

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Experimentelle Befunde	2
1.3	Stand der Forschung	5
1.3.1	Modellierung	6
1.3.2	Numerische Verfahren	7
1.4	Zielsetzung und Gliederung der Arbeit	9
2	Grundlagen	11
2.1	Kinematik	11
2.2	Thermodynamische Relationen	12
2.3	Bilanzgleichungen und zweiter Hauptsatz	13
2.3.1	Massenbilanz	13
2.3.2	Impulsbilanz	14
2.3.3	Schwache Form des Gleichgewichts	14
2.3.4	Drehimpulsbilanz	15
2.3.5	Energiebilanz	16
2.3.6	Entropiegleichung	17
2.4	Theorie verallgemeinerter Kräfte	18
2.4.1	Verallgemeinerte Impulsbilanz	18
2.4.2	Schwache Formulierung	21
2.5	Stochastischer Zugang	22
2.5.1	Statistische Definition der freien Energie	23
2.5.2	Statistische Definition der Entropie	25
3	Mikroheterogenitäten	27
3.1	Einteilung	27

3.2	Feldgrößen und Randbedingungen	28
3.3	Defektenergien	29
3.4	Punktdefekte	30
3.4.1	Allgemeines	30
3.4.2	Treibende Kraft auf einen Punktdefekt	32
3.5	Versetzungen	35
3.5.1	Allgemeines	35
3.5.2	Elastische Felder im anisotropen Medium	36
3.5.3	Treibende Kraft auf eine Versetzung	37
3.6	Treibende Kraft auf eine Rissspitze	40
3.7	Phasengrenzflächen	40
3.7.1	Elastische Feldgrößen	41
3.7.2	Variationsformulierung	41
3.7.3	Grenzflächenenergie	43
3.7.4	Grenzflächenbewegung	44
4	Modellierung mikroheterogener Materialien	45
4.1	Diskrete Modelle	45
4.1.1	Ising Modell	46
4.1.2	Diskretes Atom-Modell	51
4.2	Modell einer diffusen Grenzschicht	56
4.3	Kontinuumsmechanisches Modell	60
4.3.1	Gesamtpotenzial und Variationsprinzip	61
4.3.2	Volumenkonstanz als Nebenbedingung	62
4.3.3	Eshelby-Lösung	63
4.3.4	Äquivalente Eigendehnung	64
4.4	Semianalytische Modellierung	65
4.5	Makroskopische Aspekte der Mikrostrukturänderung	67
5	Numerische Verfahren	71
5.1	Finite-Elemente-Formulierungen	71
5.1.1	Klassische isoparametrische Formulierung	72
5.1.2	Direkter Ansatz für die verallgemeinerte Impulsbilanz	75
5.1.3	Diskretisierung von Grenzflächen	77
5.1.4	Diskretes Atom-Modell	80
5.1.5	Gausspunkt-Methode	81

5.2	Simulation der Mikrostrukturentwicklung	83
5.2.1	Konstitutivgesetz	83
5.2.2	Gestaltoptimierung	84
5.2.3	Genauigkeit der Verfahren	87
5.2.4	Monte-Carlo-Simulation	91
6	Anwendungen	95
6.1	Diffusion in einem Ni-Al System	95
6.1.1	Interaktion mit einem Einschluss	98
6.1.2	Interaktion mit einer Versetzung	101
6.2	Ausscheidungen in zweiphasigen Materialien	104
6.2.1	Gleichgewichtsmorphologien	105
6.2.2	Zeitliche Evolution	107
6.2.3	Stabilitätsbetrachtungen	110
6.2.4	Makroskopische Aspekte	121
6.2.5	Einfluss äußerer Lasten	125
6.2.6	Wechselwirkung mehrerer Einschlüsse: Floßbildung	129
6.2.7	Interaktion mit einem Riss	135
6.2.8	Interaktion mit Versetzungen	141
7	Zusammenfassung	147
	Anhang	149
A.1	Verwendete Symbole und Bezeichnungen	149
A.2	Elastische Konstanten in kristallographischen Achsen	151
A.3	Zur Umformung der Defektenergie	154
A.4	Zum vollständigen Differenzial von $\ln Z$	155
	Literaturverzeichnis	157