

Simulation der Entstehung von Versetzungsstrukturen am Beispiel von AlMg5Mn

Vom Fachbereich Maschinenbau
der Universität Hannover
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur
genehmigte Dissertation
von

Dipl.-Math. Andreas Kuhlmeier
geboren am 17.02.1972 in Gronau

2003

1. Referent: Prof. Dr.-Ing. Fr.-W. Bach
2. Referent: Prof. Dr.-Ing. E. Doege
3. Referent: Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. mult. H. Haferkamp

Tag der Prüfung: 01.07.2003

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Werkstoffkunde der Universität Hannover.

Meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr.-Ing. Fr.-W. Bach, dem Leiter des Instituts für Werkstoffkunde, gilt mein besonderer Dank für die Unterstützung und Förderung der Arbeit.

Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. E. Doege, dem Leiter des Instituts für Umformtechnik und Umformmaschinen, für die Übernahme des Koreferats. Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. mult. H. Haferkamp, dem ehemaligen Leiter des Instituts für Werkstoffkunde, sei an dieser Stelle für die Übernahme des Vorsitzes innerhalb des Promotionsverfahrens gedankt.

Für die langjährige gute Zusammenarbeit möchte ich allen meinen Kollegen danken. Ein Dank geht ebenfalls an Herrn Dipl.-Ing. M. Schaper und Herrn Dr.-Ing. M. Niemeyer für die fachliche Unterstützung. Ein besonderer Dank geht an Frau Dr. N. Buschmann für den Ansporn, das Ziel der Arbeit nicht aus den Augen zu verlieren, und an meine Eltern, die mir das Studium ermöglichten.

Abstract

Zur Verbesserung der Genauigkeit von makromechanischen Simulationsmodellen sind korrekte Eingabedaten der modellierten Werkstoffe erforderlich. Diese Materialdaten werden konventionell durch Versuche bestimmt, können jedoch auch mit Hilfe kristallphysikalischer Simulationen gewonnen werden. Eine derartige Methode, welche Elemente von Zellularautomaten und Monte-Carlo-Methode verbindet und auf ein Vielteilchenmodell zurückführt, wird im Rahmen dieser Arbeit vorgestellt. Vorteil dieser Methode ist die Erlangung eines grundlegenden Verständnisses der im Kristall ablaufenden Vorgänge. Im Vordergrund steht die Untersuchung der Strukturbildung von Versetzungen in metallischen Werkstoffen. In diesem Zusammenhang wird auch der Einfluss eines Abschneideradius von langreichweitigen Spannungsfeldern um Versetzungen auf die Versetzungsstrukturbildung untersucht. Im Zusammenarbeit mit dem European Center for Parallelism of Barcelona (CEPBA) wurde eine Simulationssteuerung entwickelt, die die Nachbildung von Zugversuchen im mikrostrukturellen Maßstab ermöglicht. Zur Validierung der Simulationsergebnisse werden Vergleiche mit transmissionselektronenmikroskopischen Aufnahmen durchgeführt. Neben Korrelationsverfahren liegt ein Schwerpunkt in der Bestimmung der Versetzungsdichte bei TEM-Bildern. Hierzu wird ein automatisches, auf Methoden der Bildverarbeitung basierendes Programm vorgestellt.

Schlagworte

Simulation, Versetzung, Mikrostruktur, Transmissionselektronenmikroskopie

Abstract

To increase the accuracy of macromechanical simulation models correct input data of the modeled materials is required. This material data can be determined conventionally by experiments but also by using crystal-physical simulations. Such a method which combines elements of cellular automata and Monte-Carlo method and reduces them to a multi-body problem is introduced in this work. The advantage of this model is to obtain a fundamental understanding of the processes taking place in the crystal. The main topic is the analysis of the formation of dislocation structures in metallic materials. In this context the influence of a cutoff-radius for long-range stressfields around dislocations on the development of dislocation structures is discussed. In collaboration with the European Center for Parallelism of Barcelona (CEPBA) a simulation control has been developed which allows the emulation of tensile tests on a microstructural scale. To validate the simulation results comparisons with transmission-electron-microscopic images are carried out. In addition to correlation methods an emphasis lies on the determination of dislocation densities in TEM-pictures. For doing that an automatic method based on image processing techniques is presented.

Keywords

Simulation, dislocation, microstructure, transmission-electron-microscopy

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Stand von Wissenschaft und Technik	4
3	Zielsetzung	6
4	Grundlagen des Gefügeaufbaus	8
4.1	Nulldimensionale Defekte	9
4.2	Versetzungen	10
4.2.1	Lineare Elastizitätstheorie	11
4.2.2	Spannungsfeld um eine Schraubenversetzung	14
4.2.3	Spannungsfeld um eine Stufenversetzung	14
4.2.4	Superposition von Spannungsfeldern	16
4.2.5	Versetzungsbewegungen	17
4.2.6	Interaktion und Multiplikation von Versetzungen	20
4.3	Höherdimensionale Defekte	24
4.3.1	Korngrenzen	24
4.3.2	Räumliche Fehler	25
5	Simulationsmodelle	27
5.1	Monte-Carlo-Methode	27
5.2	Prinzip der zellulären Automaten	28
5.3	Molekulardynamik-Modelle	30
5.4	Verwendete Simulationsmethode	30
5.4.1	Rechentechnik	31
5.4.2	Parallelisierung	36
6	Validierungsmethoden	40
6.1	Transmissionselektronenmikroskopie	40
6.1.1	Funktionsweise	40
6.1.2	Elektronenbeugung	41
6.1.3	Beugungskontraste	43
6.1.4	Verwendetes TEM	45
6.2	TEM-Untersuchungen	47
6.2.1	Schwingbelastung	47
6.2.2	Wärmebehandlung	51
6.3	Methoden der Bildverarbeitung	52

6.3.1	Bilderfassung	52
6.3.2	Bildvorverarbeitung	54
6.3.3	Segmentierung	63
6.4	Automatische Bestimmung der Versetzungsdichte	69
6.4.1	Methoden	69
6.4.2	Automatisierung	70
6.5	Vergleich der Verfahren	75
6.6	Methode der Paarkorrelation	78
7	Simulationsrechnungen	80
7.1	Resultierende Kräfte	80
7.2	Einfluss des Abschneideradius	80
7.3	Korrelationsuntersuchungen	85
7.4	Dehnungsgesteuerte Simulationen	88
8	Simulationsrechnungen zum Nano-Indenter	91
8.1	Grundlagen	91
8.2	Modellbildung	93
8.3	Simulationsrechnungen	95
9	Zusammenfassung	98
10	Literaturverzeichnis	100

Formelzeichenverzeichnis

Symbole, die nur einmal im Text vorkommen und dort erklärt sind, wurden in dieses Verzeichnis nicht aufgenommen.

Formelzeichen	Bezeichnung	Einheit
a	Eindruckdurchmesser	[m]
a_c	Gitterkonstante	[m]
a_m	kritischer Annihilationsabstand	[m]
\vec{b}	Burgersvektor	[m]
B	Schnittmenge von strukturierendem Element und Eingangsbild	[-]
c	Lichtgeschwindigkeit	$[\frac{m}{s}]$
d	Netzebenenabstand	[m]
d_A	Atomdurchmesser	[Å]
D	Durchmesser des Eindruckkörpers	[m]
$E_H(t)$	Segmentierungsfehler des Hintergrunds	[-]
$E_O(t)$	Segmentierungsfehler des Objekts	[-]
\vec{F}	Peach-Koehler-Kraft	[N]
\vec{F}_j^{sum}	auf Versetzung j wirkende Peach-Koehler-Kraft	[N]
F_p	Prüfkraft	[N]
$g(\vec{r})$	Paarkorrelationsfunktion	[-]
\vec{g}	Ortsvektor des reziproken Gitters	[-]
G	Schubmodul	$[\frac{N}{m^2}]$
h	Plancksches Wirkungsquantum	[Js]
h_i	wahre Eindringtiefe	[m]
h_s	maximale Eindringtiefe	[m]
$i(x,y)$	Grauwert im Eingangsbild an der Stelle (x,y)	[-]
\vec{k}_0	Wellenvektor des einfallenden Strahls	$[\frac{1}{m}]$
\vec{k}_1	Wellenvektor des gebeugten Strahls	$[\frac{1}{m}]$
k_b	Boltzmann-Konstante	$[\frac{J}{K}]$
K	Kompressionsmodul	$[\frac{N}{m^2}]$
m_0	Ruhemasse des Elektrons	[kg]
m_e	Masse des Elektrons	[kg]
N	Teilchenanzahl im System	[-]
$o(x,y)$	Grauwert im Ergebnisbild an der Stelle (x,y)	[-]
p_e	Impuls des Elektrons	$[\frac{kg \cdot m}{s}]$
p, p_i	Wahrscheinlichkeiten	[-]
p_H	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für Hintergrundgrauwerte	[-]

p_O	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für Objektgrauwerte	[-]
P	Linienlast	$[\frac{N}{m}]$
P_H	a priori Wahrscheinlichkeit des Hintergrunds	[-]
P_O	a priori Wahrscheinlichkeit des Objekts	[-]
r	maximaler Wechselwirkungsabstand	[m]
t	Schwellwert zur Unterscheidung von Objekt und Hintergrund	[-]
T	Temperatur	[K]
T_S	Schmelztemperatur	[K]
\vec{u}	Verschiebung	[m]
u_{ik}	Verzerrungstensor	[-]
$U(x)$	Lennard-Jones-Potential	[J]
U_0	lokale Aktivierungsenergie	[eV]
U_a	spezifische Prozeßenergie	[eV]
U_A	gesamte Aktivierungsenergie	[eV]
U_b	Beschleunigungsspannung	[V]
U_i	Energie des Zustands i	[J]
v	Geschwindigkeit der Elektronen im Elektronenstrahl	$[\frac{m}{s}]$
V	Aktivierungsvolumen	$[m^3]$
V_E	Volumen der Elementarzelle	$[m^3]$
$Z(T)$	Zustandssumme bei Temperatur T	[-]
γ	Schiebung	[-]
Δ_S	Schrittweite der Spannungserhöhung	[-]
ϵ	Interaktionsenergie	[J]
ϵ_{ik}	Dehnungstensor	$[\frac{N}{m}]$
$\vec{\Theta}(\vec{r})$	Thetafunktion (Stufenfunktion)	[-]
λ	Lame-Koeffizient	$[\frac{N}{m^2}]$
λ_e	Wellenlänge des Elektronenstrahls	[m]
ν	Querkontraktionszahl	[-]
$\vec{\xi}$	Linienvektor	[m]
ρ, ρ_{lok}	(lokale) Versetzungsdichte	$[\frac{1}{m}]$
σ_{ik}	normierter Spannungstensor	$[\frac{N}{m}]$
τ	Schubspannung	$[\frac{N}{m^2}]$
τ_k	Frank-Read-Quellspannung	$[\frac{N}{m^2}]$

1 Einleitung

Metallische Werkstoffe sind in allen technischen Bereichen trotz der Entwicklung neuer Materialien aufgrund ihrer vielseitigen Verwendungsmöglichkeiten nach wie vor unersetzlich. Die meisten Erkenntnisse hierzu entstammen der langen Entwicklungsgeschichte metallischer Werkstoffe, die eng mit der menschlichen Evolution und dem allgemeinen technischen Fortschritt verbunden ist. Ein großer Teil dieses Wissens entstammt jedoch eher praktischen Versuchen, zunächst vermutlich zufälligen Gegebenheiten, später gezielteren Experimenten. Erst in den letzten Jahrhunderten dieser Jahrtausende alten Entwicklung wurden empirische Kenntnisse durch wissenschaftlich fundierte Theorien ergänzt. Hierdurch ist man zu der Erkenntnis gelangt, dass ihr breites Einsatzgebiet in erster Linie durch die zahlreichen Beeinflussungsmöglichkeiten auf mikrostruktureller Ebene zurückzuführen ist.

Zur weiteren Verbesserung von metallischen Werkstoffen und Legierungen ist ein grundlegendes und tiefgehendes Verständnis der im Material ablaufenden Prozesse erforderlich, welche beispielsweise während plastischer Verformung oder thermischer Behandlung auftreten. Mikrostrukturelle Simulationsmethoden liefern hierzu einen entscheidenden Beitrag, da sie die komplexen Interaktionen aller mikrostrukturellen Elemente wie Versetzungen, Ausscheidungen und Korngrenzen abbilden. Besonders das kollektive Verhalten von Versetzungen untereinander muss hierbei im Vordergrund stehen, da das durch die Gitterverzerrung hervorgerufene Spannungsfeld zwar bereits bekannt, das Zusammenspiel von mehreren Tausend Versetzungen jedoch äußerst komplex ist. Zur Lösung solcher Vielteilchensysteme bieten sich mehrere Verfahren an, wie z.B. Monte-Carlo-Methoden, zelluläre Automaten und Methoden der Molekulardynamik. Diese Verfahren weisen einen unterschiedlichen Grad an Determinismus auf. So ist beispielsweise die Monte-Carlo-Methode ein stochastisches Verfahren, wogegen Molekulardynamik-Modelle eine analytische Lösung des Problems liefern. Der Einsatz von Computern ist bei Verwendung jedes Verfahrens inzwischen unverzichtbar geworden, da nur sie das Lösen dieser Vielteilchenprobleme ermöglichen. Zur Minimierung des hohen Rechenaufwands wird im Rahmen dieser Arbeit ein zweidimensionales Modell vorgestellt, mit dem die Entstehung von Versetzungsstrukturen untersucht werden kann. Übergeordnetes Ziel dieser Arbeit ist die Vorhersage des Werkstoffverhaltens bei Umform- oder Fügeprozessen durch Simulationsrechnungen auf mikrostruktureller Ebene, um auf diese Art die Entwicklungszeit neuer Legierungen zu senken und dadurch Kosten zu sparen. Die Vorhersage erfolgt durch das Ableiten makroskopischer Parameter, wie z.B. Spannungs-Dehnungs-Kurven, aus den simulierten Mikrostrukturen.

Die sich während der Simulation herausbildenden Versetzungsstrukturen können mit transmissionselektronenmikroskopischen (TEM) Aufnahmen realer Bauteile verglichen und dadurch validiert werden. Hinsichtlich der Probenpräparation und den sich einstellenden Versetzungsstrukturen hat sich eine Aluminium-Magnesium-Legierung (AlMg5Mn) als besonders geeignet erwiesen. Die entsprechenden kristallphysikalischen Kenngrößen werden in der Simulation verwendet.

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit liegt in der Auswertung von TEM-Aufnahmen, wobei Metho-

1 Einleitung

den der Bildverarbeitung zum Einsatz kommen müssen. Da meist ungleichmäßige Beleuchtungszustände vorliegen, müssen die Aufnahmen erst verschiedene Vorverarbeitungsschritte durchlaufen, bevor mit der eigentlichen Auswertung begonnen werden kann. Zu dieser zählen die Bestimmung der Versetzungsdichte, die durch ein im Rahmen dieser Arbeit entwickeltes Programm vollautomatisch erfolgt, sowie Korrelationsuntersuchungen, die einen Vergleich von simulierten mit realen Versetzungsstrukturen ermöglichen.

2 Stand von Wissenschaft und Technik

In diesem Abschnitt soll ein kurzer Überblick über die auf dem Gebiet der mikrostrukturellen Simulationen vorhandenen Kenntnisse und deren Analysemethoden gegeben werden.

Mikrostrukturelle Simulationen behandeln in erster Linie die Interaktion von Versetzungen untereinander. Es wird dabei unterschieden zwischen Modellen mit und ohne Ortsauflösung. Sind die jeweiligen Positionen der simulierten Versetzungen nicht von Interesse, sondern basieren die Modelle auf der Formulierung von Versetzungsdichten einzelner Versetzungstypen, so spricht man von Modellen ohne Ortsauflösung.

Gängige Versetzungsdichtemodelle basieren auf Entwicklungsgleichungen für die berücksichtigten mikrostrukturellen Elemente und einer kinetischen Grundgleichung, die Mikrostruktur, Temperatur und Dehnrates mit der dafür nötigen Spannung verknüpft. Einsatzgebiete sind meist Metalle oder Legierungen mit hoher Stapelfehlerenergie, die zur Versetzungszellbildung neigen, wie z.B. Aluminium. Modelle mit drei internen Parametern berücksichtigen drei unterschiedliche Versetzungsdichten: mobile Versetzungen, immobile Versetzungen in Zellwänden und immobile Versetzungen im Zellinneren [Goe00], [Goe01]. Erst kürzlich ist KARHAUSEN und ROTERS die Formulierung eines Vier-Parameter-Modells gelungen [Kar02], welches von einer konstanten Anzahl mobiler Versetzungen ausgeht, jedoch immobile Schrauben- und Stufenversetzungen in Zellwänden und im Zellinneren einbezieht.

Ein weiteres Einsatzgebiet für versetzungsdichtebasierte Modelle ist die Untersuchung der Abhängigkeiten von Dehnrates zu Spannung bei stationärer Verformung. Der Übergang von einer kubischen zu einer exponentiellen Abhängigkeit wurde in [Blu01] auf spontane Annihilationsvorgänge zurückgeführt, wobei die dynamische Erholung sowohl von der Auflösung von Dipolanordnungen als auch von Abgleitvorgängen bestimmt wird.

Falls bei mikrostrukturellen Simulationen die Untersuchung der Anordnung von Versetzungen im Vordergrund steht, so sind deren Positionen essentiell wichtig und finden in Modellen mit Ortsauflösung ihre Berücksichtigung.

Grundlegende Simulationen, welche das Durchlaufen einer Versetzungslinie durch ein Hindernisfeld aus Ausscheidungen nachbilden, wurden zuerst von MORRIS und KLAHN mittels eines raumdiskreten Modells durchgeführt [Mor74], von FUCHS und RÖNNPAGEL [Fuc93] ergänzt und von ARSENAULT [Ars01] unter Verwendung eines kontinuumselastizitätstheoretischen Modells fortgeführt. Bei MOHLES [Moh98] wurde unabhängig davon eine ähnliche Herangehensweise gewählt. Die Versetzungslinie liegt bei diesem zweidimensionalen Simulationstyp in der Bildebene, die Ausscheidungen stellen punkt- oder flächenartige Hindernisse dar. Grundlage all dieser Simulationen ist das lokale Gleichgewicht aller Spannungen entlang der Versetzungslinie.

Im Gegensatz dazu existieren zweidimensionale Modelle, die der Untersuchung von Versetzungsstrukturen dienen, wobei die Linienvektoren der Versetzungen senkrecht zur Bildebene stehen und hierbei als unendlich lang angenommen werden. Man spricht aus diesem Grund auch häufig von zweieinhalbdimensionalen Simulationen. Relativ einfache Modelle zur Simulation von Stufenver-

setzungen unter Spannungseinfluss basierend auf der Theorie der Zellularautomaten wurden erstmals von LÉPINOUX und KUBIN [Lep87] entwickelt. Der Einfluss verschiedener Temperaturen wurde hierbei jedoch vernachlässigt. Ähnliche, ebenfalls auf zellulären Automaten basierende Modelle wurden von STECK und HESSELBARTH [Ste94], [San99] entwickelt. Bei diesen Arbeiten stand die Untersuchung der Selbstorganisationsmechanismen nach dem Prinzip von NICOLIS und PRIGOGINE [Pri77] im Vordergrund. Zelluläre Automaten werden ebenfalls zur Nachbildung der dynamischen Rekristallisation verwendet [Got01]. Ausgehend von KUBIN und CANOVA [Kub89], GHONIEM und AMODEO [Amo90], sowie GULLUOGLU ET AL. [Gul89] haben sich auf einer Variante der Molekulardynamik basierende, mikrostrukturelle Modelle (engl.: *dislocation dynamics*) derart weiterentwickelt, dass sie mittlerweile wichtige Einblicke in das Verhalten von Werkstoffen unter verschiedenen Belastungen bieten.

Der Schritt zur Dreidimensionalität wurde wiederum von KUBIN ET AL. durchgeführt [Kub92]. Versetzungen setzen sich hierbei aus elementaren Stufen- und Schraubenversetzungssegmenten zusammen. Die resultierenden Spannungsfelder müssen aus den Spannungsfeldern der einzelnen Segmente berechnet werden.

Spezielle Untersuchungen von statischen Spannungsfeldern regelmäßiger Zellanordnungen und der sich hieraus ergebenden Versetzungsverteilung wurden von RAABE und ROTERS [Raa95], [Raa96] und [Rot96], [Rot97] in zwei und in drei Dimensionen durchgeführt. Die Entwicklung der Mikrostruktur hinsichtlich der Erzeugung und Interaktion von Versetzungen ist Bestandteil der Arbeiten von SCHIØTZ [Sio02].

Monte-Carlo-Methoden, die Kornwachstum in zwei und drei Dimensionen nachbilden, wurden von ANDERSON ET AL. [And84], [And86] entwickelt. Auch hier ist das Material in diskrete Bereiche aufgeteilt, welche ihrerseits Attribute wie Orientierung besitzen, jedoch keine subsidiäre Mikrostruktur aufweisen, sondern als homogen angenommen werden. Korngrenzen werden durch große Orientierungsunterschiede zwischen benachbarten Bereichen repräsentiert. Bei jedem Monte-Carlo-Schritt wird ein zufällig ausgewählter Bereich neu orientiert, der Energiezustand des Gesamtsystems berechnet und gemäß den Entwicklungsregeln des Metropolis-Algorithmus akzeptiert oder verworfen.

Ein noch relativ neues Forschungsgebiet ist die Simulation von plastischen Umformvorgängen auf mesoskopischer Ebene [Dev96], [Vrd98] und [Dev01]. Diese Art von Simulation wurde erst durch den Zuwachs an Rechenleistung moderner Rechner in jüngster Zeit möglich. Basierend auf einem gemischt diskret-kontinuierlichen Simulationsmodell wird die Mikrostruktur durch eine Variante der Molekulardynamik berechnet, wobei die Ergebnisse schließlich in ein Finite-Elemente-Modell (FE-Modell) integriert werden, welches die mesoskopische Verformung des Werkstücks bestimmt. Ebenfalls erst kürzlich gelang ARETZ ET AL. [Are01] die Integration eines versetzungsdichtebasierten mikrostrukturellen Modells und eines Texturmodells in eine FE-Simulation. Die Kopplung erfolgt durch den Export makroskopischer Daten aus der FE-Simulation in das mikrostrukturelle und das Texturmodell. Ergebnisse dieser Teilberechnungen werden dann wieder dem FE-Modell zugeführt.

3 Zielsetzung

Die Validität eines mikrostrukturellen Simulationsmodells hängt in erster Linie von der Abbildung von Versetzungen als Träger der plastischen Verformung ab. Weiterhin ist die Anzahl der simulierten Versetzungen und deren Interaktion mit höherdimensionalen Kristallgitterbaufehlern von Bedeutung. Die meisten Versetzungssimulationen müssen sich auf kleine Simulationsgebiete oder geringe Versetzungsdichten beschränken, um die Rechenzeiten in einem vertretbaren Rahmen zu halten.

Ein verbreitetes Hilfsmittel hierzu ist die Beschränkung der Reichweite der zwischen den Versetzungen wirkenden, langreichweitigen Peach-Koehler-Kräfte, um die Anzahl der zu berechnenden Wechselwirkungsterme gering zu halten. Im Rahmen dieser Arbeit wird anhand eines Verfahrens, welches Elemente von zellulären Automaten sowie Monte-Carlo-Methoden aufweist, gezeigt, dass es bei Verwendung des in der Literatur häufig für den Abschneideradius angegebenen und von der Versetzungsdichte ρ abhängigen Werts von $5/\sqrt{\rho}$ zur Bildung von künstlichen Mustern und Artefakten kommt.

Ein weiteres Mittel zur Verringerung der Rechenzeit ist die Verwendung von Multipolmethoden. Diese führen jedoch zu einer gewissen Verminderung der Rechengenauigkeit, weshalb sie im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter verfolgt werden.

Aufgrund der kontinuierlichen Steigerung der Leistungsfähigkeit von Prozessoren im Bereich der Computertechnologie erfolgte vielmehr eine Entscheidung für den Einsatz von verteilten Systemen oder Parallelrechnern. Die vorliegende Simulationsaufgabe wird dadurch auf mehrere Rechner aufgeteilt, und es kommt zu einem nahezu linearen Absinken der Programmlaufzeit in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Prozessoren.

Ziel dieser Arbeit ist die Vorhersage des Werkstoffverhaltens bei Umform- oder Fügeprozessen durch Simulationsrechnungen auf mikrostruktureller Ebene. Durch die Energiezufuhr aufgrund thermischer und mechanischer Belastungen während des Umform- oder Schweißvorgangs unterliegt die Mikrostruktur des Werkstoffs starken Veränderungen. So kommt es bei Umformung bei Raumtemperatur zu einem Anstieg der Versetzungsdichte und zur Bildung charakteristischer Strukturen. Die Festigkeit des Werkstoffs ist durch diese Kaltverformung stark angestiegen. Die hohe thermische Belastung des Materials bei Fügeprozessen kann hingegen zu einer Verringerung der Festigkeit aufgrund von Selbstordnungs- und Annihilationsmechanismen von Versetzungen führen, so dass das Material der Wärmeeinflusszone andere Eigenschaften als das der Schweißnaht oder des Grundwerkstoffs aufweist. Makroskopische Kenngrößen sind also auf mikrostrukturelle Prozesse zurückzuführen, so dass ein tiefgehendes Verständnis dieser Prozesse bei der Legierungsentwicklung hilfreich ist. Hierdurch ist es beispielsweise möglich, die Entwicklungszeit neuer Legierungen zu senken und dadurch Kosten zu sparen. Die Vorhersage erfolgt durch das Ableiten makroskopischer Parameter, wie z.B. Spannungs-Dehnungs-Kurven, aus den simulierten Mikrostrukturen.

Ein erst wenig erforschtes Einsatzgebiet für mikrostrukturelle Simulationen ist die Nachbildung von Härtemessungen, bei denen die Festigkeit (Härte) eines Werkstoffs über das Eindringen eines

3 Zielsetzung

Eindruckkörpers bestimmt wird. Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit ist die Simulation der Entwicklung der Mikrostruktur direkt unter dem Indenter während der durch diesen hervorgerufenen plastischen Verformung. Die hierdurch gewonnenen Erkenntnisse führen wiederum zu einem besseren Verständnis des Verhaltens von Versetzungen unter hohen lokalen Spannungen.

Die Visualisierung von Versetzungsstrukturen kann im Experiment neben Ätzverfahren, welche die Durchstoßpunkte von Versetzungen durch eine freie Oberfläche freilegen, nur mittels Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) erfolgen. Letzteres Verfahren bietet sich trotz aufwändiger Probenpräparation aufgrund der vielseitigeren Einsatzmöglichkeiten an. Die Validierung der Simulationsergebnisse erfolgt dann durch den Vergleich der simulierten mit den experimentell bestimmten Versetzungsstrukturen. Hierbei ist die Versetzungsdichte, die im verwendeten Modell in jedem Schritt protokolliert wird, bei TEM-Aufnahmen jedoch erst bestimmt werden muss, von großem Interesse. Zur Vereinfachung der Auswertungsmethodik von TEM-Bildern sollte ein automatisches Verfahren zur Versetzungsdichtebestimmung zum Einsatz kommen. Ein solches, auf Methoden der Bildverarbeitung basierendes Verfahren wird im Rahmen dieser Arbeit entwickelt. Das vorgestellte Bildverarbeitungssystem zur automatischen Bestimmung von Versetzungsdichten bei TEM-Aufnahmen bietet mehrere Bildvorverarbeitungsmethoden und wählt dann die für die jeweilige Aufnahme geeignetste selbstständig und ohne weitere Bearbeiterinteraktion aus. Weiterhin erfolgt die Berechnung der Versetzungsdichten durch mehrere unterschiedliche Methoden.

Um mit dem vorgestellten Versetzungsstrukturmodell nicht nur die sich ausbildenden Strukturen untersuchen zu können, sondern beispielsweise auch Zugversuche nachbilden zu können, ist es erforderlich, die während des solchen Versuchs wirkenden externen Spannungen zu protokollieren. Der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Simulationstyp der dehnungsgesteuerten Simulation dient zur Ermittlung von nicht-empirischen Fließkurven, welche langfristig Einzug in FE-Modelle zur Umformsimulation halten werden und konventionell im Experiment bestimmte Fließkurven ersetzen können.

4 Grundlagen des Gefügeaufbaus

In diesem Kapitel sollen zunächst die werkstoffphysikalischen Grundlagen beschrieben werden, auf denen eine mikrostrukturelle Simulationsmethode basiert.

Zwischen den positiv geladenen Atomkernen und negativ geladenen Elektronen bestehen anziehende elektrostatische Kräfte. Gleichzeitig herrschen jedoch abstoßende Kräfte zwischen den Atomkernen. Diese beiden Kräfte befinden sich für eine bestimmte Entfernung gerade im Gleichgewicht, welches sich nach dem *Lennard-Jones-Potential* [Hai92] bestimmt ist:

$$U(x) = 4 \cdot \epsilon \left(\left(\frac{x}{d_A} \right)^{-12} - \left(\frac{x}{d_A} \right)^{-6} \right).$$

Der ungefähre Atomdurchmesser d_A wird hierbei in Ångström angegeben, die Interaktionsenergie ϵ berechnet sich als Produkt von Temperatur in Kelvin und Boltzmannkonstante $k_b = 1,3800662 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$. Sie wird häufig auch in Kelvin als Verhältnis zur Boltzmannkonstante angegeben, ϵ/k_b . Die Bindungsenergie U entspricht der Arbeit, die erforderlich wäre, um die Atome bei null Kelvin zu trennen. Aufgrund dieser Gleichgewichtslage sind die Atome metallischer Werkstoffe im festen Zustand deshalb im sogenannten *Kristallgitter*, einer räumlich periodischen Struktur, angeordnet. Abbildung 4.1 zeigt ein einfaches kubisches Raumgitter, welches zur genaueren Beschreibung als Wiederholung sogenannter *Elementarzellen* aufgefasst wird. Die Kantenlänge der

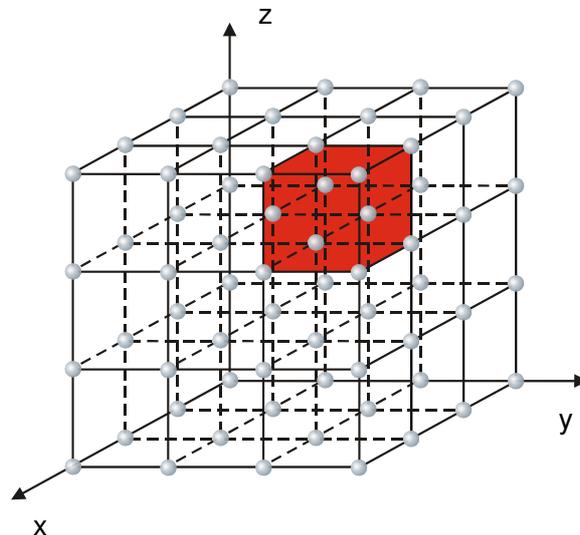


Abbildung 4.1: Elementarzelle im kubischen Kristallgitter.

Elementarzelle wird *Gitterkonstante* a_c genannt. Bei einfachen Raumgittern sind nur die Eckpunkte

der Elementarzellen mit Atomen besetzt. Meist enthalten die Elementarzellen jedoch zusätzliche Atome in den Schnittpunkten der Flächen- oder Raumdiagonalen. Diese *kubisch-flächenzentrierten* (*kfz*) und *kubisch-raumzentrierten* (*krz*) Gitter sind Modifikationen des einfachen kubischen Raumgitters. Das *kfz*-Gitter ist ebenso wie das *hexagonale Gitter dichtester Packung* (*hdP*) ein System dichtester Kugelpackung, welche sich lediglich durch die Reihenfolge, in der die dichtesten Ebenen übereinandergeschichtet sind, unterscheiden. In dieser Arbeit werden nur kubisch-flächenzentrierte Gitter betrachtet, da die verwendete Aluminiumlegierung diesen Gittertyp aufweist.

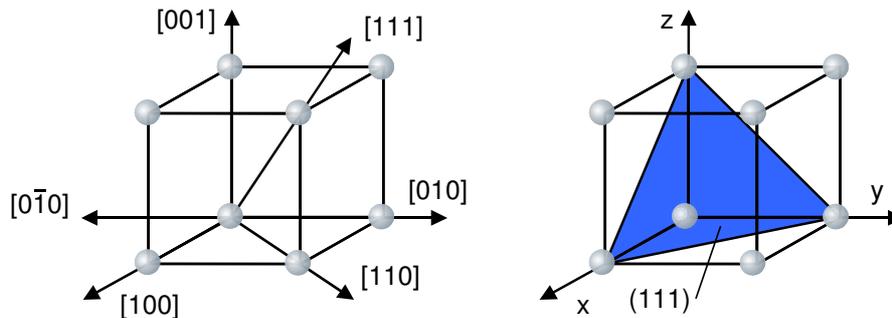


Abbildung 4.2: Millersche Indizes von Richtungen und Ebenen im kubischen Kristallgitter.

Da eine Reihe von Vorgängen im Kristallgitter nur auf bestimmten Ebenen erfolgt, ist es nötig, die verschiedenen Netzebenen und Richtungen zu kennzeichnen. Dies geschieht mit Hilfe der *Millerschen Indizes*, wobei die Achsen des Koordinatensystems parallel zu den Kanten der Elementarzelle verlaufen. Als Maßeinheit werden die Kantenlängen der Elementarzelle verwendet. Abbildung 4.2 zeigt Beispiele von Millerschen Indizes im kubischen Grundgitter. Negative Werte werden aus Gründen der Übersichtlichkeit durch Querstriche über den Ziffern repräsentiert. Spezielle Richtungen werden durch die Achsabschnitte u, v, w der Projektion des Richtungsvektors als Vielfache der Kantenlängen der Elementarzelle in eckigen Klammern $[uvw]$ dargestellt. Dabei entstehende Brüche werden mit dem Hauptnenner multipliziert, um teilerfremde Zahlen zu erhalten. Kristallographisch äquivalente Richtungen werden durch spitze Klammern $\langle uvw \rangle$ beschrieben. Ebenen werden mit runden Klammern (hkl) , in kubischen Kristallen entsprechend ihrer Normalenrichtung $[hkl]$, gekennzeichnet, kristallographisch äquivalente Ebenen analog mit geschweiften Klammern $\{hkl\}$. Vorzugsebenen für Gleitvorgänge (Gleitebenen) bei kubisch-flächenzentrierten Gittern sind die vier $\{111\}$ -Ebenen. Die drei $\langle 110 \rangle$ -Richtungen sind jeweils die bevorzugten Gleitrichtungen, so dass sich in der Summe für *kfz*-Gitter zwölf Gleitsysteme ergeben.

In Idealkristallen liegt eine völlig regelmäßige Struktur vor, reale Metallkristalle weisen jedoch Störungen dieses idealen Zustands auf. Diese entstehen einerseits beim Übergang von der Schmelze in den festen Zustand durch Störung des thermodynamischen Gleichgewichts, andererseits im festen Kristall durch plastische Verformungsvorgänge, wobei Energie von außen zugeführt wird. Die dadurch entstehenden Gitterbaufehler werden im Allgemeinen nach ihrer Geometrie unterschieden.

4.1 Nulldimensionale Defekte

Nulldimensionale Fehler sind punktförmige Fehlstellen im Kristallgitter. Zu ihnen zählen Leerstellen, d.h. unbesetzte Gitterplätze, Zwischengitteratome, also Atome, die auf Zwischengitterplätzen

sitzen, sowie einzelne Fremdatome auf regulären oder Zwischengitterpositionen. Leerstellen und Zwischengitteratome sind in Abbildung 4.3 gezeigt. In kristallinen Werkstoffen existiert eine natürli-



Abbildung 4.3: Nulldimensionale Gitterfehler.

che Leerstellendichte, die aufgrund der Brownschen Molekularbewegung temperaturabhängig ist. Bei Raumtemperatur beträgt das Verhältnis von Leerstellen zu besetzten Gitterpositionen ungefähr 10^{-12} und nimmt bis zum Erreichen der Schmelztemperatur T_S auf 10^{-4} zu. Leerstellen sind die einzigen Gitterbaufehler, bei denen sich der Kristall im thermodynamischen Gleichgewicht befinden kann. Beim Auftreffen energiereicher Kernstrahlung auf den Kristall, kann es vorkommen, dass einzelne Atome durch Anregung aus dem Kristallverbund herausgelöst werden und eine Leerstelle hinterlassen. Die Anregung reicht oft jedoch nicht aus, um den Kristall komplett zu verlassen, sondern nur für einen Sprung auf den nächsten Zwischengitterplatz. Diese Kombination aus Leerstelle und Zwischengitteratom wird *Frenkel-Paar* genannt.

Fremdatome sind ebenfalls Fehler im Gitter. Diese sollten gegenüber den Atomen des Basisgitters Atomradiendifferenzen von höchstens 15% aufweisen. Zudem sollten die Elemente gleiche Gitterstruktur besitzen und sich chemisch affin zueinander verhalten. Fremdatome können nur dann auf Zwischengitterplätzen sitzen, wenn sie wesentlich kleiner als die Atome des Grundgitters sind. Die Verspannung des Kristalls durch große Mengen einer zweiten Atomart führt zu einer Festigkeitssteigerung.

4.2 Versetzungen

Eindimensionale Gitterfehler werden Linienfehler oder *Versetzungen* genannt. Es wird zwischen zwei Grundarten von Versetzungen unterschieden. Abbildung 4.4 zeigt den prinzipiellen Aufbau einer Stufenversetzung, welche man sich als herausgetrennte Halbebene in einem ansonsten perfekten Gitter vorstellen kann. Eine Versetzung wird meist durch das eingezeichnete Symbol repräsentiert. Den schematischen Aufbau einer Schraubenversetzung zeigt Abbildung 4.5. Schraubenversetzungen entstehen durch die Verschiebung zweier Kristallbereiche an einer Trennfläche gegeneinander. Beliebige verlaufende Versetzungen sind immer Mischformen der beiden Grundtypen, setzen sich also immer aus einem Schrauben- und einem Stufenanteil zusammen.

Versetzungen bilden stets einen geschlossenen Linienzug oder enden an der Kristalloberfläche, bzw. anderen Hindernissen oder Gitterbaufehlern. Ein Maß für Größe und Richtung einer Versetzung ist der *Burgersvektor* \vec{b} , welcher durch einen *Burgersumlauf* bestimmt wird. Abbildung 4.6 zeigt einen solchen Umlauf am Beispiel einer Stufenversetzung. Die Versetzung wird hierbei einmal umkreist und im Anschluß wird die gleiche Operation im fehlerfreien Kristallgitter durchgeführt. Der Vektor, der letzteren Burgersumlauf schließt, wird Burgersvektor genannt. In einer äquivalenten Definition nach [Hrt82] ist der Burgersvektor gleich dem Linienintegral einer elastischen Verschiebung \vec{u} auf

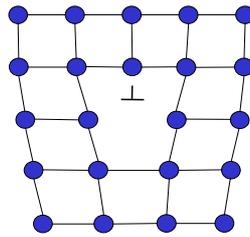


Abbildung 4.4: Prinzipieller Aufbau einer Stufenversetzung.

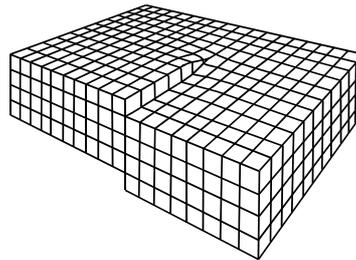


Abbildung 4.5: Prinzipieller Aufbau einer Schraubenversetzung.

einer geschlossenen Kurve um die Versetzung

$$\vec{b} = \oint_C \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} dt. \quad (4.1)$$

4.2.1 Lineare Elastizitätstheorie

Der Einfluss von Versetzungen auf die Kristalleigenschaften ist in erster Linie auf interne Verzerungen und resultierende Spannungsfelder zurückzuführen. Im Folgenden bezeichnen $x_i, i = 1, 2, 3$ gewöhnliche kartesische Koordinaten und σ_{ij} die Spannungen eines Körpers. σ_{ij} ist hierbei die i -te Komponente der Spannung bezüglich einer Fläche, deren Normale parallel zur x_j -Richtung liegt. Im Ausgangszustand ist ein infinitesimales Volumenelement des Körpers im Ruhezustand, also im

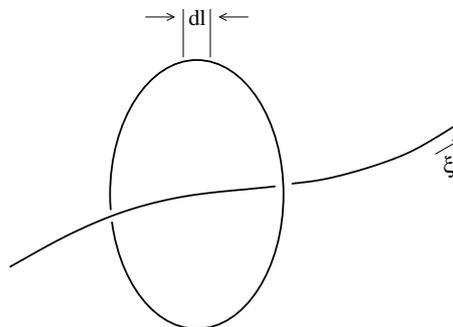


Abbildung 4.6: Burgersumlauf.

mechanischen Gleichgewicht. Damit kann es keine internen Momente geben, so dass gilt:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \quad (4.2)$$

Da ferner keine resultierende Kräfte auf das Volumenelement wirken, muss gelten:

$$\frac{\partial \sigma_{1i}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{2i}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{3i}}{\partial x_3} = 0 \quad i = 1, 2, 3. \quad (4.3)$$

Ein Körper deformiert sich unter dem Einfluss einer externen Spannung. Die dabei auftretende Verschiebung an Punkt \vec{r} habe die Komponenten u_i . Die Dehnungen sind definiert als

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (4.4)$$

Gemäß der Einsteinschen Summenkonvention wird über wiederholt auftretende Indizes summiert. Dieser Ausdruck enthält nur Terme erster Ordnung, da es sich hier um Methoden der linearen Elastizitätstheorie handelt, die jedoch bei kleinen Verzerrungen gute Näherungen liefern. Nach dem Hookeschen Gesetz hängen die Spannungen linear von den Deformationen ab, so dass gilt:

$$\sigma_{ij} = C \cdot \varepsilon_{ji}. \quad (4.5)$$

Die Koeffizienten der Matrix C sind die Elastizitätskonstanten. In der in dieser Arbeit verwendeten Konfiguration besteht keine Abhängigkeit der Verschiebungen von der x_3 -Koordinate. Ferner sind die Verschiebungen in dieser Richtung Null, so dass gilt:

$$\begin{aligned} u_1 &= u_1(x_1, x_2) & u_2 &= u_2(x_1, x_2) \\ u_3 &= 0 & \frac{\partial}{\partial x_3} &= 0 \end{aligned} \quad (4.6)$$

Gleichungen (4.3) und (4.6) kombinieren in kartesischen Koordinaten zu

$$\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} = 0 \quad (4.7)$$

$$\text{und } \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial x_2} = 0, \quad (4.8)$$

in Polarkoordinaten zu

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial \theta} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} = 0 \quad (4.9)$$

$$\text{und } \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{2\sigma_{r\theta}}{r} = 0. \quad (4.10)$$

Diese Gleichungen sind erfüllt, wenn σ_{11} , σ_{22} und σ_{12} durch eine *Airysche Spannungsfunktion* ψ ausgedrückt werden. Es ergibt sich hierfür in kartesischen Koordinaten

$$\sigma_{11} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2}, \quad \sigma_{22} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} \quad \text{und} \quad \sigma_{12} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1 \partial x_2} \quad (4.11)$$

und in Polarkoordinaten

$$\sigma_{rr} = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2}, \quad \sigma_{\theta\theta} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \quad \text{und} \quad \sigma_{r\theta} = -\frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \psi}{r \partial \theta}. \quad (4.12)$$

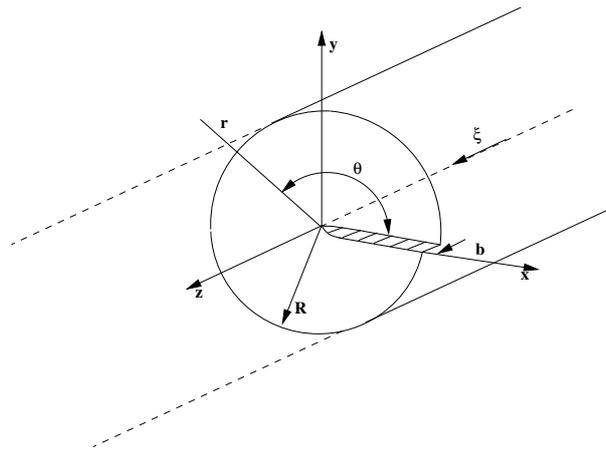


Abbildung 4.7: Zylindermodell einer Schraubenversetzung.

Differenzieren von Gleichung (4.4) ergibt

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{11}}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{22}}{\partial x_1^2} = 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{12}}{\partial x_1 \partial x_2}. \quad (4.13)$$

Aus dieser Gleichung ist ersichtlich, dass ε_{11} , ε_{22} und ε_{12} nicht unabhängig sind, sondern aus zwei Funktionen u_1 und u_2 ermittelt werden können. Mit Hilfe des sogenannten *Lamé-Koeffizienten*

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

und der *Querkontraktionszahl*

$$\nu = \frac{3K - 2G}{6K + 2G}$$

ergibt sich

$$\frac{\partial^4 \psi}{\partial x_1^4} + 2 \frac{\partial^4 \psi}{\partial x_1^2 \partial x_2^2} + \frac{\partial^4 \psi}{\partial x_2^4} = 0.$$

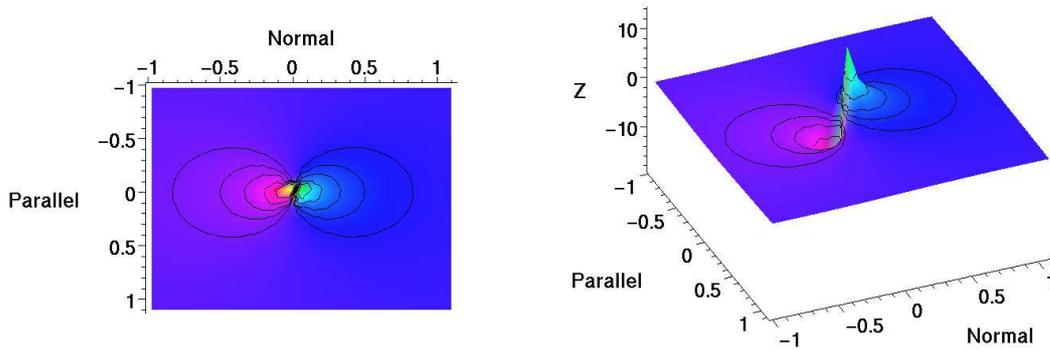
Unter Verwendung von Gleichung (4.11) lässt sich diese Gleichung für kartesische Koordinaten zu

$$\nabla^4 \psi = \nabla^2 (\nabla^2 \psi) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right)^2 \psi = 0 \quad (4.14)$$

und für Polarkoordinaten zu

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right)^2 \psi = 0 \quad (4.15)$$

umformen. Wenn Gleichung (4.14) für ψ gelöst ist, so können die Spannungen σ_{11} , σ_{22} und σ_{12} durch Gleichung (4.11) und (4.12) ermittelt werden. Die Spannungsfelder um die beiden Grundtypen von Versetzungen sind Spezialfälle dieser allgemeinen Lösung.

Abbildung 4.8: σ_{xz} -Spannungsfeld einer Schraubenversetzung.

4.2.2 Spannungsfeld um eine Schraubenversetzung

Zur Berechnung des Spannungsfelds einer Schraubenversetzung verwendet man nach Abbildung 4.7 einen unendlich langen Zylinder, auf dessen Symmetrieachse der Linienvektor $\vec{\xi}$ der Schraubenversetzung verläuft. Offensichtlich sind die Verschiebungen in x - und y -Richtung $u_x = u_y = 0$. Die Verschiebung in z -Richtung berechnet sich in einem isotropen Medium gemäß

$$u_z = b \frac{\theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \arctan \frac{y}{x}. \quad (4.16)$$

Der lineare Zusammenhang zwischen Dehnungen und Spannungen, der aufgrund des Hookeschen Gesetzes gilt, lässt sich folgendermaßen darstellen:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= (\lambda + 2G)\varepsilon_{11} + \lambda\varepsilon_{22} + \lambda\varepsilon_{33} \\ \sigma_{22} &= \lambda\varepsilon_{11} + (\lambda + 2G)\varepsilon_{22} + \lambda\varepsilon_{33} \\ \sigma_{33} &= \lambda\varepsilon_{11} + \lambda\varepsilon_{22} + (\lambda + 2G)\varepsilon_{33} \\ \sigma_{23} &= 2G\varepsilon_{23} \\ \sigma_{13} &= 2G\varepsilon_{13} \\ \sigma_{12} &= 2G\varepsilon_{12}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Die Spannungen, die zu diesen Verschiebungen gehören sind durch Gleichungen (4.4) und (4.17) bestimmt, woraus sich folgender kartesischer Spannungstensor ergibt:

$$\sigma_{ik} = \frac{Gb}{2\pi} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{y}{x^2+y^2} \\ 0 & 0 & \frac{x}{x^2+y^2} \\ -\frac{y}{x^2+y^2} & \frac{x}{x^2+y^2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Abbildung 4.8 zeigt das σ_{xz} -Spannungsfeld einer Schraubenversetzung und dessen Linien gleicher Spannung.

4.2.3 Spannungsfeld um eine Stufenversetzung

Auch bei der Berechnung des Spannungsfelds um eine Stufenversetzung wird ein Zylindermodell verwendet. Wie aus Abbildung 4.9 ersichtlich, sind die Verschiebungen in z -Richtung $u_z = 0$. Fer-

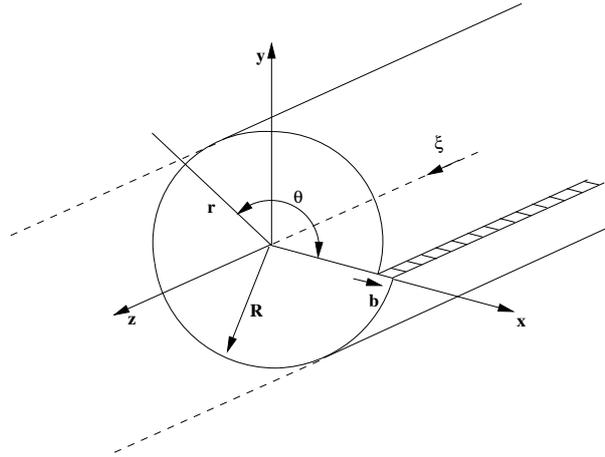


Abbildung 4.9: Zylindermodell einer Stufenversetzung.

ner gilt für das Feld: $\partial u_i / \partial z = 0$, $i = x, y$. In Polarkoordinaten wird die Differentialgleichung der Airyschen Spannungsfunktion (4.14) zu

$$\nabla^4 \psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right)^2 \psi = 0. \quad (4.19)$$

Eine der ersten allgemeinen Lösungen dieser Gleichung geht zurück auf [Mit1899]. Diese Lösung kann dann speziell auf den Fall einer Stufenversetzung angewendet werden. Durch Substitution von

$$\phi = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = \nabla^2 \psi$$

wird Gleichung (4.19) zu

$$\nabla^2 \phi = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \phi = 0. \quad (4.20)$$

Da diese harmonische Gleichung separierbar ist, sind die Lösungen von der Form

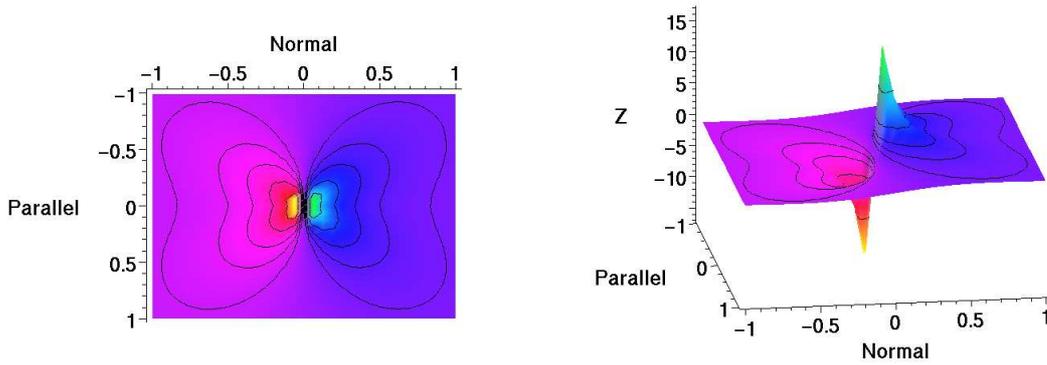
$$\phi = \sum_n R_n(r) \phi_n(\theta), \quad (4.21)$$

wobei jeder Term wiederum separierbar ist, da die Funktionen R_i und ϕ_i , $i = 0, \dots, n$ nur von einer Variable abhängen. Da eine einwertige Lösung gefordert ist, wird (4.21) zu

$$\phi = (\alpha_0 + \beta_0 \ln r) + \sum_{n=1}^{\infty} (\alpha_n r^n + \beta_n r^{-n}) \sin n\theta + \sum_{n=1}^{\infty} (\gamma_n r^n + \delta_n r^{-n}) \cos n\theta. \quad (4.22)$$

Aus Abbildung 4.9 lassen sich folgende qualitative Merkmale ableiten: $\phi = \sigma_{xx} + \sigma_{yy}$ soll bei $\theta = -\pi/2$ ein Maximum, bei $\theta = \pi/2$ ein Minimum besitzen und ϕ sollte für steigende r fallend sein. Die einfachste Funktion, die diese Merkmale erfüllt, ist

$$\phi_e = \beta_1 r^{-1} \sin \theta. \quad (4.23)$$

Abbildung 4.10: σ_{xx} -Spannungsfeld einer Stufenversetzung.

Die r^n -Terme und der logarithmische Term sind für das Spannungsfeld einer Stufenversetzung nicht relevant, die r^{-n} $n \geq 2$ fallen so stark ab, dass ab einem gewissen Abstand vom Zentrum der Versetzung Gleichung (4.23) dominiert. Das Spannungsfeld wird demnach durch folgende Gleichung bestimmt

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \psi = \beta_1 r^{-1} \sin \theta. \quad (4.24)$$

Eine spezielle Lösung hiervon lautet

$$\psi_e = \frac{\beta_1}{2} r \sin \theta \ln r. \quad (4.25)$$

Lösungen der homogenen Gleichung (4.24) können analog zu obiger Begründung ignoriert werden. Mit $\beta_1 = \frac{-Gb}{\pi(1-\nu)}$ wird (4.25) zu

$$\psi_e = \frac{-Gby}{4\pi(1-\nu)} \ln(x^2 + y^2). \quad (4.26)$$

Der zugehörige Spannungstensor berechnet sich schließlich nach Gleichung (4.11) zu

$$\sigma_{ik} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)(x^2 + y^2)^2} \begin{pmatrix} -y(3x^2 + y^2) & x(x^2 - y^2) & 0 \\ x(x^2 - y^2) & y(x^2 - y^2) & 0 \\ 0 & 0 & -\nu 2y(x^2 + y^2) \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

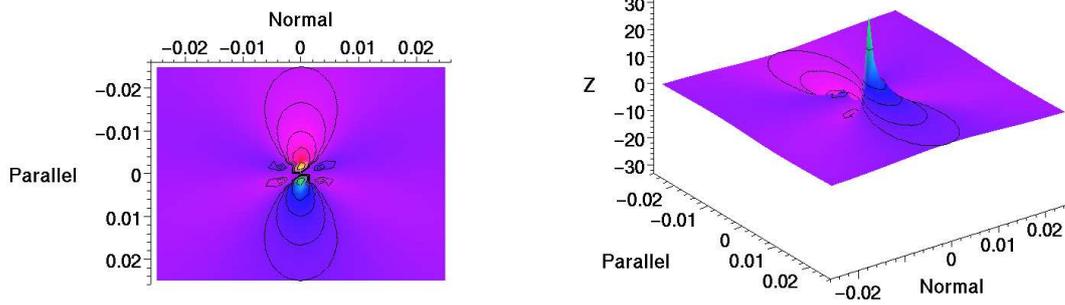
Die Linien konstanter Spannung des σ_{xx} - und des σ_{xy} -Spannungsfelds werden in Abbildungen 4.10 und 4.11 veranschaulicht.

4.2.4 Superposition von Spannungsfeldern

Die aufgrund dieser Spannungsfelder wirkenden Kräfte zwischen Versetzungen heißen nach [Pea50] *Peach-Koehler-Kräfte*. Sie berechnen sich als Kraft pro Längeneinheit zu

$$\vec{F} = (\vec{b} \cdot \sigma_{ik}) \times \vec{\xi} \quad (4.28)$$

und sind unabhängig von der jeweiligen Kristallstruktur und der Quellen der Spannungsfelder. Da sich zudem die Spannungsfelder verschiedener Versetzungen gegenseitig beeinflussen, gilt es

Abbildung 4.11: σ_{xy} -Spannungsfeld einer Stufenversetzung.

zur Berechnung der resultierenden Kraft, die auf eine bestimmte Referenzversetzung wirkt, alle Kraftfelder der umliegenden Versetzungen zu berücksichtigen. Es erfolgt also ein Aufsummieren der Kräfte zwischen der Referenzversetzung und jeweils allen anderen beteiligten Versetzungen, wie Abbildung 4.12 zeigt.

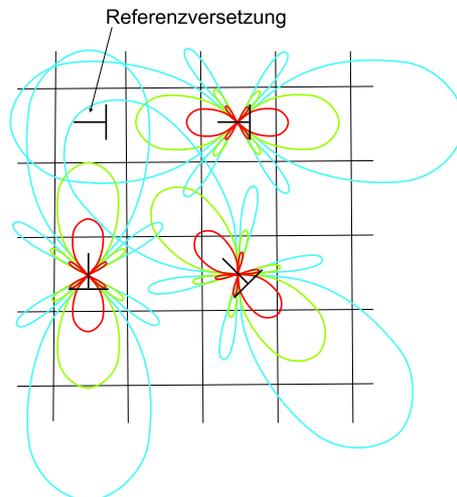


Abbildung 4.12: Superposition der Spannungsfelder.

4.2.5 Versetzungsbewegungen

Abgleitbewegungen in einem perfekten, d.h. fehlerfreien Kristallgitter erfolgen durch die Translationsbewegung einer Atomebene gegenüber der Nachbarebene. Die hierzu benötigte Scherspannung lässt sich auf sinnvolle Art abschätzen. Die erste Berechnung dieser Art geht zurück auf [Fre26]. Unterliegen zwei Atomebenen gemäß Abbildung 4.13 einer homogenen Scherspannung, welche parallel zur Abgleitrichtung wirkt, so besteht in erster Näherung ein sinusförmiger Zusammenhang zwischen Schubspannung und Verschiebungslänge, welcher für kleine Verschiebungen vereinfacht werden kann zu

$$\tau = \tau_m \sin \frac{2\pi x}{b} \approx \tau_m \frac{2\pi x}{b}. \quad (4.29)$$

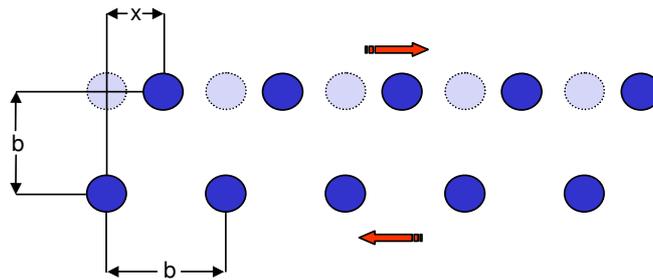


Abbildung 4.13: Verschiebung zweier Atomebenen gegeneinander.

Da für kleine Verschiebungen zudem noch das Hookesche Gesetz

$$\tau = G\gamma = \frac{Gx}{b} \quad (4.30)$$

gilt, ergibt sich für die Maximalspannung, bei der ein Abgleiten erfolgt,

$$\tau_m = G\gamma = \frac{G}{2\pi}. \quad (4.31)$$

Der Schubmodul G von Metallen liegt im Bereich zwischen 20 und 150 GPa, er beträgt bei Aluminium ungefähr 26 GPa, so dass die theoretische Schubspannung τ gemäß Gleichung (4.31) ungefähr bei 4 GPa liegt. Die tatsächlich gemessenen Werte liegen jedoch ein Vielfaches darunter, so dass im Kristall ein anderer Mechanismus vorherrschen muss.

Liegt kein fehlerfreier Kristall vor, sondern existieren Versetzungen, auf die eine Schubspannung wirkt, so erfolgt ebenfalls ein Abgleiten der Kristallbereiche gegeneinander. Abbildung 4.14 zeigt den schematischen Ablauf einer Bewegung einer Stufenversetzung durch den Kristall. Erfolgt die Bewegung entlang einer Vorzugsrichtung, die durch das jeweilige Kristallgitter bestimmt ist, so spricht man vom *Abgleiten* einer Versetzung.

Die Spannung, die nötig ist, um eine Versetzung zum Gleiten zu bringen, wird *Peierls-Spannung* genannt. Sie berechnet sich nach [Cot67] als

$$\tau_m = \frac{2G}{K} e^{-\frac{2\pi}{K}}, \quad (4.32)$$

woraus sich für Aluminium Werte von ca. 5,8 MPa ergeben. K ist hierbei eine Konstante, die zwischen $(1 - \nu)$ für Stufenversetzungen und 1 für Schraubenversetzungen liegt. Die erforderliche Schubspannung beträgt demnach nur ein Bruchteil der Spannung, die für das starre Abgleiten der beiden Kristallhälften erforderlich wäre. Dies liegt daran, dass nur jeweils eine atomare Bindung überwunden werden muss, wogegen beim starren Abgleiten immer gleichzeitig die Bindungen aller beteiligten Atome unterbrochen werden müssen. Die für einen Abgleitvorgang benötigte Aktivierungsenergie U_0 pro Linienelement d berechnet sich allgemein nach

$$\frac{U_0}{d} = \frac{Gb^2}{2\pi K} e^{-\frac{2\pi}{K}}. \quad (4.33)$$

Erfolgt die Bewegung nicht entlang der Vorzugsrichtung, sondern senkrecht zu ihr, so spricht man vom *Klettern* einer Versetzung. Da bei Schraubenversetzungen Burgers- und Linienvektor immer

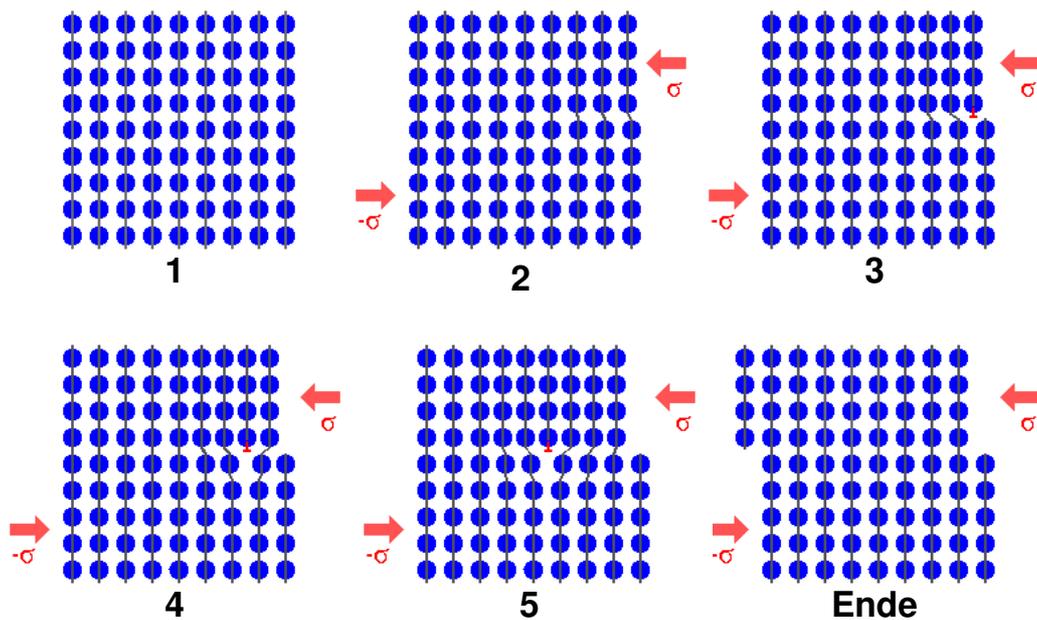


Abbildung 4.14: Schematischer Bewegungsablauf des Abgleitens einer Stufenversetzung.

parallel zueinander liegen, und sie somit immer gleiten, ist das Klettern Stufenversetzungen vorbehalten. Klettervorgänge werden hervorgerufen durch Generierung einer Leerstelle oder durch Anlagern eines Gitteratoms, welches wiederum meist auf Diffusionsvorgängen im Werkstoff basiert. Die erforderliche Energie für Klettervorgänge liegt um ein Vielfaches über der Aktivierungsenergie von Gleitvorgängen, sie setzt sich aus den erforderlichen Energien für Leerstellenerzeugung oder -bewegung sowie Selbstdiffusion zusammen [Die86] und tritt erst bei höheren Temperaturen deutlich in Erscheinung. Durch diesen Prozess kann sich eine Stufenversetzung in beiden Richtungen senkrecht zu ihrer Vorzugsrichtung bewegen, was insbesondere dann wichtig wird, wenn die Versetzungsbewegung in Gleitrichtung durch Hindernisse, wie z.B. Ausscheidungen (Kapitel 4.3.2), blockiert wird. In diesem Fall würde eine Versetzung aufgrund der durch äußere Spannung zugeführten Energie so lange klettern, bis sie sich neben dem Hindernis befindet und weitergleiten kann. Gleitbewegungen werden als *konservative* Bewegungen bezeichnet, da das Kristallvolumen bei diesem Vorgang konstant bleibt. Das Versetzungsklettern zählt jedoch zu den *nichtkonservativen* Bewegungen, da die hiermit verbundene Leerstellenerzeugung bzw. -vernichtung mit einer Änderung des Kristallvolumens verbunden ist.

Bei Schraubenversetzungen existiert ein Mechanismus, der *Quergleiten* genannt wird. Schraubenversetzungen können die Gleitebene wechseln, so dass hierdurch Hindernisse umgangen werden können. Abbildung 4.16 nach [Hul84] zeigt am Beispiel eines kubisch-flächenzentrierten Kristalls den Quergleitprozess eines sogenannten *Versetzungsringes*, einer geschlossenen Versetzung, die an zwei gegenüberliegenden Punkten (y, w) Stufen-, an zwei senkrecht dazu gegenüberliegenden Punkten (x, z) Schraubencharakter besitzt. Die Spannung, die für die Expansion der Versetzungsschleife verantwortlich ist, zieht den Schraubenanteil der Versetzungslinie auf die schneidende $(1\bar{1}1)$ -Ebene, wie Abbildung 4.16 (b) zeigt. In 4.16 (c) hat eine Ausdehnung der Versetzung auf die zweite Ebene stattgefunden, während in 4.16 (d) ein zweites Quergleiten stattgefunden hat, so dass die Ver-

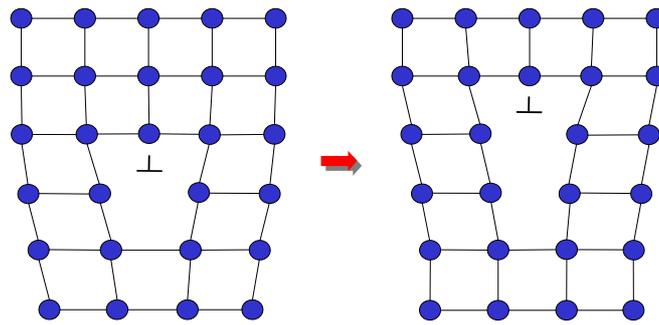


Abbildung 4.15: Klettern einer Stufenversetzung durch Generierung einer Leerstelle, das überzählige Atom wandert dabei zu einer anderen Leerstelle im Kristall.

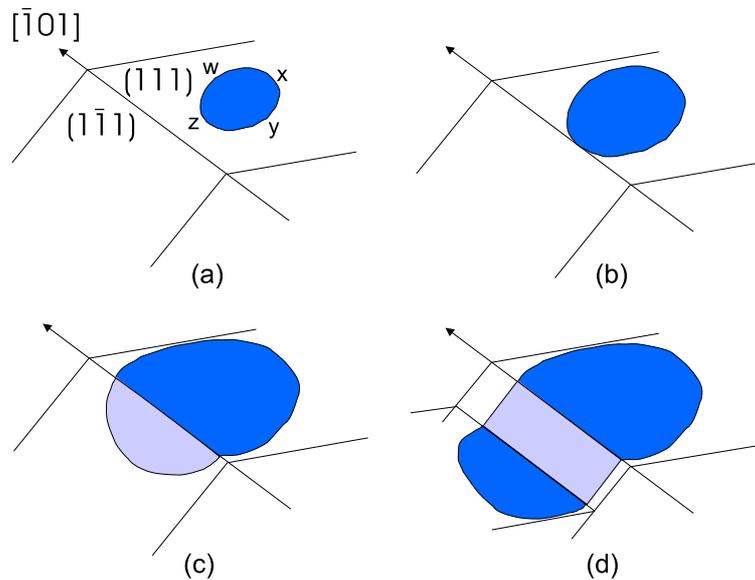


Abbildung 4.16: Quergleiten bei einer Schraubenversetzung.

setzungslinie auf der ursprünglichen (111)-Ebene weiterlaufen kann. In kubisch-raumzentrierten Kristallen sind die Gleitebenen weniger klar definiert, so dass Schraubenversetzungen häufiger von einer Ebene in eine andere wechseln und schließlich beim Austreten aus dem Kristall wellenförmige Gleitlinien an polierten Oberflächen hinterlassen.

4.2.6 Interaktion und Multiplikation von Versetzungen

Kommen sich Versetzungen nah, so kommt es durch die asymmetrische Form der sie umgebenden Kraftfelder zu Anziehungs- und Abstoßungseffekten. Für den Spezialfall zweier paralleler Stufenversetzungen mit gleichem Burgersvektor berechnen sich die Kräfte parallel (F_x) und senkrecht zur Gleitrichtung (F_y) zu

$$F_x = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad F_y = -\frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}. \quad (4.34)$$

Da sich Versetzungen durch Gleiten nur in der Ebene bewegen können, die durch Versetzungslinie und Burgersvektor festgelegt wird, bestimmt die Kraftkomponente F_x die Anordnung der beiden Versetzungen zueinander. In Abbildung 4.17 ist F_x gegenüber x aufgetragen. Für Versetzungen mit gleichgerichtetem Burgersvektor ist F_x negativ (anziehend) für $x < y$ und positiv (abstoßend) für $x > y$, bei Versetzungen mit entgegengesetzten Burgersvektoren genau umgekehrt. Gleichgewichtspositionen, an denen die wirkende Kraft Null ist, ergeben sich also für $x = 0$, $x = \pm y$, und $x = \pm\infty$. Hieraus folgt, dass sich Stufenversetzungen gleichen Vorzeichens vertikal untereinander anordnen (Abbildung 4.18(a)). Stufenversetzungen gegensätzlichen Vorzeichens, die sich auf unterschiedlichen Gleitebenen befinden, bilden relativ stabile *Dipole*, wie in Abbildungen 4.18(b) und 4.19 dargestellt.

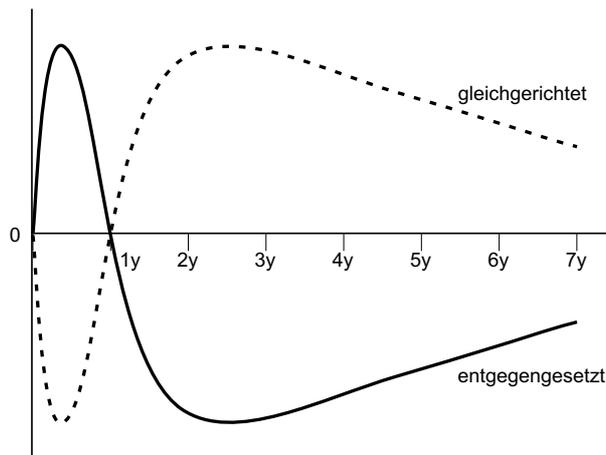


Abbildung 4.17: Kraft zwischen zwei Stufenversetzungen mit parallelen Burgersvektoren gemäß Gleichung (4.34).

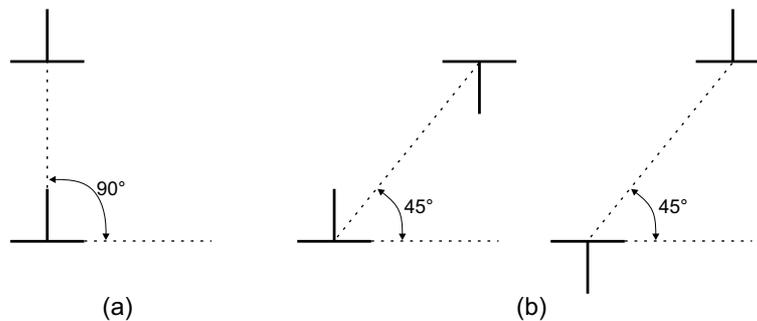


Abbildung 4.18: Gleichgewichtspositionen zweier Stufenversetzungen.

Stufenversetzungen gegensätzlichen Vorzeichens auf der gleichen Gleitebene können beim Zusammentreffen rekombinieren. Dieser Vorgang wird *Annihilation* genannt und hinterlässt einen fehlerfreien Kristall, wie in Abbildung 4.20 dargestellt. Nach [Ess74] bestimmt sich der kleinste mögliche Abstand zweier entgegengesetzter Versetzungen zu

$$a_m = \frac{Gb^4}{2\pi KU_f \sin \theta}$$

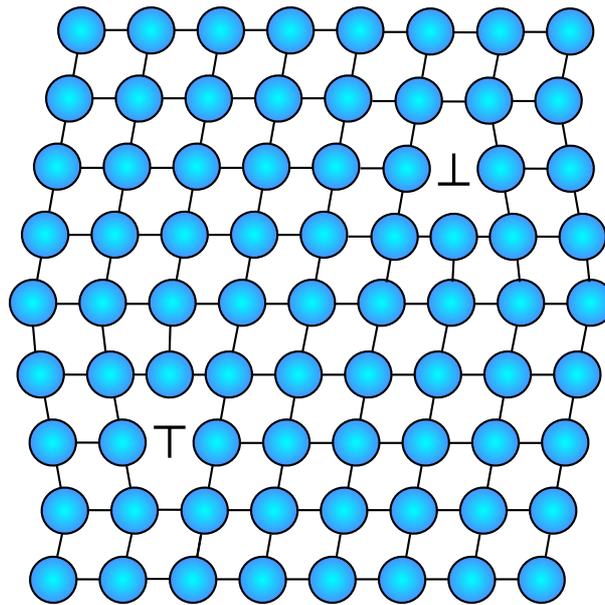


Abbildung 4.19: Dipolanordnung zweier Stufenversetzungen.

Durch a_m wird gleichzeitig eine maximal mögliche Versetzungsdichte festgelegt.

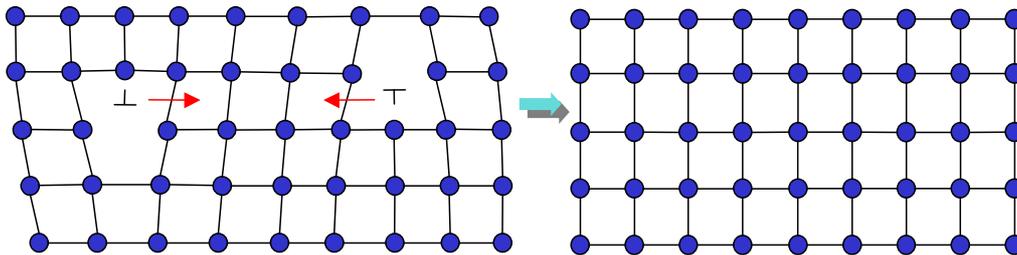


Abbildung 4.20: Annihilation zweier Stufenversetzungen

Treffen hingegen zwei Versetzungen unterschiedlicher Richtung und Gleitebenen aufeinander, so existieren verschiedene Reaktionsmöglichkeiten. Bei geeigneter Orientierung der Burgersvektoren kann bei der Kombination der beteiligten Versetzungen eine neue Versetzung entstehen, deren Burgersvektor ebenfalls in einer der möglichen Gleitebenen liegt, so dass hierbei eine neue gleitfähige Versetzung entstanden ist.

Bei bestimmten Anordnungen ist das Resultat jedoch eine nicht-gleitfähige Versetzung. Ein Beispiel für eine solche Reaktion in kubisch-flächenzentrierten Kristallen, wie in Abbildung 4.21 dargestellt, wurde zuerst von Lomer [Lom51] und Cottrell [Cot52] entdeckt, weshalb diese Versetzungen auch *Lomer-Cottrell-Versetzungen* genannt werden.

Um die großen plastischen Dehnungen von metallischen Werkstoffen zu gewährleisten, muss es eine wiederkehrende Multiplikation von Versetzungen geben. Diese Theorie wird durch Experimente belegt. Unterwirft man einen metallischen Werkstoff, der nach einer Wärmevorbehandlung nur wenig

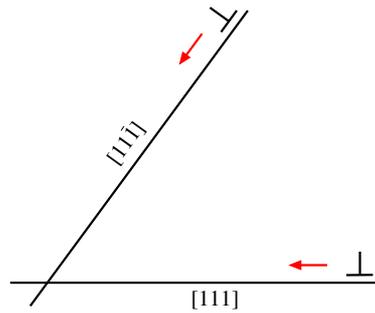


Abbildung 4.21: Entstehung einer Lomer-Cottrell-Versetzung.

Versetzungen enthält, einer großen plastischen Dehnung, so erhöht sich die Anzahl der im Material enthaltenen Versetzungen signifikant. Bei unverändert geringer Ausgangszahl von Versetzungen wäre die erzielte Dehnung nicht möglich gewesen. Statt dessen sind im Verlauf des Versuchs zahlreiche neue Versetzungen entstanden, wie mikroskopische Untersuchungen zeigen.

In Frage kommen für diese Versetzungsmultiplikation mehrere Mechanismen, von denen die *Frank-Read-Quelle* die größte Bedeutung besitzt. Abbildung 4.22 zeigt das Funktionsprinzip. Die Versetzungslinie DD' der Länge L wird an beiden Enden durch ein Hindernis festgehalten (a). Diese Hindernisse können beispielsweise schneidende Versetzungen oder Ausscheidungen sein. Die Versetzungslinie baucht sich unter dem Einfluss einer Spannung zunächst halbkreisförmig aus, falls diese einen kritischen Wert

$$\tau_k = \frac{Gb}{L}$$

überschreitet (b). Anschließend erfolgt die Ausdehnung wie in (c) dargestellt. Dieser Vorgang dauert solange an, bis sich die entgegengesetzten Versetzungssegmente m und n aufheben (d). Dadurch entsteht ein kompletter Versetzungsring, der sich weiter von der Quelle entfernen kann (e). Die Versetzungslinie DD' kann schließlich wieder als Quelle weiterer Versetzungen dienen.

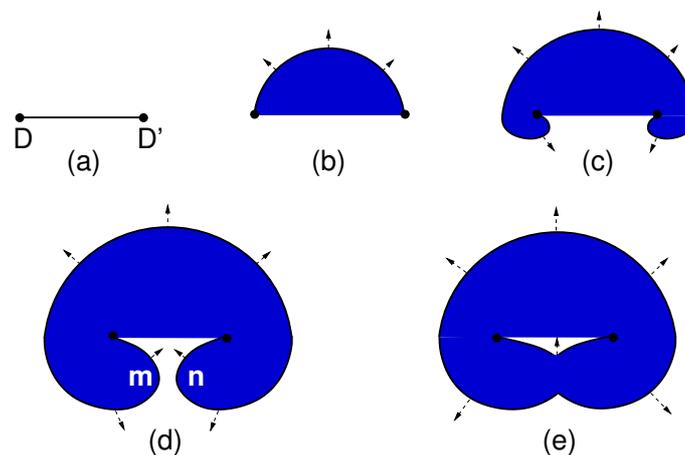


Abbildung 4.22: Prinzip des Frank-Read-Mechanismus zur Versetzungsmultiplikation.

Eine andere Art von Versetzungsquelle kann durch Mehrfach-Quergleitung erfolgen. Hierbei verhalten sich die beiden parallelen Versetzungssegmente bei einem zweifachen Quergleitvorgang, wie

in Abbildung 4.16 (d) beschrieben, wie zwei Frank-Read-Quellen, da die vier Eckpunkte relativ unbeweglich sind.

Ein Mechanismus, der auf dem Klettern von Stufenversetzungen basiert, wird *Bardeen-Herring-Quelle* genannt. Die Versetzungslinie DD' aus Abbildung 4.22 ist hierbei eine Stufenversetzung mit einer eingefügten Halbebene überhalb von DD' . Eine hohe Konzentration von Leerstellen ermöglicht es der Versetzungslinie zu klettern, die hierfür benötigte Kraft berechnet sich nach

$$F = \frac{bkT}{V_a} \ln(c/c_0). \quad (4.35)$$

Hierbei bezeichnet T die Temperatur, V_a das Volumen eines Atoms und c/c_0 das Verhältnis von tatsächlicher zu Gleichgewichts-Leerstellendichte. Zusätzlich zur Frank-Read-Quelle müssen die Punkte D und D' an Versetzungen mit Schraubencharakter enden, sonst würde ein Generierungszyklus keine neue Versetzungslinie DD' hinterlassen, die als neue Quelle dienen kann.

In realen polykristallinen Werkstoffen existiert eine weiter wichtige Versetzungsquelle, die besonders während plastischen Verformungsvorgängen auftritt. Versetzungen werden in diesen Fällen von Korngrenzen (Kapitel 4.3.1) emittiert. Versetzungen, die Kleinwinkelkorngrenzen wie in Abbildung 4.23 bilden, können als Frank-Read-Quellen fungieren, oder an Korngrenzen aufgestaute Versetzungen können bei relativ geringen Spannungen Versetzungsquellen in der Korngrenze oder im Nachbarkorn induzieren.

4.3 Höherdimensionale Defekte

In Realkristallen sind neben den eindimensionalen Versetzungen höherdimensionale Gitterfehler von Bedeutung. Man unterscheidet hierbei die zu den zweidimensionalen Störungen zählenden *Korngrenzen* und die als dreidimensionale Fehler geltenden *Ausscheidungen*, *Einschlüsse*, *Mikrorisse* und *Poren*.

4.3.1 Korngrenzen

Die meisten Realkristalle sind polykristallin aufgebaut. Die einzelnen Kristallite oder Körner entstehen bei der Erstarrung des schmelzflüssigen Werkstoffs durch lokale Störungen des thermodynamischen Gleichgewichts. Hierbei bilden sich an sogenannten Kristallisationskeimen kristalline Bereiche, die bei fortschreitender Erstarrung wachsen, bis der gesamte Werkstoff erstarrt ist. Die Orientierung der Körner ist regellos. Je nach Lage der Drehachse unterscheidet man zwei Grenzfälle von Korngrenzen. Liegt die Drehachse in der Korngrenzenfläche, so spricht man von *Kippgrenzen*, liegt sie senkrecht dazu, so bezeichnet man sie als *Drehgrenze*. Weiterhin wird hinsichtlich des Orientierungsunterschieds differenziert. Abbildung 4.23 stellt auf der linken Seite eine Kleinwinkelkorngrenze dar, welche einen Orientierungsunterschied von ca. 5° aufweist. Kleinwinkelkorngrenzen werden im Fall einer Kippgrenze von übereinander liegenden Stufenversetzungen gebildet, es kommen noch Schraubenversetzungen hinzu, falls zusätzlich noch ein Drehgrenzenanteil vorhanden ist. Im rechten Bildteil ist eine (Großwinkel-)Korngrenze dargestellt, welche einen Orientierungsunterschied von ungefähr 15° aufweist. Da sich diese Verkipfung, bzw. Verdrehung auch auf die Gleitrichtungen auswirkt, bilden (Großwinkel-)Korngrenzen eine unüberwindbare Barriere für Versetzungsbewegungen.

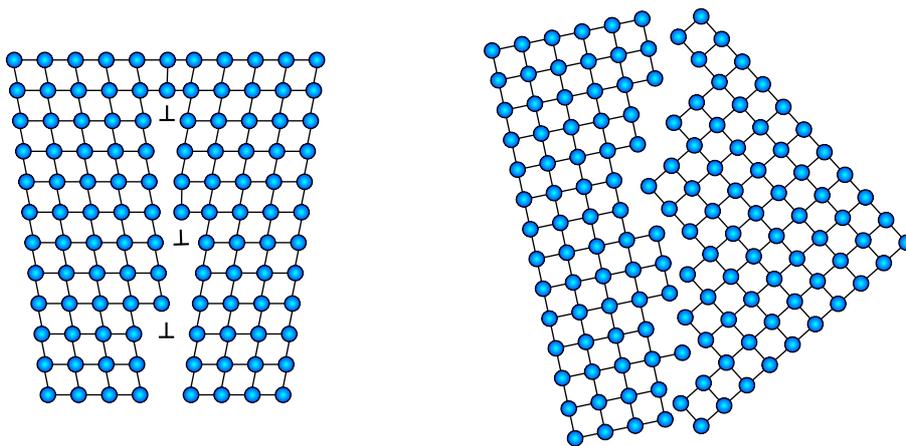


Abbildung 4.23: Kleinwinkel- und (Großwinkel-)Korngrenze.

In einem feinkörnigen Gefüge können Versetzungen nur eine geringe mittlere freie Weglänge zurücklegen, bevor sie an eine Korngrenze stoßen. Dagegen können sich Versetzungen in einem grobkörnigen Gefüge über einen weiten Bereich aufstauen. Durch Kombination ihrer Spannungsfelder kann ein Abgleiten von Versetzungen im Nachbarkorn oder die Entstehung einer Versetzungsquelle im Nachbarkorn induziert werden.

Insgesamt führt die Kornfeinung zu einem Anstieg der Festigkeit, der nach der Hall-Petch-Beziehung proportional der reziproken Wurzel des mittleren Korndurchmessers d ist.

4.3.2 Räumliche Fehler

Zu den dreidimensionalen Gitterbaufehlern zählen alle absichtlichen oder unbeabsichtigten räumlichen Störungen (Abbildung 4.24). Zu letzterem zählen Risse, Poren und Einschlüsse, die z.B. beim Gießprozess entstehen können. Einschlüsse sind vergleichbar mit einem Sandkorn. Als Dispersion bezeichnet man die beabsichtigte feine Verteilung kleiner Einschlüsse. Ebenfalls zu den beabsichtigten Gitterbaufehlern zählen Ausscheidungen. Diese sind Anteile zweiter Phasen, welche sich beim Erstarren bilden. Hierbei scheiden sich eine oder mehrere Phasen aus Mischkristallen aus, wenn mit

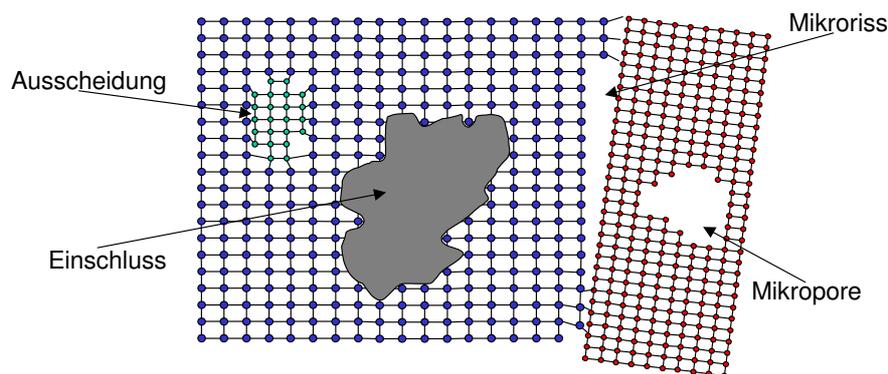


Abbildung 4.24: Räumliche Gitterbaufehler

abnehmender Temperatur die Löslichkeit abnimmt. Die Zusammensetzung und Gitterstruktur der ausscheidenden Phasen weichen von der Ausgangsphase ab [Brg88].

Je nach „Passung“ der Atome in den beiden Phasen in der Grenzfläche unterscheidet man zwischen kohärenten und inkohärenten Grenzflächen. Offensichtlich ist eine solche Passung nur bei bestimmten Orientierungsbeziehungen der beiden Phasen zu erfüllen. Man spricht demnach von kohärenten, bzw. inkohärenten Ausscheidungen.

5 Simulationsmodelle für Vielteilchensysteme

Simulationsmethoden sind mittlerweile zu einem unersetzlichen Bestandteil wissenschaftlichen Arbeitens geworden. Die Ursachen hiervon sind vielschichtig. Mit rechnerbasierten Simulationsmethoden ist es zum Beispiel möglich Systeme zu untersuchen, die mit analytischen Methoden nicht behandelbar sind. Zudem können Computersimulationen die Lücke zwischen Theorie und Experiment schließen. Ein bestimmtes Verhalten eines Systems, das schwer im Experiment nachweisbar ist, kann hierdurch berechnet werden [Hee90].

Simulationsmethoden lassen sich hinsichtlich des verwendeten Grades an Determinismus, der ihnen zugrunde liegt, unterscheiden. So weisen *Monte-Carlo-Methoden* ein großes stochastisches Element auf, während *molekulardynamische* Methoden auf deterministischen Prinzipien basieren. *Zellulare Automaten* liegen in etwa dazwischen wie Abbildung 5.1 veranschaulicht. Im Folgenden sollen die drei Simulationsverfahren genauer erläutert, und anschließend die Verwendung einer bestimmten Methode begründet werden, die hinsichtlich des Determinismus zwischen Monte-Carlo-Methode und Zellularautomaten angesiedelt ist.

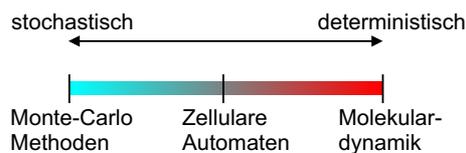


Abbildung 5.1: Determinismus verschiedener Simulationsverfahren nach [Hai92].

5.1 Monte-Carlo-Methode

Im Gegensatz zu einer analytischen Lösung eines Problems beispielsweise in der Mechanik, bei der man die Bewegungsgleichungen von Teilchen lösen und die Impulse und Orte aller Teilchen als Funktion der Zeit ausgeben kann, wird bei der Monte-Carlo-Methode die Lösung durch Mittelung über eine Stichprobe möglicher Punkte des *Phasenraums* bestimmt. Der Phasenraum ist hierbei ein Raum, der genügend Koordinaten hat, um das System vollständig zu beschreiben. Nach einer zufälligen Verteilung der Punkte im Phasenraum als Ausgangskonfiguration erfolgen Bewegungen durch sogenannte *Markov-Prozesse*. Der Ort eines Teilchens im Phasenraum ist nur abhängig von seinem Ort einen Zeitschritt zuvor. In einem zweidimensionalen diskreten Phasenraum beispielsweise kann sich ein Teilchen um einen Schritt in seiner Nachbarschaft bewegen, der neue Ort ist demnach nur von der vorigen Position abhängig. Dieser statistische Zusammenhang zwischen dem Eingabe- und dem Ausgabewert, bei dem sich jede neue Position zufällig in der Nachbarschaft der alten Position befindet, wird *random walk* genannt. Die physikalische Bedeutung der Punkte im Phasenraum entspricht bestimmten Zuständen des zugrunde liegenden Systems. Eine Aussage hierüber kann mit Hilfe der *Boltzmann-Verteilung* getroffen werden. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich

das System im Zustand i mit Energie U_i befindet, ist dabei

$$p_i = \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{U_i}{k_b T}}. \quad (5.1)$$

Die Größe k_b ist die Boltzmannkonstante, T ist die Temperatur des Systems und $Z(T)$ ist die Zustandssumme, die die Anzahl aller möglichen Zustände des Systems bei der Temperatur T angibt,

$$Z(T) = \sum_i e^{-\frac{U_i}{k_b T}}. \quad (5.2)$$

Im Anwendungsfall ist der Zustandsraum meist die Summe der möglichen Zustände von Zellen eines zwei- oder dreidimensionalen Gitters. Die Abfolge der Markov-Prozesse einer Monte-Carlo-Simulation heißt *Markov-Kette* [Tie94], sie konvergiert für große Längen gegen einen Gleichgewichtswert [Hbl95], der gleich der analytischen Lösung ist. Liegen Systeme vor, die aus mehr als nur einem Element bestehen, so werden alle erfolgten und nicht-erfolgten Zustandsänderungen zu einem *Monte-Carlo-Schritt* zusammengefasst, welcher dann in die Markov-Kette eingetragen wird. Aufgrund des „Boltzmann-Faktors“ $e^{-\frac{U_i}{k_b T}}$ haben manche Konfigurationen einen großen Anteil an der Näherung, andere praktisch keinen. Abhilfe, also eine Möglichkeit sich der analytischen Lösung mit möglichst wenigen Schritten zu nähern, bieten sogenannte *importance sampling*-Verfahren. Hierbei wird durch speziell gewichtete Zufallsverteilungen erzielt, dass in erster Linie Konfigurationen gewählt werden, die einen großen Beitrag zur Approximation liefern.

Ein wichtiges Beispiel dieser Verfahren ist der in [Met53] beschriebene *Metropolis-Algorithmus*. Hierbei wird die Übergangswahrscheinlichkeit eines Markov-Prozesses aus der Energieänderung eines Systems zwischen zwei MC-Schritten berechnet. Es wird von einem zufälligen Initialzustand ausgegangen, welcher für jedes Element wiederum ebenfalls zufällig innerhalb bestimmter Grenzen variiert wird. Ein Beispiel hierfür sind die Positionen von Atomen bei einer Diffusionssimulation. Die neue Position x_{neu} wird gemäß

$$x_{neu} = x_{alt} + \delta x$$

bestimmt. Anschließend wird die Energiedifferenz ΔU zwischen altem und neuem Zustand berechnet. Bei Energiegewinn, d.h. $\Delta U \leq 0$, wird der neue Zustand immer, also mit Wahrscheinlichkeit 1, akzeptiert, sonst nur mit einer Wahrscheinlichkeit

$$p = e^{-\frac{\Delta U}{k_b T}}. \quad (5.3)$$

Je mehr Energie notwendig ist, um das System in einen neuen Zustand zu überführen, desto unwahrscheinlicher ist also dieses Ereignis. Jeder neue Zustand wird wiederum über den Monte-Carlo-Schritt in die Markov-Kette eingetragen, bei einem verworfenen Ereignis wird der Ausgangszustand wiederhergestellt. Monte-Carlo-Methoden mit weiter verbesserten Konvergenzeigenschaften sind in [Has70] allgemeingültig und in [Pan78] für den Spezialfall einer Molekülsimulation beschrieben.

5.2 Prinzip der zellulären Automaten

Zelluläre Automaten sind ein Konzept aus dem Bereich der Computerwissenschaften, welches vor ungefähr 60 Jahren zunächst nur theoretisch entwickelt wurde. VON NEUMANN beschrieb in einer Reihe von Veröffentlichungen [Neu58] bis [Neu66b] die grundlegenden Konzepte einer mathematischen Theorie, die das Verhalten natürlicher Systeme abbildet. Die Anwendung dieses Konzepts

wurde jedoch erst möglich, nachdem ULAM [Ula50] vorschlug, eine regelmäßige Zellstruktur als Grundlage zu verwenden. Zellularautomaten werden nach [Wol86] durch folgende Eigenschaften charakterisiert:

Diskrete Raumaufteilung: Zelluläre Automaten bestehen aus einer regelmäßigen Anordnung von diskreten Zellen. Am häufigsten werden zweidimensionale Automaten verwendet, welche eine rechtwinklige Gitterstruktur aufweisen. Es existieren jedoch auch eindimensionale, ringförmig aufgebaute, oder dreidimensionale Automaten, bei denen die Zellen beispielsweise zu einem Quader zusammengefügt sind. Höherdimensionale Automaten werden aufgrund ihrer Komplexität nur selten verwendet.

Diskrete Zeitaufteilung: Die Entwicklung erfolgt in diskreten Zeitschritten. Der Wert jeder Zelle wird periodisch aufgrund bestimmter Entwicklungsregeln neu berechnet.

Diskrete Zustände: Jede Zelle kann nur eine endliche Anzahl möglicher Zustände annehmen. Es existieren jedoch mindestens zwei Zustände, wodurch einfache ja/nein-Entscheidungen ermöglicht werden.

Homogenität: Alle Zellen sind gleich.

Synchrone Operation: Alle Zellen werden gleichzeitig neu berechnet.

Determinismus: Jede Zelle entwickelt sich anhand der gleichen deterministischen Regeln.

Lokalität: Der Wert jeder Zelle bestimmt sich aus endlich vielen vorherigen Werten einer begrenzten, sie umgebenden Nachbarschaft von Zellen.

Das Langzeitverhalten, welches bei Monte-Carlo-Verfahren immer asymptotisch gegen einen Gleichgewichtswert strebt, kann bei Zellularautomaten nach [Pac85] in vier Klassen eingeteilt werden:

1. Homogener Endzustand,
2. Stationärer oder periodischer Endzustand,
3. Chaotische Muster,
4. Komplexe räumliche und zeitliche Strukturen.

Das bekannteste Beispiel für die Anwendung zellulärer Automaten ist das von CONWAY entwickelte zweidimensionale Modell des *Game of Life* [Con85], in dem jede Zelle genau zwei Zustände „tot“ oder „lebendig“ annehmen kann. Ist eine lebendige Zelle von zwei oder drei lebendigen Zellen umgeben, so bleibt sie lebendig, andernfalls stirbt sie aufgrund von Unter- bzw. Überbevölkerung. Eine tote Zelle kann zum Leben erwachen, falls sie von genau drei lebendigen Zellen umgeben ist. Eine Vielzahl möglicher Muster selbst bei diesen einfachen Entwicklungsregeln ist das Ergebnis dieses Zellularautomatenmodells.

5.3 Molekulardynamik-Modelle

Molekulardynamik-Modelle zählen zu den vollständig deterministischen Modellen. Wiederum ausgehend von einem Initialzustand werden Impuls und Position aller im System befindlichen Teilchen durch Lösung der Newtonschen Gleichung berechnet. Der zugrunde liegende physikalische Formalismus kann jedoch auf der Lagrangeschen oder Hamiltonschen Darstellungsweise basieren.

In der *NVE Molekulardynamik* [Hee90] bezeichnet N die Anzahl der betrachteten Teilchen und V das betrachtete Modellvolumen. E bezeichnet die Energie des Systems, die konstant sein muss, da das System abgeschlossen ist, d.h. isoliert von anderen betrachtet wird. Die zu lösende Newtonsche Gleichung eines Systems von Teilchen lautet

$$\frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2} = \frac{1}{m} \sum_{i < j} \vec{F}_{ij}. \quad (5.4)$$

Analytisch erfolgt die Lösung des Systems von Differentialgleichungen zweiter Ordnung durch zweimalige Integration von $t = 0$ bis t , um erst die Geschwindigkeiten und anschließend die Positionen zu erhalten. Zum Lösen sind nicht nur die Ausgangspositionen, sondern auch die Anfangsgeschwindigkeiten nötig. Die Ausgangspositionen liefern den Anteil der potentiellen Energie zur Gesamtenergie E , die Anfangsgeschwindigkeiten den Beitrag der kinetischen Energie. Ein möglicher Algorithmus sieht nach [Rah64], [Vrl67] folgendermaßen aus:

1. Festlegen der Teilchenpositionen r_i^0 und r_i^1 ,
2. Berechnung der Kräfte für Zeitschritt n ,
3. Berechnung der Positionen für Zeitschritt $n+1$,
4. Berechnung der Geschwindigkeiten für Zeitschritt n .

Ausgehend von den Positionen r_i^0 und r_i^1 werden alle folgenden Positionen aus den jeweils vorigen zwei Positionen rekursiv bestimmt. Dieses Verfahren wird Zweischritt-Verfahren genannt. Zu beachten ist hierbei, dass im $(n+1)$ -ten Zeitschritt die Geschwindigkeiten des vorherigen (n) -ten Zeitschritts berechnet werden. Deshalb befindet sich die kinetische Energie immer genau einen Schritt hinter der berechneten potentiellen Energie.

Ein Vorteil dieses Verfahrens ist die zeitliche Reversibilität. Wird das System also in umgekehrter zeitlicher Reihenfolge durchlaufen, so ergeben sich schließlich wieder die Anfangspositionen. Dies stimmt jedoch nur in der Theorie. Durch das Rechnen mit endlicher Genauigkeit ergeben sich zwangsläufig Rundungsfehler, die dazu führen, dass die Teilchen bei umgekehrter Berechnung von ihrer Bahn abweichen. Hinzu kommt eine Bahnabweichung von der theoretisch berechneten durch eine zeitliche Einteilung in einzelne Zeitschritte, die eine endliche Größe haben müssen und nicht infinitesimal klein werden können. Diese Einschränkung gilt jedoch in gleichem Maße für alle hier vorgestellten Verfahren.

5.4 Verwendete Simulationsmethode

Die in dieser Arbeit verwendete Simulationsmethode beruht auf dem Modell nach HOERNER [Hoe00], einem gemischten Modell, welches die Vorteile von Monte-Carlo-Methoden und zellulären Automaten vereinigt. Es basiert einerseits auf dem *Metropolis-Algorithmus*, also einem speziellen Monte-Carlo-Verfahren, das sich besonders gut zur Formulierung komplexer Vielteilchenprobleme eignet,

andererseits weist es Gemeinsamkeiten mit zellulären Automaten auf, die durch eine Diskretisierung des Raums den Berechnungsaufwand der kurzreichenden Wechselwirkung zwischen Versetzungen reduzieren, da sie innerhalb einer Zelle abläuft und nicht gesondert berechnet werden muss.

Die abgebildeten Systeme bestehen aus einer Menge von unendlich langen, parallelen, geraden gleichartigen Versetzungen (Stufen- oder Schrauben-). Für jede Versetzung ist die interne Spannung, welche sich durch Überlagerung der gegenseitigen Spannungsfelder mit anderen Versetzungen in einer gewissen Nachbarschaft ergibt, mit Hilfe der Peach-Koehler-Formel aus Gleichung (4.28) zu berechnen. Da die Anzahl der aufzusummierenden Wechselwirkungsterme aufgrund der hohen Zahl von betrachteten Versetzungen ebenfalls groß ist, kann zur Verringerung des Berechnungsaufwands ein Abschneideradius eingeführt werden, ab welchem Versetzungen keinen gegenseitigen Einfluss mehr ausüben. Modellrechnungen mit verschiedenen Reichweiten finden sich in Kapitel 7.2. Ein entscheidender Vorteil des verwendeten Verfahrens liegt in der Ortsauflösung, d.h. der Berücksichtigung der Positionen der beteiligten mikrostrukturellen Defekte. Im Gegensatz zu auf Versetzungsdichten basierenden Modellen, die nicht ortsaufgelöst arbeiten, ist so eine genauere Abbildung der Peach-Koehler-Kräfte möglich, die unterschiedliche lokale Versetzungsanordnungen und daraus resultierende veränderte Spannungsfelder trotz gleicher lokaler Versetzungsdichte berücksichtigt.

5.4.1 Rechentechnik

Die räumliche Diskretisierung erfolgt mittels eines zweidimensionalen Gitters, wobei jede Zelle genau einen Gitterbaufehler aufnehmen kann. Die Zellgröße errechnet sich aus dem minimalen Annihilationsabstand zweier Versetzungen, für den nach [Ess74]

$$a_m = \frac{Gb^4}{2\pi KU_f \sin \psi} \quad (5.5)$$

gilt. Hierbei bezeichnet G den Schubmodul, b den Betrag des Burgersvektors und K die Konstante aus Gleichung (4.32), die für Schraubenversetzungen bei 1 und für Stufenversetzungen bei $1 - \nu$ liegt. Weiterhin hängt der Annihilationsabstand von der Energie U_f , die zur Erzeugung einer Versetzung notwendig ist, und dem Winkel ψ zwischen \vec{b} und $\vec{\xi}$ ab. Schraubenversetzungen stellen einen Grenzfall dar, da Gleichung (5.5) nur für Versetzungen gilt, die keine reinen Schraubenversetzungen sind. Diese Gleichung ist weiterhin der Grund dafür, dass Stufen- und Schraubenversetzungen nur getrennt voneinander betrachtet werden können, da sonst verschiedene Zellgrößen für die unterschiedlichen Versetzungstypen erforderlich wären. Dies ist jedoch keine Beschränkung der Simulationsgültigkeit, da die Interaktionskräfte zwischen Schrauben- und Stufenversetzungen nach [Lan57] stets Null sind.

Eine Zelle kann die folgenden Zustände annehmen:

- Ausscheidung,
- Versetzung,
- Korngrenze.

Ausscheidungen und Korngrenzen stellen in dem zweidimensionalen Simulationsmodell flächen- bzw. linienförmige Hindernisse für die Bewegung von Versetzungen dar.

Der Ausgangszustand einer Simulation ist eine mit Hilfe eines Pseudo-Zufallszahlengenerators zufällig erzeugte Anfangsverteilung von Versetzungen im Gitter. Hierbei wird sowohl die Orientierung als auch die Position der Versetzungen durch den Zufallszahlengenerator bestimmt, wobei

bei der Orientierung eine Beschränkung auf bestimmte Gleitebenen erfolgen kann. Die Belegung der Zellen durch Korngrenzen erfolgt durch eine spezielle Eingabedatei auf vorgegebenen Positionen, welche realen Gefügestrukturen nachempfunden sind, die Belegung durch Ausscheidungen kann ebenso oder zufällig verteilt erfolgen und damit realen Anordnungen nachempfunden werden, oder einer dispersiven Verteilung entsprechen.

Interaktion von Versetzungen

Das Modell berechnet die langreichweitigen Peach-Koehler-Kräfte zwischen den einzelnen Versetzungen nach Gleichung (4.28). Die resultierende Peach-Koehler-Kraft \vec{F}_j^{sum} , die auf Versetzung j wirkt, ist die Summe der Kraftvektoren zwischen Versetzung j und allen anderen Versetzungen im Gitter, da Peach-Koehler-Kräfte nur mit $1/r$ abnehmen.

$$\vec{F}_j^{sum} = \sum_i \vec{b}_j \cdot \sigma_{ij} \times \vec{\xi}_j. \quad (5.6)$$

Die Versetzungsbewegungen folgen nicht analytischen Gesetzmäßigkeiten, sondern erfolgen auf Grundlage der dem Metropolis-Algorithmus inhärenten Wahrscheinlichkeitsverteilung aus Gleichung (5.3) und damit in Abhängigkeit von den resultierenden Kräften. Gleichung (5.3) wird in unserem Fall, also bei Versetzungsbewegungen zu

$$p = e^{-U_A/kT}. \quad (5.7)$$

U_A bezeichnet die für diesen Prozess notwendige Aktivierungsenergie, welche als ein zu überwindendes Potential gedeutet werden kann. Für einen Bewegungsvorgang einer Versetzung muss zunächst ein Grundpotential U_0 überwunden werden, welches auf die periodische Struktur des Kristallgitters zurückzuführen ist. U_0 wird *Peierls-Nabarro-Energie* genannt. Ein weiterer Term U_a hängt von dem lokalen Aktivierungsprozess ab. Unter dem Einfluss einer äußeren Kraft verringert sich U_a um die von ihr geleistete Arbeit $V\tau$. V ist das Aktivierungsvolumen des Prozesses, also das Produkt aus Betrag des Burgersvektors b , dem Hindernisdurchmesser d und der charakteristischen Versetzungslänge L . Zusammenfassend kann das Potential beschrieben werden als

$$U_A = U_0 + U_a - Lbd\tau. \quad (5.8)$$

Hierdurch ergibt sich mit den Peach-Koehler-Kräften aus Gleichung (4.28)

$$U_A = U_0 + U_a + V(\tau - d \cdot F_j^{sum}). \quad (5.9)$$

Zusammen mit Gleichung (5.3) und einer Konstanten C erhalten wir für die Übergangswahrscheinlichkeit einer Versetzungsbewegung:

$$p = C \cdot e^{-(U_0 + U_a + V(\tau - d \cdot F_j^{sum}))/kT}. \quad (5.10)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeiten für Versetzungsbewegungen werden jeweils parallel und senkrecht zu ihren Gleichrichtungen berechnet, da hierfür unterschiedliche Aktivierungsenergien erforderlich sind. Das Klettern von Versetzungen, das einer Bewegung senkrecht zur Gleichrichtung entspricht, ist ein höherenergetischer Vorgang, der aus diesem Grund unwahrscheinlicher ist als das Gleiten von Versetzungen entlang ihrer Gleitrichtung. Es werden hierbei stets Wahrscheinlichkeitswerte aus dem Intervall $[0, 1]$ angenommen. Sobald diese bekannt sind, wird gemäß der

Monte-Carlo-Methode für die beiden Richtungen je eine Zufallszahl aus dem Intervall $[0, 1]$ erzeugt und mit der jeweiligen Übergangswahrscheinlichkeit verglichen. Die Bewegung erfolgt, sobald die Zufallszahl kleiner als der Wahrscheinlichkeitswert ist. Bei Vorgängen mit großer Übergangswahrscheinlichkeit ist also fast das gesamte Intervall ein möglicher Bereich, in dem Zufallszahlen liegen dürfen, so dass eine Bewegung erfolgt.

Die kurzreichende Wechselwirkung von Versetzungen wird, bedingt durch die räumliche Diskretisierung, idealisiert betrachtet. Für den Fall, dass bei einer Versetzungsbewegung der neue Ort der Versetzung schon durch ein anderes Element belegt ist, muss eine realitätsnahe Interaktion erfolgen. Das Modell bietet unterschiedliche Behandlungsweisen für die verschiedenen Ereignisse:

Versetzung: Trifft eine Versetzung auf eine Zelle, die bereits durch eine andere Versetzung belegt ist, so addieren sich die beiden Burgersvektoren, die Versetzungsbewegung der zweiten Versetzung findet also statt. Die Zelle ist schließlich nur noch mit einer resultierenden Versetzung belegt. Treffen hierdurch zwei Versetzungen aufeinander, die den gleichen Burgersvektor jedoch mit entgegengesetzter Orientierung besitzen, so erfolgt eine Auslöschung oder Annihilation (Kapitel 4.2.6, Abbildung 4.20), die einen perfekten Kristall hinterlässt. In manchen Fällen ist die Richtung des Burgersvektors der resultierenden Versetzung nicht mehr Bestandteil der möglichen Gleitrichtungen, so dass eine nicht-gleitfähige Versetzung entstanden ist. Diese Art von Versetzung entspricht in kubisch-flächenzentrierten Gittern den Lomer-Cottrell-Versetzungen. Durch ihr Spannungsfeld beeinflusst sie jedoch weiterhin andere Versetzungen und kann zudem mit beweglichen Versetzungen interagieren.

Ausscheidung: Ausscheidungen oder Fremdatome sind Hindernisse, die die Bewegung von Versetzungen behindern. Zellen, die durch Ausscheidungen oder Fremdatome belegt sind, können nicht direkt mit Versetzungen interagieren, sondern verhindern stattdessen deren Fortbewegung. Im Modell sind Kraftfelder um derartige Hindernisse als Stufenfunktion implementiert, welche außerhalb der Zelle Null ist, und innerhalb einen unendlichen Wert besitzt. Auf Ausscheidungen oder Fremdatome auflaufende Versetzungen haben jedoch die Möglichkeit, diese Hindernisse über mehrere Simulationsschritte hinweg durch den zunächst weniger wahrscheinlichen Mechanismus des Versetzungskletterns zu umgehen. Dieser auch in der Realität auftretende Prozess lässt sich in den in dieser Arbeit durchgeführten Simulationsrechnungen nachweisen.

Korngrenze: Bei dem verwendeten zweidimensionalen Simulationsverfahren stellen Korngrenzen unüberwindbare, linienhafte Hindernisse für Versetzungsbewegungen dar. Im realen Gefüge kann durch die gegeneinander verschobenen Kristallgitter kein Durchlaufen von Versetzungen durch Korngrenzen erfolgen. Dieser Effekt wird wiederum durch obige Stufenfunktion als Kraftfeld um Korngrenzen erzielt. Die Möglichkeit des Umgehens durch Klettern ist bei diesen linienhaften Hindernissen jedoch nicht mehr gegeben.

Damit Versetzungen, die bereits ihre Position verändert haben, nicht mit Versetzungen interferieren, denen der Vergleich mit Zufallszahlen noch bevorsteht, werden erstere in ein zweites Simulationsgitter, das sogenannte *Shadow-Gitter* [Haf01] kopiert, welches nur zu dem Zweck existiert, die Position der Versetzungen nach dem Monte-Carlo-Schritt aufzunehmen. Sobald alle Versetzungen des primären Simulationsgitters bearbeitet worden sind, wird das Shadow-Gitter, welches die nun aktuellen Positionen aller Versetzungen enthält, wieder auf das primäre Gitter zurück kopiert.

Da die Größe des Gitters endlich sein muss, wird auf periodische Randbedingungen zurückgegriffen, um die scheinbare Gitterlänge und -breite zu erhöhen. Mathematisch betrachtet wird das quadratische Simulationsgitter also zu einem Torus. Bei der Berechnung der Kraftfelder werden also auch Versetzungen berücksichtigt, die eigentlich in einem anderen Teil des Gitters liegen. Bei der Bewegung von Versetzungen ist zudem eine Kontrolle erforderlich, ob es zu einem Verlassen der Zelle kommt, in diesem Fall wird die Versetzung an der gegenüber liegenden Seite des Gitters auf gleicher Höhe bzw. Breite wieder in die Simulation eingesetzt, so dass sich die Versetzungsdichte nicht aufgrund Verlassens des Simulationsgebiets verändert, sondern ausschließlich durch die bereits beschriebenen und nun folgenden Interaktionsmechanismen.

Quellen

Die Erzeugung neuer Versetzungen im Gitter durch Nachbildung von Quellen dient der Erhöhung des Realitätsgrads der Simulation. Analog zur Frank-Read-Quelle aus Kapitel 4.2.6 ist ein Mechanismus implementiert worden, der für die Generierung neuer Versetzungen verantwortlich ist, falls ein lokaler Spannungsschwellwert überschritten wird. Ausgangspunkte von Frank-Read-Quellen sind, durch das Schneiden mit anderen Versetzungen entstandene, immobile Versetzungen. Die entsprechende zweidimensionale Implementierung dieses Mechanismus geht also von Lomer-Cotrell-Versetzungen der Simulation aus, Versetzungen, die durch Addition zweier oder mehrerer Versetzungen entstanden sind und deren Burgersvektoren durch die Addition nicht mehr parallel zu den Gleitrichtungen des Systems liegen. Für alle Lomer-Cotrell-Versetzungen wird also ein Schwellwert τ_q berechnet, der durch die Spannungsfelder der Versetzungen in ihrer lokalen Umgebung bestimmt wird,

$$\tau_q = G \cdot b \cdot \sqrt{\rho_{lok}}. \quad (5.11)$$

ρ_{lok} ist die lokale Versetzungsdichte in einer bestimmten Umgebung. Wie in jedem Monte-Carlo-Schritt wird auch hier eine Zufallszahl erzeugt und mit dem Schwellwert verglichen. Bei Überschreitung wird eine neue Versetzung erzeugt. Diese soll jedoch nicht irgendwo zufällig im Gitter liegen, wie von einigen Autoren im Zusammenhang zur Aufrechterhaltung einer konstanten Versetzungsdichte vorgeschlagen wird [San98], sondern in der näheren Umgebung der immobilen Versetzung, welche auch zur Schwellwertbestimmung herangezogen wurde.

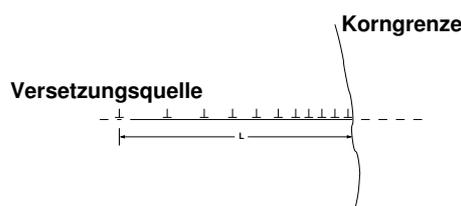


Abbildung 5.2: Aufstauen von Versetzungen an einer Korngrenze.

Die Erzeugung neuer Versetzungen muss zum Erliegen kommen, wenn diese nicht mehr abwandern können, sondern sich an anderen Hindernissen zu sogenannten *pile-ups* aufstauen [Die86]. Diese in Abbildung 5.2 exemplarisch dargestellten Aufstauungen bewirken, dass sich die Versetzungslinie der Frank-Read-Quelle nicht mehr ausbauchen kann, da die Gegenkräfte durch die aufgestauten Versetzungen zu gross werden. Das bedeutet, dass in der Simulation Maßnahmen getroffen werden

müssen, die die Generierung neuer Versetzungen im Verlauf der Simulation unter der Bedingung einschränken, dass bereits genügend viele Versetzungen dieser Quelle erzeugt worden sind. Als ein geeigneter Ansatz hierzu hat sich die Begrenzung der zur Erzeugung neuer Versetzungen erlaubten Wahrscheinlichkeitswerte erwiesen. Übersteigen diese einen bestimmten Wert, so kann die jeweilige Lomer-Cottrell-Versetzung nicht mehr als Frank-Read-Quelle fungieren. Erst wenn Versetzungen beispielsweise durch Klettern abgewandert oder durch Annihilationsvorgänge verschwunden sind, die durch die lokale Versetzungsdichte bestimmte Wahrscheinlichkeit aus Gleichung (5.11) also gesunken ist, kann sie wieder als Quelle neuer Versetzungen dienen.

Spannungsgesteuerte Simulation

Um den Einfluss von, auf die Simulationszelle wirkenden, externen Spannungen untersuchen zu können, kann auf das System eine zusätzliche äußere Spannung aufgebracht werden. Hierzu wird dem resultierenden Kraftvektor jeder Versetzung die vektoriell dargestellte, in eine Kraft umgerechnete externe Spannung hinzuaddiert [Bac02]. Das aufgebrachte Spannungsfeld kann entweder homogen sein, so dass allen Versetzungen der gleiche Kraftvektor hinzugefügt wird, oder inhomogen, wie es beispielsweise bei Mikro- oder Nanohärtemessungen vorliegt, so dass die externe Kraftkomponente in Abhängigkeit der Position der Versetzung in der Simulationszelle jedes Mal neu berechnet werden muss. Bei diesem Simulationstyp werden neben der sich herausbildenden Struktur der Versetzungen besonders deren Bewegungen untersucht und dokumentiert.

Dehnungsgesteuerte Simulation

Diese Art der Steuerung dient zur Bestimmung der mikrostrukturellen Entwicklung bei simulierten Zugversuchen. Diese sind dadurch gekennzeichnet, dass eine konstante Dehnrates in der untersuchten Probe vorgegeben ist, und die für diese Dehnung benötigte äußere Kraft bestimmt wird. Dieses Prinzip kann direkt auf das mikrostrukturelle Simulationsmodell übertragen werden. Eine vorgegebene konstante Dehnrates kann hierbei erzielt werden, indem eine bestimmte Anzahl von Versetzungsbewegungen in einer Richtung erfolgen muss. Das Simulationsmodell ist deshalb dahingehend modifiziert worden, dass die Versetzungsbewegungen in x -Richtung nach jedem Schritt überprüft werden. Ist die Anzahl, welche der vorgegebenen Dehnrates entspricht, innerhalb einer gewissen Toleranz erreicht worden, so werden die Bewegungen und die im Shadow-Gitter gespeicherten Positionen der Versetzungen übernommen, und es wird mit dem nächsten Schritt fortgefahren. Falls die vorgegebene Zahl von Versetzungsbewegungen nicht erreicht wurde, so muss derselbe Schritt mit einer erhöhten externen Spannung wiederholt werden. Hierzu wird die Position der Versetzungen vor dem Schritt, welche im eigentlichen Simulationsgitter gespeichert ist, wiederhergestellt. Gleiches gilt für den Fall, dass zu viele Versetzungsbewegungen unter einer bestimmten äußeren Spannung erfolgt sind, hier muss die äußere Spannung für den zu wiederholenden Schritt gesenkt werden. Die Schrittweite Δ_S der Spannungserhöhung, bzw. -abnahme berechnet sich nach

$$\Delta_S = \frac{(\gamma_0 - \gamma_a) \cdot d_0 \cdot d_a}{200}.$$

Hierbei bezeichnen γ_0 und γ_a die vorgegebene und tatsächliche Dehnrates, sowie d_0 und d_a die ursprüngliche und aktuelle Anzahl von Versetzungen im simulierten Bereich. Da die zugrunde liegende Monte-Carlo-Methode ein stochastisches Verfahren ist, kann kein absoluter Wert für die Anzahl

der erfolgten Versetzungsbewegungen gefordert werden. Bedingt durch die Generation von Zufallszahlen in jedem Schritt, kann es selbst bei identischer Ausgangskonfiguration und gleicher externer Spannung zu unterschiedlichen Bewegungen bei den sonst gleichen simulierten Monte-Carlo-Schritten kommen. Aus diesem Grund ist ein gewisser Toleranzbereich nötig, der diese Effekte berücksichtigt. Den in dieser Arbeit durchgeführten Simulationsrechnungen liegt ein Toleranzwert von 10% zugrunde, der sich bei den gegebenen anderen Parametern als geeignet erwiesen hat. Da sich neben der Richtung des zu einer Versetzung gehörenden Burgersvektors nach Interaktion mit anderen Versetzungen auch die Länge ändert, muss berücksichtigt werden, dass größere Versetzungen einen größeren Anteil an der plastischen Verformung während eines solchen nachgebildeten Zugversuchs besitzen als kleinere. Es wird also nicht nur die Anzahl aller Abgleitvorgänge in x -Richtung ermittelt, sondern jede Bewegung zählt entsprechend der Länge des Burgersvektors der zugehörigen Versetzung zur Gesamtanzahl aller Abgleitprozesse und damit zur Gesamt-Abgleitrate pro Simulationsschritt.

Im Gegensatz zu [Goe01] ist hier nicht ein integrativer Ansatz gewählt worden, der die Mikrostruktur nur als eine modellhafte Einheit mittels Parametern auffasst, sondern es werden anhand der konkret simulierten Gefügeentwicklung für die Makromechanik interessante Eigenschaften ermittelt.

Die Entwicklung dieses Simulationstyps erfolgte während eines Forschungsaufenthaltes am European Center for Parallelism of Barcelona (CEPBA) im Rahmen des Increase of the Human Potential (IHP) Programms der Europäischen Union.

5.4.2 Parallelisierung

Ein Grund, weshalb mikrostrukturelle Simulationsmethoden in der Industrie bisher nur wenig verbreitet sind, ist in der hohen benötigten Rechenleistung zu finden. Der für die zugrundeliegende Monte-Carlo-Methode notwendige hohe Komplexitätsgrad erfordert ein ebenso hohes Maß an Vergleichs- und Berechnungsoperationen. Der hierbei verwendete Berechnungsalgorithmus ist von der Ordnung $O(N^2)$, d.h. der Berechnungsaufwand steigt quadratisch mit der simulierten Teilchenanzahl an. Zur Verbesserung der Rechenzeiten eignet sich das folgende Lösungsverfahren.

Laufzeituntersuchungen des Simulationsprogramms haben gezeigt, dass ca. 3/4 der benötigten Rechenleistung für die Berechnung der resultierenden Kraftfelder verwendet werden. Bei einem gewöhnlichen Einprozessorrechner laufen diese einzelnen Berechnungsschritte sequentiell ab. Dieses Konzept wird in der Rechnerarchitektur nach FLYNN [Fly72], [Mal01] auch als SISD (Single Instruction - Single Data) bezeichnet. Die Optimierungsmöglichkeiten in diesem Bereich liegen darin, mehrere dieser Rechenoperationen gleichzeitig durchzuführen. Dieses Konzept findet sich in der Literatur als MIMD (Multiple Instruction - Multiple Data). Die verschiedenen hierzu benötigten Prozessoren müssen parallel unterschiedliche Befehle und unterschiedliche Daten bearbeiten. Der Aufbau der Hardware ist relativ einfach zu realisieren, der große Aufwand liegt jedoch auf der Softwareseite, und zwar darin, die Prozesse, also ganze Befehlsgruppen, auf die verschiedenen Prozessoren zu verteilen, die gemeinsamen Daten jedoch konsistent zu halten. Die Hardwareanordnung kann hierbei durch Multiprozessor-Cluster oder durch verteilte Systeme erreicht werden. Die beiden anderen denkbaren Architekturmodelle MISD (Multiple Instruction - Single Data) und SIMD (Single Instruction - Multiple Data) sind bei der vorliegenden Problemstellung nicht einsetzbar. Das erstere scheint generell nicht sinnvoll zu sein, da ein Datensatz gleichzeitig von mehreren Befehlen bearbeitet werden soll. Das zweite Modell ist als parallele Bearbeitung des gleichen Befehls auf

verschiedene Daten nur in speziellen Bereichen wie beispielsweise der Bildverarbeitung, wo man häufig eine bestimmte Operation für das gesamte Bild durchführen muss, einsetzbar.

Um im konkreten Fall der mikrostrukturellen Simulation das Gitter in verschiedene jeweils auf unterschiedlichen Prozessoren zu bearbeitende Bereiche aufzuteilen, muss der Informationsaustausch zwischen den einzelnen Bereichen gewährleistet werden, da die zu berechnenden Spannungsfelder über das gesamte Simulationsgitter hinweg reichen. Dieser Informationsaustausch wird mittels des standardisierten *Message Passing Interface (MPI)* erreicht [MPI94]. Hierzu wird das gesamte Simulationsgitter zunächst gleichmäßig auf die vorhandenen Prozessoren aufgeteilt, wobei deren Anzahl als Zweierpotenz darstellbar sein muss. In den Simulationsrechnungen dieser Arbeit wurde das Gebiet auf 4, 9 oder 16 Prozessoren aufgeteilt.

Jeder Prozessor benötigt für die an den Rändern seines Simulationsgebiets liegenden Versetzungen die Position von Versetzungen, die in Gebieten anderer Prozessoren liegen, um resultierende Spannungsfelder zu berechnen. Um jedes Teilgebiet wird also ein Überhang oder *Halo* erzeugt, in welchen Daten aus anderen Teilgebieten einfließen. Der Halo dient nur zur passiven Nutzung, indem die darin enthaltenen Daten nur ausgelesen und nicht für den nächsten Schritt berechnet werden. Die durch diese Maßnahmen erreichte Steigerung der Rechenleistung sorgt für Rechenzeiten von ca. 50 bis 200 h pro Simulationsrechnung, je nach Versetzungsdichte und Größe des Simulationsgebiets. Der universelle Charakter von MPI sorgt dafür, dass sowohl massiv-parallele Rechner wie die Hochschulinterne Sun E10000 des Regionalen Rechenzentrums für Niedersachsen (RRZN) als auch das interne Workstation-Netz des Instituts für Werkstoffkunde (IW) verwendet werden können. In [Smt01] finden sich Mechanismen zur Parallelisierung auf mehreren Ebenen. So werden Simulationsbereiche wie oben beschrieben mit MPI auf vorhandene Prozessoren verteilt, die einzelnen Berechnungsschleifen werden danach jedoch zusätzlich mittels des alternativen Parallelisierungsverfahrens OpenMP [Eig01] gleichmäßig von allen Prozessoren bearbeitet, wodurch eine ausgeglichene Lastverteilung gewährleistet wird. Für das in dieser Arbeit verwendete Modell sind Lastungleichheiten der Prozessoren zwar vorhanden, durch die anfängliche Zufallsverteilung jedoch nicht übermäßig. Potenzial für Verbesserungsmöglichkeiten aus der Kombination beider Parallelisierungsmethoden besteht jedoch.

Mit Hilfe der nichtkommerziellen Visualisierungssoftware *Paraver* [Cau01] ist es möglich, den Ablauf einer Simulationsrechnung graphisch darzustellen. Diese besteht aus Berechnungsphasen der Spannungsfelder und Kommunikationsphasen zwischen den Prozessoren. Abbildung 5.3 zeigt in einer Übersicht den Ablauf einer mit 656 Sekunden Rechenzeit sehr kurzen, einfachen Simulation über 50 Schritte auf vier Prozessoren (Threads). In blau dargestellt sind die Berechnungsphasen, rot sind Leerlaufphasen und gelb sind Kommunikationsaufrufe mittels MPI. Bereits in dieser Übersicht ist erkennbar, dass selbst bei einer einfachen Rechnung die Berechnungsphasen überwiegen.

Abbildung 5.4 zeigt eine Berechnungsphase der vier beteiligten Prozessoren. Die zeitlichen Unterschiede liegen im Bereich von einigen Sekunden, was absolut gesehen unbedeutend ist, prozentual jedoch ca. ein Drittel der gesamten Berechnungszeit des Schritts ausmacht. Diese Unterschiede müssen jedoch nicht nur aus der ungleichen Verteilung der Versetzungen in den einzelnen Gebieten resultieren, sondern können auch durch eine tageszeitlich bedingte ungleiche Belastung des Systems durch interaktive Nutzung hervorgerufen worden sein.

Eine detailliertere Darstellung der Kommunikationsphase, in der die Positionen der Versetzungen in Übergangsbereichen der Prozessoren in den jeweiligen Halo übermittelt werden, ist in Abbildung 5.5 zu sehen. Zum Kommunizieren mit anderen Prozessoren werden vorhandene, zu MPI gehörende Routinen und Funktionen eingesetzt [MPI94]. Zunächst erfolgt ein Aufruf von *MPI_Reduce*, einer Funktion, die inkonsistente Daten zwischen verschiedenen Prozessoren abgleicht. Diese wird

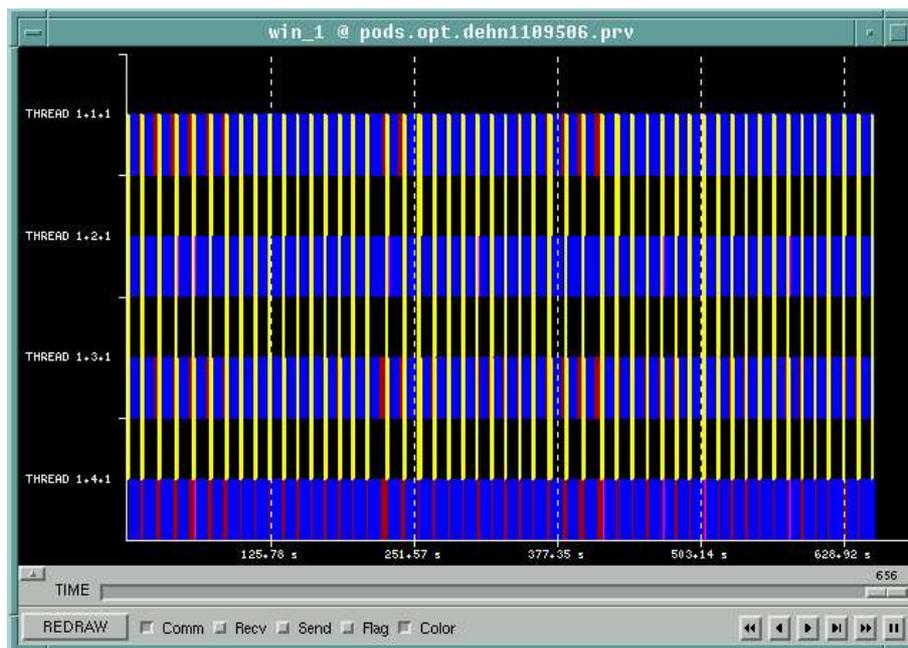


Abbildung 5.3: Übersicht einer Simulation über 50 Schritte mit Hilfe der Software *Paraver*.

mit *MPI_Barrier* abgeschlossen, einer Schranke, die sicherstellt, dass die Daten auf allen Prozessoren abgeglichen sind. Erst wenn dies erfolgt ist, erlaubt die Schranke die Fortsetzung der Berechnung. Die jeweilige Dauer des Kommunikationsaufrufs *MPI_Sendrecv* ist pink eingefärbt, gelbe Linien veranschaulichen, welcher Thread Sender und Empfänger eines Datenaustauschs ist. Alle Kommunikationsaufrufe werden wiederum mit einer Schranke abgeschlossen, die für die gleichzeitige Wiederaufnahme der Berechnungen sorgt, ein Vorgang, der auch als Thread Synchronisation bezeichnet wird. Threads, die ihren Datenaustausch beendet haben, müssen also auf die restlichen warten. Die Berechnungen der resultierenden Spannungsfelder können nach diesen Operationen unter Verwendung des nun gefüllten Halos fortgeführt werden.

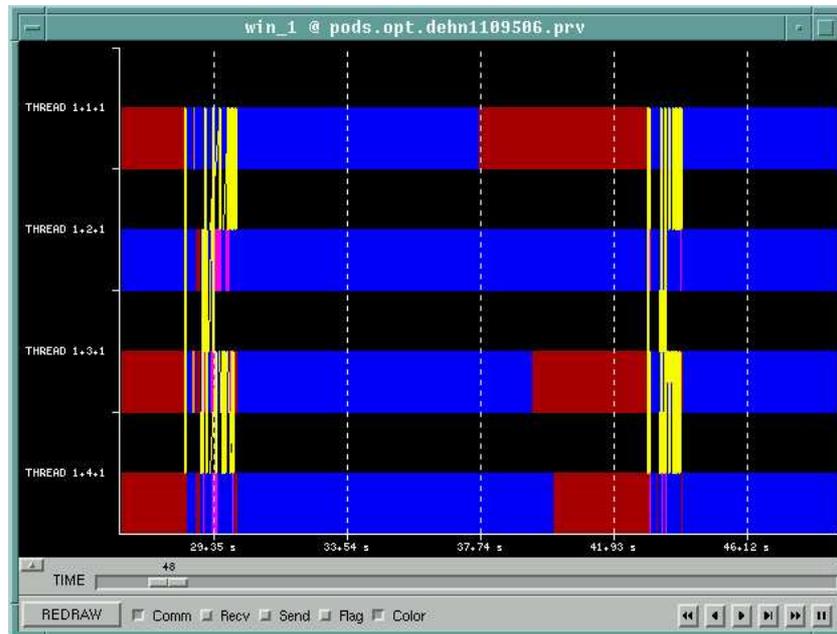


Abbildung 5.4: Darstellung einer Phase zur Berechnung der Spannungsfelder um Versetzungen während eines Schritts mit Hilfe der Software *Paraver*.

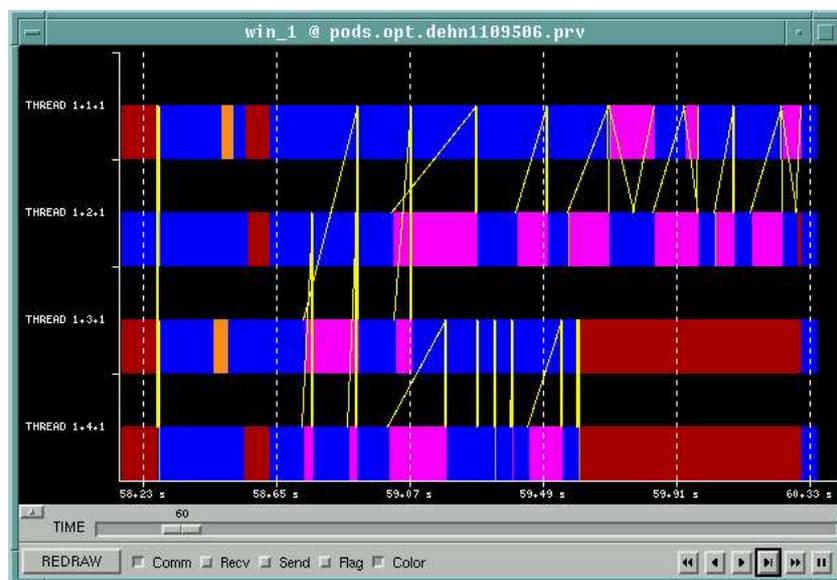


Abbildung 5.5: Darstellung der Kommunikationsphase eines Schritts mit Hilfe von *Paraver*.

6 Validierungsmethoden der Simulation

6.1 Validierung mittels Transmissionselektronenmikroskopie

Von großer Bedeutung bei mikrostrukturellen Simulationen ist die experimentelle Verifikation der Simulationsergebnisse, da nur hierdurch die Gültigkeit des verwendeten Modells überprüft werden kann. Versetzungen können im realen Versuch neben dem Einsatz von Ätzverfahren nur mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) sichtbar gemacht werden. Das Verfahren ist zwar hinsichtlich der Probenpräparation sehr aufwändig, besitzt jedoch den Vorteil der direkten Abbildung von Versetzungen und Ausschnitten von Versetzungssystemen. Es können somit komplexe Versetzungsstrukturen mit Hilfe geeigneter Bildanalyseverfahren quantitativ erfasst und durch Korrelationsbetrachtungen direkt mit den zugehörigen Simulationsergebnissen verglichen werden.

6.1.1 Funktionsweise

Bei der Transmissionselektronenmikroskopie erfolgt eine Durchstrahlung einer dünnen Folie des zu untersuchenden Werkstoffs mittels eines Elektronenstrahls. Bedingung für die Foliendicke ist, dass sie dünn genug ist, um vom Elektronenstrahl durchdrungen werden zu können, andererseits aber dick genug bleibt, um Kontrastunterschiede zwischen gestörten und ungestörten Bereichen des Kristallgitters zu ermöglichen. Die Präparation dieser dünnen Folien erfolgt entweder durch elektrolytisches Polieren oder nach Vorbehandlung mit einem Muldenschleifgerät (Dimple Grinder) durch Ionenstrahlätzen. Die Behandlung erfolgt solange, bis es zu einem Lochdurchbruch in der Probe gekommen ist. In der Nähe der Lochrands sollten die Proben dann je nach Ordnungszahl und Beschleunigungsspannung eine Dicke von ca. 80 nm (bei Au und W) bis 300 nm (bei Al und Si) [Hor93] aufweisen. Typische Beschleunigungsspannungen von Transmissionselektronenmikroskopen liegen zwischen 100 und 400 kV. Hinter dem Objekt entstehen bei unterschiedlichen Werkstoffen auch verschiedene Bilder. Bei Einkristallen entstehen periodische Punktmuster, bei vielkristallinen Proben kommt es zur Bildung von konzentrischen Kreisen, wogegen bei amorphen Stoffen wie Glas wenige diffuse Ringe erscheinen. Ursache für die unterschiedlichen Bilder ist die Beugung des Elektronenstrahls an Atomen in der Probe. Die Elektronen stellen eine räumlich kohärente Wellenstrahlung dar. Wegen der strengen räumlichen Periodizität bei Kristallstrukturen über das gesamte Objekt hinweg, bestehen feste Phasenbeziehungen zwischen den einzelnen Teilbündeln, in die die Gesamtstrahlung zerlegt gedacht werden kann. In dem durchstrahlten Objekt werden die Strahlen je nach örtlichen Eigenschaften unterschiedlich gebeugt oder absorbiert. Die aus ihrer ursprünglichen Richtung abgelenkten, von verschiedenen Objektpunkten ausgehenden Strahlen sind in Folge ihrer Kohärenz interferenzfähig, wodurch ein Wellenbild hinter dem Objekt entsteht. Da die einzelnen Körner bei vielkristallinen Stoffen statistisch verteilt sind, und die Beugungswinkel festliegen, können die Einkristallreflexe nur auf konzentrischen Ringen liegen. Bei amorphen Werkstoffen entstehen Beugungsbilder, die durch wenige, sehr diffuse Ringe anzeigen, dass keine Kristallstruktur vorhanden ist.

6.1.2 Elektronenbeugung

Um transmissionselektronenmikroskopische Aufnahmen und Beugungsbilder richtig verstehen und deuten zu können, ist es notwendig, ein grundlegendes Verständnis der Beugungserscheinungen zu besitzen. Die zugehörige Wellenlänge der mit einer Geschwindigkeit v auf die Probe treffenden Elektronen ist durch die *de Broglie-Beziehung*

$$\lambda_e = \frac{h}{p_e} = \frac{h}{m_e \cdot v}$$

bestimmt, wobei $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js das *Plancksche Wirkungsquantum*, p_e den Impuls und m_e die Masse der Elektronen bezeichnet. Bei der Massenbestimmung kann die Relativitätstheorie aufgrund der hohen Geschwindigkeit der Elektronen nicht vernachlässigt werden. Somit ergibt sich die Masse aus

$$m_e = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

mit der Ruhemasse des Elektrons m_0 und der Lichtgeschwindigkeit c . Die Wellenlänge der Elektronen beträgt also

$$\lambda_e = \frac{h \cdot c}{\sqrt{(U_b \cdot e + m_0 \cdot c^2)^2 - (m_0 \cdot c^2)^2}}.$$

e bezeichne die Elementarladung. Bei einer eingestellten Beschleunigungsspannung des TEM von $U_b = 200$ kV beläuft sie sich auf $\lambda_e = 0,0025$ nm. Wenn man die Werte der Wellenlänge λ_e in die *Braggsche Gleichung*

$$\sin \vartheta = \frac{n\lambda_e}{2d}$$

einsetzt, mit Braggschem Beugungswinkel ϑ , Reflexionsordnung n und Netzebenenabstand a_c des Kristalls, ergeben sich bei Reinaluminium Beugungswinkel im Bereich von $0,2^\circ$ bei obigem λ_e und der Gitterkonstanten von Al = 0,4042 nm. Alle gebeugte Intensität niederer Ordnung rührt also von Ebenen her, die fast parallel zum einfallenden Elektronenstrahl liegen.

Eine einfache Methode, um Beugungsbilder von Einkristallen darzustellen, ist die Verwendung eines geeigneten *reziproken Gitters*. Dabei ist die Indizierung einfach, da die Indizes der Beugungspunkte mit den korrespondierenden des reziproken Gitters übereinstimmen [Hrs65]. Ein Punkt des reziproken Gitters wird festgelegt durch die Normale auf einer Ebenenschar mit einem Abstand g reziprok zum wirklichen Abstand der Netzebenen a_c , also $g = d^{-1}$ (Abbildung 6.1). Im Folgenden wird der Ortsvektor des reziproken Gitters als \vec{g} bezeichnet und die Vielfachen der Achsenabschnitte als h, k, l . Sie entsprechen den reziproken Achsenabschnitten des wirklichen Gitters. Das Koordinatensystem des reziproken Gitters ist definiert als

$$\vec{a}_r = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V_E}; \vec{b}_r = \frac{\vec{a} \times \vec{c}}{V_E}; \vec{c}_r = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V_E},$$

wobei $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ die Einheitsvektoren und V_E das Volumen der Elementarzelle bezeichnen. Die Komponenten eines reziproken Gittervektors \vec{g} , mit dessen Hilfe eine Ebenenschar beschrieben wird, lauten also

$$\vec{g} = h\vec{a}_r + k\vec{b}_r + l\vec{c}_r.$$

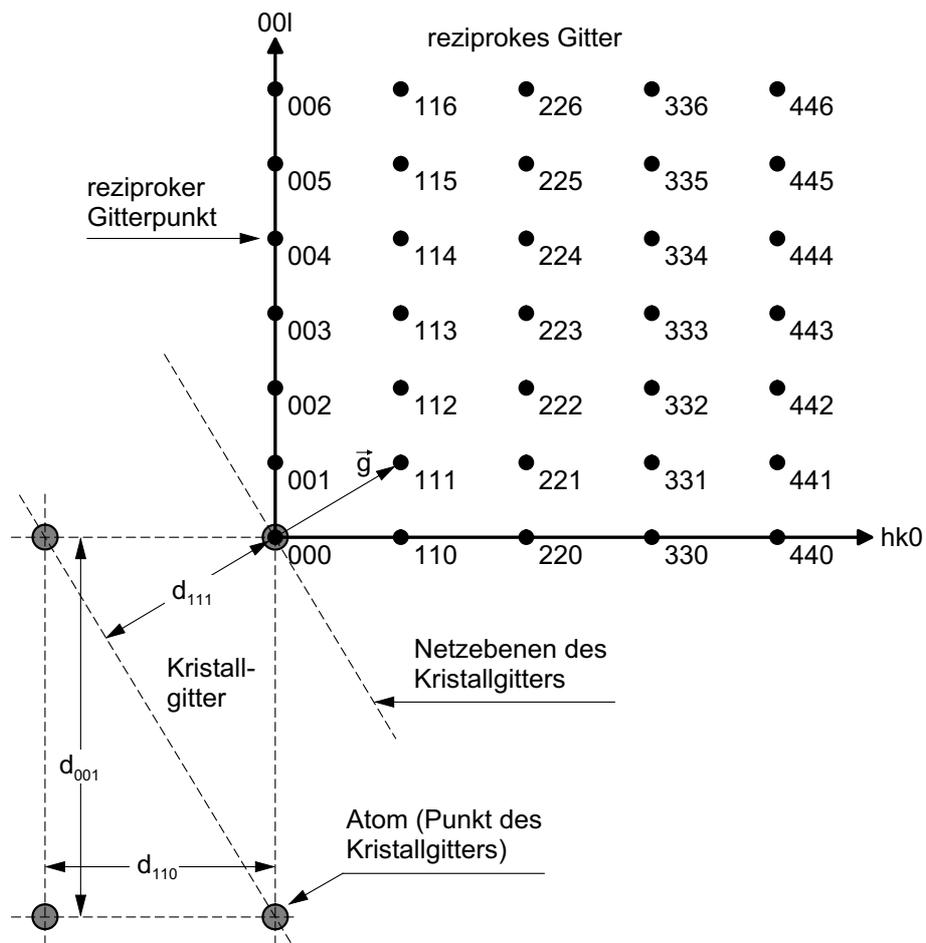


Abbildung 6.1: Konstruktion eines zweidimensionalen Ausschnitts des reziproken Gitters und Kennzeichnung eines reziproken Gittervektors \vec{g} der (111)-Ebenenschar.

Die Phasendifferenz zwischen ungebeugtem und gebeugtem Strahl muss gemäß der Bragg'schen Gleichung ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge betragen, damit ein Beugungsmaximum entsteht. Setzt man den Betrag des reziproken Gittervektors \vec{g} in diese Gleichung ein, so ergibt sich

$$\sin \vartheta = \frac{\lambda_e \cdot |\vec{g}|}{2}.$$

In Analogie zur Definition des reziproken Gitters kann ein Wellenvektor \vec{k} mit dem Betrag der reziproken Wellenlänge λ_e eingeführt werden, $|\vec{k}| = 1/\lambda_e$. Dies führt zu

$$\sin \vartheta = \frac{|\vec{k}| \cdot |\vec{g}|}{2},$$

woraus die Beziehung

$$\vec{g} = \vec{k}_1 - \vec{k}_0 \quad (6.1)$$

resultiert. \vec{k}_0 ist der Wellenvektor des einfallenden und \vec{k}_1 der des gebeugten Strahls, mit $|\vec{k}_0| = |\vec{k}_1|$. Stellt man diese Beziehung geometrisch dar, so ergibt sich die *Ewaldsche Kugelkonstruktion*. Nur solche Netzebenen \vec{g} führen zu Beugungserscheinungen, für die der Vektor \vec{g} eine Kugel mit dem Radius $|\vec{k}|$ berührt, was in Abbildung 6.2 (links) dargestellt ist. In Folge der kleinen Wellenlängen von Elektronenstrahlen ist der Radius der Ewaldkugel viel größer als der Netzebenenabstand, so dass der Kreis für kleine \vec{g} -Werte zur Geraden entartet. \vec{g} steht also auf \vec{k}_0 fast senkrecht. Die Orte, an denen im Kristall abgebeugte Intensität austritt, entsprechen also annähernd dem reziproken Gitter. Abbildung 6.2 (rechts) zeigt, dass nicht alle reziproken Gitterpunkte eines feststehenden Kristalls von einem parallel einfallenden Strahl gleich gut getroffen werden können. Es treten vielmehr Abweichungen von der idealen Bragg-Bedingung auf, die durch einen zusätzlichen Vektor \vec{s} gekennzeichnet werden. Dieser hat die Dimension einer reziproken Länge. Im reziproken Raum werden solche, etwas außerhalb der Ewald-Kugel liegende Punkte beschrieben durch

$$\vec{g} + \vec{s} = \vec{k}_1 - \vec{k}_0. \quad (6.2)$$

Der Sonderfall, dass eine Ebenenschar \vec{g}_{hkl} die Beugungsbedingungen sehr genau erfüllt, \vec{s} für alle anderen Reflexe stärker von Null abweicht, kann durch Verkippung des Kristalls gegen den Elektronenstrahl erreicht werden. Das Beugungsbild enthält dann nur zwei starke Reflexe, den durchgehenden \vec{g}_{000} und den abgebeugten \vec{g}_{hkl} , während alle anderen vernachlässigt werden können. Dieser *Zweistrahlfall* ist Voraussetzung für die Herstellung von TEM-Aufnahmen unter definierten Bedingungen, wie z.B. zur Bestimmung des sichtbaren Anteils von Versetzungen oder für Kontrastrechnungen, wogegen er für die Bestimmung der Kristallstruktur oder Gitterparametern weniger gut geeignet ist.

6.1.3 Beugungskontraste

Gitterfehler erscheinen im transmissionselektronenmikroskopischen Bild als reine Beugungskontraste. Die Störungen in der Periodizität und die Gitterverzerrungen in der Umgebung von Versetzungen verändern die Beugungsbedingungen für den Elektronenstrahl. An den betroffenen Stellen schwankt daher die Beugungsintensität gegenüber benachbarten, ungestörten Bereichen, so dass die gestörte Zone im TEM-Bild gegenüber der Nachbarschaft Kontraste aufweist. Der spezielle Verlauf des Kontrasts hängt außer von der Art des Gitterfehlers noch von der Foliendicke und -orientierung,

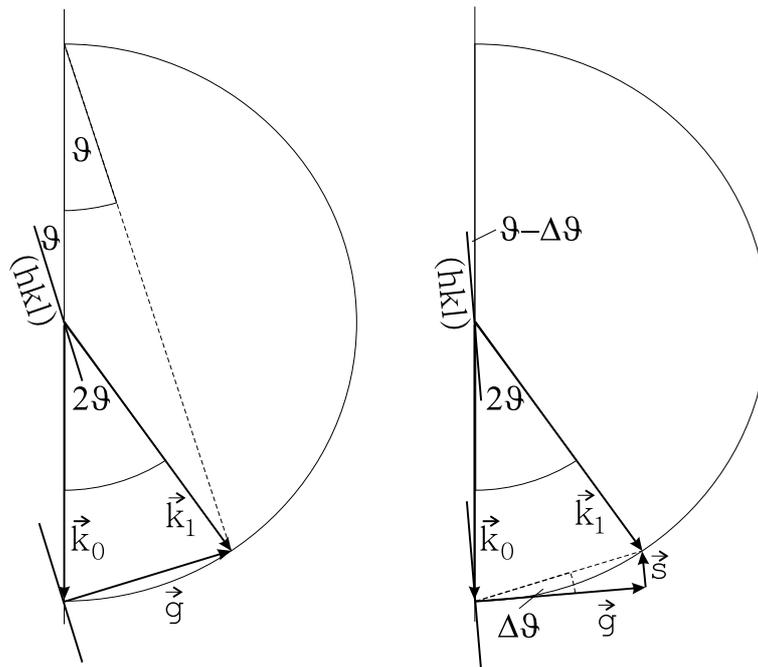


Abbildung 6.2: Graphische Darstellung der Bragg'schen Beugungsbedingung durch die Ewaldsche Kugel. Links erfüllt die Netzebene (hkl) mit reziproken Gittervektor \vec{g} die Bedingung (6.1) genau, rechts wird die Abweichung von der idealen Bedingung in Richtung des einfallenden Strahls k_0 durch einen weiteren Vektor \vec{s} im reziproken Raum gekennzeichnet Gleichung (6.2).

von der Lage des Gitterfehlers relativ zur Folienfläche und vom Grad der Genauigkeit ab, mit der die Bragg-Bedingung in unmittelbarer Umgebung des Fehlers erfüllt ist. Für Versetzungen gelten die folgenden Unsichtbarkeitskriterien [Sci69]:

Schraubenversetzungen sind im TEM-Bild unsichtbar, falls Burgersvektor \vec{b} und Ortsvektor \vec{g} des reziproken Gitters senkrecht aufeinander stehen, also die Bedingung

$$\vec{g} \cdot \vec{b} = 0 \quad (6.3)$$

erfüllt ist.

Stufenversetzungen sind unsichtbar, falls \vec{b} und \vec{g} senkrecht aufeinander stehen und \vec{g} zusätzlich noch in der von Burgers- und Linienvektor $\vec{\xi}$ aufgespannten Ebene liegt:

$$\vec{g} \cdot \vec{b} = 0 \quad (6.4)$$

$$\text{und } \vec{g} \cdot (\vec{b} \times \vec{\xi}) = 0. \quad (6.5)$$

Durch Aufsuchen der Reflexe $\vec{g} = (hkl)$, für die die Versetzungslinien verschwinden, lassen sich die zugehörigen Burgersvektoren bestimmen. Die hierfür notwendige Kippung der Probe lässt sich im TEM durch verschiedene Probenhalter realisieren.



Abbildung 6.3: Transmissionselektronenmikroskop JEM 2010 der Firma JEOL am Institut für Werkstoffkunde.

6.1.4 Verwendetes TEM

Die TEM-Aufnahmen dieser Arbeit wurden mit dem institutseigenen JEM 2010 der Firma *JEOL* angefertigt (Abbildung 6.3), dessen technische Daten in Tabelle 6.1 aufgeführt sind.

Das TEM wurde im Rahmen dieser Arbeit in zwei verschiedenen Modi betrieben:

- Im normalen TEM-Modus erfolgt eine Durchstrahlungsaufnahme mit verschiedenen Vergrößerungen, wobei auf dem Beobachtungsschirm die Abbildungsebenen der Objektivlinse betrachtet werden.
- Im CBD-Modus (convergent beam diffraction) wird das TEM mit stark konvergierendem Elektronenstrahl betrieben. Dieser Modus wird hauptsächlich für Beugungsabbildungen verwendet, welche zur Bestimmung der Probendicke herangezogen werden können [Haf02].

Zur Kippung der Proben im Rahmen einer ersten Kontrastoptimierung kamen zwei verschiedene Probenhalter zum Einsatz:

- Mit dem Doppelkippprobenhalter aus Abbildung 6.4 kann die Probe um zwei senkrecht aufeinander stehende Achsen gekippt werden.

Beschleunigungsspannung:	maximal 200 kV
Punktauflösung:	0,23 nm
Gitterauflösung:	0,14 nm
Vergrößerung:	in 20 Schritten von 50 auf 6.000 in 30 Schritten von 2.000 auf 1.500.000
Kameralängen:	Feinbereichsbeugung: 8 - 200 cm
HD-Beugung:	-8 m
Strahldurchmesser:	TEM-Modus: 20 - 200 nm CBD-Modus: 1 - 25 nm
Probenkippfung:	bei Standard- und Heizprobenhalter: $x = \pm 30^\circ$ $y = \pm 0^\circ$ bei Doppelkippprobenhalter: $x = \pm 15^\circ$ $y = \pm 15^\circ$
Probenbewegung:	$x = y = 2$ mm, $z = 0,4$ mm
Vakuumsystem	Arbeitsdruck: $1 \cdot 10^{-5}$ Pa, vollautomatische Vakuumlöge mit Diffusions-, Rotations-, und Ionengetterpumpe
Zusatzausstattung:	Rastertransmissionseinheit (STEM) Röntgenmikrobereichsanalyse (EDX)

Tabelle 6.1: Technische Daten des JEM 2010.

- Nach [Voe76] müssen Nachbildungen von Temperaturverläufen nicht zwangsweise im kompakten Material durchgeführt werden, aus welchem dann Proben für die Durchstrahlungsmikroskopie angefertigt werden, sondern es können auch mittels eines geeigneten beheizbaren Probenhalters bereits angefertigte Proben aus dem Grundmaterial verschiedenen Temperaturverläufen unterzogen werden. Der am Institut für Werkstoffkunde vorhandene in-situ-Heizprobenhalter der Firma *Gatan* (Abbildung 6.5) sorgt dafür, dass keine Verfälschung der Ergebnisse durch Probenpräparation nach externer Wärmebehandlung erfolgt. Hinsichtlich der Kippbarkeit ähnelt der Heizprobenhalter dem Standardprobenhalter, d.h. er kann nur um eine Achse gekippt werden. Der Einsatz des Heizprobenhalters ist in Kapitel 6.2.2 beschrieben.



Abbildung 6.4: Doppelkippprobenhalter des JEM 2010.

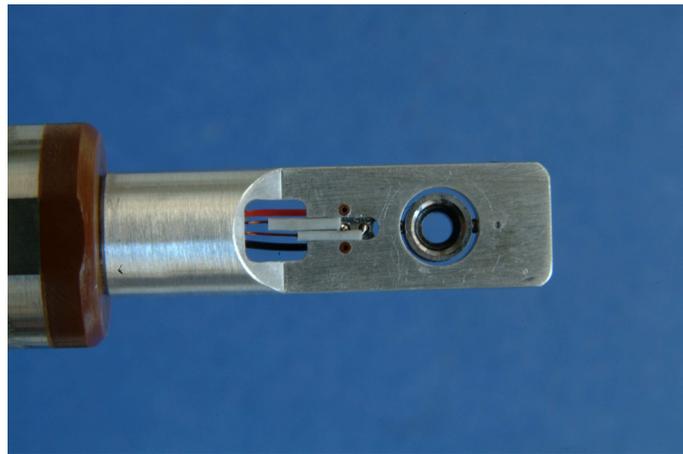


Abbildung 6.5: Heizprobenhalter des JEM 2010.

6.2 TEM-Untersuchungen

Die Bildaquisition des Transmissionselektronenmikroskops JEM 2010 am Institut für Werkstoffkunde erfolgte über eine Digitalkamera vom Typ *MegaView II* der Firma *Soft Imaging System*. Hierbei reflektiert ein im Strahlengang montiertes Prisma das Bild auf die seitlich im Vakuumteil des TEM eingebaute Kamera. Abbildung 6.6 zeigt den sichtbaren Teil der Kamera.



Abbildung 6.6: Digitales Kamerasystem des JEM 2010.

6.2.1 Schwingbelastung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Untersuchungen an AlMg5Mn-Blechen, wie in Abbildung 6.7 zu sehen, durchgeführt. Hierzu wurde das Blech am Institut für Maschinelle Anlagentechnik und Betriebsfestigkeit der Technischen Universität Clausthal einer zyklischen Schwingbelastung unter-

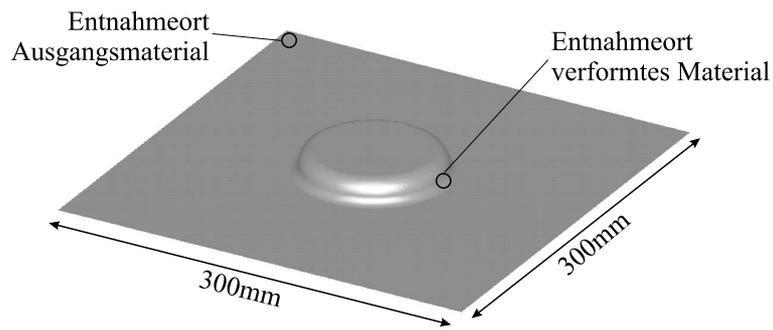


Abbildung 6.7: AlMg5Mn-Blech mit tiefgezogener Rundsicke.

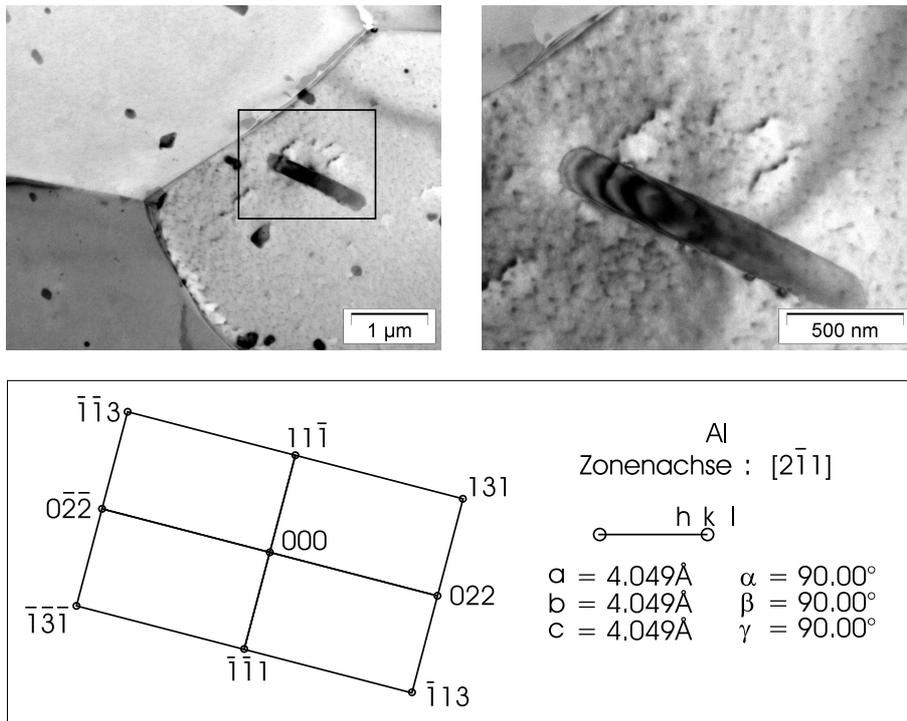


Abbildung 6.8: Ausgangsgefüge von AlMg5Mn im unbehandelten Zustand mit Ausschnittsvergrößerung und zugehörigem indiziertem Beugungsbild.

zogen, bis sich nach ca. 300.000 Schwingspielen Risse im Material zeigten. Die Rundsicke wurde zuvor am Institut für Umformtechnik und Umformmaschinen der Universität Hannover durch Tiefziehen erzeugt. Zwei Entnahmeorte für zu untersuchende Proben wurden gewählt. Unverformtes Ausgangsmaterial wurde an der Bauteilecke entnommen, einer Region, in der keine Verformung durch das Tiefziehen oder die Schwingbelastung vorliegt. Verformtes Probenmaterial sollte aus einem Bereich entnommen werden, der 2mm vom äußeren Rand der Rundsicke entfernt liegt und sich unter 0° und 90° auf dem Bauteil befinden kann. In diesen Bereichen sind die höchsten Spannungszustände während der Schwingbelastung zu erwarten. Hierbei sind alle vier möglichen Bereiche, die dieses Kriterium erfüllen, gleichwertig, es wurde ein Entnahmeort gewählt, an dem noch keine Rissbildung durch die Schwingbelastung aufgetreten ist.

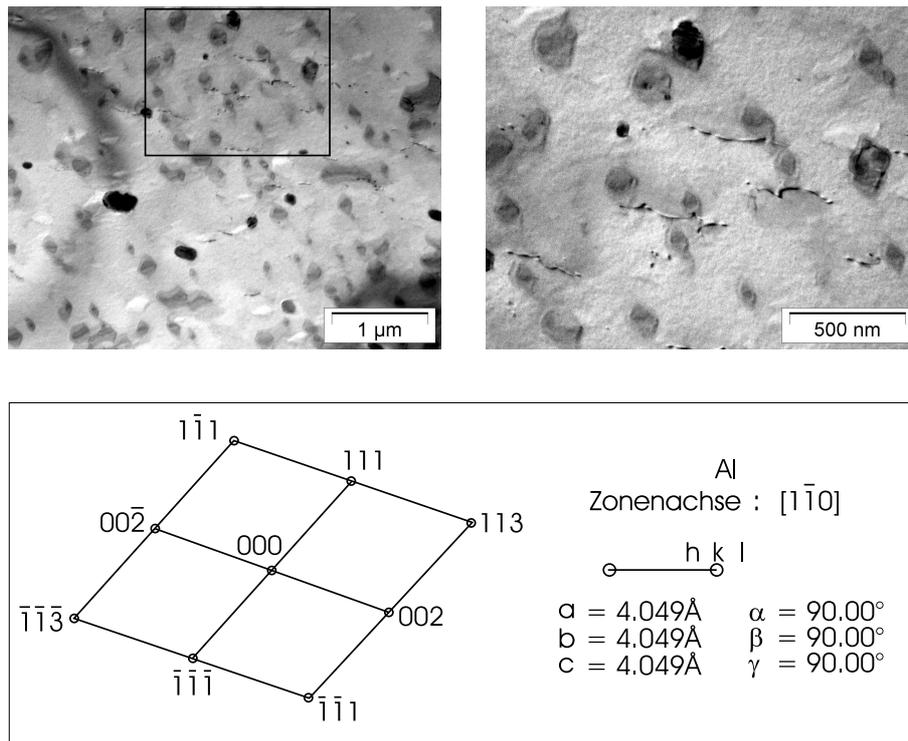


Abbildung 6.9: Ausgangsgefüge von AlMg5Mn im unbehandelten Zustand mit Ausschnittsvergrößerung und zugehörigem indiziertem Beugungsbild.

Abbildungen 6.8 und 6.9 zeigen TEM-Aufnahmen des unverformten Ausgangszustands des Bauteils. Jeweils links ist eine Übersichtsaufnahme mit 20000- bzw. 25000-facher Vergrößerung zu sehen, rechts ein Ausschnitt mit 60000-facher Vergrößerung.

Klar zu erkennen sind einzelne Körner und Ausscheidungen in Abbildung 6.8, wobei sich einzelne Versetzungen in der Umgebung der größten Ausscheidung und entlang einer Korngrenze angesiedelt haben. Ausscheidungen und einige wenige Versetzungen finden sich ebenfalls in Abbildung 6.9. Insgesamt ist die Versetzungsdichte in beiden Bildern sowie im gesamten Ausgangsmaterial sehr niedrig, was auf Erholungsvorgänge durch Wärmebehandlung nach dem Herstellungs- und Walzprozess des Bleches hindeutet.

Durch Interpretation von Beugungsbildern wurde bei den TEM-Aufnahmen die kristallographische Orientierung der Probe bestimmt. Hierbei wird die Lage der Zonenachse bestimmt, die parallel zum einfallenden Elektronenstrahl verläuft, und in den Koordinaten der abgebildeten Netzebene dargestellt. Da die Zonenachse zudem senkrecht auf der Probenoberfläche steht, ergibt sich, dass bei Abbildung 6.8 die Oberfläche die (211)-Ebene ist, da die Zonenachse in [211]-Richtung verläuft. Analog ergibt sich bei Abbildung 6.9 die (110)-Ebene als Probenoberfläche.

Seitens der Mikrostruktur ist eine völlig andere Situation in Abbildungen 6.10 und 6.11 erkennbar. Wiederum sind links die Übersichtsaufnahmen mit 25000- bzw. 20000-facher und rechts Detailbilder mit 60000-facher Vergrößerung zu sehen. Als Folge des Tiefziehens und der Schwingbelastung ist die Versetzungsdichte in beiden Aufnahmen stark angestiegen. Die Versetzungen haben sich in Abbildung 6.10 relativ regellos in Versetzungsknäueln angeordnet, es ist keine übergeordnete Struktur erkennbar. Im Gegensatz dazu sind an einem weiteren Ort derselben Probe (Abbildung 6.11)

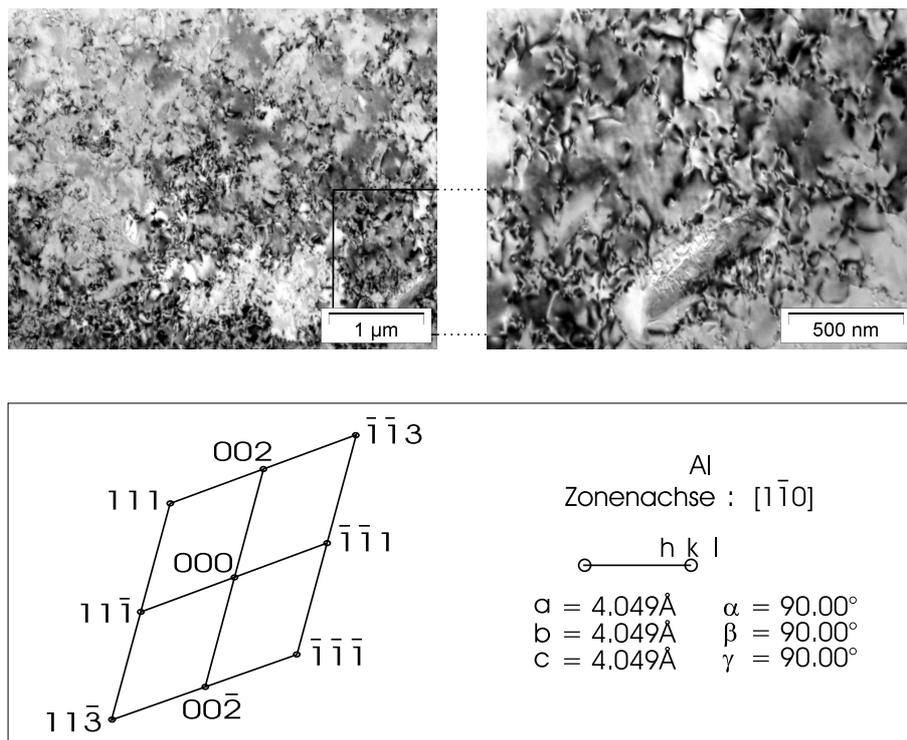


Abbildung 6.10: AlMg5Mn im kaltverfestigten Zustand nach Schwingbelastung mit Ausschnittsvergrößerung und zugehörigem indiziertem Beugungsbild.

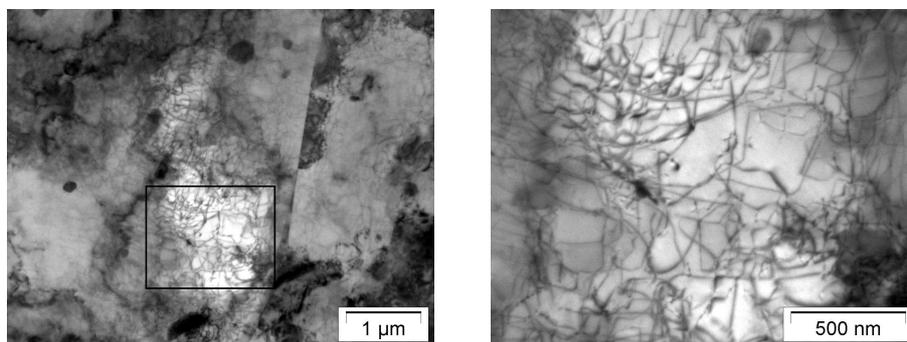


Abbildung 6.11: AlMg5Mn im kaltverfestigten Zustand nach Schwingbelastung mit Ausschnittsvergrößerung.

Versetzungsnetzwerke entstanden, die regelmäßige Anordnungen erkennen lassen.

Die Bestimmung der Orientierung der Probenoberfläche in Abbildung 6.10 ergibt ebenfalls die $(1\bar{1}0)$ -Ebene. Die verwendete Probe war an der Stelle, an der Abbildung 6.11 aufgenommen wurde, zu dick für ein Beugungsbild. Die aus der Dicke resultierende Unschärfe des Beugungsbildes machte die Unterscheidung einzelner Reflexe zur Interpretation unmöglich.

6.2.2 Wärmebehandlung

Mit Hilfe des in Abbildung 6.5 gezeigten in-situ-Heizprobenhalters kann man die TEM-Probe beliebige Temperaturprofile durchlaufen lassen, ohne den eingestellten Bildausschnitt verändern zu müssen. Konventionelle Wärmebehandlungen basieren immer auf unterschiedlichen Proben, die jeweils getrennt behandelt werden, woraus sich allein schon aufgrund der anschließenden Präparation mittels Ausstanzen und elektrolytischen Polierens immer verschiedene Ausschnitte ergeben, die dann verglichen werden müssen. Bei der hier verwendeten in-situ-Methode wird nur eine einzige präparierte Probe benötigt. Es wird ein aussagekräftiger Bildausschnitt gesucht, worauf die Wärmebehandlung im Heizprobenhalter beginnen kann, während man gleichzeitig die dadurch hervorgerufenen Veränderungen der Mikrostruktur direkt beobachten und aufgrund der Digitalkamera in Echtzeit weiter verarbeiten kann.

Abbildung 6.12 zeigt den Verlauf einer solchen in-situ-Wärmebehandlung von AlMg5Mn. Ausgehend vom kaltverfestigten Zustand nach der beschriebenen vorangehenden Umformung und anschließender Schwingbelastung wird die Temperatur linear von Raumtemperatur auf 405°C erhöht. Im Verlauf dieser Bildserie, die den interessanten Bereich von 210°C bis 405°C abdeckt, ist gut zu erkennen, wie Annihilations- und Relaxationsvorgänge die Versetzungsstruktur verändern, wobei die Versetzungsdichte abnimmt.

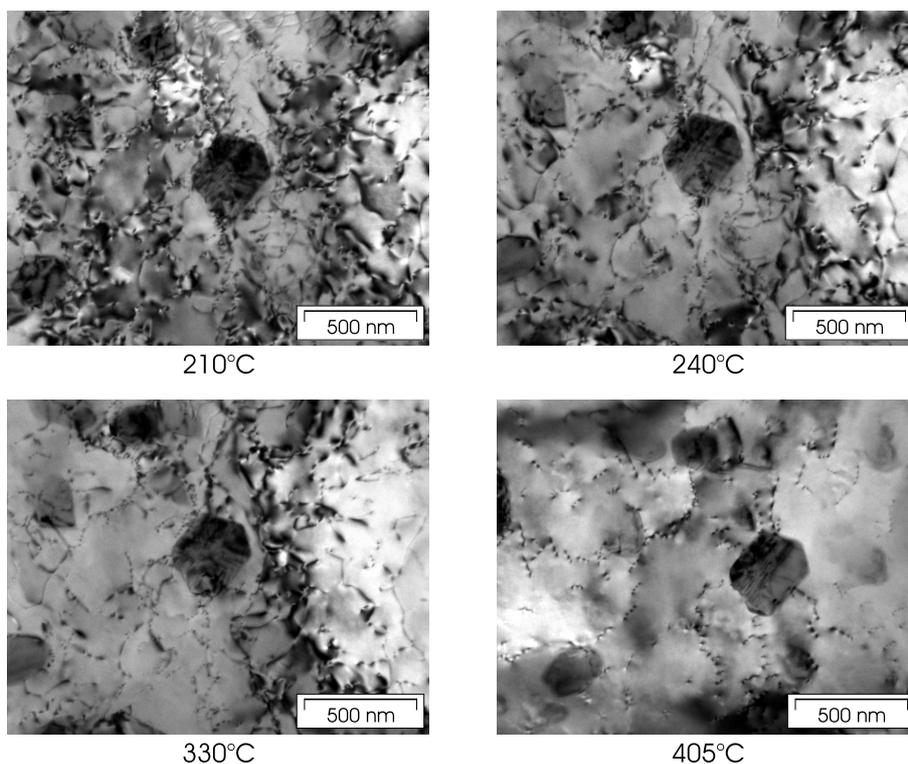


Abbildung 6.12: Verlauf einer in-situ-Wärmebehandlung von AlMg5Mn nach Schwingbelastung.

6.3 Methoden der Bildverarbeitung

Der direkte Vergleich von transmissionselektronenmikroskopischen Aufnahmen mit Ergebnissen der Versetzungssimulation zur Validierung letzterer gestaltet sich aufgrund der hohen Anzahl der Versetzungen und der Komplexität ihrer Strukturen derart schwierig, dass auf ein automatisiertes Verfahren zurückgegriffen wurde, welches im Rahmen dieser Arbeit entwickelt worden ist. Das Verfahren basiert auf Methoden der Bildverarbeitung. Bisherige, manuelle bis halbautomatische Methoden beruhen immer auf Entscheidungen des jeweiligen Anwenders, so dass wiederholte Messungen eines Anwenders zum Teil voneinander abweichende Resultate besitzen. Automatische Verfahren haben den Vorteil, dass sie reproduzierbare, anwenderunabhängige Ergebnisse liefern. Die größte Herausforderung bei einem automatischen Verfahren ist das Integrieren der Anwendererfahrung in das Programm. Diese Erfahrungen sind wichtig bei der Unterscheidung verschiedener Gitterdefekte, die in der TEM-Aufnahme ähnliche Gestalt besitzen, wie z.B. Versetzungen und bestimmte Korngrenzen. Ein automatisches Verfahren muss zu seiner Implementierung als Bildverarbeitungsaufgabe formuliert werden, wobei die Aufgabe in einzelne Bearbeitungsschritte aufgeteilt wird, die im Folgenden vorgestellt werden. Die Lösung einer Bildverarbeitungsaufgabe gliedert sich nach [Jae89] in die Bereiche

- Bilderfassung,
- Bildvorverarbeitung,
- Segmentierung.

Diese Stufen dienen zur Zerlegung der Gesamtaufgabe in mehrere voneinander unabhängige Teile, in denen jeweils ein bestimmtes Kriterium geprüft wird.

6.3.1 Bilderfassung

Die Bilderfassung oder Bildkodierung hat eine Quantisierung der Ortskoordinaten und Grauwerte zum Ziel. Das Bild wird in eine Zahlenmatrix zerlegt, die vom Rechner ausgewertet und weiter verarbeitet werden kann. Diese Zerlegung erfolgt mittels einer geeigneten optischen Abbildung und Beleuchtung durch einen opto-elektrischen Wandler (CCD-Sensor), welcher die anschließende Kodierung der elektrischen Signale (CCD-Spannung) vornimmt. In dieser zu dem Eingangsbild äquivalenten Matrix muss die wesentliche Information des Originalbilds wie Form, Struktur oder Farbe enthalten sein.

Durch die Überlagerung des Bilds mit einem rechteckigen oder quadratischen Gitter wird das zu erfassende Bild in Rasterflächenstücke unterteilt. Diese Quantisierung der Ortskoordinaten wird auch **Rasterung** genannt. Die Größe dieses Rasters ist für den Informationsgehalt des Bilds von entscheidender Bedeutung. Ist das Raster zu groß, so können wichtige Bildinhalte verloren gehen, ist es sehr klein, so wird der Rechenaufwand sehr groß, ein Nachteil, der jedoch durch die zunehmenden Fortschritte auf dem Gebiet der Informationstechnologie relativiert wird. Bei der Quantisierung der Grauwerte wird jedem Rasterflächenstück ein Grauwert $g(x,y)$ aus einer **Grauwertmenge** G zugewiesen. Als Grauwertmenge hat sich aufgrund der byteorientierten Architektur von Rechenanlagen die Menge $G = \{0, 1, \dots, 255\}$ durchgesetzt, denn da ein Byte acht Bit entspricht, benötigt man für diese 2^8 Grauwerte ein Byte Speicherplatz. Besteht ein Bild nur aus den Grauwerten 0 und 1, so bezeichnet man es als **Binärbild**. Zur Speicherung genügt dann ein Bit. Die mathematische Beschreibung von Bildern erfolgt meist durch eine Darstellung als Bildmatrix. Im einfachsten Fall

ist das Bild i eine rechteckige Matrix mit Bildzeilen und Bildspalten. Der Zeilenindex hierbei ist x , der Spaltenindex y . Der Bildpunkt, der auch Pixel (von picture element) genannt wird, besitzt an der Stelle (x, y) den Grauwert $i(x, y)$.

Einige offensichtliche Eigenschaften kontinuierlicher Bilder besitzen keine direkte Analogie im Bereich der Digitalbilder. Ein wichtiges Beispiel hierfür ist die **Entfernung** oder Metrik. Der Abstand zwischen zwei Pixeln (x_1, y_1) und (x_2, y_2) eines Digitalbilds ist ein wesentliches quantitatives Merkmal. Er lässt sich auf unterschiedliche Arten definieren. Der *euklidische Abstand* D_E , der aus der klassischen Geometrie und alltäglichen Erfahrungen bekannt ist, wird als

$$D_E((x_1, y_1), (x_2, y_2)) = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad (6.6)$$

festgelegt. Diese Definition ist intuitiv verständlich. Ein Nachteil ist jedoch der relativ hohe Rechenaufwand durch die Wurzel. Die Entfernung zwischen zwei Punkten lässt sich jedoch auch als die minimale Anzahl von Elementarschritten in einem Raster festlegen, die nötig sind, um von einem zum anderen Pixel zu gelangen. Falls nur horizontale und vertikale Bewegungen erlaubt sind, so erhält man die D_4 -Entfernung, die vergleichbar ist mit dem Abstand zwischen zwei Orten in einer Stadt mit rechteckiger Anordnung der Straßen,

$$D_4((x_1, y_1), (x_2, y_2)) = |x_1 - x_2| + |y_1 - y_2|. \quad (6.7)$$

Falls Bewegungen in diagonaler Richtung ebenfalls erlaubt sind, so erhält man die sogenannte Schachbrett-Entfernung D_8 :

$$D_8((x_1, y_1), (x_2, y_2)) = \max\{|x_1 - x_2|, |y_1 - y_2|\}. \quad (6.8)$$

Die **Pixelumgebung** ist ein weiteres wichtiges Konzept in der Bildverarbeitung. Zwei Pixel werden 4-er Nachbarn genannt, wenn sie den Abstand $D_4 = 1$ voneinander haben. Analog sind zwei Pixel 8-er Nachbarn, falls $D_8 = 1$. Die Nachbarschaft eines Pixels wird dann einfach als Summe aller Nachbarn festgelegt. 8-er Nachbarschaften werden auch als 3×3 Nachbarschaft bezeichnet. Abbildung 6.13 zeigt 4-er und 8-er Nachbarschaften.

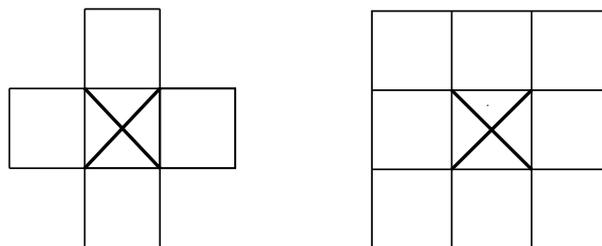


Abbildung 6.13: 4-er und 8-er Nachbarschaften von Bildpunkten.

In der Statistik versteht man unter einem Histogramm die Darstellung einer Häufigkeitstabelle in einem Balkendiagramm. In dieser Tabelle wird erfasst, wie oft bestimmte Klassen von Werten vorkommen. Im Falle eines **Grauerthistogramms** wird also für jeden Grauwert im Histogramm eingetragen, wie oft er im gesamten Bild vorkommt. Das Ergebnis ist also eine diskrete Funktion. Die Häufigkeiten werden in der Regel einzeln gezählt, lassen sich wie im Beispiel der Grauerthistogramme aber auch in Klassen unterteilen, so genannten Grauwertklassen. Eine übliche Einteilung

ist das Zusammenfassen von jeweils 16 Grauwerten zu einer Grauwertklasse. Eine Gemeinsamkeit aller Histogramme ist jedoch, dass immer nur der Grauwert jedes Bildpunkts für eine Klassifizierung oder direkte Zählung verwendet wird. Daher ist das Histogramm eine statistische Beschreibung erster Ordnung für die Verteilung der Grauwerte im Bild. Beispiele für Statistiken zweiter Ordnung beinhalten die räumliche Beziehung zwischen den Grauwerten. Aus Grauerthistogrammen lassen sich wichtige Eigenschaften des Bilds, wie mittlerer Grauwert oder Streuung ableiten. Histogramme können durch bestimmte Operationen gezielt verändert werden, um bestimmte Eigenschaften des Bilds stärker zu betonen. Ferner werden sie auch benötigt, um geeignete Schwellwerte für die Segmentierung oder statistische Kenngrößen eines Bilds zu bestimmen.

6.3.2 Bildvorverarbeitung

Unter Bildvorverarbeitung versteht man einen Verarbeitungsschritt, der das Bild in ein anderes Bild überführt, welches dem Eingangsbild grundsätzlich ähnlich ist, sich jedoch in speziellen Eigenschaften, wie z.B. einem verbesserten Kontrast von ihm unterscheidet. Der Informationsgehalt des Bilds verändert sich hierbei nicht wesentlich. Neben der Kontrastverbesserung können weitere Ziele Beleuchtungskorrekturen, Reduzierung von statistischem Rauschen und Filteranpassungen sein, die Frequenzen mit wichtigen Inhalten verstärken und die übrigen Frequenzen unterdrücken. Frequenzen in Bildern werden auf Seite 61 genauer erklärt. Nach dieser Definition bedeutet Bildvorverarbeitung die Veränderung der Helligkeit einzelner Bildpunkte. Diese Helligkeit kann im Ergebnisbild auf verschiedene Arten gewonnen werden.

Punktoperationen errechnen die Helligkeit nur aus dem Wert der Helligkeit des korrespondierenden Punkts im Eingangsbild. Verknüpfungen von Bildern fallen auch in diese Gruppe, denn auch sie verwenden nur Bildpunkte derselben Koordinate. Alle Punktoperationen lassen sich ferner in homogene und inhomogene Punktoperationen aufteilen, je nachdem, ob die Transformationsfunktion an jedem Punkt gleich ist, oder von der jeweiligen Koordinate abhängt. Punktoperationen sind eine spezielle Form der lokalen Operationen mit 1-er Nachbarschaft.

Lokale Nachbarschaftsoperationen beziehen eine bestimmte Nachbarschaft des Punkts in die Berechnungen ein, z.B. eine 8-er Nachbarschaft. Wird die Nachbarschaft sehr groß, so spricht man von globaler Nachbarschaft.

Globale Nachbarschaftsoperationen verwenden das gesamte Eingangsbild, um einen Punkt des Ergebnisbilds zu berechnen.

Eine weitere Klasse von Operationen zur Bildvorverarbeitung sind die Grauwerttransformationen. Diese ändern Helligkeitswerte unabhängig von der Position des Pixels im Bild.

Grauwerttransformationen

Allgemein lassen sich Grauwerttransformationen nach [Son93] in folgender Weise darstellen

$$o(x,y) = f(i(x,y)). \quad (6.9)$$

Hierbei bezeichnet $o(x,y)$ den Grauwert des Bildpunkts an der Stelle (x,y) im Ergebnisbild (output) und $i(x,y)$ den entsprechenden Grauwert im Eingangsbild (input). Die Transformationsfunktion f ist in dieser allgemeinen Fassung nicht ortsabhängig also für alle Bildpunkte gleich. Weiterhin

ist f prinzipiell beliebig und muss auch nicht analytisch darstellbar sein. Häufig werden die Bildpunkte des Ergebnisbilds nicht durch wiederholtes Ausführen von f berechnet, sondern mit Hilfe von Wertetabellen, so genannten **Look-Up-Tabellen**. Unter einer Look-Up-Tabelle (LUT) versteht man einen Speicher, bei der unter der Adresse x der Inhalt y gespeichert ist:

$$y = LUT(x).$$

Mathematisch bedeutet die Verwendung einer Look-Up-Tabelle, dass die Transformationsfunktion f durch eine Tabelle gegeben ist, die für jeden möglichen Grauwert einen Stützpunkt der Funktion angibt, jedem Grauwert also einen Funktionswert zuordnet. Unabhängig davon, ob die Funktion implizit oder explizit angegeben ist, wird der Inhalt der Look-Up-Tabelle nur einmal berechnet und kann dann für das gesamte Ergebnisbild $o(x,y)$ für alle x,y abgefragt werden. Look-Up-Tabellen ermöglichen also Transformationen, die sich analytisch nicht sinnvoll niederschreiben lassen. Ferner lassen sich auch analytisch darstellbare Operationen mittels Look-Up-Tabellen oft wesentlich schneller durchführen als durch die wiederholte direkte Umrechnung jedes einzelnen Bildpunkts. Je nach Komplexität der Transformation lassen sich Beschleunigungsfaktoren von mehr als 15 erzielen [Dem98]. Obwohl sich mit Look-Up-Tabellen Zeitvorteile ergeben können, besteht eine große Abhängigkeit von stabilen Beleuchtungsbedingungen und einem gleichbleibenden Erscheinungsbild der dargestellten Objekte. Kann dies nicht sichergestellt werden, so ist eine dynamische Anpassung an die aktuellen Bildverhältnisse nötig, was mit Look-Up-Tabellen einen ungleich höheren Aufwand mit sich bringt. Ideales Einsatzgebiet für Look-Up-Tabellen sind also unbefriedigende, aber trotzdem stabile Beleuchtungszustände.

Ein wichtiger Sonderfall von Gleichung (6.9) ist die **lineare Skalierung**

$$o(x,y) = c_2 \cdot (c_1 + i(x,y)). \quad (6.10)$$

Für verschiedene Koeffizientenwerte von c_1 und c_2 ergeben sich folgende Effekte [Hab91]:

- $c_1 > 0$ Erhöhung der Bildhelligkeit,
- $c_1 < 0$ Verringerung der Bildhelligkeit,
- $|c_2| > 1$ Erhöhung des Bildkontrasts,
- $|c_2| < 1$ Verringerung des Bildkontrasts.

Hierbei ist zu beachten, dass bei dieser Operation ein sogenanntes Clipping durchgeführt wird, d.h. entstehende negative Werte werden auf 0 gesetzt und Werte größer 255 durch 255 ersetzt.

Um den gesamten Graubereich von 0 bis 255 auszuschöpfen, lässt sich die lineare Skalierung durch entsprechende Wahl der Koeffizienten verwenden. Hierzu benutzt man den minimalen und maximalen Grauwert im Eingangsbild, um den Bildkontrast zu optimieren. Bezeichnen g_{min} den minimalen und g_{max} den maximalen Grauwert des Eingangsbilds, so wird die sogenannte *Kontrastnormierung* durch folgende Abbildung erreicht:

$$o(x,y) = \frac{255}{g_{max} - g_{min}} \cdot (i(x,y) - g_{min}). \quad (6.11)$$

Die Subtraktion von g_{min} verschiebt den minimalen Grauwert auf 0, den maximalen auf $g_{max} - g_{min}$. Die anschließende Multiplikation bewirkt, dass der maximale Grauwert des Ergebnisbilds 255 wird. Das Ebneten eines Grauwertbilds oder die *Histogrammlinearisierung* ist ebenfalls eine lineare Transformation der Grauwerte des Bilds. Der erzielte Effekt ist eine Erhöhung des Kontrasts und eine

bessere Erkennbarkeit feiner Bildstrukturen. Hier wird die Funktion f jedoch nicht vorgegeben, sondern aus dem Eingangsbild berechnet, und damit auf dessen spezielle Grauwertverteilung abgestimmt. Mittels einer Grauwerttransformation wird dafür gesorgt, dass jedes Helligkeitsintervall gleichmäßig besetzt ist. Dies bedeutet nicht, dass jeder einzelne Grauwert genau gleich häufig vorkommt, das Histogramm also aus gleich hohen Balken besteht, sondern dass in einem Grauwertintervall $[0, g]$ ein der Breite des Intervalls entsprechender Anteil von Pixeln zu finden ist, d.h. $g/256$ im Fall eines Bilds mit 256 Grauwerten. Mathematisch lässt sich dieser Vorgang folgendermaßen darstellen: Nach der Berechnung des Histogramms des Eingangsbilds $p(g)$ mit $g \in \{0, \dots, 255\}$ werden die relativen Summenhäufigkeiten ermittelt:

$$h(g) = \sum_{k=0}^g \frac{N_k}{N}, \quad g \in \{0, \dots, 255\}. \quad (6.12)$$

Hierbei ist N_i die Anzahl der Pixel mit Grauwert i und N die Gesamtzahl der Pixel im Eingangsbild. Nun wird die Skalierungsfunktion f berechnet:

$$f(g) = 255 \cdot h(g). \quad (6.13)$$

Der Summenausdruck ist die kumulative Häufigkeit der Grauwerte im Eingangsbild. Die Skalierungsfunktion ist monoton steigend. Damit wird sichergestellt, dass die Relation zwischen zwei Pixeln unterschiedlichen Grauwerts nicht umgekehrt wird. Ein Pixel, welches vor der Transformation heller war als sein Nachbar, kann nach der Histogrammlinearisation nicht dunkler sein, lediglich die Differenz zwischen den Grauwerten hat sich geändert. Dieses Verfahren wird häufig eingesetzt, wenn Menschen die Bildinformation optisch begutachten sollen, da Menschen keine so feinen Grauwertabstufungen erkennen können wie ein Bildverarbeitungssystem. Nach [Ros82] kann das menschliche Auge etwa 30 Graustufen erkennen, so dass der Betrachter das gegebene Bild für informationsreicher hält. Ein nochmaliges Ebenen des Ergebnisbilds würde an diesem nichts mehr ändern, die Menge der Pixel im Ergebnisbild ist also die Fixpunktmenge dieser Operation. Die eigentliche Implementierung dieses Vorgangs erfolgt meist über eine Look-Up-Tabelle, so dass nicht die gesamte Rechnung für jeden Bildpunkt erneut ausgeführt werden muss, sondern für jeden Grauwert g genau einmal zum Aufbau der Tabelle.

Bildarithmetik

Bildarithmetik bedeutet die punktweise Verrechnung zweier oder mehrerer Bilder miteinander. Der Grauwert eines Pixels im Ergebnisbild hängt demnach von den Grauwerten der entsprechenden Pixel aller Eingabebilder ab. Dies ist immer noch eine Punktoperation, da keine Pixel aus den jeweiligen Nachbarschaften in die Berechnung einbezogen werden. Die diesen Vorgang allgemein beschreibende Darstellung lautet analog zu Gleichung (6.9)

$$o(x, y) = f(i_1(x, y), i_2(x, y), \dots, i_n(x, y)). \quad (6.14)$$

Die **Bildaddition** stellt die einfachste Operation im Bereich der Bildarithmetik dar. Grauwerte zweier oder mehrerer Bilder werden pixelweise addiert. Hierbei tritt jedoch häufig das Problem auf, dass die Ergebniswerte das Grauwertbereichsintervall von $[0, 255]$ überschreiten. In diesen Fällen bietet sich die Benutzung einer der folgenden Möglichkeiten an.

Clipping: Ergebniswerte oberhalb von 255 werden einfach abgeschnitten und auf den Wert 255 gesetzt.

Division durch Anzahl der Bilder: Diese Operation entspricht einer Bildmittelung, welche zur Unterdrückung von stochastisch auftretenden Helligkeitsfehlern, sogenanntem Rauschen, eingesetzt wird.

Skalierung auf Minimum und Maximum: Hierbei werden die Eingangsbilder zunächst in einem Ergebnisbild summiert, welches die möglichen Ergebniswerte größer 255 auch aufnehmen kann. Dann wird der tatsächliche Minimal- und Maximalwert festgestellt und dieses Intervall dann auf $[0, 255]$ skaliert, d.h. eine Kontrastnormierung durchgeführt.

Eine weitere mögliche Operation ist die **Bildsubtraktion**. Sie ist vielseitiger anwendbar als die Addition. Im Allgemeinen wird nur ein Bild von einem anderen Bild subtrahiert. Es können hierbei jedoch auch negative Werte auftreten, was neue Mechanismen bei der Ergebnisskalierung erfordert.

Absolutbetrag: Diese Methode verwendet den Absolutbetrag des Ergebnisses. Bei nur zwei Eingangsbildern ist keine weitere Operation nötig, um die Ergebniswerte auf das Intervall $[0, 255]$ zu skalieren. Bei mehr als zwei Bildern ist eine Division des Ergebniswerts durch Anzahl der Bilder minus eins erforderlich. Das Ergebnisbild enthält die Information, an welchen Stellen und wie stark sich die Eingangsbilder unterscheiden. Dieses Verfahren kommt industriell zum Einsatz, z.B. in Fällen bei denen die Anwesenheit bestimmter Bauteile auf optischem Weg geprüft werden soll, wobei nicht spezifiziert ist, ob diese Bauteile hell oder dunkel sind. Sie müssen sich lediglich vom Hintergrund unterscheiden.

Positives Clipping: Setzt man alle negativen Werte auf 0, so liefert das Ergebnisbild alle Stellen, an denen das erste Bild heller war, als das zweite, d.h. man stellt fest, ob zusätzliche helle Objekte vorhanden oder geforderte dunkle Objekte fehlen.

Negative Skalierung: Analog zum positiven Clipping kann man auch alle positiven Werte des Ergebnisbilds auf 0 setzen und dann den Absolutbetrag der negativen verwenden. In diesem Falle detektiert man die Anwesenheit zusätzlicher dunkler oder die Abwesenheit geforderter heller Objekte.

Lineare Skalierung: Bei dieser Methode wird zunächst die Differenz der Grauwerte der Eingangsbilder um ein volles Grauwertintervall angehoben. Damit verschiebt sich der theoretische Ergebnisbereich von $[-255, 255]$ auf $[0, 510]$. Danach werden alle Ergebniswerte halbiert, so dass man wieder in das gewünschte Intervall $[0, 255]$ kommt. Es gilt also folgende Transformationsgleichung:

$$o(x,y) = \frac{1}{2}(255 + i_1(x,y) - i_2(x,y)). \quad (6.15)$$

Diese Operation hat den Effekt, dass alle Punkte, an denen die Grauwerte beider Bilder identisch sind, einen mittleren Grauwert erhalten. Alle Punkte an denen das erste Bild heller ist als das zweite, werden heller als dieser mittlere Grauwert erscheinen, umgekehrt werden die Punkte bei denen das erste Bild dunkler als das zweite ist, dunkler als der mittlere Grauwert im Ergebnisbild sein. Es ist also nicht nur der Ort sichtbar, wo Unterschiede zwischen den beiden Bildern bestehen, sondern auch noch die Richtung.

Ein Spezialfall der Bildarithmetik ist die Hintergrundkompensation oder **Shading-Korrektur**. Sie dient zur Korrektur und Eliminierung systematischer Helligkeitsfehler. Systematische Helligkeitsfehler sind z.B. Randabschattungen, verursacht durch die Apertur des bei der Bildaufnahme verwendeten Objektivs, oder Beleuchtungsgradienten in Form einseitiger Ausleuchtung, die durch

punktförmige Lichtquellen verursacht werden können. Das Bild wird also von einem unerwünschten Hintergrundsignal überlagert, welches durch eine geeignete Operation entfernt werden soll. Dieser Sachverhalt läßt sich mathematisch folgendermaßen darstellen:

$$o(x, y) = f(x, y)b(x, y). \quad (6.16)$$

Hierbei ist $o(x, y)$ der Grauwert des Bilds an der Stelle (x, y) , $b(x, y)$ die wahre Helligkeit des Bilds an derselben Stelle und $f(x, y)$ eine nicht notwendigerweise analytisch darstellbare Funktion, die die Einflüsse der Beleuchtungsfehler abbildet. f wird auch Shadingmatrix genannt. Sind deren Einflüsse auf das Bild bekannt, so kann man das aufgezeichnete Bild korrigieren. Die Shadingmatrix wird durch Aufnahme eines Weissbilds $w(x, y)$ erzeugt, wobei die Helligkeit des Bilds durch Öffnen der Aperturblende des Objektivs oder durch Hochregeln des Lichts voll ausgeregt ist. Hieraus wird der mittlere Weisswert \bar{w} errechnet. Weiter wird bei geschlossener Aperturblende ein Schwarzbild $s(x, y)$ bestimmt, und der mittlere Schwarzwert \bar{s} als Offset abgeleitet. Das Weissbild enthält das Rauschen, die Inhomogenität aufgrund Objektivfehlern des Aufnahmesystems sowie den Ausleuchtungsfehler, aus dem Schwarzbild läßt sich das Rauschen ableiten. Bei der *multiplikativen* Shadingkorrektur werden die enthaltenen Fehler dann gemäß folgender Beziehung korrigiert:

$$o_m(x, y) = f(x, y)b(x, y) \frac{\bar{w}}{w(x, y)} - \bar{s}. \quad (6.17)$$

Diese Art der Korrektur ist jedoch sehr rechenaufwändig, man kann aber statt dessen meist eine *additive* Shadingkorrektur durchführen, die sonst nur bei Sensoren mit logarithmischer Beziehung zwischen Helligkeit und CCD-Spannung zwingend ist,

$$o_a(x, y) = f(x, y)b(x, y) - w(x, y) + \bar{w} - \bar{s}. \quad (6.18)$$

Diese Korrektur liefert nach [Dem98] auch bei linearen Sensoren meist ein für die weitere Verarbeitung ausreichendes Bild.

Lineare Filter

Lineare Filter stellen eine Klasse von Filtern dar, welche bei der Bildvorverarbeitung von TEM-Aufnahmen von Versetzungsstrukturen zum Einsatz kommen. Sie sind ein Beispiel für lokale Operationen. Die Umgebung von Pixeln, die zur Berechnung des aktuellen Bildpunkts herangezogen wird, nennt man auch Filterkern oder Filtermaske. Lineare Filter beinhalten eine gewichtete Summierung der Grauwerte innerhalb des meist rechteckigen Filterkerns, wobei der aktuelle Bildpunkt den Mittelpunkt dieser Nachbarschaft bildet:

$$o(x, y) = \frac{1}{s} \sum_{r=0}^{R-1} \sum_{c=0}^{C-1} f_{rc} i(x - dx + c, y - dy + r). \quad (6.19)$$

Hierbei bezeichnen dx und dy die Abstände zwischen Zielpunkt und linker oberer Ecke der Nachbarschaft, welche aus R Zeilen und C Spalten besteht. r und c sind entsprechende Zeilenindizes des Filterkerns. Jeder Punkt innerhalb des Rechtecks wird also mit dem zugehörigen Filterkoeffizienten f_{rc} gewichtet und aufsummiert. Das Ergebnis wird noch mit dem Faktor s skaliert, der oft die Summe aller Filterkoeffizienten ist, damit der mittlere Grauwert des Bilds erhalten bleibt.

Die Implementation linearer Filter dient meist dem Glätten von Bildern, d.h. Rauschen aber auch feine Details sollen unterdrückt werden. Glättungfilter beruhen auf Mittelwertbildungen. Da sich

das Rauschen in kleinen zufälligen Veränderungen des Grauwerts einzelner Punkte äußert, kann es durch Mitteln der Helligkeit im Filterkern unterdrückt werden. Die Helligkeit der die Störung umgebenden Pixel wird sich durch die Filterung zwar ebenfalls ein wenig verändern, die Helligkeit des Störpixels wird sich jedoch der Umgebungshelligkeit anpassen, was meist die deutlichere Veränderung sein wird. Nachteil der Glättungsoperation durch Mittelwertbildung ist zudem eine ausgeprägte Kantenumschärfe. Sind im Eingangsbild scharfe Kanten vorhanden, so besteht das Ausgangsbild in diesem Bereich aus mehreren Linien, deren Helligkeit analog zur Kantenrichtung abnimmt. Weiterhin verschmelzen Linien, deren Abstand gerade der Breite des Filterkerns entspricht, vollständig.

Medianfilter

Um diese Nachteile zu vermeiden, kann man den *Median* verwenden. Dieser Begriff stammt aus der Statistik und er bezeichnet den in der Mitte einer geordneten Menge liegenden Wert. Ist also $G = \{g_1 \leq g_2 \leq \dots \leq g_n\}$ eine geordnete Menge von Grauwerten einer Nachbarschaft, so ist der Median definiert als

$$\tilde{g} = \begin{cases} g_{\frac{n+1}{2}}, & n \text{ ungerade} \\ \frac{g_{\frac{n}{2}} + g_{\frac{n+1}{2}}}{2}, & n \text{ gerade.} \end{cases} \quad (6.20)$$

Der Median ist ein Spezialfall sogenannter Quantile. Ein Quantil x_q ist derart definiert, dass q Werte einer diskreten Folge kleiner oder gleich q sein müssen. Nach dieser Definition ist der Median ein $x_{\frac{1}{2}}$ -Quantil. Die Medianfilterung ist nach [Tya81] eine Glättungsmethode, die das Verwischen an Kanten reduziert. Der Median der Grauwerte wird durch Ausreißer in der Nachbarschaft nicht beeinflusst, so dass punktförmige Störungen relativ gut eliminiert werden können. Der Nachteil des Verschwindens dünner Linien bleibt jedoch bestehen. Ein Weg, dies zu verhindern, ist die Verwendung einer speziellen Anordnung des Filterkerns. Sollen also horizontale und vertikale Linien erhalten bleiben, so sollte der Filterkern aus Abbildung 6.14 benutzt werden. Die Lage des Bezugspunkts wird durch ein Kreuz beschrieben.

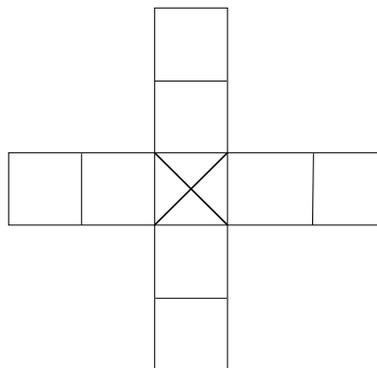


Abbildung 6.14: Filterkern für Medianfilter, der horizontale und vertikale Linien erhält.

Kantenfilter

Kantenfilter arbeiten nach dem Prinzip der numerischen Differenzierung und heben Unterschiede im Bild entlang bestimmter Richtungen hervor. Eine *Kante* beschreibt die Grauwertänderung

benachbarter Bildregionen und ist pixelorientiert. Die Bildpunkte einer Kante können durch Gradientenfilter ermittelt werden. Der Gradient einer Funktion $B(x,y)$ ist definiert als stetige Funktion zweier Veränderlicher und zwar in x - und y -Richtung:

$$B'_x(x,y) = \frac{\partial B(x,y)}{\partial x} \quad \text{und} \quad B'_y(x,y) = \frac{\partial B(x,y)}{\partial y}. \quad (6.21)$$

Da Digitalbilder als diskrete Matrizen darstellbar sind, interessiert an dieser Stelle nur die diskrete Ableitung, die allgemein durch Differenzengleichungen beschrieben werden kann. Werden die partiellen Ableitungen in Gleichung (6.21) durch Differenzen zwischen zwei benachbarten Bildpunkten in x - und y -Richtung ersetzt, so ist (6.21) darstellbar als

$$\frac{\partial B(x,y)}{\partial x} \approx \Delta_x B(x,y) = \frac{B(x,y) - B(x - \Delta x, y)}{\Delta x} \quad (6.22)$$

und

$$\frac{\partial B(x,y)}{\partial y} \approx \Delta_y B(x,y) = \frac{B(x,y) - B(x, y - \Delta y)}{\Delta y}. \quad (6.23)$$

$\Delta_x B(x,y)$ und $\Delta_y B(x,y)$ sind die diskreten Ableitungen oder Gradienten in x - und y -Richtung. Für den diskreten Fall bekommt man mit $\Delta x = 1$ und $\Delta y = 1$ als Ableitung in x - und y -Richtung

$$\begin{aligned} \Delta_x B(x,y) &= B(x,y) - B(x-1,y), \\ \Delta_y B(x,y) &= B(x,y) - B(x,y-1). \end{aligned} \quad (6.24)$$

Für die Gradienten $\Delta_x B(x,y)$ und $\Delta_y B(x,y)$ können die Faltungsmatrizen C_x und C_y angegeben werden:

$$C_x = \begin{vmatrix} -1 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{und} \quad C_y = \begin{vmatrix} -1 \\ 1 \end{vmatrix}. \quad (6.25)$$

Die Ableitung in einer bestimmten Richtung Θ kann nach

$$\Delta_\Theta B(x,y) = \Delta_x B(x,y) \cos \Theta + \Delta_y B(x,y) \sin \Theta \quad (6.26)$$

aus der horizontalen und vertikalen Ableitung berechnet werden.

Die Herstellung eines Gradientenbilds erfordert für jeden Pixel die Differenzierung in zwei orthogonalen Richtungen. Dies sind meist die x - und y -Richtungen. Jedem Pixel werden also zwei Gradientenwerte, sogenannte Vektorgradienten, zugeordnet. Die in Gleichung (6.25) definierten Matrizen haben den Nachteil, keinen symmetrischen Bezugspunkt zu haben, welcher behoben werden kann durch

$$C_x = \begin{vmatrix} 1 & 0 & -1 \end{vmatrix} \quad \text{und} \quad C_y = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{vmatrix}. \quad (6.27)$$

Soll zudem noch ein gewisses Rauschen eliminiert werden, so finden vor allem 3×3 Vektorgradienten Verwendung. So hat der *Prewitt-Operator* folgenden Aufbau:

$$C_{P_x} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \end{vmatrix} \quad \text{und} \quad C_{P_y} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{vmatrix}. \quad (6.28)$$

Die *Sobel-Methode* der Kantenextraktion verwendet eine Reihe aufeinander abgestimmter Filteroperationen, die Kanten in verschiedenen Richtungen extrahieren. Im Vergleich zum Prewitt-Operator haben die mittleren Matrixwerte eine höhere Gewichtung:

$$C_{S_x} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad C_{S_y} = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & -2 & -1 \end{vmatrix}, \quad (6.29)$$

$$C_{S_{xy}} = \begin{vmatrix} 0 & -1 & -2 \\ 1 & 0 & -1 \\ 2 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad C_{S_{yx}} = \begin{vmatrix} -2 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{vmatrix}. \quad (6.30)$$

Prewitt und Sobel-Operator wirken am stärksten auf horizontale und vertikale (Gleichung (6.29)), bzw. diagonale Grauwertkanten (Gleichung (6.30)). Wenn alle Kantenrichtungen festgestellt werden sollen, so verknüpft man die einzelnen Ergebnisbilder nachträglich mit einem Maximumoperator, welcher punktweise den Maximalwert der Grauwerte als Ergebniswert liefert. Da alle Kanten hell hervortreten, sind sie im Maximumbild enthalten.

Eine weitere Methode zur Kantenextraktion verwendet Ableitungen zweiter Ordnung. Die Summe der beiden partiellen Ableitungen zweiter Ordnung nach x und y wird als *Laplace-Operator* bezeichnet:

$$\Delta^2 B(x, y) = \frac{\partial^2 B(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 B(x, y)}{\partial y^2}.$$

$\Delta^2 B(x, y)$ ist der Laplace-Operator für den diskreten Fall, der bei digitalen Bildmatrizen vorliegt. Im Gegensatz zum Prewitt- oder Sobel-Operator ist der Laplace-Operator rotationsinvariant. Die digitale Realisierung lautet:

$$\begin{aligned} \Delta^2 B(x, y) &= \Delta_x^2 B(x, y) + \Delta_y^2 B(x, y) \\ &= B(x+1, y) + B(x-1, y) + B(x, y+1) + B(x, y-1) - 4B(x, y). \end{aligned}$$

Daraus läßt sich die Filtermatrix eines Laplace-Filters in einer 4er-Nachbarschaft ableiten:

$$C_L = \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}. \quad (6.31)$$

Mit einem Laplace-Filter werden strukturreiche Bereiche hervorgehoben und weniger strukturreiche Bereiche unterdrückt.

Hochpassfilter

Sollen bei Bildern Strukturen untersucht werden, die sich periodisch wiederholen, so können diese Strukturen durch ihr Schwingungsverhalten, d.h. durch die Länge einer Periode oder die Anzahl der Schwingungen pro Einheitslänge charakterisiert werden. Bei Bildern kommen hier die *Wellenlänge* λ (Einheit: Länge in Pixel) und die *Ortsfrequenz* f (Einheit: Anzahl der Wellen pro Pixel) zur Anwendung. Da keine vollständige Schwingung auf einem einzelnen Pixel möglich ist, bleibt f immer kleiner als eins. Wellenlänge und Frequenz stehen in der bekannten Beziehung zueinander:

$$f = \frac{1}{\lambda}.$$

Intuitiv klar ist, dass die maximale Wellenlänge gleich der Bildgröße ist. Das *Abtasttheorem* [Abm94], [Jae89] besagt, dass eine periodische Struktur nur dann richtig rekonstruiert werden kann, wenn die kleinste Wellenlänge mindestens zweimal abgetastet wird. Somit werden die minimale Wellenlänge und die korrespondierende maximale Ortsfrequenz durch das Abtasttheorem bestimmt. Bezeichnet f_s die Abtastfrequenz, so muss gelten:

$$\lambda_{min} = 2 \text{ Pixel} \quad \text{und} \quad f_{max} = \frac{1}{2} f_s.$$

In einem Bild werden, begrenzt durch die minimale und maximale Wellenlänge, viele verschiedene Werte für λ auftreten. Die Menge der in einem Bild auftretenden Wellenlängen, bzw. der korrespondierenden Ortsfrequenzen, bezeichnet man als *Spektrum* des Bilds. Dessen Berechnung erfolgt mit Hilfe einer zweidimensionalen *Fouriertransformation*. Hierbei wird aus der Ortsfunktion $b(x, y)$, d.h. der Darstellungsmatrix des Eingangsbilds, die Ortsfrequenzfunktion $S(f_x, f_y)$ berechnet. Sie läßt sich unter Verwendung der komplexwertigen Exponentialfunktion darstellen als

$$S(f_x, f_y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} b(x, y) e^{-i2\pi(f_x x + f_y y)} dx dy.$$

Eine hinreichende Bedingung für die Existenz der Spektralfunktion $S(f_x, f_y)$ ist die absolute Summierbarkeit der Bildfunktion $b(x, y)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |b(x, y)| dx dy < \infty.$$

Die Rücktransformation des Fourierbilds in den Ortsraum heißt *inverse zweidimensionale Fouriertransformation*:

$$b(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} S(f_x, f_y) e^{i2\pi(f_x x + f_y y)} df_x df_y.$$

Obwohl beide Gleichungen für reelle sowie komplexe Funktionen $b(x, y)$ gelten, sind die betrachteten Funktionen meist reell. Ein Beispiel ist die Intensitätsverteilung eines Bilds. Die Ortsfrequenzfunktion $S(f_x, f_y)$ ist dagegen im Allgemeinen eine komplexwertige Funktion, die man in Real- und Imaginärteil zerlegen kann:

$$S(f_x, f_y) = \Re\{S(f_x, f_y)\} + i\Im\{S(f_x, f_y)\}.$$

Die graphische Darstellung der Ortsfrequenzfunktion erfolgt mittels dimensionsloser normierter Größen. So läßt sich die Abtastfrequenz in x - und y -Richtung unabhängig voneinander variieren, so dass sich die beiden Abtastfrequenzen f_{sx} und f_{sy} ergeben. Nach Normierung und unter Berücksichtigung des Abtasttheorems ergibt sich schließlich

$$\frac{f_y}{f_{sy}} \leq 0.5 \quad \text{und} \quad \frac{f_x}{f_{sx}} \leq 0.5.$$

Abbildung 6.15 zeigt die prinzipielle Darstellungsweise von Ortsfrequenzfunktionen.

Eine Hochpassfilterung als Anwendung der Fouriertransformation läßt hohe Bildfrequenzen unverändert, während tiefere Bildfrequenzen unterdrückt werden. Hochpassfilter lassen sich beispielsweise zur Extraktion von Kanten verwenden, da dort rasche Übergänge zwischen verschiedenen Grauwerten vorliegen. Der Laplace-Filter aus Gleichung (6.31) hat ebenfalls Hochpasseigenschaften, weil niedrige Frequenzen unterdrückt werden. Analog zu den beschriebenen Methoden zur Hochpassfilterung lassen sich auch andere Frequenzen ausfiltern. Typische weitere Filter dieser Art sind Tiefpassfilter und Bandpassfilter, welche tiefe Frequenzen bzw. bestimmte zusammenhängende Frequenzbereiche passieren lassen.

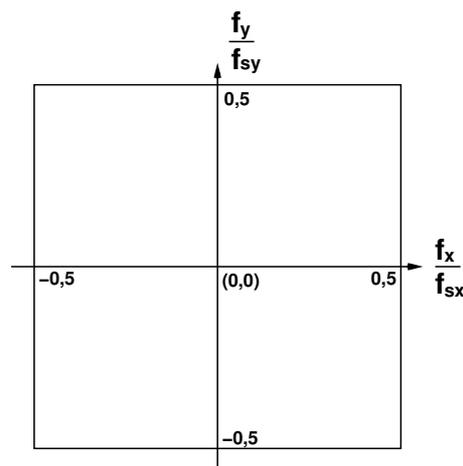


Abbildung 6.15: Prinzipielle Darstellungsweise von Ortsfrequenzfunktionen.

6.3.3 Segmentierung

Unter *Segmentierung* versteht man die Zusammenfassung von Bildpunkten mit ähnlichen Eigenschaften in Gruppen, sogenannten Segmenten. Die Trennung und Unterscheidung von Hintergrund und Objekten, die zur weiteren Ver- und Bearbeitung benötigt werden, ist das wichtigste Beispiel dieses Prozessschritts. Im Vergleich zu den weiteren Schritten des gesamten Bildverarbeitungssystems kommt der Segmentierung eine herausragende Bedeutung zu, weil man die aus dem Bildverband herausgelösten Objekte nun getrennt vom Rest bearbeiten oder vermessen kann. Die vorausgehenden Operationen dienen letztlich nur dazu, in eine bessere Ausgangsposition für die Segmentierung zu gelangen.

Man spricht im Falle der Unterscheidung zwischen Objekt- und Hintergrundpixel von einer Pixelklassifikation. Ein wichtiges Merkmal hierfür ist der Grauwert eines Pixels, es eignen sich jedoch auch lokale oder spektrale Eigenschaften als Unterscheidungsmerkmale der Segmentierung. Das Ergebnis der Operation ist meist ein Binärbild, in dem die Objektpunkte den Wert 1 und die Hintergrundpunkte den Wert 0 haben. Zur Darstellung von Binärbildern am Bildschirm eines Bildverarbeitungssystems, welches alle Bilder als Grauwertbilder abbildet, werden die Werte 0 und 1 häufig durch 0 und 255 ersetzt, da sich die Grauwerte 0 und 1 nur minimal unterscheiden.

Einfacher Schwellwert

Dieses Verfahren klassifiziert die Bildpunkte ausschließlich aufgrund ihrer Grauwerteigenschaft. Die Nachbarschaft der Pixel wird nicht berücksichtigt. Bildpunkte mit Grauwerten oberhalb einer Schwelle t sind Objektpunkte, unterhalb von t Hintergrundpunkte:

$$o(x,y) = \begin{cases} 1, & i(x,y) \geq T \\ 0, & i(x,y) < T, \end{cases} \quad (6.32)$$

für Schwellwerte $T \in \{0, \dots, 255\}$. Bilder heller Objekte auf dunklem Hintergrund, bzw. dunkler Objekte vor hellem Hintergrund lassen sich hierdurch einfach binarisieren. Probleme der Segmentierung bei diesem Verfahren treten immer dann auf, wenn relevante Bildbereiche unterschiedliche Helligkeitseigenschaften aufweisen. Hierzu zählen Bilder mit lokal unterschiedlicher Beleuchtung

und Aufnahmen, bei denen das gesuchte Objekt in verschiedenen Bereichen auf unterschiedliche Weise mit dem Hintergrund kontrastiert. TEM-Aufnahmen weisen häufig diesen Effekt auf. Dies ist durch die Probenpräparation bedingt, die eine unterschiedlich dicke Probe zurücklässt, welche bei Durchstrahlung zu unterschiedlich hellen Hintergründen im Bild führt. Durch die fehlende Systematik lassen sich diese jedoch nicht mit Hilfe der Shading-Korrektur beheben.

Bimodalitätsanalyse zur dynamischen Schwellwertbestimmung

Eine etwas anspruchsvollere Methode der Schwellwertbestimmung verwendet das Histogramm des Eingangsbilds. Sie basiert auf der Analyse der Form des Histogramms. Wenn das Bild aus Objektpixeln ähnlichen Grauwerts besteht, welcher sich zudem vom Grauwertniveau des Hintergrunds unterscheidet, so ist das zugehörige Histogramm bimodal, d.h. die Objektpixel bilden einen Peak, während die Hintergrundpixel einen zweiten Peak bilden. Ein solches Histogramm zeigt Abbildung 6.16. Eine typische Vorgehensweise ist, den Schwellwert in das Minimum zwischen den beiden Maxima zu legen. Um zu verhindern, dass zwei lokale Maxima desselben Peaks gefunden werden, werden Mindestabstände der Grauwerte gefordert, oder es werden Techniken zur Histogrammglättung verwendet. Bei TEM-Aufnahmen von Versetzungsstrukturen kann dieses Verfahren

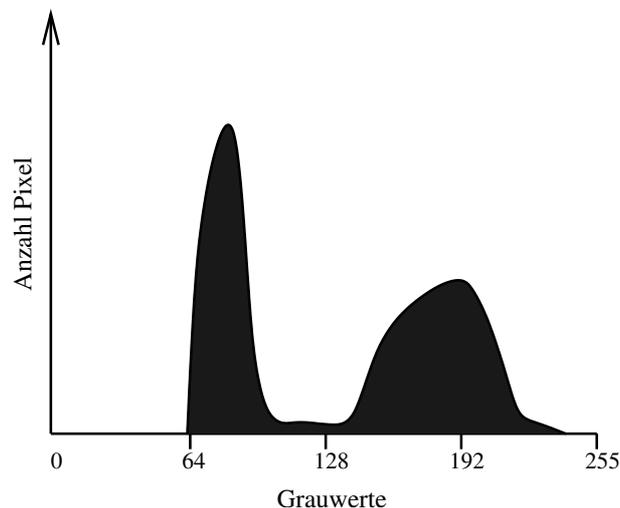


Abbildung 6.16: Bimodales Histogramm

nur durchgeführt werden, nachdem eine Vorverarbeitung der Bilder erfolgt ist. Diese hat dann die unterschiedliche Hintergrundausschleuchtung kompensiert und Versetzungslinien mit Hilfe von Kantentfiltern stärker hervortreten lassen.

Berechnung eines optimalen Schwellwerts

Methoden, die das Histogramm als gewichtete Summe von normalverteilten Wahrscheinlichkeitsdichten approximieren, stellen eine weitere Methode dar, die *optimal thresholding* genannt wird. Grauwerte sind innerhalb zusammengehöriger Objekte nicht konstant, sondern unterliegen statistischen Schwankungen. Ihre Verteilung lässt sich nach [Gon92] als eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion beschreiben. Es gibt eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $p_O(z)$ für die Grauwerte z der

Objekte und eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $p_H(z)$ für die Grauwerte z des Hintergrunds. In einer guten Näherung wählt man hierfür die Gaußsche Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $p_i(z)$ mit

$$p_i(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left(-\frac{(z-\mu_i)^2}{2\sigma_i^2}\right), \quad i = O, H. \quad (6.33)$$

Hierbei sind μ_i die Mittelwerte und σ_i die Standardabweichungen der Grauwerte z . Bezeichnet P_H die a priori Wahrscheinlichkeit für den Hintergrund und P_O die a priori Wahrscheinlichkeit für das Objekt, so gilt

$$P_O(z) + P_H(z) = 1, \quad (6.34)$$

denn ein Pixel ist entweder Objektbestandteil oder er zählt zum Hintergrund. Die Grauwertverteilung des gesamten Bilds ist dann

$$p(z) = P_O \cdot p_O(z) + P_H \cdot p_H(z). \quad (6.35)$$

Die Klassifizierung soll nun alle Bildpunkte mit Grauwerten unterhalb einer Schwelle t als Hintergrund und oberhalb von t als Objektpunkte einordnen. Es ergibt sich jedoch ein Segmentierungsfehler, da sich die beiden Wahrscheinlichkeitsverteilungen zum Teil überlappen. So entsteht ein Segmentierungsfehler $E_H(t)$, falls ein Objektpunkt fälschlicherweise als Hintergrund klassifiziert wird:

$$E_H(t) = \int_{-\infty}^t p_O(z) dz. \quad (6.36)$$

Analog entsteht ein Segmentierungsfehler $E_O(t)$, wenn ein Hintergrundpunkt als zugehörig zum Objekt klassifiziert wird:

$$E_O(t) = \int_t^{\infty} p_H(z) dz. \quad (6.37)$$

Damit ergibt sich der Gesamtfehler als Summe dieser Einzelfehler zu

$$E(t) = P_H \cdot E_O(t) + P_O \cdot E_H(t). \quad (6.38)$$

Es gilt nun, den Schwellwert zu finden, bei dem dieser Fehler minimal wird. Hierzu müssen die Gleichungen (6.33) bis (6.37) in Gleichung (6.38) eingesetzt werden, die entstandene Gleichung nach t differenziert und die Ableitung gleich Null gesetzt werden. Das Resultat ist eine quadratische Gleichung für t :

$$(\sigma_H^2 - \sigma_O^2)t^2 + 2(\mu_H\sigma_O^2 - \mu_O\sigma_H^2)t + \sigma_H^2\mu_O^2 - \sigma_O^2\mu_H^2 + 2\sigma_H^2\mu_O^2 \ln\left(\frac{\sigma_O P_H}{\sigma_H P_O}\right) = 0. \quad (6.39)$$

Es existieren also zwei Schwellwerte, die für eine optimale Segmentierung des Bilds in Hintergrund und Objekt sorgen. Nimmt man vereinfachend an, dass die Streuungen der Verteilungen gleich sind, $\sigma_O = \sigma_H = \sigma$, so liegt die optimale Schwelle t bei

$$t = \frac{\mu_O + \mu_H}{2} - \frac{\sigma^2}{\mu_O - \mu_H} \ln \frac{P_O}{P_H}. \quad (6.40)$$

Sind die Parameter der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(z)$ nicht bekannt, so können diese nach [Wah84] ausgehend vom normierten Histogramm $h(z)$ mit Hilfe numerischer Optimierungsverfahren berechnet werden:

$$E = \sum_{z=z_u}^{z=z_o} (p(z) - h(z)) \rightarrow \min. \quad (6.41)$$

Hierbei sind z_u der unterste und z_o der oberste Grauwert. Sind die Verteilungen keinesfalls zu ermitteln, so ist man auf Schätzungen angewiesen.

Lokaler Schwellwert

In Fällen, bei denen eine Shadingkorrektur nicht möglich ist, weil beispielsweise kein Referenzbild vorhanden ist, oder das Bild keinen ebenen Hintergrund besitzt, so kann man ein Segmentierungsverfahren verwenden, bei dem ein lokaler Schwellwert berechnet wird. Die obigen Schwellwertverfahren benutzen eine globale Schwelle für das gesamte Bild. Um lokale Schwellwerte zu berechnen, wird das Bild in kleinere lokale Regionen unterteilt, in denen dann ein lokaler Schwellwert durch das beschriebene Optimierungsverfahren oder durch Bimodalitätsanalyse ermittelt wird. Die Anzahl der lokalen Regionen ist hierbei variabel. Ein häufig verwendeter Wert ist 64. Dieser stellt einen guten Kompromiss zwischen Rechenaufwand und zu großen Regionen dar. Im Extremfall kann jedoch auch für jeden Bildpunkt eine eigene Schwelle errechnet werden, die aus einer bestimmten Umgebung des Punkts abgeleitet wird.

Mathematische Morphologie

Die Weiterverarbeitung von Binärbildern erfolgt mittels Methoden der mathematischen Morphologie. Diese ist vor ca. 30 Jahren als relativ eigenständiges Gebiet der Bildverarbeitung entstanden. Sie basiert auf den Objekteigenschaften Geometrie und Form, ihre Operationen vereinfachen Bilder und Objekte, lassen jedoch ihre Haupteigenschaften unverändert. Diese Methoden können prinzipiell auf alle Arten von Bildern angewendet werden, in dieser Arbeit steht jedoch ihr Einsatz bei Binärbildern im Vordergrund. Für das Anwenden einer morphologischen Transformation ist wiederum die Festlegung und Kenntnis einer Nachbarschaft nötig, die in der Morphologie auch als *strukturierendes Element* bezeichnet wird. Für die Morphologie typische strukturierende Elemente zeigt Abbildung 6.17. Der Bezugspunkt ist nicht notwendigerweise Bestandteil des strukturierenden

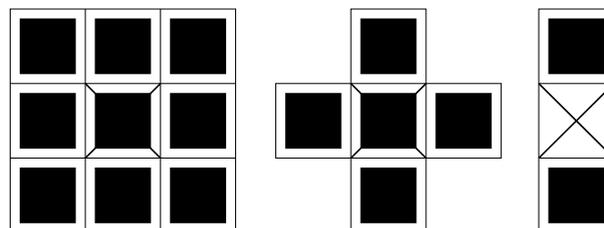


Abbildung 6.17: Typische strukturierende Elemente und Bezugspunkt.

Elements, wie der rechte Teil in Abbildung 6.17 zeigt. Analog zur Anwendung eines Filters bedeutet die Anwendung einer morphologischen Operation auf ein Bild, dass das strukturierende Element systematisch Pixel für Pixel über das Bild verschoben wird. An jeder aktuellen Position wird die jeweilige Operation durchgeführt und der Ergebniswert als neuer Wert der aktuellen Position im Ergebnisbild gespeichert. Die am häufigsten verwendeten morphologischen Operationen sind:

Medianfilter: Der Medianfilter für Grauwertbilder wurde auf Seite 59 eingeführt. (x_a, y_a) bezeichnet die aktuelle Position im Eingangsbild $i(x, y)$ und B die Schnittmenge der Pixel von strukturierendem Element und Eingangsbild. Der Bezugspunkt des strukturierenden Elements befindet sich an der aktuellen Position (x_a, y_a) . Der Medianfilter verwendet als Ergebniswert wieder den Median aller Werte der Pixel, die sich in der Schnittmenge B von strukturierendem Element und Eingangsbild befinden. B muss zur Medianfilterung noch geordnet werden.

Bei Binärbildern entsteht eine Folge von Nullen gefolgt von einer Folge von Einsen. Der Median ist dann der Wert des $\frac{n+1}{2}$ -ten Pixels, falls n ungerade ist, oder das arithmetische Mittel des $\frac{n}{2}$ -ten und $\frac{n+1}{2}$ -ten Pixels bei geradem n .

Erosion: Wiederum bezeichnet (x_a, y_a) die aktuelle Position im Eingangsbild und B obige Schnittmenge. Der Bezugspunkt des strukturierenden Elements befindet sich wieder an der aktuellen Position (x_a, y_a) . Die Erosion verwendet als Ergebniswert das Minimum aller Werte der Pixel, die sich in der Schnittmenge B von strukturierendem Element und Eingangsbild befinden. Die mathematische Beschreibung hiervon lautet:

$$g_e(x_a, y_a) = \min\{i(x, y) | (x, y) \in B\}. \quad (6.42)$$

Der Name Erosion ist aus dem Effekt abgeleitet, dass helle Strukturen verdünnt werden. Sobald auch nur ein Punkt in der Menge B schwarz ist, wird der neue Wert des Zentralpunkts ebenfalls schwarz. Ein flächiges helles Objekt wird also an seinen Rändern rundherum abgetragen, also erodiert. Umgekehrt kann man auch sagen, dass die Erosion dunkle Strukturen verdickt.

Dilatation: Die Dilatation ist das Maximum aller Pixelwerte in B :

$$g_d(x_a, y_a) = \max\{i(x, y) | (x, y) \in B\}. \quad (6.43)$$

Das Resultat ist eine Verbreiterung heller und eine Verdünnung dunkler Strukturen. Die Dilatation ist von der Definition das Gegenteil der Erosion, beide Operationen sind jedoch nicht umkehrbar, d.h. man kann eine vorangegangene Erosion durch anschließende Dilatation nicht wieder rückgängig machen. Die Aneinanderreihung dieser Operationen ergibt die folgenden neuen morphologischen Operationen, Opening und Closing.

Opening: Erosion gefolgt von einer Dilatation wird Opening genannt. Das strukturierende Element ist bei beiden Vorgängen gleich. Die Erosion schließt Lücken in dunklen Strukturen, anschließend macht die Dilatation die Verdickung dunkler Objekte wieder rückgängig. Die bei der einzeln angewendeten Erosion auftretende Vergrößerung der Fläche dunkler Objekte wird durch die anschließende Dilatation aufgehoben. Sind während der Erosion Lücken in dunklen Strukturen vollständig geschlossen worden, so dass kein heller Punkt übrig geblieben ist, etwa weil ihre Fläche im Verhältnis zum Filteroperator, d.h. der obigen Pixelschnittmenge B , klein war, so können sie durch die Dilatation nicht wieder geöffnet werden. Die Bezeichnung *Opening* rührt daher, dass dünne helle Strukturen zerlegt werden können, wobei Objektmerkmale wie Fläche oder die Grunddimensionen erhalten bleiben. Das Ergebnis ist also eine vereinfachte und weniger detailreiche Version des Eingangsbilds.

Closing: Genau umgekehrt dazu erfolgt das Closing: Einer Dilatation folgt eine Erosion, wobei wiederum das gleiche strukturierende Element verwendet wird. Bei dieser Operation werden Lücken in hellen Objekten ohne Veränderung der Objektfläche geschlossen.

Bei der Analyse und Bearbeitung von TEM-Aufnahmen in Kapitel 6.4 werden die beiden letzteren Verfahren in Abhängigkeit des zuvor eingesetzten Kantensfilters zum Einsatz kommen.

Skelettierung

Ein weiterer Verarbeitungsschritt von Binärbildern ist häufig ein weiteres Verdünnen der Objektlinien, so dass nur eine ein Pixel breite Linie übrig bleibt, die in der Mitte des ursprünglichen breiteren Objektes verläuft. Dieser Vorgang wird als Skelettierung bezeichnet. Dieser Schritt bildet den Abschluss und das eigentliche Ziel der Bildverarbeitungsschritte bei TEM-Bildern von Versetzungsstrukturen, denn nach den vorangegangenen Schritten mit anschließender Skelettierung verläuft die resultierende Linie in der Mitte jeder Struktur, die eine Versetzungslinie darstellt. Mit diesen Skelettlinien kann dann eine quantitative Auswertung erfolgen.

Die Skelettlinie einer binär dargestellten Fläche ist durch gewisse Forderungen festgelegt, die jedoch nicht als exakte mathematische Funktionen aufgefasst werden können.

- Die Skelettlinie soll nur einen Bildpunkt breit sein.
- Die Skelettlinie soll ungefähr in der Mitte des Objektes liegen.
- Die ursprüngliche Form des Objektes soll im Skelett erkennbar sein, das Skelett einer einfach zusammenhängenden Fläche darf also nicht in mehrere Teile zerfallen.
- Der Skelettierungsalgorithmus soll unempfindlich gegenüber kleinen Störungen am Rand des Objekts sein, also wenig Verästelungen am Rand erzeugen.
- Der Algorithmus soll stabil sein, d.h. nach einer bestimmten Anzahl von Iterationen sollen sich keine Änderungen mehr ergeben.

Die Operation kann nicht mittels reiner Erosion erreicht werden, denn Bildpunkte dürfen nur dann entfernt werden, wenn sie keine Skelettpunkte sind. Die Implementation von Skelettierungsalgorithmen geht also vom Binärbild aus und entscheidet für alle Objektpixel, ob sie entfernt werden können oder nicht. Die Entscheidung, ob sie entfernt, also dem Hintergrund zugerechnet werden können oder weiterhin zum Objekt zugehörig bleiben, wird anhand von Umgebungsmasken entschieden. Hierzu sind acht verschiedene Masken nötig, die in Abbildung 6.18 gezeigt sind. Diese Masken be-

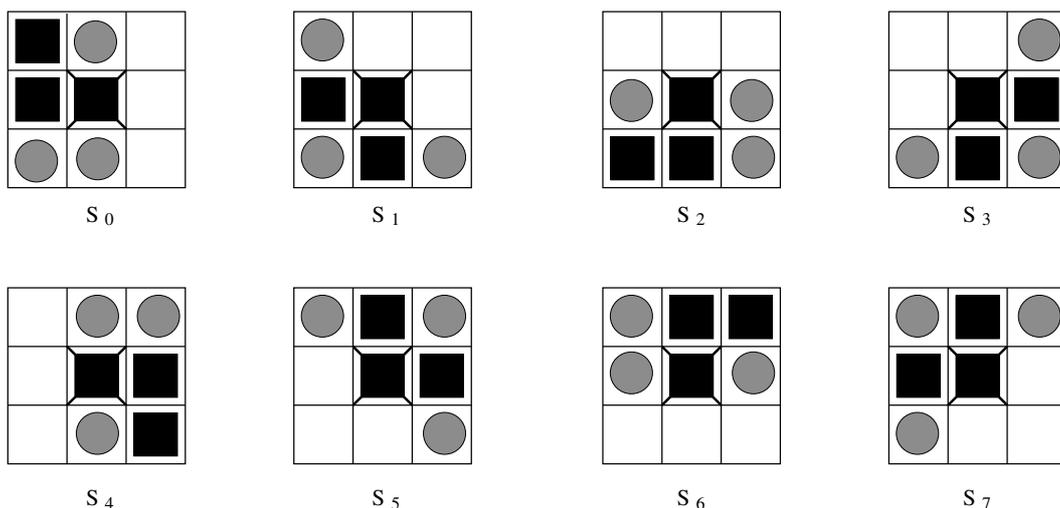


Abbildung 6.18: Strukturierende Elemente und Bezugspunkte zur Skelettierung

schreiben Konstellationen von Objekt- und Hintergrundpixeln, bei denen jeweils der mittlere Pixel, der sich auf der gerade aktuellen Position befindet, aus dem Objekt entfernt und dem Hintergrund zugerechnet werden darf. Die Symbole der verschiedenen Anordnungen haben folgende Bedeutung:

Leerstelle: Position ist mit Hintergrundpixel besetzt.

Quadrat: Position ist mit Objektpixel besetzt.

Kreis: Position kann beliebig besetzt sein, d.h. es ist egal, ob der Pixel ein Objekt- oder Hintergrundpixel ist.

Alle Pixel des zu skelettierenden Bilds werden also sequentiell mit den acht Umgebungsmasken S_0, \dots, S_7 überdeckt und das mittlere Pixel entfernt, falls die Maskenanordnung erfüllt wird. Die Reihenfolge der Operationen hierbei muss nicht notwendigerweise von 0 bis 7 verlaufen, nach [Abm94] ist es sogar vorteilhaft, wenn man jeweils gegenüberliegende Richtungen hintereinander ausführt. Eine sinnvolle Reihenfolge wäre demnach also

$$S_0 \rightarrow S_4 \rightarrow S_2 \rightarrow S_6 \rightarrow S_1 \rightarrow S_5 \rightarrow S_3 \rightarrow S_7.$$

Sind alle Pixel des Eingangsbilds durchlaufen, beginnt der Vorgang von vorne. Es werden so viele Iterationen durchgeführt, bis in einem Durchlauf keine Bildpunkte mehr entfernt worden sind. Das Ergebnisbild enthält dann das Skelett.

6.4 Automatische Bestimmung der Versetzungsdichte

Die Anwendung der beschriebenen Methoden zur Bildverarbeitung hat das Ziel, einen optimalen Ausgangspunkt für eine quantitative Auswertung der TEM-Aufnahmen zu schaffen. Wesentliches Merkmal hierzu ist die Versetzungsdichte. Sie ist ein Maß für die Gesamtlänge aller Versetzungen in einem bestimmten Volumen. Ihre Einheit ist also $[\frac{m}{m^3}] = [\frac{1}{m^2}]$. Häufig findet man die Angabe in $[\frac{1}{cm^2}]$. Die Bestimmung kann manuell erfolgen, ein Ziel dieser Arbeit war jedoch ihre automatische Ermittlung.

6.4.1 Methoden

Zur Bestimmung der Versetzungsdichte aus der TEM-Aufnahme können nach [Mar95] verschiedene Verfahren zum Einsatz kommen. Beim *Linienschnittverfahren nach Ham* [Ham61], [Keh62] und [Keh63] werden, nachdem ein Gitternetz über die Aufnahme gelegt worden ist, die Schnittpunkte von Gitternetzlinien und Versetzungen berechnet. Diese Vorgehensweise lehnt sich an die Lösung des *Nadelproblems von Buffon* an, welche in [Smi53] beschrieben ist. Zur Bestimmung der Versetzungsdichte mittels Linienschnittverfahrens müssen dann in zwei aufeinanderfolgenden Schritten die Summen der Abstände von Schnittpunkten mit senkrechten und waagerechten Gitterlinien ermittelt werden. Hierbei bezeichnen n_1 und l_1 die Anzahl, bzw. Abstandssumme der Schnittpunkte von Versetzungen mit waagerechten Gitterlinien, sowie n_2 und l_2 Anzahl und Abstandssumme von Versetzungsschnittpunkten mit senkrechten Gitterlinien. In Abhängigkeit der Dicke t der verwendeten Folie berechnet sich die Versetzungsdichte ρ_H nach Ham mittels

$$\rho_H = M \frac{\frac{n_1}{l_1} + \frac{n_2}{l_2}}{t}. \quad (6.44)$$

Beugungsvektor	Unsichtbare Versetzungen [%]	Korrekturfaktor
111	50,0	2,0
200	33,3	1,5
220	33,3	1,5
311	16,7	1,2

Tabelle 6.2: Korrekturfaktor M bei der elektromikroskopischen Abbildung von Versetzungen im kfz-Gitter.

M bezeichnet einen beugungsspezifischen Korrekturfaktor, der sich gemäß Tabelle 6.2 je nach verwendetem Beugungsvektor ergibt. Bei TEM-Aufnahmen bleibt aufgrund der Unsichtbarkeitsbedingungen aus Gleichungen (6.3), (6.4) und (6.5) ein Teil der in der Probe vorhandenen Versetzungen unsichtbar.

Die Methode zur Berechnung der Versetzungsdichte nach *Bailey & Hirsch* basiert auf der ins Bild projizierten Versetzungslinienlänge L [Mar95]. Diese kann auf verschiedene Weisen gewonnen werden. Einerseits kann sie manuell unter Benutzung eines Lineals gemessen werden, ein Verfahren, das jedoch sehr fehleranfällig ist. Andererseits bietet sich die Verwendung einer bereits implementierten Berechnungsfunktion eines Bildverarbeitungsprogramms an. Bei dieser Methode sind die Ergebnisse reproduzierbar und zudem nicht vom Bearbeiter abhängig. Ist die Versetzungslinienlänge schließlich bekannt, so berechnet sich die Versetzungsdichte nach

$$\rho_{BH} = \frac{4L}{\pi A t} \quad (6.45)$$

A bezeichnet hierbei die Fläche des Durchstrahlungsbilds.

Ein systematischer Vergleich der beiden Verfahren ergibt nach [Mar95], dass das Verfahren nach Bailey & Hirsch bei den dort durchgeführten Messungen durchweg höhere Versetzungsdichten als das Linienschnittverfahren nach Ham liefert. Dies ist dadurch zu erklären, dass andere Gefügebestandteile wie Korngrenzen oder Karbide durch schlechte Kontrastbedingungen fehlerhaft als Versetzungslinien aufgefasst werden.

6.4.2 Automatisierung

Entscheidend bei der Bestimmung der Versetzungsdichte von Werkstückproben mittels transmissionselektronenmikroskopischen Aufnahmen ist bislang die Erfahrung des Anwenders oder der Anwenderin gewesen. Er oder sie entscheidet, ob eine Struktur eine Versetzung darstellt oder nicht, bestimmt beim Linienschnittverfahren nach Ham die Schnittpunkte zwischen Versetzung und Gitterlinien und misst die Linienlänge von Versetzungslinien beim Verfahren nach Bailey & Hirsch. Anwender stoßen an ihre Grenzen bei Aufnahmen von strukturlosen dichten Versetzungsnetzwerken, da das Gitter in diesen Fällen sehr fein gewählt werden müsste, um genügend Schnittpunkte zu erhalten, damit alle Versetzungen erfasst werden. Die Anzahl der zu ermittelnden Schnittpunkte, die nacheinander per Maus markiert werden müssten, würde dabei das Maß übersteigen, was Anwender in akzeptabler Zeit korrekt erledigen können. Eine automatisierte Bestimmung dient also dazu, auch Aufnahmen von Proben mit hoher Versetzungsdichte zuverlässig untersuchen zu können.

Ähnliche Probleme treten auch bei der Methode nach Bailey & Hirsch auf. Der Anwender muss die Linienlänge mit einem geeigneten Verfahren manuell messen. Es ist offensichtlich, dass sich bei

einer Messmethode mittels Lineal große Abweichungen selbst bei wiederholten Messungen eines Anwenders bei demselben Bild ergeben können. Zudem eignen sich auch für diese Methode nur Aufnahmen mit geringer Versetzungsdichte, da es inakzeptabel ist, die Linienlänge verworrener Versetzungsknäuel nachzumessen. Hinzu kommt, dass sich Messungen der Versetzungsdichte bei derselben Aufnahme aber unterschiedlichen Bearbeitern zum Teil stark unterscheiden. Ein neutrales, stabiles und anwenderunabhängiges Verfahren ist also erforderlich.

Im Gegensatz zu der menschlichen Herangehensweise haben Bildverarbeitungsmethoden keinen Erfahrungsschatz, auf den sie zurückgreifen können. Zudem sind auf intelligenten Entscheidungen beruhende Abläufe nicht einfach zu implementieren. Die menschliche Wahrnehmung kann Objekte vor unterschiedlich hellem Hintergrund problemlos identifizieren, während computerbasierte Bildverarbeitungssysteme weitaus aufwändiger, z.B. mit lokalen Schwellwerten zur Unterscheidung zwischen Objekt und Hintergrund, arbeiten müssen. Idealerweise bietet ein Bildverarbeitungssystem zur automatischen Versetzungsdichtebestimmung mehr als eine Berechnungsmethode und wählt dann die für die jeweilige Aufnahme geeignetste selbstständig ohne weitere Bearbeiterinteraktion aus.

Die Implementierung des automatisierten Verfahrens zur Versetzungsdichtebestimmung erfolgte im Rahmen dieser Arbeit auf Basis des Bildverarbeitungsprogrammpaketes *KS 400* der Firma Zeiss, welches die Methoden der Bildverarbeitung, die in Kapitel 6.3 vorgestellt worden sind, zur Verfügung stellt. Das hierbei entstandene Programm *Autovers* ist gekennzeichnet durch seinen modularen Aufbau, der einerseits erweiterungsfähig ist, falls zusätzliche Methoden und Filteroperationen zum Einsatz gelangen sollen, und andererseits die separate Ausführbarkeit einzelner Module ermöglicht. Der Programmaufbau der einzelnen Module lehnt sich an die Struktur an, wie sie in den Kapiteln 6.3.2 und 6.3.3 beschrieben wurde. Abbildung 6.19 skizziert den Aufbau der Module. Zur Bildvorverarbeitung und Segmentierung sind vier verschiedene Verfahren entwickelt worden, von denen das für das jeweilige Bild geeignetste ausgewählt wird. Sie gehen alle vom digitalisierten Eingangsbild aus und enden mit dem skelettierten Bild, welches nur noch ein Pixel breite Linien entlang der Versetzungen enthält.

1. Bei der ersten Vorverarbeitungsvariante wird die TEM-Aufnahme zunächst einer Hochpassfilterung unterzogen, wie auf Seite 61 beschrieben. Hierdurch treten Grauwertübergänge zwischen Versetzungen und Hintergrund stärker hervor. Diese Methode bietet sich besonders bei feinen Strukturen an. Das hochpassgefilterte Bild wird anschließend grauwertnormiert, wie auf Seite 55 beschrieben. Diese lineare Skalierung bewirkt, dass der gesamte Grauwertbereich von 0 bis 255 voll ausgeschöpft wird. Hiernach wird die automatische Grauwertsegmentierung des Programms *KS 400* auf das linear skalierte Bild angewendet. Die Funktion berechnet die beiden stärksten lokalen Minima im Histogramm. Es erfolgt eine Binarisierung, indem die Werte zwischen diesen Minima als Objektpixel aufgefasst werden und den Grauwert 1 (weiß) erhalten, die restlichen den Wert 0 (schwarz). Die linear skalierten Grauwerte von Versetzungsstrukturen liegen gerade zwischen diesen Minima und die zugehörigen Pixel werden demnach als weiße Objektpixel dargestellt. Das Ergebnis der bisherigen Schritte ist also, dass Regionen von Pixeln entstanden sind, die Versetzungen repräsentieren. Die eigentlichen Versetzungslinien liegen aber zentral in diesen Regionen. Deshalb müssen diese Regionen abschließend mittels des auf Seite 68 beschriebenen Skelettierungsverfahrens, in mittig liegende, ein Pixel breite Linien umgewandelt werden.
2. Bei der zweiten Methode werden die Kanten der TEM-Aufnahme mittels des Sobelfilters von Seite 61 extrahiert. Dieser bildet die Kanten feiner Strukturen jedoch häufig zu dick ab, so

dass diese Methode eher bei Detailaufnahmen von Versetzungen mit großem Maßstab zum Einsatz kommt. Hierbei liefert der Sobelfilter jedoch gute Ergebnisse. An die Kantenextraktion schließt sich eine Glättungsmethode an. Mit Hilfe eines Medianfilters von Seite 59 werden langsame Grauwertübergänge in Bereichen, die durch die vorangehende Filteroperation als Kante gekennzeichnet wurden, verschärft. Diese nun steileren Grauwertübergänge lassen sich anschließend besser mittels der automatischen Grauwertsegmentierung binarisieren. Das Ergebnis des bisherigen Vorgehens sind alle Kanten, die eine Versetzung umschließen. Da man jedoch an der Versetzungslinie selbst interessiert ist, wird auf dieses Bild nun die morphologische Operation Opening von Seite 66 angewendet. Weiße Objektbereiche vergrößern sich also auf Kosten der Hintergrundpixel. Das Resultat dieser Operation ist, dass die zuvor ringförmigen Bereiche, die Versetzungen zu allen Seiten umschließen, nun geschlossen sind. Wiederum bildet die Skelettierung den Abschluss der Vorverarbeitung, indem sie aus den Versetzungen repräsentierenden Regionen ein Pixel breite Linien extrahiert, die die eigentlichen Versetzungslinien darstellen.

3. Die dritte Methode ist analog zu vorigem Verfahren aufgebaut, mit dem Unterschied, dass Kanten der TEM-Aufnahme hier mittels eines Laplace-Filters extrahiert werden. Dieser ist auf Seite 61 beschrieben. Er hebt strukturreiche Bereiche hervor, so dass seine Funktion vergleichbar mit einem Kantenfilter ist.
4. Die vierte Methode führt zunächst eine adaptive Grauwertsegmentierung durch. Dieses Verfahren ist besonders hilfreich für die Segmentierung von kleinen Strukturen vor variierendem Hintergrund, wie er bei der unterschiedlichen Ausleuchtung von TEM-Aufnahmen häufig auftritt. Das segmentierte Bild kann dann zur Erzeugung binärer Regionen verwendet werden. Bei der adaptiven Grauwertsegmentierung wird das tiefpassgefilterte Eingangsbild von diesem subtrahiert. Diese Methode verwendet die 4-er Umgebung, um auch feine Versetzungsstrukturen vom Hintergrund unterscheiden zu können. Auf die resultierende Bildmatrix wird dann ein Schwellwertverfahren zur Binarisierung angewendet. Dieses Schwellwertverfahren kann nach der zuvor erfolgten adaptiven Segmentierung feste Schwellwerte verwenden. Gute Ergebnisse wurden mit einer Binarisierungsschwelle von 145 erzielt. Grauwerte größer 145 bekommen den Wert 1 (weiß), darunter liegende Werte werden auf 0 (schwarz) gesetzt. Um Strukturen zu schließen wird, wie beim ersten Verfahren, eine Closing-Operation durchgeführt. Anschließend muss auch das hierdurch entstandene Bild skelettiert werden, um die Versetzungslinien auswerten zu können.

Die Unterscheidung zwischen einer für das vorliegende Bild geeigneten oder ungeeigneten Vorverarbeitungsmethode erfolgt anschließend über die Maßzahl der prozentualen Feldfläche von Objektpixeln. Dieser Wert berechnet sich aus dem noch nicht skelettierten Bild, indem der prozentuale Anteil von Objektpixeln der Gesamtpixelanzahl ermittelt wird. Ungeeignete Vorverarbeitungsmethoden sind grundsätzlich dadurch gekennzeichnet, dass die prozentuale Objektfläche als zu groß berechnet wird, d.h. dass die Kombination aus Kantenextrahierung, Binarisierung und morphologischer Filterung unter den bildspezifischen Bedingungen wie ungleichmäßiger Ausleuchtung oder allgemeinen Helligkeits- und Kontrasteigenschaften nicht zufriedenstellend arbeitet. Eine ungeeignete Methode fasst nahezu den gesamten Bildbereich als Objektbereich auf, welcher die eigentlich vorhandenen Versetzungsstrukturen natürlich keinesfalls repräsentiert. Die am Besten geeignete Methode zeichnet sich durch den geringsten prozentualen Objektflächenanteil aus, feine Strukturen

werden also nicht zu dick abgebildet, sondern behalten ihre charakteristische Form und Ausdehnung bei.

Nachdem eine Vorverarbeitungsmethode ausgewählt worden ist, muss das skelettierte Binärbild mit einem Gitter zur Schnittpunktbestimmung für das Linienschnittverfahren nach Ham überdeckt werden. Hierzu wird es mit äquidistanten waagerechten und senkrechten Linien mittels einer mathematisch-logischen *UND*-Operation verknüpft. Dabei werden nur diejenigen Bildpunkte erfasst, die auf einer Versetzungslinie und zugleich auf einer senkrechten oder waagerechten Gitterlinie liegen. Die resultierenden Pixel werden in vektorisierter Form in Feldvariablen zur Weiterverarbeitung abgespeichert. Die zeilenweise Summation der Abstände dieser Schnittpunkte bei waagerechten, bzw. die spaltenweise Summation bei senkrechten Linien und die Umrechnung von Pixelabstand in metrische Einheiten ist der letzte Verarbeitungsschritt, bevor die Versetzungsdichte nach Ham gemäß Gleichung (6.44) berechnet werden kann. Hierzu wird die Dicke der durchstrahlten Folie benötigt, die zusammen mit dem Namen des zu verwendenden Bilds zu Beginn der Verarbeitungsschritte interaktiv eingegeben wurde.

Für die Methode nach Bailey & Hirsch wird das gleiche skelettierte Binärbild verwendet. Unter Verwendung von Gleichung (6.45) wird hierzu neben der Foliendicke noch die Linienlänge der Versetzungslinien benötigt. Die Bildgröße wird selbständig errechnet, wogegen sich die Linienlänge summarisch aus den Linienlängen der skelettierten Versetzungen zusammensetzt. Das Bildverarbeitungssystem bietet hierfür eine automatische Berechnung der Länge an. Die zugrunde liegende Gleichung lautet:

$$L = \frac{U_f - \sqrt{U_f^2 - 16A_f}}{2}.$$

Hierbei bezeichnet U_f den Umfang und A_f die Fläche der jeweiligen Region. Die beiden Verfahren werden im folgenden Kapitel verglichen.

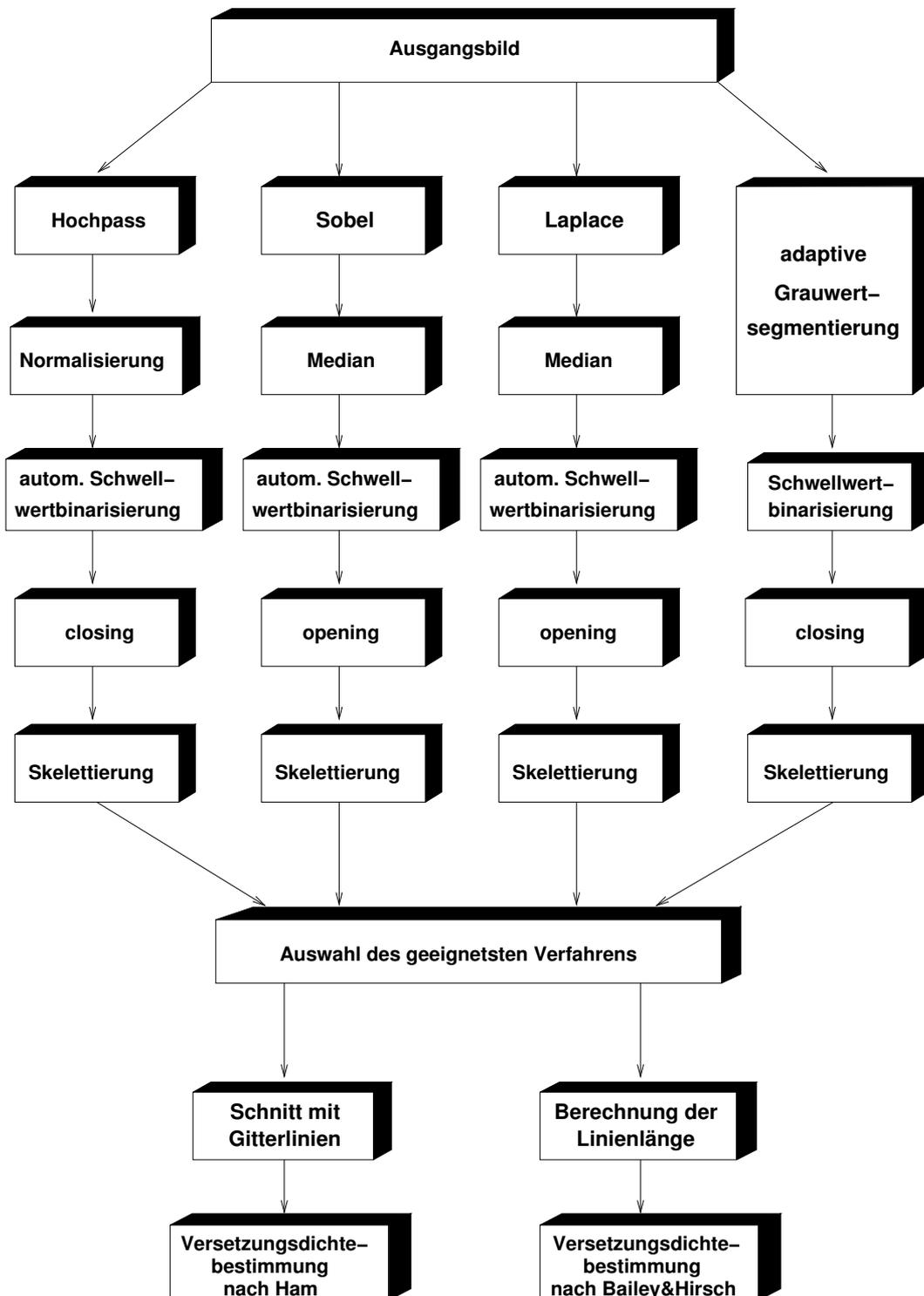


Abbildung 6.19: Modulaufbau des im Rahmen dieser Arbeit entstandenen Bildverarbeitungsprogramms *Autovers* zur automatischen Bestimmung der Versetzungsdichten bei TEM-Aufnahmen.

6.5 Vergleich der Verfahren

Bei einem Vergleich zwischen verschiedenen Methoden zur Bestimmung der Versetzungsdichte bei transmissionselektronenmikroskopischen Aufnahmen ist zu beachten, dass die Ergebnisse zweier Messungen des gleichen manuellen Verfahrens aber unterschiedlicher Anwender zum Teil erheblich voneinander abweichen können. Dieser Aspekt wird etwas dadurch relativiert, dass Versetzungsdichten einzelner TEM-Aufnahmen niemals Absolutwerte darstellen, sondern entweder nur eine Größenordnung angeben sollen oder als Beitrag zu einem Durchschnittswert mehrerer Aufnahmen an verschiedenen Stellen derselben Probe zur statistischen Absicherung dienen. Die Versetzungsdichte bei TEM-Aufnahmen wird, wie bereits erläutert, als Linienlänge pro Volumeneinheit angegeben.

Verglichen werden die folgenden Verfahren:

- Bestimmung der Linienlänge der Versetzungen durch Messung mittels Lineal (manuell),
- Linienschnittverfahren nach Ham (halbautomatisch),
- Linienschnittverfahren nach Ham (automatisch),
- Verfahren nach Bailey & Hirsch (automatisch).

Die Messungen mit manuellen bzw. halbautomatischen Auswerteverfahren fanden im Rahmen zweier Studienarbeiten am Institut für Werkstoffkunde [Sae99], [Kes00] statt. Ein Vergleich muss also auf die dort verwendeten TEM-Bilder zurückgreifen.

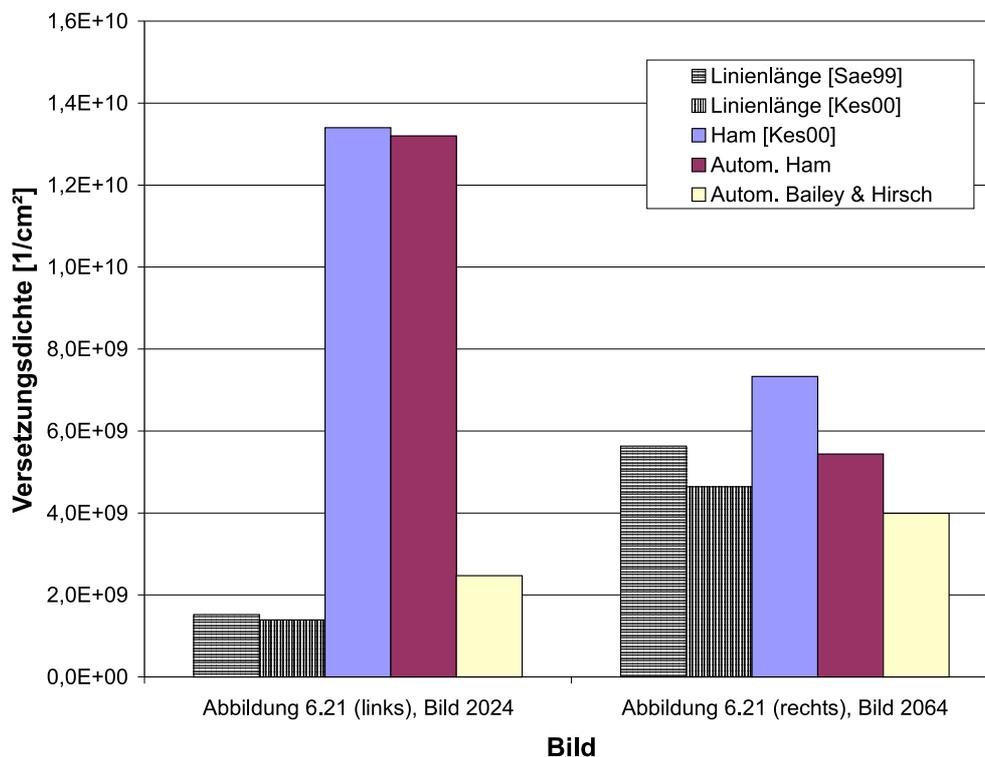


Abbildung 6.20: Vergleich von *Autovers* und manuellen Verfahren.

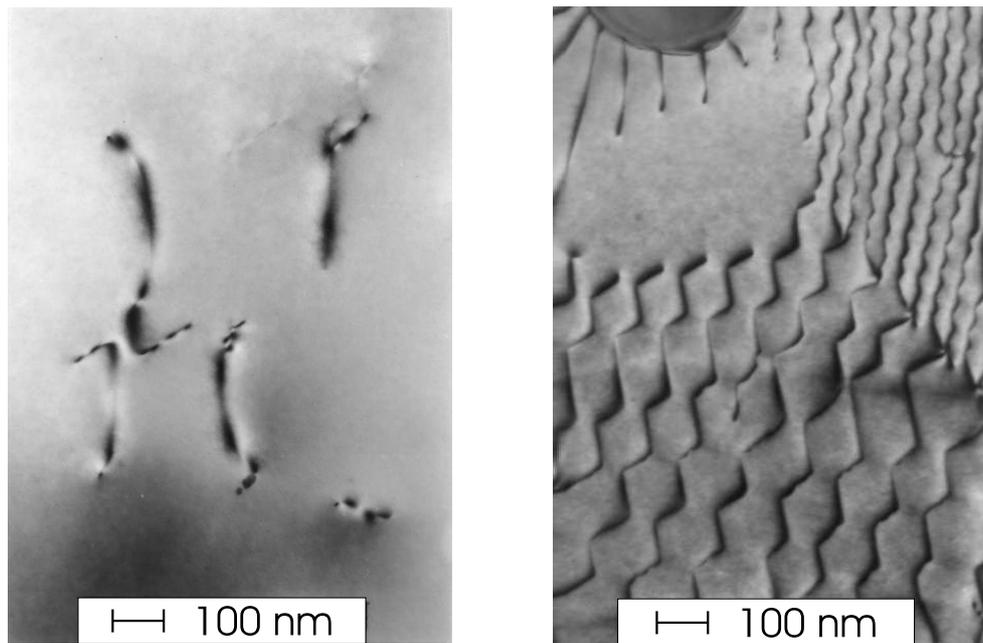


Abbildung 6.21: Versetzungsstrukturen mit geringer (links, Bild 2024) und hoher Versetzungsdichte (rechts, Bild 2064) bei AlMg5Mn.

Der Vergleich der Ergebnisse in Abbildung 6.20 zeigt die möglichen Einsatzgebiete der einzelnen Verfahren.

Die direkte Messung der Linielänge eignet sich als manuelle Methode für Bilder mit geringer Versetzungsdichte, wie in Abbildung 6.21 (links, Bild 2024). Hier bietet sie jedoch Vorteile, da das Linienschnittverfahren nach Ham als statistisches Verfahren auf eine gewisse Mindestmenge an Versetzungslinien angewiesen ist. Die in [Sae99] gemessenen Werte bilden den Referenzwert für einen Vergleich. Die Abweichungen der manuellen und halbautomatischen Untersuchungen in [Sae99] und [Kes00] voneinander betragen bereits 8,6%. Die automatisierte Variante der Methode nach Bailey & Hirsch ist für Bilder mit geringer Versetzungsdichte schlechter geeignet, da die Abweichung gegenüber [Sae99] bereits 38,5% beträgt. Da Versetzungsdichtebestimmungen jedoch nur Anhaltswerte darstellen, ist dies noch akzeptabel. Die beiden Varianten des Linienschnittverfahrens nach Ham unterscheiden sich voneinander nur um 1,5%, was die korrekte Implementierung des Verfahrens belegt. Im Vergleich zu [Sae99] sind die beiden Werte der Linienschnittverfahren jedoch prinzipiell zu hoch, da bei Aufnahmen mit nur wenig sichtbaren Versetzungen, also niedriger Versetzungsdichte, zu wenig Schnittpunkte existieren, um die in diesem Verfahren erfolgende Extrapolation statistisch zu rechtfertigen.

In einem mittleren Versetzungsdichtebereich, wie in Abbildung 6.21 (rechts, Bild 2064), ist eine genügende Anzahl von Versetzungen in der Aufnahme enthalten. Hier sind alle Verfahren gut einsetzbar. Abweichungen der manuellen Verfahren belaufen sich auf 17,6%, zum Bailey & Hirsch-Verfahren 29,1% und zu dem automatisierten Ham-Verfahren 3,4%. Der Unterschied des manuellen Ham-Verfahrens lag schon bei 23,2%, so dass die Abweichungen der automatischen zu den manuellen Verfahren als durchaus vertretbar angesehen werden können.

Bei Messungen an Aufnahmen, die Versetzungsknäuel und -netzwerke enthalten, sind manuelle

Methoden nicht mehr einsetzbar, wodurch ein Vergleich mit diesen Methoden entfallen muss. Die automatischen, bzw. halbautomatischen Verfahren funktionieren hierbei aber noch problemlos. Vergleichsmessungen an 20 TEM-Aufnahmen ergaben zum Teil gute Übereinstimmungen der drei Methoden, wobei die durch die automatischen Verfahren ermittelten Werte im Schnitt unter den entsprechenden, mit dem halbautomatischen Verfahren nach Ham bestimmten Werten aus [Kes00] lagen. Dies gilt insbesondere für die Methode nach Bailey & Hirsch. Die Vergleichswerte sind in Abbildung 6.22 dargestellt.

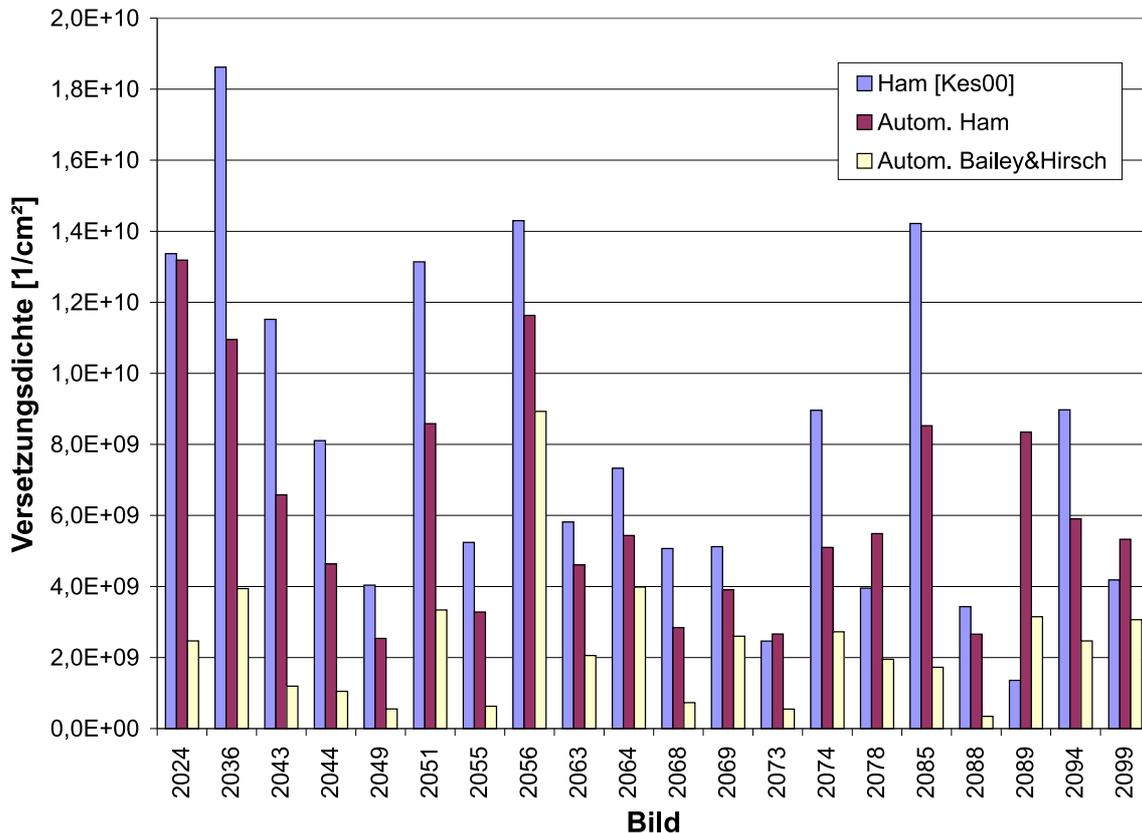


Abbildung 6.22: Vergleichswerte von Versetzungsdichtemessungen an AlMg5Mn.

Die vorhandenen Abweichungen der drei Verfahren sind einerseits erwünscht, da das Verfahren nach Bailey & Hirsch bei Aufnahmen mit geringer Versetzungsdichte die Extrapolationsfehler der beiden Linienschnittmethoden nicht aufweist. Andererseits konnte die Gitterweite beim automatischen Linienschnittverfahren viel kleiner als bei der halbautomatischen Variante gewählt werden, was diesen Fehlereinfluss verringert. Da es bei TEM-Aufnahmen, wie bereits erwähnt, nicht den absolut richtigen Vergleichswert, sondern nur ungefähre Werte gibt, stellen die Ergebnisse des halbautomatischen Linienschnittverfahrens nur Richtwerte dar, die unter Berücksichtigung der prinzipiellen Fehler durch zu große Gitterabstände nicht besser oder schlechter als andere Ergebnisse sein müssen. Alle ermittelten Werte korrespondieren gut mit Werten aus der Literatur. Es ist in Abbildung 6.22 zu sehen, dass die beiden automatischen Verfahren tendenziell unter den Vergleichswerten des halbautomatischen Linienschnittverfahrens mit Bearbeiterinteraktion liegen. Dies kann zumindest bei der Methode nach Ham auf die geringere Gitterweite zurückzuführen sein, und damit eine

Verbesserung des ermittelten Wertes darstellen.

Ferner sind bei einem Vergleich der beiden automatischen Methoden die gemessenen Werte des Linienschnittverfahrens größer als bei dem Verfahren nach Bailey & Hirsch, obwohl beide zur Berechnung das gleiche skelettierte Bild verwenden. Der Unterschied muss also verfahrensimmanent sein und steht damit im Widerspruch zu Untersuchungen in [Moh98], wo durchweg höhere Versetzungsdichten bei Messungen mit dem Verfahren nach Bailey & Hirsch gegenüber dem Linienschnittverfahren nach Ham ermittelt worden sind.

6.6 Methode der Paarkorrelation

Eine Möglichkeit, um Ergebnisse der mikrostrukturellen Simulation quantitativ mit Experimenten zu vergleichen, bietet die Paarkorrelationsmethode, welche Bilder von Versetzungsanordnungen mit Hilfe einer mathematischen Abbildung in ein zweidimensionales Korrelationsbild überführt. Die dafür verwendete Abbildungsfunktion heißt *Paarkorrelationsfunktion* $g(\vec{r})$ [Br95] und lautet:

$$g(\vec{r}) = \sum_{\vec{r}'} \Theta(\vec{r}') \Theta(\vec{r}' + \vec{r}). \quad (6.46)$$

$g(\vec{r})$ stellt dabei ein Maß für die Häufigkeit dar, dass sich von einer beliebigen Versetzung ausgehend, in der Raumrichtung \vec{r} eine andere Versetzung befindet. Das Summation erstreckt sich hierbei auf das gesamte Simulationsgitter, d.h. jede Versetzung mit Ortsvektor \vec{r}' wird berücksichtigt. Die Stufenfunktion Θ ist gleich 1, wenn der Gitterplatz mit einer Versetzung besetzt ist, andernfalls nimmt sie den Wert 0 an. Dies veranschaulicht Abbildung 6.23. Die Versetzungen im linken Bildteil

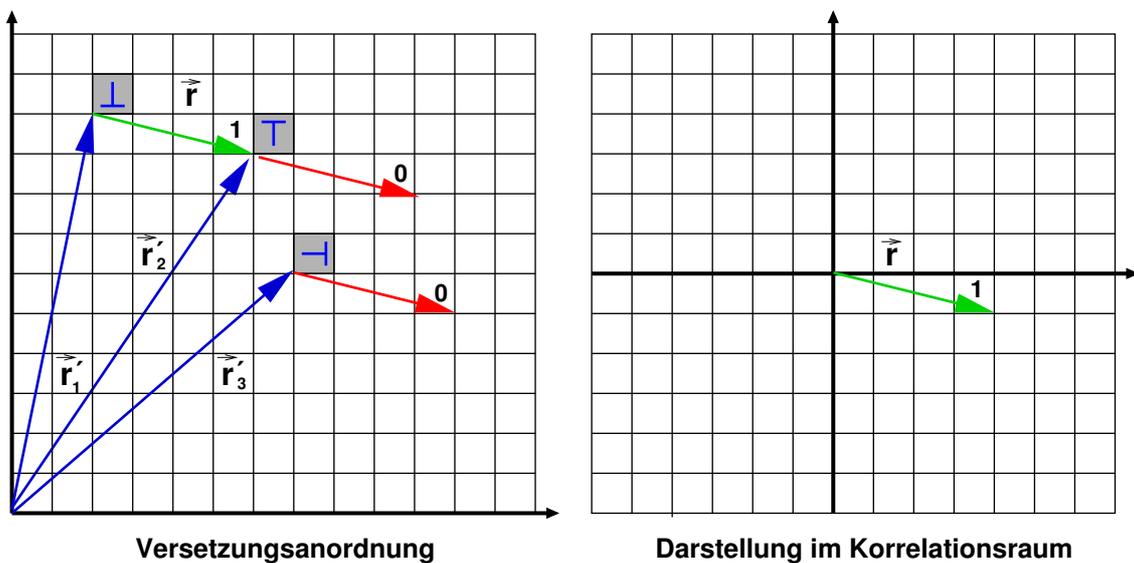


Abbildung 6.23: Funktionsprinzip der Paarkorrelationsmethode.

besitzen die Ortsvektoren \vec{r}'_i , wobei i die Werte 1, 2 oder 3 annimmt. Ausgehend von jedem der Ortsvektoren, denn nur an diesen Stellen ist $\Theta(\vec{r}'_i)$ von Null verschieden, werden alle denkbaren Abstandsvektoren getestet. Wird hierbei eine andere Versetzung getroffen, so ist $\Theta(\vec{r}' + \vec{r})$ ebenfalls von Null verschieden, so dass dieser Abstandsvektor einmal ins Korrelationsbild übertragen werden

kann. Wird keine andere Versetzung getroffen, so behält $\Theta(\vec{r} + \vec{r})$ den Wert 0 und der Abstandsvektor wird diesmal nicht ins Korrelationsbild überführt.

Jedem Abstandsvektor kann hierdurch eine Häufigkeit zugeordnet werden, die als Darstellung im Korrelationsraum zur Strukturcharakterisierung genutzt wird. Abstandsvektoren, welche von verschiedenen Versetzungen ausgehend auf andere Versetzungen treffen, tauchen entsprechend ihrer Häufigkeit im Korrelationsbild auf. Dort ist das entsprechende Häufigkeitsmaß die Helligkeit. Helle Bereiche weisen also eine hohe Korrelation auf, d.h. in diesen Raumrichtungen finden sich verstärkt andere Versetzungen.

7 Simulationsrechnungen

In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse der Simulationen mit dem in Abschnitt 5.4 beschriebenen Ansatz vorgestellt werden. Es wird zwischen den verschiedenen Typen der Simulationen hinsichtlich Spannungs- oder Dehnungssteuerung unterschieden, zunächst werden jedoch Ergebnisse von Simulationen ohne äußere Krafteinwirkung vorgestellt, bei denen Selbstordnungsmechanismen im Vordergrund stehen.

7.1 Resultierende Kräfte

In diesem Abschnitt sollen die resultierenden Peach-Koehler-Kräfte, die auf die beteiligten Versetzungen wirken, durch graphische Darstellung veranschaulicht werden. Hierzu wurden bei einer Simulationsrechnung mit relativ einfachen Parametern die auf die beteiligten Versetzungen wirkenden Kräfte in vektorieller Form protokolliert. Wie bereits beschrieben, wird zunächst von einer zufälligen Anfangsverteilung ausgegangen. Die in Abbildung 7.1 gezeigte Simulation umfasst einen Bereich von 1024×1024 Zellen, was bei der simulierten AlMg5Mn-Legierung einem Gebiet von $2,96 \times 2,96 \mu\text{m}$ entspricht. Die Ausgangsversetzungsdichte beträgt $5 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$, so dass sich ca. 400 Versetzungen im Simulationsgitter befinden. In dieser Simulation ist nur ein Gleitsystem aktiv, so dass die vorhandenen Versetzungen nur in x -Richtung gleiten können. In Abbildung 7.1 (links) ist die Anordnung der Versetzungen nach 500 Simulationsschritten gezeigt. Versetzungen werden wiederum durch ein „T“-Symbol repräsentiert, wobei die Größe ein Maß für die Länge des zugehörigen Burgersvektors ist. Diese hat sich vereinzelt mittels der beschriebenen Interaktionsmechanismen geändert. Ferner ist es aufgrund der die Versetzungen umgebenden Spannungsfelder zu einer Umordnung aus der anfänglichen, einen erzwungenen Zustand darstellenden, Zufallsverteilung in für die Modellversetzungen energetisch günstigere Strukturen gekommen. Abbildung 7.1 (rechts) zeigt qualitativ die an den Positionen der Versetzungen wirkenden Kraftvektoren. Diese resultieren aus der Überlagerung der paarweise zwischen den Versetzungen wirkenden Peach-Koehler-Kräfte. In Einzelfällen können sich diese innerhalb der zugrunde liegenden Rechengenauigkeit gegenseitig aufheben, so dass der auf diese Versetzung wirkende Kraftvektor der Nullvektor ist. Nullvektoren sind der Übersichtlichkeit halber nicht im Diagramm dargestellt. Ersichtlich ist jedoch, dass keine ausgezeichnete Richtung existiert, in der sich alle Kraftvektoren orientieren. Durch die inhomogenen Spannungsfelder um Versetzungen und deren unregelmäßige Verteilung entstehen vielmehr nur einzelne Subregionen, in denen bestimmte Richtungen vorherrschen. Weiterhin ersichtlich ist, dass die Versetzungen noch keine abschließenden Gleichgewichtspositionen gefunden haben, welche sich durch kleine Kraftvektoren auszeichnen.

7.2 Einfluss des Abschneideradius

Die Berechnung der langreichweitigen Peach-Koehler-Kräfte zwischen den einzelnen Versetzungen, welche nur umgekehrt proportional zur Entfernung abfallen, erfordert einen Großteil der zur

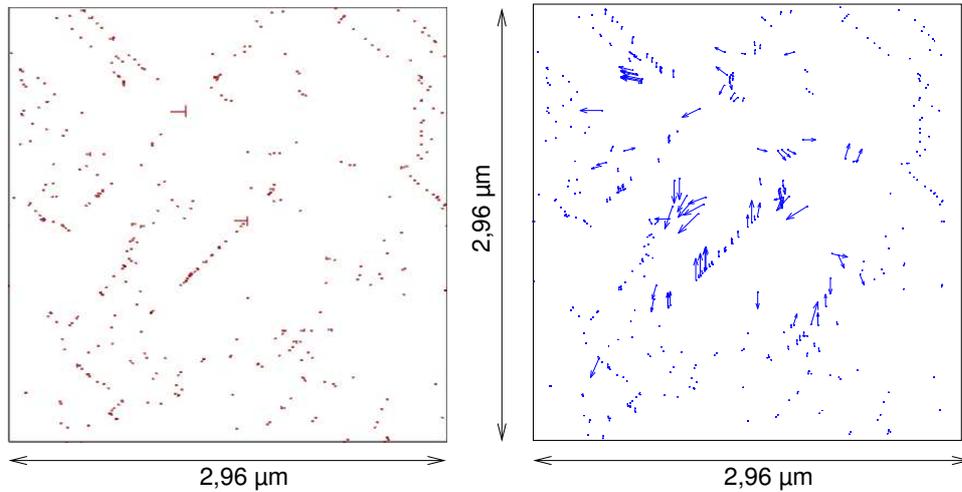


Abbildung 7.1: Versetzungsanordnung (links) und qualitative vektorielle Darstellung der resultierenden Kraftfelder (rechts).

Verfügung stehenden Rechenleistung. Aus diesem Grund ist es wünschenswert, nur Versetzungen in einer näheren Umgebung berücksichtigen zu müssen. KUBIN und CANOVA zeigten in [Kub89], dass nur Versetzungen innerhalb einer von der Versetzungsdichte ρ abhängigen Entfernung r von

$$r \leq \frac{5}{\sqrt{\rho}}$$

einen signifikanten Beitrag zur resultierenden Peach-Koehler-Kraft leisten, wodurch die Verwendung eines Abschneideradius (Cutoff-Radius) vorgeschlagen wird. Auf dabei entstehende Probleme machten GULLUOGLU ET AL. in [Gul89] aufmerksam. Wird die Wechselwirkungsreichweite zu klein gewählt, so fördert dies die Entstehung künstlicher Muster und unrealistischer Anordnungen, sogenannten Artefakten, da sich Versetzungen bevorzugt in Entfernungen niederlassen, die dem Abschneideradius entsprechen, da dort die resultierenden Kräfte schlagartig gleich Null sind. Untersuchungen zum Einfluss der verwendeten Wechselwirkungsreichweite sind demzufolge im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt worden.

Zunächst wurden Simulationen mit drei unterschiedlichen Cutoff-Radien unter Verwendung eines Simulationsgitters mit $2,96 \times 2,96 \mu\text{m}$ Kantenlänge durchgeführt. Die Ausgangsversetzungsdichte bei diesen Rechnungen beträgt $5 \cdot 10^{14} \text{m}^{-2}$, was rund 4300 Versetzungen entspricht. Da das verwendete Simulationsverfahren stabil ist, d.h. dass bei geringfügig unterschiedlichen Anfangszuständen prinzipiell der gleiche Endzustand entsteht, müssen die zufällig erzeugten Versetzungspositionen zu Beginn der Simulationen nicht identisch sein, es reicht aus, dass sie mit identischen Parametern generiert worden sind. Bei den durchgeführten Simulationen ist ein Gleitsystem aktiv, was einer Gleitrichtung parallel zur x -Achse entspricht. Die Versetzungsanordnungen nach 1000 Schritten sind in Abbildung 7.2 gezeigt. Unterschiede bei den drei Simulationen sind klar ersichtlich, obwohl

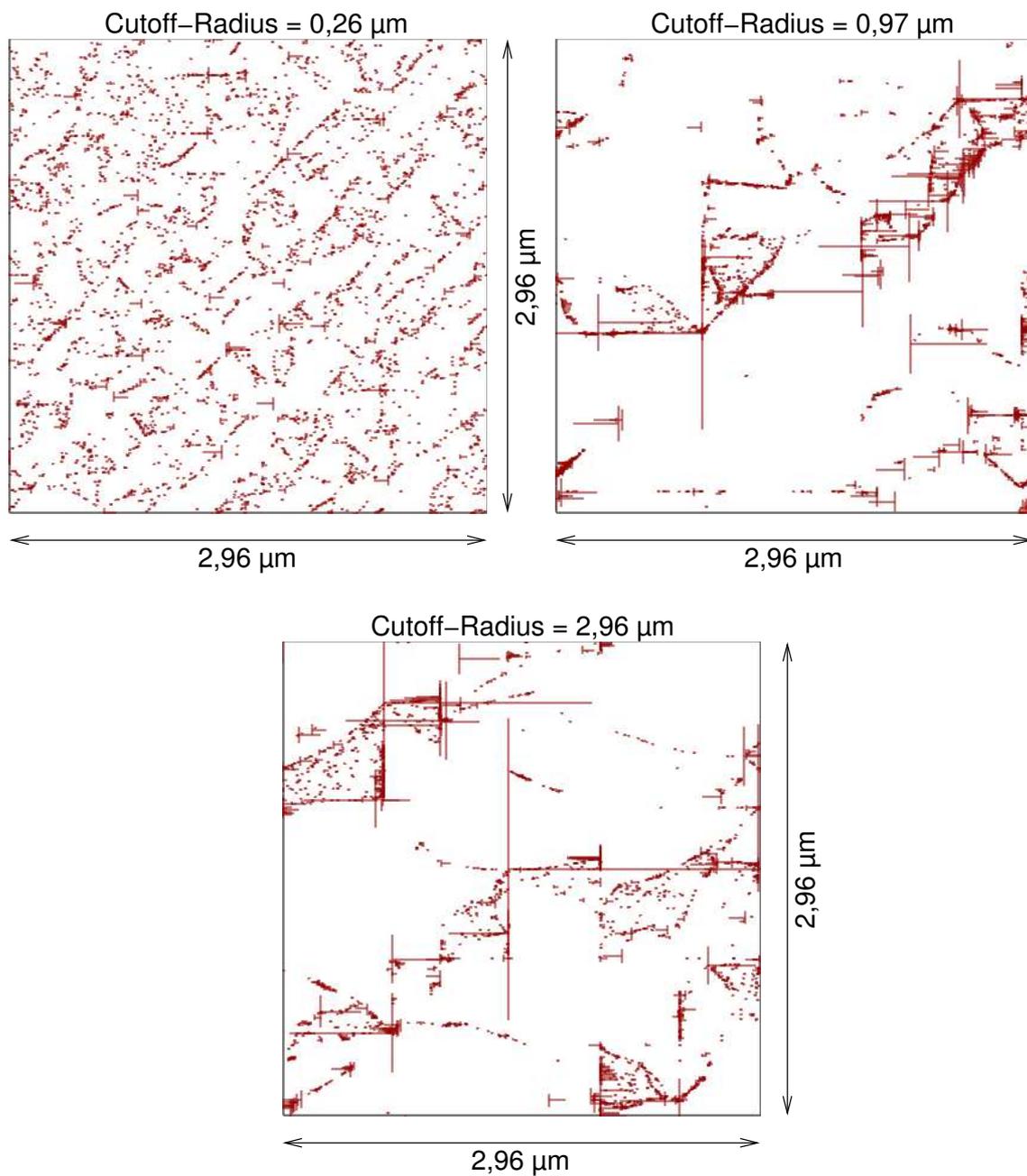


Abbildung 7.2: Versetzungsanordnungen nach 1000 Simulationsschritten mit verschiedenen Abschneideradien und einer Ausgangsversetzungsdichte von $5 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$.

prinzipiell die gleichen Selbstordnungsmechanismen durchlaufen worden sind. Aufgrund der inhomogenen Spannungsfelder bilden sich jeweils stabile Mauern in diagonaler Richtung heraus, die aus einzelnen Versetzungsdipolen bestehen. Im Fall der kleinsten Wechselwirkungsreichweite, die dem Vorschlag $\frac{5}{\sqrt{\rho}}$ nach KUBIN und CANOVA entspricht, liegt eine deutliche Korrelation zwischen Entfernung der Mauern und Abschneideradius vor. Die Unterschiede bei den beiden anderen Simu-

lationen sind nicht ganz so deutlich, sondern scheinen in erster Linie durch den Zufallscharakter des Simulationsverfahrens bedingt zu sein. Die Abstände der Mauern in der Simulation mit größtem Abschneideradius sind keinesfalls dreimal so groß wie bei der Simulation mit mittlerer Reichweite, obwohl die jeweiligen Cutoff-Radien dieses Verhältnis aufweisen. Dieser Versuch ist also ein erstes Indiz für die Annahme, dass eine Wechselwirkungsreichweite von rund $1\ \mu\text{m}$ bei den gegebenen Simulationsparametern ausreichend ist.

Um die Versetzungsstruktur beeinflussende Effekte aufgrund von periodischen Randbedingungen (PBC) auszuschließen, wurden weiterhin Simulationen mit einer größeren Simulationszelle von $10,13\ \mu\text{m}$ Kantenlänge durchgeführt. Da eine Verdreifachung der Gitterlänge bei gleichbleibender Versetzungsdichte einer Verneunfachung der Rechenzeiten entspricht, musste die Ausgangsdichte auf $1 \cdot 10^{13}\ \text{m}^{-2}$ verringert werden. Die offensichtlich zu geringe Wechselwirkungsreichweite von $0,26\ \mu\text{m}$ wurde bei diesen Rechnungen nicht weiter berücksichtigt. Darüber hinaus wurde zur Verringerung der Artefakte von einem festen, für alle Versetzungen gültigen, Abschneideradius Abstand genommen. Statt dessen erfolgte die Berechnung von zufälligen Cutoff-Radien für jede einzelne Versetzung nach einem Verfahren, was von GOMEZ-GARCIA ET AL. in [Gom00] beschrieben wird. Bei der Berechnung der Peach-Koehler-Kräfte wird für jede Versetzung innerhalb einer eigens für sie zufällig festgelegten Reichweite die resultierende Kraft ermittelt. Dabei bildet der ehemals als einheitlicher Abschneideradius für alle Versetzungen angegebene Wert eine obere Grenze. Die untere Grenze ist der nach [Kub89] vorgeschlagene Wert. Mit diesem Verfahren verbunden ist also ein etwas verringerter Berechnungsaufwand gegenüber dem festen Cutoff-Wert, der sich aufgrund des stochastischen Charakters zudem gut für die verwendete Simulationsmethode eignet und die Bildung bestimmter bevorzugter Wellenlängen in den sich ausbildenden Versetzungsstrukturen verhindert.

Abbildung 7.3 zeigt die Versetzungsanordnungen dreier durchgeführter Rechnungen mit minimalen Wechselwirkungsreichweiten von $0,97$, $2,96$ und $6,75\ \mu\text{m}$. Gegenüber den kleineren Simulationszellen aus Abbildung 7.2 haben sich bei diesen Simulationen keine parallelen Mauern in einer einzelnen Diagonalenrichtung herausgebildet, sondern es sind labyrinthartige Strukturen entstanden, welche wiederum aus Mauersegmenten aufgebaut sind. Deren Orientierung ist diesmal jedoch nicht mehr auf nur eine Diagonale beschränkt. Die Mauern bestehen wie oben aus Versetzungsdipolen. Die beschriebenen veränderten Anordnungen liegen in der vergrößerten Simulationszelle und der beschriebenen Modifikation des Cutoff-Radius begründet, welche zu einer Verringerung der durch periodische Randbedingungen hervorgerufenen Effekte führt. Alle eventuell vorhandenen Unterschiede der Versetzungsanordnungen müssen also durch die unterschiedlichen Obergrenzen der Wechselwirkungsreichweiten hervorgerufen worden sein. Eine genaue Betrachtung von Abbildung 7.3 zeigt jedoch keine Differenzen, die über das stochastisch beeinflusste Maß der Simulationsmethode hinausgehen. Es existieren nicht dieselben wiederkehrenden Abstände von Mauersegmenten, die gleich dem verwendeten Cutoff-Radius sind. Die sichtbaren Entfernungen der Segmente sind vielmehr bei allen drei Abschneideradien gleich, also systemimmanent, was weiterhin bedeutet, dass sämtliche in diesen Simulationen verwendeten maximalen Cutoff-Radien groß genug sind. Diese qualitative Betrachtungsweise rechtfertigt also die Verwendung einer Wechselwirkungsreichweite von rund $1\ \mu\text{m}$ bei dem simulierten Werkstoff AlMg5Mn zur Verringerung der Rechenzeiten, ohne die sich ausbildenden Versetzungsstrukturen zu verfälschen.

Untermauert wird diese These durch die Betrachtung der relativen Versetzungsbewegungen bei den jeweiligen Simulationen. Ein direkter Vergleich der absoluten Werte für Versetzungsbewegungen

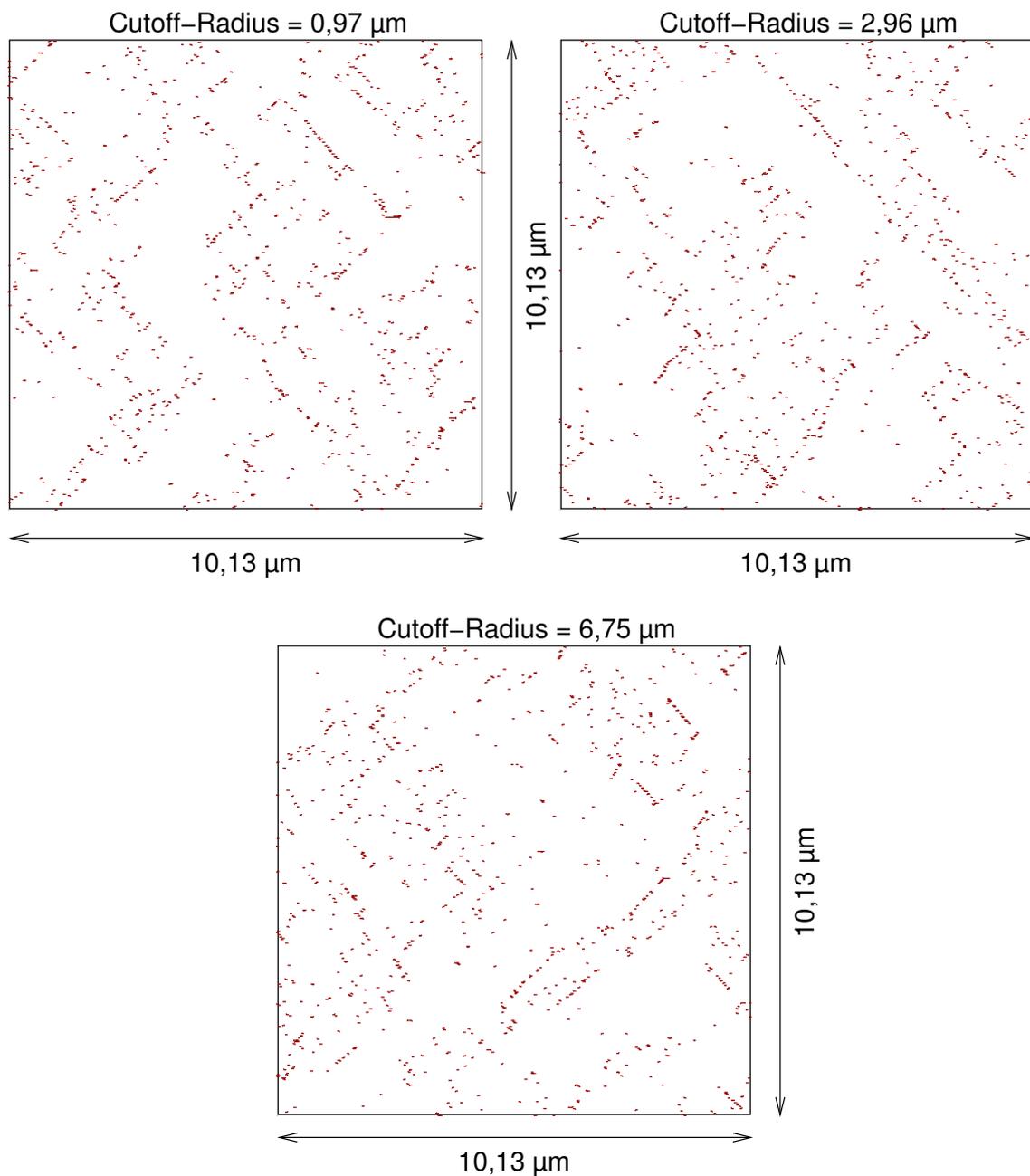


Abbildung 7.3: Versetzungsanordnungen nach 1000 Simulationsschritten mit verschiedenen Abschneideradien und einer Ausgangsversetzungsdichte von $1 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$.

ist aufgrund der auf zufälligen Zahlen basierenden Entscheidung für oder gegen eine Bewegung und darüber hinaus aufgrund der unterschiedlichen Versetzungsdichten bei den beiden verschieden großen Simulationsgittern nicht möglich. Die Berechnung des Verhältnisses von Bewegungen und Gesamtzahl von mobilen Versetzungen ermöglicht jedoch einen quantitativen Vergleich der Ergebnisse. Abbildung 7.4 zeigt die relative Anzahl von Versetzungen, die sich pro Schritt bewegt haben, von den drei Rechnungen mit großem Gitter und größeren Abschneideradien im Vergleich zu den

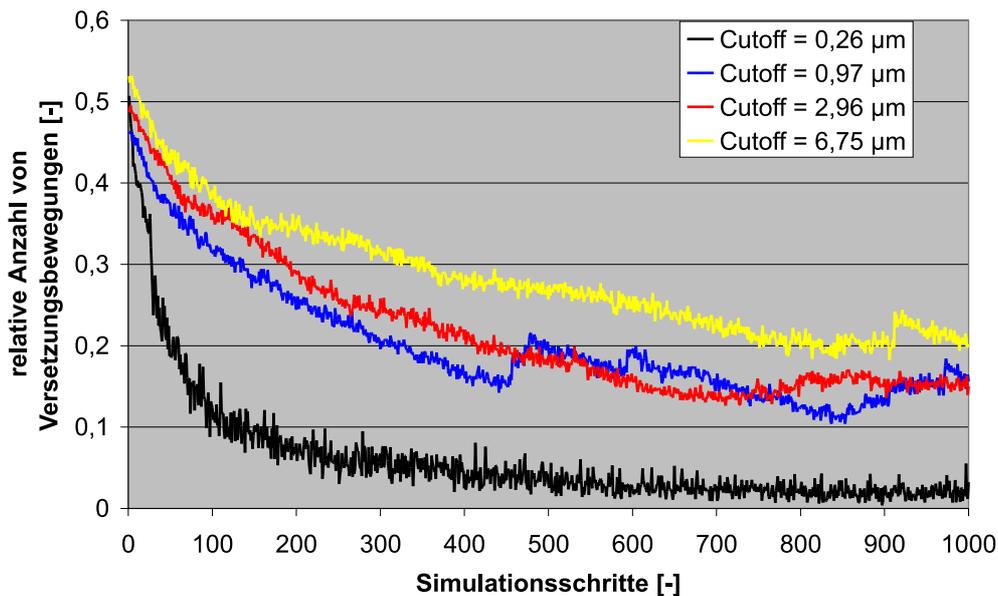


Abbildung 7.4: Relative Anzahl von Versetzungsbewegungen im Verlauf von Simulationen mit verschiedenen Abschneideradien.

entsprechenden Werten der Simulation mit zu kleinem Cutoff-Radius von $0,26\ \mu\text{m}$.

Ersichtlich ist, dass eine kleine Wechselwirkungsreichweite zu einem System führt, welches schnell einen stabilen Endzustand einnimmt. Die relative Anzahl von Versetzungsbewegungen nimmt vergleichsweise schnell ab, es erfolgen also kaum noch Veränderungen der vorliegenden Versetzungsstruktur. Bei den größeren Cutoff-Radien hingegen ist dieser Vorgang in die Länge gezogen, die Endzustände werden erst später erreicht. Je größer der Radius, desto aktiver bleibt das System.

Da die drei Kurven des großen Simulationsgitters relativ dicht beieinander in einem Bereich liegen, der weit über dem Wert der Kurve mit zu geringem Cutoff-Radius angesiedelt ist, wird die Verwendung einer Wechselwirkungsreichweite von rund $1\ \mu\text{m}$ weiter gestützt.

7.3 Korrelationsuntersuchungen

Die Labyrinthstruktur der Versetzungsanordnungen der Simulationen aus Abbildung 7.3 weist ein qualitativ hohes Maß an Übereinstimmung mit realen Versetzungsanordnungen von AlMg5Mn auf. Es ist bekannt, dass Metalle mit hoher Stapelfehlerenergie wie z.B. Aluminium zur Bildung derartiger Strukturen neigen. Ergebnisse in [Kes00] haben dies bestätigt, wie die TEM-Aufnahmen aus Abbildungen 7.5 und 7.6 zeigen.

Während einer Wärmebehandlung über 80 Sekunden mit Temperaturen von bis zu 400° sind regelmäßige Strukturen entstanden, welche qualitativ die gleichen rechtwinkligen Muster wie in den Simulationen zeigen.

Für einen quantitativen Vergleich wird die in Kapitel 6.6 vorgestellte Methode der Paarkorrelation verwendet. Deren Einsatz an TEM-Aufnahmen erfordert ein hohes Maß an Benutzerinteraktion, da jeweils die Mittelpunkte aller sichtbaren Versetzungen per Maus markiert werden müssen. Bei den Simulationsergebnissen erfolgt die Bestimmung der Paarkorrelationsbilder dagegen automatisch. Bei allen Bildern zeigen blaue oder grüne Bereiche, dass keine oder nur geringe Korrelation vor-

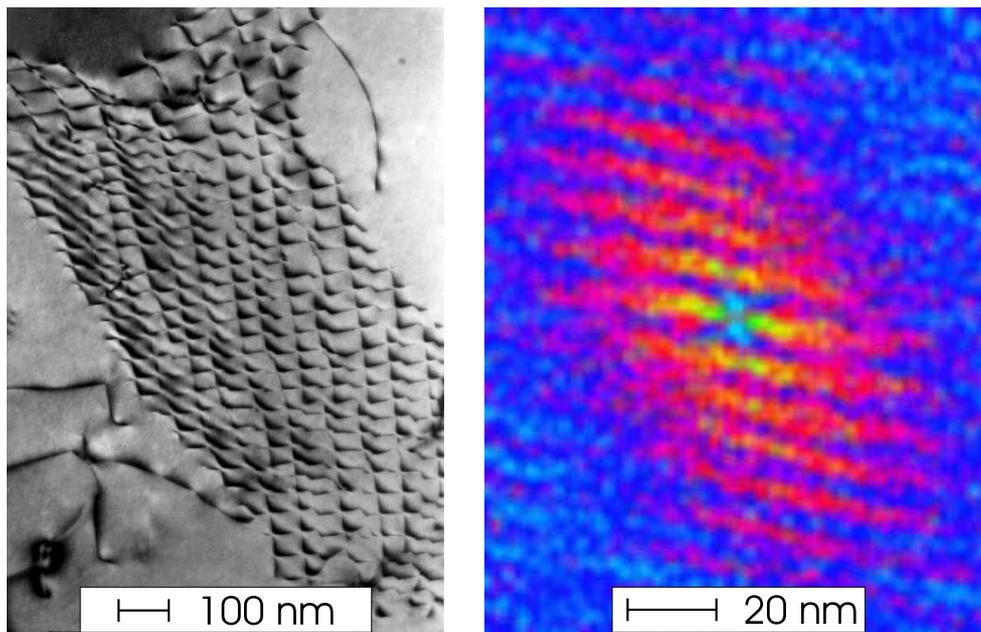


Abbildung 7.5: Versetzungsstruktur (links) und zugehöriges Korrelationsbild (rechts) von AlMg5Mn.

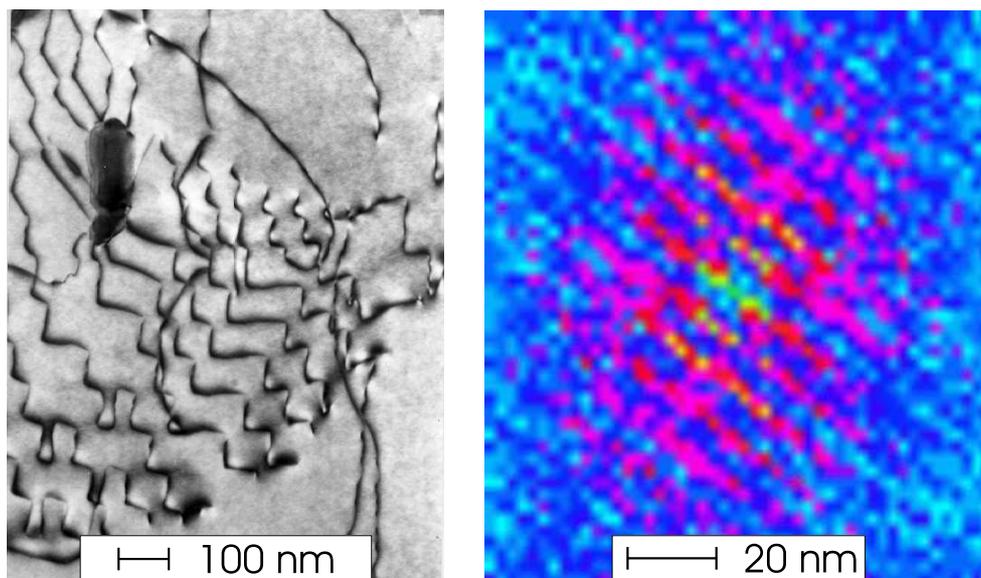


Abbildung 7.6: Versetzungsstruktur (links) und zugehöriges Korrelationsbild (rechts) von AlMg5Mn.

liegt, gelbe, bzw. rote Regionen markieren Zonen mittlerer, bzw. starker Korrelation.

Die Korrelationsbilder der TEM-Aufnahmen realer Versetzungsstrukturen aus Abbildungen 7.5 und 7.6 zeigen, dass eine Zone hoher Korrelation in den 45° -Richtungen vorliegt, welche eine Länge von etwa 90 nm und eine Breite von etwa 45 nm aufweist. Jedoch wird in den Bildern jeweils nur eine

der 45° -Richtungen bevorzugt. Zudem verschwindet jede Korrelation bei sehr kleinen Abständen von ungefähr 5 nm , was durch die blauen, bzw. grünen Zonen um den Ursprung in der Bildmitte belegt wird. Weiterhin existiert eine Substruktur in Form paralleler Streifen im Korrelationsbild. Diese stehen senkrecht zur Vorzugsrichtung und haben einen Abstand von ebenfalls etwa 5 nm . Die Korrelationsbilder geben die vorherrschenden Strukturen von Versetzungen in den TEM-Aufnahmen sehr gut wieder.

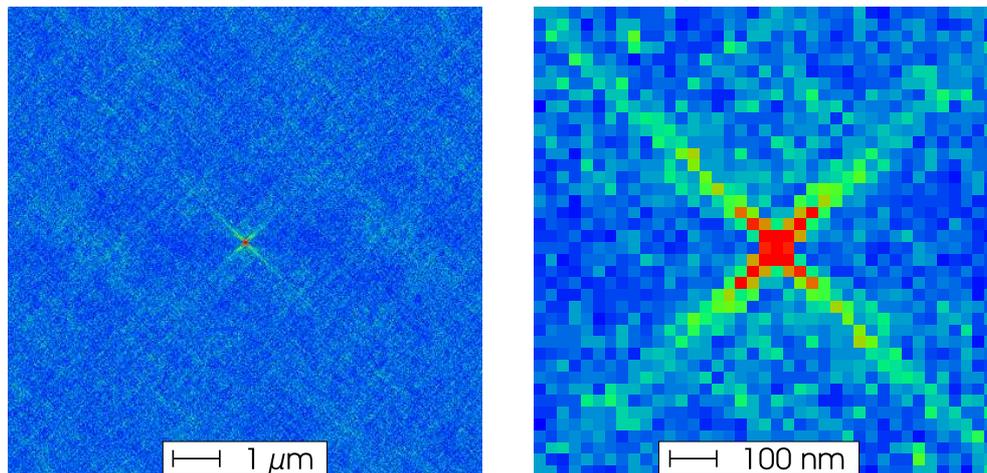


Abbildung 7.7: Korrelationsbild (links) der Simulation mit Cutoff-Radius $0,97\mu\text{m}$ aus Abbildung 7.3 mit Ausschnittsvergrößerung (rechts).

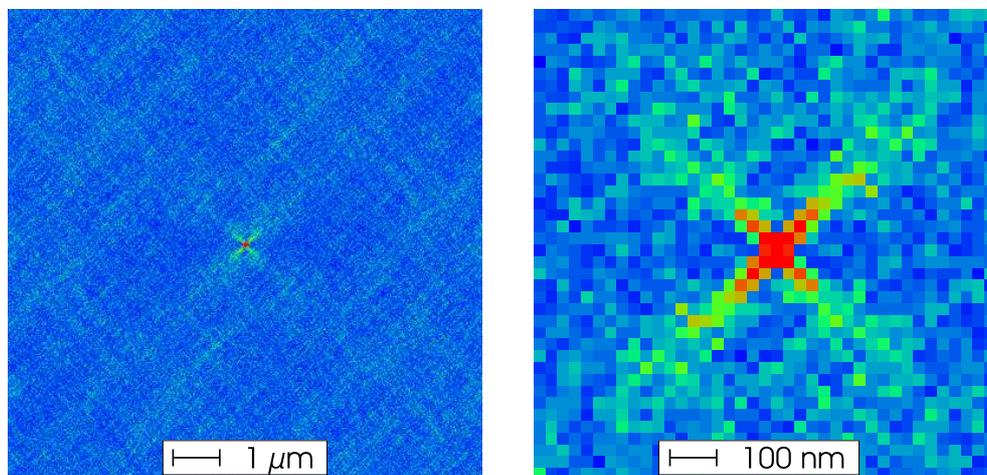


Abbildung 7.8: Korrelationsbild (links) der Simulation mit Cutoff-Radius $2,96\mu\text{m}$ aus Abbildung 7.3 mit Ausschnittsvergrößerung (rechts).

Aus den Korrelationsbildern der Simulationen aus Abbildungen 7.7 bis 7.9 können vergleichbare Schlüsse gezogen werden. Die drei Bilder weisen, wie auch die Versetzungsanordnungen, ein hohes Maß an Ähnlichkeit untereinander auf. Aufgrund der Labyrinthstrukturen in den Simulationsergebnissen sind beide 45° -Richtungen gleich stark vertreten. In den Übersichtsbildern zur Korrelation,

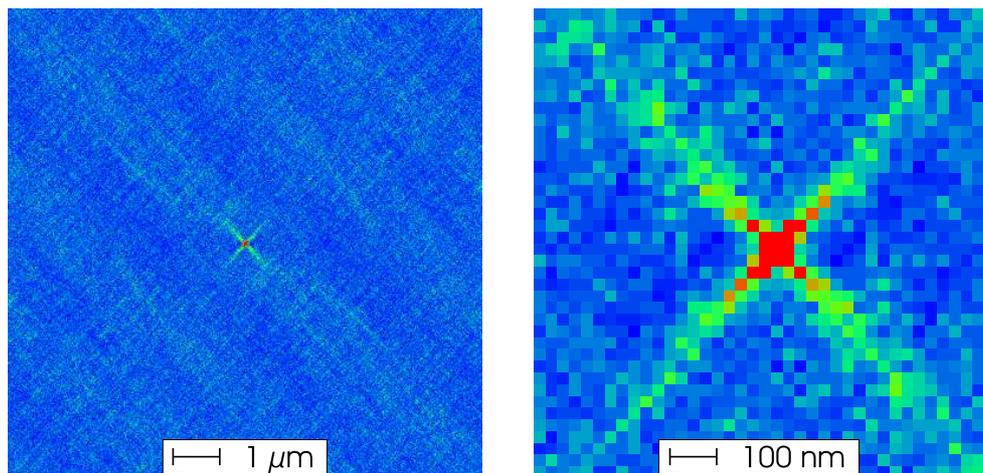


Abbildung 7.9: Korrelationsbild (links) der Simulation mit Cutoff-Radius $6,75\ \mu\text{m}$ aus Abbildung 7.3 mit Ausschnittsvergrößerung (rechts).

die jeweils links zu sehen sind, ist eine regelmäßige Zellstruktur sichtbar, die eine Kantenlänge von etwa $1\ \mu\text{m}$ aufweist. Dieser Effekt tritt besonders in Abbildung 7.8 auf. Aus den Ausschnittsvergrößerungen wird ersichtlich, dass das Gebiet höchster Korrelation eine Länge von rund $200\ \text{nm}$ besitzt. Die Ausdehnung ist also etwas größer als bei den TEM-Aufnahmen, die Werte bewegen sich jedoch in derselben Größenordnung. Die Abmessungen der grünen Zonen mit nur mittlerer Korrelation sind bei den drei Simulationen unterschiedlich, wobei dieser Effekt vermutlich eher auf die stochastische Simulationemethode zurückzuführen ist, als auf den Abschneideradius. Bei Vergrößerung der Cutoff-Länge ist kein monotoner Trend, d.h. kein durchgehendes Ansteigen oder Abfallen der Korrelationslänge, zu verzeichnen.

Ein Verschwinden der Korrelation bei kleinen Entfernungen wie bei den TEM-Aufnahmen ist bei den Korrelationsbildern der Simulationen nicht sichtbar. Dies ist dadurch begründet, dass die Größe jeder einzelnen Zelle in der Simulation rund $3\ \text{nm}$ beträgt. Diese Länge entspricht dem Annihilationsabstand bei AlMg5Mn. Zudem besitzen auch die Korrelationsbilder nur eine begrenzte Anzahl von 400×400 Pixeln, womit die Auflösung umgekehrt proportional zur Kantenlänge des Simulationsgitters ist.

Insgesamt läßt sich also sagen, dass die Versetzungsstrukturen von Simulation und TEM-Aufnahmen nicht nur optisch in ihrer Regelmäßig- und Rechtwinkligkeit übereinstimmen, sondern dass dies auch durch Korrelationsuntersuchungen belegt werden kann, wobei kleine Unterschiede bei den tatsächlichen Längen existieren.

7.4 Dehnungsgesteuerte Simulationen

Unter Verwendung der in Kapitel 5.4.1 beschriebenen dehnungsgesteuerten Simulationemethode wurde ein Zugversuch zur Bestimmung einer Spannungs-Dehnungs-Kurve nachgebildet. Zur Aufrechterhaltung einer konstanten Dehnrate ist jeder Simulationsschritt so oft wiederholt worden, bis sich 20% der mobilen Versetzungen in x -Richtung bewegt haben. Die dazu nötige externe Spannung wurde protokolliert. Die Simulationsrechnungen wurden in einer $2,96 \times 2,96\ \mu\text{m}$ großen Simu-

lationszelle mit einer Ausgangsversetzungsdichte von $4 \cdot 10^{14} m^{-2}$ und drei aktiven Gleitrichtungen durchgeführt.

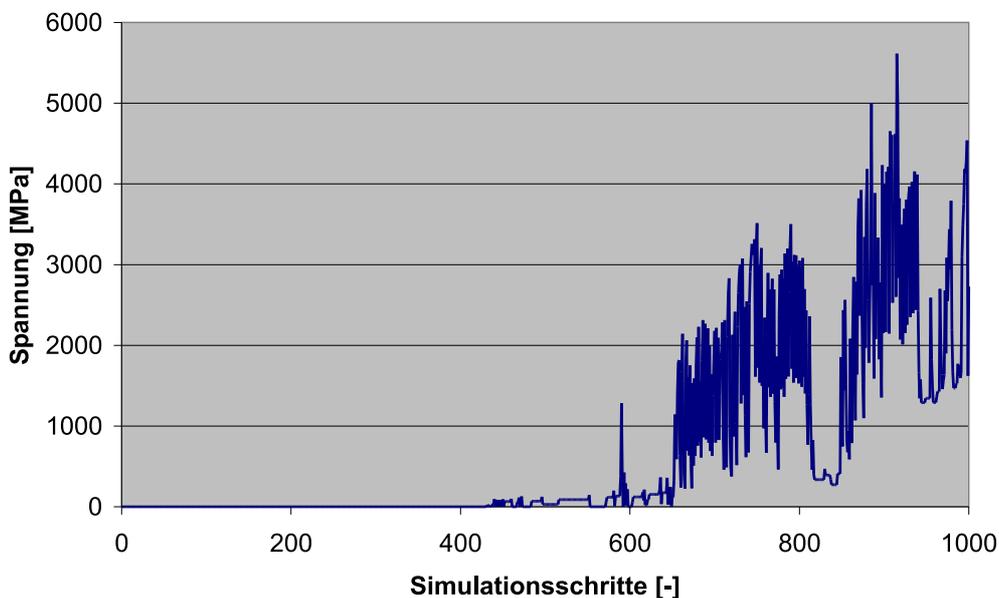


Abbildung 7.10: Externe Spannung der dehnungsgesteuerten Simulation.

Die resultierende Spannungs-Dehnungs-Kurve ist in Abbildung 7.10 dargestellt. Sie ist gekennzeichnet durch einen ersten Bereich, in dem es keiner externen Spannung bedarf, um die Versetzungen abgleiten zu lassen. Dies liegt in der anfänglichen Zufallsverteilung der Versetzungen begründet, wodurch in den ersten ca. 400 Schritten einer Simulation zunächst Selbstordnungsmechanismen in Erscheinung treten. Sobald diese Prozesse abgeschlossen sind, hat sich ein lokaler Gleichgewichtszustand der Versetzungsstrukturen eingestellt. Es kommt nun zu einem Anstieg der benötigten externen Spannung, um die Versetzungsbewegungen aufrecht zu halten, da die Versetzungen von außen zugeführte Energie benötigen, um ihre Gleichgewichtspositionen verlassen zu können. Im weiteren Verlauf der Simulation entstehen zum Teil weniger stabile Versetzungsanordnungen, bei denen es einer geringeren externen Spannung bedarf, um Versetzungen aus dieser Konfiguration zu lösen und die konstante Abgleitrate aufrecht zu erhalten. Zudem kommt es zum Teil zum kollektiven Abgleiten ganzer Bereiche, da Versetzungen durch anziehende Kraftfelder sich bereits bewegender Versetzungen mitgerissen werden können. Diese Effekte können in unterschiedlichem Maße auftreten, so dass es einerseits zu kleinen, auf wenige Simulationsschritte begrenzten Schwankungen, andererseits zu längeren Phasen mit geringer relativer Spannung kommt, die sich über 50 Schritte erstrecken. Diese sich wiederholenden Effekte sind mit dem verwendeten Modell eines simulierten Einkristalls zu erklären, in dem Prozesse wie z.B. Korngrenzgleiten nicht berücksichtigt worden sind. Aus demselben Grund liegen auch die Werte der externen Spannungen über den Vergleichswerten von realen Zugversuchen an AlMg5Mn. Ein genereller Anstieg der externen Spannung im Verlauf der Simulation, der einer Verfestigung des Werkstoffs entspricht, ist trotz Schwankungen klar erkennbar.

Die beschriebene Simulationsrechnung kann aufgrund ihrer Randbedingungen nur einen gewissen Teil einer realen Spannungs-Dehnungs-Kurve abdecken, welcher in Abbildung 7.11 rot markiert ist. Durch die Unveränderlichkeit des Simulationsgitters können beispielsweise keine Einschnüreffekte

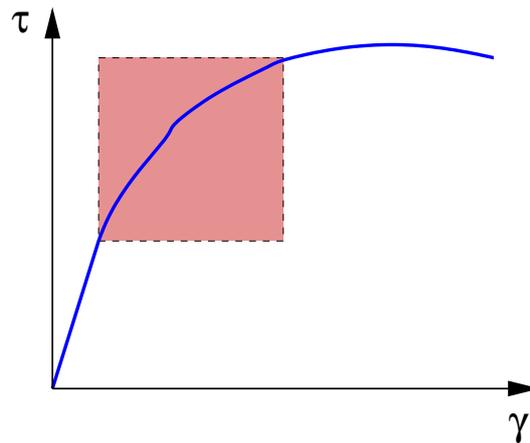


Abbildung 7.11: Spannungs-Dehnungs-Diagramm von Aluminiumlegierungen. Der in diesem Kapitel simulierte Bereich ist rot markiert.

gegen Ende eines Zugversuchs berücksichtigt werden. Die Unterschiede zu einem realen Spannungs-Dehnungs-Diagramm sind weiterhin im Maßstab der Simulation begründet. Reale Zugversuche stellen makroskopische Mittelwerte für ein polykristallines Gefüge dar, bei der Versetzungsanordnungen in den einzelnen Körnern keine signifikanten Auswirkungen auf den Spannungsverlauf im Gesamtkristall haben. Bei einem simulierten Einkristall ohne weitere Kristallgitterdefekte außer Versetzungen ist dies jedoch der entscheidende Faktor. Da das vorgestellte Simulationsverfahren auf Versetzungsbewegungen, also plastischen Verformungen basiert, können außerdem keine elastischen Effekte berücksichtigt werden, so dass der Bereich der Hookeschen Gerade im Spannungs-Dehnungs-Diagramm nicht nachgebildet werden kann. Der sich hieraus ergebende Offset für die externe Spannung aus Abbildung 7.10 wird im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter untersucht.

8 Simulationsrechnungen zum Nano-Indenter

Die Materialeigenschaften eines Werkstoffs können experimentell auf unterschiedliche Arten bestimmt werden. Neben Zugversuchen zur Bestimmung der Spannungs-Dehnungs-Kurve sind in der Werkstoffprüfung auch Eindruckversuche, engl. „indentation tests“, zur Härtemessung weit verbreitet. Hierbei wird mit einem definierten Prüfkörper ein Eindruck in der Oberfläche des Materials erzeugt.

8.1 Grundlagen

Die hier beschriebenen Verfahren zählen zu den statischen Prüfverfahren, da die Prüfkraft stoßfrei aufgebracht wird und während einer vorbestimmten Zeit ruhend auf die Probe einwirkt. Nach dem Entlasten wird der bleibende Eindruck vermessen. Die Verfahren werden unterschieden nach zwei Meßprinzipien:

Messung der Eindruckfläche: Verfahren nach Brinell, Vickers,

Messung der Eindringtiefe: Verfahren nach Rockwell.

Bei Eindruckversuchen nach dem Verfahren von Brinell [EN6506] wird ein kugelförmiger Eindruckkörper mittels einer Prüfeinrichtung mit definierter Prüfkraft F_p senkrecht in die ebene Probenoberfläche hineingedrückt [Cha99]. Der Eindringkörper ist hierbei eine Hartmetallkugel mit Durchmesser D , und der Eindruckdurchmesser a , der nach Wegnahme der Prüfkraft auf der Prüffläche entsteht, wird anschließend gemessen. Die Brinellhärte berechnet sich nach

$$HBW = 0,102 \cdot \frac{2F_p}{\pi D(D - \sqrt{D^2 - a^2})}.$$

Es muss eine Vorbehandlung der Probe stattgefunden haben, so dass sie frei von Zunder, Fremdkörpern und Schmierstoffen ist. Ihre Dicke muss mindestens das Achtfache der Eindringtiefe h_i betragen.

Beim Verfahren nach Vickers [EN6507] wird ein Diamant-Eindruckkörper in Form einer geraden Pyramide mit einem festgelegten Winkel von 136° zwischen gegenüber liegenden Flächen in die Probenoberfläche eingedrückt, und die beiden Diagonalen a_1 und a_2 des Eindrucks, der nach Rücknahme der Prüfkraft auf der Prüffläche entsteht, werden gemessen. Die Vickershärte berechnet sich nach

$$HV = 0,102 \cdot \frac{2F_p \sin \frac{136^\circ}{2}}{a^2}.$$

a bezeichnet den arithmetischen Mittelwert der beiden Diagonalenlängen a_1 und a_2 . Es gelten die gleichen Anforderungen an die Probenvorbehandlung wie beim Verfahren nach Brinell, die Proben- oder Schichtdicke muss mindestens das 1,5-fache der mittleren Diagonalenlänge des Eindrucks betragen.

Das Verfahren nach Rockwell [EN6508] unterscheidet sich von den beiden vorigen Verfahren dadurch, dass der Eindruckkörper in zwei Stufen unter vorgegebenen Bedingungen in die Probe eingedrückt wird. In der ersten Stufe erfolgt ein Eindringen aufgrund einer Prüfvorkraft, in einer zweiten Stufe kommt die Prüfkraft hinzu. Nach Entlastung wird bei diesem Verfahren die Eindringtiefe gemessen. Beim Rockwell-Verfahren können zwei verschiedene Eindruckkörper verwendet werden. Dies ist einerseits ein abgerundeter Diamantkegel mit 120° Kegelwinkel, wobei sich diese Variante nur für harte Werkstoffe eignet, andererseits kommt bei Werkstoffen mit mittlerer Härte eine Hartmetallkugel von 1,59 mm Durchmesser zum Einsatz. Die Probendicke muss mindestens das 10-fache der bleibenden Eindringtiefe betragen.

Je nach Größe der Prüfkraft werden die Verfahren in Makro-, Mikro- und Ultramikrohärtemessungen unterschieden. Speziell für Härtemessungen dünner Schichten, ohne störenden Einfluss des unterliegenden Trägermaterials, dient die Bestimmung der Nanohärte, die mit den geringsten Kräften arbeitet.

Mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode wurde auf makroskopischer Ebene das Materialverhalten während der Indentation eines kugelförmigen Körpers untersucht [Fol84], [Sin85]. Die Bestimmung der Härte und der Übergang vom elastischen zum plastischen Verhalten standen hierbei im Vordergrund. Ein Modell zur Beschreibung der Deformation der Materialoberfläche um kugelförmige und pyramidale Eindrücke wurde in [Alc00] aufgestellt. Das Aufstauen oder Einsinken des Werkstoffs um den Indenter verändert den gemessenen Härtewert, da sich die Kontaktfläche erhöht, bzw. verringert.

Aus der elastischen Theorie nach HERTZ [Her1881] folgt für die wahre Eindringtiefe h_i eines Indenters in eine ebene Oberfläche

$$h_i = h_s c^2 = \frac{a^2}{D}.$$

Ein Maß für das Aufstauen oder Einsinken ist der Parameter c , wobei nach der Elastizitätstheorie $c^2 = 0,5$ gilt. h_s ist die maximale Eindringtiefe, a der Eindruckdurchmesser und D der Durchmesser des Indenters. Voraussetzung ist, dass $a \ll D$.

Gemäß dem plastischen Modell nach MEYER [Gra98] gilt der grundlegende Zusammenhang zwischen a , D und der aufgetragenen Last P

$$P = K \frac{a^{n+2}}{D^n},$$

wobei n und K materialspezifische Konstanten sind. Hieraus ergibt sich mit $\kappa = K/\pi$ die Brinellhärte H zu

$$H = \frac{P}{\pi a^2} = \kappa (a/D)^n.$$

Auch bei diesen makroskopischen Modellen werden empirisch ermittelte Materialeigenschaften zur Berechnung verwendet. Mit Hilfe des vorgestellten zweidimensionalen Versetzungssimulationsmodells soll nun die Entwicklung der Mikrostruktur in der Materialprobe unter dem Eindruckkörper während eines solchen Tests untersucht werden, so dass Rückschlüsse auf die Materialeigenschaften gezogen werden können.

8.2 Modellbildung

Um einen Eindruckversuch mit Hilfe der Versetzungssimulation nachzubilden, ist die Größe des Eindruckkörpers von entscheidender Bedeutung. Da sich Mikroindruckkörper im Größenbereich von $\sim 50 - 200 \mu\text{m}$ bewegen [Alc98], die Simulationszellen des Versetzungssimulationsmodells jedoch nur Kantenlängen von einigen μm aufweisen, ist die Nachbildung eines Versuchs mit dem Modell nicht möglich. Eindruckkörper bei Nanohärtemessungen besitzen eine Größe von $\sim 500\text{nm}$, so dass sich diese Arbeit auf die Untersuchung der Mikrostruktur solcher Versuche beschränkt.

Aufgrund der Unveränderlichkeit der Simulationszelle kann kein tatsächliches Eindringen eines Körpers in das Gitter nachgebildet werden. Da der größte Teil der mikrostrukturellen Veränderungen jedoch durch das vom Eindruckkörper hervorgerufene Spannungsfeld verursacht wird, darf eine solche Vereinfachung in diesem Stadium erfolgen. Zur Simulation wird der in Kapitel 5.4.1 vorgestellte Typ der Spannungssteuerung verwendet. Auf die durch Versetzungen hervorgerufenen internen Spannungsfelder wird ein vom Indenter verursachter Spannungsanteil hinzuaddiert. Dieses Spannungsfeld ist inhomogen im Bereich des Simulationsgitters und damit ist der zur Spannung jeder Versetzung addierte Teil abhängig von ihrer Position.

Aufgrund der Singularität des Spannungsfelds von pyramidalen Eindruckkörpern wird im Rahmen dieses Versuchs angenommen, dass die Spitze der Pyramide hinreichend rund sei. Diese Annahme ist bei nicht-kugelförmigen Eindruckkörpern aus fertigungstechnischen Gründen gerechtfertigt. Es kann also das Modell einer ausreichend kleinen Kugel als Indenterspitze verwendet werden. Analog zur Definition des zweidimensionalen Versetzungssimulationsmodells muss auch das Spannungsfeld des Eindruckkörpers in x - und y -Richtung berechnet werden. Da das Modell auf in z -Richtung unendlich langen Versetzungssegmenten basiert, muss das Spannungsfeld der kugelförmigen Indenterspitze also dem eines unendlich langen Zylinders in z -Richtung entsprechen.

Ein derartiges Spannungsfeld kann folgendermaßen dargestellt werden [Alc01]: Ein unendlich langer Zylinder, dessen Achse in z -Richtung verläuft, wird mit dem Simulationsgitter in Kontakt gebracht. Während des Eindringens des Zylinders in das Simulationsgebiet erhält man also einen unendlich langen Streifen der Breite a . Der Punkt des ersten Kontakts von Zylinder mit dem Simulationsgitter definiert den Ursprung eines Koordinatensystems, in dem die durch den Zylinder aufgebrachte Linienlast P in y -Richtung wirkt. Dieser Ursprung sitzt mittig auf dem oberen Rand der Simulationszelle. Der zylindrische Indenter mit Radius R wird analog zur diamantenen Beschaffenheit von Vickers-Indentern als starr und unnachgiebig aufgefasst, so dass für seinen Elastizitätsmodul gilt: $E_{ind} \rightarrow \infty$. Das simulierte Material besitzt den E-Modul E und die Poissonzahl ν . Mit den Variablen

$$m^2 = \frac{1}{2} [\{ (a^2 - x^2 + y^2)^2 + 4x^2y^2 \}^{1/2} + (a^2 - x^2 + y^2)]$$

$$\text{und } n^2 = \frac{1}{2} [\{ (a^2 - x^2 + y^2)^2 + 4x^2y^2 \}^{1/2} - (a^2 - x^2 + y^2)]$$

lässt sich das Spannungsfeld wie folgt darstellen:

$$\sigma_x = -\frac{p_0}{a} \left[m \left(1 + \frac{y^2 + n^2}{m^2 + n^2} \right) - 2y \right],$$

$$\sigma_y = -\frac{p_0}{a} m \left(1 - \frac{y^2 + n^2}{m^2 + n^2} \right),$$

$$\sigma_{xy} = -\frac{p_o}{a} n \left(\frac{m^2 - y^2}{m^2 + n^2} \right).$$

Hierbei ist die maximale Kontaktspannung p_o gegeben durch

$$p_o = \frac{2P}{\pi a} = \frac{4}{\pi} p_m = \left(\frac{PE^*}{\pi R} \right)^{1/2}$$

mit

$$E^* = \frac{E}{1 - \nu^2}.$$

Die durchschnittliche Kontaktspannung p_m wird gewöhnlich als Härte bezeichnet.

Da in der Realität der Indenter auf eine frei Oberfläche des Materials drückt, wird im Gegensatz zu den vorangegangenen Simulationsrechnungen, bei denen das Simulationsgitter aufgrund der periodischen Randbedingungen als ein Torus aufgefasst wird, in diesem Versuch das Verlassen von Versetzungen an horizontalen Rändern des Simulationsgitters verhindert, um so die Wanderung von Versetzungen aus der Simulationszelle hinaus und aufgrund periodischer Randbedingungen an der freien Oberfläche wieder in das Gitter hinein zu unterbinden. Das Gitter kann also als eine Zylinderoberfläche interpretiert werden. Versetzungen können nur noch an vertikalen Rändern des Simulationsgitters aufgrund periodischer Randbedingungen herauslaufen und an gegenüber liegender Seite neu eingesetzt werden. Wie bereits erwähnt, erfolgt die Lasteinleitung aufgrund der verwendeten Koordinatensysteme von unten in der Mitte des Simulationsgitters. Die maximale Eindringtiefe des

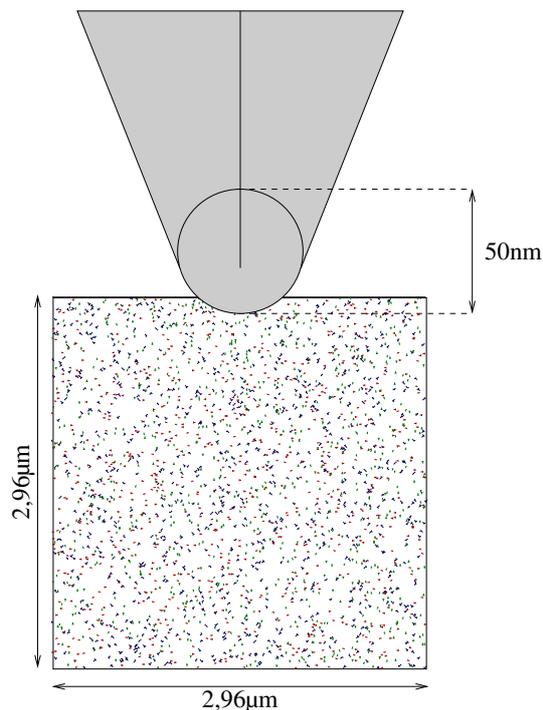


Abbildung 8.1: Schematischer Aufbau des verwendeten Zylindermodells einer Indenter-Simulation.

Indenters wird auf $1/10$ des Radius begrenzt. Der Eindringvorgang wird gleichmäßig auf die gesamte Simulationszeit aufgeteilt. Das verwendete Simulationsgitter besteht weiterhin nur aus einem einzelnen Korn, es weist damit keine zusätzlich vorgegebene Mikrostruktur bestehend aus Korngrenzen auf. Nach [Swy02] werden die beobachteten Versetzungen für größere Eindringtiefen von der umgebenden Korngrenzenstruktur aufgenommen, so dass sich die plastische Deformation ausschließlich auf das Korn direkt unter dem Indenter beschränkt, die vorgenommene Einschränkung also gerechtfertigt ist.

Aufgrund der Diskretisierung des Gitters werden die durch den Indenter aufgebrachten Kräfte in den Mittelpunkten der entsprechenden Zellen berechnet. Ferner sind in den Simulationen alle Gleitrichtungen aktiviert.

8.3 Simulationsrechnungen

In einer Simulationsrechnung bei Raumtemperatur unter Verwendung eines Indenters mit Radius 500nm und einer durch diesen aufgebrachten Linienlast von 500N/m bildete sich nach 1000 Schritten keine signifikante Mikrostruktur heraus. Unter Berücksichtigung der in Kapitel 7.4 ermittelten Spannungswerte scheint die gewählte Linienlast zu gering zu sein. Bei einer Erhöhung um den Faktor 1000 bildet sich schon nach einem Drittel der durchlaufenden Simulationsschritte eine charakteristische Mikrostruktur heraus, die nach 1000 Schritten die in Abbildung 8.2 (links) gezeigte Anordnung annimmt. Unter Einfluss des vom Eindruckkörper hervorgerufenen Spannungsfelds ent-

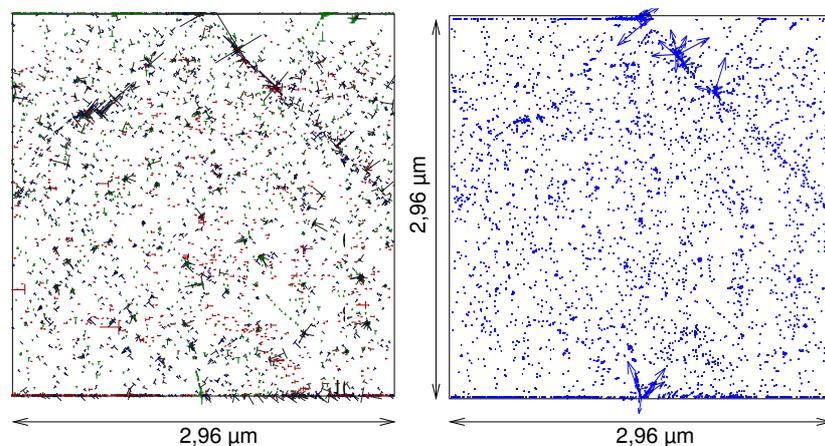


Abbildung 8.2: Versetzungsanordnung und qualitative vektorielle Darstellung der resultierenden Kraftfelder am Ende einer Indenter-Simulation.

steht eine charakteristische V-förmige Versetzungsanordnung, zentriert um den Ort des ersten Kontaktes von Indenter und Simulationsgitter. In der unteren Hälfte des Simulationsgitters mit $2,96\mu\text{m}$ Kantenlänge sind keine außergewöhnlichen Effekte feststellbar, da der Indentereinfluss in diesem Bereich nicht ausreichend ist, um signifikante Versetzungsbewegungen hervorzurufen. An der unteren Kante des Gitters ist ein Aufstauen von Versetzungen zu verzeichnen. Dies wird durch die

eingeschränkten periodischen Randbedingungen an den horizontalen Begrenzungen hervorgerufen, die ein Einsetzen von Versetzungen an der gedachten freien Oberfläche unterbinden sollen. Dieser enge Bereich stellt somit keine realistische Versetzungsanordnung im realen Kristall dar, er wird keiner weiteren Interpretation unterzogen.

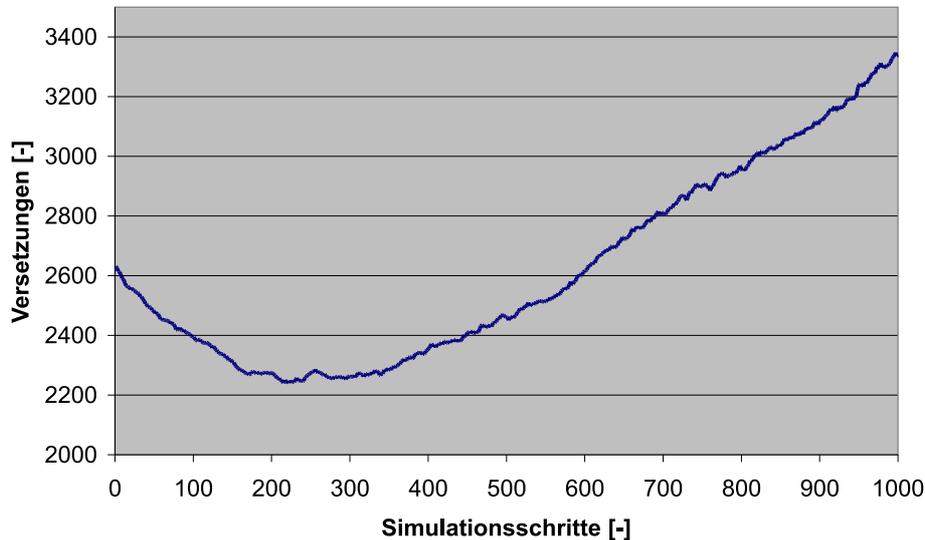


Abbildung 8.3: Anzahl von Versetzungen im Verlauf einer Indenter-Simulation.

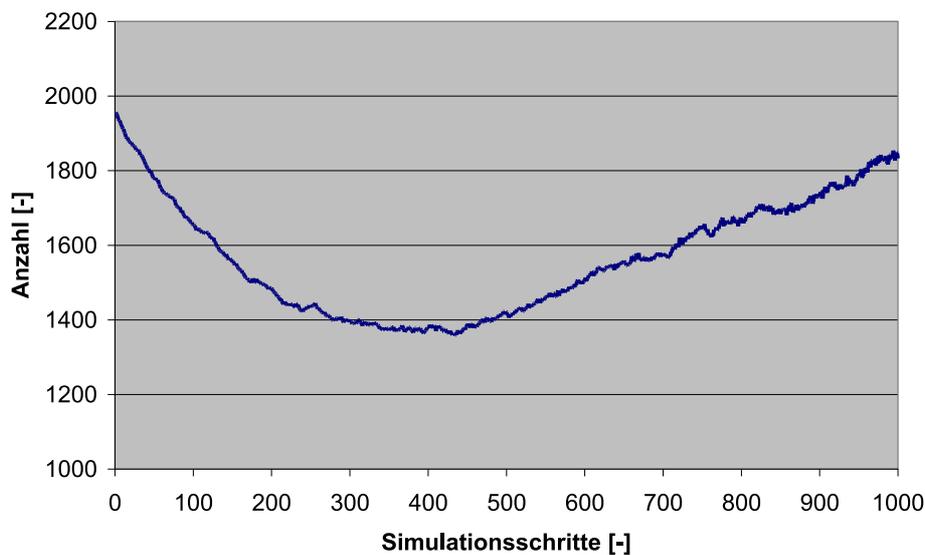


Abbildung 8.4: Anzahl von Versetzungsbewegungen im Verlauf einer Indenter-Simulation.

Abbildung 8.2 (rechts) zeigt wiederum qualitativ die herausgebildeten Kraftvektoren an den Positionen der Versetzungen. In einem sehr großen Bereich des Simulationsgitters haben die Versetzungen Gleichgewichtspositionen eingenommen, so dass keine Kräfte mehr zwischen ihnen wirken. Am oberen Rand des Gitters, im V-förmigen Versetzungsprofil direkt unter dem Indenter, sind noch ausgeprägte Kraftvektoren sichtbar. Aufgrund des immer noch wirkenden externen Spannungsfelds

des Indenters ist diese Region noch in Bewegung. Die hohe Versetzungsdichte, aus der hohe lokale Spannungen resultieren können, sorgt zusammen mit der Indenterspannung für die Aktivierung von Lomer-Cottrell-Versetzungen als Frank-Read-Quellen für neue Versetzungen, was zu weiteren Verspannungen im Nahbereich führen kann. Die Kräfte am unteren Bildrand werden durch interne Spannungen zwischen den Versetzungen hervorgerufen, die sich am unteren Rand aufgestaut haben. Diese Kräfte sind jedoch nicht groß genug, um das restliche Gitter zu beeinflussen oder die Positionen anderer Versetzungen signifikant zu verfälschen.

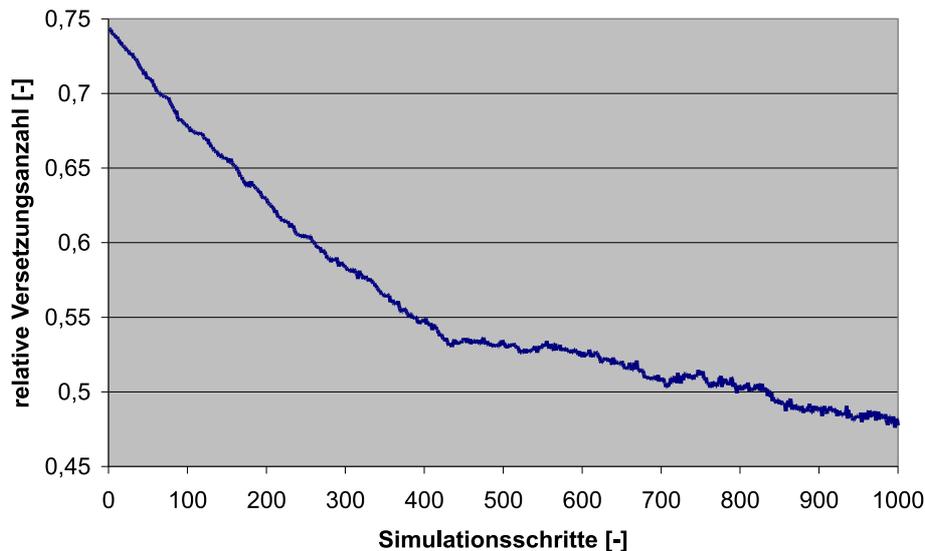


Abbildung 8.5: Relative Anzahl von Versetzungsbewegungen im Verlauf einer Indenter-Simulation.

Abbildung 8.3 zeigt die Anzahl der Versetzungen über den Verlauf der Simulation. Die zufällige Anfangsverteilung führt zu einer hohen Annihilation von Versetzungen in den ersten 200 Schritten, bis genügend Frank-Read Quellen aufgrund der steigenden Indenterspannung aktiviert werden, welche die Versetzungsdichte bis weit über den Ausgangswert erhöhen. Während das Minimum der Versetzungsanzahl bei rund 220 Simulationsschritten erreicht wird, ist dies bei den Versetzungsbewegungen erst später der Fall, wie in Abbildung 8.4 zu sehen ist. Die Anzahl der Versetzungsbewegungen sinkt rund 440 Schritte lang, bevor die Zunahme der Versetzungsdichte auch zu einem Zuwachs an Versetzungsbewegungen führt. Es kommt trotz der Erhöhung jedoch nicht zu einem Anstieg über den Anfangswert. Dies ist mit der verstärkten Bildung von Lomer-Cottrell-Versetzungen in Umgebung der Frank-Read-Quellen zu erklären, die dazu führt, dass die neu gebildeten Versetzungen nur kurze freie Wege zurücklegen können, bevor sie mit anderen Versetzungen reagieren.

Die Kombination aus Abbildung 8.3 und 8.4 ist Abbildung 8.5, in der die relative Anzahl der Versetzungen, die sich pro Schritt bewegen, aufgetragen ist. Die Stabilisierung der Versetzungsanordnung wird generell durch das Absinken der Kurve verdeutlicht. Es kommt zu einem nahezu linearen Abfall während der ersten rund 220 Schritte, bis sich die Steigung der Kurve etwas verringert und sie wiederum linear flacher weiter verläuft. Ein weiterer Knick ist bei rund 440 Schritten zu verzeichnen. Beide Änderungen der Steigung stimmen sehr gut mit den Minima aus Abbildungen 8.3 und 8.4 überein.

9 Zusammenfassung

Simulationsmethoden nehmen in den Werkstoffwissenschaften einen immer höheren Stellenwert ein. Im Zuge der stetigen Weiterentwicklung von Mikroprozessoren ist es möglich geworden, immer komplexere Probleme zu simulieren. So können makromechanische Modelle auf Basis der Methode der Finiten Elemente beispielsweise das Umformverhalten von Feinblechen beim Tiefziehen unter Berücksichtigung der Rückfederung nachbilden oder das Crashverhalten komplexer Bauteile richtig wiedergeben. Voraussetzung für derartige Simulationen sind korrekte Eingabedaten für die modellierten Werkstoffe, welche bislang durch empirische Methoden, beispielsweise durch Zugversuche, bestimmt werden.

Zur Verringerung dieser Empirik sollten Materialdaten durch Simulationen bestimmt werden, welche auf grundlegenden kristallphysikalischen Eigenschaften des modellierten Werkstoffs basieren. Hierzu können mikrostrukturelle Simulationsmethoden einen entscheidenden Beitrag liefern, indem sie das Zusammenspiel von Versetzungen und anderen Kristallgitterdefekten abbilden. Ziel der in dieser Arbeit beschriebenen und weiterentwickelten Simulationsmethode, welche Elemente von Zellularautomaten und Monte-Carlo-Methode verbindet, ist die Berechnung temperaturabhängiger Fließkurven und das Erlangen tiefgehender werkstoffphysikalischer Erkenntnisse durch Simulation der mikrostrukturellen Gefügeveränderungen. Der Schwerpunkt des verwendeten Modells liegt in der Untersuchung mechanischer Einflüsse in Abhängigkeit des verwendeten Umformverfahrens auf die Mikrostruktur des verwendeten Werkstoffs. Da sich grundlegende Simulationsparameter mit der abzubildenden Elementarzelle des Werkstoffs ändern, wurde die Untersuchung auf kubisch-flächenzentrierte Materialien beschränkt, aus Gründen der Probenpräparation wurde exemplarisch eine Aluminium-Magnesiumlegierung (AlMg5Mn) gewählt.

Das vorgestellte Simulationsverfahren wurde erfolgreich eingesetzt, um die Wechselwirkungsreichweite von Peach-Koehler-Kräften in der modellierten Aluminium-Magnesiumlegierung zu bestimmen. Es wurde gezeigt, dass der häufig in der Literatur zitierte Wert von $5/\sqrt{\rho}$ zu klein ist und damit zur Entstehung von Artefakten und künstlichen Versetzungsanordnungen führt.

Mittels einer dehnungsgesteuerten Simulation, bei der zur Nachbildung von Zugversuchen eine konstante Dehnrage in einer Richtung eingehalten werden kann, wurde eine Fließkurve berechnet, welche die ablaufende Kaltverfestigung im Material durch einen Anstieg der erforderlichen externen Spannung dokumentiert, jedoch sind die ermittelten Zahlenwerte noch zu hoch. Hier besteht weiterer Forschungsbedarf.

Die bei den Simulationen entstehenden Strukturen weisen große Ähnlichkeit mit realen Versetzungsanordnungen auf. Kubisch-flächenzentrierte Werkstoffe neigen zur Bildung regelmäßiger Zell- und Labyrinthstrukturen, und derartige Strukturen ergaben sich auch in den Simulationen. Neben direkten visuellen Vergleichen von Simulationsergebnissen mit Aufnahmen aus dem Transmissionselektronenmikroskop kamen Korrelationsverfahren zum Einsatz. Hierbei wurden Gemeinsamkeiten von simulierten und realen Mikrostrukturen hinsichtlich ihrer Orientierung und Ausdehnung auch quantitativ nachgewiesen.

Da der Vergleich zwischen simulierten und realen Mikrostrukturen auch einen Vergleich der Ver-

setzungsdichten beinhalten muss, wurde zur Bestimmung ein Verfahren vorgestellt, welches diesen, bei TEM-Aufnahmen zeitaufwändigen und komplexen Vorgang, automatisiert. Die bislang angewendeten manuellen Methoden erforderten ein hohes Maß an Mitarbeiterinteraktion und lieferten je nach Erfahrung des Anwenders schlecht reproduzierbare Werte.

Idealerweise bietet ein Bildverarbeitungssystem zur automatischen Versetzungsdichtebestimmung mehr als eine Berechnungsmethode und wählt dann die für die jeweilige Aufnahme geeignetste selbstständig ohne weitere Mitarbeiterinteraktion aus.

Bei der Implementierung eines automatischen Verfahrens mit Methoden der Bildverarbeitung musste gewährleistet werden, dass der modulare Programmcode diese Anwendererfahrung berücksichtigt. So wird aus mehreren parallel ausgeführten Vorverarbeitungsmethoden die geeignetste ausgewählt und die Versetzungsdichte danach durch zwei voneinander unabhängige Verfahren berechnet. Ergebnisse des automatisierten Algorithmus wurden mit konventionell bestimmten Werten verglichen.

Mikrostrukturelle Simulationsmethoden werden auch in Zukunft weiter an Bedeutung gewinnen. Die in dieser Arbeit erlangten Erkenntnisse liefern einen entscheidenden Beitrag zur Verbesserung von makroskopischen Modellen, wie sie beispielsweise zur Simulation von Umformprozessen eingesetzt werden und ermöglichen weiterhin die genauere Anpassung von Werkstoffen an spezielle Anforderungen. Langfristiges Ziel bleibt die Modellierung und Simulation eines kompletten Herstellungs- und Verarbeitungsprozesses, beispielsweise von der Schmelze über die Blechherstellung bis zur Umformung eines Bauteils im industriellen Maßstab.

10 Literaturverzeichnis

- [Abm94] W. Abmayr. *Einführung in die digitale Bildverarbeitung*. Teubner, Stuttgart, 1994.
- [Alc98] J. Alcalá, A. Giannakopoulos, S. Suresh. Continuous measurements of load-penetration curves with spherical microindenters and the estimation of mechanical properties. *J. Mater. Res.*, **13**, 5, Seite 1390ff, 1998.
- [Alc00] J. Alcalá, A. Barone, M. Anglada. The influence of plastic hardening on surface deformation modes around vickers and spherical indents. *Acta Mater.*, **48**, Seite 3451ff, 2000.
- [Alc01] J. Alcalá. Persönliche Mitteilung, 2001.
- [Alu92] S. Aluru, G. Prabhu, J. Gustafson. A random number generator for parallel computers. *Parallel Computing*, **18**, Seite 839ff, 1992.
- [Amo90] R. Amodeo, N. Ghoniem. Dislocation dynamics. I. A proposed methodology for deformation micromechanics. *Phys. Rev. B*, **41**, Seite 6958ff, 1990.
- [And84] M. Anderson, D. Srolovitz, G. Grest, P. Sahni. Computer simulation of grain growth - I. Kinetics. *Acta Metall.*, **32**, Seite 783ff, 1984.
- [And86] M. Anderson. *Simulation of grain growth in two and three dimensions*. In: N. Hansen et al. (Hrg.) *Annealing Processes - Recovery, Recrystallization and Grain Growth, Proc. 7th Risø Int. Symposium of Metallurgy and Materials Science*. Risø National Laboratory, Roskilde, 1986.
- [Are00] H. Aretz, R. Luce, M. Wolske, R. Kopp, M. Goerdeler, V. Marx, G. Pomana, G. Gottstein. *Integration of physically based models into FEM and application in simulation of metal forming processes*. In: R. Sebald (Hrg.) *Integral Materials Modelling: SFB 370 Workshop*. Shaker, Aachen, 2000.
- [Are01] H. Aretz, R. Luce, M. Wolske, R. Kopp, M. Goerdeler, G. Pomana, G. Gottstein. Incorporation of microstructure and texture models into FEM. *J. Phys. IV France*, **11**, Seite 115ff, 2001.
- [Ars01] R. Arsenault. *Thermally activated motion of dislocations*. In: R. Arsenault et al. (Hrg.) *Computer Simulation in Materials Science*. ASM International, Ohio, 1986.
- [Aug66] M. August. *Theorie statischer Versetzungen*. Teubner, Leipzig, 1966.
- [Bac02] Fr.-W. Bach, H. Haferkamp, A. Kuhlmeier, M. Niemeyer. Monte-Carlo simulation of dislocation networks using the message passing interface. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **10**, Seite 215ff, 2002.

- [Brg88] H. Bargel, G. Schulze. *Werkstoffkunde*. VDI-Verlag, Düsseldorf, 1988.
- [Brt95] D. Barts, A. Carlsson. Order-N method for force calculation in many-dislocation systems. *Phys. Rev. E*, **52**, Seite 3195ff, 1995.
- [Ber89] W. Bergmann. *Werkstofftechnik, Teil 1, Grundlagen*. Hanser, München, 1989.
- [Blu01] W. Blum, F. Roters. Spontaneous dislocation annihilation explains the breakdown of the power law of steady state deformation. *Phys. Stat. Sol. (a)*, **184**, Seite 257ff, 2001.
- [Boe92] H. Böhm. *Einführung in die Metallkunde*. BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1992.
- [Cau01] J. Caubet, J. Gimenez, J. Labarta, L. DeRose, J. Vetter. *A dynamic tracing mechanism for performance analysis of OpenMP applications*. In: R. Eigenmann, M. Voss (Hrg.) *International Workshop on OpenMP Applications and Tools, WOMPAT 2001. Proceedings (Lecture Notes in Computer Science Vol. 2104)*. Springer, Berlin, 2001.
- [Cha99] H. Chandler. *Hardness Testing*. ASM International, Ohio, 1999.
- [Con85] H. Conway, E. Berlekamp, R. Guy. *Gewinnen: Strategien für mathematische Spiele*, Band 4. Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 1985.
- [Cot52] A. Cottrell. The formation of immobile dislocations during slip. *Phil. Mag.*, **43**, Seite 645ff, 1952.
- [Cot53] A. Cottrell. *Dislocations and Plastic Flow in Crystals*. Oxford University Press, Oxford, 1953.
- [Cot65] A. Cottrell. *Theory of Crystal Dislocations*. Gordon & Breach, New York, 1965.
- [Cot67] A. Cottrell. *An Introduction to Metallurgy*. Edward Arnold Publishers, London, 1967.
- [Dem98] C. Demant, B. Streicher-Abel, P. Waszkewitz. *Industrielle Bildverarbeitung*. Springer, Berlin, 1998.
- [Dev96] B. Devincere. *Meso-scale simulations of the dislocation dynamics*. In: H. Kirchner et al. (Hrg.) *Computer Simulation in Materials Science*. Kluwer Academic Publishers, London, 1996.
- [Dev01] B. Devincere, L. Kubin, C. Lemarchand, R. Madec. Mesoscopic simulations of plastic deformation. *Mat. Sci. Eng. A*, **309-310**, Seite 211ff, 2001.
- [Die86] G. Dieter. *Mechanical Metallurgy*. McGraw-Hill, New York, 1986.
- [Eig01] R. Eigenmann, M. Voss (Hrg.) *OpenMP Shared Memory Parallel Programming : International Workshop on OpenMP Applications and Tools*. Springer, Berlin, 2001.
- [EN6506] EN ISO 6506-1. *Härteprüfung nach Brinell*. Deutsches Institut für Normung e.V. (Hrg.) Beuth, Berlin, 1999.
- [EN6507] EN ISO 6507-1. *Härteprüfung nach Vickers*. Deutsches Institut für Normung e.V. (Hrg.) Beuth, Berlin, 1999.

- [EN6508] EN ISO 6508-1. *Härteprüfung nach Rockwell*. Deutsches Institut für Normung e.V. (Hrg.) Beuth, Berlin, 1999.
- [Ess74] U. Essmann, H. Mughrabi. Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities. *Phil. Mag. A*, **40**, Seite 731ff, 1974.
- [Est01] Y. Estrin, G. Gottstein, E. Rabkin, L. Shvindlerman. Grain growth in thin metallic films. *Acta Mater.*, **49**, Seite 673ff, 2001.
- [Fly72] M. Flynn. Some computer organizations and their effectiveness. *IEEE Trans. on Computers. C*, **21**, Seite 948ff, 1972.
- [Fol84] P. Follansbee, G. Sinclair. Quasi-static normal indentation of an elasto-plastic half-space by a rigid sphere. I. Analysis. *Int. J. Solids Structures.*, **13**, Seite 81ff, 1984.
- [Fre26] J. Frenkel. Order-N method for force calculation in many-dislocation systems. *Z. Phys.*, **37**, Seite 572ff, 1926.
- [Fuc93] A. Fuchs, D. Rönnpagel. Comparison between simulation calculations and measurements concerning athermal yielding of precipitation hardening of Cu-Co single crystals. *Mat. Sci. Eng. A*, **164**, Seite 340ff, 1993.
- [Gei01] J. Geiger, A. Roósz, P. Barkóczy. Simulation of grain coarsening in two dimensions by cellular automaton. *Acta Mater.*, **49**, Seite 632ff, 2001.
- [Goe00] M. Goerdeler, G. Gottstein. Modelling work hardening of aluminium alloys with dislocation based models. *Materialsweek*, München, DGM, CD-Rom, 2000.
- [Goe01] M. Goerdeler, G. Gottstein. A microstructural work hardening model based on three internal state variables. *Mat. Sci. Eng. A*, **309-310**, Seite 377ff, 2001.
- [Gom00] D. Gomez-Garcia, B. Devincere, L. Kubin. Forest hardening and boundary conditions in 2-D simulations of dislocation dynamics. *Mat. Res. Soc. Symp.*, **578**. In: I. Robertson et al. (Hrg.) *Multiscale Phenomena in Materials: Experiments and Modelling*. Material Research Society, Warrendale, 2000.
- [Gon92] R. Gonzales, D. Wintz. *Digital Image Processing, Analysis and Machine Vision*. Addison Wesley, Reading, 1992.
- [Got01] G. Gottstein, R. Sebal, M. Goerdeler, H. Diepers, R. Prieler, G. Laschet, R. Luce, H. Aretz, R. Kopp. *Integral materials modelling - Recent contributions of SFB 370*. In: U. Dilthey (Hrg.) *Hochleistungsfügeverfahren: Grundlagen, Anwendungen, Ausrüstungen*, 7. *International Aachen Welding Conference*. Shaker, Aachen, 2001.
- [Gou00] A. Gouldstone, H. Koh, K. Zeng, A. Giannakopoulos, S. Suresh. Discrete and continuous deformation during nanoindentation of thin films. *Acta Mater.*, **42**, Seite 2277ff, 2000.
- [Gra98] P. Grau, G. Berg, H. Meinhard, S. Mosch. Strain rate dependence of the hardness of glass and Meyer's Law. *J. Am. Ceram. Soc.*, **81**, Heft 6, Seite 1557ff, 1998.
- [Gul89] A. Gulluoglu, D. Srolovitz, R. LeSar, P. Lomdahl. Dislocation distribution in two dimensions. *Scripta Metallurgica*, **23**, Seite 1347ff, 1989.

- [Hab91] P. Haberäcker. *Digitale Bildverarbeitung*. Hanser, München, 1991.
- [Hab95] P. Haberäcker. *Praxis der digitalen Bildverarbeitung und Mustererkennung*. Hanser, München, 1995.
- [Hbl95] R. Haberlandt, S. Fritzsche, G. Peinel, K. Heinzinger. *Molekulardynamik: Grundlagen und Anwendungen*. Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 1995.
- [Haf01] H. Haferkamp, J. Hoerner, A. Kuhlmeier, M. Niemeyer. Simulation des Verfestigungsverhaltens von Metallen unter thermomechanischen Einflüssen. *Z. angew. Math. Mech.*, **81**, 1, Seite 43ff, 2001.
- [Haf02] H. Haferkamp, M. Niemeyer, S. Walter, M. Schäperkötter. Transmissionselektronenmikroskopische Analysen zur Foliendickebestimmung an kaltverfestigtem und thermisch behandeltem AlMg5Mn. *Praktische Metallographie*, **39**, Heft 6, Seite 289ff, 2002.
- [Hai92] J. Haile. *Molecular Dynamics Simulation*. J. Wiley&Sons, Toronto, 1992.
- [Ham61] R. Ham. The determination of dislocation densities in thin films. *Phil. Mag.*, **6**, Seite 1183ff, 1961.
- [Has70] W. Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, **57**, Seite 97ff, 1970.
- [Hee90] D. Heermann. *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*. Springer, Berlin, 1990.
- [Her1881] H. Hertz. Über die Berührung fester elastischer Körper. *J. Reine Angew. Math.* **92**, Seite 156ff, 1881.
- [Hes92] H. Hesselbarth. *Simulation von Versetzungsstrukturbildung, Rekristallisation und Kriechschädigung mit dem Prinzip der zellulären Automaten*. Dissertation, Technische Universität Braunschweig, 1992.
- [Hrs65] P. Hirsch, A. Howie, R. Nicholson, D. Pashley, M. Whelan. *Electron Microscopy of Thin Crystals*. Butterworths, London, 1965.
- [Hrt82] J. Hirth, J. Lothe. *Theory of Dislocations*. J. Wiley&Sons, New York, 1982.
- [Hoe00] J. Hoerner. *Parallel-objektorientierte Simulation von Versetzungsnetzwerken unter thermo-mechanischer Belastung am Beispiel von AlMg5Mn*. Dissertation, Universität Hannover, 2000.
- [Hor93] E. Hornbogen, E. Skrotzki. *Werkstoff-Mikroskopie*. Springer, Berlin, 1993.
- [Hul84] D. Hull, D. Bacon. *Introduction to Dislocations*. Pergamon Press, Oxford, 1984.
- [Hum00] F. Humphreys. Modelling microstructural evolution during annealing. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **8**, Seite 893ff, 2000.
- [Jae89] B. Jähne. *Digitale Bildverarbeitung*. Springer, Berlin, 1989.

- [Kar02] K. Karhausen, F. Roters. Development and application of constitutive equations for the multiple-stand hot rolling of Al-alloys. *J. Mat. Proc. Tech.*, **123**, Seite 155ff, 2002.
- [Keh62] A. Keh. *Dislocation arrangement in alpha iron during deformation and recovery*. In: J. Newkirk und J. Wernick (Hrg.) *Direct Observation of Imperfections in Crystals*. Interscience Publishers, New York, 1962.
- [Keh63] A. Keh, S. Weissmann. *Deformation substructure in body-centered cubic metals*. In: G. Thomas und J. Washburn (Hrg.) *Electron Microscopy and Strength of Crystals*. Interscience Publishers, New York, 1963.
- [Kes00] A. Keßler. *Entwicklung eines Bildverarbeitungssystems zur Analyse von Versetzungsstrukturen*. Kleine Studienarbeit, Institut für Werkstoffkunde, Universität Hannover, 2000.
- [Kub89] L. Kubin, G. Canova. *The formation of ordered dislocation microstructures*. In: U. Messerschmidt und F. Appel (Hrg.) *Electron Microscopy in Plasticity and Fracture Research of Materials. Proc. Int. Symp. Dresden*. Akademie Verlag, Berlin, 1989.
- [Kub91] L. Kubin. *Simulation of dislocation microstructures*. In: M. Meyer, V. Pontikis (Hrg.) *Computer Simulation in Materials Science*. Kluwer Academic Publishers, London, 1991.
- [Kub92] L. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincere, V. Pontikis, Y. Bréchet. Dislocation microstructures and plastic flow: A three dimensional simulation. *Solid State Phenomena*, **23-24**, Seite 455ff, 1992.
- [Kub96] L. Kubin. *Dislocation Patterns*. In: H. Kirchner et al. (Hrg.) *Computer Simulation in Materials Science*. Kluwer Academic Publishers, London, 1996.
- [Lan57] L. Landau, E. Lifschitz. *Lehrbuch der Theoretischen Physik: Elastizitätstheorie, Band 7*. Akademie-Verlag, Berlin, 1957.
- [Lep87] J. Lépinoux, L. Kubin. The dynamic organization of dislocation structures. *Scripta Metallurgica*, **21**, Seite 833ff, 1987.
- [Lom51] W. Lomer. A dislocation reaction in the face-centred cubic lattice. *Phil. Mag.*, **42**, Seite 1327ff, 1951.
- [Mal01] H. Malz. *Rechnerarchitektur*. Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 2001.
- [Mar95] U. Martin, U. Mühle, H. Oettel. Erfahrungen mit der quantitativen Bestimmung der Versetzungsdichte im Transmissionselektronenmikroskop. *Praktische Metallographie*, **32**, Heft 9, Seite 467ff, 1995.
- [MPI94] Message Passing Interface Forum. *Int. J. Supercomputer Applications and High Performance Computing*, **8 (3/4)**, Seite 159ff, 1994.
- [Met53] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller. Equation of the state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, **21**, Seite 1087ff, 1953.

- [Mit1899] J. Mitchell. On the direct determination of stress in an elastic solid, with application to the theory of plates. *Proc. London Math. Soc.*, **31**, Seite 100ff, 1899.
- [Moh98] V. Mohles, D. Rönnpagel, E. Nembach. Computersimulation von Versetzungsbewegungen in unterschiedlichen Hindernisanordnungen. *Freiberger Forschungshefte B*, **295**, Seite 143ff, 1998.
- [Mor74] J. Morris, D. Klahn. Thermally activated dislocation glide through a random array of point obstacles: Computer Simulation. *J. Appl. Phys.*, **45**, Seite 2027ff, 1974.
- [Pri77] G. Nicolis, I. Prigogine. *Self-Organisation in Nonequilibrium Systems*. Wiley&Sons, New York, 1977.
- [Pac85] N. Packard, S. Wolfram. Two-dimensional cellular automata. *J. Stat. Phys.*, **38**, Seite 901ff, 1985.
- [Pan78] C. Pangali, M. Rao, B. Berne. On a novel Monte Carlo scheme for simulation water and aqueous solutions. *Chem. Phys. Lett.*, **55**, Seite 413ff, 1978.
- [Pea50] M. Peach, J. Koehler. The forces exerted on dislocations and the stress fields produced by them. *Phys. Rev.*, **80**, Seite 436ff, 1950.
- [Raa95] D. Raabe, F. Roters. 2D- and 3D-simulation of the stressfields of dislocation networks. *Conference Proceedings, Vol. F, 4th European Conference on Advanced Materials and Processes, Padua*, Seite 395ff, 1995.
- [Raa96] D. Raabe, F. Roters. Simulation of the statics of 2D and 3D dislocation networks. *Comp. Mat. Sci.*, **5**, Seite 203ff, 1996.
- [Rah64] A. Rahman. Correlations in the motion of atoms in liquid argon. *Phys. Rev.*, **136**, Seite 405ff, 1964.
- [Reh98] F. Reher. *Simulation der Rekristallisation auf der Basis orientierter Keimbildung und orientierten Keimwachstums mittels modifizierter zellularer Automaten - Morphologie, Textur, Kinetik*. Dissertation, RWTH Aachen, 1998.
- [Ros82] A. Rosenfeld, A. Kak. *Digital Image Processing*. Academic Press, New York, 1982.
- [Rot96] F. Roters, D. Raabe. Numerical simulation of stress fields of dislocation networks with special regard to interface dislocations. *Material Science and Technology*, **12**, Seite 281ff, 1996.
- [Rot97] F. Roters, D. Raabe. 2-dimensional dislocation dynamics - A new technique for the simulation of deformation microtextures. *Textures and Microtextures*, **28**, Seite 167ff, 1997.
- [San98] D. Sangi. *Die Versetzungsstrukturbildung in Metallen*. Dissertation, Technische Universität Braunschweig, 1998.
- [San99] D. Sangi, E. Steck, S. Bross. Simulation of self-organised dislocation structures in f.c.c. and b.c.c. single crystals. *Acta Mech.*, **132**, Seite 93ff, 1999.

- [Sae99] M. Schäperkötter. *Transmissionselektronenmikroskopische Analysen zur Versetzungsdichtebestimmung an thermisch behandelten AlMg5Mn Zugproben*. Große Studienarbeit, Institut für Werkstoffkunde, Universität Hannover, 1999.
- [Sci69] G. Schimmel. *Elektronenmikroskopische Methodik*. Springer, Berlin, 1969.
- [Sio02] J. Schiøtz, T. Leffers, B. Singh. Modelling of dislocation generation and interaction during high-speed deformation of metals. *Radiation Effects and Defects in Solids*, **157**, Seite 193ff, 2002.
- [Sin85] G. Sinclair, P. Follansbee, K. Johnson. Quasi-static normal indentation of an elasto-plastic half-space by a rigid sphere. II. Results. *Int. J. Solids Structures.*, **21**, Seite 865ff, 1985.
- [Son93] M. Sonka, V. Hlavac, R. Boyle. *Image Processing, Analysis and Machine Vision*. Chapman & Hall, London, 1993.
- [Smi53] C. Smith, L. Guttman. Measurement of internal boundaries in three-dimensional structures by random sectioning. *Journal of Metals, Transactions AIME*, Seite 481ff, 1953.
- [Smt01] L. Smith, M. Bull. Development of mixed mode MPI / OpenMP applications. *Scientific Programming*, **9**, 2-3, Seite 83ff, 2001.
- [Ste94] E. Steck, H. Hesselbarth, D. Sangi. Simulation von Vorgängen im Mikrobereich bei plastischer Verformung von Metallen. *Z. angew. Math. Mech.*, **74**, 4, Seite T19ff, 1994.
- [Tie94] L. Tierney. Markov Chains for exploring posterior distributions. *Annals of Statistics*, **22**, Seite 1701ff, 1994.
- [Tya81] S. Tyan. *Median filtering, deterministic properties*. In: T. Huang (Hrg.) *Two-Dimensional Digital Signal Processing, Vol. II*. Springer, Berlin, 1981.
- [Ula50] S. Ulam. Random processes and transformations. *Proc. Int. Cong. Math. Vol. II*, Seite 264ff, 1950. American Math. Soc., Rhode Island, 1952.
- [Swy02] H. Van Swygenhoven, P. Derlet, D. Feichtinger, A. Hasnaoui, M. Samaras. Atomistic simulations in nanocrystalline metals. *EPFL Supercomputing Review*, **13**, Seite 4ff, 2002.
- [Vrd98] M. Verdier, M. Fivel, I. Groma. Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals: Principles and applications. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **6**, Seite 755ff, 1998.
- [Vrl67] L. Verlet. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Phys. Rev.*, **159**, Seite 98ff, 1967.
- [Voe76] H. Vöhse. *Ausscheidungsvorgänge im kompakten Material und in daraus hergestellten Folien für die Transmissionselektronenmikroskopie*. In: *Tagungsbericht „Ausscheidungen in metallischen Werkstoffen“*, **4**, Seite 12. Bergakademie Freiberg, 1976.
- [Neu58] J. v. Neumann. *The Computer and the Brain*. Yale University Press, New Haven, 1958.

Literaturverzeichnis

- [Neu63a] J. v. Neumann. *The general and logical theory of automata. In: A. Taub (Hrg.) Collected Works Vol. V.* Pergamon Press, Frankfurt, 1963.
- [Neu63b] J. v. Neumann. *Probabilistic logics and synthesis of reliable organisms from unreliable components. In: A. Taub (Hrg.) Collected Works Vol. V.* Pergamon Press, Frankfurt, 1963.
- [Neu66a] J. v. Neumann. *Theory and organization of complicated automata. In: A. Burks (Hrg.) Theory of Self-Reproducing Automata.* University of Illinois Press, London, 1966.
- [Neu66b] J. v. Neumann. *Theory of automata: Construction, reproducing, homogeneity. In: A. Burks (Hrg.) Theory of Self-Reproducing Automata.* University of Illinois Press, London, 1966.
- [Wan95] H. Wang, R. LeSar. O(N) algorithm for dislocation dynamics. *Phil. Mag. A*, **71**, Seite 149ff, 1995.
- [Wah84] F. Wahl. *Digitale Bildsignalverarbeitung.* Springer, Berlin, 1984.
- [Win01a] M. Wining, G. Gottstein, L. Shvindlerman. Stress induced grain boundary motion. *Acta Mater.*, **49**, Seite 211ff, 2001.
- [Win01b] M. Wining, G. Gottstein, L. Shvindlerman. Migration of grain boundaries under the influence of an external shear stress. *Mat. Sci. Eng. A*, **317**, Seite 17ff, 2001.
- [Wol86] S. Wolfram. *Theory and Applications of Cellular Automata.* World Scientific, Singapur, 1986.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Andreas Kuhlmeier
Geburtsdatum: 17.02.1972
Geburtsort: Gronau
Staatsangehörigkeit: deutsch
Familienstand: ledig

Schule

1978 - 1982 Grundschule Elze
1982 - 1991 Gymnasium Jugenddorf Christophorus-Schule Elze
Abschluss Abitur

Wehrdienst

07.1991 - 06.1992 Elektromechaniker in Eschweiler und Giesen

Studium

10.1992 - 06.1999 Mathematik mit Nebenfach Physik, Universität Hannover
Studienschwerpunkt in Funktionentheorie
Abschluss Diplom

Berufliche Tätigkeit

seit 07.1999 wissenschaftlicher Mitarbeiter am
Institut für Werkstoffkunde, Universität Hannover