

Chemomechanische Modellierung der Wärmebehandlung von Stählen mit der Phasenfeldmethode

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS

von der KIT-Fakultät für
Maschinenbau,
des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

genehmigte

DISSERTATION

von

Ephraim Schoof, M.Sc.
geb. in Bad Mergentheim

Tag der mündlichen Prüfung:

11.03.2020

Hauptreferent:
Korreferent:

Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler
Prof. Dr. Michael J. Hoffmann

Kurzfassung

Die Entwicklung hochfester Stähle kann mithilfe numerischer Verfahren beschleunigt werden. Insbesondere die Phasenfeldmethode hat sich als mächtiges Werkzeug etabliert, um die Mikrostrukturentwicklung auf mesoskopischer Längenskala zu beschreiben. In der vorliegenden Arbeit werden Multiphasenfeldmodelle vorgestellt, um die Gefügeentwicklung während der Wärmebehandlung von Stahl numerisch abzubilden, was im weiteren Verlauf Rückschlüsse auf das Materialverhalten unter mechanischer Belastung ermöglicht. Dabei stehen die Phasenumwandlungen im Fokus, bei denen elastische treibende Kräfte maßgeblich zur Mikrostrukturentwicklung beitragen. Als ein wesentlicher Teil dessen wird ein neues Multiphasenfeldmodell zur Simulation der martensitischen Umwandlung entwickelt, das elastische treibende Kräfte verwendet, die auf den mechanischen Sprungbedingungen basieren. Die beim Abschrecken einer ferritischen-austenitischen Mikrostruktur auftretende martensitische Umwandlung wird mithilfe elastischer und elastoplastischer Simulationen untersucht und der resultierende Materialzustand analysiert. Es werden Methoden vorgestellt, um die Energielandschaft zu quantifizieren, die sich nach dem Wachstum einer bainitischen Untereinheit ausbildet, um Aussagen über das Nukleationsverhalten nachfolgender Untereinheiten zu treffen. Zudem wird ein Modell für das Wachstum von Widmanstätten-Ferrit vorgestellt, bei dem die nadelartige Struktur ein Resultat anisotroper Eigendehnungen darstellt. Es wird festgestellt, dass zwei Widmanstätten-Nadeln, die in einem gewissen Abstand zueinander wachsen, über das Spannungsfeld interagieren, wodurch die Morphologie beeinflusst wird. Darüber hinaus wird am Beispiel der Wärmebehandlung von Dualphasenstahl eine digitale Prozesskette aufgebaut, die es ermöglicht, die Auswirkungen einzelner Prozessparameter auf nachfolgende Prozessschritte zu berücksichtigen.

Abstract

The development of high-strength steels can be accelerated using numerical methods. In particular, the phase-field method has emerged as a powerful tool to describe the microstructure evolution on the mesoscopic length scale. In the present work, multiphase-field models are presented to numerically display the morphological evolution during the heat treatment of steel, which, in the further course, allows conclusions to be drawn about the material behavior under mechanical load. The focus of the current work is on phase transformations, in which elastic driving forces contribute significantly to the microstructural changes. As an essential part of this, a new multiphase-field model is developed to simulate the martensitic phase transformation, using an elastic driving force based on the mechanical jump conditions. The martensitic transformation, occurring during quenching of a ferritic-austenitic microstructure, is investigated by means of elastic and elastoplastic simulations, and the resulting material state is analyzed. Methods are presented to quantify the energy landscape that develops after the growth of a bainitic subunit, in order to assess the nucleation behavior of subsequent subunits. In addition, a model for the growth of Widmanstätten ferrite is presented, in which the needle-like structure is a result of anisotropic eigenstrains. It is found that two Widmanstätten needles, growing at a certain distance from each other, interact via the stress field, which influences the morphology. In addition, a digital process chain is set up, using the heat treatment of dual-phase steel as an example, which makes it possible to consider the effects of individual process parameters on subsequent process steps.

Vorwort und Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institute of Materials and Processes bzw. am Institut für Digitale Materialforschung der Hochschule Karlsruhe - Technik und Wirtschaft und am Institut für Angewandte Materialien - Computational Material Sciences des Karlsruher Instituts für Technologie. Ich danke der Deutschen Forschungsgemeinschaft, dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie, dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg und der Helmholtz-Gemeinschaft für die finanzielle Unterstützung während dieser Zeit.

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei allen Personen bedanken, die zur Erstellung dieser Arbeit beigetragen haben. Insbesondere gilt mein Dank Prof. Dr. rer. nat. Britta Nester, die mich während meiner Promotion betreut und es mir ermöglicht hat, diese Arbeit in ihrer Arbeitsgruppe, die ich als eine Forschungsgruppe mit einer ausgeprägten und offenen Diskussionskultur kennenlernen durfte, mit vielen Freiheiten anfertigen zu können. Ebenso möchte ich mich bei Prof. Dr. Michael J. Hoffmann für die Bereitschaft zur Übernahme des Korreferats bedanken.

Ich möchte mich besonders bei meinem Gruppenleiter Dr.-Ing. Daniel Schneider für die jahrelange intensive Betreuung und die enge Zusammenarbeit bedanken, der mich während meiner Promotionszeit durch wichtige Impulse und eine fortwährende Diskussionsbereitschaft entscheidend unterstützt hat. Ich bedanke mich auch bei meinen Kollegen bzw. ehemaligen Kollegen P. G. Kubendran Amos, C. Herrmann, T. Mittnacht, F. Schwab, P. Hoffrogge, W. Werner, S. Daubner, L. Schöller, J. Hötzer, J. Santoki, O. Tschukin, M. Selzer, A. Reiter, P. Altschuh, C. Ratz und bei allen Kollegen, die ich bei dieser Aufzählung vergessen habe, für die zahlreichen Diskussionen, das fruchtbare Arbeitsklima und die abwechslungsreichen Gespräche während der Mittagspause.

Ich möchte mich außerdem besonders bei M. Selzer und A. Reiter für die Hilfestellung bei der Umsetzung der entwickelten Modelle, bei T. Mittnacht

und P. G. Kubendran Amos für die Bereitstellung von CALPHAD-Daten, bei P. G. Kubendran Amos für die produktive Zusammenarbeit bei einer Reihe von Veröffentlichungen, bei H. Bayram und C. Ratz für den technischen Support, bei L. Geisen für das Korrekturlesen von Texten sowie bei C. Hertweck-Maurer, I. Heise und B. Hardt für die administrative Unterstützung bedanken.

Allen Mitgliedern des Graduiertenkollegs 1483, im Forschungsbereich A, danke ich für die interessanten überfachlichen Diskussionen und im Besonderen J. Pagenkopf für die Zusammenarbeit im Bereich der Kopplung von Kaltwalzen und Rekristallisation.

Ebenso möchte ich mich bei allen Studenten, und besonders bei N. Streichhan, bedanken, die im Rahmen einer wissenschaftliche Hilfstätigkeit, einer Abschlussarbeit oder eines Praktikums mit mir zusammengearbeitet und meine Forschungsarbeiten unterstützt haben.

Von ganzem Herzen bedanke ich mich bei meinen Freunden, bei meiner Familie und besonders bei meiner Frau, die in jeder Phase der Arbeit für mich da waren und mit ihrem Zuspruch, aber auch mit ihrem Verständnis, eine wichtige Stütze während der Promotionszeit darstellten.

Teile dieser Arbeit wurden auf dem Supercomputer ForHLR II ausgeführt, der vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg und vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert wird.

Karlsruhe, Januar 2020

Ephraim Schoof

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	i
Abstract	iii
Vorwort und Danksagung	v
Inhaltsverzeichnis	ix
Abkürzungs- und Symbolverzeichnis	xi
1 Einleitung	1
2 Literaturübersicht	5
2.1 Phasenumwandlungen beim Zerfall von Austenit	5
2.2 Phasenumwandlungen während der Wärmebehandlung von Dualphasenstahl	14
3 Multiphasenfeldmethode zur Beschreibung der Mikrostruk- turentwicklung in mehrphasigen und mehrkomponenti- gen Systemen	21
3.1 Das freie Energiefunktional	22
3.2 Phasenfeldevolutionsgleichung	23
3.3 Grenzflächenenergiedichte	26
3.4 Kopplung mit volumetrischen Energiedichtebeiträgen	28
3.5 Phasenfeldmodell für ein zweiphasiges System	39
3.6 Verzerrung des Grenzflächenprofils	48
3.7 Eliminierung der Krümmungsminimierung	50
3.8 Nukleation im Phasenfeldkontext	54
3.9 Numerische Umsetzung und Optimierung	57

3.10	Vergleich mit anderen Phasenfeldlösern	59
3.11	Verhältnis von grenzflächenaufbauenden Termen zu volumetrischen treibenden Kräften	60
4	Modellierung der Martensitumwandlung mit der Multiphasenfeldmethode	69
4.1	Freies Energiefunktional und Evolutionsgleichung	69
4.2	Das Bain'sche Modell	70
4.3	Modellierung der autokatalytischen Nukleation	73
4.4	Modellierung der Nukleation an Korngrenzen	78
4.5	Modellierung der Martensitumwandlung unter dem Einfluss einer äußeren Spannung	80
4.6	Dreidimensionale Martensitumwandlung	83
4.7	Fazit	85
5	Martensitumwandlung in einer ferritisch-austenitischen Mikrostruktur	87
5.1	Elastische Simulation der Martensitumwandlung	88
5.2	Elastoplastische Simulation der Martensitumwandlung	103
5.3	Einfluss der martensitischen Mikrostruktur auf die Plastifizierung in Ferrit	119
5.4	Fazit	120
6	Bainitumwandlung	123
6.1	Modellierung und Simulationsaufbau	123
6.2	Auswertevorgehen	128
6.3	Ergebnisse und Diskussion	130
6.4	Fazit	142
7	Wachstum von Widmanstätten-Ferrit	145
7.1	Modellierung und Simulationsaufbau	145
7.2	Ergebnisse und Diskussion	148
7.3	Fazit	151
8	Sequenziell gekoppelte Wärmebehandlung von Dualphasenstahl	153

8.1	Ausgangsmikrostruktur und Kaltwalzen	154
8.2	Rekristallisation	157
8.3	Austenitumwandlung	172
8.4	Martensitumwandlung	179
8.5	Fazit	184
9	Zusammenfassung und Ausblick	187
9.1	Zusammenfassung	187
9.2	Ausblick	188
A	Anhang	193
A.1	Entdimensionalisierung	193
A.2	Einfluss der Interpolationsfunktion auf die Kinetik und die numerische Grenzflächenenergie	193
	Abbildungsverzeichnis	201
	Tabellenverzeichnis	203
	Literaturverzeichnis	205

Abkürzungs- und Symbolverzeichnis

Abkürzungen

AHS	Advanced High Strength
CALPHAD	CALculation of PHase Diagrams
DP	Dualphasen
EBSD	Electron Backscatter Diffraction
LROP	Locally Reduced Order Parameter
MICRESS	The MICROstructure Evolution Simulation Software
Pace3D	Parallel Algorithms for Crystal Evolution in 3D

Symbole

Symbol	Einheit	Beschreibung
--------	---------	--------------

Lateinische Symbole

<i>a</i>	J/m^4	Beitrag zur Gradientenenergiedichte
<i>A</i>	–	Amplitude
<i>b</i>	m	Burgers-Vektor
<i>B</i>	–	Distribution
<i>c</i>	–	Konzentration
<i>C</i>	Pa	Steifigkeitstensor
<i>d</i>	–	Dimension
<i>D</i>	m^2/s	Diffusivität
<i>E</i>	Pa	Elastizitätsmodul
<i>F</i>	J	Energiefunktional

G	Pa	Schubmodul
k	–	Relaxationsrate
K	–	Anzahl definierter Konzentrationsfelder
\mathcal{K}	–	Kontrollparameter
M	m^4/Js	Mobilität
N	–	Anzahl definierter Phasen
\tilde{N}	–	Anzahl lokal vorhandener Phasen
$\mathbf{q}_{\alpha\beta}$	1/m	generalisierter Gradientenvektor an einer α - β -Grenzfläche
Q	J/mol	Aktivierungsenergie
R	m	Radius
\mathcal{R}	J/(k mol)	allgemeine Gaskonstante
\mathcal{S}	1/Pa	Nachgiebigkeitstensor
t	s	Zeit
T	°C bzw. K	Temperatur
\mathbf{u}	m	Verschiebung eines materiellen Punktes
v	m/s^2	Geschwindigkeit
V	m^3	Volumen
W	J/m^3	Energiedichte

Griechische Symbole

γ	J/m^2	Grenzflächenenergie
Γ	–	Funktion zur Reduktion der Eigendehnung
γ^n	J/m^2	Parameter zum Aufbau einer Grenzfläche in Normalenrichtung
ε	–	infinitesimaler Dehnungstensor
ϵ	m	Parameter zur Einstellung der Grenzflächenbreite
$\bar{\varepsilon}_{\text{pl}}$	–	akkumulierte plastische Dehnung
ζ	–	Rauschterm
η	m	Grenzflächenbreite

θ	$^{\circ}$	Missorientierung
κ	$1/\text{m}$	Krümmung
λ	J/m^3	Lagrangescher Multiplikator
μ	J/m^3	chemisches Potential
ν	–	Poissonzahl
ρ	$1/\text{m}^2$	Versetzungsdichte
ϱ	–	Parameter zur Reduktion der Eigendehnung an Korngrenzen
σ	Pa	Spannungstensor
τ	Js/m^4	Relaxationsparameter
ϕ	–	Ordnungsparameter
Ψ	J/m^3	Großkanonisches Potential
ω	J/m^2	Beitrag zur potentiellen Energiedichte

Indizes

\square^{appl} , \square_{appl}	angelegte Spannung
\square_{bulk}	auf das Phaseninnere bezogen; volumetrischer Beitrag
\square_{c}	Kohlenstoff
\square_{chem}	chemisch
\square_{elast}	elastisch
\square_{hagb}	Großwinkelkorngrenze (engl.: <i>high-angle grain boundary</i>)
\square_{int}	Interaktion
\square_{intf}	auf die Grenzfläche bezogen (engl.: <i>interfacial</i>)
\square_{krit}	kritisch
\square_{max}	maximal
\square_{n}	in Normalenrichtung
\square_{nuk}	Nukleation
\square_{num}	numerisch
\square_{ob}	unter Verwendung des Multihindernispotentials

\square_{pl}	plastisch
\square_{ref}	Referenz
\square_{sum}	Summe
\square_{unrot}	unrotiert
\square_{ver}	Verformung
\square_{well}	unter Verwendung des Multimuldenpotentials
$\square^{\alpha}, \square_{\alpha}$	auf Phase α bezogen
$\square^{\beta}, \square_{\beta}$	auf Phase β bezogen
$\square^{\alpha\beta}, \square_{\alpha\beta}$	auf die Grenzflächen zwischen Phase α und β bezogen
$\square_{\alpha\beta\delta}$	auf den Tripelpunkt der Phasen α , β und δ bezogen

1 Einleitung

Der Erfolg oder Misserfolg eines materiellen Produkts ist maßgeblich mit der Wahl des richtigen Werkstoffs verknüpft. Bei der Entwicklung neuer oder leistungsfähiger Produkte werden daher auf der einen Seite immer höhere Anforderungen an Materialien und deren Neu- oder Weiterentwicklung gestellt. Auf der anderen Seite kann die Materialforschung selbst als Impulsgeber für die Realisierung innovativer Produkte auftreten, indem sie neuartige Ausgangsmaterialien bereitstellt. Metallbasierte Werkstoffe haben jahrtausendlang den technologischen Fortschritt mitgeprägt und zählen auch heutzutage zu einem der wichtigsten Werkstoffe. Dabei ist Eisen als Hauptbestandteil von Stahl mit deutlichem Abstand das weltweit meistgenutzte Metall [1] und nicht nur ein elementarer Rohstoff für die Baubranche, die Elektroindustrie oder den Maschinenbau.

Insbesondere in der Automobilindustrie sind in den letzten Jahren durch gesetzliche Rahmenbedingungen zur Reduktion der CO₂-Emissionen die Anforderungen an die eingesetzten Materialien stetig gewachsen [2]. Weiterentwickelte hochfeste Stähle (engl.: *advanced high-strength steel*) (AHS-Stähle) bieten einen Lösungsansatz, um durch wirtschaftlichen Automobilleichtbau einen maßgeblichen Beitrag zur Senkung des Kraftstoffverbrauchs zu leisten, ohne Sicherheitsaspekte außer Acht zu lassen [2, 3]. Zur Klasse der AHS-Stähle gehören neben Dualphasenstahl und Komplexphasenstahl auch neue bainitische Stähle, die sich alle, wie in Abb. 1.1 dargestellt ist, durch eine hervorragende Kombination aus Festigkeit und Duktilität auszeichnen. Trotz jahrelanger Forschung bieten abgestimmte Wärmebehandlungsverfahren oder speziell optimierte Legierungszusammensetzungen weiterhin ein weitreichendes Potential für die Optimierung von AHS-Stählen.

Die Entwicklung von Werkstoffen mit verbesserten Eigenschaften erfordert grundlegende Kenntnisse über den Einfluss verschiedener Prozessparameter während der Herstellung auf die resultierende Mikrostruktur, die die Eigenschaften unter mechanischer Belastung maßgeblich beeinflusst. Neben experimentellen Untersuchungen können modernste numerische Methoden dazu beitragen,

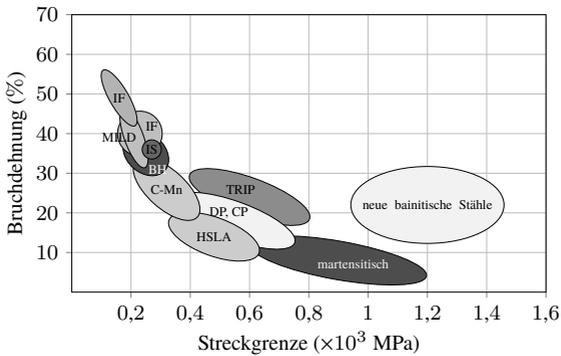


Abbildung 1.1: Verformungsverhalten unterschiedlicher Stahlsorten, nach [4]. IF: IF-Stahl (engl.: *interstitial free*), MILD: kohlenstoffarmer Stahl, TRIP: TRIP-Stahl (engl.: *transformation-induced plasticity*), IS: Isotroper Stahl, DP: Dualphasenstahl, CP: Komplexphasenstahl, HSLA: HSLA-Stahl (engl.: *high-strength low-alloy*), BH: BH-Stahl (engl.: *bake hardening*), C-Mn: Kohlenstoff-Mangan-Stahl.

das Verständnis grundlegender Mechanismen zu erklären und zu vertiefen. Insbesondere die Phasenfeldmethode hat sich als leistungsfähiges Werkzeug zur Modellierung der Mikrostrukturentwicklung während der Wärmebehandlung von Stahl etabliert und liefert wertvolle Erkenntnisse über Umwandlungsmechanismen in komplexen Gefügen [5].

Mit der vorliegenden Arbeit wird ein Beitrag zum verbessertem Verständnis der Phasenumwandlungen während der Wärmebehandlung von Stahl geleistet, wobei die Umwandlungen, bei denen mechanische treibende Kräfte einen maßgeblichen Einfluss auf die resultierende Mikrostruktur haben, im Mittelpunkt stehen. Hierzu wird die Multiphasenfeldmethode verwendet, und bereits bestehende Methoden und Modelle werden für den jeweiligen Anwendungsfall weiterentwickelt bzw. angepasst. Somit werden Modellierungsansätze für eine Vielzahl von Phasenumwandlungen während der Wärmebehandlung von Stahl für weitere Simulationsstudien zur Verfügung gestellt. Daneben wird am Beispiel der Wärmebehandlung von Dualphasenstahl das Potential der entwickelten Modelle aufgezeigt, mithilfe der Multiphasenfeldmethode eine digitale Prozesskette aufzubauen. Damit ermöglicht die computergestützte Materialentwicklung nicht nur die Untersuchung einzelner Prozesse, sondern auch die Vorhersage, wie sich die Veränderung eines Prozessparameters einerseits auf nachfolgende

Prozessschritte und andererseits auf das Verhalten eines Bauteils im Betrieb auswirkt, indem eine virtuelle Prozesskette betrachtet wird (vgl. [6–8]).

Die vorliegende Arbeit gliedert sich insgesamt in neun Kapitel. Das Einleitungskapitel führt in die Thematik ein und stellt die Zielsetzung dieser Arbeit vor. In Kapitel 2 wird eine Literaturübersicht der Modellierungsansätze der behandelten Phasenumwandlungen während der Wärmebehandlung von Stahl gegeben. In Kapitel 3 wird das Grundgerüst des in dieser Arbeit verwendeten Multiphasenfeldmodells beschrieben sowie die Kopplung mit volumetrischen Energiedichten erläutert. Hierbei wird besonders auf die Herausforderungen der Phasenfeldmodellierung im Kontext großer treibender Kräfte eingegangen und Strategien diskutiert, um eine ungewollte Verzerrung der diffusen Grenzfläche zu minimieren. In Kapitel 4 wird das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Modell zur Beschreibung der martensitischen Umwandlung in polykristallinen Gefügen vorgestellt. Weitere Ergänzungen zu dem in Kapitel 3 beschriebenen Modell werden erläutert und die wesentlichen Mechanismen werden anhand einfacher Beispiele diskutiert. Das in Kapitel 4 eingeführte Modell wird in Kapitel 5 für großskalige Simulationen der martensitischen Umwandlung in Dualphasenstahl eingesetzt. Es werden sowohl elastische als auch elastoplastische Simulationsergebnisse gezeigt. Neben der resultierenden Mikrostruktur wird die Verteilung der von Mises-Spannung und der akkumulierten plastischen Dehnung diskutiert. In Kapitel 6 steht die Energielandschaft bei der bainitischen Umwandlung im Fokus. Sowohl aus mechanischer als auch aus chemischer Sicht lassen sich nach dem Wachstum einer bainitischen Untereinheit Regionen identifizieren, in denen die Nukleation einer weiteren Untereinheit energetisch begünstigt bzw. behindert wird. In Kapitel 7 werden Simulationsergebnisse des Wachstums von Widmanstätten-Ferrit gezeigt. Die in Kapitel 6 eingeführte Methode zur Darstellung der elastischen Energielandschaft wird verwendet, um das Wachstumsverhalten zweier Widmanstätten-Nadeln zu erklären, die sich in einem gewissen Abstand zueinander befinden. Kapitel 8 befasst sich mit der Prozesskettensimulation einer Wärmebehandlungsrouten von Dualphasenstahl. Basierend auf einer Simulation des Kaltwalzens wird die Mikrostrukturentwicklung während der Rekristallisation, der Austenit- und der Martensitumwandlung sequentiell betrachtet, wobei jeweils der vorherige Schritt wesentliche Informationen für den nachfolgenden Schritt zur Verfügung stellt. In Kapitel 9 werden die zentralen Ergebnisse zusammengefasst und es wird ein Ausblick auf weiterführende Arbeiten gegeben.

wird vollständig austenitisiert, rasch auf eine Abkühltemperatur gebracht und auf dieser gehalten. Unterhalb der Martensitstarttemperatur M_S erfolgt die diffusionslose Umwandlung zu Martensit. Bei einer geringen Abkühlung unterhalb der A_{c1} -Temperatur bildet sich Perlit, in welchem sich Ferrit (α) und Zementit (Fe_3C) lamellar anordnen. Die Perlitbildung ist diffusionskontrolliert. Zwischen diesen beiden Extremen der raschen und langsamen Abkühlung kann sich Widmanstätten-Ferrit (α_{wf}) und Bainit (α_b) bilden.

2.1.1 Martensitumwandlung

Namensgeber für das martensitische Gefüge ist der deutsche Metallurg Adolf Martens. Bei großen und raschen Unterkühlungen aus dem austenitischen Bereich werden Diffusionsvorgänge der Legierungselemente unterdrückt. Gleichzeitig steigt die chemische treibende Kraft für eine Phasenumwandlung, sodass schließlich austenitische Bereiche in einer kooperativen Scherbewegung in Martensit umklappen. Beim Umklappen des kubisch-flächenzentrierten Austenitgitters in das kubisch-raumzentrierte Martensitgitter findet aufgrund der unterdrückten Diffusion kein Platzwechsel von einzelnen Atomen statt und die relative Lage der Eisen- und Kohlenstoffatome zueinander bleibt erhalten. Bei diesem Vorgang werden elastische Verzerrungen in das Material eingebracht, die durch Gleitung oder Zwillingsbildung reduziert werden können. Gleichzeitig findet eine Volumenzunahme des Martensits gegenüber dem Austenit statt. Bei niedrigen Kohlenstoffgehalten bis 0,5 Ma.-% entsteht Lattenmartensit, der durch Blöcke aus parallel zueinander verlaufenden Latten charakterisiert ist. Bei hohen Kohlenstoffgehalten über 1,4 Ma.-% bildet sich Plattenmartensit, bei dem einzelne Martensitplatten in verschiedenen Winkeln zueinander angeordnet sind. Im Übergangsbereich wird von Mischmartensit gesprochen. [10]

Die numerische Modellierung der martensitischen Phasenumwandlung mithilfe der Phasenfeldmethode begann mit den grundlegenden Arbeiten von A. G. Khachaturyan und seinen Mitarbeitern [11–14]. Diese frühen, rein elastischen Modelle wurden mit der Zeit weiter verbessert, um die Bandbreite der berücksichtigten physikalischen Effekte bei der Martensitumwandlung weiter zu erhöhen und sie damit realitätsnäher zu gestalten. Ausführliche Übersichtsartikel zur Modellierung der martensitischen Umwandlung mit der Phasenfeldmethode sind in [15, 16] zu finden.

Einer der wesentlichen Punkte bei der Modellierung der martensitischen Um-

wandlung ist der Nukleationsmechanismus zur Bildung der unterschiedlichen martensitischen Varianten. Eine Sonderstellung stellt der Modellierungsansatz für die ersten wachstumsfähigen Keime dar. Sobald die ersten Keime entstanden sind, breitet sich die Umwandlungsfront durch den autokatalytischen Nukleationsmechanismus weiter aus [17]. Unabhängig, ob Ein- oder Polykristalle betrachtet werden, kann die Umwandlung durch ein Rauschen innerhalb einer Phase [13, 18, 19], durch einen vorhandenen Keim [20–22] oder durch eine äußere Spannung bzw. Dehnung [23] ausgelöst werden. Zudem kann ein Versetzungsring, der an bestimmten Positionen innerhalb des Simulationsgebietes platziert wird, ein statisches Dehnungsfeld erzeugen und damit als heterogene Nukleationsstelle dienen [24–26]. Diese Modellierungsansätze, mit Ausnahme der spannungs- oder dehnungsinduzierten Nukleationsmethode, haben einen Nachteil: Entweder müssen *A-priori*-Annahmen bezüglich der Nukleationsstelle getroffen werden oder es wird außer Acht gelassen, dass die Martensitnukleation vorwiegend an strukturellen Defekten wie Korngrenzen, Versetzungen oder Einschlüssen stattfindet [27–29]. Um der heterogenen Natur der Martensitentstehung gerecht zu werden, entwickelten Heo und Chen [30] eine Methode zur Modellierung der Nukleation an Korngrenzen eines Polykristalls. Dabei werden die Informationen der diffusen Grenzfläche zwischen austenitischen Körnern mit den Eigendehnungen der Martensitvarianten verknüpft. Die Eigendehnungen der Martensitvarianten werden in Abhängigkeit von einem Skalierungsparameter örtlich begrenzt reduziert. Damit ist die elastische Formänderungsenergie in den Grenzflächenregionen geringer und die Nukleation der martensitischen Varianten ist dort energetisch vorteilhafter als innerhalb einer Phase. Durch ein Rauschen in den Phasenfeldern wird somit die erstmalige Nukleation an den Korngrenzflächen angeregt.

Ein weiterer herausfordernder Punkt ist die Frage, wie die Martensitumwandlung in Polykristallen modelliert werden kann. Hierbei lassen sich die vorhandenen Modelle in zwei Gruppen unterteilen: In der ersten Gruppe wird ein durchgehender Ordnungsparameter für jede Martensitvariante - unabhängig des parentalen Kornes - verwendet [14, 22]. Es unterscheiden sich nur die Eigendehnungen der jeweiligen Variante in Abhängigkeit von der Orientierung der parentalen Phase. Dieser Ansatz impliziert jedoch, dass eine martensitische Variante durch eine Austenit/Austenit-Phasengrenze wachsen kann und kein autokatalytisches Nukleationsereignis nötig ist, um das Wachstum im Nachbarkorn zu ermöglichen. Martensit kann jedoch keine Korngrenzen durchlaufen und stoppt an diesem Hindernis [31]. Eine Erweiterung wurde von Malik et al. [21, 32] vorgestellt. In diesem Ansatz wird die Mobilität zwischen Martensit und Austenit innerhalb

der diffusen Austenit/Austenit-Grenzfläche auf null gesetzt und somit eine kinetische Barriere zwischen zwei Austenitkörnern geschaffen. Die Interaktion zwischen den Körnern findet über das Spannungsfeld statt und ermöglicht autokatalytische Nukleation der Martensitvarianten im Nachbarkorn nahe der Korngrenze. Dieser Ansatz führt jedoch zwangsläufig zu Restaustenit in diesem Bereich und damit zu einer Verfälschung der Ergebnisse.

In einem alternativen Modellierungskonzept wird in jedem austenitischen Korn ein eigener Satz von Ordnungsparametern verwendet [26, 30, 33, 34]. Ein verbreiteter Ansatz zur Unterscheidung verschiedener austenitischer Körner ist die Einführung einer Kornformfunktion (engl.: *grain shape function*). Innerhalb eines bestimmten Korns nimmt die Kornformfunktion den Wert eins an, außerhalb ist sie null. Damit ermöglicht die Kornformfunktion die Umwandlung im Bereich eines einzelnen Austenitkorns und verhindert das Wachstum einer Variante in ein Nachbarkorn. Trotz der Einführung einer Vielzahl von Ordnungsparametern bleibt der numerische Aufwand unabhängig von der Anzahl der austenitischen Körner, da pro Korn maximal die Phasenfeldgleichung für einen Satz an Ordnungsparametern gelöst wird. Es wird jedoch eine scharfe Parametrisierung gewählt, um die austenitischen Körner darzustellen. Wie der erste Modellierungsansatz führt auch dieser Ansatz dazu, dass die Grenzflächenenergie zwischen den austenitischen Körnern nicht berücksichtigt wird.

Ein Meilenstein bei der Entwicklung von Phasenfeldmodellen für die Modellierung der martensitischen Umwandlung war die Integration von Plastifizierungseffekten. Yamanaka et al. [22, 35] kombinierten ein elastisches Phasenfeldmodell für die martensitische Phasenumwandlung [13] mit einem elastoplastischen Phasenfeldmodell [36]. In ihren Arbeiten mit einer J_2 -Viskoplastizitätsformulierung konnten sie zeigen, dass Plastifizierungen den Martensitanteil im Vergleich zu einer rein elastischen Annahme ansteigen lassen. Durch plastische Deformationen werden Spannungsüberhöhungen abgebaut, wodurch die elastische Formänderungsenergie abnimmt und sich mehr Martensit bilden kann. Je nach Komplexität und numerischem Aufwand gibt es weitere Möglichkeiten, Plastizität in ein Phasenfeldmodell zur martensitischen Umwandlung zu integrieren, wie beispielsweise durch die Verwendung von Kristallplastizität [37–41] oder Versetzungsdynamik [42, 43]. Aufgrund der vergleichsweise geringen numerischen Kosten ist eine J_2 -Plastizitätsformulierung jedoch die erste Wahl für großskalige Simulationen. Aus modellierungstechnischer Sicht gibt es grundsätzlich zwei Möglichkeiten, J_2 -Plastizität mit einem Phasenfeldansatz zu kombinieren [44, 45]. Die Modelle unterscheiden sich durch die Frage voneinander, ob sich alle Phasen die gleichen plastischen Dehnungen an einem

materiellen Punkt teilen, oder ob für jede bestehende Phase phasenabhängige plastische Dehnungen eingeführt werden. Der zweite Weg bietet die Möglichkeit, verschiedene konstitutive Gleichungen für jede Phase separat anzuwenden und einen Sprung der plastischen Verformung zwischen zwei Phasen zu integrieren. Innerhalb des ersten Ansatzes wird in der Regel die gleiche Art von konstitutiver Gleichung verwendet, und da alle Phasen die gleichen plastischen Felder aufweisen, verschwindet der Sprung der plastischen Verformung. Wenn sich die Phasengrenze zu bewegen beginnt, zeigen beide Modelle ein unterschiedliches Verhalten hinsichtlich der Vererbung der plastischen Dehnungen. Während im ersten Fall alle plastischen Informationen erhalten bleiben, werden im zweiten Fall die phasenabhängigen plastischen Dehnungen der schrumpfenden Phasen nicht auf die wachsende Phase übertragen. Die Auswahl des richtigen Modells für eine bestimmte Anwendung erfordert daher zunächst eine Klärung der Frage, was an einer sich bewegenden Phasengrenze passiert, wenn plastische Dehnungen oder Versetzungen im Material vorhanden sind. Wenn eine Phasenfront eine plastisch deformierte Region durchquert, können Versetzungen im Allgemeinen vor der sich bewegenden Phasenfront hergeschoben, an die wachsende Phase vererbt oder vernichtet werden, wenn zwei Versetzungen desselben Gleitsystems aufeinandertreffen [43]. Im Grenzfall, wenn das Gitter komplett neu angeordnet wird und ein Großteil der Versetzungen abgebaut wird, liegt die Versetzungsdichte der neuen Phase auf einem niedrigen Basisniveau. Dieses Verhalten kann beispielsweise während der Rekristallisation [46] oder während des Wachstums von Ferrit in deformiertem Austenit [47] beobachtet werden. Die Reduzierung der gespeicherten Energiedichte dient als treibende Kraft für die Phasenumwandlung. In Phasenfeldansätzen ist die Verwendung einer durch die gespeicherte Energiedichte motivierten treibenden Kraft basierend auf der plastischen Verformung oder Versetzungsdichte für diese Prozesse etabliert [48–50]. Dieser Modellierungsansatz kann jedoch bei der martensitischen Umwandlung nicht angewendet werden. In Phasenfeldansätzen mit J_2 -Viskoplastizität wird allgemein angenommen, dass bei der Umwandlung von Austenit zu Martensit plastische Dehnungen vollständig vererbt werden [20–22, 32, 35, 51–53]. Neuere Arbeiten im Bereich der Modellierung der martensitischen Umwandlung befassen sich z. B. mit der gekoppelten Berechnung der Phasenumwandlung und der Temperaturevolution [54–56], um den Effekt der latenten Wärme zu berücksichtigen, oder zeigen Möglichkeiten auf, wie 24 martensitische Varianten mithilfe der Kurdjumov–Sachs-Orientierungsbeziehung modelliert werden können [6, 57, 58].

2.1.2 Bainitumwandlung

Das Zwischenstufengefüge Bainit ist nach dem amerikanischen Metallkundler Edgar. C. Bain benannt und tritt zwischen der Perlit- und Martensitstufe, im Temperaturbereich von 250 °C bis 550 °C auf. Im Überlappungsbereich mit Perlit ähnelt die Morphologie der des Perlits und im Überlappungsbereich mit Martensit der des Martensits. Dabei wird zwischen dem oberen Bainit (400–550 °C) und dem unteren Bainit (250–400 °C) unterschieden. Während beim oberen Bainit kohlenstoffreiche Komponenten wie Karbide, Martensit und/oder Restaustenit zwischen den Nadeln des bainitischen Ferrits auftreten, bilden sich beim unteren Bainit auch innerhalb der Nadeln Karbide aus. [10]

Der dem Bainit zugrundeliegende Umwandlungsmechanismus wird bis heute kontrovers diskutiert [9]: Auf der einen Seite wird versucht, Bainit als rekonstruktive Phasenumwandlung zu beschreiben, wobei die Wachstumsrate in seitlicher Richtung einer bainitischen Nadel geringer ist als an der Spitze. Nach dieser Theorie wachsen der bainitische Ferrit und Zementit gleichzeitig und kooperativ. Mit der rekonstruktiven Annahme können Umwandlungsgeschwindigkeiten von Bainit mit angemessener Genauigkeit vorhergesagt werden. Auf der anderen Seite steht die displazive Theorie: Eine bainitische Untereinheit wächst ähnlich wie bei der Martensitumwandlung ohne Kohlenstoffdiffusion. Das Wachstum wird durch Plastifizierungseffekte im angrenzenden Austenit gestoppt, ohne ein Hindernis wie eine Korngrenze erreicht zu haben. Nachfolgend diffundiert Kohlenstoff aus dem übersättigten bainitischen Ferrit. Im Falle des oberen Bainits bilden sich Karbide zwischen den Untereinheiten; im Falle des unteren Bainits auch innerhalb der Untereinheiten. Neue Untereinheiten nukleieren vorwiegend im Bereich der Spitze der vorhandenen Untereinheiten, wodurch die nadelförmige Struktur zu erklären ist.

Zu den bekanntesten Unterstützern der displaziven Theorie zählt H. K. D. H Bhadeshia [31, 59]: Er argumentiert, dass die Bainitumwandlung in deformiertem Austenit behindert wird. Diese mechanische Stabilisierung könne lediglich bei displaziven Phasenumwandlungen wie der Martensitumwandlung auftreten.

In den vergangenen Jahren wurden erste Phasenfeldmodelle zur Beschreibung der bainitischen Umwandlung vorgestellt, wobei sowohl Modelle basierend auf dem displaziven als auch auf dem rekonstruktiven Umwandlungsmechanismus entwickelt wurden.

Basierend auf der displaziven Annahme stellten Düsing und Mahnken Phasenfeldansätze zur Beschreibung der oberen und unteren Bainitumwandlung

vor [60–63]. Im Falle des unteren Bainits kam es innerhalb einer bainitischen Nadel zu einer Karbidbildung und im Falle des oberen Bainits zwischen zwei Nadeln. [62]. Die bainitische Form wurde durch anisotrope Grenzflächenparameter modelliert. Arif und Qin [64, 65] stellten ein Phasenfeldmodell vor, das neben der chemischen Kraft auch eine elastische treibende Kraft enthält. Das elastische Modell basiert auf einer phänomenologischen Beschreibung der elastischen treibenden Kraft. Damit konnte eine nadelförmige Struktur ohne anisotrope Grenzflächenenergien oder Mobilitäten erzielt werden. Eine einzelne bainitische Untereinheit wächst solange, bis eine bestimmte Größe erreicht ist. Danach diffundiert Kohlenstoff aus dem übersättigten bainitischen Ferrit. Obwohl die Phasenumwandlung und die Kohlenstoffdiffusion gleichzeitig simuliert werden, diffundiert der Kohlenstoff im Vergleich zur bainitischen Umwandlung viel langsamer, sodass das Modell den sequentiellen Aspekt der Umwandlung und Diffusion widerspiegelt. Die Nukleation weiterer Untereinheiten wird im Bereich der Nadelspitze der vorherigen Untereinheit stimuliert, um die autokatalytische Nukleation zu modellieren. Mit diesem Ansatz konnten karbidfreie bainitische Strukturen, die aus mehreren Untereinheiten bestehen, simuliert werden. Das Modell ist jedoch nicht in der Lage, den Spannungszustand während des Wachstums oder die Spannungswechselwirkung zwischen mehreren Untereinheiten zu untersuchen. Dieser Nachteil wurde beispielsweise in [66] überwunden, indem ein physikalisches Elastizitätsmodell in Verbindung mit einem Multiphasenfeldmodell zur Simulation einer einzelnen bainitischen Platte angewendet wurde. In dieser Arbeit wird Kohlenstoffdiffusion während des Wachstums angenommen. Die nadelförmige Form wird durch anisotrope Eigendehnungen erhalten und die Spannungsverteilung wird gezeigt. Weikamp et al. [67] erweiterten das in [61] vorgestellte Modell, indem hydrostatische Eigendehnungen berücksichtigt wurden. Die Ergebnisse zeigen, dass das bainitische Wachstum behindert wird, wenn Elastizität berücksichtigt wird. Um die plastische Verformung in der Nähe einer bainitischen Untereinheit zu untersuchen, präsentierten Prahl et al. ein mit einem Kristallplastizitätsmodell gekoppeltes Phasenfeldmodell [68, 69]. Die Morphologie wird durch Grenzflächen-, elastische und chemische Beiträge beeinflusst. Da keine Kohlenstoffdiffusion während des Wachstums angenommen wird, ist die chemische treibende Kraft eine konstante Größe. Das Wachstum einer einzelnen bainitischen Untereinheit wurde simuliert und die Plastifizierung diskutiert. In [70] wurde der Einfluss einer makroskopischen Spannung, die durch Presshärten entsteht, auf das Wachstum einer bainitischen Untereinheit untersucht. Hierbei wurde ein Finite-Elemente-Code zur Simulation der makroskopischen

Verformung mit einem Phasenfeld-Softwarepaket gekoppelt, um das Wachstum eines bainitischen Ferrits zu beschreiben. Die bainitische Umwandlung wird durch ein Zusammenspiel der Grenzflächenenergie, einer konstanten, chemischen treibenden Kraft sowie von einem mechanischen Beitrag, der durch das Zusammenspiel des makroskopischen Spannungsfeldes mit den Eigendehnungen resultiert, beeinflusst. Die Ergebnisse in Bezug auf den umgewandelten Bainitanteil zeigen eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Dilatometer-Tests. Neben Phasenfeldansätzen wurde auch ein zellulärer Automat für die bainitische Umwandlung vorgestellt [71]. Eine einzelne bainitische Untereinheit wächst, bis eine bestimmte Länge erreicht wurde. Anschließend bilden sich in der Nähe der Untereinheit neue Untereinheiten, sodass eine bainitische Nadel gebildet wird, die aus mehreren Untereinheiten besteht. Andere Arbeiten basierend auf dem rekonstruktiven Umwandlungsmechanismus: Song et al. [72] wandten ein Multiphasenfeldmodell an, um die Kinetik und die Mikrostrukturentwicklung einer einzelnen bainitischen Nadel zu untersuchen. Die nadelförmige Form wurde mithilfe facettierter Anisotropie erzielt und die Karbidbildung wurde nicht berücksichtigt. In späteren Arbeiten [73–75] wurde zudem die Karbidbildung während der isothermen unteren bainitischen Umwandlung betrachtet und mehrere Nadeln, die eine Kurdjumov-Sachs-Orientierungsbeziehung zur parentalen Phase aufweisen, wurden dargestellt. Toloui und Militzer [76] entwickelten ein Modell für die Umwandlung von Austenit in Ferrit und karbidfreien oberen Bainit. Eine anisotrope Mobilität und Grenzflächenenergie wurde verwendet, um das nadelförmige Wachstum des Bainits zu modellieren. Die vorhergesagten Mikrostrukturen sind in guter Übereinstimmung mit experimentellen Untersuchungen. Ramazani et al. [77] nutzten anisotrope Grenzflächenparameter, um die bainitische Umwandlung beim schnellen Abkühlen nach dem Schweißvorgang zu modellieren.

2.1.3 Wachstum von Widmanstätten-Ferrit

Widmanstätten-Ferrit ist nach der Gefügeausbildung benannt, die vom österreichischen Naturwissenschaftler Alois Beckh von Widmanstätten in Meteoriten entdeckt wurde. Dieser entsteht bevorzugt bei Kohlenstoffgehalten von etwa 0,2 bis 0,4 Ma.-%. Ein wesentliches Merkmal sind Ferritplatten, die von Austenitkorngrenzen in das Korn hineingewachsen und im Schlibbild als Nadeln zu erkennen sind. [10]

Die Ursache des nadelförmigen Wachstums von Widmanstätten-Ferrit ist bis heute nicht vollständig verstanden. Eine anisotrope Grenzflächenregie kann nur bedingt durch die experimentell beobachteten Formen erklärt werden, die ein Seitenverhältnis von 10–100 aufweisen, da der experimentelle Nachweis fehlt, dass sich die Oberflächenenergie an der Spitze im Vergleich zu der an den Seiten um einen Faktor unterscheidet, der das große Seitenverhältnis von Widmanstätten-Ferrit plausibel erscheinen lässt [78]. Aus diesem Grund wird aktuell diskutiert, inwieweit mechanische treibende Kräfte das diffusionskontrollierte Wachstum von Widmanstätten-Ferrit beeinflussen. Viele experimentelle Arbeiten unterstützen die These des displaziven Charakters von Widmanstätten-Ferrit [79–81]. Basierend auf der displaziven Theorie untersuchten Cottura et al. [82] mithilfe der Phasenfeldmethode qualitativ den Einfluss von anisotropen Eigendehnungen auf das Wachstumsverhalten von nadelförmigen Mikrostrukturen. Sie kamen zu dem Schluss, dass anisotrope Eigendehnungen ein nadelförmiges Wachstum ähnlich der Widmanstätten-Strukturen bewirken kann. In einer Nachfolgearbeit [83] wurde Plastizität in das Phasenfeldmodell integriert und gezeigt, dass dies zu einem größeren Radius an der Spitze der Widmanstätten-Nadel führt. Unter Verwendung des von Cottura et al. [82] vorgestellten Phasenfeldmodells simulierten Zhang et al. [78] das Wachstum einer Widmanstätten-Nadel mit realistischeren Parametern. Im Gegensatz zum displaziven Ansatz untersuchten mehrere Autoren das Wachstum von Widmanstätten-Ferrit mit der Phasenfeldmethode, basierend auf der Annahme einer anisotropen Grenzflächenenergie [84–87]. In einer neueren Arbeit diskutierten Lin et al. [88] das Zusammenspiel zwischen Grenzflächenanisotropie und anisotropen Eigendehnungen und deren Einfluss auf das Wachstum und die Form einer Widmanstätten-Nadel. Lin et al. erzielten ein Seitenverhältnis von 1,5 bei Verwendung der Grenzflächenanisotropie zur Modellierung des anisotropen Wachstums, ein Verhältnis von fünf mithilfe anisotroper Eigendehnung und ein Verhältnis von zwölf bei Verwendung sowohl anisotroper Oberflächenenergien als auch anisotroper Eigendehnungen. Basierend auf diesen Ergebnissen postulierten die Autoren, dass das große Seitenverhältnis der Widmanstätten-Nadeln nur durch eine Kombination beider Effekte erklärt werden kann. In der Arbeit von Zhang et al. [78] konnte jedoch ein Seitenverhältnis von 15 mit lediglich anisotropen Eigendehnungen erzielt werden.

2.2 Phasenumwandlungen während der Wärmebehandlung von Dualphasenstahl

Dualphasenstahl besteht bei Raumtemperatur aus einer weichen ferritischen Matrix und aus 10 – 40 % harten martensitischen Inseln [89]. Aufgrund dieser zweiphasigen Mikrostruktur weist Dualphasenstahl eine attraktive Kombination aus Festigkeit und Duktilität auf (vgl. Abb. 1.1), weshalb er seit vielen Jahren im industriellen Maßstab eingesetzt wird [3]. Auch wenn ein grundsätzliches Verständnis des Materials aufgebaut werden konnte, ist die Entwicklung noch nicht abgeschlossen. Es sind noch eine Reihe von Fragestellungen unbeantwortet und es gibt Verbesserungsmöglichkeiten zur Optimierung der mechanischen Eigenschaften [90].

Zur Herstellung von Dualphasenstahl können unterschiedliche Wärmebehandlungsrouten zum Einsatz kommen [90, 91], die sich unter anderem darin unterscheiden, ob die interkritische Zweiphasenregion ($\alpha + \gamma$ -Gebiet) aus dem γ -Gebiet durch Abkühlen oder aus dem $\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$ -Gebiet durch Erwärmen betreten wird. In der Zweiphasenregion stellt sich eine ferritisch-austenitische Mikrostruktur ein, wobei sich die Anteile je nach chemischer Zusammensetzung des Stahls, Haltedauer und Temperatur ergeben. Durch Abschrecken wandelt sich Austenit in Martensit um, wodurch die für Dualphasenstahl charakteristische ferritisch-martensitische Mikrostruktur entsteht.

Eine typische Prozessroute zur Herstellung von Blech aus Dualphasenstahl umfasst die Prozessschritte Warmwalzen, Kaltwalzen, interkritisches Glühen und Abschrecken [90]. Nach dem Kaltwalzen liegt eine deformierte ferritisch-perlitische Mikrostruktur vor. Während der Wärmebehandlung findet eine Rekristallisation der deformierten ferritischen Bereiche statt und es bildet sich Austenit. Je nach Aufheizgeschwindigkeiten können sich die Rekristallisation des Ferrits und die Austenitumwandlung überschneiden, wobei sich unterschiedliche Mikrostrukturen ergeben [92]. Bei langsamer Erwärmung ist die Rekristallisation abgeschlossen, bevor es zu einer Austenitumwandlung im interkritischen Gebiet kommt, während größere Aufheizraten zu einer Überlappung beider Prozesse führen [92, 93].

Nach dem Kaltwalzen zeigt Dualphasenstahl, vergleichbar mit einem einphasigen ferritischem Stahl, eine typische Kaltwalztextur, die sich durch eine ausgeprägte α - und γ -Faser auszeichnet [94–96]. Je nach Prozessroute stellt sich eine unterschiedliche Texturentwicklung während der Wärmebehandlung ein [97]. Für Temperaturen unterhalb von 740 °C findet zunächst die Rekristalli-

sation der ferritischen Bereiche statt und nachfolgend die Austenitumwandlung. In diesem Fall wurde von Peranio et al. [98] festgestellt, dass die Textur nach der Wärmebehandlung der Textur nach dem Kaltwalzen ähnelt. Bei höheren Temperaturen überlagern sich Rekristallisation und Austenitumwandlung [98]. Hai-rong et. al. [99] beobachteten bei einer Glüh­temperatur von 860 °C eine Abschwächung der α - und eine Stärkung der γ -Faser. Ein vergleichbarer Unterschied zwischen Kalt- und Fertigband wurde auch von Wenk [95] festgestellt. Die Morphologie der martensitischen Einschlüsse, die je nach Prozessroute der Wärmehandlung unterschiedlich ausfallen kann [100], ist ein wesentliches Mikrostrukturmerkmal von Dualphasenstahl und beeinflusst die Eigenschaften unter mechanischer Belastung [101]. Unter Berücksichtigung dieses Mikrostrukturmerkmals können virtuelle Zugversuche das Fließverhalten von Dualphasenstahl bis zu einem gewissen Grad zufriedenstellend wiedergeben. Um die Vorhersage der plastischen Anisotropie zu verbessern, muss zudem die kristallographische Textur der ferritischen Bereiche als zweites Mikrostrukturmerkmal berücksichtigt werden [101]. Dualphasenstahl reagiert im Vergleich zu konventionellen Stählen deutlich sensitiver auf unterschiedliche Prozessbedingungen während des Herstellungsprozesses, weshalb ein sorgfältiges Einstellen der Prozessbedingungen und ein Verständnis kritischer Prozessparameter von großem Interesse sind [92].

2.2.1 Rekristallisation

Durch plastische Verformungen, die z. B. aufgrund von Kaltwalzen in ein Material eingebracht werden, bildet sich ein Materialzustand, der durch eine Vielzahl von Versetzungen charakterisiert ist. Um die Duktilität für weitere Bearbeitungsschritte zu erhöhen, wird das Material auf eine Temperatur gebracht, bei der es zu einer Neubildung des Gefüges und zu einer Reduktion der Versetzungen kommt. Dieser Vorgang wird Rekristallisation genannt und kann als zweistufiger Prozess verstanden werden, der sich aus der Nukleation neuer Körner und deren Wachstum zusammensetzt [102]. Die Reduktion der Versetzungen dient dabei als treibende Kraft für das Wachstum der neuen Körner. Es wird zwischen dynamischer und statischer Rekristallisation unterschieden. Bei der dynamischen Rekristallisation findet die Rekristallisation während der Umformung, bei der statischen nach Beendigung der Umformung statt. Eine Vielzahl von numerischen Modellen wurde entwickelt, um Vorher-

sagen über die Kornstruktur nach der Rekristallisation treffen zu können. Zur Beschreibung der Rekristallisation kommen unter anderem die Monte-Carlo-Methode [103, 104], zelluläre Automaten [105–109], die Level-Set-Methode [110–112], Vertex-Modelle [113] und Phasenfeldansätze [48, 114–117] zum Einsatz. Eine detaillierte Übersicht zu den in der Literatur bekannten Modellierungsansätzen der Rekristallisation wird von Hallberg [118] gegeben. Für die Modellierung der statischen Rekristallisation ist die Wahl eines geeigneten Nukleationskriteriums die größte Herausforderung, da die finale Mikrostruktur stark von dem verwendeten Nukleationmechanismus abhängt [114]. Das Wachstum der neuen Körner wird durch die treibende Kraft, die sich aus der Reduktion sowohl der gespeicherten Verformungsenergie als auch aus der Grenzflächenenergie zusammensetzt, und der Mobilität der neuen Körner bestimmt [102]. Da Nukleation leicht in Regionen mit der höchsten gespeicherten Verformungsenergie stattfindet, die durch eine plastische Deformation ins System eingebracht wurde, [119, 120], ist die gespeicherte Verformungsenergie sowohl entscheidend für die Auswahl der Nukleationskeime als auch eine Ursache für die treibende Kraft während der Rekristallisation. Ein entscheidender Punkt bei der Modellierung ist die Frage, wie die gespeicherte Verformungsenergie, die zu Beginn des Rekristallisationsprozesses vorliegt, bestimmt wird. Eine einfache Möglichkeit ist, jedem deformierten Korn eine zufällige, jedoch eine auf ein bestimmtes Intervall beschränkte, gespeicherte Verformungsenergie zuzuweisen [117]. Diese Annahme stellt jedoch eine starke Vereinfachung dar, da die gespeicherte Verformungsenergie auch innerhalb eines Kornes erheblich inhomogen sein kann. Experimentelle Messungen des Zustandes nach der Deformation berücksichtigen diese Inhomogenitäten und können als Ausgangspunkt für eine Simulation dienen [103]. Diese Vorgehensweise ist jedoch aufgrund der hohen Anzahl an Experimenten für systematische Untersuchungen ungeeignet [106]. Daher werden Modelle, die eine FE-Simulation der plastischen Verformung mithilfe eines Kristallplastizitätsmodells¹ mit einem Ansatz zur Simulation der Mikrostrukturentwicklung koppeln, als vielversprechendster Weg angesehen [114]. Eine wesentliche Herausforderung bei diesem Vorgehen besteht darin, die Datenpunkte nach der Deformation auf ein Rechnernetz für die Simulation der Rekristallisation zu über-

¹ In der englischsprachigen Literatur wird die Verwendung eines Kristallplastizitätsmodells im Rahmen der Finite-Elemente-Methode häufig als *Crystal Plasticity Finite Element Method* (CPFEM) bezeichnet.

tragen. Zudem muss die Frage geklärt werden, wie die durch die Deformation entstandenen Subkörner konstruiert werden können. Takaki und Tomita [114] stellten einen solchen Ansatz zur Kopplung einer FE-Simulation mit einer Phasenfeldsimulation der Rekristallisation vor. Sie überführen die gespeicherte Verformungsenergiegedichte nach der Deformation in die Grenzflächenenergie der Subkörner, wobei der Radius der Subkörner von der lokalen gespeicherten Verformungsenergiegedichte abhängt. Die Rekristallisation wird dann durch die Reduktion der Grenzflächenenergie getrieben, wobei die Mobilität und die Grenzflächenenergie in Abhängigkeit von der Missorientierung der Subkörner modelliert werden. Eine zusätzliche treibende Kraft in der Evolutionsgleichung aufgrund der Reduktion der gespeicherten Verformungsenergiegedichte ist daher nicht gegeben. Rekristallisierende Keime werden in dieser Arbeit als Keime mit einem Radius angesehen, der größer als der anderthalbfache Radius der initialen Subkornstruktur ist. Ein vergleichbares Vorgehen zur Erstellung der Subkornstruktur wird von Han et al. [106] angewendet. Abweichend zu Takaki und Tomita wird während der Subkornvergrößerung zunächst eine Missorientierung von 4° , also eine Kleinwinkelkorngrenze, zwischen allen Subkörnern angenommen. Sobald ein Subkorn, das eine Korngrenze zu einem Subkorn eines anderen Großkorns besitzt, einen kritischen Radius überschreitet, wird diese Korngrenze zu einer Großwinkelkorngrenze. Damit wächst das Subkorn rasch in das benachbarte Großkorn. In der Arbeit von Shen et al. [108] bildet die Basis für die Simulation der Rekristallisation auch eine FE-Simulation. Das Mapping der gespeicherten Verformungsenergiegedichte nach der Deformation auf ein äquidistantes Rechennetz erfolgt, indem jedem Diskretisierungspunkt des äquidistanten Rechennetzes der Zustand der nächstgelegenen Zelle der FE-Simulation zugeordnet wird. Um die nötige Genauigkeit zu erzielen, wird dabei die Anzahl der Rechenzellen des äquidistanten Rechennetzes im Vergleich zum Rechennetz der FE-Simulation erhöht. Ebenso ist es möglich, den Wert der gespeicherten Verformungsenergiegedichte auf dem äquidistanten Rechennetz basierend auf den umliegenden Rechenzellen der FM-Simulation zu interpolieren [115, 116]. Vondrous et al. [48] stellten eine weitere Methode zur Erzeugung einer initialen Subkornstruktur vor: Der Kerngedanke ihrer Arbeit ist es, basierend auf den Ergebnissen einer FE-Simulation des Kaltwalzens, eine Subkornstruktur als initiale Mikrostruktur für die Rekristallisation zu erzeugen, wobei jeder Integrationspunkt des FE-Netzes der Ausgangspunkt zum Erstellen eines eigenen Subkorns ist, das auf einer Voronoi-Zerlegung basiert. Jedem so erstellten Subkorn wird dabei die gespeicherte Verformungsenergiegedichte und Orientierung des Integrationspunktes des FE-Netzes zugeordnet.

2.2.2 Austenitumwandlung

Die kubisch-flächenzentrierte Phase Austenit ist nach dem britischen Metallurgen Sir William Chandler Roberts-Austen benannt. Die Austenitbildung ist eine diffusionskontrollierte Phasenumwandlung, die, vergleichbar mit der Rekristallisation, aus Nukleations- und Wachstumsprozessen besteht [121]. Der grundlegende Mechanismus der Austenitumwandlung einer ferritisch-perlitischen Mikrostruktur im interkritischen Bereich lässt sich dabei nach Speich et al. [122], bei Vernachlässigung weiterer Legierungselemente wie Magnesium, wie folgt beschreiben: Zunächst nukleiert Austenit an Ferrit/Perlit-Grenzflächen und wächst sehr schnell in Perlit hinein. Im zweiten Schritt findet eine Umwandlung von Ferrit zu Austenit statt, die durch die Kohlenstoffdiffusion bestimmt ist. Dieser Prozess ist wesentlich langsamer und führt letztendlich zum Phasengleichgewicht zwischen Ferrit und Austenit. Je nach Aufheizgeschwindigkeiten, Haltetemperaturen und -zeiten können sich die Rekristallisation des Ferrits und die Austenitumwandlung überschneiden, wobei sich unterschiedliche Mikrostrukturen ergeben [92, 93].

Die verschiedenen Phasenumwandlungen beim Abkühlen aus dem austenitischen Bereich, die während der Wärmebehandlungen stattfinden, wurden in den vergangenen Jahrzehnten intensiv erforscht, was sich auch durch viele simulative Arbeiten auf diesem Gebiet widerspiegelt. Dagegen fand die Modellierung der Mikrostrukturevolution der Ferrit-zu-Austenit- und Perlit-zu-Austenit-Umwandlung weit weniger Aufmerksamkeit [123]. Die Austenitumwandlung bei der Wärmebehandlung moderner hochfester Stahlsorten wie Dualphasenstahl hat jedoch einen großen Einfluss auf die finale Morphologie und daher auch auf die mechanischen Eigenschaften. Aus diesem Grund rückte die Modellierung der Austenitumwandlung in den letzten Jahren stärker in den Fokus [124].

Bos et al. [125] entwickelten einen zellulären Automaten zur Modellierung der Mikrostrukturentwicklung während der Wärmebehandlung eines kaltgewalzten Dualphasenstahls. Dabei kombinierten sie Modelle für die Rekristallisation, die Austenitumwandlung und die Martensitumwandlung. Letztere wird nicht explizit simuliert, sondern es wird lediglich angenommen, dass sich der gesamte Austenit in Martensit umwandelt. Mithilfe des Multiphasenfeldlösers MICRESS[®] simulierten Rudnizki et al. [123] die Austenitumwandlung einer bereits rekristallisierten, ferritisch-perlitischen Mikrostruktur. Die Auflösung von Perlit und die Ferrit-zu-Austenit-Umwandlung wurden in zwei Schritten unterteilt. In einem

ersten Schritt wurde die Perlitauflösung betrachtet, wobei die Kinetik lediglich durch die Kohlenstoffdiffusion bestimmt wird, und in einem zweiten Schritt wurde die Austenit-zu-Ferrit-Umwandlung unter Berücksichtigung weiterer Legierungselemente simuliert. In dieser Arbeit konnte eine gute Übereinstimmung zwischen simulierten und experimentell bestimmten Mikrostrukturen nach der Austenitumwandlung erzielt werden. In einer weiterführenden Arbeit [126] wurde zudem die Rekristallisation berücksichtigt. Zheng und Raabe [127] entwickelten einen zellulären Automaten mit dem Fokus, die Interaktion der gleichzeitig ablaufenden Rekristallisation und Austenitumwandlung bei der Wärmebehandlung eines kaltgewalzten Dualphasenstahls zu untersuchen. Sie kamen zu dem Schluss, dass das Zusammenspiel beider Prozesse nicht nur die Kinetik, sondern auch die Morphologie und insbesondere die räumliche Verteilung von Austenit beeinflusst. Ebenfalls wurde von Zhu und Militzer [100] ein Phasenfeldmodell für die simulative Beschreibung der Wärmebehandlung eines kaltgewalzten Dualphasenstahls entwickelt, das es ermöglicht, die Rekristallisation und die Austenitumwandlung sowohl sequentiell als auch simultan abzubilden. Sowohl die Umwandlungskinetik als auch die Mikrostrukturentwicklung während einer industriell eingesetzten Wärmebehandlungsrouten konnten wiedergegeben werden.

In den aufgeführten Arbeiten [100, 123, 125–127] wird Perlit jeweils als homogenisierte Phase aus Ferrit und Zementit betrachtet.

2.2.3 Martensitumwandlung in Dualphasenstahl

Aufgrund der Volumenausdehnung von 2-4 % während der martensitischen Umwandlung liegt nach dem Abschrecken von Dualphasenstahl ein inhomogener Materialzustand vor [128]. Wegen der im Vergleich zum Martensit geringen Streckgrenze von Ferrit verformt sich Ferrit in der Nähe der Ferrit/Martensit-Korngrenzen plastisch, um die Volumenausdehnung zu kompensieren. Kadkhodapour et al. [129] konnten experimentell nachweisen, dass die Härte von Ferrit mit zunehmendem Abstand zur Ferrit/Martensit-Korngrenze abnimmt. Dieser inhomogene Materialzustand kann grundsätzlich auf zwei Arten in ein Modell für virtuelle Zugversuche einer Dualphasen-Mikrostruktur integriert werden. Ausgehend von einem ferritisch-austenitischen Gefüge kann die Martensitumwandlung simuliert werden, um einen geeigneten initialen Spannungs- und Dehnungszustand für den anschließenden Belastungstest zu erzeugen. In der

Regel wird dazu angenommen, dass sich austenitische Bereiche isotrop und in Abhängigkeit von einer abfallenden Temperatur in Martensit umwandeln. Hierbei wird lediglich die Volumenausdehnung berücksichtigt und die zugrunde liegende martensitische Struktur (Substruktur) nicht aufgelöst [130, 131]. Daneben ist es auch möglich, die Materialeigenschaften in Abhängigkeit vom Abstand zur Ferrit/Martensit-Korngrenze zu berechnen, ohne den Abschreckschritt direkt in die Simulationskette einzubeziehen [129]. Zarei et al. [132] kamen zu dem Schluss, dass eine bessere Vorhersage der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurve möglich ist, wenn die Inhomogenitäten aufgrund der volumetrischen Ausdehnung während der Martensitumwandlung berücksichtigt werden.

2.2.4 Wärmebehandlungskette Dualphasenstahl

Experimentelle Arbeiten sind in der Lage, alle Prozessschritte bei der Wärmebehandlung von Dualphasenstahl im Labor nachzubilden und den Materialzustand an verschiedenen Stellen während der Prozessroute zu charakterisieren [95, 133]. Da bereits die Modellierung eines einzelnen Teilprozesses komplex ist, gibt es bisher nur wenige Arbeiten (z. B. [121, 134]), die als Ziel haben, für Dualphasenstahl komplette Simulationsketten, inklusive virtueller Zugversuche an der resultierenden Mikrostruktur, zur Bestimmung der mechanischen Eigenschaften aufzustellen. Teilaspekte der Prozessroute wurden z. B. von Madej et al. [135] präsentiert, die einen Modellierungsansatz für eine sequentiell gekoppelte Simulation des Kaltwalzens und der Rekristallisation eines ferritisch-perlitischen Ausgangsgefüges vorstellten. Zhu und Militzer [100] stellten einen Phasenfeldansatz zur Simulation der gleichzeitig ablaufenden Rekristallisation und Austenitisierung während des interkritischen Glühens von Dualphasenstahl vor.

3 Multiphasenfeldmethode zur Beschreibung der Mikrostrukturentwicklung in mehrphasigen und mehrkomponentigen Systemen

Die Phasenfeldmethode hat sich in den letzten Jahrzehnten als vielseitiges Werkzeug etabliert, um Mikrostrukturentwicklungen auf mesoskopischer Längenskala zu beschreiben [136]. Alle Phasenfeldmodelle haben gemeinsam, dass eine beliebige Mikrostruktur, die sich aus physikalisch unterscheidbaren Regionen zusammensetzt, mithilfe eines einzelnen oder mehrerer Ordnungsparametern parametrisiert wird, wobei der Übergang eines Ordnungsparameters zwischen zwei Regionen kontinuierlich innerhalb einer Grenzfläche mit finiter Breite erfolgt. Mithilfe dieses diffusen Übergangs zwischen physikalisch unterscheidbaren Regionen, die auch als Phasen bezeichnet werden, ist während ihrer zeitlichen Evolution keine explizite Grenzflächenverfolgung notwendig, was ein Grund für den Erfolg der Phasenfeldmethode ist [137]. Ausführliche Übersichtsartikel zur Phasenfeldmethode sind in den Referenzen [5, 137–140] zu finden.

Zur besseren Unterscheidung der verschiedenen Modellansätze wird nach [141, 142] folgende Abgrenzung verwendet: Auf der einen Seite gibt es die Multiphasenfeldmethode, die aus den Arbeiten von Steinbach et al. [143, 144], Garcke et al. [145] und Nestler et al. [146] hervorging. Auf der anderen Seite entstanden Modelle ausgehend von Arbeiten unter Beteiligung von L.-Q. Chen [147–149], die nach Gránásy et al. [142] „Multiordnungsparametermodelle“ (engl.: *multiorder-parameter models*) oder nach Moelans et al. [141] „Kontinuumsfeldmodelle“ (engl.: *continuum field models*) genannt werden. Beide Ansätze unterscheiden sich in einem wesentlichen Punkt: Während die Summe aller Phasen in den Multiphasenfeldmodellen an jeder Stelle im System intrinsisch eins ergibt und die Ordnungsparameter somit als Volumenfraktionen

verstanden werden können, ist abweichend dazu in Multiordnungsparametermodellen die Einhaltung der Summenbedingung nicht zwangsläufig gegeben. Trotz ihrer unterschiedlichen Formulierungen liefern beide Modellansätze bei entsprechender Anwendung vergleichbare Ergebnisse [141].

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Multiphasenfeldmethode nach [143, 144, 146] verwendet. Dabei wird jeder Phase ein Ordnungsparameter $\phi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ zugewiesen, der Teil des N -Tupels $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}, t)$ ist, wobei N die Anzahl aller Ordnungsparameter, t die Zeit und \mathbf{x} der Ortsvektor ist. Während in diesem Kapitel allgemeine Grundlagen der Multiphasenfeldmodellierung sowie deren Kopplung mit zusätzlich treibenden Kräften vorgestellt werden, werden in den folgenden Kapiteln spezifische Modifikationen und Ergänzungen zur Modellierung der einzelnen Phasenumwandlungen während der Wärmebehandlung von Stahl erläutert. Die Darstellung der Multiphasenfeldmethode beschränkt sich dabei auf die Verwendung isotroper Grenzflächenenergien und Mobilitäten sowie auf die Modellierung isothermer Systeme. Um mechanische Einflüsse zu berücksichtigen, wird die Phasenfeldmethode mit einem Elastizitätsmodell für kleine Deformationen und mit einem J_2 -Plastizitätsmodell gekoppelt.

3.1 Das freie Energiefunktional

Die freie Energie eines Systems mit dem Volumen V setzt sich im Allgemeinen aus Energiebeiträgen aufgrund von Grenzflächen zwischen unterschiedlichen Phasen und aus Energiebeiträgen, die innerhalb einer Phase vorliegen, zusammen. Letztere werden im weiteren Verlauf als volumetrische Energiedichtebeiträge bezeichnet. Im Phasenfeldkontext ist die freie Energie gegeben mit

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}, \dots) &= \mathcal{F}_{\text{intf}}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}) + \mathcal{F}_{\text{bulk}}(\dots) \\
 &= \int_V W(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}, \dots) dV \\
 &= \int_V W_{\text{intf}}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}) + \bar{W}_{\text{bulk}}(\dots) dV.
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Dabei enthält der Term $W_{\text{intf}}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi})$ die Energiebeiträge aller Grenzflächen und der Term $\bar{W}_{\text{bulk}}(\dots)$, der von beliebigen Größen abhängig sein kann, die

volumetrischen Energiebeiträge. In der Regel ist die volumetrische Energiedichte phasenabhängig und kann somit zur Grenzflächenbewegung beitragen. Jedoch sind auch Energiedichtebeiträge unabhängig des Phasenfeldparameters möglich [41]. Die phasenanteilig interpolierte volumetrische Energiedichte ist gegeben mit

$$\bar{W}_{\text{bulk}}(\boldsymbol{\phi}, \dots) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} W_{\text{bulk}}^{\alpha}(\dots). \quad (3.2)$$

3.2 Phasenfeldevolutionsgleichung

Jedes System ist bestrebt, die freie Energie zu minimieren. Eine Möglichkeit zur Minimierung des Energiefunktionals (3.1) besteht durch eine Änderung der Morphologie¹. Dazu wird eine Phasenfeldevolutionsgleichung verwendet, die lokal durch eine Veränderung der Phasenanteile die freie Energie minimiert. In der Literatur lassen sich zwei Ansätze zur Formulierung der Allen-Cahn Evolutionsgleichung im Multiphasenkontext unterscheiden. Nestler et al. [146] verwenden einen sogenannten Lagrange-Parameter λ , um die Einhaltung der Summenbedingung $\sum_{\alpha} \phi_{\alpha} = 1$ zu gewährleisten:

$$\begin{aligned} \tau \epsilon \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial t} &= -\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi_{\alpha}} - \lambda \\ &= -\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi_{\alpha}} + \frac{1}{\tilde{N}} \sum_{\beta} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi_{\beta}}, \quad \forall \phi_{\alpha}, \alpha = 0, \dots, N. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Dabei ist \tilde{N} die Anzahl der lokal aktiven Phasen und

$$\frac{\delta \mathcal{F}(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}, \dots)}{\delta \phi_{\alpha}} = \left(\frac{\partial}{\partial \phi_{\alpha}} - \nabla \cdot \frac{\partial}{\partial \nabla \phi_{\alpha}} \right) W(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}, \dots)$$

die Variationsableitung des Energiefunktionals \mathcal{F} nach dem Ordnungsparameter ϕ_{α} . Der Divergenzoperator wird mit $(\nabla \cdot (\dots))$ dargestellt. Die Kinetik der

¹ Auch ohne eine Phasenumwandlung kann die freie Energie minimiert werden, z. B. durch eine Konzentrationsumverteilung [150].

Phasenumwandlungen wird mithilfe des Relaxationsparameters τ und die Breite der diffusen Grenzfläche mit dem Parameter ϵ eingestellt. Um eine abweichende Relaxation unterschiedlicher Phasenumwandlungen einzustellen, kann der Relaxationsparameter lokal mithilfe des Relaxationsparameters zwischen zwei Phasen $\tau_{\alpha\beta}$ und ihren Volumenfraktionen (wie z. B. in [48]) gewichtet werden

$$\tau(\phi) = \frac{\sum_{\alpha < \beta} \tau_{\alpha\beta} \phi_{\alpha} \phi_{\beta}}{\sum_{\alpha < \beta} \phi_{\alpha} \phi_{\beta}}. \quad (3.4)$$

Problematisch wird dieser Ansatz, wenn sich die Relaxationsraten unterschiedlicher Phasenumwandlungen im System stark unterscheiden. In diesem Fall wird die Phasenumwandlung $\alpha \rightarrow \beta$ in den Tripelpunkten der Phasen α , β und γ durch die Formulierung (3.4) von der Relaxationsrate $\tau_{\beta\gamma}$ beeinflusst und es kann zu unerwünschten Pinning-Effekten kommen.

Ein anderer Ansatz wird von Steinbach et al. [140, 143, 144] verfolgt. Jede Phasenumwandlung wird als Superposition von paarweisen Umwandlungen betrachtet, und mit der Mobilität zwischen zwei Phasen $M_{\alpha\beta} = 1/\tau_{\alpha\beta}$ ist die Evolutionsgleichung gegeben mit

$$\frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial t} = -\frac{1}{\tilde{N}\epsilon} \sum_{\beta \neq \alpha}^{\tilde{N}} \left[M_{\alpha\beta} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi_{\alpha}} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi_{\beta}} \right) \right], \quad \forall \phi_{\alpha}, \alpha = 0, \dots, N. \quad (3.5)$$

In Gl. (3.5) ist deutlich erkennbar, dass keine Interpolation der Mobilität wie in Gl. (3.4) verwendet wird. Jede Phasenumwandlung $\alpha \rightarrow \beta$ wird mit der entsprechenden Mobilität $M_{\alpha\beta}$ skaliert. Für den Fall gleicher Mobilitäten aller im System vorhandenen Phasengrenzen, $M_{\alpha\beta} = M = 1/\tau$, sind die Evolutionsgleichungen nach Nestler, Gl. (3.3), und Steinbach, Gl. (3.5), äquivalent. Dies beinhaltet auch den Zweiphasenfall.

Die phasenanteilig interpolierte volumetrische Energiedichte wird nach Gl. (3.2) mit dem Ordnungsparameter gewichtet. Dies führt nach Gl. (3.5) dazu, dass die Differenz der volumetrischen Energiedichten gleich verteilt in Normalenrichtung auf das Grenzflächenprofil aufgeprägt wird. Dadurch wird das Profil verzerrt und eine zufriedenstellende Wiedergabe der Grenzflächenenergie ist nicht mehr zwangsläufig gegeben. Nach [140] können die Beiträge der volumetrischen Energiedichten in der Grenzflächenregion so gewichtet auf das Profil aufgeprägt werden, dass die Abweichung vom Gleichgewichtsprofil

minimiert wird. Mit der separaten Gewichtung der Differenz der volumetrischen Energiedichten ergibt sich die Evolutionsgleichung zu

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = \frac{1}{\tilde{N}\epsilon} \sum_{\beta \neq \alpha}^{\tilde{N}} \left[M_{\alpha\beta} \left(\Delta W_{\text{intf}}^{\alpha\beta} + \frac{8\sqrt{\phi_\alpha \phi_\beta}}{\pi} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \right) \right], \quad \forall \phi_\alpha, \alpha = 0, \dots, N, \quad (3.6)$$

mit $\Delta W_{\text{intf}}^{\alpha\beta} = \delta \mathcal{F}_{\text{intf}} / \delta \phi_\beta - \delta \mathcal{F}_{\text{intf}} / \delta \phi_\alpha$ als krümmungsminimierender Beitrag und $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} = \delta \mathcal{F}_{\text{bulk}} / \delta \phi_\beta - \delta \mathcal{F}_{\text{bulk}} / \delta \phi_\alpha$ als volumetrische treibende Kraft. Gl. (3.6) stellt, sofern nicht anders angegeben, den Ausgangspunkt für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen dar. Um weitere Effekte (z. B. Nukleation) zu berücksichtigen, wird diese Evolutionsgleichung in den Abschnitten 3.6 und 4.3 zusätzlich erweitert.

Der Vollständigkeit halber wird an dieser Stelle eine weitere Form der Multiphasen-Evolutionsgleichung erwähnt: Die sogenannte antisymmetrische Approximation [140]. In Fällen, in welchen die exakte Dynamik von Tripel- oder höherwertigen Punkten eine untergeordnete Rolle spielt [151], kann die Evolutionsgleichung

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = \sum_{\beta \neq \alpha} M_{\alpha\beta} \left\{ \gamma_{\alpha\beta} \left[\phi_\beta \nabla^2 \phi_\alpha - \phi_\alpha \nabla^2 \phi_\beta + \frac{4}{\epsilon^2 \pi^2} (\phi_\alpha - \phi_\beta) \right] + \frac{4\sqrt{\phi_\alpha \phi_\beta}}{\epsilon \pi} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \right\}, \quad \forall \phi_\alpha, \alpha = 0, \dots, N \quad (3.7)$$

verwendet werden, wie z. B. in [72, 76, 126]. Hierbei ist $\gamma_{\alpha\beta}$ die Grenzflächenenergie einer α - β -Grenzfläche. Im Zweiphasenfall sind Gl. (3.6) und Gl. (3.7) bei Verwendung des Multihindernispotentials (Gl. (3.10), s. nächster Abschnitt) äquivalent. Wenn jedoch lokal drei oder mehr Phasen vorhanden sind, ergeben sich Unterschiede durch die unterschiedliche Formulierung der Grenzflächenterme sowie durch die Tatsache, dass die volumetrischen treibenden Kräfte nicht mehr durch die Anzahl der lokal aktiven Phasen geteilt werden.

3.3 Grenzflächenenergiedichte

Nach Nestler et al. [146] setzt sich die Grenzflächenenergiedichte

$$W_{\text{intf}}(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}) = \epsilon a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}) + \frac{1}{\epsilon} \omega(\boldsymbol{\phi})$$

aus der Gradientenenergiedichte $\epsilon a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi})$ und der potentiellen Energiedichte $\omega(\boldsymbol{\phi})/\epsilon$ zusammen. Das Zusammenspiel beider Beiträge führt zur Bildung einer diffusen Grenzfläche sowie zur Abbildung der Grenzflächenenergie über einen volumetrischen Bereich. Nach Nestler et al. [146] ist die Gradientenenergiedichte

$$\epsilon a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}) = \epsilon \sum_{\alpha < \beta} \gamma_{\alpha\beta} |\mathbf{q}_{\alpha\beta}|^2 \quad (3.8)$$

als Funktion von $\gamma_{\alpha\beta}$ und des generalisierten α - β -Gradienten $\mathbf{q}_{\alpha\beta} = \phi_\alpha \nabla\phi_\beta - \phi_\beta \nabla\phi_\alpha$ formuliert. Sofern nicht anders angegeben, wird diese Formulierung der Gradientenenergiedichte standardmäßig in dieser Arbeit verwendet.

Nach Steinbach et al. [143, 144] kann auch eine alternative Formulierung verwendet werden:

$$\epsilon a(\boldsymbol{\phi}, \nabla\boldsymbol{\phi}) = \epsilon \sum_{\alpha < \beta} -\nabla\phi_\alpha \nabla\phi_\beta. \quad (3.9)$$

Die potentielle Energiedichte kann ebenfalls auf unterschiedliche Arten formuliert werden [146]. Das Multimuldenpotential

$$\frac{1}{\epsilon} \omega_{\text{well}}(\boldsymbol{\phi}) = \frac{9}{\epsilon} \sum_{\alpha < \beta} \gamma_{\alpha\beta} \phi_\alpha^2 \phi_\beta^2 + \frac{1}{\epsilon} \sum_{\alpha < \beta < \delta} \gamma_{\alpha\beta\delta} \phi_\alpha^2 \phi_\beta^2 \phi_\delta^2$$

ist so formuliert, dass die Ableitung an den Stellen $\boldsymbol{\phi} = \{0; 1\}$ in einer Grenzfläche zwischen zwei Phasen null ergibt. Daneben ist an diesen Stellen die Ableitung des Multihindernispotentials

$$\frac{1}{\epsilon} \omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\phi}) = \begin{cases} \frac{16}{\epsilon \pi^2} \sum_{\alpha < \beta} \gamma_{\alpha\beta} \phi_\alpha \phi_\beta + \frac{1}{\epsilon} \sum_{\alpha < \beta < \delta} \gamma_{\alpha\beta\delta} \phi_\alpha \phi_\beta \phi_\delta, & \text{wenn } \boldsymbol{\phi} \in \mathcal{G} \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.10)$$

ungleich null, was zu einer finiten Grenzflächenbreite führt. Um Drittphasen in Grenzflächen zwischen zwei Phasen zu vermeiden, wird ein Dreiphasenbeitrag in Abhängigkeit des Parameters $\gamma_{\alpha\beta\delta}$ verwendet [146]. Eine detaillierte Diskussion dieses Terms kann in [152] gefunden werden. Es sei angemerkt, dass bei Verwendung der Gradientenenergiedichte nach Steinbach (3.9) in Kombination mit dem Multihindernispotential (3.10) auf die Verwendung eines Dreiphasenbeitrages verzichtet werden kann [144]. Für das Multihindernispotential wird die potentielle Energiedichte auf unendlich gesetzt, wenn das N -Tupel ϕ nicht auf dem Gibbs-Simplex

$$\mathcal{G} = \{\phi \mid \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} = 1, \quad \text{und} \quad \phi_{\alpha} \geq 0\} \quad (3.11)$$

liegt. Anders ausgedrückt bedeutet die obige Bedingung, dass keine negativen Phasenfeldwerte zugelassen werden. Ein Vorgehen zur Einhaltung der Bedingung (3.11) ist in [153] beschrieben. Die Vermeidung negativer Phasenfeldwerte hat nicht zuletzt praktische Gründe. So ist die Wurzel für negative Werte nicht definiert, weshalb die Evolutionsgleichung (3.6) nicht ohne Weiteres anwendbar wäre. Zudem ist die Vorstellung, dass die Phasenfeldwerte Volumenfraktionen darstellen, mit negativen Phasenfeldwerten schwer vereinbar. Trotzdem kann der nachfolgende Ansatz, bei dem genau dies gewollt zugelassen wird, seine Rechtfertigung haben, wie in Abschnitt 3.8 deutlich wird. Eine Abwandlung des Multihindernispotentials (3.10) ist nach [144] mit

$$\frac{1}{\epsilon} \omega_{\text{ob,b}}(\phi) = \frac{16}{\epsilon \pi^2} \sum_{\alpha < \beta} \gamma_{\alpha\beta} |\phi_{\alpha} \phi_{\beta}| + \frac{1}{\epsilon} \sum_{\alpha < \beta < \delta} \gamma_{\alpha\beta\delta} |\phi_{\alpha} \phi_{\beta} \phi_{\delta}| \quad (3.12)$$

gegeben. Hierbei kann auf die explizite Forderung, dass alle Phasenfeldwerte auf dem Gibbs-Simplex liegen, verzichtet werden und es kommt zu Phasenfeldwerten mit $\phi_{\alpha} > 1$ und $\phi_{\alpha} < 0$. Die Summenbedingung $\sum_{\alpha} \phi_{\alpha} = 1$ bleibt auch hier erfüllt, da die Phasenfeldevolutionsgleichung (3.5) intrinsisch die Bedingung $\sum_{\alpha} \dot{\phi}_{\alpha} = 0$ erfüllt. Der Verlauf der drei vorgestellten Formulierungen ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Das Multihindernispotential (Gl.(3.10)) und das Multihindernispotential unter Verwendung des Betrages (Gl.(3.12)) zeigen im Bereich $0 \leq \phi_{\alpha} \leq 1$ den gleichen Verlauf. Durch die Verwendung des Betrages ist die potentielle Energie für $\phi_{\alpha} < 0$ größer als für $\phi_{\alpha} = 0$, sodass Phasenfeldwerte größer als eins oder kleiner als null nur in einem begrenzten Rahmen auftreten.

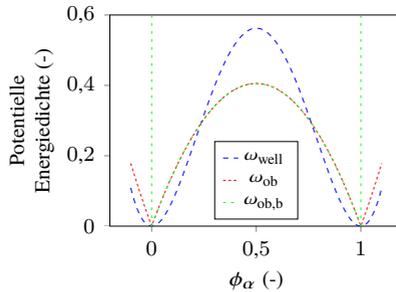


Abbildung 3.1: Dimensionsloser Verlauf der potentiellen Energiedichte einer Grenzfläche zwischen zwei Phasen für $\epsilon = 1$ und $\gamma_{\alpha\beta} = 1$.

Für effiziente, großskalige Simulationen hat sich das Multihindernispotential nach Gl. (3.10) durchgesetzt [48, 154], da damit die Anzahl der Rechenzellen, in denen zwei oder mehr Phasen gleichzeitig vorliegen, am geringsten ist und somit der Rechenaufwand minimiert werden kann.

3.4 Kopplung mit volumetrischen Energiedichtebeiträgen

In den kommenden Abschnitten werden die zusätzlichen volumetrischen Energiedichtebeiträge, die zu einer treibenden Kraft und somit zusätzlich zur Krümmungsminimierung zu einer Bewegung der Grenzfläche führen können, für die in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen näher erläutert. Je nach Anwendungsfall wird ein freies Energiefunktional definiert, das die für die betrachtende Mikrostrukturevolution ausschlaggebenden Energiedichtebeiträge enthält.

3.4.1 Chemische Energiedichte bei zeitlich unveränderter Konzentrationsverteilung

Die chemische Energiedichte bei einer zeitlich unveränderten Konzentrationsverteilung wird mit

$$\bar{W}_{\text{chem},k}(\phi, \bar{c}, T) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} W_{\text{chem}}^{\alpha}(\mathbf{c}^{\alpha}, T), \quad (3.13)$$

ausgedrückt, wobei $W_{\text{chem}}^{\alpha}(\mathbf{c}, T)$ eine phasenabhängige Größe ist, die von der Temperatur T und der lokalen Konzentration \mathbf{c}^{α} in der Phase α abhängt. Hierbei ist \mathbf{c}^{α} ein Tupel mit $K - 1$ unabhängigen Konzentrationen, wobei K die Anzahl der unterschiedlichen Konzentrationen im System ist. Die interpolierte Konzentration wird mit $\bar{c} = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \mathbf{c}^{\alpha}$ berechnet und es gilt

$$\sum_i^K \bar{c}_i = 1.$$

Zur besseren Unterscheidbarkeit mit der chemischen treibenden Kraft, bei gleichzeitiger Diffusion von Legierungselementen (s. Abschnitt 3.4.2), wird die phasenanteilig interpolierte, chemische Energiedichte bei zeitlich unveränderter Konzentrationsverteilung $\bar{W}_{\text{chem},k}$ mit dem Subskript „k“ gekennzeichnet. Bei dieser Formulierung liegt die Annahme zugrunde, dass die Umwandlung so schnell abläuft, dass keine Diffusion der Legierungselemente stattfindet. Die Konzentration kann aber örtlich unterschiedlich ausfallen und somit zu örtlich unterschiedlichen treibenden Kräften führen. Die phasenabhängigen Werte für $W_{\text{chem}}^{\alpha}(\mathbf{c}^{\alpha}, T)$ können in Abhängigkeit von der vorliegenden Legierung und Temperatur aus thermodynamischen Datenbanken entnommen werden. Im einfachsten Fall vereinfacht sich $W_{\text{chem}}^{\alpha}(\mathbf{c}^{\alpha}, T)$ zur in der Simulation konstanten, phasenabhängigen Größe W_{chem}^{α} .

In Abb. 3.2 ist am Beispiel der Martensitumwandlung der schematische Verlauf der freien chemischen Energie für Martensit und Austenit dargestellt. Bei der Gleichgewichtstemperatur T_0 sind beide Phasen energetisch gleichwertig. Bei Temperaturen unterhalb der Gleichgewichtstemperatur weist Martensit eine geringere chemische Energie auf, wobei die Umwandlung erst unterhalb der Martensitstarttemperatur einsetzt.

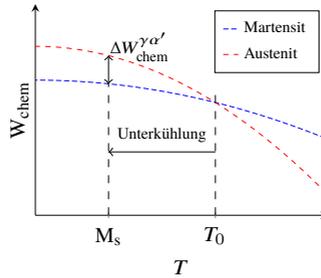


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Verlaufs der chemischen freien Energie für Martensit und Austenit als Funktion der Temperatur, nach [155]. Hierbei ist M_s die Martensitstarttemperatur und T_0 die Gleichgewichtstemperatur.

3.4.2 Chemische Energiedichte bei gleichzeitiger Konzentrationsdiffusion

Die Formulierung der freien chemischen Energiedichte bei gleichzeitiger Konzentrationsdiffusion basiert auf den Vorarbeiten von Choudhury und Nestler [156]. Anstelle des häufig verwendeten Großkanonischen Potentials [150, 154, 156, 157] kann, ausgehend von einer freien chemischen Energiedichte, eine identische treibende Kraft formuliert werden [158]. Die freie Energiedichte ist gegeben mit

$$\bar{W}_{\text{chem,d}}(\phi, \bar{c}, T) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} W_{\text{chem}}^{\alpha}(\mathbf{c}^{\alpha}, T)$$

und die Ableitung nach dem Ordnungsparameter ergibt

$$\frac{\partial \bar{W}_{\text{chem,d}}}{\partial \phi_{\alpha}} = W_{\text{chem}}^{\alpha} + \sum_{i=1}^{K-1} \sum_{\beta} \frac{\partial W_{\text{chem}}^{\beta}}{\partial c_i^{\beta}} \frac{\partial c_i^{\beta}}{\partial \phi_{\alpha}} \phi_{\beta}. \quad (3.14)$$

Mit der interpolierten Konzentration $\bar{c}_i = \sum_{\beta} c_i^{\beta} \phi_{\beta}$, dem Zusammenhang $\sum_{\beta} \phi_{\beta} \partial c_i^{\beta} / \partial \phi_{\alpha} = -c_i^{\alpha}$ und dem chemischen Potential $\mu_i = \partial W_{\text{chem}}^1 / \partial c_i^1 = \dots = \partial W_{\text{chem}}^N / \partial c_i^N$ vereinfacht sich Gl. (3.14) zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{W}_{\text{chem,d}}}{\partial \phi_{\alpha}} &= W_{\text{chem}}^{\alpha} + \sum_{i=1}^{K-1} \mu_i \sum_{\beta} \frac{\partial c_i^{\beta}}{\partial \phi_{\alpha}} \phi_{\beta} \\ &= W_{\text{chem}}^{\alpha} - \sum_{i=1}^{K-1} \mu_i c_i^{\alpha}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Gl. (3.15) stellt das Großkanonische Potential der Phase α dar

$$\Psi_{\text{chem}}^{\alpha}(T, \boldsymbol{\mu}) = W_{\text{chem}}^{\alpha}(\mathbf{c}^{\alpha}(T, \boldsymbol{\mu}), T) - \sum_{i=1}^{K-1} \mu_i c_i^{\alpha}(T, \boldsymbol{\mu}),$$

wobei das Tupel $\boldsymbol{\mu}$ die $K - 1$ unabhängigen chemischen Potentiale enthält. Die daraus resultierende treibende Kraft ist demnach die Differenz der entsprechende Großkanonischen Potentiale $\Delta W_{\text{chem}}^{\alpha\beta} = \Psi_{\text{chem}}^{\beta} - \Psi_{\text{chem}}^{\alpha}$. Die Evolutionsgleichung der $K - 1$ unabhängigen Konzentrationsfelder wird mithilfe des Gradienten des chemischen Potentials bestimmt

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\sum_{j=1}^{K-1} \bar{D}_{ij}(\boldsymbol{\phi}) \nabla \mu_j \right),$$

wobei sich die interpolierte Mobilität

$$\bar{\mathcal{M}}_{ij}(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \mathcal{M}_{ij}^{\alpha} = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} D_i^{\alpha} \frac{\partial c_i^{\alpha}}{\partial \mu_j}$$

basierend auf der Diffusivität D_i^{α} der Komponente i innerhalb der Phase α und der Ableitung der Konzentration c_i^{α} nach dem chemischen Potential μ_j ergibt. Daraus folgt die Evolutionsgleichung für das chemische Potential

$$\frac{\partial \mu_i}{\partial t} = \left[\sum_{\alpha=1}^N \phi_{\alpha} \frac{\partial c_i^{\alpha}(\boldsymbol{\mu}, T)}{\partial \mu_j} \right]_{ij}^{-1} \left\{ \nabla \cdot \sum_{j=1}^{K-1} \bar{\mathcal{M}}_{ij}(\boldsymbol{\phi}) \nabla \mu_j - \sum_{\alpha=1}^N c_i^{\alpha}(\boldsymbol{\mu}, T) \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial t} \right\}.$$

3.4.3 Elastizitätsmodell und elastische Energiedichte

Zur Berechnung der Spannungen und Dehnungen im Multiphasenfeldkontext und der elastischen treibenden Kraft wird das Modell für infinitesimale Deformationen nach Schneider et al. [159, 160] verwendet. Das Modell basiert auf den mechanischen Sprungbedingungen und nutzt Konfigurationskräfte als elastische treibende Kräfte, wodurch überschüssige Energiedichtebeiträge in der diffusen Grenzfläche minimiert werden. Trotz der Verwendung einer diffusen Parametrisierung einer Grenzfläche zwischen zwei Phasen kann gezeigt werden, dass das Modell die Lösung für eine scharf parametrisierte Grenzfläche zwischen zwei Phasen wiedergibt [159, 160]. In Bereichen, in denen mehr als zwei Phasen koexistieren, kommt ein Homogenisierungsansatz zum Einsatz [160]. Alternative Interpolationsverfahren, die jedoch nicht auf den mechanischen Sprungbedingungen basieren, werden in den Quellen [159–164] diskutiert.

Im Kontext infinitesimaler Deformationen ist der Zusammenhang zwischen der linearisierten Dehnung und dem Verschiebungsfeld gegeben mit $\boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)/2$, wobei $(\nabla \mathbf{u})_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$ ist. Es gilt die Einsteinsche Summenkonvention. Innerhalb einer Phase α werden die Spannungen nach $\sigma_{ij}^\alpha = (\mathcal{C}^\alpha [\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\alpha])_{ij} = C_{ijkl}^\alpha (\varepsilon_{kl}^\alpha - \tilde{\varepsilon}_{kl}^\alpha)$ berechnet, wobei $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\alpha$ alle inelastischen Dehnungsbeiträge enthält und \mathcal{C} der Steifigkeitstensor ist. Mit dieser Notation wird die elastische Energiedichte ausgedrückt:

$$\bar{W}_{\text{elast}}(\boldsymbol{\phi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} W_{\text{elast}}^{\alpha}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha}) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \frac{1}{2} (\varepsilon_{ij}^{\alpha} - \tilde{\varepsilon}_{ij}^{\alpha}) C_{ijkl}^{\alpha} (\varepsilon_{kl}^{\alpha} - \tilde{\varepsilon}_{kl}^{\alpha}).$$

Die Herleitung des Elastizitätsmodells, das im Bereich der diffusen Grenzfläche zum Einsatz kommt, beginnt mit der Definition eines Normalenvektors innerhalb der Grenzfläche

$$\mathbf{n}(g(\boldsymbol{\phi})) = \frac{\nabla g(\boldsymbol{\phi})}{|\nabla g(\boldsymbol{\phi})|},$$

mit $g(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{\alpha < \beta} \phi_{\alpha} \phi_{\beta}$. Mithilfe dieses Normalenvektors werden die Spannungen und Dehnungen in eine orthonormale Basis $\mathbf{B} = \{\mathbf{n}, \mathbf{t}, \mathbf{s}\}$ überführt,

wobei $\mathbf{n} \cdot \mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{s} = \mathbf{t} \cdot \mathbf{s} = \mathbf{0}$ gilt. In der Voigt-Notation können die Spannungen und Dehnungen mit

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_B^\alpha(\mathbf{n}) &:= \left(\sigma_{nn}, \sigma_{nt}, \sigma_{ns}, \sigma_{tt}^\alpha, \sigma_{ss}^\alpha, \sigma_{ts}^\alpha \right)^\top = \left(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\sigma}_t^\alpha \right)^\top \quad \text{und} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_B^\alpha(\mathbf{n}) &:= \left(\varepsilon_{nn}^\alpha, 2\varepsilon_{nt}^\alpha, 2\varepsilon_{ns}^\alpha, \varepsilon_{tt}, \varepsilon_{ss}, 2\varepsilon_{ts} \right)^\top = \left(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha, \boldsymbol{\varepsilon}_t \right)^\top\end{aligned}$$

ausgedrückt werden. Dabei wird die Reihenfolge abgeändert, um sie gemäß der Sprungbedingung des Spannungsvektors $[[\boldsymbol{\sigma}_n]] = \mathbf{0}$ und der kinematischen Kompatibilitätsbedingung² $[[\boldsymbol{\varepsilon}_t]] = \mathbf{0}$ für eine infinitesimale Verformung an einer singulären Fläche [165] in kontinuierliche und diskontinuierliche Beiträge anzuordnen. Der Sprung einer Variablen wird mit $[[\cdot]]$ ausgedrückt. Die kontinuierlichen Beiträge sind gegeben mit $\boldsymbol{\sigma}_n := (\sigma_{nn}, \sigma_{nt}, \sigma_{ns})^T$ und $\boldsymbol{\varepsilon}_t := (\varepsilon_{tt}, \varepsilon_{ss}, 2\varepsilon_{ts})^T$, und die diskontinuierlichen Anteile mit $\boldsymbol{\sigma}_t^\alpha := (\sigma_{tt}^\alpha, \sigma_{ss}^\alpha, \sigma_{ts}^\alpha)^T$ und $\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha := (\varepsilon_{nn}^\alpha, 2\varepsilon_{nt}^\alpha, 2\varepsilon_{ns}^\alpha)^T$. Die diskontinuierlichen Variablen sind phasenabhängig, was mit dem Superskript α angezeigt wird.

Der Steifigkeitstensor wird ebenso in der Basis \mathbf{B} ausgedrückt und für die weitere Berechnung in Blöcke der Größe 3×3 aufgeteilt:

$$\mathbf{C}_B = \left(\begin{array}{ccc|ccc} \mathcal{C}_{nnnn} & \mathcal{C}_{nnnt} & \mathcal{C}_{nnns} & \mathcal{C}_{nntt} & \mathcal{C}_{nnss} & \mathcal{C}_{nnts} \\ \mathcal{C}_{ntnn} & \mathcal{C}_{ntnt} & \mathcal{C}_{ntns} & \mathcal{C}_{nttt} & \mathcal{C}_{ntss} & \mathcal{C}_{ntts} \\ \mathcal{C}_{nsnn} & \mathcal{C}_{nsnt} & \mathcal{C}_{nsns} & \mathcal{C}_{nstt} & \mathcal{C}_{nsss} & \mathcal{C}_{nsts} \\ \hline \mathcal{C}_{ttnn} & \mathcal{C}_{ttn} & \mathcal{C}_{ttns} & \mathcal{C}_{tttt} & \mathcal{C}_{ttss} & \mathcal{C}_{ttts} \\ \mathcal{C}_{ssnn} & \mathcal{C}_{ssnt} & \mathcal{C}_{ssns} & \mathcal{C}_{sstt} & \mathcal{C}_{ssss} & \mathcal{C}_{sst} \\ \mathcal{C}_{tsnn} & \mathcal{C}_{tsnt} & \mathcal{C}_{tsns} & \mathcal{C}_{tstt} & \mathcal{C}_{tsss} & \mathcal{C}_{tsts} \end{array} \right) =: \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{nn} & \mathbf{C}_{nt} \\ \mathbf{C}_{tn} & \mathbf{C}_{tt} \end{pmatrix}.$$

Der Nachgiebigkeitstensor \mathbf{S}_B wird auf die gleich Weise gebildet. Mit dieser Notation kann nach [160, 166] die Variationsableitung der elastischen Energiedichte unter Vernachlässigung der partiellen Ableitung nach $\nabla\phi_\alpha$ mit kontinuierlichen

² auch Hadamardsche Sprungbedingung genannt

Variablen ausgedrückt werden als $\delta\mathcal{F}_{\text{elast}}/\delta\phi_\alpha \approx \partial\bar{W}_{\text{elast}}/\partial\phi_\alpha = p^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$, wobei

$$p^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) = \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_n \\ \boldsymbol{\varepsilon}_t \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathcal{T}_{nn}^\alpha & \mathcal{T}_{nt}^\alpha \\ \mathcal{T}_{tn}^\alpha & \mathcal{T}_{tt}^\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_n \\ \boldsymbol{\varepsilon}_t \end{pmatrix} \right] - \left[\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_n \\ \boldsymbol{\varepsilon}_t \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathcal{T}_{nt}^\alpha \\ \mathbf{0} & \mathcal{T}_{tt}^\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \end{pmatrix} \right] + \frac{1}{2} (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \cdot \mathcal{T}_{tt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha)$$

gilt. Die Komponenten der Proportionalitätsmatrix \mathcal{T}^α sind

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{nn}^\alpha &:= -\mathcal{S}_{nn}^\alpha \\ \mathcal{T}_{nt}^\alpha &:= \mathcal{S}_{nn}^\alpha \mathcal{C}_{nt}^\alpha \\ \mathcal{T}_{tt}^\alpha &:= \mathcal{C}_{tt}^\alpha - \mathcal{C}_{tn}^\alpha \mathcal{S}_{nn}^\alpha \mathcal{C}_{nt}^\alpha. \end{aligned}$$

Eine weiterführende Diskussion des Terms $\nabla \cdot (\partial\bar{W}_{\text{elast}}(\boldsymbol{\phi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}})/\partial\nabla\phi_\alpha)$ ist in [167] zu finden. Ausgehend von dem Potential bestehend aus kontinuierlichen Variablen folgt die Spannung in der Basis \mathbf{B}

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_B = \underbrace{\begin{pmatrix} -\bar{\mathcal{T}}_{nn}^{-1} & -\bar{\mathcal{T}}_{nn}^{-1} \bar{\mathcal{T}}_{nt} \\ -\bar{\mathcal{T}}_{tn} \bar{\mathcal{T}}_{nn}^{-1} & \bar{\mathcal{T}}_{tt} - \bar{\mathcal{T}}_{tn} \bar{\mathcal{T}}_{nn}^{-1} \bar{\mathcal{T}}_{nt} \end{pmatrix}}_{\bar{\mathcal{C}}_B^v(\boldsymbol{\phi})} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_n \\ \boldsymbol{\varepsilon}_t \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} \bar{\mathcal{T}}_{nn}^{-1} & \mathbf{0} \\ \bar{\mathcal{T}}_{tn} \bar{\mathcal{T}}_{nn}^{-1} & -\mathbf{I} \end{pmatrix}}_{\bar{\boldsymbol{\sigma}}_B} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\chi}}_n \\ \tilde{\boldsymbol{\chi}}_t \end{pmatrix}.$$

Die normalen und tangentialen Teile der inelastischen Dehnungen $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\alpha$ sind definiert als

$$\tilde{\boldsymbol{\chi}}_n = \sum_\alpha (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha + \mathcal{T}_{nt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha) \phi_\alpha, \quad \tilde{\boldsymbol{\chi}}_t = \sum_\alpha \mathcal{T}_{tt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \phi_\alpha.$$

Die lokal gemittelten Komponenten der Proportionalitätsmatrix $\bar{\mathcal{T}}$ sind gegeben mit

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{T}}_{nn} &:= \sum_\alpha \mathcal{T}_{nn}^\alpha \phi_\alpha := - \sum_\alpha (\mathcal{C}_{nn}^\alpha)^{-1} \phi_\alpha \\ \bar{\mathcal{T}}_{nt} &:= \sum_\alpha \mathcal{T}_{nt}^\alpha \phi_\alpha := \sum_\alpha (\mathcal{C}_{nn}^\alpha)^{-1} \mathcal{C}_{nt}^\alpha \phi_\alpha \\ \bar{\mathcal{T}}_{tt} &:= \sum_\alpha \mathcal{T}_{tt}^\alpha \phi_\alpha := \sum_\alpha \left(\mathcal{C}_{tt}^\alpha - \mathcal{C}_{tn}^\alpha (\mathcal{C}_{nn}^\alpha)^{-1} \mathcal{C}_{nt}^\alpha \right) \phi_\alpha. \end{aligned}$$

Die resultierenden Spannungen, ausgedrückt in der Voigt-Notation und zurück überführt in das Kartesische Koordinatensystem, werden berechnet mit $\bar{\sigma}^v(\phi) = \bar{C}^v(\phi)\bar{\varepsilon}^v + \bar{\sigma}^v(\phi)$, mit $\bar{C}^v(\phi) = M_\varepsilon^T C_B^v(\phi) M_\varepsilon$ und $\bar{\sigma}^v(\phi) = M_\sigma^T \sigma_B(\phi)$. Die Transformationsmatrizen M_ε und M_σ sind in [159] definiert. Nach dieser Rücktransformation wird die Impulsbilanz $\nabla \cdot \bar{\sigma}(\phi) = \mathbf{0}$ zur Berechnung des Verschiebungsfeldes \mathbf{u} implizit gelöst.

Das vorgestellte Modell ermöglicht die Berücksichtigung beliebig anisotroper Steifigkeiten. In den in dieser Arbeit gezeigten Phasenfeldsimulationen wird bei allen Materialien von einem isotropen elastischen Verhalten ausgegangen, sodass der Steifigkeitstensor als Funktion des Elastizitätsmoduls E und der Poissonzahl ν berechnet werden kann [168]. Soweit nicht anders angegeben, werden innerhalb eines Simulationsbeispiels der Elastizitätsmodul und die Poissonzahl von allen auftretenden Phasen als identische Größen angenommen.

3.4.4 Plastizitätsmodell und plastische Energiedichte

In dieser Arbeit kommt ein J_2 -Plastizitätsmodell zum Einsatz, das auf den Vorarbeiten von Schneider et al. [166] aufbaut und im Rahmen dieser Arbeit um eine viskoplastische Komponente erweitert wird. Eine vergleichbare Formulierung wurde zudem von Ammar et al. [44] vorgestellt und zeichnet sich durch ihre numerische Einfachheit und Robustheit aus [166]. Eine detaillierte Diskussion zur Wahl dieses Modells ist in Abschnitt 2.1.1 zu finden.

Plastische Verformungen entstehen, sobald die J_2 -Fließbedingung

$$f_y(\bar{\sigma}', \bar{\varepsilon}_{pl}, \phi) = |\bar{\sigma}'| - \sqrt{\frac{2}{3}} \bar{\sigma}_y(\phi, \bar{\varepsilon}_{pl}) \leq 0$$

erreicht wird. Dabei sind die deviatorische Spannung mit $\bar{\sigma}' = \bar{\sigma} - 1/3(\bar{\sigma}_{11} + \bar{\sigma}_{22} + \bar{\sigma}_{33})$, die Frobeniusnorm mit $|\bar{\sigma}'| = \sqrt{\bar{\sigma}' \cdot \bar{\sigma}'}$ und die akkumulierte plastische Dehnung mit $\bar{\varepsilon}_{pl} = \sqrt{2/3} \int |\dot{\varepsilon}_{pl}| dt$ gegeben. Die Fließspannung wird nach

$$\bar{\sigma}_y(\phi, \bar{\varepsilon}_{pl}) = \bar{\sigma}_0(\phi) + \bar{\sigma}_h(\phi, \bar{\varepsilon}_{pl})$$

berechnet, wobei $\bar{\sigma}_0(\boldsymbol{\phi})$ die initiale Fließspannung und $\bar{\sigma}_h(\boldsymbol{\phi}, \bar{\varepsilon}_{pl})$ eine Zusatzspannung aufgrund von Materialverfestigung sind. In dieser Arbeit kommt eine nichtlineare Verfestigungsfunktion nach Voce [169] der Form

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_h(\boldsymbol{\phi}, \bar{\varepsilon}_{pl}) &= \bar{\theta}_\infty(\boldsymbol{\phi})\bar{\varepsilon}_{pl} + (\bar{\sigma}_\infty(\boldsymbol{\phi}) - \bar{\sigma}_0(\boldsymbol{\phi})) \\ &\times \left[1 - \exp\left(-\frac{\bar{\theta}_0(\boldsymbol{\phi}) - \bar{\theta}_\infty(\boldsymbol{\phi})}{\bar{\sigma}_\infty(\boldsymbol{\phi}) - \bar{\sigma}_0(\boldsymbol{\phi})} \bar{\varepsilon}_{pl}\right) \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

zum Einsatz, wobei die physikalischen Größen (initiale Fließspannung $\bar{\sigma}_0$, finale Fließspannung $\bar{\sigma}_\infty$, initialer Verfestigungsmodul $\bar{\theta}_0$ und finaler Verfestigungsmodul $\bar{\theta}_\infty$) in Grenzflächenbereichen linear gewichtet werden, z. B. $\bar{\sigma}_0(\boldsymbol{\phi}) = \sum \sigma_0^\alpha \phi_\alpha$.

Die zeitliche Evolution der plastischen Dehnungen wird mithilfe eines viskoplastischen Fließverhaltens beschrieben:

$$\dot{\varepsilon}_{pl} = k \dot{\gamma} \frac{\partial f_y(\bar{\sigma}', \bar{\varepsilon}_{pl}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \bar{\sigma}'}$$

Dabei bestimmt die plastische Relaxationsrate $0 < k \leq 1$ die Kinetik der plastischen Dehnungen [45]. Die Konsistenzbedingung $f_y(\bar{\sigma}', \bar{\varepsilon}_{pl}, \boldsymbol{\phi}) \stackrel{!}{=} 0$ wird über einen zweistufigen Return-Mapping-Algorithmus sichergestellt. Weiterführende Informationen zur Implementierung und zur Numerik des Plastizitätsmodells sind in [45, 166] zu finden. Der vorgestellte Ansatz zur Kopplung der Phasenfeldmethode mit einer Plastizitätsformulierung impliziert, dass plastische Dehnungen vollständig vererbt werden, wenn eine Phasenfront einen plastisch verformten Bereich durchquert, da alle Phasen die gleichen plastischen Felder teilen. Aus diesem Grund trägt die Plastizität nicht zu den mechanischen Sprungbedingungen bei [45].

Nach [166] ist die plastische Energiedichte

$$\bar{W}_{pl}(\boldsymbol{\phi}, \bar{\varepsilon}_{pl}) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} W_{pl}^{\alpha}(\bar{\varepsilon}_{pl}) \quad (3.17)$$

das Integral der Verfestigungsfunktion $\sigma_h^\alpha(\phi, \bar{\epsilon}_{pl})$ über die akkumulierte plastische Dehnung. Für Gl. (3.16), aufgestellt für Phase α , ergibt sich die Integration nach $\bar{\epsilon}_{pl}$, mit der Nebenbedingung $W_{pl}^\alpha(\bar{\epsilon}_{pl} = 0) = 0$, zu

$$\begin{aligned}
 W_{pl}^\alpha(\bar{\epsilon}_{pl}) &= \frac{1}{2} \theta_\infty^\alpha (\bar{\epsilon}_{pl})^2 + (\sigma_\infty^\alpha - \sigma_0^\alpha) \bar{\epsilon}_{pl} \\
 &+ \frac{(\sigma_\infty^\alpha - \sigma_0^\alpha)^2}{\theta_0^\alpha - \theta_\infty^\alpha} \exp\left(-\bar{\epsilon}_{pl} \frac{\theta_0^\alpha - \theta_\infty^\alpha}{\sigma_\infty^\alpha - \sigma_0^\alpha}\right) \\
 &- \frac{(\sigma_\infty^\alpha - \sigma_0^\alpha)^2}{\theta_0^\alpha - \theta_\infty^\alpha}.
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Alternative Behandlung der Fließbedingung im Grenzflächenbereich

Eine weitere Möglichkeit, die Fließbedingung in diffuse Grenzflächenbereiche einzuführen, ist die Verwendung eines scharfen Grenzwertes. Dabei wird auf eine Interpolation der Materialparameter für die Fließfunktion verzichtet. Yamanaka et al. [22], zum Beispiel, definieren einen Grenzwert von $\phi = 0,6$, im Kontext der Modellierung der Martensitumwandlung. Wenn der Phasenanteil von Martensit $\phi_{\alpha'} > 0,6$ ist, werden die Fließparameter des Martensits verwendet. Ansonsten werden die Materialparameter von Austenit verwendet. Um diesen Modellierungsansatz zu vergleichen, wird dieser Ansatz auf eine Multiphasenfeldformulierung angepasst. Es werden die Fließparameter der Phasenklasse mit dem größten relativen Volumenanteil in einer diskreten Zelle verwendet. Nachteile dieses Ansatzes sind jedoch, dass abrupte Veränderungen der Materialparameter zu sichtbaren Gittereffekten führen können. Darüber hinaus können die Ergebnisse von der Definition des Grenzwertes abhängen. Die Formulierung der plastischen treibenden Kraft (Gl. (3.18)) bleibt bei diesem Ansatz unberührt. Da die plastische Dehnung innerhalb des diffusen Grenzflächenbereichs heterogener verteilt ist als beim Interpolationsansatz, gilt dies auch für die plastische treibende Kraft, was eine ungewünschte Verzerrung der Grenzfläche begünstigen kann (vgl. Abschnitt 3.6). Bei Anwendung dieser Methode kann es vorkommen, dass zwei Phasenklassen genau den gleichen Volumenanteil aufweisen. Da ein solcher Fall jedoch in den in dieser Arbeit gezeigten Simulationen nicht auftritt, müssen keine speziellen Behandlungen durchgeführt werden.

3.4.5 Elastische Energiedichte aufgrund einer extern angelegten Spannung

Um den Effekt einer extern angelegten Spannung im Kontext displaziver Phasenumwandlungen auf die Mikrostrukturentwicklung zu berücksichtigen, kann nach [14, 52, 138, 170, 171] ein zusätzlicher Beitrag im Energiefunktional verwendet werden, der sich im Rahmen einer Multiphasenfeldformulierung zu

$$\bar{W}_{\text{appl}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\sigma}^{\text{appl}}) = \sum_{\alpha} -\phi_{\alpha} \sigma_{ij}^{\text{appl}} \tilde{\varepsilon}_{ij}^{0,\alpha} \quad (3.19)$$

ergibt. Dabei ist

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{appl}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

die angelegte Spannung und führt im Zusammenspiel mit der phasenabhängigen Eigendehnung $\tilde{\varepsilon}^{0,\alpha}$ zu einer treibenden Kraft, sodass Phasen, die vorteilhaft zur angelegten Spannung orientiert sind, energetisch begünstigt werden.

3.4.6 Gespeicherte Energiedichte für die Rekristallisation aufgrund plastischer Verformung

Die treibende Kraft bei der Rekristallisation ist die Elimination der durch eine Deformation in ein System eingebrachten Versetzungen [172]. Der Zusammenhang zwischen Versetzungsdichte ρ und gespeicherter Verformungsenergiedichte W_{ver} ist gegeben mit

$$W_{\text{ver}} = \frac{1}{2} \rho G b^2,$$

wobei G den Schubmodul und b den Burgersvektor darstellen [172]. Nach [48] wird die freie Energiedichte für die Rekristallisation im Phasenfeldkontext mit

$$\bar{W}_{\text{ver}}(\boldsymbol{\phi}, W_{\text{ver}}) = W_{\text{ver}}(\mathbf{x}, t) \sum_{\alpha}^N m_{\alpha}(t) \phi_{\alpha}$$

berechnet, wobei $\mathbf{m}(t) = (m_1, \dots, m_N)$ ein N -Tupel ist und die Information enthält, ob eine Phase eine rekristallisierende Phase ($m_{\alpha} = 0$) ist oder nicht ($m_{\alpha} = 1$). Sowohl die gespeicherte Verformungsenergiedichte als auch das Nukleationstupel $\mathbf{m}(t)$ sind zeitabhängig. Zum einen kann durch Erholung die gespeicherte Verformungsenergiedichte abnehmen und zum anderen können - je nach Nukleationsmechanismus - weitere Keime zur Simulationslaufzeit entstehen. Sobald eine Zelle vollständig rekristallisiert ist ($\sum_{\alpha} m_{\alpha} \phi_{\alpha} = 0$), wird die gespeicherte Verformungsenergiedichte in dieser Zelle auf null gesetzt. Somit ist es ersichtlich, dass die gespeicherte Verformungsenergiedichte $\bar{W}_{\text{ver}}(\mathbf{x}, t)$ abnimmt, wenn eine rekristallisierende Phase wächst.

3.5 Phasenfeldmodell für ein zweiphasiges System

Multiphasenfeldmodelle werden mit dem Bestreben entwickelt, Lösungen, die aus den Arbeiten für scharf parametrisierte Grenzflächen bekannt sind, im Kontext diffus parametrisierter Grenzflächen bestmöglich abzubilden. Dabei sind zwei Eigenschaften von zentraler Bedeutung: Zum einen sollte eine Grenzflächenbewegung aufgrund krümmungsminimierender oder volumetrischer Kräfte präzise wiedergeben werden können. Zum anderen wird gefordert, dass die Energiebilanz, die sich aus dem Zusammenspiel krümmungsminimierender und zusätzlicher volumetrischer treibender Kräfte ergibt, im Gleichgewicht abgebildet werden kann. In diesem Abschnitt wird aufgezeigt, dass das in den vorangegangenen Abschnitten vorgestellte Multiphasenfeldmodell beide Anforderungen bei Betrachtung eines Systems, bestehend aus zwei Phasen ($\boldsymbol{\phi} = (\phi_{\alpha}, \phi_{\beta})$), bei entsprechender Anwendung erfüllt. Das Vorgehen orientiert sich an den Vorgängerarbeiten [173, 174]. Abweichend zu den eben genannten Arbeiten wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit die Evolutionsgleichung (3.6) statt Gl. (3.5), wie in [174], verwendet.

Zunächst wird ein Phasenfeldmodell für ein zweiphasiges System aus der Multiphasenfeldformulierung abgeleitet. Nachfolgend wird gezeigt, dass mit der Kenntnis des Profils des Ordnungsparameters im Übergangsbereich eine identische Evolutionsgleichung aus einem Ansatz für scharfe Grenzflächen hergeleitet werden kann.

3.5.1 Reduktion der Multiphasenfeldtheorie auf ein zweiphasiges System

Im Folgenden wird ein Energiefunktional, bestehend aus Grenzflächenbeiträgen und einem zusätzlichen volumetrischen Energiedichtebeitrag, betrachtet:

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}) = \int_V W_{\text{intf}}(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}) + \bar{W}_{\text{bulk}}(\boldsymbol{\phi}) dV. \quad (3.20)$$

Dabei wird davon ausgegangen, dass W_{bulk}^α eine konstante Größe ist.

Evolutionsgleichung für ein System mit zwei Phasen

Ausgehend von der Evolutionsgleichung im Multiphasenfall (3.6) ergibt sich die Evolutionsgleichung im Zweiphasenfall zu

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = \frac{1}{2\epsilon} \left[M_{\alpha\beta} \left(\Delta W_{\text{intf}}^{\alpha\beta} + \frac{8\sqrt{\phi_\alpha \phi_\beta}}{\pi} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \right) \right], \quad \forall \phi_\alpha, \alpha = 1, 2. \quad (3.21)$$

Die Variationsableitungen der Grenzflächenbeiträge bestehen aus der Gradientenenergiedichte (3.8) und der potentiellen Energiedichte und ergeben sich unter Verwendung des Multihindernispotentials (3.10) zu

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{F}_{\text{intf}}}{\delta \phi_\alpha} &= \left(\frac{\partial}{\partial \phi_\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial}{\partial \nabla \phi_\alpha} \right) W_{\text{intf}} \\ &= \epsilon \gamma_{\alpha\beta} \left[\left(2 \nabla \phi_\beta \cdot \mathbf{q}_{\alpha\beta} \right) - \nabla \cdot \left(2 (-\phi_\beta) \mathbf{q}_{\alpha\beta} \right) \right] + \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \gamma_{\alpha\beta} \phi_\beta \end{aligned}$$

und

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{\text{intf}}}{\delta \phi_\beta} = \epsilon \gamma_{\alpha\beta} \left[\left(2(-\nabla \phi_\alpha) \cdot \mathbf{q}_{\alpha\beta} \right) - \nabla \cdot \left(2\phi_\alpha \mathbf{q}_{\alpha\beta} \right) \right] + \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \gamma_{\alpha\beta} \phi_\alpha.$$

Nun wird ausgenutzt, dass die Summe der Ordnungsparameter im Zweiphasenfall eins ergeben muss und es gilt $\phi_\beta = 1 - \phi_\alpha$. Für die Gradiententerme ergibt sich der Zusammenhang $\nabla \phi_\beta = -\nabla \phi_\alpha$. Somit vereinfacht sich der generalisierte α - β -Gradient zu $\mathbf{q}_{\alpha\beta} = \phi_\alpha \nabla \phi_\beta - \phi_\beta \nabla \phi_\alpha = -\nabla \phi_\alpha$. Eingesetzt in die Evolutionsgleichung für den Zweiphasenfall (3.21) ergibt sich folgende Evolutionsgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} &= \frac{1}{2\epsilon} M_{\alpha\beta} \left(2\epsilon \gamma_{\alpha\beta} \Delta \phi_\alpha - \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \gamma_{\alpha\beta} (1 - 2\phi_\alpha) \right. \\ &\quad \left. + \frac{8\sqrt{\phi_\alpha(1-\phi_\alpha)}}{\pi} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \right) \\ &= M_{\alpha\beta} \left[\gamma_{\alpha\beta} \left(\Delta \phi_\alpha - \frac{16}{\epsilon^2 \pi^2} \frac{1 - 2\phi_\alpha}{2} \right) + \frac{8\sqrt{\phi_\alpha(1-\phi_\alpha)}}{2\pi\epsilon} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \right]. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Für das effiziente Lösen eines Zweiphasenproblems ist es ausreichend, Gl. (3.22) zu betrachten, wobei die zweite Phase stets über den Zusammenhang $\phi_\beta = 1 - \phi_\alpha$ gegeben ist.

Grenzflächenprofil, Grenzflächenbreite und Grenzflächenenergie

Die Grenzflächenbreite η wird über den Parameter ϵ eingestellt. Der genaue Zusammenhang wird im Folgenden hergeleitet. Es wird ein eindimensionales System der Länge $2L$ betrachtet, in dem sich zwei Phasen im thermodynamischen Gleichgewicht ($\partial \phi_\alpha / \partial t = 0$) befinden. Die Grenzfläche erstreckt sich von $x = 0$ bis $x = 2L$, wobei in der Mitte des Gebiets ($x = L$) die scharfe Grenzfläche liegt. Unter Vernachlässigung volumetrischer treibender Kräfte ($\bar{W}_{\text{bulk}} = 0$) ergibt sich abgeleitet von Gl. (3.22) der Zusammenhang

$$\frac{\partial^2 \phi_\alpha}{\partial x^2} = \frac{16}{\epsilon^2 \pi^2} \frac{1 - 2\phi_\alpha}{2}. \quad (3.23)$$

Nach der Multiplikation von Gl. (3.23), von beiden Seiten mit $\partial\phi_\alpha/\partial x$, und der Integration von 0 bis x folgt

$$\begin{aligned}
 & \int_0^x \frac{\partial\phi_\alpha}{\partial x} \left(\frac{\partial^2\phi_\alpha}{\partial x^2} \right) dx = \int_0^x \frac{16}{\epsilon^2\pi^2} \frac{(1-2\phi_\alpha)}{2} \frac{\partial\phi_\alpha}{\partial x} dx \\
 \Rightarrow & \int_0^x \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial x} \right)^2 dx = \int_0^{\phi_\alpha} \frac{16}{\epsilon^2\pi^2} \frac{(1-2\phi_\alpha)}{2} d\phi_\alpha \\
 \Rightarrow & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial x} \right)^2 = \frac{16}{\epsilon^2\pi^2} \frac{\phi_\alpha(1-\phi_\alpha)}{2} \\
 \Rightarrow & \frac{\partial\phi_\alpha}{\partial x} = \pm \frac{1}{\epsilon} \sqrt{\frac{16}{\pi^2} \phi_\alpha(1-\phi_\alpha)}. \quad (3.24)
 \end{aligned}$$

Das Vorzeichen in Gl. (3.24) wird darüber bestimmt, ob ϕ_α von null auf eins steigt, wenn x von 0 bis $2L$ läuft oder umgekehrt [173]. Im weiteren Verlauf wird

$$\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial x} = + \frac{1}{\epsilon} \sqrt{\frac{16}{\pi^2} \phi_\alpha(1-\phi_\alpha)} \quad (3.25)$$

verwendet. Aus Gl. (3.25) folgt nach der Trennung der Variablen die Grenzflächenbreite

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{2L} dx = \int_0^1 \frac{\epsilon}{\sqrt{\frac{16}{\pi^2} \phi_\alpha(1-\phi_\alpha)}} d\phi_\alpha \\
 \Rightarrow & \eta = -\frac{\epsilon\pi}{4} \arcsin(1-2\phi_\alpha) \Big|_0^1 = \frac{\epsilon\pi^2}{4}.
 \end{aligned}$$

Für das Profil der Phasenfeldparameter in der diffusen Grenzfläche ergibt sich

$$\begin{aligned}
 & \int_0^x dx = \int_0^1 \frac{\epsilon}{\sqrt{\frac{16}{\pi^2} \phi_\alpha(1-\phi_\alpha)}} d\phi_\alpha \\
 \Rightarrow & x = \frac{\epsilon\pi^2}{8} - \frac{\epsilon\pi}{4} \arcsin(1-2\phi_\alpha) \\
 \Rightarrow & \phi_\alpha(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \sin \left(\frac{-\pi^2\epsilon + 8x}{2\epsilon\pi} \right) \right), \quad 0 \leq x \leq \eta.
 \end{aligned}$$

Wird das Profil um eine halbe Grenzflächenbreite ($\epsilon\pi^2/8$) verschoben, liegt die scharfe Grenzfläche ($\phi_\alpha = 0,5$) bei $x = 0$, und das Profil ist gegeben mit

$$\phi_\alpha(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \sin \left(\frac{4x}{\epsilon\pi} \right) \right), \quad -\frac{\eta}{2} \leq x \leq \frac{\eta}{2}.$$

Das Zusammenspiel der Gradientenenergiedichte und der potentiellen Energiedichte resultiert in der Wiedergabe der Grenzflächenenergie im Kontext einer diffus parametrisierten Grenzfläche. Ausgehend von der Grenzflächenenergiedichte $W_{\text{intf}}^{\alpha\beta}$ für zwei Phasen ergibt sich mit dem Zusammenhang (3.25), bei Betrachtung eines Linienintegrals entlang der Normalenrichtung,

$$\begin{aligned} W_{\text{intf}}^{\alpha\beta} &= \gamma_{\alpha\beta} \int_0^\eta \left(\epsilon |\mathbf{q}_{\alpha\beta}|^2 + \frac{16}{\epsilon\pi^2} \phi_\alpha \phi_\beta \right) dx \\ &= \gamma_{\alpha\beta} \int_0^\eta \left(\epsilon \left(\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x} \right)^2 + \frac{16}{\epsilon\pi^2} \phi_\alpha (1 - \phi_\alpha) \right) dx \\ &= \gamma_{\alpha\beta} \int_0^\eta \left(\frac{16}{\epsilon\pi^2} \phi_\alpha (1 - \phi_\alpha) + \frac{16}{\epsilon\pi^2} \phi_\alpha (1 - \phi_\alpha) \right) dx \\ &= \gamma_{\alpha\beta} \int_0^1 2 \frac{16}{\epsilon\pi^2} \phi_\alpha (1 - \phi_\alpha) \frac{\partial x}{\partial \phi_\alpha} d\phi_\alpha \\ &= \gamma_{\alpha\beta} \frac{8}{\pi} \int_0^1 \sqrt{\phi_\alpha (1 - \phi_\alpha)} d\phi_\alpha = \gamma_{\alpha\beta} \frac{8}{\pi} \frac{\pi}{8} = \gamma_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

Somit ist gezeigt, dass die Kombination der Gradientenenergiedichte (3.8) und der potentiellen Energiedichte unter Verwendung des Multihindernispotentials (3.10) die Grenzflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ abbilden kann.

Gleichgewicht zwischen krümmungsminimierenden und volumetrischen treibenden Kräften

Im Folgenden wird ein kreisförmiger Einschluss in einem zweidimensionalen System, wie in Abb. 3.3 dargestellt, betrachtet. Wie in Gl. (3.20) aufgeführt, wird von einem Energiefunktional bestehend aus Grenzflächenbeiträgen und einer volumetrischen treibenden Kraft ausgegangen. Befindet sich das System im thermodynamischen Gleichgewicht, so folgt aus der Evolutionsgleichung (3.22)

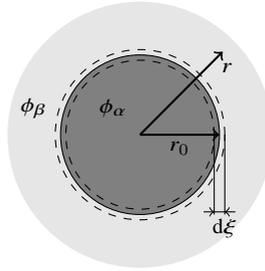


Abbildung 3.3: Kreisförmiger Einschluss in einem zweidimensionalen System, nach [174]. Die Position der scharfen Grenzfläche ist anhand einer durchgezogenen Linie erkennbar. Der Anfang und das Ende der diffusen Grenzfläche ist mit gestrichelten Linien dargestellt.

die Bilanz zwischen krümmungsminimierenden und volumetrischen treibenden Kräften

$$\frac{8}{2\epsilon\pi} \sqrt{\phi_\alpha(1-\phi_\alpha)} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} = -\gamma_{\alpha\beta} \Delta\phi_\alpha + \gamma_{\alpha\beta} \frac{16}{\pi^2\epsilon^2} \frac{1-2\phi_\alpha}{2}. \quad (3.26)$$

Im Folgenden werden Polarkoordinaten verwendet. Damit entspricht die Richtung des Normalenvektors der diffusen Grenzfläche der radialen Richtung in Polarkoordinaten. Vergleichbar mit Abschnitt 3.5.1 wird Gl. (3.26) von beiden Seiten mit $\partial\phi_\alpha/\partial r$ multipliziert und nachfolgend von 0 bis ∞ integriert. Für die linke Seite von Gl. (3.26) ergibt sich

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \frac{8}{2\epsilon\pi} \sqrt{\phi_\alpha(1-\phi_\alpha)} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \frac{\partial\phi_\alpha}{\partial r} dr \\ &= \int_0^1 \frac{8}{2\epsilon\pi} \sqrt{\phi_\alpha(1-\phi_\alpha)} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} d\phi_\alpha \\ &= \frac{8}{2\epsilon\pi} \frac{\pi}{8} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2\epsilon} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Wird die rechte Seite von Gl. (3.26) berücksichtigt, so folgt unter Verwendung des Ergebnisses (3.27) für die linke Seite der Zusammenhang

$$\frac{1}{2\epsilon} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} = -\gamma_{\alpha\beta} \int_0^\infty \frac{\partial\phi_\alpha}{\partial r} \left(\Delta\phi_\alpha - \frac{16}{\pi^2\epsilon^2} \frac{(1-2\phi_\alpha)}{2} \right) dr.$$

Mit dem Laplace-Operator in Polarkoordinaten [175] ergibt sich

$$\frac{1}{2\epsilon} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \approx -\gamma_{\alpha\beta} \int_0^\infty \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial r} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} (\dots) \right) \phi_\alpha - \frac{16}{\pi^2 \epsilon^2} \frac{(1 - 2\phi_\alpha)}{2} \right] dr. \quad (3.28)$$

Nun wird eine Näherung erster Ordnung betrachtet, wozu die Terme der Ordnung $\mathcal{O}(1/r^2)$ vernachlässigt werden. Die Terme der Ordnung $\mathcal{O}(1/r^0)$ ergeben sich zu

$$-\gamma_{\alpha\beta} \int_0^\infty \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial r} \underbrace{\left(\frac{\partial^2 \phi_\alpha}{\partial r^2} - \frac{16}{\pi^2 \epsilon^2} \frac{(1 - 2\phi_\alpha)}{2} \right)}_{=0} dr = 0,$$

da die Terme in der Klammer die Gleichgewichtsbedingung einer planaren Grenzfläche ohne Störung darstellen (Gl. (3.23)) und sich folglich aufheben. Für die übrigen Terme aus Gl. (3.28) folgt mit $r = r_0 + \epsilon d\xi$, $dr = \epsilon d\xi$, $1/r \approx 1/r_0 - \epsilon d\xi/r_0^2$ [174] der Zusammenhang

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\epsilon} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} &\approx -\gamma_{\alpha\beta} \int_0^\infty \frac{1}{r} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial r} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial r} dr \\ &\approx -\gamma_{\alpha\beta} \int_0^1 \left(\frac{1}{r_0} - \frac{\epsilon d\xi}{r_0^2} \right) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial r} d\phi_\alpha. \end{aligned}$$

Da Terme der Ordnung $\mathcal{O}(1/r_0^2)$ vernachlässigt werden, resultiert mit der Bedingung (3.24) für $\partial \phi_\alpha / \partial r$ schließlich

$$\frac{1}{2\epsilon} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \approx -\gamma_{\alpha\beta} \frac{1}{r_0} \int_0^1 -\frac{1}{\epsilon} \sqrt{\frac{16}{\pi^2} \phi_\alpha (1 - \phi_\alpha)} d\phi_\alpha = \gamma_{\alpha\beta} \frac{1}{2\epsilon r_0}$$

Mit der Krümmung $\kappa = 1/r_0$ im Zweidimensionalen ergibt sich nun die Bilanz zwischen krümmungsminimierenden und volumetrischen treibenden Kräften:

$$\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \approx \gamma_{\alpha\beta} \kappa.$$

Für den betrachteten Fall, dass $\bar{W}_{\text{bulk}}(\phi)$ lediglich eine lineare Abhängigkeit vom Ordnungsparameter aufweist, entspricht der Term $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ tatsächlich dem Sprung der volumetrischen Energiedichte an einer scharfen Grenzfläche

$$\llbracket W_{\text{bulk}} \rrbracket \approx \gamma_{\alpha\beta} \kappa.$$

Im Rahmen der Phasenfeldmodellierung ist dies jedoch nicht zwangsläufig der Fall, und $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ kann in der Normalenrichtung der Grenzfläche variieren. Ist dies der Fall, kann das Profil und damit auch die resultierende Grenzflächenenergie unter Umständen nicht mehr zufriedenstellend wiedergegeben werden [156]. In Abschnitt 3.6 werden zudem weitere Ursachen, die zu einer Verzerrung der Grenzfläche führen können, und Strategien diskutiert, um dem entgegenzuwirken.

3.5.2 Herleitung der Evolutionsgleichung für ein zweiphasiges System basierend auf der Gibbs-Thomson Gleichung

Mit der Kenntnis des Gleichgewichtsprofils kann die Evolutionsgleichung für ein zweiphasiges System basierend auf der Gibbs-Thomson-Gleichung für scharfe Grenzflächen hergeleitet werden. Das Vorgehen basiert auf den Referenzen [176, 177]. Die verallgemeinerte Gibbs-Thomson-Gleichung für eine isotrope Grenzflächenenergie stellt eine Relation zwischen der Geschwindigkeit einer scharfen Grenzfläche in Normalenrichtung, v_n , und den Energiebeiträgen, die zur Bewegung der Grenzfläche in Normalenrichtung beitragen, her und kann mit

$$v_n = M_{\alpha\beta} \left(\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} - \gamma_{\alpha\beta} \kappa \right) \quad (3.29)$$

ausgedrückt werden. Die Richtung der Normalen $\mathbf{n}_{x_n} = -\nabla\phi_\alpha/|\nabla\phi_\alpha|$ in einer diffusen Grenzfläche ist in Abb. 3.4 ersichtlich. Zuvor wurde bereits gezeigt, dass die Evolutionsgleichung für ein zweiphasiges System, abgeleitet aus der Evolutionsgleichung für Multiphasen, im Gleichgewicht die Bedingung $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \approx \gamma_{\alpha\beta} \kappa$ erfüllt. Nun wird die Verknüpfung zur Kinetik hergestellt.

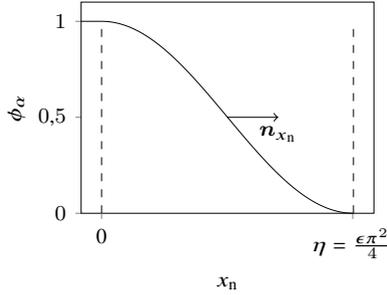


Abbildung 3.4: Gleichgewichtsprofil des Ordnungsparameters. Innerhalb der diffusen Grenzfläche zwischen $x_n = 0$ und $x_n = \eta$ nimmt der Wert von $\phi_\alpha = 1$ auf $\phi_\alpha = 0$ ab.

Das Profil des Ordnungsparameters ϕ_α ist für den in Abb. 3.4 dargestellten Verlauf mit

$$\phi_\alpha(x_n) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{-\pi^2\epsilon + 8x_n}{2\epsilon\pi}\right)$$

gegeben. Die Geschwindigkeit in Normalenrichtung und die Krümmung werden nun in Abhängigkeit vom Ordnungsparameter ausgedrückt und ergeben

$$v_n = \frac{\partial\phi_\alpha/\partial t}{|\nabla\phi_\alpha|} \quad \text{und} \quad \kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}_{x_n} = -\frac{1}{|\nabla\phi_\alpha|} \left(\nabla^2\phi_\alpha - \frac{(\nabla\phi_\alpha \nabla)|\nabla\phi_\alpha|}{|\nabla\phi_\alpha|} \right). \quad (3.30)$$

Beide Ausdrücke können mithilfe des Profils des Ordnungsparameters weiter umgeformt werden:

$$|\nabla\phi_\alpha| = \left| \frac{d\phi_\alpha(x_n)}{dx_n} \right| \quad \text{und} \quad \frac{(\nabla\phi_\alpha \nabla)|\nabla\phi_\alpha|}{|\nabla\phi_\alpha|} = \frac{d^2\phi_\alpha(x_n)}{dx_n^2}. \quad (3.31)$$

Werden die Umformungen (3.30) und (3.31) in Gl. (3.29) eingesetzt, folgt

$$\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial t} = M_{\alpha\beta} \left[\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \left| \frac{d\phi_\alpha(x_n)}{dx_n} \right| + \gamma_{\alpha\beta} \left(\nabla^2\phi_\alpha - \frac{d^2\phi_\alpha(x_n)}{dx_n^2} \right) \right]. \quad (3.32)$$

Mit den Ableitungen des Profils nach dem Ordnungsparameter

$$\left| \frac{d\phi_\alpha(x_n)}{dx_n} \right| = \frac{1}{\epsilon} \sqrt{\frac{16}{\pi^2} \phi_\alpha (1 - \phi_\alpha)} \quad \text{und} \quad \frac{d^2\phi_\alpha(x_n)}{dx_n^2} = \frac{16}{\epsilon^2 \pi^2} \frac{1 - 2\phi_\alpha}{2}$$

folgt schließlich für Gl. (3.32) die Evolutionsgleichung in Abhängigkeit vom Ordnungsparameter:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = M_{\alpha\beta} \left[\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \frac{1}{\epsilon} \sqrt{\frac{16}{\pi^2} \phi_\alpha (1 - \phi_\alpha)} \right. \\ \left. + \gamma_{\alpha\beta} \left(\nabla^2 \phi_\alpha - \frac{16}{\epsilon^2 \pi^2} \frac{1 - 2\phi_\alpha}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Gl. (3.33) ist offensichtlich identisch mit der Formulierung, die aus der Multiphasen-Evolutionsgleichung (3.22) abgeleitet wurde. Dies bedeutet, dass die Evolutionsgleichung (3.22) eine verallgemeinerte Gibbs-Thomson-Gleichung im Kontext einer diffus parametrisierten Grenzfläche darstellt. Ebenso kann mit dieser Methodik eine Evolutionsgleichung für weitere Profile hergeleitet werden [176]. Zudem ist mit einer vergleichbaren Methodik eine Herleitung aus der allgemeinen Advektionsgleichung möglich, um den Einfluss einer Strömung zu berücksichtigen [178].

3.6 Verzerrung des Grenzflächenprofils

Solange sich eine Phase nicht im Gleichgewicht befindet, können krümmungsminimierende und volumetrische treibende Kräfte zusammen oder einzeln dazu führen, dass der Verlauf der Ordnungsparameter im Übergangsbereich nicht mehr dem analytischen Profil entspricht. Diese Auslenkung des Profils aus dem Gleichgewichtsprofil führt in der Regel zu einer Bewegung der Grenzfläche. Ist die Auslenkung günstig, ist eine zufriedenstellende Abbildung der Kinetik der Grenzfläche in einer zweiphasigen Phasenfeldsimulation gegeben. Im Falle einer zu großen Auslenkung, ist eine ausreichende Wiedergabe der Kinetik nicht mehr gegeben. Das Maß der Auslenkung des Profils aus dem Gleichgewichtsprofil hängt bei ausreichender Diskretisierung der Grenzfläche im Wesentlichen von drei Faktoren ab:

- 1) Zunächst spielt das Verhältnis von grenzflächenaufbauenden Termen zu volumetrischen treibenden Kräften eine entscheidende Rolle. Je größer die volumetrische treibende Kraft im Vergleich zu grenzflächenaufbauenden Termen ist, desto stärker wird die Grenzfläche verzerrt. Dies wird in Abschnitt 3.11 deutlich.
- 2) Zusätzlich spielt die Art und Weise eine Rolle, welche Werte $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ entlang der Normalenrichtung annimmt. Wird ein 1D-Fall betrachtet, ist im besten Fall $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ entlang der Normalenrichtung in der Grenzfläche, also für $0 \leq \phi_\alpha \leq 1$, in etwa gleich groß. Im negativen Extremfall besitzt $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ entlang der Normalenrichtung in der Grenzfläche einen Vorzeichenwechsel, sodass die volumetrische treibende Kraft zu einer Verbreiterung oder zu einem Zusammenstauchen der Grenzfläche führen kann [159]. Auch Pinning-Effekte sind möglich. Darunter ist zu verstehen, dass das Integral von $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ in Normalenrichtung ungleich null ist, die Grenzfläche aber aufgrund einer ungleichen Verteilung von $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ zum Stillstand kommt.
- 3) Zudem ist von Relevanz, wie $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ auf die Grenzfläche aufgeprägt wird. Hier ist die verwendete Interpolationsfunktion von zentraler Bedeutung. Im besten Fall wird $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ basierend auf dem Gleichgewichtsprofil über die Grenzfläche verteilt, sodass eine ungewollte Auslenkung aus dem Gleichgewichtsprofil am geringsten ausfällt. Dies ist im Anhang A.2 dargestellt.

Um einer zu großen Verzerrung der Grenzfläche entgegenzuwirken, gibt es mehrere Strategien:

- Zur Vermeidung eines ungünstigen Verhältnisses zwischen grenzflächenaufbauenden Termen und volumetrischen treibenden Kräften (Punkt 1) sind mehrere Möglichkeiten denkbar:
 - Erhöhung der grenzflächenaufbauenden Terme durch eine Verkleinerung der physikalischen Grenzflächenbreite (d. h. bei gleicher Anzahl an Diskretisierungspunkten in der Grenzfläche). Dies führt zu einem höheren Rechenaufwand.
 - Lokale Begrenzung der treibenden Kräfte, wenn ein gewisser Schwellenwert überschritten wird [179]. Damit kann jedoch das

Ergebnis verfälscht werden, da lokale Spitzen in den treibenden Kräften nicht richtig abgebildet werden.

- Erhöhung der grenzflächenaufbauenden Terme durch Zusatzterme, die eine diffuse Grenzfläche aufbauen, aber nicht zur Krümmungsminimierung beitragen [180]. Diese Methode wird in dieser Arbeit verwendet und ausführlich in den Abschnitten 3.7 und 3.11 diskutiert.
- Eine Verzerrung der Grenzfläche aufgrund ungleicher Werte von $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ in Normalenrichtung (Punkt 2), kann verringert werden, indem $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ zunächst in Normalenrichtung gemittelt wird und der gemittelte Wert in die Evolutionsgleichung eingeht [181, 182].
- Eine Verzerrung des Grenzflächenprofils aufgrund der Interpolationsfunktion kann vermieden werden (Punkt 3), indem $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ entsprechend des verwendeten Gleichgewichtsprofils auf die Grenzfläche aufgeprägt wird. In Anhang A.2 ist der Fehler bei der Verwendung unterschiedlicher Interpolationsfunktionen ersichtlich.

Der Vollständigkeit halber muss noch erwähnt werden, dass eine ungenügende Anzahl an Diskretisierungspunkten innerhalb der Grenzfläche ebenfalls zu einer Verzerrung und zu einer ungenügenden Wiedergabe der Kinetik führt. Um bei einem geringen Diskretisierungsaufwand der Grenzfläche eine hohe Genauigkeit zu erzielen, gibt es Ansätze [183, 184], die aber im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter betrachtet werden.

3.7 Eliminierung der Krümmungsminimierung

Bisher sind in der Phasenfeldevolutionsgleichung die Terme, welche die diffuse Grenzfläche aufbauen, mit einer physikalischen Größe, genauer gesagt, der Grenzflächenenergie, verknüpft. Um die Genauigkeit der Simulation zu gewährleisten, sollten volumetrische treibende Kräfte in einer angemessenen Relation

zu den grenzflächenaufbauenden Termen liegen, was zu folgender Bedingung führt:

$$\frac{\gamma_{\alpha\beta}}{\epsilon} \approx |\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}| \quad \text{oder} \quad \mathcal{K} = \frac{|\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}|}{\frac{\gamma_{\alpha\beta}}{\epsilon}} \approx 1, \quad (3.34)$$

wobei \mathcal{K} für Kontrollparameter steht (vgl. [179]). Dies ist vor allem dann einschränkend, wenn Systeme simuliert werden sollen, die durch hohe volumetrische Kräfte, z. B. durch eine starke Unterkühlung, charakterisiert sind. Die einzige Möglichkeit, Bedingung (3.34) bei einer gegebenen Grenzflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ und einer gegebenen volumetrischen Kraft $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ zu erfüllen, ist die Verwendung einer physikalisch kleinen Grenzflächenbreite. Solange der Fokus der Simulation auf kleinen Volumina liegt, ist die Wahl einer physikalisch kleinen Grenzflächenbreite sinnvoll und der Rechenaufwand begrenzt. Sollen größere Gebiete simuliert werden, da z. B. eine bestimmte Korngröße aufgelöst werden soll, kann die Zellanzahl nicht nach Belieben erhöht werden, da der Simulationsaufwand nicht mehr praktikabel wäre.

Eine ähnliche Problematik ergibt sich bei der Betrachtung von Systemen, bei denen krümmungsminimierende Kräfte keine Rolle spielen, die numerisch effiziente Beschreibung bewegter Grenzflächen aber maßgeblich ist. Dies ist z. B. bei der Topologieoptimierung mechanisch belasteter Bauteile der Fall [185]. Ein Ansatz zur Lösung dieser Schwierigkeiten liegt in der *Entkopplung* der grenzflächenaufbauenden Terme von der physikalischen Bedeutung der Grenzflächenenergie [178, 185, 186]. Der Term $\Delta W_{\text{intf}}^{\alpha\beta}$ in Gl. (3.6) wird durch einen Term ersetzt, der keine Abhängigkeit mehr von der Grenzflächenenergie aufweist. Damit ist die Evolutionsgleichung mit

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = \frac{1}{N\epsilon} \sum_{\beta \neq \alpha}^{\tilde{N}} \left[M_{\alpha\beta} \left(\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta} + \frac{8\sqrt{\phi_\alpha \phi_\beta}}{\pi} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \right) \right], \quad \forall \phi_\alpha, \alpha = 0, \dots, N$$

gegeben. Der Term $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$ ähnelt dem Term $\Delta W_{\text{intf}}^{\alpha\beta}$, jedoch besteht der Unterschied, dass er keine Krümmungsminimierung induziert, sondern lediglich

in Abhängigkeit des numerischen Parameters γ^n eine diffuse Grenzfläche in Normalenrichtung aufbaut:

$$\begin{aligned}
 \Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta} &= -\gamma^n \epsilon \left\{ \Delta\phi_\beta - |\nabla\phi_\beta| \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi_\beta}{|\nabla\phi_\beta|} \right) - \frac{16}{\epsilon^2 \pi^2} (1 - \phi_\beta) \right. \\
 &\quad \left. - \left[\Delta\phi_\alpha - |\nabla\phi_\alpha| \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi_\alpha}{|\nabla\phi_\alpha|} \right) - \frac{16}{\epsilon^2 \pi^2} (1 - \phi_\alpha) \right] \right\} \\
 &= \gamma^n \epsilon \left\{ \Delta\phi_\alpha - |\nabla\phi_\alpha| \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi_\alpha}{|\nabla\phi_\alpha|} \right) - \left[\Delta\phi_\beta - |\nabla\phi_\beta| \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi_\beta}{|\nabla\phi_\beta|} \right) \right] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{16}{\epsilon^2 \pi^2} (\phi_\alpha - \phi_\beta) \right\}. \tag{3.35}
 \end{aligned}$$

Dabei wird vom Laplace-Operator $\Delta\phi_\alpha$ der Teil abgezogen, der die krümmungsminimierenden Beiträge enthält.

Alternativ kann eine andere Formulierung verwendet werden. Mit der Definition der Krümmung

$$\kappa = \nabla \cdot \frac{\nabla\phi_\alpha}{|\nabla\phi_\alpha|} = (\nabla \cdot \nabla\phi_\alpha) \frac{1}{|\nabla\phi_\alpha|} - \nabla|\nabla\phi_\alpha| \cdot \left(\frac{\nabla\phi_\alpha}{|\nabla\phi_\alpha|^2} \right)$$

kann nach der Umformung

$$|\nabla\phi_\alpha| \nabla \cdot \frac{\nabla\phi_\alpha}{|\nabla\phi_\alpha|} = \nabla \cdot \nabla\phi_\alpha - \nabla|\nabla\phi_\alpha| \cdot \left(\frac{\nabla\phi_\alpha}{|\nabla\phi_\alpha|} \right)$$

der Laplace-Operator $\Delta\phi_\alpha$ wie folgt dargestellt werden:

$$\nabla \cdot \nabla\phi_\alpha = \Delta\phi_\alpha = |\nabla\phi_\alpha| \nabla \cdot \frac{\nabla\phi_\alpha}{|\nabla\phi_\alpha|} + \nabla|\nabla\phi_\alpha| \cdot \left(\frac{\nabla\phi_\alpha}{|\nabla\phi_\alpha|} \right). \tag{3.36}$$

Gl. (3.36), eingesetzt in Gl. (3.35), ergibt:

$$\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta} = \gamma^n \epsilon \left[\nabla |\nabla \phi_\alpha| \cdot \left(\frac{\nabla \phi_\alpha}{|\nabla \phi_\alpha|} \right) - \nabla |\nabla \phi_\beta| \cdot \left(\frac{\nabla \phi_\beta}{|\nabla \phi_\beta|} \right) + \frac{16}{\epsilon^2 \pi^2} (\phi_\alpha - \phi_\beta) \right].$$

Der Faktor zur Gewichtung der grenzflächenaufbauenden Terme war zuvor die Grenzflächenenergie und wird nun durch den numerischen Parameter γ^n ersetzt, sodass die Bedingung (3.34) zu

$$\mathcal{K} = \frac{|\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}|}{\frac{\gamma^n}{\epsilon}} \approx 1$$

wird. Nun kann in Abhängigkeit von den im System wirkenden volumetrischen treibenden Kräften und der physikalischen Grenzflächenbreite ein für die Simulation geeigneter Wert für γ^n gewählt werden, der ausschließlich von numerischen Gesichtspunkten und nicht von physikalischen Größen abhängt. Für Systeme, bei denen krümmungsminimierende Kräfte nicht vernachlässigt werden dürfen, ist eine Kombination beider Ansätze möglich [180], was zu einer Superposition der grenzflächenaufbauenden Terme führt:

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = \frac{1}{\tilde{N} \epsilon} \sum_{\beta \neq \alpha}^{\tilde{N}} \left[M_{\alpha\beta} \left(\Delta W_{\text{intf}}^{\alpha\beta} + \Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta} + \frac{8\sqrt{\phi_\alpha \phi_\beta}}{\pi} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \right) \right], \quad \forall \phi_\alpha, \alpha = 0, \dots, N. \quad (3.37)$$

In der obigen Gleichung baut der Term $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$ eine diffuse Grenzfläche auf, ohne zur Krümmungsminimierung beizutragen, während der Term $\Delta W_{\text{intf}}^{\alpha\beta}$ sowohl eine diffuse Grenzfläche aufbaut als auch zur Bewegung der Grenzfläche

führt, die aufgrund der Krümmungsminimierung stattfindet. Entsprechend erweitert sich Bedingung (3.34) zu

$$\mathcal{K} = \frac{|\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}|}{\frac{\gamma_{\alpha\beta} + \gamma^n}{\epsilon}} \approx 1.$$

Zum besseren Verständnis des Zusammenspiels zwischen grenzflächenaufbauenden Termen und volumetrischen treibenden Kräften werden in Abschnitt 3.11 Simulationsbeispiele diskutiert.

3.8 Nukleation im Phasenfeldkontext

Bei einer Vielzahl von Materialien tragen die Vorgänge der Keimbildung und des Keimwachstums, die während des Herstellungsprozesses ablaufen, entscheidend zur Mikrostrukturentwicklung bei. Um eine präzise Beschreibung der Mikrostrukturentwicklung mit der Phasenfeldmethode zu ermöglichen, müssen Modellierungsansätze gefunden werden, um Nukleationsprozesse im Kontext diffus parametrisierter Grenzflächen zu berücksichtigen [142].

Wird die Energie eines zweiphasigen Systems, bestehend aus einer volumetrischen Energiedichte und der potentiellen Energiedichte, betrachtet, so ergibt sich die Summe zu

$$\begin{aligned} W_{\text{sum}} &= \frac{1}{\epsilon} \omega_{\text{ob}}(\phi) + \bar{W}_{\text{bulk}}(\phi) \\ &= \frac{16}{\epsilon} \gamma_{\alpha\beta} \phi_{\alpha} \phi_{\beta} + \phi_{\alpha} W_{\text{bulk}}^{\alpha} + \phi_{\beta} W_{\text{bulk}}^{\beta}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

In Abb. 3.5 ist der Verlauf von Gl. (3.38) für eine Grenzfläche zwischen zwei Phasen ($\phi_{\beta} = 1 - \phi_{\alpha}$), $\gamma_{\alpha\beta} = \{1; 1,5\}$, $\epsilon = 1$, $W_{\text{bulk}}^{\alpha} = 1$ und $W_{\text{bulk}}^{\beta} = 0$ in dimensionsloser Form dargestellt. Das energetische Niveau aufgrund der volumetrischen Energiedichte ergibt sich für $\phi_{\alpha} = 0$ und $\phi_{\alpha} = 1$ unabhängig des Wertes der Grenzflächenenergie. Die Grenzflächenenergie beeinflusst den Pfad zwischen diesen Punkten und damit auch die Nukleationsbarriere, die überwunden werden muss, damit die Phase den metastabilen Zustand ($\phi_{\alpha} = 0$) verlassen kann. Je kleiner die Grenzflächenenergie, desto geringer ist die Nukleationsbarriere und desto geringer ist der Wert von ϕ_{α} , ab dem die Steigung von W_{sum} negativ wird, sodass die Phase ϕ_{α} die Nukleationsbarriere

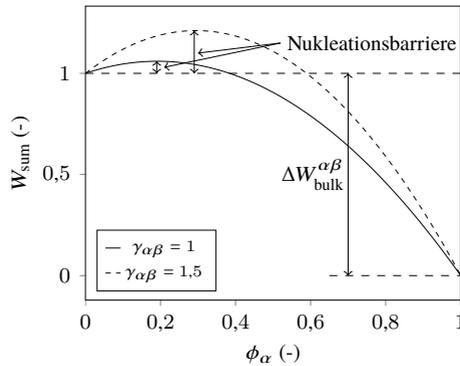


Abbildung 3.5: Dimensionsloser Verlauf der Energiedichte W_{sum} in Abhängigkeit von ϕ_α . Bei $\phi_\alpha = 0$ liegt ein metastabiler und bei $\phi_\alpha = 1$ ein stabiler Zustand vor.

überwunden hat. Neben der Grenzflächenenergie und dem Parameter ϵ kann auch der numerische Parameter γ^n den Verlauf zwischen den Werten für $\phi_\alpha = 0$ und $\phi_\alpha = 1$ abändern und damit das Nukleationsverhalten beeinflussen. Nach [187] lassen sich zwei unterschiedliche Ansätze unterscheiden, um Nukleationsprozesse in ein Phasenfeldmodell zu integrieren:

- Explizite Nukleation: Anhand einer bestimmten Nukleationswahrscheinlichkeit werden neue Phasen explizit in das System gesetzt.
- Langevin-Rauschen: Auf eine bestimmte Größe (z. B. Phasenfelder, Temperatur etc.) wird eine statistisch verteilte Fluktuation ζ aufgeprägt. Ist dieses Rauschen günstig eingestellt, führt es zur Auslenkung aus einem metastabilen Zustand und zur Nukleation einer neuen Phase.

Daneben gibt es noch den Mechanismus der *autokatalytischen Nukleation*. Darunter ist zu verstehen, dass durch interne Vorgänge (z. B. durch das Spannungsfeld einer martensitischen Variante) die Nukleationsbarriere für eine metastabile Phase lokal soweit abgesenkt wird, dass eine Nukleation möglich wird. Hierbei kann bei entsprechender Modellierung sowohl auf eine explizite Nukleation als auch auf einen zusätzlichen Rauschterm verzichtet werden [20, 30, 53].

In allen Fällen ist eine Besonderheit der Phasenfeldmethode zu beachten: Die Grenzflächenenergie kann nur dann richtig wiedergegeben werden, wenn ei-

ne voll ausgebildete Grenzfläche vorliegt [188]. Ein Setzen von Keimen mit einem Radius, der der Breite der diffusen Grenzfläche entspricht, kann diese Problematik im Kontext der Modellierung von Nukleation zwar umgehen, ist jedoch nicht immer zielführend, denn dies kann z. B. zu einer starken Änderung gekoppelter Größen (Konzentration, Plastizität) führen. Auch die Annahme eines runden Keimes ist nicht immer angebracht. Daher werden, wie bei der Verwendung eines Langevin-Rauschens, Nukleationsprozesse auch auf einer Größenskala betrachtet, bei der die diffuse Grenzfläche zwischen Keim und metastabiler Matrix nicht voll ausgebildet ist. In diesem Fall sind die Beiträge der Grenzflächenenergiedichte \bar{W}_{intf} zu groß und es kann der Fall eintreten, dass ein Keim schrumpft, obwohl er bei besserer Diskretisierung (die diffuse Grenzfläche ist voll ausgebildet) aufgrund einer volumetrischen treibenden Kraft wachsen würde. Es gibt mehrere Strategien, damit umzugehen. Ist die präzise Wiedergabe der krümmungsminimierenden Beiträge von großer Bedeutung, kann eine Korrektur durchgeführt werden:

- Nach [49] kann der Beitrag der Grenzflächenenergiedichte mit einem Vorfaktor, der in Abhängigkeit vom Volumen eines Keimes berechnet wird, reduziert werden. Überschreitet das Volumen ein kritisches Volumen, ist der Vorfaktor eins.
- Unter Annahmen, dass der Keim kreisförmig wächst, kann analytisch der Radius und damit die Krümmung berechnet werden. Solange der Keim nicht die Größe $r \approx \eta$ erreicht hat, wird der Krümmungsbeitrag statt mit $\Delta W_{\text{intf}}^{\alpha\beta}$ analytisch berechnet [188].

Bei einer Vielzahl von Arbeiten, bei denen der Einfluss der Krümmungsminimierung eine untergeordnete Rolle spielt, findet keine besondere Behandlung der Grenzflächenenergiedichte für Phasen unterhalb eines kritischen Volumens statt, siehe [20, 30, 53].

Eine besondere Herausforderung besteht bei der Modellierung der Nukleation im Multiphasenfeldkontext. Die Phasenfeldevolutionsgleichung (3.6) wird für alle lokal aktiven Phasen gelöst. Daher muss sichergestellt werden, dass eine bestimmte Phase an einer Position „aktiv“ ist, an der die Nukleation stattfinden soll, und somit die Phasenfeldgleichung dieser Phase gelöst wird. Hierfür sind prinzipiell verschiedene Strategien denkbar:

- Bei Verwendung der Gradientenenergiedichte $\epsilon a(\phi_\alpha, \nabla \phi_\alpha)$ (Gl. (3.8)) in Kombination mit dem Multihindernispotential (Gl. (3.10)) und ohne Dreiphasenbeitrag ($\gamma_{\alpha\beta\delta} = 0$) treten Drittphasen auf. Sofern es energetisch günstig ist, wachsen daraus neue Phasen. Jedoch wird die Kinetik der Grenzfläche zwischen zwei Phasen dauerhaft verfälscht und der Rechenaufwand erhöht.
- Die Verwendung des Multihindernispotentials mit Betragsfunktion (Gl. (3.12)) und ohne Einhaltung des Gibbs-Simplex führt dazu, dass Phasenfeldwerte aller Phasen, die zu Beginn im System vorhanden sind, in den meisten Zellen zumindest zu einem gewissen Anteil vorhanden sind. Daher sind die Phasen „aktiv“ und können nukleieren. Auch hier wird die Kinetik einer Grenzfläche zwischen zwei Phasen nicht richtig abgebildet.
- Die Phase kann mithilfe des expliziten Nukleationsmechanismus gesetzt werden.
- Durch einen Rauschterm kann die Phase temporär aktiviert werden. Ist dies energetisch günstig, wächst die Phase. Andernfalls verschwindet sie wieder.

Im Rahmen dieser Arbeit kommt je nach Anwendungsfall ein unterschiedlicher Nukleationsmechanismus zum Einsatz, der in den jeweiligen Kapiteln im Detail beschrieben wird.

3.9 Numerische Umsetzung und Optimierung

Zur numerischen Berechnung der vorgestellten Modelle wurde im Rahmen dieser Arbeit, soweit nicht anders angegeben, das PACE3D-Framework (Parallel Algorithms for Crystal Evolution in 3D) [136] verwendet, das seit den 2000er Jahren in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. rer. nat. Nestler auf Basis einer Multiphasen-Multikomponentenformulierung [146] für Multiphysik-Anwendungen entwickelt wird. Neben den in der Programmiersprache C programmierten Lösern für diffuse Grenzflächenformulierungen (Allen-Cahn, Cahn-Hilliard) umfasst es unter anderem Module zur Kopplung mit Konzentrationsevolution, Strömung, Magnetismus oder Elastizität. Zudem enthält das

PACE3D-Framework eine Vielzahl an Werkzeugen zur Vor- und Nachbereitung sowie zur Visualisierung von Simulationsdaten [136].

Im Rahmen dieser Arbeit wird die zeitliche Entwicklung der Phasenfeldparameter und Konzentrationsfelder mit einem expliziten Euler-Verfahren gelöst, wobei für den diskreten Zeitschritt Δt bei einem in allen Raumrichtungen äquidistanten Gitter das folgende Stabilitätskriterium gilt, das auf [189] basiert:

$$\Delta t \leq \min\{\Delta t_\phi, \Delta t_c\},$$

wobei

$$\Delta t_\phi = \frac{(\Delta x)^2}{\max\{M_{\alpha\beta}\} \times 2 \times d \times 2 \times \max\{\gamma_{\alpha\beta} + \gamma^n\}} \quad (3.39)$$

und

$$\Delta t_c = \frac{(\Delta x)^2}{\max\{M_{\alpha\beta}\} \times 2 \times d \times \max\{D_i\}}.$$

Hierbei ist Δx der Gitterabstand und $d = 1, 2, 3$ die entsprechende Dimension des Simulationsgebiets. Informationen zur räumlichen Diskretisierung der Divergenz- und Gradiententerme mithilfe der Finite-Differenzen-Methode können in [152, 167, 190] gefunden werden. Die implizite Berechnung des mechanischen Gleichgewichts benötigt kein Stabilitätskriterium und erfolgt nach der Berechnung der Konzentrations- und Phasenfeldgleichung. Hierfür steht eine Finite-Differenzen- oder eine Finite-Elemente-Diskretisierung zur Verfügung. Weiterführende Informationen zur Diskretisierung der Impulsbilanz in PACE3D sind in [191] zu finden.

Eine Reihe von Optimierungsstufen ermöglicht eine effiziente Berechnung der nichtlinearen Differenzialgleichungen auf Hochleistungsrechnern. Um bei einer Vielzahl von Ordnungsparametern Rechenzeit und Speicherbedarf zu begrenzen, steht ein LROP-Verfahren (engl.: *locally reduced order parameter*) [192–194] zur Verfügung. Mit der Annahme, dass in einer Zelle maximal eine bestimmte Anzahl an Phasen gleichzeitig vorliegen kann, ist der numerische Aufwand unabhängig von der Anzahl der bei einer Problemstellung definierten Phasen. Zudem ist ein Klassenkonzept zur einfachen Definition der Materialparameter umgesetzt. Mithilfe der standardisierten Programmibliothek MPI (engl.: *message passing interface*) kann das Rechengebiet dreidimensional zerlegt werden,

wobei jedem Teilgebiet ein einzelner MPI-Prozess zugeordnet wird. Zudem stehen spezialisierte Löser für 1D-, 2D- oder 3D-Anwendungen zur Verfügung. Zur Verbesserung der Genauigkeit werden in dieser Arbeit alle dimensionsbehafteten Größen entdimensionalisiert. Die entsprechende Entdimensionalisierung ist im Anhang A.1 aufgeführt.

3.10 Vergleich mit anderen Phasenfeldlösern

Weltweit gibt es nur wenige Softwarepakete, die auf Basis einer Multiphasenfeldformulierung nach [143, 144, 146] arbeiten und für Multiphysik-Anwendungen (weiter-) entwickelt werden. Neben PACE3D gehören zu den bekanntesten Softwarepaketen das kommerziell vertriebene MICRESS[®]-Paket (MICROstructure Evolution Simulation Software) [195] sowie die Open-Source-Software OpenPhase [181]. Zu erwähnen sind zudem die japanischen Forscher um A. Yamana, T. Takaki und Y. Tomita, die Multiphasenfeldsimulationen [50, 114, 196–198] mit eigener Software durchführen. Der Kern jedes Multiphasenfeldlösers stellt die Multiphasenfeldgleichung dar, die, wenn die oben genannten Löser bzw. die verwendeten Modelle verglichen werden, Unterschiede aufweisen kann. Da für den Zweiphasenfall die analytische Theorie zu der Phasenfeldmethode weit fortgeschritten ist (vgl. Abschnitt 3.5) und wesentliche Punkte wie die präzise Wiedergabe der krümmungsminimierenden Kraft sowie der Kinetik (sowohl bei rein krümmunggetriebenen Fällen als auch bei zusätzlichen treibenden Kräften) grundlegend sind, lassen sich nur wenige Unterschiede im Zweiphasigen festmachen. Wie in Anhang A.2 zu erkennen ist, kann die Wahl der Interpolationsfunktion auch im Zweiphasigen das Ergebnis beeinflussen. Die Definition der interpolierten Energiedichten mit ϕ_α (wie z. B. Gl. (3.13)) hat sich weit verbreitet, wobei die Differenz der freien Energien nach Gl. (3.6) in die Evolutionsgleichung eingebracht wird. Damit wird die Verzerrung der Grenzfläche minimiert. Ein wesentlicher formaler Unterschied ist zudem, dass die Phasenfeldgleichungen in MICRESS[®] und OpenPhase nicht in Abhängigkeit von ϵ , sondern direkt in Abhängigkeit von der Grenzflächenbreite η angegeben werden.

Im Mehrphasenfall lassen sich größere Unterschiede feststellen. Zu den wesentlichen Unterschieden gehört die Wahl der Gradientenenergiedichte. Wird die Gradientenenergiedichte nach Gl. (3.9) in Kombination mit dem Multihindernispotential verwendet, kann im Mehrphasenfall auf die Verwendung des Dreipha-

senbeitrags in Abhängigkeit des Parameters $\gamma_{\alpha\beta\delta}$ in der potentiellen Energiedichte verzichtet werden. Während in PACE3D sowohl mit der Evolutionsgleichung unter Verwendung des Lagrange-Parameters nach Gl. (3.3) (z. B. [48, 199]) als auch mit der Evolutionsgleichung nach Steinbach (3.6) (z. B. [150, 200]) gearbeitet wird, haben sich in anderen Forschungsgruppen die Evolutionsgleichungen ohne Interpolation der Mobilitäten (Gl. (3.5), Gl. (3.6) und Gl. (3.7)) durchgesetzt [76, 114, 181]. Zudem kann die Frage, ob die volumetrische treibende Kraft entlang der Normalenrichtung in der diffusen Grenzfläche gemittelt wird [181], das Ergebnis beeinflussen.

Neben den eben erwähnten Softwarepaketen, die auf Basis einer Multiphasenfeldformulierung arbeiten, werden Phasenfeldsimulationen (u. a. basierend auf einem Multiordnungsparametermodell) mithilfe von Open-Source-Paketen wie MOOSE [201], PRISMS-PF [202], FiPy [203] oder FEniCS [204] durchgeführt. Aufgrund der steigenden Popularität der Phasenfeldmethode, der unterschiedlichen mathematischen Formulierungen und der Nutzung dieser Methode in unterschiedlichen Softwarepaketen wird die Vergleichbarkeit zunehmend schwieriger, weshalb erste Arbeiten gemacht werden, um die Vielzahl an Modellen zu vergleichen [141, 205, 206] und standardisierte Benchmark-Tests einzuführen [207–209].

3.11 Verhältnis von grenzflächenaufbauenden Termen zu volumetrischen treibenden Kräften

In Abschnitt 3.6 wurde auf die Herausforderung eingegangen, im Kontext krümmungsminimierender und volumetrischer treibender Kräfte eine zufriedenstellende Lösung eines Problems mithilfe der Phasenfeldmethode zu erzielen. In den nächsten beiden Abschnitten wird in der Evolutionsgleichung, unter Verwendung des Zusatzterms $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$, das Verhalten unterschiedlicher Gewichtungen von grenzflächenaufbauenden Termen zu volumetrischen treibenden Kräften anhand kleiner Simulationsbeispiele in 1D und 2D veranschaulicht, um ein besseres Verständnis dieser Problematik aufzubauen.

3.11.1 Eindimensionales Simulationsbeispiel

In einem 1D-System mit 200 Zellen in x -Richtung wird ein Keim der Phase α bei $x = 0$ mit einer Breite von zehn Zellen gesetzt. Er ist umgeben von einer Phase β . Die dimensionslosen Parameter für die Simulation sind die folgenden: Phase α wächst mit einer konstanten treibenden Kraft von $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} = 1$. Die Mobilität beträgt $M_{\alpha\beta} = 1$ und der Parameter zum Einstellen der Grenzflächenbreite ist $\epsilon = 1$. Die Gitterbreite beträgt $\Delta x = 0,2$, sodass sich eine Grenzflächenbreite von ungefähr zwölf Zellen einstellt. Die Berechnung der Zeitschrittweite erfolgt nach Gl. (3.39). Für die Fälle $\gamma^n = \{0; 0,1; 1; 10\}$ wird die Grenzflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta} = \{0,01; 0,1; 1; 10; 100\}$ variiert, sodass der Bereich $0,009 \leq \mathcal{K} \leq 100$ abgedeckt wird. Es wird die Phasengleichung (3.37) verwendet. Da die analytischen Lösungen für die Geschwindigkeit (vgl. Gl. (3.29)) und die Grenzflächenenergie bekannt sind, werden diese Größen zur Beurteilung der Ergebnisse herangezogen. Die Geschwindigkeit und die numerische Grenzflächenenergie

$$W_{\text{intf,num}}^{\alpha\beta} = 2 \int_V \epsilon a(\phi, \nabla\phi) dV$$

werden in der Zeitspanne gemittelt, in der $\phi_\alpha = 0,5$ im Bereich $100 \leq \Delta x \leq 180$ liegt. Damit werden Initialisierungs- und Randeffekte vermieden. Zur Vergleichbarkeit wird ein prozentualer Fehler nach

$$\text{Fehler} = \left| \frac{g_{\text{num}} - g_{\text{ref}}}{g_{\text{ref}}} \right| \times 100 \%$$

ermittelt, wobei g_{num} die numerisch ermittelte und g_{ref} die Referenzgröße ist. Das Ergebnis ist in Abbildung 3.6 dargestellt. Für den Fall $\gamma^n = 0$ zeigen die Ergebnisse sowohl für die Kinetik als auch die Grenzflächenenergie einen großen Fehler für $\gamma_{\alpha\beta} \leq 0,1$ bzw. $\mathcal{K} \geq 10$. Eine Stabilisierung der Grenzfläche mit $\gamma^n = 0,1$ verbessert die Lösung in diesem Bereich sowohl für die Geschwindigkeit als auch für die Grenzflächenenergie. Mit $\gamma^n = 1$ wird der Fehler auf unter zwei Prozent verringert. Für $\gamma_{\alpha\beta} \geq 1$ liegt in allen Fällen der Fehler in der Grenzflächenenergie bei unter zwei Prozent. Der Fehler in der Kinetik nimmt jedoch für sehr große Werte von $\gamma_{\alpha\beta}$ bzw. sehr kleine Werte von \mathcal{K} wieder zu. Für $\gamma_{\alpha\beta} = 1000$ bewegt sich die Grenzfläche nicht mehr. Es kommt zum Stillstand der Phasenumwandlung, obwohl eine volumetrische treibende Kraft vorhanden ist. Der Effekt, dass es analytisch zu einer

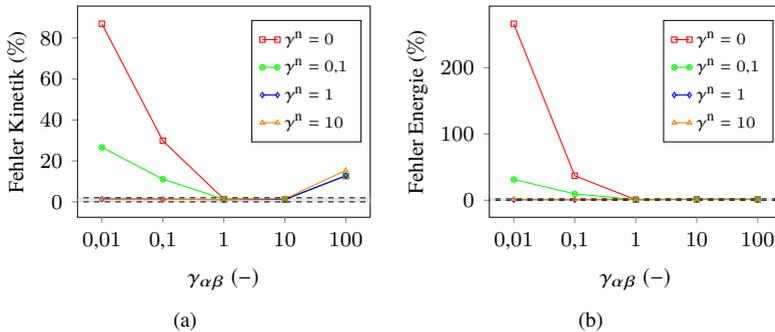


Abbildung 3.6: Fehler für unterschiedliche Verhältnisse zwischen grenzflächenaufbauenden Termen und volumetrischen treibenden Kräften. (a) Fehler in der resultierenden Kinetik. (b) Fehler in der Grenzflächenenergie. Der Bereich mit einem Fehler von kleiner gleich zwei Prozent ist grau unterlegt. Sind die grenzflächenaufbauenden Terme im Vergleich zur volumetrischen treibenden Kraft stärker gewichtet, führt dies zu einer präziseren Wiedergabe der Grenzflächenenergie. Bei der Kinetik ist ein Minimum feststellbar. Sowohl ein kleiner als auch ein großer Wert von \mathcal{K} führt zu einem größeren Fehler in der Kinetik.

Phasenumwandlung kommen sollte, dies aber numerisch bei den gewählten Parametern nicht abbildbar ist, wird im Rahmen dieser Arbeit *numerisches Pinning* genannt. Um das Phänomen des numerischen Pinnings zu verstehen, wird der Mechanismen betrachtet, nach dem sich eine Grenzfläche numerisch fortbewegt. In diesem eindimensionalen Beispiel führen volumetrische treibende Kräfte nur innerhalb der diffusen Grenzfläche zu einer Änderung der Phasenfeldwerte, da volumetrische treibende Kräfte mit dem Faktor $\sqrt{\phi_\alpha \phi_\beta}$ aufgebracht werden. Somit können Phasenfeldwerte in Zellen, die nicht in der diffusen Grenzfläche liegen, aber an welchen ein Gradient der Phasenfeldwerte vorliegt, lediglich durch ein Zusammenspiel der Gradientenenergiedichte und der potentiellen Energiedichte zunehmen bzw. abnehmen. Damit dies stattfinden kann, muss ein gewisses Maß an Auslenkung vom Gleichgewichtsprofil vorliegen. Gegenüber den volumetrischen treibenden Kräften ($\mathcal{K} \lll 1$) ist bei dominierenden grenzflächenaufbauenden Termen die Auslenkung aus dem Gleichgewichtsprofil so schwach ausgeprägt, dass die Phasenfeldwerte in der Zelle, in denen ein Gradient vorliegt, unverändert bleiben, wobei die Zelle jedoch nicht im diffusen Grenzbereich liegt. Der Grund dafür ist, dass die durch die Gradientenenergiedichte induzierten Beiträge nicht groß genug sind, um die durch die potentielle Energiedichte induzierten Beiträge zur Begrenzung

der diffusen Grenzflächenbreite zu überwinden. Dies liegt daran, dass beim Multihindernispotential die Ableitung an der Stelle $\phi = 0$ oder $\phi = 1$ nicht null ist.

3.11.2 Zweidimensionales Simulationsbeispiel

In einem zweiten Schritt wird ein zweidimensionaler, kreisrunder Keim der Phase α mit einem Radius von 80 Zellen betrachtet, der von einer Phase β umgeben ist. Das Gebiet ist 200×200 Zellen groß und die Grenzflächenenergie beträgt $\gamma_{\alpha\beta} = 1$. Die Werte für ϵ , $M_{\alpha\beta}$, Δx und Δt entsprechen dem vorherigen Beispiel. Aufgrund der Krümmungsminimierung schrumpft der Keim. Die Simulation wird gestoppt, sobald ein Viertel des Anfangsvolumens unterschritten ist. Die Grenzflächengeschwindigkeit variiert dabei in Abhängigkeit von der Krümmung und ist im Zweidimensionalen gegeben mit

$$|v| = M_{\alpha\beta}\gamma_{\alpha\beta}\kappa = M_{\alpha\beta}\gamma_{\alpha\beta}\frac{1}{R}, \quad (3.40)$$

wobei R den Radius darstellt. Die Geschwindigkeit der Grenzfläche wird exemplarisch an einem Schritt entlang der x-Achse durch den Keim gemessen. In Abb. 3.7(a) ist sowohl die analytische, nach Gl. (3.40) bestimmte Geschwindigkeit als auch die simulativ ermittelte Geschwindigkeit an 160 Zeitpunkten aufgetragen. Es fällt auf, dass die simulativ ermittelte Geschwindigkeit der Grenzfläche stark schwankt. Dies ist auf numerische Effekte zurückzuführen. Je nachdem, ob die Phasenfront kurz davor ist, eine bisher grenzflächenfreie Zelle zu betreten oder dies gerade passiert ist, nimmt die Geschwindigkeit der 0,5-Stelle kurzzeitig ab oder zu. Eine durch diese Punkte gefittete Kurve zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Referenzlösung. Daher wird der Zeitpunkt, bei dem in dieser Simulation ein Viertel des Anfangsvolumens erreicht wurde, als Referenzlösung für die weiteren Simulationen verwendet. Der numerische Stabilisierungsparameter $\gamma^n = \{0; 0,1; 1; 10; 50; 75\}$ wird nun variiert. Das Ergebnis ist in Abb. 3.7(b) anhand der prozentualen Abweichung vom Referenzfall $\gamma^n = 0$ dargestellt. Solange $\gamma^n \leq \gamma_{\alpha\beta}$ wird die Kinetik der Krümmungsminimierung mit einer Abweichung von unter zwei Prozent abgebildet. Dominiert γ^n über $\gamma_{\alpha\beta}$, wächst die Abweichung. Auch in diesem Fall ist ein numerisches Pinnen feststellbar. Liegt $\gamma^n \geq 100$ vor, bleibt der Keim stehen und schrumpft nicht. Der Grund ist ähnlich wie im 1D-Beispiel. Eine zu

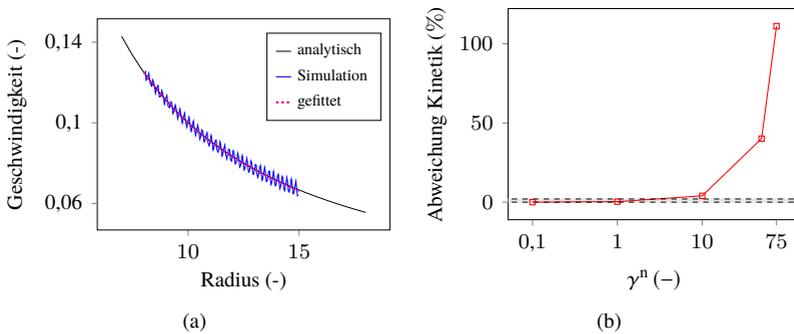


Abbildung 3.7: Grenzflächengeschwindigkeit eines kreisförmigen Keimes in 2D ohne Berücksichtigung volumetrischer treibender Kräfte. (a) Vergleich der analytischen zur simulierten Geschwindigkeit für $\gamma^n = 0$. (b) Prozentuale Abweichung der Zeitspanne zur Vervielfachung des Anfangsvolumens im Vergleich zum Referenzfall $\gamma^n = 0$ für unterschiedliche Werte für γ^n . Der Bereich mit einem Fehler von kleiner gleich zwei Prozent ist in (b) grau unterlegt.

hohe Stabilisierung durch γ^n wirkt der Auslenkung durch $\gamma_{\alpha\beta}$ entgegen und verhindert das Schrumpfen.

Im letzten Fall wird eine Kombination von krümmungsminimierenden und volumetrischen Beiträgen betrachtet. Zusätzlich zum vorherigen Beispiel wird eine volumetrische treibende Kraft von $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} = -0,1$ gleichgerichtet aufgebracht. Somit ist bei einem dimensionslosen Radius von zehn der Beitrag zur Grenzflächengeschwindigkeit von den volumetrischen und den krümmungsminimierenden Beiträgen gleich groß. Das Ergebnis ist in Abb. 3.8 dargestellt. In Abb. 3.8(b) zeigt sich für $\gamma^n = 0$ eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung. Wie im vorherigen Fall wird dieser Fall als Referenzlösung für die weiteren Beispiele $\gamma^n = \{0; 0,1; 1; 10; 100\}$ verwendet. In Abb. 3.8(b) zeigt sich, dass mit steigendem γ^n die Abweichung wächst. Da sowohl krümmungsminimierende als auch volumetrische Beiträge zum Schrumpfen des Keimes beitragen, ist die Abweichung für $\gamma^n \geq 10$ zur Referenzlösung kleiner als für den Fall $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} = 0$. Das numerische Pinnen setzt somit später ein.

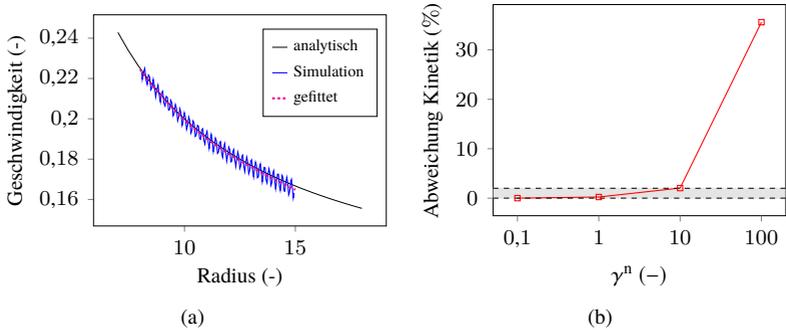


Abbildung 3.8: Grenzflächengeschwindigkeit eines kreisförmigen Keimes in 2D mit Berücksichtigung volumetrischer treibender Kräfte. (a) Vergleich der analytischen zur simulierten Geschwindigkeit, für $\gamma^n = 0$. (b) Prozentuale Abweichung der Zeitspanne zur Vervielfachung des Anfangsvolumens im Vergleich zum Referenzfall $\gamma^n = 0$ für unterschiedliche Werte für γ^n . Der Bereich mit einem Fehler von kleiner gleich zwei Prozent ist in (b) grau unterlegt.

3.11.3 Fazit

In den vorherigen beiden Abschnitten wurde die Wichtigkeit einer angemessenen Gewichtung grenzflächenaufbauender zu volumetrischen Beiträgen in der Phasenfeldformulierung deutlich, wobei das Multihindernispotential und eine konstante treibende Kraft verwendet wurde. Dominieren volumetrische Beiträge, ist in der Kinetik und in der Grenzflächenenergie eine deutliche Abweichung von der analytischen Lösung erkennbar. In der Phasenfeldevolutionsgleichung ist dieser negative Effekt mit einem numerischen Zusatzterm $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$ zur Stabilisierung des Grenzflächenprofils reduzierbar. Als Folge dessen verringert sich die Zeitschrittweite, die nun auch vom numerischen Parameter γ^n abhängt. Ist γ^n im Vergleich zur Grenzflächenenergie oder zu den volumetrischen Beiträgen zu groß gewählt, kann dies zu numerischem Pinnen führen. Die Grenzfläche bleibt stehen, obwohl Beiträge zur weiteren Bewegung vorhanden sind. Es ist anzumerken, dass das Multihindernispotential im Vergleich zum Multimuldenpotential anfälliger für das numerische Pinnen ist, da bei diesem die Ableitungen an den Stellen $\phi = 0$ oder $\phi = 1$ null ergeben. Da für effiziente großskalige Simulationen mit einer Vielzahl von Ordnungsparametern das Multihindernispotential große Vorteile bietet, findet im Rahmen dieser Arbeit keine weitere Untersuchung mit dem Multimuldenpotential statt.

Die Herausforderung beim Einstellen einer Simulation besteht darin, dass sowohl die Grenzflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ als auch die volumetrische treibende Kraft $\Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ lokal sehr unterschiedlich ausfallend können. Die Grenzflächenenergie kann z. B. anhand der Missorientierung zweier Körner berechnet werden und die volumetrische treibende Kraft kann sich um mehr als eine Größenordnung unterscheiden, z. B. aufgrund von Heterogenitäten der gespeicherten Verformungsenergie bei der Rekristallisation. Dies führt lokal zu einem sehr unterschiedlichen Verhältnis zwischen grenzflächenaufbauenden und volumetrischen Kräften. In solchen Fällen ist ein überlegtes Einstellen des Verhältnisses zwischen grenzflächenaufbauenden und volumetrischen Kräften besonders wichtig.

Die zentralen Erkenntnisse der Untersuchungen mit den Vor- und Nachteilen bei Verwendung des numerischen Zusatzterms $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$ sind in den Tabellen 3.1 und 3.2 aufgeführt. Bei der Beschreibung der Eigenschaften der einzelnen Fälle wird, soweit nicht anders angegeben, davon ausgegangen, dass die im Simulationsgebiet vorhandenen Phasengrenzen ein gewisses Maß an Krümmung aufweisen.

Tabelle 3.1: Eigenschaften von Gebieten mit unterschiedlichem Verhältnis von Krümmungsminimierenden zu volumetrischen treibenden Kräften ohne Verwendung von $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$.

Fall	Eigenschaften
$\gamma_{\alpha\beta}/\epsilon \ll$ $ \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} $ bzw. $\mathcal{K} \gg 1$	Gebiet mit dominierenden volumetrischen Kräften: <ul style="list-style-type: none"> - instabile Grenzfläche - ungenügende Wiedergabe der Kinetik und Grenzflächenenergie + geringer Rechenaufwand
$\gamma_{\alpha\beta}/\epsilon \approx$ $ \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} $ bzw. $\mathcal{K} \approx 1$	Gebiet mit deutlichen Einflüssen aus Krümmungsminimierenden und volumetrischen Kräften: <ul style="list-style-type: none"> + stabile Grenzfläche + präzise Wiedergabe der Kinetik und Grenzflächenenergie
$\gamma_{\alpha\beta}/\epsilon \gg$ $ \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} $ bzw. $\mathcal{K} \ll 1$	Gebiet mit dominierenden Krümmungsminimierenden Einflüssen: <ul style="list-style-type: none"> + stabile Grenzfläche + präzise Wiedergabe der Grenzflächenenergie + präzise Wiedergabe der Kinetik der durch die Krümmungsminimierung induzierten Phasenumwandlung - Verfälschung der Kinetik der durch volumetrische Kräfte induzierten Phasenumwandlung möglich - numerisches Pinnen für $\gamma_{\alpha\beta}/\epsilon \gg \gg \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ (keine Grenzflächenbewegung einer planaren Front, trotz vorhandener Differenz in volumetrischen Energien)

Tabelle 3.2: Eigenschaften von Gebieten mit unterschiedlichem Verhältnis von grenzflächenaufbauenden zu volumetrischen treibenden Kräften mit Verwendung von $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$.

Fall	Eigenschaften
$(\gamma_{\alpha\beta} + \gamma^n)/\epsilon \approx \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} $ bzw. $\mathcal{K} \approx 1$ Verwendung von γ^n zur Stabilisierung der Grenzfläche für den Fall unzureichender Ergebnisse für $\gamma^n = 0$	Gebiet mit sichtbaren Einflüssen krümmungsminimierender und mit deutlichen Einflüssen volumetrischer Kräfte für $\gamma^n \approx \gamma_{\alpha\beta}$ bzw. mit dominierenden volumetrischen Kräften für $\gamma^n \gg \gamma_{\alpha\beta}$: <ul style="list-style-type: none"> + stabilere Grenzfläche, im Vergleich zu $\gamma^n = 0$ + präzisere Wiedergabe der Kinetik und Grenzflächenenergie, im Vergleich zu $\gamma^n = 0$ + geringerer Rechenaufwand, im Vergleich zu einer feineren Diskretisierung (Verringerung von ϵ) und $\gamma^n = 0$ - höherer Rechenaufwand (kleinere Zeitschrittweite), im Vergleich zu $\gamma^n = 0$
$(\gamma_{\alpha\beta} + \gamma^n)/\epsilon \gg \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} $ bzw. $\mathcal{K} \ll 1$	Gebiet mit dominierenden krümmungsminimierende Kräfte für $\gamma^n \approx \gamma_{\alpha\beta}$ bzw. Fixierung des Gleichgewichtsprofils für $\gamma^n \gg \gamma_{\alpha\beta}$ <ul style="list-style-type: none"> + stabile Grenzfläche + präzise Wiedergabe der Grenzflächenenergie - Verfälschung der durch volumetrische treibende Kräfte induzierten Grenzflächenbewegung - Verfälschung der durch krümmungsminimierende Kräfte induzierten Grenzflächenbewegung für $\gamma^n \gg \gamma_{\alpha\beta}$ - numerisches Pinnen möglich: <ul style="list-style-type: none"> - keine Grenzflächenbewegung einer planaren Front, trotz vorhandener Differenz in volumetrischen Energien für $(\gamma_{\alpha\beta} + \gamma^n)/\epsilon \gg \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta}$ - keine Grenzflächenbewegung, trotz vorhandener Krümmung für $\gamma^n \gg \gamma_{\alpha\beta}$

4 Modellierung der Martensitumwandlung mit der Multiphasenfeldmethode

In diesem Kapitel wird ein neuartiges Modell zur Beschreibung der Martensitumwandlung mit der Multiphasenfeldmethode vorgestellt. Dabei wird sowohl ein besonderer Fokus auf die Anwendbarkeit für großskalige Simulationen mit polykristallinen Mikrostrukturen als auch auf die Verwendung einer elastischen treibenden Kraft basierend auf den mechanischen Sprungbedingungen gelegt, um eine präzise Abbildung der treibenden Kräfte sicherzustellen. Als Basis dient das in Kapitel 3 vorgestellte Multiphasenfeldmodell. Weitere Ergänzungen werden in den folgenden Abschnitten eingeführt. Das entwickelte Modell ist in den referierten Journal-Artikeln Schoof et al. [210] und Schoof et al. [211] publiziert.

4.1 Freies Energiefunktional und Evolutionsgleichung

Das komplexe Zusammenspiel von im Wesentlichen drei treibenden Kräften ist für die Bildung einer typischen martensitischen Morphologie verantwortlich [212]: (i) Die Umwandlung wird durch eine Temperaturdifferenz ermöglicht, sodass die chemische Energiedichte von Martensit geringer ist als die von Austenit. Dem stehen (ii) die Grenzflächenenergie und (iii) die elastische Energiedichte gegenüber, die vorwiegend der Umwandlung entgegenwirken¹.

¹ Je nach Spannungszustand kann die elastische treibende Kraft eine Umwandlung von Austenit in Martensit begünstigen, z. B. im Falle einer extern angelegten Spannung (s. Abschnitt 4.5).

Unter Berücksichtigung dieser drei Energiebeiträge wird die gesamte freie Energie mit dem freien Energiefunktional

$$\mathcal{F}(\phi, \nabla\phi, \bar{\varepsilon}) = \int_V W_{\text{intf}}(\phi, \nabla\phi) + \bar{W}_{\text{elast}}(\phi, \bar{\varepsilon}) + \bar{W}_{\text{chem,k}}(\phi) dV \quad (4.1)$$

ausgedrückt. Bei Berücksichtigung von Plastizität oder einer extern angelegten Spannung kann das Energiefunktional um jeweils einen zusätzlichen Term erweitert werden (s. Abschnitt 4.5 bzw. Abschnitt 5.2).

Als Evolutionsgleichung wird eine erweiterte Form von Gl. (3.37) verwendet. Zum einen wird damit die Möglichkeit gegeben, die Grenzfläche im Kontext hoher volumetrischer treibender Kräfte mithilfe des Terms $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$ als Funktion des Faktors γ^n zu stabilisieren (s. Abschnitt 3.7). Zum anderen wird ein Rauschterm ζ hinzugefügt, um die Nukleation martensitischer Varianten zu ermöglichen. Damit ergibt sich die Evolutionsgleichung für die martensitische Umwandlung zu

$$\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial t} = \frac{1}{\bar{N}\epsilon} \sum_{\beta \neq \alpha}^{\bar{N}} \left[M_{\alpha\beta} \left(\Delta W_{\text{intf}}^{\alpha\beta} + \Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta} + \frac{8\sqrt{\phi_\alpha\phi_\beta}}{\pi} \Delta W_{\text{bulk}}^{\alpha\beta} \right) \right] + \zeta^\alpha, \quad \forall \phi_\alpha, \alpha = 0, \dots, N. \quad (4.2)$$

Mit der Formulierung der Grenzflächenbeiträge in Abschnitt 3.3, der chemischen und elastischen Energiedichte in den Abschnitten 3.4.1 und 3.4.3 und des Terms $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$ in Abschnitt 3.7 ist das Modell zur Simulation der Martensitumwandlung bis auf den Nukleationsterm ζ und die Definition der Eigendehnung $\tilde{\varepsilon}^0$ zur Berechnung der elastischen treibenden Kraft (s. Abschnitt 3.4.3) vollständig beschrieben. Die beiden fehlenden Komponenten werden in den nächsten Abschnitten erläutert.

4.2 Das Bain'sche Modell

Der während der martensitischen Umwandlung stattfindende diffusionslose Umklappvorgang des kubisch flächenzentrierten Gitters in ein tetragonal raumzentriertes Gitter kann mithilfe der Bain'schen Konstruktion kristallographisch

anschaulich dargestellt werden. Nach [213] ist das tetragonal raumzentrierte Gitter des Martensits bereits als Elementarzelle im kubisch flächenzentrierten Gitter des Austenits vorhanden, wie in Abb. 4.1 zu erkennen ist. Mögliche Positionen

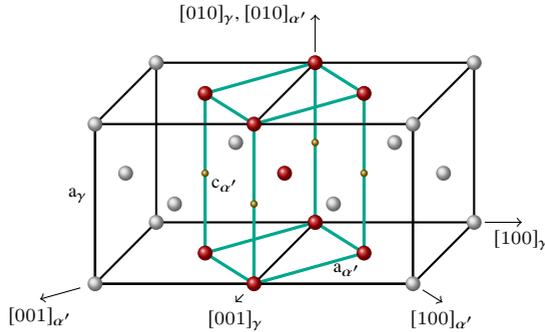


Abbildung 4.1: Bain'sche Konstruktion, nach [213]. Dargestellt sind zwei Elementarzellen des kubisch flächenzentrierten Austenits und eine Elementarzelle des tetragonal raumzentrierten Martensits. Mögliche Positionen des Kohlenstoffs sind als gelbe Kreise dargestellt.

des interstitiell gelösten Kohlenstoffs sind in beiden Gittern identisch, sodass keine Diffusion des Kohlenstoffs bei der Martensitumwandlung notwendig ist. Die bei diesem Umklappvorgang entstehenden Verzerrungen werden Bain'sche Dehnungen genannt und können basierend auf den Gitterkonstanten a_α , $a_{\alpha'}$ und $c_{\alpha'}$ mit

$$\varepsilon_1 = \frac{a_{\alpha'}\sqrt{2} - a_\alpha}{a_\alpha} \quad \text{und} \quad \varepsilon_3 = \frac{c_{\alpha'} - a_\alpha}{a_\alpha} \quad (4.3)$$

berechnet werden, wobei die Gitterkonstanten nach [214] mit

$$a_\gamma = 0,3548 + 0,0044c_c \quad (4.4)$$

$$a_{\alpha'} = 0,2861 - 0,0013c_c \quad (4.5)$$

$$c_{\alpha'} = 0,2861 + 0,0116c_c \quad (4.6)$$

in Nanometern gegeben sind. In Gln. (4.4), (4.5) und (4.6) wird die Kohlenstoffkonzentration c_c jeweils in Ma.-% angegeben. Der Verlauf der Gitterkonstanten in Abhängigkeit von der Kohlenstoffkonzentration ist in Abb. 4.2 dargestellt. Vor allem die Gitterkonstante $c_{\alpha'}$ zeigt eine starke Kohlenstoffabhängigkeit,

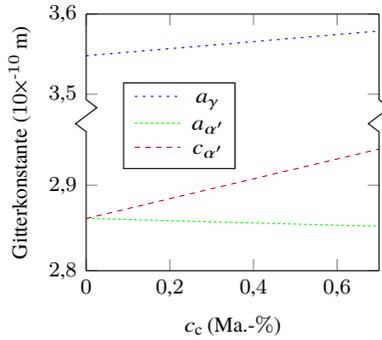


Abbildung 4.2: Verlauf der Gitterkonstanten in Abhängigkeit von der Kohlenstoffkonzentration, nach [214].

da die Kohlenstoffatome größer als die Oktaederlücken sind [215]. Da die tetragonale Verzerrung in alle drei Raumrichtungen gleichermaßen auftreten kann, sind drei energetisch gleichwertige Martensitvarianten möglich, die in Abb. 4.3 dargestellt sind. Basierend auf Gl. (4.3) lässt sich die Strukturänderung

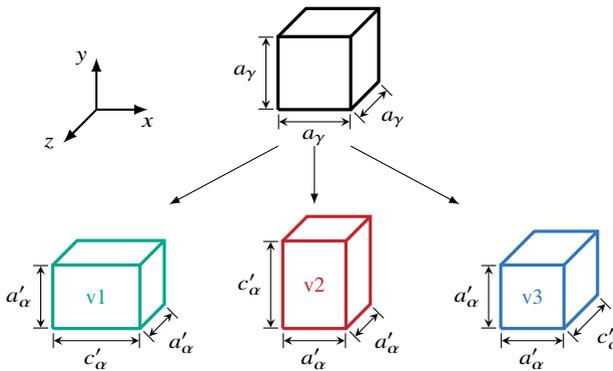


Abbildung 4.3: Konstruktion der drei energetisch gleichwertigen Bain-Varianten, nach [16].

nach Bain mithilfe der Eigendehnungen

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}^{000}(\text{v1}) &= \begin{pmatrix} \varepsilon_3 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1 \end{pmatrix}, & \tilde{\varepsilon}^{000}(\text{v2}) &= \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_3 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1 \end{pmatrix}, & (4.7) \\ \tilde{\varepsilon}^{000}(\text{v3}) &= \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

mathematisch beschreiben.

In Abhängigkeit von der Kristallorientierung des austenitischen Korns werden die Steifigkeiten und die Eigendehnungen aller Phasen gemäß der $z - y' - x''$ intrinsischen Rotationskonvention mithilfe der Rotationsmatrix Q rotiert:

$$C_{ijkl} = Q_{im}Q_{jn}Q_{ko}Q_{lp}C_{mnop}^{\text{unrot}} \quad \text{und} \quad \tilde{\varepsilon}_{ij}^{00} = Q_{im}Q_{jn}\tilde{\varepsilon}_{mn}^{000},$$

wobei C^{unrot} und $\tilde{\varepsilon}^{000}$ die unrotierte Steifigkeit und Eigendehnung darstellen.

4.3 Modellierung der autokatalytischen Nukleation

Die Phasenfeldevolutionsgleichung (4.2) wird für alle lokal aktiven Phasen gelöst. Um eine Phase, die lokal nicht vorhanden ist, zu aktivieren und damit die Nukleation einer martensitischen Variante zu ermöglichen, wird der Rauschterm

$$\zeta^\alpha = \frac{\partial}{\partial \phi_\alpha} \left(\sum_{\alpha < \beta < \delta} \phi_\alpha \phi_\beta \phi_\delta \times B \times A \right) \quad (4.8)$$

in die Phasenfeldevolutionsgleichung integriert, wobei B die Distribution und A die Amplitude darstellen. Mithilfe der Distribution kann eine Wahrscheinlichkeitsverteilung von Zufallszahlen vorgegeben werden, während über die Amplitude der Maximalwert des Rauschens einstellbar ist. In dieser Arbeit liefert die Distribution gleichverteilte Zufallszahlen, d. h. alle Zahlen im Intervall zwischen minus eins und eins erscheinen mit gleicher Wahrscheinlichkeit. Die

Amplitude muss je nach Anwendungsfall so kalibriert werden, dass die Nukleation neuer martensitischer Varianten an energetisch günstigen Stellen möglich ist. Gleichzeitig muss eine ausreichende Nukleationsbarriere an energetisch ungünstigen Stellen vorhanden sein (vgl. Abschnitt 3.8), sodass die eingebrachten Störungen an diesen Stellen abgebaut werden. Der Rauschterm ζ^α wird in einem Diskretisierungspunkt nur dann aktiviert, wenn

- α eine martensitische Phase,
- die Phase α nicht vorhanden ($\phi_\alpha = 0$),
- der Phasenfeldwert der parentalen Phase ungleich null und
- der aktuelle Zeitschritt ohne Restbildung durch eine ganze Zahl I teilbar

ist. Das Intervall I zwischen zwei Rauschereignissen wird so gewählt, dass es groß genug ist, damit das System die eingebrachten Störungen an den Stellen abbauen kann, an denen eine Nukleation energetisch ungünstig ist, und klein genug ist, um signifikante Einflüsse auf die resultierende Mikrostruktur zu vermeiden. Zudem wird sichergestellt, dass die Phasenfelder trotz des Rauschterms auf dem Gibbs-Simplex $\mathcal{G} = \{\phi \mid \sum_\alpha \phi_\alpha = 1, \text{ und } \phi_\alpha \geq 0\}$ liegen. Im Falle einer Grenzfläche zwischen zwei Körnern (z. B. zwischen zwei Austenitkörnern) wird gewährleistet, dass dort keine ungewünschte Umwandlung zwischen Phasen aus zwei unterschiedlichen Körnern stattfindet, die zwischen einander keine Mobilität aufweisen.

Simulationsbeispiel

Die Funktionsweise des autokatalytischen Nukleationsmechanismus wird anhand eines quasi-eindimensionalen Beispiels veranschaulicht. Wie in Abb. 4.4(a) dargestellt ist, wird ein Gebiet, das mit 300×1 Zellen diskretisiert ist, mit einem martensitischen Keim in einer austenitischen Matrix betrachtet. Die Materialparameter orientieren sich an einer Eisen-Nickel-Legierung [30, 33] und wurden wie folgt gewählt: $E = 77$ GPa, $\nu = 0,375$, $\varepsilon_1 = 0,08$, $\varepsilon_3 = -0,08$, $\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha'} = -1,3 \times 10^8$ J/m³. Es gilt $\Delta x = \Delta y = 1$ nm.

Aufgrund der Reduktion auf ein quasi-eindimensionales Problem gilt, dass in den Bain-Dehnungen (Gl. (4.7)) lediglich $\tilde{\varepsilon}_{11}^{000} \neq 0$ ist. Ohne Rotation des Aus-

tenits und keiner Reduktion der Eigendehnungen an Korngrenzen (s. nächster Abschnitt) gilt der direkte Zusammenhang $\tilde{\epsilon}^0 = \tilde{\epsilon}^{000}$. Für alle auftretenden Grenzflächen wird eine Grenzflächenenergie von $\gamma = 0,08 \text{ J/m}^2$ angenommen und der Dreiphasenterm mit $\gamma_{\alpha\beta\delta} = 10\gamma$ gewichtet. Die Zeitschrittweite wird auf eins gesetzt und die Mobilität zwischen Austenit und den martensitischen Varianten wird so berechnet, dass die Simulation stabil läuft (s. Abschnitt 3.9). Die Mobilität zwischen zwei martensitischen Varianten wird auf null gesetzt. Der Gradient der Phasenfelder sowie die Verschiebungen in orthogonaler Richtung, an den Simulationsrändern werden auf null gesetzt. In z-Richtung wird ein ebener Dehnungszustand angenommen. Die Phasenfeldevolutionsgleichung (4.2) wird zunächst ohne Nukleationsterm für unterschiedliche Grenzflächenbreiten gelöst. In einer weiteren Simulation wird durch den aktivierten Nukleationsterm in jedem 50. Zeitschritt ein Rauschen nach Gl. (4.8) auf die Phasenfelder aufgebracht, wobei die Amplitude $A = 0,1$ beträgt. Das Beispiel wird ohne Distribution und ohne zusätzliche Stabilisierung der Grenzfläche ($\gamma^n = 0$) durchgeführt.

Aufgrund der Unterkühlung und der damit verbundenen chemischen treibenden Kraft wächst der martensitische Keim. Durch die Eigendehnungen steigt die Spannung im Simulationsgebiet und die elastische treibende Kraft, die der Umwandlung entgegen wirkt, steigt. Der Volumenanteil der martensitischen Phasen ist in Abb. 4.4(d) und die Spannungskomponente σ_{11} ist in Abb. 4.4(e) über der dimensionslosen Zeit aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass die Umwandlungsgeschwindigkeit abnimmt, bis das System einen Gleichgewichtszustand erreicht hat (Abb. 4.4(b)). In Abwesenheit von krümmungsminimierenden Beiträgen ist die analytische Gleichgewichtsbedingung zwischen Austenit (γ) und der ersten martensitischen Variante ($\alpha'(v1)$) erreicht, wenn

$$\Delta W_{\text{bulk}}^{\gamma\alpha'(v1)} = \Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha'(v1)} + \Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha'(v1)} = 0$$

gilt. Da gleiche Steifigkeiten angenommen werden und nur eine Komponente der Eigendehnungen ungleich null ist, ergibt sich die Differenz der elastischen treibenden Kräfte zu $\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha'(v1)} = -\sigma_{11}\tilde{\epsilon}_{11}^{0,\alpha'(v1)}$. Wird aus den Simulationsergebnissen die Spannungskomponente σ_{11} abgelesen, so lässt sich ein prozentualer Fehler mit

$$\text{Fehler} = \left| \frac{\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha'(v1)} - \sigma_{11}\tilde{\epsilon}_{11}^{0,\alpha'(v1)}}{\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha'(v1)}} \right| \times 100 \%$$

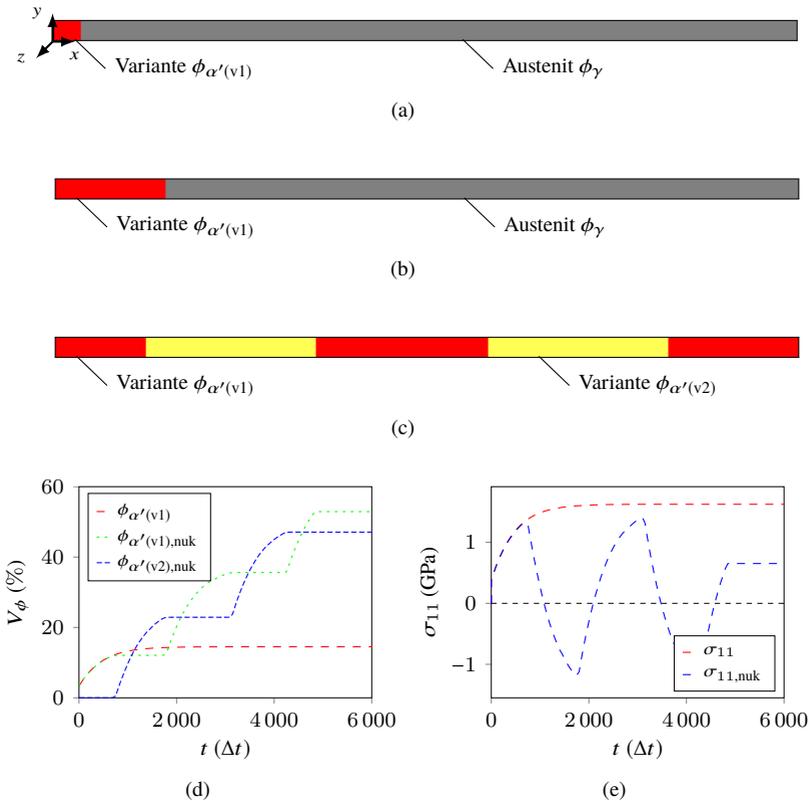


Abbildung 4.4: Martensitumwandlung in einem quasi-eindimensionalen Gebiet. (a) Anfangskonfiguration. (b) Endzustand ohne Nukleation. (c) Endzustand mit Nukleation. (d) Zeitlicher Verlauf der Volumenanteile. (e) Zeitlicher Verlauf der Spannungskomponenten σ_{11} . Zur besseren Visualisierung ist die Ausdehnung der Simulationsbilder (a-c) in y-Richtung künstlich erhöht.

berechnen. In Abbildung 4.5 ist dieser Fehler in Abhängigkeit von unterschiedlichen Grenzflächenbreiten dargestellt. Es ist zu erkennen, dass der prozentuale Fehler ab einem Wert von $\epsilon = 2\Delta x$ kleiner als 0,1 % ist.

Die Simulation mit aktiviertem Nukleationsterm wird mit $\epsilon = 2,5\Delta x$ durchgeführt. Der Nukleationsterm führt dazu, dass kleine Phasenfeldwerte der Variante $\phi_{\alpha'(v2)}$ in der Grenzfläche zwischen Austenit und der Variante $\phi_{\alpha'(v1)}$ auftreten. Wenn es energetisch günstig für das Wachstum der neuen Phase

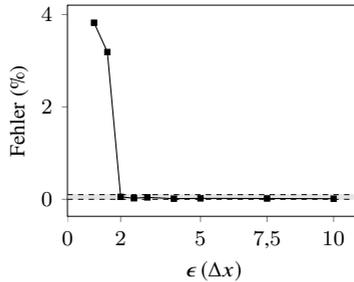


Abbildung 4.5: Prozentualer Fehler für unterschiedliche Grenzflächenbreiten. Der Bereich mit einem Fehler kleiner als 0,1 % ist grau unterlegt.

ist, wird die Nukleationsbarriere überwunden. Andernfalls verschwinden die kleinen Phasenanteile innerhalb weniger Zeitschritte. Dieser Mechanismus macht die Simulation numerisch effizient, da nur die Evolutionsgleichungen der numerisch vorhandenen Phasen gelöst werden. Zusätzlich ermöglicht es die genaue Berechnung aller interpolierten Größen in den Zeitschritten, in denen keine Störungen in einer Grenzfläche zwischen zwei Phasen vorhanden sind. In Abb. 4.4(d) ist zu erkennen, dass die Variante $\phi_{\alpha'(v1)}$ bei aktiviertem Nukleationsmechanismus solange wächst, bis der größte Teil der anfangs zu Verfügung stehenden treibenden Kraft verbraucht ist. Sobald die treibende Kraft für die Variante $\phi_{\alpha'(v2)}$ groß genug ist, um die Nukleationsbarriere zu überwinden, entsteht die Variante $\phi_{\alpha'(v2)}$ und wächst weiter in die austenitischen Phase. Dabei entsteht eine voll ausgebildete Martensit/Martensit-Grenzfläche. Da die Mobilität zwischen den martensitischen Varianten null ist, bleibt diese Grenzfläche am Ort der Entstehung stehen. Dieser Nukleationsmechanismus wiederholt sich, bis eine Mikrostruktur aus alternierenden martensitischen Varianten entstanden ist, was in Abb. 4.4(c) zu erkennen ist. Die Spannungskomponente σ_{11} alterniert bei diesem Prozess um den Wert null (Abb. 4.4(e)). Das Wachstum der Variante $\phi_{\alpha'(v1)}$ bewirkt den Aufbau einer Zugspannung, die durch die Nukleation der Variante $\phi_{\alpha'(v2)}$ abgebaut wird. Zu den Zeitpunkten, an denen der Volumenanteil beider martensitischer Phasen gleich groß ist, ist die Spannungskomponente σ_{11} null.

4.4 Modellierung der Nukleation an Korngrenzen

Zur Stimulation der Martensitnukleation an Korngrenzen wird der Ansatz nach Heo und Chen [30] verwendet. Hierbei wird angenommen, dass die durch die displazive Umwandlung eingebrachten Eigendehnungen an vorhandenen Austenit/Austenit-Korngrenzen schwächer ausfallen als innerhalb eines Kornes, da ein Teil der Eigendehnungen durch die ungeordnete Struktur der Korngrenzen kompensiert wird. Somit ist die elastische Energie des Martensits innerhalb einer Austenit/Austenit-Korngrenze geringer, sodass martensitische Varianten eine geringere Unterkühlung zum Nukleieren benötigen. Um dies zu modellieren, werden die rotierten Eigendehnungen mit der Funktion

$$\Gamma(\boldsymbol{\phi}^{t_0}) = 1 - \varrho 16 \sum_{\alpha < \beta} (\phi_{\alpha}^{t_0})^2 (\phi_{\beta}^{t_0})^2$$

verknüpft, sodass sich die Eigendehnungen, die zu den Berechnungen der Elastizität (Abschnitt 3.4.3) verwendet werden, zu $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^0 = \Gamma(\boldsymbol{\phi}^{t_0})\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{00}$ ergeben. Die Funktion $\Gamma(\boldsymbol{\phi}^{t_0})$ hängt von der initialen austenitischen Mikrostruktur ab, sodass die Information über die Phasenfelder zum Zeitpunkt $t = 0$ während der Simulation zur Verfügung stehen müssen, nachdem die diffuse Grenzfläche zwischen austenitischen Körnern aufgebaut wurde. In den Grenzflächen zwischen den martensitischen Varianten findet keine Reduktion der Eigendehnungen statt. Die Reduktion der Eigendehnungen und damit das Nukleationsverhalten der martensitischen Varianten an Korngrenzen wird mit dem Parameter $0 \leq \varrho \leq 1$ skaliert. Für $\varrho = 0$ findet keine Reduktion statt; $\varrho = 1$ steht für eine volle Reduktion. Dieser Zusammenhang ist in Abb. 4.6 dargestellt.

Simulationsbeispiel

Um das Nukleationsverhalten für unterschiedliche Werte des Parameters ϱ zu veranschaulichen, wird ein Beispiel bestehend aus zwei austenitischen Körnern verwendet. Das zweidimensionale Gebiet ist mit 200×150 Punkten diskretisiert, wobei die Korngrenze in der Mitte des Gebietes verläuft (s. Abb. 4.7(a)). Als Beispielmateriale wird die gleiche Eisen-Nickel-Legierung wie in Abschnitt 4.3 verwendet, wobei die Parameter $\gamma = 0,25 \text{ J/m}^2$ und $A = 0,8$ aufgrund des zweidimensionalen Beispiels abgeändert werden. Zudem gilt $\varepsilon_1 = 0,095$ und $\varepsilon_3 = -0,065$, um eine Volumenzunahme während der Martensitumwand-

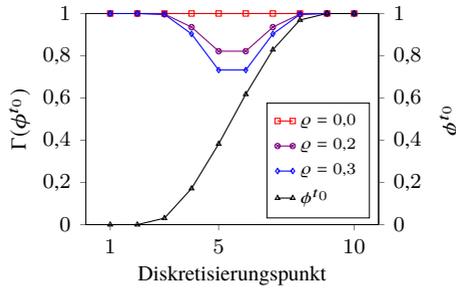


Abbildung 4.6: Reduktion der Eigendehnungen in einer Austenit/Austenit-Grenzfläche. Die Grenzfläche ist mit sechs Diskretisierungspunkten aufgelöst und durch den Verlauf von ϕ^{t_0} erkennbar. Nach Heo und Chen [30] ist die Reduktion der Eigendehnungen in Abhängigkeit vom Parameter ϱ einstellbar.

lung zu berücksichtigen. Die erste Rauschamplitude wird mit einem Faktor von 2,5 verstärkt, um eine erstmalige Nukleation an den Korngrenzen zu unterstützen. Der Zufallsgenerator erzeugt gleichverteilte Werte zwischen minus eins und eins. Nach jedem Rauschen an Austenit/Austenit-Korngrenzen wird gewährleistet, dass die Summe der Phasenfeldwerte der parentalen Phase und der entstehenden martensitischen Varianten über der Zeit konstant bleibt und kein Phasenfeld negative Werte aufweist. In y -Richtung werden periodische Randbedingungen verwendet, und für die weiteren Ränder gelten die gleichen Randbedingungen wie in Abschnitt 4.3. In Abbildung 4.7 sind die Mikrostrukturen für $\varrho = \{0,17; 0,2; 0,25\}$ zum Zeitpunkt $t = 700\Delta t$ dargestellt. In

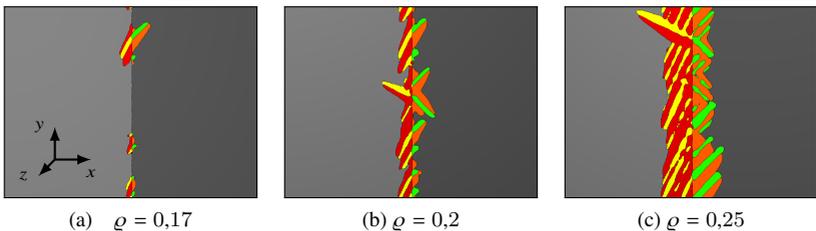


Abbildung 4.7: Mikrostrukturen für unterschiedliche Werte des Parameters ϱ zum Zeitpunkt $t = 700\Delta t$. Austenitische Körner sind in Grautönen und Martensit ist in Farbe dargestellt.

Übereinstimmung mit den Ergebnissen von [30] zeigt sich, dass eine höhere

Reduktion der Eigendehnungen an Korngrenzen mehr Nukleationsstellen an den Austenit/Austenit-Korngrenzen zur Folge hat und somit zu einer schnelleren Martensitumwandlung führt. Dies wird auch anhand von Abb. 4.8 deutlich. Die

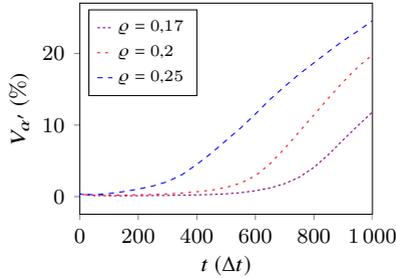


Abbildung 4.8: Zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils für unterschiedliche Werte des Parameters ϱ .

zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils veranschaulicht, dass mit einem größeren Wert von ϱ schneller wachstumsfähige Keime entstehen und die Martensitumwandlung insgesamt daher rascher abläuft.

4.5 Modellierung der Martensitumwandlung unter dem Einfluss einer äußeren Spannung

In der Literatur werden zur Untersuchung der durch äußere Spannungen beeinflussten Martensitumwandlung zwei unterschiedliche Vorgehensweisen vorgestellt. Yeddu et al. [52, 170, 171] verwenden einen Zusatzterm im Energiefunktional, welcher in Abschnitt 3.4.5 im Kontext eines Multiphasenfeldansatzes formuliert ist. Nach diesem Ansatz ergibt sich für die elastische Simulation der durch äußere Spannungen beeinflussten Martensitumwandlung folgendes Energiefunktional:

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{\sigma}^{\text{appl}}) = \int_V W_{\text{intf}}(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}) + \bar{W}_{\text{elast}}(\boldsymbol{\phi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) + \bar{W}_{\text{chem,k}}(\boldsymbol{\phi}) + \bar{W}_{\text{appl}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\sigma}^{\text{appl}}) dV.$$

Einen anderen Ansatz verwenden Malik et al. [32]. In dieser Arbeit wird eine Spannung direkt über eine Randbedingung aufgeprägt, sodass auf den Term \bar{W}_{appl} verzichtet werden kann. Beide Varianten bieten die Möglichkeit, den Effekt einer angelegten Spannung auf die Martensitumwandlung zu untersuchen, wobei sie nicht zwangsläufig die gleichen Ergebnisse liefern. Eine über Randbedingungen einachsige angelegte Spannung führt durch die Querkontraktion zu weiteren Spannungskomponenten, die in der Energiedichte \bar{W}_{appl} bei Verwendung einer einzigen Spannungskomponente nicht berücksichtigt werden. Bei Verwendung eines elastoplastischen Modells ist zudem die zweite Methode ratsam, da eine über Randbedingungen aufgeprägte Spannung die Plastifizierung des Materials beeinflussen kann, was über die Energiedichte \bar{W}_{appl} nicht berücksichtigt wird.

Simulationsbeispiel

Der Einfluss einer äußeren Spannung wird am folgenden Beispiel untersucht. Ein martensitischer Einschluss der zweiten Bain-Variante befindet sich in einem austenitischen Korn, wie in Abb 4.9(a) dargestellt ist. Es gelten die gleichen Materialparameter wie in Abschnitt 4.3, wobei die Grenzflächenenergie wie in Abschnitt 4.4 auf $\gamma = 0,25 \text{ J/m}^2$ gesetzt wird. Es werden periodische Randbedingungen verwendet. Zunächst wird die Simulation ohne äußere Spannung durchgeführt. Nachfolgend wird der Einfluss einer äußeren Spannung mit $\sigma_{11}^{\text{appl}} = \{250; 500\} \text{ MPa}$ untersucht. Alle weiteren Komponenten von σ^{appl} sind null. Ohne angelegte Spannung ist zu erwarten, dass beide martensitischen Varianten zu ungefähr gleichen Teilen entstehen. Bei einer angelegten Spannung ist dies in dem gewählten Simulationsbeispiel nicht mehr der Fall. Gl. (3.19) führt dazu, dass der energetische Zustand der martensitischen Varianten nicht mehr identisch ist. Die angelegte Spannung führt zu einer Bevorzugung der zweiten Variante, da für diese die Energiedichte \bar{W}_{appl} niedriger ist. In Abb 4.9(a) und (b) ist die Mikrostruktur mit und ohne angelegte Spannung nach 400 Zeitschritten dargestellt. Zum einen fällt auf, dass bei Berücksichtigung einer angelegten Spannung die mittlere Lamelle der zweiten Variante im Vergleich zum Fall ohne angelegte Spannung weiter gewachsen ist. Dies liegt daran, dass eine zusätzliche treibende Kraft von $\Delta W_{\text{appl}}^{\gamma\alpha'(v2)} = W_{\text{appl}}^{\alpha'(v2)} - W_{\text{appl}}^{\gamma} = -\varepsilon_{11}\sigma_{11}^{\text{appl}} = -0,4 \times 10^8 \text{ J/m}^3$ die Umwandlung der zweiten Variante begünstigt. Zum anderen fällt auf, dass die Lamellen der ersten Variante, die an die mittlere Lamelle der zweiten

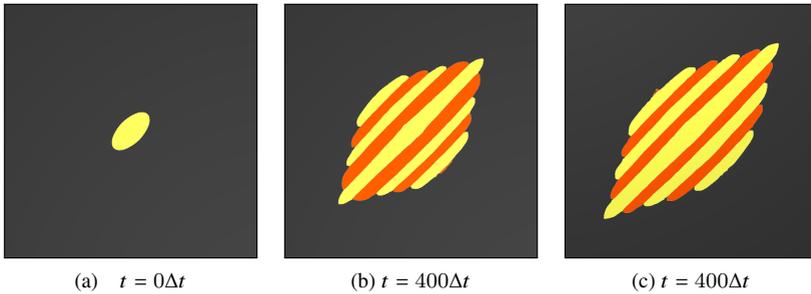


Abbildung 4.9: Mikrostrukturentwicklung in einem Austenitkorn. (a) Initialzustand. (b) Mikrostruktur ohne angelegte Spannung. (c) Mikrostruktur mit einer angelegten Spannung von $\sigma_{11}^{\text{appl}} = 500$ MPa.

Variante grenzen, im Vergleich zum Fall ohne angelegte Spannung schmaler sind. In diesem Fall wirkt $\Delta W_{\text{appl}}^{\gamma\alpha'(v2)} = 0,4 \times 10^8 \text{ J/m}^3$ der Umwandlung der ersten Variante entgegen. Dies lässt sich mit dem zeitlichen Verlauf der Volumenanteile, die in Abbildung 4.10 dargestellt sind, quantifizieren. Ohne angelegte Spannung

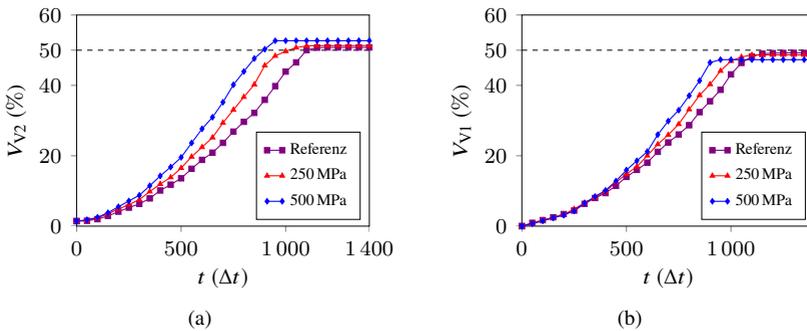


Abbildung 4.10: Zeitlicher Verlauf der martensitischen Volumenanteile unter dem Einfluss einer äußeren Spannung. (a) Variante zwei. (b) Variante eins.

liegt der Anteil von Variante eins und zwei nach vollständiger Umwandlung zum Zeitpunkt $t = 400 \Delta t$ bei etwa 50 %. Je höher die angelegte Spannung ist, desto größer wird das Ungleichgewicht. Für $\sigma_{11}^{\text{appl}} = 500$ MPa liegt der Volumenanteil der zweiten Variante von $V_{\alpha'(v2)} = 53$ % am Ende der Simulation vor. Somit ist ersichtlich, dass eine äußere Spannung zu einer Bevorzugung

oder Behinderung einzelner Martensitvarianten führt. Dieser Zusammenhang wird Magee-Effekt genannt [216].

4.6 Dreidimensionale Martensitumwandlung

Sowohl die Modellformulierung als auch die Implementierung in PACE3D sind für zwei- oder dreidimensionale Simulationen der Martensitumwandlung geeignet. Zudem kann die Anzahl der berücksichtigten martensitischen Varianten flexibel eingestellt werden, sodass auch andere Orientierungsbeziehungen (z. B. nach Kurdjumov-Sachs, unter Berücksichtigung von 24 Varianten wie in [6]) möglich ist. Die dreidimensionale Anwendbarkeit des vorgestellten Modells wird anhand folgenden Beispiels gezeigt. Als Materialsystem wird wie in den vorangegangenen Abschnitten eine Eisen-Nickel-Legierung gewählt. Abweichend von den Parametern in Abschnitt 4.4 werden die aus der Literatur bekannten Eigendehnungen $\varepsilon_1 = 0,1322$ und $\varepsilon_3 = 0,1994$ [33] mit einem Faktor von 0,4 verkleinert, um im Kontext einer rein elastischen Simulation zu hohe elastische treibende Kräfte zu vermeiden [150, 160, 217]. Ein austenitischer Einkristall wird mit $150 \times 150 \times 150$ Zellen diskretisiert, wobei $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 2 \text{ nm}$ gilt. Zu Beginn befindet sich bei $t = 0\Delta t$ in der Mitte des Simulationsgebietes ein Keim der ersten Bain-Variante, wie in Abb. 4.11(a) zu erkennen ist. In allen Raumrichtungen werden periodische Randbedingungen verwendet.

In Abb. 4.11 ist die Mikrostrukturevolution während der Martensitumwandlung dargestellt. Vergleichbar mit den Simulationen in 2D nukleieren weitere martensitische Varianten, um die elastische Energie zu minimieren. Aufgrund der Bain-Dehnungen ist es energetisch günstig, dass alle drei Varianten im Gebiet entstehen. In Abb. 4.11(f) sind drei Stellen hervorgehoben, an denen sich jeweils zwei unterschiedliche Martensitvarianten (v_1 und v_2 , v_2 und v_3 , v_2 und v_3) alternierend bilden. Ein vergleichbares Verhalten wurde z. B. auch in der simulativen Arbeit von Yeddu et al. [20] beschrieben. In Abb. 4.12 ist die zeitliche Entwicklung der Volumenfraktion der drei Bain-Varianten dargestellt. Zu Beginn fällt auf, dass die erste und zweite Variante im Vergleich zur dritten Variante schneller wachsen. Dies ist durch die initiale Form der ersten Variante zu begründen, sodass bereits eine anfängliche Bevorzugung der ersten und zweiten Variante im System vorhanden ist. Nach etwa 3 000 Zeitschritten liegt in etwa eine Gleichverteilung der Varianten vor, und nach über 4 000 Zeitschritten besitzt die dritte Variante den größten Volumenanteil. Da sich eine Variante

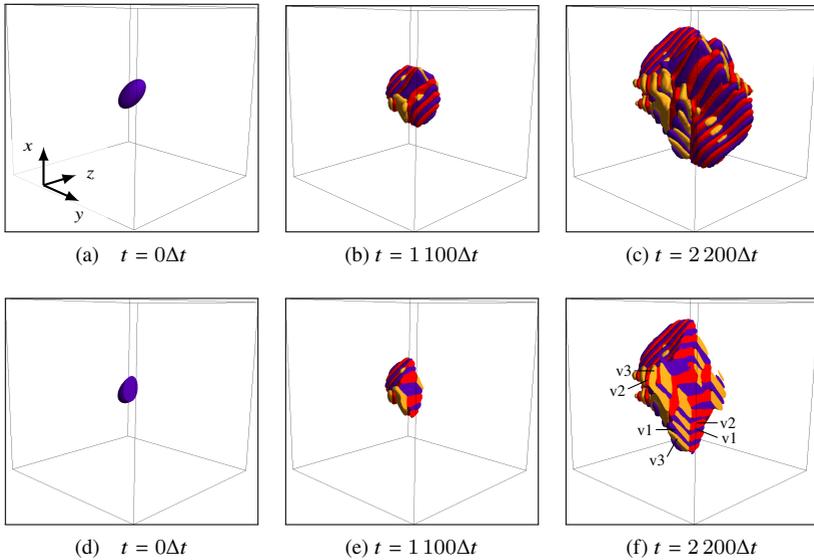


Abbildung 4.11: Dreidimensionale Martensitumwandlung im Einkristall. Martensitische Varianten sind in Farbe dargestellt, Austenit ist transparent. In (d-f) ist das Gebiet für den Ausschnitt $y \leq 75\Delta y$ dargestellt.

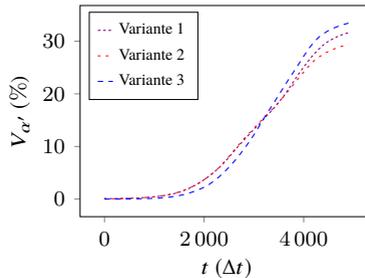


Abbildung 4.12: Zeitlicher Verlauf der Volumenfraktion der drei Bain-Varianten.

nicht in eine andere Variante umwandeln kann und durch das Rauschen eine Zufallskomponente im System vorhanden ist, ist keine perfekte Gleichverteilung zu erwarten. Trotzdem ist festzuhalten, dass sich alle drei Varianten in etwa gleichstark bilden, um die elastische Energiedichte zu minimieren.

4.7 Fazit

Mit den grundlegenden Formulierungen der Phasenfeldevolutionsgleichung und den treibenden Kräften in Kapitel 3 sowie der Beschreibung der Strukturänderungen anhand des Bain'schen Modells und der numerisch effizienten Modellierung der autokatalytischen Nukleation sowie der Nukleation an Korngrenzen steht nun ein neuartiger Modellierungsansatz für die numerische Beschreibung der Martensitumwandlung für Simulationsstudien zu Verfügung. Hervorzuheben sind vor allem folgende Merkmale:

- Das vorgestellte Modelle verwendet eine quantitative Formulierung der elastischen treibenden Kräfte basierend auf den mechanischen Sprungbedingungen. Dies ermöglicht eine präzise Wiedergabe der aus der Theorie für scharfe Grenzflächen abgeleiteten elastischen Konfigurationskraft an Grenzflächen zwischen zwei Phasen und der Vermeidung von Überschussenergien [159, 160].
- Die Eigenschaften aller im System auftretenden Grenzflächen können mithilfe des Multiphasenfeldansatzes separat eingestellt werden. Dies ermöglicht die Berücksichtigung z. B. der Austenit/Austenit-Grenzflächenenergie. Dieser Beitrag ist in Modellen mit Kornformfunktionen (z. B. [26, 30, 33]) zur Unterscheidung von unterschiedlichen Austenitkörnern nicht integriert. Im Hinblick auf eine Kombination mit einem Modell zur Rissausbreitung ist dieser Beitrag jedoch nicht zwangsläufig vernachlässigbar.
- Die Modellierung der autokatalytischen Nukleation martensitischer Varianten erfolgt im Hinblick auf die Anwendbarkeit für großskalige Simulationen und ist in der erarbeiteten Form (Kombination des Multihindernispotentials mit einem Nukleationsterm in Bereichen mit diffusen Grenzflächen) neuartig. Im Gegensatz zu Modellen, die ein Muldenpotential [20, 30, 35] oder ein Multihindernispotential mit Betragsfunktion [18, 34] verwenden, führt der vorgestellte Ansatz dazu, dass sich vermehrt grenzflächenfreie Regionen ausbilden. Dadurch kann Rechenzeit eingespart werden.
- Bei den meisten vorgestellten simulativen Untersuchungen der Martensitumwandlung mit der Phasenfeldmethode wurden *A-priori*-Annahmen der

Nukleationsstellen getroffen bzw. anfängliche Keime gesetzt [20, 22, 24]. Durch die Einbindung des Modells zur Nukleation an Korngrenzen [30] ist dies nun nicht mehr nötig.

Wie an Beispielen gezeigt wurde, ist das vorgestellte Multiphasenfeldmodell zudem in der Lage, die Martensitumwandlung unter dem Einfluss einer äußeren Spannung sowie im Dreidimensionalen unter Berücksichtigung von drei Bain-Varianten darzustellen. Im folgenden Kapitel wird das Modell zur Simulation der Martensitumwandlung beim Abschrecken einer ferritisch-austenitischen Mikrostruktur genutzt und damit die Anwendbarkeit für großskalige Simulationen unter Beweis gestellt.

5 Martensitumwandlung in einer ferritisch-austenitischen Mikrostruktur

In diesem Kapitel wird die elastoplastische Modellierung der martensitischen Umwandlung in Dualphasenstahl beschrieben und damit erzielte Simulationsergebnisse diskutiert. Mit diesem Ansatz können neben Mikrostrukturen auch die dazugehörigen Materialzustände für virtuelle Zugversuche bereitgestellt werden. Teile der in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse sind in den referierten Journal-Artikeln Schoof et al. [210] und Schoof et al. [211] veröffentlicht. Eine Simulation der Martensitumwandlung in Dualphasenstahl mit Auflösung der martensitischen Substruktur ist, abgesehen von den eigenen Arbeiten [210,211], in der Literatur nicht bekannt. Die in diesem Kapitel simulierten Mikrostrukturen können sowohl als Ausgangspunkt für virtuelle Zugversuche als auch für eine simulative Untersuchung der Rissbildung in Dualphasenstahl dienen, da die Rissbildung und -ausbreitung nicht nur an Ferrit/Martensit-Korngrenzen, sondern auch innerhalb von martensitischen Bereichen stattfindet [218], weshalb die Berücksichtigung der martensitischen Substruktur von Bedeutung ist. Zunächst wird die Martensitumwandlung in Dualphasenstahl mit einem elastischen Modell simuliert. Im folgenden Abschnitt werden Möglichkeiten zur Integration plastischer Effekte diskutiert und der nach dem Abschrecken vorliegende Materialzustand analysiert. Danach wird der Einfluss der Größe der martensitischen Latten auf den Plastizitätseintrag in Ferrit untersucht und abschließend ein Fazit gezogen.

5.1 Elastische Simulation der Martensitumwandlung

5.1.1 Modellierung und Simulationsaufbau

Für die Beschreibung der Martensitumwandlung wird das freie Energiefunktional nach Gl. (4.1) verwendet:

$$\mathcal{F}(\phi, \nabla\phi, \bar{\varepsilon}) = \int_V W_{\text{intr}}(\phi, \nabla\phi) + \bar{W}_{\text{elast}}(\phi, \bar{\varepsilon}) + \bar{W}_{\text{chem,k}}(\phi) dV.$$

Erstellung einer EBSD-basierten Dualphasen-Mikrostruktur

Die Grundlage für die Simulation der Martensitumwandlung in einer Dualphasen-Mikrostruktur ist eine Elektronenrückstreubeugungsaufnahme (EBSD-Aufnahme) des Fertigbands eines voestalpine® DP600-Stahls. Die EBSD-Daten wurden von Moritz Wenk am Institut für Angewandte Materialien - Werkstoff- und Biomechanik (IAM-WBM) des Karlsruher Instituts für Technologie bereitgestellt. Dabei kam ein Zeiss Merlin Rasterelektronenmikroskop ausgestattet mit einem Oxford Nordlys EBSD-System zum Einsatz. Die Proben wurden durch mechanisches Polieren und Elektropolieren vorbereitet. Mehrere Poliermittel und Präparationsschritte mussten variiert werden, um glatte Oberflächen und hochwertige EBSD-Daten zu erhalten [95]. Im EBSD-Bild werden Bereiche mit einer Vielzahl an Messfehlern als Martensit identifiziert. Weitere Punkte, die nicht vom EBSD indiziert sind, z. B. an den Korngrenzen, werden entfernt, um ein glattes Gefüge zu erhalten [219]. Rieger und Böhlke [131] nutzten diese resultierende Dualphasen-Mikrostruktur, um das Verfestigungsverhalten von Dualphasenstahl zu untersuchen. Ein quadratischer Ausschnitt mit den Dimensionen $65 \times 65 \mu\text{m}$, der in Abb. 5.1 dargestellt ist, wird basierend auf den Vorarbeiten [95, 131] in die PACE3D-Software importiert. Aufgrund der Vereinfachung auf zwei Dimensionen werden die Orientierungen der Körner nicht importiert, sondern jedem Korn wird eine zufällige Drehung um die z-Achse zugewiesen. Auf Basis der EBSD-Messung können keine Aussagen über die Substruktur der martensitischen Bereiche gemacht werden, da die Auflösung zu klein ist. Es ist jedoch davon auszugehen, dass sich bei der Wärmebehandlung viele Austenitkörner bilden, die sich beim Abschrecken

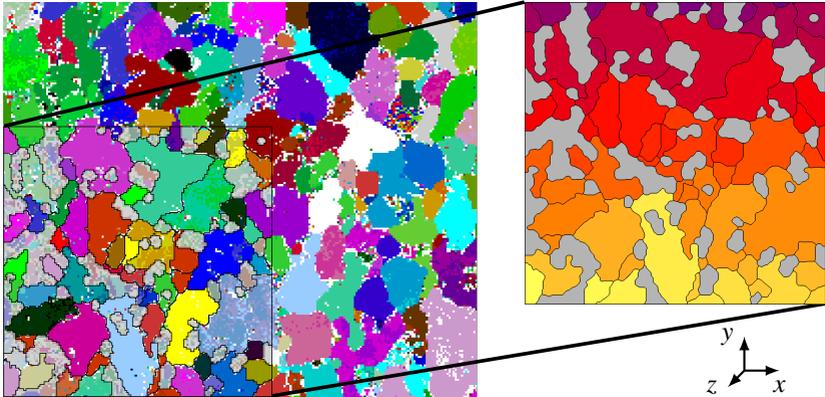


Abbildung 5.1: Konvertierung der EBSD-Messung in PACE3D, basierend auf Vorarbeiten von [95, 131]. In der linken unteren Ecke sind die identifizierten martensitischen Bereiche grau überlagert. Jedes ferritische Korn wird als eigene Phase behandelt und erhält eine separate Zuordnung im Phasenfeld-Tupel ϕ . Martensitische Bereiche sind grau dargestellt.

des Materials in Martensit verwandeln. Zhu und Militzer [100] untersuchten die Mikrostrukturentwicklung während der Wärmebehandlung eines Dualphasenstahls mit der Phasenfeldmethode. Sie zeigten die Keimbildung und das Wachstum mehrerer Austenitkörner in Abhängigkeit von unterschiedlichen Wärmebehandlungsrouten. Daher werden die zuvor identifizierten martensitischen Bereiche in eine Vielzahl von Austenitkörnern aufgeteilt, und es wird jedem Korn eine separate Phasenfeldvariable zugeordnet. Um die anfängliche Ferrit/Austenit-Mikrostruktur zu erhalten, werden 180 Austenitkeime mit einem Radius von einer Zelle zufällig an Ferrit/Martensit-Grenzflächen platziert. Dabei wird ein Mindestabstand zum nächsten Austenitkeim gewährleistet. Mithilfe einer Kornwachstumssimulation wird den Austenitkörnern erlaubt, auf Kosten der martensitischen Bereiche zu wachsen. Dies führt zu einer Ferrit/Austenit-Mikrostruktur, die für die folgenden Simulationen verwendet wird und in Abb. 5.2 dargestellt ist. Zudem wird jedem Austenitkorn eine zufällige Rotation des Kristallgitters um die z-Achse zugeordnet.

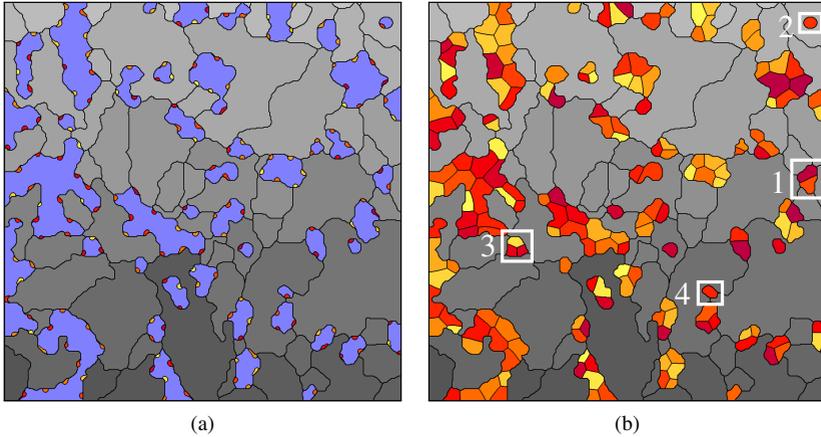


Abbildung 5.2: Erstellung der Ferrit/Austenit-Mikrostruktur. (a) Die als martensitisch identifizierten Bereiche werden mit Austenitkörnern gefüllt. (b) Resultierende Ferrit/Austenit-Mikrostruktur.

Physikalische und numerische Parameter

Der untersuchte voestalpine® DP600-Stahl hat eine durchschnittliche Kohlenstoffkonzentration von $C_{DP}=0,094$ Ma.-% und, typisch für kommerziellen Dualphasenstahl, weitere Legierungselemente [131, 220], die in Tabelle 5.1 aufgeführt sind. Die Kohlenstoffkonzentration in Martensit $C_{\alpha'}$ variiert in

Tabelle 5.1: Chemische Zusammensetzung des voestalpine® Dualphasenstahls in Masseprozent [131]. Der Rest ist Eisen. Die Kohlenstoffkonzentration in Martensit $C_{\alpha'}$ ist gemäß der Mischungsregel berechnet.

C_{DP}	P	Mn	S	Cr	Cu	Mo	Si	Ni	C_{α}	$C_{\alpha'}$
0,094	0,01	1,5	0,0054	0,77	0,061	0,003	0,1	0,024	0,015 [221]	0,341

Abhängigkeit vom Austenitanteil, der sich während der Wärmebehandlung bildet, und liegt über der durchschnittlichen Konzentration. Mithilfe der Mischungsregel [130, 221] kann eine Abschätzung gemacht werden

$$C_{\alpha'} = \frac{C_{DP} - C_{\alpha}V_{\alpha}}{1 - V_{\alpha}}, \tag{5.1}$$

wobei V_α die Volumenfraktion und C_α die Kohlenstoffkonzentration des Ferrits sind. Das Simulationsgebiet in Abb. 5.2(b) besteht aus $V_\alpha = 0,758$ Ferrit. Unter Verwendung der Kohlenstoff-Löslichkeitsgrenze von $C_\alpha = 0,015$ in Ferrit [221], ergibt sich gemäß Gl. (5.1) eine Kohlenstoffkonzentration von $C_{\alpha'} = 0,341$ Ma.-% in Martensit. Daher basiert die Bestimmung der Parameter für die Eigendehnungen und die chemische treibende Kraft auf einem Kohlenstoffgehalt von $C_{\alpha'} = 0,341$ Ma.-%.

Für Austenit, Martensit und Ferrit wird ein konstanter Elastizitätsmodul von 200 GP und eine Poissonzahl von 0,3 verwendet. Die Eigendehnungen werden basierend auf experimentell gemessenen Gitterkonstanten für Fe-C-Legierungen [222] berechnet und ergeben $\varepsilon_1 = 0,131$ und $\varepsilon_3 = -0,188$. Daraus wird die Volumenausdehnung während der Martensitumwandlung berechnet, die sich zu $[(1 + \varepsilon_1)^2 \times (1 + \varepsilon_3) - 1] \times 100\% = 3,9\%$ ergibt und konsistent zu experimentell ermittelten Werten ist [129]. Um eine vergleichbare Volumenausdehnung im Zweidimensionalen zu erhalten, werden die Eigendehnungen auf $\varepsilon_1 = 0,131$ und $\varepsilon_3 = -0,082$ gesetzt. Dies ist notwendig, da ε_{33}^0 im 2D-Fall auf null gesetzt wird. Eine vergleichbare Anpassung der Eigendehnung in 2D zur Erhaltung der effektiven Volumenausdehnung fand auch in [26] statt. Unter Verwendung der Software Thermo-Calc und der TCFE7-Datenbank [223] wird die chemische treibende Kraft bei einer zeitlich unveränderten Konzentrationsverteilung für die Legierung aus Tabelle 5.1 und für $C_{\alpha'} = 0,341$ Ma.-% bestimmt. Ein Abschrecken des Materials auf Raumtemperatur (20 °C) ergibt eine chemische treibende Kraft von $\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha'} = -5,89 \times 10^8 \text{ J/m}^3$ [210]. Für alle auftretenden Grenzflächenkombinationen wird eine Grenzflächenenergie von $\gamma_{\alpha\beta} = 0,01 \text{ J/m}^2$ verwendet [13]. Das vorgestellte Multiphasenfeldmodell ist prinzipiell in der Lage, unterschiedliche Grenzflächenenergien für unterschiedliche Grenzflächentypen (z. B. Austenit/Martensit oder Martensit/Martensit-Grenzflächen) anzuwenden, wie es auch physikalisch der Fall ist [224]. Eine konstante Annahme ist jedoch im Rahmen dieser Arbeit vertretbar, da der Fokus an einer anderen Stelle liegt. Das zweidimensionale Gebiet wird mit 4000×4000 Zellen diskretisiert, wobei die räumliche Diskretisierung bei $\Delta x = \Delta y = 16,25 \text{ nm}$ liegt. Der Parameter ϵ zum Einstellen der diffusen Grenzflächenbreite wird auf $\epsilon = 2,5\Delta x$ gesetzt, womit die Ausdehnung der Grenzfläche in Normalenrichtung ungefähr sechs Zellen beträgt. Da keine zuverlässigen Daten für die Kinetik der martensitischen Umwandlungsfront verfügbar sind, wird die dimensionslose Zeitschrittweite auf $\Delta t = 1$ gesetzt und die Mobilität M zwischen den martensitischen Varianten und ihrer parentalen

austenitischen Phase so angepasst, dass die Simulation numerisch stabil verläuft. Alle anderen Mobilitäten, z. B. zwischen Ferritkörnern, werden auf null gesetzt. Bei der vorhandenen Kohlenstoffkonzentration in Austenit bildet sich Lattenmartensit [225]. Die Lattendicke variiert von weniger als $0,1 \mu\text{m}$ bis zu mehreren Mikrometern, wobei zwischen $0,1$ und $0,2 \mu\text{m}$ eine Häufung der Lattendicke festgestellt wurde [226]. Unter Verwendung der Transmissionselektronenmikroskopie fanden Ghassemi-Armaki et al. [128] Lattenmartensit in einem DP980-Stahl mit einer Lattengröße von 30 bis 100 nm. Zudem berichtete Granbom [227] über das Vorkommen von Lattenmartensit in Dualphasenstählen für verschiedene Kohlenstoffkonzentrationen bis zu $C_{\alpha'} \approx 0,5 \text{ Ma.}\%$.

Bei der Modellierung der Martensitumwandlung ist das Zusammenspiel des gewählten Gitterabstands, der chemischen treibenden Kraft und der Grenzflächenenergiedichte für die Nukleationsbarriere entscheidend (s. Gl. (3.38)). Für den Fall einer verschwindend kleinen Nukleationsbarriere kann keine ausreichende Separation der Martensitvarianten erreicht werden. Daher besteht die Herausforderung darin, den Verlauf der Energiedichte, bestehend aus chemischen und Grenzflächen aufbauenden Beiträgen (Gl. (3.38)), so zu gestalten, dass eine ausreichend große Nukleationsbarriere vorhanden ist und gleichzeitig die Physik des Problems dabei nicht verfälscht wird. Dies ist mit der in Abschnitt 3.7 vorgestellten Methode möglich. Der Parameter γ^n wird in Kombination mit der Rauschamplitude A so kalibriert, dass die Nukleationsbarriere angehoben und in der Simulation eine Lattenbreite von ca. $0,1 - 0,2 \mu\text{m}$ erreicht wird, was zu $\gamma^n = 4,0 \text{ J/m}^3$ und $A = 0,8$ führt. Damit ergibt sich der unter Berücksichtigung der chemischen treibenden Kraft in Kapitel 3.7 eingeführte Kontrollparameter zu

$$\mathcal{K} = \frac{|\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha'}|}{\frac{\gamma_{\alpha\beta} + \gamma^n}{\varepsilon}} = 6.$$

Da die elastischen treibenden Kräfte mehrheitlich der Umwandlung entgegenwirken, fällt die effektive treibende Kraft ($\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha'} + \Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha'}$) geringer aus, sodass eine ausreichende Stabilisierung der Grenzfläche gewährleistet wird. Ohne Verwendung von $\Delta W_{\text{acurv}}^{\alpha\beta}$ ergäbe sich der Kontrollparameter zu $\mathcal{K} = 2393 \gg 1$, was zu einer ungenügend ausgeprägten Grenzfläche und zu verfälschten Ergebnissen führen würde. Um Drittphasen zu vermeiden und um die Ausbildung stabiler, grenzflächenfreier Bereiche zu unterstützen, wird der $\gamma_{\alpha\beta\delta}$ -Parameter auf $\gamma_{\alpha\beta\delta} = 10 \times (\gamma_{\alpha\beta} + \gamma^n)$ gesetzt. Das Rauschen ζ nach Gl. (4.8) wird in

jedem fünfzigsten Zeitschritt mit einer gleichverteilten Wahrscheinlichkeit angewendet. Dies führt zu einer Fluktuation der Phasenfeldwerte von bis zu 0,2. Um eine erstmalige Keimbildung zu ermöglichen, wird im ersten Simulationsschritt eine zweifach höhere Amplitude verwendet. Darüber hinaus wird der Parameter ρ zur Reduktion der Eigendehnung an Austenit/Austenit bzw. Ferrit/Austenit-Phasengrenzen auf $\rho = 0,05$ gesetzt.

Für die Phasenfelder wird eine extrapolierende Randbedingung verwendet. Die Verschiebungen werden in orthogonaler Richtung an den Rändern auf null gesetzt. Vor Beginn der Simulation unter Verwendung der Evolutionsgleichung basierend auf Gl. (3.5) wird eine diffuse Grenzfläche zwischen allen Körnern aufgebaut.

Folgende Simulationen werden zur Untersuchung der rein elastisch modellierten Martensitumwandlung in Dualphasenstahl durchgeführt:

- Phasenfeldsimulation der Martensitumwandlung *mit* Berücksichtigung der Volumenausdehnung. Dazu werden die Eigendehnungen auf $\varepsilon_1 = 0,131$ und $\varepsilon_3 = -0,082$ gesetzt.
- Phasenfeldsimulation der Martensitumwandlung *ohne* Berücksichtigung der Volumenausdehnung. Dazu werden die Eigendehnungen auf $\varepsilon_1 = 0,107$ und $\varepsilon_3 = -0,107$ gesetzt.
- Simulation des elastischen Gleichgewichts unter der Annahme, dass sich alle austenitischen Bereiche vollständig und isotrop zu Martensit umwandeln. Dazu werden die Eigendehnungen auf $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 0,019$ gesetzt. Dies entspricht der gleichen Volumenausdehnung wie in der Phasenfeldsimulation mit Berücksichtigung der Volumenausdehnung.

5.1.2 Ergebnisse und Diskussion

Sofern nicht anders angegeben, werden die Ergebnisse der Simulation mit Berücksichtigung der Volumenausdehnung gezeigt und diskutiert.

Nukleationsmechanismus

Die zeitliche Entwicklung der Martensitvarianten in einem Ausschnitt, der in Abb. 5.2(b) durch ein weißes Quadrat markierten und mit „1“ gekennzeichnet

ist, ist in Abb. 5.3 dargestellt. Der Ausschnitt besteht aus zwei Austenitkörnern,

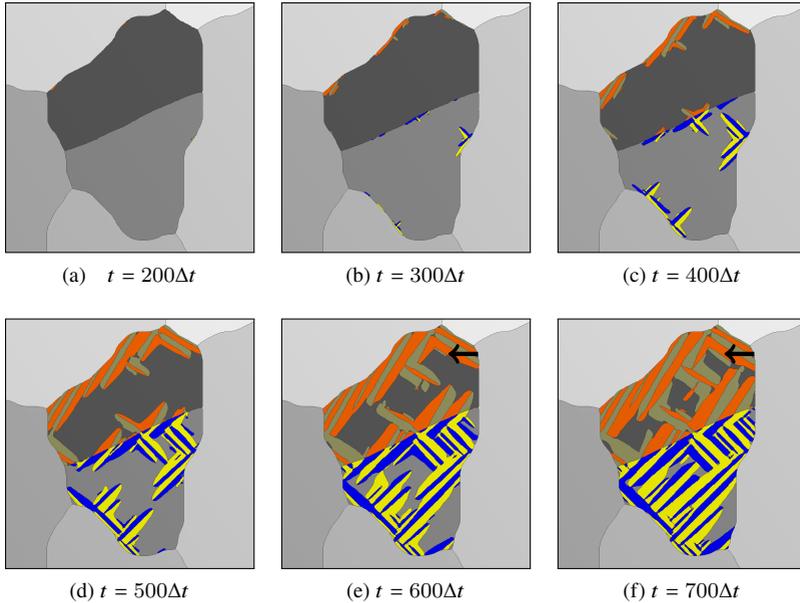


Abbildung 5.3: Zeitliche Entwicklung der martensitischen Varianten innerhalb von zwei austenitischen Körnern, die von einer ferritischen Matrix umgeben sind. Der gezeigte Ausschnitt ist in Abb. 5.2(b) mit „1“ markiert.

die von einer ferritischen Matrix umgeben sind. Zunächst ist der Simulationsausschnitt spannungsfrei und es sind keine Martensitvarianten vorhanden. Ab $t = 0$ wird das Rauschen in der Phasenfeldgleichung bei jedem fünfzigsten Zeitschritt angewendet, was an allen vorhandenen Korn- oder Phasengrenzen zu kleinen Schwankungen der Ordnungsparameter führt. Bei $t = 200\Delta t$, dargestellt in Abb. 5.3(b), sind die ersten Nuklei beobachtbar. Im verwendeten Modellierungsansatz sind Korngrenzen eine bevorzugte Nukleationsstelle. Dies liegt zum einen an der Reduktion der Eigendehnung in diesem Bereich, zum anderen wird die Grenzflächenenergie zwischen Austenit/Austenit (AA) und Ferrit/Austenit (FA) berücksichtigt. Die Reduktion der Eigendehnung führt zu einer geringen Formänderungsenergie dichte der Martensitvarianten. Zudem ist weniger Grenzflächenenergie als bei einer homogenen Keimbildung nötig, um einen überkritischen Keim zu bilden. In Abb. 5.3 ist eine heterogene Nukleation

sowohl an Austenit/Austenit- als auch an Ferrit/Austenit-Korngrenzen klar ersichtlich. Im weiteren Verlauf ist zu beobachten, dass die jeweils andere Variante schnell entsteht, nachdem eine Variante nukleiert ist, wodurch die Formänderungsenergiegedichte reduziert wird. In dieser Konstellation wachsen zwei Varianten in das Korninnere. Dieses Verhalten ist mit den Ergebnissen in [30] vergleichbar. Allerdings ist nicht nur eine heterogene Keimbildung an Austenit/Austenit-Korngrenzen zu beobachten. In Abb. 5.3(e) und (f) ist eine autokatalytische Nukleation einer Variante unmittelbar an einer anderen Variante zu beobachten. Eine entsprechende Stelle ist mit schwarzen Pfeilen markiert. Beide Mechanismen führen zu einer Mikrostruktur aus Lattenmartensit.

Experimentell wird während der Keimbildungsstufe beobachtet, dass Korngrenzen oder freie Oberflächen die Variantenauswahl beeinflussen [27, 212, 228]. Ueda et al. [27, 212] fanden heraus, dass in einem Fe-Ni-Bikristall die Variantenauswahl so beeinflusst wird, dass diejenigen Varianten, deren Habitusebenen nahezu parallel oder senkrecht zur Korngrenze liegen, bevorzugt nukleieren. Die Habitusebene ist die makroskopisch gemessene Grenzfläche zwischen Austenit und Martensit und liegt in Lattenmartensit in der Nähe von $\{1\ 1\ 1\}_\gamma$ [229]. Im vorgestellten Simulationsansatz mit zwei Bain-Varianten in 2D bedeutet dies jedoch im Gegenzug, dass die Keimbildung zunächst an Stellen erfolgen sollte, an denen die Korngrenze nahezu parallel oder senkrecht zur Habitusebene der beiden möglichen Varianten liegt. Die nachfolgend vorgestellten Ergebnisse machen deutlich, dass dies in den Simulationen der Fall ist. Durch die Reduktion auf 2D sind in Abhängigkeit von der Orientierung der parentalen Phase vier Habitusebenen, die jeweils um 90° gedreht sind, möglich. In Abb. 5.3(c) ist deutlich zu erkennen, dass die Keimbildung der martensitischen Varianten nicht an allen austenitischen Grenzen gleichverteilt stattfindet. Das untere Korn ist um fast 180° um die z-Achse gedreht, sodass die Varianten in einem Winkel von 45° zur Horizontalen wachsen, was der Richtung der Habitusebenen entspricht. An den Korngrenzen, die parallel oder senkrecht zur Habitusebene stehen, findet Keimbildung statt, während beispielsweise an der unteren rechten Korngrenze keine Kerne gebildet werden, die 45° zur Habitusebene liegt. Dieses Verhalten wird bei Betrachtung eines kreisförmigen austenitischen Kornes, das in Abb. 5.4 dargestellt ist, noch deutlicher. Dieses Korn ist um 83° um die z-Achse gedreht, sodass die Habitusebene wieder etwa 45° zur Horizontalen liegt. Nukleation findet an allen vier energetisch günstigen Stellen statt. Von dort aus wachsen die martensitischen Varianten sowohl parallel als auch senkrecht zur Ferrit/Austenit-Korngrenze. Durch den autokatalytischen Nukleationsmechanismus breitet sich

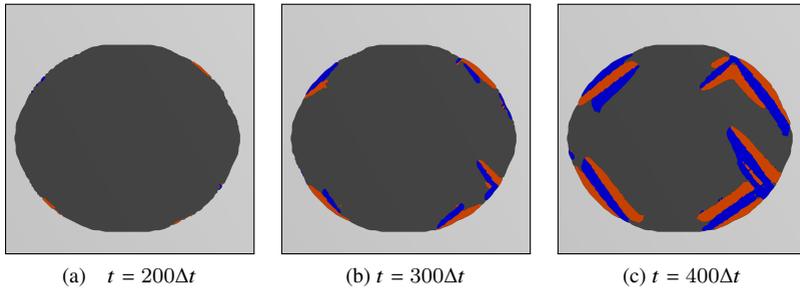


Abbildung 5.4: Nukleation von martensitischen Varianten innerhalb eines kreisförmigen austenitischen Korn. Die Keimbildung erfolgt vorzugsweise an den Stellen der Austenit/Ferrit-Korngrenze, die parallel oder senkrecht zur Habitusebene der Varianten liegen. Der Ausschnitt ist in Abb. 5.2(b) mit „2“ markiert.

der Martensit weiter in das Korninnere aus.

Um dieses Verhalten zu quantifizieren, wird analysiert, wie viel Austenit, das sich in direktem Kontakt mit einem anderen Austenitkorn oder einem Ferritkorn befindet, in Martensit umgewandelt wird. Der so analysierte prozentuale Anteil des umgewandelten Austenit ist in Abb. 5.5 über der Zeit aufgetragen. Zu Beginn

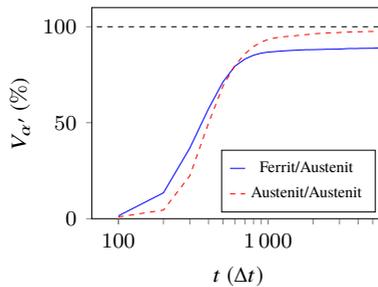


Abbildung 5.5: Zeitlicher Verlauf der prozentualen Martensitumwandlung an Ferrit/Austenit- und Austenit/Austenit-Korngrenzen.

der Simulation wandelt sich Austenit an Ferrit/Austenit-Korngrenzen schneller um als Austenit an Austenit/Austenit-Korngrenzen. Dies deutet auf eine höhere Nukleationsrate an Ferrit/Austenit-Korngrenzen hin. Bei $t = 600\Delta t$ wird ein ähnlicher Wert von 80 % an beiden Korngrenztypen erreicht. Bei $t = 6000\Delta t$ ist die Umwandlung von Austenit an Austenit/Austenit-Korngrenzen fast vollständige.

dig (98 %) abgeschlossen, während 11 % des Restaustenits an Ferrit/Austenit-Korngrenzen auftreten. Der Grund für die höhere Keimdichte an Ferrit/Austenit-Korngrenzen ist die im Vergleich zu Austenit/Austenit-Korngrenzen höhere Wahrscheinlichkeit für das Vorhandensein einer Korngrenze, die parallel oder senkrecht zur Habitusebene der Varianten liegt. In Abb. 5.3 bilden die beiden Austenitkörner beispielsweise eine gemeinsame, fast planare Korngrenze, die jedoch nur in einem sehr spezifischen Orientierungsverhältnis zur Habitusebene der Varianten steht. Im Vergleich dazu besteht aufgrund der unterschiedlich gekrümmten Korngrenzen der ferritischen Körner eine hohe Wahrscheinlichkeit für die Existenz einer Ferrit/Austenit-Korngrenze, die parallel oder senkrecht zur Habitusebene der Varianten liegt.

Um den Mechanismus für die Bildung des Restaustenits an Ferrit/Austenit-Korngrenzen zu untersuchen, wird ein weiterer Ausschnitt betrachtet, für den die Mikrostruktur und die von Mises-Spannung in Abb. 5.6 dargestellt ist. Gebiete

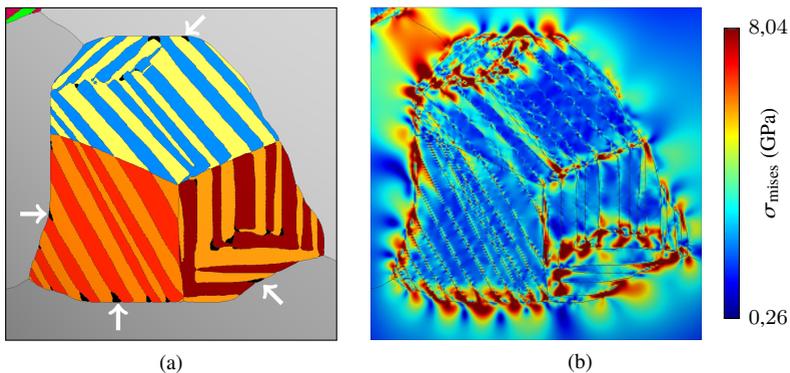


Abbildung 5.6: Mikrostruktur (a) und von Mises-Spannung (b) eines Ausschnitts für den Zeitpunkt $t = 6000\Delta t$. Restaustenit ist in (a) in Schwarz eingefärbt. Der gezeigte Ausschnitt ist in Abb. 5.2(b) mit „3“ markiert.

mit Restaustenit an Ferrit/Austenit-Korngrenzen sind in Abb. 5.6(a) mit weißen Pfeilen markiert. Restaustenit tritt besonders dort auf, wo Latten in einem Winkel von 45° oder höher auf Ferrit/Austenit-Korngrenzen treffen. Anhand der in Abb. 5.6(b) dargestellten von Mises-Spannungsverteilung ist zu erkennen, dass in diesen Regionen hohe Spannungen auftreten. Da die Phasenumwandlung an diesen Stellen nahezu zum Erliegen gekommen ist und die Grenzflächenenergie nur in der Keimbildungsstufe einen entscheidenden Einfluss hat, ist ersichtlich,

dass sich die chemische und die elastische treibende Kraft gegenseitig aufheben. Dies bedeutet, dass sich Martensit und Austenit nahe am energetischen Gleichgewicht befinden. Da die chemische treibende Kraft eine konstante Größe ist, die die martensitische Phasenumwandlung vorantreibt, ist klar, dass hohe elastische treibende Kräfte vorhanden sind, die ein weiteres Wachstum des Martensits verhindern. Innerhalb der Austenitkörner können die durch die Umwandlung ins System eingebrachten Spannungen, die durch die Scheranteile der Eigendehnungen entstehen, durch eine vorteilhafte Anordnung beider Varianten abgebaut werden. Dieses Verhalten ist auch über die Austenit/Austenit-Korngrenze hinweg zu beobachten. Die Martensitlatten zweier benachbarter Körner ordnen sich bündig zueinander an, um die kombinierte Grenzflächen- und Formänderungsenergie zu minimieren. An Ferrit/Austenit-Korngrenzen ist dies nicht möglich, da im Ferrit keine Umwandlung möglich ist. In Folge dessen ergibt sich im Vergleich zu Austenit/Austenit-Korngrenzen ein höherer Anteil an Restaustenit an Ferrit/Austenit-Korngrenzen.

Von Mises-Spannungsverteilung

In Abb. 5.7 ist die Mikrostruktur zum Zeitpunkt $t = 6000\Delta t$ für die Simulation mit Berücksichtigung der Volumenausdehnung und in Abb. 5.8 ohne Berücksichtigung der Volumenausdehnung dargestellt. In den ferritischen Regionen findet keine Phasenumwandlung statt, während sich die austenitischen Körner größtenteils in Martensit verwandeln. Es entsteht ein Gefüge aus Lattenmartensit. Der Volumenanteil des Martensits in anfangs austenitischen Bereichen ist in Abb. 5.9 dargestellt. Innerhalb einer kurzen Inkubationszeit bilden sich an bestehenden Korngrenzen wachstumsfähige Keime, die von der Korngrenze in das Innere des Kornes hineinwachsen. Im Fall ohne Berücksichtigung der Volumenausdehnung findet eine vollständige Umwandlung statt. Wird die Volumenausdehnung berücksichtigt, verlangsamt sich die Umwandlungsgeschwindigkeit mit der Zeit und 1,8% Restaustenit bleibt zum Zeitpunkt $t = 6000\Delta t$ bestehen. Dies resultiert aus der Volumenausdehnung, die im Falle einer spannungs- und dehnungsfreien Einspannung immer gegen die Martensitumwandlung wirkt. Es ist somit nicht mehr energetisch günstig, dass bestehende Martensitlatten weiter wachsen oder dass neue Keime nukleieren. Neben dem oben genannten Restaustenit an Ferrit/Austenit-Korngrenzen lassen sich zwei weitere Stellen identifizieren, an denen die Martensitumwandlung nicht vollständig abgeschlossen ist. In Abb. 5.7 sind drei Stellen

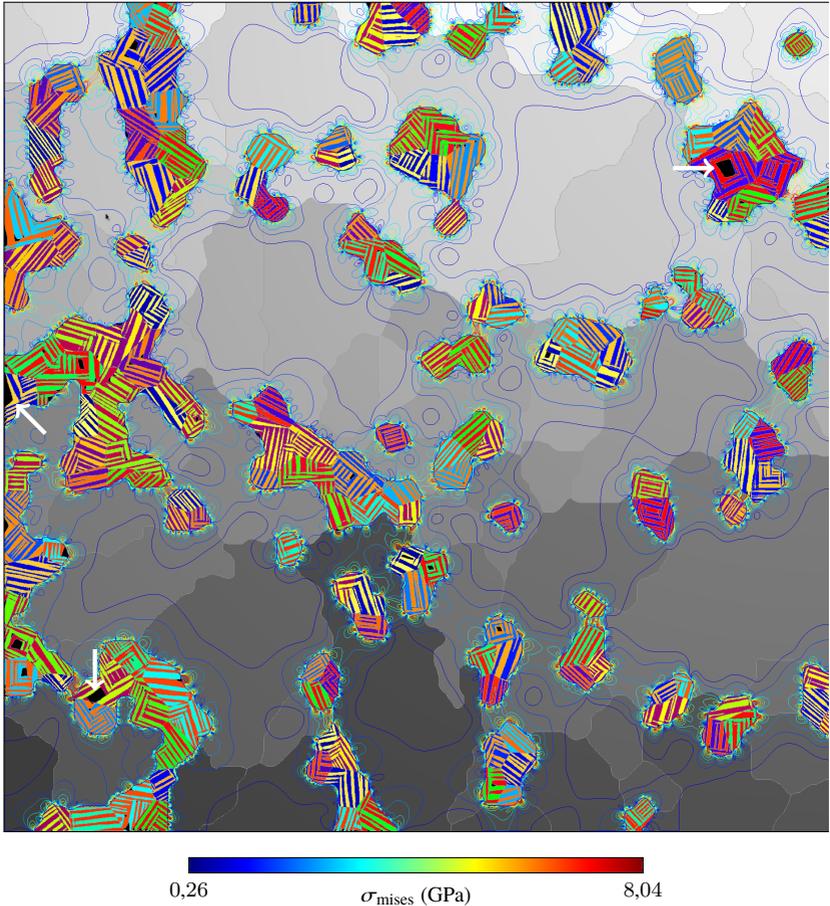


Abbildung 5.7: Ferritisch-martensitische Mikrostruktur zum Zeitpunkt $t = 6000\Delta t$ mit Berücksichtigung der Volumenausdehnung. Jede Martensitvariante ist in einer anderen Farbe dargestellt. Ferritische Körner sind grau eingefärbt. Isolinien der von Mises-Spannung sind in den ferritischen Bereichen eingezeichnet. Die dazugehörige Farblegende befindet sich unter dem Bild. Pfeile zeigen Bereiche mit Restaustenit an, der schwarz dargestellt ist.

exemplarisch mit weißen Pfeilen markiert. Auf der einen Seite ist zu erkennen, dass Restaustenit in der Nähe der Simulationsränder auftritt. Dies ist damit zu erklären, dass die gewählte Randbedingung eine Spannungsrelaxation im

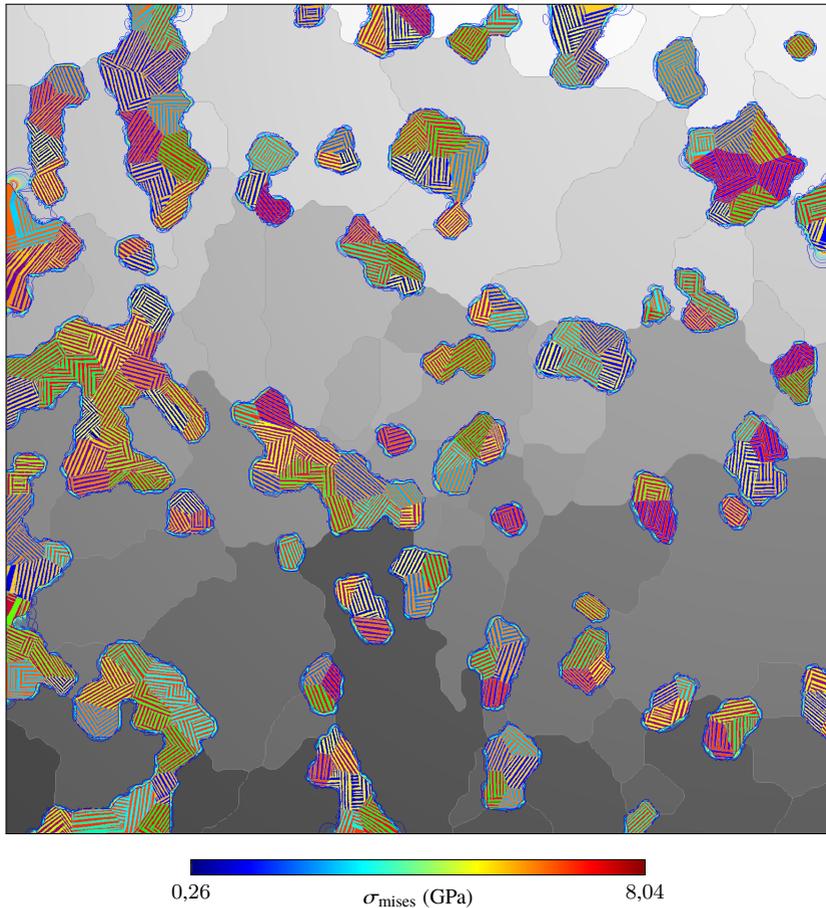


Abbildung 5.8: Ferritisch-martensitische Mikrostruktur zum Zeitpunkt $t = 6\,000\Delta t$ ohne Berücksichtigung der Volumenausdehnung.

Vergleich zum Inneren des Simulationsgebiets erschwert, was zu höheren Spannungen führt. Auf der anderen Seite findet sich Restaustenit im Inneren von anfangs austenitischen Körnern. Diese Bereiche befinden sich vor allem in Bereichen mit viel umgebendem Martensit. Im Gegensatz dazu wandeln sich kleine austenitische Regionen, die einen ausreichenden Abstand zu den

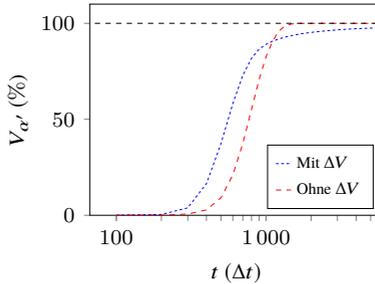


Abbildung 5.9: Zeitlicher Verlauf des martensitischen Volumenanteils $V_{\alpha'}$ in Austenit mit und ohne Berücksichtigung der Volumenausdehnung ΔV .

nächsten austenitischen bzw. martensitischen Inseln haben, vollständig um. Dieses Ergebnis lässt sich wiederum mit der Spannungsverteilung erklären. Die von Mises-Spannungsverteilung für die drei in diesem Abschnitt diskutierten Simulationen ist in Abb. 5.10 dargestellt. Daraus lassen sich folgende Aussagen

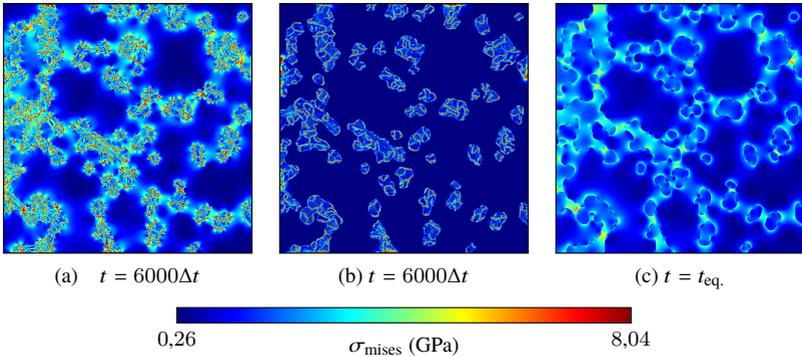


Abbildung 5.10: Von Mises-Spannungsverteilung. (a) Simulation der Martensitumwandlung mit Berücksichtigung der Volumenausdehnung. (b) Simulation der Martensitumwandlung ohne Berücksichtigung der Volumenausdehnung. (c) Elastisches Gleichgewicht für ein System ohne explizite Berücksichtigung der Phasenumwandlung und isotropen Eigendehnungen von $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 0,019$. Die von Mises-Spannung in (a) und (b) wird mit dem gleichen Minimal- und Maximalwert skaliert wie in (c).

ableiten:

- Die Phasenfeldsimulation der Martensitumwandlung mit Volumenausdehnung (Abb. 5.10(a)) und die Simulation des elastischen Gleichgewichts ohne explizite Berechnung der Phasenumwandlung, und unter Annahme isotroper Eigendehnungen (Abb. 5.10(c)), zeigen eine Interaktion in der Spannungsverteilung zwischen benachbarten martensitischen Inseln. Dieser Effekt wird auch bei elastoplastischen Simulationen mit der Annahme von isotropen Eigendehnungen beobachtet [130, 131]. Somit beeinflusst die Umgebung, ob die Martensitumwandlung in einem Austenitkorn vollständig abläuft oder ob Restaustenit vorhanden ist.
- Der Spannungseintrag in die ferritische Matrix ist bei der Simulation mit Berücksichtigung der Volumenausdehnung (Abb. 5.10(a)) etwas höher als bei der Annahme einer isotropen Eigendehnung (Abb. 5.10(c)). Die Ursache für diese Beobachtung ist der Umstand, dass sich die Scheranteile der Eigendehnungen, die im Falle der isotropen Annahme nicht berücksichtigt werden, nicht komplett durch eine günstige Anordnung der Martensitlamellen aufheben. Dies wird bei der Betrachtung von Abb. 5.10(b) deutlich. Obwohl keine Volumenausdehnung berücksichtigt wird und sich die Scherspannungen der beiden Martensitvarianten pro Korn gegenseitig aufheben, sind Spannungen an Austenit/Austenit-Korngrenzen oder an Stellen, an denen sich Wachstumsfronten innerhalb eines Kornes treffen, zu beobachten. Dieser Effekt führt zu einer weiteren Erhöhung der Spannungen, die durch die Volumenzunahmen bei der Martensitumwandlung eingebracht werden.
- Ein weiterer Effekt ergibt sich aus der oben genannten Beobachtung: Die von Mises-Spannung ist im Fall der Phasenfeldsimulation mit Berücksichtigung der Volumenausdehnung deutlich heterogener als im Falle der isotropen Annahmen. Dies gilt auch für ferritische Regionen.
- Die Bereiche mit der höchsten von Mises-Spannung in den ferritischen Bereichen liegen zwischen zwei oder mehr martensitischen Inseln.

5.2 Elastoplastische Simulation der Martensitumwandlung

5.2.1 Modellierung und Simulationsaufbau

Im nächsten Schritt wird Plastizität bei der Modellierung der Martensitumwandlung in Dualphasenstahl berücksichtigt. Dazu kommt das in Abschnitt 3.4.4 beschriebene Plastizitätsmodell zum Einsatz. Das freie Energiefunktional kann bei Berücksichtigung der plastischen Energiedichte \bar{W}_{pl} zu

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}) = \int_V W_{\text{intf}}(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}) + \bar{W}_{\text{elast}}(\boldsymbol{\phi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) + \bar{W}_{\text{chem}}(\boldsymbol{\phi}) + \bar{W}_{\text{pl}}(\boldsymbol{\phi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}) dV,$$

erweitert werden, wobei auch elastoplastische Simulationen ohne \bar{W}_{pl} möglich sind.

Als Grundlage dient die gleiche Mikrostruktur wie im vorangegangenen Abschnitt. Die numerischen und physikalischen Parameter für den elastischen Teil der Simulation orientieren sich am vorangegangenen Kapitel und sind in Tabelle 5.2 aufgelistet. Das plastische Fließverhalten der drei Phasenbestandteile wird als Funktion der akkumulierten plastischen Dehnung mit der nichtlinearen Verfestigung nach Gl. (3.16) berechnet. Die Materialkonstanten werden mit Werten aus der Literatur gefittet. Die Fließfunktion von Austenit kann mithilfe der Ludwik-Gleichung $\sigma_y^{\gamma} = a_1 + a_2(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}})^{0,4}$ und den Konstanten $a_1 = 650$ MPa und $a_2 = 1\,200$ MPa ausgedrückt werden [130]. Basierend auf der Arbeit von Rodriguez und Gutiérrez [230] wird die folgende Gleichung für Martensit und Ferrit verwendet:

$$\sigma_y = \sigma_0 + \Delta\sigma + \alpha M \mu \sqrt{b} \sqrt{\frac{1 - \exp(-M k_{\text{r}} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}})}{L k_{\text{r}}}}, \quad (5.2)$$

wobei die Erklärung und die Werte der Konstanten in Tabelle 5.3 angegeben sind. Der erste Term σ_0 in Gl. (5.2) repräsentiert die Peierls-Spannung, die in

Tabelle 5.2: Parameter für den elastischen Teil der elastoplastischen Simulationen.

Parameter	Symbol	Wert
Elastizitätsmodul	E	200 GPa
Poissonzahl	ν	0,3
Eigendehnung	ε_1	0,131
Eigendehnung	ε_3	-0,082
Abschrecktemperatur	T	20 °C
Chemische treibende Kraft	$\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha'}$	$-5,98 \times 10^8 \text{ J/m}^3$
Grenzflächenenergie	$\gamma_{\alpha\beta}$	0,1 J/m ²
Parameter zum Aufbau einer Grenzfläche in Normalenrichtung	γ^n	4,75 J/m ²
Parameter für den Dreiphasenbeitrag	$\gamma_{\alpha\beta\delta}$	$2 (\gamma_{\alpha\beta} + \gamma^n)$
Gitterabstand	$\Delta x, \Delta y$	16,25 nm
Parameter zur Einstellung der Grenzflächenbreite	ϵ	$2,5\Delta x$
Dimensionslose Zeitschrittweite	Δt	1
Parameter zur Reduktion der Eigendehnung	ϱ	0,15

Abhängigkeit von der in Tabelle 5.1 in Masseprozent gegebenen chemischen Zusammensetzung mit

$$\sigma_0(\text{MPa}) = 77 + 80 \times \text{Mn} + 750 \times \text{P} + 60 \times \text{Si} + 80 \times \text{Cu} \\ + 45 \times \text{Ni} + 60 \times \text{Cr} + 11 \times \text{Mo}$$

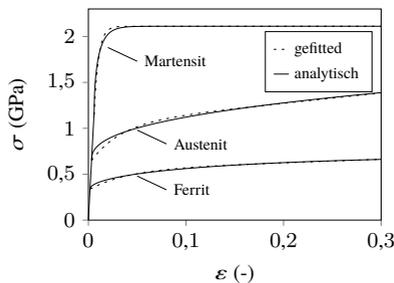
berechnet wird. Die resultierenden gefitteten Konstanten sind in Tabelle 5.4 angegeben, und die Spannungs-Dehnungskurven der analytischen und der gefitteten Funktionen sind in Abb. 5.11 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass eine gute Approximation der analytischen Spannungs-Dehnungskurven erzielt werden wird. Die Wahl der plastischen Relaxationsrate k spielt bei der Gefügebildung eine entscheidende Rolle. Yeddu et al. [232] untersuchten das Wachstumsverhalten eines martensitischen Keims in einer austenitischen Matrix für verschiedene Relaxationsraten. Die Arbeiten wurden in 3D und bei der Martensitstarttemperatur einer Eisen-Kohlenstoff-Legierung durchgeführt. Es wurde ein kritischer Wert für k gefunden, bei dem die treibende Kraft gerade groß genug war, damit der Keim wachsen konnte. Unterhalb der kritischen

Tabelle 5.3: Parameter für die nichtlineare Verfestigung von Martensit und Ferrit.

Parameter	Symbol	Wert für Ferrit	Wert für Martensit	Referenz
Verstärkung durch gelösten Kohlenstoff	$\Delta\sigma$	5 000 C_α	3 065 $C_{\alpha'}$ -161	[231]
Konstante	α		0,33	[231]
Taylor-Faktor	M		3	[231]
Schubmodul	μ		$E/(2(1 + \nu))$	berechnet
Burgersvektor	b		$2,5 \times 10^{-10}$ m	[231]
Korndurchmesser Ferrit	d_α	7 μm	-	berechnet
Mittlere freie Weglänge für Versetzungen	L	d_α	$3,8 \times 10^{-8}$ m	[231]
Erholungsrate	k_r	$10^{-5}/d_\alpha$	41	[231]

Tabelle 5.4: Für DP600-Stahl gefittete Parameter für die nichtlineare Verfestigung, in GPa.

	Ferrit	Austenit	Martensit
σ_0	0,338	0,650	1,147
σ_∞	0,550	1,050	2,111
θ_0	5,701	14,26	210,6
θ_∞	0,377	1,130	0,001

**Abbildung 5.11:** Analytische und gefittete Spannungs-Dehnungskurven für die einzelnen Phasen des untersuchten DP600.

Relaxationsrate waren die elastischen treibenden Kräfte zu hoch, was zu einem Schrumpfen des Keimes führte. Oberhalb des kritischen Wertes wurden die Spannungen schnell genug durch Plastifizierung reduziert, was zur Reduktion der elastischen treibenden Kräfte führte und das Wachstum des Keims ermöglichte. Eine autokatalytische Nukleation der anderen Varianten trat nur dann auf, wenn die Relaxationsrate moderat über dem kritischen Wert lag. Bei einem noch höheren Wert wurde die freie Energie nur durch Plastifizierung, nicht aber durch die abwechselnde Nukleation martensitischer Varianten minimiert. Basierend auf diesen Beobachtungen wird die plastische Relaxationsrate oft so bestimmt, dass der Martensit bei der martensitischen Starttemperatur der betrachteten Legierung zu wachsen beginnt [20, 53]. Da die Größe des Keims die kapillaren Kräfte bestimmt und damit die kritische Relaxationsrate beeinflusst wird, liegt der Schluss nahe, dass k keine Materialkonstante im klassischen Sinne, sondern eine problemabhängige Größe ist. Aus diesem und dem Grund, dass aus der Literatur keine Methodik für den Fall bekannt ist, dass die martensitische Transformation nur durch Rauschen ausgelöst wird, werden in dieser Arbeit zwei verschiedene Werte für k verwendet, um den Einfluss auf die resultierende Verteilung der von Mises-Spannung und der akkumulierten plastischer Dehnung zu untersuchen.

Der Rauschterm (Gl. (4.8)) in der Phasenfeldevolutionsgleichung (4.2) wird jeden fünfzigsten Zeitschritt aktiviert und führt zu einem Rauschen in den Phasenfeldern, mit einer Auslenkung von bis zu 0,2. Im ersten Zeitschritt wird eine 2,5-fach höhere Amplitude verwendet, um die erste Keimbildung zu ermöglichen. Danach wächst die martensitische Front mithilfe des autokatalytischen Nukleationsmechanismus ins Korninnere. Die Randbedingungen sind zu denen der elastischen Phasenfeldsimulation in Abschnitt 5.1 identisch. Die folgenden Simulationen werden zur Untersuchung der elastoplastisch modellierten Martensitumwandlung in Dualphasenstahl durchgeführt:

- Um die Auswirkung der plastischen Relaxationsrate k auf die Martensitumwandlung in Dualphasenstahl zu untersuchen, wird eine elasto-plastische Simulation mit einer niedrigen plastischen Relaxationsrate von $k = 0,001$ und mit einer entsprechend höheren Relaxationsrate von $k = 0,01$ durchgeführt. Um den Einfluss der plastischen Energiedichte separat zu diskutieren, werden diese Simulationen ohne \bar{W}_{pl} durchgeführt. Als Vergleichsfall wird eine rein elastische Simulation durchgeführt. Es sei angemerkt, dass aufgrund einer leicht anderen Kali-

brierung ein anderes Simulationsergebnis im Vergleich zur elastischen Simulation in Abschnitt 5.1 zu erwarten ist.

- Um die resultierende Verteilung der von Mises-Spannung und der akkumulierten plastischen Dehnung nach dem Abschrecken mit Modellierungsansätzen zu vergleichen, bei denen nur die Volumenzunahme des Martensits berücksichtigt wird, wird eine vergleichbarer Simulation durchgeführt. Wie im vorangegangenen Abschnitt 5.1 werden die anfänglich austenitischen Bereiche als vollständig in Martensit umgewandelt angenommen, indem $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 0,019$ gesetzt wird. Ohne eine Phasenfeldevolutionsgleichung zu lösen, wird lediglich das elastoplastische Gleichgewicht berechnet.
- Der Effekt der plastischen Energiedichte nach Gl. (3.17) wird durch eine Simulation mit $k = 0,01$ und der Verwendung von \bar{W}_{pl} im Energiefunktional diskutiert. Mit wenigen Ausnahmen, z. B. [40, 41], ist ein vergleichbarer Term für die martensitischen Phasenumwandlungen nicht im Energiefunktional elastoplastischer Phasenfeldmodelle zu finden [20, 22, 35, 53]. Es ist zudem zu berücksichtigen, dass die Verwendung einer plastischen Energiedichte im Energiefunktional nicht zwangsläufig zu einer treibenden Kraft in der Phasenfeldevolutionsgleichung führt. Ist die plastische Energiedichte nicht phasenabhängig, ergibt sich kein Beitrag in der Phasenfeldevolutionsgleichung [40, 41]. Experimentelle Arbeiten zeigen, dass die martensitische Phasenumwandlung im Falle einer starken Plastifizierung im Austenit behindert wird, sodass keine weitere Umwandlung mehr möglich ist [233]. In dieser Arbeit ist die plastische Energiedichte $\bar{W}_{pl}(\phi, \bar{\varepsilon}_{pl})$ so formuliert, dass ein Beitrag in der Phasenfeldevolutionsgleichung vorhanden ist. Dabei hängt der Sprung der plastischen treibenden Kraft lediglich von den Materialparametern der Verfestigungsfunktion und der örtlichen Plastifizierung ab. In Abb. 5.11 ist zu erkennen, dass Martensit ein größeres Verfestigungspotenzial zeigt als Austenit. Unter der Annahme, dass im simulierten Abschreckvorgang lediglich Martensit in Austenit umgewandelt wird und keine Rücktransformation stattfindet, ist die plastische Energiedichte so formuliert, dass sie ausschließlich der martensitischen Umwandlung entgegenwirkt. Mit dieser phänomenologischen Formulierung kann der Effekt, dass eine Plastifizierung im Austenit die Martensitumwandlung behindert, abgebil-

det werden, auch wenn damit sicherlich nicht alle zugrunde liegenden Mechanismen auf der Versetzungsebene aufgelöst werden können.

- Für den Fall von $k = 0,01$ wird der Effekt der alternativen Art der Integration von Plastizität (scharfer Übergang der plastischen Materialparameter (s. Abschnitt 3.4.4)) untersucht.

5.2.2 Ergebnisse und Diskussion

Mikrostruktur und Kinetik

Wie in Abschnitt 5.1.2 beschrieben, findet die Nukleation der martensitischen Varianten sowohl an Austenit/Austenit- als auch an Austenit/Ferrit-Korngrenzen statt. Von dort wachsen sie ins Korninnere, wobei über das Spannungsfeld der einen Variante die Nukleation der jeweils anderen Variante ausgelöst wird, was zu der typischen Mikrostruktur des Lattenmartensits führt. Die resultierenden Mikrostrukturen für den rein elastischen und für den plastischen Fall mit $k = 0,001$ und $k = 0,01$ sind in Abb. 5.12 dargestellt. Die dazugehörige

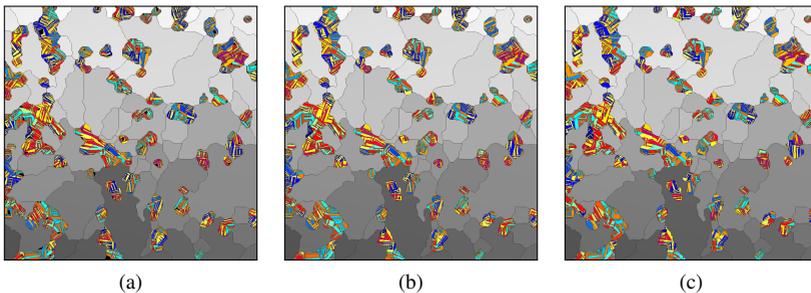


Abbildung 5.12: Resultierende ferritisch-martensitische Mikrostrukturen. (a) Ohne Plastizität, $t = 6200\Delta t$. (b) Mit Plastizität und $k = 0,001$, $t = 56000\Delta t$. (c) Mit Plastizität und $k = 0,01$, $t = 98000\Delta t$. Die martensitischen Varianten sind in unterschiedlichen Farben dargestellt. Der Restaustenit ist schwarz eingefärbt.

ge Umwandlungskinetik ist anhand der martensitischen Volumenfraktion in anfangs austenitischen Körnern in Abb 5.13 zu erkennen. Zu Beginn steht in allen drei Fällen eine große treibende Kraft zur Verfügung, sodass die Phasenumwandlung schnell erfolgt. Bis zur Zeit $t = 600\Delta t$ ist nur ein geringer

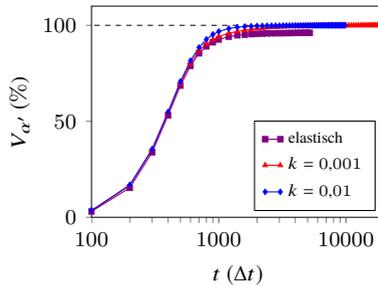


Abbildung 5.13: Zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils $V_{\alpha'}$ in ursprünglich austenitischen Körnern.

Unterschied in den drei Simulationen erkennbar. Von da an unterscheidet sich die Kinetik erheblich. Durch die Volumenausdehnung erhöht sich die elastische treibende Kraft, die größtenteils der Umwandlung entgegenwirkt, mit steigender martensitischer Volumenfraktion. Die Nukleation einer anderen martensitischen Variante kann nur die durch die Scherkomponenten der Eigendehnung verursachten Spannungen aufheben, nicht jedoch die durch die Volumenausdehnung resultierenden Anteile. Aus diesem Grund ist in der elastischen Simulation Restaustenit vorhanden, der in Abb. 5.12(a) gezeigt ist. Im plastischen Fall führt eine Plastifizierung zu einer Reduktion der elastischen Dehnungen und somit zu einer Verringerung der elastischen treibenden Kraft. Eine höhere plastische Relaxationsrate mit $k = 0,01$ führt zu einer höheren Umwandlungskinetik, sodass die Martensitumwandlung im Vergleich zu $k = 0,001$ früher abgeschlossen ist. Dies ist der Grund, warum die Endergebnisse in Abb. 5.12 und Abb. 5.14 zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt sind. Für die gewählten Prozessbedingungen ist ein vollständig umgewandeltes Gefüge zu erwarten, da die Martensitendtemperatur für einen vergleichbaren Stahl deutlich über der Raumtemperatur liegt [130].

Nicht nur die Kinetik ändert sich durch plastische Effekte, sondern auch die resultierende Mikrostruktur. Aus [232] ist bekannt, dass eine hohe plastische Relaxationsrate das abwechselnde Nukleieren der Martensitvarianten unterdrückt. Um die Anzahl der Nukleationsevents zu quantifizieren, wird der Volumenanteil V_{inf} bestimmt, in dem mehr als eine Phase vorhanden ist. Ein niedrigerer Wert bedeutet größere zusammenhängende Flächen einer martensitischen Variante. Für den elastischen Fall ergibt sich $V_{\text{inf}} = 11,1\%$.

Für den plastischen Fall ist $V_{\text{intf}} = 10,4\%$ für $k = 0,001$ und $V_{\text{intf}} = 9,9\%$ für $k = 0,01$. Auf dieser Grundlage kann geschlossen werden, dass eine höhere plastische Relaxationsrate eher zu einer Energieminimierung durch Plastifizierung als zu einer Energieminimierung durch das abwechselnde Nukleieren der Martensitvarianten führt.

Verteilung der von Mises-Spannung und der akkumulierten plastischen Dehnung

Abb. 5.14 zeigt die resultierende Verteilung der von Mises-Spannung und der akkumulierten plastischen Dehnung nach der Martensitumwandlung. Um die Ergebnisse mit den Ergebnissen unter Annahme einer reinen Volumenausdehnung, modelliert mit einem isotropen $\bar{\epsilon}^0$, zu vergleichen, werden letztere in Abb. 5.14(a, c, d) dargestellt. Dabei wird die Substruktur der martensitischen Bereiche nicht aufgelöst. In Übereinstimmung mit den Ergebnissen von [130] treten im Fall der isotropen Annahme vor allem in ferritischen Bereichen, in der Nähe von Ferrit/Martensit Grenzflächen, plastische Dehnungen auf, um der Volumenänderung bei der Umwandlung von Austenit in Martensit Rechnung zu tragen. Dies ist auf die geringere Streckgrenze von Ferrit im Vergleich zu Martensit zurückzuführen. In unmittelbarer Nachbarschaft liegende martensitische Inseln beeinflussen sich gegenseitig, was in Ferrit zu besonders hohen Werten in der akkumulierten plastischen Dehnung (Abb. 5.14(a)) und der von Mises-Spannung (Abb. 5.14 g) führt. In den kleineren und eher runden martensitischen Inseln liegt die resultierende von Mises-Spannung im Bereich der Streckgrenze von Martensit ($\sigma_0 = 1,147$ GPa), während die von Mises-Spannung in größeren und komplexer geformten martensitischen Inseln einen Wert von ca. 2 GPa erreicht, was auf das Vorhandensein von plastischen Dehnungen hinweist. Da die Reduktion der Eigendehnung an Korngrenzen auch im isotropen Fall aktiv ist, sind geringfügig niedrigere Werte von σ_{mises} im Bereich der Austenit/Austenit Grenzflächen in Abb. 5.14(d) gezeigt. Werden die Ergebnisse mit der isotropen Annahme mit den Ergebnissen verglichen, bei denen die martensitische Umwandlung explizit berechnet wird, so lassen sich einige Unterschiede feststellen:

Die akkumulierte plastische Dehnung und die von Mises-Spannung in ferritischen Bereichen sind im isotropen Fall geringer. Die zeitliche Entwicklung der im gesamten Simulationsgebiet gemittelten akkumulierten plastischen Deh-

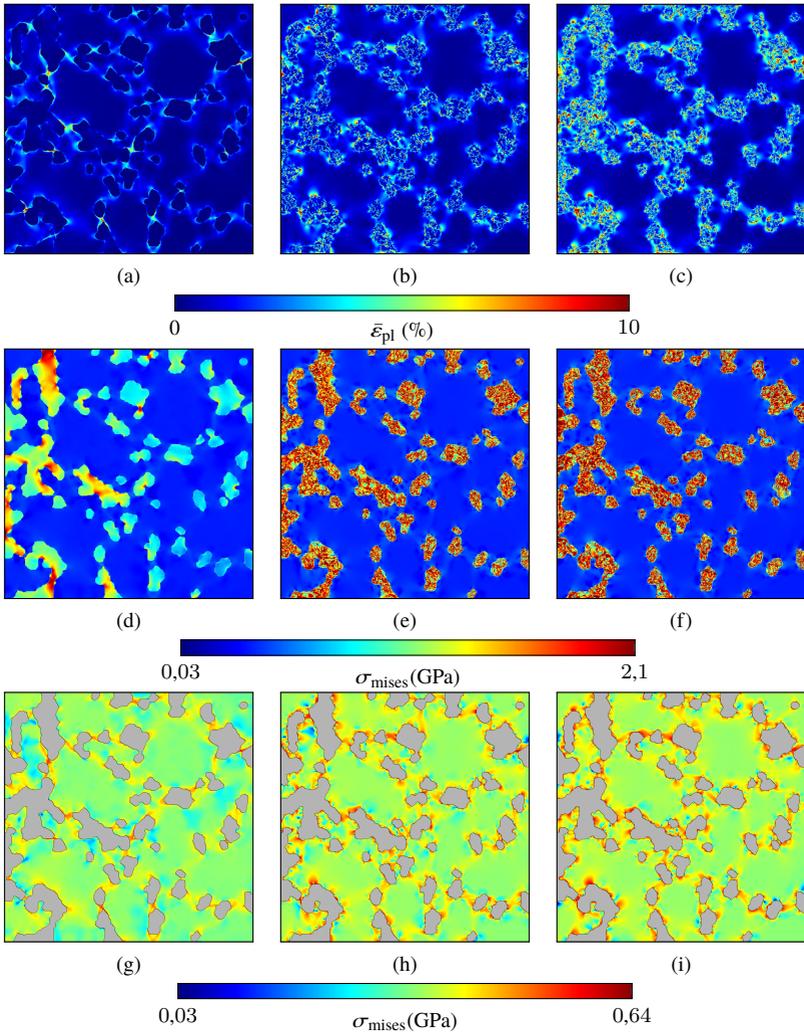


Abbildung 5.14: Endzustand der von Mises-Spannung und der akkumulierten plastischen Dehnung. (a-c) Akkumulierte plastische Dehnung. (d-f) Von Mises-Spannung im gesamten Simulationsgebiet. (g-i) Von Mises-Spannung in ferritischen Bereichen. Die Ergebnisse in (a, d, g) resultieren für die Annahme eines isotropen $\bar{\epsilon}^0$ (nur Volumenausdehnung), (b, e, h) für $k = 0,001$ und (c, f, i) für $k = 0,01$. Die Ergebnisse werden entsprechend den Minimal- und Maximalwerten des isotropen Falls skaliert.

nung ist in Abb. 5.15(a) dargestellt. Es ist ersichtlich, dass die Plastifizierung

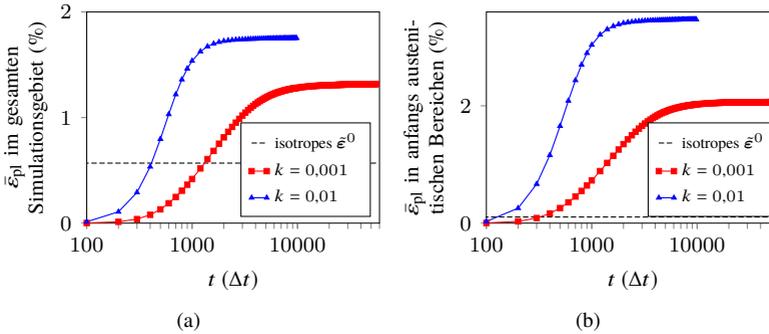


Abbildung 5.15: Zeitliche Entwicklung der gemittelten akkumulierten plastischen Dehnung $\bar{\epsilon}_{pl}$. (a) Im gesamten Simulationsgebiet. (b) In anfangs austenitischen Bereichen.

für $k = 0,01$ schneller beginnt und einen höheren Endwert von 1,75 % erreicht als im Fall mit $k = 0,001$, wo ein Endwert von 1,32 % erreicht wird. Die Simulation mit der Annahme eines isotropen $\bar{\epsilon}^0$ ergibt einen niedrigeren Wert von 0,75 %. Das liegt daran, dass sich die Spannungen, die durch die Scherkomponenten der Eigendehnung ins System eingebracht werden, nicht optimal durch eine günstige Anordnung der Varianten aufheben, wenn die Substruktur des Martensits aufgelöst wird (s. Abschnitt 5.1.2). Wird die martensitische Umwandlung explizit aufgelöst, sind die akkumulierte plastische Dehnung und die von Mises-Spannung in den martensitischen Gebieten größer.

Die vergleichsweise hohen Scherkomponenten der Eigendehnung führen an bestimmten Stellen leicht zu von Mises-Spannungen oberhalb der Streckgrenze und führen zu einem nennenswerten Maß an akkumulierter plastischer Dehnung in die martensitischen Bereiche. Die zeitliche Entwicklung der gemittelten akkumulierten plastischen Dehnung in den anfangs austenitischen Bereichen ist in Abb. 5.15(b) dargestellt. Während im isotropen Fall nur eine sehr geringe Plastifizierung von 0,1 % zu beobachten ist, ergibt sich in der Phasenfeldsimulation mit $k = 0,001$ ein Wert von 2,1 % und mit $k = 0,01$ ein Wert von 3,5 %. Dieses Ergebnis ist plausibler, da die Versetzungsdichte in Lattenmartensit hoch ist, was einer der Gründe für seine hohe Festigkeit ist [234]. Im isotropen Fall liegen martensitische Einschlüsse vor, in denen überhaupt keine Plastifizierung stattfindet.

Wie experimentell [128, 129, 235] und numerisch [130, 131] von einer Reihe von Autoren herausgefunden wurde, ist der Materialzustand nach dem Abschrecken in Dualphasenstahl nicht homogen. Aufgrund der Volumenänderung nimmt die Versetzungsdichte in Ferrit mit zunehmendem Abstand zu den martensitischen Bereichen ab. Um den Grad der Plastifizierung in Abhängigkeit vom Abstand zum nächstliegenden martensitischen Bereich zu analysieren, wird in jedem Diskretisierungspunkt der Minimalabstand berechnet und mit der akkumulierten plastischen Dehnung an dieser Position korreliert. Es werden 200 Intervalle zwischen null und der maximalen Entfernung gebildet und jeder Datenpunkt, der aus der Entfernung und dem entsprechenden $\bar{\epsilon}_{pl}$ besteht, wird nach seiner Entfernung kategorisiert. Der Mittelwert und die Standardabweichung werden für jedes Intervall berechnet und sind in Abb. 5.16 dargestellt. In

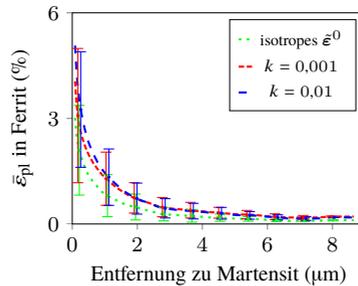


Abbildung 5.16: Akkumulierte plastische Dehnung $\bar{\epsilon}_{pl}$ als Funktion des Mindestabstandes zum nächsten martensitischen Bereich. Die jeweilige Standardabweichung wird mit den Fehlerbalken dargestellt. Um das Diagramm übersichtlicher zu gestalten, ist die Standardabweichung für verschiedene Fälle nicht für den gleichen Punkt, sondern für benachbarte Punkte angegeben.

der Nähe der Ferrit/Martensit-Korngrenzen erreicht die akkumulierte plastische Dehnung die höchsten Werte. Mit zunehmendem Abstand folgt die Abnahme der akkumulierten plastischen Dehnung einer exponentiellen Abnahme, die mit den Ergebnissen in [129, 235] übereinstimmt. Im Vergleich zur isotropen Annahme ist zu erkennen, dass die resultierenden plastischen Dehnungen höher sind, wenn die martensitische Transformation explizit simuliert wird. Verglichen mit dem Fall $k = 0,001$, führt die höhere Relaxationsrate $k = 0,01$, bis zu einer Entfernung von ca. $2 \mu\text{m}$, zu einer stärkeren Plastifizierung. Bei größeren Entfernungen führt die kleinere plastische Relaxationsrate zu etwas höheren Werten von $\bar{\epsilon}_{pl}$. Dies ist dadurch zu erklären, dass eine geringere plastische Relaxationsrate vorübergehend zu höheren Spannungen führt, was

zu größeren Plastifizierungseffekten in entfernten ferritischen Regionen führt. In allen drei Fällen weist die Standardabweichung den höchsten Wert nahe der Ferrit/Martensit-Korngrenze auf und nimmt mit zunehmendem Abstand ab. Die große Standardabweichung ist ein Resultat der heterogen verteilten martensitischen Insel. Neben den allgemein höheren Werten sind auch die Standardabweichungen für $k = 0,001$ und $k = 0,01$ im Vergleich zur isotropen Annahme höher, was durch die Scherkomponenten der Eigendehnung verursacht wird.

Neben dem martensitischen Volumenanteil beeinflusst auch die Morphologie der martensitischen Insel die mechanischen Eigenschaften von Dualphasenstahl. Ein Parameter zur Quantifizierung dieses Zusammenhangs ist der Anteil der Ferritkorngrenze pro Korn, der eine Korngrenze mit Martensit bildet. Basierend auf Vorgängerarbeiten [131, 236] wird dieser Parameter $t_{\alpha\alpha'}$ aus dem Verhältnis der Länge der Korngrenze $l_{\alpha\alpha'}$, die eine Korngrenze mit Martensit bildet, zu der gesamten Korngrenzlänge l_{gesamt} gebildet:

$$t_{\alpha\alpha'} = \frac{l_{\alpha\alpha'}}{l_{\text{gesamt}}}.$$

Abb. 5.17 stellt die gemittelte akkumulierte plastische Dehnung pro Ferritkorn in Abhängigkeit vom Parameter $t_{\alpha\alpha'}$ dar. Es sei angemerkt, dass nur solche Ferritkörner berücksichtigt wurden, die vollständig innerhalb des Simulationsgebiets liegen und eine Ferrit/Martensit-Korngrenze aufweisen (insgesamt 34). Der generelle Trend, dass ein höherer Wert von $t_{\alpha\alpha'}$ zu einer größeren durchschnittlichen Plastifizierung in einem ferritischen Korn führt [131, 236], kann durch die Simulationsergebnisse innerhalb dieser Arbeit bestätigt werden. Bei Körnern mit einem geringen Anteil an Ferrit/Martensit-Korngrenzen führt eine höhere plastische Relaxationsrate zu einer geringeren Plastifizierung. Dies steht im Einklang mit den im vorherigen Absatz diskutierten Ergebnissen, wo festgestellt wurde, dass eine geringere plastische Relaxationsrate in entfernten Ferritbereichen zu größeren plastischen Dehnungen führt (Abb. 5.16). Im Allgemeinen ist es offensichtlich, dass die resultierende Verteilung der von Mises-Spannung und der akkumulierten plastischen Dehnung sowohl im Ferrit als auch insbesondere im Martensit heterogener ist, wenn die martensitische Substruktur aufgelöst wird.

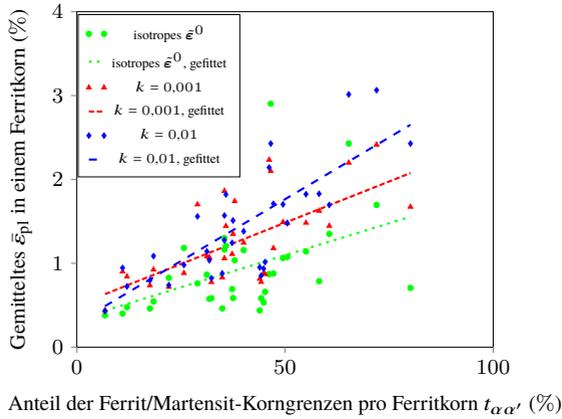


Abbildung 5.17: Gemittelte akkumulierte plastische Dehnung pro Ferritkorn in Abhängigkeit vom Anteil der Ferrit/Martensit-Korngrenzen. Ausgehend von den Datenpunkten ist ein Fit mit der Methode der kleinsten Quadrate dargestellt.

Einfluss der plastischen treibenden Kraft

Bevor die Ergebnisse diskutiert werden, wird eine Abschätzung der zu erwartenden Auswirkungen der plastischen treibenden Kraft vorgenommen. Die plastische Energiedichte (Gl. (3.17)) ist in Abb. 5.18 in Abhängigkeit von der akkumulierten plastischen Dehnung $\bar{\epsilon}_{pl}$ und unter Verwendung der in Tabelle 5.4 angegebenen Parameter dargestellt. Damit sich eine Phasengrenze umwandelt, ist jedoch nur die Differenz der Energiedichten entscheidend. Daher ist der Unterschied der Energiedichten zwischen Martensit und Austenit $\Delta W_{pl}^{\gamma\alpha'} = W_{pl}^{\alpha'} - W_{pl}^{\gamma}$ zusätzlich angegeben. Es ist zu erkennen, dass die Differenz bis zu einer plastischen Verformung von $\bar{\epsilon}_{pl} = 0,2$ unter $1 \times 10^8 \text{ J/m}^3$ liegt. Im Vergleich zur chemischen treibenden Kraft der Martensitumwandlung ($\Delta W_{chem}^{\gamma\alpha'} = -5,98 \times 10^8 \text{ J/m}^3$) wird deutlich, dass die plastische treibende Kraft nur dann eine deutliche Rolle spielt, wenn die chemische und elastische treibende Kraft ähnliche Werte aufweisen, was erst in der späteren Phase der Umwandlung der Fall ist. Die zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils $V_{\alpha'}$ in anfänglich austenitischen Körnern bei Verwendung der plastischen treibenden Kraft ist für $k = 0,01$ in Abb. 5.19 dargestellt. Es ist zu beachten, dass auch die Ergebnisse der Simulation mit einer scharfen Parame-

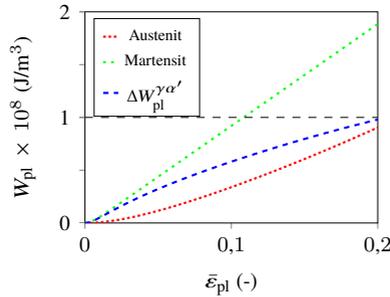


Abbildung 5.18: Plastische Energiedichte W_{pl} für Austenit und Martensit als Funktion der akkumulierten plastischen Dehnung $\bar{\epsilon}_{pl}$.

trisierung der plastischen Materialparameter aufgeführt sind, die jedoch erst im nächsten Abschnitt diskutiert werden. Wie erwartet, ist eine Abweichung bis zu

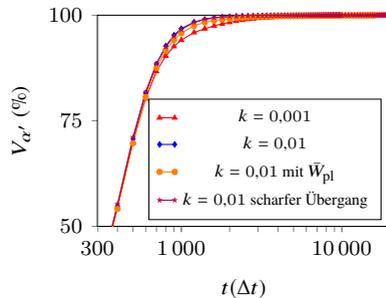


Abbildung 5.19: Zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils $V_{\alpha'}$ in anfänglich austenitischen Körnern.

einem Volumenanteil von $V_{\alpha'} = 75\%$ kaum sichtbar. In der Region, in der sich ein Unterschied zwischen den verschiedenen Relaxationsraten zeigt, zeigt die Simulation mit \bar{W}_{pl} im Vergleich zum Referenzfall eine langsamere Kinetik. In diesem Bereich ist der resultierende Sprung der treibenden Kräfte zwischen Martensit und Austenit nicht mehr so groß wie zu Beginn, und die zusätzliche plastische treibende Kraft, die der Umwandlung entgegenwirkt, kommt zum Tragen. Dennoch wird eine Umwandlung von 100 % erreicht.

Das Maß der akkumulierten plastischen Dehnung unterscheidet sich nur geringfügig, wie in Abb. 5.20 zu erkennen ist. Bei Verwendung von \bar{W}_{pl} wird

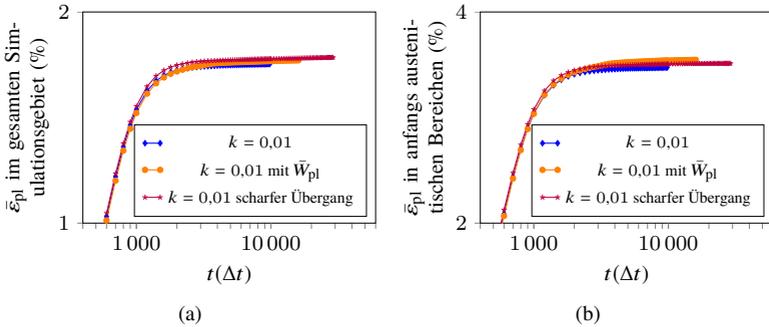


Abbildung 5.20: Zeitliche Entwicklung der gemittelten akkumulierten plastischen Dehnung $\bar{\epsilon}_{pl}$ für verschiedene Modellierungsansätze. (a) Im gesamten Simulationsgebiet. (b) In anfangs austenitischen Bereichen.

ein geringfügig höherer Wert von $\bar{\epsilon}_{pl}$ erreicht, sowohl gemittelt im gesamten Simulationsgebiet als auch in den anfangs austenitischen Bereichen. Ein Grund könnte sein, dass \bar{W}_{pl} in der späteren Phase der Simulation zur Unterdrückung der Keimbildung beiträgt und somit eine Minimierung der freien Energie durch Plastifizierung begünstigt wird. Da der Nukleationsterm ζ (Gl. (4.8)) jedoch einen Zufallszahlengenerator beinhaltet, ist eine Mittelung über mehrere Simulationsergebnisse (mit verschiedenen Zufallsgeneratoren) erforderlich, um zuverlässige Aussagen treffen zu können. Aus diesen Ergebnissen lässt sich dennoch schließen, dass die nach Gl. (3.17) formulierte plastische treibende Kraft im Kontext der dominierenden chemischen treibenden Kräfte, die durch das Abschrecken auf Raumtemperatur entstehen, eine untergeordnete Rolle spielt.

Einfluss der Plastizitätsformulierung

In diesem Abschnitt wird der Effekt diskutiert, wenn keine Interpolation der plastischen Materialparameter verwendet wird, sondern in jeder Diskretisierungszelle die Materialparameter der Phasenklasse mit der jeweils größten

Volumenfraktion verwendet werden, wie in Abschnitt 3.4.4 vorgestellt wurde. Die Ergebnisse der Simulation mit dem Interpolationsansatz und mit Verwendung eines scharfen Übergangs mit $k = 0,01$ sind in Abb. 5.21 dargestellt. Der

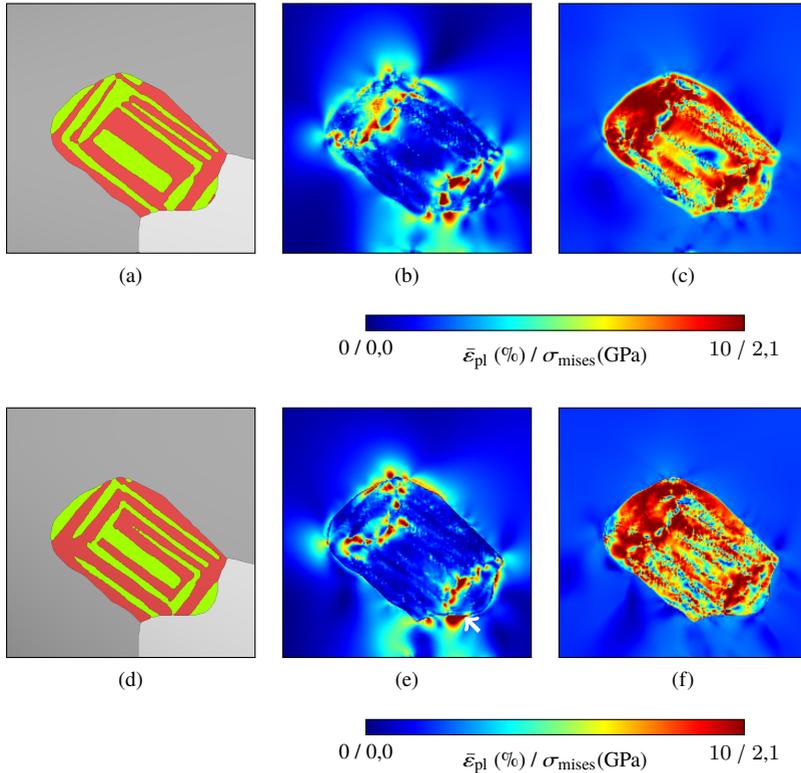


Abbildung 5.21: Vergleich zweier verschiedener Plastizitätsansätze für die Bestimmung der plastischen Materialparameter im diffusen Grenzflächenbereich zum Zeitpunkt $t = 9800\Delta t$: (a-c) Interpolationsansatz. (d-f) Scharfer Übergang. Dargestellt sind die Mikrostruktur (a, d), die akkumulierte plastische Dehnung $\bar{\epsilon}_{pl}$ (b, e) und die von Mises-Spannung σ_{mises} (c, f). Der gezeigte Ausschnitt ist in Abb. 5.2(b) mit „4“ markiert.

Hauptunterschied liegt in dem schärferen Übergang der von Mises-Spannung und der akkumulierten plastischen Dehnung in den diffusen Grenzflächenbereichen zwischen Ferrit und Martensit. Da sich die plastischen Materialparameter (Streckgrenze, etc.) bei Verwendung einer scharfen Grenze von einer Dis-

retisierungszelle zur nächsten stark ändern, ist dieses Verhalten auch in den Ergebnissen sichtbar, was durch den weißen Pfeil in Abb. 5.21(e) angezeigt wird. Bei Verwendung des Interpolationsansatzes ist der Übergang zwischen hohen und niedrigen Werten glatter, was im Vergleich zu Abb. 5.21(b) ersichtlich wird. Die gleiche Tendenz zeigt sich auch bei der Betrachtung der von Mises-Spannung in Abb. 5.21(c) und (f). Die Mikrostrukturen, die in Abb.5.21(a) und (d) dargestellt sind, zeigen eine großen Ähnlichkeit. Zudem folgt die Umwandlungskinetik der Kinetik bei Verwendung des Interpolationsansatzes nahezu identisch, wenn für die plastischen Materialparameter eine scharfe Grenze verwendet wird (Abb. 5.19). Auch das Maß der plastischen Dehnungen beider Ansätze unterscheidet sich nur geringfügig (s. Abb. 5.20), sodass geschlossen werden kann, dass beide Simulationsansätze zu sehr ähnlichen Ergebnissen führen.

5.3 Einfluss der martensitischen Mikrostruktur auf die Plastifizierung in Ferrit

In Abschnitt 5.1 und 5.2 wurde festgestellt, dass im ferritischen Bereich um einen martensitischen Einschluss sowohl die von Mises-Spannung als auch die akkumulierte plastische Dehnung bei der Auflösung der Substruktur des Martensits größer ist als bei der Annahme einer isotropen martensitischen Umwandlung. Da typischer Lattenmartensit aus unterschiedlich großen Latten besteht, wobei die maximale Größe von der Korngröße des Austenits beschränkt wird [237], wird in diesem Abschnitt untersucht, inwieweit die Größe der Latten im Vergleich zur Größe des gesamten martensitischen Einschlusses eine Rolle spielt. Es wird ein runder martensitischer Einschluss in einer ferritischen Matrix betrachtet, der aus einer unterschiedlichen Anzahl martensitischer Latten besteht und in Abb. 5.22 dargestellt ist. Das Gebiet ist mit 400×400 Zellen diskretisiert, wobei der kreisförmige martensitische Einschluss einen Durchmesser von 200 Zellen besitzt. Das Austenitkorn ist um 45° um die z-Achse gedreht, sodass die Latten in Vorzugsrichtung liegen. Alle weiteren Simulationsparameter sind aus Abschnitt 5.2 entnommen.

Ohne eine Phasenumwandlung zu berechnen, wird das elastoplastische Gleichgewicht sowohl für die unterschiedlichen Mikrostrukturen aus Abb. 5.22 als auch für die isotrope Annahme einer reinen Volumenausdehnung berechnet.

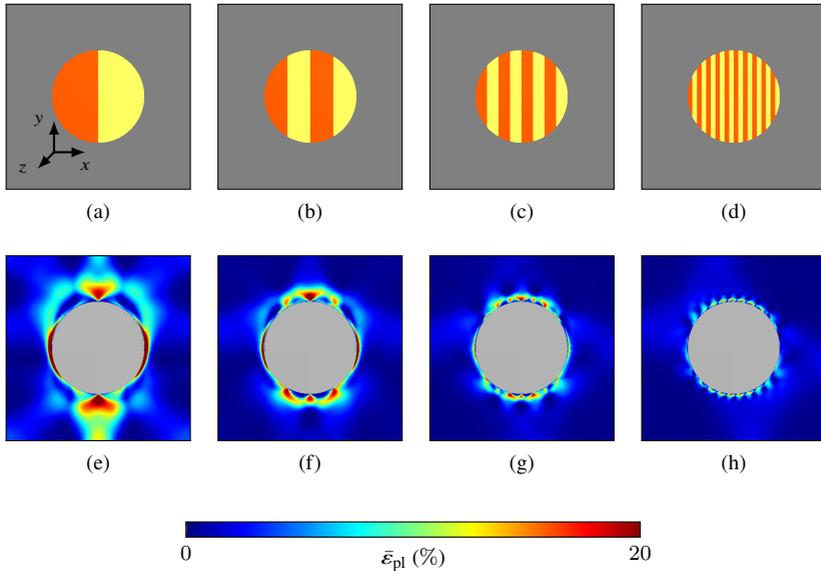


Abbildung 5.22: Martensitischer Einschluss mit unterschiedlicher Anzahl an Latten. (a-d) Mikrostruktur. (e-h) Akkumulierte plastische Dehnung in Ferrit. (a, e) Zwei Latten. (b, f) Vier Latten. (c, g) Acht Latten. (d, h) 20 Latten.

Zur Auswertung wird die gemittelte akkumulierte plastische Dehnung in Ferrit betrachtet, die in Abb. 5.23 dargestellt ist. Es ist zu erkennen, dass die gemittelte akkumulierte plastische Dehnung mit steigender Anzahl an Latten im martensitischen Einschluss abnimmt und gegen das Ergebnis mit isotroper Annahme strebt. Je dünner die Latten sind, desto besser können die Scherkomponenten der Eigendehnung durch benachbarte Latten ausgeglichen werden, und desto geringer ist der Plastizitätseintrag in Ferrit.

5.4 Fazit

In diesem Kapitel wurde die Martensitumwandlung in Dualphasenstahl mit dem in Kapiteln 3 und 4 vorgestellten Multiphasenfeldmodell simulativ im

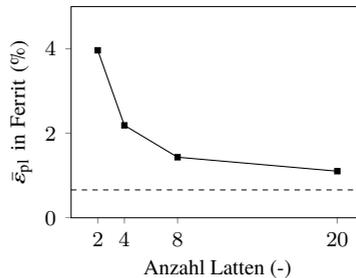


Abbildung 5.23: Zusammenhang zwischen der Anzahl der Latten in einem Austenitkorn und der gemittelten Plastifizierung im umliegenden Ferrit. Die gestichelte Linie steht im isotropen Fall für die Annahme einer reinen Volumenausdehnung ohne Scherkomponenten.

Zweidimensionalen abgebildet. Dabei konnten in der Literatur beschriebene Effekte wie der Abfall der Plastifizierung in Ferrit mit steigendem Abstand zu Martensit/Ferrit-Korngrenzen erfolgreich reproduziert werden. Durch die erstmalige Beschreibung des Abschreckvorgangs von Dualphasenstahl unter Auflösung der martensitischen Variantenbildung mithilfe der Phasefeldmethode lag ein Hauptaugenmerk auf dem Vergleich zwischen diesem Ansatz und der isotropen Annahme des Martensits, bei der keine Scherkomponenten berücksichtigt werden. Dabei wurde festgestellt, dass die von Mises-Spannung und die akkumulierte plastische Dehnung sowohl höher als auch deutlich heterogener ausfallen, wenn die martensitischen Varianten aufgelöst werden. Dies ist mit den hohen Scherkomponenten der Eigendehnungen zu begründen, die bei der isotropen Annahme nicht berücksichtigt werden. Im Gegensatz zur isotropen Annahme tritt bei Berücksichtigung der martensitischen Variantenbildung innerhalb der martensitischen Inseln eine nennenswerte Plastifizierung auf, was im Vergleich zu Experimenten zu erwarten ist. In Abschnitt 5.3 wurde zudem deutlich, dass der Unterschied zwischen beiden Ansätzen stark von der Größe der martensitischen Latten abhängt. Aus modellierungstechnischer Sicht ist es daher ratsam, die Lattendicke oder auch eine Streuung unterschiedlicher Lattendicken basierend auf experimentellen Beobachtungen in den Simulationen richtig einzustellen, um belastbare Vorhersagen treffen zu können. Die mit diesem Simulationsansatz gewonnenen Ergebnisse können darüber hinaus als Grundlagen für nachfolgende Simulationsstudien dienen, die als Startbedingung eine ferritisch-austenitische Mikrostruktur benötigen, wie z. B. die Simulation der Rissbildung in Dualphasenstahl.

6 Bainitumwandlung

Die Spannungsverteilung beim displaziven Wachstum einer bainitischen Untereinheit wurde trotz erster Ansätze, wie [66], bisher in der Literatur nicht ausreichend diskutiert. Vor allem die Auswirkung der Spannungsverteilung auf die Nukleation einer zweiten Untereinheit wurde nicht untersucht. In dieser Arbeit wird ein Phasenfeldmodell für das Wachstum einer bainitischen Untereinheit basierend auf der displaziven Theorie unter der Verwendung eines Elastizitätslösers und der Erfüllung der mechanischen Sprungbedingungen vorgestellt. Ziel dieses Kapitels ist es, nach dem Wachstum einer ersten bainitischen Untereinheit die vorliegende Spannungsverteilung zu analysieren, um davon ausgehend Regionen vorhersagen zu können, die als energetisch günstige Nukleationsstellen für das Wachstum einer zweiten Untereinheit dienen können. Dabei wird das Wachstum einer bainitischen Untereinheit und die Diffusion des Kohlenstoffs aus der ersten, übersättigten Untereinheit als sequentieller Prozess modelliert. Teile dieses Kapitels sind Bestandteil eines Manuskripts [238], welches zur Publikation in einem referierten Fachjournal eingereicht wurde.

6.1 Modellierung und Simulationsaufbau

Das displazive Wachstum einer bainitischen Untereinheit ist zum Wachstum einer martensitischen Lamelle identisch. Daher wird für das Wachstum einer bainitischen Untereinheit das Funktional nach Gl. (4.1), bestehend aus chemischen, elastischen und Grenzflächenbeiträgen, verwendet:

$$\mathcal{F}(\phi, \nabla\phi, \bar{\varepsilon}) = \int_V W_{\text{intf}}(\phi, \nabla\phi) + \bar{W}_{\text{elast}}(\phi, \bar{\varepsilon}) + \bar{W}_{\text{chem,k}}(\phi) dV. \quad (6.1)$$

Da mit dieser Modellformulierung ein Wachstumsstopp einer bainitischen Untereinheit nicht abgebildet werden kann, wird die Simulation angehalten, wenn ein bestimmtes Volumen der bainitischen Untereinheit überschritten wird.

Die Diffusion des Kohlenstoffs aus der übersättigten bainitischen Untereinheit wird unter Berücksichtigung der simulierten Mikrostruktur mit einer zweiten Simulation berechnet. Um die Kohlenstoffdiffusion zu berücksichtigen, wird die Formulierung der freien chemischen Energiedichte angepasst, und das freie Energiefunktional (6.1) ergibt sich zu

$$\mathcal{F}(\phi, \nabla\phi, \bar{\epsilon}, \bar{c}) = \int_V W_{\text{intf}}(\phi, \nabla\phi) + \bar{W}_{\text{elast}}(\phi, \bar{\epsilon}) + \bar{W}_{\text{chem,d}}(\phi, \bar{c}) dV.$$

Da lediglich eine Diffusion von Kohlenstoff, aber keine Phasenumwandlung stattfindet, wird die freie Energie durch eine Umverteilung des Kohlenstoffs reduziert. Weder die Grenzflächenenergiedichte W_{intf} noch die elastische Energiedichte \bar{W}_{elast} beinhalten in diesem Modellierungsansatz eine Konzentrationsabhängigkeit und sind daher während dieses Prozesses konstante Größen. Somit reduziert sich das für die Simulation relevante Energiefunktional zu

$$\mathcal{F}(\phi, \bar{c}) = \int_V \bar{W}_{\text{chem,d}}(\phi, \bar{c}) dV.$$

Das Wachstum einer bainitischen Untereinheit basierend auf der displaziven Theorie wird in dieser Arbeit an einem Beispielsystem mit einer Kohlenstoffkonzentration von 1,968 mol-% und einer Temperatur von 573,15 K betrachtet. Ein zweidimensionales Simulationsgebiet wird mit $1\,199 \times 2\,400$ Zellen diskretisiert, wobei $\Delta x = \Delta y = 0,65$ nm beträgt. Die Ausdehnung des elliptischen Keims, der zu Beginn im Simulationsgebiet vorhanden und in Abbildung 6.1 dargestellt ist, beträgt $5,85 \times 59,8$ nm.

Es wird angenommen, dass die bainitische Untereinheit eine Bain-Orientierungsbeziehung (vgl. Abschnitt 4.2) zu Austenit hat, wobei die im Simulationsgebiet vorhandene Untereinheit die erste Bain-Variante darstellt. Das Austenitkorn wird um 45° um die z-Achse gedreht, sodass die bevorzugte Wachstumsrichtung der bainitischen Untereinheit entlang einer Koordinatenachse liegt. Sofern nicht anders angegeben, werden für alle Simulationen periodische Randbedingungen verwendet.

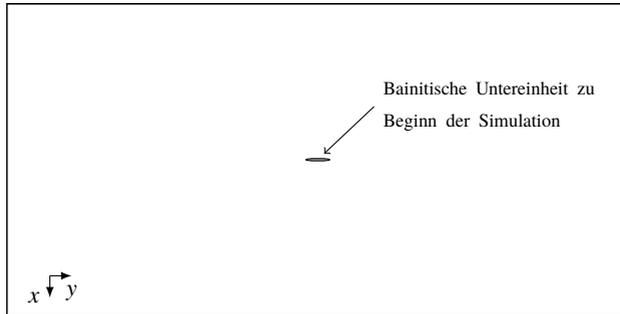


Abbildung 6.1: Ausgangszustand zur Simulation des Wachstums einer bainitischen Untereinheit.

Simulationsparameter für das Wachstum einer bainitischen Untereinheit

Die chemische treibende Kraft für das Wachstum einer bainitischen Untereinheit bei einer zeitlich unveränderten Konzentrationsverteilung von 1,968 mol-% ergibt sich unter Verwendung der Thermo-Calc Software und der TCFE7-Datenbank [223] zu $\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_b} = -2,96 \times 10^8 \text{ J/m}^3$. Der Elastizitätsmodul und die Poissonzahl betragen sowohl für Austenit als auch für Bainit $E = 210 \text{ GPa}$ und $\nu = 0,3$. Aufgrund der rein elastischen Annahme werden die Eigendehnungen auf $\varepsilon_1 = -0,1$ und $\varepsilon_3 = 0,1$ gesetzt. Die Grenzflächenenergie zwischen Austenit und Bainit beträgt $\gamma = 0,2 \text{ J/m}^2$ [239]. Die Breite der diffusen Grenzfläche wird mit $\epsilon = 3\Delta x$ eingestellt, sodass die Grenzflächenregion mit ungefähr sieben Diskretisierungspunkten in Normalenrichtung aufgelöst wird. Es werden periodische Randbedingungen angenommen. Wie bei dem Modell für die Martensitumwandlung wird die dimensionslose Zeitschrittweite auf $\Delta t = 1$ gesetzt und die Mobilität zwischen Austenit und der bainitischen Untereinheit so angepasst, dass die Simulation numerisch stabil bleibt. Die Phasenfeldevolutionsgleichung (3.6) wird verwendet. Die Simulation wird gestoppt, wenn die bainitische Untereinheit eine Fläche von 6760 nm^2 in 2D überschreitet.

Simulationsparameter für die Kohlenstoffumverteilung

Die Kohlenstoffkonzentration beträgt anfangs überall im Gebiet 1,968 mol-%. Nach [158] wird die phasenanteilige freie chemische Energiedichte wie folgt ausgedrückt:

$$W_{\gamma/\alpha_b}(c_c) = \frac{1}{V_m} \left(O^{\gamma/\alpha_b} c_c^2 + P^{\gamma/\alpha_b} c_c + Q^{\gamma/\alpha_b} \right). \quad (6.2)$$

Dabei sind $V_m = 7 \times 10^{-6} \text{ J/m}^3$ das molare Volumen, c_c die Kohlenstoffkonzentration und O^{γ/α_b} , P^{γ/α_b} und Q^{γ/α_b} phasenabhängige Koeffizienten. Die zur Parametrisierung der freien chemischen Energiedichte von Austenit (γ) und Bainit (α_b) benötigten Koeffizienten sind in Tabelle 6.1 aufgeführt. Die Kohlen-

Tabelle 6.1: Koeffizienten der freien chemischen Energiedichte für eine Temperatur von $T = 573,15 \text{ K}$ und einer durchschnittlichen Kohlenstoffkonzentration von 1,968 mol-% bzw. 0,43 Ma.-%.

Phase	Koeffizient	Wert (J/mol)
Austenit	O^γ	180 070 000
	P^γ	-7 202 800
	Q^γ	57 226
Bainit	O^{α_b}	38 779 833 333
	P^{α_b}	0
	Q^{α_b}	-18 289

stoffdiffusivität in Austenit wird nach [240] mit einer Funktion in Abhängigkeit der Kohlenstoffkonzentration modelliert und ergibt sich zu

$$D_c^\gamma(c_c) = 4,53 \times 10^{-7} \left(1 + y_c(1 - y_c) \frac{8\,339,9}{T} \right) \times \exp \left[- \left(\frac{1}{T} - 2,221 \times 10^{-4} \right) (17\,767 - 26\,436 y_c) \right], \quad (6.3)$$

wobei $y_c = c_c/(1 - c_c)$ gilt.

Die Diffusivität in Martensit bzw. Bainit ist temperaturabhängig und ist nach [241] gegeben mit

$$D_c^{\alpha b} = 0,02 \times 10^{-4} \times \exp\left(\frac{-10\,115}{T}\right) \times \left\{ 0,5898 \left[1 + \frac{2}{\pi} \arctan\left(1,4985 - \frac{15\,309}{T}\right) \right] \right\}. \quad (6.4)$$

Sowohl Gl. (6.3) als auch Gl. (6.4) geben die Diffusivität in m^2/s an [242]. Für die Simulation der Kohlenstoffverteilung bei der Temperatur von $T = 573,15 \text{ K}$ ergibt sich die Kohlenstoffdiffusivität in der bainitischen Untereinheit zu $D_c^{\alpha b} = 4,396 \times 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$. Die Diffusivität in Austenit wird nach Gl. (6.3) als Funktion der lokalen Kohlenstoffkonzentration berechnet. Um vor allem zu Beginn der Simulation unphysikalisch hohe Werte von D_c^γ zu vermeiden, wird wie in [150] die Bedingung $D_c^\gamma \leq D_c^{\alpha b}/1\,000$ eingeführt. Der sich damit ergebene Verlauf von D_c^γ ist in Abb. 6.2 dargestellt. Als Ausgangspunkt für

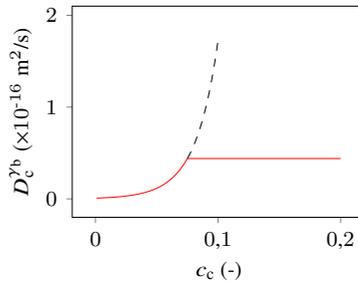


Abbildung 6.2: Verlauf der Kohlenstoffdiffusivität in Austenit als Funktion der Kohlenstoffkonzentration. Solange $D_c^\gamma < D_c^{\alpha b}/1\,000$ gilt, wird die Kohlenstoffdiffusivität nach Gl. (6.3) berechnet, ansonsten gilt $D_c^\gamma = D_c^{\alpha b}/1\,000$. Mit dieser Bedingung ergibt sich der rot dargestellte Verlauf.

die Simulation der Kohlenstoffumverteilung dient die nach der displaziven Umwandlung vorhandene Mikrostruktur. Um Rechenzeit zu sparen, wird in y -Richtung lediglich die obere Hälfte betrachtet. Da die Diffusivität in Austenit deutlich kleiner als in der bainitischen Untereinheit ist, kann zudem das Gebiet um die erste bainitische Untereinheit verkleinert werden. Das resultierende Gebiet besitzt 399×400 Diskretisierungspunkte. Als Randbedingung wird der Gradient der Phasenfelder und des Konzentrationsfeldes auf null gesetzt.

Folgende Simulationsstudien werden durchgeführt:

- Chemoelastisches Wachstum einer einzelnen bainitischen Untereinheit in ein austenitisches Korn.
- Chemoelastisches Wachstum einer zweiten bainitischen Untereinheit unter Berücksichtigung der Mikrostruktur der ersten bainitischen Untereinheit. Dazu wird die zweite Untereinheit an unterschiedlichen Positionen innerhalb des austenitischen Kornes gesetzt und die chemische treibende Kraft um neun Prozent reduziert. Dieser Wert ist so kalibriert, dass eine vollständige Rücktransformation der ersten bainitischen Untereinheit zu Austenit mit einer um neun Prozent, jedoch nicht mit einer um sieben Prozent reduzierten chemischen treibenden Kraft stattfindet. Dabei ist das Anfangsvolumen genauso groß wie das Volumen der ersten Untereinheit zu Beginn der vorangegangenen Simulation. Die Mobilität der ersten Untereinheit zu Austenit wird auf null gesetzt, sodass lediglich eine Evolution der zweiten Variante möglich ist. Bei diesem Setup wird angenommen, dass die Nukleation der zweiten Untereinheit so schnell auftritt, dass noch keine nennenswerte Diffusion von Kohlenstoff stattfinden konnte.
- Diffusion des Kohlenstoffes aus der ersten, übersättigten bainitischen Untereinheit.

6.2 Auswertevorgehen

Ein wesentlicher Teil der Auswertung widmet sich der Frage, inwiefern bzw. an welchen Positionen das Vorhandensein einer bainitischen Untereinheit die Nukleation einer zweiten Untereinheit energetisch begünstigt oder verschlechtert. Zur Quantifizierung wird die elastische Interaktionsenergie (engl.: *elastic interaction energy*) verwendet [243–245], die basierend auf dem momentanen Spannungszustand und den Eigendehnungen einer Phase α berechnet wird:

$$W_{\text{int}}^{\alpha} = -\sigma_{ij}(\mathbf{x})\varepsilon_{ij}^{0,\alpha}. \quad (6.5)$$

Vergleichbar mit der volumetrischen Energiedichte aufgrund einer angelegten Spannung (Gl. (3.19)), stellt Gl. (6.5) einen Zusammenhang zwischen einer

Spannung und den Eigendehnungen einer Phase her, wodurch bestimmte Spannungszustände zu einer Bevorzugung oder einer Behinderung einzelner Phasen führen. Während die volumetrische Energiedichte aufgrund einer angelegten Spannung, \bar{W}_{appl} , global zu einer Bevorzugung bestimmter Phasen führt, kann Gl. (6.5) lokal ausgewertet und damit festgestellt werden, ob das Wachstum einer Phase die freie elastische Energie an dieser Stelle verkleinert oder vergrößert.

Für die zweite bainitische Untereinheit gilt somit, dass an Stellen mit

$$W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} = -\sigma_{ij}(\mathbf{x})\varepsilon_{ij}^{0,\alpha_{\text{b},2}} < 0 \quad (6.6)$$

das Wachstum die elastische Energie reduziert. Dieses Kriterium ist im Rahmen kleiner Deformationen gültig für linear elastische Materialien, wenn Austenit und Bainit die gleichen Steifigkeiten aufweisen. In diesem Fall gilt das Superpositionsprinzip, das besagt, dass die Lösung eines Problems die Summe der Lösung der Teilprobleme darstellt [246]. Dies wird am folgenden Beispiel validiert: Es werden drei Simulationen mit unterschiedlichen Mikrostrukturen durchgeführt, die in Abb. 6.3(a, c, d) dargestellt sind. Als Materialparameter werden die im vorherigen Abschnitt für das displazive Wachstum eingeführten Parameter gewählt, wobei abweichend $\varepsilon_1 = -0,08$ und $\varepsilon_1 = 0,12$ verwendet wird. Es wird lediglich das mechanische Gleichgewicht basierend auf einer diffus parametrisierten Mikrostruktur berechnet. Die elastischen treibenden Kräfte werden im Bereich der Grenzfläche zwischen Austenit und der zweiten bainitischen Untereinheit ausgewertet. In Abb. 6.3(b) ist $W_{\text{int}}^{\gamma\alpha_{\text{b},2}}$ nach Gl. (6.6) berechnet und lediglich im Bereich der diffusen Grenzfläche zwischen Austenit und der zweiten Untereinheit, wie sie in Abb. 6.3(c) auftritt, dargestellt. In Abb. 6.3(e) und (f) ist die elastische treibende Kraft nach dem in Abschnitt 3.4.3 beschriebenen Elastizitätsmodell berechnet. Die analytisch berechnete Summe der Ergebnisse aus Abb. 6.3(d) und (e)

$$\Delta W_{\text{elast,sum}}^{\gamma\alpha_{\text{b},2}} = W_{\text{int}}^{\gamma\alpha_{\text{b},2}} + \Delta \tilde{W}_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_{\text{b},2}}$$

ist in Abb. 6.3(f) dargestellt und ergibt bis auf numerische Abweichungen aufgrund des impliziten Elastizitätslösers das simulierte Ergebnis in Abb. 6.3(g). Es ist somit erkennbar, dass sich der Einfluss eines vorliegenden Spannungsfeldes, das durch die erste bainitische Untereinheit erzeugt wurde, auf die elastische treibende Kraft einer sich noch nicht im System befindenden, zweiten bainitischen Untereinheit quantifizieren lässt.

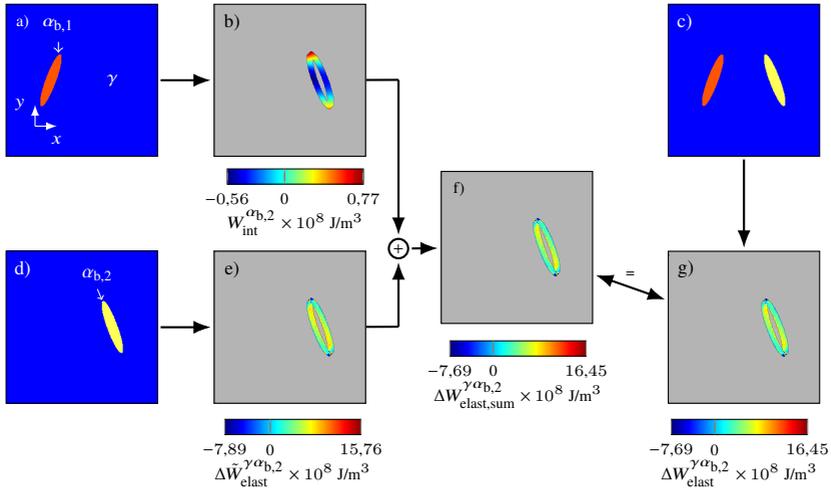


Abbildung 6.3: Superpositionsprinzip der volumetrischen Energiedichtebeiträge. (a, c, d) Mikrostruktur. (b) Elastische Interaktionsenergie nach Gl. (6.6) basierend auf Simulationen mit der Mikrostruktur in (b) und dargestellt im Bereich der Grenzfläche zwischen Austenit und der zweiten bainitischen Untereinheit $\alpha_{b,2}$ aus (d). (e) Elastische treibende Kraft zwischen Austenit und einer zweiten bainitischen Untereinheit basierend auf Simulationen mit der Mikrostruktur in (d). (f) Summe der Ergebnisse aus (b) und (e). (g) Elastische treibende Kraft zwischen Austenit und einer zweiten bainitischen Untereinheit basierend auf Simulationen mit der Mikrostruktur in (c).

6.3 Ergebnisse und Diskussion

Displazives Wachstum

In Abb. 6.4 ist die Mikrostruktur der bainitischen Untereinheit zu verschiedenen Zeitpunkten während des Wachstums dargestellt. Das Wachstum findet, vergleichbar zur martensitischen Umwandlung, ohne Kohlenstoffdiffusion statt. Anders als bei Martensit stoppt die Umwandlung, ohne ein Hindernis (z. B. eine Korngrenze) erreicht zu haben. Durch Plastifizierung im Austenit ist ab einem gewissen Punkt keine weitere Umwandlung mehr möglich [9]. Da dieser Mechanismus in diesem Simulationsaufbau nicht enthalten ist, wird die Simulation zum Zeitpunkt $t = 1\ 306\Delta t$ gestoppt, da das kritische Volumen überschritten wurde. Neben der Mikrostruktur ist die elastische Interaktionsenergie $W_{int}^{\alpha_{b,2}}$

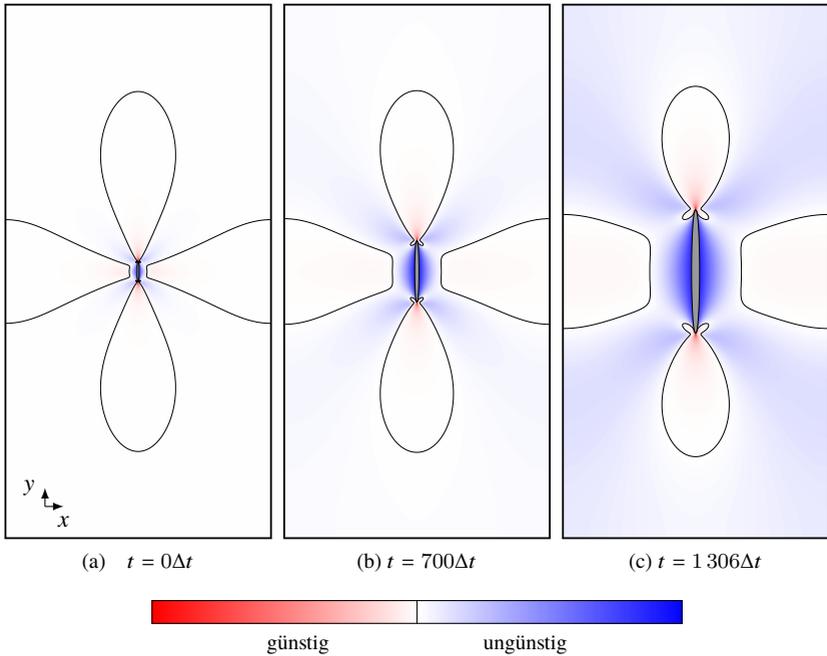


Abbildung 6.4: Wachstum der ersten bainitischen Untereinheit. Zusätzlich zur Mikrostruktur ist die elastische Interaktionsenergie $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}}$ qualitativ dargestellt, die signalisiert, ob der Spannungszustand das Wachstum einer zweiten bainitischen Untereinheit begünstigt oder nicht. Die Isolinie $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} = 0$ ist als schwarze Linie eingezeichnet.

qualitativ in Abb. 6.4 eingetragen. Es ist zu erkennen, dass sich Bereiche ausbilden, in denen der Term $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}}$ positiv bzw. negativ wird. Ein negativer Wert von $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}}$ signalisiert, dass eine zweite Untereinheit an dieser Stelle die elastische Energiedichte reduzieren würde. Die Präsenz der ersten Untereinheit erleichtert die Nukleation und das Wachstum einer zweiten Untereinheit der gleichen Bain-Variante in diesen Regionen. Ein positiver Wert von $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}}$ signalisiert, dass eine zweite Untereinheit an dieser Stelle die elastische Energiedichte erhöhen würde. Die Präsenz der ersten Untereinheit erschwert die Nukleation und das Wachstum einer zweiten Untereinheit der gleichen Bain-Variante in diesen Regionen. Dieser Zusammenhang wird anhand der folgenden Simulation verdeutlicht:

In Abb. 6.5 ist die Fläche einer zweiten bainitischen Untereinheit über der Zeit aufgetragen, die an unterschiedlichen Positionen in das Simulationsgebiet mit einer bainitischen Untereinheit gesetzt wurde. Wie in Abschnitt 6.1 be-

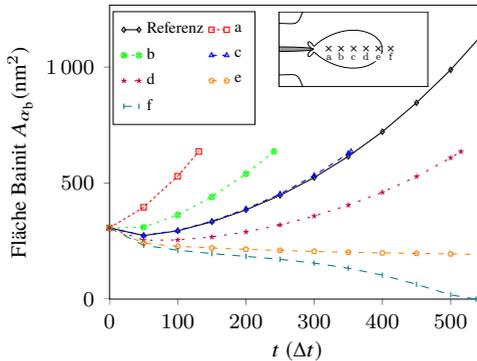


Abbildung 6.5: Zeitlicher Verlauf der Fläche der zweiten bainitischen Untereinheit, die an unterschiedlichen Positionen in das Simulationsgebiet gesetzt wurde.

schrieben, wird die chemische treibende Kraft im Vergleich zum Wachstum der ersten bainitischen Untereinheit reduziert, sodass die zweite Untereinheit lediglich aufgrund der Präsenz der ersten bainitischen Untereinheit an energetisch günstigen Stellen im Gebiet wachsen kann. Es ist zu erkennen, dass die zweite Untereinheit in den Fällen (a-e) unterschiedlich schnell wächst. Um Rechenzeit zu sparen, wird die Simulation gestoppt, wenn eine Fläche von 634 nm^2 überschritten wurde. Je näher die zweite Untereinheit an die Spitze der ersten Untereinheit gesetzt wird, desto schneller wächst sie. Die durch die erste Untereinheit eingebrachten Spannungen, die in der Nähe der ersten Untereinheit am größten sind, begünstigen das Wachstum der zweiten Untereinheit. Für die Simulationsbeispiele (e-f) ist kein Wachstum möglich - die zweite Untereinheit wandelt sich wieder in Austenit um.

Für den Fall, dass die Eigendehnungen keine Volumenausdehnung induzieren, gilt, dass die elastische Interaktionsenergie zwischen Austenit und der ersten Bain-Variante im Zweidimensionalen betragsmäßig gleich der elastischen Interaktionsenergie zwischen Austenit und der zweiten Bain-Variante ist. Sie unterscheiden sich lediglich im Vorzeichen:

$$W_{\text{int}}^{\gamma\alpha_b(v1)} = -W_{\text{int}}^{\gamma\alpha_b(v2)}.$$

Ein Bereich, der energetisch ungünstig für die eine Variante ist, ist energetisch günstig für die andere.

Die elastische Interaktionsenergie $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}}$ ist in Abb. 6.6 quantitativ anhand mehrerer Isolinien dargestellt. Der kleinste Wert von $\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma_{\text{ab}}}$ liegt an der Nadelspitze.

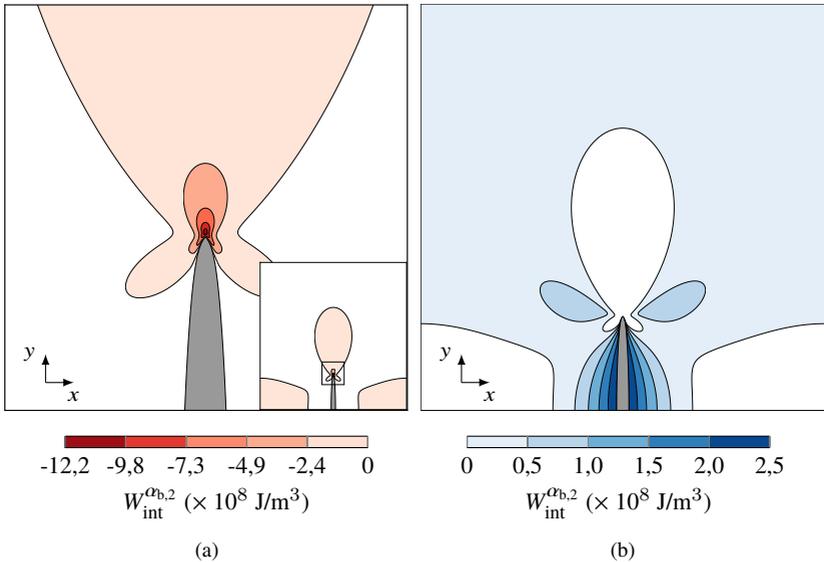


Abbildung 6.6: Elastische Interaktionsenergie $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}}$ zum Zeitpunkt $t = 1\,306\Delta t$. (a) Eine zweite bainitische Untereinheit wird in dem farblich hervorgehobenen Gebiet begünstigt. (b) Eine zweite bainitische Untereinheit wird in dem farblich hervorgehobenen Gebiet nicht begünstigt.

Der größte Wert liegt an der Flanke der ersten Untereinheit. Es fällt auf, dass der Betrag von $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}}$ an der Spitze betragsmäßig um einen Faktor von ca. fünf kleiner ist als an der Flanke. Anhand von Abb. 6.6(a) ist zu erklären, warum bei Simulationen der martensitischen Umwandlung ohne Berücksichtigung der Volumenausdehnung die Nukleation der zweiten Bain-Variante an der Flanke der ersten Variante stattfindet, wie es z. B. in [35] beobachtet wurde.

Ein wesentliches Ergebnis ist die Isolinie für $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} = 0$ zur Einteilung, welche Regionen günstig bzw. ungünstig für die Nukleation einer zweiten bainitischen Untereinheit sind. In Abb. 6.7 ist das Ergebnis einer Validierungsstudie dargestellt. Jeder Kreis symbolisiert eine Phasenfeldsimulation, wobei die Position der zweiten bainitischen Untereinheit variiert wurde und das Ergebnis, ob

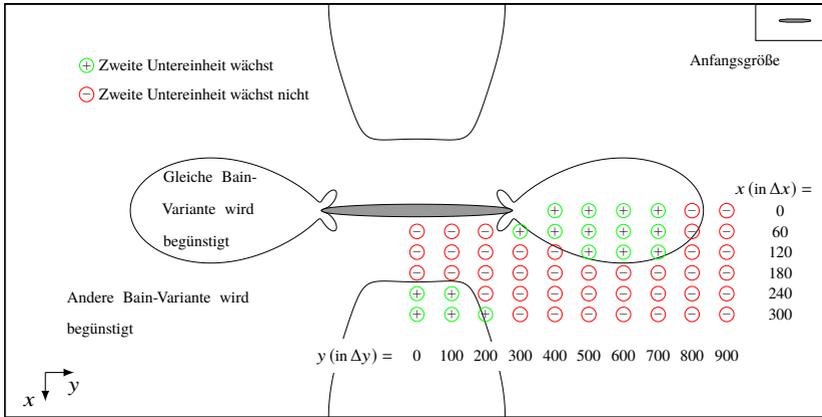


Abbildung 6.7: Energielandschaft um eine bainitische Untereinheit. Jeder Kreis steht für eine Simulation, bei der eine zweite bainitische Untereinheit an der Stelle des Kreises gesetzt wurde.

die Untereinheit wächst oder nicht, über die Farbe bzw. das Symbol (Plus- oder Minuszeichen) eingetragen ist. Es ist ein allgemeiner Trend zu erkennen: Solange die zweite Untereinheit innerhalb der Region $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} < 0$ gesetzt wird, wächst sie, außerhalb nicht. Es gibt jedoch einige Ausnahmen: Der Punkt $x = 60\Delta x$, $y = 300\Delta y$ liegt im Bereich $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} > 0$, jedoch wächst die zweite Untereinheit. Ein Teil der zweiten bainitischen Untereinheit liegt bereits zu Beginn der Simulation im Bereich $\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_{\text{b}}} < 0$, sodass sie durch die Präsenz der ersten Variante lokal unterschiedliche Einflüsse erfährt. Ein gewisser Teil der Grenzfläche zwischen der zweiten bainitischen Untereinheit und dem Austenit wird durch die erste Untereinheit am Wachstum gehindert, ein anderer Teil beim Wachsen unterstützt. Durch die Anfangsgröße ist somit das Wachstum einer zweiten Untereinheit zu erklären, auch wenn der Mittelpunkt der Untereinheit zu Beginn der Simulation im Bereich $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} > 0$ liegt.

Die bainitische Untereinheit, die an dem Punkt $x = 0\Delta x$, $y = 800\Delta y$ gesetzt wurde, schrumpft, obwohl der Mittelpunkt im Bereich $\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_{\text{b}}} < 0$ liegt. Dazu gibt es zwei Erklärungen: Zum einen liegt ein Teil der Untereinheit im Bereich $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} > 0$. Zum anderen kann nicht die Aussage getroffen werden, dass die zweite Untereinheit wachsen muss, wenn sie vollständig im Bereich $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} < 0$ liegt. Durch die Reduktion der chemischen treibenden Kraft im Vergleich zum Wachstum der ersten Untereinheit würde die zweite Untereinheit schrumpfen.

Der *exakte* Wert, ab welcher chemischen treibenden Kraft die erste Untereinheit wachsen kann, wurde nicht bestimmt. Daher kann nicht ausgeschlossen werden, dass eine zweite Untereinheit im Bereich $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} < 0$ liegt, der Beitrag jedoch zu klein ist, um die Reduktion der chemischen treibenden Kraft auszugleichen und ein Wachstum zu ermöglichen.

Eine qualitativ ähnliche Isolinie für $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} = 0$, die um eine bainitische Untereinheit liegt, ist in [59] basierend auf der Arbeit von Olson und Owen [247] zu finden. Im nächsten Schritt wird eine zweite Untereinheit an die Position $x = 60\Delta x, y = 300\Delta y$ gesetzt und solange wachsen gelassen, bis das Volumen das kritische Volumen überschreitet. Das Ergebnis ist in Abb. 6.8 dargestellt. Durch die Präsenz der zweiten Untereinheit ändert sich die Isolinie

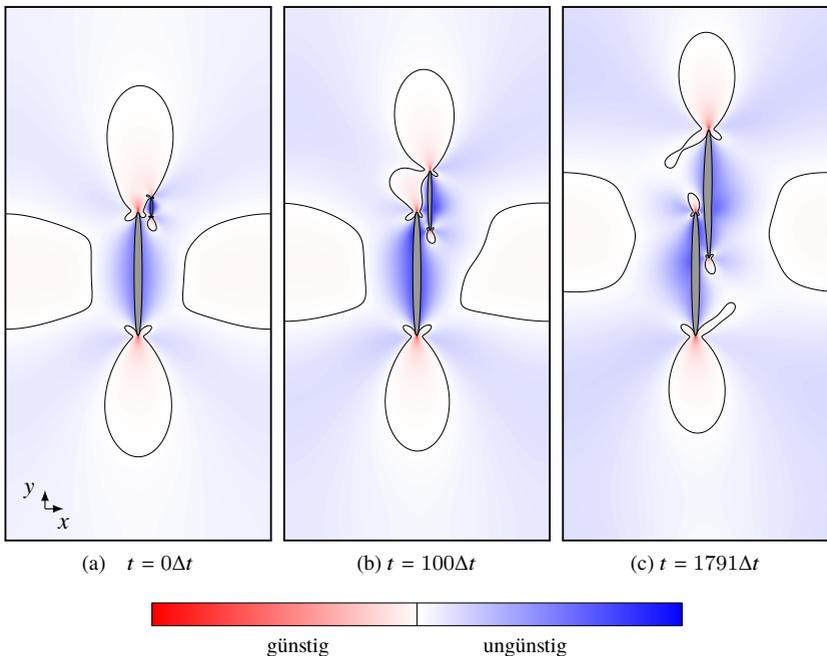


Abbildung 6.8: Wachstum einer zweiten bainitischen Untereinheit.

für $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} = 0$ bereits zu Beginn der Simulation bei $t = 0\Delta t$. Die erste Untereinheit beeinflusst das Wachstumsverhalten der zweiten Untereinheit. Zum einen ist das Wachstum - wie bereits ausführlich erläutert - lediglich aufgrund der

Präsenz der ersten Untereinheit möglich. Zum anderen ist zu erkennen, dass das Wachstum der zweiten bainitischen Untereinheit vor allem in der unteren Hälfte, die nahe an der ersten Untereinheit liegt, nicht symmetrisch stattfindet. Hier findet eine Interaktion über das Spannungsfeld statt. Aus Abb. 6.6(b) ist zu entnehmen, dass an der Flanke der ersten Untereinheit $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}}$ mit steigender Entfernung geringer wird. Daher bestrebt die zweite Untereinheit, den Abstand zur Flanke der ersten Untereinheit zu erhöhen. Zum Zeitpunkt $t = 1791\Delta t$ ist das Volumen beider Untereinheiten ungefähr gleich groß. Die Isolinie für $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}} = 0$ zeigt mögliche Nukleationsstellen für eine dritte Untereinheit auf: Im Bereich der Spitzen der Untereinheiten befinden sich die betragsmäßig höchsten Werte von $W_{\text{int}}^{\alpha_{\text{b},2}}$, sodass in diesen Regionen eine Nukleation energetisch begünstigt wird. Dieser Mechanismus, bestehend aus Wachstums-, Stopp und Nukleationsprozessen, kann zu einer bainitischen Nadel führen, die, wie experimentell beobachtet [248], aus einer Vielzahl bainitischer Untereinheiten besteht.

Kohlenstoffumverteilung

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Simulation der Kohlenstoffumverteilung aus der ersten bainitischen Untereinheit diskutiert. In Abb. 6.9 ist die Kohlenstoffverteilung zu drei verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Nachdem

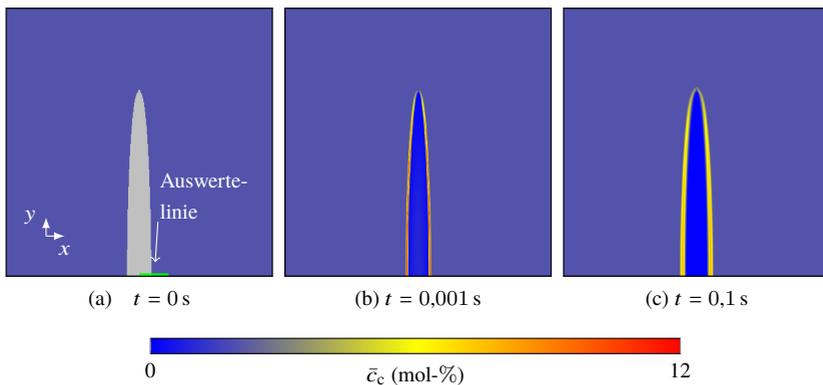


Abbildung 6.9: Kohlenstoffumverteilung aus einer übersättigten bainitischen Untereinheit. Zum Zeitpunkt $t = 0$ s beträgt die Kohlenstoffkonzentration im gesamten Gebiet 1,968 mol-%. Die Mikrostruktur der bainitischen Untereinheit ist in (a) grau überlagert.

das Wachstum zum Stillstand gekommen ist, liegt zum Zeitpunkt $t = 0$ s eine homogene Kohlenstoffverteilung von 1,968 mol-% im gesamten Gebiet vor. Aufgrund der unterschiedlichen chemischen Potentiale diffundiert der Kohlenstoff aus der übersättigten bainitischen Untereinheit in den umliegenden Austenit. Da die Diffusivität in Austenit deutlich niedriger ist, entsteht eine Kohlenstoffanreicherung im Bereich der Austenit/Bainit-Grenzfläche. Diese Kohlenstoffanreicherung verändert die chemische treibende Kraft, die für die Umwandlung einer zweiten bainitischen Variante zur Verfügung steht. In Abb. 6.10 ist dieser Zusammenhang dargestellt. Für eine Kohlenstoffkonzen-

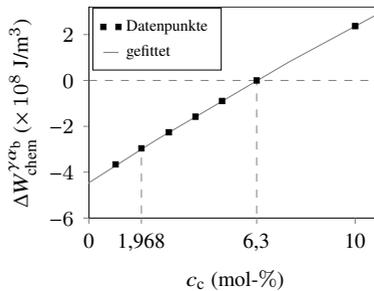


Abbildung 6.10: Differenz der freien chemischen Energie zwischen Austenit und Bainit als Funktion der Kohlenstoffkonzentration.

tration von $c_c = 6,3$ mol-% sind Austenit und Bainit bei einer Temperatur von $T = 573,15$ K im Gleichgewicht, sodass keine chemische treibende Kraft für ein Wachstum einer zweiten bainitischen Untereinheit vorhanden ist. In Abb. 6.11 ist die Kohlenstoffkonzentration entlang der in Abb. 6.9 eingezeichneten Auswertelinie dargestellt. Nach einer kurzen Zeit von 0,000 2 s ist ein starker Kohlenstoffkonzentrationsgradient innerhalb der bainitischen Untereinheit zu erkennen. Während die Kohlenstoffkonzentration in der Mitte der bainitischen Untereinheit nur leicht unterhalb der anfänglichen Konzentration liegt, ist sie in der Nähe der Grenzfläche zwischen der bainitischen Untereinheit und dem Austenit deutlich gefallen. Die phasenanteilig gewichtete Kohlenstoffkonzentration ist innerhalb der diffusen Grenzfläche gestiegen, da der Austenit den aus der bainitischen Untereinheit heraus diffundierten Kohlenstoff aufnimmt. Es bildet sich eine Kohlenstoffakkumulation an der Grenzfläche, die mit fortschreitender Zeit weiter in den Austenit hineinwandert, wobei der Maximalwert immer kleiner wird. In diesem Diagramm ist zudem ersichtlich, dass sich

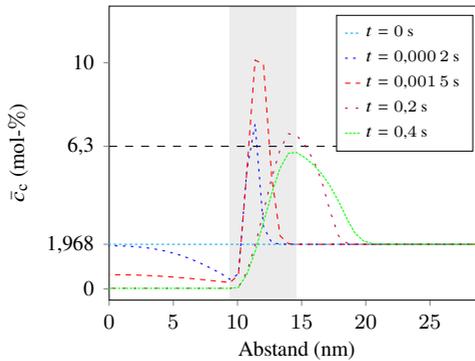


Abbildung 6.11: Kohlenstoffkonzentrationsverläufe für unterschiedliche Zeitpunkte. Die Verläufe sind entlang der in Abb. 6.9 eingezeichneten Auswertelinie dargestellt. Der Bereich der diffusen Grenzfläche zwischen der bainitischen Untereinheit und dem Austenit ist grau unterlegt.

Bereiche ausbilden, in denen die Kohlenstoffkonzentration den Schwellenwert von $c_c = 6,3 \text{ mol-\%}$ überschreitet. In Abb. 6.12 sind diese Bereiche neben der Mikrostruktur mit $c_c^\gamma > 6,3 \text{ mol-\%}$ hervorgehoben. Zunächst bildet sich um die bainitische Untereinheit ein dünner Film, in dem der Kohlenstoffgehalt den Schwellenwert übersteigt. Eine Ausnahme bildet die Spitze. In diesem Bereich ist genügend Austenit umgeben, sodass es zu keiner übermäßigen Akkumulation kommt. Im weiteren Verlauf wandert die Grenze, an der der Grenzwert überschritten wird, von der Spitze ausgehend in Richtung Mitte der bainitischen Untereinheit. Die Fläche, in der der Schwellenwert überschritten wird, ist in Abb. 6.13 über der Zeit aufgetragen. Nach einem raschen Anstieg ist ab der Zeit $t = 0,43 \text{ s}$ kein Bereich mehr vorhanden, in dem der Kohlenstoffgehalt den Schwellenwert übersteigt¹.

¹ In Abb. 6.11 wird die phasenanteilig gewichtete Konzentration \bar{c}_c dargestellt. Auch wenn in diesem Schaubild zum Zeitpunkt $t = 0,4 \text{ s}$ die Kohlenstoffkonzentration \bar{c}_c entlang der Auswertelinie unterhalb des Schwellenwertes liegt, gibt es noch Bereiche mit $\phi^\gamma > 0,5$ und $c_c^\gamma > 6,3 \text{ mol-\%}$.

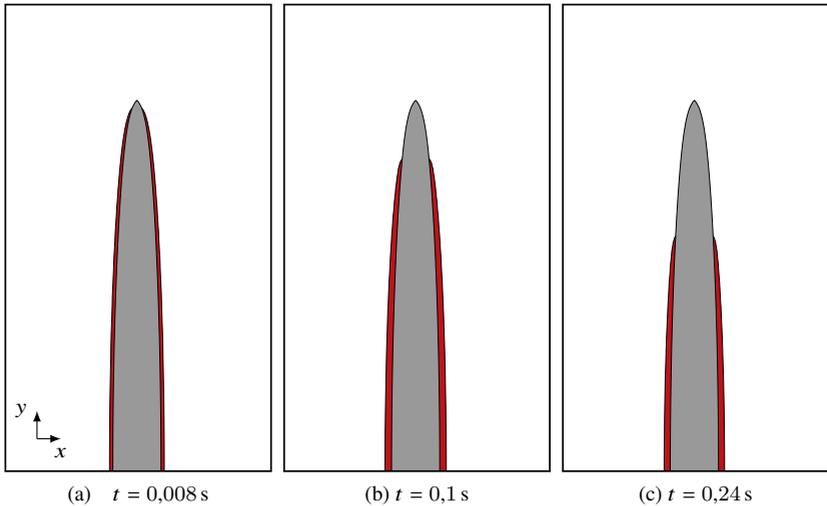


Abbildung 6.12: Kohlenstoffreicher Bereich, in dem ein Wachstum einer zweiten bainitischen Untereinheit ungünstig ist. Dargestellt ist die Mikrostruktur ($\phi^{a_{b,1}} > 0,5$) und der Bereich, in dem die Kohlenstoffkonzentration c_c^{γ} den Schwellenwert von $c_c = 6,3 \text{ mol-\%}$ überschreitet.

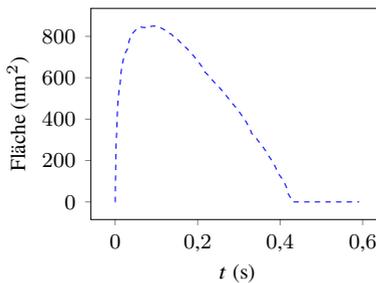


Abbildung 6.13: Fläche mit einer Kohlenstoffkonzentration von $c_c^{\gamma} > 6,3 \text{ mol-\%}$.

Kombinierte Betrachtung

Für den Fall, dass die zweite Untereinheit nicht kurz nach dem Stoppen der ersten Untereinheit nukleiert und wächst, diffundiert der Kohlenstoff aus der ersten, übersättigten bainitischen Untereinheit. Durch die inhomogene Kohlen-

stoffverteilung ändert sich die chemische treibende Kraft für die Nukleation bzw. das Wachstum der zweiten Variante. In Abb. 6.14 ist die Energielandschaft im Bereich der Spitze der ersten bainitischen Untereinheit dargestellt. Zum

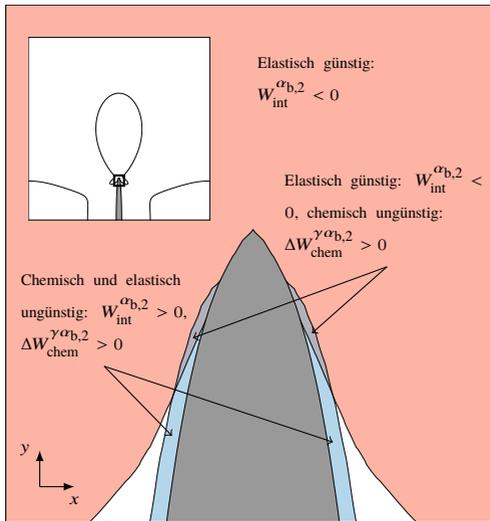


Abbildung 6.14: Chemische und elastische Energielandschaft im Bereich der Spitze einer bainitischen Untereinheit. In Rot ist der Bereich mit $W_{\text{int}}^{\alpha_{b,2}} < 0$ dargestellt. In Blau ist der Bereich dargestellt, in dem der Schwellenwert von $c_c^\gamma > 6,3$ mol-% ($\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_{b,2}} > 0$) zum Zeitpunkt $t = 0,006$ s überschritten ist.

Zeitpunkt $t = 0,006$ s stellt sich nach Beginn der Kohlenstoffdiffusion an der Spitze eine komplexe Situation ein. Es existiert eine Fläche, die aus elastischer Sicht eine günstige Stelle, aus chemischer Sicht jedoch eine ungünstige Stelle für die Nukleation und das Wachstum der zweiten bainitischen Untereinheit bildet.

Im nächsten Schritt werden beide Kriterien miteinander verrechnet: Ein Wachstum der ersten bainitischen Untereinheit ist möglich, wenn

$$\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_{b,1}} + \Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_{b,1}} + \Delta W_{\text{intf}}^{\gamma\alpha_{b,1}} < 0.$$

Aus den Simulationen für das Wachstum der ersten bainitischen Untereinheit ist bekannt, dass ein Wachstum möglich ist, wenn die chemische treibende Kraft

größer als 93 % von $\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_b} = -2,96 \times 10^8 \text{ J/m}^3$ ist. Somit ist die kritische chemische treibende Kraft $\Delta W_{\text{chem,krit}}^{\gamma\alpha_b,1} = -2,75 \times 10^8 \text{ J/m}^3$.

Ein Wachstum der zweiten bainitischen Untereinheit ist möglich, wenn

$$\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_b,2} + \Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_b,2} + \Delta W_{\text{intf}}^{\gamma\alpha_b,2} < 0. \quad (6.7)$$

Nun wird von dem in Abschnitt 6.2 vorgestellten Superpositionsprinzip Gebrauch gemacht. Der Term $\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_b,2}$ kann aus der Summe der elastischen Interaktionsenergie $W_{\text{int}}^{\alpha_b,2}$ und der elastischen treibenden Kraft der ersten Untereinheit, $\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_b,1}$, berechnet dargestellt werden, da die Morphologie zu Beginn des Wachstums gleich ist und periodische Randbedingungen gewählt wurden

$$\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_b,2} = \Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_b,1} + W_{\text{int}}^{\alpha_b,2}. \quad (6.8)$$

Zudem ist zu Beginn der Einfluss der Krümmungsminimierung identisch:

$$\Delta W_{\text{intf}}^{\gamma\alpha_b,1} = \Delta W_{\text{intf}}^{\gamma\alpha_b,2}. \quad (6.9)$$

Gl. (6.8) und Gl. (6.9) in Gl. (6.7) eingesetzt ergibt:

$$\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_b,1} + \Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_b,2} + \underbrace{\Delta W_{\text{intf}}^{\gamma\alpha_b,1} + W_{\text{int}}^{\alpha_b,2}}_{\approx -\Delta W_{\text{chem,krit}}^{\gamma\alpha_b,1}} < 0.$$

Damit gilt, dass ein Wachstum der zweiten bainitischen Untereinheit möglich ist, wenn

$$\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_b,2} + \Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_b,2} - \Delta W_{\text{chem,krit}}^{\gamma\alpha_b,1} < 0.$$

Sowohl $W_{\text{int}}^{\gamma\alpha_b,2}$ (nach Gl. (6.6)) als auch $\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_b,2}$ (mithilfe des gefitteten Verlaufs aus Abb. 6.10) können in jeder Position ausgewertet werden, und mit der Konstante $\Delta W_{\text{chem,krit}}^{\gamma\alpha_b,1}$ kann eine Isolinie für

$$\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_b,1} + \Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_b,2} - \Delta W_{\text{chem,krit}}^{\gamma\alpha_b,1} = 0 \quad (6.10)$$

berechnet werden. Dies ist in Abb. 6.15 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass sich in dem Bereich, der in Abb. 6.14 als elastisch günstig, aber chemisch ungünstig gekennzeichnet ist, Unterschiede ausmachen lassen. Durch die kombinierte

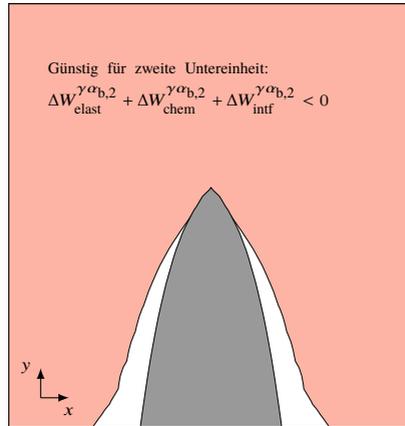


Abbildung 6.15: Kombinierte Energielandschaft im Bereich der Spitze einer bainitischen Untereinheit. Die eingezeichnete Isolinie ist nach Gl.(6.10) berechnet. Es ist der gleiche Ausschnitt wie in Abb. 6.14 dargestellt.

Betrachtung wird diese Region für das Wachstum ungünstig, obwohl aus elastischer Sicht eine zweite Untereinheit die Energie reduzieren würde.

6.4 Fazit

In diesem Kapitel wurde ein Modell zur Simulation der bainitischen Umwandlung, basierend auf einer Multiphasenfeldformulierung, vorgestellt. Das Wachstum einer bainitischen Untereinheit und die Kohlenstoffdiffusion wurden sequentiell betrachtet. Um ein besseres Verständnis aufzubauen, warum sich die typische Morphologie einer bainitischen Nadel, bestehend aus einer Vielzahl an Untereinheiten, bildet, wurden Methoden zur Quantifizierung der elastischen und chemischen Energielandschaft in der Umgebung einer bainitischen Untereinheit vorgestellt. Basierend auf energetischen Gesichtspunkten können Regionen identifiziert werden, die für die Nukleation und das Wachstum einer zweiten bainitischen Untereinheit günstig sind. Im Kontext der Modellierung der martensitischen Umwandlung ist der Mechanismus der autokatalytischen Nukleation auf phänomenologischer Basis bereits gut verstanden. Die hier

vorgestellte Methodik kann zur Quantifizierung auch bei der Modellierung der Martensitumwandlung eingesetzt werden.

7 Wachstum von Widmanstätten-Ferrit

In diesem Kapitel wird in einem ersten Schritt gezeigt, dass das in Kapitel 3 vorgestellte chemoelastische Multiphasenfeldmodell die Simulation von Widmanstätten-Ferrit auf Basis der displaziven Theorie ermöglicht. Im Vergleich zu anderen Phasenfeldmodellen für Widmanstätten-Ferrit, die Elastizität verwenden [78, 82, 83, 88], basiert das vorgestellte Modell auf den mechanischen Sprungbedingungen zur Berechnung der elastischen treibenden Kräfte. Damit wird an einer Grenzfläche zwischen zwei Phasen im Phasenfeldkontext die Konfigurationsbilanz der treibenden Kräfte mit

$$\llbracket W_{\text{chem}} \rrbracket - \sum_{i=1}^{K-1} \mu_i \llbracket c_i \rrbracket + \llbracket W_{\text{elast}} \rrbracket - \llbracket \varepsilon \rrbracket \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = -\gamma_{\alpha\beta\kappa} \quad (7.1)$$

abgebildet [158]. Eine detaillierte Validierung des Gleichgewichtszustandes nach Gl. (7.1) ist in [249] gezeigt.

Im zweiten Schritt werden zwei Widmanstätten-Nadeln betrachtet, die in einem gewissen Abstand nebeneinander wachsen und unter anderem über das Spannungsfeld miteinander interagieren. Teile der in diesem Kapitel vorgestellten Methodiken sind in dem referierten Journal-Artikel [158] veröffentlicht.

7.1 Modellierung und Simulationsaufbau

Zur Beschreibung der chemoelastischen Widmanstätten-Ferrit-Umwandlung werden neben den Grenzflächenbeiträgen chemische und elastische Beiträge betrachtet [78, 82, 83, 158]. Somit ist das Energiefunktional gegeben mit

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \bar{c}) = \int_V W_{\text{intf}}(\boldsymbol{\phi}, \nabla \boldsymbol{\phi}) + \bar{W}_{\text{elast}}(\boldsymbol{\phi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) + \bar{W}_{\text{chem,d}}(\boldsymbol{\phi}, \bar{c}) dV.$$

Im Gegensatz zum Modell zur Beschreibung der Martensitumwandlung ist die Kinetik durch die Kohlenstoffdiffusion bestimmt, sodass zur Berechnung der chemischen Energiedichte $\bar{W}_{\text{chem,d}}(\phi, \bar{c})$ das in Kapitel 3.4.2 beschriebene Modell Anwendung findet. Dabei wird die zeitliche Evolution von Kohlenstoff berücksichtigt.

Als Beispielmaterial werden die physikalischen Parameter für eine Eisen-Kohlenstofflegierung bei einer durchschnittlichen Kohlenstoffkonzentration von 3,6 mol-% und einer Temperatur von $T = 873$ K verwendet, die auf der Arbeit von Kubendran Amos et. al. [158] basieren. Es wird angenommen, dass Widmanstätten-Ferrit eine Bain-Orientierungsbeziehung (vgl. Abschnitt 4.2) zum parentalen Austenit bildet. Alle Widmanstätten-Ferrit-Nadeln in den folgenden Simulationsbeispielen stellen die erste Bain-Variante dar. Die Eigendehnungen betragen $\varepsilon_1 = 0,08$ und $\varepsilon_3 = -0,08$. Der Elastizitätsmodul beträgt $E = 130$ GPa und die Poissonzahl ist $\nu = 0,33$. Die Grenzflächenenergie zwischen Ferrit und Austenit wird mit $\gamma = 0,2$ J/m² angenommen. Zur Beschreibung der freien chemischen Energiedichte wird die Ansatzfunktion (6.2) verwendet. Die Koeffizienten der freien chemischen Energiedichte basierend auf CALPHAD-Daten für die Simulation von Widmanstätten-Ferrit sind in Tabelle 7.1 aufgeführt. Die Diffusivität von Kohlenstoff in Ferrit wird

Tabelle 7.1: Koeffizienten der freien chemischen Energiedichte für eine Temperatur von $T = 873$ K und einer durchschnittlichen Kohlenstoffkonzentration von 3,6 mol-% bzw. 0,8 Ma.-%. Die Werte basieren auf der Arbeit von Kubendran Amos et. al. [158].

Phase	Koeffizient	Wert (J/mol)
Austenit	O^γ	102 806
	P^γ	25 519
	Q^γ	-33 520
Ferrit	$O^{\alpha_{\text{wf}}}$	15 000 000
	$P^{\alpha_{\text{wf}}}$	22 400
	$Q^{\alpha_{\text{wf}}}$	-34 189

mit $D_\alpha = 1 \times 10^{-9}$ m²/s und in Austenit mit $D_\gamma = 0,6 \times 10^{-9}$ m²/s angenommen.

Folgende Simulationen werden durchgeführt:

- Phasenfeldsimulation des Wachstums einer einzelnen Widmanstätten-Ferrit-Nadel, die in der Mitte des Simulationsgebietes liegt. Die initiale Mikrostruktur ist in Abb. 7.1(a) dargestellt. Diese Anfangskonfiguration wird in diesem Kapitel als „Setting I“ betitelt.
- Phasenfeldsimulation des Wachstums zweier Widmanstätten-Ferrit-Nadeln, die sich in einem gewissen Abstand zueinander befinden. Beide Widmanstätten-Ferrit-Nadeln stellen die erste Bain-Variante dar. Die initiale Mikrostruktur ist in Abb. 7.1(b) dargestellt. Diese Anfangskonfiguration wird in diesem Kapitel als „Setting II“ bezeichnet.
- Phasenfeldsimulation des Wachstums einer Widmanstätten-Ferrit-Nadel, die die gleiche Anfangsposition wie im Setting II aufweist. Die initiale Mikrostruktur ist in Abb. 7.1(c) dargestellt. Diese Anfangskonfiguration wird in diesem Kapitel „Setting III“ genannt.

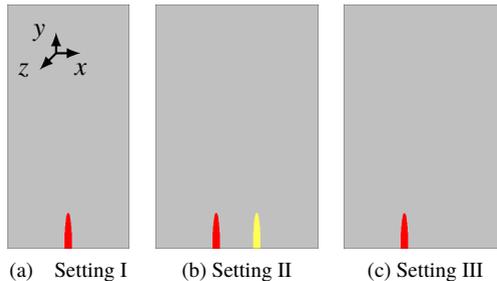


Abbildung 7.1: Initiale Mikrostruktur für die Simulation des Wachstums von Widmanstätten-Ferrit. (a) Einzelne Nadel zentriert. (b) Zwei Nadeln. (c) Einzelne Nadel seitlich. Die Position der roten Nadel ist in (b) und (c) identisch.

Das parentale Austenitkorn ist um 45° um die z-Achse gedreht, um ein Wachstum entlang einer Koordinatenachse zu ermöglichen. Für Setting I beträgt die Auflösung des Simulationsgebietes 299×600 , für Setting II und III jeweils 399×600 Diskretisierungspunkte, wobei $\Delta x = \Delta y = 2 \times 10^{-9}$ m beträgt. In Setting II beträgt der Abstand zwischen den beiden Nadeln der ersten Bain-Variante 100 Diskretisierungspunkte. Für die Phasenfelder wird an den Simulationsrändern ein Gradient von null angenommen. In x- und y-Richtung gilt eine spannungsfreie Randbedingung, während in z-Richtung ein ebener Dehnungszustand angenommen wird.

7.2 Ergebnisse und Diskussion

In Abbildung 7.2 ist das Wachstum der einzelnen Widmanstätten-Ferrit-Nadeln für Setting I dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Nadel nach einer Anpassung

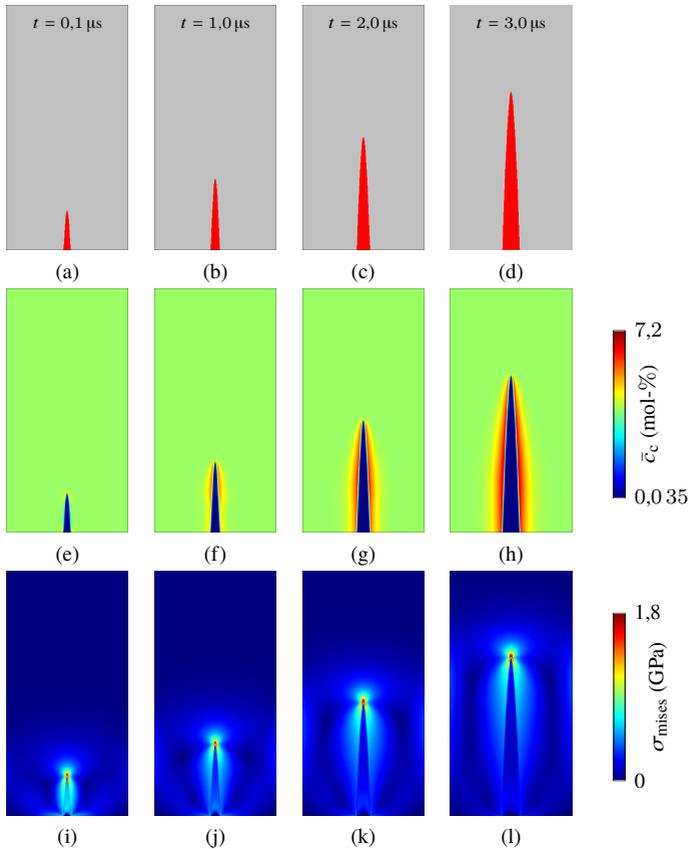


Abbildung 7.2: Wachstum einer einzelnen Widmanstätten-Nadel. (a-d) Mikrostruktur. (e-h) Kohlenstoffkonzentration. (i-l) Von Mises-Spannung. Die korrespondierenden Zeitpunkte sind pro Spalte jeweils in der Abbildung der Mikrostruktur angegeben.

der initialen Form aufgrund hoher elastischer treibender Kräfte entlang der y-Achse in den Austenit wächst. Die chemische treibende Kraft ist dabei groß

genug, um die elastische und die durch die Krümmungsminimierung induzierte Kraft, die beide dem Wachstum entgegenwirken, zu überwinden. Aufgrund der geringeren Gleichgewichtskonzentration von Ferrit im Vergleich zu Austenit, führt das Wachstum zu einer Kohlenstoffanreicherung an der Umwandlungsfront, was in den Abb. 7.2(a-d) zu erkennen ist. Die höchste von Mises-Spannung befindet sich an der Nadelspitze. Eine Validierung des Modells anhand der Wachstumsgeschwindigkeit der Widmanstätten-Ferrit-Nadel an der Spitze bzw. an der Flanke ist in [158] gegeben.

In Abbildung 7.3 ist das Ergebnis für Setting II und III zum Zeitpunkt $t = 3,7 \mu\text{s}$ dargestellt. Bei genauer Betrachtung fällt auf, dass sich die Gestalt der roten

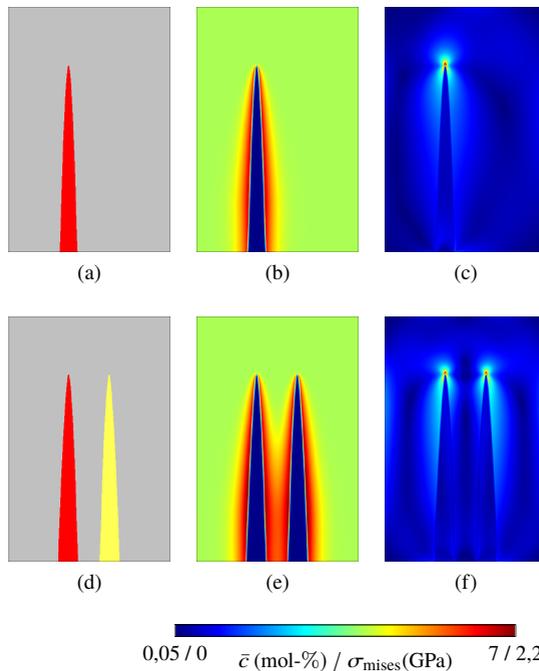


Abbildung 7.3: Simulierte Widmanstätten-Struktur zum Zeitpunkt $t = 3,7 \mu\text{s}$. (a, d) Mikrostruktur. (b, e) Kohlenstoffkonzentration. (c, f) Von Mises-Spannung. Die Ergebnisse für Setting II sind in der ersten Zeile und für Setting III in der zweiten Zeile dargestellt.

Nadel unterscheidet. Dies wird deutlicher, wenn die Entwicklung des Volu-

mens der roten Nadel betrachtet wird, die in Abb. 7.4 dargestellt ist. Es ist

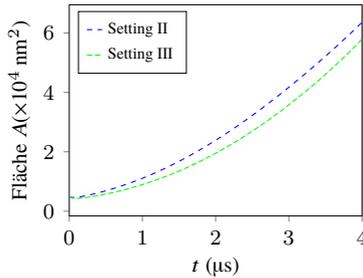


Abbildung 7.4: Zeitliche Entwicklung der Fläche einer Widmanstätten-Nadel. Die Fläche bezieht sich jeweils auf die in Abb. 7.1(b, c) rot dargestellten Nadeln.

zu erkennen, dass in beiden Fällen das Volumen zu Beginn der Simulation kurzzeitig abnimmt. Dabei wird, wie im vorangegangenen Beispiel, die Form angepasst, um die elastische Energie zu minimieren. Im weiteren Verlauf ist ersichtlich, dass die rote Nadel in Setting II schneller wächst. Die Ursache liegt in der Interaktion der beiden Nadeln. Diese Interaktion findet auf zwei Wegen statt. Da in jedem Zeitschritt das statische Gleichgewicht ($\nabla \cdot \sigma = \mathbf{0}$) gilt, findet von Anfang an eine Interaktion über das Spannungsfeld statt. Dies lässt sich anhand der gemittelten elastischen treibenden Kraft zwischen Austenit und der roten Ferrit-Nadel quantifizieren. In Abb. 7.5 ist die in der diffusen Grenzfläche gemittelte chemische ($\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_{\text{wf}}}$), elastische ($\Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_{\text{wf}}}$) und die aus beiden Beiträgen resultierende ($\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha_{\text{wf}}} + \Delta W_{\text{elast}}^{\gamma\alpha_{\text{wf}}}$) treibende Kraft über der Zeit aufgetragen. In Abb. 7.5(b) ist zum Zeitpunkt $t = 0 \mu\text{s}$ zu erkennen, dass im Vergleich zu Setting II in Setting III eine höhere elastische treibende Kraft vorhanden ist. Wie aus Kapitel 6 ersichtlich wurde, können sich Bain-Varianten gegenseitig über das Spannungsfeld beeinflussen. In Abb. 7.6 ist die elastische Interaktionsenergie für Setting III dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die rechte Nadel in einer Region liegt, in welcher die elastische Energie durch das Auftreten einer zweiten Nadel der gleichen Bain-Variante reduziert wird. Damit ist zu erklären, warum die rote Nadel in Setting II zum Zeitpunkt $t = 0 \mu\text{s}$ eine betragsmäßig geringere elastische treibende Kraft hat.

Da zum Zeitpunkt $t = 0 \mu\text{s}$ sowohl die Mikrostruktur als auch die Konzentrationsverteilung der roten Nadel in beiden Settings identisch ist, gibt es keinen Unterschied in der chemischen treibenden Kraft. Die geringere elastische

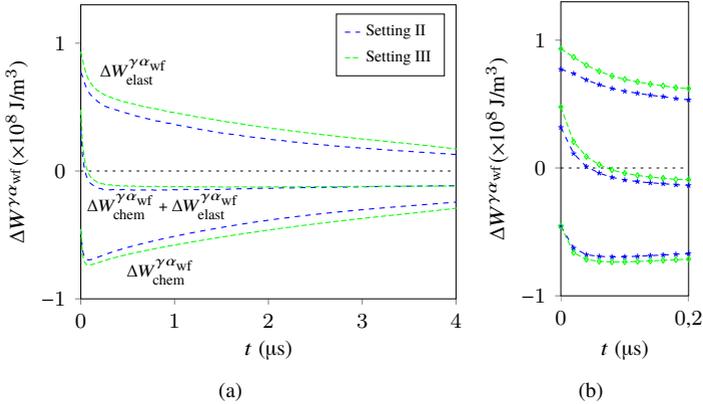


Abbildung 7.5: Im Simulationsgebiet gemittelte treibende Kraft. Die Auswertung erfolgt in der diffusen Grenzfläche zwischen Austenit und der in Abb. 7.1(b, c) rot dargestellten Nadel. In (b) ist ein Ausschnitt von (a) für $0 < t < 0,2 \mu\text{m}$ gezeigt. Die Legende und Beschriftung für (b) ist (a) zu entnehmen.

treibende Kraft führt zu einer betragsmäßig größeren resultierenden treibenden Kraft, sodass das Volumen in Setting II zu Beginn nicht so stark abfällt wie in Setting III.

Wie in Abb. 7.3(e) zu erkennen ist, ergibt sich, wie auch in anderen Studien beobachtet [85, 87], eine Kohlenstoffakkumulation zwischen den zwei Widmanstätten-Nadeln, sodass auch eine Interaktion über das Konzentrationsfeld stattfindet.

7.3 Fazit

In diesem Kapitel wurde das chemoelastische Wachstum von Widmanstätten-Ferrit simulativ abgebildet. Ähnlich zu den Vorgängerarbeiten [78, 82] kann die nadelförmige Struktur von Widmanstätten-Ferrit mithilfe anisotroper Eigendehnungen und ohne eine Anisotropie der Grenzflächenenergie erzielt werden. Mit diesem Modellansatz wurde erstmals die chemoelastische Konfigurationsbilanz nach Gl. (7.1) für eine metallurgische Fragestellung im Rahmen einer Phasenfeldmodellierung verwendet, wodurch eine quantitative Abbildung der

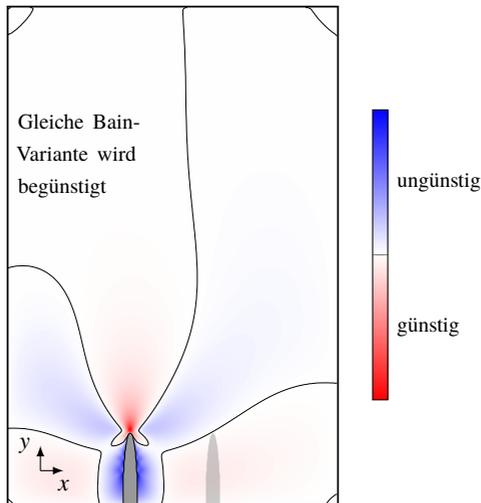


Abbildung 7.6: Qualitative Darstellung der elastischen Interaktionsenergie für Setting III. Die Position der rechten Nadel ist als Orientierungshilfe zusätzlich eingezeichnet.

treibenden Kräfte ermöglicht wird.

Zudem wurde das Wachstum zweier Widmanstätten-Nadeln untersucht und festgestellt, dass das Wachstum einer zweiten Nadel der gleichen Bain-Variante aufgrund des Spannungszustandes in einem gewissen Abstand zur ersten Nadel energetisch begünstigt wird.

8 Sequenziell gekoppelte Wärmebehandlung von Dualphasenstahl

In diesem Kapitel wird eine virtuelle Prozesskette zur Simulation der Mikrostrukturentwicklung während der Wärmebehandlung von Dualphasenstahl aufgebaut. Das entwickelte Vorgehen ermöglicht, basierend auf einer Finite-Elemente-Simulation (FE-Simulation) des Kaltwalzens, die Mikrostrukturentwicklung der nachfolgenden Prozessschritte mithilfe des in Kapitel 3 eingeführten Multiphasenfeldmodells simulativ zu beschreiben. Dazu wird eine Prozessroute zur Herstellung von Dualphasenstahl betrachtet, die die Teilschritte Kaltwalzen, interkritisches Glühen und Abschrecken umfasst und in Abb 8.1 dargestellt ist. Ein vollständig austenitisiertes Blech wird langsam abgekühlt, sodass sich

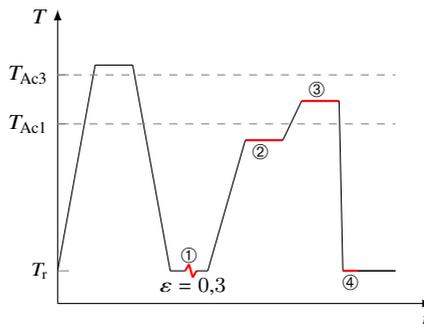


Abbildung 8.1: Schematische Darstellung einer Prozessroute zur Herstellung von Dualphasenstahl. Die farblich markierten Teilschritte, bestehend aus Kaltwalzen (①), Rekristallisation (②), Austenitumwandlung (③) und martensitischer Umwandlung (④), werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit berücksichtigt.

eine ferritisch-perlitische Mikrostruktur bildet. Das Werkstück erfährt durch das Kaltwalzen eine Dickenreduktion von 30 % und wird anschließend auf

eine Temperatur unterhalb der Ac1-Temperatur gebracht. Hier rekristallisieren die deformierten ferritischen Bereiche vollständig. Im folgenden Schritt findet das interkritische Glühen oberhalb der Ac1-Temperatur statt, was zu einer ferritisch-austenitischen Mikrostruktur führt. Somit ist eine entkoppelte Untersuchung der Rekristallisation und Austenitisierung möglich. Im abschließenden Abschreckprozess wandelt sich Austenit in Martensit um. In dieser Prozessketten simulation wird die Mikrostruktur als wesentliches Mikrostrukturmerkmal über alle Prozessschritte verfolgt und jeweils dem nächsten Prozessschritt als Eingangsgröße zur Verfügung gestellt. Auf die Entwicklung der kristallographischen Textur wird nicht näher eingegangen, da bei dieser Route keine bedeutende Änderung der Textur während der Wärmebehandlung zu erwarten ist [98]. Dies ermöglicht zudem eine Reduktion des numerischen Aufwandes, da für eine belastbare Beschreibung der Texturentwicklung eine große Anzahl an unterschiedlichen orientierten Phasen verwendet werden muss. Das zur Beschreibung der Rekristallisation verwendete Modell [48] ist jedoch in der Lage, die Texturentwicklung während der Wärmebehandlung zu berücksichtigen. Für dieses Simulationsbeispiel wird eine FeC-Legierung mit 0,57 Ma.-% Kohlenstoff gewählt. Bei allen Phasenumwandlungen wird eine Grenzflächenenergie von $0,1 \text{ J/m}^2$ verwendet, und in allen Simulationen kommt die Formulierung der Gradientenenergie dichte nach Steinbach (Gl. (3.9)) zum Einsatz. Zunächst wird das Erstellen der Ausgangsmikrostruktur und das Kaltwalzen beschrieben. Die darauf folgenden drei Abschnitte behandeln die sequenziell ablaufende Rekristallisation, Austenitumwandlung und Martensitumwandlung. Eine Publikation in einem referierten Fachjournal über die in diesem Kapitel diskutierten Ergebnissen ist in Vorbereitung.

8.1 Ausgangsmikrostruktur und Kaltwalzen

Das in diesem Kapitel vorgestellte Simulationsbeispiel wird mit den Ergebnissen der experimentellen Arbeit von Kulakov et al. [250] kalibriert. In dieser Arbeit wird ein warmgewalzter Dualphasenstahl für 1 800 Sekunden auf 900°C erwärmt und danach langsam abgekühlt. Die resultierende Mikrostruktur besteht aus 15 % Perlit und 85 % Ferrit, wobei die durchschnittliche Korngröße des Ferrits $11 \mu\text{m}$ beträgt. Nach dem Kaltwalzen mit einer Dickenreduktion von 50 % rekristallisiert die Probe unterhalb der Austenitisierungstemperatur. Nach der Rekristallisation beträgt die Korngröße des Ferrits $7,6 \mu\text{m}$.

Ausgangsmikrostruktur für die Kaltwalzsimulation

Die zweidimensionale, periodische, initiale Mikrostruktur wurde mit PACE3D erzeugt und ist in Abb. 8.2 dargestellt. Die Größe des Gebiets liegt bei $68,8 \times 68,8 \mu\text{m}$. Das Simulationsgebiet wird mit 400×400 Zellen diskretisiert. Es wurden zufällig 100 Voronoi-Zellen erstellt, jeder Zelle ein unterschiedlicher Phasenindex zugewiesen und eine isotrope Kornwachstumssimulation durchgeführt, bis 50 Körner existierten. 13 Körner wurden als Perlit klassifiziert, was einem Volumenanteil von 16 % entspricht. Die übrigen Körner bilden den ferritischen Anteil. Die mittlere Korngröße des Ferrits beträgt $11 \mu\text{m}$.

FE-Simulation des Kaltwalzens

Die Simulation des Kaltwalzschrittes wurde von Jan Pagenkopf am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik (IWM) in Freiburg durchgeführt. Wesentliche Bearbeitungsschritte und Materialmodelle, die zum Verständnis dieser Arbeit beitragen, werden im Folgenden erläutert; weiterführende Informationen zur verwendeten FE-Methode sind in [101, 109] zu finden. Die mit PACE3D berechnete Mikrostruktur wurde in Abaqus importiert und mit 400×400 Elementen vom Typ C3D8R diskretisiert. In jedem Element befindet sich ein Integrationspunkt, sodass nach der Simulation der Werkstoffzustand an 400^2 Punkten vorliegt. Jedem ferritischen Korn wird eine zufällige Kristallorientierung zugewiesen.

Das Verfestigungsverhalten des Perlits wird mit einem isotropen J_2 -Plastizitätsmodell modelliert, wobei zur Berechnung der Fließspannung ein Verfestigungsmodell nach Swift [251] verwendet wurde:

$$\sigma = c_1(c_2 + \varepsilon_p)^{c_3}.$$

Die Materialkonstanten $c_1 = 1\,200 \text{ MPa}$, $c_2 = 0,001$ und $c_3 = 0,15$ orientieren sich an der in [230] für unterschiedliche Zementitlamellenabstände berechneten Fließkurve für Perlit. Die isotropen, elastischen Konstanten werden basierend auf einem Elastizitätsmodul von $E = 210 \text{ GPa}$ und einer Poissonzahl von $\nu = 0,3$ bestimmt.

Für die ferritische Matrix wird ein Kristallplastizitätsmodell mit den 24 Gleitsystemen vom Typ $\{110\}\langle 111 \rangle$ und $\{112\}\langle 111 \rangle$ verwendet. Die Verfestigung auf

den Gleitsystemen des Ferrits wird als Funktion der akkumulierten plastischen Scherung Γ mit

$$\hat{\sigma}(\Gamma) = \tau_0 + (\tau_1 + \Theta_1\Gamma) \left[1 - \exp\left(\frac{-\Theta_0\Gamma}{\tau_1}\right) \right]$$

modelliert, wobei für die Konstanten $\tau_0 = 128$ MPa, $\tau_1 = 145$ MPa, $\Theta_0 = 107$ MPa und $\Theta_1 = 12$ MPa angenommen wird [101]. Die elastischen Konstanten für Ferrit sind $C_{11} = 226$ GPa, $C_{12} = 140$ GPa und $C_{44} = 116$ GPa [101].

Die Dickenreduktion wird über eine gleichmäßige Verschiebungsrandbedingung in y -Richtung aufgebracht. Die Ränder in x -Richtung sind spannungsfrei, und in z -Richtung wird ein ebener Verzerrungszustand angenommen. Das

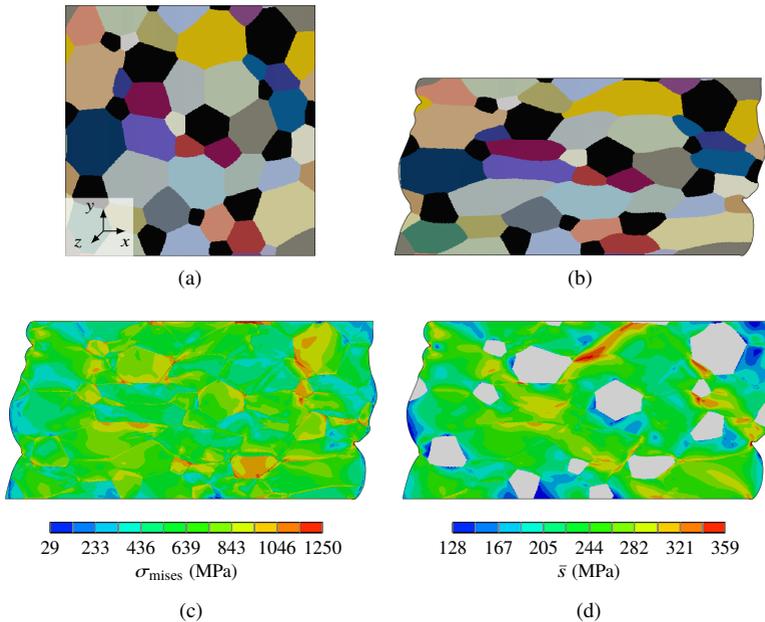


Abbildung 8.2: FE-Simulation des Kaltwalzens. (a) Initiale Mikrostruktur. (b) Durch das Kaltwalzen deformierte Mikrostruktur. (c) Von Mises-Spannung. (d) Gemittelte Verfestigungsgröße. Perlitische Bereiche sind in (a) und (b) schwarz dargestellt.

Ergebnis der Walzsimulation, bei einer Dickenreduktion von 30 %, ist in

Abb. 8.2(b-d) dargestellt. In Abb. 8.2(b) ist zu erkennen, dass ferritische Körner in Walzrichtung (x-Richtung) gestreckt werden. Perlitische Bereiche werden aufgrund der höheren Festigkeit normal zur Walzrichtung (y-Richtung) weniger stark gestaucht als Ferrit. Die Verteilung der von Mises-Spannung (Abb. 8.2(c)) und der über alle Gleitebenen gemittelten Verfestigungsgröße $\bar{s} = 1/n \sum_{i=1}^n s^i$ (Abb. 8.2(d)) zeigt ein stark inhomogenes Verhalten. Dies ist zum einen auf die unterschiedlichen Bestandteile (Perlit und Ferrit) und zum anderen auf die unterschiedliche Kristallorientierung des Ferrits zurückzuführen. Aufgrund der höheren Fließgrenze des Perlits und des isotropen Materialverhaltens treten in den perlitischen Bereichen großflächig hohe Spannungen auf, während in den ferritischen Bereichen vor allem Spannungslokalisierungen an Korngrenzen vorhanden sind. Zudem ist zu erkennen, dass es in einigen ferritischen Regionen, die in unmittelbarer Nähe eines Perliteinschlusses liegen, nur zu einer sehr geringen Plastifizierung kommt.

8.2 Rekristallisation

Nach dem Kaltwalzen wird das Blech auf 650 °C erwärmt, was liegt unterhalb der Ac1-Temperatur liegt. Dabei rekristallisieren die deformierten ferritischen Bereiche.

8.2.1 Modellierung und Simulationsaufbau

Das im Folgenden vorgestellte Modell basiert auf den Vorarbeiten zur Modellierung der Rekristallisation mit der Phasenfeldmethode von Vondrous et al. [48], wobei Anpassungen und Erweiterungen unter anderem im Bereich des Nukleationsmechanismus und der Berechnung der Mobilität vorgenommen werden. Zudem wird Erholung in das Modell integriert. Das freie Energiefunktional zur Simulation der Rekristallisation besteht aus Grenzflächenbeiträgen und aus der in Abschnitt 3.4.6 eingeführten Verformungsenergiedichte:

$$\mathcal{F}(\phi, \nabla\phi, W_{\text{ver}}) = \int_V W_{\text{intf}}(\phi, \nabla\phi) + \bar{W}_v(\phi, W_{\text{ver}}) dV. \quad (8.1)$$

Erstellung der Anfangsbedingung für die Rekristallisation

Die Outputdaten der Walzsimulation werden in einer Textdatei gespeichert und enthalten die folgenden Informationen:

- Position der Integrationspunkte
- Phasenindex an jedem Integrationspunkt
- Orientierung der Phase an jedem Integrationspunkt des Ferrits
- gemittelte Verfestigungsgröße an jedem Integrationspunkt des Ferrits.

Wie in [48] beschrieben, wird aus jedem der 400×400 Integrationspunkte mithilfe einer Voronoi-Zerlegung eine separate Phase erstellt, die jeweils ein Subkorn darstellt. Die Verfestigungsgröße eines Integrationspunktes wird dabei dem kompletten Gebiet, das die neue Phase einnimmt, zugeordnet. Ebenso erhält die Phase die Orientierung des Integrationspunktes. Die Mikrostruktur nach Konvertierung auf eine äquidistante Diskretisierung ist in Abb. 8.3(a) dargestellt. Der für die weitere Simulation verwendete Ausschnitt ist in Farbe dargestellt. Randbereiche in x-Richtung werden abgeschnitten, um Artefakte aufgrund der Voronoi-Zerlegung zu vermeiden und um ein rechteckiges Simulationsgebiet zu erhalten [48]. Da die Substruktur der Perlitbereiche für die weitere Betrachtung keine Relevanz hat, werden alle perlitischen Bereiche zu einer Phase zusammengefasst. Die Substruktur der ferritischen Bereiche ist beispielhaft für einen Ausschnitt in Abb. 8.3(c) gezeigt. Nach dieser Konvertierung liegen 110 118 ferritische Subkörner mit einem durchschnittlichen Korndurchmesser von 18,7 Zellen vor. Somit ist gewährleistet, dass bei einer Grenzflächenbreite von ca. neun Zellen ($\epsilon = 3,5\Delta x$) ein Mindestmaß an grenzflächenfreien Zellen¹ vorhanden ist. Die Auflösung des in Abb. 8.3(a) dargestellten Ausschnittes beträgt $8\,448 \times 4\,745$ Zellen, wobei die Ausdehnung einer Zelle $\Delta x = \Delta y = 10,15$ nm misst. Der Perlitanteil in diesem Ausschnitt liegt bei 17 %.

Wie in [106, 108] beschrieben, kann die gespeicherte Verformungsenergie-dichte, die als Ausgangsgröße aus der FE-Simulation vorliegt, basierend auf der

¹ Die minimale Ausdehnung grenzflächenfreier Zellen eines Subkorns hängt von der Form der Voronoi-Zelle ab und beträgt ungefähr ein bis fünf Zellen.

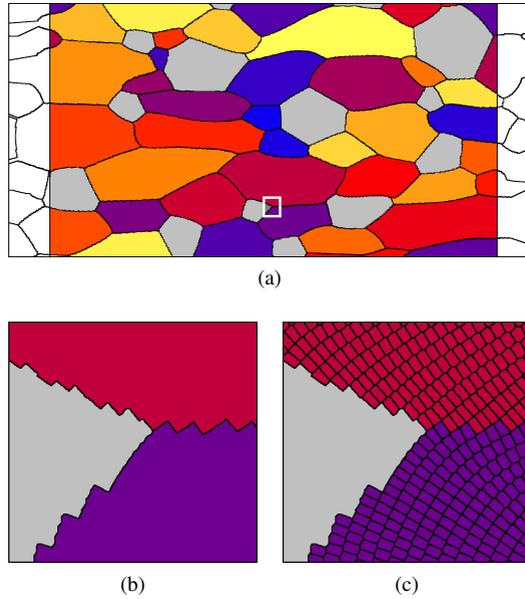


Abbildung 8.3: Mikrostruktur nach Konvertierung auf eine äquidistante Diskretisierung. (a) Farblich hervorgehobener Ausschnitt für die nachfolgende Simulation. Perlit ist grau eingefärbt. (b) Teilgebiet der Mikrostruktur, das in (a) mit einem weißen Rechteck gekennzeichnet ist. (c) Substruktur des Teilgebiets aus (b). Zu erkennen sind die mit der Voronoi-Zerlegung erzeugten Subkörner.

gemittelten Verfestigungsgröße \bar{s} berechnet werden. Die gespeicherte Verformungsenergiedichte W_{ver} wird basierend auf der Versetzungsdichte ρ über

$$W_{\text{ver}} = \frac{1}{2} \rho G b^2 \quad (8.2)$$

bestimmt, wobei G den Schubmodul und b den Burgersvektor darstellt. Der Zusammenhang zwischen der Versetzungsdichte ρ und der Verfestigungsgröße nach der Deformation wird mit

$$\bar{s} = \alpha' G b \sqrt{\rho} \quad (8.3)$$

berechnet, wobei $\alpha' = 0,5$ eine Konstante darstellt. Werden Gl. (8.2) und (8.3) kombiniert, ergibt sich die gespeicherte Verformungsenergiedichte mit

$$W_{\text{ver}} = \frac{2\bar{\sigma}^2}{G}. \quad (8.4)$$

Ausgehend von der gemittelten Verfestigungsgröße der Kaltwalzsimulation (Abb. 8.2(d)) wird die orts aufgelöste Verformungsenergiedichte in Ferrit nach Gl. (8.4) bestimmt, die in Abb. 8.4(a) dargestellt ist. Die prozentuale Verteilung ist in Abb. 8.4(b) aufgetragen. Die durchschnittliche Verformungsenergiedichte beträgt $\bar{W}_{\text{ver}} = 1,4 \text{ MJ/m}^3$. In der experimentellen Arbeit [250] wurde eine gemittelte gespeicherte Verformungsenergiedichte nach dem Kaltwalzen von $1,8 \text{ MJ/m}^3$ bestimmt.

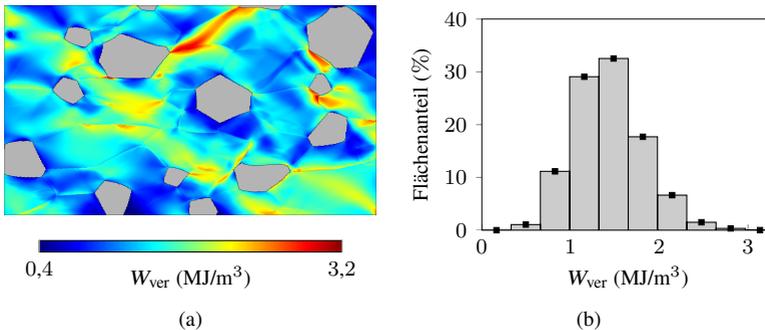


Abbildung 8.4: Inhomogene Verteilung der gespeicherten Verformungsenergiedichte im Ferrit nach Gl. (8.4). (a) Orts aufgelöste Darstellung. Perlitische Bereiche sind grau dargestellt. (b) Prozentuale Verteilung.

Simulationsaufbau für die Rekristallisation

Sowohl die Mobilität als auch die Grenzflächenenergie werden als Funktion der Missorientierung des Kristallgitters, $\Delta\theta_{\alpha\beta}$, zwischen zwei Körnern α und β ausgedrückt. Basierend auf [252] gilt für die Grenzflächenenergie

$$\gamma_{\alpha\beta}(\Delta\theta_{\alpha\beta}) = \begin{cases} \gamma_{\text{hagb}}, & \text{für } \Delta\theta_{\alpha\beta} > \Delta\theta_m \\ \gamma_{\text{hagb}} \frac{\Delta\theta_{\alpha\beta}}{\Delta\theta_m} \left[\left(1 - \ln \frac{\Delta\theta_{\alpha\beta}}{\Delta\theta_m} \right) \right], & \text{sonst,} \end{cases} \quad (8.5)$$

wobei γ_{hagb} die Grenzflächenenergie einer Großwinkelkorngranze ist und bei $\Delta\theta_m = 15^\circ$ der Übergang von Klein- zu Großwinkelkorngranze stattfindet. Nach [253] gilt für die Mobilität

$$M_{\alpha\beta}(\Delta\theta_{\alpha\beta}) = \begin{cases} M_{\text{hagb}}, & \text{für } \Delta\theta_{\alpha\beta} > \Delta\theta_m \\ M_{\text{hagb}} \left[1 - \exp \left(-5 \left(\frac{\Delta\theta_{\alpha\beta}}{\Delta\theta_m} \right)^4 \right) \right], & \text{sonst,} \end{cases} \quad (8.6)$$

wobei M_{hagb} die Mobilität einer Großwinkelkorngranze ist. Der Verlauf der Mobilität und der Grenzflächenenergie ist in Abb. 8.5 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Mobilität der Korngranze für kleine Missorientierungen sehr kleine Werte annimmt.

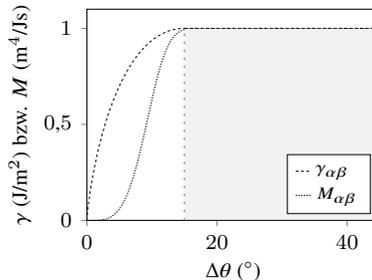


Abbildung 8.5: Grenzflächenenergie und Mobilität als Funktion der Missorientierung der Kristallgitter (Gl. (8.5) und (8.6)) zwischen zwei Körnern, für $\gamma_{\text{hagb}} = 1 \text{ J/m}^2$ und $M_{\text{hagb}} = 1 \text{ m}^4(\text{Js})^{-1}$. Ab einer Missorientierung von $\Delta\theta_m = 15^\circ$ ist der Wert konstant.

Die durch Erholungsvorgänge bewirkte Abnahme der gespeicherten Energiedichte wird wie folgt berechnet:

$$W_{\text{ver}}(t) = \left[W_{\text{ver}}(t_0)^{0,5} - C_E G^{-0,5} k T \ln \left(1 + \frac{t}{t_c} \right) \right]^2, \quad (8.7)$$

wobei $W_{\text{ver}}(t_0)$ die initiale gespeicherte Energiedichte, k die Boltzmann-Konstante, C_E ein Fitting-Parameter und $t_c = 1$ ist [127]. Im Gegensatz zur Vorgängerarbeit [48], in der angenommen wurde, dass alle Nuklei bereits zu Beginn der Simulation vorhanden sind, kommt in der vorliegenden Arbeit eine Keimauswahl zur Simulationslaufzeit zum Einsatz. In der experimentellen Arbeit [254] wurde gezeigt, dass sich ca. 80 % der Keime in der Zeit bilden, in der das Material bis zu 10 % rekristallisiert ist. Jedoch bilden sich weitere Keime über eine große Zeitspanne.

Die Auswahl der Keime erfolgt im Rahmen dieser Arbeit anhand von bestimmten Gesichtspunkten. Es kommen nur diejenigen Subkörner für ein Nukleationsevent in Frage, die folgende Kriterien erfüllen:

- Das Subkorn ist bisher noch nicht rekristallisiert.
- Das Subkorn besitzt mindestens eine Großwinkelkorngrenze. Dies wird als notwendiges Kriterium angesehen, da nur Subkörner mit der Mobilität einer Großwinkelkorngrenze zu Körnern rekristallisieren [255]. Dabei werden Großwinkelkorngrenzen zu einer rekristallisierenden Phase nicht berücksichtigt, da keine treibende Kraft, die aus der gespeicherten Verformungsenergiedichte resultiert, zwischen zwei Nuklei vorhanden ist und ein potentieller Keim dadurch kaum eine Überlebenschance aufweist bzw. keinen Raum hat um zu wachsen.
- Das Volumen des Subkorns überschreitet ein kritisches Volumen. Damit wird verhindert, dass Subkörner, die schon zum Teil von einem rekristallisierten Keim aufgezehrt sind, ausgewählt werden.

Im zweiten Schnitt wird in Anlehnung an [109, 256] für jedes Subkorn, das die obigen Kriterien erfüllt, eine Nukleationswahrscheinlichkeit w_N berechnet:

$$w_N = C_{\text{nuk}} \begin{cases} \left(\frac{W_{\text{ver}} - W_{\text{ver,krit.}}}{W_{\text{ver,max}} - W_{\text{ver,krit.}}} \right)^a & \text{für } W_{\text{ver}} > W_{\text{ver,krit.}} \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (8.8)$$

wobei C_{nuk} ein Fitting-Parameter, a eine Konstante, $W_{\text{ver,krit.}}$ die kritische und $W_{\text{ver,max.}}$ die maximale gespeicherte Verformungsenergiegedichte ist. Die berechnete Nukleationswahrscheinlichkeit w_N wird mit einer Zufallszahl z zwischen null und eins verglichen. Für den Fall $w_N > z$ wird das Subkorn als rekristallisierender Keim klassifiziert und der Eintrag im Nukleationstupel auf null ($m^\alpha = 0$) gesetzt.

Die Nukleationswahrscheinlichkeit ist in Abb. 8.6 dargestellt. Mit dieser For-

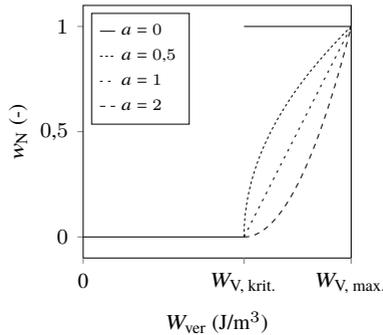


Abbildung 8.6: Nukleationswahrscheinlichkeit gemäß Gl. (8.8) ohne den Vorfaktor C_{nuk} für unterschiedliche Exponenten a und $W_{\text{ver,krit.}} = 0,6W_{\text{ver,max.}}$.

mulierung wird erreicht, dass nur Subkörner, deren gespeicherte Verformungsenergiegedichte einen kritischen Wert übersteigt, zu Keimen werden können. Somit wird der experimentellen Beobachtung Rechnung getragen, dass die Keimbildung leicht in Bereichen mit der höchsten gespeicherten Verformungsenergiegedichte stattfindet [119, 120].

Im vorgestellten Modellierungsansatz nimmt die Anzahl der möglichen Nukleationsstellen kontinuierlich mit der Zeit ab. Zum einen überschreiten durch die einsetzende Erholung weniger Subkörner die kritische gespeicherte Verformungsenergiegedichte, zum anderen gibt es insgesamt aufgrund der voranschrei-

tenden Rekristallisation weniger Subkörner im System. Da in dieser Arbeit eine isotherme Rekristallisation betrachtet wird, kann auf eine temperaturabhängige Nukleationswahrscheinlichkeit verzichtet werden. Eine entsprechende Formulierungen für eine temperaturabhängige Nukleationsrate ist z. B. in [257] zu finden.

Folgende Parameter werden für die Simulation der Rekristallisation bei einer Temperatur von 650 °C verwendet: Da Erholung nur zu einer geringen Reduktion der gespeicherten Verformungsenergiedichte führt [120, 258], wird die Konstante C_E in Gl. (8.7) so eingestellt, dass die maximale gespeicherte Verformungsenergiedichte von 3,2 MJ/m³ nach 100 000 Zeitschritten (1 288 s) um fünf Prozent abgenommen hat. Der zeitliche Verlauf der gespeicherten Verformungsenergiedichte für $W_{\text{ver}}(t_0) = 3,2 \text{ MJ/m}^3$ ist in Abb. 8.7 dargestellt. Innerhalb einer kurzen Zeitspanne ist ein relativ großer Abfall der gespeicherten

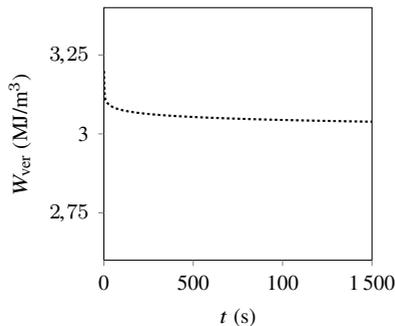


Abbildung 8.7: Zeitliche Abnahme der gespeicherten Verformungsenergiedichte aufgrund Erholung gemäß Gl. (8.7).

Verformungsenergiedichte erkennbar, die im weiteren Verlauf nur noch moderat abnimmt. Das kritische Volumen, unter dem die Nukleation von Subkörnern ausgeschlossen ist, wird auf 0,7 mal dem mittleren Volumen der initialen Subkörner gesetzt. Weitere Parameter sind: $\gamma_{\text{hagb}} = 0,1 \text{ J/m}^2$, $\gamma_{\alpha\beta\delta} = 4\gamma_{\text{hagb}}$, $W_{\text{ver,krit.}} = 0,55W_{\text{ver,max.}}$. Für die Grenzflächenenergie zwischen Perlit und Ferrit wird $\gamma = 0,1 \text{ J/m}^2$ angenommen. Die Mobilität zwischen zwei Ferritphasen wird nach Gl. (8.6) berechnet, sofern mindestens eine der beiden Ferritphasen ein Keim ist. Ansonsten gilt eine Mobilität von null. Ebenso hat Perlit zu allen

Phasen eine Mobilität von null. Die Mobilität einer Großwinkelkorngrenze wird mit der Arrhenius-Gleichung

$$M_{\text{hagb}} = M_0 \exp(-Q/(\mathcal{R}T)) \quad (8.9)$$

berechnet, wobei $\mathcal{R} = 8,314 \text{ J}/(\text{K mol})$ die allgemeine Gaskonstante darstellt. Nach [117] wird ein Vorfaktor von $M_0 = 2,2 \times 10^6 \text{ m}^4/(\text{Js})^{-1}$ und eine Aktivierungsenergie von $Q = 360 \text{ kJ/mol}$ verwendet. Somit ergibt sich für die Temperatur von $T = 650 \text{ }^\circ\text{C}$ eine Mobilität von $M_{\text{hagb}} = 1 \times 10^{-14} \text{ m}^4/(\text{Js})^{-1}$ [117].

Zur Berechnung der Nukleationswahrscheinlichkeit wird in Gl. (8.8) der Exponent auf $a = 0,5$ gesetzt. Aus Rechenzeitgründen wird die Auswertung der Nukleation nur jeden zehnten Zeitschritt durchgeführt. Sobald keine möglichen Nukleationsstellen mehr vorhanden sind, findet keine weitere Überprüfung der Nukleation mehr statt. Für die Phasenfelder gilt an den Rändern eine Neumann-Randbedingung. Mit diesen Parametern wird die Konstante C_{nuk} mithilfe von mehreren Simulationsläufen so kalibriert, dass die Korngröße des Ferrits nach der Rekristallisation ca. $7,6 \mu\text{m}$ entspricht.

Die Evolution der Phasenfelder wird basierend auf dem verwendeten Energiefunktional (Gl. (8.1)) nach Gl. (3.6) berechnet.

8.2.2 Ergebnisse und Diskussion

Die Mikrostrukturentwicklung zu verschiedenen Zeitpunkten während der Rekristallisation ist in Abb. 8.8 dargestellt. Perlitische Bereiche nehmen nicht an der Rekristallisation teil und bleiben während der Simulation unverändert. Es entstehen neue ferritische Körner, die in das deformierte Gefüge hineinwachsen und ein neues Gefüge bilden. Dabei wird die gespeicherte Energiedichte abgebaut, wie in Abbildung 8.9 zu erkennen ist. Nukleation findet vorwiegend an den Korngrenzen der Großkörner statt, da an diesen Stellen oft eine Großwinkelkorngrenze vorliegt. Bildet sich ein Keim, kann dieser unter Reduktion der gespeicherten Verformungsenergiedichte in das benachbarte Großkorn (Korn vor der Rekristallisation) wachsen. Dieser Vorgang wird dehnungsinduzierte Korngrenzenwanderung (engl.: *strain-induced boundary migration* (SIBM)) genannt [172]. In Abb. 8.10 ist die Missorientierung für ein Teilgebiet dargestellt. Zum Zeitpunkt der Nukleation (t_{nuk}) befinden sich an der Korngrenze der Großkörner Korngrenzen mit einer Missorientierung,

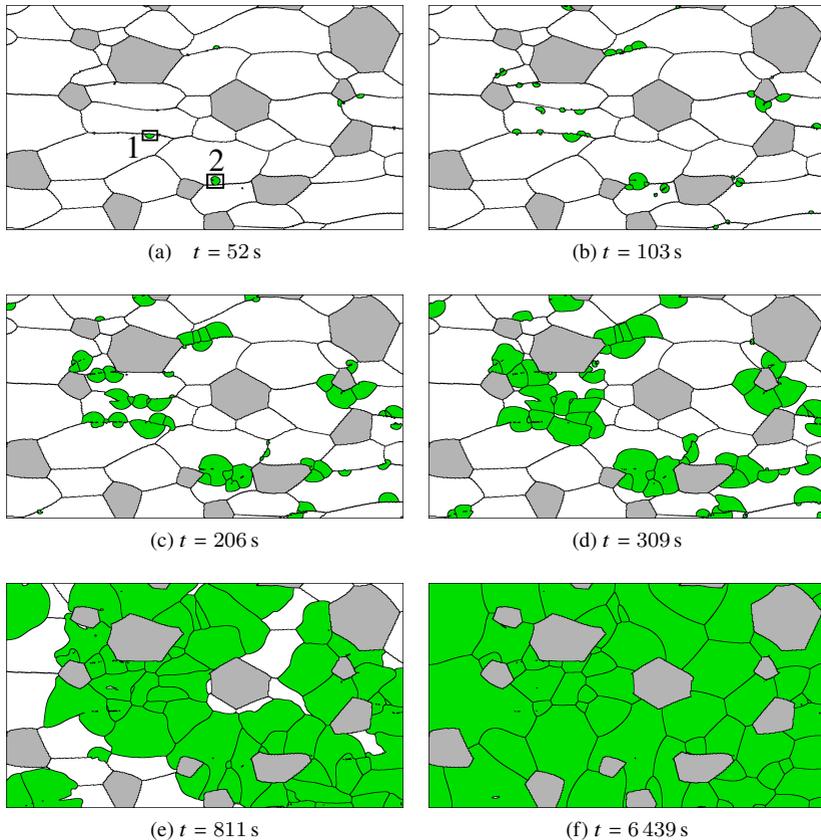


Abbildung 8.8: Mikrostrukturentwicklung während der Rekristallisation zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Rekristallisierende Körner sind grün eingefärbt.

die größer als 15° ist. Der rekristallisierende Keim kann in das benachbarte Großkorn wachsen, da aufgrund der Großwinkelkorngrenze eine hohe Mobilität zur Verfügung steht. Zu den Subkörnern des eigenen Großkorns besitzt der Keim Kleinwinkelkorngrenzen. Zwar ist aufgrund der Reduktion der gespeicherten Verformungsenergie eine treibende Kraft vorhanden, jedoch ist die Mobilität gering, sodass der Keim insgesamt halbrund wächst. Ein vergleichbares Beispiel für eine experimentell beobachtete dehnungsinduzierte

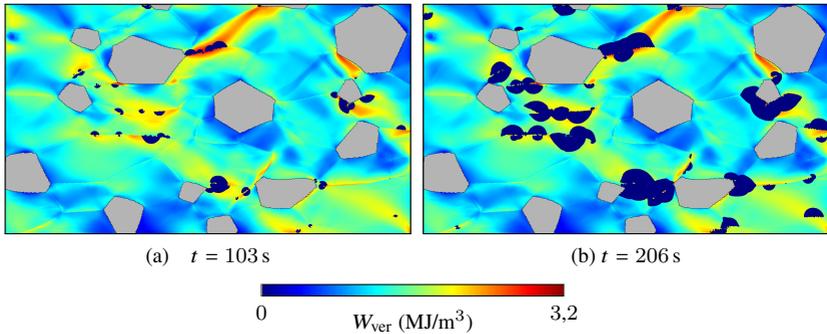


Abbildung 8.9: Abnahme der gespeicherten Energiedichte während der Rekristallisation.

Korngrenzenwanderung ist in [259] zu finden.

Eine Keimbildung kann nicht nur an der Korngrenze der Großkörner, sondern auch innerhalb eines Großkorns stattfinden, sofern eine starke Deformation zu der Bildung einer Großwinkelkorngrenze geführt hat [255]. Dieser Mechanismus ist auch in der Simulation feststellbar. In Abb. 8.11(a) ist aufgrund der Bildung von Großwinkelkorngrenzen innerhalb eines Kornes ein stark deformierter Bereich zu erkennen. Während des Wachstums bilden sich vorwiegend Großwinkelkorngrenzen zu benachbarten Subkörnern, weshalb sich eine eher kreisförmige Form ausbildet. Trifft der wachsende Keim auf ein Subkorn, zu dem sich eine Kleinwinkelkorngrenze ausbildet, entsteht eine Korngrenze mit geringer Mobilität. In Abb. 8.11 umschließt der wachsende Keim ein Subkorn, aufgrund der Bildung einer Kleinwinkelkorngrenze. Je nach Missorientierung sind solche Einschlüsse am Ende der Simulation ($t = 6439$ s) noch erkennbar. Dieser Vorgang ist unter dem Begriff *orientation pinning* bekannt [260].

In Abb. 8.12 sind alle Nukleationsstellen vor dem Hintergrund der Großkörner hervorgehoben. Aufgrund der heterogenen Verteilung der gespeicherten Verformungsenergiedichte ist die Keimbildung ebenfalls heterogen. Es entstehen gehäuft Keime in Bereichen mit einer hohen gespeicherten Verformungsenergiedichte, die folglich nicht viel Raum zum Wachsen haben, bevor sie auf andere rekristallisierende Körner treffen. Sobald dies geschieht, dominieren krümmungsminimierende Kräfte und es findet eine Kornvergrößerung statt. Kleine rekristallisierende Keime verschwinden durch diesen Prozess wieder, was in Abb. 8.8(d-f) ersichtlich ist und in experimentellen [120] sowie in simulativen Arbeiten [108] beobachtet wurde.

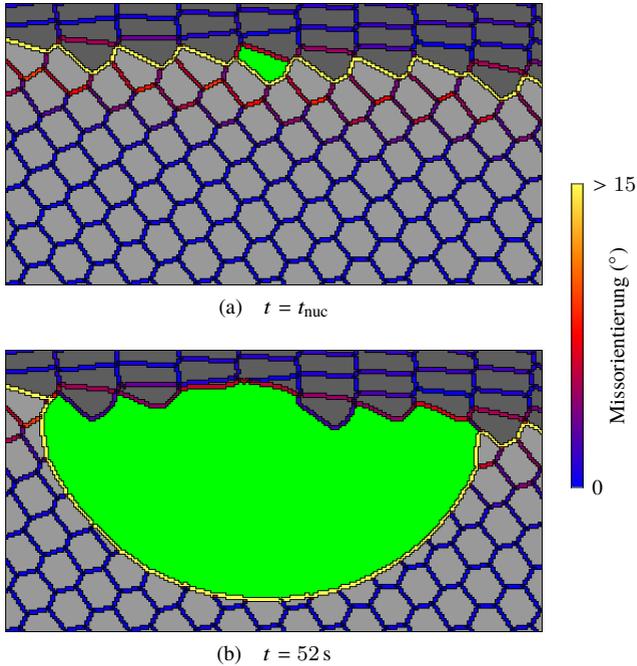


Abbildung 8.10: Missorientierung zwischen Subkörnern in der Umgebung eines Keims, der an einer Korngrenze zweier Großkörner nukleiert. Der Ausschnitt ist in Abb. 8.8(a) mit „1“ gekennzeichnet. Das rekristallisierende Subkorn ist grün eingefärbt. Die Bereiche mit unterschiedlichen Großkörnern sind in Graustufen dargestellt.

Nach der Rekristallisation eines kaltgewalzten Materials kann es zu Inhomogenitäten der Korngröße im Material kommen, die auf die inhomogene Verteilung der gespeicherten Verformungsenergiedichte zurückzuführen sind [172]. Dies wird in Abb. 8.8(f) deutlich. In den Bereichen mit einer hohen gespeicherten Verformungsenergiedichte finden sich durch eine häufigere Nukleation kleinere Körner als in den Bereichen mit einer niedrigen gespeicherten Verformungsenergiedichte. Dieser Zusammenhang wurde auch in einer vergleichbaren Arbeit beobachtet, in der die Finite-Elemente-Methode zur Berechnung einer Deformation und ein zellulärer Automat zur Simulation der statischen Rekristallisation gekoppelt wurden [261].

Wie in Abschnitt 8.2.1 beschrieben, können neue Keime während der Rekris-

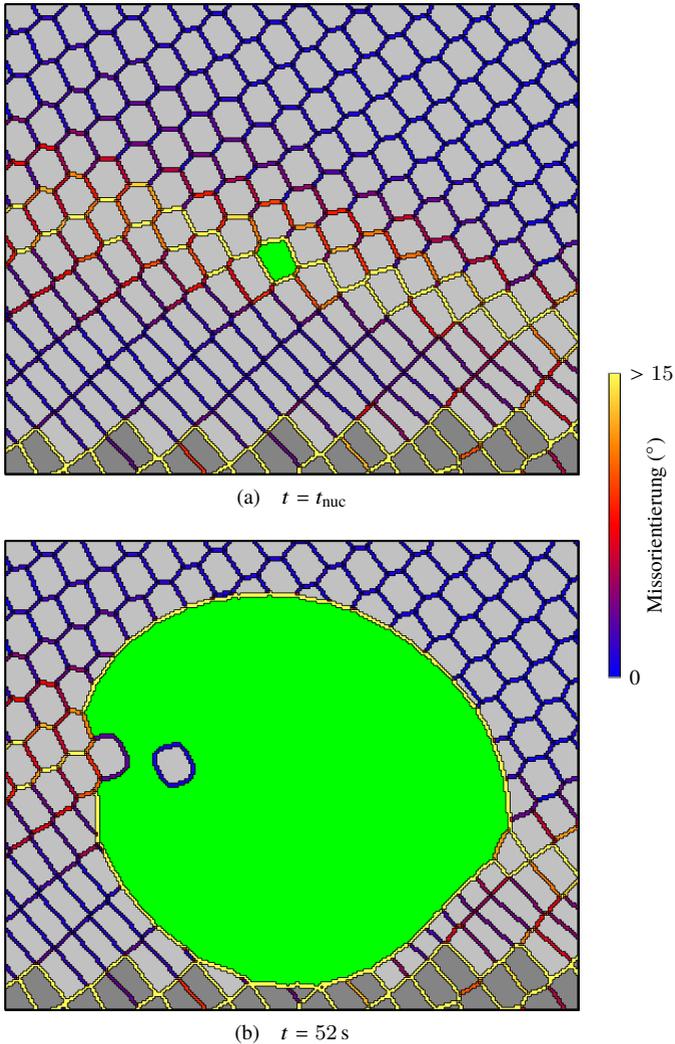


Abbildung 8.11: Missorientierung zwischen Subkörnern in der Umgebung eines Keims, der innerhalb eines Großkorns nukleiert. Der Ausschnitt ist in Abb. 8.8(a) mit „2“ gekennzeichnet. Das rekristallisierende Subkorn ist grün eingefärbt. Die Bereiche mit unterschiedlichen Großkörnern sind in Graustufen dargestellt.

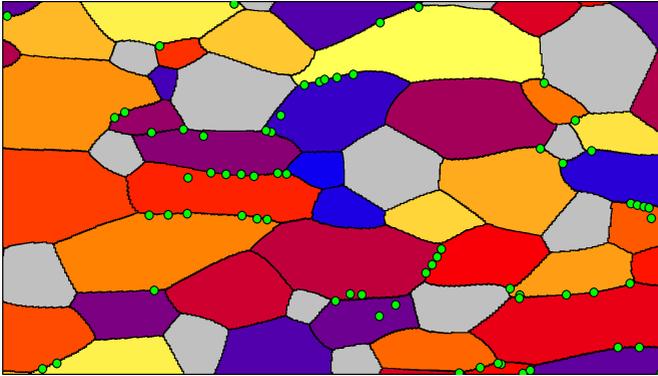


Abbildung 8.12: Mikrostruktur mit den markierten Nukleationsstellen der Subkörner. Neue Keime (grüne Kreise) entstehen vorwiegend an ehemaligen Korngrenzen, aber vereinzelt auch innerhalb von Körnern, die eine starke Deformation widerfahren haben. Durch die Deformation entstehen Großwinkelkorngrenzen an Subkörnern, die sich nicht mit den Korngrenzen der Großkörner in Kontakt befinden.

tallisation entstehen. In Abb. 8.13 ist der zeitliche Verlauf der potentiellen Nukleationsstellen und der stattgefundenen Nukleationsevents aufgetragen. Zum Zeitpunkt $t = 0$ sind die meisten potentiellen Nukleationsstellen, also

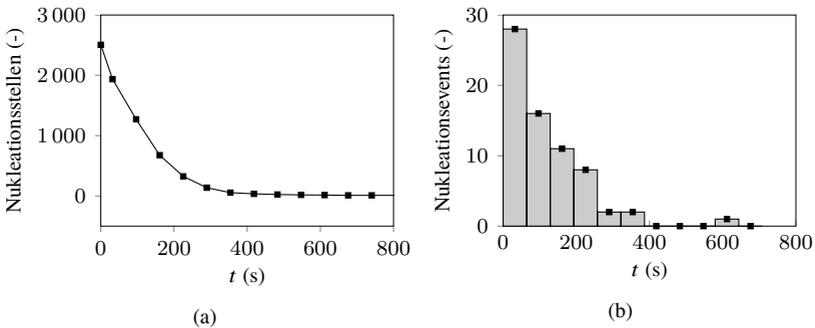


Abbildung 8.13: Nukleationsstellen und -events. (a) Zeitlicher Verlauf der potentiellen Nukleationsstellen. (b) Anzahl der stattgefundenen Nukleationsevents pro Zeitintervall.

Subkörner, die die im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Kriterien

erfüllen, vorhanden. Folglich entstehen die meisten Keime in den ersten 60 s der Simulierten, was in Abb. 8.13(b) deutlich wird. Im weiteren Verlauf nehmen sowohl die möglichen Nukleationsstellen als auch die Anzahl der neu entstehenden Keime aufgrund der Erholung und des Wachstums der rekristallisierenden Keime ab. In Übereinstimmung mit experimentellen Beobachtungen [254] findet die Nukleation auch noch nach einer gewissen Rekristallisationszeit statt, was durch eine Nukleation nach ca. 600 s deutlich wird.

Der Flächenanteil der rekristallisierenden ferritischen Bereiche über der Rekristallisationszeit ist in Abb. 8.14 dargestellt. Nach einer kurzen Phase, in der

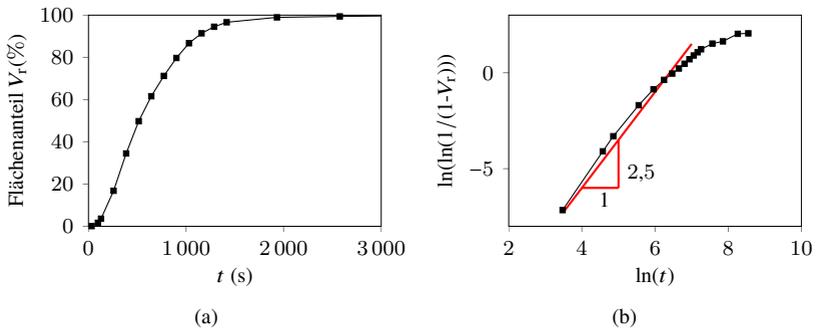


Abbildung 8.14: Flächenanteil der rekristallisierenden Keime, bezogen auf den gesamten ferritischen Bereich. (a) Konventionelle Darstellung. (b) JMAK-Darstellung.

sich Rekristallisationskeime bilden, nimmt das Volumen rasch zu. Ab einem rekristallisierten Anteil von ca. 80 % verlangsamt sich die Ausbreitung und es dauert länger als 2000 s, bis das Material nahezu vollständig rekristallisiert ist. Um die Kinetik von Rekristallisationsvorgängen mit einer analytischen Vorhersage zu vergleichen, wird häufig die Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov-Gleichung (JMAK-Gleichung) herangezogen, die einen Zusammenhang zwischen dem rekristallisierten Volumenanteil V_r und der Zeit in der Form

$$V_r = 1 - \exp(-Bt^n)$$

herstellt, wobei B eine Konstante und n ein Exponent ist [172]. Wird nun $\ln(\ln(1/(1 - V_r)))$ auf $\ln(t)$ geplottet, ergibt das JMAK-Modell eine Gerade. In Abb. 8.14(b) ist der Volumenanteil in der JMAK-Darstellung aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass die Anfangsphase gut mit einer Geraden mit der

Steigung $n = 2,5$ angenähert werden kann. Im weiteren Verlauf ist ein deutlicher Abfall zu verzeichnen. Das JMAK-Modell basiert auf einer Reihe von Annahmen, die in diesem Fall nicht gegeben sind, weshalb eine Abweichung von der idealisierten JMAK-Lösung zu erwarten ist. Zum einen wird eine zufällige Verteilung der Nukleationsstellen angenommen. Zum anderen wird von einem isotropen Keimwachstum ausgegangen. Für einen zweidimensionalen Fall kann unter diesen Voraussetzungen und bei der Annahme einer konstanten Nukleationsrate ein Exponent von $n = 3$ bzw. bei der Annahme einer initialen Keimdichte ein Exponent von $n = 2$ erwartet werden [172]. Durch die Berücksichtigung der Erholung, der heterogenen Nukleation aufgrund der gespeicherten Energiedichte sowie des anisotropen Wachstums, je nach Ausbildung einer Klein- oder Großwinkelkorngrenze, ist folglich ein niedrigerer Exponent als $n = 3$ plausibel. In einer experimentellen Arbeit zur Kinetik der Rekristallisation eines kaltgewalzten, kohlenstoffarmen Stahls wurden zwei Bereiche mit unterschiedlicher Umwandlungsgeschwindigkeit gefunden [120]. Die Rekristallisation bis zu einem Volumenanteil von 70 % wird mit der Umwandlung der Regionen mit einer hohen gespeicherten Verformungsenergiedichte in Verbindung gebracht. Danach ist ein zweiter Bereich deutlich zu erkennen, in dem die Umwandlung merklich langsamer verläuft, was auf das Vorhandensein von Regionen mit einer niedrigen gespeicherten Verformungsenergiedichte zurückzuführen ist. Dieser Umstand ist ein Grund für die beobachtete Abnahme der Umwandlungsgeschwindigkeit in Abb. 8.14. In der experimentellen Arbeit [250] ist die Probe bei einer Haltetemperatur von 650 °C nach ca. 1 000 s vollständig rekristallisiert. In der Simulation liegt nach 1 000 s ein Volumenanteil von ca. 80 % rekristallisiertem Ferrit vor. Dieser Unterschied kann zum einem mit der im Experiment um ca. 30 % höheren durchschnittlichen gespeicherten Verformungsenergiedichte erklärt werden. Eine höhere treibende Kraft führt zu einer schnelleren Umwandlung. Zum anderen sind Effekte aufgrund der Reduktion auf zwei Dimensionen oder Randeffekte nicht auszuschließen.

8.3 Austenitumwandlung

Wie in Abbildung 8.1 dargestellt ist, wird nach der Rekristallisation das Blech auf eine Temperatur oberhalb der Ac1-Temperatur erwärmt, sodass die Austenitumwandlung einsetzt.

8.3.1 Modellierung und Simulationsaufbau

Die Austenitumwandlung wird von der Differenz der freien chemischen Energie angetrieben. Daher wird zur Modellierung ein freies Energiefunktional bestehend aus Grenzflächenbeiträgen und der freien chemischen Energie aufgestellt:

$$\mathcal{F}(\phi, \nabla\phi, \bar{c}) = \int_V W_{\text{intf}}(\phi, \nabla\phi) + \bar{W}_{\text{chem}}(\phi, \bar{c}) dV.$$

Die Austenitumwandlung wird bei einer Temperatur von 755 °C betrachtet. Als Ausgangsmikrostruktur dient das Ergebnis der Rekristallisation (Abb. 8.8(f)). Kleine Subkörner, die zu diesem Zeitpunkt noch vorhanden sind, werden den umliegenden Körnern zugeteilt. Um Rechenzeit zu sparen, wird die Zellanzahl auf 2112×1186 Diskretisierungspunkte verkleinert, wobei nun $\Delta x = \Delta y = 40,6$ nm gilt. Nach Speich et al. [122] nukleiert Austenit an Ferrit/Perlit-Grenzflächen. Daher werden vor Simulationsbeginn 50 Austenitkeime zufällig in die Grenzfläche zwischen Ferrit und den 14 Perlitregionen gesetzt, sodass in den kleinen Perlitgebieten zwei und in den größeren bis zu sieben Keime vorhanden sind. Dieses Vorgehen ist mit [123] vergleichbar. Die initiale Mikrostruktur, inklusive der Keimstellen, ist in Abbildung 8.15 dargestellt. Die Kohlenstoff-

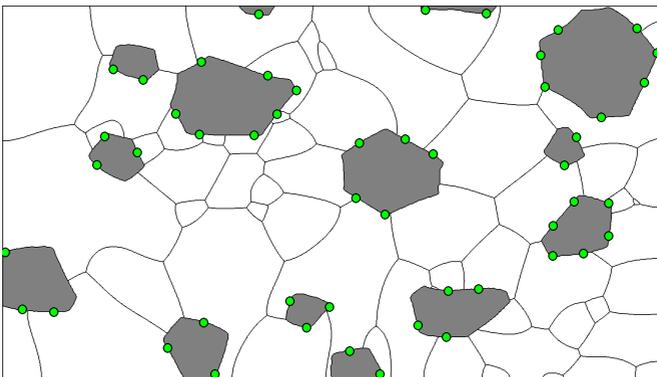


Abbildung 8.15: Ausgangsmikrostruktur zur Simulation der Austenitumwandlung. Perlit ist in Grau eingefärbt. Die Positionen der gesetzten Austenitkeime sind mit grünen Kreisen dargestellt.

konzentration in Ferrit wird nach [100] mit 0,012 Ma.-% angenommen. Damit

die Kohlenstoffkonzentration im Gebiet $\bar{c}_c = 0,13 \text{ Ma.-%}$ entspricht, ergibt sich für die Kohlenstoffkonzentration in Perlit ein Wert von $0,71 \text{ Ma.-%}$.

Der Idee von Rudnizki et al. [123, 126] folgend, wird die Austenitumwandlung in zwei Simulationsschritten durchgeführt. In einem ersten Schritt wird die Umwandlung von Perlit in Austenit abgebildet. Hierbei wird angenommen, dass die Umwandlung so schnell abläuft, dass alle anderen Prozesse vernachlässigbar sind. Dies ist eine vertretbare Annahme, da die Perlitauflösung bis zur Einstellung des chemischen Gleichgewichts [122] deutlich schneller abläuft als die nachfolgende Umwandlung von Ferrit in Austenit. Den austenitischen Keimen wird gegenüber dem Perlit eine konstante chemische treibende Kraft von $(\Delta W_{\text{chem}}^{P\gamma} = -1,3 \times 10^6 \text{ J/m}^3)$ zugewiesen. Die Größenordnung ist so gewählt, dass sich ein günstiges Verhältnis zwischen der grenzflächenaufbauenden und der chemischen treibenden Kraft einstellt ($\mathcal{K} = 1,8$). Dabei kommt die in Abschnitt 3.4.1 eingeführte freie chemische Energiedichte $\bar{W}_{\text{chem},k}$ zum Einsatz. Die dimensionslose Zeitschrittweite wird auf eins gesetzt. Bis auf die Mobilität der Perlit/Austenit-Grenzfläche, die so gewählt ist, dass die Simulation stabil verläuft, werden alle weiteren Mobilitäten auf null gesetzt. Es wird angenommen, dass in dieser Phase keine Kohlenstoffdiffusion stattfindet. Sobald die perlitischen Regionen in Austenit umgewandelt sind, wird die Simulation gestoppt. Basierend auf der resultierenden austenitisch-ferritischen Mikrostruktur wird die Umwandlung von Ferrit in Austenit mithilfe der in Abschnitt 3.4.2 beschriebenen freien chemischen Energiedichte $\bar{W}_{\text{chem},d}$ simuliert. Dabei werden CALPHAD-Daten verwendet, die in Tabelle 8.1 aufgeführt sind. Die Diffusivität in Ferrit

Tabelle 8.1: Koeffizienten der freien chemischen Energiedichte für eine Temperatur von $T = 1,028 \text{ K}$ und eine durchschnittliche Kohlenstoffkonzentration von $2,596 \text{ mol.-%}$ bzw. $0,57 \text{ Ma.-%}$.

Phase	Koeffizient	Wert (J/mol)
Ferrit	O^α	31 000 000
	P^α	0
	Q^α	-44 285
Austenit	O^γ	105 650
	P^γ	26 490
	Q^γ	-44 221

und Perlit wird nach Gl. (6.4) berechnet und ergibt $D^\alpha = 1,1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$.

Die Diffusivität in Austenit ergibt sich für $c_c = 2,9 \text{ mol-}\%$ nach Gl. (6.3) zu $D^\gamma = 1,6 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$. Die gewählte Konzentration stellt den Mittelwert zwischen der Gleichgewichtskonzentration von $c_{c,\text{equil}}^\gamma = 2,628 \text{ mol-}\%$ und der initialen Konzentration von $c_c = 3,2 \text{ mol-}\%$ dar. Verglichen mit Austenit liegt somit eine deutlich höhere Diffusivität vor, was konsistent zu Vorgängerarbeiten ist [100, 262]. Die Mobilität zwischen ferritischen Körnern wird nach Gl. (8.9) berechnet und ergibt $M^{\alpha\alpha} = 1,1 \times 10^{-12} \text{ m}^4/(\text{Js})^{-1}$. Da die perlitischen Bereiche keine Kornstruktur enthalten, muss keine Mobilität für Perlit/Perlit-Grenzflächen gegeben werden. Sowohl die Mobilität der Perlit/Austenit- als auch der Austenit/Austenit-Grenzflächen wird nach [100] und mittels der Arrhenius-Gleichung (8.9) berechnet. Dabei gilt $M_0^{\gamma\gamma} = 5 \times 10^{-3} \text{ m}^4/(\text{Js})^{-1}$, $M_0^{\text{py}} = 5 \times 10^{-6} \text{ m}^4/(\text{Js})^{-1}$, $Q^{\text{py}} = 140 \text{ kJ/mol}$ und $Q^{\gamma\gamma} = 185 \text{ kJ/mol}$. Damit ergibt sich $M^{\gamma\gamma} = 2,0 \times 10^{-12} \text{ m}^4/(\text{Js})^{-1}$ und $M^{\text{py}} = 3,8 \times 10^{-13} \text{ m}^4/(\text{Js})^{-1}$.

8.3.2 Ergebnisse und Diskussion

Perlitauflösung

Zunächst wird die Austenit-Perlit-Umwandlung betrachtet. In Abb. 8.16 ist das Wachstum der Austenitkörner dargestellt. An den in Abb. 8.15 gekennzeichneten Stellen wachsen die Austenitkeime in die perlitischen Bereiche hinein, bis der Perlit vollständig aufgelöst ist. Die Morphologie der Keime in Abb. 8.15(b) ähnelt in der frühen Wachstumsphase Halbkreisen. Das Wachstum dauert so lange an, bis sich austenitische Keime treffen bzw. kein Perlit mehr zur weiteren Umwandlung zur Verfügung steht. Da lediglich die Perlit/Austenit-Grenzfläche eine Mobilität aufweist, finden keine weiteren Prozesse statt. Zum Zeitpunkt $t = 5950\Delta t$ ist Perlit vollständig aufgelöst und die Simulation wird gestoppt.

Ferrit-Austenit-Umwandlung

Die zum Zeitpunkt $t = 5950\Delta t$ vorhandene Mikrostruktur dient als Ausgangspunkt für die Ferrit-Austenit-Umwandlung. Es liegt nun in den zuvor perlitischen Bereichen übersättigter Austenit vor, der bestrebt ist, durch das Wachstum zu einem chemischen Gleichgewicht mit Ferrit zu gelangen. Die

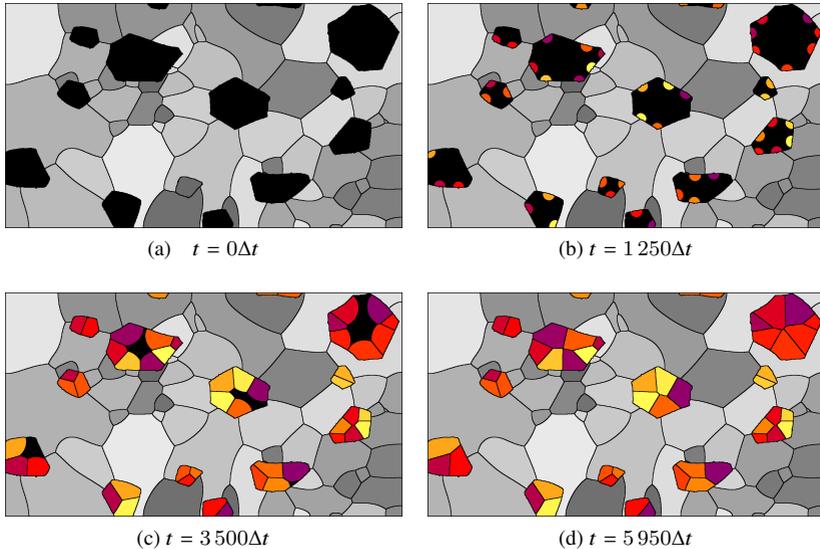


Abbildung 8.16: Perlit-Austenit-Umwandlung. Perlitische Regionen sind in Schwarz dargestellt, ferritische Körner sind in Grautönen eingefärbt und Austenit ist in Farbe eingezeichnet.

Mikrostrukturentwicklung der Ferrit-Austenit-Umwandlung und die Kohlenstoffkonzentration c_c^γ in Bereichen mit $\phi_\gamma > 0,5$ ist in Abb. 8.17 dargestellt. Dieser Prozess ist diffusionskontrolliert. Der Kohlenstoff diffundiert aus dem Inneren der austenitischen Bereiche zur Umwandlungsfront. Daher stellt sich innerhalb des Austenits ein Kohlenstoffgradient ein. In den kleineren austenitischen Inseln sinkt die Kohlenstoffkonzentration schneller in Richtung der Gleichgewichtskonzentration von $c_{c,\text{equil}}^\gamma = 2,628 \text{ mol-\%}$, da die Distanz zur Umwandlungsfront kürzer ist. In Abb. 8.18 ist der gemittelte Kohlenstoffgehalt entlang der in Abb. 8.17(a) eingezeichneten Auswertelinie dargestellt. Es ist zu erkennen, dass der Kohlenstoffgehalt zunächst im Bereich der Ferrit/Austenit-Grenzfläche in den zuvor perlitischen Bereichen zu fallen beginnt. Damit ist eine Grenzflächenbewegung verbunden. Die austenitischen Körner wachsen in den Ferrit hinein. Dieser Vorgang hält solange an, bis der Kohlenstoffgehalt in Austenit in etwa die Gleichgewichtskonzentration von $c_{c,\text{equil}}^\gamma = 2,628 \text{ mol-\%}$ erreicht hat. In den größeren Einschlüssen ist zum Zeitpunkt $t = 7 \text{ s}$ noch ein Konzentrationsgradient vorhanden, was in Abb. 8.17 zu erkennen ist. Folglich

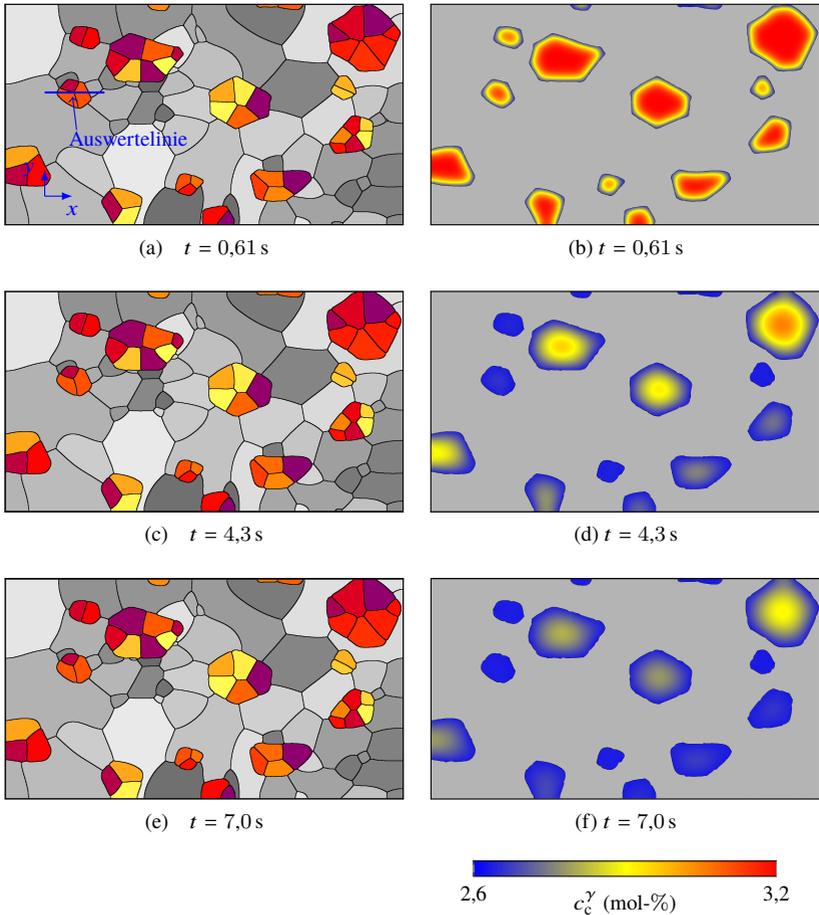


Abbildung 8.17: Mikrostruktur- und Kohlenstoffevolution während der Ferrit-Austenit-Umwandlung. (a, c, e) Mikrostruktur. (b, d, f) Kohlenstoffverteilung in Bereichen mit $\phi_\gamma > 0,5$.

ist die Austenitumwandlung zu diesem Zeitpunkt noch nicht abgeschlossen. In Abb. 8.19 ist die zeitliche Entwicklung des austenitischen Volumenanteils über der Zeit aufgetragen. Der Verlauf ähnelt einem beschränkten Wachstum. Nach einem raschen Anstieg der austenitischen Volumenfraktion verlangsamt sich das Wachstum im weiteren Verlauf und strebt gegen den Gleichgewichtswert

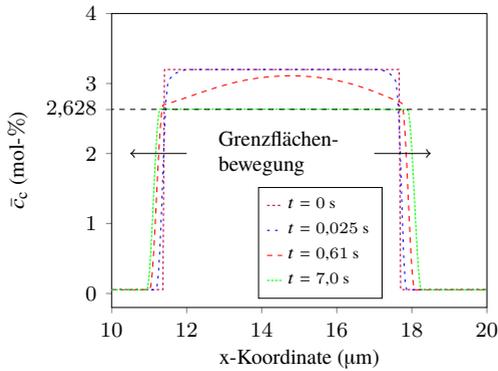


Abbildung 8.18: Kohlenstoffverteilung während der Umwandlung von Ferrit in Austenit. Der Linienplot ist entlang der Auswertelinie in Abb. 8.17(a) dargestellt.

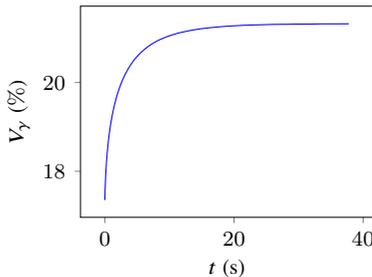


Abbildung 8.19: Zeitliche Entwicklung des austenitischen Volumenanteils.

von ca. 21,3 %.

Neben der Umwandlung von Ferrit in Austenit finden auch Kornwachstumsprozesse statt. In Abb. 8.17(a, c, e) ist Kornwachstum sowohl zwischen ferritischen Körnern, innerhalb der austenitischen Einschlüsse als auch zwischen beiden Phasenbestandteilen zu beobachten. Durch das Wegschumpfen kleiner Körner nimmt der mittlere Korndurchmesser mit steigender Austenitisierungszeit immer weiter zu.

In Abb. 8.20 ist das Ergebnis zum Zeitpunkt $t = 30$ dargestellt. Es sind Bereiche oberhalb und unterhalb der Gleichgewichtskonzentration erkennbar. Dies resultiert aus der Interaktion zwischen chemischen und krümmungsminimierenden

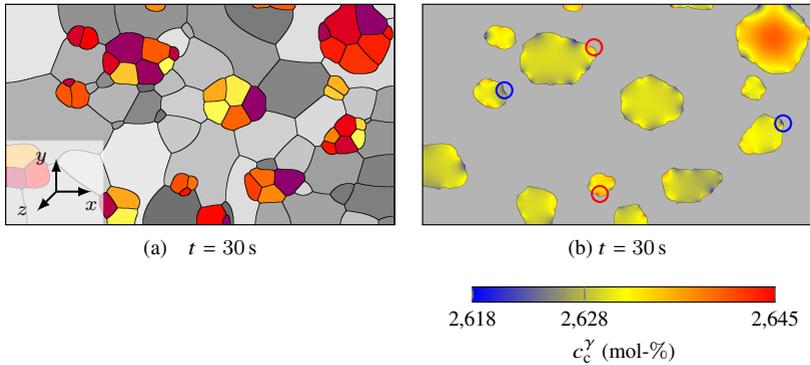


Abbildung 8.20: Mikrostruktur und Kohlenstoffverteilung zum Zeitpunkt $t = 30$ s. (a) Mikrostruktur. (b) Kohlenstoffverteilung in Bereichen mit $\phi_\gamma > 0,5$.

Einflüssen. Lokal gibt es die Situation, dass krümmungsminimierende Kräfte ein Wachstum von Austenit begünstigen. Dies ist z. B. der Fall, wenn kleine ferritische Körner an einer Ferrit/Austenit-Grenzfläche liegen. In Abb. 8.20(b) sind exemplarisch zwei dieser Stellen mit einem blauen Kreis markiert. Ebenso führen krümmungsminimierende Kräfte lokal zu einem Schrumpfen von austenitischen Keimen. Hier entstehen Konzentrationen leicht oberhalb der Gleichgewichtskonzentration, die dem Schrumpfen entgegenwirken. Zwei Stellen sind in Abb. 8.20(b) mit roten Kreisen markiert.

8.4 Martensitumwandlung

Im nächsten Schritt wird der Abschreckvorgang und die dabei auftretende Martensitumwandlung in den austenitischen Bereichen betrachtet.

8.4.1 Modellierung und Simulationsaufbau

Zur Beschreibung der Martensitumwandlung kommt das in Kapitel 4 vorgestellte und in Abschnitt 5.2 angewendete Modell zum Einsatz. Es wird wie in Abschnitt 5.2 ein freies Energiefunktional

$$\mathcal{F}(\phi, \nabla\phi, \bar{\varepsilon}) = \int_V W_{\text{intr}}(\phi, \nabla\phi) + \bar{W}_{\text{elast}}(\phi, \bar{\varepsilon}) + \bar{W}_{\text{chem}}(\phi) dV,$$

bestehend aus elastischen Beiträgen, chemischen Beiträgen und Grenzflächenbeiträgen verwendet. Als initiale Mikrostruktur dient das Ergebnis der simulierten Austenitumwandlung zum Zeitpunkt $t = 30$ s, das in Abb. 8.20 dargestellt ist. Für die Simulation der Martensitumwandlung wird angenommen, dass die Kohlenstoffkonzentration in Austenit überall 2,6 mol-% beträgt. Für diese Konzentration ergibt sich eine chemische treibende Kraft von $\Delta W_{\text{chem}}^{\gamma\alpha'} = -5,52 \times 10^8 \text{ J/m}^3$. Die Eigendehnungen werden nach Abschnitt 4.2 berechnet und ergeben $\varepsilon_1 = 0,129$ und $\varepsilon_3 = -0,181$. Damit ergibt sich eine Volumenzunahme von $[(1 + \varepsilon_1)^2 \times (1 + \varepsilon_3) - 1] \times 100 \% = 4,50 \%$. Wie in Kapitel 5 wird für die Simulation im Zweidimensionalen die Komponente ε_3 so berechnet, dass sich die gleiche Volumenzunahme wie im Dreidimensionalen ergibt. Unter dieser Bedingung ergibt sich $\varepsilon_3 = -0,075$. Zur Bestimmung der Parameter für die nichtlineare Fließfunktionen wird die gleiche Methodik wie in Abschnitt 5.2 verwendet. Die mittlere Korngröße des Ferrits, die als Input-Parameter zur Berechnung der Fließfunktionen dient (vgl. Gl. (5.2)), beträgt nach der Austenitisierung $8,3 \mu\text{m}$. Damit ergeben sich die in Abb. 8.21 dargestellten Spannungs-Dehnungskurven. Die gefitteten Parameter für Gl. (3.16) sind in Tabelle 8.2 aufgeführt. Es fällt auf, dass die Spannungs-Dehnungskurven

Tabelle 8.2: Gefittete Parameter für die nichtlineare Verfestigung, in GPa.

	Ferrit	Austenit	Martensit
σ_0	0,133	0,650	1,666
σ_∞	0,519	1,050	2,654
θ_0	2,575	14,26	216,7
θ_∞	0,0006	1,130	0,0006

für Ferrit niedriger liegen als in Abschnitt 5.2. Dies liegt daran, dass außer

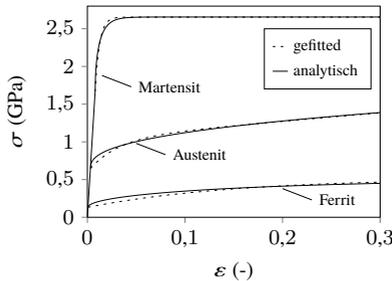


Abbildung 8.21: Analytische und gefittete Spannungs-Dehnungskurven für die verwendete FeC-Legierung.

Kohlenstoff keine weiteren Legierungselemente berücksichtigt wurden. Die Fließspannung bei sehr hohen plastischen Dehnungen von Martensit liegt höher als in Abschnitt 5.2, was aus einer höheren Kohlenstoffkonzentration in Austenit resultiert. Die Rauschamplitude wird auf $A = 0,8$ gesetzt und der Rauschterm (Gl. (4.8)) wird jeden 50. Zeitschritt aktiviert. Die erste Rauschamplitude wird mit einem Faktor von 2,5 verstärkt. Der Parameter zur Reduktion der Eigendehnungen in Ferrit/Austenit- und Austenit/Austenit-Grenzflächen wird auf $\varrho = 0,1$ gesetzt. Die plastische Relaxationsrate wird mit $k = 0,001$ angenommen. An den Simulationsrändern wird die Verschiebung in orthogonaler Richtung auf null gesetzt. Die Phasenfeldevolutionsgleichung nach Gl. (4.2) wird verwendet, wobei $\gamma^n = 13 \text{ J/m}^2$, $\gamma_{\alpha\beta\delta} = 2(\gamma_{\alpha\beta} + \gamma^n)$ und $\epsilon = 2,5\Delta x$ gilt. Damit ergibt sich unter Berücksichtigung der chemischen treibenden Kraft der Kontrollparameter zu $\mathcal{K} = 4,3$. Die dimensionslose Zeitschrittweite wird auf eins gesetzt und die Mobilität anhand des Stabilitätskriteriums nach Gl. (3.39) berechnet.

8.4.2 Ergebnisse und Diskussion

Das Ergebnis des Abschreckvorgangs ist in Abb. 8.22 dargestellt. An den Austenit/Austenit- und Ferrit/Austenit-Korngrenzen nukleiert Martensit und wächst ins Korninnere. Um die elastische Energiedichte zu minimieren, entsteht einerseits eine Mikrostruktur aus alternierenden martensitischen Varianten und andererseits setzen Plastifizierungsvorgänge ein. In Abb. 8.23 ist die zeitliche Entwicklung der martensitischen Volumenfraktion in anfangs austenitischen

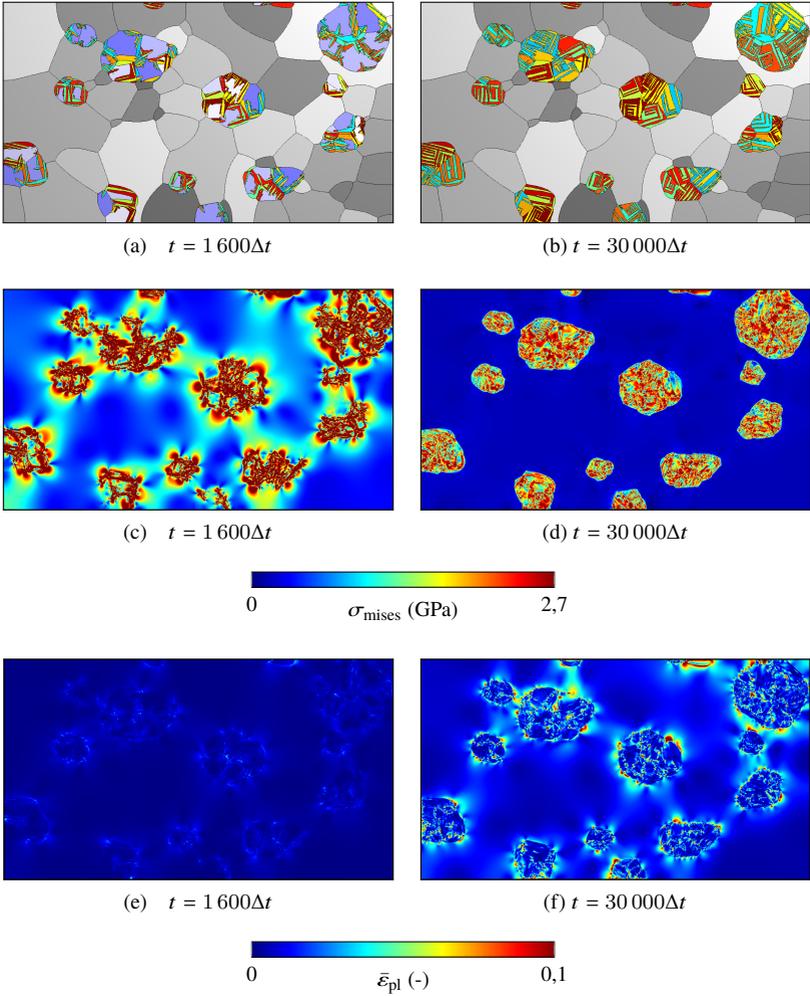


Abbildung 8.22: Simulation des Abschreckvorgangs. (a, b) Mikrostruktur. (c, d) Von Mises-Spannung. (e, f) Akkumulierte plastische Dehnung.

Körnern aufgetragen. Nachdem die ersten wachstumsfähigen Keime entstehen, nimmt der Volumenanteil rasch zu und nähert sich 100 % an. Die letzten zehn

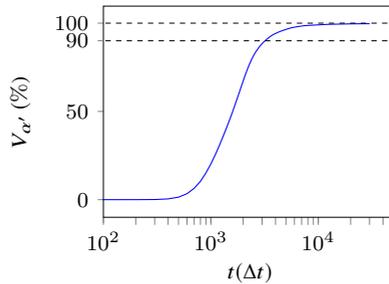


Abbildung 8.23: Zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils in anfangs austenitischen Körnern.

Prozent Austenit wandeln sich nur langsam um. Wie aus Abb. 8.22(c) zu erkennen ist, liegen vor allem im Ferrit Spannungen oberhalb der Fließgrenze vor. In Abb. 8.24 ist die im Simulationsgebiet gemittelte von Mises-Spannung und die akkumulierte plastische Dehnung über der Zeit aufgetragen. Der Effekt der plas-

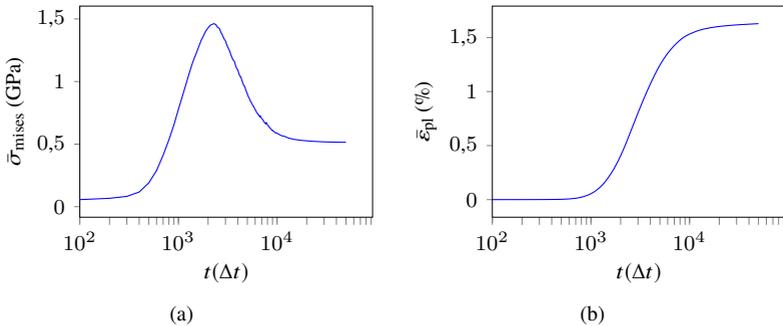


Abbildung 8.24: Im Simulationsgebiet gemittelte von Mises-Spannung und akkumulierte plastische Dehnung. (a) Von Mises-Spannung. (b) Akkumulierte plastische Dehnung.

tischen Relaxationsrate ist gut zu erkennen. Die gemittelte von Mises-Spannung zeigt ein Maximum zum Zeitpunkt $t = 2\,300\Delta t$. Zu diesem Zeitpunkt beträgt die Volumenfraktion $V_{\alpha'} = 77\%$ und die gemittelte plastische Dehnung $0,54\%$. Damit liegt die Plastifizierung erst bei einem Drittel des späteren Wertes. In der Folge werden die hohen Spannungen durch eine verstärkte Plastifizierung abgebaut. Zum Zeitpunkt $t = 3\,200\Delta t$ liegt die martensitische Volumenfraktion

über 90 % und die gemittelte plastische Dehnung bei 0,87 %. Während die letzten zehn Prozent Austenit in Martensit umgewandelt werden, entsteht folglich die Hälfte der plastischen Dehnungen im System. Die Plastifizierung gegen Ende der Simulation führt zu einer Reduktion der Spannungen, sodass Austenit vollständig umgewandelt wird (vgl. Kapitel 5.2).

8.5 Fazit

In diesem Kapitel wurden die bei der Wärmebehandlung auftretenden Mikrostrukturentwicklungen mithilfe des Multiphasenfeldlösers PACE3D abgebildet. Dabei wurden die Teilschritte Rekristallisation, Austenitumwandlung und Martensitumwandlung sequenziell gekoppelt. Als Ausgangspunkt wurde eine mit Abaqus durchgeführte Simulation des Kaltwalzens verwendet, die die orts aufgelöste Verteilung der Verformungsenergiedichte als treibende Kraft für die Rekristallisation bereitstellte. Mithilfe dieser Simulationsmethodik wurde die Morphologie der Körner als wesentliches Mikrostrukturmerkmal über die gesamte Wärmebehandlungskette an einem Beispiel betrachtet. Die in diesem Abschnitt abgebildete Prozessroute, inklusive Ausschnitte der Mikrostruktur zu Beginn und am Ende der unterschiedlichen Teilschritte, ist in Abb. 8.25 dargestellt. Die auf diesem Weg erhaltenen Mikrostrukturen können in einem weiteren Schritt als Basis für virtuelle Zugversuche dienen. Hierbei ist von besonderer Bedeutung, dass zusätzlich zur Mikrostruktur die durch die Martensitumwandlung in das System einbrachten Spannungen und plastischen Verformungen als Ausgangsbedingung zur Verfügung stehen, was die Genauigkeit der virtuellen Zugversuche erhöht [132].

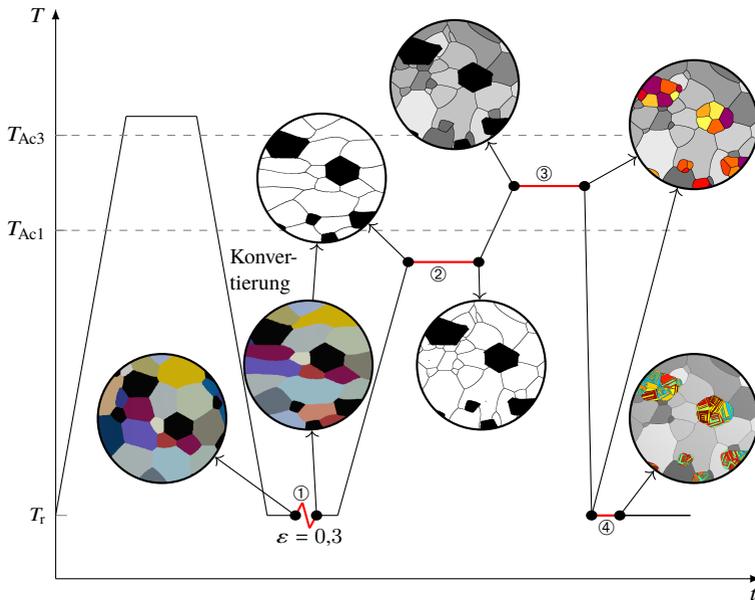


Abbildung 8.25: Simulierte Mikrostrukturentwicklung während der Wärmebehandlung von Dualphasenstahl. Als Basis diente eine mit Abaqus durchgeführte Simulation des Kaltwalzens (①). Nach Konvertierung der Daten auf eine äquidistante Diskretisierung wurde die nachfolgende Wärmebehandlung, bestehend aus den Teilschritten Rekristallisation (②), Austenitumwandlung (③) und martensitischer Umwandlung (④), mit PACE3D durchgeführt. Perlit ist durchgängig in Schwarz dargestellt.

9 Zusammenfassung und Ausblick

9.1 Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden Multiphasenfeldmodelle zur Simulation ausgewählter Phasenumwandlungen während der Wärmebehandlung von Stahl entwickelt, umgesetzt und für Simulationsstudien angewendet. Die entwickelten chemomechanischen Modelle wurden in das Softwarepaket `PACE3D` integriert, wobei ein besonderes Augenmerk auf die Anwendbarkeit für großskalige Simulationsstudien und auf die effiziente Gebietsparametrisierung gelegt wurde. Für jeden Anwendungsfall wurde ein freies Energiefunktional aufgestellt, das neben den Grenzflächenbeiträgen die für die Mikrostrukturentwicklung ausschlaggebenden volumetrischen Energiedichtebeiträge enthält. Dabei kamen in dieser Arbeit sechs unterschiedliche volumetrische Energiedichtebeiträge zum Einsatz.

Als zentrales Ergebnis dieser Arbeit wurde ein neuartiges Multiphasenfeldmodell zur Simulation der martensitischen Umwandlung vorgestellt und die Anwendbarkeit sowohl für großskalige als auch für dreidimensionale Simulationen unter Beweis gestellt. Damit wurde erstmals die martensitische Umwandlung beim Abschrecken von Dualphasenstahl unter Auflösung der martensitischen Variantenbildung numerisch dargestellt und die Auswirkungen auf die ferritische Matrix detailliert analysiert. Mit der Bainitumwandlung und dem Wachstum von Widmanstätten-Ferrit wurden zwei weitere Phasenumwandlungen modelliert, bei denen elastische treibende Kräfte eine entscheidende Rolle bei der Mikrostrukturausbildung spielen. Bei der Auswertung der Simulationsergebnisse stand im Besonderen die Interaktion über das Spannungs- und Konzentrationsfeld zwischen jeweils zwei Untereinheiten bzw. Nadeln im Vordergrund, um das Nukleations- bzw. Wachstumsverhalten zu verstehen. Die Simulationsergebnisse dieser drei Umwandlungsarten sind in Abb. 9.1 in dem Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubild aus Abb. 2.1(b) dargestellt. In all diesen Simulationen wurde eine elastische treibende Kraft basierend

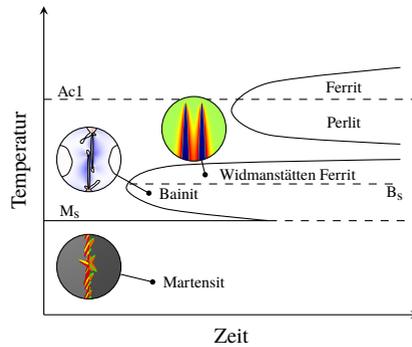


Abbildung 9.1: Isothermes Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubild, nach [9]. Zusätzlich sind Simulationsergebnisse der in dieser Arbeit behandelten Phasenumwandlungen aufgeführt.

auf den mechanischen Sprungbedingungen verwendet, wodurch ungewollte Energiebeiträge in der Grenzflächenregion vermieden werden können.

Neben der Modellierung einzelner Phasenumwandlungen war die Realisierung einer digitalen Prozesskette ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit. Am Beispiel von Dualphasenstahl wurde die Möglichkeit aufgezeigt, wie die bei der Blechherstellung auftretenden morphologischen Änderungen durch Kaltwalzen, Rekristallisation, Austenitumwandlung und Martensitumwandlung mithilfe von sequentiell gekoppelten FE- und Multiphasenfeldsimulationen beschrieben werden können. Die Morphologie der Körner wurde dabei als wesentliches Mikrostrukturmerkmal über alle Prozessschritte hinweg verfolgt, sodass die Kornstruktur und der elastoplastische Materialzustand für weiterführende Untersuchungen zur Verfügung gestellt werden.

9.2 Ausblick

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modelle können einerseits als Ausgangspunkt für weitere Modellentwicklungen dienen und andererseits bereits in ihrer bestehenden Form für weitere simulative Untersuchungen verwendet werden. Insbesondere das vorstellte Modell für die martensitische Umwandlung ist aufgrund der zugrunde liegenden Multiphasenfeldformulierung flexibel einsetzbar und wurde bereits erfolgreich für die Darstellung der martensitischen

Umwandlungen in anderen Szenarien genutzt, wie in Abb. 9.2 und Abb. 9.3 verdeutlicht wird. Während die Modellierung der spannungsinduzierten Mar-

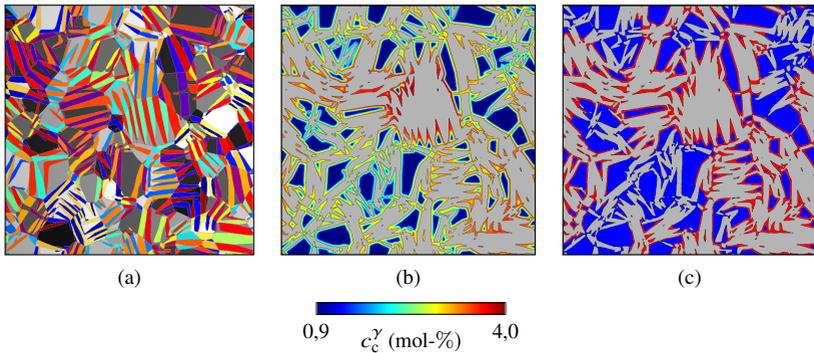


Abbildung 9.2: Phasenfeldsimulation des Abschreckens und Umverteilens. (a) Simulierte Mikrostruktur mithilfe des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modells für die martensitische Umwandlung. Der Volumenanteil des Martensits beträgt 60 %. (b) Kohlenstoffverteilung in Austenit c_c^γ nach 52 s. Bereiche mit einem Volumenanteil von über 50 % Martensit sind grau eingefärbt. (c) Kohlenstoffreicher Austenit. Austenit mit einem Kohlenstoffgehalt von $c_c^\gamma > 2,8$ mol-% ist bei Raumtemperatur stabil und ist in Rot dargestellt. In Abhängigkeit von der Haltezeit für das Umverteilen kann der Anteil des Restaustenits bestimmt werden. Die Ergebnisse stammen aus der Arbeit von Kubendran Amos et al. [150].

tensitumwandlung mit der Phasenfeldmethode in der Literatur hinreichend beschrieben wird, z. B. in [32, 52, 263], und auch mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Modell möglich ist (vgl. Abschnitt 4.5), findet die verformungsinduzierte Martensitumwandlung bisher kaum Beachtung. Hierbei besteht die Herausforderung darin, die durch plastische Verformungen in das Material eingebrachten Scherbänder als günstige Nukleationsstellen für die Martensitumwandlung in das Modell zu integrieren. Eine weitere interessante Möglichkeit für zukünftige Untersuchungen in Polykristallen ist die Berücksichtigung von bis zu 24 martensitischen Varianten, wie in [58] in einem Einkristall gezeigt wurde. Um den teils großen elastischen Dehnungen und dem Plastizitätsverhalten einzelner Gefügebestandteile besser gerecht werden zu können, kann die Berücksichtigung von großen Deformationen und die Verwendung von Kristallplastizität die Qualität der Ergebnisse weiter verbessern.

Die Martensitumwandlung kann je nach Kohlenstoffgehalt im Material zu Mikrorissen [264] und damit zu einer Vorschädigung des Materials führen. Um

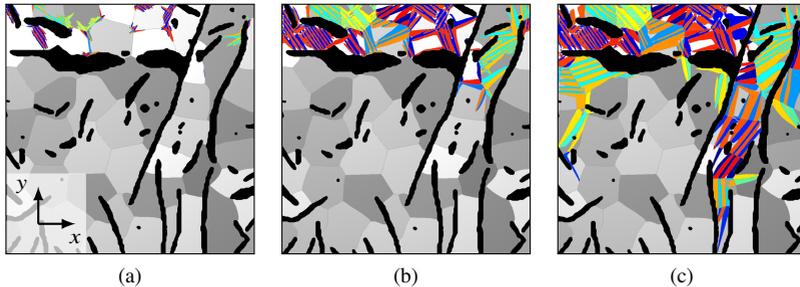


Abbildung 9.3: Martensitumwandlung in einer Mikrostruktur, bestehend aus Austenit (dargestellt in Graustufen) und Graphit (in Schwarz eingefärbt), zu verschiedenen Zeitpunkten. In dieser Simulation liegt in y -Richtung ein konstanter Gradient in der chemischen treibenden Kraft vor, wobei am unteren Simulationsrand die chemische treibende Kraft am geringsten und am oberen Simulationsrand am größten ist. Dies spiegelt eine lokal unterschiedliche Abkühlung wider. Aufgrund der höheren treibenden Kraft nukleiert Martensit zunächst im oberen Drittel des Gebiets und breitet sich mithilfe des autokatalytischen Nukleationsmechanismus auch nach unten aus. Die Graphitlamellen sind dabei inert und behindern die Ausbreitung des Martensits. Die Martensitumwandlung ist mit dem in dieser Arbeit entwickelten Modell modelliert. Die Ergebnisse stammen aus der Arbeit von Schoof et al. [200].

diesen Mechanismus besser zu verstehen, kann das formulierte Martensitmodell mit einem Modell für die Rissausbreitung [265] kombiniert werden. Ebenso können die in dieser Arbeit gewonnenen Mikrostrukturen, inklusive der aufgelösten martensitischen Varianten, als Ausgangspunkt für die Untersuchung der Rissausbildung in Dualphasenstahl unter mechanischer Belastung dienen. Der für die Modellierung der martensitischen Umwandlung entwickelte Nukleationsmechanismus kann zudem als Ausgangspunkt für die Modellierung der Nukleation in weiteren Anwendungsfällen dienen. Dieser Ansatz kam z. B. bereits bei der Simulation eutektischer Kolonien erfolgreich zum Einsatz [266]. Vor allem bei der Modellierung der bainitischen Umwandlungen gibt es noch viele offene Fragen. Bisher ist kein überzeugender Modellierungsansatz bekannt, um im Rahmen einer Phasenfeldmodellierung ein Anhalten einer bainitischen Untereinheit aufgrund von Plastifizierungseffekten darzustellen. Bereits mit dem vorgestellten Ansatz kann der Mechanismus zur Bildung einer bainitischen Nadel, die aus vielen Untereinheiten aufgebaut ist, unter Berücksichtigung weiterer Untereinheiten untersucht werden. Um ein umfänglicheres Verständnis der Bainitbildung aufzubauen, muss zudem die Karbidbildung integriert werden. Das Wachstum von Widmanstätten-Ferrit kann durch das Vorhandensein weite-

rer Nadeln beeinflusst werden, doch bisher konzentriert sich die Literatur auf die Darstellung einzelner Nadeln [78, 82, 83, 88]. Um das Nukleations- und Wachstumsverhalten von Widmanstätten-Ferrit in polykristallinen Gefügen zu verstehen, können mit dem vorgestellten Modell weitere Simulationsstudien durchgeführt werden.

In dieser Arbeit wurden die Rekristallisation und die Austenitisierung während der Wärmebehandlung von Dualphasenstahl als sequenziell ablaufende Prozesse betrachtet. Je nach gewählter Wärmebehandlungsrouten ist auch eine Überlagerung beider Umwandlungen möglich [100]. Um die ganze Bandbreite an Mikrostrukturen, die nach der Wärmebehandlung vorliegen können, darzustellen, müssen beide Prozesse gleichzeitig betrachtet werden und z. B. auch die Nukleation von Austenit an Ferrit/Ferrit-Korngrenzen berücksichtigt werden. Die dabei gewonnenen Mikrostrukturen können als Ausgangspunkt für virtuelle Zugversuche dienen, um einen direkten Zusammenhang zwischen der Wärmebehandlung und dem mechanischen Verformungsverhalten unter einer äußeren Last darzustellen.

Bisher werden Simulationen zur Untersuchung einer einzelnen spezifischen Phasenumwandlung eingestellt, d. h. es wird *a priori* festgelegt, welche Gefügeänderung abgebildet werden soll. Eine folgerichtige, wenn auch anspruchsvolle Weiterentwicklung wäre ein Modell, das in Abhängigkeit von den lokal vorhandenen Temperaturverläufen bzw. Abkühlgeschwindigkeiten unterschiedliche Phasenumwandlungstypen darstellen kann. Damit wären Untersuchungen von Prozessen möglich, bei denen sich Austenit einerseits zu Bainit und andererseits zu Martensit umwandelt [267] und die Reaktion eines Systems auf unterschiedliche Wärmebehandlungsrouten könnte in einem deutlich größeren Parameterraum dargestellt werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Vielzahl von Modellen für die Darstellung unterschiedlicher Phasenumwandlungen während der Wärmebehandlung von Stahl vorgestellt. Damit konnten wesentliche Mechanismen beschrieben und erklärt werden. Notwendige Materialparameter wurden dabei, soweit möglich, aus experimentellen Arbeiten bzw. thermodynamischen Datenbanken entnommen und weitere Kalibrierungsgrößen an in der Literatur verfügbaren Experimenten gefittet. Neuartige experimentelle Methoden erlauben eine dreidimensionale Rekonstruktion von umgewandeltem Lattenmartensit [237, 268] und eröffnen Möglichkeiten, die mit den vorgestellten Modellen erzielten Mikrostrukturen mit experimentellen, dreidimensionalen Datensätzen zu vergleichen.

Die verwendeten Modelle und Methodiken stellen die bereits heute bestehende Leistungsfähigkeit der computergestützten Materialentwicklung unter Beweis

und zeigen weitere Potentiale auf, wie die Entwicklung hochfester Stähle mit Hilfe modernster numerischer Verfahren unterstützt und beschleunigt werden kann.

A Anhang

A.1 Entdimensionalisierung

In Tabelle A.1 sind die vier unabhängigen Größen aufgeführt, die im Rahmen dieser Arbeit zur Berechnung der dimensionslosen Input-Parameter mithilfe des Zusammenhangs

$$\text{dimensionslose Größe} = \frac{\text{dimensionsbehaftete Größe}}{\text{Umrechnungsgröße mit gleicher physikalischer Einheit}}$$

für die Simulationen mit PACE3D verwendet wurden. Alle weiteren notwendigen Umrechnungsgrößen lassen sich daraus berechnen.

Tabelle A.1: Umrechnungsgrößen für die Entdimensionalisierung.

Größe	Wert	Einheit
Energiedichte	1×10^{12}	J/m ³
Länge	1×10^{-9}	m
Zeit	1×10^{-10}	s
Temperatur	1	K

A.2 Einfluss der Interpolationsfunktion auf die Kinetik und die numerische Grenzflächenenergie

In der Literatur kommen unterschiedliche Interpolationsfunktionen zur Gewichtung der volumetrischen Energiedichtebeiträge zum Einsatz, wobei die

volumetrischen Energiedichtebeiträge in diesen Fällen direkt über eine Variationsableitung in die Phasenfeldevolutionsgleichung nach Gl. (3.3) eingehen [154, 156]. Die Wahl der Interpolationsfunktionen kann jedoch einen Einfluss auf die Wiedergabe der Kinetik haben. Die volumetrischen Energiedichtebeiträge

$$\bar{W}_{\text{bulk}}(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\phi}) W_{\text{bulk}}^{\alpha}.$$

werden dabei mit einer normierten Interpolationsfunktion

$$h_i^{\alpha}(\boldsymbol{\phi}) = \frac{\tilde{h}_i^{\alpha}(\phi_{\alpha})}{\sum_{\beta} \tilde{h}_i^{\beta}(\phi_{\beta})}$$

gewichtet, wobei nach [160, 269] unterschiedliche Interpolationsfunktionen möglich sind:

$$\tilde{h}^{\alpha}(\phi_{\alpha}) = \begin{cases} \tilde{h}_0^{\alpha} = \phi_{\alpha} \\ \tilde{h}_1^{\alpha} = \phi_{\alpha}^2(3 - 2\phi_{\alpha}) \\ \tilde{h}_2^{\alpha} = \phi_{\alpha}^3(6\phi_{\alpha}^2 - 15\phi_{\alpha} + 10) \\ \tilde{h}_3^{\alpha} = \phi_{\alpha}^2 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Der Einfluss unterschiedlicher Interpolationsfunktionen auf die Kinetik einer Grenzfläche zwischen zwei Phasen und die numerische Grenzflächenenergie ist in Abb. A.1 zu erkennen. Der Simulationsaufbau und die verwendeten Parameter sind in Abschnitt 3.11.1 gegeben. Dabei steht h_{Δ} für die Verwendung des Ordnungsparameters ϕ_{α} zur Gewichtung der Energiedichtebeiträge nach Gl. (3.2) in Kombination mit der Evolutionsgleichung (3.6). Die anderen Ergebnisse sind mit den in Gl. (A.1) gegebenen Interpolationsfunktionen und der Evolutionsgleichung (3.3) erzielt.

Es ist zu erkennen, dass die Verwendung des Ordnungsparameters ϕ_{α} zur Gewichtung der Energiedichtebeiträge in Kombination mit der Evolutionsgleichung (3.6) die besten Resultate liefert. Bei ausreichender Stabilisierung der Grenzfläche für den Fall $\gamma_{\alpha\beta} = 10$ bzw. $\mathcal{K} = 0,1$ liefern alle Interpolationsfunktionen überzeugende Ergebnisse und die Wahl der Interpolationsfunktion ist nicht ausschlaggebend.

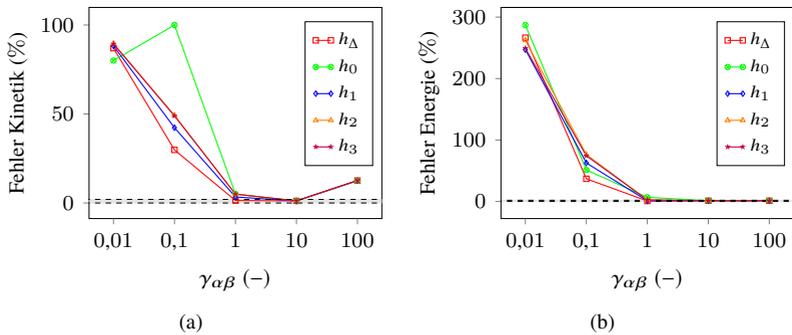


Abbildung A.1: Fehler für unterschiedliche Verhältnisse zwischen grenzflächenaufbauenden Termen und volumetrischen treibenden Kräften für unterschiedliche Interpolationsfunktionen. (a) Fehler in der resultierenden Kinetik. (b) Fehler in der Grenzflächenenergie. Der Bereich mit einem Fehler von kleiner gleich zwei Prozent ist grau unterlegt.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Verformungsverhalten unterschiedlicher Stahlsorten	2
3.1	Dimensionsloser Verlauf der potentiellen Energiedichte einer Grenzfläche zwischen zwei Phasen	28
3.2	Schematische Darstellung des Verlaufs der freien chemischen Energie für Martensit und Austenit als Funktion der Temperatur	30
3.3	Kreisförmiger Einschluss in einem zweidimensionalen System .	44
3.4	Gleichgewichtsprofil des Ordnungsparameters	47
3.5	Dimensionsloser Verlauf der Energiedichte W_{sum} in Abhängigkeit von ϕ_α	55
3.6	Fehler für unterschiedliche Verhältnisse zwischen grenzflächen- aufbauenden Termen und volumetrischen treibenden Kräften . .	62
3.7	Grenzflächengeschwindigkeit eines kreisförmigen Keimes in 2D ohne Berücksichtigung volumetrischer treibender Kräfte	64
3.8	Grenzflächengeschwindigkeit eines kreisförmigen Keimes in 2D mit Berücksichtigung volumetrischer treibender Kräfte	65
4.1	Bain'sche Konstruktion	71
4.2	Verlauf der Gitterkonstanten in Abhängigkeit von der Kohlenstoff- konzentration	72
4.3	Konstruktion der drei energetisch gleichwertigen Bain-Varianten	72
4.4	Martensitumwandlung in einem quasi-eindimensionalen Gebiet .	76
4.5	Prozentualer Fehler für unterschiedliche Grenzflächenbreiten . .	77
4.6	Reduktion der Eigendehnungen in einer Austenit/Austenit-Grenzfläche	79
4.7	Mikrostrukturen für unterschiedliche Werte des Parameters ρ . .	79
4.8	Zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils für unterschiedliche Werte des Parameters ρ	80
4.9	Mikrostrukturentwicklung in einem Austenitkorn	82

4.10	Zeitlicher Verlauf der martensitischen Volumenanteile unter dem Einfluss einer äußeren Spannung	82
4.11	Dreidimensionale Martensitumwandlung im Einkristall	84
4.12	Zeitlicher Verlauf der Volumenfraktion der drei Bain-Varianten	84
5.1	Konvertierung der EBSD-Messung	89
5.2	Erstellung der Ferrit/Austenit-Mikrostruktur	90
5.3	Zeitliche Entwicklung der martensitischen Varianten innerhalb von zwei austenitischen Körnern, die von einer ferritischen Matrix umgeben sind	94
5.4	Nukleation von martensitischen Varianten innerhalb eines kreisförmigen austenitischen Korns	96
5.5	Zeitlicher Verlauf der prozentualen Martensitumwandlung an Ferrit/Austenit- und Austenit/Austenit-Korngrenzen	96
5.6	Mikrostruktur und von Mises-Spannung eines Ausschnitts für den Zeitpunkt $t = 6\,000\Delta t$	97
5.7	Ferritisch-martensitische Mikrostruktur zum Zeitpunkt $t = 6\,000\Delta t$ mit Berücksichtigung der Volumenausdehnung	99
5.8	Ferritisch-martensitische Mikrostruktur zum Zeitpunkt $t = 6\,000\Delta t$ ohne Berücksichtigung der Volumenausdehnung	100
5.9	Zeitlicher Verlauf des martensitischen Volumenanteils in Austenit	101
5.10	Von Mises-Spannungsverteilung	101
5.11	Analytische und gefittete Spannungs-Dehnungskurven für die einzelnen Phasen des untersuchten DP600	105
5.12	Resultierende ferritisch-martensitische Mikrostrukturen	108
5.13	Zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils $V_{\alpha'}$ in ursprünglich austenitischen Körnern.	109
5.14	Endzustand der von Mises-Spannung und der akkumulierten plastischen Dehnung	111
5.15	Zeitliche Entwicklung der gemittelten akkumulierten plastischen Dehnung	112
5.16	Akkumulierte plastische Dehnung als Funktion des Mindestabstandes zum nächsten martensitischen Bereich	113
5.17	Gemittelte akkumulierte plastische Dehnung pro Ferritkorn in Abhängigkeit vom Anteil der Ferrit/Martensit-Korngrenzen	115

5.18	Plastische Energiedichte W_{pl} für Austenit und Martensit als Funktion der akkumulierten plastischen Dehnung $\bar{\epsilon}_{pl}$	116
5.19	Zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils $V_{\alpha'}$ in anfänglich austenitischen Körnern	116
5.20	Zeitliche Entwicklung der gemittelten akkumulierten plastischen Dehnung für verschiedene Modellierungsansätze	117
5.21	Vergleich zweier verschiedener Plastizitätsansätze für die Bestimmung der plastischen Materialparameter im diffusen Grenzflächenbereich	118
5.22	Martensitischer Einschluss mit unterschiedlicher Anzahl an Latten	120
5.23	Zusammenhang zwischen der Anzahl der Latten in einem Austenitkorn und der gemittelten Plastifizierung im umliegenden Ferrit	121
6.1	Ausgangszustand zur Simulation des Wachstums einer bainitischen Untereinheit	125
6.2	Verlauf der Kohlenstoffdiffusivität in Austenit als Funktion der Kohlenstoffkonzentration	127
6.3	Superpositionsprinzip der volumetrischen Energiedichtebeiträge	130
6.4	Wachstum der ersten bainitischen Untereinheit	131
6.5	Zeitlicher Verlauf der Fläche der zweiten bainitischen Untereinheit, die an unterschiedlichen Positionen gesetzt wurde	132
6.6	Elastische Interaktionsenergie $W_{int}^{\alpha_b,2}$ zum Zeitpunkt $t = 1\ 306\Delta t$.	133
6.7	Energielandschaft um eine bainitische Untereinheit	134
6.8	Wachstum einer zweiten bainitischen Untereinheit	135
6.9	Kohlenstoffumverteilung aus einer übersättigten bainitischen Untereinheit	136
6.10	Differenz der freien chemischen Energie zwischen Austenit und Bainit als Funktion der Kohlenstoffkonzentration	137
6.11	Kohlenstoffkonzentrationsverläufe für unterschiedliche Zeitpunkte	138
6.12	Kohlenstoffreicher Bereich, in dem ein Wachstum einer zweiten bainitischen Untereinheit ungünstig ist	139
6.13	Fläche mit einer Kohlenstoffkonzentration von $c_c^\gamma > 6,3\ \text{mol-}\%$.	139
6.14	Energielandschaft im Bereich der Spitze einer bainitischen Untereinheit	140

6.15	Kombinierte Energielandschaft im Bereich der Spitze einer bainitischen Untereinheit	142
7.1	Initiale Mikrostruktur für die Simulation des Wachstums von Widmanstätten-Ferrit	147
7.2	Wachstum einer einzelnen Widmanstätten-Nadel	148
7.3	Simulierte Widmanstätten-Struktur zum Zeitpunkt $t = 3,7 \mu\text{s}$	149
7.4	Zeitliche Entwicklung der Fläche einer Widmanstätten-Nadel	150
7.5	Im Simulationsgebiet gemittelte treibende Kraft	151
7.6	Qualitative Darstellung der elastischen Interaktionsenergie für Setting III	152
8.1	Schematische Darstellung einer Prozessroute zur Herstellung von Dualphasenstahl	153
8.2	FE-Simulation des Kaltwalzens	156
8.3	Mikrostruktur nach Konvertierung auf eine äquidistante Diskretisierung	159
8.4	Inhomogene Verteilung der Verformungsenergiegedichte im Ferrit	160
8.5	Grenzflächenenergie und Mobilität als Funktion der Missorientierung der Kristallgitter	161
8.6	Nukleationswahrscheinlichkeit	163
8.7	Zeitliche Abnahme der gespeicherten Verformungsenergiegedichte aufgrund Erholung	164
8.8	Mikrostrukturentwicklung während der Rekristallisation	166
8.9	Abnahme der gespeicherten Energiegedichte während der Rekristallisation	167
8.10	Missorientierung zwischen Subkörnern in der Umgebung eines Keims, der an einer Korngrenze zweier Großkörner nukleiert	168
8.11	Missorientierung zwischen Subkörnern in der Umgebung eines Keims, der innerhalb eines Großkorns nukleiert	169
8.12	Mikrostruktur mit den markierten Nukleationsstellen der Subkörner	170
8.13	Nukleationsstellen und -events	170
8.14	Flächenanteil der rekristallisierenden Keime, bezogen auf den gesamten ferritischen Bereich	171
8.15	Ausgangsmikrostruktur zur Simulation der Austenitumwandlung	173

8.16	Perlit-Austenit-Umwandlung	176
8.17	Mikrostruktur- und Kohlenstoffevolution während der Ferrit-Austenit-Umwandlung	177
8.18	Kohlenstoffverteilung während der Umwandlung von Ferrit in Austenit	178
8.19	Zeitliche Entwicklung des austenitischen Volumenanteils	178
8.20	Mikrostruktur und Kohlenstoffverteilung zum Zeitpunkt $t = 30$ s	179
8.21	Analytische und gefittete Spannungs-Dehnungskurven für die verwendete FeC-Legierung	181
8.22	Simulation des Abschreckvorgangs	182
8.23	Zeitliche Entwicklung des martensitischen Volumenanteils in anfangs austenitischen Körnern	183
8.24	Im Simulationsgebiet gemittelte von Mises-Spannung und akkumulierte plastische Dehnung	183
9.1	Isothermes Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubild	188
9.2	Sequenziell gekoppelte Phasenfeldsimulation des Abschreckens und Umverteilens	189
9.3	Martensitumwandlung in einer Mikrostruktur, bestehend aus Austenit und Graphit, zu verschiedenen Zeitpunkten	190
A.1	Fehler für unterschiedliche Verhältnisse zwischen grenzflächenaufbauenden Termen und volumetrischen treibenden Kräften für unterschiedliche Interpolationsfunktionen	195

Tabellenverzeichnis

3.1	Eigenschaften von Gebieten mit unterschiedlichem Verhältnis von krümmungsminimierenden zu volumetrischen treibenden Kräften ohne Verwendung von $\Delta W_{acurv}^{\alpha\beta}$	67
3.2	Eigenschaften von Gebieten mit unterschiedlichem Verhältnis von grenzflächenaufbauenden zu volumetrischen treibenden Kräften mit Verwendung von $\Delta W_{acurv}^{\alpha\beta}$	68
5.1	Chemische Zusammensetzung des voestalpine® Dualphasenstahls in Masseprozent	90
5.2	Parameter für den elastischen Teil der elastoplastischen Simulationen	104
5.3	Parameter für die nichtlineare Verfestigung von Martensit und Ferrit	105
5.4	Für DP600-Stahl gefittete Parameter für die nichtlineare Verfestigung	105
6.1	Koeffizienten der freien chemischen Energiedichte für eine Temperatur von $T = 573, 15 \text{ K}$ und einer durchschnittlichen Kohlenstoffkonzentration von $1,968 \text{ mol-}\%$ bzw. $0,43 \text{ Ma-}\%$	126
7.1	Koeffizienten der freien chemischen Energiedichte für eine Temperatur von $T = 873 \text{ K}$ und einer durchschnittlichen Kohlenstoffkonzentration von $3,6 \text{ mol-}\%$ bzw. $0,8 \text{ Ma-}\%$	146
8.1	Koeffizienten der freien chemischen Energiedichte für eine Temperatur von $T = 1,028 \text{ K}$ und eine durchschnittliche Kohlenstoffkonzentration von $2,596 \text{ mol-}\%$ bzw. $0,57 \text{ Ma-}\%$	174
8.2	Gefittete Parameter für die nichtlineare Verfestigung	180
A.1	Umrechnungsgrößen für die Entdimensionalisierung	193

Literaturverzeichnis

- [1] World mining data 2018. <http://www.world-mining-data.info/wmd/downloads/PDF/WMD2018.pdf>, eingesehen am 30.07.2019.
- [2] H. Dieringa, K. Drechsler, T. Evertz, V. Flaxa, P. Furrer, R. Gadow, Z. Georgeou, R.-H. Gronebaum, K. U. Kainer und N. Kwiaton et al. Die Leichtbauwerkstoffe für den Fahrzeugbau. In: H. E. Friedrich (Hrsg.), *Leichtbau in der Fahrzeugtechnik*, Seiten 199–442. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2013.
- [3] H. Hofmann, D. Mattissen und T. W. Schaumann. Advanced cold rolled steels for automotive applications. *Steel Research International*, 80(1):22–28, 2009.
- [4] F. G. Caballero, M. J. Santofimia, C. García-Mateo, J. Chao und C. García de Andrés. Theoretical design and advanced microstructure in super high strength steels. *Materials & Design*, 30(6):2077–2083, 2009.
- [5] M. Militzer. Phase field modeling of microstructure evolution in steels. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 15(3):106–115, 2011.
- [6] E. Borukhovich, G. Du, M. Stratmann, M. Boeff, O. Shchyglo, A. Hartmaier und I. Steinbach. Microstructure design of tempered martensite by atomistically informed full-field simulation: From quenching to fracture. *Materials*, 9(8):673, 2016.
- [7] B.-A. Behrens, J. Schröder, D. Brands, L. Scheunemann, R. Niekamp, A. Chugreev, M. Sarhil, S. Uebing und C. Kock. Experimental and numerical investigations of the development of residual stresses in thermomechanically processed cr-alloyed steel 1.3505. *Metals*, 9(4):480, 2019.
- [8] F. Schwab. *Curing Simulations of a Fibre-Reinforced Thermoset on a Micro- and Nano-Scale*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2019.
- [9] L. C. D. Fielding. The bainite controversy. *Materials Science and Technology*, 29(4):383–399, 2013.

- [10] W. Bleck. *Werkstoffkunde Stahl*. Verlag Mainz, Aachen, 2010.
- [11] A. G. Khachaturyan. *Theory of structural transformations in solids*. Wiley, New York [u. a.], 1983.
- [12] Y. Wang und A. G. Khachaturyan. Three-dimensional field model and computer modeling of martensitic transformations. *Acta Materialia*, 45(2):759–773, 1997.
- [13] A. Artemev, Y. Jin und A. G. Khachaturyan. Three-dimensional phase field model of proper martensitic transformation. *Acta Materialia*, 49(7):1165–1177, 2001.
- [14] Y. M. Jin, A. Artemev und A. G. Khachaturyan. Three-dimensional phase field model of low-symmetry martensitic transformation in polycrystal: simulation of ζ_2 martensite in AuCd alloys. *Acta materialia*, 49(12):2309–2320, 2001.
- [15] Y. Wang und A. G. Khachaturyan. Multi-scale phase field approach to martensitic transformations. *Materials Science and Engineering: A*, 438:55–63, 2006.
- [16] M. Mamivand, M. A. Zaem und H. El Kadiri. A review on phase field modeling of martensitic phase transformation. *Computational Materials Science*, 77:304–311, 2013.
- [17] P. R. Rios und J. R. C. Guimarães. Microstructural path analysis of martensite burst. *Materials Research*, 13(1):119–124, 2010.
- [18] R. Shi und Y. Wang. Variant selection during α precipitation in ti–6al–4v under the influence of local stress—a simulation study. *Acta Materialia*, 61(16):6006–6024, 2013.
- [19] G. Xu, C. Wang, J. I. Beltrán, J. Llorca und Y. Cui. Landau modeling of dynamical nucleation of martensite at grain boundaries under local stress. *Computational Materials Science*, 118:103–111, 2016.
- [20] H. K. Yeddu, A. Malik, J. Ågren, G. Amberg und A. Borgenstam. Three-dimensional phase-field modeling of martensitic microstructure evolution in steels. *Acta Materialia*, 60(4):1538–1547, 2012.
- [21] A. Malik, G. Amberg, A. Borgenstam und J. Ågren. Phase-field modelling of martensitic transformation: the effects of grain and twin boundaries. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 21(8):085003, 2013.

- [22] A. Yamanaka, T. Takaki und Y. Tomita. Elastoplastic phase-field simulation of martensitic transformation with plastic deformation in polycrystal. *International Journal of Mechanical Sciences*, 52(2):245–250, 2010.
- [23] H. K. Yeddu, T. Lookman und A. Saxena. Strain-induced martensitic transformation in stainless steels: a three-dimensional phase-field study. *Acta Materialia*, 61(18):6972–6982, 2013.
- [24] W. Zhang, Y. M. Jin und A. G. Khachaturyan. Modelling of dislocation-induced martensitic transformation in anisotropic crystals. *Philosophical Magazine*, 87(10):1545–1563, 2007.
- [25] W. Zhang, Y. M. Jin und A. G. Khachaturyan. Phase field microelasticity modeling of heterogeneous nucleation and growth in martensitic alloys. *Acta Materialia*, 55(2):565–574, 2007.
- [26] S. Cui, Y. Cui, J. Wan, Y. Rong und J. Zhang. Grain size dependence of the martensite morphology—a phase-field study. *Computational Materials Science*, 121:131–142, 2016.
- [27] M. Ueda, H. Yasuda und Y. Umakoshi. Effect of grain boundary on martensite transformation behaviour in fe–32 at.% ni bicrystals. *Science and Technology of Advanced Materials*, 3(2):171, 2002.
- [28] S. Zhang, S. Morito und Y. Komizo. Variant selection of low carbon high alloy steel in an austenite grain during martensite transformation. *ISIJ international*, 52(3):510–515, 2012.
- [29] T. Song und B. C. De Cooman. Martensite nucleation at grain boundaries containing intrinsic grain boundary dislocations. *ISIJ International*, 54(10):2394–2403, 2014.
- [30] T. W. Heo und L.-Q. Chen. Phase-field modeling of displacive phase transformations in elastically anisotropic and inhomogeneous polycrystals. *Acta Materialia*, 76:68–81, 2014.
- [31] H. K. D. H. Bhadeshia. The bainite transformation: unresolved issues. *Materials Science and Engineering: A*, 273:58–66, 1999.
- [32] A. Malik, G. Amberg, A. Borgenstam und J. Ågren. Effect of external loading on the martensitic transformation—a phase field study. *Acta Materialia*, 61(20):7868–7880, 2013.
- [33] A. Artemev, Y. Jin und A. G. Khachaturyan. Three-dimensional phase field model and simulation of cubic to tetragonal martensitic transformation in polycrystals. *Philosophical Magazine A*, 82(6):1249–1270, 2002.

- [34] R. Shi, N. Zhou, S. R. Niezgodna und Y. Wang. Microstructure and transformation texture evolution during α precipitation in polycrystalline α/β titanium alloys—a simulation study. *Acta Materialia*, 94:224–243, 2015.
- [35] A. Yamanaka, T. Takaki und Y. Tomita. Elastoplastic phase-field simulation of self-and plastic accommodations in cubic \rightarrow tetragonal martensitic transformation. *Materials Science and Engineering: A*, 491(1):378–384, 2008.
- [36] X. H. Guo, S. Q. Shi und X. Q. Ma. Elastoplastic phase field model for microstructure evolution. *Applied Physics Letters*, 87(22):221910, 2005.
- [37] Z. Cong, Y. Murata, Y. Tsukada und T. Koyama. Prediction of the maximum dislocation density in lath martensitic steel by elasto-plastic phase-field method. *Materials transactions*, 53(9):1598–1603, 2012.
- [38] Z. Cong, Y. Murata, Y. Tsukada und T. Koyama. Phase field simulation of the sub-block microstructure in lath martensitic steels. *Materials transactions*, 53(10):1822–1825, 2012.
- [39] Z. Cong, Y. Murata, Y. Tsukada und T. Koyama. Elasto-plastic phase-field simulation of martensitic transformation in lath martensite steels. *Philosophical Magazine*, 93(14):1739–1747, 2013.
- [40] R. Schmitt, C. Kuhn, R. Müller und K. Bhattacharya. Crystal plasticity and martensitic transformations - a phase field approach. *Technische Mechanik*, 34(1):23–38, 2014.
- [41] R. Schmitt, C. Kuhn und R. Müller. On a phase field approach for martensitic transformations in a crystal plastic material at a loaded surface. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 29(4):957–968, 2017.
- [42] J. Kundin, D. Raabe und H. Emmerich. A phase-field model for incoherent martensitic transformations including plastic accommodation processes in the austenite. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(10):2082–2102, 2011.
- [43] J. Kundin, E. Pogorelov und H. Emmerich. Numerical investigation of the interaction between the martensitic transformation front and the plastic strain in austenite. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 76:65–83, 2015.
- [44] K. Ammar, B. Appolaire, S. Forest, M. Cottura, Y. Le Bouar und A. Finel. Modelling inheritance of plastic deformation during migration of phase

- boundaries using a phase field method. *Meccanica*, 49(11):2699–2717, 2014.
- [45] C. Herrmann, E. Schoof, D. Schneider, F. Schwab, A. Reiter, M. Selzer und B. Nestler. Multiphase-field model of small strain elasto-plasticity according to the mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 62(6):1399–1412, 2018.
- [46] F. J. Humphrey und M. Hatherly. *Recrystallization and related annealing phenomena*. Pergamon, Oxford [u. a.], 1996.
- [47] R. Bengochea, B. Lopez und I. Gutierrez. Microstructural evolution during the austenite-to-ferrite transformation from deformed austenite. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 29(2):417–426, 1998.
- [48] A. Vondrous, P. Bienger, S. Schreijäg, M. Selzer, D. Schneider, B. Nestler, D. Helm und R. Mönig. Combined crystal plasticity and phase-field method for recrystallization in a process chain of sheet metal production. *Computational Mechanics*, 55(2):439–452, 2015.
- [49] P. S. Engels. *A multi-phase-field simulation approach incorporating finite, elasto-plastic deformations*. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 2016.
- [50] A. Yamanaka, T. Takaki und Y. Tomita. Simulation of austenite-to-ferrite transformation in deformed austenite by crystal plasticity finite element method and multi-phase-field method. *ISIJ international*, 52(4):659–668, 2012.
- [51] H. K. Yeddu, V. I. Razumovskiy, A. Borgenstam, P. A. Korzhavyi, A. V. Ruban und J. Ågren. Multi-length scale modeling of martensitic transformations in stainless steels. *Acta Materialia*, 60(19):6508–6517, 2012.
- [52] H. K. Yeddu, A. Borgenstam und J. Ågren. Stress-assisted martensitic transformations in steels: A 3-d phase-field study. *Acta Materialia*, 61(7):2595–2606, 2013.
- [53] A. Malik, H. K. Yeddu, G. Amberg, A. Borgenstam und J. Ågren. Three dimensional elasto-plastic phase field simulation of martensitic transformation in polycrystal. *Materials Science and Engineering: A*, 556:221–232, 2012.
- [54] S. Cui, J. Wan, X. Zuo, N. Chen, J. Zhang und Y. Rong. Three-dimensional, non-isothermal phase-field modeling of thermally and

- stress-induced martensitic transformations in shape memory alloys. *International Journal of Solids and Structures*, 109:1–11, 2017.
- [55] Y. Sun, J. Luo und J. Zhu. Phase field study of the microstructure evolution and thermomechanical properties of polycrystalline shape memory alloys: Grain size effect and rate effect. *Computational Materials Science*, 145:252–262, 2018.
- [56] Y. Sun, J. Luo, J. Zhu und K. Zhou. A non-isothermal phase field study of the shape memory effect and pseudoelasticity of polycrystalline shape memory alloys. *Computational Materials Science*, 167:65–76, 2019.
- [57] G. Du. *Phase-field simulation of lath martensite in low-carbon steel*. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 2017.
- [58] O. Shchyglo, G. Du, J. K. Engels und I. Steinbach. Phase-field simulation of martensite microstructure in low-carbon steel. *Acta Materialia*, 175:415–425, 2019.
- [59] H. K. D. H. Bhadeshia. *Bainite in steels: theory and practice*. Maney Publishing, Leeds, 2015.
- [60] M. Düsing und R. Mahnken. A thermodynamic framework for coupled multiphase ginzburg-landau/cahn-hilliard systems for simulation of lower bainitic transformation. *Archive of Applied Mechanics*, 86(12):1947–1964, 2016.
- [61] M. Düsing und R. Mahnken. Simulation of lower bainitic transformation with the phase-field method considering carbide formation. *Computational Materials Science*, 111:91–100, 2016.
- [62] M. Düsing und R. Mahnken. A coupled phase field/diffusion model for upper and lower bainitic transformation. *International Journal of Solids and Structures*, 135:172–183, 2018.
- [63] M. Düsing und R. Mahnken. Simulation of upper and lower bainitic transformation with a coupled phase field/diffusion/deformation framework. *PAMM*, 18(1):1–2, 2018.
- [64] T. T. Arif und R. S. Qin. A phase-field model for bainitic transformation. *Computational Materials Science*, 77:230–235, 2013.
- [65] T. T. Arif und R. S. Qin. A phase-field model for the formation of martensite and bainite. In: *Advanced materials research*, Band 922, Seiten 31–36. Trans Tech Publ, 2014.

- [66] C. Hüter, M. Lin, D. Schicchi, M. Hunkel, U. PrahL und R. Spatschek. A multiscale perspective on the kinetics of solid state transformations with application to bainite formation. *AIMS Materials Science*, 2(4):319–345.
- [67] M. Weikamp, C. Hüter, M. Lin, U. PrahL, D. Schicchi, M. Hunkel und R. Spatschek. Scale bridging simulations of large elastic deformations and bainitic transformations. In: *Jülich Aachen Research Alliance (JARA) High-Performance Computing Symposium*, Seiten 125–138, Cham. Springer, 2016.
- [68] M. Lin und U. PrahL. A parallelized model for coupled phase field and crystal plasticity simulation. *Computer Methods in Materials Science*, 16:156–162, 2016.
- [69] U. PrahL, M. Lin, M. Weikamp, C. Hueter, D. Schicchi, M. Hunkel und R. Spatschek. Multiscale, coupled chemo-mechanical modeling of bainitic transformation during press hardening. In: *Proceedings of the 4th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2017)*, Seiten 335–343, Cham. Springer, 2017.
- [70] D. S. Schicchi, M. Lin, U. PrahL und M. Hunkel. A combined finite element—phase field model approach on the bainitic transformation. In: *Proceedings of European Conference on Heat Treatment*, auf CD, 9 Seiten, Prag, 2016.
- [71] O. Seppälä, A. Pohjonen, A. Kajjalainen, J. Larkiola und D. Porter. Simulation of bainite and martensite formation using a novel cellular automata method. *Procedia Manufacturing*, 15:1856–1863, 2018.
- [72] W. Song, U. PrahL, W. Bleck und K. Mukherjee. Phase-field simulations of bainitic phase transformation in 100cr6. In: *TMS 2011 140th Annual Meeting and Exhibition, Materials Fabrication, Properties, Characterization, and Modeling*, Band 2, Seite 417. John Wiley & Sons, 2011.
- [73] W. Song. *Characterization and simulation of bainite transformation in high carbon bearing steel 100Cr6*. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Aachen, 2014.
- [74] W. Song, W. Bleck und U. PrahL. Icme towards improved understanding of bainite in 100cr6. In: *Proceedings of the 3rd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2015)*, Seiten 39–46. Springer, 2015.

- [75] W. Song, U. Prael, Y. Ma und W. Bleck. Multiphase-field simulation of cementite precipitation during isothermal lower bainitic transformation. *steel research international*, 89(8):1800028, 2018.
- [76] M. Toloui und M. Militzer. Phase field modeling of the simultaneous formation of bainite and ferrite in trip steel. *Acta Materialia*, 144:786–800, 2018.
- [77] A. Ramazani, Y. Li, K. Mukherjee, U. Prael, W. Bleck, A. Abdurakhmanov, M. Schleser und U. Reisgen. Microstructure evolution simulation in hot rolled dp600 steel during gas metal arc welding. *Computational Materials Science*, 68:107–116, 2013.
- [78] L. Zhang, Y. Shen, H. Wan, X. Xiong und L. Zhang. The study of widmanstätten ferrite in fe–c alloys by a phase field model coupled with anisotropic elasticity. *Journal of Alloys and Compounds*, 650:239–247, 2015.
- [79] Y. Ohmori, H. Ohtsubo, K. Georgima und N. Maruyama. Growth of bainite and widmanstätten ferrite. *Materials Transactions, JIM*, 34(3):216–223, 1993.
- [80] Y. Ohmori, H. Ohtsubo, Y. C. Jung, S. Okaguchi und H. Ohtani. Morphology of bainite and widmanstätten ferrite. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 25(9):1981–1989, 1994.
- [81] P. H. Shipway und H. K. D. H. Bhadeshia. The mechanical stabilisation of widmanstätten ferrite. *Materials Science and Engineering: A*, 223(1-2):179–185, 1997.
- [82] M. Cottura, B. Appolaire, A. Finel und Y. Le Bouar. Phase field study of acicular growth: role of elasticity in widmanstätten structure. *Acta Materialia*, 72:200–210, 2014.
- [83] M. Cottura, B. Appolaire, A. Finel und Y. Le Bouar. Plastic relaxation during diffusion-controlled growth of widmanstätten plates. *Scripta Materialia*, 108:117–121, 2015.
- [84] I. Loginova, J. Ågren und G. Amberg. On the formation of widmanstätten ferrite in binary fe–c–phase-field approach. *Acta Materialia*, 52(13):4055–4063, 2004.
- [85] A. Yamanaka, T. Takaki und Y. Tomita. Phase-field simulation of austenite to ferrite transformation and widmanstätten ferrite formation in fe–c alloy. *Materials transactions*, 47(11):2725–2731, 2006.

- [86] W. Yan, N. Xiao, Y. Chen und D. Li. Phase-field modeling of widmanstätten ferrite formation during isothermal transformation in low carbon steels. *Computational Materials Science*, 81:503–509, 2014.
- [87] A. Bhattacharya, K. Ankit und B. Nestler. Phase-field simulations of curvature-induced cascading of widmanstätten-ferrite plates. *Acta Materialia*, 123:317–328, 2017.
- [88] C. Lin, J. Wan und H. Ruan. Phase field modeling of widmanstätten ferrite formation in steel. *Journal of Alloys and Compounds*, 769:620–630, 2018.
- [89] R. Kuziak, R. Kawalla und S. Waengler. Advanced high strength steels for automotive industry. *Archives of civil and mechanical engineering*, 8(2):103–117, 2008.
- [90] C. C. Tasan, M. Diehl, D. Yan, M. Bechtold, F. Roters, L. Schemmann, C. Zheng, N. Peranio, D. Ponge, M. Koyama, K. Tsuzaki und D. Raabe. An overview of dual-phase steels: advances in microstructure-oriented processing and micromechanically guided design. *Annual Review of Materials Research*, 45:391–431, 2015.
- [91] Y.-G. Deng, H.-S. Di und J.-C. Zhang. Effect of heat-treatment schedule on the microstructure and mechanical properties of cold-rolled dual-phase steels. *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*, 28(9):1141–1148, 2015.
- [92] J. Huang, W. J. Poole und M. Militzer. Austenite formation during intercritical annealing. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 35(11):3363–3375, 2004.
- [93] D. Barbier, L. Germain, A. Hazotte, M. Gouné und A. Chbihi. Microstructures resulting from the interaction between ferrite recrystallization and austenite formation in dual-phase steels. *Journal of materials science*, 50(1):374–381, 2015.
- [94] C. Barbatti, P. R. Triguero, S. Van Bohemen, S. Celotto und D. N. Hanlon. Study of recrystallization and phase transformation in a cold-rolled dual-phase steel: influence of temperature and heating rate during first annealing stages. In: *Materials Science Forum*, Band 702, Seiten 818–821. Trans Tech Publ, 2012.
- [95] M. H. Wenk. *Gefüge und Mikromechanik von Dualphasenstahl*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2016.

- [96] S. Schreijäg. *Microstructure and mechanical behavior of deep drawing DC04 steel at different length scales*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2013.
- [97] J. Gautam, A. G. Miroux, J. Moerman, C. Barbatti und L. Kestens. Texture evolution during cold rolling and annealing in dual phase steels. In: *Materials Science Forum*, Band 702, Seiten 778–781. Trans Tech Publ, 2012.
- [98] N. Peranio, Y. J. Li, F. Roters und D. Raabe. Microstructure and texture evolution in dual-phase steels: Competition between recovery, recrystallization, and phase transformation. *Materials Science and Engineering: A*, 527(16-17):4161–4168, 2010.
- [99] G. Hai-rong, Z. Zheng-zhi, Y. Jie-yun, W. Zhi-gang und Z. Ai-min. Texture evolution of high-strength deep-drawing dual-phase steels. *Materials Research Innovations*, 19(sup5):S5–631–S5–634., 2015.
- [100] B. Zhu und M. Militzer. Phase-field modeling for intercritical annealing of a dual-phase steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 46(3):1073–1084, 2015.
- [101] J. Pagenkopf, A. Butz, M. Wenk und D. Helm. Virtual testing of dual-phase steels: Effect of martensite morphology on plastic flow behavior. *Materials Science and Engineering: A*, 674:672–686, 2016.
- [102] F. J. Humphreys. Nucleation in recrystallization. In: *Materials Science Forum*, Band 467, Seiten 107–116. Trans Tech Publ, 2004.
- [103] S.-H. Choi und J. H. Cho. Primary recrystallization modelling for interstitial free steels. *Materials Science and Engineering: A*, 405(1-2):86–101, 2005.
- [104] O. M. Ivasishin, S. V. Shevchenko, N. L. Vasiliev und S. L. Semiatin. A 3-d monte-carlo (potts) model for recrystallization and grain growth in polycrystalline materials. *Materials Science and Engineering: A*, 433(1-2):216–232, 2006.
- [105] D. Raabe und R. C. Becker. Coupling of a crystal plasticity finite-element model with a probabilistic cellular automaton for simulating primary static recrystallization in aluminium. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 8(4):445, 2000.
- [106] F. Han, B. Tang, H. Kou, L. Cheng, J. Li und Y. Feng. Static recrystallization simulations by coupling cellular automata and crystal plasticity

- finite element method using a physically based model for nucleation. *Journal of materials science*, 49(8):3253–3267, 2014.
- [107] C. Haase, M. Kühbach, L. A. Barrales-Mora, S. L. Wong, F. Roters, D. A. Molodov und G. Gottstein. Recrystallization behavior of a high-manganese steel: Experiments and simulations. *Acta Materialia*, 100:155–168, 2015.
- [108] G. Shen, B. Hu, C. Zheng, J. Gu und D. Li. Coupled simulation of ferrite recrystallization in a dual-phase steel considering deformation heterogeneity at mesoscale. *Computational Materials Science*, 149:191–201, 2018.
- [109] J. Pagenkopf. *Bestimmung der plastischen Anisotropie von Blechwerkstoffen durch ortsaufgelöste Simulationen auf Gefügebene*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2018.
- [110] M. Bernacki, H. Resk, T. Coupez und R. E. Logé. Finite element model of primary recrystallization in polycrystalline aggregates using a level set framework. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(6):064006, 2009.
- [111] B. Scholtes, R. Boulais-Sinou, A. Settefrati, D. P. Muñoz, I. Poitraul, A. Montouchet, N. Bozzolo und M. Bernacki. 3d level set modeling of static recrystallization considering stored energy fields. *Computational Materials Science*, 122:57–71, 2016.
- [112] D. N. Ilin, N. Bozzolo, T. Toulorge und M. Bernacki. Full field modeling of recrystallization: Effect of intragranular strain gradients on grain boundary shape and kinetics. *Computational Materials Science*, 150:149–161, 2018.
- [113] K. Piękoś, J. Tarasiuk, K. Wierzbowski und B. Bacroix. Generalized vertex model of recrystallization—application to polycrystalline copper. *Computational materials science*, 42(4):584–594, 2008.
- [114] T. Takaki und Y. Tomita. Static recrystallization simulations starting from predicted deformation microstructure by coupling multi-phase-field method and finite element method based on crystal plasticity. *International Journal of Mechanical Sciences*, 52(2):320–328, 2010.
- [115] O. Güvenç, T. Henke, G. Laschet, B. Böttger, M. Apel, M. Bambach und G. Hirt. Modeling of static recrystallization kinetics by coupling crystal plasticity fem and multiphase field calculations. *Computer methods in materials science*, 13(1-3):368–374, 2013.

- [116] O. Güvenç, M. Bambach und G. Hirt. Coupling of crystal plasticity finite element and phase field methods for the prediction of srx kinetics after hot working. *steel research international*, 85(6):999–1009, 2014.
- [117] B. Zhu und M. Militzer. 3d phase field modelling of recrystallization in a low-carbon steel. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20(8):085011, 2012.
- [118] H. Hallberg. Approaches to modeling of recrystallization. *Metals*, 1(1):16–48, 2011.
- [119] A. Godfrey, D. Juul Jensen und N. Hansen. Recrystallisation of channel die deformed single crystals of typical rolling orientations. *Acta Materialia*, 49(13):2429–2440, 2001.
- [120] M. Oyarzábal, A. Martínez-de Guereñu und I. Gutiérrez. Effect of stored energy and recovery on the overall recrystallization kinetics of a cold rolled low carbon steel. *Materials Science and Engineering: A*, 485(1-2):200–209, 2008.
- [121] J. Rudnizki. *Through-process model for the microstructure of dual-phase steel*. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Aachen, 2011.
- [122] G. R. Speich, V. A. Demarest und R. L. Miller. Formation of austenite during intercritical annealing of dual-phase steels. *Metallurgical and materials transactions A*, 12(8):1419–1428, 1981.
- [123] J. Rudnizki, B. Böttger, U. Prahl und W. Bleck. Phase-field modeling of austenite formation from a ferrite plus pearlite microstructure during annealing of cold-rolled dual-phase steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 42(8):2516–2525, 2011.
- [124] M. Militzer und H. Azizi-Alizamini. Phase field modelling of austenite formation in low carbon steels. In: *Solid State Phenomena*, Band 172, Seiten 1050–1059. Trans Tech Publ, 2011.
- [125] C. Bos, M. G. Mecozzi und J. Sietsma. A microstructure model for recrystallisation and phase transformation during the dual-phase steel annealing cycle. *Computational Materials Science*, 48(3):692–699, 2010.
- [126] J. Rudnizki, U. Prahl und W. Bleck. Phase-field modelling of microstructure evolution during processing of cold-rolled dual phase steels. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 1(1):3, 2012.

- [127] C. Zheng und D. Raabe. Interaction between recrystallization and phase transformation during intercritical annealing in a cold-rolled dual-phase steel: A cellular automaton model. *Acta Materialia*, 61(14):5504–5517, 2013.
- [128] H. Ghassemi-Armaki, R. Maaß, S. P. Bhat, S. Sriram, J. R. Greer und K. S. Kumar. Deformation response of ferrite and martensite in a dual-phase steel. *Acta Materialia*, 62:197–211, 2014.
- [129] J. Kadkhodapour, S. Schmauder, D. Raabe, S. Ziaei-Rad, U. Weber und M. Calcagnotto. Experimental and numerical study on geometrically necessary dislocations and non-homogeneous mechanical properties of the ferrite phase in dual phase steels. *Acta Materialia*, 59(11):4387–4394, 2011.
- [130] A. Ramazani, K. Mukherjee, A. Schwedt, P. Goravanchi, U. Prahll und W. Bleck. Quantification of the effect of transformation-induced geometrically necessary dislocations on the flow-curve modelling of dual-phase steels. *International Journal of Plasticity*, 43:128–152, 2013.
- [131] F. Rieger und T. Böhlke. Microstructure based prediction and homogenization of the strain hardening behavior of dual-phase steel. *Archive of Applied Mechanics*, 85(9-10):1439–1458, 2015.
- [132] S. Zarei, R. J. Nedoushan und M. Atapour. The sources of the micro stress and strain inhomogeneity in dual phase steels. *Materials Science and Engineering: A*, 674:384–396, 2016.
- [133] M. Kulakov. *Microstructure evolution during intercritical annealing of a Mn-Cr dual-phase steel*. Dissertation, University of British Columbia, Vancouver, 2013.
- [134] D. Khan, A. Suhane, P. Srimannarayana, A. Bhattacharjee, G. Tennyson, P. Zagade und B. P. Gautham. Integrated microstructure based modelling of process-chain for cold rolled dual phase steels. In: *Proceedings of the 4th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2017)*, Seiten 15–22, Cham. Springer, 2017.
- [135] L. Madej, L. Sieradzki, M. Sitko, K. Perzynski, K. Radwanski und R. Kuziak. Multi scale cellular automata and finite element based model for cold deformation and annealing of a ferritic–pearlitic microstructure. *Computational Materials Science*, 77:172–181, 2013.

- [136] J. Hötzer, A. Reiter, H. Hierl, P. Steinmetz, M. Selzer und B. Nestler. The parallel multi-physics phase-field framework pace3d. *Journal of computational science*, 26:1–12, 2018.
- [137] B. Nestler und A. Choudhury. Phase-field modeling of multi-component systems. *Current opinion in solid state and Materials Science*, 15(3):93–105, 2011.
- [138] L.-Q. Chen. Phase-field models for microstructure evolution. *Annual review of materials research*, 32(1):113–140, 2002.
- [139] N. Moelans, B. Blanpain und P. Wollants. An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution. *Calphad*, 32(2):268–294, 2008.
- [140] I. Steinbach. Phase-field models in materials science. *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 17(7):073001, 2009.
- [141] N. Moelans, F. Wendler und B. Nestler. Comparative study of two phase-field models for grain growth. *Computational Materials Science*, 46(2):479–490, 2009.
- [142] L. Gránásy, G. I. Tóth, J. A. Warren, F. Podmaniczky, G. Tegze, L. Rátkai und T. Pusztai. Phase-field modeling of crystal nucleation in undercooled liquids—a review. *Progress in Materials Science*, 106:100569, 2019.
- [143] I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler, M. Seeßelberg, R. Prieler, G. J. Schmitz und J. L. L. Rezende. A phase field concept for multiphase systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 94(3):135–147, 1996.
- [144] I. Steinbach und F. Pezzolla. A generalized field method for multiphase transformations using interface fields. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 134(4):385–393, 1999.
- [145] H. Garcke, B. Nestler und B. Stoth. A multiphase field concept: numerical simulations of moving phase boundaries and multiple junctions. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 60(1):295–315, 1999.
- [146] B. Nestler, H. Garcke und B. Stinner. Multicomponent alloy solidification: phase-field modeling and simulations. *Physical Review E*, 71(4):041609, 2005.
- [147] L.-Q. Chen und W. Yang. Computer simulation of the domain dynamics of a quenched system with a large number of nonconserved order parameters: The grain-growth kinetics. *Physical Review B*, 50(21):15752, 1994.
- [148] D. Fan und L.-Q. Chen. Computer simulation of grain growth using a continuum field model. *Acta Materialia*, 45(2):611–622, 1997.

- [149] D. Fan, C. Geng und L.-Q. Chen. Computer simulation of topological evolution in 2-d grain growth using a continuum diffuse-interface field model. *Acta materialia*, 45(3):1115–1126, 1997.
- [150] P. G. Kubendran Amos, E. Schoof, N. Streichan, D. Schneider und B. Nestler. Phase-field analysis of quenching and partitioning in a polycrystalline fe-c system under constrained-carbon equilibrium condition. *Computational Materials Science*, 159:281–296, 2019.
- [151] J. Eiken, B. Böttger und I. Steinbach. Multiphase-field approach for multi-component alloys with extrapolation scheme for numerical application. *Physical review E*, 73(6):066122, 2006.
- [152] J. Hötzer, O. Tschukin, M. Ben Said, M. Berghoff, M. Jainta, G. Barthelémy, N. Smorchkov, D. Schneider, M. Selzer und B. Nestler. Calibration of a multi-phase field model with quantitative angle measurement. *Journal of materials science*, 51(4):1788–1797, 2016.
- [153] D. A. Cogswell und W. C. Carter. Thermodynamic phase-field model for microstructure with multiple components and phases: The possibility of metastable phases. *Physical Review E*, 83(6):061602, 2011.
- [154] J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, B. Nestler, A. Dennstedt, A. Genau, M. Bauer, H. Köstler und U. Rude. Large scale phase-field simulations of directional ternary eutectic solidification. *Acta Materialia*, 93:194–204, 2015.
- [155] P. J. Jacques. Phase transformations in transformation induced plasticity (trip)-assisted multiphase steels. In: E. Pereloma und D. V. Edmonds (Hrsg.), *Phase Transformations in Steels*, Band 2, Seiten 213–246. Woodhead Publishing, Philadelphia, 2012.
- [156] A. Choudhury und B. Nestler. Grand-potential formulation for multicomponent phase transformations combined with thin-interface asymptotics of the double-obstacle potential. *Physical Review E*, 85(2):021602, 2012.
- [157] P. G. Kubendran Amos, E. Schoof, D. Schneider und B. Nestler. On the globularization of the shapes associated with alpha-precipitate of two phase titanium alloys: Insights from phase-field simulations. *Acta Materialia*, 159:51–64, 2018.
- [158] P. G. Kubendran Amos, E. Schoof, D. Schneider und B. Nestler. Chemoelastic phase-field simulation of the cooperative growth of mutually-accommodating widmanstätten plates. *Journal of Alloys and Compounds*, 767:1141–1154, 2018.

- [159] D. Schneider, O. Tschukin, A. Choudhury, M. Selzer, T. Böhlke und B. Nestler. Phase-field elasticity model based on mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 55(5):887–901, 2015.
- [160] D. Schneider, E. Schoof, O. Tschukin, A. Reiter, C. Herrmann, F. Schwab, M. Selzer und B. Nestler. Small strain multiphase-field model accounting for configurational forces and mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 61(3):277–295, 2018.
- [161] A. Durga, P. Wollants und N. Moelans. A quantitative phase-field model for two-phase elastically inhomogeneous systems. *Computational Materials Science*, 99:81–95, 2015.
- [162] L. K. Aagesen, D. Schwen, K. Ahmed und M. R. Tonks. Quantifying elastic energy effects on interfacial energy in the kim-kim-suzuki phase-field model with different interpolation schemes. *Computational Materials Science*, 140:10–21, 2017.
- [163] A. Durga, P. Wollants und N. Moelans. Evaluation of interfacial excess contributions in different phase-field models for elastically inhomogeneous systems. *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 21(5):055018, 2013.
- [164] B. Bhadak, R. Sankarasubramanian und A. Choudhury. Phase-field modeling of equilibrium precipitate shapes under the influence of coherency stresses. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 49(11):5705–5726, 2018.
- [165] M. Silhavy. *The mechanics and thermodynamics of continuous media*. Springer, Berlin Heidelberg, 2013.
- [166] D. Schneider, S. Schmid, M. Selzer, T. Böhlke und B. Nestler. Small strain elasto-plastic multiphase-field model. *Computational Mechanics*, 55(1):27–35, 2015.
- [167] O. Tschukin. *Phase-Field Modelling of Welding and of Elasticity-Dependent Phase Transformations*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2017.
- [168] H. A. Mang und G. Hofstetter. *Festigkeitslehre*. Springer, Wien, New York, 208.
- [169] E Voce. The relationship between stress and strain for homogeneous deformation. *Journal of the Institute of Metals*, 74:537–562, 1948.

- [170] H. K. Yeddu, T. Lookman und A. Saxena. The simultaneous occurrence of martensitic transformation and reversion of martensite. *Materials Science and Engineering: A*, 594:48–51, 2014.
- [171] H. K. Yeddu, H. Zong und T. Lookman. Alpha–omega and omega–alpha phase transformations in zirconium under hydrostatic pressure: A 3d mesoscale study. *Acta Materialia*, 102:97–107, 2016.
- [172] F. J. Humphreys und M. Hatherly. *Recrystallization and related annealing phenomena*. Pergamon, Oxford [u. a.], 1996.
- [173] A. N. Choudhury. *Quantitative phase-field model for phase transformations in multi-component alloys*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2013.
- [174] D. Schneider. *Phasenfeldmodellierung mechanisch getriebener Grenzflächenbewegungen in mehrphasigen Systemen*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2016.
- [175] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Harri Deutsch, Thun u. Frankfurt/Main, 1993.
- [176] C. Beckermann, H.-J. Diepers, I. Steinbach, A. Karma und X. Tong. Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification. *Journal of Computational Physics*, 154(2):468–496, 1999.
- [177] J. Eiken. *A phase-field model for technical alloy solidification*. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Aachen, 2010.
- [178] Y. Sun und C. Beckermann. Sharp interface tracking using the phase-field equation. *Journal of Computational Physics*, 220(2):626–653, 2007.
- [179] E. Borukhovich. *Consistent coupling of geometrically non-linear finite deformation with alloy chemistry and diffusion within the phase-field framework*. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 2016.
- [180] C. C. Chen, H. K. Lin und C. W. Lan. Phase field modeling with large interface thickness and undercooling. *Journal of Crystal Growth*, 385:121–126, 2014.
- [181] M. Tegeler, O. Shchyglo, R. D. Kamachali, A. Monas, I. Steinbach und G. Sutmann. Parallel multiphase field simulations with openphase. *Computer Physics Communications*, 215:173–187, 2017.

- [182] Micress: User guide version 6.4, volume 2: running micress. <http://web.micress.de/download.html>, eingesehen am 09.12.2018.
- [183] J. Eiken. The finite phase-field method-a numerical diffuse interface approach for microstructure simulation with minimized discretization error. *MRS Online Proceedings Library Archive*, 1369, 2011.
- [184] A. Finel, Y. Le Bouar, B. Dabas, B. Appolaire, Y. Yamada und T. Mohri. Sharp phase field method. *Phys. Rev. Lett.*, 121:025501, 2018.
- [185] T. Takaki und J. Kato. Phase-field topology optimization model that removes the curvature effects. *Mechanical Engineering Journal*, 4(2):16–00462, 2017.
- [186] R. Folch, J. Casademunt, A. Hernández-Machado und L. Ramirez-Piscina. Phase-field model for hele-shaw flows with arbitrary viscosity contrast. i. theoretical approach. *Physical Review E*, 60(2):1724, 1999.
- [187] T. W. Heo und L.-Q. Chen. Phase-field modeling of nucleation in solid-state phase transformations. *Jom*, 66(8):1520–1528, 2014.
- [188] M. Apel, S. Benke und I. Steinbach. Virtual dilatometer curves and effective young’s modulus of a 3d multiphase structure calculated by the phase-field method. *Computational Materials Science*, 45(3):589–592, 2009.
- [189] B. Nestler, M. Selzer, F. Wendler, M. Reichardt und M. Jainta, M. Berghoff et al. *Pace3D - A compiled documentation*. Institut für Angewandte Materialien - Computational Material Science, Karlsruhe, 2018.
- [190] J. Hötzer. *Massiv-parallele und großskalige Phasensfeldsimulationen zur Untersuchung der Mikrostrukturentwicklung*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2017.
- [191] S. Schmid. *Mesoskopischer Ansatz zur Festigkeitsberechnung von Bremscheiben*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2016.
- [192] S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim und Y. B. Park. Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth. *Physical Review E*, 74(6):061605, 2006.
- [193] M. Selzer. *Mechanische und strömungsmechanische Topologieoptimierung mit der Phasensfeldmethode*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2014.

- [194] B. Nestler, M. Reichardt und M. Selzer. Massive multi-phase-field simulations: methods to compute large grain system. In: *Proceedings of the 11th international conference on aluminium alloys*, Seiten 1251–1255. Wiley-VCH, Weinheim Aachen, Germany, 2008.
- [195] Micress Software. <http://web.micress.de/>, eingesehen am 17.01.2018.
- [196] T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Hisakuni, A. Yamanaka und Y. Tomita. Multi-phase-field model to simulate microstructure evolutions during dynamic recrystallization. *Materials transactions*, 49(11):2559–2565, 2008.
- [197] T. Takaki, Y. Hisakuni, T. Hirouchi, A. Yamanaka und Y. Tomita. Multi-phase-field simulations for dynamic recrystallization. *Computational Materials Science*, 45(4):881–888, 2009.
- [198] E. Miyoshi und T. Takaki. Validation of a novel higher-order multi-phase-field model for grain-growth simulations using anisotropic grain-boundary properties. *Computational Materials Science*, 112:44–51, 2016.
- [199] Y. Cai, F. Wang, M. Selzer und B. Nestler. Phase-field investigation on the growth orientation angle of aluminum carbide with a needle-like structure at the surface of graphite particles. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 27(6):065010, 2019.
- [200] E. Schoof, C. Herrmann, D. Schneider, J. Hötzer und B. Nestler. Multiphase-field modeling and simulation of martensitic phase transformation in heterogeneous materials. In: W. E. Nagel, D. H. Kröner und M. M. Resch (Hrsg.), *High Performance Computing in Science and Engineering '18*, Seiten 475–488. Springer International Publishing, Cham, 2019.
- [201] D. Schwen, L. K. Aagesen, J. W. Peterson und M. R. Tonks. Rapid multiphase-field model development using a modular free energy based approach with automatic differentiation in moose/marmot. *Computational Materials Science*, 132:36–45, 2017.
- [202] L. K. Aagesen, J. F. Adams, J. E. Allison, W. B. Andrews, V. Araullo-Peters, T. Berman, Z. Chen, S. Daly, S. Das und S. DeWitt et al. Prisms: An integrated, open-source framework for accelerating predictive structural materials science. *JOM*, 70(10):2298–2314, 2018.

- [203] J. E. Guyer, D. Wheeler und J. A. Warren. Fipy: Partial differential equations with python. *Computing in Science & Engineering*, 11(3):6–15, 2009.
- [204] M. J. Welland, D. Karpeyev, D. T. O’Connor und O. Heinonen. Miscibility gap closure, interface morphology, and phase microstructure of 3d li x fepo4 nanoparticles from surface wetting and coherency strain. *ACS nano*, 9(10):9757–9771, 2015.
- [205] G. I. Tóth, T. Pusztai und L. Gránásy. Consistent multiphase-field theory for interface driven multidomain dynamics. *Physical Review B*, 92(18):184105, 2015.
- [206] J. Kundin und I. Steinbach. Comparative study of different anisotropy and potential formulations of phase-field models for dendritic solidification. *Computational Materials Science*, 170:109197, 2019.
- [207] A. M. Jokisaari, P. W. Voorhees, J. E. Guyer, J. Warren und O. G. Heinonen. Benchmark problems for numerical implementations of phase field models. *Computational Materials Science*, 126:139–151, 2017.
- [208] A. M. Jokisaari, P. W. Voorhees, J. E. Guyer, J. A. Warren und O. G. Heinonen. Phase field benchmark problems for dendritic growth and linear elasticity. *Computational Materials Science*, 149:336–347, 2018.
- [209] R. D. Kamachali, C. Schwarze, M. Lin, M. Diehl, P. Shanthraj, U. Prahl, I. Steinbach und D. Raabe. Numerical benchmark of phase-field simulations with elastic strains: Precipitation in the presence of chemo-mechanical coupling. *Computational Materials Science*, 155:541–553, 2018.
- [210] E. Schoof, D. Schneider, N. Streichhan, T. Mitnacht, M. Selzer und B. Nestler. Multiphase-field modeling of martensitic phase transformation in a dual-phase microstructure. *International Journal of Solids and Structures*, 134:181–194, 2018.
- [211] E. Schoof, C. Herrmann, N. Streichhan, M. Selzer, D. Schneider und B. Nestler. On the multiphase-field modeling of martensitic phase transformation in dual-phase steel using J_2 -viscoplasticity. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 27(2):025010, 2019.
- [212] M. Ueda, H. Y. Yasuda und Y. Umakoshi. Controlling factor for nucleation of martensite at grain boundary in fe-ni bicrystals. *Acta Materialia*, 51(4):1007–1017, 2003.

- [213] E. C. Bain und N. Y. Dunkirk. The nature of martensite. *trans. AIME*, 70(1):25–47, 1924.
- [214] C. S. Roberts. Effect of carbon on the volume fractions and lattice parameters of retained austenite and martensite. *Trans. AIME*, 197(2):203–204, 1953.
- [215] G. Gottstein. *Physikalische Grundlagen der Materialkunde*. Springer, Berlin Heidelberg, 2007.
- [216] C. L. Magee. *Transformation Kinetics, Microplasticity and Aging of Martensite in Fe-31 Ni*. Dissertation, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh, 1966.
- [217] C. Hüter, M. Lin, D. Schicchi, M. Hunkel, U. Prahl und R. Spatschek. A multiscale perspective on the kinetics of solid state transformations with application to bainite formation. *AIMS Materials Science*, 2(4):319–345, 2015.
- [218] D. Das und P. P. Chattopadhyay. Influence of martensite morphology on the work-hardening behavior of high strength ferrite–martensite dual-phase steel. *Journal of materials science*, 44(11):2957–2965, 2009.
- [219] F. Wülker. *Modellierung umwandlungsinduzierter Eigendehnungen in Dual-Phasen-Stahl*. Bachelorarbeit, Teilinstitut Kontinuumsmechanik - Institut für Technische Mechanik, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2013.
- [220] A. Wasilkowska, R. Petrov, L. Kestens, E. A. Werner, C. Kremaszky, S. Traint und A. Pichler. Microstructure and texture changes in a low-alloyed trip-aided steel induced by small plastic deformation. *ISIJ international*, 46(2):302–309, 2006.
- [221] P. Movahed, S. Kolahgar, S. P. H. Marashi, M. Pouranvari und N. Parvin. The effect of intercritical heat treatment temperature on the tensile properties and work hardening behavior of ferrite–martensite dual phase steel sheets. *Materials Science and Engineering: A*, 518(1-2):1–6, 2009.
- [222] Z. Nishiyama. *Martensitic transformation*. Academic Press, New York [u. a.], 1978.
- [223] Thermo-Calc Software. <http://www.thermocalc.com/>, eingesehen am 20.01.2017.
- [224] N. Nakada, T. Tsuchiyama, S. Takaki und N. Miyano. Temperature dependence of austenite nucleation behavior from lath martensite. *ISIJ international*, 51(2):299–304, 2011.

- [225] G. Krauss. Martensite in steel: strength and structure. *Materials science and engineering: A*, 273:40–57, 1999.
- [226] G. Krauss und A. R. Marder. The morphology of martensite in iron alloys. *Metallurgical Transactions*, 2(9):2343, 1971.
- [227] Y. Granbom. *Structure and mechanical properties of dual phase steels: An experimental and theoretical analysis*. Dissertation, Royal Institute of Technology, Stockholm, 2010.
- [228] S. Nambu, N. Shibuta, M. Ojima, J. Inoue, T. Koseki und H. K. D. H. Bhadeshia. In situ observations and crystallographic analysis of martensitic transformation in steel. *Acta Materialia*, 61(13):4831–4839, 2013.
- [229] P. M. Kelly, A. Jostsons und R. G. Blake. The orientation relationship between lath martensite and austenite in low carbon, low alloy steels. *Acta Metallurgica et Materialia*, 38(6):1075–1081, 1990.
- [230] R. Rodriguez und I Gutierrez. Unified formulation to predict the tensile curves of steels with different microstructures. In: *Materials Science Forum*, Band 426, Seiten 4525–4530, Zürich-Uetikon. Trans Tech Publ, 2003.
- [231] C. Thomser, V. Uthaisangsuk und W. Bleck. Influence of martensite distribution on the mechanical properties of dual phase steels: experiments and simulation. *Steel research international*, 80(8):582–587, 2009.
- [232] H. K. Yeddu, A. Borgenstam, P. Hedström und J. Ågren. A phase-field study of the physical concepts of martensitic transformations in steels. *Materials Science and Engineering: A*, 538:173–181, 2012.
- [233] H. Sato und S. Zaefferer. A study on the formation mechanisms of butterfly-type martensite in fe–30% ni alloy using ebsd-based orientation microscopy. *Acta Materialia*, 57(6):1931–1937, 2009.
- [234] S. Morito, J. Nishikawa und T. Maki. Dislocation density within lath martensite in fe-c and fe-ni alloys. *ISIJ international*, 43(9):1475–1477, 2003.
- [235] P. Tsipouridis, L. Koll, C. Kremaszky und E. Werner. On the strength of grain and phase boundaries in ferritic-martensitic dual-phase steels. *International Journal of Materials Research*, 102(6):674–686, 2011.
- [236] M. Calcagnotto, D. Ponge, E. Demir und D. Raabe. Orientation gradients and geometrically necessary dislocations in ultrafine grained dual-phase

- steels studied by 2d and 3d ebstd. *Materials Science and Engineering: A*, 527(10-11):2738–2746, 2010.
- [237] L. Morsdorf, C. C. Tasan, D. Ponge und D. Raabe. 3d structural and atomic-scale analysis of lath martensite: effect of the transformation sequence. *Acta Materialia*, 95:366–377, 2015.
- [238] E. Schoof, P. G. Kubendran Amos, D. Schneider und B. Nestler. Influence of stress-free transformation strain on the autocatalytic growth of bainite: A multiphase-field analysis. *Materialia*, eingereicht.
- [239] N. V. Luzginova, L. Zhao und J. Sietsma. Bainite formation kinetics in high carbon alloyed steel. *Materials Science and Engineering: A*, 481:766–769, 2008.
- [240] J. Ågren. A revised expression for the diffusivity of carbon in binary fe c austenite. *Scripta metallurgica*, 20(11):1507–1510, 1986.
- [241] J. Ågren. Computer simulations of the austenite/ferrite diffusional transformations in low alloyed steels. *Acta Metallurgica*, 30(4):841–851, 1982.
- [242] E. J. Seo, L. Cho und B. C. De Cooman. Kinetics of the partitioning of carbon and substitutional alloying elements during quenching and partitioning (q&p) processing of medium mn steel. *Acta Materialia*, 107:354–365, 2016.
- [243] C. Shen, J. P. Simmons und Y. Wang. Effect of elastic interaction on nucleation: I. calculation of the strain energy of nucleus formation in an elastically anisotropic crystal of arbitrary microstructure. *Acta Materialia*, 54(20):5617–5630, 2006.
- [244] C. Shen, J. P. Simmons und Y. Wang. Effect of elastic interaction on nucleation: II. implementation of strain energy of nucleus formation in the phase field method. *Acta materialia*, 55(4):1457–1466, 2007.
- [245] Q. P. Meng, Y. H. Rong und T. Y. Hsu. Effect of internal stress on autocatalytic nucleation of martensitic transformation. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 37(5):1405–1411, 2006.
- [246] M. H. Sadd. *Elasticity: theory, applications, and numerics*. Academic Press, Oxford, 2009.
- [247] G. B. Olson und W. S. Owen. Stress field of a martensitic particle and the conditions for thermoelastic behavior. *New Aspects of Martensitic Transformation. Japan Institute of Metals, Tokyo. 105-110*, 1976.

- [248] H. K. D. H. Bhadeshia und J. W. Christian. Bainite in steels. *Metallurgical transactions A*, 21(3):767–797, 1990.
- [249] O. Tschukin, D. Schneider und B. Nestler. An elasto-chemical phase-field model for isotropic solids. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 73:181–191, 2019.
- [250] M. Kulakov, W. J. Poole und M. Militzer. The effect of the initial microstructure on recrystallization and austenite formation in a dp600 steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 44(8):3564–3576, 2013.
- [251] H. W. Swift. Plastic instability under plane stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1(1):1–18, 1952.
- [252] W. T. Read und W. Shockley. Dislocation models of crystal grain boundaries. *Physical review*, 78(3):275, 1950.
- [253] F. J. Humphreys. A unified theory of recovery, recrystallization and grain growth, based on the stability and growth of cellular microstructures—i. the basic model. *Acta Materialia*, 45(10):4231–4240, 1997.
- [254] E. M. Lauridsen, H. F. Poulsen, S. F. Nielsen und D. Juul Jensen. Recrystallization kinetics of individual bulk grains in 90% cold-rolled aluminium. *Acta Materialia*, 51(15):4423–4435, 2003.
- [255] R. D. Doherty, D. A. Hughes, F. J. Humphreys, J. J. Jonas, D. Juul Jensen, M. E. Kassner, W. E. King, T. R. McNelley, H. J. McQueen und A. D. Rollett. Current issues in recrystallization: a review. *Materials Science and Engineering: A*, 238(2):219–274, 1997.
- [256] Y. Hayakawa und J. A. Szpunar. Modeling of texture development during recrystallization of interstitial free steel. *Acta materialia*, 45(6):2425–2434, 1997.
- [257] X. Song, M. Rettenmayr, C. Müller und H. E. Exner. Modeling of recrystallization after inhomogeneous deformation. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 32(9):2199–2206, 2001.
- [258] T. Furu und E. Nes. Growth rates of recrystallized grains in highly deformed commercial purity aluminium, an experimental and modelling study. In: *Materials Science Forum*, Band 113, Seiten 311–316. Trans Tech Publ, 1993.
- [259] P. J. Hurley und F. J. Humphreys. Modelling the recrystallization of single-phase aluminium. *Acta materialia*, 51(13):3779–3793, 2003.

- [260] D. Juul Jensen. Effects of orientation on growth during recrystallization. In: *Microstructural and Crystallographic Aspects of Recrystallisation—Proceedings of the 16th Riso Symposium*, Seiten 119–137, Roskilde. Riso National Laboratory, 1995.
- [261] E. Afshari und S. Serajzadeh. Simulation of static recrystallization after cold side-pressing of low carbon steels using cellular automata. *Journal of materials engineering and performance*, 21(8):1553–1561, 2012.
- [262] B. Zhu. *Phase-field modeling of microstructure evolution in low-carbon steels during intercritical annealing*. Dissertation, University of British Columbia, Vancouver, 2015.
- [263] H. K. Yeddu, T. Lookman, A. Borgenstam, J. Ågren und A. Saxena. Martensite formation in stainless steels under transient loading. *Materials Science and Engineering: A*, 608:101–105, 2014.
- [264] A. R. Marder, A. O. Benschoter und G. Krauss. Microcracking sensitivity in fe-c plate martensite. *Metallurgical Transactions*, 1(6):1545–1549, 1970.
- [265] D. Schneider, E. Schoof, Y. Huang, M. Selzer und B. Nestler. Phase-field modeling of crack propagation in multiphase systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312:186–195, 2016.
- [266] M. Kellner, J. Hötzer, E. Schoof und B. Nestler. Phase-field study of eutectic colony formation in nial-34cr. *Acta Materialia*, 182:267 – 277, 2020.
- [267] K. Abbaszadeh, H. Saghafian und S. Kheirandish. Effect of bainite morphology on mechanical properties of the mixed bainite-martensite microstructure in d6ac steel. *Journal of Materials Science & Technology*, 28(4):336–342, 2012.
- [268] S. Morito, Y. Edamatsu, K. Ichinotani, T. Ohba, T. Hayashi, Y. Adachi, T. Furuhashi, G. Miyamoto und N. Takayama. Quantitative analysis of three-dimensional morphology of martensite packets and blocks in iron-carbon-manganese steels. *Journal of Alloys and Compounds*, 577:S587–S592, 2013.
- [269] N. Moelans. A quantitative and thermodynamically consistent phase-field interpolation function for multi-phase systems. *Acta Materialia*, 59(3):1077–1086, 2011.