

Zu einer physikalischen Theorie der Plastizität

Towards a Physical Theory of Plasticity

Thomas Hochrainer

Die plastische Verformbarkeit von Metallen ist eine Voraussetzung für den vielfältigen Einsatz von Metallen im Maschinen- und Fahrzeugbau. Umso erstaunlicher erscheint es, dass die Plastizität von Metallen bis heute ein nur unzureichend verstandenes Phänomen ist. Während elastische Materialeigenschaften von nicht zu komplexen Metalllegierungen heute mithilfe von quantenmechanischen Simulationen vorhergesagt werden können, gibt es noch keinen Weg, das plastische Verhalten aus grundlegenden Materialeigenschaften auf Kristallebene vorherzusagen.

Bleibende und damit plastische Verformungen von Kristallen entstehen durch die Bewegung linienhafter Defekte in der Kristallstruktur, die Versetzungen. Die Bewegung einzelner Versetzungen infolge von Spannungen im Material ist zumindest hinsichtlich einige Kristallklassen bereits gut verstanden. Allerdings enthalten die meisten Metalle sehr viele Versetzungen. In einem Kubikmillimeter Metall finden sich zwischen 1 und 10.000 km (!) Linienlänge von Versetzungen. Insbesondere in Metallen mit kubisch-flächenzentrierter Kristallstruktur (zum Beispiel austenitische Stähle und Aluminiumlegierungen) sind daher weniger die Eigenschaften der einzelnen Versetzung als vielmehr das kollektive Verhalten einer großen Zahl von Versetzungen bestimmend für die plastischen Eigenschaften. Aus kollektiven Effekten resultiert dabei sowohl das Verfestigungsverhalten von Metallen bei plastischer Verformung als auch die Ausbildung charakteristischer Versetzungsstrukturen, die insbesondere bei dauerhafter Wechselbelastung zur sogenannten Materialermüdung und damit zum Versagen von Bauteilen führen können.

Kontinuumstheorie

In vielen physikalischen Zusammenhängen (Diffusion, Fluidmechanik, Plasmaphysik etc.) können Kontinuumstheorien mithilfe der statistischen Mechanik und Thermodynamik mit dem >

The relative ease of plastically deforming metallic materials is a prerequisite for their widespread application in mechanical engineering. So it is surprising that the plastic deformation of metals has not been completely understood by now. While elastic characteristics of new alloys may nowadays be predicted from quantum mechanical simulations, there is still no way to predict the plastic behavior of metals from basic properties of the crystal structure.

The plastic properties of metals are controlled by the presence and characteristics of line-like crystal defects, so-called dislocations. The motion of dislocations in response to stresses in the material are for several classes of crystal structures well understood. But metals typically contain a very large amount of dislocations. A cubic millimeter of a metal contains between 1 and 10,000 km (!) line-length of dislocations. Especially for metals with face-centered cubic crystal structure (e.g. austenitic steels and aluminum alloys) it is therefore the collective behavior of many dislocations rather than the characteristics of single dislocations which control the plastic characteristics. The hardening behavior during plastic deformation as well as the emergence of characteristic dislocation structures are both due to collective effects on the dislocation level. To understand the emergence of dislocation structures is of enormous economic importance because dislocation structures may initiate material failure when subject to alternating loads.

Continuum theories

In many areas of physics (diffusion, fluid mechanics, plasma physics) the continuum theories of engineering sciences may be derived from the behavior of many single objects using methods from statistical mechanics and thermodynamics. Such a derivation of a continuum plasticity theory from dislocation theory has long been viewed as a hopeless endeavor in materials science. One important reason for this is the fact that dislocations are >



Thomas Hochrainer ist Leiter und Professor am Institut für Festigkeitslehre der TU Graz.

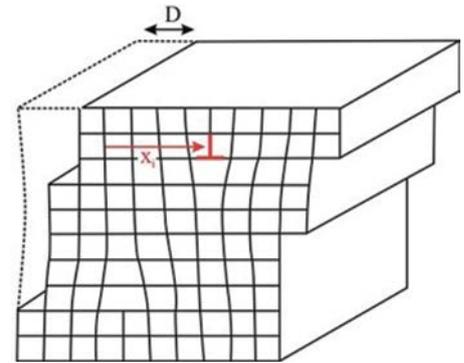
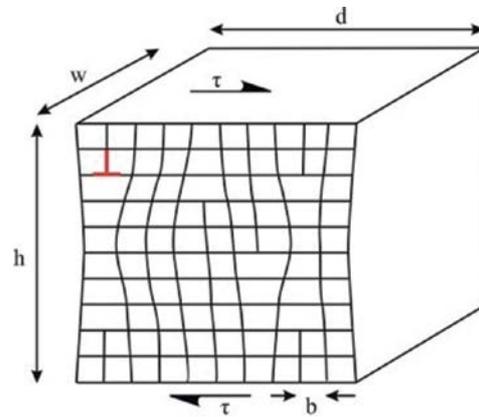
Thomas Hochrainer is head of and professor at the Institute of Strength of Materials of TU Graz.

Verhalten einer Großzahl von Einzelobjekten und ihrer Wechselwirkungen verknüpft werden. Eine solche Verknüpfung galt in der Plastizitätstheorie noch bis vor Kurzem als aussichtslos. Als eine wesentliche Hürde auf dem Weg zu einer Kontinuumstheorie der Versetzungen wurde schon vor Jahrzehnten die Tatsache identifiziert, dass Versetzungen bewegliche und flexible Kurven sind. Daher können die Methoden der Teilchenphysik nicht ohne Weiteres angewandt werden.

moving flexible lines, which obstructs the application of methods from particle physics. Only recently, Thomas Hochrainer, Institute of Strength of Materials at TU Graz, laid the foundations for the transfer of the methods from particle physics. He adopted the concept of alignment tensors from other continuum theories of extended objects to the dislocation case and derived evolution equations for the tensorial dislocation density variables which account for the kinematics of moving flexible lines.

Abbildung 1:
Schematische Darstellung der permanenten Scherung eines Kristalls, hervorgerufen durch die Bewegung sogenannter Stufenversetzungen.

Figure 1:
Schematic picture of the permanent shearing of a crystal produced by moving dislocations.



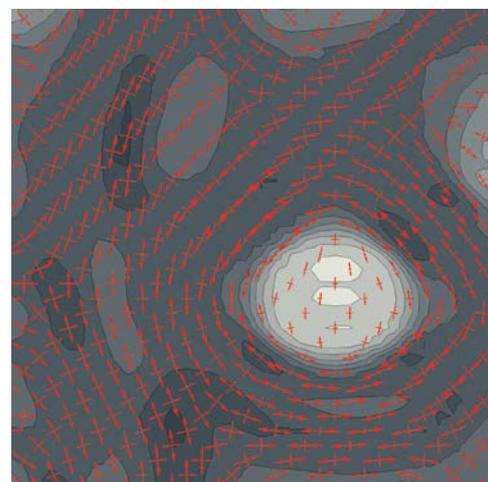
© Thomas Hochrainer

Durch die Übertragung des Konzepts der Ausrichtungstensoren auf Verteilungen von Versetzungen und der Ableitung von Erhaltungsgleichungen für diese Tensoren hat Thomas Hochrainer, Institut für Festigkeitslehre der TU Graz, kürzlich die Grundlage geschaffen, um die Kinematik der Versetzungsbewegung in einer versetzungs-basierten Kristallplastizitätstheorie zu erfassen. Im Rahmen der von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Forschergruppe „Dislocation based plasticity“ mit interdisziplinären Partnerinnen und Partnern am Karlsruher Institut für Technologie (KIT), der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg und der Technischen Universität Bergakademie Freiberg arbeiten wir nun daran, in der Dichtetheorie kollektive Effekte durch Wechselwirkungen von Versetzungen zu berücksichtigen. Dazu werden Methoden der statistischen Mechanik und Thermodynamik von Vielteilchensystemen auf Versetzungssysteme übertragen.

Within the Research Unit “Dislocation based plasticity” funded by the German Science foundation (DFG), with interdisciplinary partners at Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg and Technische Universität Bergakademie Freiberg, we are currently working on including collective effects due to dislocation interactions in the continuum dislocation dynamics framework. This requires transferring statistical mechanics and thermodynamics methods from many particle systems to the dislocation case.

Abbildung 2:
Dichtediagramm der Versetzungsdichte zu Beginn der Strukturbildung. Hellgrau bedeutet niedrige und Dunkelgrau hohe Dichte. Die Paare orthogonaler roter Doppelpfeile zeigen die lokale Ausrichtung der Versetzungen an.

Figure 2:
Density plot of the total dislocation density in an early stage of dislocation pattern formation. Light grey means low density and dark grey high density. The orthogonal pairs of double-headed arrows indicate the local alignment of dislocations.



© Thomas Hochrainer

A surprising result from the continuum dislocation dynamics is the fact that the consideration of dislocation interactions naturally leads to the emergence of dislocation structures. The reason is that existing inhomogeneities get enhanced by a process similar to the emergence of traffic jams: where there is already a high dislocation density, dislocation becomes slowed down and contributes to a further accumulation of dislocations. Elastic interactions restrict the accumulation and determine the characteristic size of the emerging dislocation structures. The size of the structures was shown to scale as expected from experiments, that is, the size is proportional to the average dislocation spacing and inversely proportional to the applied stress.

Due to the consideration of dislocation interactions, the continuum dislocation dynamics theory becomes moreover size-dependent. This means that for specimens with dimensions on the order of the average dislocation spacing, the plastic characteristics turn out to be dependent on the absolute size. Note that classical continuum plasticity is size-scale

$$\partial_t \rho^{ij} = \left[-\varepsilon^{ik} \partial_k (v \kappa^j) + v Q^{ij} - \varepsilon^j_k \rho^{ikm} \partial_m v \right]_{\text{sym}}$$

© Thomas Hochrainer

Abbildung 3:
Entwicklungsgleichung des
Versetzungsausrichtungstensors
zweiter Stufe.

Figure 3:
*Evolution equation of the
dislocation alignment tensor of
second order.*

Zu unserer Überraschung führt die Berücksichtigung von Wechselwirkung automatisch zu einer Tendenz zur Ausbildung von Versetzungsstrukturen. Der Grund ist, dass bestehende Inhomogenitäten durch eine Art Verkehrsstaueffekt verstärkt werden: Da, wo der Versetzungsfluss bereits durch eine hohe Dichte von Versetzungen behindert ist, werden ankommende Versetzungen gebremst und tragen zur weiteren Akkumulation und damit zur Verstärkung der Bremswirkung bei.

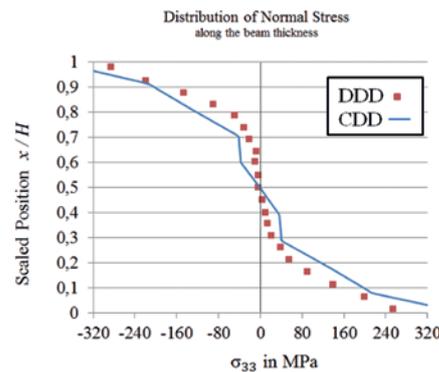
Elastische Wechselwirkungen begrenzen die Akkumulation und führen zu typischen Abmessungen der Strukturen. Die Abmessungen der aus der Kontinuumsversetzungsdynamik vorhergesagten Strukturen skalieren dabei wie experimentell erwartet mit dem mittleren Versetzungsabstand und invers zur anliegenden Spannung.

Durch die Berücksichtigung von Wechselwirkungen wird die resultierende Kontinuumsversetzungstheorie außerdem größenabhängig. Das bedeutet, dass für Probengrößen oder Bauteile, deren äußere Dimensionen in der Größenordnung des mittleren Versetzungsabstands sind, die plastischen Eigenschaften von der Größe des Objekts abhängen. Während die klassische Plastizitätstheorie keine Größeneffekte kennt, wurden Größeneffekte für die Plastizität auf kleinen Skalen vielfach experimentell nachgewiesen. Wir sind derzeit dabei, die Kontinuumsversetzungstheorie durch Vergleich mit Mikrotorsionsversuchen am KIT zu validieren.

Zukünftige Herausforderung

Als nächste große Herausforderung für die Kontinuumsversetzungsdynamik bleibt die Vorhersage der Verfestigung. Hier entstehen neue theoretische Herausforderungen, da sich durch sogenannte Versetzungsreaktionen die Topologie der Versetzungsnetzwerke laufend verändert, was in den bestehenden Entwicklungsgleichungen noch nicht berücksichtigt wird. ■

independent, but numerous size-effects have been observed in small-scale plasticity. We are currently in the course of validating the continuum dislocation theory by comparing it to micro-torsion experiments at KIT.



© Thomas Hochrainer

Abbildung 4:
Längsnormalspannung in einem
Mikrobalken unter Biegung.
Durchgehende Linie: berechnet
mit Kontinuumsversetzungs-
dynamik. Rote Symbole:
Ergebnis einer diskreten
Versetzungsdynamiksimulation
am KIT.

Figure 4:
*Longitudinal normal stress in a
micro beam during bending.
Solid line: results from
continuum dislocation dynamics
simulation. Red symbols:
results from discrete dislocation
dynamics simulations at KIT.*

Future challenges

The next big challenge in continuum dislocation theory is predicting work hardening. This introduces new theoretical challenges because the dislocation reactions involved in strain hardening lead to dynamic changes of the topology of the dislocation network, which are not yet reflected in the current evolution equations. ■