

HELLER, KATRIN

NUMERISCHE ANALYSE DES KONTAKT-
PROBLEMS KUGELSYMMETRISCHER INDENTER
AUF SCHICHT-SUBSTRAT-SYSTEMEN

DIPLOMARBEIT

HOCHSCHULE MITTWEIDA (FH)

UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Fachbereich: Mathematik, Naturwissenschaften, Informatik

Chemnitz, 25. Februar 2010

HELLER, KATRIN

NUMERISCHE ANALYSE DES KONTAKT-
PROBLEMS KUGELSYMMETRISCHER INDENTER
AUF SCHICHT-SUBSTRAT-SYSTEMEN

eingereicht als

DIPLOMARBEIT

an der

HOCHSCHULE MITTWEIDA (FH)

UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Fachbereich: Mathematik, Naturwissenschaften, Informatik

Chemnitz, 25. Februar 2010

ERSTPRÜFER: Frau Prof. Dr. rer. nat. Cordula Bernert (HS Mittweida (FH))

ZWEITPRÜFER: Herr Dr. Ing. habil Jürgen Leopold (TBZ-PARIV GmbH)

Die vorgelegte Arbeit wurde verteidigt am: 26. Februar 2010

Bibliografische Beschreibung

Heller, Katrin

Numerische Analyse des Kontaktproblems kugelsymmetrischer Indenter auf Schicht-Substrat-Systemen - 123 Seiten. Mittweida, Hochschule Mittweida (FH) - University of Applied Sciences, Fachbereich Mathematik, Naturwissenschaften, Informatik (MNI). Diplomarbeit, 2010.

Referat

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Beurteilung beschichteter Materialien hinsichtlich ihres Verhaltens im Kontaktzustand. Hierzu werden numerische und analytische Berechnungen durchgeführt und diskutiert. Eine nicht kommerzielle Software, mit der numerische Berechnungen ausgeführt werden können (SPC-PM 2Ad), soll mit bekannterer und mehr erforschter Software verglichen werden. Die Frage, ob sich das SPC-PM 2Ad zur Analyse von Schicht-Substrat-Systemen eignet und welche Vor- bzw. Nachteile gegenüber anderen Programmen zu erwarten sind, soll innerhalb dieser Arbeit beantwortet werden.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
I Theorie und Literaturübersicht	
1 Beschichtung von Werkzeugen	5
1.1 Verschleißmechanismen	5
1.2 Schichteigenschaften	8
1.3 Typische Beschichtungsverfahren	9
2 Typische Härteprüfverfahren	15
2.1 Kugelindenter	16
2.1.1 Härteprüfverfahren nach Rockwell:	16
2.1.2 Härteprüfverfahren nach Brinell:	18
2.2 Spitze Indenter	21
2.2.1 Härteprüfverfahren nach Vickers:	21
2.2.2 Härteprüfverfahren nach Knoop:	23
2.2.3 Nanohärteprüfung (Berkovich):	25
3 Theoretische Grundlagen der numerischen Simulation	27
3.1 Die Elastizitätstheorie	28
3.1.1 Herleitung des Elastizitätsproblems	28
3.1.2 Elastizitätsproblem mit exakter Hindernisformulierung	38
3.2 Grundlagen der Finiten-Elemente-Methode	39
3.2.1 Verallgemeinerte Formulierung des Elastizitätsproblems	40
3.2.2 Formulierung des Kontaktes	44
3.2.3 Lösungsmethoden der FEM	47
3.2.4 Vorstellung eines adaptiv arbeitenden FE-Algorithmus	55
4 Stand der Technik	59
4.1 Anwendung numerischer Lösungsverfahren	59

4.2	Weitere theoretische Methoden	61
4.2.1	Analytische Methoden	61
4.2.2	Molekulardynamik	63

II Experimente und Ergebnisse

5	Eigene Berechnungen	69
5.1	Verwendete Programme und Hardwarekombinationen	69
5.1.1	ELASTICA [®]	69
5.1.2	ANSYS [®]	70
5.1.3	Adaptiver finite Elemente Code SPC-PM 2Ad	70
5.2	Modellierung und Simulation	71
5.2.1	Modellentwicklung	71
5.2.2	Berechnung des Modells 1 - Einfache Beschichtung	73
5.2.3	Berechnung des Modells 2 - Beschichtung mit Zwischenschicht	82
5.3	Härtevergleich der Modelle 1 und 2	88
6	Zusammenfassung und Ausblick	91

Anhang

A	Verwendete Bezeichnungen	a1
B	Begriffserklärungen	a5
C	Tabellen	a7

Abbildungsverzeichnis

1.1	Tribologisches System	6
1.2	Übersicht der Verschleißmechanismen	7
1.3	<i>TiN</i> -Beschichtung auf Hartmetall (REM-Aufnahme)	10
1.4	<i>TiN</i> -Beschichtung, hergestellt bei hoher Ionendichte	11
1.5	Oberfläche einer gespritzten Oxidbeschichtung (REM-Aufnahme)	13
2.1	Härteprüfverfahren nach Rockwell mittels geradem Kegel	17
2.2	Härteprüfverfahren nach Brinell	19
2.3	Darstellung der Eindruck- und Kugelgeometrie zur Berechnung der Eindruckoberfläche	20
2.4	Härteprüfverfahren nach Vickers	22
2.5	Härteprüfverfahren nach Knoop	23
2.6	Dachkante c bei vierseitigen Pyramiden	25
2.7	Härteprüfverfahren nach Berkovich	25
3.1	Spannungs-Dehnungs-Diagramm	32
3.2	Schema eines adaptiven FE-Algorithmus	56
4.1	Schicht-Substrat mit Gradientenschicht und vertikalem Riss	60
4.2	Schema des Kontaktproblems	61
4.3	Aufbau des Molekulardynamik-Modells eines Nanoindruckversuches	64
5.1	Modellskizze	72
5.2	Skizzierung des Modells 1	74
5.3	Gewählte Wege zur Ergebnisdarstellung	75
5.4	Vergleich der Verfeinerung mittels von-Mises-Vergleichsspannung über Weg y	76
5.5	Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg x_1	77
5.6	Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg x_1	77
5.7	Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg x_1	78
5.8	Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg x_2	79
5.9	Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg x_2	79

5.10	Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg x_2	80
5.11	Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg y	80
5.12	Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg y	81
5.13	Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg y	81
5.14	Skizzierung des Modells 2	82
5.15	Gewählte Wege zur Ergebnisdarstellung	83
5.16	Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg x_1	84
5.17	Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg x_1	84
5.18	Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg x_1	85
5.19	Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg x_2	86
5.20	Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg x_2	86
5.21	Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg x_2	87
5.22	Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg y	87
5.23	Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg y	88
5.24	Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg y	88
5.25	Vergleich der Verschiebung über Weg x_2	89
5.26	REM-Aufnahme der Oberfläche von <i>TiCN</i> auf Stahl	89

Tabellenverzeichnis

1.1	Wichtigste Hartstoffe zum Beschichten	8
2.1	Überblick der Prüfverfahren nach Rockwell	18
2.2	Anwendungsbereiche für die Härteprüfung nach Vickers	21
2.3	Prüfkräfte und Kurzzeichen bei der Härteprüfung nach Knoop	24
5.1	Übersicht der verwendete Hardware-Kombinationen	71
5.2	Übersicht der berechneten Modelle	73
5.3	Parameter des Modells 1	74
5.4	Parameter des Modells 2	82
C.1	Vergleich der Beschichtungsverfahren	a7

Einleitung

„Denn dies ist ... die Ursache allen Übels ...“

(Arius)

Im Laufe der letzten Jahrzehnte hat die industrielle Bedeutung von Beschichtungen und Beschichtungsverfahren stark zugenommen. Diese Beschichtungen werden auf unterschiedliche Weise eingesetzt und dienen unter anderem als Verschleißschutz, Korrosionsschutz, Schutz vor thermischen Einflüssen und vieles mehr. Die hier betrachteten Schichten werden im Maschinenbau bei gleitenden Teilen, Lagern, Walzen und fertigungstechnischen, umformenden und spanenden Werkzeugen genutzt. Das Ziel einer solchen Beschichtung ist die Erhöhung der Lebensdauer, die Erhöhung der Werkzeugstandzeit und die Minimierung des Energieaufwandes. Für viele Anwendungen ist daher die Optimierung der Schicht-Substrat-Struktur von entscheidender Bedeutung.

Die Bestimmung der mechanischen Kenngrößen wie Härtewert, Elastizitätsmodul, Fließspannung und Reibkoeffizienten ist Aufgabe der Nanohärtemessung. Die verwendeten Methoden reichen dabei von Nanoeindruck- über Nanoritzexperimente bis hin zu Messungen der Oberflächentopographie mittels Rasterelektronen- und Atomkraftmikroskopie. Der Gegenstand dieser Arbeit ist, die bisherigen Erfahrungen und Ergebnisse bei der Analyse der Schicht-Substrat-Struktur unter äußerer Beanspruchung durch die Nutzung kugelsymmetrischer Indenter zu nutzen.

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen des M3-2S-Forschungsprojektes angefertigt, und alle verwendeten Materialeigenschaften und Geometrie-Informationen sind Teil dieses Projektes. Das Softwarepaket SPC-PM 2Ad, entwickelt von Herrn Prof. Dr. Arnd Meyer und von Herrn Dr. Matthias Pester an der TU-Chemnitz, wird seit seiner Entwicklung für Vergleichsrechnungen in verschiedenen Projekten angewendet und soll aufgrund seiner freien Verfügbarkeit, den kürzeren Rechenzeiten und der Flexibilität im Modellaufbau für die zukünftigen Arbeiten im M3-2S-Projekt verwendet werden. Es ist daher auch zu untersuchen, ob diese Software im Vergleich zu kommerzieller und bereits besser erforschter Software (ANSYS[®] und ELASTICA[®]) vergleichbar gute Ergebnisse liefert.

Hierzu werden im ersten Kapitel zunächst Verschleißmechanismen und standardisierte Beschichtungsverfahren vorgestellt.

Die Beschreibung standardisierter Härteprüfverfahren, d.h. Verfahren mit der Anwendung kugelsymmetrischer und spitzer Indenter, erfolgt in Kapitel 2.

Das Kapitel 3 umfasst die wesentlichen Grundlagen der numerische Simulation. Es erfolgt die Herleitung des Elastizitätsproblems und die Modellierung des Kontaktes. Im darauffolgenden Abschnitt wird ein Überblick über die Berechnung der Probleme vermittelt, die aus der verallgemeinerten Formulierung resultieren. Dazu wird die Methode der finiten Elemente genutzt. Nach einer kurzen Grundlagenbetrachtung wird auf die Gestalt und Auflösung der daraus resultierenden Gleichungssysteme eingegangen. Den Abschluss des Kapitels bildet die Beschreibung eines adaptiven Algorithmus zur Lösung der zum Elastizitätsproblem gehörenden Differentialgleichung.

Das 4. Kapitel gibt einen Überblick über die bisherigen Analysen des Kontaktproblems kugelsymmetrischer Indenter auf Schicht-Substrat-Systemen. Hierbei werden sowohl numerische Ergebnisse vorgestellt, als auch analytische und Ergebnisse aus der Molekulardynamik.

Die mit eigenen Berechnungen erzielten Ergebnisse werden im 5. Kapitel dargestellt und diskutiert.

Im Anhang befindet sich eine Übersicht der verwendeten Abkürzungen. Außerdem sind hier ergänzende Erklärungen, Tabellen und Abbildungen zu finden.

Teil I

Theorie und Literaturübersicht

Kapitel 1

Beschichtung von Werkzeugen

Schicht-Substrate entstehen in der Praxis häufig beim Beschichten von Werkzeugen, die für umformende und spanende Verfahren benötigt werden. Die Hauptaufgabe einer solchen Oberflächenbeschichtung ist die Erhöhung der Werkzeugstandzeit.

Nach DIN 8580 [12] ist Beschichten das „Fertigen durch Aufbringen einer fest haftenden Schicht aus formlosem Stoff auf ein Werkstück. Maßgebend ist der unmittelbar vor dem Beschichten herrschende Zustand des Beschichtungsstoffes.“

1.1 Verschleißmechanismen

Nach DIN 50320 [11] ist Verschleiß der „fortschreitende Materialverlust aus der Oberfläche eines festen Körpers, hervorgerufen durch mechanische Ursachen, d.h. Kontakt und Relativbewegung eines festen, flüssigen oder gasförmigen Gegenkörpers.“ Man unterscheidet die Hauptverschleißmechanismen Adhäsion, Abrasion, tribochemische Reaktion und Oberflächenzerrüttung.

Der Gesamtverschleiß von Bauteilen ist in der Praxis gewöhnlich von mehr als einem Verschleißmechanismus abhängig. So kann es auch vorkommen, dass zum Beginn einer Betriebszeit andere Verschleißarten auftreten, als zu einem beliebigen späteren Zeitpunkt. Die Verschleißprodukte ihrerseits können am Bauteil zu einem sekundären Verschleiß anderer Art beitragen. Zudem muss hervorgehoben werden, dass Verschleiß eine Systemeigenschaft des tribologischen Systems (siehe Abbildung 1.1) ist, da das Verhalten der Verschleißfläche maßgeblich durch die Eigenschaften des Verschleißpartners bestimmt wird. [32]

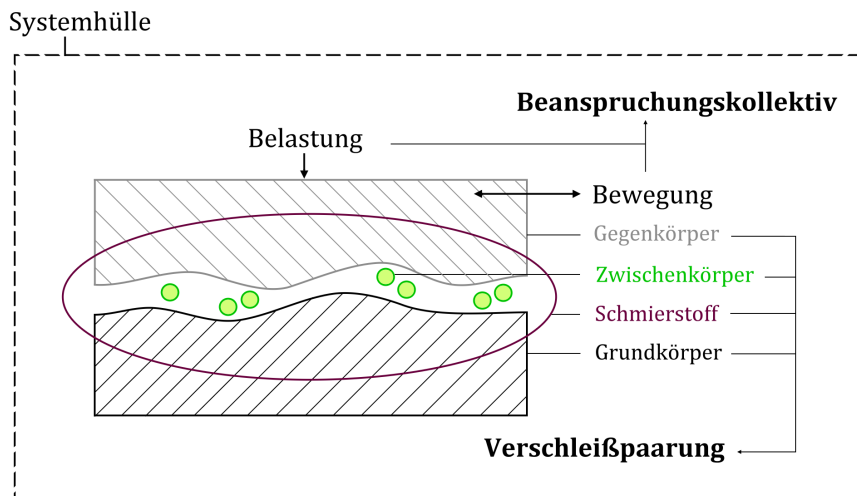


Abbildung 1.1: Tribologisches System

Abrasionsverschleiß:

Abrasionsverschleiß wird durch Hartstoffe hervorgerufen, die in die Oberfläche des Grundwerkstoffes eindringen und eine schneidende oder furchende Wirkung haben. Hierbei kann es sich entweder um Teilchen handeln, die sich frei über eine Oberfläche hinwegbewegen, um Hartstoffteilchen zwischen zwei sich bewegenden Flächen, oder auch um eine aufgeraute Oberfläche, über die eine Gegenfläche hinweggleitet.

Im alltäglichen Sprachgebrauch wird der Abrasionsverschleiß häufig mit Bezeichnungen wie Abrieb, Abnutzung, usw. belegt. Damit sei zwar die Stärke, nicht jedoch die Art des Verschleißes näher erläutert. Der zugrunde liegende Verschleißmechanismus ist jedoch bei allen die Abrasion.

Adhäsionsverschleiß:

Die Oberfläche von vorrangig metallischen Festkörpern ist im mikroskopischen Maßstab betrachtet rau und uneben. Obwohl sie scheinbar glatt wirkt, weist sie zahlreiche Täler und Spitzen auf. Bei tribologischen Vorgängen kommen zwei solcher Oberflächen in Verbindung und berühren sich ausschließlich an den Spitzen. Die Berührungsflächen gegenüber der nominellen Fläche sind sehr klein, hohe Drücke und Temperaturen in diesen Bereichen sind die Folge. Da dadurch die Elastizitätsgrenze der Werkstoffe überschritten werden kann, treten plastische Deformationen auf, die zur Folge haben, dass Oberflächenschichten durchbrochen werden und reine Metalle miteinander in Berührung kommen. Dies kann zu Kaltverschweißung führen. Bewegen sich beide Flächen relativ zueinander, werden die Bindungen auseinandergerissen, und Materialpartikel werden aus der Oberfläche herausgelöst. Diese Verschleißart wird als Adhäsionsverschleiß bezeichnet. Zudem

können die losgerissenen Partikel selbst zu einem abrasiven Verschleiß beitragen.

Tribochemische Reaktion:

Tribochemische Reaktionen sind chemische Reaktionen, die durch das Einwirken von mechanischen Beanspruchungen zwischen den Elementen des tribologischen Systems auftreten. Zu diesen Elementen gehören Grund- und Gegenkörper, Zwischenstoff und das angrenzende Medium. Die Reaktionsprodukte sind zumeist Veränderungen der Schmierstoffe oder der Grenzschicht der beiden Reibkörper.

Bei metallischen Reibpartnern handelt es sich vorwiegend um Oxidationen, die die Bildung von spröden Korrosionsschichten zur Folge haben. Aus diesen können sich Partikel leicht herauslösen und zu einem anschließenden abrasiven Verschleiß führen.

Oberflächenzerrüttung:

Man spricht von Oberflächenzerrüttung, wenn infolge tribologisch wechselnder Beanspruchungen in den oberflächennahen Werkstoffschichten eines Reibpartners eine erhöhte Brüchigkeit auftritt und feine Mikrorisse entstehen. Die so gelockerten, spröden Teile können sich aus dem Material lösen und sogenannte Grübchen entstehen.

Die Rissbildung ist Folge der stetig in Betrag und Richtung wechselnden Druck- und Schubspannungen. Diese Spannungswechsel werden z.B. beim Walzen beobachtet.

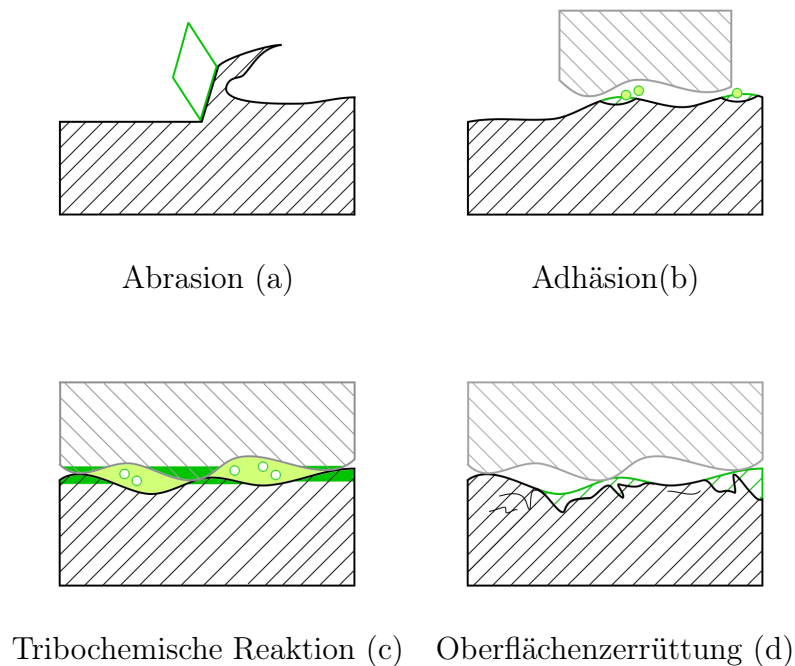


Abbildung 1.2: Übersicht der Verschleißmechanismen

Durch die Adhäsion und die tribochemische Reaktion wird die Oberfläche der Reibpartner chemisch und physikalisch verändert. Die mechanischen Eigenschaften werden dabei häufig verschlechtert. Der eigentliche Abrieb erfolgt jedoch stets durch die Abrasion und die Oberflächenzerrüttung. Metallische Verschleißpartikel, die sowohl adhäsiv gebunden sein, als auch in der Reibzone vorliegen können, können zudem oxidieren.

Da der Verschleiß häufig in der Randschicht des Werkzeuges auftritt, ist das Verschleißverhalten entscheidend von den Materialeigenschaften der Randschicht abhängig. Der Verminderung des Verschleißes kommt betriebswirtschaftlich gesehen eine immer größere Bedeutung zu, da es durch die Abnutzung fertigungsbedingt zu Ausfällen kommt, die teure Nacharbeitungen zur Folge haben.

Maßnahmen, die zur Verschleißminderung beitragen, sind sowohl Schmierungen als auch Hartstoffbeschichtungen mit geeigneten Werkstoffpaarungen, die zur Verminderung von Mikrokontakten beitragen und die Festigkeit der adhäsiven Bindungen verringern soll.

1.2 Schichteigenschaften

Durch das Auftragen äußerst harter und dünner Hartstoff-Schichten auf ein zähes Ausgangsmaterial werden der Verschleiß und gleichzeitig die Wahrscheinlichkeit des Bruches des Trägermaterials vermindert. Unter diesen Hartstoffen versteht man meist die Ausbildung einer intermetallischen Phase, also der homogenen, chemischen Verbindung zweier oder mehrerer Metalle. Zu ihnen zählen sowohl Metallcarbide als auch Metallnitride. Nur in seltenen Fällen handelt es sich bei Hartstoffen um Nichtmetallcarbide und -oxide.

Die wichtigsten Hartstoffe sind in Tabelle 1.1 aufgeführt.

Tabelle 1.1: Wichtigste Hartstoffe zum Beschichten [21], S. 267

Stoff	Vickershärte [HV]	Schmelztemperatur [°C]
Metallcarbide		
<i>TiC</i> (Titancarbid)	3 000	3 147
<i>WC</i> (Wolframcarbid)	1 780	2 720
<i>NbC</i> (Niobcarbid)	1 960	3 480
Metallnitride		
<i>TiN</i> (Titannitrid)	1 990	3 205
<i>ZrN</i> (Zirkoniumnitrid)	1 520	2 980
Nichtmetallische Hartstoffe		
<i>B₄C</i> (Borcarbid)	4 950	2 447
<i>SiC</i> (Siliziumcarbid)	3 500	2 200
<i>Al₂O₃</i> (Aluminiumoxid)	2 000	2 050

Hartstoffe weisen aufgrund der hohen Härtewerte eine gute Verschleißbeständigkeit auf. Diese Eigenschaft spricht aber auch für eine geringe Zähigkeit, d.h. sie sind aufgrund hoher Rissbildungs- und Bruchwahrscheinlichkeit in ihrer Reinform praktisch nicht zu verarbeiten und finden bei der Beschichtung von relativ zähen Grundmaterialien Anwendung. Die Schichtdicken müssen dabei entsprechend niedrig bleiben. Als dünne Schichten werden Schichten bezeichnet, die weniger als $10\ \mu\text{m}$ Dicke aufweisen, wobei die einzelnen Schichten in Mehrfachbeschichtungen durchaus dünner als $1\ \mu\text{m}$ sein können.

1.3 Typische Beschichtungsverfahren

Die meisten Schichtwerkstoffe, darunter Metalle, Legierungen, Keramikwerkstoffe und intermetallische Phasen, können kombiniert aufgetragen werden. Die Verfahren zu ihrer Aufbringung werden jedoch hinsichtlich ihrer Werkstoffeigenschaften stark eingeschränkt. So können z.B. hochschmelzende Oxide nicht mit Auftragsschweißverfahren aufgetragen werden. Weiterhin ist die Wahl von Schichtwerkstoff und dem dazugehörigen Beschichtungsverfahren abhängig von den Eigenschaften, die von der späteren Schicht erwartet werden, z.B. Schichtdicke, Dichte und Haftfestigkeit.

Die Tabelle C.1 (Anhang C) zeigt eine Übersicht der Beschichtungsverfahren, die für den Maschinenbau am wichtigsten erscheinen. Dazu gehören die Aufdampfverfahren des CVD- und PVD-Beschichtens zur Abscheidung besonderer Hartstoffe, elektrolytische bzw. chemische Verfahren zur Abscheidung metallischer Schichten, thermisches Spritzen und Auftragsschweißen.

Aufdampfen

Das Verfahren des Aufdampfens beschreibt die Herstellung anorganischer Überzüge durch Kondensation oder durch Reaktion in der Gasphase. Man unterscheidet hierbei zwischen der chemischen Abscheidung aus der Gasphase (*engl.*: chemical vapour deposition, CVD), die für die Aufbringung von Schichten bis zu 1mm geeignet ist, und der physikalischen Gasabscheidung (*engl.*: physikal vapour deposition, PVD), welche ausschließlich zur Herstellung sehr dünner Schichten (von $0,1\ \mu\text{m}$ bis $100\ \mu\text{m}$) verwendet wird.

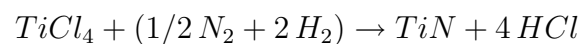
Beim Aufdampfen steht nur eine begrenzte Zahl von Schichtwerkstoffen zur Verfügung. Der Vorteil besteht jedoch darin, dass sich unter diesen Werkstoffen auch solche befinden, die mit anderen Verfahren nicht oder nur schwer aufzubringen sind. Außerdem können dünne Schichten mit kontrollierter Dicke aufgetragen werden.

Das *CVD-Verfahren (chemische Dampfabscheidung)* ist ein Prozess, bei dem ein Reaktionsgas, vornehmlich ein Halogenid, in einem beheizten Rezipienten erzeugt wird. Bei der Anwesenheit von Kohlenwasserstoff oder stickstoffhaltigen Verbindungen werden aus

den vorhandenen Halogeniden gute Carbid-, Nitrid- oder Karbonitridbildner. Die Reaktionsprodukte setzen sich fest auf der Oberfläche des Werkstücks nieder.

Die Abscheidung eines Metalles erfolgt z.B. über die Erzeugung eines Metallhalogenides, d.h. der chemischen Verbindung zwischen Metallen und Elementen der siebten Hauptgruppe des Periodensystems. Die daraus resultierenden Stoffe, z.B. Metallcarbide oder -nitride, eignen sich am besten für die Beschichtung von Werkzeugen.

Beispiel: Als Beispiel soll die Reaktion für die Herstellung einer Titannitridbeschichtung (TiN) betrachtet werden [21]:



Das gasförmige $TiCl_4$ (Titan-tetrachlorid) reagiert im Rezipienten zusammen mit Ammoniak, der bei $500^\circ C$ in Stickstoff und Wasserstoff zerfällt. Bei einer Temperatur von $1000^\circ C$, einem Unterdruck von $0,1\text{ bar}$ und Wasserstoffgas als Aktivator entsteht festes Titannitrid. Es schlägt sich auf der Oberfläche des Werkstoffes goldfarben nieder. Die Salzsäure (HCl) wird aufgefangen und verwertet. Wie dick eine Beschichtung ist, hängt von der Dauer der Behandlung ab.

Die Abbildung 1.3 zeigt eine TiN -Beschichtung auf gebrochenem Hartmetall.

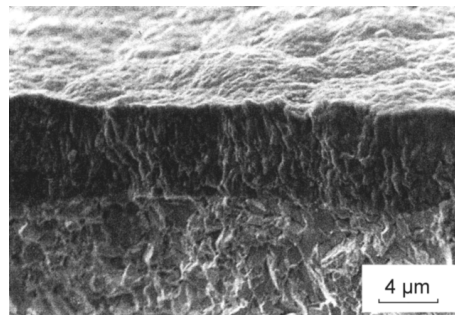


Abbildung 1.3: TiN -Beschichtung auf Hartmetall (REM-Aufnahme) [21]

Die Größe der zu beschichtenden Bauteile ist abhängig von der Größe des Rezipienten. Da mehrere Werkstücke gleichzeitig beschichtet werden können, werden kleine Teile vielfach in Körben oder Trommeln behandelt. Wesentlich größere Bauteile, wie Fahrgestelle von Flugzeugen, werden in Kammern mit einem Durchmesser von 2 m und einer Länge von 3 m beschichtet, Fensterscheiben bis zu einer Größe von $6\text{ m} \times 10\text{ m}$ in Anlagen bis zu 60 m Länge. Nachteilig sind die hohen Behandlungstemperaturen, womit die Beschichtung niedrigschmelzender Metalle ausgeschlossen ist.

Das *PVD-Verfahren* (*physikalische Dampfabscheiden*) beschreibt das Beschichten durch

Metall Dampf. Das Metall liegt hierbei zum Ausgangszeitpunkt in fester Form vor. Man unterscheidet die PVD-Verfahren in der Art ihrer Energiezufuhr für gewöhnlich in drei Verfahrensgruppen: das Verdampfen, das Kathodenzerstäuben („Sputtern“) und Ionenplattieren.

Für das **Verdampfen** wird der Beschichtungswerkstoff z.B. thermisch durch Widerstandsheizungen oder mittels Elektronenstrahlverdampfen bis zu seiner Siedetemperatur erhitzt und verdampft. Er kondensiert an der kälteren Oberfläche des zu beschichtenden Werkstückes als hauchdünner Metallfilm.

Beim **Kathodenzerstäuben** werden Metallatome aus einem Festkörper gelöst, indem energiereiche positiv geladenen Argon-Ionen mit sehr hoher Geschwindigkeit auf das negativ geladene Beschichtungsmaterial (Kathode) auf treffen und dieses zerstäuben.

Das **Ionenplattieren** beginnt mit dem Verdampfen des Beschichtungsmaterials mithilfe unterschiedlicher Energiequellen. Im Argon-Plasma entstehen positive Metallionen, die mit einer hohen Geschwindigkeit auf das Werkstück treffen, welches als Kathode geschaltet ist. Dort bilden sie die gut haftende Beschichtung des Grundwerkstoffes.

Während der Abscheidung des Werkstoffes entsteht eine Hartstoffverbindung durch die Zugabe eines reaktiven Gases, welches mit den Metallatomen reagiert. Die Abbildung 1.4 zeigt eine *TiN*-Schicht, die mit einem PVD-Verfahren und einer hohen Ionendichte aufgebracht wurde.

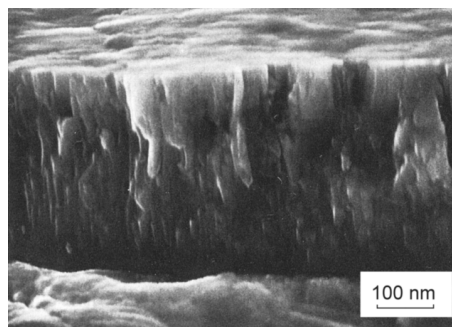


Abbildung 1.4: *TiN*-Beschichtung, hergestellt bei hoher Ionendichte [19]

Bauteilflächen, die von der Verdampfungsquelle abgewandt sind, können nur schlecht beschichtet werden. Eine gleichmäßige Beschichtungen kann z.B. mit gleichzeitiger Rotation erzielt werden. Die niedrigen Beschichtungstemperaturen von nur etwa $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ und die Vielzahl an Beschichtungsmöglichkeiten sind als Vorteile dieses Verfahrens anzusehen.

Elektrolytische Abscheidung

Das elektrolytische Abscheiden ist ein Verfahren zur Aufbringung von metallischen Überzügen. Es handelt sich hierbei um die Aufbringung relativ dünner und korrosionsbeständiger Schichten. Beim Verfahren wird das zu beschichtende Bauteil in einen Behälter mit einer elektrisch leitenden Flüssigkeit (Elektrolyt) gegeben und dort als Kathode verwendet. Der Elektrolyt ist häufig die Lösung eines Salzes des abzuscheidenden Metalls. Bei einer konstanten Temperatur von 60°C wird der Stromkreis mit einer Anode vervollständigt. Sie besteht im Allgemeinen aus dem Beschichtungswerkstoff und befindet sich im Elektrolyt in der Nähe der Kathode. Durch die Wirkung eines Gleichstroms mit niedriger Spannung, der durch den Elektrolyt fließt, wandern positiv geladene Metallionen zur Kathode und entladen sich beim Auftreffen. Sie gehen in Metallatome über und schlagen sich auf der Oberfläche der Kathode nieder. Sie bilden die Beschichtung des Grundwerkstoffes. Der Nachteil dieses Verfahrens besteht darin, dass es bei der Wahl des Schichtwerkstoffes Einschränkungen gibt, da lediglich leitende Materialien, wie z.B. Eisen oder beschichteter Kunststoff als Grundwerkstoff und z.B. Zink, Chrom oder Nickel als Beschichtungswerkstoff, genutzt werden können. Das Verfahren kann zudem besonders für große Schichtdicken sehr zeit- und kostenaufwändig sein. Hinzu kommt, dass die Beschichtung aufgrund der Feldlinienverteilung abhängig vom Abstand zur Anode ist. So können an hervorstehenden Kanten dickere und an abgelegeneren Stellen sehr dünne Schichten entstehen. Der Vorteil des Verfahrens liegt in der geringen Beschichtungstemperatur, wodurch Deformationen vermieden werden. Zudem ist es möglich, auch Innenflächen zu beschichten. Die Schichtdicke ist hierbei, bei Bauteilen mit einfacher Geometrie, sehr gut regulierbar.

Thermisches Spritzen

Das thermische Spritzen umfasst nach DIN EN 657 [13] „Verfahren, bei denen Spritzzustände innerhalb oder außerhalb der Spritzpistole zugeführt und bis zum plastischen oder geschmolzenen Zustand aufgeheizt und dann auf die vorbereitete Oberfläche geschleudert werden. Die Oberfläche wird dabei nicht aufgeschmolzen.“

Dieses Verfahren findet Anwendung bei Schichtdicken im Bereich von mehr als $100\ \mu\text{m}$. Das Schichtmaterial in Form von Pulver bzw. Drähten wird thermisch aufgeheizt und geschmolzen. Es wird durch einen Gasstrom mit einer hohen Geschwindigkeit auf die Oberfläche des zu beschichtenden Bauteils geschleudert. Beim Auftreffen zerfließen die Partikel, die sich miteinander verzahnen und so die Schicht mit der gewünschten Dicke ausbilden. Die Eigenschaften des Schichtwerkstoffes sowie die Energie und Temperatur, mit der die Partikel auf die Oberfläche auftreffen, beeinflussen maßgeblich die Dichte der späteren Schicht. Die Haftfestigkeit ist ebenso von den genannten Komponenten und von der Oberflächenbeschaffenheit der Unterlage abhängig.

Der Vorteil des thermischen Spritzens besteht darin, dass fast alle Schichtwerkstoffe und Materialzusammensetzungen als Beschichtungsmaterialien genutzt werden können. So sind Metalle, Keramiken, Carbide und Kunststoffe und auch jegliche sich daraus ergebenden Kombinationen zum Auftragen geeignet. Für die Wahl des Beschichtungsgrundstoffes liegen keinerlei Begrenzungen vor. Die Schichtwerkstoffe können auch auf Grundwerkstoffe aufgebracht werden, die sich aufgrund ihres dünnen Querschnittes beim Auftragsschweißen verziehen würden. Nachteilig ist, dass die Schichthaftung sehr gering ist und die Beschichtung im Vergleich zu anderen Beschichtungsverfahren eine hohe Porösität aufweist.

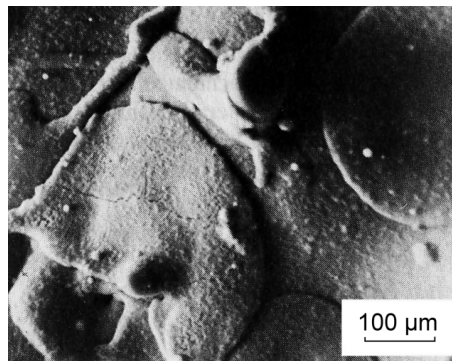


Abbildung 1.5: Oberfläche einer gespritzten Oxidbeschichtung (REM-Aufnahme) [22]

Auftragsschweißen

Beim Auftragsschweißen wird dem zu beschichtenden Werkstück, im Allgemeinen Stahl, Wärme zugeführt. Die Verbindung von Grund- und Beschichtungswerkstoff erfolgt durch das Erhitzen des zu beschichtenden Bauteils bis über seinen Schmelzpunkt hinaus. Das Beschichtungsmaterial wird mithilfe eines Schweißwerkzeuges mittels Druck und der möglichen Hinzunahme von Schweißzusatzstoffen auf den Grundkörper aufgebracht. Das Beschichtungsmaterial ist so zu wählen, dass es einen ähnlichen oder einen niedrigeren Schmelzpunkt besitzt, als das Grundmaterial.

Der Vorteil beim Auftragsschweißen besteht darin, dass die Bindungsfestigkeit zwischen dem Grund- und dem Beschichtungswerkstoff im Vergleich zu allen anderen Beschichtungsverfahren am größten ist. Das Verfahren macht es möglich, Schichten mit sehr großen Schichtdicken aufzutragen, die sich im Bereich von 3 mm bis 10 mm bewegen. Von Vorteil ist hierbei, dass damit der Verschleißschutz in größere Tiefen gewährleistet wird. Nachteilig ist das Auftreten von inneren Spannungen im Werkstück, die auf die unterschiedlichen Ausdehnungskoeffizienten von Grund- und Beschichtungswerkstoff zurückzuführen sind. Ebenso dafür verantwortlich ist das große Temperaturgefälle, welches während des Schweißvorgangs im Bauteil auftritt. Die Spannungen können zum Verzug des Bauteils sowie zur Ausbildung von Rissen in der Schicht beitragen.

Kapitel 2

Typische Härteprüfverfahren

Die Werkstoffprüfung ist ein wichtiger Bestandteil der Qualitätssicherung, die zum einen bei der Herstellung qualitativ hochwertiger Produkte Anwendung findet, zum anderen in vielen Industriezweigen, bei denen ein hohes Sicherheitsbedürfnis besteht.

Mithilfe der Prüfverfahren werden das Verhalten und die Werkstoffkenngrößen von Bauteilen ermittelt. Diese lassen sich in 4 Gruppen einteilen:

- die *technologischen* (Gießfähigkeit, Kalt- und Warmformbarkeit, Zerspanbarkeit, Schweißbarkeit u.a.),
- die *mechanischen* (Elastizität, Härte, Festigkeit, Zähigkeit u.a.),
- die *chemischen* (Beständigkeit bei Luftfeuchtigkeit, angreifenden Gasen, Flüssigkeiten u.a.)
- und die *thermischen* (Schmelztemperatur, Wärmeausdehnung, Wärmeleitung, Wärmefestigkeit, Kaltzähigkeit u.a.) Kenngrößen.

Bei den Werkstoffprüfverfahren werden zwei Hauptgruppen unterschieden: die zerstörenden bzw. bedingt zerstörenden und die zerstörungsfreien Prüfverfahren.

Im Folgenden soll die Härteprüfung an Metallen betrachtet werden. Sie gehört zu den zerstörenden Werkstoffprüfverfahren, die nur stichprobenweise durchgeführt werden können. [25]

Man unterscheidet statische Härteprüfverfahren, bei denen die Prüfkraft stoßfrei in einer vorgeschriebenen Mindestzeit auf das Bauteil aufgebracht wird, und dynamische Härteprüfverfahren, bei denen die Belastung schlagartig auftritt. Obwohl die dynamischen Verfahren bereits in älterer Literatur zu finden sind, haben sie nicht die Bedeutung der statischen Verfahren erlangt. In der vorliegenden Arbeit sollen deshalb statische Härteprüfverfahren behandelt werden. Die Prinzipien der meisten heute vorrangig genutzten

Härteprüfverfahren entstanden bereits vor 1930 und werden noch immer unverändert angewendet.

Als Härte wird die Eigenschaft eines Körpers bezeichnet, dem Eindringen eines anderen, härteren und wenig verformbaren Körpers einen gewissen Widerstand entgegenzusetzen. Je größer dieser Verformungswiderstand ist, umso härter erscheint das geprüfte Material. Nach dieser Definition ist das folgende allgemeine Verfahren zur Härteprüfung standardisiert worden.

Ein Eindruckkörper (Indenter) wirkt, mit einer konstanten Kraft belastet, auf die Oberfläche eines Bauteils bzw. einer Bauteilprobe (Substrat). Der bleibende Eindruck wird anschließend, entweder nach Wegnahme der wirkenden Prüfkraft oder bei Wirken der Prüfvorkraft, optisch vermessen. Die Grundlage des Begriffs der Härte H liegt in der folgenden Gleichung:

$$H = \frac{F}{A} \quad (2.1)$$

Die Härte ist der Quotient aus der aufgebrachten Kraft F und einem Maß A für die Oberfläche des bleibenden Eindruckes. Anhand der Werkstückverformung in Abhängigkeit der definierten Beanspruchung wird anschließend der Härtewert berechnet.

Jedes konkrete Prüfverfahren ergibt dabei einen anderen Härtewert. Die Zuordnung zum jeweiligen Verfahren ist deshalb stets mit anzugeben. Bei der Spezifikation der Prüfverfahren sind die folgenden Festlegungen zu treffen:

1. Form und Werkstoff des Eindringkörpers
2. Kraft-Zeit-Regime des Härteprüfverfahrens
3. Definitionsgleichung des Härtewertes

Für die Bestimmung der Härte eines Materials sind spezielle statische Härteprüfverfahren anhand der verwendeten Indentergeometrie standardisiert worden. [14, 15, 16, 17, 19, 25]

2.1 Kugelindenter

2.1.1 Härteprüfverfahren nach Rockwell:

Der Eindruckkörper dieses Verfahrens ist zum einen ein gerader Kegel mit einem Öffnungswinkel von $\alpha = 120^\circ$ und einer abgerundeten Spitze aus Diamant mit einem Radius

von $r = 0,2 \text{ mm}$. Zum anderen wird für die Härteprüfung nach Rockwell auch eine Kugel aus Hartmetall verwendet. Ihr Durchmesser beträgt entweder $1,5875 \text{ mm}$ oder $3,175 \text{ mm}$. Der Indenter wird zunächst mit einer Prüfvorkraft F_0 stoßfrei in das Bauteil bis zu einer Eindringtiefe eingedrückt, die als Bezugsebene für die weiteren Messungen dient. Das Tiefenmesssystem wird auf Null gesetzt und anschließend eine Prüfüzusatzkraft F_1 stoßfrei in mindestens 1 s und nicht mehr als 8 s auf den Indenter aufgebracht. Nach einer Einwirkzeit von $4 \text{ s} \pm 2 \text{ s}$ wird die maximale Eindringtiefe erreicht. Die Prüfüzusatzkraft wird anschließend wieder zurückgenommen, sodass sich der Indenter um den elastischen Anteil der Eindringtiefe zurückbewegt. Mithilfe der verbleibenden Eindringtiefe h wird die Rockwell-Härte HR berechnet.

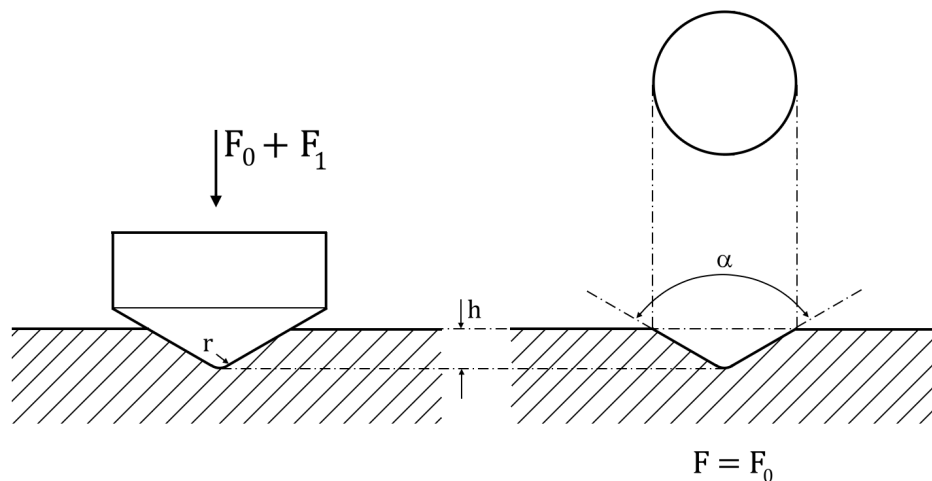


Abbildung 2.1: Härteprüfverfahren nach Rockwell mittels geradem Kegel

Bei weicheren Werkstoffen steigt die Eindringtiefe stark an. Damit keine dickeren Prüfkörper erforderlich werden, wurden nach DIN EN ISO 6508-1 [17] 11 Skalen mit unterschiedlichen Prüfkraften und Indentergeometrien genormt. Die Tabelle 2.1 gibt einen Überblick der existierenden Skalen.

Tabelle 2.1: Überblick der Prüfverfahren nach Rockwell

Bezeichnung	N	S [mm]	Indentergeometrie	Prüfvorkraft F_0 [N]	Prüfzusatzkraft F_1 [N]
<i>HRA</i>	100	0,002		98,06650	490,3325
<i>HRC</i>	100	0,002		98,06650	1372,931
<i>HRD</i>	100	0,002	Diamantkegel mit	98,06650	882,5985
<i>HR15N</i>	100	0,001	120° Spitzenwinkel	29,41995	117,6798
<i>HR30N</i>	100	0,001		29,41995	264,7796
<i>HR45N</i>	100	0,001		29,41995	411,8793
<i>HRB</i>	130	0,002		98,06650	882,5985
<i>HRF</i>	130	0,002		98,06650	490,3325
<i>HRG</i>	130	0,002	Hartmetallkugel,	98,06650	1372,931
<i>HR15T</i>	100	0,001	∅ 1,5875 mm	29,41995	117,6798
<i>HR30T</i>	100	0,001		29,41995	264,7795
<i>HR45T</i>	100	0,001		29,41995	411,8793
<i>HRE</i>	130	0,002	Hartmetallkugel,	98,06650	882,5985
<i>HRH</i>	130	0,002	∅ 3,175 mm	98,06650	490,3325
<i>HRK</i>	130	0,002		98,06650	1372,931

Die Rockwellhärte wird mithilfe der Eindringtiefe h und der in Tabelle 2.1 definierten Konstante N und der Skaleneinteilung S wie folgt berechnet [25]:

$$HR = N - \frac{h}{S} \quad (2.2)$$

Die Konstante N ist dimensionslos, die Skaleneinteilung S und die Eindringtiefe h sind in mm einzutragen.

Die einzelnen Verfahren finden aufgrund ihrer einfachen Realisierung und des geringen Zeitaufwandes einer Messung die weltweit häufigste Anwendung.

2.1.2 Härteprüfverfahren nach Brinell:

Der Eindringkörper, eine Kugel aus Hartmetall mit dem Durchmesser D , wird unter einer definierten Prüfkraft F senkrecht in die Oberfläche einer Probe eingedrückt. Der gemittelte Durchmesser d des Eindruckes, der in der Oberfläche des Prüfkörpers nach Wegnahme der Kraft zurückbleibt, wird ermittelt. Der Durchmesser der Kugel ist nach DIN EN ISO 6506-1 [15] auf $D = 10\text{ mm}$, 5 mm , $2,5\text{ mm}$ bzw. 1 mm festgelegt.

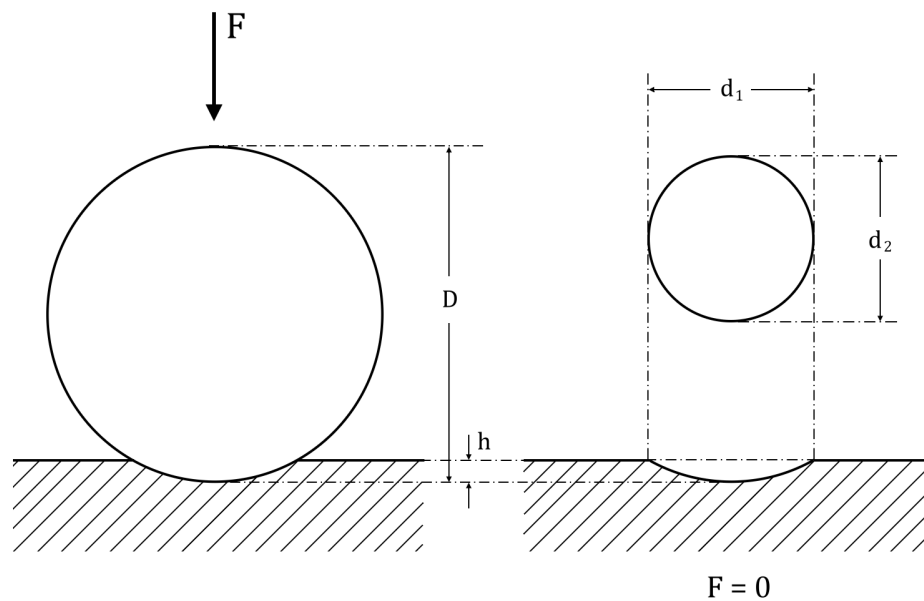


Abbildung 2.2: Härteprüfverfahren nach Brinell

Die Prüfkraft in der allgemeinen Formel für die Härteberechnung $H = \frac{F}{A}$ ist in Kilopond (kp) anzugeben. Diese entspricht der Gewichtskraft eines Körpers der Masse 1 Kilogramm unter Wirkung der standardisierten Erdbeschleunigung von $9,80665 \frac{m}{s^2}$.

Es gilt also

$$1 kp = 1 kg \cdot 9,80665 \frac{m}{s^2} = 9,80665 \frac{kg \cdot m}{s^2}$$

Da diese Krafteinheit seit 1978 in Deutschland unzulässig ist und durch die Einheit Newton (N) ersetzt wurde, wobei $1 N = 0,101971621 kp$, ist die Kraft in der allgemeinen Formel in N anzugeben und mit dem Faktor 0,102 zu multiplizieren.

Für die Härteformel ergibt sich somit

$$HBW = \frac{0,102 \cdot F}{A} \quad (2.3)$$

Die Formel für die Berechnung der Brinellhärte (HBW) lässt sich nun wie folgt herleiten:

Für die Berechnung der Oberfläche des Eindruckes ist der Durchmesser d zu ermitteln, der Mittelwert zweier rechtwinklig zueinander liegender Durchmesser d_1 und d_2 .

$$d = \frac{d_1 + d_2}{2}$$

Die Oberfläche des Eindruckes ergibt sich aus der Formel für die Kugelkappe:

$$A = \pi \cdot D \cdot h \quad (2.4)$$

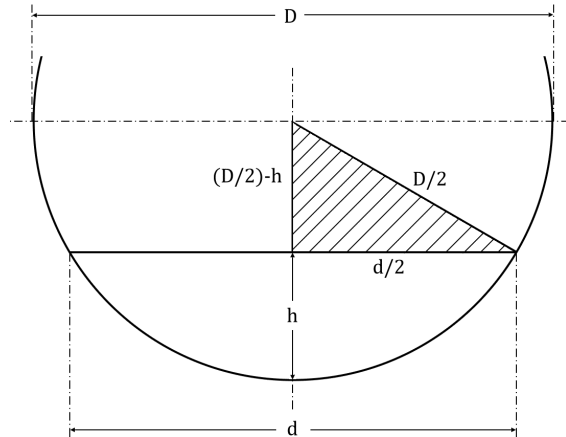


Abbildung 2.3: Darstellung der Eindruck- und Kugelgeometrie zur Berechnung der Eindruckoberfläche

Gemäß Abbildung 2.3 und der Anwendung des Satzes des Pythagoras gilt

$$\left(\frac{D}{2}\right)^2 = \left(\frac{D}{2} - h\right)^2 + \left(\frac{d}{2}\right)^2$$

$$\left(\frac{D}{2} - h\right)^2 = \left(\frac{D}{2}\right)^2 - \left(\frac{d}{2}\right)^2$$

$$\frac{D}{2} - h = \frac{1}{2}\sqrt{D^2 - d^2}$$

$$h = \frac{D}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{D^2 - d^2}$$

$$h = \frac{1}{2}\left(D - \sqrt{D^2 - d^2}\right) \quad (2.5)$$

Durch Einsetzen von (2.5) in (2.4) ergibt sich für die Eindruckoberfläche

$$A = \pi \cdot D \cdot \left(\frac{1}{2}\left(D - \sqrt{D^2 - d^2}\right)\right) \quad (2.6)$$

Wird (2.6) schließlich in (2.3) eingesetzt, folgt die Berechnungsformel für die Brinellhärte:

$$HBW = \frac{0,102 \cdot 2 \cdot F}{\pi \cdot D \cdot (D - \sqrt{D^2 - d^2})} \quad (2.7)$$

Die Prüfkraft F ist in N , die Länge des Kugeldurchmessers D und die Länge des Eindrucksdurchmessers d sind in mm einzutragen.

Der Härtewert wird in der Praxis nicht in jedem einzelnen Fall neu berechnet. Er kann aus Tabellen entnommen werden, die für alle genormten Eindringkörperdurchmesser und Prüfkraften den Härtewert in Abhängigkeit vom mittleren Eindringdurchmesser enthalten. Hierzu sei auf die Literatur [25] und die Norm [15] verwiesen.

Die Prüfkraften sind mithilfe des sogenannten Beanspruchungsgrades

$$B = \frac{0,102 \cdot F}{D^2} = 30; 10; 2,5; 1 \text{ und selten } 15 \text{ und } 1,5$$

festgelegt.

2.2 Spitze Indenter

2.2.1 Härteprüfverfahren nach Vickers:

Der Eindringkörper für das Härteprüfverfahren nach Vickers ist eine gerade vierseitige Pyramide aus Diamant mit einem Öffnungswinkel von $\alpha = 136^\circ$ zwischen zwei gegenüberliegenden Flächen.

Der Indenter wird senkrecht mit einer Prüfkraft F in die Oberfläche einer Probe eingedrückt. In Abhängigkeit von der angewendeten Prüfkraft wird die Härteprüfung nach Vickers gemäß DIN EN ISO 6507 [16] in drei Bereiche gegliedert (Tabelle 2.2). Es sind Eindrucksdiagonallängen zwischen $20 \mu m$ und $1,4 mm$ zugelassen.

Tabelle 2.2: Anwendungsbereiche für die Härteprüfung nach Vickers

Bereich	Bereiche der Prüfkraft F [N]	Kurzzeichen der Härte
Konventioneller Bereich	$F \geq 49,03$	$\geq HV 5$
Kleinkraftbereich	$1,961 \leq F < 49,03$	$HV 0,2$ bis $< HV 5$
Mikrobereich	$0,09807 \leq F < 1,961$	$HV 0,01$ bis $< HV 0,2$

Die Prüfkraft wird stoßfrei aufgebracht und gesteigert, bis ein festgelegter Prüfwert erreicht ist. Sie muss im konventionellen Härtebereich in mindestens 2 s und maximal 8 s, im Kleinkraft- und Mikrohärtbereich in nicht mehr als 10 s vollständig aufgebracht sein. Die Einwirkzeit beträgt 10 s bis 15 s.

Anschließend werden die Diagonalen d_1 und d_2 des Eindrucks, der nach Wegnahme der Prüfkraft in der Oberfläche der Probe zurückbleibt, gemessen. Die Vickershärte (HV) ist der Quotient aus Prüfkraft F und Eindruckoberfläche A , die mithilfe des arithmetischen Mittelwertes $d = \frac{d_1+d_2}{2}$ aus beiden Diagonalen ermittelt wird.

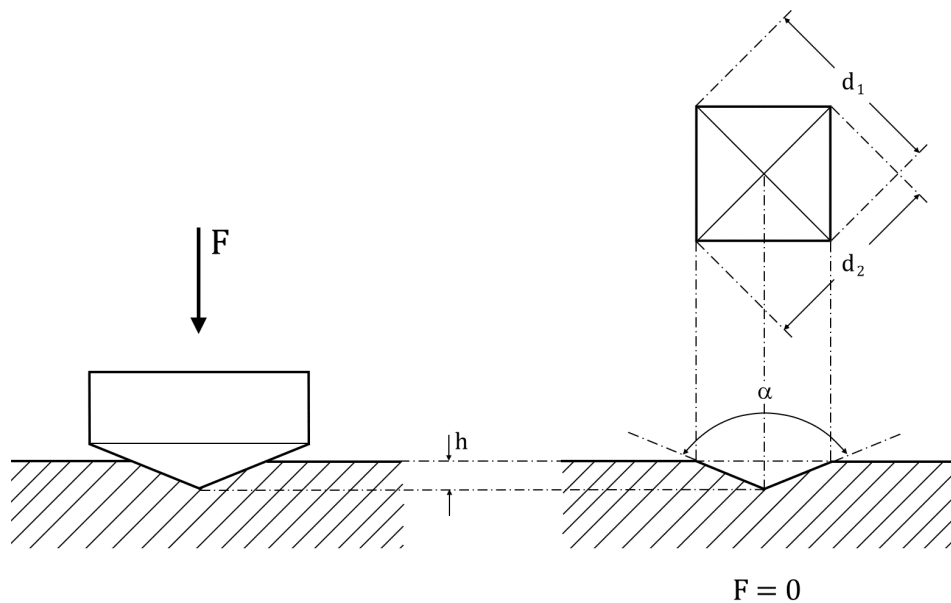


Abbildung 2.4: Härteprüfverfahren nach Vickers

Die Prüfkraft ist hier erneut in der allgemeinen Formel für die Härteberechnung $H = \frac{F}{A}$ in Kilopond (kp) anzugeben und wird dementsprechend mit dem Faktor 0,102 multipliziert. Es ergibt sich für die Härteformel

$$HV = \frac{0,102 \cdot F}{A} \quad (2.8)$$

Aus dem Flächeninhalt A des Eindrucks (Herleitung siehe [19] S.192)

$$A = \frac{d^2}{2 \cdot \sin \frac{136^\circ}{2}} = \frac{d^2}{2 \cdot \sin 68^\circ} \cong \frac{d^2}{1,854}$$

ergibt sich für die Vickershärte

$$HV = \frac{0,102 \cdot 1,854 \cdot F}{d^2}$$

$$HV = 0,1891 \cdot \frac{F}{d^2}. \quad (2.9)$$

Die Prüfkraft F ist in N , die Länge der Diagonale d in mm einzutragen.

2.2.2 Härteprüfverfahren nach Knoop:

Der Eindringkörper des Härteprüfverfahrens nach Knoop ist eine Diamant-Pyramide mit rhombischer Grundfläche. Der Längskantenwinkel beträgt $\alpha = 172,5^\circ$ und der Querkantenwinkel $\beta = 130^\circ$.

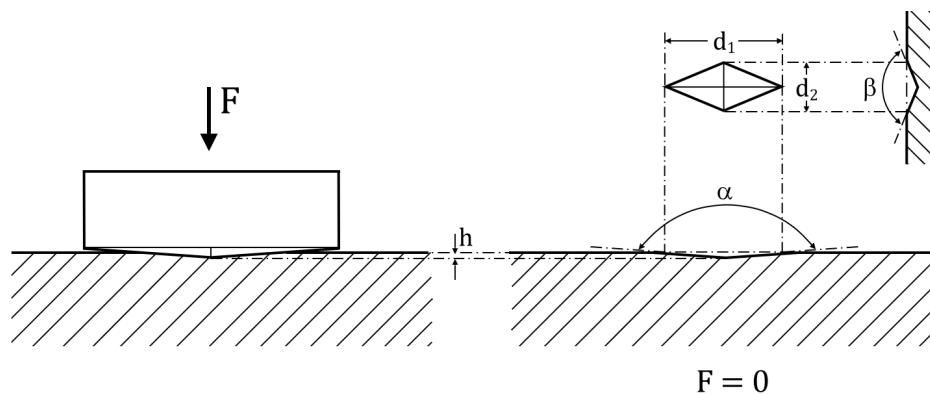


Abbildung 2.5: Härteprüfverfahren nach Knoop

Das Verfahren ähnelt im Aufbau des Indenters und in der Anwendung der Prüfkräfte stark dem Härteprüfverfahren nach Vickers im Kleinkraftbereich. Die Prüfkraft F wird auch hier stoßfrei aufgebracht und gesteigert, bis ein festgelegter Prüfwert erreicht ist und muss in höchstens 10 s vollständig aufgebracht sein. Die Einwirkzeit beträgt 10 s bis 15 s. Der Unterschied zum Verfahren nach Vickers besteht jedoch darin, dass für die Knoophärte (HK) nicht die Eindruckoberfläche, sondern die Projektionsfläche A_P des Eindruckes auf der Probenoberfläche zur Berechnung genutzt wird. Die Berechnung der Projektionsfläche erfolgt mithilfe der längeren Diagonale $d = d_1$. Anhand der Körpergeometrie des Indenters lässt sich die Knoophärte wie folgt berechnen (Herleitung siehe [19] S.193):

$$A_P = \frac{\tan \frac{\beta}{2}}{2 \cdot \tan \frac{\alpha}{2}} \cdot d^2 = \frac{\tan 65^\circ}{2 \cdot \tan 86,25^\circ} \cdot d^2 \cong 0,07028 d^2$$

Unter der erneuten Berücksichtigung des Faktors 0,102 für die Umrechnung der Prüfkraft von kp in N ergibt sich für die Knoop Härte

$$HK = 0,102 \cdot \frac{F}{A_P} = 0,102 \cdot \frac{F}{0,07028 d^2}$$

$$HK = 1,451 \cdot \frac{F}{d^2} \tag{2.10}$$

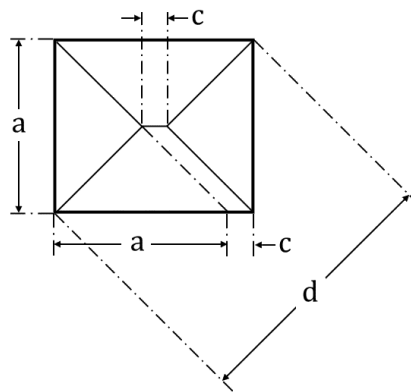
Die Prüfkraft F ist in N , die Länge der Diagonale d in mm einzutragen.

Auch hier sind die Prüfkraften nach DIN EN ISO 4545 [14] standardisiert. Sie sind in Tabelle 2.3 aufgezeigt.

Tabelle 2.3: Prüfkraften und Kurzzeichen bei der Härteprüfung nach Knoop

Prüfkraft F [N]	Kurzzeichen der Härte
0,09807	$HK\ 0,01$
0,1961	$HK\ 0,02$
0,2451	$HK\ 0,025$
0,4903	$HK\ 0,05$
0,9807	$HK\ 0,1$
1,961	$HK\ 0,2$
2,942	$HK\ 0,3$
4,903	$HK\ 0,5$
9,807	$HK\ 1$

Sowohl bei dem Härteprüfverfahren nach Vickers, als auch nach Knoop entstehen bereits bei der Herstellung der Indenter Fehler, die im Nanometer-Bereich besonders gravierend sind. Der Nachteil bei der Herstellung dieser vierseitigen Pyramiden ist die Gefahr eine sogenannte „Dachkante“ c (siehe Abbildung 2.6) zu produzieren, die im Makrobereich $2\ \mu m$ nicht überschreiten darf. Im Mikrobereich gibt es für die maximale Länge dieser Kante keine Norm, sodass im ungünstigsten Fall weiterhin mit der Dachkantenlänge von $2\ \mu m$ gerechnet werden muss. Die Verfahren nach Vickers und Knoop sind deshalb im Nanobereich unbrauchbar.

Abbildung 2.6: Dachkante c bei vierseitigen Pyramiden

2.2.3 Nanohärteprüfung (Berkovich):

Die Nanohärteprüfung verwendet einen Eindringkörper, mit dem die Härte in wesentlich kleineren Gebieten berechnet werden kann. Der Indenter für dieses Verfahren ist eine Diamantpyramide mit einer gleichseitigen dreieckigen Grundfläche (Berkovich-Indenter). Durch die spezielle Form ist es nicht möglich eine Dachkante, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben, zu produzieren.

Der Öffnungswinkel α , der sich zwischen der Höhe und einer beliebigen Seitenfläche der Pyramide befindet beträgt $65,3^\circ$.

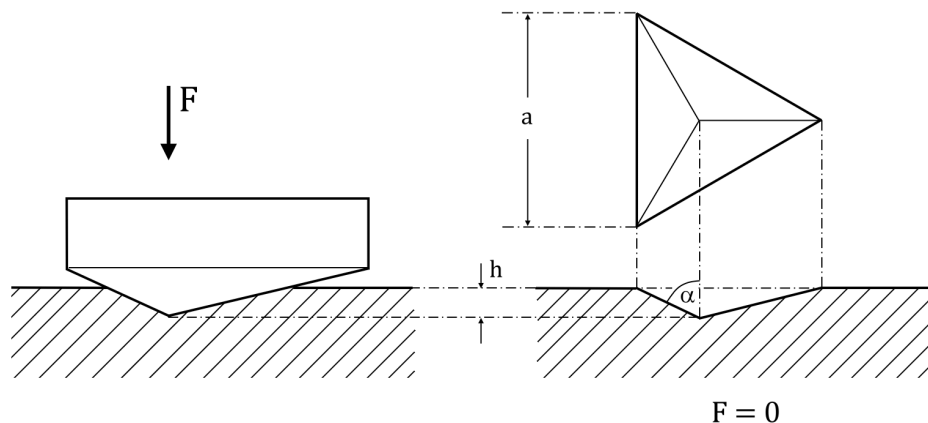


Abbildung 2.7: Härteprüfverfahren nach Berkovich

Wie in den Härteprüfverfahren nach Vickers und Knoop, wird die Prüfkraft F stoßfrei aufgebracht und gesteigert. Sie muss innerhalb von 10 s vollständig aufgebracht sein und 10 s bis 15 s aufgebracht bleiben.

Die Nanohärte (HN) ist der Quotient aus Prüfkraft F und der Projektionsfläche A_P , die mithilfe der Eindringtiefe h ermittelt wird.

$$HN = \frac{F}{A_P} \quad (2.11)$$

Anhand der Körpergeometrie des Indenters lässt sich die Projektionsfläche A_P wie folgt berechnen:

$$A_P = \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot a^2 \quad (2.12)$$

wobei a als Seitenlänge des Eindruckes definiert ist (Herleitung siehe [19] S.191):

$$a = 2 \cdot \sqrt{3} \cdot \tan(\alpha) \cdot h \quad (2.13)$$

Einsetzen von (2.13) in (2.12) liefert

$$\begin{aligned} A_P &= \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot \left(2 \cdot \sqrt{3} \cdot \tan(65,3^\circ) \cdot h \right)^2 \\ &= \left(3 \cdot \sqrt{3} \cdot \tan^2(65,3^\circ) \right) \cdot h^2 \\ A_P &= 24,56 \cdot h^2 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Das Einsetzen von (2.14) in (2.11) ergibt

$$\begin{aligned} HN &= \frac{F}{24,56 \cdot h^2} \\ HN &= 0,041 \cdot \frac{F}{h^2} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Die Umrechnung von Kilopond in Newton ist hierbei nicht notwendig. Die Prüfkraft F ist somit wie gewöhnlich in N , die Eindringtiefe h in mm anzugeben.

Kapitel 3

Theoretische Grundlagen der numerischen Simulation

„... aber eine Gleichung ist etwas für die Ewigkeit.“

(Albert Einstein)

Die numerische Simulation technischer und physikalischer Prozesse gewinnt in vielen Teilen der Physik, angewandten Mathematik und Ingenieurwissenschaften, aufgrund von Zeit- und Kostenersparnis, immer mehr an Bedeutung. Der Großteil dieser Prozesse, darunter Festkörperbeanspruchung, Wärmeleitung in festen Körpern, Strömung von Flüssigkeiten oder Gasen sowie elektrische und magnetische Felder, kann durch gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen bzw. Integralgleichungen beschrieben werden. Da eine analytische Lösung solcher Gleichungen, d.h. die Bestimmung der unbekanntenen Größen wie Verschiebung, Temperatur, Strömungsgeschwindigkeit, elektrisches und magnetisches Potential, nur in sehr wenigen Fällen möglich ist, sind umfassende numerische Berechnungen zur Analyse derartiger Problemklassen notwendig.

Die Differentialgleichungen beschreiben das Verhalten einer Struktur anhand eines differentiell kleinen Abschnittes. So zeigen z.B. die Differentialgleichungen der Elastizitätstheorie von Lamé das Verhalten eines Festkörpers unter Beanspruchung, die Navier-Stokes-Gleichungen das Verhalten eines Fluids, und die Maxwell-Gleichungen entsprechen einer mathematischen Formulierung für Magnetfelder.

In dieser Arbeit sollen die restringierten Probleme zur Verformung elastischer Körper durch den Kontakt mit einem festen Hindernis betrachtet werden. Neben Heinrich Hertz, der sich bereits im Jahr 1881 mit der Berührung zweier elastischer Körper beschäftigte [26], war es Antonio Signorini [49], der 1933 das eigentliche nach ihm benannte Kontaktproblem (Signorini-Problem) populär machte. Seit seiner Zeit entwickelten sich zahlreiche Algorithmen zur Lösung derartiger Problemklassen. Mit der Entwicklung der Finiten-Elemente-Methode und dem Fortschritt der Rechentchnik erlangte der Großteil dieser

Algorithmen letztendlich auch praktische Bedeutung.

In den nachfolgenden Abschnitten sollen die Grundlagen der Elastizitätstheorie näher erläutert werden. Im Anschluss daran erfolgt die Herleitung der Lamé-Gleichung, welche die Verformung eines elastischen Körpers unter vorgegebenen Randbedingungen und Volumenlasten modelliert.

3.1 Die Elastizitätstheorie

In der Elastizitätstheorie werden die Bewegung und die Verformung eines deformierbaren Körpers betrachtet. Im Folgenden wird dieser Körper als lückenloses, raumausfüllendes Kontinuum angesehen. Es handelt sich also um ein Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ mit dem Rand $\Gamma = \partial\Omega$. d ist hierbei die Dimension des Problems. Im allgemeinen Fall ist $d \in \{1, 2, 3\}$.

Das Kontinuum wird durch die Koordinaten seiner Punkte beschrieben. Man unterscheidet zwei Arten der Beschreibung: die Euler'sche und die Lagrange'sche. Die Euler'sche Beschreibung gibt die momentane Position der einzelnen Punkte an. Sie wird vorrangig bei der Betrachtung von Fluiden genutzt. In der Festkörpermechanik findet oft die Lagrange'sche Beschreibungsweise Anwendung. Jedem Punkt $\vec{x} = (x_1, \dots, x_d)^T$ des Kontinuums, identifiziert durch seine Koordinaten, wird ein zeitabhängiges Vektorfeld

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} u_1 \\ \dots \\ u_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1(\vec{x}, t) \\ \dots \\ u_d(\vec{x}, t) \end{pmatrix}$$

zugeordnet. In diesem Feld ist die Verschiebung des Punktes im Zeitraum $[0, T]$ festgelegt. So sind die Bewegungen für alle Zeiten $t \in [0, T]$ in allen Punkten nachvollziehbar. Daraus resultieren auch wichtige mechanische Größen, wie die Verformungsgeschwindigkeit und die darauffolgende Reaktion des Materials. Anhand dieser Beschreibung lässt sich das Materialverhalten nachvollziehen. Im Nachfolgenden wird ausschließlich von der Lagrange'schen Beschreibung ausgegangen.

3.1.1 Herleitung des Elastizitätsproblems [23, 27, 53]

In den weiterführenden Betrachtungen sind ausschließlich die Endzustände des Kontinuums von Bedeutung. Demzufolge kann die Zeitabhängigkeit vernachlässigt und die Verformung als eine Abbildung ϕ mit

$$\begin{aligned} \phi: \Omega &\rightarrow \mathbb{R}^d \\ \phi(\vec{x}) &= \vec{x} + \vec{u}(\vec{x}) \end{aligned}$$

betrachtet werden.

Aufgrund der Forderung der Kontinuität, d.h. keine gegenseitige Durchdringung und kein Aufreißen der Materie, ergibt sich die Injektivität der Abbildung ϕ . Somit ist der Deformationsgradient J

$$J = \left[\frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} \right]_{i,j=1,\dots,d},$$

der in der Umgebung jedes Teilchens definiert ist, regulär. Er wird als eine Fundamentalgröße der Elastizitätstheorie bezeichnet und beschreibt die Lage- und Formänderung des differentiellen Elementes $\partial \vec{x}$.

Die nachfolgende Annahme zeige den Einfluss auf die Änderung benachbarter Linienelemente:

Seien \vec{x} und $(\vec{x} + \vec{z})$ zwei benachbarte Punkte in Ω mit dem Abstand $\|\vec{z}\|$. In Folge der Deformation ϕ werden diese Punkte auf $\phi(\vec{x})$ und $\phi(\vec{x} + \vec{z})$ abgebildet. Ihr Abstand beträgt im deformierten Zustand $\|\phi(\vec{x} + \vec{z}) - \phi(\vec{x})\|$. Mittels Taylorreihen-Entwicklung ergibt sich die lineare Näherung

$$\phi(\vec{x} + \vec{z}) = \phi(\vec{x}) + J\vec{z} + O(\|\vec{z}\|^2).$$

Somit ergibt sich für den Abstand

$$\begin{aligned} \|\phi(\vec{x} + \vec{z}) - \phi(\vec{x})\|^2 &= \|\phi(\vec{x}) + J\vec{z} + O(\|\vec{z}\|^2) - \phi(\vec{x})\|^2 \\ &= \|J\vec{z}\|^2 + O(\|\vec{z}\|^4) \\ &= \vec{z}^T J^T J \vec{z} + O(\|\vec{z}\|^4), \end{aligned}$$

und eine Längenänderung durch $J^T J$ wird bewirkt.

Diese Größe $C = J^T J$, die aus dem Deformationsgradienten abgeleitet wird, wird als *Rechts-Cauchy-Green-Tensor* bezeichnet. Für den Fall, dass keine Deformation, sondern nur eine Starrkörperverschiebung vorliegt, ergibt sich $C = I$, wobei I der Einheitstensor ist, d.h. es hätte keine Längenänderung stattgefunden. Im dreidimensionalen Fall beschreibt I den Einheitstensor zweiter Stufe, d.h. die Einheitsmatrix der entsprechenden Größe.

Aus dem Rechts-Cauchy-Green-Tensor leitet sich eine weitere fundamentale Größe der Elastizitätstheorie her, der *Green'sche Verzerrungstensor* ϵ

$$\epsilon = \frac{1}{2}(C - I).$$

Für die Veranschaulichung soll die Berechnung des Verzerrungstensors für den dreidimensionalen Fall ($d = 3$) erfolgen:

Es gilt:

$$\phi \left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} x_1 + u_1 \\ x_2 + u_2 \\ x_3 + u_3 \end{bmatrix}$$

mit $u_i = u(x_i)_{i=1,2,3}$.

Daraus ergibt sich für den Deformationsgradienten

$$J = I + \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right]_{i,j=1,2,3}.$$

Die entstehende Matrix dieses Ausdruckes entspricht dabei dem Gradienten der Vektorfunktion \vec{u} , d.h.

$$\mathbf{grad} \vec{u} = \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right]_{i,j=1,2,3}.$$

Somit ergibt sich für den Rechts-Cauchy-Green-Tensor

$$\begin{aligned} C &= J^T J \\ &= (I + (\mathbf{grad} \vec{u}))^T \cdot (I + (\mathbf{grad} \vec{u})) \\ &= (I^T + (\mathbf{grad} \vec{u})^T) \cdot (I + (\mathbf{grad} \vec{u})) \\ &= I + (\mathbf{grad} \vec{u}) + (\mathbf{grad} \vec{u})^T + (\mathbf{grad} \vec{u})^T \cdot (\mathbf{grad} \vec{u}). \end{aligned}$$

Daraus folgt für den Verzerrungstensor

$$\epsilon = \frac{1}{2} ((\mathbf{grad} \vec{u}) + (\mathbf{grad} \vec{u})^T) + \frac{1}{2} (\mathbf{grad} \vec{u})^T \cdot (\mathbf{grad} \vec{u}).$$

Für eine beliebige Komponente ϵ_{ij} von ϵ gilt

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x_j}.$$

In der Elastizitätstheorie werden die in \vec{u} quadratischen Terme vernachlässigt. Die Gleichung vereinfacht sich dann wie folgt:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.1)$$

d.h. es wird mit

$$\varepsilon = \varepsilon(u) = \frac{1}{2} (\mathbf{grad}(\vec{u}) + (\mathbf{grad} \vec{u})^T) \quad (3.2)$$

gearbeitet, und es gilt $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ bzw. $\varepsilon^T = \varepsilon$.

Bei der Verformung eines Körpers ist der Einfluss äußerer Belastungen maßgeblich. Hierbei wird davon ausgegangen, dass sich alle einwirkenden Kräfte und Momente auf Volumen- und Oberflächenkräfte zurückführen lassen.

Voraussetzung für die Definition dieser Kräfte ist die Bedingung, dass sich bei einem im Gleichgewicht befindlichen Körper alle äußeren Einflüsse zu Null summieren.

Als Kraftdichte \vec{f} wird ein auf Ω definiertes Vektorfeld mit $\vec{f}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ bezeichnet, welches in einem Volumenelement dV die resultierende Volumenkraft $\vec{f} dV$ hervorruft.

Oberflächenkräfte hängen dagegen nicht nur vom Flächenelement dA ab, sondern gleichzeitig von der Richtung des Normalenvektors \vec{n} . Man definiert diese Kraft deshalb über einen Spannungsvektor, welcher von \vec{x} und \vec{n} abhängig ist.

Es sei S die Einheitkugel im \mathbb{R}^d und $\vec{t}: \Omega \times S \rightarrow \mathbb{R}^d$ ein Vektorfeld, welches als Cauchy'scher Spannungsvektor bezeichnet wird. Dieser Vektor liefert zusammen mit dem Flächenelement dA die Oberflächenkraft $\vec{t}(\vec{x}, \vec{n}) dA$.

Da die Summe aller Kräfte und aller Momente im Gleichgewichtszustand des verformten Körpers Null ergeben, lassen sich die Gleichgewichtsbedingungen als

$$\int_{\Omega} \vec{f}(\vec{x}) dV + \int_{\Gamma} \vec{t}(\vec{x}, \vec{n}) dA = 0 \quad (3.3)$$

$$\int_{\Omega} \vec{x} \times \vec{f}(\vec{x}) dV + \int_{\Gamma} \vec{x} \times \vec{t}(\vec{x}, \vec{n}) dA = 0 \quad (3.4)$$

formulieren. Hierbei gibt (3.3) die Gleichgewichtsbedingung aller Kräfte und (3.4) die der Momente an, wobei sich alle durch eine angreifende Kraft $\vec{f}(\vec{x}) dV$ hervorgerufenen Momente über die Beziehung $M(\vec{x}) = \vec{x} \times \vec{f}(\vec{x}) dV$ bestimmen lassen.

Nach dem *Satz von Cauchy* existiert mit (3.3) und (3.4) ein Tensorfeld σ (*Cauchy'scher*

Spannungstensor), sodass gilt:

$$\vec{t}(\vec{x}, \vec{n}) = \sigma(\vec{x}) \cdot \vec{n} \quad (3.5)$$

$$\mathbf{div} \sigma(\vec{x}) + \vec{f}(\vec{x}) = 0 \quad (3.6)$$

$$\sigma = \sigma^T. \quad (3.7)$$

Damit das Problem mathematisch korrekt formuliert werden kann, werden nun materialabhängigen Kenngrößen gefordert. Um diesen Sachverhalt anschaulich zu machen, betrachte man den einfachsten Fall einer Verformung, den einachsigen Spannungszustand:

Dieser Zustand entspricht einem in die Länge gezogenen Draht. Die Verzerrungs- und Spannungsrichtung liegt hierbei nur einfach vor. Sie sollen mit ε_{1D} und σ_{1D} bezeichnet werden.

Die Verzerrung entspricht der Dehnung des Materials und ist in einem Spannung-Dehnungs-Diagramm darstellbar, in welchem die Dehnung des Materials in Abhängigkeit von der anliegenden Spannung gezeigt wird (siehe Abbildung 3.1).

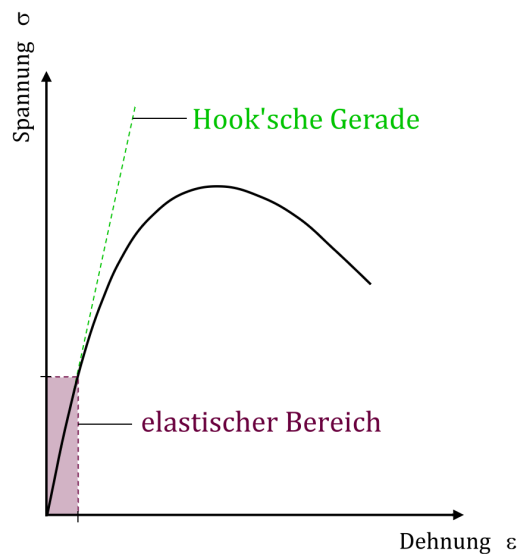


Abbildung 3.1: Spannungs-Dehnungs-Diagramm

Bei geringen Spannungen ist der Zusammenhang zur Verzerrung linear. Diese Gerade wird als *Hook'sche Gerade* bezeichnet, und es gilt

$$\sigma_{1d} = E \cdot \varepsilon_{1d}.$$

Der Proportionalitätsfaktor E beschreibt, wie stark sich ein Material bei einer bestimmten Belastung dehnt und wird als *Elastizitätsmodul* bezeichnet.

Im mehrachsigen Zustand gilt eine analoge Beziehung zwischen dem Spannungs- und Verzerrungstensor, wobei der Hook'sche Tensor \mathfrak{h} diese Beziehung vermittelt. Für die weiterführenden Betrachtungen werden jedoch die folgenden Vereinfachungen getroffen:

- Beschränkung auf den dreidimensionalen Fall
- Isotropie des Materials

Aufgrund dieser Bedingungen haben der Spannungstensor σ und der Verzerrungstensor ε die Gestalt

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}, \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix},$$

mit der Eigenschaft der Symmetrie, d.h. $\sigma = \sigma^T$ und $\varepsilon = \varepsilon^T$. Die sechs relevanten, unabhängigen Größen der Tensoren $\{\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}\}$ und $\{\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, \varepsilon_{12}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{23}\}$ werden deshalb auch in zwei Vektoren der Form

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix}, \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{23} \end{bmatrix}$$

zusammengefasst.

Mit diesen Vereinfachungen lautet das Hook'sche Gesetz dann

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & 1-\nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & 1-\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-2\nu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1-2\nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1-2\nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{23} \end{bmatrix}, \quad (3.8)$$

wobei ν als *Querkontraktionszahl* bezeichnet wird und die Änderung des Querschnittes bei einer Dehnung oder Stauchung beschreibt.

Der Spannungstensor σ kann folglich über den Verzerrungstensor ε dargestellt werden. Durch die zusätzliche Anwendung der Beziehung (3.1) können alle erhaltenen Größen über das Verschiebungsfeld \vec{u} ausgedrückt werden.

Der Zusammenhang zwischen den Kräften, die am betrachteten Körper angreifen, und den daraus resultierenden Verschiebungen wird durch eine partielle Differentialgleichung beschrieben. Der Ausgangspunkt ihrer Herleitung ist die Gleichung (3.6), bzw. die sich daraus ergebende äquivalente Beziehung

$$\mathbf{div} \sigma(\vec{x}) = -\vec{f}(\vec{x}).$$

Für den dreidimensionalen Fall heißt das

$$\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x_3} = -f_1(\vec{x}) \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \sigma_{21}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial x_3} = -f_2(\vec{x}) \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \sigma_{31}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial x_3} = -f_3(\vec{x}). \quad (3.11)$$

Die Komponenten von ε werden mithilfe von (3.1) durch die einzelnen Komponenten von \vec{u} dargestellt:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \\ \varepsilon_{22} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) = \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \\ \varepsilon_{33} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right) = \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \\ \varepsilon_{12} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \\ \varepsilon_{13} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \\ \varepsilon_{23} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right). \end{aligned}$$

Beim Einsetzen dieser Beziehungen in (3.8) erhält man für die Komponenten des Spannungstensors

$$\begin{aligned}
\sigma_{11} &= k \left[(1 - \lambda) \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \nu \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \nu \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right] \\
\sigma_{22} &= k \left[\nu \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + (1 - \lambda) \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \nu \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right] \\
\sigma_{33} &= k \left[\nu \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \nu \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + (1 - \lambda) \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right] \\
\sigma_{12} &= k(1 - 2\nu) \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \\
\sigma_{13} &= k(1 - 2\nu) \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \\
\sigma_{23} &= k(1 - 2\nu) \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right)
\end{aligned}$$

mit

$$k = \frac{E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}.$$

Mithilfe der Lamé-Konstanten

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad (3.12)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (3.13)$$

lassen sich die Produkte $k\nu$, $k(1 - \nu)$ und $\frac{1}{2}k(1 - 2\nu)$ vereinfachen zu

$$k\nu = \frac{E\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} = \lambda$$

$$k(1 - \nu) = \frac{(1 - \nu)E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} = \frac{\lambda}{\nu}(1 - \nu) = \lambda + 2\mu$$

$$\frac{1}{2}k(1 - 2\nu) = \frac{E}{2(1 + \nu)} = \mu.$$

Nun werden die Ableitungen in den Divergenzbeziehungen (3.9) bis (3.11) bestimmt.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} &= k \left[(1 - \nu) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \nu \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \nu \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} \right] \\
 &= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \lambda \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \lambda \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} \\
 \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} &= k(1 - 2\nu) \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} \right) \\
 &= \mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + \mu \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} \\
 \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x_3} &= k(1 - 2\nu) \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} \right) \\
 &= \mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2} + \mu \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3}
 \end{aligned}$$

Einsetzen der erhaltenen Beziehungen in (3.9) ergibt

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x_3} &= -f_1(\vec{x}) \\
 \lambda \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + 2\mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \lambda \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \lambda \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} + \mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + \mu \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2} + \mu \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} &= -f_1(\vec{x}) \\
 \mu \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2} \right) + (\lambda + \mu) \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} \right) &= -f_1(\vec{x}),
 \end{aligned}$$

oder in kompakter Schreibweise

$$\mu \Delta u_1 + (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial x_1} \operatorname{div} \vec{u} = -f_1.$$

Durch analoge Anwendung der Schritte auf die Gleichungen (3.10) und (3.11) erhält man entsprechende Beziehungen für f_2 und f_3 . Daraus ergibt sich die Lamé'sche Differentialgleichung

$$-\mu\Delta\vec{u} - (\lambda + \mu)\mathbf{grad}(\mathbf{div}\vec{u}) = \vec{f}.$$

Neben der Differentialgleichung ist die Festlegung von Randbedingungen nötig, um ein korrektes Randwertproblem zu formulieren. Diese werden in zwei Arten unterteilt:

- Dirichlet'sche Randbedingungen

$$\vec{u}(\vec{x}) = \vec{g}_D$$

auf einem Randstück Γ_D , d.h., es erfolgt die Vorgabe einer Verschiebung auf diesem Rand,

- Neumann'sche Randbedingungen

$$\sigma(\vec{u}) \cdot \vec{n} = \vec{g}_N$$

auf einem Randstück Γ_N , d.h., es wird eine Flächenlast auf diesem Rand aufgebracht.

Das Problem der linearen Elastizitätstheorie lässt sich nun wie folgt formulieren:

1. Elastizitätsproblem: Gesucht ist das Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{x})$ für einen elastischen Körper Ω , sodass die Lamé-Gleichung

$$-\mu\Delta\vec{u} - (\lambda + \mu)\mathbf{grad}(\mathbf{div}\vec{u}) = \vec{f} \quad \text{in } \Omega$$

zusammen mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \vec{u}(\vec{x}) &= \vec{g}_D & \text{auf } \Gamma_D \\ \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{n} &= \vec{g}_N & \text{auf } \Gamma_N \end{aligned}$$

erfüllt wird.

Dieses Problem kann auch mithilfe des Spannungstensors σ formuliert werden:

$$\begin{aligned} -\mathbf{div}\sigma(\vec{u}) &= \vec{f} & \text{in } \Omega \\ \vec{u}(\vec{x}) &= \vec{g}_D & \text{auf } \Gamma_D \\ \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{n} &= \vec{g}_N & \text{auf } \Gamma_N. \end{aligned} \tag{3.14}$$

3.1.2 Elastizitätsproblem mit exakter Hindernisformulierung [39, 53]

Damit die Verformung eines Körpers, der gegen ein Hindernis gedrückt wird, modelliert werden kann, sind einige zusätzliche Annahmen zu treffen. Die Bedingung ist hierbei, dass alle Punkte von Ω außerhalb eines vorgegebenen starren Hindernisses liegen sollen. Diese Forderung soll durch vier Gleichungen erfüllt werden, die in diesem Abschnitt kurz erläutert werden.

Die erste Beziehung

$$\vec{\mathbf{n}}^\perp \cdot \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{\mathbf{n}} = 0 \quad (3.15)$$

beschreibt die Tangentialkomponente des Kraftvektors, welcher aus der Spannung resultiert. Die Forderung, dass dieser Anteil Null ergeben soll, beschreibt also ein reibungsfreies tangenciales Gleiten im Bereich der Kontaktzone.

Die zweite Bedingung

$$u_{\vec{\mathbf{n}}} - g \leq 0 \quad (3.16)$$

mit $u_{\vec{\mathbf{n}}} = \vec{u} \cdot \vec{\mathbf{n}}$ stellt sicher, dass kein Punkt in das Hindernis eindringt. Hierbei wird g als Abstand zwischen dem durch das Verschiebungsfeld \vec{u} verschobenen Punkt \vec{x} und dem Hindernis definiert.

Als dritte Forderung ergibt sich

$$p_{\vec{\mathbf{n}}} \leq 0, \quad (3.17)$$

damit sichergestellt wird, dass kein Punkt vom Hindernis eingeschlossen wird. Der Kontaktdruck $p_{\vec{\mathbf{n}}}$ ist die Größe, die am Rand des Körpers aus dem Spannungstensor und dem Normalenvektor wie folgt gebildet wird:

$$p_{\vec{\mathbf{n}}} = \vec{\mathbf{n}} \cdot \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{\mathbf{n}}.$$

Die Relation 3.17 ergibt sich aus der Bedingung, dass dieser Kontaktdruck im Bereich der tatsächlichen Kontaktzone Γ_C im Inneren des Gebietes negativ ist.

Mit der letzten Gleichung

$$(u_{\vec{\mathbf{n}}} - g) \cdot p_{\vec{\mathbf{n}}} = 0 \quad (3.18)$$

wird gefordert, dass mindestens eine der beiden Beziehungen (3.16) und (3.17) als Gleichung

chung zu erfüllen ist. D.h., dass ein Punkt \vec{x} entweder bereits Kontakt zum Hindernis hat und deshalb ein Kontaktdruck vorliegt ($p_{\vec{n}} \neq 0$ und $u_{\vec{n}} - g = 0$) oder, dass der Punkt noch keinen Kontakt hat und deshalb kein Kontaktdruck vorliegt ($p_{\vec{n}} = 0$ und $u_{\vec{n}} - g \neq 0$).

Da in den vorangegangenen Überlegungen von kleinen Deformationen ausgegangen wurde, aber grundsätzlich auch große Deformationen möglich sind, sollen für die weiteren Betrachtungen die Gleichungen (3.16) bis (3.18) durch eine exakte Hindernisformulierung ersetzt werden.

Als Hindernis wird eine beliebige fest vorgegebene Teilmenge $\mathbb{O} \subset \mathbb{R}^d$ bezeichnet. Daraus ergibt sich die Menge der zulässigen Verschiebungen wie folgt:

$$\mathcal{K} = \left\{ \vec{u} \in [H^1(\Omega)]^d : \begin{array}{l} \vec{x} + \vec{u}(\vec{x}) \notin \mathbb{O} \quad \forall x \in \Omega, \\ \vec{n}^\perp \cdot \sigma \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{auf } \Gamma_C^v, \\ \vec{n} \cdot \sigma \cdot \vec{n} \leq 0 \quad \text{auf } \Gamma_C^v \end{array} \right\},$$

wobei Γ_C^v das Randstück von Ω beschreibt, welches Kontakt mit dem Hindernis haben könnte (kontaktverdächtige Zone). Man bezeichnet eine Verschiebung \vec{u} genau dann als zulässig, wenn $\vec{u} \in \mathcal{K}$ gilt.

Das Signoriniproblem mit exakter Hindernisformulierung lautet dann wie folgt:

2. Signoriniproblem mit exakter Hindernisformulierung: Gesucht ist das Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{x})$ für einen elastischen Körper Ω aus der Menge \mathcal{K} der zulässigen Verschiebungen, sodass die Lamé-Gleichung

$$-\mu \Delta \vec{u} - (\lambda + \vec{u}) \mathbf{grad}(\mathbf{div} \vec{u}) = \vec{f} \quad \text{in } \Omega$$

zusammen mit den Randbedingungen

$$\begin{array}{l} \vec{u}(\vec{x}) = \vec{g}_D \quad \text{auf } \Gamma_D \\ \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{n} = \vec{g}_N \quad \text{auf } \Gamma_N \\ \vec{u} \in \mathcal{K} \end{array}$$

erfüllt wird.

3.2 Grundlagen der Finiten-Elemente-Methode [39, 53]

Die Anwendung der Finiten-Elemente-Methode (FEM) für die Analyse von Schicht-Substrat-Systemen ist das entscheidende Kernthema dieser Arbeit. Deshalb sollen den wesent-

lichen Grundlagen der FEM im Folgenden besondere Aufmerksamkeit geschenkt werden.

Für die Lösung des Problems 2 ist man auf die numerische Approximationen der Lösung angewiesen. Das Ziel aller numerischen Verfahren ist die Transformation des kontinuierlichen Problems in ein diskretes Ersatzproblem, welches im Anschluss mithilfe des Computers gelöst werden kann. Neben den bereits länger existierenden Differenzenverfahren, der Finite-Volumen-Methode, der Randelemente-Methode u.a., hat sich die FEM hierfür zum standardisierten Lösungswerkzeug entwickelt.

In diesem Abschnitt soll die Herleitung der Variationsformulierung zum linearen Elastizitätsproblem erfolgen. Daran schließt sich die Spezialisierung für das allgemeine Kontaktproblem und das Kontaktproblem mit exakter Hindernisformulierung an.

Zuerst werden die Grundlagen für die numerische Lösung des linearen Elastizitätsproblems gelegt.

3.2.1 Verallgemeinerte Formulierung des Elastizitätsproblems

Für die Herleitung der verallgemeinerten Formulierung geht man von der klassischen Formulierung (3.14) aus:

$$\begin{aligned} -\mathbf{div} \sigma(\vec{u}) &= \vec{f} && \text{in } \Omega \\ \vec{u}(\vec{x}) &= \vec{g}_D && \text{auf } \Gamma_D \\ \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{n} &= \vec{g}_N && \text{auf } \Gamma_N. \end{aligned}$$

Man wählt einen geeigneten Raum für die Testfunktionen

$$\mathbb{V}_0 = \left\{ \vec{v} \in [H^1(\Omega)]^3 : \vec{v}|_{\Gamma_D} = \vec{0} \right\},$$

d.h., dass als Testfunktionen v grundsätzlich Funktionen gewählt werden, die auf dem Randstück mit Dirichlet'schen Randbedingungen Γ_D identisch Null sind, und für die Ansatzfunktionen

$$\mathbb{V}_D = \left\{ \vec{v} \in [H^1(\Omega)]^3 : \vec{v}|_{\Gamma_D} = \vec{g}_D \right\}.$$

Durch Multiplikation der Differentialgleichung mit einer Testfunktion $v \in \mathbb{V}_0$ und der Integration über Ω erhält man

$$-\int_{\Omega} \mathbf{div} \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{v} \, dx = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} \, dx.$$

Im Anschluss erfolgt die Anwendung der Green'schen Formel auf das Integral. Mithilfe des Doppelpunkt-Operators (vgl. [44]) und dem in (3.2) eingeführten $\varepsilon(\vec{v})$ erhält man eine kompakte Notation

$$-\int_{\Omega} \mathbf{div} \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{v} \, dx = \int_{\Omega} \sigma(\vec{u}) : \varepsilon(\vec{v}) \, dx - \int_{\Gamma} \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{\mathbf{n}} \cdot \vec{v} \, ds$$

Beweis:

$$-\int_{\Omega} \mathbf{div} \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{v} \, dx = -\int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ij}(\vec{u})}{\partial x_j} v_i \, dx$$

↓ Anwendung der ersten Greenschen Identität

$$\begin{aligned} &= \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij}(\vec{u}) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \, dx - \int_{\Gamma} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij}(\vec{u}) \vec{\mathbf{n}}_j v_i \, ds \\ &= \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij}(\vec{u}) \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \, dx - \int_{\Gamma} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij}(\vec{u}) \vec{\mathbf{n}}_j v_i \, ds \end{aligned}$$

↓ Anwendung von $\varepsilon(\vec{u})$ auf die Vektorfunktion \vec{v}

$$\begin{aligned} &= \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij}(\vec{u}) \varepsilon_{ij}(\vec{v}) \, dx - \int_{\Gamma} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij}(\vec{u}) \vec{\mathbf{n}}_j v_i \, ds \\ &= \int_{\Omega} \sigma(\vec{u}) : \varepsilon(\vec{v}) \, dx - \int_{\Gamma} \sigma(\vec{u}) \cdot \vec{\mathbf{n}} \cdot \vec{v} \, ds \end{aligned}$$

□

Das Integral über Γ lässt sich in zwei Teilintegrale zerlegen, eines über die Randstücke mit Dirichlet'schen Randbedingungen Γ_D und eines über die Randstücke mit Neumann'schen Randbedingungen Γ_N .

Auf dem Dirichlet-Rand Γ_D ist das Integral aufgrund der Definition des Raumes \mathbb{V}_0 der Testfunktionen gleich Null. Im Integral über Γ_N ist der Wert von $\sigma \cdot \vec{\mathbf{n}}$ durch die Funktion \vec{g}_N dargestellt. Damit ist die verallgemeinerte Formulierung des Elastizitätsproblems wie folgt gegeben:

3. Verallgemeinerte Formulierung des Elastizitätsproblems: Gesucht ist eine Funktion $\vec{u} \in \mathbb{V}_D$ für einen elastischen Körper Ω , sodass für die Bilinearform

$$a(\vec{u}, v) = \int_{\Omega} \sigma(\vec{u}) : \varepsilon(v) d\vec{x} \quad (3.19)$$

und die Linearform

$$(\vec{f}, \vec{v}) = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} d\vec{x} + \int_{\Gamma_N} \vec{g}_N \cdot \vec{v} ds \quad (3.20)$$

die Beziehung

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{f}, \vec{v}) \quad \forall \vec{v} \in \mathbb{V}_0$$

erfüllt ist.

Im Folgenden soll eine kompakte Formulierung für den drei- und zweidimensionalen Fall gegeben werden.

Unter Verwendung der Beziehungen (3.13) und (3.12), lassen sich die einzelnen Komponenten des Spannungstensors σ in (3.8) wie folgt umformen:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{11} + \lambda\varepsilon_{22} + \lambda\varepsilon_{33} \\ \sigma_{22} &= \lambda\varepsilon_{11} + (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{22} + \lambda\varepsilon_{33} \\ \sigma_{33} &= \lambda\varepsilon_{11} + \lambda\varepsilon_{22} + (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{33} \\ \sigma_{12} &= 2\mu\varepsilon_{12} \\ \sigma_{13} &= 2\mu\varepsilon_{13} \\ \sigma_{23} &= 2\mu\varepsilon_{23}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Durch die Vektorisierung des Spannungs- und Verzerrungstensors in der Form

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix}, \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{23} \end{bmatrix}$$

erhält man die Beziehung (3.21) auch in der kompakten Schreibweise

$$\sigma = \tilde{C}\varepsilon$$

mit

$$\tilde{C} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix}.$$

Unter zusätzlicher Verwendung der Matrix $B(\vec{x})$

$$B(\vec{x}) = \begin{bmatrix} x_1 & 0 & 0 \\ 0 & x_2 & 0 \\ 0 & 0 & x_3 \\ x_2 & x_1 & 0 \\ x_3 & 0 & x_1 \\ 0 & x_3 & x_2 \end{bmatrix}$$

lässt sich (3.19) schreiben als

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = \int_{\Omega} [B(\nabla)\vec{v}]^T \tilde{C} B(\nabla)\vec{u} dx,$$

wobei $B(\nabla)\vec{u} = \varepsilon(\vec{u})$ und $B(\nabla)\vec{v} = \varepsilon(\vec{v})$.

In Analogie dazu lässt sich (3.19) im zweidimensionalen Fall mit den Größen

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix}, \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix}$$

$$\tilde{C} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & \mu \end{bmatrix}$$

$$B(\vec{x}) = \begin{bmatrix} x_1 & 0 \\ 0 & x_2 \\ x_2 & x_1 \end{bmatrix}$$

kompakt formulieren als

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = \int_{\Omega} [B(\nabla) \vec{v}]^T \tilde{C} B(\nabla) \vec{u} \, dx.$$

3.2.2 Formulierung des Kontaktes

Allgemeine Kontaktformulierung

Um die Variationsformulierung des Kontaktproblems herzuleiten, ist die Beachtung der Beziehungen (3.16) bis (3.18) notwendig.

Hierzu betrachtet man die Testfunktionen $\vec{v} \in \mathbb{V}_0$ als „virtuelle Verschiebungen“. Die Menge der zulässigen Verschiebungen wird dann wie folgt definiert:

$$\mathcal{K} = \{\vec{v} \in \mathbb{V}_0 \mid v_{\vec{n}} - g \leq 0\} \quad (3.22)$$

mit g als Abstandsfunktion und $v_{\vec{n}} = \vec{v} \cdot \vec{n}$.

Durch die Betrachtung von Testfunktionen der Gestalt $\vec{v} - \vec{u}, \vec{v}, \vec{u} \in \mathcal{K}$ ergibt sich als Integralbilanz

$$\int_{\Omega} \sigma(\vec{u}) : \varepsilon(\vec{v} - \vec{u}) \, d\vec{x} = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot (\vec{v} - \vec{u}) \, d\vec{x} + \int_{\Gamma_N} \vec{g}_N \cdot (\vec{v} - \vec{u}) \, ds + \int_{\Gamma_C} p_{\vec{n}}(\vec{u})(v_{\vec{n}} - u_{\vec{n}}) \, ds.$$

Das Integral über Γ_C lässt sich zerlegen in

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_C} p_{\vec{n}}(\vec{u})(v_{\vec{n}} - u_{\vec{n}}) \, ds &= \int_{\Gamma_C} p_{\vec{n}}(\vec{u})(v_{\vec{n}} - u_{\vec{n}} + g - g) \, ds \\ &= \int_{\Gamma_C} p_{\vec{n}}(\vec{u})(-u_{\vec{n}} + g) \, ds + \int_{\Gamma_C} p_{\vec{n}}(\vec{u})(v_{\vec{n}} - g) \, ds. \end{aligned}$$

Da aus (3.18), (3.17) und (3.22) folgt, dass

$$\begin{aligned}
p_n(\vec{u})(-u_n + g) &= 0 \\
p_n &\leq 0 \\
v_n - g &\leq 0
\end{aligned}$$

gilt, ergibt sich die Ungleichung

$$\int_{\Omega} \sigma(\vec{u}) : \varepsilon(\vec{v} - \vec{u}) \, d\vec{x} \geq \int_{\Omega} \vec{f} \cdot (\vec{v} - \vec{u}) \, d\vec{x} + \int_{\Gamma_N} \vec{g}_N \cdot (\vec{v} - \vec{u}) \, ds.$$

Zusammen mit der in (3.19) definierten Bilinearform und der in (3.20) definierten Linearform ergibt sich die folgende Formulierung des Kontaktproblems mit Variationsungleichung:

4. Kontaktproblem mit Variationsungleichung: Gesucht ist das Verschiebungsfeld $\vec{u} \in \mathbb{V}_D$ für einen elastischen Körper Ω , sodass die Variationsungleichung

$$a(\vec{u}, \vec{v} - \vec{u}) \geq (\vec{f}, \vec{v} - \vec{u}) \quad \forall \vec{v} \in \mathbb{V}_0$$

für die Bilinearform aus (3.19)

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = \int_{\Omega} \sigma(\vec{u}) : \varepsilon(\vec{v}) \, d\vec{x}$$

und die Linearform aus (3.20)

$$(\vec{f}, \vec{v}) = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} \, dx + \int_{\Gamma_N} \vec{g}_N \cdot \vec{v} \, ds$$

erfüllt wird.

Dieses Problem mit Variationsungleichung ist nichtlinear in \vec{u} . Der Aufwand zur Lösung der Differentialgleichung ist demnach entsprechend hoch. Für die Lösung dieser Probleme können verschiedene Methoden verwendet werden, deren Grundlage die Umformulierung des Problems als Minimierungsproblem eines Funktionals ist.

Exakte Kontaktformulierung

Für die vorliegende Arbeit soll das Kontaktproblem mit einer Variationsgleichung und einem angepassten Raum für die Testfunktionen behandelt werden.

Hierzu betrachte man die Linearform aus (3.20)

$$\begin{aligned} (\vec{f}, \vec{v}) &= \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} \, d\vec{x} + \int_{\partial\Omega} \vec{g}_N \cdot \vec{v} \, ds \\ &= \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} \, d\vec{x} + \int_{\partial\Omega} \sigma \cdot \vec{n} \cdot \vec{v} \, ds \end{aligned}$$

Das Integral über den Rand $\partial\Omega$ kann erneut in die einzelnen Integrale über Γ_D , Γ_N und Γ_C^v zerlegt werden. Das Integral über Γ_D ist aufgrund der Gestalt der Testfunktionen \vec{v} Null, die Randbedingung für das Integral über Γ_N lautet $\sigma \cdot \vec{n} = \vec{g}_N$. Die Testfunktionen sollen nun so gewählt werden, dass das Integral über Γ_C^v

$$\int_{\Gamma_C^v} \sigma \cdot \vec{n} \cdot \vec{v} \, ds$$

ebenfalls Null wird. Die Testfunktionen werden dafür in ihre normal- und tangentialgerichteten Anteile zerlegt. Durch Umformung ergibt sich

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_C^v} \sigma \cdot \vec{n} \cdot \vec{v} \, ds &= \int_{\Gamma_C^v} \sigma \cdot \vec{n} \cdot (v_{\vec{n}} + v_{\vec{n}^\perp}) \, ds & (3.23) \\ &= \int_{\Gamma_C^v} \sigma \cdot \vec{n} \cdot \left((\vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{v})) + (\vec{n}^\perp(\vec{n}^\perp \cdot \vec{v})) \right) \, ds \\ &= \int_{\Gamma_C^v} \left(\sigma \cdot \vec{n} \cdot \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{v}) + \sigma \cdot \vec{n} \cdot \vec{n}^\perp(\vec{n}^\perp \cdot \vec{v}) \right) \, ds. \end{aligned}$$

Das Integral (3.23) wird genau dann Null, wenn die beiden Terme $\sigma \cdot \vec{n} \cdot \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{v})$ und $\sigma \cdot \vec{n} \cdot \vec{n}^\perp(\vec{n}^\perp \cdot \vec{v})$ gleich Null ergeben. Die Forderung des tangentialen reibungsfreien Gleitens, welches anhand der Gleichung (3.15) durch

$$\vec{n}^\perp \cdot \sigma \cdot \vec{n} = 0$$

beschrieben wird, erfüllt bereits eine dieser Beziehungen. Die Bedingung, dass der Kontaktdruck $p_{\vec{n}}$ negativ auf Γ_C ist (siehe (3.17)), d.h.

$$p_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \sigma \cdot \vec{n} \leq 0 \quad \text{auf } \Gamma_C$$

erfordert, dass die Beziehung

$$\vec{\mathbf{n}} \cdot \vec{v} = 0$$

erfüllt sein muss.

Mit dieser Bedingung wird der Raum der Testfunktionen definiert als

$$\mathbb{V}_{0,C} = \{\vec{v} \in \mathbb{V}_0 : \vec{\mathbf{n}} \cdot \vec{v} = 0\} \text{ auf } \Gamma_C.$$

Hiermit lässt sich das Kontaktproblem wie folgt formulieren:

5. Kontaktproblem mit Variationsgleichung: Gesucht ist das Verschiebungsfeld $\vec{u} \in \mathcal{K}$ für einen elastischen Körper Ω , sodass die Variationsgleichung

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{f}, \vec{v}) \quad \forall \vec{v} \in \mathbb{V}_{0,C}$$

für die Bilinearform aus (3.19)

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = \int_{\Omega} \sigma(\vec{u}) : \varepsilon(\vec{v}) \, d\vec{x}$$

und die Linearform aus (3.20)

$$(\vec{f}, \vec{v}) = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} \, d\vec{x} + \int_{\Gamma_N} \vec{g}_N \cdot \vec{v} \, ds$$

erfüllt wird, wobei

$$\mathbb{V}_{0,C} = \{\vec{u} \in \mathbb{V}_0 : \vec{\mathbf{n}} \cdot \vec{u}|_{\Gamma_C} = 0\}.$$

gilt.

Eine numerische Lösungsmethode für dieses Problem wird im nachfolgenden Abschnitt vorgestellt.

3.2.3 Lösung mittels der Finiten Elemente Methode [4, 5, 39, 53]

In diesem Abschnitt werden kurz die wesentlichen Grundlagen der Finiten-Elemente-Methode (FEM) dargelegt. Im Anschluss daran wird auf die Eigenschaften der Gleichungssysteme eingegangen, die aus der FEM resultieren, und es werden Auflösungsmethoden für diese Systeme vorgestellt.

Grundlagen der Umsetzung

Ausgangspunkt der FEM ist die verallgemeinerte Formulierung eines Randwertproblems. Ein Beispiel hierfür ist die in Problem 3 dargestellte verallgemeinerte Formulierung

$$a(\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{f}, \vec{v}) \quad \forall \vec{v} \in \mathbb{V}_0$$

des Elastizitätsproblems. Gesucht ist die Funktion \vec{u} in einem unendlich dimensionalen Funktionenraum \mathbb{V}_D . Da eine Lösung mithilfe des Computer so nicht möglich ist, wird vom unendlichdimensionalen Raum \mathbb{V}_D zu einer endlich dimensionalen Approximation \mathbb{V}_h des Raumes \mathbb{V}_D übergegangen. Hierzu findet eine zulässige Zerlegung Ω_h des polygonal berandeten Gebietes Ω in sogenannte finite Elemente Ω_i statt. Eine Zerlegung heißt dann zulässig, wenn

- die Vereinigung aller Elemente exakt mit dem Gebiet Ω übereinstimmt,
- zwei Elemente Ω_i und Ω_j ($i \neq j$) disjunkt sind oder einen nichtleeren Durchschnitt vom Maße Null bzgl. der Integration über diese Elemente besitzen und
- alle Ω_i polygonal berandet sind.

Für die Zerlegung allgemeiner Gebiete werden entweder teilweise krummlinig berandete Elemente verwendet oder das Gebiet Ω wird mit einer polygonalen Zerlegung angenähert. Bei nicht polygonal berandeten Gebieten muss die Approximation des Gebietes durch immer feinere Zerlegungen gegen das exakte Gebiet Ω konvergieren. Die Eckpunkte dieser Elemente werden als Knoten bezeichnet.

Nun werden den finiten Elementen sogenannte Formfunktionen p_i , in der Regel Polynome 1., 2., 3. ... Grades, zugeordnet, für die gilt, dass sie in einem Knoten des Elementes den Wert 1 und in allen anderen Knoten den Wert 0 besitzen. Die gesuchte Näherungslösung \vec{u}_h lässt sich dann komponentenweise durch die Formfunktionen darstellen.

Zur eindeutigen Definition des Polynoms auf einem Element werden, je nach Grad des Polynoms, unterschiedlich viele Stützstellen benötigt. Im einfachsten Fall, der Vernetzung durch Dreieckselemente mit linearen Formfunktionen, werden zur Festlegung der drei Freiheitsgrade drei Stützstellen benötigt. Hierzu werden die drei Knoten des Dreiecks gewählt. Abhängig vom Polynomgrad der durch die Vernetzung entstehenden Knoten erhält man durch die lineare Hülle

$$\mathbb{V}_h = \mathbf{span}\{\vec{p}_i\}_{i=1, \dots, N_h}$$

aller Formfunktionen einen endlich dimensionalen Teilraum \mathbb{V}_h des unendlich dimensionalen Raumes \mathbb{V}_D mit $\dim(\mathbb{V}_h) = N_h$. Darin ist die Approximation der gesuchten Lösung $\vec{u}(\vec{x})$ möglich mit

$$\vec{u}(\vec{x}) \approx \vec{u}_h(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{N_h} u_i \vec{p}_i(\vec{x}) \quad \vec{u} \in \mathbb{V}, \quad \vec{u}_h \in \mathbb{V}_h \quad (3.24)$$

Die Koeffizienten $u_i \in \mathbb{R}$ stellen aufgrund der Interpolationseigenschaft der Formfunktionen die Näherungswerte der Lösung in den Knoten dar und sind zu bestimmen.

Die diskrete Variationsformulierung des Problems 3 lautet dann wie folgt:

6. Diskrete Variationsformulierung der Elastizitätstheorie: Gesucht ist die Funktion $\vec{u}_h \in \mathbb{V}_h$ für einen elastischen Körper Ω , sodass die Variationsgleichung

$$a(\vec{u}_h, \vec{v}_h) = (\vec{f}, \vec{v}_h) \quad \forall v_h \in \mathbb{V}_{0h}$$

für die Bilinearform

$$a(\vec{u}_h, \vec{v}_h) = \int_{\Omega_h} \sigma(\vec{u}_h) : \varepsilon(\vec{v}_h) dx$$

und die Linearform

$$(\vec{f}, \vec{v}_h) = \int_{\Omega_h} \vec{f} \cdot \vec{v}_h dx + \int_{\Gamma_N} \vec{g}_N \cdot \vec{v}_h ds$$

erfüllt wird.

\mathbb{V}_{0h} ist hierbei das zu \mathbb{V}_0 diskrete Analogon. Es stellt die lineare Hülle aller Formfunktionen \vec{p}_i dar, die auf dem Randstück mit Dirichlet'schen Randbedingungen Γ_D Null sind.

Die Variationsformulierung ist bereits für alle v_h aus \mathbb{V}_{0h} erfüllt, wenn sie für alle \vec{p}_i des Raumes \mathbb{V}_{0h} gilt.

Zusammen mit dem Einsetzen des Ansatzes (3.24) in die diskrete Variationsformulierung 6 ermöglicht dies das Aufstellen des linearen Gleichungssystems

$$K \vec{u}_h = \vec{b} \quad K \in \mathbb{R}^{N_h \times N_h}, \quad \vec{u}_h, \vec{b} \in \mathbb{R}^{N_h} \quad (3.25)$$

mit der Steifigkeitsmatrix

$$K = [a(\vec{p}_j, \vec{p}_i)]_{i,j=1}^{N_h}$$

und der rechten Seite (Lastvektor)

$$\vec{b} = \left[(f, \vec{p}_i) \right]_{i=1}^{N_h}$$

zur Bestimmung der unbekanntenen Koeffizienten u_i des Vektors $\vec{u} = [u_1, u_2, \dots, u_{N_h}]^T$.

Die Integrale, die über dem Gebiet Ω definiert werden, lassen sich in Summen aus Integralen über die Finiten Elemente zerlegen. Die Integrale über den Rand Γ lassen sich analog in Summen aus Integralen über die Ränder der Finiten Elemente zerlegen.

Die Berechnung der Integrale ist also aufgrund der lokalen Träger der Formfunktionen besonders effektiv umsetzbar.

Die Eigenschaften der Gleichungssysteme, welche aus der speziellen Struktur der Matrix K resultieren, sollen an dieser Stelle kurz zusammengefasst werden. Sie sind für die Wahl einer geeigneten Lösungsmethode von großer Bedeutung.

- Das Gleichungssystem ist **schwach besetzt**, da die Formfunktionen nur lokale Träger besitzen und aufgrund dessen viele Einträge der Matrix K Null werden.
- Weiterhin ist das System **großdimensioniert**. Die Dimension wächst bei globaler Verkleinerung der Schrittweite h mit h^{-d} .
- Das Gleichungssystem erhält je nach Nummerierung der Knoten eine **spezielle Struktur**. So kann in speziellen Fällen eine Bandstruktur entstehen, die für die Wahl eines Lösungsverfahrens von Vorteil ist.
- Die Matrix K ist **symmetrisch und positiv definit**, d.h., dass $K = K^T$ und $\vec{x}^T K \vec{x} > 0 \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^{N_h}, \quad \vec{x} \neq 0$ gilt.
- Die Matrix K besitzt außerdem im Allgemeinen eine **schlechte Kondition**. K ist dann schlecht konditioniert, wenn das Verhältnis vom größten zum kleinsten Eigenwert

$$\kappa(K) = \frac{\lambda_{max}(K)}{\lambda_{min}(K)}$$

(bezeichnet als Konditionszahl) mit h^{-p} anwächst, wobei $p \geq 1$.

Lösung der linearen Gleichungssysteme

Für die Lösung des Gleichungssystems (3.25) gibt es direkte und iterative Lösungsverfahren.

Direkte Verfahren: Direkte Verfahren lösen das lineare Gleichungssystem in einem Verfahrensschritt und überführen die Systemmatrix in vielen Fällen in ein Produkt spezieller Matrizen, wie z.B. bei der LR-Zerlegung, der Cholesky-Zerlegung oder der QR-Zerlegung. Diese Verfahren werden vor allem zur Lösung von linearen Gleichungssystemen mit gleicher Systemmatrix, aber unterschiedlichen rechten Seiten genutzt. Aufgrund der Rechenfehler infolge der schlechten Kondition werden, durch Nichtbeachten der speziellen Struktur, die Nulleinträge der Matrix zerstört, und es entsteht ein erheblicher Fehler, dessen Größe nicht abgeschätzt werden kann.

Iterative Verfahren: Aufgrund der genannten Nachteile der direkten Verfahren sind in den letzten Jahren verstärkt iterative Verfahren verwendet worden.

Die Verfahren verändern die Systemmatrix im Allgemeinen nicht, da in jedem Iterationsschritt ausschließlich Matrix-Vektor-Multiplikationen ausgeführt werden. Das lineare Gleichungssystem aus (3.25) wird in eine iterierfähige Gestalt $\vec{u}^{k+1} = \phi(\vec{u}^k)$ überführt. Von der Startlösung \vec{u}^0 ausgehend wird eine Folge von Näherungslösungen \vec{u}^k mit der Eigenschaft

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \vec{u}^k = \vec{u}^*$$

erzeugt. Das Verfahren wird dann abgebrochen, wenn eine festgelegte Toleranz oder eine maximale Iterationszahl erreicht ist. Die bekanntesten iterativen Verfahren sind

- Gauß-Seidel-Verfahren (Einzelschrittverfahren)
- Jacobiverfahren (Gesamtschrittverfahren und Gedämpftes Jacobi-Verfahren)
- SOR-Verfahren (Successive Overrelaxation)
- Gradientenverfahren
- Methode der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren)
- Mehrgitterverfahren

Seit dem Beginn der 70er Jahre hat die Methode der konjugierten Gradienten, vor allem unter Verwendung einer Vorkonditionierung, enorm an Bedeutung gewonnen. Da sie im SPC-PM 2Ad Anwendung findet, wird die Methode der konjugierten Gradienten mit Vorkonditionierung im Nachfolgenden näher betrachtet.

Konjugiertes Gradientenverfahren mit Vorkonditionierung

Der Ausgangspunkt des Verfahrens ist ein lineares Gleichungssystem, wie z.B. (3.25)

$$K\vec{u}_h = \vec{b} \quad K \in \mathbb{R}^{N_h \times N_h}, \quad \vec{u}_h, \vec{b} \in \mathbb{R}^{N_h}.$$

Für die Beschreibung des Algorithmus wird auf die Indexschreibweise, welche aus der Diskretisierung des Problems 5 stammt, verzichtet.

Die Steifigkeitsmatrix K ist symmetrisch und positiv definit. Gesucht ist die Lösung \vec{u} dieses linearen Gleichungssystems.

Ausgehend von der Wahl eines Startvektors \vec{u}^0 erfolgt die Bestimmung der Größen $r^{(0)}$ und $s^{(0)}$ und im Anschluss daran der Beginn der Iterationen. Das konjugierte Gradientenverfahren (engl. „Conjugate-Gradient-Method“, kurz: „CG-Verfahren“) lässt sich in dem Algorithmus 1 zusammenfassen.

Algorithmus 1 CG-Verfahren

Eingabe: $u^{(0)}, k_{max}, \varepsilon$

Bestimmung von $r^{(0)} := Ku^{(0)} - b$
 $s^{(0)} := r^{(0)}$
 $k := 1$

while true do

$$\alpha^{(k)} = -\frac{(r^{(k-1)}, r^{(k-1)})}{(Ks^{(k-1)}, s^{(k-1)})}$$

$$u^{(k)} = u^{(k-1)} + \alpha^{(k)} s^{(k-1)}$$

$$r^{(k)} = r^{(k-1)} - \alpha^{(k)} Ks^{(k-1)}$$

if $[(r^{(k)}, r^{(k)}) \leq \varepsilon^2 (r^{(0)}, r^{(0)})] \vee [k > k_{max}]$ **then**

STOP

end if

$$\beta^{(k)} = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(r^{(k-1)}, r^{(k-1)})}$$

$$s^{(k)} = r^{(k)} + \beta^{(k)} s^{(k-1)}$$

$k := k + 1$

end while

Ein Ausdruck der Form (\cdot, \cdot) bezeichnet hierbei das Skalarprodukt zweier Vektoren, die Exponenten der Form (\cdot) stellen hochgestellte Indizes dar. Aus dem Algorithmus abzuleiten ist, dass die Iterationen entweder durch das Erreichen einer vorgegebenen Verbesserung

des Startresiduums mit

$$\rho^k < \varepsilon^2 \rho^0, \quad \text{wobei} \quad \rho^k = (r^{(k)}, r^{(k)})$$

abgebrochen werden, oder durch das Erreichen einer vorgegebenen maximalen Iterationszahl k_{max} .

Durch die schlechte Kondition der Steifigkeitsmatrix K werden sehr schnell hohe Iterationszahlen erreicht. Das Ziel einer Vorkonditionierung ist nun, das System (3.25) in ein äquivalentes System

$$\tilde{K} \vec{u}_h = \vec{\tilde{b}}$$

zu überführen, sodass gilt

$$\kappa(\tilde{K}) \ll \kappa(K).$$

Dieses wird durch eine symmetrische und positiv definite Vorkonditionierungsmatrix V erreicht. Die Inverse dieser Matrix wird von links an die Ausgangsgleichung multipliziert

$$V^{-1} K \vec{u}_h = V^{-1} \vec{b},$$

sodass für \tilde{K} und $\vec{\tilde{b}}$ folgt

$$\begin{aligned} \tilde{K} &= V^{-1} K \\ \vec{\tilde{b}} &= V^{-1} \vec{b}. \end{aligned}$$

Es ergibt sich das vorkonditionierte CG-Verfahren (*engl.* „Preconditioned-Conjugate-Gradient-Method“, *kurz:* „PCG-Verfahren“), welches in Algorithmus 2 zusammengefasst wird.

Algorithmus 2 PCG-Verfahren**Eingabe:** $u^{(0)}$, k_{max} , ε

Bestimmung von $r^{(0)} := Ku^{(0)} - b$
 $\omega^{(0)} := V^{-1}r^{(0)}$
 $d^{(0)} := \omega^{(0)}$
 $k := 1$

while true do

$$\alpha^{(k)} = -\frac{(\omega^{(k-1)}, r^{(k-1)})}{(Kd^{(k-1)}, d^{(k-1)})}$$

$$u^{(k)} = u^{(k-1)} + \alpha^{(k)}d^{(k-1)}$$

$$r^{(k)} = r^{(k-1)} - \alpha^{(k)}Kd^{(k-1)}$$

$$\omega^{(k)} = V^{-1}r^{(k)}$$

if $([(\omega^{(k)}, r^{(k)}) \leq \varepsilon^2(\omega^{(0)}, r^{(0)})] \vee [k > k_{max}])$ **then**

STOP

end if

$$\beta^{(k)} = \frac{(\omega^{(k)}, r^{(k)})}{(\omega^{(k-1)}, r^{(k-1)})}$$

$$d^{(k)} = \omega^{(k)} + \beta^{(k)}d^{(k-1)}$$

$$k := k + 1$$

end while

Bei der Wahl von V ist zum einen darauf zu achten, dass eine schnelle Konvergenz erfolgt. Diese Bedingung ist für $\kappa(\tilde{K}) = 1$ bei der Wahl von $V = K$ erfüllt. Das ergibt jedoch das Gleichungssystem $K\omega^{(k)} = r^{(k)}$, d.h. wieder ein Gleichungssystem mit der Systemmatrix K . Zum Anderen soll das System mit geringem numerischen Aufwand zu lösen sein. Für den Fall $V = I$ ist diese Bedingung erfüllt, allerdings hätte hierfür keine Vorkonditionierung stattgefunden.

Für die praktische Umsetzung wird deshalb ein Mittelweg zwischen diesen beiden gegensätzlichen Forderungen gewählt, welcher die Konditionszahl bei vertretbarem numerischen Aufwand verbessert.

An dieser Stelle sollen zwei Möglichkeiten der Vorkonditionierung vorgestellt werden, die auch im SPC-PM 2Ad Anwendung finden:

1. Bei der **Jacobi-Vorkonditionierung** wird die Diagonalmatrix $\mathbf{diag}(K)$ der Systemmatrix K gewählt. Hierfür ist die Lösung des Gleichungssystems aufgrund der Diagonalgestalt besonders einfach, jedoch erfolgt eine Reduktion der Iterationszahl nur bei Gleichungssystemen, die aus FE-Diskretisierungen von Randwertproblemen mit stark veränderlichen Koeffizienten resultieren.

2. Die zweite Möglichkeit ist die Anwendung sogenannter **Gitter-Hierarchien**. Vor allem für Gleichungssysteme, die aus FE-Diskretisierungen zweidimensionaler Gebiete resultieren, sind diese Ansätze, die Diskretisierungen über benachbarte Gitter verwenden, geeignet. Beispiele für solche hierarchischen Vorkonditionierungen sind die Ansätze von H. Yserentant und der BPX-Vorkonditionierer von Bramble, Pasciak und Xu. [39, 53]

3.2.4 Vorstellung eines adaptiv arbeitenden FE-Algorithmus [39, 40]

In Abschnitt 3.2.3 wurde bereits die Grundidee der Vernetzung des Gebietes Ω beschrieben. Mit der Verfeinerung des Netzes werden genauere Lösungen erzielt, jedoch auch Rechenzeiten stark erhöht. Durch eine optimale Vernetzung kann erreicht werden, dass der Fehler in allen Teilen der Diskretisierung annähernd gleich groß ist und eine bestimmte Approximationsgüte über Ω erreicht wird. Diese gesuchte Vernetzung wird durch eine adaptive Netzverfeinerung erzeugt. D.h. es wird ein grobes Startnetz eingelesen und Schritt für Schritt nur an den Stellen verfeinert, an denen der Fehler noch zu groß ist. In allen anderen Regionen bleibt das Netz bestehen oder wird sogar wieder vergrößert.

Der Algorithmus der adaptiven Netzverfeinerung soll hier kurz erläutert werden.

Algorithmus 3 Adaptive Netzverfeinerung

Eingabe: Ω , $\varepsilon > 0$, $\gamma = 0.8$

Festlegen der Anfangsvernetzung Γ_{h_0} für Ω und setzen $k := 0$

while true do

1. Lösen des diskreten Problems mit der Vernetzung Γ_{h_k}
2. Berechnen des Fehlers η_E für alle Kanten E und setzen $\eta_k := \max_E \eta_E$

if $\eta_k \leq \varepsilon$ **then**

STOP

end if

3. Markieren aller Kanten E mit $\eta_E^2 \geq \gamma \cdot \eta_k^2$

if Anzahl der Kanten zu gering (unter 10%) **then**

Setzen $\gamma := \gamma \cdot 0.5 \rightarrow$ und gehen zu 3.

else

4. Teilen aller markierten Kanten und verfeinern aller betroffenen Elemente mit entsprechender Verfeinerungsstrategie

5. Setzen $k := k + 1$ und speichern der vorhandenen Vernetzung als Γ_{h_k}

end if

end while

Zusammen mit den bisher gemachten Überlegungen zur Funktionsweise der FEM und der Grundidee der adaptiven Vernetzung ist es möglich, einen FE-Algorithmus zu erstellen, welcher eigenständig die Stellen des Netzes erkennt und verfeinert, die noch nicht der geforderten Genauigkeit der Approximation genügen. Die Abbildung 3.2 skizziert einen entsprechenden Algorithmus.

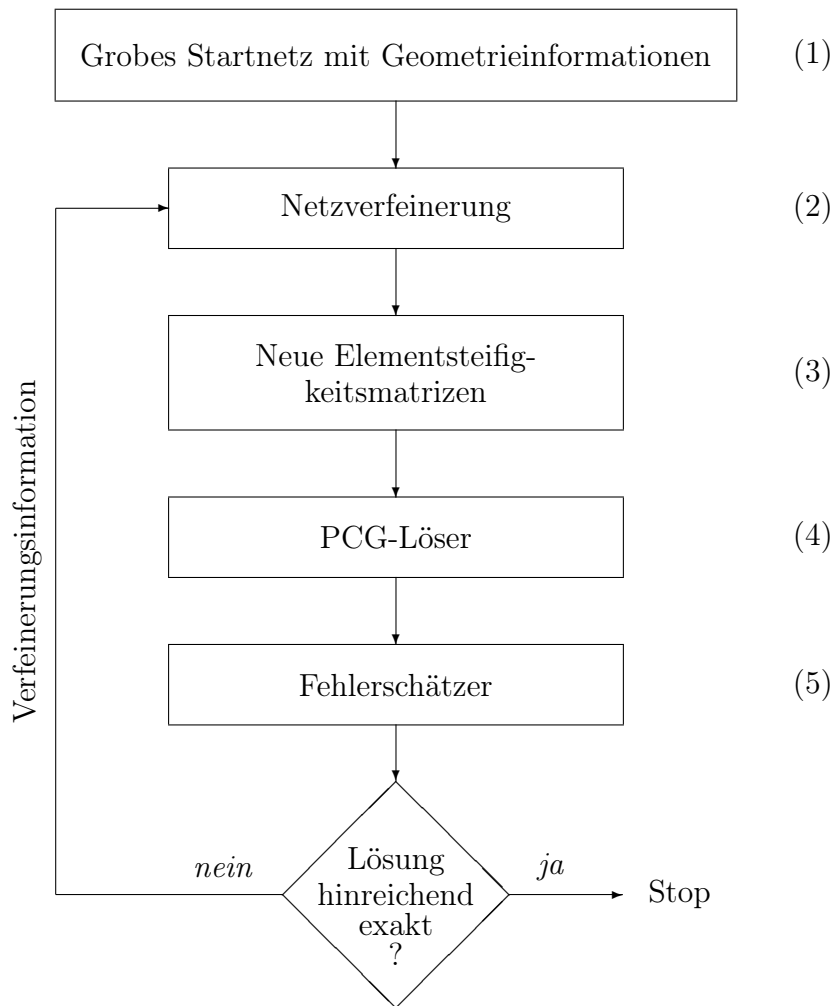


Abbildung 3.2: Schema eines adaptiven FE-Algorithmus [40]

Ausgehend von Block (1) der Abbildung 3.2 erfolgt eine Berechnung auf einem groben Startnetz, welches bereits alle Geometrieinformationen tragen muss, sodass sich das Netz bei Verfeinerung der wahren Geometrie des Gebietes Ω annähert. Im Anschluss daran beginnt die äußere Iteration des Algorithmus, die neben den inneren Iterationen, die im Block (4) stattfinden (die üblichen Iterationen des CG-Verfahrens), existiert und den Durchlauf der Blöcke (2) bis (5) beinhaltet. Sie umfassen die Netzverfeinerung (2), die

Generierung der neuen Elementsteifigkeitsmatrizen (3), das Lösen des vorhandenen Gleichungssystems (4) und den Fehlerschätzer (5).

Die Verschachtelung der inneren und äußeren Iterationen hat den Vorteil, dass nach einigen äußeren Iterationen die Startlösung bereits so gut ist, dass weit weniger innere Iterationen zum Erreichen einer brauchbaren Genauigkeit benötigt werden.

Der Algorithmus findet in der vorliegenden Arbeit, integriert im SPC-PM 2Ad, seine Anwendung. [39, 40, 53]

Kapitel 4

Stand der Technik

„... es läuft die Zeit, wir laufen mit.“

(Wilhelm Busch)

4.1 Anwendung numerischer Lösungsverfahren

Mit der Entwicklung leistungsstarker Computer erlangten die numerischen Lösungsverfahren immer mehr an Bedeutung. Die Finite Elemente Methode ist hierbei am häufigsten in der Literatur zu finden.

Im Artikel [51] aus dem Jahr 1995 wird das Kontaktproblem anhand eines Modells betrachtet, welches zu heute vergleichsweise wenig Knoten (1 376) und Elemente (481 quadratische 8-Knoten-Elemente und 25 4-Knoten-Kontaktelemente) besitzt. Seine Dimension beträgt $40 \mu\text{m} \times 42 \mu\text{m}$, der Indenterradius beträgt $100 \mu\text{m}$. Unter der Anwendung des FE-Programms ABAQUS[®] und der Verwendung verschiedener Schicht-Substrat-Systeme (TiN/Stahl , TiN/Ti , Ti/Al) und verschiedener Schichtdicken ($0 \mu\text{m}$ bis $9 \mu\text{m}$) werden die plastischen Verformungen näher betrachtet.

Die Ergebnisse zeigen, dass plastische Verformungen bei einem unbeschichteten Substrat in einem gewissen Bereich unter der Substratoberfläche auftreten und bei relativ weichem Material schnell sehr groß werden. Sie zeigen weiterhin, dass die plastischen Deformationen im System immer zuerst innerhalb des Substrats im Bereich des Übergangs von der Beschichtung zum Substrat auftreten. Es wird veranschaulicht, dass lediglich bei sehr dicken Beschichtungen auf einem überaus harten Substrat (z.B. Schnellarbeitsstahl) plastische Verformungen zuerst in der Beschichtung auftreten.

Im Vergleich dazu werden in den Untersuchungen in [33] aus dem Jahr 2000 bereits beachtlich mehr Elemente verwendet. Es handelt sich hierbei um die Analyse des Kontaktproblems im Dreidimensionalen. Betrachtet wird ein kubisches Modell mit einem Volumen von 10mm^3 und einer Vernetzung mit 219 615 Knoten. Die Elementgrößen betragen im

der Länge und Breite, aufweisen. Der besondere Vorteil dieser Methode besteht darin, dass für geänderte Schichtdicken keine bzw. nur eine geringfügige Neuvernetzung notwendig ist.

In [36] wird diese erweiterte BEM zur mechanisch-thermischen Analyse von thermischen Isolationsschichten verwendet.

4.2 Weitere theoretische Methoden

4.2.1 Analytische Methoden

Falls es die Problemstellung zulässt, wird versucht, partielle Differentialgleichungen analytisch zu lösen. Der Vorteil dieser Methode besteht darin, dass keine genäherten, sondern exakte Lösungen ermittelt und feine Details der Spannungs- und Dehnungsfelder eher aufgefunden werden. Die Umsetzung der analytischen Lösung auf dem Rechner benötigt außerdem sehr viel weniger Zeit, als die numerische.

In [3, 45, 47, 48] wird das Kontaktproblem kugelsymmetrischer Indenter auf Schicht-Substrat-Systemen entsprechend Abbildung 4.2 analytisch gelöst.

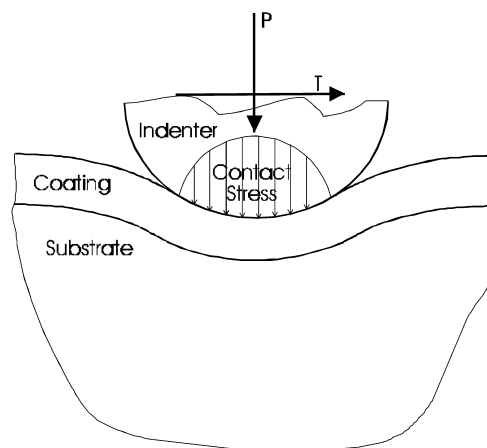


Abbildung 4.2: Schema des Kontaktproblems [45]

In [48] wird der Verbund aus einkristallinem Silikon (Si) als Substrat und einer Titannitrid(TiN)-Beschichtung untersucht. Der Kugelindenter hat einen Durchmesser von $5 \mu m$ und besteht aus Diamant.

Die Ermittlung der Deformation und der vorherrschenden Spannungen werden für Schichtdicken von $0.4 \mu m$ und $0.2 \mu m$ durchgeführt. Hierbei steht das nicht elastische Verhalten des Systems unter der Nutzung der von-Mises-

Vergleichsspannung im Vordergrund. Die Ergebnisse zeigen, dass eine Kraft-einwirkung von mehr als 40 mN plastische Verformungen hervorruft.

Die Untersuchungen [3, 47] zeigen weiterhin, dass die Ergebnisse der numerischen und analytischen Methode gut übereinstimmen.

In [47] werden die Ergebnisse mittels eines Eindringtiefe-Kraft-Diagramms miteinander verglichen. Die Berechnung des FE-Modells erfolgt dabei mit ANSYS[®]. Das hier angewendete Modell besitzt 1088 Knoten und 330 isoparametrische, quadratische 8-Knoten-Elemente. Die Dimension des Modells beträgt 264 μm in der Länge und in Abhängigkeit von der Schichtdicke 334 μm bis 348 μm in der Breite. Der Wert der Schichtdicke befindet sich im Intervall [4 μm , 18 μm].

Verglichen werden die Radialspannungen σ_r für sechs verschiedene Systeme, die der Tabelle 1 in [47] zu entnehmen sind. Die Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung zwischen den analytischen und den numerischen Lösungen, wobei die Vorteile der jeweiligen Methode aufgezeigt werden:

- die numerischen Methoden können Systeme auch mit plastischem Materialverhalten analysieren,
- analytische Methoden benötigen weniger Rechenzeit.

Eine ähnliche Untersuchung erfolgt in [3] mit veränderten Materialien und Dimensionen. Auch hier stimmen die Ergebnisse beider Methoden überein. Ein weiteres Ergebnis der Betrachtung ist, dass die Größenordnung der von-Mises-Vergleichsspannung und die Lage ihres Maximums stark vom Reibkoeffizienten und vom E-Modul-Verhältnis $\frac{E_C}{E_S}$ (E_C beschreibt das E-Modul der Beschichtung und E_S das E-Modul des Substrates) abhängen. Eine Erhöhung des Reibkoeffizienten oder des E-Modul-Verhältnisses erhöht den Wert der von-Mises-Vergleichsspannung, eine Vergrößerung der Schichtdicke verringert sie. Der Einfluss der Schichtdicke auf die Spannungsverteilung erhöht sich zudem, wenn gilt $\frac{E_C}{E_S} \gg 1$.

Das Programm ELASTICA[®] der Firma ASMEC, welches in dieser Arbeit zu Vergleichszwecken Anwendung findet, beruht ebenfalls auf der analytischen Methode und liefert Lösungen, die sowohl mit den numerischen, als auch mit den experimentell ermittelten Lösungen gut übereinstimmen.

In [7, 8, 10, 42] werden die Lösungen des Kontaktproblems kugelsymmetrischer Indenter, die mit Elastica und unter der Verwendung des Nanoindenters UMIS-2000 (CSIRO, Lindfield, Australien) ermittelt wurden, miteinander verglichen.

Die Untersuchungen beschränken sich hierbei auf den rein elastischen Materialbereich, was die Anwendung hinreichend großer Kugelindenter, mit einem Radius von mindestens $4 \mu m$, sowie relativ geringe Eindringtiefen, höchstens $\frac{1}{10}$ der Schichtdicke, nötig macht. Für eine Analyse von Systemen mit einer Schichtdicke unter $0.5 \mu m$ ist diese Methode jedoch nicht praktikabel. Für die Untersuchungen werden vorrangig Halbleiterschichten verwendet.

Die Spannungen werden für eine kritische Belastung ermittelt, für die die Verformungen noch rein elastisch sind. Die Untersuchungen dienen der Entwicklung optimaler Schicht-Substrat-Systeme, die für diesen Fall der Beanspruchung besonders widerstandsfähig sind.

Für alle Untersuchungen ist die Bestimmung des E-Moduls unumgänglich. Hierfür wird geprüft, ab welcher Belastung plastische Verformungen auftreten. Die Bestimmung der Querkontraktionszahl ist im Vergleich dazu nicht notwendig. Sie kann geschätzt oder z.B. aus der Literatur entnommen werden, da selbst ein Fehler von 20 – 30 % nur geringe Auswirkungen auf die Ergebnisse hat.

Neben der Analyse des Kontaktproblems kugelsymmetrischer Indenter wurden auch analytische und experimentelle Untersuchungen unter der Benutzung spitzer Indenter, wie Vickers und Berkovich, durchgeführt. [9, 46]

Der Vorteil dieser Indenter besteht darin, dass die Analyse für Modelle mit einer Beschichtung sogar unter 100 nm Dicke gute Ergebnisse liefert. Bei experimentellen Untersuchungen im Nanobereich findet der Berkovich-Indenter deshalb vorrangig Anwendung.

In [9] findet außerdem der sogenannte Scratch(Kratz)-Test Anwendung, bei dem eine Diamantnadel mit einer vordefinierten Geschwindigkeit und Kraft über die Oberfläche geführt wird. Mit dieser Art der Untersuchung kann festgestellt werden, welchen Einfluss die Reibung auf den Zusammenhalt des Schicht-Substrates, d.h die Bindung zwischen der Schicht und dem Substrat, hat.

4.2.2 Molekulardynamik

Die Molekulardynamik gehört zu den gitterfreien Methoden zur Lösung partieller Differentialgleichungen und gibt keine präzise Vorhersage über das Systemverhalten ab, sondern ermittelt das wahrscheinliche Verhalten eines durchaus auch nur teilweise bekannten Systems. Sie bezeichnet die computerunterstützte Simulation im Molekulardesign, wobei Wechselwirkungen zwischen Atomen und Molekülen berücksichtigt werden.

Die Methode beschreibt dabei die Bewegung von Atomen und Molekülen anhand der Lösung ihrer klassischen Bewegungsgleichung

$$\sum_i \vec{F}_i = m \cdot \vec{a},$$

die die räumliche und zeitliche Entwicklung eines physikalischen Systems unter dem Einwirken einer Kraft F vollständig beschreibt. Diese Kraft wird durch äußere Kräfte und durch Teilchenwechselwirkungen bestimmt. Hierzu ist die Modellierung von Potentialen (z.B. Lennard Jones Potential) notwendig.

Es erfolgt die Bestimmung der zeitlichen Entwicklung mittels zeitdiskreter Integration und die Berechnung der charakteristischen Größen innerhalb jedes Zeitschrittes. [20]

Da bei der Berechnung die Atome bzw. Moleküle einzeln modelliert werden, ist diese Methode auf die Simulation im Nanobereich beschränkt, findet jedoch aufgrund der heute verfügbaren Rechentechnik immer häufiger Anwendung. [2]

Neben der Anwendung in der Strukturmechanik erfolgt die Nutzung von gitterfreien Methoden auch in vielen weiteren Bereichen:

- Simulation der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen [30]
- Simulation Interaktion zwischen Fluiden und flexiblen Strukturen [52]
- Lösung der Poisson-Gleichung [31] u.a.

In [43] liegt der Fokus auf der Echtzeitvisualisierung und rechnergesteuerte molekulardynamische Simulation von Problemen der Materialwissenschaft (Abbildung 4.3). Diese Simulation ist für die Analyse von Materialdefekten notwendig.

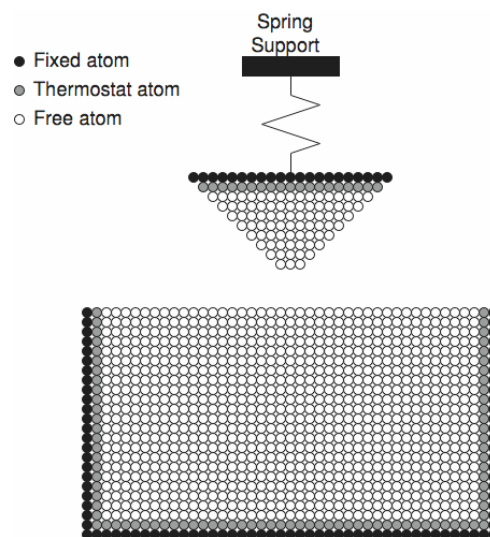


Abbildung 4.3: Aufbau des Molekulardynamik-Modells eines Nanoindruckversuchs [43]

In [35] werden Untersuchungen durchgeführt, die das Gefüge aus einem Kupfer(*C*)-Substrat und einer einkristallinen Nickel(*Ni*)-Beschichtung mittels der Molekulardynamik auf Versagen (Rissbildung und Verlagerungen) bei Einwirkung eines Kugelindenters überprüft.

Das simulierte Modell besitzt 57 900 Atome, auf 22 Atomschichten verteilt, davon befinden sich in der Beschichtung 16 428 Atome auf 16 Atomschichten. Das Substrat besteht aus 41 472 Atomen, auf 6 Atomschichten verteilt. Die Abmessungen des Modells betragen $13.93\text{ nm} \times 13.93\text{ nm} \times 4.09\text{ nm}$. Der einwirkende Indenter besitzt einen Durchmesser von 7.58 nm und ist mit 1 518 Atomen modelliert. Seine Härte wird als unendlich angenommen.

Für die Untersuchungen werden mehrfach aufeinanderfolgende Zusammenstöße zwischen dem Indenter und dem Schicht-Substrat unter der Verwendung hoher Frequenzen (bis zu $1.25\text{E}+13\text{ Hz}$) simuliert. Die Ergebnisse zeigen die sich ändernden Spannungszustände, die starke Verschiebungen und Rissbildungen innerhalb des Systems zur Folge haben.

Teil II

Experimente und Ergebnisse

Kapitel 5

Eigene Berechnungen

„Das, wobei unsere Berechnungen versagen, nennen wir Zufall.“

(Albert Einstein)

5.1 Verwendete Programme und Hardwarekombinationen

Die Ergebnisse in dieser Arbeit wurden mithilfe verschiedener Programme ermittelt, eine analytische Lösung mittels Elastica[®] und numerische Lösungen mit dem FEM-Programm ANSYS[®] und dem adaptiven finiten Elemente Codes SPC-PM 2Ad. An dieser Stelle werden diese kurz vorgestellt.

5.1.1 ELASTICA[®]

Elastica[®] bietet die Möglichkeit, elastische Spannungs- und Deformationsfelder für beschichtete Bauteile unter mechanischer Lasteinwirkung analytisch zu berechnen. Zudem interpretiert das Programm Eindruck-, Scratch- und Verschleißexperimente physikalisch exakt und berechnet die Position und Ausmaße der Kontaktfläche genau und stellt diese dar. Die Rechnungen sind durch die Nutzung komplett analytischer Lösungen der Kontaktprobleme um ein Vielfaches schneller als FE-Rechnungen. Dies ermöglicht eine umfangreiche Variation aller Parameter und deren Optimierung. Elastica[®] hat den Vorteil, dass die lasttragende Kapazität von beschichteten Systemen schnell abgeschätzt werden kann. Es optimiert Beschichtungen zum mechanischen Schutz und unterstützt beim Schichtsystemdesign. Es bietet außerdem die Möglichkeit, Schichten von wenigen Nanometern bis hin zu mehreren Metern zu untersuchen.

Das Programm besitzt aber den Nachteil, dass die Berechnungen auf homogene und isotrope Schicht-Materialien beschränkt sind und der Kontakt reibungsfrei anzunehmen ist.

Weiterhin können ausschließlich vordefinierte Modelle berechnet werden. So ist die Berechnung z.B. auf Schicht-Substrate mit maximal drei Schichten und einer Indentierung mittels Brinellindenter beschränkt. Weitere mögliche Modelle sind Schicht-Substrate mit keiner oder mit zwei Schichten und einer zylindrischen Stempelindentierung und unbeschichtete Schicht-Substrate mittels Rockwellindentierung. [1]

Die Untersuchungen erfolgten mit der Version Elastica[®] 3 der Firma ASMEC Advanced Surface MECHANICS GmbH.

5.1.2 ANSYS[®]

„ANSYS[®] ist ein General-Purpose-Programm. Es bietet Berechnungsmöglichkeiten im Bereich linearer und nichtlinearer Strukturanalysen, Temperaturfelder, Akustik, Fluidodynamik und für gekoppelte Feldanalysen. Als Lösungsverfahren stehen direkte und iterative Gleichungslöser zur Verfügung. ANSYS[®] besitzt eine sehr umfangreiche Elementebibliothek für den zwei- und dreidimensionalen Fall. Für die Vernetzung können automatisch oder vom Benutzer generierte Dreieck-, Viereck-, Quader- oder Tetraeder-Elemente verwendet werden.“ [2], S.43

Der Vorteil des Programms ist die benutzerfreundliche Oberfläche. Hierzu zählen sowohl das Modellieren verschiedener Geometrien, als auch das einfache Auslesen von Ergebnissen.

Nachteilig ist hierbei, dass die Netzverfeinerung nicht automatisch vom Programm übernommen wird. Mit einem zu fein gewählten Netz kann die Rechenzeit somit schnell ansteigen, bzw. könnten die Ergebnisse mit einem groben Netz sehr ungenau sein.

Für die in dieser Arbeit vorgenommenen Berechnungen stand eine CADFEM ANSYS[®] 10.0 Academic Research Licence zur Verfügung.

5.1.3 Adaptiver finite Elemente Code SPC-PM 2Ad

Der adaptive finite Elemente Code SPC-PM 2Ad ist ein numerisch adaptiv arbeitendes Programm, dessen Vorteil die auf Hanging Nodes aufbauende automatische Netzverfeinerung ist. Somit ist die Berechnungszeit nahezu optimal. Das Programm enthält eine Routine für die Ausgabe des relativen Fehlers, welcher dank der adaptiven Vernetzung über alle Elemente gleich ist.

Nachteilig ist, dass das Programm keine benutzerfreundliche Oberfläche besitzt. Dazu gehört z.B., dass Geometriedaten und Randbedingungen über ein File eingelesen werden müssen, dessen Struktur nicht in der Programmbeschreibung erklärt ist. Weiterhin ist die Ausgabe gewünschter Werte nicht an beliebigen Stellen möglich. Diese müssen vor

der Berechnung eines neuen Modells in einer eigenen, speziell dafür geschriebenen, Subroutine definiert werden. Jedoch nehmen die Übermittlung der Geometriedaten sowie das Ausgeben gewünschter Werte bei ausführlichem Verständnis nicht mehr Zeit in Anspruch, als bei ANSYS® oder Elastica®. In [24] sind die grundlegenden Benutzungshinweise des SPC-PM 2Ad zusammengefasst.

Die Berechnungen der vorliegenden Arbeit erfolgten mit den Versionen SPC-PM 2Ad Vers.3.1.

Die Hardwarekombinationen in Verbindung mit der darauf installierten Software, die für die Berechnungen verwendet wurden, können der Tabelle 5.1 entnommen werden.

Tabelle 5.1: Übersicht der verwendete Hardware-Kombinationen

WORKSTATION 1 (FH Mittweida)	Dual Intel® 32 Bit / 1.40 GHz / 2 GB RAM Windows XP Pro SP2 CADFEM ANSYS® 11.0 Academic Teaching Introductory Licence
WORKSTATION 2 (privat)	Intel® Atom™ N280 / 1.66 GHz / 1 GB RAM Windows XP HE SP3 ASMEC Elastica® 3
WORKSTATION 3 (TBZ-PARIV)	Intel® Pentium® 4 / 2.4 GHz / 500 MB RAM LINUX open SuSE 11.1 SPC-PM 2Ad - Version: 3.1

5.2 Modellierung und Simulation

5.2.1 Modellentwicklung

Härteprüfverfahren liefern Erkenntnisse bezüglich des Verhaltens von Schicht-Substrat-Systemen, die maßgeblich zur Entwicklung neuer Oberflächenschichten und zur Optimierung von Beschichtungsverfahren beitragen. Numerische Simulationsrechnungen sollen die Kosten für diese Testuntersuchungen erheblich reduzieren. Da die Bauteilproben durch Härteprüfverfahren zerstört bzw. bedingt zerstört werden, müssen stetig neue Proben angefertigt werden. Darüber hinaus ist die Anschaffung eines solchen Härtemessgerätes sehr kostspielig.

Im Mittelpunkt der numerischen Untersuchungen stehen deshalb die Spannungen und Deformationen, die innerhalb der Schicht und zwischen Substratoberfläche und der Beschichtung auftreten. Sie sind maßgeblich für die Stabilität eines Schicht-Substrat-Systems verantwortlich. Einen weiteren bedeutenden Anteil am Verhalten dieser Systeme haben

äußere Belastungen, wie Torsion und Biegung, die bei der Verwendung beschichteter Werkzeuge durch äußere Krafteinwirkung und Temperaturänderungen auftreten. [2]

Die eigenen Berechnungen simulieren Härteprüfverfahren nach Brinell (siehe Abschnitt 2.1.2). Diese Modelle haben grundsätzlich die in Abbildung 5.1 dargestellte Struktur.

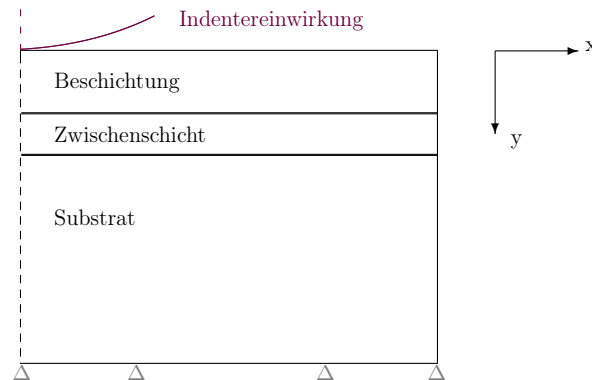


Abbildung 5.1: Modellskizze

Die Zwischenschicht wurde eingefügt, um die Schichteigenschaften in diesem Bereich besser realisieren zu können. Durch die chemische und physikalische Vorbehandlung der Substratoberfläche und die anschließende Beschichtung treten im Bereich zwischen Substrat und Beschichtung Zwischenschichten auf, für die die Materialgesetze nicht klar definiert werden können. Die Eigenschaften können für die anschließende Simulation in diesem Bereich beliebig, aber so gewählt werden, dass ihre Werte zwischen denen des Substrates und der Beschichtung liegen. Die Eigenschaften können hierbei einerseits den Substrateigenschaften angepasst werden, wodurch der Übergang von Substrat zu Beschichtung sprunghaft verläuft. Andererseits ist ein fließender Übergang in sofern möglich, dass die Materialeigenschaften der Zwischenschicht einen linearen Übergang der Eigenschaften von Substrat zu Beschichtung bilden. In der vorliegenden Arbeit wird ein Modell 1 mit einem sprunghaften und ein Modell 2 mit einem fließenden Übergang untersucht. Die Eigenschaften der Zwischenschicht ergeben sich in Modell 2 aus dem Mittelwert der Materialeigenschaften des Substrates und der Beschichtung.

Die hier verwendeten Materialgesetze stammen aus [18]. Sie wurden aus Messungen ermittelt, die für das M3-2S-Projekt durchgeführt worden sind.

Für die FE-Simulation müssen gegenüber der Realität Vereinfachungen vorgenommen werden. In der vorliegenden Arbeit wurden folgende Annahmen getroffen:

Für die Berechnungen wurden Materialgesetze verwendet, die isotrop und rein elastisch

sind. Da im Nanoindenterbereich plastisches Fließen bereits bei geringen Belastungen auftritt, werden die Kräfte so gewählt, dass rein elastische Verformungen auftreten. Durch die Betrachtung der Spannungsverteilung können aber Gebiete, in denen Risse und Schichtablösungen zu erwarten sind, eingegrenzt werden.

Weiterhin wurden die Berechnungen auf den zweidimensionalen Fall beschränkt. Diese Vereinfachung ist aus Abbildung 5.1 bereits ersichtlich und deshalb möglich, weil für den Fall der Härteprüfung nach Brinell das Modell rotationssymmetrisch bzgl. der y-Achse (Symmetrieachse) ist. Diese Annahme hat den Vorteil, dass weniger Elemente und Knoten als im dreidimensionalen Fall entstehen und demnach eine viel feinere Vernetzung und genauere Ergebnisse ermöglicht werden. Für die Simulation von Härteprüfverfahren nach Berkovich ist diese Vereinfachung nicht realisierbar, da lediglich eine Drehung um 120° um die Symmetrieachse das Modell in sich selbst abbildet.

Die Indenter werden so modelliert, dass sie fest im Raum stehen. Die Verschiebung in alle Richtungen wird dabei an allen Rändern mit Festhaltungen unterbunden. Anschließend wird das Substrat von unten mit einer vordefinierten Kraft, die im Modell als Linienlast angegeben wird, nach oben verschoben.

Der Kontakt zwischen dem Indenter und der Substratoberfläche wird als reibungsfrei angenommen.

Tabelle 5.2 gibt einen Überblick der Modelle, die für diese Arbeit berechnet wurden. Die Bezeichnungen sind hierbei wie folgt aufgebaut:

- 1. Position** Indentergeometrie (BR ... Brinell)
- 2. Position** fortlaufende Nummer der berechneten Modelle - Identische Modelle besitzen die gleiche Indentergeometrie und die gleiche Nummer
- 3. Position** verwendete Software

Tabelle 5.2: Übersicht der berechneten Modelle

SPC-PM		ANSYS [®]		Elastica [®]
BR_1_PM2D	↔	BR_1_ANSYS	↔	BR_1_ELASTICA
BR_2_PM2D	↔	BR_2_ANSYS	↔	BR_2_ELASTICA

5.2.2 Berechnung des Modells 1 - Einfache Beschichtung

Das Modell 1 simuliert das Eindringen eines Prüfkörpers nach Brinell. Für die Berechnungen gilt das in Abbildung 5.2 dargestellte Modell. Es stellt einen Schnitt durch den

Mittelpunkt des rotationssymmetrischen Systems dar. Die Zwischenschicht wurde in diesem Modell nicht integriert. Das Schicht-System besteht aus einer Titan-Nitrid(*TiN*)-Beschichtung auf einem Stahl-Substrat.

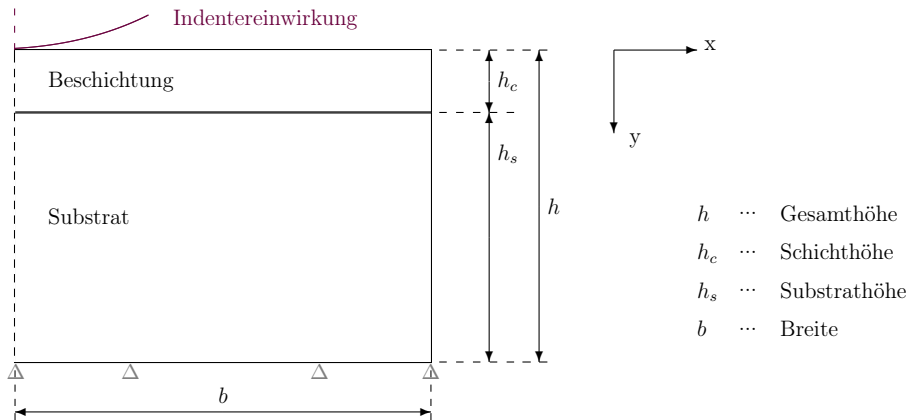


Abbildung 5.2: Skizzierung des Modells 1

Die für die nachfolgenden Berechnungen verwendeten Materialeigenschaften und Geometrieparameter sind der Tabelle 5.3 zu entnehmen.

Tabelle 5.3: Parameter des Modells 1

	Material	Breite [μm]	Höhe [μm]	Radius [μm]	E-Modul [GPa]	Querkontraktions- zahl
Indenter		50	50	50	∞	~ 0
Schicht	<i>TiN</i>	$b = 1000$	$h_c = 5$		300	0.27
Substrat	Stahl	$b = 1000$	$h_s = 995$		220	0.3

Da die ANSYS®-Version Academic Teaching Introductory Licence auf der WORKSTATION 1 als Einführungsversion in die Programmstruktur von ANSYS® gedacht ist, erlaubt es nur eine grobe Vernetzung des Gebietes. Aufgrund dieser Einschränkung wurde das Modell in ANSYS® mit Vier-Knoten-Elementen vernetzt. Es besitzt 27 115 Elemente mit 24 877 Knoten. Das Modell, welches mit dem SPC-PM 2Ad berechnet wurde, wurde mit

Acht-Knoten-Elementen vernetzt und besitzt nach 24 Verfeinerungsschritten 244 340 Elemente mit 743 543 Knoten.

Der Brinell-Indenter wird als nicht verschiebbares Hindernis im Raum definiert, d.h. seine

Verschiebung wird an allen Rändern mit Festhaltungen in alle Richtungen unterbunden. Auf ihn soll eine Kraft von 500 mN eine Sekunde lang einwirken. Dieser Sachverhalt wird in der FE-Software wie folgt definiert:

Es wird ein Druck angegeben, welcher auf der Unterseite des Substrates in positiver Richtung wirkt. Äquivalent zur Kraft von 500 mN wird ein Druck von $0,15915\text{ MPa}$ aufgebracht.

Der Kontakt zwischen Indenter und Schicht wird bei ANSYS® über ein flexibles Surface-to-Surface-Paar realisiert. Bei der Berechnung mit dem SPC-PM 2Ad wird der Kontakt als Dirichlet-Randbedingung definiert. Der Kontakt wird anschließend automatisch erkannt.

In Elastica® wird ausschließlich das entsprechende Kontaktmodell gewählt. Im Anschluss daran erfolgt die Eingabe der Materialparameter. Weitere Eingaben bzw. Umrechnungen sind nicht notwendig.

BR_1_ANSYS wurde auf der WORKSTATION 1 gerechnet. Das gleiche Modell wurde auf WORKSTATION 2 (BR_1_ELASTICA) und auf WORKSTATION 3 (BR_1_PM2D) berechnet.

Auswertung

Ausgewertet werden die Normalspannungen σ_{xx} und σ_{yy} und die von-Mises-Vergleichsspannung σ_v an den drei in Abbildung 5.3 dargestellten Wegen.

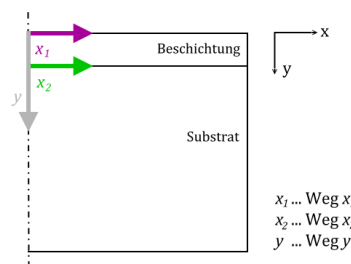


Abbildung 5.3: Gewählte Wege zur Ergebnisdarstellung

Die von-Mises-Vergleichsspannung ergibt sich aus der Formel

$$\sigma_v^2 = \frac{1}{2} \left((\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 \right) + 3 \cdot \sigma_{xy}^2.$$

Sie bezeichnet eine fiktive einachsige Spannung, die dieselben Materialbeanspruchung darstellt, wie ein realer, dreidimensionaler Spannungszustand. Mit ihr kann der Belastungszustand im Bauteil, welcher aus den Normalspannungen und den Schubspannungen besteht, direkt mit den Kennwerten aus dem einachsigen Zugversuch verglichen werden.

Hier wird zunächst der Einfluss der Verfeinerung des SPC-PM 2Ad auf die Genauigkeit der Ergebnisse untersucht. Die Abbildung 5.4 zeigt die von-Mises-Vergleichsspannung entlang Weg y . Die einzelnen Kurven repräsentieren die Ergebnisse für verschiedene Verfeinerungsschritte.

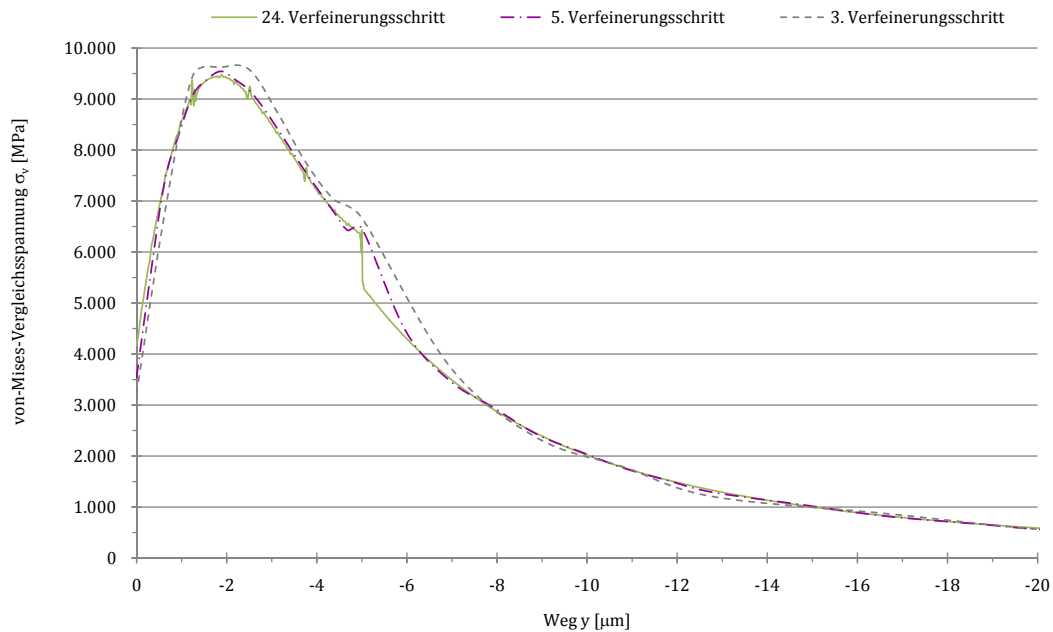
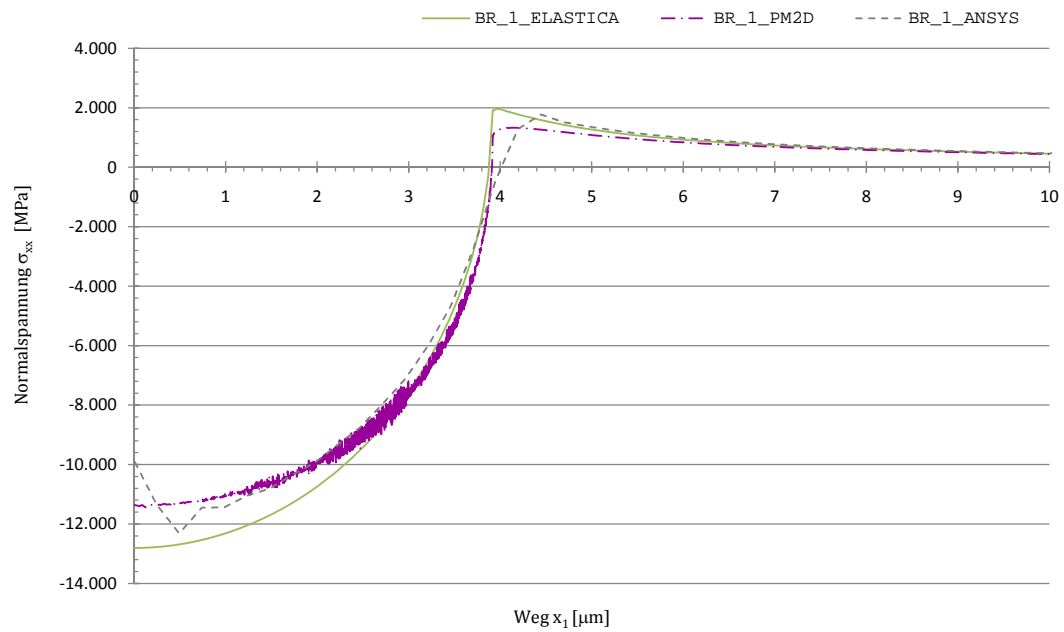


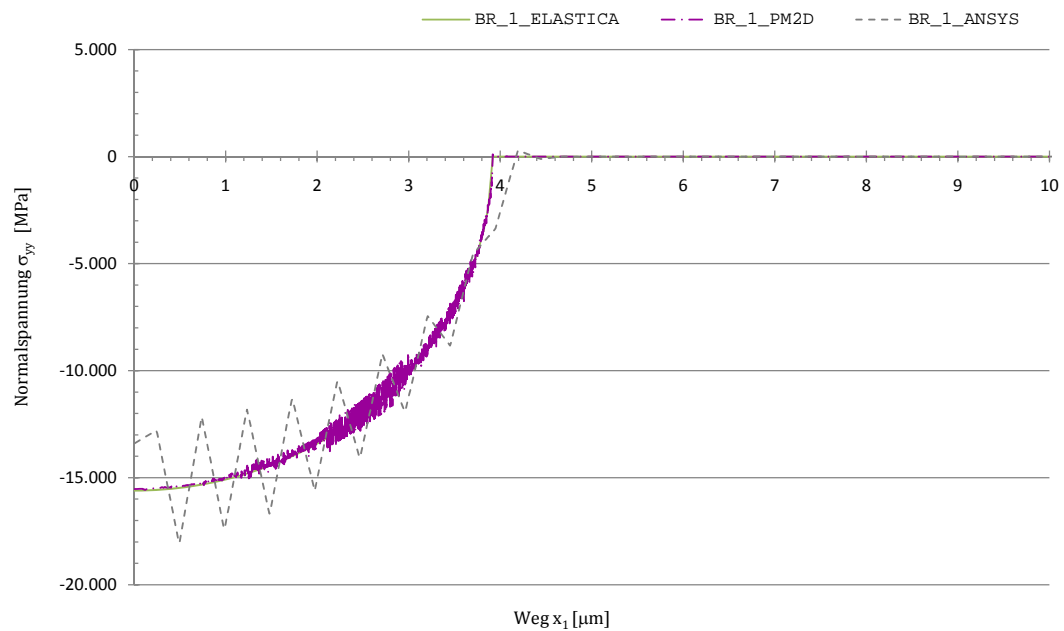
Abbildung 5.4: Vergleich der Verfeinerung mittels von-Mises-Vergleichsspannung über Weg y

Es ist zu erkennen, dass der Einfluss der Verfeinerungsschritte auf die Genauigkeit der Ergebnisse nicht sehr hoch ist. Bereits nach 5 Schritten ist eine gute Übereinstimmung mit dem genauen Ergebniss, welches nach 24. Schritten ermittelt wurde, festzustellen. Die große Abweichung im Bereich des Übergangs von Schicht zu Substrat (nach $5 \mu\text{m}$ entlang Weg y) könnte mithilfe einer besseren Regression verkleinert werden, sodass die Ergebnisse des 5. und 24. Schrittes annähernd übereinstimmen.

In Abbildung 5.5 ist ein Übergang von Druck- zu Zugspannung im Bereich von ca. $3,7 \mu\text{m}$ entlang Weg x_1 , d.h. auf der Oberfläche des Substrates ca. $3,7 \mu\text{m}$ entfernt vom Mittelpunkt des Substrates, zu erkennen. Die Folgen eines solchen Übergangs sind mögliche Rissbildungen.

Abbildung 5.5: Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg x_1

Weiterhin sind leichte Schwankungen bei den numerischen Berechnungen bis etwa $4 \mu\text{m}$ entlang Weg x_1 festzustellen. Die Abbildungen 5.6 und 5.7 zeigen jedoch noch größere Differenzen in diesem Gebiet. Diese sind auf numerische Instabilitäten in Gebieten mit großen Gradienten zurückzuführen.

Abbildung 5.6: Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg x_1

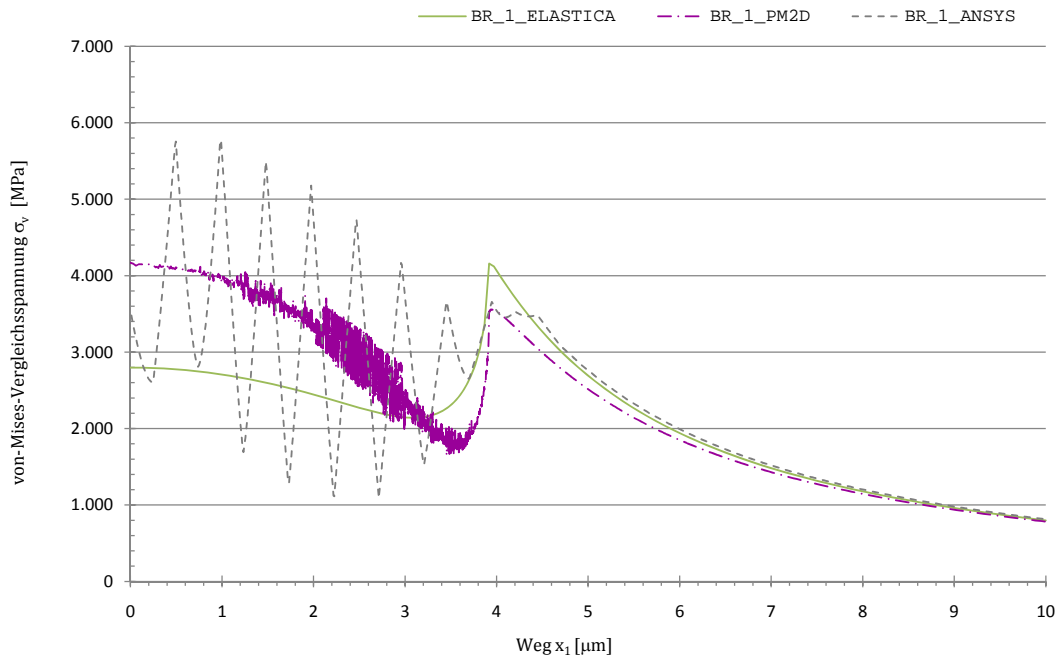
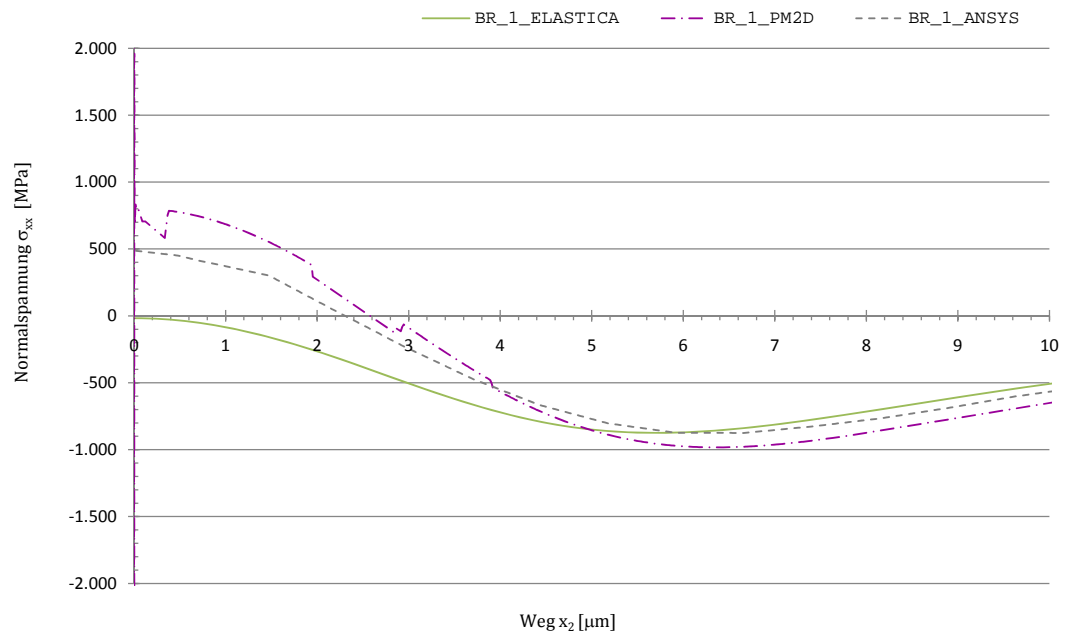
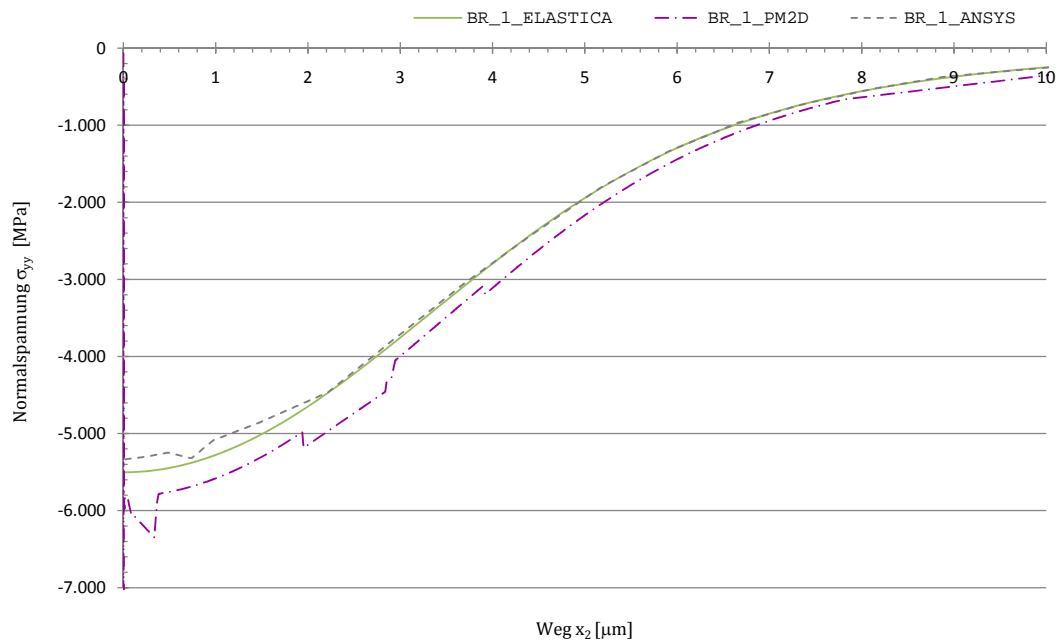


Abbildung 5.7: Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg x_1

Da sich die von-Mises-Vergleichsspannung aus den einzelnen Komponenten des Spannungstensors zusammensetzt, spiegelt sich diese Instabilität auch im zweiten Diagramm wieder und wird durch die quadratische Summierung noch verstärkt. Die Ergebnisse können auch hier mit einer geeigneten Regression wesentlich verbessert werden.

In den Abbildungen 5.8, 5.9 und 5.10, welche die Normalspannungen und die von-Mises-Vergleichsspannung entlang Weg x_2 zeigen, sind diese Instabilitäten ebenfalls zu erkennen, jedoch nicht so signifikant wie in Abbildungen 5.5, 5.6 und 5.7. Ebenfalls festzustellen ist, dass die Ergebnisse sichtbare Unterschiede zwischen den Kurven aufweisen.

Abbildung 5.8: Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg x_2 Abbildung 5.9: Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg x_2

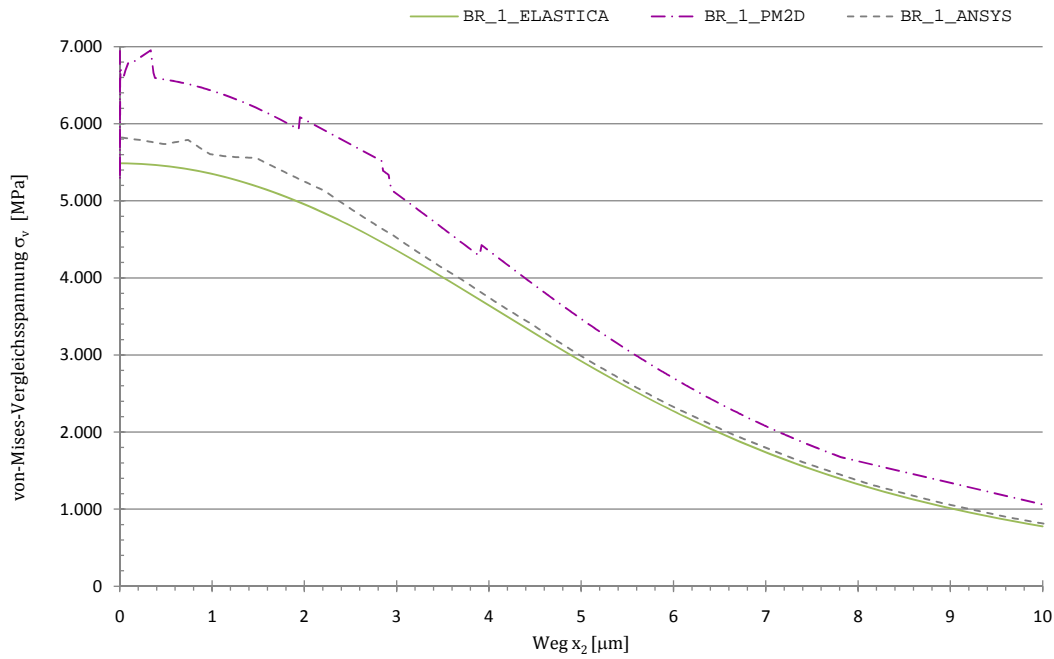


Abbildung 5.10: Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg x_2

Die Abbildungen 5.11, 5.12 und 5.13 zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse der einzelnen Programme. Hierbei sind nur minimale Unterschiede zwischen den Kurven zu erkennen.

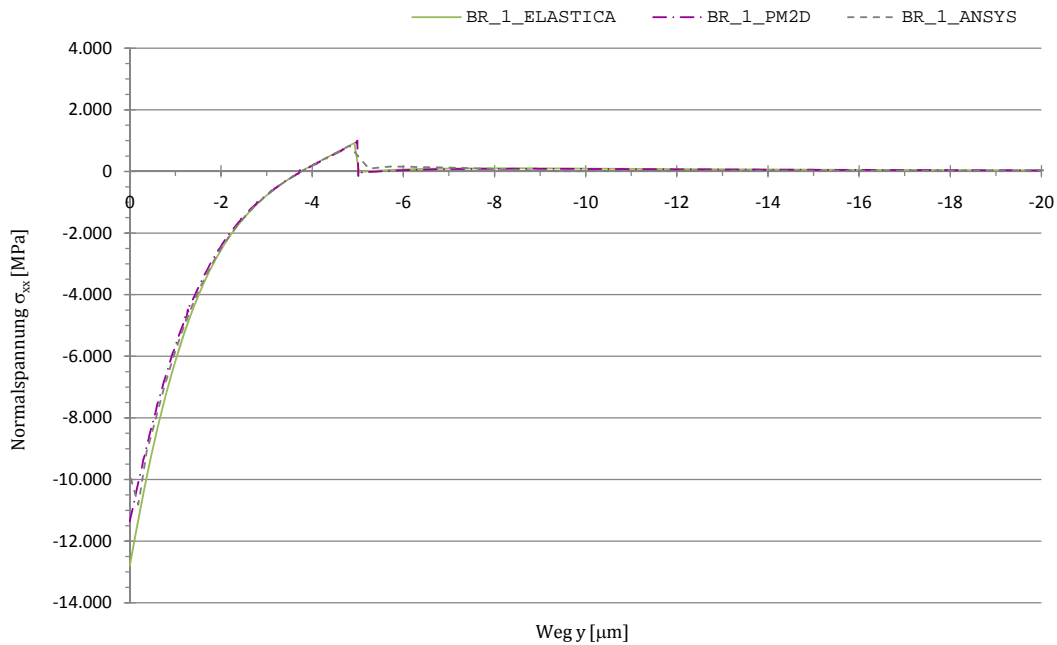
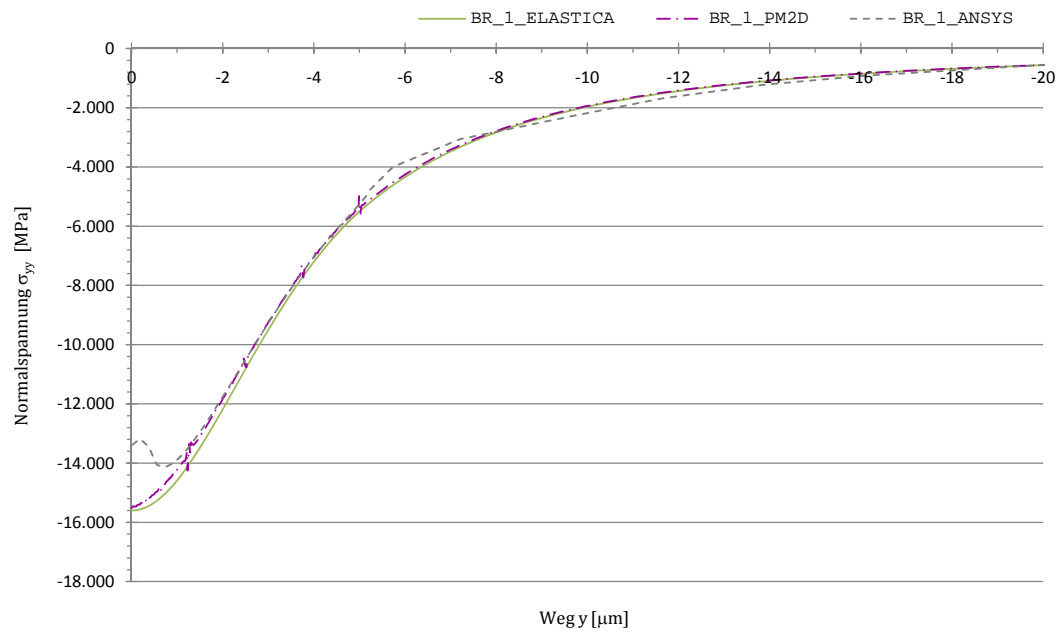
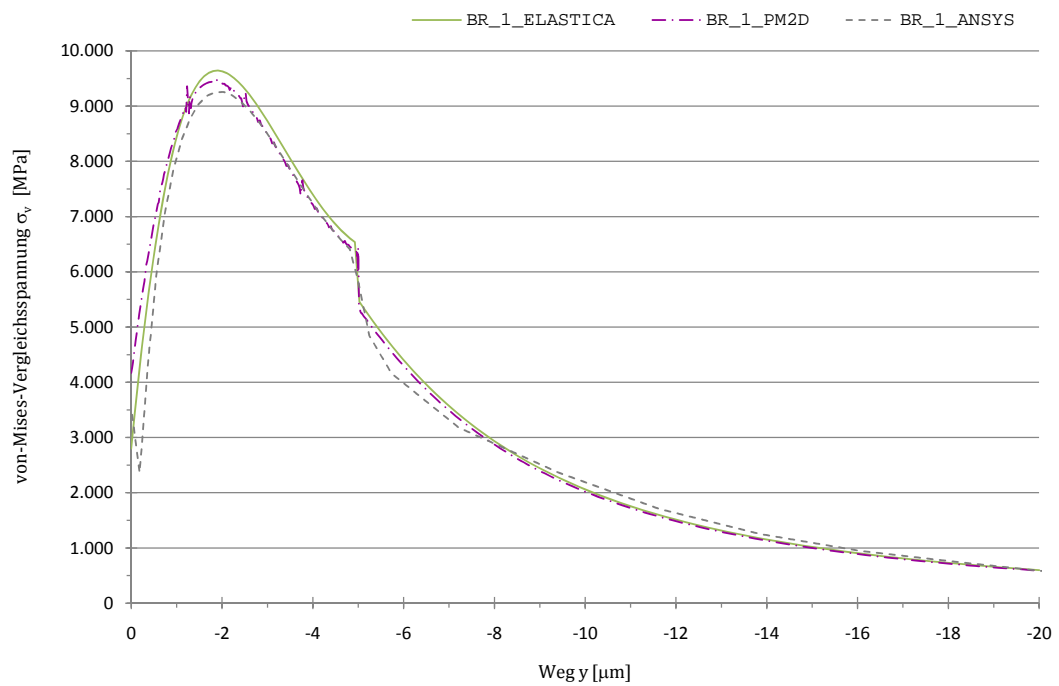


Abbildung 5.11: Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg y

Abbildung 5.12: Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg y Abbildung 5.13: Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg y

5.2.3 Berechnung des Modells 2 - Beschichtung mit Zwischenschicht

Das Modell 2 simuliert erneut das Eindringen eines Prüfkörpers nach Brinell. Für die Berechnungen gilt das in Abbildung 5.14 dargestellte Modell. Es stellt einen Schnitt durch den Mittelpunkt des rotationssymmetrischen Systems dar. Das Schicht-System besteht aus einer Titan-Nitrid(*TiN*)-Beschichtung und einer Zwischenschicht mit der Höhe h_z auf einem Stahl-Substrat. Die Materialeigenschaften der Zwischenschicht ergeben sich aus den arithmetischen Mittelwerten der Beschichtungs- und der Substrateigenschaften.

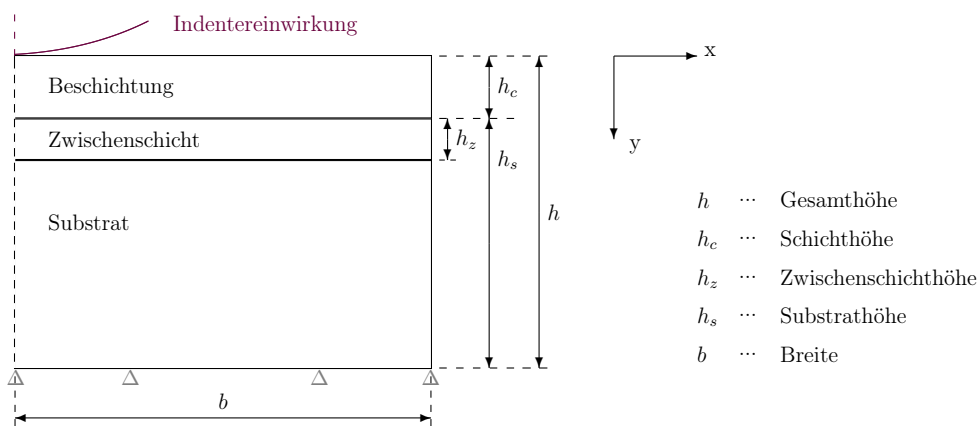


Abbildung 5.14: Skizzierung des Modells 2

Die für die nachfolgenden Berechnungen verwendeten Materialeigenschaften und Geometrieparameter sind in Tabelle 5.4 ersichtlich.

Tabelle 5.4: Parameter des Modells 2

	Material	Breite [μm]	Höhe [μm]	Radius [μm]	E-Modul [GPa]	Querkontraktions- zahl
Indenter		50	50	50	∞	~ 0
Schicht	<i>TiN</i>	$b = 1000$	$h_c = 5$		300	0.27
Zwischen- schicht		$b = 1000$	$h_z = 250$		260	0.285
Substrat	Stahl	$b = 1000$	$h_s = 745$		220	0.3

Das ANSYS®Modell wurde erneut mit Vier-Knoten-Elementen vernetzt. Es besitzt 29 141 Elemente mit 26 786 Knoten. Das Modell, welches mit dem SPC-PM 2Ad berechnet wurde,

wurde mit Acht-Knoten-Elementen vernetzt und besitzt nach 22 Verfeinerungsschritten 206 012 Elemente mit 627 675 Knoten.

Die Verschiebung des Brinell-Indenters wird mit Festhaltungen an den Rändern in alle Richtungen unterbunden. Auf ihn soll eine Kraft von 500 mN eine Sekunde lang einwirken. Dementsprechend wird ein Druck angegeben, welcher auf der Unterseite des Substrates in positiver Richtung wirkt. Äquivalent zur Kraft von 500 mN wird ein Druck von $0,15915\text{ MPa}$ aufgebracht.

Der Kontakt zwischen Indenter und Schicht wird bei ANSYS® über ein flexibles Surface-to-Surface-Paar realisiert. Bei der Berechnung mit dem SPC-PM 2Ad wird der Kontakt als Dirichlet-Randbedingung definiert. Der Kontakt wird anschließend automatisch erkannt.

In Elastica® wird ausschließlich das entsprechende Kontaktmodell gewählt. Im Anschluss daran erfolgt die Eingabe der Materialparameter. Weitere Eingaben bzw. Umrechnungen sind nicht notwendig.

BR_2_ANSYS wurde auf der WORKSTATION 1 gerechnet. Die gleiche Modell wurde auf WORKSTATION 2 (BR_2_ELASTICA) und auf WORKSTATION 3 (BR_2_PM2D) berechnet.

Auswertung

Ausgewertet werden die Normalspannungen σ_{xx} und σ_{yy} und die von-Mises-Vergleichsspannung σ_v an den drei in Abbildung 5.15 dargestellten Wegen.

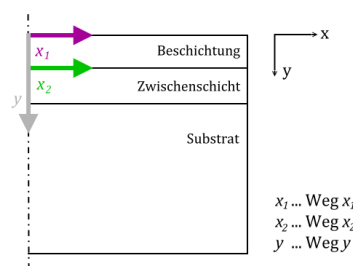


Abbildung 5.15: Gewählte Wege zur Ergebnisdarstellung

In den Abbildungen 5.16 und 5.17 sind nur minimale Unterschiede zwischen den Ergebnissen der einzelnen Programme erkennbar. Es treten aber erneut leichte Schwankungen bei den numerischen Berechnungen im Bereich bis etwa $4\text{ }\mu\text{m}$ entlang Weg x_1 auf, die durch numerische Instabilitäten verursacht werden. Diese sind jedoch nicht so groß, wie im Modell 1 zu sehen war.

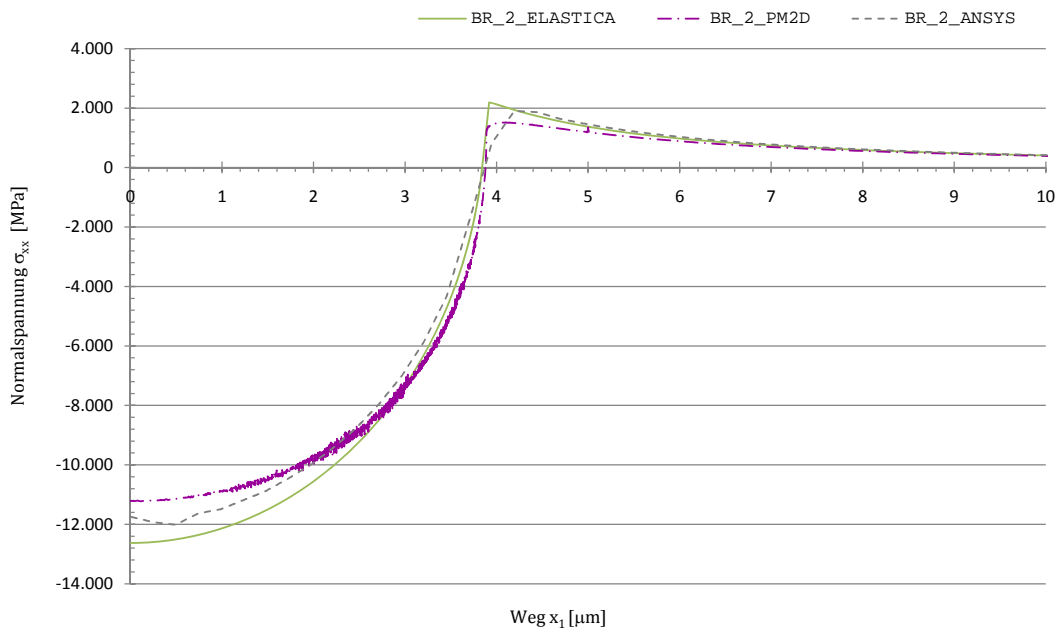


Abbildung 5.16: Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg x_1

Es ist außerdem auch hier, im Bereich von ca. $3,8 \mu\text{m}$ entlang Weg x_1 , ein Übergang von Druck- zu Zugspannung zu erkennen, wodurch Risse in diesem Gebiet hervorgerufen werden können. Obwohl der Unterschied zwischen den Materialeigenschaften zwischen der Beschichtung und der Zwischenschicht kleiner sind, als im Modell 1 zwischen der Beschichtung und dem Substrat, sind keine wesentlichen Unterschiede im Spannungsverlauf zu erkennen.

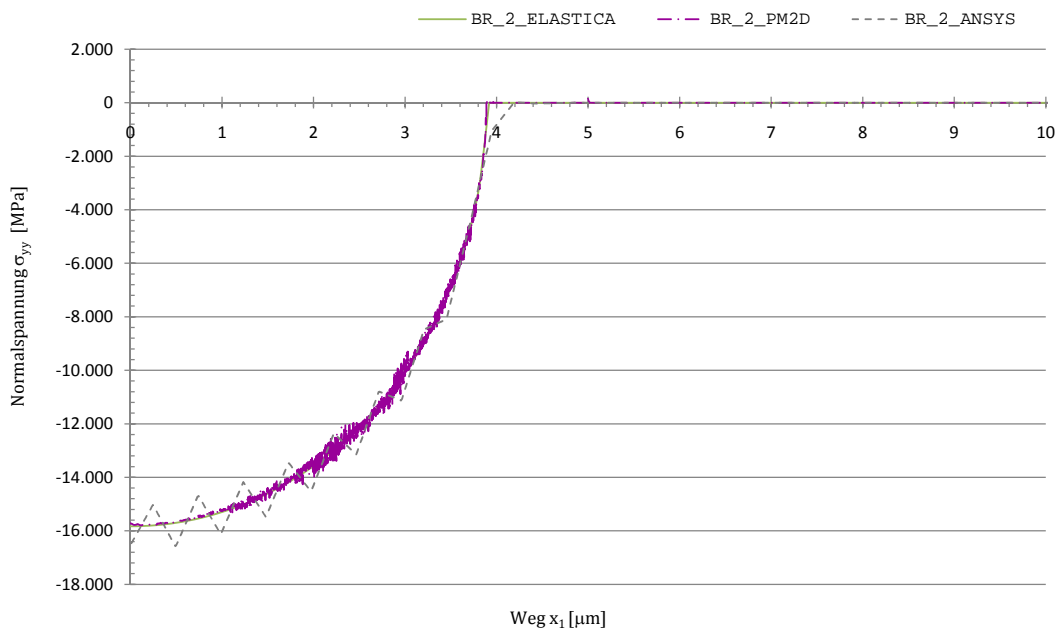


Abbildung 5.17: Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg x_1

In Abbildung 5.18 ist zu sehen, dass die von-Mises-Vergleichsspannung, die sich aus den einzelnen Komponenten des Spannungstensors mehrfach quadriert ergibt, jedoch wesentlich größere Schwankungen besitzt. Eine geeignete Regression könnte die Ergebnisse wesentlich verbessern.

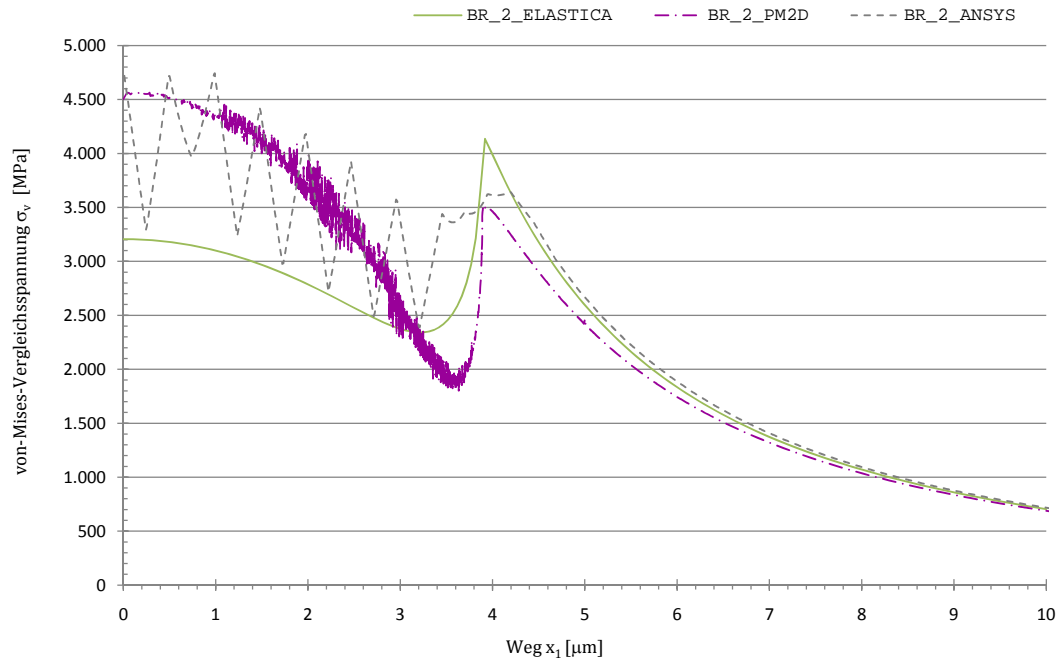


Abbildung 5.18: Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg x_1

In den Abbildungen 5.19, 5.20 und 5.21, welche die Normalspannungen und die von-Mises-Vergleichsspannung entlang Weg x_2 zeigen, sind im Vergleich zu Modell 1 keinerlei Instabilitäten zu erkennen. Weiterhin ist zu bemerken, dass weniger sichtbare Unterschiede zwischen den Ergebnisse der einzelnen Programme festzustellen sind, als in Modell 1.

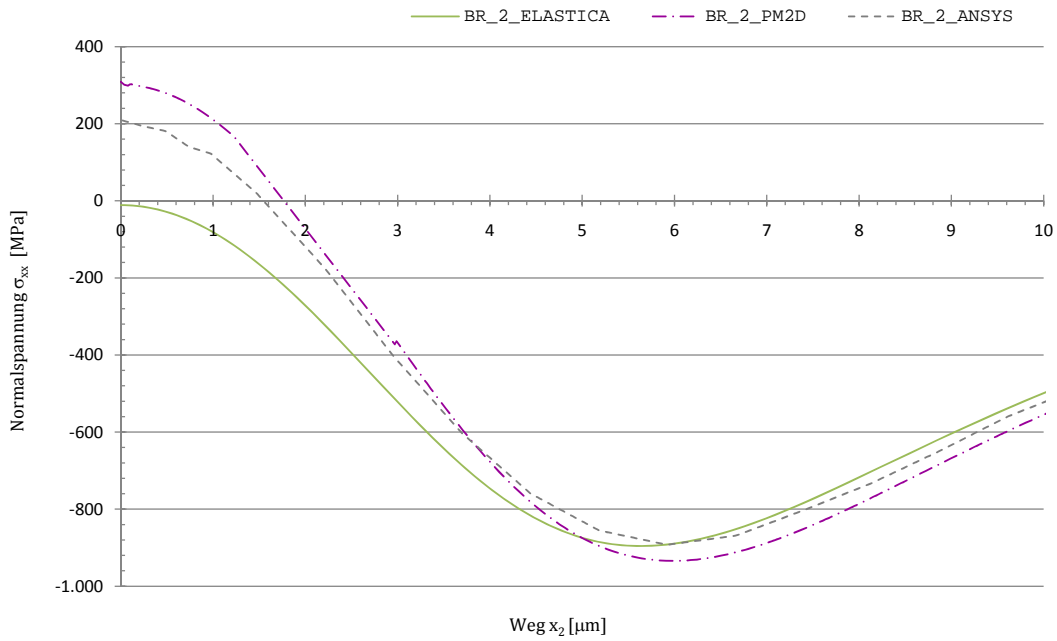


Abbildung 5.19: Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg x_2

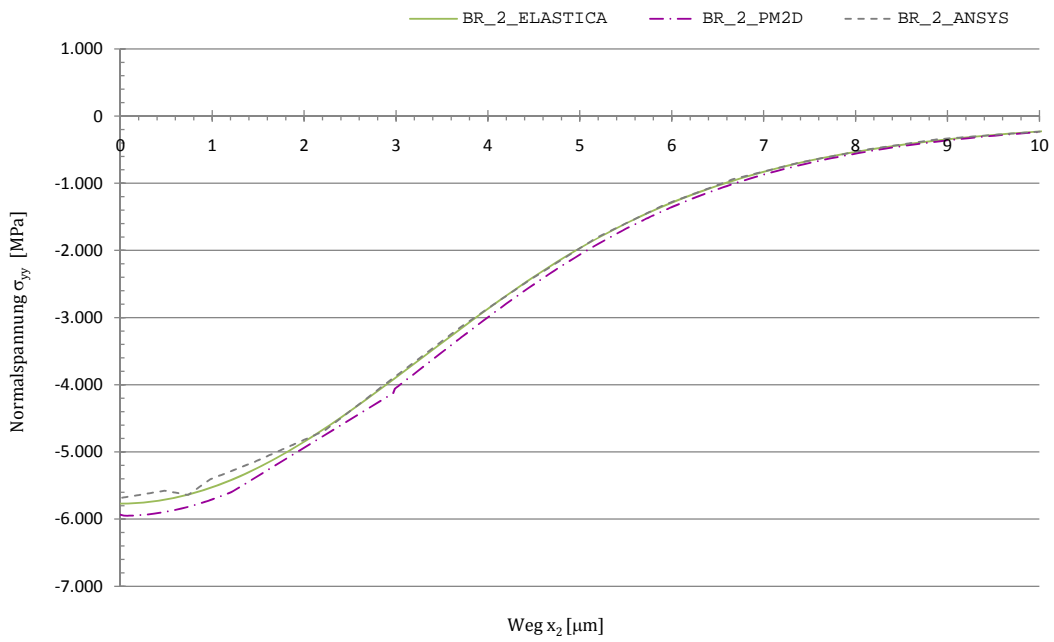
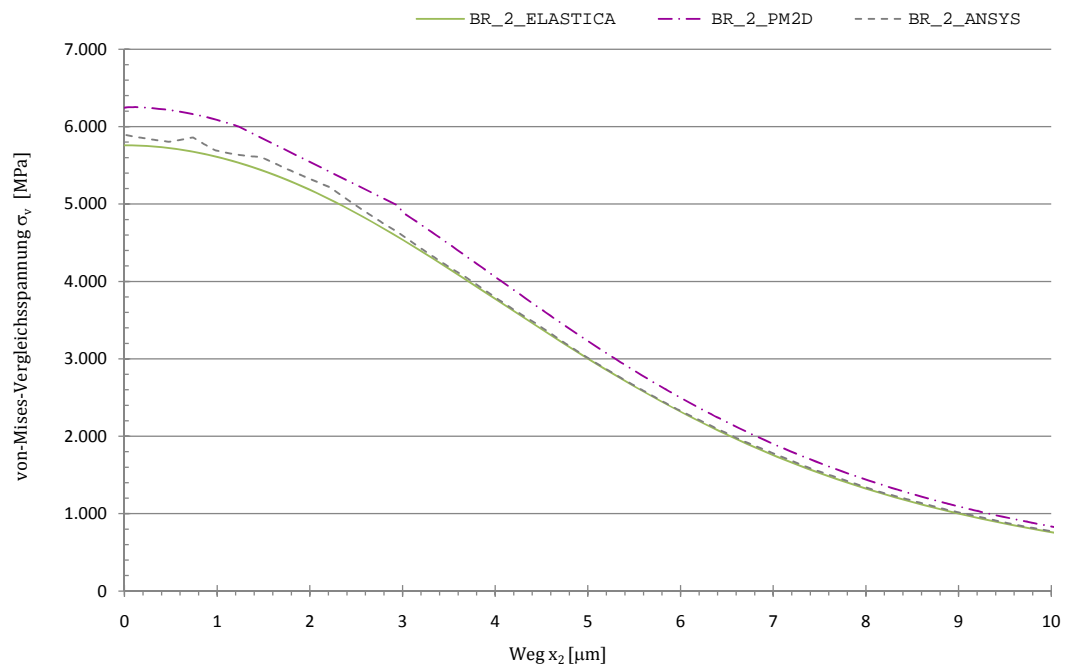
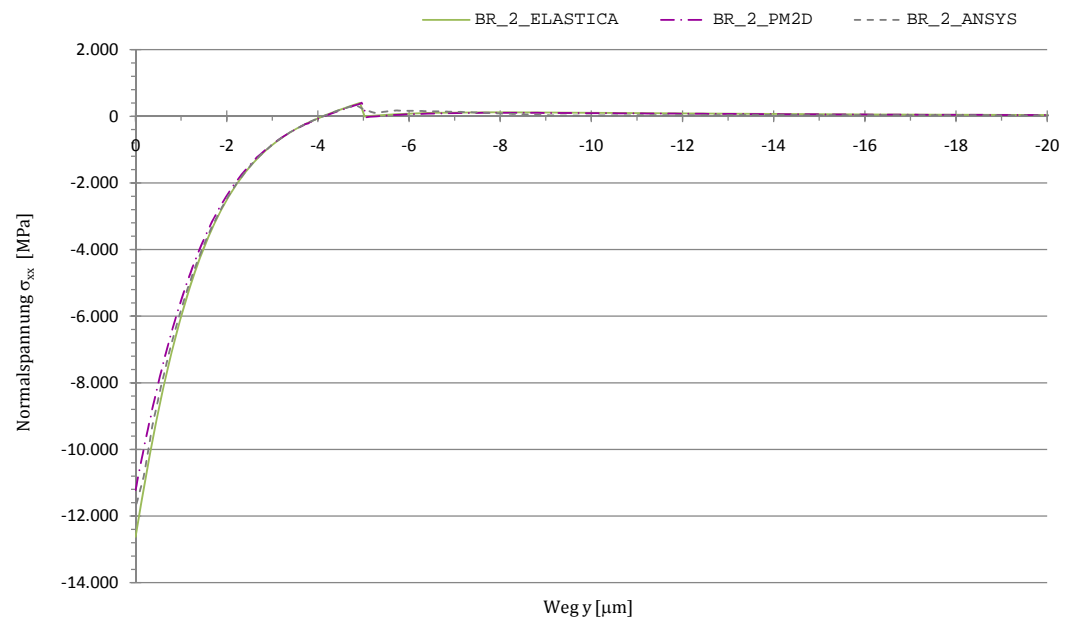


Abbildung 5.20: Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg x_2

Abbildung 5.21: Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg x_2

Die Abbildungen 5.22, 5.23 und 5.24 zeigen wieder eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse der einzelnen Programme. Hierbei sind erneut nur minimale Unterschiede zwischen den Kurven zu erkennen.

Abbildung 5.22: Vergleich der Normalspannung σ_{xx} über Weg y

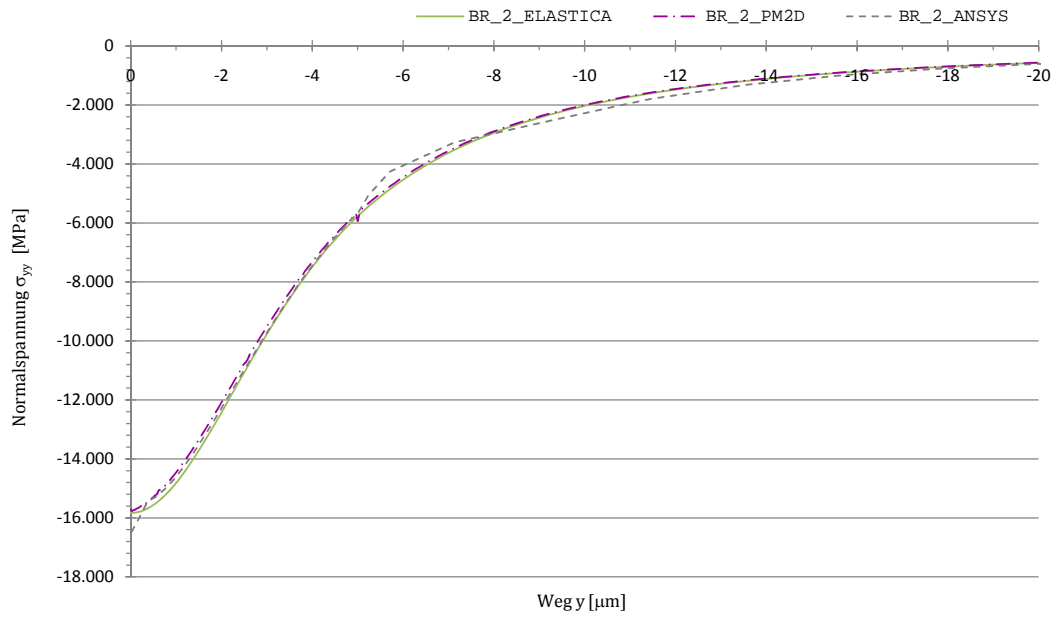


Abbildung 5.23: Vergleich der Normalspannung σ_{yy} über Weg y

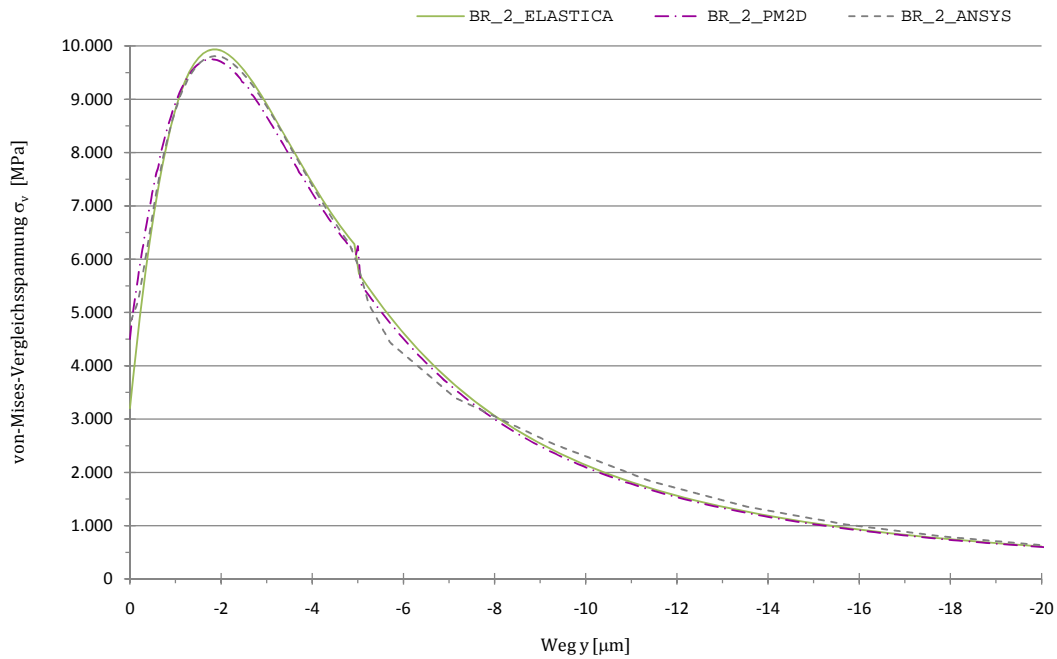
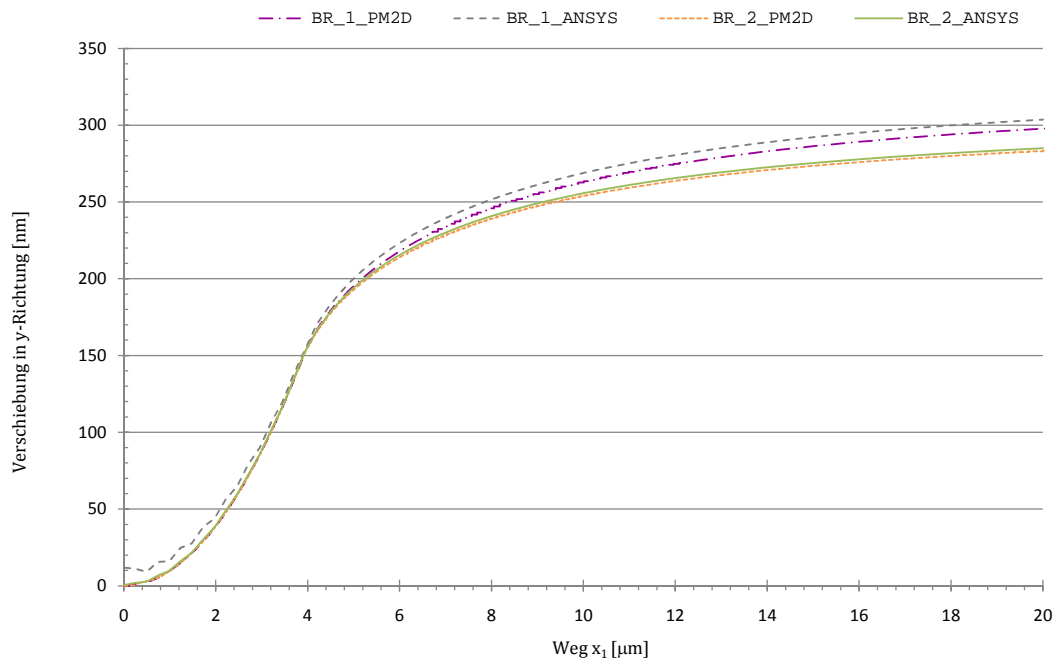


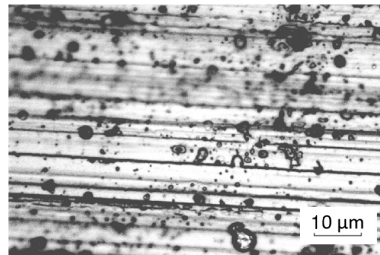
Abbildung 5.24: Vergleich der von-Mises-Vergleichsspannung σ_v über Weg y

5.3 Härtevergleich der Modelle 1 und 2

Die Brinellhärte ist der Quotient aus der aufbrachten Kraft F und der Oberfläche A des bleibenden Eindruckes. Der für die Berechnung der Härte erforderliche Radius des bleibenden Eindruckes kann der Abbildung 5.25 entnommen werden.

Abbildung 5.25: Vergleich der Verschiebung über Weg x_2

Es ist festzustellen, dass sich die Eindringtiefe der beiden Modelle nur sehr geringfügig unterscheidet. Obwohl die Unterschiede in der Verschiebung der Oberflächenpunkte (Punkte entlang des Weges x_1) in y -Richtung deutlich größer sind, als in x -Richtung, hat dies keinen bzw. nur einen geringfügigen Einfluss auf die Oberfläche des Eindruckes. Ein anderer wichtigerer Faktor ist die Oberflächenrauheit des Systems, die in Abbildung 5.26 gut zu erkennen ist.

Abbildung 5.26: REM-Aufnahme der Oberfläche von $TiCN$ auf Stahl [2]

Da der Kontaktradius bei Kugelmessungen deutlich größer ist, als bei Berkovichmessungen, ist der Einfluss der Rauheit auf die Eindringtiefe besonders hoch. [2]

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

„Wichtig ist, dass man nie aufhört zu fragen...“

(Albert Einstein)

Schicht-Substrat-Systeme sind vor allem in vielen Bereichen der Technik übliche Verbundwerkstoffe, um Kontaktoberflächen mit gezielten Eigenschaften auszustatten. Eine Hartstoffbeschichtung kann das Verschleißverhalten von spanenden und umformenden Werkzeugen um ein Vielfaches verbessern. Jedoch kann ein solches Schicht-System im Belastungsfall, besonders im Grenzbereich, zum Versagen führen.

Zur Optimierung derartiger Systeme kommen zunehmend numerische Verfahren zum Einsatz. Der Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die Untersuchung der Möglichkeiten und Grenzen des SPC-PM 2Ad und, ob es im Vergleich zu kommerziellerer und bereits besser erforschter Software vergleichbar gute Ergebnisse liefert.

Anstelle der üblichen Belastung an Werkzeugen, werden für die Analyse Indenter mit einer vordefinierten Kraft in die Oberfläche des Schicht-Systems gedrückt. Die resultierenden Spannungen innerhalb des Systems infolge dieser äußeren Belastung werden zur Beschreibung der Stabilität herangezogen.

Beim Eindruckversuch entstehen Zugspannungen, die Rissbildungen im Bereich des Eindruckes zur Folge haben können. Risse werden durch Spannungskonzentrationen verursacht. Diese können durch Oberflächenfehler, dünnere Schichtstellen und andere Fehlstellen hervorgerufen werden. Die häufig auftretenden Druckspannungen können außerdem Ausbeulungen erzeugen. In diesen Bereichen des Systems kann es zur Schichtablösung kommen.

Erkannte Probleme

Der Vergleich der von den Programmen zur Verfügung gestellten Ergebnisdaten erwies sich als sehr schwierig und umständlich. Das SPC-PM 2Ad verfügte im Ausgangszustand über geringe Ausgaben. Ein Datenfile, welches Spannungen an gewünschten Stellen beinhaltet, wurde erst durch die manuelle Einarbeitung einer Subroutine erzeugt. Diese muss für Berechnungen mit unterschiedlichen Modellen im Vorhinein entsprechend der gewünschten Ausgabe verändert werden.

Weiterhin stehen bei ANSYS® und dem SPC-PM 2Ad als Exportmöglichkeit nur ungünstig formatierte ASCII-Files zur Verfügung, die für eine weitere Verwendung erst umfangreich manuell nachbearbeitet werden mussten. Alle Ausgabefiles wurden bzgl. der unterschiedlichen Achsen und Einheiten auf einen gemeinsamen Bezugswert umgerechnet.

Bewertung

Die Untersuchungen, Vergleichsrechnungen und Analysen, die in dieser Diplomarbeit durchgeführt wurden, haben gezeigt, dass das SPC-PM 2Ad unter der Beachtung der vorgegebenen Einschränkungen zur Berechnung von Schicht-Substrat-Systemen für den hier gewählten Brinell-Indenter gut geeignet ist. Die Ergebnisse der eigenen Berechnungen sind mit den Ergebnissen anderer kommerziellerer Software, wie ANSYS® und Elastica®, vergleichbar. Darüber hinaus zeigten die Ergebnisse teilweise bessere Übereinstimmungen mit den Ergebnisse von Elastica® als ANSYS®.

Ein weiterer Vorteil ist die freie Verfügbarkeit und die überaus schnellen Rechenzeiten des Programms.

Ein erheblicher Nachteil liegt darin, dass das SPC-PM 2Ad keine benutzerfreundliche Oberfläche bietet. Die Bedienung gestaltet sich teilweise als sehr umständlich und zeitaufwendig. Ein weiterer Nachteil ist, dass das Programm keine Schadensberechnungen mittels Versagenskriterien ermöglicht. Durch Überlastung auftretende Schäden können so nicht erkannt und berücksichtigt werden.

Weiterführende Betrachtung

Eine Erweiterung dieser Arbeit liegt in der Betrachtung des dreidimensionalen Problems. Da eine solche Untersuchung weit mehr Elemente und Knoten benötigt, stehen bei dieser Analyse nichtrotationssymmetrische Modelle im Vordergrund, die mittels eines zweidimensionalen Modells nicht berechnet werden kann können. Ein Beispiel hierfür ist die Untersuchung des Kontaktproblems des Berkovichindenters auf Schicht-Substrat-Systemen. Für eine solche Untersuchung steht bereits eine, auf dem Prinzip des SPC-PM 2Ad auf-

bauende, Software bereit: das SPC-PM 3AdH. Es wurde ebenfalls von Herrn Prof. Dr. Arnd Meyer und von Herrn Dr. Matthias Pester in Zusammenarbeit mit Herrn Dr. Sven Beuchler und Frau Janine Glänzel an der TU-Chemnitz entwickelt. Mit dieser Software wurden bereits erste eigene Untersuchungen durchgeführt. Ein Vergleich der Ergebnisse konnte aufgrund der stark begrenzten ANSYS®-Lizenz nicht durchgeführt werden. Dieser Vergleich sollte nachfolgenden Untersuchungen mit erweiterten Hardwarevoraussetzungen vorbehalten bleiben.

Anhang

Anhang A

Verwendete Bezeichnungen

„Sie wissen, wir leben im Zeitalter der Abkürzungen ...“

(Robert Lembke)

A	Eindruckoberfläche
A_p	Projektionsfläche
\vec{b}	rechte Seite des FE-Gleichungssystems
B	Beanspruchungsgrad
C	Rechts-Cauchy-Green-Tensor
d	Dimension (im allgemeinen Fall $d \in 1, 2, 3$)
\mathbf{div}	Divergenz-Operator
ϵ	Green'scher Verzerrungstensor im allgemeinen Fall
ε	Green'scher Verzerrungstensor im elastischen Fall
η_E	Fehler über die Kante E
η_k	maximaler Kantenfehler
E	Elastizitätsmodul
\vec{f}	Kraftdichte
F	Prüfkraft
F_0	Prüfvorkraft
F_1	Prüfzusatzkraft
\vec{g}_D	Oberflächenverschiebung
\vec{g}_N	Flächenlast
$\Gamma = \partial\Omega$	Rand des Gebietes Ω
Γ_C	Kontaktzone
Γ_C^v	kontaktverdächtige Zone
Γ_D	Randabschnitt mit Dirichlet-Randbedingungen
Γ_N	Randabschnitt mit Neumann-Randbedingungen

g	Abstands-Funktion
grad	Gradient-Operator
\mathfrak{h}	Hook'scher Tensor
h	Schrittweite
$H^1(\Omega)$	Raum der Funktionen aus $L_2(\Omega)$, deren erste verallgemeinerte Ableitungen existieren und ebenfalls Element dieses Raumes sind
H	allgemeine Härte
HBW	Brinellhärte
HK	Knoophärte
HN	Nanohärte
HR	Rockwellhärte
HV	Vickershärte
I	Einheitsmatrix
J	Deformationsgradient
κ	Konditionszahl
\mathcal{K}	Menge der zulässigen Verschiebungen
K	Stiffigkeitsmatrix des FE-Gleichungssystems
λ, μ	Lamé-Konstanten
$\lambda_{max}, \lambda_{min}$	größter und kleinster Eigenwert des FE-Gleichungssystems
Δ	Laplace-Operator
$L_2(\Omega)$	Raum der über Ω quadratisch integrierbaren Funktionen
∇	Nabla-Operator
$\vec{\mathbf{n}}$	äußere Normale
ν	Querkontraktionszahl
N_h	Anzahl der Knoten der Vernetzung
\odot	Hindernis
Ω	betrachtetes Gebiet
Ω_h	Approximation des Gebietes Ω
p_i	Formfunktionen auf Ω_h
$p_{\vec{\mathbf{n}}}$	Kontaktdruck
\mathbb{R}	Menge der reellen Zahlen
\mathbb{R}^d	Raum der Vektoren mit d Komponenten
rot	Rotations-Operator
σ	Cauchy'scher Spannungstensor
span	lineare Hülle
\vec{u}	Verschiebungsfeld
u_n	Normalenkomponente des Verschiebungsfeldes
\vec{v}	Testfunktion

\mathbb{V}_0	Raum der Testfunktionen
$\mathbb{V}_{0,C}$	Raum der Testfunktionen für exakte Kontaktformulierung
\mathbb{V}_D	Raum der Formfunktionen
\mathbb{V}_0h	endlichdimensionale Approximation von \mathbb{V}_0
\mathbb{V}_h	endlichdimensionale Approximation von \mathbb{V}_D
\vec{x}	Punkt aus Ω
$\ z\ $	Abstand

Anhang B

Begriffserklärungen

Divergenz-Operator: Im kartesischen Koordinatensystem ordnet der Divergenz-Operator einem Vektorfeld ein Skalarfeld wie folgt zu:

$$\mathbf{div} \vec{u} = \mathbf{div} \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \\ u^3 \end{pmatrix} = u_x^1 + u_y^2 + u_z^3 = \nabla \vec{u}.$$

Gradient-Operator: Im kartesischen Koordinatensystem ordnet der Gradient-Operator einer skalaren Funktion ein Vektorfeld wie folgt zu:

$$\mathbf{grad} \phi = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \phi = \begin{pmatrix} \phi_x \\ \phi_y \\ \phi_z \end{pmatrix} = \nabla \phi.$$

Grenzschicht: Die Oberflächen metallischer Reibpartner sind nur in wenigen Ausnahmen metallisch rein. Gewöhnlich werden sie mit Grenzschichten abgedeckt, die durch chemische und physikalische Reaktionen des Grundwerkstoffs an Luft, mit Feuchtigkeit oder mit Schmierstoffen entstehen.

Halogenide: Halogenide sind chemische Verbindungen zwischen den Elementen der 7. Hauptgruppe des Periodensystems.

Kontaktverdächtige Zone: Die kontaktverdächtige Zone Γ_C^v , mit $\Gamma_C \subset \Gamma_C^v$, ist eine Teilmenge des Randes Γ und beschreibt alle Teilstücke des Randes, welcher in Kontakt mit dem Hindernis kommen könnte.

Kontaktzone: Die Kontaktzone Γ_C ist eine Teilmenge des Randes Γ . Auf ihr besteht der Kontakt des Körpers mit dem Hindernis.

Laplace-Operator: Im kartesischen Koordinatensystem ist der Laplace-Operator für Vektorfelder definiert als

$$\Delta \vec{u} = \mathbf{grad}(\mathbf{div} \vec{u}) - \mathbf{rot}(\mathbf{rot} \vec{u})$$

und für skalare Funktionen als

$$\Delta \phi = \mathbf{div}(\mathbf{grad} \phi).$$

Nabla-Operator: Der Nabla-Operator

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)^T$$

ist ein symbolischer Vektor, mit dem die Operatoren

$$\mathbf{div} \vec{u} = \nabla \vec{u}$$

$$\mathbf{rot} \vec{u} = \nabla \times \vec{u} \quad \text{und}$$

$$\mathbf{grad} \phi = \nabla \phi$$

und Kombinationen davon kurz notiert werden können. [5]

Rezipient: Als Rezipient wird in der Vakuumtechnik ein Gefäß bezeichnet, in welchem für Versuchszwecke ein Vakuum erzeugt wird.

Rotations-Operator: Im kartesischen Koordinatensystem ordnet der Rotations-Operator einem Vektorfeld ein anderes Vektorfeld wie folgt zu:

$$\mathbf{rot} \vec{u} = \mathbf{rot} \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \\ u^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_y^3 - u_z^2 \\ u_z^1 - u_x^3 \\ u_x^2 - u_y^1 \end{pmatrix} = \nabla \times \vec{u}.$$

Tribologie: Die Tribologie (*griech.*: Reibungslehre) umfasst alle Bereiche von Reibung, Verschleiß und Schmierung.

Tribologisches System: Unter dem Tribologischen System versteht man die Gesamtheit der am tribologischen Vorgang beteiligten stofflichen Partner, ihre tribologisch relevanten Eigenschaften und Wechselwirkungen, sowie die mit dem Vorgang verbundene Übertragung oder Umwandlung von Energie. [32]

Anhang C

Tabellen

Tabelle C.1: Vergleich der Beschichtungsverfahren [22]

	Aufdampfen	Elektrolyt. Abscheidung	Thermisches Spritzen	Auftrags-schweißen
Schichtdicke [mm]	0.001-0.2	0.02-0.5	0.1-1.0	1-20 oder mehr
Bauteil-geometrie	flexibel	flexibel	Zugang zu verdeckten Flächen ist begrenzt durch Größe des Brenners oder der Pistole	
Bauteilgröße	begrenzt durch Kammergröße	begrenzt durch Badgröße	keine Begrenzung	keine Begrenzung
Grundwerkstoff	fast unbegrenzt	fast unbegrenzt	fast unbegrenzt	Metalle und Legierungen mit höherem Schmelzpunkt als Schichtwerkstoff
Temperatur des Grundwerkstoffs, [°C]	30-1000	100	200	1400

Vorbehandlung	PVD-Ionenätzen, CVD-untersch.	chemische Reinigung, Ätzen	Reinigen und Aufrauen	mechanische Reinigung
Porosität der Schicht [%]	null bis gering	null bis gering	1-15	null
Haftfestigkeit [MPa]	hoch	100	20-140	hoch
Haftmechanismus	atomar, Oberflächenkräfte	Oberflächenkräfte	mechanisch	metallische Bindung
Verzug des Bauteils	gering	gering	gering	u.U. hoch, je nach Bauteilgeometrien

Danksagung

An dieser Stelle ist es mir ein Bedürfnis, mich recht herzlich bei allen Personen zu bedanken, die mich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben.

Herrn Dr. Jürgen Leopold möchte ich besonders für die Vergabe des Diplomthemas danken, sowie für die fachliche Unterstützung und die Betreuung bei der TBZ-PARIV GmbH. Ein besonderer Dank gilt auch Frau Prof. Dr. Cordula Bernert, die mir mit viel Engagement, guten Ideen und unermüdlichem Einsatz bei der Erstellung dieser Arbeit geholfen hat.

Weiterhin möchte ich mich bei Herrn Dr. Chudoba und der Firma ASMEC bedanken, die mir eine Vollversion von ELASTICA zur Verfügung gestellt haben.

Ich danke außerdem Herrn Prof. Dr. Arnd Meyer und Herrn Dr. Roman Unger für die Bereitstellung der Software-Pakete SPC-PM 2Ad und SPC-PM 3AdH und die tatkräftige Unterstützung beim Umgang mit dieser.

Vielen Dank Herrn Dr. Reiner Wohlgemuth, der es mir ermöglichte, in seiner Firma mein Praktikum und anschließend mein Diplom durchzuführen, sowie für die finanzielle Absicherung der Endphase meines Studiums. Besonders lobenswert sind auch die überaus freundliche Aufnahme im Team der TBZ-PARIV GmbH und die gute Zusammenarbeit.

Mein ganz besonderer Dank gilt abschließend meiner Familie, die mich während meines Studiums und bei der Erstellung dieser Arbeit tatkräftig unterstützt haben und vor allem meiner Mutter für das kritische Korrekturlesen und die konstruktiven Vorschläge.

Literaturverzeichnis

- [1] ASMEC - ADVANCED SURFACE MECHANICS (Hrsg.): *Messtechnik, Messdienstleistungen und Software für die Oberflächenmechanik*. 08. Dezember 2009 . – URL: <http://www.asmec.de/d.htm>
- [2] BEIER, D.: *Numerische Analyse des Schicht-Substrat-Verhaltens*. Mittweida, Hochschule Mittweida (FH), Diplomarbeit, Januar 2007
- [3] BENNANI, H. H.; TAKADOUM, J.: Finite element model of elastic stresses in thin coatings submitted to applied forces. In: *Surface and Coatings Technology* 111 (1999), S. 80–85
- [4] BERNERT, C.: *Numerik der Partiellen Differentialgleichungen*. Mittweida, Hochschule Mittweida (FH), Vorlesung, SS 2008
- [5] BERNERT, C.: *Partielle Differentialgleichungen*. Mittweida, Hochschule Mittweida (FH), Vorlesung, WS 2007/2008
- [6] CHOI, H. J.: Effects of graded layering on the tip behavior of a vertical crack in a substrate under frictional Hertzian contact. In: *Engineering Fracture Mechanics* 68 (2001), S. 1033–1059
- [7] CHUDOBA, T.; SCHWARZER, N. ; RICHTER, F.: New possibilities of mechanical surface characterization with spherical indenters by comparison of experimental and theoretical results. In: *Thin Solid Films* 355-356 (1999), S. 284–289
- [8] CHUDOBA, T.; SCHWARZER, N. ; RICHTER, F.: Determination of elastic properties of thin films by indentation measurements with a spherical indenter. In: *Surface and Coatings Technology* 127 (2000), S. 9–17
- [9] CHUDOBA, T.; SCHWARZER, N. ; RICHTER, F.: Steps towards a mechanical modeling of layered systems. In: *Surface and Coatings Technology* 154 (2002), S. 140–151
- [10] CHUDOBA, T.; SCHWARZER, N.; RICHTER, F. ; BECK, U.: Determination of mechanical film properties of a bilayer system due to elastic indentation measurements with a spherical indenter. In: *Thin Solid Films* 377-378 (2000), S. 366–372

- [11] DIN 50320: *Verschleiß-Begriff-Systemanalyse von Verschleißvorgängen*. Dezember 1979
- [12] DIN 8580: *Fertigungsverfahren - Begriffe, Einteilung*. September 2003
- [13] DIN EN 657: *Thermisches Spritzen - Begriffe, Einteilung*. Juni 2005
- [14] DIN EN ISO 4545: *Metallische Werkstoffe - Härteprüfung nach Knoop - Teil 1: Prüfverfahren*. März 2006
- [15] DIN EN ISO 6506-1: *Metallische Werkstoffe - Härteprüfung nach Brinell - Teil 1: Prüfverfahren*. März 2006
- [16] DIN EN ISO 6507-1: *Metallische Werkstoffe - Härteprüfung nach Vickers - Teil 1: Prüfverfahren*. März 2006
- [17] DIN EN ISO 6508-1: *Metallische Werkstoffe - Härteprüfung nach Rockwell - Teil 1: Prüfverfahren*. März 2006
- [18] DONG, H.; LIN, J.: Input Database for Mechanics Modeling and Validation. In: *M3-2S Discussion Document 09-01*, 2009
- [19] FISCHER-CRIPPS, A. C.: *Nanoindentation*. New York: Springer Verlag, 2002 (Mechanical Engineering Series)
- [20] FRUHNER, S.: *Methoden der Molekulardynamik - Computersimulation*. Berlin, TU Berlin, Vortrag, 2005
- [21] GOBRECHT, J.: *Werkstofftechnik - Metalle*. München/Wien: Oldenbourg Verlag, 2006 (Oldenbourg Lehrbücher für Ingenieure)
- [22] GRAININGER, S.: *Funktionelle Beschichtungen in Konstruktion und Anwendung*. Saulgau: Eugen G. Leuze Verlag, 1994 (Engineering Coatings)
- [23] GROSSMANN, C.; ROOS, H.-G.: *Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen*. Wiesbaden: B. G. Teubner Verlag, 2005
- [24] HELLER, K.: *Benutzerhandbuch für den Adaptiven Finite Element Code SPC-PM 2Ad*. 2009
- [25] HERRMANN, K. ...: *Härteprüfung an Metallen und Kunststoffen. Grundlagen und Überblick zu modernen Verfahren*. Renningen: Expert Verlag, 2007
- [26] HERTZ, H.: Über die Berührung elastischer Körper. In: *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 92 (1881), S. 156–171

- [27] JUNG, M.; LANGER, U.: *Methode der finiten Elemente für Ingenieure*. Stuttgart/Leipzig/Wiesbaden: B. G. Teubner Verlag, 2001
- [28] KIM, S.-R.; NAIRN, J. A.: Fracture mechanics analysis of coating/substrate systems. Part I: Analysis of tensile and bending experiments. In: *Engineering Fracture Mechanics* 65 (2000), S. 573–593
- [29] KIM, S.-R.; NAIRN, J. A.: Fracture mechanics analysis of coating/substrate systems. Part II: Experiments in bending. In: *Engineering Fracture Mechanics* 65 (2000), S. 595–607
- [30] KUHNERT, J.; TIWARI, S.: Finite pointset method based on the projection method for simulations of the incompressible Navier-Stokes equations / Fraunhofer, Institut Techno- und Wirtschaftsmathematik. 2001 (30). – Berichte des Fraunhofer ITWM
- [31] KUHNERT, J.; TIWARI, S.: Grid free method for solving the Poisson equation / Fraunhofer, Institut Techno- und Wirtschaftsmathematik. 2001 (25). – Berichte des Fraunhofer ITWM
- [32] LANGE, K. (Hrsg.): *Umformtechnik - Grundlagen*. Berlin/Heidelberg: Springer Verlag, 2002
- [33] LEOPOLD, J.; MEISEL, M.: Numerical analysis of coating-substrate systems. In: *Computational Materials Science* 19 (2000), S. 205–212
- [34] LEOPOLD, J.; MEISEL, M.; WOHLGEMUTH, R. ; LIEBICH, J.: High performance computing of coatings-substrate systems. In: *Surface and Coatings Technology* 142-144 (2001), S. 916–922
- [35] LI, J.; GAO, H.; QU, L. ; RENTSCH, R.: Characterisation of dynamic properties of coating-substrate system by molecular dynamics simulation. In: *International Journal of Computer Applications in Technology* 29 (2007), S. 108–113
- [36] LU, S.; DONG, M.: An Advanced BEM for Thermal and Stress Analyses of Components with Thermal Barrier Coating. In: *Electronical Journal of Boundary Elements* 1 (2003), Nr. 2, S. 302–315
- [37] LUO, J. F.; LIU, Y. J. ; BERGER, E.: Interfacial stress analysis for multi-coating systems using an advanced boundary element method. In: *Computational Mechanics* 24 (2000), S. 448–455
- [38] MA, L.; WU, L.-Z.: Mode III crack problem in a functionally graded coating-homogeneous substrate structure. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical*

Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science 222 (2008), Nr. 3, S. 329–337

- [39] MESZMER, P.: *Verbesserte numerische Simulation von Indenter-Versuchen durch die Fourier-Finite-Elemente-Methode*. Chemnitz, TU Chemnitz, Diplomarbeit, Oktober 2007
- [40] MEYER, A.: *Programmer's Manual for Adaptive Finite Element Code SPC-PM 2Ad*. Sonderforschungsbereich 393, TU-Chemnitz, 2001
- [41] PANICH, N.; WANGYAO, P.; CHOMTOHSUWAN, T. ; YONG, S.: Finite Element Analysis of the Critical Ratio of Coating Thickness to Indentation Depth of Soft Coating on a Harder Substrate by Nanoindentation. In: *ScienceAsia* 32 (2006), S. 411–416
- [42] RICHTER, F.; CHUDOBA, T.; SCHWARZER, N. ; HECHT, G.: Neue Möglichkeiten zur Charakterisierung dünner Schichten mit Indentermethoden. In: *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik* 32 (2001), S. 621–627
- [43] SANZ-NAVARRO, C. F.; KENNY, S. D.: Real-time Visualization and Computational Steering of Molecular Dynamics simulations of Materials Science. In: *Proceedings of the UK e-Science All Hands Meeting 2004*, 2004
- [44] SCHADE, H.: *Tensoranalysis*. New York/Berlin: de Gruyter Verlag, 1997
- [45] SCHWARZER, N.: Coating design due to analytical modelling of mechanical contact problems on multilayer systems. In: *Surface and Coatings Technology* 133-134 (2000), S. 397–402
- [46] SCHWARZER, N.; CHUDOBA, T. ; RICHTER, F.: Investigation of ultra thin coatings using nanoindentation. In: *Surface and Coatings Technology* 200 (2006), S. 5566–5580
- [47] SCHWARZER, N.; DJABELLA, H.; RICHTER, F. ; ARNELL, R. D.: Comparison between analytical and FEM calculations for the contact problem of spherical indenters on layered materials. In: *Thin Solid Films* 270 (1995), S. 279–282
- [48] SCHWARZER, N.; WHITTLING, M.; SWAIN, M. ; RICHTER, F.: The analytical solution of the contact problem of spherical indenters on layered Materials: application for the investigation of TiN films on silicon. In: *Thin Solid Films* 270 (1995), S. 371–375
- [49] SIGNORINI, A.: *Sopra alcune questioni di elastostatica*. Venezia: Atti della Societa Italiana per il Progresso delle Scienze, 1933

- [50] SUN, Y.; BELL, T. ; ZHENG, S.: Finite element analysis of the critical ratio of coating thickness to indentation depth for coating property measurements by nanoindentation. In: *Thin Solid Films* 258 (1995), S. 198–204
- [51] SUN, Y.; BLOYCE, A. ; BELL, T.: Finite element analysis of plastic deformation of various TiN coating/substrate systems under normal contact with a rigid sphere. In: *Thin Solid Films* 271 (1995), S. 122–131
- [52] TIWARI, S.; ANTONOV, S.; HIETEL, D.; KUHNERT, J. ; WEGENER, R.: A Meshfree Method for Simulations of Interactions between Fluids and Flexible Structures / Fraunhofer, Institut Techno- und Wirtschaftsmathematik. 2006 (88). – Berichte des Fraunhofer ITWM
- [53] UNGER, R.: *Unterraum-CG-Techniken zur Bearbeitung von Kontaktproblemen*. Chemnitz, TU Chemnitz, Dissertation, Februar 2007

Erklärung

Hiermit versichere ich, die vorliegende Diplomarbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt zu haben.

Chemnitz, 25. Februar 2010

Katrin Heller