

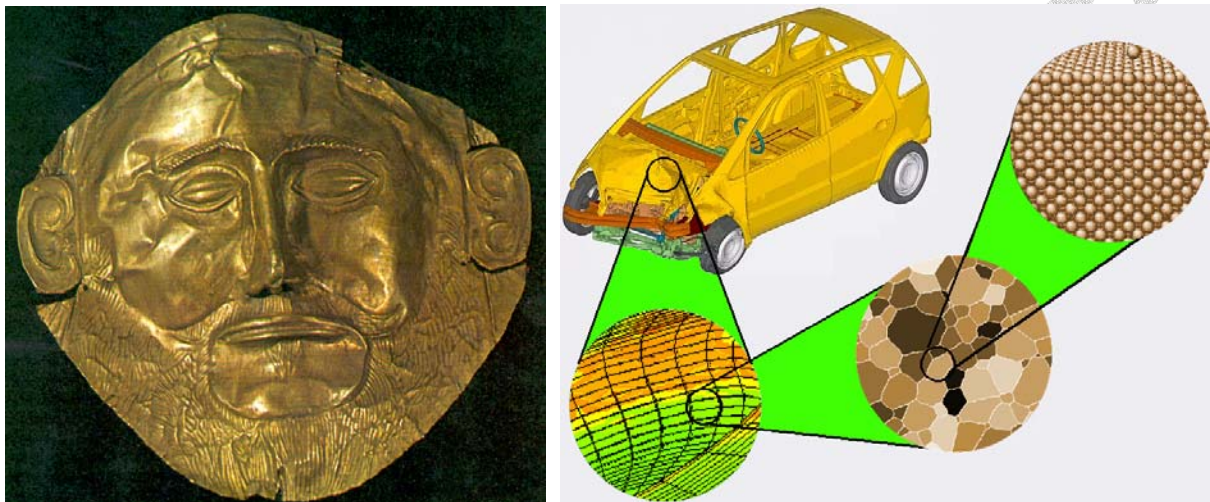
# **Polykristalle in Form – Eine neue Kristallplastizitäts-Finite- Elemente-Methode**

*Dierk Raabe und Franz Roters*

*Max-Planck-Institut für Eisenforschung  
Max-Planck-Str. 1  
40237 Düsseldorf  
Germany*



Wir begegnen metallischen Werkstoffen typischerweise in Form von Vielkristallen. In diesen weisen die einzelnen Kristalle unterschiedliche Orientierungen ihrer Kristallachsen bezüglich des Probenkoordinatensystems auf. Die Gesamtheit aller dieser Orientierungen wird als kristallographische Textur oder Orientierungsverteilung bezeichnet. Die diskrete Natur der plastischen Verformung kristalliner Materialien entlang atomar dichtgepackter Gittervektoren auf atomar dichtgepackten Ebenen führt zu einem stark richtungsabhängigen (anisotropen) Umformverhalten solcher vielkristallinen Werkstücke.



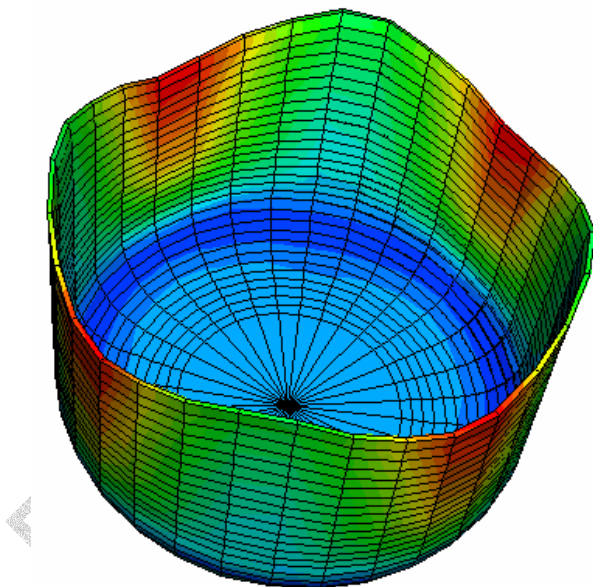
**Anisotropie ist ein 4000 Jahre altes Forschungsthema. Die Gründe dafür liegen auf der Hand: Man möchte Material sparen, überall im Werkstück gleiche mechanische Eigenschaften erhalten, Risse vermeiden und überall ähnliche Blechstärke erreichen. Die rechnerische Behandlung der Kristallanisotropie erfordert die Zusammenführung von Ansätzen aus der Metallphysik, der Kristallographie und der Mathematik nicht-linearer Differentialgleichungen.**

Während das elastisch-plastische anisotrope Umformverhalten eines einzelnen Kristalls heute zunehmend besser beschrieben werden kann, war die Wechselwirkung der zahlreichen Kristalle innerhalb eines technischen Werkstücks und seine resultierende anisotrope Formänderung bisher nur mit stark vereinfachenden Modellen oder sehr großem Rechenaufwand vorauszusagen. Die Schwierigkeiten bei der Formulierung mathematischer Modelle zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens vielkristalliner metallischer Werkstoffe gehen vor allem auf zwei Umstände zurück. Erstens sind die elastisch-plastischen Wechselwirkungen zwischen benachbarten Kristallen sowie zwischen unterschiedlichen Bereichen innerhalb ehemals einheitlich orientierter Kristalle während der Verformung bisher nur wenig verstanden. Zweitens ändern die Kristalle während der Umformung ständig ihre kristallographische Orientierung und mithin auch die Gesamtanisotropie des Werkstücks.

Eine physikalisch verbesserte und gleichzeitig mathematisch effiziente Methode zur mikroskopischen und makroskopischen Simulation der in hohem Maße nicht-linearen elastisch-plastischen Wechselwirkungen in Vielkristallen erlaubt den Forschern sich mit dem

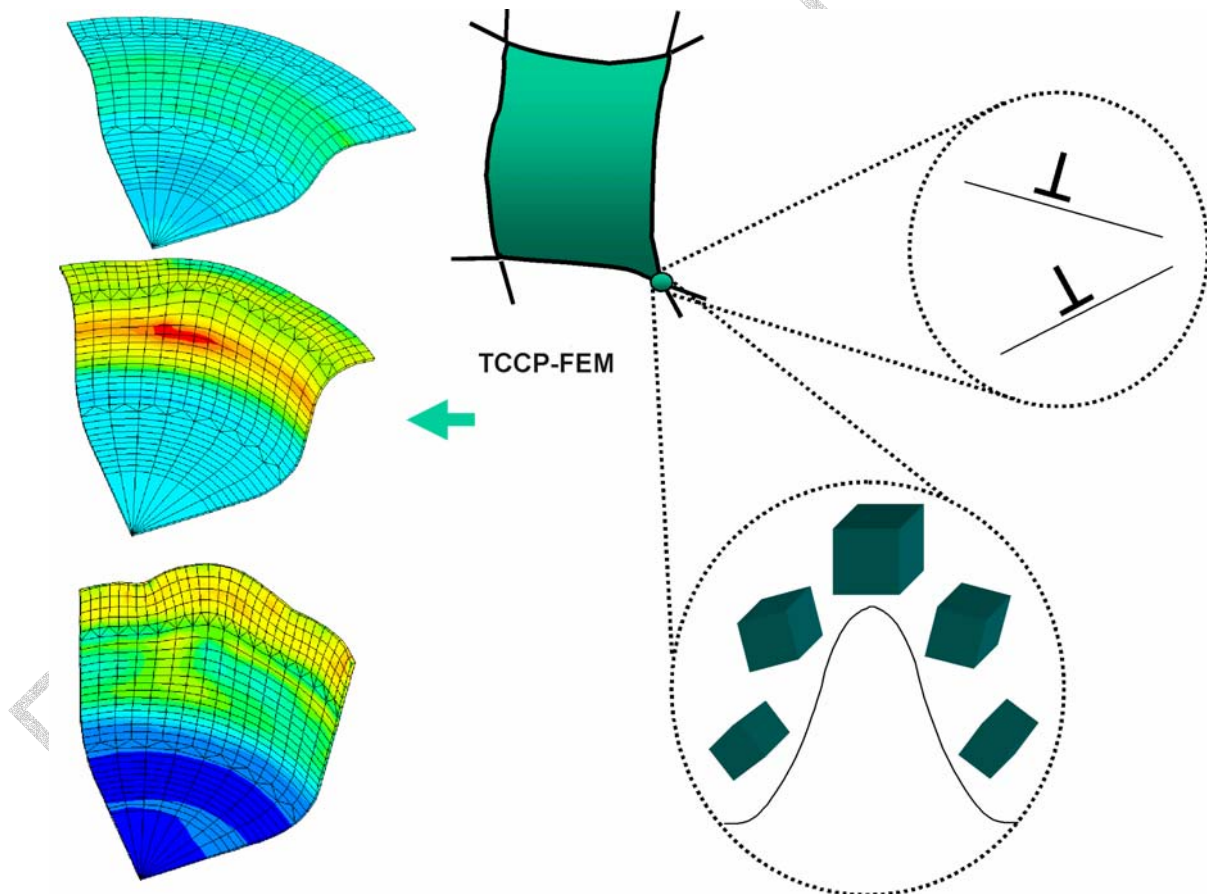
mechanischen Zusammenwirken solcher Kristall-Cluster auch unter komplizierten Randbedingungen viel detaillierter zu befassen, als es bis vor kurzem mit stark vereinfachenden Homogenisierungstheorien möglich war. Darüber hinaus können mit der neuen Finite-Elemente-Methode die Rotationswege von Kristallen unter Berücksichtigung innerer sowie äußerer Randbedingungen und ihre resultierenden mechanischer Eigenschaften wie beispielsweise innere Spannungen vorhergesagt werden.

Eine verlässliche Simulation von Umformvorgängen kristalliner Werkstoffe ist aber heute auch aus technischer Sicht von sehr großer Bedeutung, da moderne Leichtbauwerkstoffe wie Aluminium, hochfeste Stähle, Verbundwerkstoffe, Magnesium oder auch beschichtete Materialien insbesondere in der Automobiltechnik mit immer engeren Toleranzen hinsichtlich Abmessung und Eigenschaften umgeformt werden. Entsprechende Prozesse müssen daher vor der eigentlichen Produktionsphase auf dem Computer ausgelegt werden. Gerade hierbei spielen physikalisch geprägte Vorhersagemethoden, die das Material nicht, wie bisher üblich, als Kontinuum idealisieren, sondern die kristallplastischen Merkmale sowie die ständige Drehung der Körner in der Rechnung berücksichtigen, eine herausgehobene Rolle. Die wirtschaftliche Bedeutung solcher verbesserter Simulationenmethoden kann man alleine daran erkennen, daß etwa 25% des in Deutschland hergestellten zumeist anisotropen Stahls in Automobilen weiterverarbeitet wird. Weitere technische Anwendungen der Methode liegen in der Vorhersage innerer Spannungsfelder auf Kristallebene, wie sie beispielsweise in Komponenten der Mikroelektronik bis hin zu meterlangen Bauteilen der Kraftwerkstechnik auftreten.



**Beispiel einer Simulation eines Umformvorganges an Aluminium, bei dem die Bedeutung der kristallographischen Textur aufgrund der resultierenden Zipfelbildung am oberen Rand besonders deutlich wird. Die Simulation sagt gleichzeitig die Entwicklung der Blechform, der mechanischen Eigenschaften und der Kristalldrehungen voraus. Das neue Simulationsverfahren wird als Texturkomponenten-Kristallplastizitäts-Finite-Elemente-Methode bezeichnet. Die Farbskala bezeichnet die Wandstärke.**

Die konsequente Zusammenführung von Grundlagenergebnissen aus den Bereichen Kristallographie und Metallphysik mit dem robusten Simulationswerkzeug der nicht-linearen Finite-Elemente Methode hat nach zweijähriger Entwicklungszeit in der Abteilung für Mikrostrukturphysik und Umformtechnik am Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf jüngst zu einem Durchbruch in diesem Bereich geführt. Das neue Simulationsverfahren, das auch als Texturkomponenten-Kristallplastizitäts-Finite-Elemente Methode bezeichnet wird, erlaubt die genaue Vorhersage komplexer Umformvorgänge von anisotropen metallischen Werkstoffen unter Berücksichtigung der Kristalltextur, deren Änderung im Verlauf der Formänderung sowie aller daraus resultierenden Wechselwirkungen und mechanischen Eigenschaften auf solider metallphysikalischer Basis. Die neue Finite-Elemente Methode basiert auf der Umrechnung von experimentell gewonnenen Orientierungsverteilungen in einen kleinen Satz diskreter und kompakter Texturkomponenten auf der Basis sphärischer Bessel-Gaussfunktionen und deren statistisch korrekter Abbildung auf die Integrationspunkte einer Kristallplastizitäts- Finite-Elemente Rechnung. Die experimentellen Texturdaten können mittels bekannter Standardverfahren unter Ausnutzung Bragg'schen Beugung von Röntgen-, Elektronen- oder Neutronenstrahlen an kristallinen Materialien gewonnen werden.



### Das Prinzip der neuen Texturkomponenten-Finite-Elemente Methode.



## Schrifttum

D. Raabe, F. Roters, Z. Zhao: Proceedings of the 8th International Conference on Aluminium Alloys in Cambridge, UK, July 2-5, 2002, Materials Science Forum Vols. 396-402 (2002) 31-36  
“A Texture Component Crystal Plasticity Finite Element Method for Physically-Based Metal Forming Simulations Including Texture Update”

D. Raabe, K. Helming, F. Roters, Z. Zhao, J. Hirsch : Proceedings of the 13th International Conference on Textures of Materials ICOTOM 13, 2002, Seoul, Korea, Trans Tech Publications, ed.: Dong Nyung Lee, Materials Science Forum, Vols. 408–412 (2002) 257–262.  
“Texture Component Crystal Plasticity Finite Element Method for Scalable Large Strain Anisotropy Simulations”

D. Raabe, P. Klose, B. Engl, K.-P. Imlau, F. Friedel, F. Roters: Advanced Engineering Materials 4 (2002) 169-180  
„Concepts for integrating plastic anisotropy into metal forming simulations”

Z. Zhao, F. Roters, W. Mao, D. Raabe: Adv. Eng. Mater. 3 (2001) p.984/990  
„Introduction of A Texture Component Crystal Plasticity Finite Element Method for Industry-Scale Anisotropy Simulations”

D. Raabe and F. Roters: International Journal of Plasticity 20 (2004) p. 339-361  
„Using texture components in crystal plasticity finite element simulations”

Weitere Informationen sind erhältlich von:

Dierk Raabe und Franz Roters  
Abteilung für Mikrostrukturphysik und Umformtechnik  
Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Düsseldorf  
raabe@mpie.de  
Tel 0211 - 6792 - 278

