grenztemperatur hinzulaufen. Vergleicht man Abb.4.21 und Abb.2.7a, erkennt man, daß das Modell in der Lage ist, das Verhalten des Werkstoffes qualitativ zu erfassen.

Bei Wahl anderer Parameter und Veränderung des Einflusses der Spannung auf das chemische Potential ist nicht nur eine quantitative Veränderung, sondern ein in weiten Teilen qualitativ unterschiedlicher Verlauf zu beobachten. Es wurde im folgenden Parametersatz durch Verändern der Gleichgewichtstemperatur des spannungsfreien Anteils der freien HELMHOLTZ-Energie ein deutlich geringerer Einfluß der Spannung modelliert. Für $\Delta\varphi_{chem}$ wurde

$$\Delta\varphi_{chem} = ((-108.34 + 0.167122(\frac{T}{\text{°C}} - 1062.48))(\frac{T}{\text{°C}} - 1062.48))\frac{J}{kg} \quad (4.186)$$

gewählt, weiterhin wurde

$$g_0^\xi = 4.0 \cdot 10^{10} \left(\frac{J}{kg}\right)^2 \quad (4.187)$$

gesetzt.

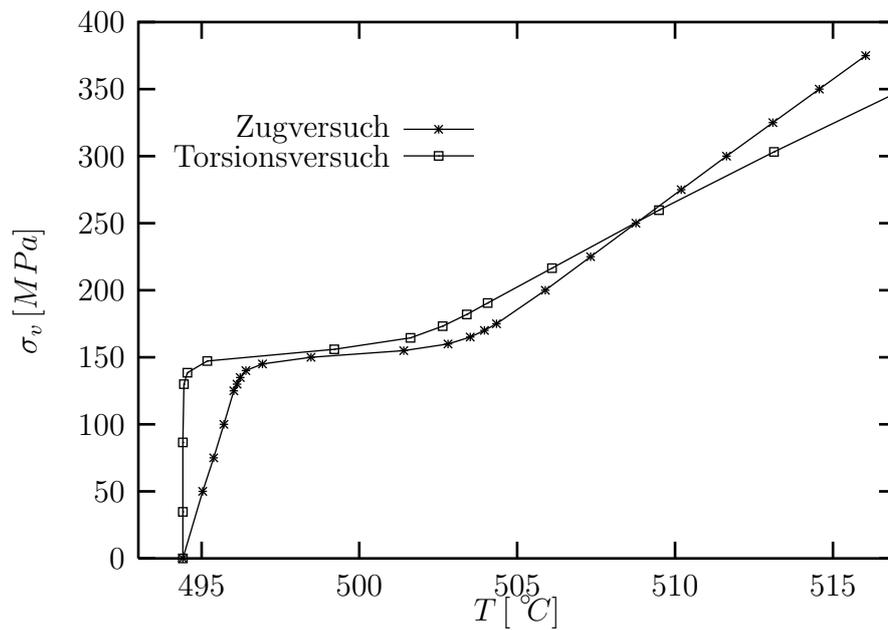


Abb. 4.22: Abhängigkeit der Martensit-Starttemperatur M_s von der angelegten Spannung für Zug und Torsion. Es wurden die Parameter (4.186) und (4.187) verwendet.

Das daraus resultierende Verhalten ist in Abb.4.22 abgestellt. Der Bereich bei Einsetzen der plastischen Deformationen ist nun überproportional kleiner. Weiterhin hat sich das Verhältnis von Zug- zu Torsionsversuch verändert. Es ist bei dieser Parameterwahl fast

keine Veränderung der Martensit-Start-Temperatur bei Aufbringen einer Schubspannung unter der Fließgrenze zu beobachten. Außerdem ist in diesem Fall kein asymptotisches Einmünden in eine Grenztemperatur feststellbar. Das Verhalten nach dem Spannungsplateau ist annähernd linear.

Das Modell in der Lage, einige Phänomene, die bei der Bestimmung der Temperatur- bzw. Spannungsabhängigkeit des Einsetzens der Transformation zu beobachten sind, zu modellieren. Trotzdem können einige Phänomene, wie z.B. ein Abfallen der Martensit-Start-Temperatur bei leichter plastischer Beanspruchung (GAUTIER[Gau85]) momentan nicht abgebildet werden. Unter Umständen kann die Berücksichtigung der plastischen Deformationen bei Berechnung der freien HELMHOLTZ-Energie bessere Möglichkeiten bieten.

4.6.3.2 Transformationsinduzierte Plastizität

Zur Ermittlung der transformationsinduzierten Plastizität wurde ebenfalls der im vorangegangenen Abschnitt verwendete Versuch berechnet. In Abb.4.23 sind für verschiedene axiale Vorbelastungen die Verläufe der 11-Dehnung dargestellt.

In den ersten 10 s des Versuchs wird bei der Temperatur von $T = 560 \text{ }^\circ\text{C}$ eine Zugspannung aufgebracht. Bei dem Verlauf für $\sigma_{11} = 140 \text{ MPa}$ ist aufgrund des Plastifizierens des Materials die Dehnung überproportional groß. Nach 10 s wird die Temperatur verringert, nach einiger Zeit setzt die Transformation ein. Diese ist für Zugspannungen ungleich Null an der transformationsinduzierten Dehnung erkennbar.

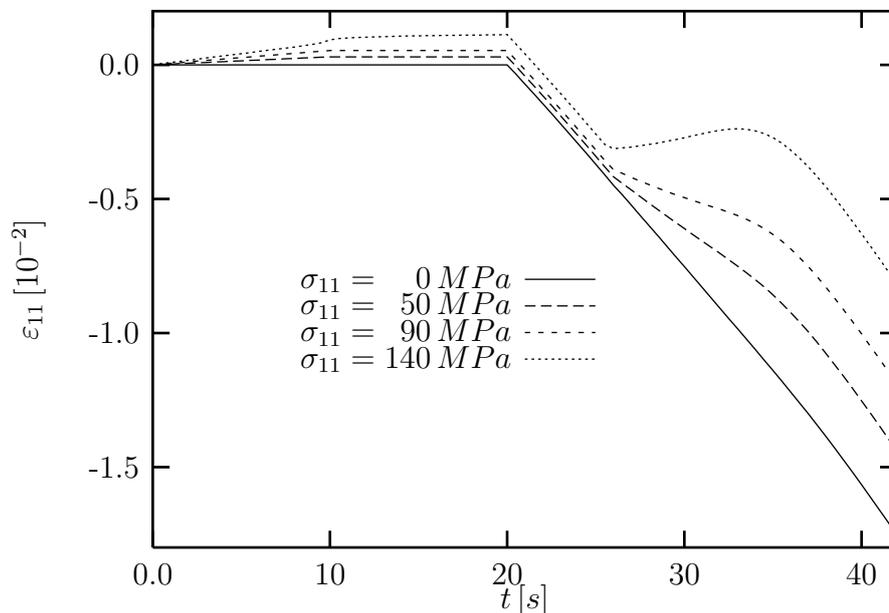


Abb. 4.23: Dehnung ε_{11} im Verlauf des Versuchs

Zur Berechnung der transformationsinduzierten Dehnung kann aufgrund des unterschiedlichen Dehnungsniveaus bei Einsetzen der Transformation nicht die Differenz zwischen

den Dehnungen unter Belastung und der Dehnung ohne Belastung verwendet werden. Es wird daher der Zeitpunkt des Einsetzens der Transformation miteinbezogen. Als Definition der transformationsinduzierten Dehnung gelte daher

$$\varepsilon_{ij} := \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^{\sigma=0} - (\varepsilon_{ij}(t^\xi = 0) - \varepsilon_{ij}^{\sigma=0}(t^\xi = 0)) \quad (4.188)$$

für alle $i, j \in \{1, 2, 3\}$, wobei der Zeitpunkt des Einsetzens der Transformation durch $t^\xi = 0$ gekennzeichnet wird.

Der Verlauf dieser Größe für die untersuchten Belastungen ist in Abb.4.24 dargestellt. Bei Überschreiten der Fließgrenze ist ein überproportionales Wachstum der transformationsinduzierten Dehnung erkennbar.

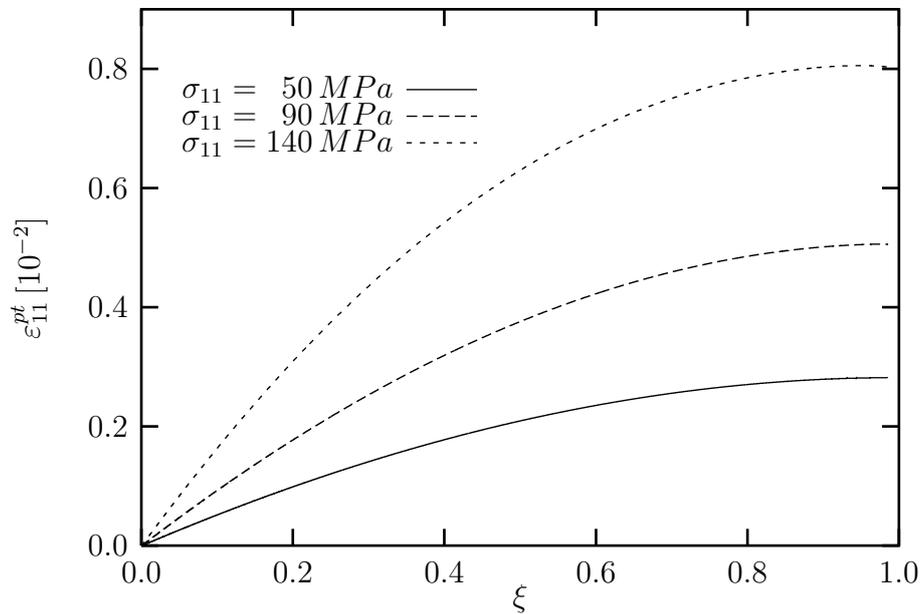


Abb. 4.24: Entwicklung der transformationsinduzierten Dehnung im Verlauf der Umwandlung

Schwächen zeigt die verwendete Modellierung bei Belastung in Druckrichtung. Es haben von VIDEAU ET AL. [VCP96] durchgeführte experimentelle Untersuchungen gezeigt, daß bei Druckbelastung deutlich geringere transformationsinduzierte Dehnungen auftreten. Dies kann mit der verwendeten Form (4.13) nicht modelliert werden. Wie aufgrund der Struktur der Gleichung (4.13) zu erwarten, ist ein symmetrisches Verhalten bzgl. des Vorzeichens der Belastung in Abb.4.25 zu beobachten.

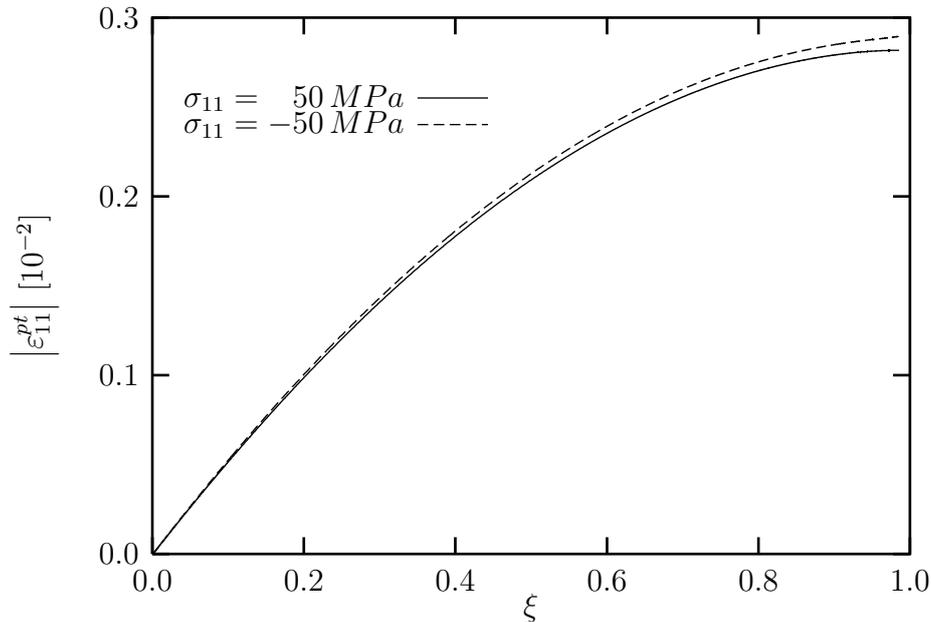


Abb. 4.25: Entwicklung des Betrags der transformationsinduzierten Dehnung im Verlauf der Umwandlung

4.6.3.3 Orientierungseffekt

Für die in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen Untersuchungen soll nun die Entwicklung des Tensors ξ während der Umwandlung dargestellt werden. Aufgrund der während der Umwandlung herrschenden Zugspannung in x_1 -Richtung ist ein stärkeres Wachstum der 11-Komponenten als der 22- und 33-Komponenten des Tensors ξ zu erwarten. Um ein relatives Maß für die Orientierung zu finden, wird die Komponente ξ_{11} auf die Spur des Tensors, den Massenanteil $\xi = \text{tr}(\xi)$ bezogen. Der Verlauf für verschiedene Zugspannungen ist in Abb.4.26 dargestellt.

Die Orientierungsausrichtung ist bei größerer Spannung stärker, wiederum ist ein deutlicher Sprung bei Überschreiten der Fließgrenze zu beobachten (vergl Abb.2.9). Der Orientierungseffekt ist bei Einsetzen der Transformation am größten. Dies widerspricht der im Kapitel 3 hergeleiteten Anfangsbedingung und ist auf das diese Regel mißachtende Evolutionsgesetz für die Variable ξ zurückzuführen. Der qualitative Verlauf entspricht aber dem auch bei Berechnungen auf mikromechanischer Ebene beobachteten Verhalten ([MF95]). Es sollte daher überdacht werden, ob die Anfangsbedingung so strikt eingehalten werden sollte oder ob eine Evolutionsgleichung, wie sie hier verwendet wurde, eher dem experimentell beobachtetem Verhalten folgt.

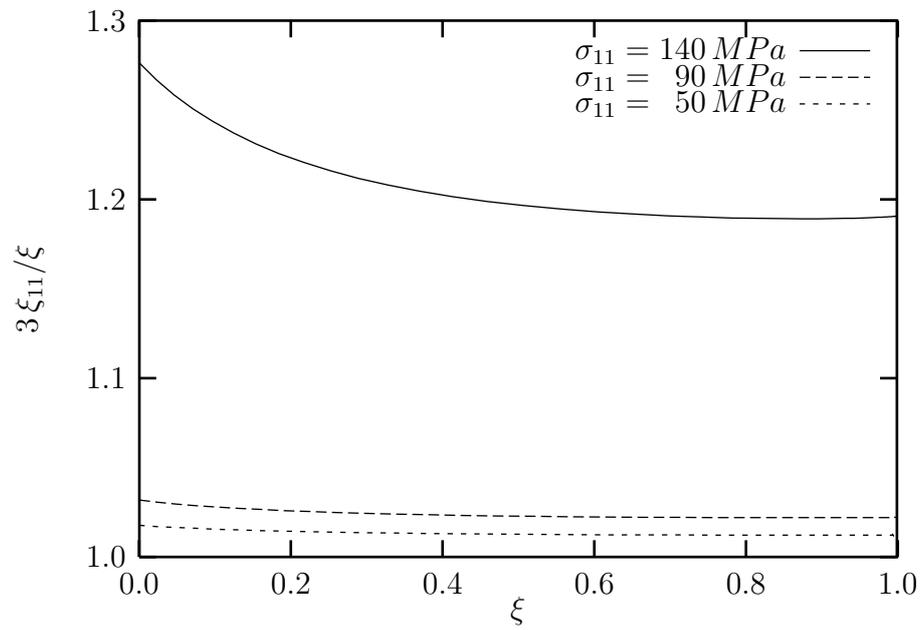


Abb. 4.26: Entwicklung der relativen Ausrichtung im Verlauf der Umwandlung

5. Strukturverhalten

5.1 Stirnabschreckversuch

Als erstes Berechnungsbeispiel wird hier ein Stirnabschreckversuch simuliert. Bei diesem wird im Vorfeld des Versuches die Probe auf die Anfangstemperatur erwärmt und dann hinreichend lang zur Erzeugung eines homogenen Phasengebildes auf dieser Temperatur gehalten. Oftmals handelt es sich bei der Probenform um zylindrische Vollproben. Eine Stirnseite der Probe wird nun mit einem Abkühlmedium, i.d.R. Wasser oder Öl, bestrahlt (s. Abb.5.1). Abhängig von dem verwendeten Material, dem Abkühlmedium und deren Temperaturen wird bis zu einer bestimmten Abstand von der Stirnfläche die Abkühlgeschwindigkeit zur Martensitbildung ausreichen.

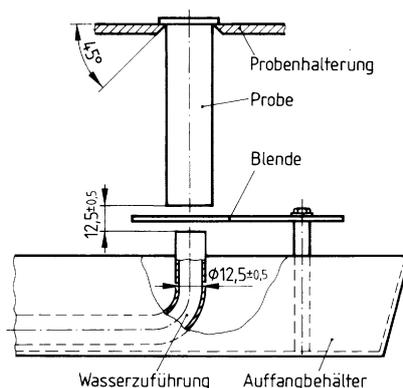


Abb. 5.1: Stirnabschreckversuch nach DIN 50191 (Nach [Kle93])

Zur Modellierung dieses Versuchs wurde das in Abb. 5.2 abgebildete Netz verwendet¹. Der Durchmesser des Zylinders beträgt 15 mm , die Länge 45 mm .² Die verwendeten Elemente sind Vier-Knoten-Elemente mit Torsionsmöglichkeit³. Das System aus 126 Elementen und 148 Knoten hat somit, vor Abzug der Randbedingungen, 444 mechanische und 148 thermische Freiheitsgrade. Es wurde von einer homogenen Anfangstemperatur von 560 °C ausgegangen, als thermische Randbedingungen wurden adiabates Verhalten

¹Bei real durchgeführten Stirnabschreckversuchen wird wie in Abb.5.1 dargestellt die Probe senkrecht gehalten und von unten mit dem Abkühlmedium bestrahlt. Aufgrund von Koordinatenvereinbarungen im FEM-System MARC liegt die Symmetrieachse bei den hier gezeigten Abbildungen. Die Zylinder wurde von der rechten Seite aus abgekühlt.

²Diese Abmessungen entsprechen nicht denen in der DIN 50191 vorgeschlagenen. Die konkrete Simulation stand aufgrund der fehlenden Werkstoffkennwerte nicht im Vordergrund.

³In diesem Versuch wird die untersuchte Struktur keiner Torsionsbelastung unterworfen. Die tordierbaren Elemente wurden aus programmtechnischen Gründen verwendet.

an den Mantelseiten und der linken Stirnfläche angenommen. An der rechten Stirnfläche wird eine konvektive Randbedingung modelliert, d.h. der Wärmefluß \mathbf{q} über der Oberfläche ist proportional zu der Temperaturdifferenz zwischen der Oberfläche (T_s) und dem Abkühlmedium (T_∞). Es gelte

$$\mathbf{q} = h(T_s - T_\infty) \quad (5.1)$$

mit dem temperaturabhängigen Parameter $h = h(T)$. Es wird dabei ein bilinearer Ansatz wie im Anhang beschrieben verwendet. Die Temperatur des Abkühlmedium beträgt $T_s = 20^\circ\text{C}$. Als mechanische Randbedingungen wurden an der linken Seite die Verschiebung in axialer Richtung verhindernde Loslager vorgesehen. Eines der Loslager verhindert zur Vermeidung von Starrkörperbewegungen zusätzlich die Verschiebung in tangentialer Richtung. Die Materialparameter sind im Anhang B.2 aufgeführt.

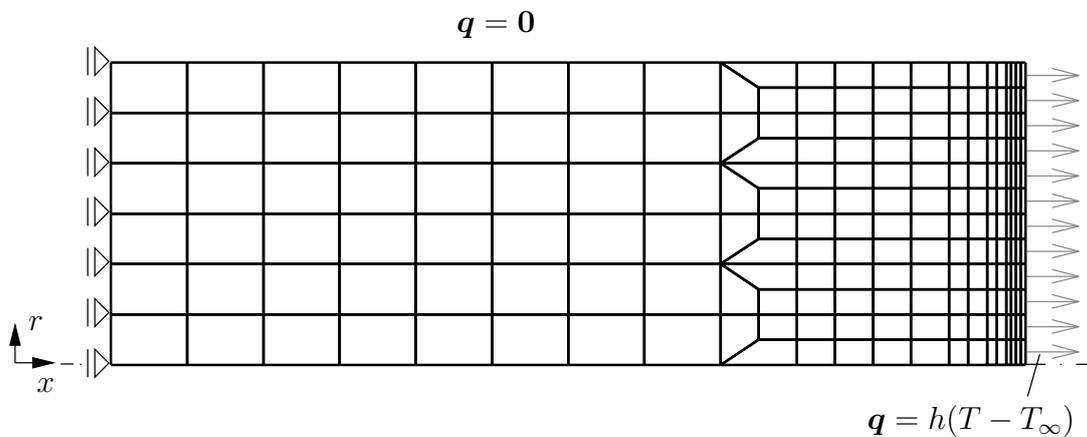


Abb. 5.2: Zur Simulation des Abschreckversuch verwendetes FEM-Netz. In diesem Bild nicht erkennbar ist, daß eines der Auflager zusätzlich die Starrkörperrotation verhindert.

Da das Materialmodell nur die Umwandlung von Austenit nach Martensit, nicht aber in andere Gefügeformen, berücksichtigt, ist der Versuch nur so lange durchgeführt worden, wie bei Umwandlung die kritische Abkühlgeschwindigkeit zur Bildung von Martensit nicht unterschritten wurde. Temperaturverteilung, Massenanteil des Martensit und die VON MISES-Vergleichsspannung sind für diesen Zeitpunkt in Abb.5.3 dargestellt. An der Stirnfläche des Zylinders ist das Material in einer dünnen Schicht vollständig umgewandelt. Für die Zeitpunkte $t = 1.0\text{ s}$, $t = 1.5\text{ s}$, $t = 2.0\text{ s}$, $t = 2.5\text{ s}$ und $t = 3.0\text{ s}$ sind die in Abb.5.3 dargestellten Größen in der Abb.5.4 zu sehen. Es wurde dort nur das rechte Drittel des Zylinders dargestellt.

Die VON MISES-Vergleichsspannung ist vor der Umwandlung teilweise so hoch, daß plastische Deformationen des Austenits beobachtet werden können. Nach der Umwandlung konnte wiederum das elastische Materialverhalten des Martensits beobachtet werden. Während der Umwandlung verringert sich die VON MISES-Vergleichsspannung eklatant. Einige Zeit nach der Umwandlung ist dann ein unterschiedliches Verhalten im Innenteil und am Außenrand zu beobachten: Während die Spannung am Außenrand auf dem niedrigen Niveau verbleibt, baut sich im Kern wieder eine relativ hohe Spannung auf.

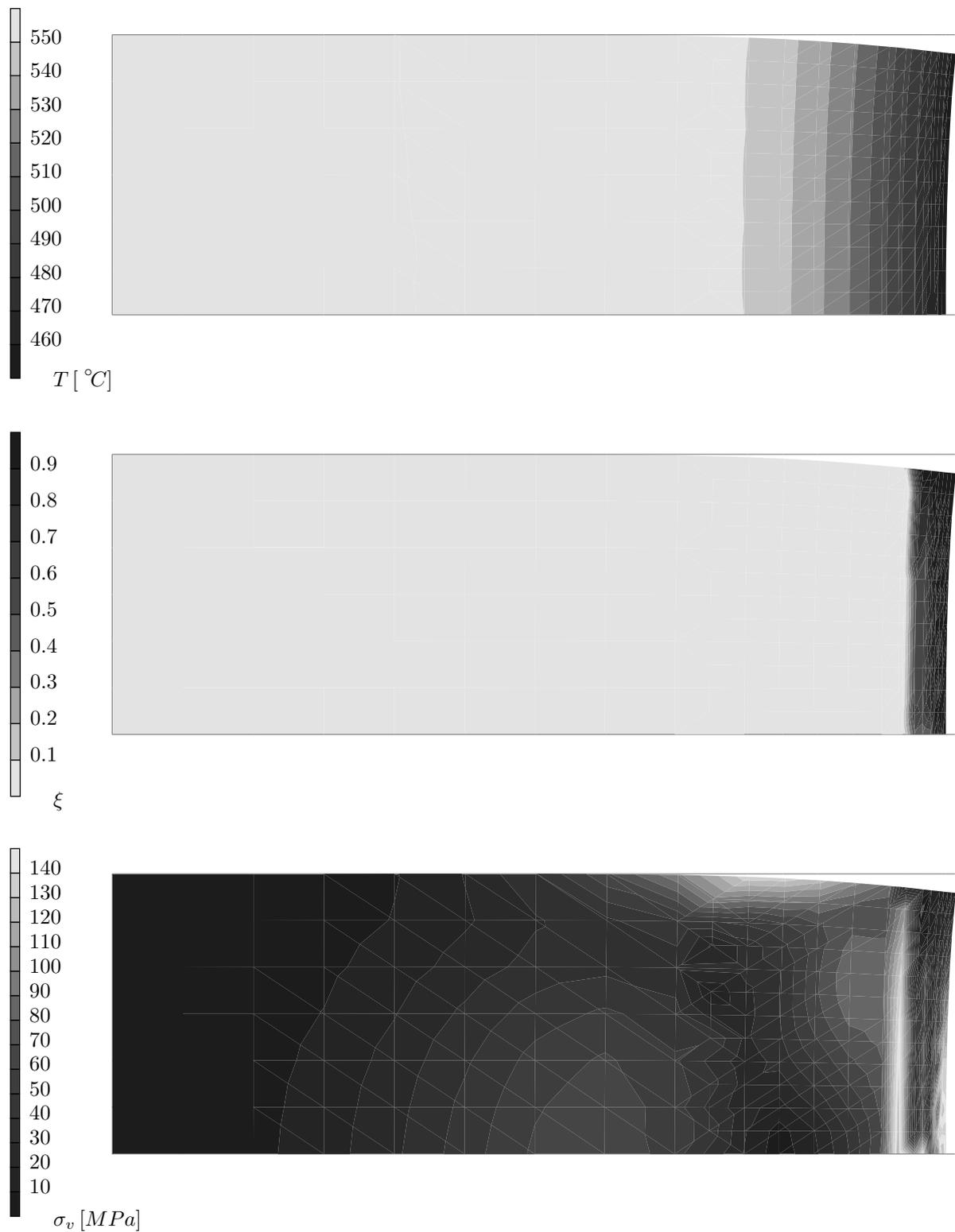


Abb. 5.3: Temperatur T , Massenanteil des Martensits ξ und VON MISES-Vergleichsspannung zum Zeitpunkt $t = 3.8s$. Die Verformungen sind 20-fach verstärkt dargestellt.

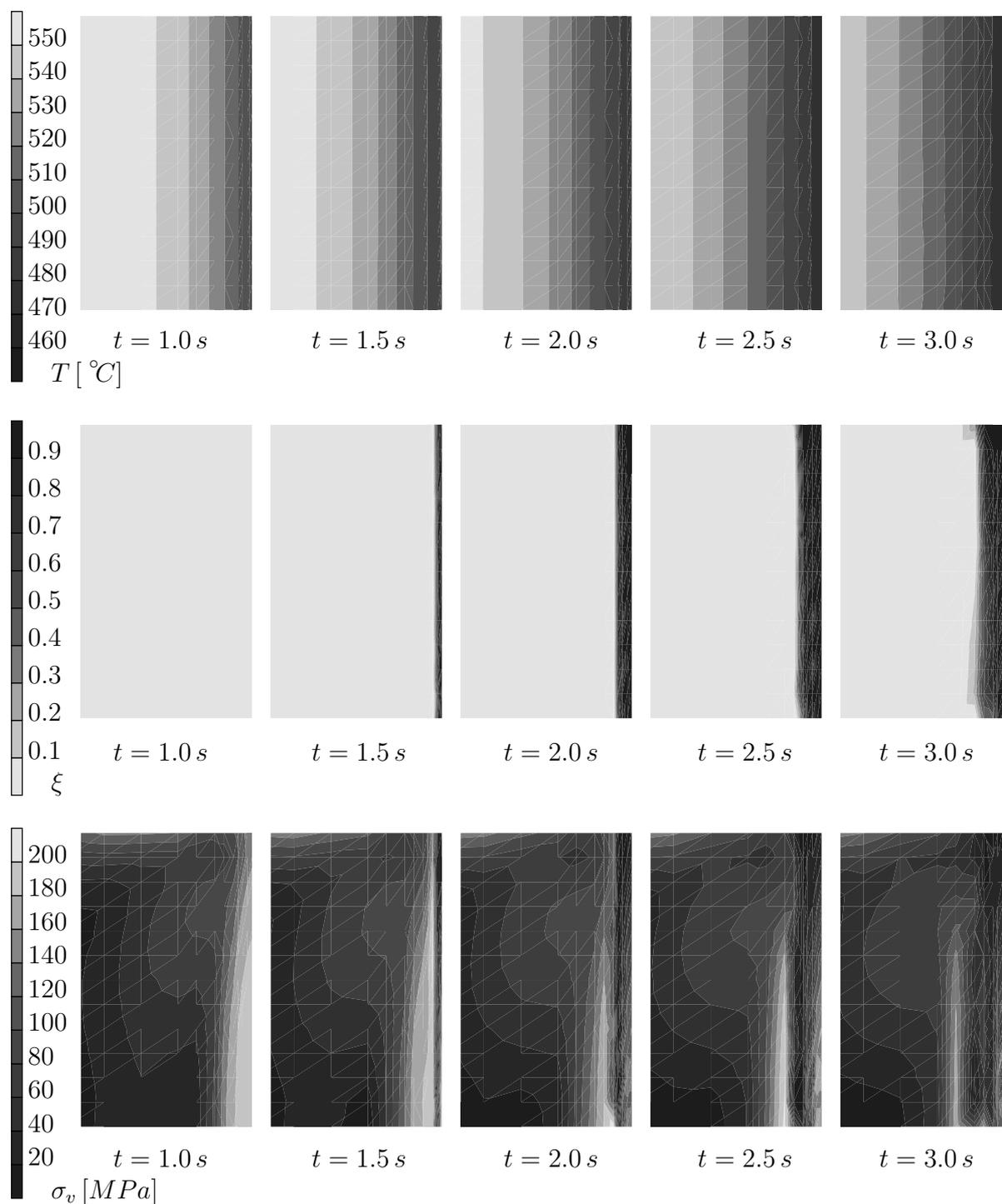


Abb. 5.4: Temperatur T , Massenanteil des Martensits ξ und VON MISES-Vergleichsspannung für verschiedene Zeitpunkte. Dargestellt ist jeweils nur das rechte Drittel des Zylinders.

5.2 Oberflächenhärtung eines Zylinders

In diesem Abschnitt wird das Abschrecken eines Zylinders in Öl simuliert. Anhand diesen Beispiels soll die Ausrichtung des Tensors ξ nach dem während der Umwandlung herrschenden Spannungszustand demonstriert werden.

Bei diesem Vorgang wird der Zylinder, im Vorfeld des Versuchs hinreichend lang auf der Austenitisierungstemperatur gehalten und somit aus einer homogenen Austenitphase bestehend, in kaltes Öl eingetaucht.

Der Eintauchvorgang mit der fortschreitenden Benetzung mit Öl wird nicht modelliert. Die Berechnung geht von einem gleichzeitigen Einsetzen der Kühlung auf der gesamten Oberfläche aus. Aufgrund der Symmetrie wurde nur ein Viertel des Zylinders modelliert und entsprechende thermische und mechanische Randbedingungen an den Symmetrieachsen vorgesehen (s. Abb.5.5). Die thermischen Anfangsbedingungen und Bedingungen bzgl. des Abkühlmediums wurden wie im vorangegangenen Versuch beschrieben gewählt.

In der Abb.5.6 sind die Eigenrichtungen und die Spur des Tensors ξ , der Massenanteil des Martensits, für den Zeitpunkt $t = 1s$ dargestellt. Es wurde nur ein Ausschnitt des Zylinders dargestellt; nur der Bereich an der rechten oberen Ecke, in der die Transformation bereits stattgefunden hat ist dargestellt. Es zeigt sich, daß die Eigenrichtungen von ξ sich nach den Eigenrichtungen der während der Umwandlung herrschenden Spannung ausrichten (vergl Abb.5.7). Diese bleibt auch während des Abfallens der Spannung im Verlauf der Umwandlung erhalten. Daß die Eigenrichtungen des Tensors ξ mit dem Verlauf der Transformationsfront übereinstimmen ist zufällig.

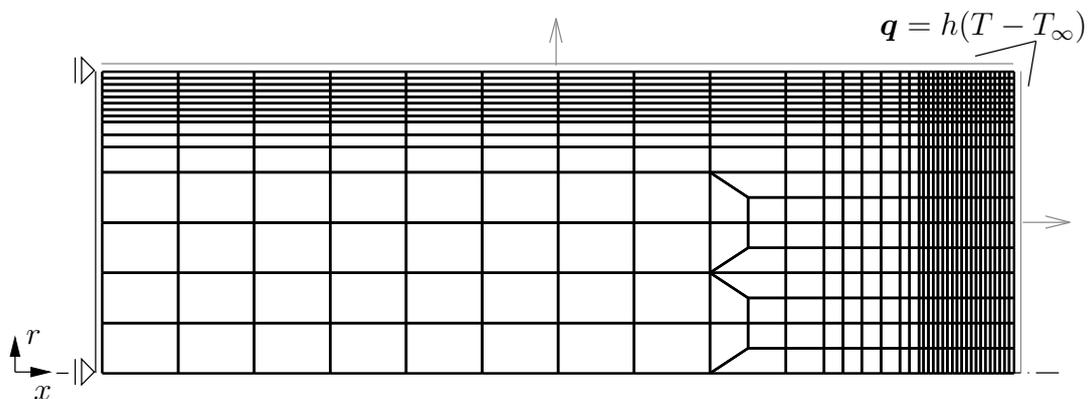


Abb. 5.5: Zur Simulation des Versuchs verwendetes FEM-Netz. Die mechanischen Randbedingungen sind wie im Versuch des Abschnittes 5.1 gewählt.

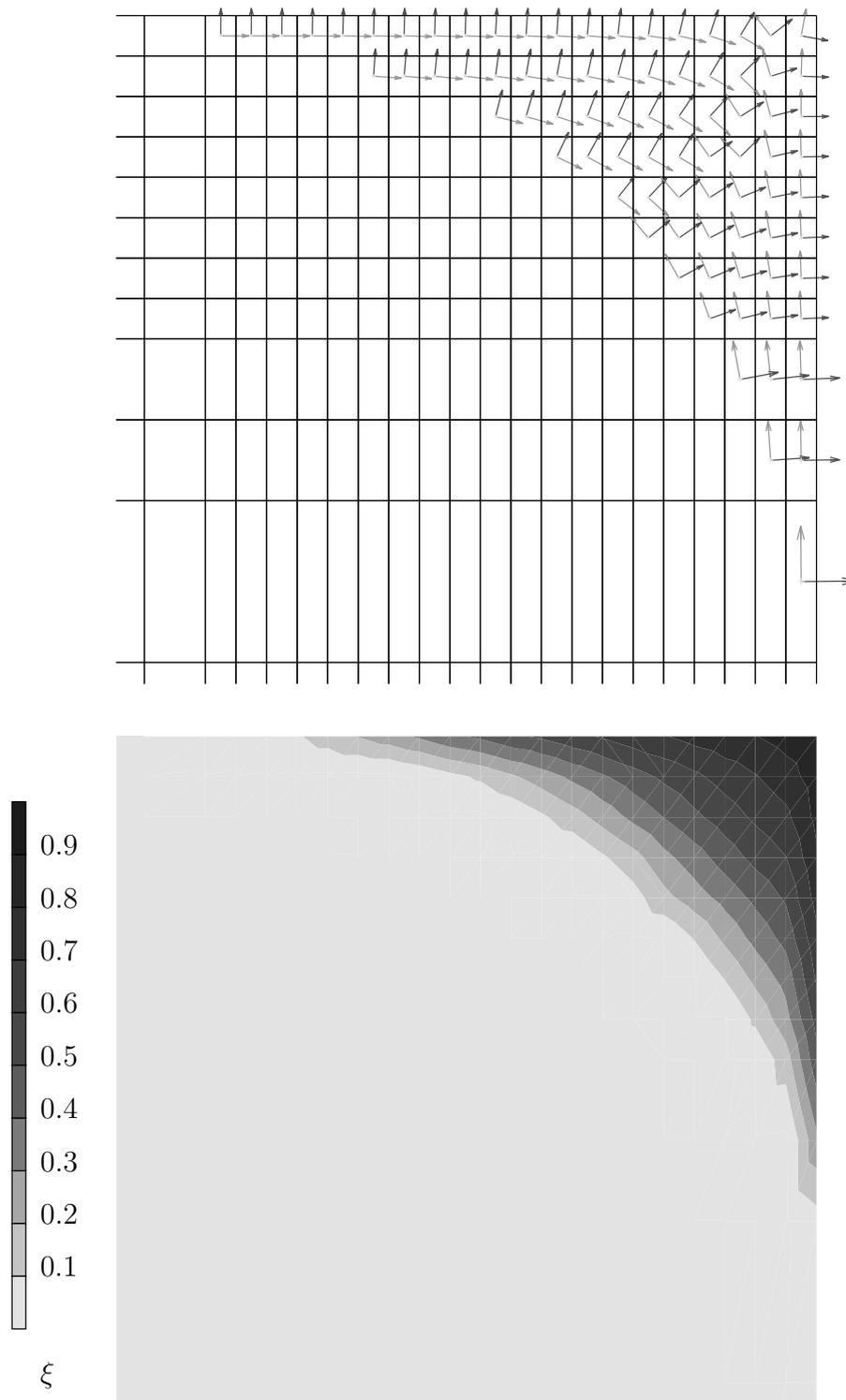


Abb. 5.6: oben: Orientierung des Eigenraums des Tensors ξ . Die Größe der Pfeile sind an die Elementgrößen angepaßt.
unten: Spur des Tensors ξ .
Der Zeitpunkt ist $t = 1.0 s$

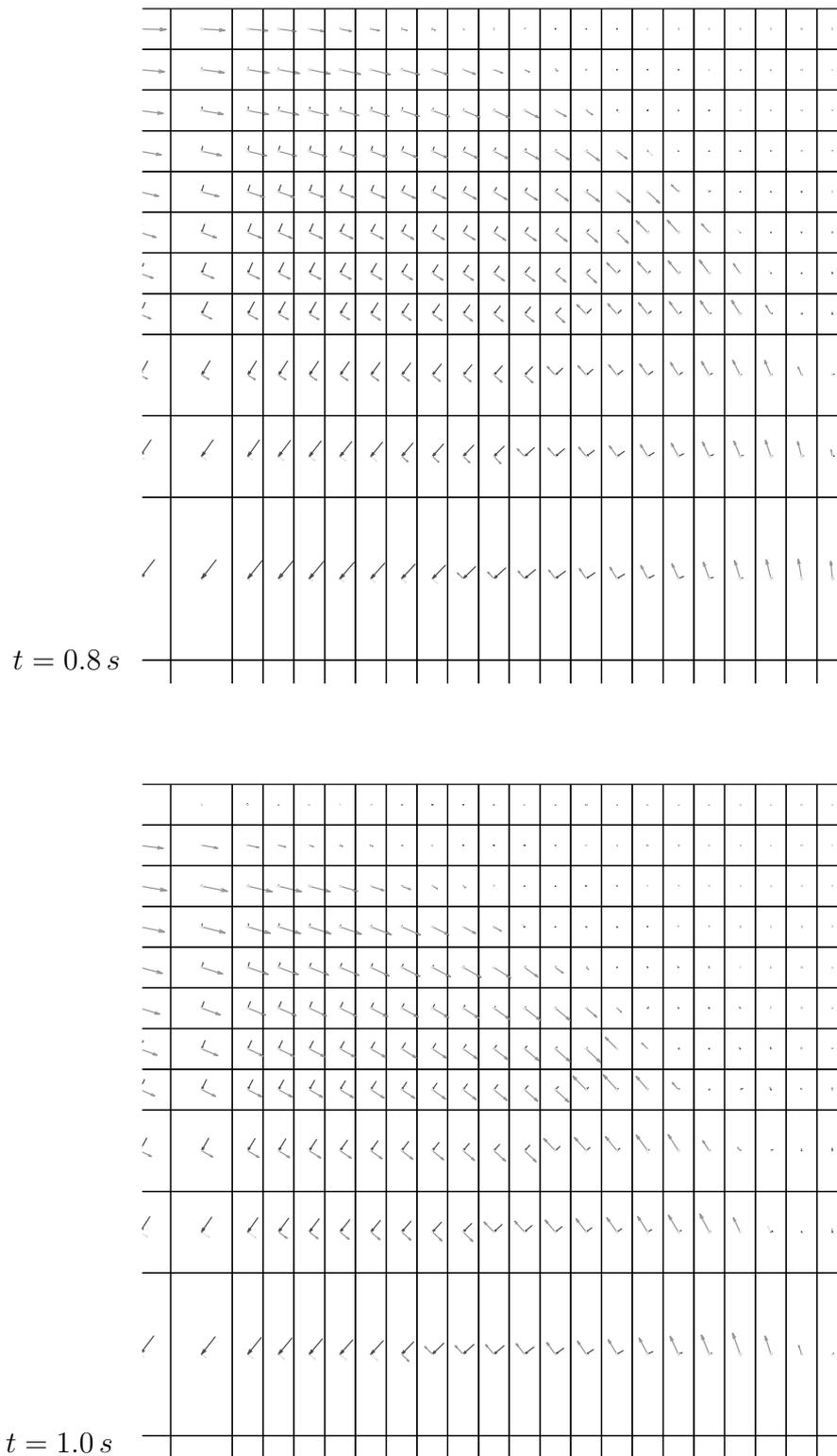


Abb. 5.7: Eigenrichtungen des Spannungstensors für $t = 0.8 \text{ s}$ und $t = 1.0 \text{ s}$. Die Größe der Pfeile entsprechen dem Wert des zugehörigen Eigenwertes.

6. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde, ausgehend von mikromechanischen Überlegungen, eine Erweiterung der Beschreibung der Transformationskinetik auf tensorielle Größen entwickelt. Basierend auf der Identifikation des Tensors des chemischen Potentials (oder ESHELBY-Tensors) als thermodynamisch treibende Kraft des Phasenübergangs wurde die dazu thermodynamisch konjugierte Größe zur Beschreibung der Transformationskinetik eingeführt. Diese ist, dem LEGENDRESchen Algorithmus folgend, ebenfalls eine tensorielle Größe. Die Größe beinhaltet nicht nur Informationen über die Massenanteile der Phasen sondern auch über die Orientierung der Phasengrenzen. Es wurden physikalische Interpretationen der neu eingeführten Größen aufgeführt sowie eine Einordnung klassischer skalarer Beschreibungen in das neue Konzept vorgenommen. Mögliche Beschränkungen und Probleme bei Anwendung des Konzeptes wurden diskutiert.

Darauf aufbauend wurde im zweiten Teil der Arbeit ein thermodynamisch konsistentes Stoffgesetz zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation entwickelt und in eine gekoppelt thermomechanische FE-Formulierung implementiert. Besonderes Augenmerk lag auf der Berücksichtigung der Unterschiede des elasto-plastischen Verhaltens der Phasen. Daher wurde das Materialverhalten der Phasen getrennt modelliert und über eine Mittelungsstrategie auf die makroskopischen Größen übertragen. Ein Konzept zur Entwicklung eines Stoffgesetzes auf Basis der tensoriellen Beschreibung der Transformationskinetik wurde entwickelt und angewandt. Die Möglichkeit zur Berechnung kompletter Strukturen wurde an zwei Beispielen demonstriert.

Das vorliegende Modell bietet aufgrund der eindeutigen Identifikation der thermodynamisch treibenden Kraft der Phasentransformation und einer thermodynamisch geschlossenen Beschreibung des Vorgangs die Möglichkeit, komplexe Abhängigkeiten des Transformationsverhaltens sowohl von der Temperatur als auch von der Größe und Richtung der Spannung abzubilden. Zu einer Anpassung und damit einer definitiven Aussage zu der Qualität des Modells fehlt zur Zeit die konsistente experimentelle Datenbasis. Es konnte daher nur eine qualitative Anpassung des Stoffgesetzes vorgenommen werden.

Die mit dem Modell ermittelten Ergebnisse zeigen, daß eine starke Abhängigkeit des Transformationsverhaltens von dem elasto-plastischen Verhalten der Matrixphase besteht. Dies steht im Einklang mit experimentellen Untersuchungen. So konnte die starke Variation der Martensit-Start-Temperatur bei einer Spannung nahe der Fließspannung des Austenits verifiziert werden. Weiterhin konnte mit Hilfe der neu eingeführten tensoriellen Beschreibung die spannungsabhängige Orientierung der Martensiteinschlüsse bei Plastifizierung der Matrixphase qualitativ modelliert werden. Aussagen über das mechanische Verhalten während und insbesondere nach nicht vollständig durchgeführter Transformation konnten nicht gemacht werden, da ein großer Einfluß der eingeführten Parameter auf

das mechanische Verhalten zu beobachten war und daher zunächst eine Anpassung dieser Parameter an experimentelle Daten vorgenommen werden muß.

Mit der momentanen Implementation muß das FE-Modell sehr sorgfältig gewählt werden. Wegen des starken Spannungsabfalls im Verlauf der Phasentransformation kommt es bei einer zu groben Diskretisierung zu großen Spannungsgradienten im Element. Es ist zu hoffen, daß eine Lösung mit adaptiven Netzalgorithmen Abhilfe schaffen kann. Das verwendete FEM-System MARC/Mentat stellt diese Möglichkeit zur Verfügung.

Aufgrund des gekoppelt thermo-mechanischen Charakters des Problems ist es nahezu unmöglich, im Versuch einen homogenen Zustand im untersuchten Probengebiet zu erreichen. Mit der entwickelten FE-Implementierung steht ein zur Anpassung der Modellparameter an experimentelle Untersuchungen notwendiger Baustein zur Verfügung. Diese kann, eingebettet in eine geeignete Optimierungstrategie, die Möglichkeit der Modellierung des komplexen thermo-mechanischen Vorgangs geben und somit Basis einer Aussage zur Qualität der Modellparameter bieten.

Ein Versuchsprogramm zur Anpassung der Modellparameter besteht aus drei Phasen. Zunächst sollten wegen der hohen Abhängigkeit der Transformationskinetik von dem Verhalten der Einzelphasen detaillierte Informationen über das elasto-plastische Verhalten der Einzelphasen bei möglichst vielen verschiedenen Temperaturen gesammelt werden. Mit diesen Kenntnissen können dann Abkühlversuche bei verschiedenen Spannungsniveaus und Orientierungen durchgeführt werden. Weiterhin können Untersuchungen zum Verhalten des Werkstoffs bei abgebrochener Transformation im Hinblick auf mögliches anisotropes Verhalten aufgrund der Orientierung der Einschlüsse zur einer weiteren Verbreiterung der Informationsgrundlage zur Anpassung der Materialparameter dienen.

A. Aufbereitung des Stoffgesetzes zur Verwendung in dem FEM-System MARC/Mentat

A.1 Allgemeines

An dieser Stelle soll kurz auf die Implementation des verwendeten Stoffgesetzes in das finite Elemente Programm MARC eingegangen werden. Allgemeine Ausführungen zur Methode der finiten Elemente und den bei der Implementation zu berücksichtigenden Bedingungen finden sich in zahlreichen Arbeiten ([Pit88],[Rot91],[K94], [Wes95],[Mit95],[And97]) und sollen daher hier nicht wiederholt werden.

Das in Kapitel 4 präsentierte Stoffgesetz ist ein gekoppeltes thermomechanisches Problem. Zur Lösung einer Problemstellung dieser Art stehen momentan zwei Möglichkeiten im Rahmen der Methode der finiten Elemente zur Verfügung: einerseits die Programmierung eines Elementes mit dem zusätzlichen Freiheitsgrad der Temperatur (s. z.B. [Mie88],[Ree98]), andererseits die durch die Entkoppelung des Gesamtproblems in das thermische und das mechanische Problem erreichte Beschreibung durch die beiden Teilprobleme. Dieser Weg wurde in MARC verfolgt. Die Koppelung der beiden Probleme wird durch die Temperaturabhängigkeit aller Parameter und der Berücksichtigung der im mechanischen Problem freiwerdenden Wärme im thermischen Problem erreicht.

Das finite Elemente Programm MARC bietet verschiedene Möglichkeiten der Implementation eines allgemein nichtlinearen Stoffgesetzes. Hier wurde die Routine UVSCPL verwendet. Die in dieser Routine verwendeten Größen beziehen sich auf die GAUSSpunkte des verwendeten Elementes wodurch eine weitgehende Trennung von Stoffgesetz und Elementformulierung möglich ist. Es wird bei Aufruf der Unterroutine durch das Hauptprogramm ein Dehnungsinkrement vorgegeben, in der Routine müssen die diesem Dehnungsinkrement entsprechende Spannungsinkrement, inelastische Dehnungsinkrement und die inelastische Dehnungsrate zum Ende des Inkrements berechnet werden. Weiterhin können interne Variablen zur Beschreibung des Materialverhaltens definiert werden. Deren Inkremente müssen ebenfalls berechnet werden. Die Steifigkeitsmatrix, der thermische Anteil der Dehnung und sämtliche, vom Hauptprogramm aus den in der Unterroutine berechneten Inkrementen, integrierten Größen stehen zur Verfügung. In der Unterroutine wurde zur Berechnung des Inkrements ein implizites Integrationsverfahren zur Integration des in Raten formulierten Stoffgesetzes verwendet [Gam99].

Zur Berücksichtigung großer Formänderungen stehen verschiedene Algorithmen zur Verfügung. Im Rahmen der hier durchgeführten Berechnungen wurden die Option der Berechnung in der *Total Lagrange*-Formulierung gewählt. Der oben erwähnte Dehnungstensor ist da-

her der GREEN-Verzerrungstensor \mathbf{E} , die Spannung die zweite PIOLA-KIRCHHOFF Spannung. Die Formulierung des Meso-Stoffgesetzes soll im folgenden Kapitel durch Transformation der einzelnen Größen von der aktuellen in die Referenzkonfiguration übertragen werden ([Bat90]). Die für die Beschreibung in der aktuellen Konfiguration angepaßten Materialparameter haben nur noch bedingt Bedeutung. Da aber in diesem Rahmen noch keine konkrete Anpassung an experimentelle Ergebnisse vorgenommen wurde soll dieser Aspekt vernachlässigt werden. Die Beschreibung des Meso-Stoffgesetzes wurde in der EULERSchen Betrachtung dargestellt. Alle dort verwendeten tensoriellen Größen werden durch entsprechende PULL-BACK Operationen in die Referenzkonfiguration transformiert. Die resultierende Implementation ist bei der Aufstellung des Differentialgleichungssystems zusammengefasst.

A.2 Programmierung der MAXWELL-CATTANEO Wärmeleitungsgleichung

Das FEM-System MARC bietet zur Berechnung von Wärmeleitungsproblemen nur die Verwendung des FOURIERSchen Wärmeleitungsgesetz an. Die Implementation der MAXWELL-CATTANEO-Wärmeleitungsgleichung muß über die Möglichkeit der Definition einer latenten Wärme erreicht werden.

Es soll das Wärmeleitungsproblem

$$c_p \dot{T} = -\frac{1}{\rho} \nabla_X \cdot \mathbf{Q} + \dot{h}_m \quad (\text{A.1})$$

berechnet werden, wobei \dot{h}_m die Koppelung zwischen dem mechanischen Problem und dem thermischen Problem darstellt und sowohl Anteile aus der plastischen Verformung des Materials als auch aus der Phasentransformation enthalten kann. Als konstitutives Gesetz wird die MAXWELL-CATTANEO-Wärmeleitungsgleichung

$$\tau_q \dot{\mathbf{Q}} + \mathbf{Q} = -\lambda \nabla_X T \quad (\text{A.2})$$

mit den Parametern τ_q und λ verwendet. Setzt man (A.2) in (A.1) ein, gelangt man zu

$$\rho c_p \dot{T} = \lambda \nabla_X^2 T + \nabla_X \cdot (\tau_q \dot{\mathbf{Q}}) + \rho \dot{h}_m \quad (\text{A.3})$$

Nimmt man den Parameter τ_q als konstant an und vertauscht die Reihenfolge der Differentiation, kann unter nochmaliger Verwendung der Gleichung (A.1) das Wärmeleitungsproblem unter Vernachlässigung der Änderung der Dichte ρ in die Form

$$\rho c_p \dot{T} = \lambda \nabla_X^2 T + \rho \tau_q \left(\frac{\partial}{\partial t} \dot{h}_m - \frac{\partial}{\partial t} (c_p \dot{T}) \right) + \rho \dot{h}_m \quad (\text{A.4})$$

gebracht werden. Vergleicht man dies mit der von MARC([Pee91]) zur Verfügung gestellten Form des Wärmeleitungsproblems

$$\rho c_p \dot{T} = \lambda \nabla_X^2 T + Q \quad , \quad (\text{A.5})$$

kann die latente Wärme Q des Wärmeleitungsproblems in MARC als

$$Q = \rho \dot{h}_m + \rho \tau_q \left(\frac{\partial}{\partial t} \dot{h}_m - \frac{\partial}{\partial t} (c_p \dot{T}) \right) \quad (\text{A.6})$$

identifiziert werden.

Ist der Parameter c_p durch eine Funktion $c_p = c_p(T)$ beschreibbar, kann Q durch

$$Q = \rho \dot{h}_m + \rho \tau_q \left(\frac{\partial}{\partial t} \dot{h}_m - \frac{\partial c_p}{\partial T} \dot{T}^2 - c_p \ddot{T} \right) \quad (\text{A.7})$$

beschrieben werden. Die zur Berechnung des Ausdrucks (A.7) notwendigen Zeitableitung werden durch eine numerische Differentiation über die Zeitschritte approximiert.

B. Zusammenstellung des Differentialgleichungssystems und der Parameter zur Berechnung der Strukturen im Kapitel 5

B.1 Differentialgleichungssystem

Das hier aufgeführten Differentialgleichungssystem stellt das in MARC programmierte dar. Möglichkeiten wie z.B. die Temperaturabhängigkeit der elastischen Parameter werden im Hauptprogramm berücksichtigt und müssen an dieser Stelle daher nicht programmiert werden. Von der in das Hauptprogramm eingebundene Unterroutine wird verlangt, daß bei vorgegebenen Dehnungsinkrement das Spannungsinkrement, inelastische Dehnungsinkrement und die inelastische Dehnungsrate am Ende des Inkrements berechnet werden. Eine Beschreibung der Programmschnittstelle mit einer Auflistung der vom Hauptprogramm zur Verfügung gestellten Größen findet sich in [Mar94], eine ausführliche Dokumentation des Programms ist vorhanden [OB99].

- Mittelung

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{E}} &= \dot{\mathbf{E}}^{PT} + \dot{\mathbf{E}}^{MESO} \\ \dot{\mathbf{S}}_K &= \xi \dot{\mathbf{S}}_K^M + (1 - \xi) \dot{\mathbf{S}}_K^A + \dot{\xi} (\mathbf{S}_K^M - \mathbf{S}_K^A) \\ \xi &= \text{tr}(\boldsymbol{\xi})\end{aligned}$$

- Transformation

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{E}}^{PT} &= 3 K^* \frac{\mathbf{S}'_K^A + \mathbf{S}'_K^M}{2} (1 - \xi) \dot{\xi} \\ \dot{\boldsymbol{\xi}} &= \boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu}) \left\langle \frac{\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu}) : \dot{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu} \cdot (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu}) : (\boldsymbol{\mu}^{-1} \cdot \dot{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{\gamma}^\xi) \text{tr}(\boldsymbol{\xi})}{\frac{1}{2} \frac{\partial g^\xi}{\partial \kappa^\xi} (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu}) : \boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu})} \right\rangle^\xi \\ \dot{\boldsymbol{\gamma}}^\xi &= -\boldsymbol{\mu}^{-1} \cdot \dot{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{\gamma}^\xi \text{tr}(\boldsymbol{\xi}) \\ \dot{\kappa}^\xi &= (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu}) : \dot{\boldsymbol{\xi}} \\ \langle x \rangle^\xi &= \begin{cases} x & \text{wenn } LC^\xi \geq 0 \text{ und } F^\xi = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\ LC^\xi &= \frac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{\mu}} : \dot{\boldsymbol{\mu}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F^\xi &= (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu}) : (\boldsymbol{\gamma}^\xi \cdot \boldsymbol{\mu}) - g^\xi(\kappa^\xi) \\
 g^\xi &= g_0^\xi + \frac{c_1^\xi}{c_2^\xi} \left((1 - c_3^\xi) (1 - \exp(-c_2^\xi \kappa^\xi)) \right) + c_2^\xi c_3^\xi \kappa^\xi \\
 \boldsymbol{\mu} &= \mathbf{1}\varphi - \frac{1}{\rho} \mathbf{C} \cdot (\mathbf{S}_K^A - \mathbf{S}_K^M) \\
 \mathbf{C} &= 2\mathbf{E} + \mathbf{1} \\
 \varphi &= \varphi^{chem} + \frac{1}{2} (\mathbf{E}_r^A : \mathbf{S}_K^A - \mathbf{E}_r^M : \mathbf{S}_K^M) \\
 \varphi^{chem} &= (c_1^\varphi + c_2^\varphi(T - T_0))(T - T_0) \\
 h_m &= \Delta Q \dot{\xi}
 \end{aligned}$$

· Meso-Ebene Austenit, $\alpha \in \{A, M\}$

$$\begin{aligned}
 \dot{\mathbf{E}}^\alpha = \dot{\mathbf{E}}^{MESO} &= \dot{\mathbf{E}}_r^\alpha + \dot{\mathbf{E}}_i^\alpha \\
 \dot{\mathbf{S}}_K^\alpha &= \mathbf{M}^\alpha : \dot{\mathbf{E}}_e^\alpha \\
 \dot{\mathbf{E}}_e &= \dot{\mathbf{E}} - \dot{\mathbf{E}}_i - \dot{\mathbf{E}}_{th} \\
 \dot{\mathbf{E}}_r &= \dot{\mathbf{E}}_e + \dot{\mathbf{E}}_{th} \\
 \dot{\mathbf{E}}_{th} &= \alpha \mathbf{1}\dot{T} \\
 \dot{\mathbf{E}}_i^\alpha &= \langle \Phi_p^\alpha \rangle_p^\alpha \mathbf{n}_p^\alpha \\
 \mathbf{n}_p^\alpha &= \frac{\partial F^\alpha}{\partial \mathbf{S}_K^\alpha} \left(\left| \frac{\partial F^\alpha}{\partial \mathbf{S}_K^\alpha} \right| \right)^{-1} \\
 F^\alpha &= f^\alpha - g^\alpha(\kappa^\alpha, T) \\
 f^\alpha &= (\mathbf{S}'_K{}^\alpha - \boldsymbol{\zeta}^{R,\alpha}) : (\mathbf{S}'_K{}^\alpha - \boldsymbol{\zeta}^{R,\alpha}) \\
 \Lambda^\alpha &= \sqrt{f^\alpha} - \sqrt{g^\alpha} \\
 \langle x \rangle_p^\alpha &= \begin{cases} x & \text{wenn } \Lambda^\alpha \geq 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\
 \Phi_p^\alpha &= 2\gamma^\alpha \frac{\Lambda^\alpha}{E^\alpha} \left(1 + \frac{\Lambda^\alpha}{c_4^\alpha} \right)^{c_5^\alpha} \\
 g^\alpha(\kappa^\alpha) &= g_0^\alpha + (g_\infty^\alpha - g_0^\alpha)(1 - e^{-c_1^\alpha \kappa^\alpha}) \\
 \dot{\kappa}^\alpha &= (\boldsymbol{\sigma}'^\alpha - \boldsymbol{\zeta}^{R,\alpha}) \dot{\mathbf{E}}_i^\alpha \\
 \boldsymbol{\zeta}^{\dot{R},\alpha} &= c^\alpha \dot{\mathbf{E}}_i^\alpha \\
 c &= \frac{2}{3} \frac{E E_t}{E - E_t} - \frac{1}{2} (g_\infty - g_0) c_1 e^{-c_1 \kappa} \\
 E_t &= \frac{k_1 \varepsilon^2 + 2k_1 k_4 \varepsilon + k_2 k_4 - k_3}{(\varepsilon + k_4)^2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon &= H + \sqrt{H^2 + \left(\left(k_4 \frac{\Delta}{\sigma_0} + \frac{k_3}{E} \right) \left(1 - \frac{k_1}{E} \right)^{-1} \right)} \\ H &= \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_0}{E} + \left(\frac{\Delta}{\sigma_0} - \frac{k_3}{\sigma_0} \right) \left(1 - \frac{k_1}{E} \right)^{-1} \right) \\ k_1 &= E \Psi_\infty \\ k_2 &= \sigma_0 \frac{c_\sigma \Psi_0 + \Psi_\infty (2\Psi_\infty - \Psi_0 - 1)}{\Psi_0 - \Psi_\infty} \\ k_3 &= \frac{\sigma_0^2}{E} \frac{c_\sigma (1 - \Psi_0) - (1 - \Psi_\infty)^2}{\Psi_0 - \Psi_\infty} \\ k_4 &= \frac{\sigma_0}{E} \frac{c_\sigma - \Psi_0 + 2\Psi_\infty - 1}{\Psi_0 - \Psi_\infty} \end{aligned}$$

- Beschreibung der Wärmeleitung (siehe auch A.2)

$$\tau_q \dot{\mathbf{Q}} + \mathbf{Q} = -\lambda_q \nabla_X T$$

B.2 Parameter

allgemeine Parameter	
M_{Fe}	$= 55.84 \text{ g/mol}$
$\Delta H_{\alpha\gamma}$	$= 1.468 \cdot 10^4 \text{ J/kg}$
ΔQ	$= 0.1175 \text{ J/mm}^3$
ρ	$= 8.93 \cdot 10^{-6} \text{ kg/mm}^3$
c_1^φ	$= -1083.4 \text{ J/(kgK)}$
c_2^φ	$= 1.67122 \text{ J/(kgK}^2)$
T_0	$= 1062 \text{ }^\circ\text{C}$
Parameter des thermischen Problems	
λ^q	$= 0.034 \text{ W/(mmK)}$
τ_q	$= 2.53 \cdot 10^{-8} \text{ s}$
c_p	aus Tabelle nach [BP82]
h	$= \begin{cases} 0.002 (0.25 + T/(400 \text{ }^\circ\text{C})) \text{ W/(mm}^2\text{K)} & \text{für } 0 \text{ }^\circ\text{C} \leq T \leq 300 \text{ }^\circ\text{C} \\ 0.002 (1.375 - T/(800 \text{ }^\circ\text{C})) \text{ W/(mm}^2\text{K)} & \text{für } 300 \text{ }^\circ\text{C} \leq T \leq 900 \text{ }^\circ\text{C} \end{cases}$
elastische Materialparameter	
$E^A(T)$	$= (2.06 \cdot 10^{-5} - 67.494 T / \text{ }^\circ\text{C}) \text{ MPa}$
$E^M(T)$	$= (2.266 \cdot 10^{-5} - 74.243 T / \text{ }^\circ\text{C}) \text{ MPa}$
$\nu^M = \nu^A$	$= 0.3$
$\alpha^M = \alpha^A$	$= 2.0 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$
viskoplastische Materialparameter	
$\sigma_0^A(T)$	$= (336 - 0.55009 T / \text{ }^\circ\text{C} + 2.3068 \cdot 10^{-4} (T / \text{ }^\circ\text{C})^2) \text{ N/mm}^2$
$\sigma_0^M(T)$	$= (1577 + 0.98885 T / \text{ }^\circ\text{C} - 5.7835 \cdot 10^{-3} (T / \text{ }^\circ\text{C})^2) \text{ N/mm}^2$
$c_1^M = c_1^A$	$= 1.99 \cdot 10^{-2} \text{ MPa}^{-1}$
$c_2^M = c_2^A$	$= 3.06$
$\Psi_0^M = \Psi_0^A$	$= 8.08729 \cdot 10^{-1}$
$\Psi_\infty^M = \Psi_\infty^A$	$= 1.60984 \cdot 10^{-2}$
$c_\sigma^M = c_\sigma^A$	$= 1.2482$
$c_4^M = c_4^A$	$= 0.01 \text{ MPa}$
$c_5^M = c_5^A$	$= 8.7$
$\gamma^M = \gamma^A$	$= 8 \cdot 10^{-29} \text{ s}^{-1}$
Parameter des Transformationsprozesses (sofern nicht anders angegeben)	
g_0^ξ	$= 1.45 \cdot 10^{15} \text{ (J/kg)}^2$
c_1^ξ	$= 4.0 \cdot 10^8 \text{ J/kg}$
c_2^ξ	$= 1.0 \cdot 10^{-7} \text{ (J/kg)}^{-1}$
c_3^ξ	$= 0.1$
K^*	$= 5.2 \cdot 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$

Literaturverzeichnis

- [AA94] J. Altenbach und H. Altenbach. *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1994.
- [Aav95] I. Aavatsmark. *Mathematische Einführung in die Thermodynamik der Gemische*. Akademie Verlag, 1995.
- [AK90] R. Abeyaratne und J.K. Knowles. On the driving Traction acting on a Surface of Strain Discontinuity in a Continuum. *J. Mech. Phys. Solids*, 38(3):345–360, 1990.
- [And97] Dirk Klaus Anding. *Zur simultanen Bestimmung materialabhängiger Koeffizienten inelastischer Stoffgesetze*. Nummer 109 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 1997.
- [Bae66] H.D. Baehr. *Thermodynamik*. Springer-Verlag, 1966.
- [Bat90] K.-J. Bathe. *Finite-Elemente-Methoden*. Springer-Verlag, 1990.
- [BB75] E. Becker und W. Bürger. *Kontinuumsmechanik*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1975.
- [BB92] Burkhard Bischoff-Beiermann. *Zur selbstkonsistenten Berechnung von Eigenspannungen in polykristallinem Eis unter Berücksichtigung der Monokristallanisotropie*. Nummer 82 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 7 1992.
- [BCA99] M. Berveiller, M. Cherkaoui, und I. Aubert. Micromechanics of Moving Inelastic Discontinuities and Applications. In O.T. Bruhns und E. Stein, Herausgeber, *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermo-plasticity*, Seiten 115–126. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [Ber93] H. Berns. *Stahlkunde für Ingenieure*. Springer-Verlag, 1993.
- [Bes93] G. Besserdich. *Untersuchungen zur Eigenspannungs- und Verzugsausbildung beim Abschrecken von Zylindern aus den Stählen 42 CrMo 4 und CK 45 unter Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität*. Dissertation, Universität Karlsruhe, 1993.
- [Bet82] J. Betten. Net-Stress Analysis in Creep Mechanics. *Ingenieur-Archiv*, 52:405–419, 1982.
- [Bet85] J. Betten. *Elastizitäts- und Plastizitätslehre*. Vieweg, 1985.

- [Bet93] J. Betten. *Kontinuumsmechanik*. Springer-Verlag, 1993.
- [BIOV95] P.G.J. Bussink, P.L. Iske, J. Oortwijn, und G.L.M.M. Verbist. Self-consistent Analysis of elastic Wave Propagation in two-dimensional Matrix-Inclusion Composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 43(10):1673–1690, 1995.
- [Bow67] R.M. Bowen. Toward a Thermodynamics and Mechanics of Mixtures. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 24:370–403, 1967.
- [Bow76] R.M. Bowen. Theory of Mixtures. In C. Eringen, Herausgeber, *Mixtures and EM Field Theories*, Band III von *Continuum Physics*, Seiten 1–127. Academic Press, New York, San Francisco, London, 1976.
- [BP82] W. Bendick und W. Pepperhoff. On the α/γ Phase Stability of Iron. *Acta metall.*, 30:679–684, 1982.
- [BP87] O.T. Bruhns und M. Pitzer. Constitutive Modelling in the Range of Inelastic Deformations. *Constitutive Modelling in the Range of Inelastic Deformations - Uniaxial Evaluations (Ed. by P. White)*, 1987.
- [BR94] O.T. Bruhns und U. Rott. A viscoplastic model with a smooth transition to describe rate-independent plasticity. *Int. J. Plasticity*, 10:347–362, 1994.
- [Bru84] O.T. Bruhns. Constitutive modelling in the range of inelastic deformations - a state of the arts report. In O.T. Bruhns, Herausgeber, *INTERATOM*, Seiten 33 – 63, 1984.
- [Bru93] O.T. Bruhns. Neue Materialgleichungen der Plastomechanik. *ZAMM*, 73(4-5):T 6 – T 19, 1993.
- [BZ79] M. Berveiller und A. Zaoui. An Extension of the Self-Consistent Scheme to Plastically-Flowing Polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 26:325–344, 1979.
- [Cal70] H.B. Callen. *Thermodynamics*. John Wiley & Sons, Inc., 7 edition, 1970.
- [Cha75] P. Chadwick. Applications of an energy-momentum tensor in non-linear elastostatics. *Journal of Elasticity*, 5:249–258, 1975.
- [Cha76] P. Chadwick. *Continuum Mechanics*. George Allen & Unwin Ltd., London, 1976.
- [DGS89] S. Denis, E. Gautier, und A. Simon. Modelling of the mechanical behaviour of steels during phase transformations: a review. In G. Beck, Herausgeber, *Int. Conf. Residual Stresses, ICRS2*, Seiten 393–398. Elsevier Applied Science, London, 1989.

- [Die89] Herbert Diehl. *Ein Materialmodell zur Berechnung von Hochgeschwindigkeitsdeformationen metallischer Werkstoffe unter besonderer Berücksichtigung der Schädigung durch Scherbänder*. Nummer 66 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 6 1989.
- [DSB83] S. Denis, A. Simon, und G. Beck. Analysis of the Thermomechanical Behavior of Steel during Martensitic Quenching and Calculation of Internal Stresses. In E. Macherauch und V. Hauk, Herausgeber, *Eigenstressungen, Entstehung - Messung - Bewertung*, Int. Eigenspannungstagung Karlsruhe 1983, DGM Vortragsband, Seiten 211–238, 1983.
- [DSB95] J.M. Diani, H. Sabar, und M. Berveiller. Micromechanical Modelling of the Transformation Induced Plasticity (TRIP) Phenomenon in Steels. *Int. J. Engng. Sci.*, 33(13):1921–1934, 1995.
- [Ec74] C. Eringen und E. Şuhubi. Elastodynamics. In *Finite Motions*, Band I. Academic Press, New York and London, 1974.
- [Esh57] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Roy. Soc.*, A241:376–396, 1957.
- [Esh61] J.D. Eshelby. Elastic inclusions and inhomogeneities. *Prog. Solid Mech.*, 2:87–140, 1961.
- [Esh70] J.D. Eshelby. The elastic energy-momentum tensor. *Journal of Elasticity*, 5:321–335, 1970.
- [FBTO94] F.D. Fischer, M. Berveiller, K. Tanaka, und E.R. Oberaigner. Continuum mechanical aspects of phase transformations in solids. *Archive of Applied Mechanics*, 64:54–85, 1994.
- [Fis92] F.D. Fischer. Transformation induced plasticity in triaxially loaded steel specimens subjected to a martensitic transformation. *European Journal of Mechanics and Solids*, 11(2):233–244, 1992.
- [Fis97] F.D. Fischer. Application to Heat Treatment and Surface Treatment. In M. Berveiller und F.D. Fischer, Herausgeber, *Mechanics of Solids with Phase Changes*, Band 368 von *CISM Courses and Lectures*, Seiten 277–292. Springer-Verlag, 1997.
- [Fra72] S. Franitza. Zur Berechnung der Wärme- und Umwandlungsspannungen in langen Kreiszyklindern. *Ph. D. Thesis*, 1972.
- [FST96] F.D. Fischer, Q.-P. Sun, und K. Tanaka. Transformation-induced plasticity (TRIP). *Appl. Mech. Rev.*, 49(6):317–364, 1996.

- [Gam99] *GAMS: Guide to Available Mathematical Software*. <http://www.gams.nist.gov/>, 1999.
- [Gau85] E. Gautier. *Transformation perlitique et martensitique sous contrainte dans les aciers*. Dissertation, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1985.
- [GJ65] G.W. Greenwood und R.H. Johnson. The deformation of metals under small stresses during phase transformations. *Proc. R. Soc. London*, A283:403–422, 1965.
- [GN65] A.E. Green und P.M. Naghdi. A general theory of an elastic-plastic continuum. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, (18):251–281, 1965.
- [GP97] E. Gautier und E. Patoor. Experimental Observations for Shape Memory Alloys and Transformation Induced Plasticity Phenomena. In M. Berveiller und F.D. Fischer, Herausgeber, *Mechanics of Solids with Phase Changes*, Band 368 von *CISM Courses and Lectures*, Seiten 69–103. Springer-Verlag, 1997.
- [Gri91] M. Grinfeld. *Thermodynamic methods in the theory of heterogenous systems*. Longman Scientific & Technical, 1991.
- [Gur95] M.E. Gurtin. The Nature of Configurational Forces. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 131:67–100, 1995.
- [Haa84] P. Haasen. *Physikalische Metallkunde*. Springer-Verlag, 1984.
- [Hil65] R. Hill. Continuum Micro-Mechanics of Elastic Polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13:89–101, 1965. (zitiert nach BISCHOFF–BEIERMANN [BB92]).
- [HJZ99] H.W. Haslach Jr. und N. Zeng. Maximum dissipation evolution equations for non-linear thermoviscoelasticity. *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 34:361–385, 1999.
- [HL85] W. Heidug und F.K. Lehner. Thermodynamics of coherent phase transformations in nonhydrostatically stressed solids. *Pure Appl. Geophys.*, 123:91–98, 1985.
- [HW91] E. Hornbogen und H. Warlimont. *Metallkunde*. Springer-Verlag, 1991.
- [ILS99] A.V. Idesman, V.I. Levitas, und E. Stein. Computational Methods for Elastoplastic Materials with Martensitic Phase Transition. In O.T. Bruhns und E. Stein, Herausgeber, *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity*, Seiten 373–382. Kluwer Academic Publishers, 1999.

- [Kö94] Jörg Körber. *Ein verallgemeinertes Finite-Element-Verfahren mit asymptotischer Stabilisierung angewendet auf viskoplastische Materialmodelle*. Nummer 88 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 4 1994.
- [Kac58] L.M. Kachanov. O wremeni rasmuschenija w usslowijach polsutschesti (in russisch). *Isw. AN SSSR. Otd. Techn. Nauk, Moskwa*, 8:26–31, 1958. (zitiert nach SCHIESSE [Sch94]).
- [Kac86] L.M. Kachanov. *Introduction to continuum damage mechanics*. Martinus Nijhoff Publishers, 1986.
- [KH97] R. Kienzler und G. Herrmann. On the properties of the Eshelby tensor. *Acta Mechanica*, 125:73–91, 1997.
- [Kle93] M. Klein. *Einführung in die DIN-Normen*. B. G. Teubner, Stuttgart, Beuth, Berlin und Köln, 1993.
- [KM59] D.P. Koistinen und R.E. Marburger. A general Equation prescribing the Extent of the Austenit–Martensit Transformation in pure Iron–Carbon Alloys and plain Carbon Steels. *Acta Metallurgica*, Seiten 59–60, 1959.
- [Kos75] W. Kosiński. Thermal waves in inelastic bodies. *Archives of Mechanics*, 27:733–748, 1975.
- [Kos86] W. Kosiński. *Field Singularities and Wave Analysis in Continuum Mechanics*. Ellis Horwood Limited, Chichester, U.K., 1986.
- [Kro58] E. Kroener. Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. *Zeitschrift für Physik*, 151:504–518, 1958. (zitiert nach BISCHOFF–BEIERMANN [BB92]).
- [LB89] P. Lipinski und M. Berveiller. Elastoplasticity of Micro-Inhomogeneous Metals at large Strains. *International Journal of Plasticity*, 5:149–172, 1989.
- [LDD89] J.B. Leblond, J. Devaux, und J.C. Devaux. Mathematical Modelling of Transformation Plasticity in Steels I: Case of Ideal-Plastic Phases. *International Journal of Plasticity*, 5:551–572, 1989.
- [Leh89] Th. Lehmann. On the balance of energy and entropy at inelastic deformations of solid bodies. *Eur. J. Mech. Solids*, 8(3):235–251, 1989.
- [Lem92] J. Lemaitre. *A Course on Damage Mechanics*. Springer-Verlag, 1992.
- [LIS98] V.I. Levitas, A.V. Idesman, und E. Stein. Finite Element Simulation of martensitic Phase Transitions in elastoplastic Materials. *International Journal of Solids and Structures*, 35(9-10):855–887, 1998.

- [LS97] V.I. Levitas und E. Stein. Simple micromechanical Model of thermoelastic martensitic Transformations. *Mechanics Research Communications*, 24(3):309–318, 1997.
- [LS99] V.I. Levitas und E. Stein. Phase Transitions in Dissipative Materials: Theory and Interpretation of Experiments. In O.T. Bruhns und E. Stein, Herausgeber, *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity*, Seiten 307–318. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [Lus96] M. Lusk. A Consideration of Curved Interfaces in Stress-Assisted Martensite Formation. *Journal of Elasticity*, 44:271–284, 1996.
- [Mac68] D.B. Macvean. Die Elementararbeit in einem Kontinuum und die Zuordnung von Spannungs- und Verzerrungstensoren. *ZAMP*, 19, 1968.
- [Mag66] C.L. Magee. *Transformation Kinetics, Microplasticity and Aging of Martensite in Fe-31Ni*. Dissertation, Carnegie Institute of Technology, 1966.
- [Mar91] *MARC Manual Volume F*. MARC Analysis Research Corporation, 1991.
- [Mar94] *MARC Manual Volume D, User Subroutines/ Special Routines*. MARC Analysis Research Corporation, 1994.
- [Mau93] G. Maugin. *Material Inhomogeneities in Elasticity*. Chapman & Hall, London, 1993.
- [MF95] F. Marketz und F.D. Fischer. A mesoscale study on the thermodynamic effect of stress on martensitic transformation. *Met. Trans.*, 26A:267–278, 1995.
- [MH83] J.E. Marsden und T.J.R. Hughes. *Mathematical Foundations of Elasticity*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.
- [Mie88] C. Miehe. *Zur numerischen Behandlung thermomechanischer Prozesse*. Dissertation, Universität Hannover, 1988.
- [Mit87] W. Mitter. *Umwandlungsplastizität und ihre Berücksichtigung bei der Berechnung von Eigenspannungen*. Berlin, Stuttgart: Gebrüder Bornträger, 1987.
- [Mit95] Marc Mittelbach. *Simulation des Deformations- und Schädigungsverhaltens beim Stoßversuch mit einem Kontinuums-Damage-Modell*. Nummer 100 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 1995.
- [MO81] S. Murakami und N. Ohno. A Continuum Theory of Creep and Creep Damage. In Ponter und Hayhurst, Herausgeber, *Creep in Structures*, Seiten 422–443. Springer-Verlag, 1981.
- [Mor72] B. Morill. *An Introduction to Equilibrium Thermodynamics*. Pergamon Press, Inc., 1972.

- [MR88] S. Murakami und H. Rong. Role of damage mechanics in local approach to fracture. In *Role of Plasticity And Damage In Fracture Of Solids*, Proceedings of the Far East Fracture Group Workshop, Tokyo Institute of Technology, International House, Seiten 145–160, 1988.
- [MT73] T. Mori und K. Tanaka. Average stress in matrix and average energy of materials with misfitting inclusions. *Act. Metall.*, 21:571–574, 1973.
- [MT95] G.A. Maugin und C. Trimarco. Dissipation of configurational forces in defective elastic solids. *Arch. Mech.*, 47(1):81–99, 1995.
- [Mur87] T. Mura. *Micromechanics of Defects in Solids*. Martinus Nijhoff Publ., 1987.
- [Ner97] Thomas Nerzak. *Modellierung und Simulation der Ausbreitung adiabatischer Scherbänder in metallischen Werkstoffen bei Hochgeschwindigkeitsinformationen*. Nummer 113 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 12 1997.
- [NW61] P.M. Naghdi und W.L. Wainwright. On the time derivatives of tensors in mechanics of continua. *Quart. Appl. Mech.*, (19):95–109, 1961.
- [OB99] C. Oberste-Brandenburg. *Dokumentierter Quellcode zur Implementation des Stoffgesetzes*. Interne Mitteilungen, 1999.
- [OFT93] E.R. Oberaigner, F.D. Fischer, und K. Tanaka. A new micromechanical formulation of martensite kinetics driven by temperature and/or stress. *Archive of Applied Mechanics*, (63):522–533, 1993.
- [Ogd97] R.W. Ogden. *Non-linear elastic deformations*. Dover Publications, Inc., 1997.
- [OL88] E.T. Onat und F.A. Leckie. Representation of mechanical behaviour in the presence of changing internal structure. *Journal of Applied Mechanics*, 55:1–10, 1988.
- [Ona81] E.T. Onat. Representation of inelastic behaviour. In B. Wilshire und D.R.J. Owen, Herausgeber, *Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures*. Pineridge Press, Swansea UK, 1981.
- [Ona86] E.T. Onat. Representation of mechanical behavior in the presence of internal damage. *Engineering Fracture Mechanics*, 25(5/6):605–614, 1986.
- [Pap88] Andreas Pape. *Zur Beschreibung des transienten und stationären Verfestigungsverhaltens von Stahl mit Hilfe eines nichtlinearen Grenzflächenmodells*. Nummer 57 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 5 1988.
- [PEB88] E. Patoor, A. Eberhardt, und M. Berveiller. Thermomechanical behaviour of shape memory alloys. *Achives of Mecanics*, 40(5-6):775 – 794, 1988.

- [Pee91] F.J.H. Peeters. Thermal Analysis by Means of Finite Element Methods. In [Mar91], 1991.
- [Pit88] Martin Pitzer. *Vergleich einiger FE-Formulierungen auf der Basis eines inelastischen Stoffgesetzes*. Nummer 61 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 7 1988.
- [Poh93] Jörg Pohe. *Ein Beitrag zur Stoffgesetzentwicklung für polykristallines Eis*. Nummer 83 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 2 1993.
- [PSB99] A. Paquin, H. Sabar, und M. Berveiller. Integral Formulation and Self-Consistent Modelling of Elastoviscoplastic Heterogeneous Materials. In O.T. Bruhns und E. Stein, Herausgeber, *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity*, Seiten 177–186. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [Rab59] Ju.N. Rabotnov. O mechanisme dliteljnogo pasruschenija (in russisch). *Woprossy protschnosti materialow i konstruktzii*. Moskwa: Isd. AN SSSR, Seiten 5–7, 1959. (zitiert nach SCHIESSE [Sch94]).
- [RB91] B. Raniecki und O.T. Bruhns. Thermodynamic reference model for elastic-plastic solids undergoing phase transformations. *Arch. Mech.*, 43(2-3):343–376, 1991.
- [Ree98] S. Reese. Multiplicative Thermo-Viscoplasticity: A Thermodynamic Model and its Finite Element Implementation. *Technische Mechanik*, 18(3):209–216, 1998.
- [Reu29] A. Reuss. Berechnung der Fließspannungen von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung von Einkristallen. *Z. angew. Math. Mech.*, Seiten 49–58, 1929.
- [Rot91] Ulfert Rott. *Ein neues Konzept zur Berechnung viskoplastischer Strukturen*. Nummer 76 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 4 1991.
- [RT92] B. Raniecki und K. Tanaka. In H. Hujiwara, T. Abe, und K. Tanaka, Herausgeber, *Residual Stresses – Science and Technology*, Band 1. Elsevier Science, London, 1992.
- [RWF98] G. Reisner, E.A. Werner, und F.D. Fischer. Micromechanical Modeling of Martensitic Transformation in Random Microstructures. *Int. J. Solids Structures*, 35(19):2457–2473, 1998.

- [RYF99] G. Reisner, W.Y. Yan, und F.D. Fischer. Micro- and Macroplasticity in Two Phase Alloys Undergoing Martensitic Transformation. In O.T. Bruhns und E. Stein, Herausgeber, *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity*, Seiten 363–372. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [Sac24] G. Sachs. *Z. Verein Deut. Ing.*, 72:734, 1924. (zitiert nach BISCHOFF–BEIERMANN [BB92]).
- [Sam97] I. Samohýl. Thermodynamics of Non-Reacting Mixtures of any Symmetry with Heat Conduction and Viscosity. *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 32(2):235–240, 1997.
- [SB98] N. K. Simha und K. Bhattacharya. Kinetics of phase boundaries with edges and junctions. *J. Mech. Phys. Solids*, 46:2323–2359, 1998.
- [Sch94] Peer Schieße. *Ein Beitrag zur Berechnung des Deformationsverhaltens anisotrop geschädigter Kontinua unter Berücksichtigung der thermoplastischen Kopplung*. Nummer 89 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 4 1994.
- [Sch98] P. Schieße. Einige Bemerkungen zur Kettenregel bei Zeitableitungen isotroper Tensorfunktionen. *ZAMM*, 78(6):419–425, 1998.
- [SH93a] Q.P. Sun und K.C. Hwang. Micromechanics Modelling for the constitutive Behaviour of polycrystalline Shape Memory Alloys - I. Derivation of general Relations. *J. Mech. Phys. Solids*, 41(1):1–17, 1993.
- [SH93b] Q.P. Sun und K.C. Hwang. Micromechanics Modelling for the constitutive Behaviour of polycrystalline Shape Memory Alloys - II. Study of the individual Phenomena. *J. Mech. Phys. Solids*, 41(1):19–33, 1993.
- [SHY91] Q.P. Sun, K.C. Hwang, und S.N. Yu. A micromechanics constitutive model of transformation plasticity with shear and dilatation effect. *J. Mech. Phys. Solids*, 39:507–524, 1991.
- [Šil97] M. Šilhavý. *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1997.
- [Sjö83] S. Sjöström. Berechnung der Abschreckeigenspannungen in Stahl. In E. Macherauch und V. Hauk, Herausgeber, *Eigenspannungen, Entstehung - Messung - Bewertung*, Int. Eigenspannungstagung Karlsruhe 1983, DGM Vortragsband, Seiten 155–188, 1983.
- [SL96] Q.-P. Sun und C. LExcellent. On the Unified Micromechanics Constitutive Description of One-Way and Two-Way Shape Memory Effects. *Journal de Physique*, iii(6):C1–367 – C1–375, 1996.

- [SMZ98] A. C. Souza, E. N. Mamiya, und N. Zouain. Three-dimensional model for solids undergoing stress-included transformations. *Eur. J. Mech. A/Solids*, (17):789–806, 1998.
- [SP97] I. Samohýl und W. Pabst. The Eshelby Relation in Mixtures. *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 32(2):227–233, 1997.
- [SS99] K. Simonsson und S. Sjöström. Mesomechanical Modelling of the Constitutive Behaviour of a Material during a Martensitic Transformation. In O.T. Bruhns und E. Stein, Herausgeber, *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity*, Seiten 345–354. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [Sze89] Frank Szepan. *Ein elastisch-viskoplastisches Stoffgesetz zur Beschreibung großer Formänderungen unter Berücksichtigung der thermomechanischen Kopplung*. Nummer 70 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 12 1989.
- [Tam82] I. Tamura. Deformation-induced martensitic transformation and transformation-induced plasticity in steels. *Metal Science*, 16:245 – 253, 1982.
- [Tan91] K. Tanaka. Analysis of transformation superplasticity and shape memory effect. In T. Inoue, H. Kitigawa, und S. Shima, Herausgeber, *Computational Plasticity*, Band 7, Seiten 43–60. The Society of Mat. Sci., Japan, Current Japanese Materials Research, Elsevier Applied Science, London, 1991.
- [Tay38] G.I. Taylor. Plastic Strain in Metals. *J. Inst. Met.*, 62:307–324, 1938. (zitiert nach BISCHOFF–BEIERMANN [BB92]).
- [TFO99] K. Tanaka, F.D. Fischer, und E.R. Oberaigner. Unified Constitutive Equations for Phase Transformation and Thermoplasticity. In O.T. Bruhns und E. Stein, Herausgeber, *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity*, Seiten 295–306. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [TT60] C. Truesdell und R. Toupin. The Classical Field Theories. In S. Flügge, Herausgeber, *Handbuch der Physik*, Band III, Seiten 227–793. Springer-Verlag Berlin, 1960.
- [VCP96] J.-C. Videau, G. Cailletaud, und A. Pineau. Experimental Study of the Transformation-Induced Plasticity in a Cr-Ni-Mo-Al-Ti Steel. *Journal de Physique*, III(6):C1–465 – C1–474, 1996.
- [Voi89] W. Voigt. Über die Beziehung zwischen den Elastizitätskonstanten isotroper Körper. *Wied. Ann.*, 38:573–587, 1889. (zitiert nach BISCHOFF–BEIERMANN [BB92]).

- [Was37] G. Wassermann. Untersuchungen an einer Eisen-Nickel-Legierung über die Verformbarkeit während der α - γ -Umwandlung. *Arch. Eisenhüttenwesen*, 10(7):321–325, 1937.
- [WDG99] Y.H. Wen, S. Denis, und E. Gautier. Analysis of the Role of the Stress on Martensitic Transformation in Ferrous Alloys Considering Numerical Modeling and Experimental Results. In O.T. Bruhns und E. Stein, Herausgeber, *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity*, Seiten 335–344. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [Wes95] Bernd Westerhoff. *Eine Untersuchung zum geschwindigkeitsabhängigen Verhalten von Stahl*. Nummer 99 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 1995.
- [WH91] Z.G. Wang und K.C. Hwang. A constitutive relation for pseudoelastic behavior in shape memory alloys. *Acta Mech. Sinica*, 7:67–75, 1991.
- [Wic96] Andreas Wichtmann. *Entwicklung eines thermodynamisch konsistenten Stoffgesetzes zur Beschreibung der Reckalterung*. Nummer 104 in Mitteilungen des Instituts für Mechanik. Ruhr-Universität Bochum, 1996.
- [WR58] F. Wever und A. Rose. *Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle*. Verlag Stahleisen, 1958.
- [XBM98] H. Xiao, O.T. Bruhns, und A. Meyers. Strain rates and material spins. *Journal of Elasticity*, 52:1–41, 1998.
- [ZPFB67] V.F. Zackay, E.R. Parker, D. Fahr, und R. Busch. The enhancement of ductility in high-strength steels. *Am. Soc. Met. Trans.*, 60:252–259, 1967.
- [ZW87] H. Ziegler und C. Wehrli. The Derivation of Constitutive Relations from the Free Energy and the Dissipation Function. *Advances in Applied Mechanics*, 25:183–236, 1987.

**Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik
RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM
Nr. 117**