

Thermische Effekte in der Materialmodellierung von Polyamid 6 bei kurzzeitdynamischen Belastungsvorgängen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur

(Dr.-Ing.)

von Dipl.-Ing. Joachim Strauch

geb. am 08.12.1970 in Lich

genehmigt durch die Fakultät für Maschinenbau
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. mult. Holm Altenbach

Prof. Dr.-Ing. habil. Stefan Kolling

Prof. Dr.-Ing. Markus Stommel

Promotionskolloquium am 25.06.2019

Zusammenfassung

Die mechanischen Eigenschaften von Kunststoffen sind in der Regel stark temperaturabhängig. Bei der mechanischen Deformation von Kunststoffen können durch Energieumwandlungsprozesse bedingte thermische Effekte zu signifikanten Temperaturänderungen im Werkstoff führen. Diese Temperaturänderungen wiederum beeinflussen zu jedem Zeitpunkt das lokale Materialverhalten des Werkstoffs und können sich somit auf den gesamten Deformations- und Versagensprozess signifikant auswirken. Vor allem unter kurzzeitdynamischer Belastung ist wegen der nahezu adiabaten Bedingungen mit starken lokalen Temperaturerhöhungen im Werkstoff zu rechnen. Bei der strukturmechanischen Auslegung von kurzzeitdynamisch belasteten Kunststoffbauteilen werden thermische Effekte in der Regel nicht explizit berücksichtigt. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden zunächst die thermischen Effekte in Zug- und Schubversuchen an dem thermoplastischen Kunststoff Polyamid 6 (trocken) untersucht. Die umfangreichen Zugversuche deckten dabei den Temperaturbereich zwischen 25 °C und 120 °C und den Dehnratenbereich von 10^{-4} 1/s bis 10^2 1/s ab. Neben einer lokalen Dehnungsmessung mittels Grauwertkorrelation erfolgte bei der Mehrzahl der Versuche die Erfassung der Probenoberflächentemperatur durch eine Infrarotkamera. Zur Bewertung der Zug-Druck-Asymmetrie wurden ergänzend noch quasistatische Druckversuche ohne Infrarotkamera durchgeführt. Basierend auf den Erkenntnissen aus der experimentellen Werkstoffcharakterisierung wurde ein phänomenologisches temperatur- und druckabhängiges elastisch-viskoplastisches Materialmodell entwickelt und in Form einer Benutzeroutine (VUMAT) in die Finite-Elemente Software ABAQUS/EXPLICIT implementiert und validiert. Hervorzuhebende Eigenschaften des Materialmodells sind, dass es auch die verstärkten Eigenschaftsänderungen von Polyamid 6 im Glasübergangsbereich beschreibt sowie den Einfluss der thermischen Effekte mittels Energiequellterme berücksichtigt.

Abstract

The mechanical properties of plastics are generally highly dependent on temperature. During the mechanical deformation of plastics, thermal effects caused by energy conversion processes can induce significant local temperature changes in the material. These temperature changes in turn influence the local material behavior of the material at any time and can therefore have a significant effect on the entire deformation and failure process. Especially under short-term dynamic loading, strong local temperature increases are to be expected in the material due to the almost adiabatic conditions. Thermal effects are usually not explicitly taken into account in the structural mechanical design of plastic components subjected to short-term dynamic loading. In the present work, the influence of the thermal effects on the deformation behavior of polyamide-6 (dry) was first experimentally investigated in tensile and shear tests. The extensive tensile test program covered the temperature range between 25 °C and 120 °C and the strain rate range from 10^{-4} 1/s to 10^2 1/s. In addition to a local strain measurement by means of digital image correlation, temperature changes on the specimen surface were recorded in the majority of the tests using (highspeed) infrared thermovision. Additionally, some quasi-static compression tests were carried out without the use of the infrared thermovision to evaluate the compression-tension asymmetry. Based on the experimental findings, a phenomenological temperature- and pressure-dependent elastic-viscoplastic constitutive model was developed. Strain-rate sensitivity and temperature dependence of polyamide-6 in the vicinity of the glass transition temperature is also covered. The thermal effects are taken into account by introducing energy source terms. The constitutive model was implemented as an ABAQUS/EXPLICIT user subroutine (VUMAT) for use with fully coupled thermo-mechanical explicit dynamic analyses.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Motivation	1
1.2. Literaturrecherche und Stand der Forschung	6
1.3. Problemstellung, Ziel, Methodik	11
1.4. Gliederung der Arbeit	13
2. Grundlagen	15
2.1. Mechanik der Kunststoffe	15
2.1.1. Aufbau und Struktur	16
2.1.2. Thermische Zustandsbereiche	21
2.1.3. Deformations- und Versagensverhalten	25
2.2. Kontinuumsmechanik	32
2.2.1. Tensoroperationen	32
2.2.2. Kinematik	33
2.2.3. Kinetik	36
3. Materialcharakterisierung	43
3.1. Thermomechanische Charakterisierung	43
3.1.1. Probekörperherstellung und -präparation	43
3.1.2. Versuchsaufbau und -durchführung	45
3.1.3. Messung und Aufbereitung der Daten	50
3.1.4. Messergebnisse	60
3.2. Thermische Analysen	78
3.2.1. Thermomechanische Analyse	78
3.2.2. Dynamische Differenzkalorimetrie	80
3.2.3. Laser Flash Analyse	81
4. Materialmodellierung	83
4.1. Anforderungen an das Materialmodell	83
4.2. Konstitutivgesetz	84
4.2.1. Lineare Thermoelastizität	85

4.2.2.	Druckabhängige Thermoviskoplastizität	87
4.2.3.	Übersicht Konstitutivgleichungen	96
4.3.	Energiequellterme	97
4.3.1.	Reversibler thermischer Effekt	97
4.3.2.	Irreversibler thermischer Effekt	98
5.	Modellerweiterungen und Parameteridentifikation	99
5.1.	Teilmodelle der Thermoelastizität	99
5.2.	Teilmodelle der Thermoviskoplastizität	105
5.2.1.	Verfestigungsfunktion	105
5.2.2.	Anpassung der Fließfläche	115
5.2.3.	Plastische Kompressibilität	117
6.	Numerische Implementierung	122
6.1.	Diskretisierungsverfahren	123
6.2.	Numerischer Integrationsalgorithmus	124
7.	Validierung	135
7.1.	Kurzzeitynämische Zugversuche	135
7.2.	Kurzzeitdynamische Schubversuche	143
7.3.	Bewertung	148
8.	Zusammenfassung und Ausblick	149
8.1.	Zusammenfassung	149
8.2.	Ausblick	151
	Literaturverzeichnis	152
A.	Ergänzungen zum Materialmodell	160
A.1.	Übersicht Modellparameter	160
A.2.	3D-Darstellungen der elastischen Koeffizienten	161
A.3.	3D-Darstellungen der Fließspannungen	162
A.4.	3D-Darstellung der Verfestigungsfunktion	163
A.5.	3D-Darstellung der Kompressibilitätsfunktion	164
B.	Ergänzungen zum Algorithmus	165
B.1.	Inkrement des Kompressions- und Schubmoduls	165
B.2.	Projektionen des diskretisierten Spannungstensors	166
B.2.1.	Projektion von $[\boldsymbol{\sigma}]_{ t+\Delta t}$ auf \mathbf{I}	166
B.2.2.	Projektion von $[\boldsymbol{\sigma}]_{ t+\Delta t}$ auf $[\mathbf{n}]_{ t+\Delta t}$	168

B.3. Jakobi-Matrix aus dem Newton-Raphson-Verfahren	169
B.3.1. Berechnung der Komponente J_{11}	169
B.3.2. Berechnung der Komponente J_{12}	171
B.3.3. Berechnung der Komponente J_{21}	173
B.3.4. Berechnung der Komponente J_{22}	173

1. Einleitung

1.1. Motivation

Der Einsatz von Kunststoffen hat seit 1950 stetig zugenommen, was sich in den weltweiten Produktionsmengen widerspiegelt, siehe Abbildung 1.1. Dabei hat der Werkstoff im Laufe der Zeit immer neue Anwendungsbereiche für sich erobert. Dazu zählt zum einen die Substitution von klassischen und üblicherweise teureren Werkstoffen, wie zum Beispiel Metall, Keramik oder Glas. Zum anderen bietet Kunststoff durch seine flexiblen Eigenschaften und Verarbeitungsmöglichkeiten neue Design- und Funktionsmöglichkeiten. Heutzutage werden Kunststoffe auch für die Herstellung sicherheitsrelevanter Bauteile oder Strukturen eingesetzt, beziehungsweise durch die Verfügbarkeit dieser Werkstoffgruppe erst ermöglicht, wie zum Beispiel der Airbag als Komponente des Insassenrückhaltesystems in Kraftfahrzeugen und Flugzeugen. Mit den gestiegenen Einsatzmöglichkeiten hat ebenso der Bedarf an geeigneten Berechnungsmethoden zur strukturmechanischen Auslegung von Kunststoffbauteilen zugenommen. Die Verwendung von numerischer Simulationssoftware zur Bauteilauslegung ist mittlerweile zum Standard geworden [87]. Mit Hilfe der numerischen Simulation sollen Schwachstellen im Bauteil bereits in einem frühen Entwicklungsstadium erkannt und beseitigt werden. Zeit- und kostenintensive Rekursionsschleifen gilt es auf diese Weise zu verhindern oder zumindest zu reduzieren. Steigender Kostendruck und die Forderung nach Gewichtsreduktion führen dazu, eine Überdimensionierung der Bauteile möglichst zu vermeiden und den eingesetzten Werkstoff optimal auszunutzen. Damit steigen auch stetig die Anforderungen an die Prognosegenauigkeit der eingesetzten Simulationsmethoden.

Kunststoffe zeigen schon unter den gebrauchstüblichen Belastungsbedingungen ein sehr komplexes Deformations- und Versagensverhalten, welches zudem noch von einer Vielzahl von Einflussgrößen abhängt, siehe Kapitel 2.1. Daher kommt der Auswahl eines geeigneten Materialmodells zur Abbildung dieses komplexen Verhaltens in strukturmechanischen Berechnungen eine große Bedeutung zu. Neben der Auswahl des Materialmodells spielt für die erzielbare Prognosegenauigkeit in der numerischen Simulation noch der Umfang sowie die Qualität der experimentellen Datenbasis, welche für die Bestimmung der Materialmodellparameter herangezogen wird, eine große Rolle. Da die Deformations- und Versagensmechanismen von

1. Einleitung

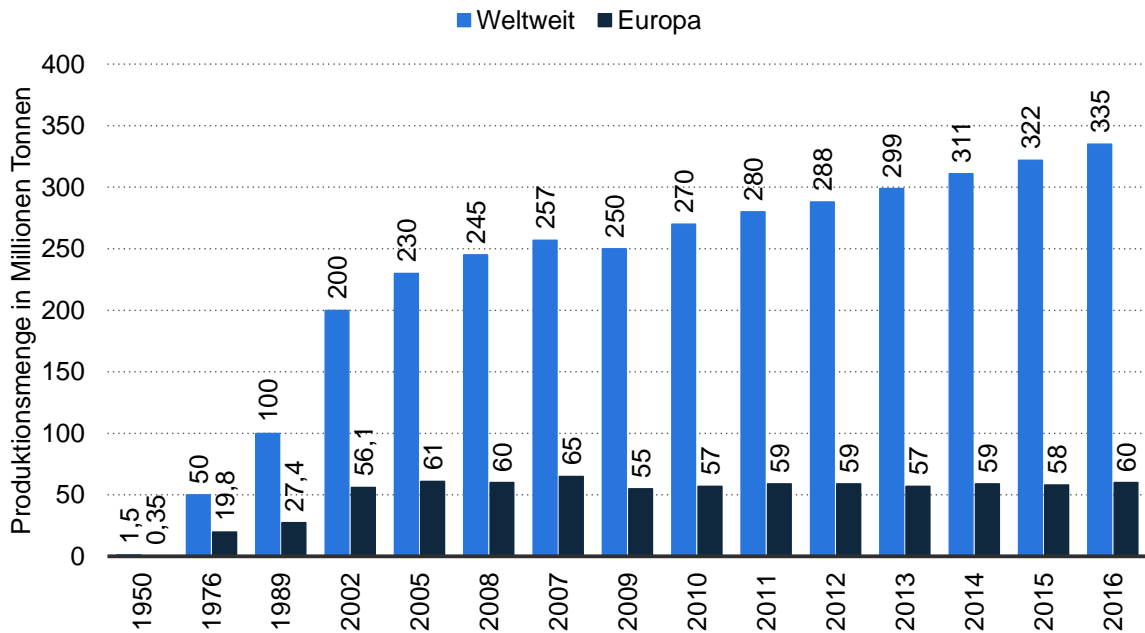


Abbildung 1.1.: Weltweite und europäische Produktionsmenge von Kunststoffen im Zeitraum von 1950 bis 2016, Quelle: PlasticsEurope; Consultic, Januar 2018

Kunststoffen, vor allem auf der mikro- und nanoskaligen Ebene, bis heute bei Weitem nicht vollkommen verstanden sind, besteht hier weiterhin erheblicher Bedarf an der Erforschung dieser Mechanismen sowie an der Entwicklung entsprechender Materialmodelle für die numerische Simulation.

Des Weiteren können thermische Effekte, die lokale Temperaturänderungen im Werkstoff verursachen, das Deformations- und Versagensverhalten von Kunststoffen beeinflussen. Daher werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit an dem unverstärkten thermoplastischen Kunststoff Polyamid 6 die bisher noch wenig beachteten thermischen Effekte experimentell untersucht. Die Erkenntnisse sollen anschließend in die Entwicklung eines Materialmodells fließen, welches für die strukturelle Simulation von kurzzeitdynamischen Belastungsvorgängen (z.B. Automobilcrash, Falltest) verwendet werden kann.

Thermische Effekte treten generell bei der Deformation von Festkörpern auf und führen, je nach Belastungssituation, zu einer mehr oder minder großen Änderung der Temperatur im Material. Sind die Temperaturänderungen signifikant, dann können beispielsweise die in einem Thermoplasten ablaufenden Deformations- und Versagensmechanismen davon stark beeinflusst

werden. Am Beispiel der Wärmeleitungsgleichung [56]

$$\rho c \dot{\Theta} = Q + P = Q - P_e + P_p - P_s \quad (1.1)$$

für ein linear elastisch-plastisches Material sollen zunächst die thermischen Effekte erläutert werden. Die Änderungsrate der absoluten Temperatur $\dot{\Theta}$ multipliziert mit der Massendichte ρ und der spezifischen Wärmekapazität c ist gleich der Summe aus der Wärmezufuhrleistung Q und der mechanischen Leistung P der äußeren Kräfte. Die Wärmezufuhrleistung Q kann unter Verwendung des Fourier'schen Wärmeleitungsgesetzes [56] mit

$$Q = \kappa \left[\frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial z^2} \right] + \rho r \quad (1.2)$$

angegeben werden. Der erste Term auf der rechten Seite beschreibt die Wärmediffusion unter Verwendung der Wärmeleitfähigkeit κ und der zweite Term berücksichtigt die Wärmezufuhr durch eine verteilte innere Wärmequelle r . Die mechanische Leistung P kann entsprechend der Wärmeleitungsgleichung (1.1) des hier angenommenen elastisch-plastischen Materialmodells in die drei Anteile P_e , P_p und P_s zerlegt werden. Diese werden im Folgenden genauer erläutert.

Der Beitrag zur mechanischen Leistung aufgrund von elastischen Deformationen ist durch den thermoelastischen Kopplungsterm [56]

$$P_e = 3\alpha K \Theta_0 \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{\text{el}} \cdot \mathbf{I} \quad (1.3)$$

definiert. Hierin ist α der lineare Wärmeausdehnungskoeffizient, K der Kompressionsmodul, Θ_0 die absolute Referenztemperatur, $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{\text{el}}$ die elastische Verzerrungsrate, \mathbf{I} der Einheitstensor und $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{\text{el}} \cdot \mathbf{I}$ das doppelte Skalarprodukt der beiden genannten Tensoren zweiter Stufe. Zur Notation von Tensoroperationen sei an dieser Stelle bereits auf den Unterabschnitt 2.2.1 verwiesen. Die zeitliche Änderung der elastischen Verzerrungen führt somit zu einer Temperaturänderung. Dieser Teil der Temperaturänderung ist jedoch, wie die elastischen Deformationen selbst, reversibel. Der auch als thermoelastische Effekt bezeichnete Vorgang führt bei thermoplastischen Werkstoffen unter Zugbeanspruchung zu einer Abkühlung und unter Druckbeanspruchung zu einer Erwärmung. Die beiden Anteile P_p und P_s können den plastischen Deformationen zugeordnet werden und als Differenz beschreiben sie den dissipativen Anteil

$$D = P_p - P_s \quad (1.4)$$

der mechanischen Leistung, welcher durch irreversible Energieumwandlungsprozesse von mechanischer Arbeit in Wärmeenergie immer zu einer Erwärmung des Materials führt. Gleichung (1.4)

1. Einleitung

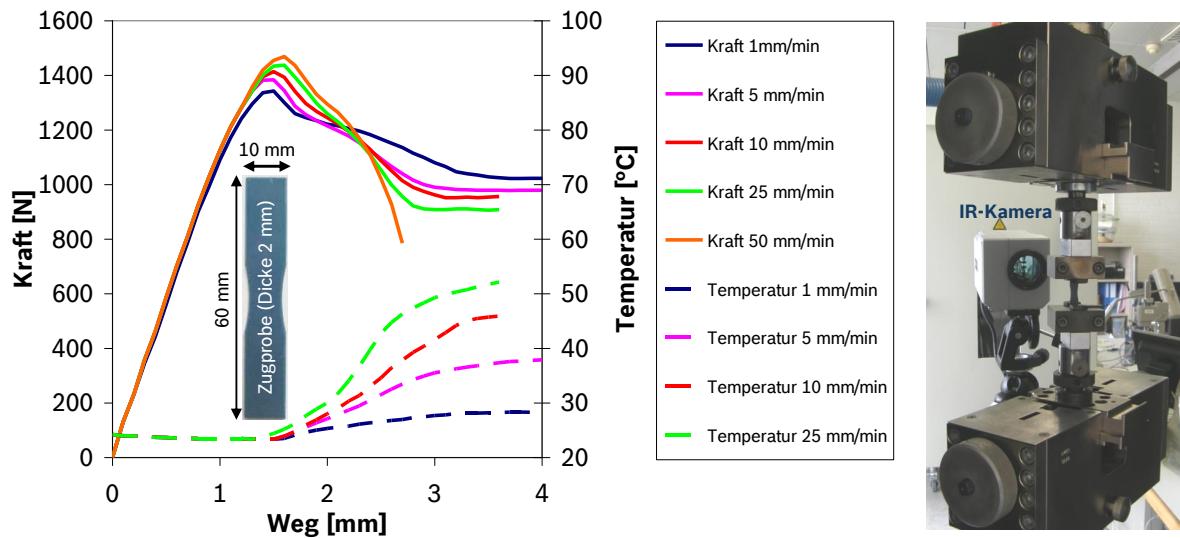


Abbildung 1.2.: Kraft-Wegkurven und Temperatur-Wegkurven aus Zugversuchen an Polyamid 6 bei Abzugsgeschwindigkeiten von 1 mm/min bis 50 mm/min, aus [90]

zeigt weiterhin, dass aufgrund des negativen Vorzeichens von P_s nur ein Teil der gesamten plastischen Spannungsleistung [56]

$$P_p = \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{pl} \quad (1.5)$$

in Wärme umgewandelt wird. Der als cold work bezeichnete Anteil P_s wird hingegen nicht in Wärmeenergie umgewandelt, sondern von den im Material ablaufenden Verfestigungsprozessen beansprucht und somit im Werkstoff gespeichert. Aufgrund seiner Komplexität wird dieser Anteil hier nicht explizit angegeben. Für eine ausführliche Beschreibung von P_s wird zum Beispiel auf [18] verwiesen. In kommerziellen Finite-Elemente-Softwarepaketen wird üblicherweise der dissipative Anteil der mechanischen Leistung durch den vereinfachten Ansatz

$$D = \beta P_p = \beta \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{pl} \quad (1.6)$$

abgebildet, siehe zum Beispiel [21]. Der Cauchy'sche Spannungstensor ist hier durch $\boldsymbol{\sigma}$ gegeben und $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{pl}$ bezeichnet die plastische Verzerrungsrate. Die Größe β mit $\beta \in [0, 1]$ in Gleichung (1.6) ist der sogenannte Taylor-Quinney-Koeffizient. Er definiert den Anteil der plastischen Spannungsleistung P_p , der als Wärmequelle zu einer Temperaturerhöhung führt. Der Koeffizient geht auf erste Untersuchungen von TAYLOR und QUINNEY [91] im Jahr 1934 zurück, welche die Umwandlung von plastischer Arbeit in Wärmeenergie bei Metallen untersuchten. Wie in Abschnitt 1.2 noch beschrieben wird, ist der Koeffizient β in der Regel keine konstante Größe, sondern kann von weiteren Einflussgrößen abhängen.

Die vorherrschenden Randbedingungen bei der Deformation eines Kunststoffbauteils entscheiden nun darüber, ob die Temperaturänderungen durch die eben beschriebenen thermischen Effekte signifikant sind oder nicht. Zu den wichtigsten dieser Bedingungen zählen die Belastungsgeschwindigkeit und die thermischen Randbedingungen. Verläuft eine Deformation ausreichend langsam, kann durch entsprechende Wärmeströme innerhalb des Materials (Diffusion) und Wärmeabtransport über die Oberfläche (Konvektion, Strahlung) ein Temperatúrausgleich mit der Umgebung stattfinden und eine starke lokale Temperaturänderung bleibt aus. Man spricht dann von isothermen Bedingungen oder einer isothermen Deformation. Erfolgt hingegen eine Deformation sehr schnell, so dass dieser Temperatúrausgleich während des Deformationsvorgangs nicht direkt stattfinden kann, liegen adiabate Bedingungen vor. Die isotherme und die adiabate Deformation stellen die beiden theoretischen Grenzfälle dar. Bei kurzzeitdynamisch belasteten Kunststoffbauteilen führt vor allem der irreversible thermische Effekt durch die einsetzende Materialplastifizierung zu signifikanten lokalen Temperaturerhöhungen. Selbst bei moderaten Belastungsgeschwindigkeiten von 1 mm/min bis 50 mm/min konnten in eigenen Vorversuchen an Polyamid 6 Zugproben schon deutliche Temperatureffekte beobachtet werden (siehe Abbildung 1.2). Die Messung der Probenoberflächentemperatur während des Zugversuchs erfolgte hier mit einer FLIR Infrarotkamera vom Typ ThermoCAM SC500. Die Temperatur-Wegkurven stellen die maximale Oberflächentemperatur während des Deformationsprozesses dar. Demzufolge ist die Annahme von isothermen Bedingungen bei der Deformation von Kunststoffen also prinzipiell als kritisch zu betrachten, vor allem bei duktilen unverstärkten Thermoplasten, bei welchen auch größere plastische Verformungen auftreten können. In diesem Zusammenhang sind auch zum Beispiel die in den Kunststoffdatenbanken als isotherme Spannungs-Dehnungskurven hinterlegten Daten entsprechend zu bewerten. Die dort angegebene Temperatur entspricht der Umgebungstemperatur, jedoch nicht zwangsweise der Proben temperatur im gesamten Messverlauf. Aufgrund der üblicherweise fehlenden Erfassung der Proben temperatur im Versuch bleiben folglich auch thermische Effekte bei der strukturmechanischen Auslegung von Kunststoffbauteilen weitestgehend unberücksichtigt. Die numerischen Simulationen werden demzufolge meistens auch unter isothermen Bedingungen durchgeführt, also ohne Einbeziehung der Wärmeleitungsgleichung. Soll die Wärmeleitungsgleichung in der strukturmechanischen Bauteil auslegung Berücksichtigung finden, ist zusätzlich eine Kopplung der mechanischen und der Wärmeleitungsgleichung im Rahmen einer thermomechanisch gekoppelten Simulation notwendig. Mit der vorliegenden Arbeit soll ein Beitrag zur Erhöhung der Prognosegenauigkeit von strukturmechanischen Simulationen kurzzeitdynamischer Belastungsvorgänge durch die Einbeziehung der thermischen Effekte in der Materialmodellierung erfolgen, siehe auch [88, 89, 90].

1.2. Literaturrecherche und Stand der Forschung

Der Einfluss der thermischen Effekte auf das Deformations- und Versagensverhalten von unverstärkten Thermoplasten ist schon seit langem bekannt und wurde wissenschaftlich in den letzten Jahrzehnten bereits unter verschiedenen Gesichtspunkten untersucht. Im folgenden Abschnitt werden einige für die vorliegende Arbeit relevante Veröffentlichungen genannt und die wesentlichen Erkenntnisse daraus kurz zusammengefasst.

Umfangreiche Untersuchungen thermischer Effekte bei der mechanischen Deformation von Kunststoffen wurden bereits in den neunzehnhundertfünfziger Jahren von MÜLLER et al. [17, 67, 68, 69, 70] durchgeführt. Ziel war es hier zunächst, das Phänomen der Fließzonenbildung bei der Kaltver Streckung in Folien aus Polyvinylchlorid und Polyamid zu erklären. Die Fließzone ist ein lokal begrenzter Bereich in einer zugbelasteten Materialprobe oder einem Bauteil, in diesem mit einer Einschnürung verbundenen Umlagerung des Materials vom ungestreckten in den gestreckten Zustand stattfindet. Aus der Analyse der Energiebilanz des Streckungsprozesses folgerten MÜLLER und JÄCKEL [70], dass im Bereich der Fließzone durch Reibung verursachte lokale Temperaturerhöhungen stattfinden müssen, die maßgebend die Entstehung der Einschnürung und die Ausbildung einer stabilen Fließzone beeinflussen. Der experimentelle Nachweis über die Temperaturerhöhungen gelang BRAUER und MÜLLER [17] kurze Zeit später mit Hilfe des Einsatzes eines sogenannten Leuchtmittels. Vorangegangene Versuche mit einem Thermoelement waren nicht zufriedenstellend, da aufgrund der Trägheit des Thermoelements und des schlechten Wärmekontaktes zur Probenoberfläche nur geringe Temperaturerhöhungen detektiert werden konnten. Das feinkörnige Leuchtmittel Calciumwolframat (CaWO_4) wurde mit Hilfe eines Bindemittels auf die Kunststoffprobenoberfläche aufgebracht und mit ultraviolettem Licht aktiviert. Das Lumineszenzlicht, welches bei zunehmender Temperatur abnimmt, wurde fotografiert. Damit konnte die Temperaturverteilung auf der gesamten Probenoberfläche sichtbar gemacht und quantifiziert werden. Die maximalen Temperaturerhöhungen in Polyamidbändern während der Kaltver Streckung betrugen zwischen 20 °C und 35 °C , jeweils für die Streckgeschwindigkeit 1 mm/s und 8 mm/s . Aus den Untersuchungen zur Fließzonenbildung folgte dann die prinzipielle Erkenntnis, dass alle unter Deformation auftretenden thermischen Effekte selbst Einfluss auf den gesamten Deformationsvorgang haben müssen. Dies gilt vor allem bei Kunststoffen, bei denen die mechanischen Eigenschaften sehr stark temperaturabhängig sind. MÜLLER und ENGELTER [30, 69] sahen sich daher veranlasst, die Auswirkungen von Wärmeumsetzungen bei Deformationsprozessen grundlegend zu untersuchen. Zu diesem Zwecke entwickelten sie ein Gaskalorimeter mit integrierter Streckvorrichtung. Hiermit konnten sowohl reversible als auch irreversible thermische Effekte in Abhängigkeit unterschiedlicher Belastungsbedingungen untersucht werden. So wurden zum Beispiel auch Kombinationen von Be- und Entlastungsvorgängen an

Proben mit unterschiedlichen Verreckgeschwindigkeiten durchgeführt. Da das entwickelte Kalorimeter sowohl die mechanische Arbeit als auch die Summe der reversiblen und irreversiblen Wärmeströme erfasste, konnten Aussagen über die Veränderung der inneren Energie und der Entropie des Materials während der Verformung getroffen werden.

Theoretische Stabilitätsbetrachtungen zur Ausbildung einer stabilen Fließzone bei Polyethylen wurden 1990 von FAGER und BASSANI [32], sowie 2001 von HILLMANSEN und HAWARD [45] durchgeführt. Beide Gruppen berechneten für den adiabaten Grenzfall das eindimensional gekoppelte Gleichungssystem für die Spannungs-Dehnungskurven und die Temperaturerhöhung. Durch Stabilitätsbetrachtungen auf Basis einer erweiterten Considere- beziehungsweise der Vincent-Considere-Bedingung kamen beide Gruppen zu dem Schluss, dass die Umgebungstemperatur einen maßgeblichen Einfluss auf die stabile Entwicklung der Fließzone haben muss. Bei niedrigeren Umgebungstemperaturen ist mit einer verstärkten Temperaturerhöhung in der Probe zu rechnen, was sich negativ auf die Ausbildung einer stabilen Fließzone auswirkt. Unterstützt wird dieser Effekt durch die temperaturabhängige spezifische Wärmekapazität, die sich entsprechend mit abnehmender Temperatur verringert. Hillmansen und Haward konnten zudem zeigen, dass während der adiabaten Erwärmung möglicherweise auftretende Nachkristallisationseffekte keinen negativen Einfluss auf die stabile Fließzonenentwicklung haben.

Mit der Erforschung der thermodynamischen Umwandlungsprozesse bei der Deformation von Thermoplasten haben sich weitere Wissenschaftler befasst. Im Jahr 1988 veröffentlichten ADAMS und FARRIS [1] experimentelle Ergebnisse aus Kalorimetermessungen an uniaxial hochverstreckten Filmen aus Polycarbonat. Ihre Ergebnisse zeigen, dass zwischen 56 und 79 Prozent der eingebrachten Deformationsarbeit in die Erwärmung der Proben fließt. Der übrige Anteil führt zu einer Erhöhung der inneren Energie. Es konnte außerdem festgestellt werden, dass bei einer Umgebungstemperatur von 20 °C der Anteil der in Wärme umgewandelten Deformationsarbeit für das untersuchte Polycarbonat deutlich von der Verformungsgeschwindigkeit abhängt. Je höher die Verformungsgeschwindigkeit, desto höher war der prozentuale Anteil an umgewandelter Wärmeenergie. Eine Erhöhung der Umgebungstemperatur auf 65 °C führte jedoch nur zu einer geringfügigen Verringerung des Verhältnisses von Wärmeenergie zu Deformationsarbeit. RITTEL [79] untersuchte 1999 die adiabate Erwärmung von druckbeanspruchten zylindrischen Proben aus Polycarbonat mit Hilfe von eingebetteten Thermoelementen mit Hinblick auf die Bewertung des Anteils umgesetzter plastischer Arbeit W_p in Wärmeenergie. Dabei unterscheidet er zwischen dem integralen Umwandlungsfaktor

$$\beta_{\text{int}} = \frac{\rho c \Delta \Theta}{\int dW_p} \quad (1.7)$$

1. Einleitung

und dem differentiellen Faktor

$$\beta_{\text{diff}} = \frac{\rho c \dot{\Theta}}{\dot{W}_p}. \quad (1.8)$$

Die Messungen ergaben, dass der integrale und der differentielle Umwandlungsfaktor sowohl von der plastischen Dehnung als auch von der plastischen Dehnrates abhängig sind. Der integrale Faktor β_{int} erreichte im Verlauf einiger Versuche einen maximalen Wert von 1, was einer kompletten Umwandlung der plastischen Arbeit in Wärmeenergie entspricht. Für den differentiellen Faktor β_{diff} wurden Maximalwerte von 2,25 ermittelt. Diese hohen, deutlich über 1 liegenden Werte begründet RITTEL mit der als cold work bezeichneten gespeicherten Energie im Belastungsvorgang, die während der Phase der plastischen Entfestigung kurzfristig wieder freigesetzt und in Wärmeenergie umgewandelt werden kann.

Die experimentelle Untersuchung des irreversiblen thermischen Effektes sowie der Dehnrates als Einflussfaktor auf das Spannungs-Dehnungsverhalten verschiedener Kunststoffe ist Gegenstand zahlreicher Veröffentlichungen. HALL [42, 43] beschreibt in seinen Arbeiten aus dem Jahr 1968 den Übergang von einer isothermen Deformation auf eine adiabatische Deformation mit zunehmender Verformungsgeschwindigkeit bei der Verstreckung von synthetischen Fasern aus Polyamid 66, Polyethylenterephthalat, Polyacrylnitrit, Polypropylen und Viskose. Im Rahmen dieser Arbeiten wurden jedoch nur die Spannungs-Dehnungskurven gemessen. Die Abschätzung der Temperaturentwicklungen in den Fasern während der Deformation erfolgte rein mittels theoretischer Betrachtungen. Ein signifikanter Einfluss der Temperaturerhöhung auf das Versagensverhalten der Fasern konnte nicht eindeutig belegt werden. Im Jahr 1973 untersuchten CHOU et al. [19] die Temperaturentwicklung in den beiden amorphen Thermoplasten Polymethylmethacrylat und Celluloseacetatbutyrat sowie in den teilkristallinen Thermoplasten Polypropylen und Polyamid 66 mit Hilfe eines eingebetteten Thermoelements im Druckversuch bei Raumtemperatur. Alle Materialien zeigten einen deutlichen Temperaturanstieg im nichtlinearen Bereich der Spannungs-Dehnungskurve. Für Polyamid 66 und Polymethylmethacrylat konnten die stärksten Temperaturanstiege von 20 °C bis 30 °C bei einem Dehnungswert von 20 Prozent verzeichnet werden. Ebenfalls konnte hier eine Verstärkung des Temperatureffektes mit steigender Dehnrates nachgewiesen werden. Neuere Untersuchungsergebnisse zum Einfluss der Dehnrates und des irreversiblen thermischen Effektes auf das Spannungs-Dehnungsverhalten von Polymethylmethacrylat, Polycarbonat und Polyamid 66 wurden in 2010 von HADRICHE et al. [41] veröffentlicht. In Zugversuchen bei Raumtemperatur, durchgeführt bei verschiedenen Dehnrates, erfolgte die Messung der Probenoberflächentemperatur mit Hilfe einer Infrarotkamera synchron zur Dehnungsmessung. Polycarbonat und Polyamid 66 zeigten eine signifikante Erwärmung mit steigender Dehnrates im untersuchten Dehnratesbereich von $2,6 \cdot 10^{-4}$ 1/s bis $1,3 \cdot 10^{-1}$ 1/s. Die Autoren beschrieben zudem das plastische Materialverhalten der beiden letztgenannten Thermoplasten als eine Überlagerung einer Dehnungsverfestigung

mit einer thermischen Entfestigung, welches sich deutlich im Kurvenverlauf widerspiegelt. Im Falle des Polymethylmethacrylats konnte keine signifikante Erwärmung der Probe unter den gegebenen Versuchsbedingungen nachgewiesen werden. Neue technische Entwicklungen im Bereich der experimentellen Werkstoffcharakterisierung werden 2018 von LIENHARD et al. [59, 58] aufgezeigt. Untersucht wurden das Deformations- und Versagensverhalten von Polypropylen und langfaserverstärktem Polypropylen im Zug-, Schub- und biaxialen Belastungsmodus. Die erzielten Dehnraten lagen im Bereich von 10^{-3} 1/s bis 10^2 1/s. Bis zu drei Hochgeschwindigkeitskameras mit einer Aufnahme Frequenz von 250 kHz in Kombination mit einer Hochgeschwindigkeitsthermokamera mit einer Aufnahme Frequenz von 20 kHz kamen dabei gleichzeitig zum Einsatz. Im Rahmen dieser Arbeit wurden ein Verfahren zur in situ Kalibrierung des Infrarotsensors sowie Algorithmen zur Feldkorrelation des Dehnungs- und Temperaturfeldes entwickelt. Zur Feldkorrelation wurden zunächst die Temperaturfelder, die üblicherweise in einem ortsfesten Koordinatensystem gemessen werden, in ein körperfestes Koordinatensystem überführt. Eine Zeit- und Rauminterpolation der Temperaturdaten auf das Dehnungsfeld liefert anschließend zeitlich synchronisierte thermomechanische Datensätze. Diese Datensätze können zum Beispiel zur Parametrisierung von thermomechanischen Materialmodellen verwendet werden.

Nun werden noch einige Literaturstellen angegeben, welche sich mit der Formulierung thermomechanischer Materialmodelle für unverstärkte Thermoplaste unter Einbeziehung der thermischen Effekte befassen. Dazu zählt die im Jahr 1995 veröffentlichte Arbeit von ARRUDA et al. [8], die am Beispiel des amorphen Thermoplasts Polymethylmethacrylat die Modellierung des zuvor experimentell beobachteten dehnraten- und temperaturabhängigen Materialverhaltens zeigt. Das Materialmodell für finite Deformationen basiert auf der Annahme, dass bei der plastischen Deformation von amorphen Thermoplasten zwei Barrieren im Polymer Netzwerk überwunden werden müssen. Die erste intermolekulare Barriere ist der Widerstand gegen eine Rotation von Kettensegmenten, welche dem Fließbeginn und der anschließenden kurzen Phase einer Dehnungsentfestigung zugeordnet wird. Hier kommt ein 1973 bereits von ARGON [5] vorgeschlagenes und von BOYCE et al. [16] im Jahr 1988 erweitertes Modell zum Einsatz. Im Anschluss an die Dehnungsentfestigung folgt bei amorphen Thermoplasten üblicherweise eine längere Phase der Dehnungsverfestigung. Dabei muss der Widerstand gegen die Ausrichtung und Verstreckung der Molekülketten überwunden werden. Dieses Verhalten wird mit dem im Jahr 1993 von ARUDA und BOYCE [6, 7] veröffentlichten Acht-Ketten-Modell beschrieben, das in Form eines Rückspannungstensors in das Gesamtmaterialmodell eingeht. Der Rückspannungstensor ist zudem für die Speicherung des nichtdissipativen Anteils der plastischen Verformungsarbeit während der Dehnungsverfestigung (cold work) verantwortlich. Die Erwärmung des Polymethylmethacrylat durch den irreversiblen thermischen Effekt und

1. Einleitung

das damit verbundene thermische Entfestigungsverhalten bei Dehnraten zwischen 10^{-3} 1/s und 10^{-1} 1/s und Umgebungstemperaturen zwischen 25 °C und 75 °C konnten für das Polymethylmethacrylat mit thermomechanisch gekoppelten Simulationen sehr gut beschrieben werden. Erweiterungen dieses Modells wurden 2006 von MULLIKEN und BOYCE [71] und 2009 von VARGHESE und BATRA [93] veröffentlicht. MULLIKEN und BOYCE bestätigten anhand eigener Versuche, dass für einen erweiterten Dehnratenbereich von 10^{-4} 1/s bis 10^4 1/s die Fließgrenzen von Polymethylmethacrylat und Polycarbonat nicht durch ein lineares Gesetz zwischen der Fließspannung und dem Logarithmus der Dehnrates abgeleitet werden können. ROETLING [80] zeigte bereits 1965 am Beispiel von Polymethylmethacrylat, dass im Dehnratenbereich zwischen 10^{-6} 1/s und 10^1 1/s bei Temperaturen zwischen 30 °C und 90 °C die Fließspannungskurven in der eben genannten Darstellung einen Knick bei einer bestimmten Dehnrates und Temperatur aufweisen. Basierend auf den Erkenntnissen von späteren Veröffentlichungen, zum Beispiel von BAUWENS [11] aus dem Jahr 1972, griffen MULLIKEN und BOYCE den Ansatz auf, das beschriebene dehnraten- und temperaturabhängige Verhalten der Fließspannung den thermischen Übergangsbereichen im viskoelastischen Verhalten von Thermoplasten zuzuordnen. Daher erfolgte im Materialmodell von ARRUDA et al. [8] eine Aufteilung des viskoplastischen Anteils der ersten Barriere in zwei separate Anteile, welche dem primären α -Übergang und dem sekundären β -Übergang zugeordnet werden (siehe hierzu auch Abbildung 2.4). Das Acht-Ketten-Modell zur Beschreibung des Verfestigungsverhaltens wurde unverändert übernommen. Mit diesem modifizierten Materialmodell konnte für das Polycarbonat das Deformationsverhalten im gesamten Dehnratenbereich sehr gut abgebildet werden. Beim Polymethylmethacrylat zeigt die Simulation bei höheren Dehnrates noch deutliche Abweichungen zum Experiment, was von den Autoren den nicht berücksichtigten thermischen Effekten zugeschrieben wurde. Dieses Manko griffen wiederum VARGHESE und BATRA [93] in ihrer Arbeit auf und modifizierten das Modell von MULLIKEN und BOYCE [71]. Sie führten temperaturabhängige Funktionen für die Entfestigungsterme der ersten Barriere ein und berücksichtigten die adiabate Erwärmung im Materialmodell. Damit konnten sie auch das Deformationsverhalten von Polymethylmethacrylat im gesamten Dehnratenbereich sehr gut beschreiben.

Im Bereich der thermomechanischen Materialmodellierung von teilkristallinen Thermoplasten soll nun noch die Arbeit von MAUREL-PANTEL et al. [62] erwähnt werden. An Polyamid 66 erfolgte hier zunächst eine umfangreiche Materialcharakterisierung mit synchronisierter Messung der lokalen Dehnungen mittels Grauwertkorrelation und den Oberflächentemperaturen unter Verwendung einer Infrarotthermokamera bei verschiedenen Dehnrates und Umgebungstemperaturen unterhalb und oberhalb der Glasübergangstemperatur. Die anfängliche Abkühlung der Proben bei den Zug- und Schubversuchen durch den thermoelastischen Effekt sowie

die folgende Erwärmung beim Einsetzen der plastischen Deformationen waren signifikant. Ein elasto-viskoplastisches Materialmodell für finite Deformationen, basierend auf dem 2012 veröffentlichten Modell von BILLON [13] für amorphe gummiartige Polymere, wurde zur Beschreibung des teilkristallinen Werkstoffs modifiziert. Das Modell von BILLON greift wiederum die Theorie von EDWARDS und VILGIS [27] aus dem Jahr 1986 auf, welche auf einem nichtgaußförmigen statistischen Ansatz zur Beschreibung von verschlauften Polymernetzwerken unter mechanischer Belastung basiert. Die Modifikationen von MAUREL-PANTEL et al. beruhen auf dem phänomenologischen Ansatz, dass jeweils für die amorphe und die kristalline Phase eine Energiefunktion zur Überwindung der jeweiligen Widerstände im Polymernetzwerk definiert wird. Für die amorphe Phase handelt es sich dabei um die Vorstellung, dass der Widerstand durch das Kettenabgleiten an Verschlaufungspunkten der Molekülketten hervorgerufen wird. In der kristallinen Phase erfolgt die Deformation gegen den Widerstand, der durch feste Verknüpfungspunkte (crosslinks) verursacht wird. Die Implementierung des Materialmodells inklusive der Wärmeleitungsgleichung sowie die Parameteranpassung erfolgte zunächst in der Software MATLAB. Die Ergebnisse der damit durchgeführten Validierungsrechnungen an Zug- und Schubversuchen zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Messungen. Dieses gilt für den Vergleich der Spannungs-Dehnungskurven sowie für die Temperatur-Dehnungskurven.

Die durchgeführte Literaturrecherche zeigt, dass thermische Effekte in vielfältiger Hinsicht einen signifikanten Einfluss auf das Deformations- und Versagensverhalten von unverstärkten Thermoplasten haben können. Vor allem unter dynamischer Belastung sind starke lokale Temperaturerhöhungen durch irreversible thermische Effekte und den vorherrschenden nahezu adiabaten Bedingungen im Werkstoff zu verzeichnen. Der thermoelastische Effekt, welcher eher zu kleinen und reversiblen Temperaturänderungen führt, wird in der Literatur seltener diskutiert.

1.3. Problemstellung, Ziel, Methodik

Wie in Abschnitt 1.1 bereits beschrieben und durch die Literaturrecherche in Abschnitt 1.2 bestätigt wurde, wird der Einfluss von thermischen Effekten auf das Deformations- und Versagensverhalten innerhalb der strukturmechanischen Auslegung von Bauteilen aus unverstärkten Thermoplasten bisher wenig berücksichtigt. Daraus wird für die vorliegende Arbeit folgende Problemstellung abgeleitet: “Es soll eine Verbesserung der Prognosefähigkeit von strukturmechanischen Simulationen bei kurzzeitdynamisch belasteten Thermoplastbauteilen durch die Berücksichtigung thermischer Effekte erreicht werden”. Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist somit, ein Materialmodell für ein unverstärktes Polyamid 6 zur Durchführung von kurzzeitdynamischen und thermomechanisch gekoppelten Simulationen zu entwickeln, das die thermischen Effekte durch Einbeziehung entsprechender Energiequellterme mit berücksichtigt.

1. Einleitung

Die Methodik zur Bearbeitung der Problemstellung wird im Folgenden kurz beschrieben. Begonnen wird mit der experimentellen Untersuchung der thermischen Effekte am ausgewählten Polyamid 6 (trocken). Dazu sollen Zugversuche mit Abzugsgeschwindigkeiten zwischen 10^{-3} mm/s und 10^4 mm/s bei einer Umgebungstemperatur von 25 °C durchgeführt werden. Damit wird in etwa der gesamte Bereich zwischen einem isothermen und einem adiabaten Deformationsverhalten abgebildet. Die vor allem während der plastischen Deformation zu erwartende Materialerwärmung, erfordert für die Anpassung des Materialmodells auch eine Materialcharakterisierung bei höheren Temperaturen. Zudem beginnt bei dem untersuchten Polyamid 6 bereits der Glasübergangsbereich knapp oberhalb der Raumtemperatur. In diesem thermischen Übergangsbereich ist der Einfluss der Temperatur auf das mechanische Verhalten besonders groß und bereits kleine Temperaturerhöhungen führen zu einem signifikanten Abfall der Steifigkeit, siehe Abbildung 2.5. Daher sollen weitere Zugversuche bei Umgebungstemperaturen zwischen 40 °C und 120 °C durchgeführt werden, jedoch nur für ausgewählte Abzugsgeschwindigkeiten. Vereinzelt Schub- und Druckversuche ergänzen die experimentelle Datenbasis zur Bewertung des Einflusses der Spannungsmehrachsigkeit (Triaxialität) auf das Deformationsverhalten.

Die Dehnungsmessung wird bei allen Versuchen optisch auf der Probenoberfläche mit Hilfe eines Grauwertkorrelationssystems durchgeführt. Die Erfassung der Temperaturentwicklung erfolgt bei der Mehrzahl der Zug- und Schubversuche zeitsynchron auf der gegenüberliegenden Probenoberfläche durch eine Infrarot-Thermokamera. Auf Basis der Messdaten werden im nächsten Schritt die wahren Spannungen, die logarithmischen Dehnungen, die logarithmischen Dehnraten und die maximalen Oberflächentemperaturen ermittelt.

Die Analyse der experimentellen Datenbasis und die Bewertung der verfügbaren Literatur führt anschließend zur Auswahl eines geeigneten Materialmodells, das für die Durchführung von thermomechanisch gekoppelten Simulationen geeignet ist. Die Anpassung der Materialmodellparameter soll auf Basis der Zug-, Schub- und Druckversuche durchgeführt werden. Das neu entwickelte Materialmodell wird über die Benutzerschnittstelle als Fortran-Routine VUMAT.F in die Finite-Elemente-Software ABAQUS/EXPLICIT implementiert. Die Validierung des Materialmodells erfolgt abschließend an den kurzzeitdynamischen Zug- und Schubversuchen bei den Umgebungstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C.

Nach Kenntnisstand des Verfassers besteht der Neuheitsgrad der vorliegenden Arbeit gegenüber den bewerteten Literaturstellen zum einen in der umfangreichen Materialcharakterisierung des unverstärkten Thermoplasten Polyamid 6 (trocken). Neben der Abdeckung eines Dehnratenbe-

reichs über sieben Dekaden, eines Temperaturbereichs von 25 °C bis 120 °C, welcher den Glasübergangsbereich des Werkstoffs komplett mit einschließt, wurde zum anderen auch der Einfluss der Spannungsmehrachsigkeit (Triaxialität) auf das plastische Materialverhalten untersucht. Des Weiteren kommt hinzu, dass eine lokale Dehnungsmessung in Kombination mit der Aufzeichnung der Probenoberflächentemperatur mittels Infrarotthermografie vorgenommen wurde. Der Einsatz einer Hochgeschwindigkeitsthermokamera erlaubte selbst bei den hohen Abzugsgeschwindigkeiten bis 1000 mm/s noch eine gute zeitliche Auflösung des Temperaturfeldes. Die Entwicklung des vorliegenden druckabhängigen thermoelastisch-thermoviskoplastischen Materialmodells baut im Wesentlichen auf den Vorarbeiten von JUNGINGER [48], HAUFE et al. [44] und KOLLING et al. [51] auf.

1.4. Gliederung der Arbeit

Im ersten Abschnitt von KAPITEL 2 werden die grundlegenden mechanischen Eigenschaften von Kunststoffen und die wichtigsten Einflussgrößen auf deren mechanisches Verhalten aufgezeigt. Die hier dargestellten Inhalte dienen der Begriffsbildung und der Vermittlung eines Grundverständnisses vom Aufbau der Kunststoffe. Der zweite Abschnitt des Kapitels fasst die im weiteren Verlauf benötigten kontinuumsmechanischen Grundlagen zusammen.

KAPITEL 3 beschreibt die Versuchsaufbauten und die verwendete Messtechnik zur Durchführung der thermomechanischen Charakterisierung sowie der thermischen Analysen am Polyamid 6. Des Weiteren werden die notwendigen Schritte zur Auswertung und Aufbereitung der Messdaten aus den thermomechanischen Versuchen erläutert. Eine ausführliche Darstellung der aufbereiteten Messdaten von Polyamid 6 sowie deren Interpretation hinsichtlich der wichtigen Einflussgrößen auf das Deformations- und Versagensverhalten schließt das Kapitel ab.

In KAPITEL 4 werden die Anforderungen an das Materialmodell auf Basis der Erkenntnisse aus der Literaturrecherche und der eigenen Versuchsergebnisse abgeleitet. Anschließend erfolgt die Aufstellung des 3D Konstitutivgesetzes für ein druckabhängiges thermoelastisch-thermoviskoplastisches Material sowie die Formulierung der Energiequellterme zur Berücksichtigung der thermischen Effekte.

KAPITEL 5 enthält die in dieser Arbeit speziell für das Polyamid 6 entwickelten eindimensionalen Materialgleichungen, welche als Teilmodelle in das 3D Konstitutivgesetz einfließen. Dabei handelt es sich um die dehnraten- und temperaturabhängigen elastischen Koeffizienten, die raten- und temperaturabhängige Verfestigungsfunktion und die raten- und temperaturabhängige plastische Kompressibilität. Außerdem erfolgt in diesem Kapitel die Anpassung aller

1. Einleitung

Materialmodellparameter auf Basis der experimentellen Daten.

Die Diskretisierung der Konstitutivgleichungen, der numerische Algorithmus zur zeitlichen Integration des Gleichungssystems sowie die Implementierung des Materialmodells als Benutzeroutine in die Software ABAQUS/EXPLICIT werden in KAPITEL 6 beschrieben.

Die Validierung und Bewertung der Prognosegenauigkeit des implementierten Materialmodells erfolgen in KAPITEL 7 am Beispiel von kurzzeitdynamischen Zug- und Schubversuchen.

Eine Zusammenfassung der wichtigsten Erkenntnisse aus dieser Arbeit sowie Vorschläge zu einer möglichen Weiterarbeit sind abschließend in KAPITEL 8 dargestellt.

2. Grundlagen

2.1. Mechanik der Kunststoffe

Im folgenden Kapitel sollen die grundlegenden mechanischen Eigenschaften von Kunststoffen und deren wichtigsten Einflussgrößen aufgezeigt werden. Dabei wird zunächst der Blick auf die Kunststoffe im Allgemeinen gerichtet. Wenn notwendig und sinnvoll, wird an entsprechender Stelle auch direkt Bezug auf den in dieser Arbeit untersuchten teilkristallinen Thermoplast Polyamid 6 genommen. Die hier dargestellten Inhalte dienen in erster Linie der Begriffsbildung und der Vermittlung eines Grundverständnisses vom Aufbau und dem mechanischen Verhalten von Kunststoffen. Im weiteren Verlauf der Arbeit wird dann immer wieder Bezug auf einige Punkte des Kapitels genommen, zum Beispiel bei der Interpretation der Daten aus den eigenen Charakterisierungsversuchen in Kapitel 3 und bei der Begründung für die Formulierung des Materialmodells in Kapitel 4.

Die mechanischen Eigenschaften von Kunststoffen werden durch Kennwerte charakterisiert, die aus dem makroskopischen Deformationsverhalten einer belasteten Kunststoffprobe folgen. Hierzu gehören zum Beispiel die Festigkeit, die Schlagzähigkeit oder auch die Bruchdehnung. Diese Kennwerte können selbst bei ein und demselben Kunststoff in Abhängigkeit der Belastungsbedingungen Unterschiede im Bereich mehrerer Größenordnungen aufweisen. Ursache hierfür ist der komplexe Aufbau von Kunststoffen und den damit verbundenen mikromechanischen Prozessen von Deformation und Versagen. Für ein tiefergehendes Verständnis der mechanischen Eigenschaften ist somit die Kenntnis über den chemischen Aufbau des Kunststoffs sowie die bei einer Belastung ablaufenden inneren Wirkmechanismen (Mikromechanismen) unbedingt notwendig. Eine stark vereinfachte Darstellung der Zusammenhänge zwischen Strukturen, Einflussgrößen und dem mechanischen Verhalten von Kunststoffen, der sogenannten Struktur-Eigenschaftsbeziehungen, enthält Abbildung 2.1. Darin ist zu erkennen, dass die molekulare (chemische) Struktur eines Kunststoffs durch den Syntheseprozess charakterisiert ist. Stark beeinflusst durch die Herstellungs- und Verarbeitungsbedingungen entsteht hieraus die übermolekulare Struktur oder Morphologie. Damit ist eine hohe Vielfalt von möglichen Strukturen gegeben. Die Größen der strukturellen Details reichen über fünf Größenordnungen, von etwa 1 nm bis 100 μm [65]. Die mechanischen Eigenschaften sind nur indirekt von der molekula-

2. Grundlagen

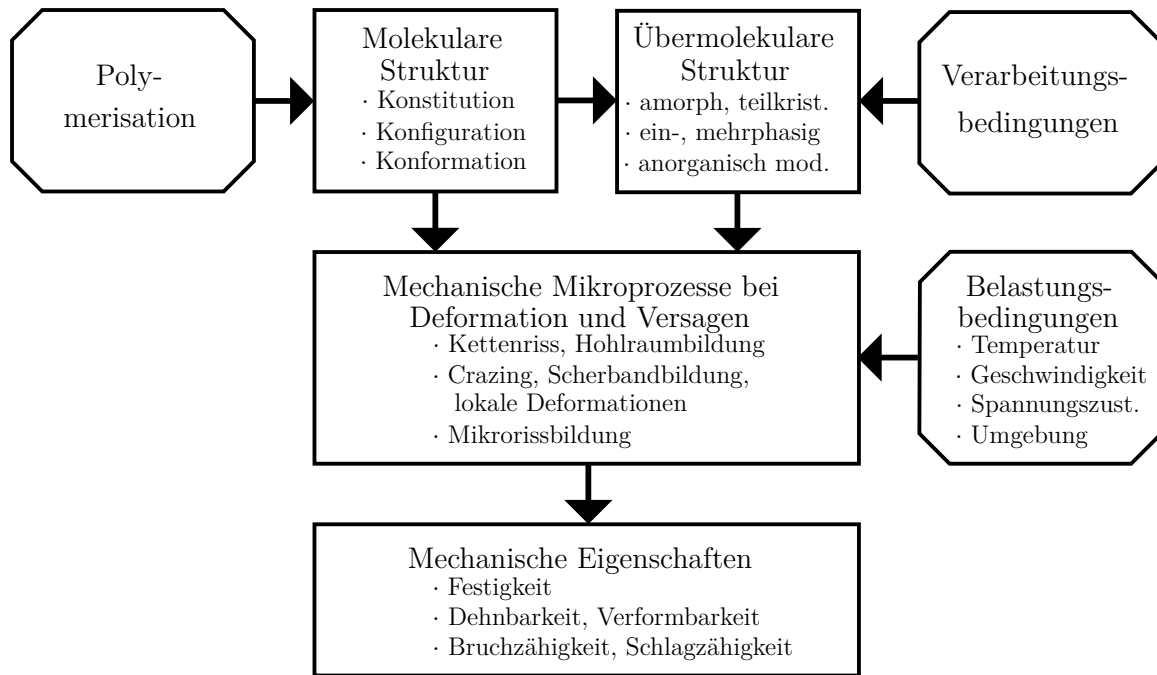


Abbildung 2.1.: Struktur-Eigenschaftsbeziehungen bei Kunststoffen, nach [65]

ren und der übermolekularen Struktur abhängig. Die Verbindung zwischen den mechanischen Eigenschaften und der molekularen sowie der übermolekularen Struktur bilden die mikromechanischen Deformations- und Versagensprozesse. Diese Mikroprozesse sind durch die molekulare und übermolekulare Struktur vorgeprägt und werden zusätzlich durch die auftretenden Belastungsbedingungen beeinflusst. Unter Belastungsbedingungen werden hier nicht nur mechanische Lasten verstanden, sondern auch die Einflüsse durch die Umgebungsbedingungen (z.B. Temperatur, umgebendes Medium). Eine kurze Beschreibung von molekularer und übermolekularer Struktur sowie des Deformations- und Versagensverhalten von Kunststoffen erfolgt in den Unterabschnitten 2.1.1 und 2.1.3. Die thermischen Zustandsbereiche werden aufgrund ihrer Wichtigkeit bei Kunststoffen in dem separaten Unterabschnitt 2.1.2 besprochen.

2.1.1. Aufbau und Struktur

Kunststoffe bestehen im Wesentlichen aus makromolekularen synthetisch-organischen Verbindungen. Neben den Makromolekülen enthalten Kunststoffe üblicherweise noch Zusatzstoffe, wie zum Beispiel Additive und Verstärkungsstoffe, die einer gezielten Modifizierung der Werkstoffeigenschaften während der Verarbeitung oder im späteren Einsatz als Bauteil dienen. Die Makromoleküle setzen sich aus immer wiederkehrenden Einheiten, den Monomeren, zusammen. Daher spricht man bei Kunststoffen umgangssprachlich auch von Polymeren. Eine strengere Definition der Begriffe Kunststoff und Polymer hingegen findet man in [49]. Hier wird der Begriff “Polymer” als Bezeichnung für den Rohstoff von Kunststoffen verwendet, also

die Substanz bestehend aus vielen Polymermolekülen. Der Begriff “Kunststoff” bezieht sich dagegen auf die bereits verarbeitete Formmasse zum Formstoff, bestehend aus dem Polymer und den Zusatzstoffen, wie zum Beispiel Additive.

Die Herstellung der Polymere aus Monomeren erfolgt für die meisten Kunststoffe durch Synthesereaktionen, auch allgemein mit dem Oberbegriff Polymerisation bezeichnet. Dabei wird zwischen drei Klassen unterschieden [29, 49]:

- Kettenpolymerisation (Polymerisation),
- Kondensationspolymerisation (Polykondensation),
- Additionspolymerisation (Polyaddition).

Sind am Aufbau eines Polymermoleküls ein, zwei oder mehrere Monomerarten beteiligt, dann bezeichnet man die entstandenen Polymere entsprechend der Anzahl beteiligter Arten von Monomeren als Homopolymere, Copolymere, Terpolymere, Quaterpolymere usw. Charakteristische Größen zur Beschreibung von Polymermolekülen sind [29]:

- Polymerisationsgrad,
- Molekulargewicht und Molekulargewichtsverteilung.

Der Polymerisationsgrad ist die Zahl der Monomere aus denen ein Polymermolekül aufgebaut ist. Für ein Polyamid 6 werden zum Beispiel Polymerisationsgrade von ungefähr 100 bis 300 erreicht. Für ein Polypropylen bewegen sich die typischen Werte im Bereich von 3500 bis 35000. Bei Thermoplasten verwendet man bevorzugt das Molekulargewicht des Polymermoleküls. Grund dafür ist, dass der Polymerisationsgrad für sich alleine keine direkte Aussage über die Größenordnung des Polymermoleküls zulässt. Das Molekulargewicht eines Polymermoleküls hingegen berechnet sich aus dem Molekulargewicht des Monomers multipliziert mit dem Polymerisationsgrad. Die Polymerketten in thermoplastischen Bauteilen weisen jedoch keine einheitliche Länge und somit kein einheitliches Molekulargewicht auf. Daher wird in der Regel die Molekulargewichtsverteilung angegeben. Die Verteilung des Molekulargewichts wird von dem Polymerisationsprozess selbst, sowie dem späteren Verarbeitungsprozess oder auch von im Laufe der Lebensdauer auftretenden chemischen Alterungsprozessen beeinflusst. Bei Thermoplasten lässt sich oft ein Zusammenhang zwischen den mechanischen Eigenschaften und der Molekulargewichtsverteilung (Mittelwert und Streubreite) herstellen. Daher ist die Molekulargewichtsverteilung eine wichtige Größe bei der Beurteilung der Eigenschaften von Kunststoffen und wird zudem auch als Indikator für den Kettenabbau durch chemische Alterungsprozesse verwendet.

2. Grundlagen

Der Aufbau der einzelnen Polymerketten, die räumliche Anordnung der Monomere und die räumliche Gestalt der Polymermoleküle sind sehr vielfältig. Die Beschreibung der als molekulare Struktur eines Polymers bezeichneten Eigenschaften erfolgt mit Hilfe folgender Begriffe [29, 49, 65]:

- Konstitution (Aufbau einzelner Polymermoleküle),
- Konfiguration (Anordnung der Monomere entlang des Polymermoleküls),
- Konformation (Art der räumlichen Gestalt des Polymermoleküls).

Für den Zusammenhalt von makromolekularen Systemen sind Bindungskräfte verantwortlich. Die wichtigsten Bindungsarten in Polymersystemen sind [49]:

- Hauptvalenzbindungen,
- Nebenvalenzbindungen (van der Waals- und Wasserstoffbrückenbindungen),
- mechanische Bindungen.

Die Verbindung der Monomere innerhalb eines Polymermoleküls und die chemische Vernetzung von Polymermolekülen untereinander erfolgt durch chemische Bindungen, den Hauptvalenzbindungen. Nebenvalenzbindungen sind physikalische Bindungen und werden durch Anziehungskräfte zwischen einzelnen Polymermolekülen hervorgerufen. Die mechanische Bindung kommt durch das Verschlaufen von Polymerketten zustande. Die Bindungskräfte zusammen mit der molekularen Struktur eines Polymers bestimmen maßgeblich sein thermisch-mechanisches Verhalten. Daher erfolgt in der Praxis häufig eine Kategorisierung der Kunststoffe in die drei folgenden Gruppen, basierend auf den Unterschieden im thermisch-mechanischen Verhalten [49]:

- Thermoplaste und thermoplastische Elastomere,
- Duroplaste,
- Elastomere.

Eine Übersicht der drei Kunststoffgruppen mit Angabe der wichtigsten Eigenschaften ist in Tabelle 2.1 dargestellt. Eine besondere und wichtige Eigenschaft gibt es bei den Thermoplasten. Bei dieser Kunststoffkategorie spielen die Nebenvalenzbindungen sowie die mechanischen Bindungen eine zentrale Rolle. Aufgrund der bei den Thermoplasten fehlenden chemischen Bindungen der Polymerketten untereinander (chemische Vernetzung), sind die Nebenvalenzbindungen und die mechanischen Bindungen maßgeblich für den Zusammenhalt der einzelnen Polymerketten verantwortlich. Daher können Thermoplaste, im Gegensatz zu Duroplasten und




Kategorie	Struktur	Wichtige Eigenschaften
Thermoplaste	 verschlängte lineare oder verzweigte Makromoleküle	schmelzbar löslich quellbar
Duroplaste	 engmaschig chemisch vernetzte Makromoleküle	nicht schmelzbar nicht löslich nicht quellbar
Elastomere	 weitmaschig chemisch vernetzte Makromoleküle	nicht schmelzbar nicht löslich quellbar

Tabelle 2.1.: Kategorisierung der Kunststoffe nach Unterschiede im thermisch-mechanischen Verhalten, Zeichnungen aus [12]

Elastomeren, durch die Zuführung von Wärmeenergie wieder aufgeschmolzen werden.

Unter der übermolekularen Struktur oder Morphologie eines Polymers wird die räumliche Anordnung mehrerer Polymerketten verstanden. Dieses Strukturmerkmal ist nicht zu verwechseln mit der bereits oben genannten Konformation, welche die räumliche Anordnung nur einer Polymerkette beschreibt. Die Entstehung und Ausprägung der übermolekularen Struktur wird maßgeblich von der vorliegenden molekularen Struktur und den Verarbeitungsbedingungen beeinflusst (siehe auch Abbildung 2.1). Des Weiteren hängt die übermolekulare Struktur zum Beispiel von dem Mischungsverhältnis der einzelnen Komponenten bei einem Polymerblend (Mischung von zwei oder mehreren Thermoplasten) ab oder auch vom Gehalt der dem Polymer zugegebenen Füll- und Verstärkungsstoffe. Ähnlich wie bei der molekularen Struktur sind auch hier eine Vielfalt von übermolekularen Strukturen möglich. Die beiden wichtigsten Ordnungszustände von Makromolekülen in einer übermolekularen Struktur sind:

- amorph,
- teilkristallin.

Bei amorphen Polymeren ist die räumliche Anordnung der Makromoleküle ungeordnet oder regellos. Zur Veranschaulichung wird hier oft das Bild von in sich verschlungenen Spagettis (Spagettistruktur) herangezogen. Es können selbst bei amorphen Polymeren weitere übermolekulare Strukturen auftreten. So ist es theoretisch möglich, dass sich in Abhängigkeit des energetischen Zustands (Entropie) der Makromoleküle bei der Erstarrung auch aneinander gelagerte wirre, statistische Knäuel bilden. Die Spagettistruktur und das Auftreten von statistischen Knäuel bilden theoretisch die beiden Grenzfälle bei amorphen Strukturen [49]. Amorphe Thermoplaste sind, sofern Sie keine Farb- oder Füllstoffe enthalten, transparent.

2. Grundlagen

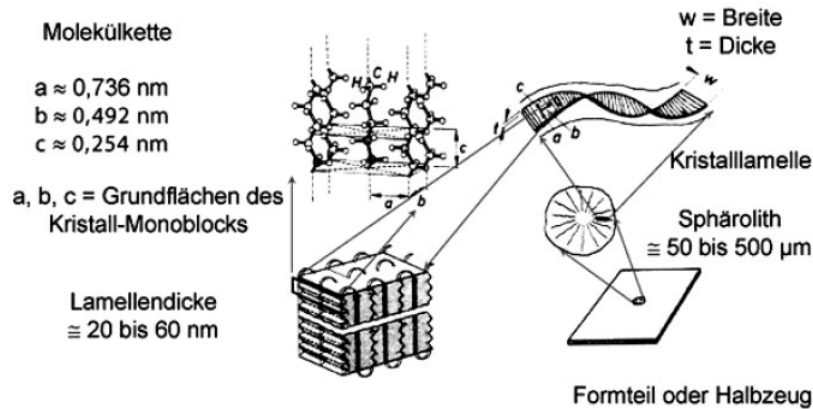


Abbildung 2.2.: Struktureller Aufbau von teilkristallinen Polymeren am Beispiel von Polyethylen, aus [64]

Bei der Gruppe der thermoplastischen Kunststoffe besteht die Möglichkeit, dass sich während des Abkühlvorgangs der Schmelze zu einem Festkörper Teile der Polymerketten aneinander ausrichten und falten. Es entstehen dadurch stellenweise geordnete oder kristallähnliche Strukturen. Bei diesem Kristallisationsprozess werden jedoch niemals alle Makromoleküle in den geordneten kristallähnlichen Zustand übergehen. Man spricht daher von teilkristallinen Thermoplasten. Zwischen den kristallinen Strukturen verbleiben weiterhin noch amorphe Bereiche mit ungeordneten Polymerketten. Der prozentuale Anteil der kristallinen Bereiche am gesamten Gefüge wird als Kristallisationsgrad bezeichnet. Die Angabe des Kristallisationsgrades kann als Gewichts- oder Volumenanteil erfolgen, wobei meistens der Gewichtsanteil verwendet wird. Beispielsweise liegt bei einem Polyethylen hoher Dichte der Kristallisationsgrad im Bereich zwischen 70 und 80 Gewichtsprozent, bei einem Polyamid 6 dagegen nur zwischen 35 und 45 Gewichtsprozent [29]. Das bereits erwähnte Auffalten der Polymerketten führt zur Bildung von sogenannten Kristalllamellen. Aus diesen kann sich wiederum eine nächst höhere Ordnungsstruktur bilden, welche in den meisten Fällen der Anordnung größerer polyedrischer Einheiten, den sogenannten Sphärolithen, entspricht. Innerhalb der Sphärolithe sind die Lamellen radialsymmetrisch angeordnet. Der strukturelle Aufbau eines teilkristallinen Polymers mit Sphärolithbildung ist am Beispiel von Polyethylen in Abbildung 2.2 dargestellt. Der Durchmesser von Sphärolithen bewegt sich im Bereich von $5 \mu\text{m}$ bis wenige mm [29]. Neben den Sphärolithen ist auch die Entstehung anderer kristalliner Strukturen möglich, zum Beispiel die Shish-Kebab Struktur. Die Shish-Kebab Struktur besteht aus stark verestreckten, hochorientierten Bündeln von Makromolekülketten (Shishs) und in regelmäßigen Abständen senkrecht dazu auskristallisierten Lamellen (Kebaps). Abbildung 2.3 zeigt im Vergleich jeweils ein Modell der beiden Strukturen. Üblicherweise entstehen bei der Kristallisation aus einer Polymer-schmelze im Standardspritzgießprozess sphärolitische Strukturen. Die gezielte Erzeugung von Shish-Kebab-Strukturen erfordert eine spezielle Prozessführung und wird in der Regel zur ge-

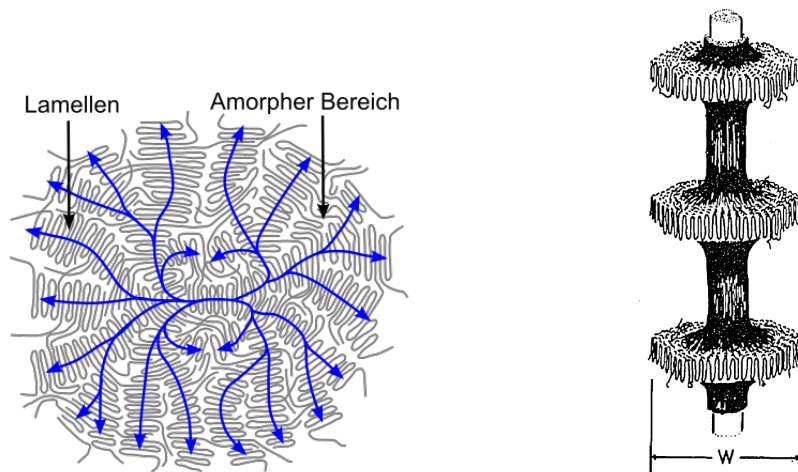


Abbildung 2.3.: Links, das Modell einer Sphärolith-Struktur aus [29] und rechts, Zeichnung einer Shish-Kebab-Struktur nach Pennings aus [72]

zielten Eigenverstärkung des Materials genutzt. Zum Beispiel kann hiermit bei Polyethylen eine starke Erhöhung der Steifigkeit und der Festigkeit erzielt werden [29]. Abschließend sei noch angemerkt, dass unverzweigte oder schwach verzweigte Polymermoleküle eine höhere Neigung zeigen, kristallähnliche Strukturen zu bilden, also einen höheren Kristallisationsgrad erreichen als stark verzweigte oder auch vernetzte Polymere. Aus diesem Grund tritt bei Duroplasten und Elastomeren keine Kristallitbildung ein.

2.1.2. Thermische Zustandsbereiche

Die Temperatur ist eine der wichtigsten Einflussgrößen auf die mikromechanischen Deformations- und Versagensprozesse und somit auch auf die mechanischen Eigenschaften der Kunststoffe. Auf der Mikroebene kann dieser Einfluss durch eine zunehmende Bewegungsfreiheit der Polymermoleküle und Molekülsegmente mit ansteigender Temperatur erklärt werden. Als Maß zur Beschreibung der Bewegungsfreiheit eignet sich das freie Volumen. Es beschreibt den Raum in einem Polymer, welcher nicht von Molekülketten besetzt ist. Je nach Art und Größe der Moleküle und Molekülsegmente nimmt die Beweglichkeit erst mit Erreichen eines bestimmten freien Volumens zu, das heißt der entsprechende Bewegungsfreiheitsgrad wird erst in einem charakteristischen Temperaturbereich aktiviert. Dieser für jedes Polymer charakteristische Temperaturbereich wird als thermischer Übergangsbereich bezeichnet. Die Temperaturbereiche, in denen keine zusätzliche Aktivierung von Bewegungsfreiheitsgraden stattfindet, heißen thermische Zustandsbereiche (Plateaus). Die thermischen Übergangsbereiche zwischen den thermischen Zustandsbereichen charakterisieren also Änderungen in der Beweglichkeit der Makromoleküle. In den thermischen Übergangsbereichen

2. Grundlagen

zeigt sich die stärkste Temperaturabhängigkeit der mechanischen Eigenschaften. Sie werden typischerweise nicht in Form des gesamten Temperaturbereichs angegeben, sondern durch eine dem thermischen Übergangsbereich zugeordnete Übergangstemperatur. Oftmals werden die Übergangstemperaturen mit T_α , T_β , T_γ und T_m bezeichnet. T_α ist auch als Glasübergangstemperatur T_g bekannt und spielt vor allem bei Thermoplasten eine zentrale Rolle. Im Bereich von T_g erweichen amorphe Thermoplaste und verlieren dabei ihre Formstabilität. Daher befindet sich der typische Anwendungsbereich amorpher Kunststoffe immer unterhalb von T_g . Bei teilkristallinen Thermoplasten hingegen verringert sich beim Überschreiten von T_g zwar stark die Steifigkeit und die Festigkeit durch das Erweichen der amorphen Anteile, die kristallinen Anteile tragen jedoch weiterhin zur Formstabilität bei. Erst wenn auch die kristallinen Anteile erweichen, verlieren teilkristalline Thermoplaste ihre Formstabilität. Der Übergang in den schmelzförmigen Zustand bei teilkristallinen Thermoplasten wird durch die Aufschmelztemperatur T_m charakterisiert. Bei amorphen Thermoplasten fallen T_m und T_g zusammen. Duroplaste oder Elastomere haben aufgrund ihrer chemisch vernetzten Molekülstruktur keinen Aufschmelzbereich. Diese werden erst bei Erreichen der sogenannten Zersetzungstemperatur irreversibel zerstört.

Die thermischen Zustands- und Übergangsbereiche eines Kunststoffes können auf verschiedene Weisen ermittelt werden [29]. Die mechanische Bestimmung kann mit Hilfe der Dynamisch-Mechanischen-Analyse (DMA) im linearen Verformungsbereich erfolgen [35]. Hierbei wird das viskoelastische Antwortverhalten des Kunststoffes unter harmonischer Anregung mit der Frequenz f durch Messung des zeitabhängigen Spannungs- und Dehnungssignals erfasst:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \cos(2\pi ft), \quad (2.1)$$

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \cos(2\pi ft - \delta). \quad (2.2)$$

Die Größe δ ist die Phasenverschiebung zwischen Anregungssignal $\sigma(t)$ und Antwortsignal $\varepsilon(t)$. In der komplexen Zahlenebene kann hieraus der sogenannte komplexe Elastizitätsmodul E^* bestimmt werden. Dieser setzt sich aus dem Speichermodul E' (Realteil) und dem Verlustmodul E'' (Imaginärteil) wie folgt zusammen:

$$E^* = E' + iE'' = \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0} \cos(\delta) + i \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0} \sin(\delta). \quad (2.3)$$

Der Verlustfaktors $\tan \delta$ berechnet sich aus dem Verhältnis von Verlustmodul zu Speichermodul und charakterisiert das Dämpfungsverhalten:

$$\tan \delta = \frac{E''}{E'}. \quad (2.4)$$

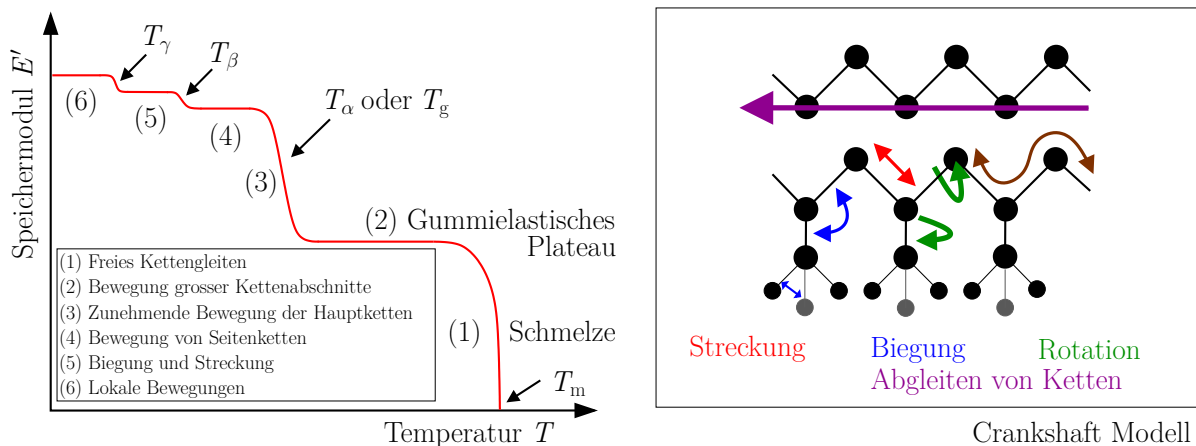


Abbildung 2.4.: Schematische DMA-Kurve zur Darstellung der möglichen thermischen Zustands- und Übergangsbereiche (links) und das Crankshaft Modell mit zugehörigen molekularen Freiheitsgraden (rechts). Beide Darstellungen sind angelehnt an [63]

Der Verlustfaktor $\tan \delta$ erreicht ein lokales Maximum im thermischen Übergangsbereich bei seiner jeweiligen Übergangstemperatur. Die thermischen Zustands- und Übergangsbereiche in einem Speichermodul-Temperatur-Diagramm sind schematisch links in Abbildung 2.4 dargestellt. Die aktiven Bewegungsfreiheitsgrade in den jeweiligen Zustandsbereichen sind hier ebenfalls beschrieben. Auf der rechten Seite in Abbildung 2.4 wird das sogenannte Crankshaft Modell gezeigt. Es illustriert in einfacher Weise die möglichen Bewegungsfreiheitsgrade der unterschiedlichen Polymerketten und Kettensegmente (Hauptketten, Seitenketten usw.). Eine weiterführende Beschreibung der thermischen Zustands- und Übergangsbereiche mit den damit verbundenen Bewegungsfreiheitsgraden findet man zum Beispiel in [63].

Wie oben bereits erwähnt wurde, sind die Übergangstemperaturen für jeden einzelnen Kunststoff charakteristische Größen. Jedoch können äußere Einflussfaktoren, wie zum Beispiel die Belastungsfrequenz oder das umgebende Medium, die Übergangstemperaturen eines Kunststoffs noch beeinflussen und verschieben. Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 2.5 das Ergebnis einer DMA Messung [54] an dem im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Polyamid 6 (trocken) dargestellt. Es handelt sich hier um einen Temperatur-Frequenzsweep im Zugbelastungsmodus an einer 2,5 mm dicken Zugprobe. Die Messung wurde im Temperaturbereich zwischen $-45\text{ }^\circ\text{C}$ und $200\text{ }^\circ\text{C}$ und im Frequenzbereich zwischen 0,5 Hz und 63 Hz durchgeführt. Bei jeweils einer konstanten Temperatur erfolgte ein Frequenzsweep mit 15 Abtastschritten und jeweils 50 Schwingungen/Abtastschritt. Nach Beendigung eines Frequenzsweeps wurde die Temperatur um jeweils $5\text{ }^\circ\text{C}$ erhöht. Im rechten Diagramm sind die Kurven des temperaturabhängigen Verlustmoduls $\tan \delta$ für die beiden Frequenzgrenzen 0,5 Hz (blau) und 63 Hz (rot) dargestellt.

2. Grundlagen

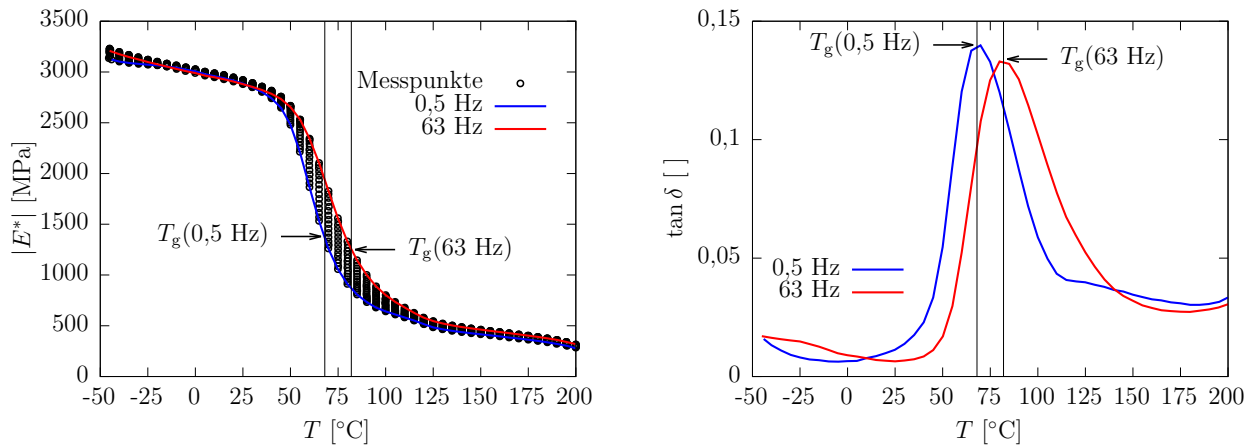


Abbildung 2.5.: Verschiebung der thermischen Übergangsbereiche in Abhängigkeit der Belastungsfrequenz bei Polyamid 6

Die lokalen Maxima der beiden $\tan \delta$ -Kurven liegen knapp unterhalb und oberhalb von $75 \text{ }^\circ\text{C}$ und zeigen die Glasübergangstemperatur T_g von Polyamid 6 im trockenen Zustand an. Deutlich zu erkennen ist die Verschiebung des T_g zu einer höheren Temperatur bei zunehmender Frequenz. Das linke Diagramm zeigt den temperaturabhängigen Verlauf vom Betrag des komplexen Elastizitätsmodul

$$|E^*| = \sqrt{(E')^2 + (E'')^2} \quad (2.5)$$

bei unterschiedlichen Frequenzen. Es enthält neben den einzelnen Messpunkten von $|E^*|$ auch wiederum die Kurven von $|E^*|$ bei $0,5 \text{ Hz}$ (blau) und 63 Hz (rot). Neben dem starken Rückgang der Steifigkeit im thermischen Übergangsbereich (Glasübergangsbereich) von T_g , ist auch eine deutlich erhöhte Frequenzabhängigkeit von $|E^*|$ zu beobachten. In den thermischen Zustandsbereichen (Plateaus) links und rechts vom Glasübergangsbereich ist die Temperatur- und Frequenzabhängigkeit von $|E^*|$ nur schwach ausgeprägt. In den beiden Diagrammen ist bei etwa $-45 \text{ }^\circ\text{C}$ andeutungsweise noch der Beginn eines weiteren thermischen Übergangsbereichs mit der charakteristischen Übergangstemperatur T_β zu erkennen. Dieser ist, wie schon in Abbildung 2.4 schematisch angedeutet, sehr viel schwächer ausgeprägt als der Glasübergangsbereich. Wie im späteren Verlauf der Arbeit noch gezeigt wird, gibt es eine Äquivalenz der Belastungsgeschwindigkeit zur Belastungsfrequenz. Eine weitere wichtige Einflussgröße auf die Glasübergangstemperatur bei Polyamiden ist der Feuchtegehalt. Da Polyamide durch ihren chemischen Aufbau verstärkt in der Lage sind Feuchtigkeit aufzunehmen, ist das eine nicht zu vernachlässigende Einflussgröße. Untersuchungsergebnisse zum Einfluss des Feuchtegehaltes auf die Übergangstemperaturen bei Polyamid 6 sind in [28] zu finden. Hier zeigt sich eine deutliche Verschiebung der Glasübergangstemperatur T_g zu höheren Werten mit abnehmendem Feuchtegehalt.

Der soeben erläuterte Einfluss der thermischen Zustands- und Übergangsbereiche auf das linear viskoelastische Deformationsverhalten soll nicht darüber hinweg täuschen, dass auch der nicht-lineare Deformationsbereich eines Kunststoffs bis hin zum Versagen hiervon beeinflusst wird. Beispielsweise kann sich beim Überschreiten eines thermischen Übergangsbereichs die charakteristische Form der Spannungs-Dehnungskurve komplett ändern, sprödartiges Versagensverhalten kann in ein duktileres Versagensverhalten übergehen. Bei unverstärktem Polyamid 6 ist ein solches Verhalten mitunter zu beobachten, siehe zum Beispiel Abbildung 2.9 in Unterabschnitt 2.1.3.

2.1.3. Deformations- und Versagensverhalten

Wie bereits zu Beginn des Kapitels beschrieben wurde, stellen die mikromechanischen Deformations- und Versagensprozesse die Verbindung zwischen dem strukturellen Aufbau eines Polymers und den mechanischen Eigenschaften (Struktur-Eigenschaftsbeziehungen) dar. In der Praxis werden die mechanischen Eigenschaften und deren charakteristische Kennwerte üblicherweise in genormten Standardversuchen ermittelt, in der Regel ohne genaue Kenntnis oder Analyse der damit verbundenen Mikroprozesse. Beispielsweise erfolgt die Bestimmung von Verformungs- und Festigkeitskennwerten häufig im quasistatischen Zugversuch nach DIN EN ISO 527. Der Zugversuch wird zunächst an geschulterten Flachproben unter Aufnahme des Kraftsignals und der Probenverlängerung in einem definierten Bereich durchgeführt. Das Deformations- und Versagensverhalten auf der makroskopischen Betrachtungsebene wird anschließend in Form von technischen Spannungs-Dehnungskurven dargestellt [35]. In der Literatur erfolgt häufig die Einteilung der Kunststoffe aufgrund des Verlaufs der Spannungs-Dehnungskurven in verschiedene Grundtypen, aus denen sich ebenfalls die charakteristischen Verformungs- und Festigkeitskennwerte ablesen lassen. Die charakteristischen Spannungs-Dehnungskurven nach [65] sind in Abbildung 2.6 dargestellt. Das Deformations- und Versagensverhalten wird in fünf Kategorien eingeteilt. Es erstreckt sich dabei von einem spröden oder semi-spröden Versagen bei kleinen Deformationen (Typ a und b) über ein duktileres Deformationsverhalten mit dem Auftreten von Einschnüreffekten (Typ c), Fließschulterbildung, -wachstum und anschließender Verfestigung (Typ d) bis hin zur homogenen oder gummielastischen Deformation ohne ausgeprägte Fließgrenze (Typ e). Zur Beschreibung der mechanischen Eigenschaften können je nach Grundtyp bestimmte Verformungs- und Festigkeitskennwerte aus den Kurven abgelesen werden [29]:

- Bruchdehnung ε_B und Bruchspannung σ_B ,
- Fließdehnung ε_F und Fließspannung σ_F ,
- Zugfestigkeit σ_Z .

2. Grundlagen

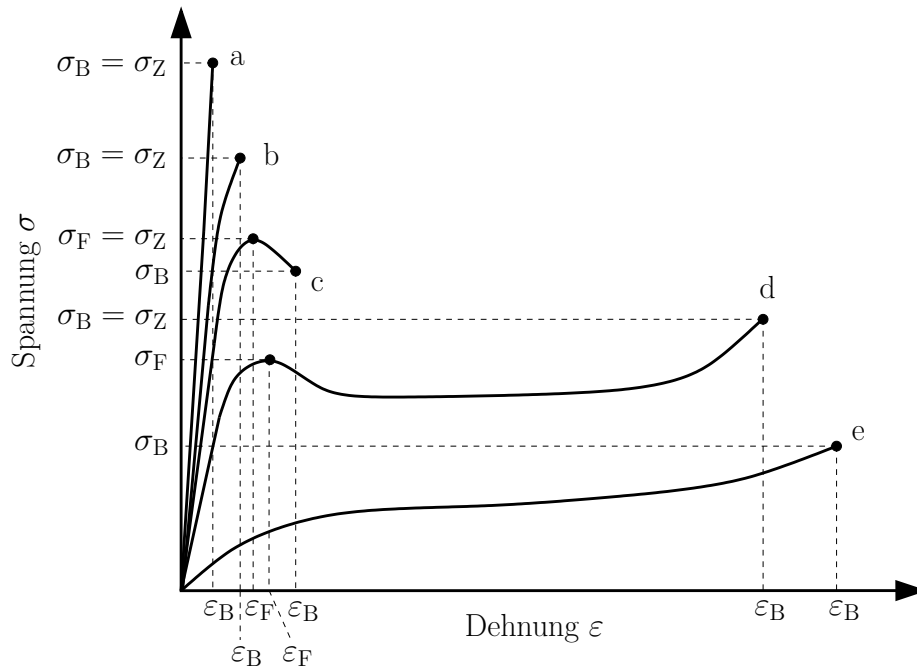


Abbildung 2.6.: Charakteristische Spannungs-Dehnungskurven für verschiedene Polymere, nach [65]: a) hochfeste, hochmodulige Fasern, b) (Semi-)sprödbruch, c) Einschnürungsbruch, d) Kaltverstreckung, e) homogene Deformation

Diese Kennwerte werden üblicherweise zum Vergleich von unterschiedlichen Kunststoffen herangezogen. Bei spröden Kunststoffen des Typs a oder b kann die Bruchdehnung ε_B und die Bruchspannung σ_B angegeben werden. Die Zugfestigkeit σ_Z entspricht in diesem Falle der Bruchspannung σ_B . Bei duktilem Verhalten mit ausgeprägter Fließgrenze (Typ c und Typ d) werden zusätzlich noch die Dehnung an der Fließgrenze ε_F und die Fließspannung σ_F angegeben. Je nach Kurvenverlauf kann die Bruchspannung σ_B unterhalb oder oberhalb der Fließspannung σ_F liegen. Die Zugfestigkeit entspricht dann immer dem Größeren der beiden Werte. Die Fließgrenze bei Erreichen der Fließspannung zeigt allgemein den Beginn einer Probeneinschnürung an. Im Falle einer anschließenden Fließschulterbildung und eines Fließschulterwachstums spricht man auch von einer inhomogenen Deformation, da die Dehnungsänderung verstärkt in den Fließschultern auftritt, während sich die Dehnung im bereits stark verstreckten mittleren Bereich nur noch geringfügig ändert (Kaltverstreckung). Die Kaltverstreckung wird industriell übrigens gezielt zur Erhöhung der Festigkeit von Polymeren durch homogene Ausrichtung der Molekülketten in Belastungsrichtung eingesetzt, zum Beispiel bei der Herstellung von Bändern, Seilen und Textilfasern. Die einzelnen Phasen einer Deformation mit Einschnürung, Fließschulterbildung bis hin zur Kaltverstreckung und anschließendem Versagen sind in Abbildung 2.7 am Beispiel einer Zugprobe aus Polypropylen anschaulich dargestellt. Wie gegen Ende dieses Abschnitts weiterhin noch diskutiert wird, können bei unverstärkten teilkristallinen Thermoplasten unter gewissen Bedingungen auch

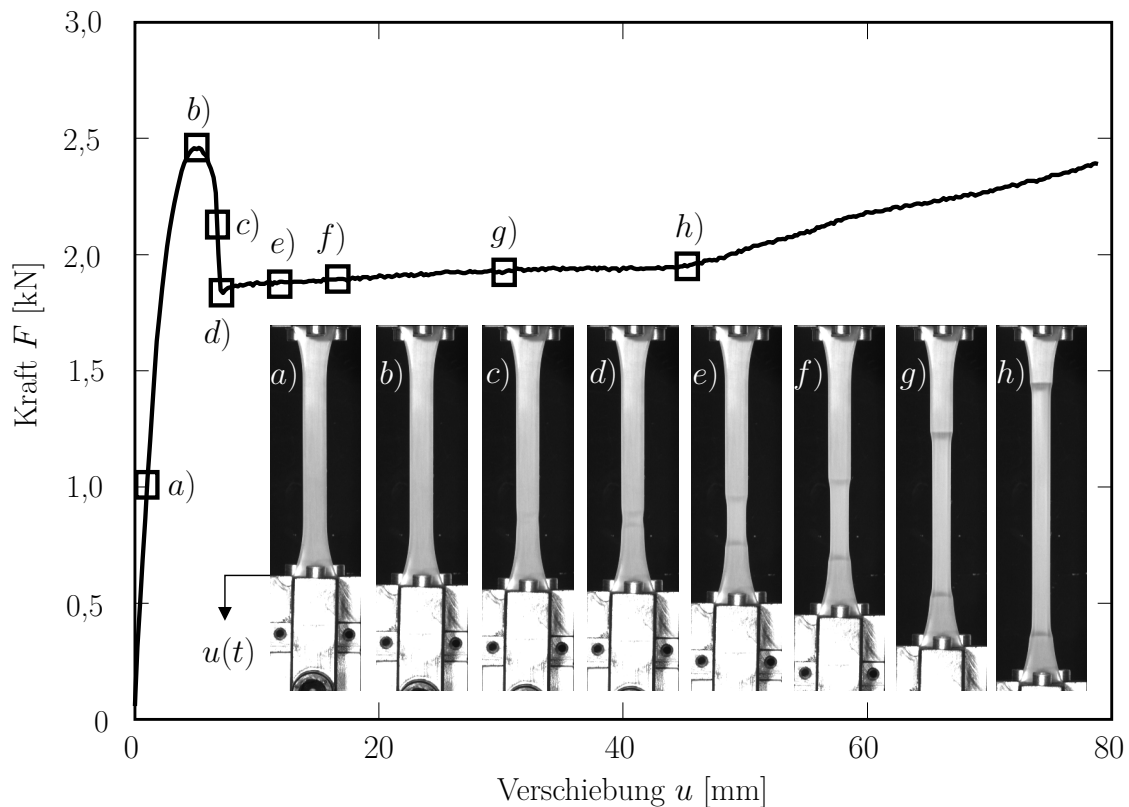


Abbildung 2.7.: Kraft-Wegdiagramm mit charakteristischen Verformungsbildern aus einem Zugversuch an Polypropylen, nach [34]

zwei Fließpunkte (Double-Yield Phänomen) beobachtet werden. In diesem Fall beginnt jedoch die Einschnürung der Probe erst mit dem Erreichen des zweiten Fließpunktes. Die Spannungs-Dehnungskurve vom Typ e beschreibt abschließend noch das duktile Verhalten ohne die Bildung einer ausgeprägten Probeneinschnürung. Hier spricht man von einer homogenen oder gummielastischen Deformation, was vor allem dem typischen Deformationsverhalten von Elastomeren entspricht. Elastomere können dabei Dehnungen von mehreren hundert Prozent erreichen, bis schließlich ein Versagen eintritt. Für Typ e erfolgt ausschließlich die Angabe der Bruchdehnung ε_B und der Bruchspannung σ_B . Wie auch im Falle des Polyamid 6 im Rahmen der Diskussion des Double-Yield Phänomens und bei der Diskussion der Messergebnisse in Kapitel 3 noch zu sehen sein wird, ist es durchaus üblich, dass die Spannungs-Dehnungskurven eines einzigen Kunststoffes unter verschiedenen Bedingungen unterschiedlichen Grundtypen entsprechen können.

Neben den Strukturmerkmalen, wie sie in Unterabschnitt 2.1.1 bereits beschrieben wurden, können äußere Einflussfaktoren die mikromechanischen Deformations- und Versagensprozesse von Kunststoffen maßgeblich beeinflussen. Wichtige äußere Einflussfaktoren sind zum Beispiel die Temperatur, die Belastungsgeschwindigkeit, die Belastungsrichtung und das den Kunststoff

2. Grundlagen

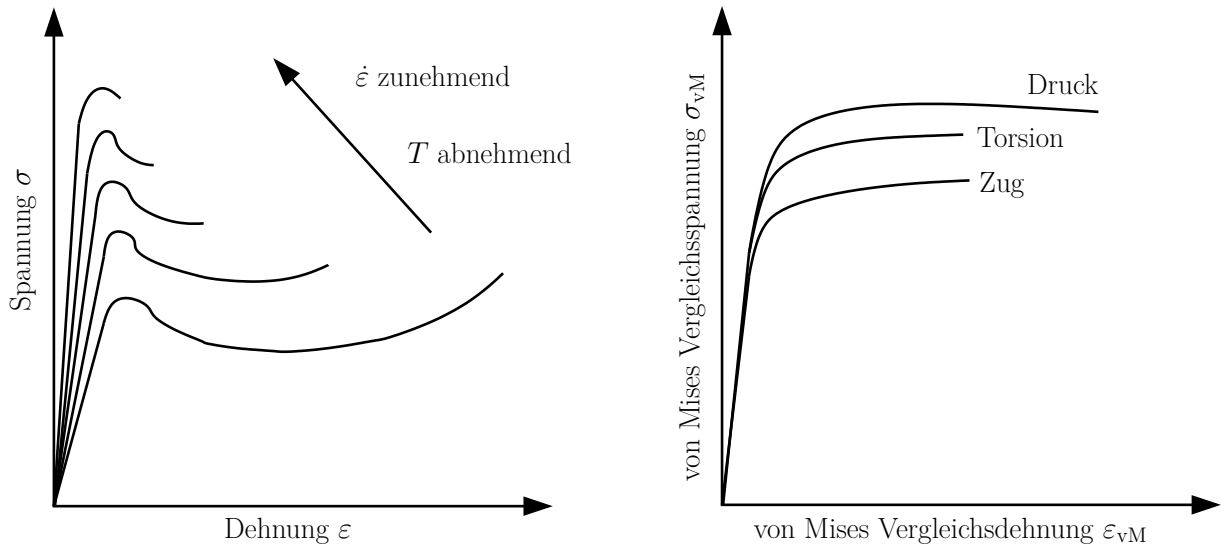


Abbildung 2.8.: Äußere Einflussfaktoren auf das mechanische Verhalten am Beispiel von unverstärkten Thermoplasten (links, schematisch nach [35] und rechts nach [53])

umgebende Medium. Auch in diesem Zusammenhang werden die Einflussfaktoren in der Regel nicht auf der mikromechanischen Ebene untersucht und bewertet. Üblicherweise erfolgt auch hier die Bewertung der Einflussfaktoren direkt im Hinblick auf die Änderung der mechanischen Eigenschaften oder des makroskopischen Deformations- und Versagensverhaltens (technische Spannungs-Dehnungskurven). So führt zum Beispiel eine Erhöhung der Temperatur bei einem duktilen Kunststoff mit Fließgrenze (Typ c oder d) zu einer Reduzierung der Anfangssteifigkeit und der Fließspannung σ_F . Dagegen nehmen die Fließdehnung ε_F und die Bruchdehnung ε_B zu, siehe linkes Diagramm in Abbildung 2.8. Voraussetzung für das beschriebene Verhalten ist, dass im Kunststoff durch die Temperaturerhöhung keine Gefügeänderungen, wie z.B. Vernetzungsreaktionen (Duroplaste, Elastomere) oder Nachkristallisation (teilkristalline Thermoplaste) mehr eintreten. Eine Erhöhung der Belastungsgeschwindigkeit wirkt sich wie eine Temperaturerniedrigung aus. Die Anfangssteifigkeit des Kunststoffs und die Fließspannung σ_F nehmen also zu und die Fließdehnung ε_F sowie die Bruchdehnung ε_B nehmen ab, welches sich in der Regel durch ein zunehmend spröderes Verhalten darstellt (Abbildung 2.8, links). Wie bereits in Abschnitt 1.1 erläutert, können jedoch mit zunehmender Belastungsgeschwindigkeit thermische Effekte im plastischen Bereich zu signifikanten lokalen Temperaturerhöhungen führen, welche die typischen charakteristischen Kurvenformen beeinflussen. Aufgrund der Überlagerung von Dehnungsverfestigung und thermischer Entfestigung bei solch einer nicht-isothermen Deformation kann im Extremfall ein Durchdringen der Spannungs-Dehnungskurven beziehungsweise der Kraft-Wegkurven die Folge sein [90]. Als eine weitere wichtige Einflussgröße auf das Deformations- und Versagensverhalten zeigt sich die Spannungsmehrachsigkeit, oft auch als Triaxialität oder Zug-, Schub-, Druckasymmetrie bezeichnet. In Abbildung 2.8 rechts sind beispielhaft an dem unverstärkten teilkristallinen Thermoplast Polyoxymethylen

unter verschiedenen Spannungszuständen gemessene Spannungs-Dehnungskurven dargestellt. Diese wurden jeweils im uniaxialen Zugversuch, im uniaxialen Druckversuch sowie in einem Torsionsversuch ermittelt. Hier zeigt sich der Einfluss der Spannungsmehrachsigkeit vor allem im nichtlinearen, plastischen Bereich. Zuletzt sei noch der Einfluss des den Kunststoff umgebenden Mediums genannt. Bewirkt das Medium ausschließlich ein physikalisches Quellen des Werkstoffs, so wirkt dieses ähnlich wie eine Erhöhung der Temperatur. Beispielfhaft sei der in dieser Arbeit untersuchte teilkristalline Thermoplast Polyamid 6 genannt, der durch seine molekulare Struktur bedingt, Feuchtigkeit aufnehmen kann und damit seine mechanischen Eigenschaften stark verändert. Neben den reversiblen Quelleffekten können durch Medieneinwirkung auch sogenannte chemische Alterungsprozesse auftreten, die die molekulare Struktur verändern oder zerstören können und im Allgemeinen irreversibler Natur sind.

Eine oben bereits angesprochene Besonderheit im Deformationsverhalten von teilkristallinen Thermoplasten stellt das sogenannte Double-Yield Phänomen dar. Es wurde bereits verschiedentlich bei Polyethylene [9, 61, 77, 84], bei Polypropylene [95] und auch bei Polyamiden [14, 86] beobachtet und beschrieben. Das Phänomen soll im Folgenden nur kurz und beispielhaft für ein Polyamid 6 anhand von Daten aus der Literatur erläutert werden, ohne genauer auf die verantwortlichen mikromechanischen Prozesse einzugehen. SHAN et al. [86] untersuchten das dehnraten- und temperaturabhängige Deformationsverhalten von Polyamid 6 im Zugversuch. Die Diagramme in Abbildung 2.9 sind dieser Arbeit entnommen. Jedes der vier Diagramme zeigt technische Spannungs-Dehnungskurven bei verschiedenen Umgebungstemperaturen und für jeweils eine Abzugsgeschwindigkeit. Bei einigen der gezeigten Spannungs-Dehnungskurven sind zwei Fließpunkte zu erkennen. In Diagramm (a) sind diese mit Y_1 und Y_2 gekennzeichnet. Die Ausprägung der beiden Fließpunkte hängt hier deutlich von der Abzugsgeschwindigkeit beziehungsweise der Dehnrates und der Temperatur ab. Es verstärkt sich zum Beispiel bei den 25 °C Kurven in den Diagrammen (a) - (d) die Ausprägung von Y_1 im Verhältnis zu Y_2 mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit. Betrachtet man die Kurven für eine konstante Abzugsgeschwindigkeit und unterschiedliche Temperaturen zum Beispiel in Diagramm (a), so verstärkt sich zunächst die Ausprägung des zweiten Fließpunktes Y_2 mit zunehmender Temperatur, jedoch nur bis zu einer Grenztemperatur von ungefähr 50 °C. Hier wird bereits der Eintritt in den Glasübergangsbereich sichtbar, welcher für das dargestellte Polyamid 6 mit einem T_g von ungefähr 63 °C angegeben wird. Oberhalb von T_g zeigt das Material ein eher homogenes oder gummielastisches Deformationsverhalten ohne ausgeprägte Fließpunkte. Weiterhin sei noch darauf hingewiesen, dass durch die bereits in Unterabschnitt 2.1.2 diskutierte Erhöhung der Glasübergangstemperatur T_g mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit ein Übergang des homogenen Deformationsverhaltens der 50 °C Kurve (Diagramm (a)) in ein inhomogenes Deformationsverhalten mit zwei Fließpunkten (Diagramm (d)) zu beobachten ist. Zudem

2. Grundlagen

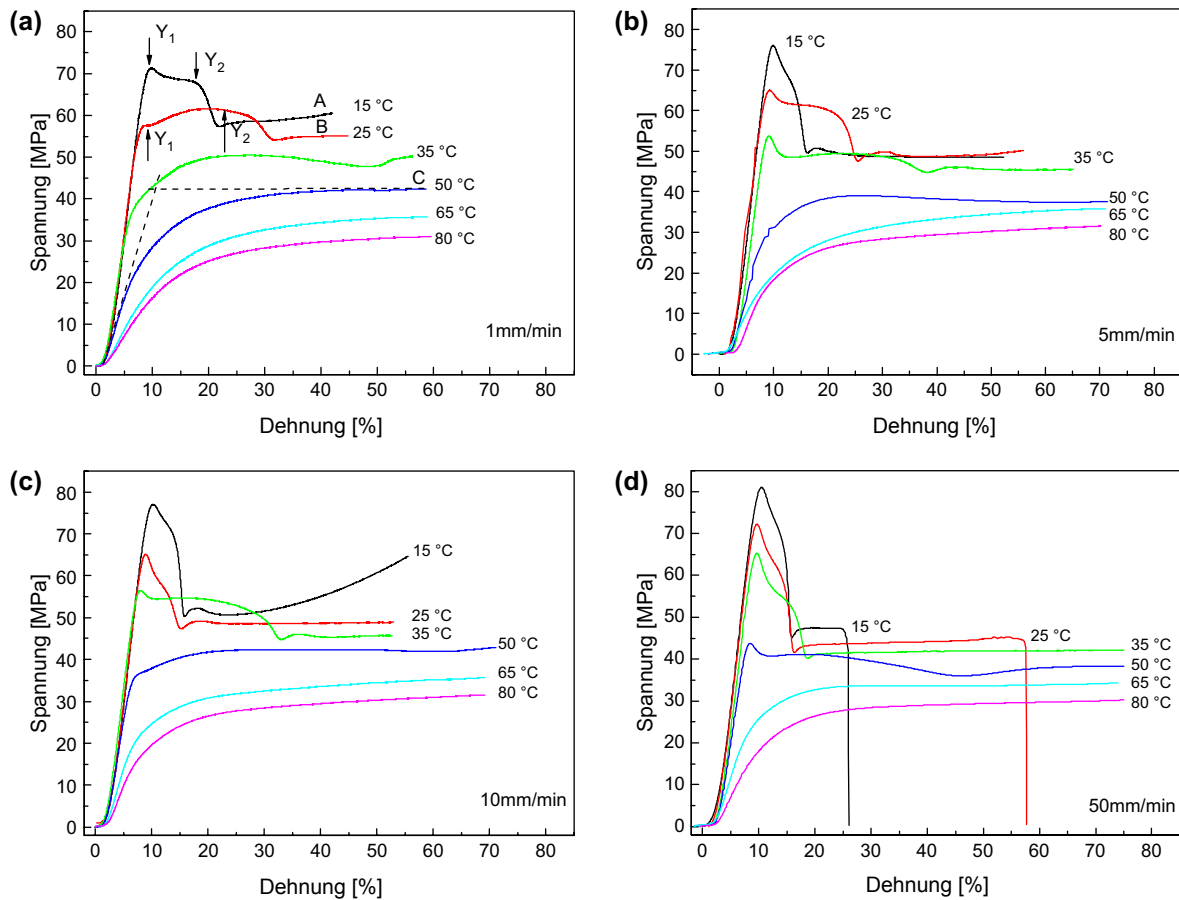


Abbildung 2.9.: Technische Spannungs-Dehnungskurven eines Polyamid 6, gemessen in Zugversuchen mit den Abzugsgeschwindigkeiten 1 mm/min (a), 5 mm/min (b), 10 mm/min (c) und 50 mm/min (d) bei jeweils unterschiedlichen Umgebungstemperaturen, nach [86]

verschwindet oberhalb von T_g nahezu der Einfluss der Abzugsgeschwindigkeit auf den Verlauf der Spannungs-Dehnungskurven. Dieses Verhalten zeigt zudem starke Parallelen zu den bereits in Unterabschnitt 2.1.2 diskutierten viskoelastischen Eigenschaften von Polyamid 6, welche in Form des Temperatur-Frequenzsweeps aus einer Dynamisch-Mechanischen-Analyse dargestellt sind, siehe linkes Diagramm in Abbildung 2.5. Der Betrag des komplexen Elastizitätsmoduls $|E^*|$ zeigt dort im Glasübergangsbereich die stärkste Frequenzabhängigkeit. Deutlich unterhalb und oberhalb des Glasübergangsbereichs geht die Frequenzabhängigkeit von $|E^*|$ deutlich zurück. Zusätzlich sei noch erwähnt, dass das eben gezeigte Deformationsverhalten mit dem Auftreten von zwei Fließpunkten nicht in den typischen Spannungs-Dehnungskurven in Abbildung 2.6 berücksichtigt wird.

Die in der Literatur diskutierten mikromechanischen Prozesse, die für das Auftreten des Double-Yield Phänomens verantwortlich gemacht werden, sind sehr vielfältig und teils

widersprüchlich. Im Rahmen dieser Arbeit wird daher auf eine Darstellung und Diskussion der verschiedenen mikromechanischen Ansätze verzichtet und auf die oben bereits angegebene Literatur verwiesen. Dennoch spielt das Double-Yield Phänomen bei der Materialmodellierung im Rahmen dieser Arbeit eine Rolle. Hier werden jedoch nur rein phänomenologische Ansätze verwendet, um das temperatur- und dehnratenabhängige Deformationsverhalten von Polyamid 6 unter Einbeziehung des Double-Yield Phänomens und des thermischen Glasübergangsbereichs zu beschreiben. Neben der Berücksichtigung der thermischen Effekte ist dieses ein wesentlicher Beitrag der vorliegenden Arbeit.

Es bleibt abschließend noch anzumerken, dass die Materialmodellentwicklung zur Beschreibung des Deformations- und Versagensverhaltens von unverstärkten thermoplastischen Werkstoffen, vor allem im industriellen Umfeld, noch größtenteils auf der makroskopischen Ebene stattfindet. Sie stützt sich damit im Wesentlichen auf die Messung und die phänomenologische Beschreibung von Spannungs-Dehnungskurven und deren Abhängigkeit von verschiedenen Einflussgrößen, wie der Temperatur, der Dehnrate und der Spannungsmehrachsigkeit (Triaxialität). Dabei wird immer vorausgesetzt, dass es sich bei dieser Art Thermoplast um ein homogenes und isotropes Material handelt. Auf der Mikro- und Nanoebene sind die Deformations- und Versagensmechanismen sehr viel komplexer und entsprechen heterogenen Prozessen. Diese Tatsache wurde bereits im vorliegenden Kapitel an manchen Stellen deutlich. Bestimmte Phänomene im Deformations- und Versagensverhalten, wie zum Beispiel das Einschnürverhalten mit Fließschulterbildung und Fließschulterwandern sowie das Double-Yield Phänomen, können nur mit Hilfe von mikro- und nanomechanischen Prozessen erklärt werden. Eine eindeutige experimentelle Erfassung und physikalisch motivierte Modellierung dieser Mechanismen ist sehr schwierig und mit hohem technischen Aufwand verbunden. Um das Auftreten bestimmter makroskopischer Phänomene und deren Ursachen jedoch genau erklären zu können, ist die weitere Erforschung der mikro- und nanomechanischen Prozesse jedoch auch zukünftig unumgänglich. Eine sehr gute Zusammenstellung der heutzutage verfügbaren experimentellen Methoden zur Aufklärung dieser Prozesse in Polymeren findet man zum Beispiel in [66]. Ebenso gibt es auch im Bereich der Materialmodellierung im wissenschaftlichen Umfeld seit einigen Jahren das Bestreben, mikromechanische Ansätze zur Beschreibung des Deformations- und Versagensverhaltens von unverstärkten teilkristallinen Thermoplasten zu verwenden. Siehe hierzu zum Beispiel [39, 76, 83]. Hinsichtlich der Materialmodellierung in den Kapiteln 4 und 5 sei nochmals angemerkt, dass hier eine rein phänomenologische Beschreibung des Materialverhaltens erfolgt.

2.2. Kontinuumsmechanik

Im vorliegenden Abschnitt werden die im Rahmen der Materialmodellentwicklung verwendeten kontinuumsmechanischen Größen eingeführt. Zur ausführlichen Darstellung der kontinuumsmechanischen Grundlagen wird auf die Standardliteratur verwiesen, siehe zum Beispiel [2, 36].

2.2.1. Tensoroperationen

Bei der Formulierung der kontinuumsmechanischen Gleichungen und Materialmodelle in dieser Arbeit werden verschiedene Tensoroperationen verwendet, die im vorliegenden Unterabschnitt knapp dargestellt werden. Alle hierbei verwendeten Skalare, Vektoren und Tensoren sind im dreidimensionalen Raum \mathbb{R}^3 definiert.

- Die Addition zweier Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} ist definiert als

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{c}$$

und ergibt einen Vektor \mathbf{c} . Es gilt das Kommutativgesetz

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{a}.$$

- Die Addition zweier Tensoren zweiter Stufe \mathbf{A} und \mathbf{B} ist definiert als

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C}$$

und ergibt einen Tensor zweiter Stufe \mathbf{C} . Es gilt das Kommutativgesetz

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{B} + \mathbf{A}.$$

- Das Skalarprodukt eines Tensors zweiter Stufe \mathbf{A} mit einem Vektor \mathbf{b} ist definiert als linkes Skalarprodukt

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{c}$$

beziehungsweise als rechtes Skalarprodukt

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{d}$$

und ergibt einen Vektor \mathbf{c} bzw. \mathbf{d} . Das Skalarprodukt von einem Tensor zweiter Stufe und einem Vektor ist nicht kommutativ

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{b} \neq \mathbf{b} \cdot \mathbf{A}.$$

- Das innere Skalarprodukt von zwei Tensoren zweiter Stufe \mathbf{A} und \mathbf{B} ist definiert als

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{C}.$$

und ergibt einen Tensor zweiter Stufe \mathbf{C} . Das innere Skalarprodukt ist nicht kommutativ

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \neq \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}.$$

- Das doppelte Skalarprodukt von zwei Tensoren zweiter Stufe \mathbf{A} und \mathbf{B} ist definiert als

$$\mathbf{A} \cdot \cdot \mathbf{B} = \alpha.$$

und ergibt einen Skalar α . Das doppelte Skalarprodukt von zwei Tensoren zweiter Stufe ist kommutativ

$$\mathbf{A} \cdot \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \cdot \mathbf{A}.$$

Im Übrigen wird sich hier bei der Schreibweise für die Tensoroperationen an das Lehrbuch zur Kontinuumsmechanik von ALTENBACH [2] angelehnt.

2.2.2. Kinematik

Die Kinematik ist der Teil der Kontinuumsmechanik, der den Formalismus für die rein geometrische Beschreibung aller Bewegungen eines Körpers bereitstellt, ohne dabei auf die Ursache dieser einzugehen. Die Gesamtbewegungen oder Deformationen setzen sich aus Starrkörperbewegungen und Verformungen zusammen. Die Verformungen oder Verzerrungen eines Körpers werden bestimmt, indem von den Deformationen die Starrkörperbewegungen abgezogen werden. Für die Formulierung von Materialgesetzen ist die Kenntnis der Verzerrungen ausschlaggebend, da diese die inneren Beanspruchungen in einem Körper hervorrufen.

2.2.2.1. Deformationsgradient

In der Kontinuumsmechanik werden zwei unterschiedliche Betrachtungsweisen zur Beschreibung der kinematischen Größen verwendet. Hierbei handelt es sich um die Lagrange'sche bzw. materielle Betrachtungsweise und die Euler'sche bzw. räumliche Betrachtungsweise. Bei der Lagrange'schen Betrachtungsweise wird die zeitliche Änderung einer Eigenschaft den materiellen Punkten direkt zugeordnet. Die Euler'sche Betrachtungsweise beschreibt diese zeitliche Änderung bezüglich fester Raumpunkte. Die Formulierung einer Transformationsvorschrift, die beide Betrachtungsweisen verknüpft, erfordert die Kenntnis der Bewegungskurve eines jeden materiellen Punktes $\mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3]$ im Raum $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_3] \in \mathbb{R}^3$ in Abhängigkeit der Zeit t . Dieser

2. Grundlagen

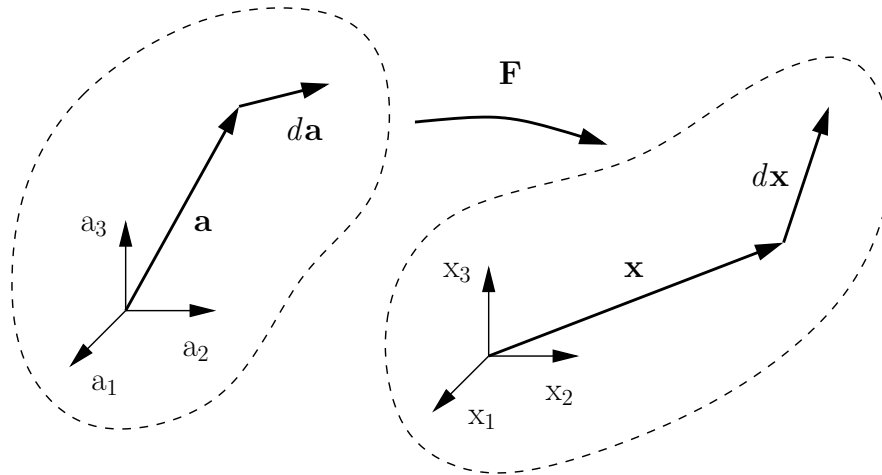


Abbildung 2.10.: Transformation eines infinitesimalen Linienelements von der Referenz- in die Momentankonfiguration

Zusammenhang wird durch die zeitabhängige Bahnkurve

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{a}, t) \quad \text{mit} \quad \mathbf{a} = \mathbf{x}(t_0) \quad (2.6)$$

beschrieben. Die Lagrange'sche Betrachtungsweise beschreibt demnach die zeitliche Entwicklung einer Eigenschaft $\varphi = \varphi(\mathbf{a}(\mathbf{x}, t_0), t) = \varphi(\mathbf{a}, t)$ bezogen auf die Referenzkonfiguration der materiellen Punkte zum Zeitpunkt $t = t_0$ und die Euler'sche Betrachtungsweise die zeitliche Entwicklung der Eigenschaft $\varphi = \varphi(\mathbf{x}, t)$ bezogen auf die Momentankonfiguration der materiellen Punkte zum Zeitpunkt t . Der materielle Deformationsgradient \mathbf{F} transformiert ein infinitesimales Linienelement $d\mathbf{a}$ von der Referenzkonfiguration in ein Linienelement $d\mathbf{x}$ in der Momentankonfiguration nach der Vorschrift

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{a}. \quad (2.7)$$

Die Transformation eines infinitesimalen Linienelements ist in Abbildung 2.10 skizziert. Wie am Anfang dieses Abschnitts bereits erwähnt wurde, sind vor allem die Verzerrungen in einem materiellen Körper für die Formulierung von Materialgesetzen von Interesse. Eine polare Zerlegung des Deformationsgradienten \mathbf{F} erlaubt die Abspaltung der Starrkörperbewegungen von der Gesamtdeformation. Die Gesamtdeformation eines infinitesimalen Linienelements $d\mathbf{x}$ in der Momentankonfiguration kann damit in Abfolge einer reinen Streckung oder Stauchung und einer reinen Starrkörperrotation berechnet werden. Die Abfolge der beiden Tensoroperationen ist umkehrbar und die polare Zerlegung von \mathbf{F} lautet somit

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{R}. \quad (2.8)$$

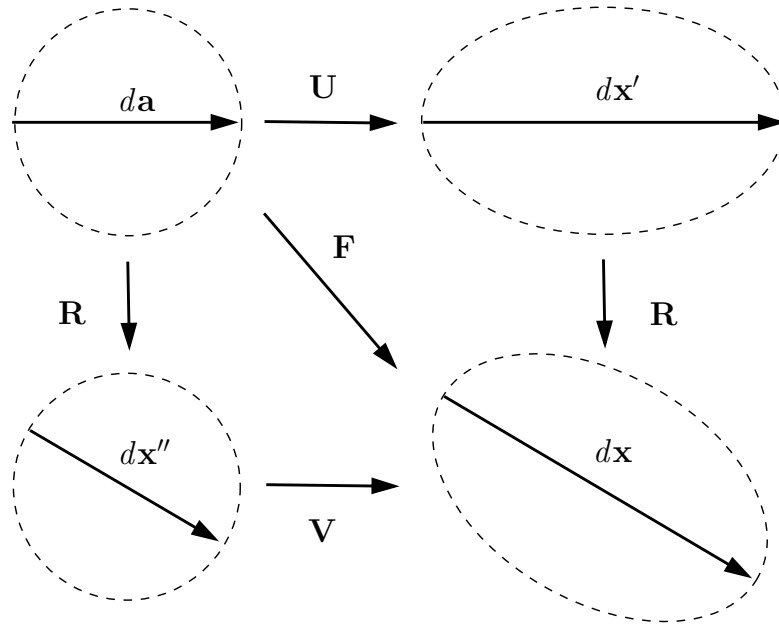


Abbildung 2.11.: Zweistufige Transformationen eines Linienelements von der Referenz- in die Momentankonfiguration mit entsprechenden Zwischenkonfigurationen

Die positiv definiten und symmetrischen Tensoren \mathbf{U} und \mathbf{V} werden als Linksstrecktensor und Rechtsstrecktensor bezeichnet. Sie bewirken eine Stauchung oder Streckung des Linienelements und lassen sich durch den materiellen Deformationsgradienten \mathbf{F} darstellen als

$$\mathbf{U} = (\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F})^{\frac{1}{2}} \quad (2.9)$$

und

$$\mathbf{V} = (\mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.10)$$

Die Tensoren \mathbf{U} und \mathbf{V} sind zudem ähnlich, das heißt, sie besitzen die gleichen Eigenwerte und Eigenvektoren. Der Rotationstensor \mathbf{R} ist ein orthogonaler Tensor ($\mathbf{R} \cdot \mathbf{R}^T = \mathbf{I}$ und $\det \mathbf{R} = 1$) und bewirkt eine starre Drehung des Linienelements. Abbildung 2.11 veranschaulicht die aus der polaren Zerlegung von \mathbf{F} resultierenden zweistufigen Transformationen eines Linienelements von der Referenz- in die Momentankonfiguration mit den jeweiligen Zwischenkonfigurationen dx' und dx'' . Ist \mathbf{U} durch Anwendung der Gleichung (2.9) bekannt, so kann \mathbf{R} mit der Gleichung

$$\mathbf{R} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{U}^{-1} \quad (2.11)$$

bestimmt werden. Zur Ableitung von Verzerrungstensoren werden nicht die Strecktensoren \mathbf{U} und \mathbf{V} selbst verwendet, sondern ihre Quadrate \mathbf{C} (Rechter Cauchy-Green Tensor)

$$\mathbf{C} = \mathbf{U}^2 = (\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}) \quad (2.12)$$

2. Grundlagen

und \mathbf{B} (Linker Cauchy-Green Tensor)

$$\mathbf{B} = \mathbf{V}^2 = (\mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T). \quad (2.13)$$

Angemerkt sei hier, dass die Tensoren \mathbf{F} , \mathbf{U} , \mathbf{V} , \mathbf{C} und \mathbf{B} materielle Tensoren in der Lagrange'schen Darstellung sind.

2.2.2.2. Hencky'scher Verzerrungstensor

Aus der Vielzahl von Verzerrungstensoren sei hier nur der Hencky'sche oder logarithmische Verzerrungstensor genannt. Dieser lautet in der Lagrange'schen Darstellung

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{a}, t) = \ln(\mathbf{U}) = \frac{1}{2} \ln(\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}) = \frac{1}{2} \ln(\mathbf{C}) \quad (2.14)$$

und in der Euler'schen Darstellung

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) = \ln(\mathbf{V}) = \frac{1}{2} \ln(\mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T) = \frac{1}{2} \ln(\mathbf{B}). \quad (2.15)$$

Der Hencky'sche Verzerrungstensor ist für finite Deformationen gültig und wird vornehmlich bei der Formulierung plastischer Materialgesetze verwendet. Er hat jedoch gegenüber anderen finiten Verzerrungstensoren, wie zum Beispiel dem Green-Lagrange oder dem Almansi-Euler-Verzerrungstensor, den Vorteil, dass sich die Gesamtverzerrung additiv in einen reinen Volumenänderungsanteil und einen reinen Gestaltänderungsanteil aufspalten lässt. Eine additive Zerlegung ist ansonsten nur bei infinitesimalen, geometrisch linearisierten Verzerrungstensoren möglich.

2.2.3. Kinetik

Wirken Kräfte auf einen Körper, so verursachen diese eine Beanspruchung im Körper. Kräfte können in Form von Oberflächen- oder Volumenkräften auftreten. Zur Beschreibung der Beanspruchung wird zunächst der Begriff der Spannung eingeführt und anschließend entsprechende Darstellungsmöglichkeiten für die Spannungsgrößen aufgezeigt. Die Gleichungen der Kinetik sind, wie die in Unterabschnitt 2.2.2 vorgestellten kinematischen Zusammenhänge, unabhängig von den Materialeigenschaften des Körpers. Erst bei der Verknüpfung der kinematischen mit den kinetischen Größen über die Konstitutivgleichungen (Materialmodelle) fließen die Materialeigenschaften mit ein.

2.2.3.1. Cauchy'scher Spannungstensor

Die Beanspruchung in einem materiellen Punkt P ist eindeutig durch drei Spannungsvektoren \mathbf{t}_i mit $i = 1, 2, 3$ definiert, dessen zugeordnete Schnittebenen orthogonal zueinander stehen. Jeder dieser drei Spannungsvektoren kann durch seine Komponenten im kartesischen Basiskoordinatensystem \mathbf{e}_i wie folgt dargestellt werden (siehe auch Abbildung 2.12):

$$\mathbf{t}_i = \sigma_{i1}\mathbf{e}_1 + \sigma_{i2}\mathbf{e}_2 + \sigma_{i3}\mathbf{e}_3 = \sigma_{ij}\mathbf{e}_j. \quad (2.16)$$

Die Gesamtheit der Komponenten der drei Spannungsvektoren beschreibt ein Tensorfeld, welches durch den Cauchy'schen Spannungstensor

$$\boldsymbol{\sigma} \quad \text{bzw. dessen Komponenten} \quad \sigma_{ij}$$

mit $i = 1, 2, 3$ und $j = 1, 2, 3$ dargestellt werden kann. In $\boldsymbol{\sigma}$ bezeichnet man die Komponenten auf der Hauptdiagonalen ($i = j$) als Normalspannungen, auf den Nebendiagonalen ($i \neq j$) befinden sich die Schubspannungen. Aus der Erhaltung des Drehimpulses folgt die Symmetrie des Cauchy'schen Spannungstensors

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \quad \text{bzw.} \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ji},$$

siehe [2]. Damit kann der allgemeine Spannungszustand in P , alternativ zu der Definition über drei Spannungsvektoren, auch durch sechs voneinander unabhängige Tensorkomponenten des Cauchy'schen Spannungstensors vollständig definiert werden.

Der Spannungsvektor in P heißt Cauchy'scher Spannungsvektor \mathbf{t}_n und kann mit Hilfe des Cauchy'schen Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$ und des Normaleneinheitsvektors \mathbf{n} bezüglich des Flächenelementes ΔA durch

$$\mathbf{t}_n(\mathbf{x}, \mathbf{n}, t) = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \quad (2.17)$$

bestimmt werden, siehe Abbildung 2.12. Der Vektor \mathbf{x} bezeichnet die Lage des materiellen Punktes P im Raum. Die Gleichung (2.17) wird als das Cauchy'sche Fundamentaltheorem bezeichnet.

2.2.3.2. Spannungsinvarianten

Der Cauchy'sche Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ kann bezüglich eines beliebig orientierten Koordinatensystems definiert werden. Die Werte der einzelnen Tensorkomponenten sind abhängig von der Lage des verwendeten Koordinatensystems. Vor allem bei der Formulierung von Materialmodellen ist es jedoch sehr hilfreich, auf Spannungsgrößen zugreifen zu können, die

2. Grundlagen

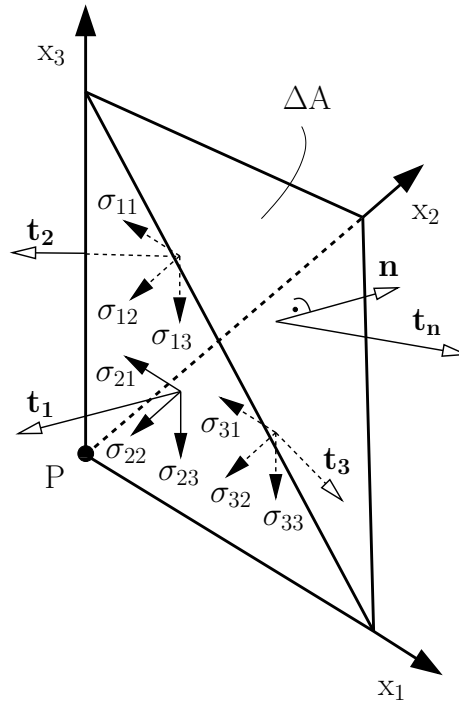


Abbildung 2.12.: Darstellung des Cauchy'schen Spannungsvektors an einem infinitesimalen Spannungstetraeder

von der Lage des Koordinatensystems unabhängig sind. Die Ableitung solcher unabhängiger Spannungsgrößen wird in diesem Abschnitt genauer beschrieben.

Die Ermittlung von koordinatensystemunabhängigen Spannungsgrößen kann mit Hilfe der Transformation des Spannungstensors σ in sein Hauptachsensystem erfolgen. Dazu ist das Eigenwertproblem, welches durch folgendes lineares Gleichungssystem definiert wird, zu lösen:

$$(\sigma - \sigma \mathbf{I}) \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (2.18)$$

Hierbei ist σ ein Eigenwert, \mathbf{n} der dazugehörige Eigenvektor und \mathbf{I} der Einheitstensor zweiter Stufe. Die Lösung des Gleichungssystems (2.18) wird durch die charakteristische Gleichung

$$\sigma^3 - I_1 \sigma^2 + I_2 \sigma - I_3 = 0 \quad (2.19)$$

beschrieben. Da σ ein symmetrischer Tensor ist, sind alle Eigenwerte reell und die dazugehörigen Eigenvektoren bilden ein Orthogonalsystem. Die drei Eigenwerte σ_I , σ_{II} und σ_{III} werden, entsprechend nach ihrer Größe sortiert ($\sigma_I > \sigma_{II} > \sigma_{III}$), als größte, mittlere und kleinste Hauptspannung bezeichnet. Der daraus folgende transformierte Spannungstensor im Hauptachsensystem ist auf der Hauptdiagonalen mit seinen Eigenwerten besetzt. Die Nebendiagonalelemente sind null, der Spannungstensor im Hauptachsensystem enthält somit keine Schub-

spannungen. Die zu den drei Hauptspannungen zugehörigen normierten Eigenvektoren bilden ein Koordinatensystem mit den Basisvektoren \mathbf{e}'_i , den sogenannten Hauptspannungsraum. Die Koeffizienten I_1 , I_2 und I_3 der Gleichung (2.19) heißen der Reihe nach lineare, quadratische und kubische Invariante des Spannungstensors und sind, ebenso wie die Hauptspannungen selbst, unabhängig vom Koordinatensystem. Die Invarianten lassen sich mit Hilfe der sechs unabhängigen Spannungskomponenten von $\boldsymbol{\sigma}$ des nichttransformierten Spannungstensors oder durch die drei Hauptspannungen σ_I , σ_{II} und σ_{III} des transformierten Spannungstensors wie folgt beschreiben:

$$I_1 = \boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I} = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} = \sigma_I + \sigma_{II} + \sigma_{III} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{2}[(\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I})^2 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \boldsymbol{\sigma}] = \sigma_{11}\sigma_{22} + \sigma_{22}\sigma_{33} + \sigma_{33}\sigma_{11} - \sigma_{12}^2 - \sigma_{23}^2 - \sigma_{31}^2 \\ &= \sigma_I\sigma_{II} + \sigma_{II}\sigma_{III} + \sigma_{III}\sigma_I \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} I_3 &= \det[\boldsymbol{\sigma}] = \sigma_{11}\sigma_{22}\sigma_{33} + 2\sigma_{12}\sigma_{13}\sigma_{23} - \sigma_{11}\sigma_{23}^2 - \sigma_{22}\sigma_{13}^2 - \sigma_{33}\sigma_{12}^2 \\ &= \sigma_I\sigma_{II}\sigma_{III} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Der Spannungszustand in einem materiellen Punkt P ist also im Hauptachsensystem durch die drei Hauptspannungen und die zugehörigen Eigenvektoren vollständig definiert. Es handelt sich hierbei um reine Zug- oder Druckspannungen in die jeweilige Richtung der drei Hauptachsen, die wiederum durch die Eigenvektoren \mathbf{e}'_i festgelegt sind.

Bei der Formulierung von Materialgesetzen hat es sich zudem als sinnvoll erwiesen, den Spannungstensor in zwei Anteile zu zerlegen. Hierzu wird eine Aufspaltung des Tensors $\boldsymbol{\sigma}$ in einen volumetrischen Anteil \mathbf{p} und einen deviatorischen Anteil \mathbf{s} vorgenommen:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{p} + \mathbf{s} \quad (2.23)$$

mit

$$\mathbf{p} = \frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} = \frac{1}{3}I_1\mathbf{I} = -p\mathbf{I} \quad (2.24)$$

und

$$\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{p} = \boldsymbol{\sigma} + p\mathbf{I} \quad (2.25)$$

Die skalare Größe p in Gleichung (2.24) beschreibt den hydrostatischen Druck. Der volumetrische Spannungstensor \mathbf{p} ist ein kugelsymmetrischer Tensor und beschreibt einen Spannungszustand, der in alle Raumrichtungen gleich mit dem hydrostatischen Druck p wirkt. Das negative Vorzeichen auf der rechten Seite von (2.24) bedeutet, dass ein betragsmäßig positiver hydrostatischer Druck in Richtung einer Volumenverkleinerung (Kompression) und ein betragsmäßig negativer Wert in Richtung einer Volumenvergrößerung (Expansion) wirkt. Man kann zeigen,

2. Grundlagen

dass der volumetrische Spannungstensor drei gleiche Eigenwerte besitzt. Sie entsprechen dem negativen hydrostatischen Druck $-p$. Daher ist jedes beliebige Koordinatensystem für diesen Spannungszustand auch ein Hauptachsensystem. Der deviatorische Spannungstensor \mathbf{s} hingegen besitzt das gleiche Hauptachsensystem wie der Gesamtspannungstensor, seine Eigenwerte und Invarianten sind jedoch unterschiedlich, siehe [36]. Er beschreibt einen Spannungszustand, der in Richtung einer reinen Gestaltänderung unter Beibehaltung des Volumens wirkt. Die Invarianten J_1 , J_2 und J_3 des deviatorischen Spannungstensors, dargestellt in den Komponenten des Spannungsdeviators, lauten:

$$J_1 = \mathbf{s} \cdot \mathbf{I} = 0 \quad (2.26)$$

$$J_2 = \frac{1}{2} \mathbf{s} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2} (s_{11}^2 + s_{22}^2 + s_{33}^2) + s_{12}^2 + s_{13}^2 + s_{23}^2 \quad (2.27)$$

$$J_3 = \det[\mathbf{s}] = s_{11}s_{22}s_{33} + 2s_{12}s_{13}s_{23} - s_{11}s_{23}^2 - s_{22}s_{13}^2 - s_{33}s_{12}^2 \quad (2.28)$$

Durch die eben gezeigte Aufspaltung des Gesamtspannungstensors in einen volumetrischen und deviatorischen Anteil folgt eine weitere Möglichkeit der Beschreibung eines Spannungszustandes. Anstelle der drei Invarianten des Gesamtspannungstensors I_1 , I_2 und I_3 können nun auch die drei Invarianten J_1 , J_2 und J_3 zur dessen Beschreibung verwendet werden.

Bei der Formulierung von Materialmodellen, vor allem zur Beschreibung von plastischem Materialverhalten, verwendet man häufig die Spannungsinvarianten. Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Materialmodell nutzt zum Beispiel gezielt den hydrostatischen Druck

$$p = -\frac{1}{3}I_1 \quad (2.29)$$

als skalierte Form der Invarianten I_1 , um die plastische Volumenänderung und die Zug-, Druckasymmetrie beim plastischen Fließen zu berücksichtigen. Die plastischen Deformationsanteile, die einer inkompressiblen Gestaltänderung zuzuschreiben sind, werden über die von Mises Vergleichsspannung

$$q = \sqrt{3J_2} \quad (2.30)$$

gesteuert, welche eine skalierte Form der Invarianten J_2 darstellt, siehe Unterabschnitt 4.2.2.

2.2.3.3. Spannungsräume

Für die grafische Darstellung eines Spannungszustandes existieren verschiedene Möglichkeiten. Häufige Verwendung findet die Darstellung im Hauptspannungsraum, welcher durch die Basisvektoren \mathbf{e}'_i des transformierten Spannungstensors aufgespannt wird, siehe Abbildung 2.13. Die Größenbezeichnung der drei Koordinatenachsen entsprechen den drei Hauptspannungen σ_I , σ_{II} und σ_{III} . Jedem Punkt im Hauptspannungsraum kann ein Ortsvektor zugeordnet

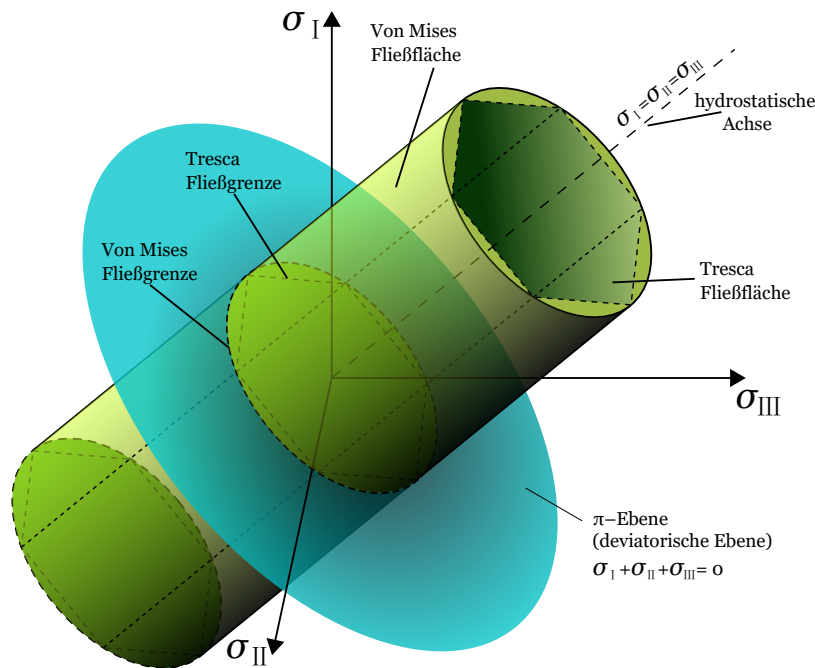


Abbildung 2.13.: Von Mises und Tresca Fließfläche im Hauptspannungsraum (aus Wikipedia, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Yield_surfaces.svg, 01.01.2009)

werden, welcher einem eindeutigen Spannungszustand entspricht. Liegt dieser Punkt auf der Hydrostatenachse, besitzt der Spannungstensor nur einen volumetrischen Anteil. Erst wenn die Hydrostatenachse verlassen wird, kommt ein deviatorischer Anteil hinzu. Die Ebene, welche senkrecht zur Hydrostatenachse liegt und durch den Koordinatenursprung verläuft, heißt π -Ebene oder Deviatorebene. Innerhalb dieser Ebene existiert nur ein deviatorischer Spannungsanteil.

Der Hauptspannungsraum dient auch der Darstellung von Fließflächen im Rahmen der Plastizitätstheorie, siehe zum Beispiel [23]. In Abbildung 2.13 sind beispielhaft die von Mises und die Tresca Fließfläche gezeigt. Der von Mises Zylinder ist die am häufigsten verwendete Fließfläche und basiert auf der ebenfalls nach von Mises benannten Gestaltänderungshypothese. Die von Mises Vergleichsspannung q berücksichtigt daher nur den deviatorischen Spannungsanteil, also den Anteil, der zur Gestaltänderung beiträgt. Da die zylindrische Fläche die Hydrostatenachse als Rotationsachse besitzt, ist q unabhängig vom hydrostatischen Spannungsanteil p . Alle Spannungszustände, deren Ortsvektoren mit ihrem Endpunkt auf der von Mises Fließfläche liegen, haben den gleichen Wert q . Daraus wird auch ersichtlich, dass die von Mises Vergleichsspannung für sich alleine keinen eindeutigen Spannungszustand definiert. Neben dem Hauptspannungsraum eignet sich, im Speziellen zur Darstellung von rotationssymmetrischen Fließflächen mit der Hydrostatenachse als Rotationsachse, die zweidimensionale p - q -Ebene oder BURZYNSKI-Ebene, siehe zum Beispiel die Darstellung des Zhang Potentials in Abbildung 4.2. Auf der

2. Grundlagen

Spannungszustand	p	q	η
Dreiachsiger (hydrostatischer) Druck	> 0	$= 0$	$+\infty$
Zweiachsiger Druck	> 0	> 0	$+\frac{2}{3}$
Einachsiger Druck	> 0	> 0	$+\frac{1}{3}$
Reiner Schub	$= 0$	> 0	0
Einachsiger Zug	< 0	> 0	$-\frac{1}{3}$
Zweiachsiger Zug	< 0	> 0	$-\frac{2}{3}$
Dreiachsiger (hydrostatischer) Zug	< 0	$= 0$	$-\infty$

Tabelle 2.2.: Triaxialitätsparameter für einige charakteristische Spannungszustände

horizontalen Achse wird der hydrostatische Druck p aufgetragen und entspricht somit der skalierten Hydrostatenachse. Die vertikale Achse beschreibt die von Mises Vergleichsspannung q . Alle Fließflächen, welche nur von p und q abhängen, sind somit rotationssymmetrische Flächen im Raum mit der Hydrostatenachse als Rotationsachse. Die zweidimensionale Darstellung im p - q -Diagramm beschreibt also nur die Außenkontur der rotationssymmetrischen Flächen. Da die Tresca Fließfläche keine Rotationssymmetrie aufweist, ist das p - q -Diagramm für die Darstellung dieser Fließfläche ungeeignet.

2.2.3.4. Triaxialitätsparameter

Unter Verwendung des hydrostatischen Drucks p und der von Mises Vergleichsspannung q kann der sogenannte Triaxialitätsparameter

$$\eta = \frac{p}{q} \quad (2.31)$$

eingeführt werden. Dieser Parameter charakterisiert einen Spannungszustand hinsichtlich seiner Mehrachsigkeit und bewegt sich im Wertebereich zwischen $-\infty$ und $+\infty$. Für einen reinen Schubspannungszustand gilt zum Beispiel $\eta = 0$, da der entsprechende Spannungstensor rein deviatorischer Natur ist und p den Wert Null annimmt. Rein hydrostatische Spannungszustände im Druck- sowie im Zugbereich hingegen sind durch einen verschwindenden deviatorischen Spannungsanteil mit $q = 0$ charakterisiert. Hierbei berechnet sich der Triaxialitätsparameter durch den Grenzübergang

$$\eta = \lim_{q \rightarrow 0} \left(\frac{p}{q} \right).$$

Je nachdem, ob es sich um einen Zug- oder Druckzustand handelt, läuft der Grenzwert von η gegen $-\infty$ oder $+\infty$. In Tabelle 2.2 sind die Triaxialitätsparameter für einige charakteristische Spannungszustände angegeben. Der Triaxialitätsparameter wird später im Rahmen der Beschreibung des Materialmodells verwendet.

3. Materialcharakterisierung

Im vorliegenden Kapitel werden die Experimente und Ergebnisse zur Materialcharakterisierung des unverstärkten Polyamid 6 (trocken, getempert) vorgestellt. Diese umfassen sowohl die thermomechanische als auch die thermische Charakterisierung. Die Materialcharakterisierung ist ein essenzieller Bestandteil dieser Arbeit, da sie zum einen Aufschluss über die makroskopischen Deformations- und Versagensmechanismen des Werkstoffs gibt und zum anderen die Datenbasis für die Anpassung der Parameter des Materialmodells liefert.

3.1. Thermomechanische Charakterisierung

Die thermomechanische Charakterisierung umfasst die Durchführung von einachsigen Zug- und Druckversuchen sowie Schubversuchen bei verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten und Umgebungstemperaturen. Bei den Zug- und Schubversuchen wurde, bis auf wenige Ausnahmen, neben einer lokalen optischen Dehnungsmessung auch die Messung der Oberflächentemperatur während des Deformationsvorganges mittels Infrarotthermografie durchgeführt. Damit sollen die bereits genannten thermischen Effekte genauer untersucht und quantifiziert werden.

Die Herstellung des Plattenhalbzeugs im Kunststoffspritzgießverfahren, die Entnahme und Präparation der Probekörper aus dem Plattenhalbzeug sowie die Durchführung der thermomechanischen Charakterisierungsversuche erfolgte vollständig am Fraunhofer Institut für Betriebsfestigkeit und Systemzuverlässigkeit LBF im Fachbereich Kunststoffe in Darmstadt, vormals Deutsches Kunststoff Institut DKI. Für die Temperaturmessungen im Rahmen der Charakterisierungsversuche wurden dem LBF durch die Robert Bosch GmbH, Zentralbereich Forschung und Voraentwicklung, Abteilung Produktionstechnik Kunststoffe CR/APP, geeignete Infrarotthermografiesysteme beigestellt.

3.1.1. Probekörperherstellung und -präparation

Die Probekörper für die Zug-, Schub- und Druckversuche wurden aus spritzgegossenen ebenen Plattenhalbzeugen mit den Abmessungen $80 \times 80 \times 2,4 \text{ mm}^3$ entnommen, siehe Abbildung 3.1. Die Herstellung der Plattenhalbzeuge erfolgte auf einer Spritzgießmaschine vom Typ Sumitomo Demag Multi 80/420-310h/220v unter Verwendung der in Tabelle 3.1 angegebenen

3. Materialcharakterisierung

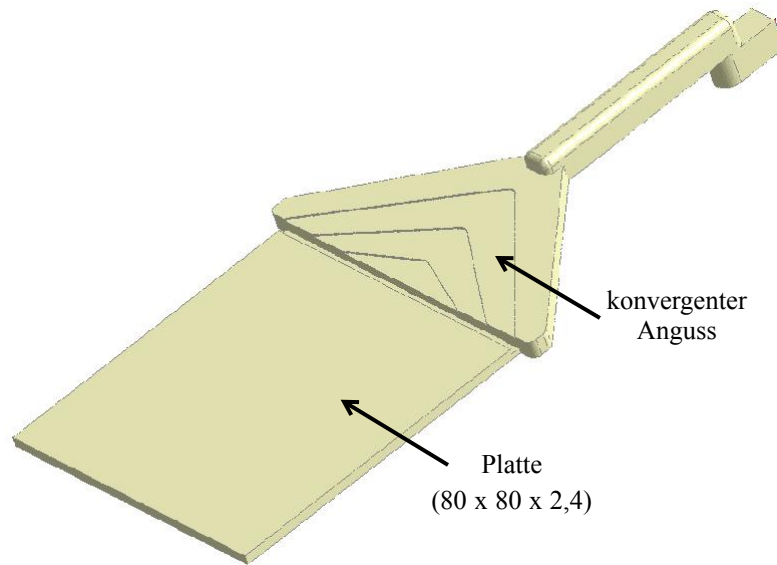


Abbildung 3.1.: CAD Modell des Plattenhalbzeugs mit den Abmessungen 80 x 80 x 2,4 mm³ und einem konvergenten Angussystem zur Erzeugung einer parallelen Schmelzefront für homogene Proben (Quelle: Fraunhofer Institut LBF)

Einspritzzeit	5,5	s
Schmelzetemperatur	280	°C
Werkzeugwandtemperatur	80	°C
Nachdruck	300	bar
Nachdruckzeit	20	s
Restkühlzeit	20	s

Tabelle 3.1.: Spritzgießprozessparameter zur Herstellung der Plattenhalbzeuge

Prozessparameter. Das Kunststoffgranulat wurde vor der Verarbeitung einem Trocknungsprozess von mindestens 4 h bei einer Temperatur von 80 °C unterzogen. Die Platten wurden nach der Herstellung und dem Abkühlen auf Raumtemperatur in aluminiumbeschichtete Kunststoffbeutel verpackt und vakuumverschweißt. Die Kunststoffbeutel mit den Platten wurden bis zum Zeitpunkt der Probekörperpräparation in einem luftdichten Blecheimer unter Beigabe von Trockenmittel gelagert. Das Ausfräsen der Probekörper aus den Platten wurde mit Hilfe einer programmierbaren CNC-Fräse vorgenommen. Für die Zug- und Schubversuche wurden die von BECKER [12] vorgeschlagenen Geometrien verwendet. Die Druckprüfungen wurden an kleinen nahezu würfelförmigen Proben durchgeführt, um die Gefahr des Ausknickens zu vermindern. Dieser Druckprobekörper und die dazugehörige Versuchsmethodik wurden in vorangegangenen Arbeiten am LBF, zum Beispiel von DILLENBERGER [24] und KUNKEL [55], bereits erfolgreich eingesetzt. Bemaßte Zeichnungen der verwendeten Probekörper zeigt die Abbildung 3.2.

Die Probekörper wurden ein bis zwei Tage vor der Versuchsdurchführung für 2 h bei 120 °C

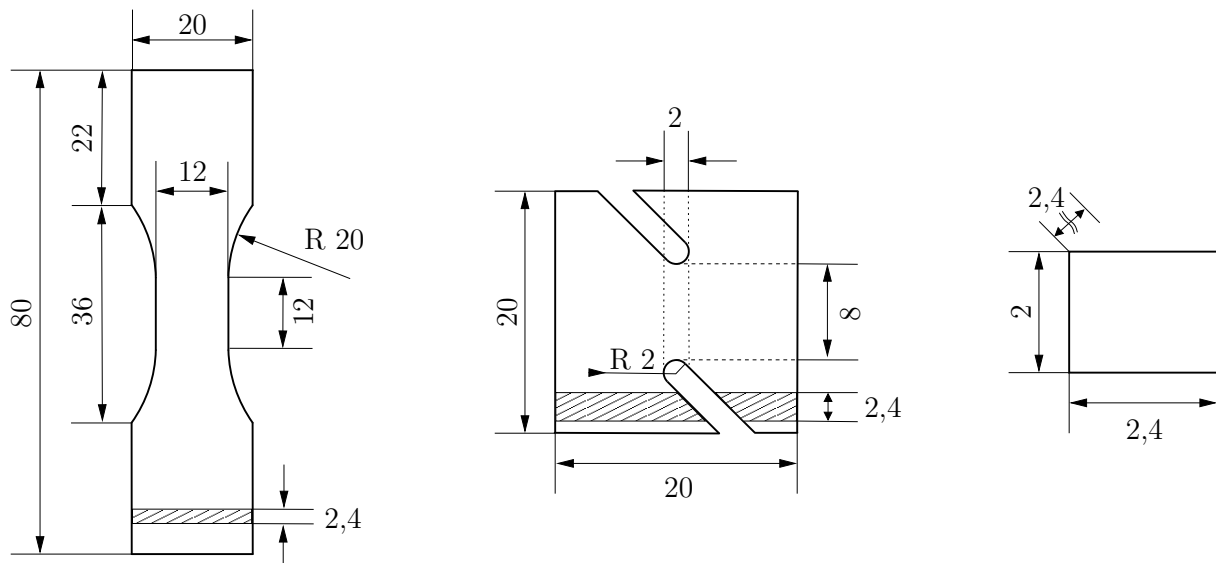


Abbildung 3.2.: Probekörpergeometrien für die thermomechanischen Charakterisierungsversuche: Zugprobe vom Typ LBF BZ12 (links), Schubprobe vom Typ LBF Z-Probe (mittig) und Druckprobe (rechts). Die Abmessungen sind in [mm] angegeben.

im Vakuumofen getempert, um die durch den Abkühlprozess nach dem Spritzgießen im Bauteil noch vorhandenen Resteigenspannungen abzubauen. Die Lagerung der Proben nach der Temperung bis zur Durchführung der Messungen erfolgte im Exsikator unter Beigabe von Phosphorpentoxid als Trockenmittel. Das einseitige Besprühen der Probekörper mit schwarzem und weißem Acryllack zur Erzeugung eines Specklemusters für die optische Dehnungsmessung mittels Grauwertkorrelation wurde unmittelbar vor der Versuchsdurchführung vorgenommen. Die Probenrückseite blieb zur Durchführung der Temperaturmessungen mittels Infrarotkamera unbehandelt.

3.1.2. Versuchsaufbau und -durchführung

Die thermomechanischen Charakterisierungsversuche sollen ein möglichst gutes Verständnis des makroskopischen Deformations- und Versagensverhaltens des untersuchten Werkstoffs über einem großen Geschwindigkeits- und Temperaturbereich liefern. Tabelle 3.2 zeigt die gesamte Prüfmatrix. Zug-, Schub- und Druckversuche sind hier jeweils mit den Anfangsbuchstaben Z, S und D bezeichnet. Versuchsreihen, bei denen keine Messung der Oberflächentemperatur stattgefunden hat, tragen ein * als Kennzeichnung. Je Versuchsreihe wurden zwischen drei und fünf Wiederholungsmessungen durchgeführt. Die Bandbreite der benötigten Prüfgeschwindigkeiten konnte nicht über eine einzige Zugprüfmaschine abgedeckt werden. Die Prüfungen im unteren Geschwindigkeitsbereich, zwischen 0,001 mm/s und 1 mm/s, wurden auf einer quasistatischen Zugprüfmaschine vom Typ Zwick Z020 durchgeführt. Die Prüfungen im oberen Geschwindigkeitsbereich, von 10 mm/s bis 1000 mm/s, fanden auf einer servohydraulischen

3. Materialcharakterisierung

Prüfgeschw. [mm/s]	Prüf- maschine	Prüftemperatur					
		25 °C	40 °C	60 °C	80 °C	100 °C	120 °C
0,001	Z020	D*					
0,01	Z020	Z, S, D*	D*	D*			
0,1	Z020	Z, S	Z ⁺ , S ⁺	Z ⁺ , S ⁺			
1	Z020	Z, S		Z*	Z*	Z*	Z*
10	HTM 5020	Z, S	Z ⁺ , S ⁺	Z ⁺ , S ⁺			
100	HTM 5020	Z					
1000	HTM 5020	Z	Z ⁺	Z ⁺			

Tabelle 3.2.: Versuchsmatrix der durchgeführten Zug-, Schub- und Druckversuche bei unterschiedlichen Prüfgeschwindigkeiten und Prüftemperaturen (*Versuche ohne IR-Thermografie; ⁺Versuche mit LBF Warmluftsystem)

Prüf-, Messtechnik	Quasistatisch	Hochdynamisch
Zugprüfmaschine:	Zwick Z020,	Amsler HTM 5020,
Hersteller:	Zwick GmbH & Co. KG	Zwick GmbH & Co. KG
Thermokamera:	ThermaCAM SC500	ImageIR 5380
Max. Bildrate:	50 fps bei 320 x 240 px ²	3000 fps bei 80 x 32 px ²
Hersteller:	FLIR Systems, Inc.	InfraTec GmbH
Videokamera:	UI-2240SE-M	Ultima APX-RS
Max. Bildrate:	15 fps bei 1280 x 1024 px ²	2,5·10 ⁵ fps bei 128 x 16 px ²
Hersteller:	IDS GmbH	Photron USA, Inc.
Kaltlichtlampen:	unbekannt	dedocool
Hersteller:		Dedotec USA, Inc.

Tabelle 3.3.: Eingesetzte Prüf- und Messtechnik bei der thermomechanischen Charakterisierung am Fraunhofer Institut LBF

Hochgeschwindigkeitszugprüfmaschine vom Typ Amsler HTM 5020 statt. Entsprechend des Geschwindigkeitsbereichs musste auch die weitere prüf- und messtechnische Ausstattung ausgewählt werden. Tabelle 3.3 zeigt eine Übersicht der eingesetzten Prüf- und Messtechnik für den quasistatischen und den hochdynamischen Versuchsaufbau.

Die Versuche mit einer Prüftemperatur oberhalb von 25 °C und der gleichzeitigen Verwendung einer Infrarotthermokamera (Versuche sind in Tabelle 3.2 mit einem ⁺ gekennzeichnet) konnten nicht in einer Temperaturkammer durchgeführt werden. Das Infrarotsignal wäre durch die Glasscheibe der Kammer zu stark abgeschwächt worden. Der Einbau eines Spezialglases (IR-Glas) in die Temperaturkammertür, welches im relevanten Längenwellenbereich transparent ist und das Infrarotsignal daher nicht abschwächt [81], wurde aus Kosten- und Zeitgründen nicht vor-

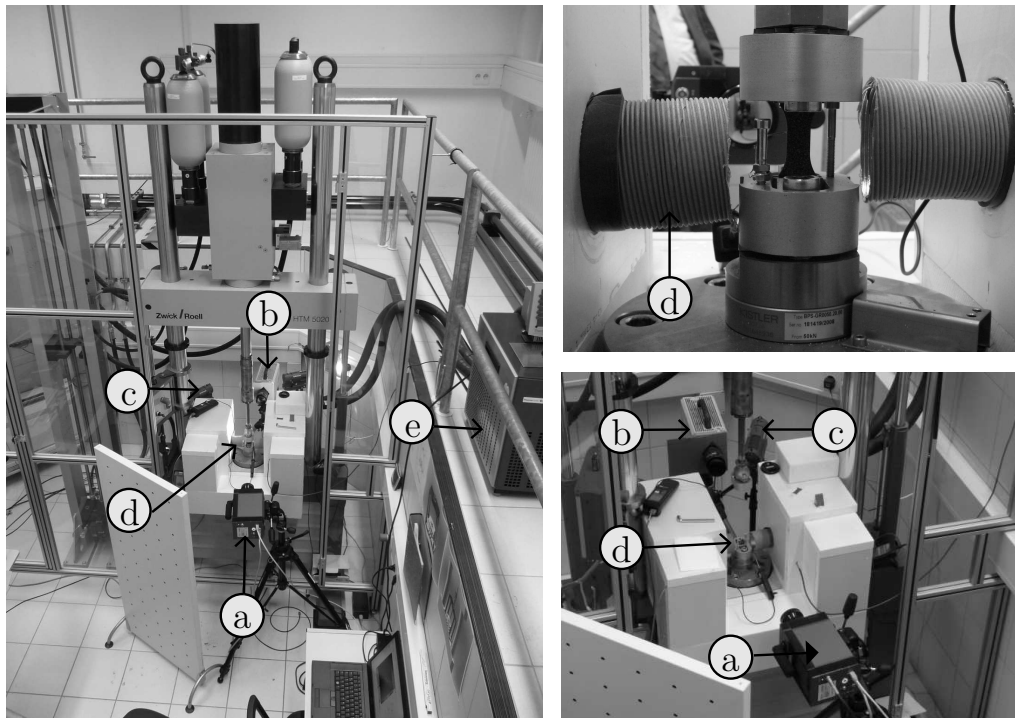


Abbildung 3.3.: Versuchsaufbau für die Hochgeschwindigkeitsversuche am Fraunhofer Institut LBF: (a) Hochgeschwindigkeitsthermokamera, (b) Hochgeschwindigkeitskamera zur lokalen Dehnungsmessung, (c) Kaltlichtlampen, (d) Warmluftdüse und (e) Wärmetauscher

genommen. Alternativ erfolgte in den oben genannten Versuchen die Probekörpertemperaturung auf der quasistatischen sowie auf der Hochgeschwindigkeitszugprüfmaschine über ein vom LBF selbstentwickeltes Warmluftsystem. Ein Warmluftstrom, der von einem Wärmetauscher mit Gebläse erzeugt wird, bringt den Probekörper vor Versuchsbeginn auf die gewünschte Anfangstemperatur. Das Warmluftsystem ist beispielhaft für den Versuchsaufbau zur Durchführung der Hochgeschwindigkeitsversuche in Abbildung 3.3 dargestellt. Der luftführende Schlauch mit Auslass im Bereich des Probekörpers ist mit (d) gekennzeichnet und (e) zeigt den Standort des Wärmetauschers. In der Abbildung ist weiterhin noch die Hochgeschwindigkeitsthermokamera (a) zu sehen. Auf der gegenüberliegenden Seite des Probekörpers befinden sich die Hochgeschwindigkeitskamera (b) für die lokale Dehnungsmessung und zwei Kaltlichtlampen (c) zur Ausleuchtung der Probe. Die Kaltlichtlampen wurden erst wenige Sekunden vor Versuchsbeginn eingeschaltet, um eine unerwünschte Aufheizung der Probe durch die Lampen auszuschließen.

Bei den Versuchen mit einer Probekörpertemperaturung unter Einsatz des Warmluftsystems konnte das Erreichen der gewünschten Anfangstemperatur der Probe mit Hilfe der Infrarotkamera vor dem Versuchsstart überprüft und sichergestellt werden. Direkt vor Beginn des Versuchs wurde der Luftstrom des Warmluftsystems jedoch ausgeschaltet. Damit sollte

3. Materialcharakterisierung

erreicht werden, dass der Wärmeübergang zwischen Probekörper und der umgebenden Luft nur durch die natürliche Konvektion bestimmt wird. Ein während des Versuchs eingeschaltetes Warmluftsystem hätte zwar die Umgebungstemperatur konstant gehalten, jedoch die in der Probe auftretenden Temperaturänderungen durch den strömungsgeschwindigkeitsbedingt erhöhten Wärmeübergang schneller wieder ausgeglichen. Die Quantifizierung der durch die thermischen Effekte verursachten Temperaturänderungen wäre dadurch weiter erschwert worden. Unabhängig davon, ob der Luftstrom während des Versuchs ein- oder ausgeschaltet ist, können beim Einsatz eines solchen Warmluftsystems die thermischen Anfangs- und Randbedingungen aufgrund der vielen möglichen Störeinflüsse nicht eindeutig definiert werden. Das ist ein signifikanter Nachteil des Warmluftsystems gegenüber der Verwendung einer Temperaturkammer.

Bei den temperierten hochdynamischen Versuchen spielten die Nachteile des Warmluftsystems wegen der nahezu adiabaten Bedingungen kaum eine Rolle. Hier war wegen der geringen Versuchszeiten nicht mit einem signifikanten Wärmetransport innerhalb des Probekörpers sowie einem konvektionsgetriebenen Wärmeübergang an der Probekörperoberfläche zu rechnen. Anders stellte sich die Situation bei den temperierten quasistatischen Versuchen dar. Da die Umgebungstemperatur nach Abschalten des Warmluftsystems schnell auf Raumtemperatur absank, musste wegen der deutlich längeren Versuchsdauern mit einem Wärmestrom von dem Probekörper in die Umgebung gerechnet werden. Eine Probenerwärmung durch irreversible thermische Effekte wurde somit durch Abkühleffekte mit der Umgebung überlagert und tendenziell unterschätzt. Hiervon waren im Wesentlichen die Versuchsreihen der Zug- und Schubversuche mit Prüfgeschwindigkeiten von 0,1 mm/s und den Anfangstemperaturen von 40 °C und 60 °C betroffen. Die Versuchsdauern bis zum Eintritt des Versagens der Proben bewegte sich hier im Bereich von mehreren Minuten. Um einer zusätzlichen Abkühlung der Proben durch den Wärmeabfluss in die metallischen Klemmbacken entgegenzuwirken, wurden in den genannten quasistatischen Versuchsreihen die Klemmbacken durch eine eingebaute Heizung auf Solltemperatur gehalten. Zur Abschätzung des Abkühlverhaltens wurde je eine Zugprobe in die Prüfmaschine eingespannt und auf die Anfangstemperatur von 40 °C beziehungsweise 60 °C aufgeheizt. Anschließend erfolgte die Probekörperabkühlung unter Raumtemperaturbedingungen bei ausgeschaltetem Warmluftstrom und ohne mechanische Belastung über eine Zeitspanne von ungefähr 9 min. Die Oberflächentemperatur der Probe wurde währenddessen mit der Thermokamera aufgezeichnet. Die zeitliche Entwicklung der Oberflächentemperatur in der Probenmitte ist in Abbildung 3.4 für die beiden untersuchten Fälle dargestellt. Rechts in der Abbildung sind zusätzlich die Temperaturverteilungen in den Zugproben am Ende der Temperaturlaufzeichnung zu sehen. Die Probe mit einer Anfangstemperatur von 40 °C kühlte sich im Auswertepunkt innerhalb der Messdauer um ungefähr 6 °C ab

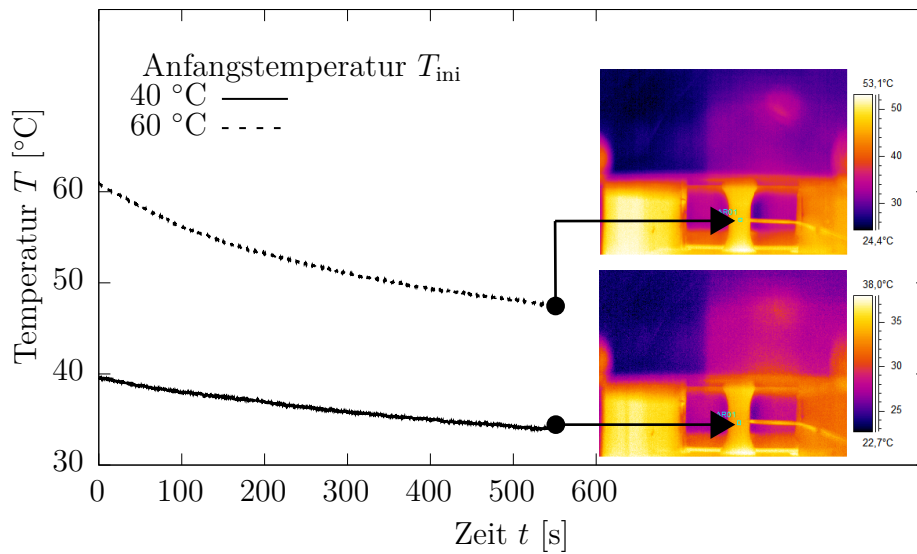
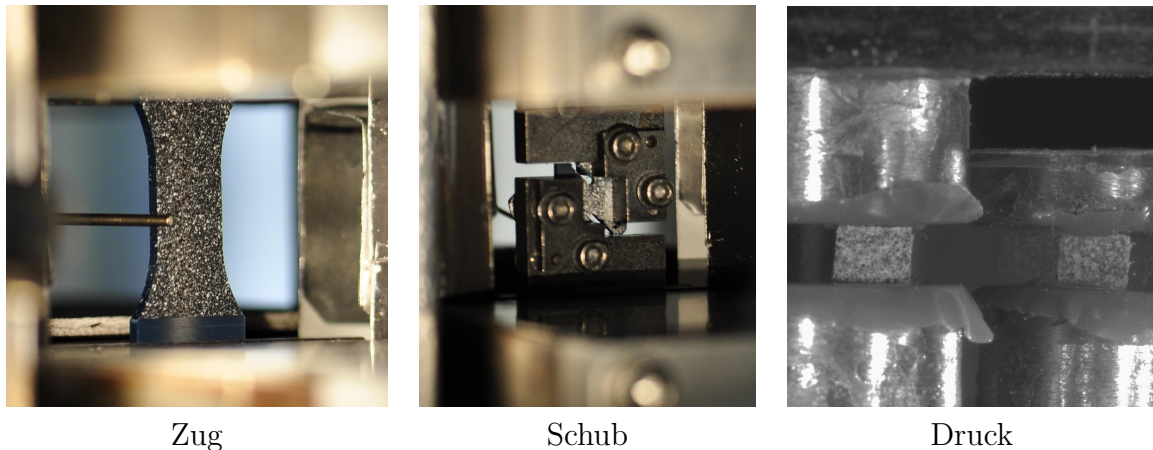


Abbildung 3.4.: Abkühlverhalten einer BZ12 Zugprobe in der Z020 Prüfmaschine bei zwei unterschiedlichen Anfangstemperaturen

und die anfänglich 62 °C warme Zugprobe um circa 15 °C. Im Rahmen der Ergebnisdiskussion in Abschnitt 3.1.4 wird hierauf nochmals Bezug genommen.

Abschließend wird noch auf die Einbausituationen der Probekörper in den jeweiligen Prüfmaschinen eingegangen. Abbildung 3.5 zeigt jeweils die Einbausituation einer Zug-, Schub- und Druckprobe in der Standardprüfmaschine Zwick Z020. Die Zugprobe wurde direkt mit Hilfe der Klemmbacken zwischen der feststehenden und der bewegten Traverse eingespannt. Rechts von der Zugprobe erkennt man zudem noch den rechten Luftauslassschlitz für die Warmluftzuführung. Die Schubprobe konnte nicht direkt in die Klemmbacken eingespannt werden, sondern musste vorab in zwei getrennte Metallhalterungen eingelegt und befestigt werden. Mit Hilfe der Metallhalterungen wurde die Zugkraft in eine Schubkraft umgewandelt und in die Probe eingeleitet. Bei den Druckversuchen wurden planparallele Proben zwischen zwei zylindrische Metallstempel gebracht und anschließend gestaucht. Die Reibung zwischen den Metallzylindern und der Kunststoffprobe konnte durch das Einlegen von dünnen Folien aus Polytetrafluorethylen (PTFE) reduziert werden. Ein haftreibungsbedingtes Ausbauchen der Druckprobe während der Deformation wurde dadurch vermieden. Der mit einer Ausbauchung einhergehende mehrachsige Spannungszustand in der Probe hätte zu verfälschten Messergebnissen geführt. Wie im rechten Bild der Abbildung 3.5 zu sehen ist, wurde im Druckversuch zudem mit einem Spiegel gearbeitet. Damit konnte die Stauchung der Probe auf der Vorder- und einer Seitenfläche erfasst werden. Die Änderung der Querschnittsfläche konnte bei den geringen Probenabmessungen somit exakter bestimmt werden. Die aktuelle Querschnittsfläche ist eine wichtige Messgröße und fließt in die Berechnung der wahren Spannung mit ein, siehe hierzu Unterabschnitt 3.1.3.4. In

3. Materialcharakterisierung

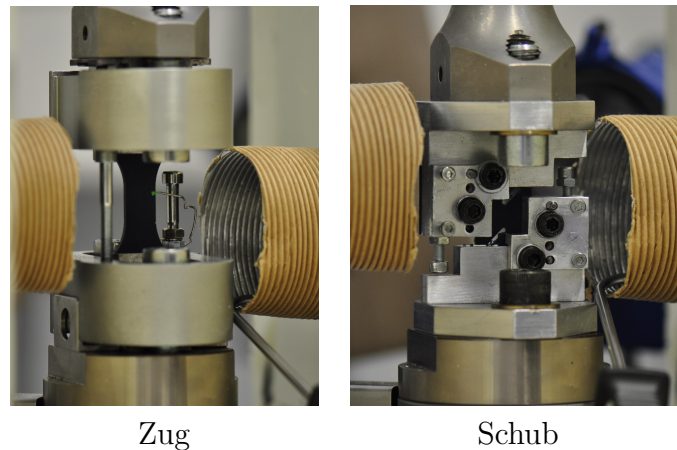


Zug

Schub

Druck

Abbildung 3.5.: Einbausituationen der Probekörper in der Standard Zugprüfmaschine Zwick Z020



Zug

Schub

Abbildung 3.6.: Einbausituationen der Probekörper in der Hochgeschwindigkeitsprüfmaschine Amsler HTM 5020

Abbildung 3.6 sind noch die Einspannbedingungen in der Hochgeschwindigkeitsprüfmaschine Amsler HTM 5020 gezeigt. Die Spannzeuge fallen hier im Vergleich zu der Standardprüfmaschine wesentlich kleiner aus, da die zu beschleunigende Masse zur Erreichung der hohen Abzugsgeschwindigkeiten möglichst gering sein muss. In beiden Bildern sind jeweils links und rechts auch nochmals die gelben Schläuche der Warmluftzufuhr zu erkennen.

3.1.3. Messung und Aufbereitung der Daten

3.1.3.1. Direkte Messgrößen

Während des Versuchs wurden zunächst die direkten Messgrößen aufgezeichnet und im Nachgang weitere für die Materialmodellierung notwendige indirekte Messgrößen abgeleitet. Zu den direkten Messgrößen gehören:

- Traversenweg $s(t_K)$,
- Kraft $F(t_K)$,
- 2D-Videobildaufzeichnung als Grauwert(px_x, px_y, t_D),
- 2D-IR-Temperaturfeldmessung als Farbwert(px_x, px_y, t_T).

Basierend auf dem Geschwindigkeitsbereich der durchgeführten Prüfung wurde die entsprechende Prüf- und Messtechnik ausgewählt, siehe Tabelle 3.3. Der Traversenweg s und die Kraft F wurden direkt über die Messeinrichtung der Zugprüfmaschine erfasst und an den Messrechner weitergeleitet. Die jeweils zweidimensionale pixelbasierte (px_x, px_y) Videobildaufzeichnung und Temperaturfeldmessung erfolgte über eine direkte PC-Schnittstelle sowie eine eigene Messsoftware. Da keine direkte Synchronisation der verschiedenen Messeinrichtungen vorhanden war, werden hier zunächst die drei Zeitachsen t_K für die Kraft- und Traversenwegmessung, t_D für die Videobildaufzeichnung und t_T für die Temperaturfeldmessung eingeführt. Unterabschnitt 3.1.3.4 beschreibt anschließend die Ermittlung der indirekten Messgrößen und Unterabschnitt 3.1.3.5 die nachträgliche Datensynchronisation mit Hilfe des freien Softwaretools SCILAB.

3.1.3.2. Grauwertkorrelation

Die Ermittlung des Dehnungsfeldes erfolgte im Nachgang der Messung mit Hilfe der Grauwertkorrelation. Hierbei kam die Software VIC-2D des Herstellers Correlated Solutions zum Einsatz. Durch das vor dem Versuch auf die Probe aufgebrachte lackbasierte Muster konnte dessen zeit- und orts aufgelöste Veränderung auf der Probenoberfläche verfolgt und in Form von Videobildern aufgezeichnet werden. Eine Auswertesoftware ermittelte dann auf Basis der Einzelbilder die zeitliche Verschiebung einzelner Grauwertfacetten in einem zuvor definierten Auswertebereich. Aus den Verschiebungen der einzelnen Facetten wurde anschließend das zeitabhängige Dehnungsfeld berechnet. In Abbildung 3.7 sind die Auswertebereiche durch die Mittelpunkte der Facetten für den Zug-, Schub- und Druckversuch dargestellt. Die farbig markierten Facettenmittelpunkte zeigen den Bereich an, über den die lokalen Dehnungen zur Erstellung von skalarwertigen Dehnungs-Zeitkurven gemittelt wurden. Die Dehnungs-Zeitkurven wurden im weiteren Verlauf der Auswerteprozedur für die Erzeugung von Spannungs-Dehnungskurven herangezogen, siehe Unterabschnitt 3.1.3.4. Im Zugversuch erfolgte die Festlegung des Mittelungsbereiches immer im Ort des Versagens, da hier die größten lokalen Dehnungswerte zu erwarten waren. Ein großer Nachteil dieser Auswertemethode zur Berechnung des Dehnungsfeldes zeigt sich beim Auftreten von größeren Deformationen in den Proben. Hier kommt es vor, dass die Grauwertkorrelation keine verlässlichen Werte mehr liefert oder sogar nicht mehr anwendbar ist. Die Ursachen hierfür können sein, dass sich Teile des zuvor aufgetragenen Lacks

3. Materialcharakterisierung

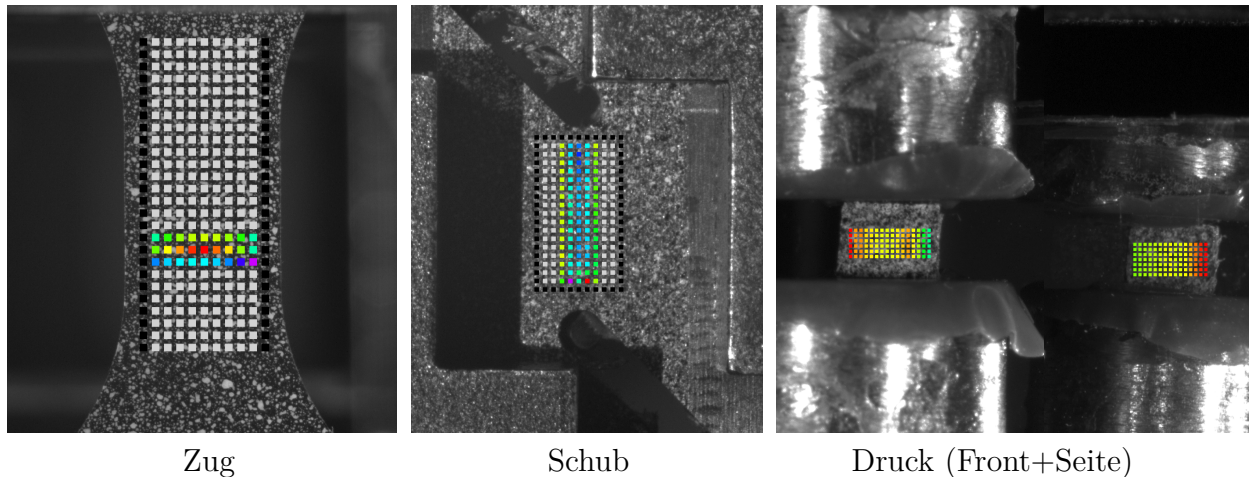


Abbildung 3.7.: Darstellung des Facettenmusters mit eingefärbten Mittelungsbereichen für die Dehnungsauswertung mittels Grauwertkorrelation

ablösen, oder dass das Grauwertmuster sich derart stark deformiert, dass es von der Auswertesoftware nicht mehr richtig interpretiert werden kann. Für das Polyamid 6 konnten daher bei einigen Versuchen keine lokalen Dehnungswerte bis zum Versagenseintritt ermittelt werden. Das betraf vor allem die Versuche bei niedrigen Abzugsgeschwindigkeiten und hohen Anfangstemperaturen. Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Methodik zur Grauwertkorrelation ist in der Dissertation von BECKER [12] ausführlich beschrieben.

3.1.3.3. Infrarotthermografie

Zur Auswertung der pixelbasierten Infrarotthermografiebilder kamen zwei unterschiedliche Softwarepakete zum Einsatz. Für den quasistatischen Geschwindigkeitsbereich handelte es sich dabei um die Software ThermaCAM Researcher 2001 des Herstellers FLIR Systems und für den hochdynamischen Geschwindigkeitsbereich um die IRBIS 3 Analyse-Software der Firma InfraTec.

Die Auswertung der Infrarotbilder erfordert die Angabe eines Emissionsgrades ϵ_{IR} des untersuchten Objekts in der Software. Der Emissionsgrad gibt an, welcher prozentuale Anteil der thermischen Strahlung von dem untersuchten Objekt im Vergleich zu einem schwarzen Strahler abgegeben wird. Der Emissionsgrad eines sogenannten realen Strahlers ist in der Regel abhängig vom Material, der Oberflächenbeschaffenheit, der Temperatur und der Wellenlänge. Außerdem absorbiert ein realer Strahler auch nur einen Anteil der auftreffenden Strahlung. Andere Anteile werden entweder reflektiert oder transmittiert. Ein schwarzer Strahler zeichnet sich dadurch aus, dass er zum einen die gesamte auftreffende elektromagnetische Strahlung, gleich welcher Wellenlänge, vollständig absorbiert und zum anderen eine thermische Strahlung aussendet, deren Intensität und spektrale Verteilung nur von der Temperatur abhängen. Das

Idealbild des schwarzen Strahlers kommt in der Praxis nicht vor. Weiterführende Informationen zur Theorie der Infrarotthermografie findet man zum Beispiel in [81].

Der Emissionsgrad für das hier verwendete Polyamid 6 wurde im Rahmen der Arbeit nicht bestimmt. In der Literatur findet man für 100 μm dicke Polyamid 6 Folien Werte zwischen 0,73 und 0,85, allerdings ohne Angabe der Einfärbung [75]. Da es sich bei dem vorliegenden Polyamid 6 um ein dunkelblau eingefärbtes Material handelt, wurde für die Auswertung aller Thermografiebilder ein idealisierter konstanter Emissionsgrad von

$$\epsilon_{\text{IR,PA6}} \equiv 1$$

angenommen. Die Annahme kann einerseits damit begründet werden, dass aufgrund der dunklen Einfärbung des Materials ein hoher Emissionsgrad knapp unter 1 vorliegen sollte. Andererseits liefern die mit einem Emissionsgrad von 1 ausgewerteten Infrarotbilder prinzipiell die vergleichsweise geringsten Temperaturwerte. Mit abnehmendem Emissionsgrad nehmen die ermittelten Temperaturwerte zu. Die Bewertung der durch den irreversiblen thermischen Effekt verursachten Temperaturerhöhungen in Polyamid 6 ist daher eher konservativ. Zur Abschätzung des Einflusses des Emissionsgrades auf die Temperatureauswertung wurde beispielhaft eine Temperatur-Zeitkurve aus den Infrarotbildern eines Zugversuchs mit zwei unterschiedlichen Emissionsgraden ausgewertet, siehe Abbildung 3.8. Das Beispiel zeigt eine um maximal 1,25% höher ausfallende Temperatur im gesamten zeitlichen Verlauf bei einer Reduzierung des Emissionsgrades von 1 auf 0,95 (gepunktete Kurve). Der mögliche Fehler in der Temperatureauswertung für das dunkelblaue Polyamid 6, der durch die Annahme eines idealisierten Emissionsgrades von 1 entstehen kann, sollte somit im unteren einstelligen $^{\circ}\text{C}$ Bereich liegen.

Im Rahmen der thermomechanischen Charakterisierung zeigte sich, dass die Durchführung von Thermografiemessungen nicht trivial ist und eine Reihe von Einflussfaktoren die Messergebnisse verfälschen können. Hierzu zählen zum Beispiel die thermische Strahlung und die Reflexionen, die von dem umgebenden Prüfaufbau ausgehen oder eine mögliche Änderung des Emissionsgrades bei zunehmender plastischer Deformation des Probekörpers mit einsetzender Weißverfärbung. Zur Minimierung von Fehlern aufgrund dieser Einflussfaktoren ist eine Kalibrierung des gesamten Prüfaufbaus notwendig. Dieses bedeutet jedoch einen hohen Aufwand und war im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich. Aktuelle Arbeiten, zum Beispiel von LIENHARDT et al. [58, 59], widmen sich unter anderem dieser Thematik. Eine weitere Schwierigkeit bei der Durchführung von Thermografiemessungen im Rahmen von thermomechanischen Materialcharakterisierungen ist, dass die Temperaturmessungen in einem ortsfesten Koordinatensystem stattfinden. Das wiederum bedeutet, dass die Verfolgung der Temperaturänderung an einem bestimmten Materialpunkt nicht direkt möglich ist. Im

3. Materialcharakterisierung

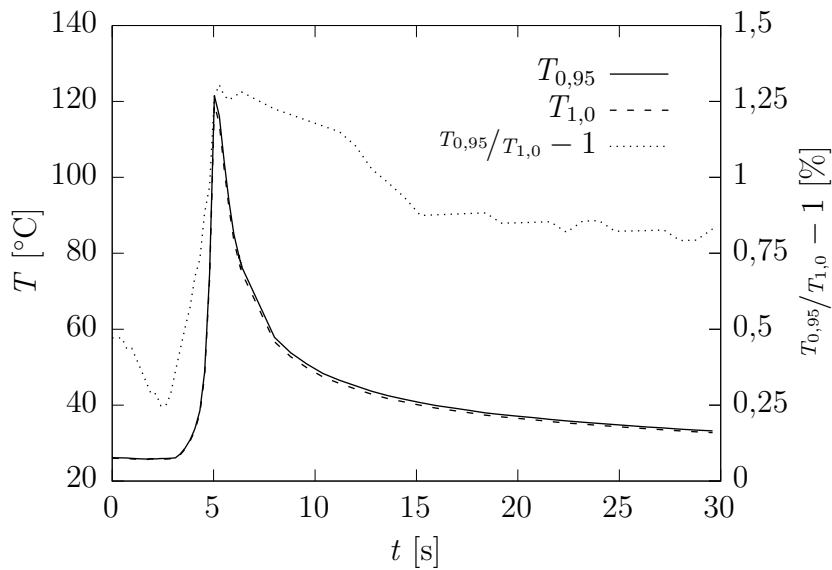


Abbildung 3.8.: Einfluss des Emissionsgrades auf die Temperatúrauswertung am Beispiel einer Temperatur-Zeitkurve

Gegensatz dazu kann bei einer Dehnungsmessung mittels Grauwertkorrelation die Auswertung der lokalen Dehnungsänderungen in einem bauteilfesten Punkt erfolgen. Eine Mittelung des Temperaturfeldes über einen begrenzten Bereich der Probekörperoberfläche zur Erstellung einer gemittelten Temperatur-Zeitkurve, entsprechend der in Unterabschnitt 3.1.3.2 erwähnten gemittelten Dehnungs-Zeitkurve, ist nicht direkt möglich. Eine Methode zur Feldkorrelation von Dehnungs- und Temperaturfeldern wird ebenfalls von LIENHARDT et al. [58, 59] vorgeschlagen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde zur Erstellung einer skalaren Temperatur-Zeitkurve für jeden Zeitpunkt t_T die maximale Temperatur T_{\max} bezogen auf die Probenoberfläche ausgewertet. Diese Möglichkeit wird von der jeweiligen Auswertesoftware direkt angeboten. Es besteht zudem die Möglichkeit ein Begrenzungsfeld zu definieren, in dem die maximale Temperatur ausgeschrieben werden soll. Da die momentane Maximaltemperatur im Probekörper in der Regel im Bereich mit der größten plastischen Deformation zu erwarten ist, kann auch die Temperatur-Zeitkurve örtlich einer entsprechenden Dehnungs-Zeitkurve zugeordnet werden. Diese Zuordnung funktionierte zum Beispiel dann nicht mehr, sobald bei duktilem Materialverhalten eine ausgeprägte Kaltverstreckung mit Fließschulterwandern auftrat und die Zone mit der maximalen Temperatur aus dem definierten Begrenzungsfeld heraus lief, siehe drittes Thermografiebild von links in Abschnitt (c) der Abbildung 3.18.

3.1.3.4. Indirekte Messgrößen

Für die Ermittlung der Materialmodellparameter müssen die direkten Messgrößen aus Unterabschnitt 3.1.3.1 noch entsprechend aufbereitet werden. Zu den benötigten indirekten Messgrößen gehören:

- Hencky'sche Dehnungen $\varepsilon_{11}(t)$, $\varepsilon_{22}(t)$ und $\varepsilon_{12}(t)$,
- Hencky'sche Dehnraten $\dot{\varepsilon}_{11}(t)$, $\dot{\varepsilon}_{22}(t)$ und $\dot{\varepsilon}_{12}(t)$,
- Cauchy'sche Spannungen $\sigma_{11}(t)$ und $\sigma_{12}(t)$,
- Maximale Oberflächentemperatur $T_{\max}(t)$.

Alle genannten indirekten Messgrößen sind zeitabhängige skalare Größen. Dabei bezeichnen ε_{11} und ε_{22} die Hencky'schen Dehnungen längs und quer zur Belastungsrichtung im einachsigen Zug- oder Druckversuch sowie ε_{12} die Hencky'sche Scherdehnung im Schubversuch. Die entsprechenden Dehnraten $\dot{\varepsilon}_{11}$, $\dot{\varepsilon}_{22}$ und $\dot{\varepsilon}_{12}$ sind die Ableitungen der Dehnungsgrößen nach der Zeit. Die Ermittlung der Dehnungen aus den Messdaten der optischen Dehnungsmessung wurde bereits in Unterabschnitt 3.1.3.2 genauer beschrieben. Es sind die gemittelten Dehnungswerte bezogen auf den definierten Auswertebereich, siehe Abbildung 3.7. Die skalaren Spannungswerte σ_{11} und σ_{12} beschreiben die Zug- beziehungsweise Druckspannung sowie die Schubspannung aus den jeweiligen Versuchen. In der Literatur wird die Hencky'sche Dehnung auch häufig als wahre Dehnung und die Cauchy'sche Spannung als wahre Spannung bezeichnet. Die Größe T_{\max} beschreibt die zeitabhängige maximale Oberflächentemperatur in einem vordefinierten Auswertefenster. Diese Kurve kann direkt aus der 2D-Temperaturfeldmessung mit Hilfe der Auswertesoftware ermittelt und ausgegeben werden, siehe Unterabschnitt 3.1.3.3. Für alle indirekten Messgrößen wurde hier bereits die synchronisierte Zeit t eingeführt, siehe Unterabschnitt 3.1.3.5.

Im Folgenden wird die Berechnung der Spannungsgrößen noch ausführlicher erläutert. Die wahre Zugspannung σ_{11} kann im einachsigen Zugversuch aus der anliegenden Kraft und der senkrecht zur Kraftrichtung orientierten aktuellen Probenquerschnittsfläche im engsten Querschnitt bestimmt werden. Im Falle des BZ12 Zugstabs mit der rechteckigen Querschnittsfläche A_{bd} und einer in Zugrichtung gerichteten Kraft F_1 gilt somit

$$\sigma_{11} = \frac{F_1}{A_{bd}} = \frac{F_1}{bd}. \quad (3.1)$$

Die Gleichung (3.1) gilt streng genommen nur für den Fall, dass über den gesamten Deformationsverlauf der rechteckige Querschnitt A_{bd} erhalten bleibt und in diesem eine homogene

3. Materialcharakterisierung

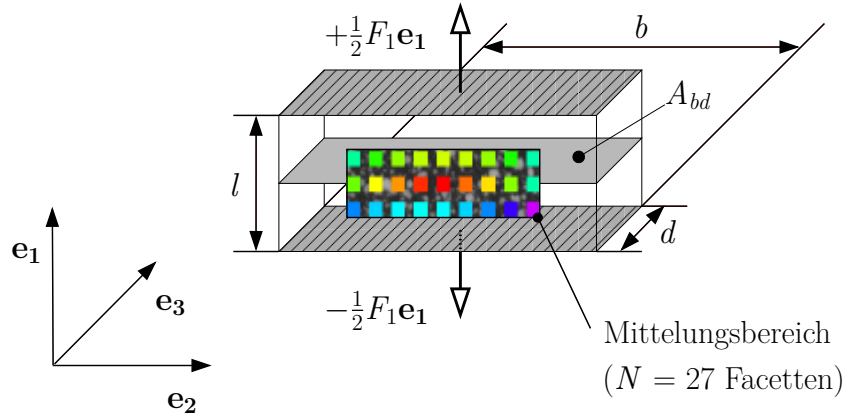


Abbildung 3.9.: Freigestellter Bereich des quaderförmigen Auswertevolumens im BZ12 Zugstab (schematisiert)

Spannungsverteilung vorliegt.¹ Zur Berechnung des zeitlichen Spannungsverlaufs muss nun die zeitlich veränderliche Querschnittsfläche bestimmt werden. Diese wurde nicht direkt gemessen, kann jedoch näherungsweise über die lokalen Dehnungen aus der optischen Dehnungsmessung berechnet werden. Zur besseren Veranschaulichung der folgenden Schritte ist in Abbildung 3.9 der freigestellte quaderförmige Auswertebereich mit der Länge l , der Breite b und der Dicke d der Zugprobe BZ12 schematisch dargestellt. Bezogen auf die Breite b und die Dicke d des Quaders können nun im nächsten Schritt die eindimensionalen Hencky'schen Dehnungen mit

$$\varepsilon_{22} = \ln\left(\frac{b}{b_0}\right) \quad (3.2)$$

und

$$\varepsilon_{33} = \ln\left(\frac{d}{d_0}\right) \quad (3.3)$$

angegeben werden. Der zeitliche Verlauf der Zugspannung kann durch Umstellen der Gleichungen (3.2) und (3.3) nach b und d und Einsetzen dieser Größen in Gleichung (3.1) durch den Ausdruck

$$\sigma_{11} = \frac{F_1}{b_0 d_0} \exp(-\varepsilon_{22} - \varepsilon_{33}) \quad (3.4)$$

beschrieben werden. Die Abmessungen b_0 und d_0 bezeichnen die Ausgangsmaße der undefor- mierten Querschnittsfläche. Die Dehnung ε_{22} wird nun durch den gemittelten Dehnungswert $\bar{\varepsilon}_{22}$ aus der optischen Dehnungsmessung

¹Die Annahme wird bei dem untersuchten Polyamid 6 nicht über den gesamten Deformationsbereich ein- gehalten. Spätestens beim Erreichen der Fließgrenze mit dem Auftreten von größeren lokalen plastischen Deformationen und Fließschulterbildung wird sich ein inhomogener Spannungszustand einstellen und die Querschnittsfläche von einer rechteckigen Form abweichen. Der damit einhergehende Fehler bei der Span- nungsauswertung wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht quantifiziert. Ein signifikanter Einfluss dieses Geo- metrieeffektes auf die Qualität der Materialmodellparameter wurde jedoch im Rahmen der Validierung in Kapitel 7 ausgeschlossen.

3.1. Thermomechanische Charakterisierung

$$\varepsilon_{22} \approx \bar{\varepsilon}_{22} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon_{22,i} \quad (3.5)$$

näherungsweise beschrieben, wenn man davon ausgeht, dass im Auswertevolumen eine nahezu homogene Dehnungsverteilung vorliegt. Die Größe N beschreibt hierbei die Anzahl der Facetten im Mittelungsbereich auf der Probenoberfläche. Zur Veranschaulichung wurde der Facettenbereich auf der vorderen Probenseite der BZ12 Zugprobe auch in Abbildung 3.9 dargestellt. Da im Zugversuch keine Dehnungsmessung in Dickenrichtung erfolgte, wird zudem unter der Voraussetzung von isotropen Materialeigenschaften noch die Annahme getroffen, dass die relative Dickenänderung des Quaders gleich der relativen Breitenänderung ist. Damit folgt für Gleichung (3.4) unter Verwendung von $\varepsilon_{33} = \varepsilon_{22}$ die vereinfachte Darstellung:

$$\sigma_{11} = \frac{F_1}{b_0 d_0} \exp(-2\varepsilon_{22}). \quad (3.6)$$

Die Berechnung der Druckspannung $-\sigma_{11}$ aus den Daten des einachsigen Druckversuchs verläuft analog zu der eben beschriebenen Berechnung der Zugspannung. Da im Gegensatz zum Zugversuch auch die gemittelte Dehnung in Dickenrichtung $\bar{\varepsilon}_{33}$ mittels Grauwertkorrelation erfasst wurde, kann für die Spannungsberechnung Gleichung (3.4) herangezogen werden.

Zur Bestimmung der Schubeigenschaften des Polyamid 6 wurde die Z-Schubprobe vom Fraunhofer Institut LBF eingesetzt [12, 55]. Die Krafteinleitung erfolgte ebenso wie beim Zugversuch in die Richtung \mathbf{e}_1 , jedoch tangential zur Querschnittsfläche A_{ld} . In Abbildung 3.10 ist der freigestellte Bereich des quaderförmigen Auswertevolumens in der Z-Schubprobe dargestellt. Da bei einer reinen Scherung des Volumenelements theoretisch keine Volumenänderung und keine Änderung der Schnittebene A_{ld} auftritt, entfällt somit die Berechnung der aktuellen Fläche während des Deformationsprozesses in Abhängigkeit der Dehnungen. Die Schubspannung kann direkt durch folgende Beziehung bestimmt werden:

$$\sigma_{12} = \frac{F_1}{A_{ld}} = \frac{F_1}{l_0 d_0}. \quad (3.7)$$

Wie beim Zugversuch, bleibt auch hier zu bemerken, dass im Falle größerer Deformationen durch mehrachsige Spannungszustände die rechteckige Querschnittsfläche ihre Gestalt verändert. Die Herleitung der Gleichungen (3.6) und (3.7) werden auch in [12, 55] ausführlich beschrieben.

Bei der späteren Diskussion der Ergebnisse aus der thermomechanischen Charakterisierung in Abschnitt 3.1.4 wird zur Bewertung des kompressiblen Materialverhaltens die relative Volumenänderung V/V_0 herangezogen. Diese Beziehung soll im vorliegenden Abschnitt bereits hergeleitet

3. Materialcharakterisierung

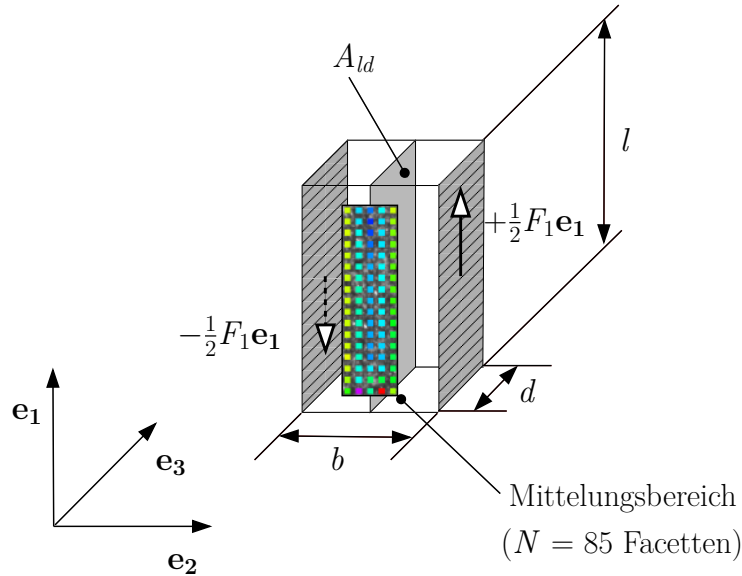


Abbildung 3.10.: Freigestellter Bereich des quaderförmigen Auswertevolumens in der Z-Schubprobe (schematisiert)

werden. Geht man davon aus, dass es sich bei einer einachsigen Zug- und Druckbeanspruchung um eine gestaltänderungsfreie Deformation (Spannungsinvariante $J_2 = 0$) handelt, kann das aktuelle Volumen des oben bereits definierten quaderförmigen Auswertebereichs unter Verwendung der Gleichungen zur Bestimmung der eindimensionalen Hencky Dehnungen angegeben werden:

$$V = lbd = l_0 b_0 d_0 \exp(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}). \quad (3.8)$$

Daraus folgt unmittelbar die gesuchte Beziehung zur Bestimmung der relativen Volumenänderung:

$$\frac{V}{V_0} = \exp(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}). \quad (3.9)$$

3.1.3.5. Datensynchronisierung

Nach der Durchführung und Auswertung aller thermomechanischer Versuche am Fraunhofer Institut LBF wurden dem Verfasser dieser Arbeit die entsprechenden Datensätze übermittelt. Bis auf die Probenoberflächentemperatur T_{\max} und die relative Volumenänderung $\frac{V}{V_0}$, enthielten die Datensätze bereits die in den Unterabschnitten 3.1.3.1 und 3.1.3.4 beschriebenen direkten und indirekten Messgrößen. Die Zeitachsen der Kraftmessungen t_K und der optischen Dehnungsmessungen t_D waren zum Zeitpunkt der Versuchsdurchführung nicht synchronisiert, da keine Triggerung der Messeinrichtungen zur Verfügung stand. Die Synchronisierung der Kraft- und Dehnungsdaten erfolgte zunächst im Nachgang der Versuche am LBF durch Verschiebung der Kraftkurven auf die Dehnungskurven mit Hilfe einer am LBF entwickelten Software. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden als Datenbasis jedoch synchronisierte Messdaten von

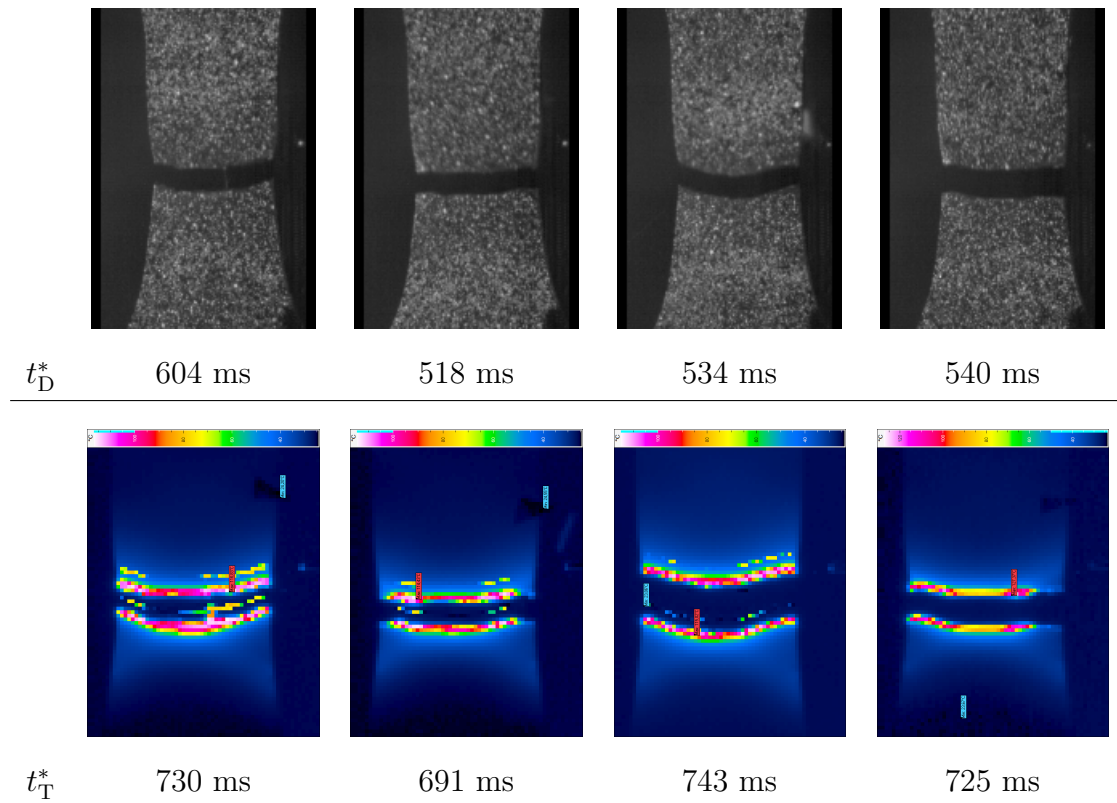


Abbildung 3.11.: Vergleich der Bilder aus der optischen Dehnungsmessung (oben) und der Thermografie (unten) aus Zugversuchen bei 10 mm/s und 25 °C zur Bestimmung des Zeitverschiebungswertes.

Dehnung, Spannung und Temperatur benötigt. Die Synchronisation der Temperaturdaten mit den anderen genannten Messgrößen musste somit nachträglich vorgenommen werden. Dazu wurden eigene Routinen zur automatisierten Synchronisation der Messdaten in der freien Software SCI LAB programmiert. Die Aufbereitung der Messdaten erfolgte in drei Schritten.

Im ersten Schritt wurde die Zeitachse der Temperaturmessungen t_T auf die Zeitachse der Dehnungsauswertungen t_D verschoben. Zur Festlegung dieser Zeitachsenverschiebung wurde der Versagenszeitpunkt oder das Auftreten erster Risse im Probekörper als Kriterium herangezogen. Für jeden Versuch wurde nun für diesen Zeitpunkt ein Bild aus der optischen Dehnungsmessung und das korrespondierende Bild aus der Temperaturmessung herausgesucht. Da jedes der Bilder einen Zeitstempel besitzt, konnte durch Bildung der Zeitdifferenz der beiden Zeitstempel t_D^* und t_T^* bei Versagensbeginn die Zeitverschiebung der Temperaturzeitachse

$$\Delta t_{T \rightarrow D} = t_T^* - t_D^* \quad (3.10)$$

bestimmt werden. Abbildung 3.11 zeigt für eine Versuchsreihe von Zugversuchen den Vergleich

3. Materialcharakterisierung

der jeweiligen Bilder aus der optischen Dehnungsmessung (obere Bildreihe) und der Temperaturfeldmessung (untere Bildreihe) unter Angabe des Zeitstempels für jedes Bild.

Im zweiten Schritt erfolgte die Verschiebung der Dehnungszeitachse t_D auf die Zeitachse der Kraftmessung t_K . Dazu wurden die Zeitwerte $t_D^\#$ und $t_K^\#$ bei einem Dehnungswert von 10 % bestimmt. Der erste Zeitwert kommt direkt aus der Datendatei der Grauwertkorrelation und der zweite Zeitwert aus der Datei, welche bereits die am LBF erzeugten dehnungssynchronisierten Messdaten enthält. Aus der Differenz der Zeitwerte

$$\Delta t_{D \rightarrow K} = t_D^\# - t_K^\# \quad (3.11)$$

kann somit der zweite Verschiebungswert ermittelt werden.

Abschließend erfolgte noch die Verschiebung der Zeitachse t_K derart, dass der erste Kraftanstieg zum Zeitpunkt $t = 0$ s stattfindet. Dazu wird eine Ausgleichsgerade in den Bereich des ersten Kraftanstiegs gelegt. Der Schnittpunkt der Ausgleichsgeraden mit der Zeitachse ergibt t_K^0 . Damit ist der dritte Wert

$$\Delta t_{K \rightarrow \text{NULL}} = t_K^0 \quad (3.12)$$

zur Verschiebung der Zeitachse t_K bekannt.

Mit den Verschiebewerten (3.10) bis (3.12) können nun die drei separaten Zeitachsen auf eine gemeinsame synchronisierte Zeitachse t verschoben werden. Damit alle Messdaten anschließend auch in Diagrammen gegeneinander aufgetragen werden konnten, war eine Interpolation aller Messdaten auf die gemeinsame Zeitachse notwendig. Dazu wurde mit Hilfe der SciLAB Routine die neue Zeitachse t in äquidistante Zeitinkremente zerlegt und anschließend alle Messdaten auf die äquidistante Zeitachse interpoliert. Für jede Messung erfolgte dann noch die automatisierte Ausgabe eines kompletten und zeitsynchronisierten Datensatzes im ASCII-Format. Damit können zum Beispiel dehnraten- und temperaturabhängige Spannungs-Dehnungskurven $\sigma(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, T)$ einfach erstellt werden.

3.1.4. Messergebnisse

In diesem Abschnitt werden die aufbereiteten Messergebnisse der thermomechanischen Charakterisierung am Polyamid 6 aufgezeigt und diskutiert. An den entsprechenden Stellen wird auch nochmals auf die grundlegenden Eigenschaften von Kunststoffen in Kapitel 2.1 Bezug genommen. In den folgenden Unterabschnitten 3.1.4.1 bis 3.1.4.3 werden in allen Ergebnisdigrammen in der Regel drei Wiederholungskurven je Versuchseinstellung dargestellt. In einigen Ausnahmefällen sind aufgrund von Fehlmessungen nur zwei Wiederholungskurven verfügbar.

3.1.4.1. Zugversuchsergebnisse

Die Zugversuche wurden mit konstanten Abzugsgeschwindigkeiten im Bereich von 0,01 mm/s bis 1000 mm/s und bei Umgebungstemperaturen zwischen 25 °C und 120 °C durchgeführt. Die Abbildungen 3.12 und 3.13 zeigen jeweils für die quasistatischen und die hochdynamischen Versuche die wahren Spannungs-Dehnungskurven auf der linken Seite (Diagramme (a) – (c)) und die Temperatur-Dehnungskurven auf der rechten Seite (Diagramme (d) – (f)). Die Temperatur-Dehnungskurven veranschaulichen die Auswirkung der thermischen Effekte auf die Entwicklung der Probenoberflächentemperatur während des Deformationsprozesses. Insgesamt ist die Reproduzierbarkeit der wahren Spannungs-Dehnungskurven für eine Versuchseinstellung sehr gut. Moderate Streuungen sind teilweise in den Temperatur-Dehnungskurven zu erkennen. Die wahren Spannungs-Dehnungskurven zeigen deutlich das typische dehnraten- und temperaturabhängige Deformationsverhalten von thermoplastischen Kunststoffen, wie es bereits schematisch in Abbildung 2.8 dargestellt wurde. Zudem wird der Einfluss des Glasübergangsbereichs im Polyamid 6 auf die dargestellten Kurven an vielen Stellen deutlich sichtbar. Vorbereitend auf die folgende detaillierte Interpretation der Versuchsergebnisse werden noch die Eckdaten zum Glasübergangsbereich zusammengefasst: Die Glasübergangstemperatur T_g von trockenem Polyamid 6 liegt bei ungefähr 78 °C [29]. Der gesamte Glasübergangsbereich erstreckt sich jedoch über ein größeres Temperaturfenster um die Glasübergangstemperatur herum, in dessen Randtemperaturbereichen sich bereits verstärkte Eigenschaftsänderungen des Materials bemerkbar machen. Basierend auf den Ergebnissen eigener Untersuchungen (siehe Abbildung 2.5) kann ein ungefähres Temperaturfenster für den Glasübergangsbereich von $50\text{ °C} < T_g < 100\text{ °C}$ angegeben werden. Die Glasübergangstemperatur sowie der gesamte Glasübergangsbereich verschiebt sich mit zunehmender Belastungsgeschwindigkeit zu höheren Temperaturen, siehe hierzu auch Unterabschnitt 2.1.2.

Das bereits in Unterabschnitt 2.1.3 erwähnte Double-Yield Phänomen ist auch bei den vorliegenden Zugversuchen zu beobachten. Die stärkste Ausprägung dieses Phänomens zeigt sich in den wahren Spannungs-Dehnungskurven in Abbildung 3.12 bei den Abzugsgeschwindigkeiten von 0,01 mm/s (a) und 0,1 mm/s (b) und den Umgebungstemperaturen von 25 °C und 40 °C. Neben den ersten Fließpunkten sind hier auch die zweiten Fließpunkte sehr stark ausgeprägt. An der 60 °C Kurve im selben Diagramm (b) ist bereits deutlich der Eintritt in den Glasübergangsbereich mit einer Änderung des typischen Deformationsverhaltens zu erkennen. Diese Kurve zeigt ein eher homogenes Deformationsverhalten ohne die Ausbildung von zwei Fließpunkten. Mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit ändert sich jedoch auch das Deformationsverhalten der 60 °C Spannungs-Dehnungskurven, welches am deutlichsten in Diagramm (c) der Abbildung 3.13 sichtbar wird. Die Ursache hierfür liegt in der Verschiebung der Glasübergangstemperatur T_g mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit.

3. Materialcharakterisierung

Den Einfluss des Glasübergangsbereichs von Polyamid 6 erkennt man zudem auch in den Anfangssteifigkeiten der Spannungs-Dehnungskurven in den Abbildungen 3.12 (a) – (c) und 3.13 (a) – (c). Unterhalb des Glasübergangsbereichs ist die Anfangssteifigkeit in den Spannungs-Dehnungskurven nur geringfügig dehnraten- und temperaturabhängig. Im Übergangsbereich ist hingegen eine deutliche Abhängigkeit der Anfangssteifigkeit von der Dehnrate und der Temperatur vorhanden. Dieses bestätigt das bereits in Abbildung 2.5 dargestellte Verhalten von Polyamid 6.

Auf der rechten Seite der Abbildungen 3.12 (d) – (f) und 3.13 (d) – (f) sind die Temperatur-Dehnungskurven der ausgewählten Zugversuche dargestellt. Eine nahezu isotherme Deformation zeigt sich bei der Abzugsgeschwindigkeit von 0,01 mm/s in Abbildung 3.12 (d). Mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit tritt der irreversible thermische Effekt verstärkt hervor, gekennzeichnet durch eine zunehmende Erwärmung der Proben beim Eintritt in den nichtlinearen Deformationsbereich. Bei einigen dieser Kurven ist im linearen Deformationsbereich auch die Auswirkung des thermoelastischen Effekts durch einen geringfügigen Temperaturrückgang sichtbar, siehe vor allem die 25 °C Kurven in Abbildung 3.12 (e), (f). Der lokale Temperaturanstieg aufgrund des irreversiblen thermischen Effektes fällt mit steigender Umgebungstemperatur bei gleicher Abzugsgeschwindigkeit geringer aus. Das zeigt sich zum Beispiel deutlich bei der Abzugsgeschwindigkeit 0,1 mm/s in Abbildung 3.12 (e). Mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit und der damit verbundenen Verschiebung von T_g verstärkt sich auch der Temperaturanstieg bei höheren Umgebungstemperaturen, welches sich in den Temperatur-Dehnungskurven bei 10 mm/s und 1000 mm/s in Abbildung 3.13 (d), (f) bemerkbar macht.

Des Weiteren zeigt sich in den Abbildungen 3.12 (a) – (c) und 3.13 (a) – (c) an einigen Stellen der Einfluss der lokalen Temperaturerhöhung in den Spannungs-Dehnungskurven in Form einer thermischen Entfestigung. Da mit dem Beginn einer Probeneinschnürung auch eine Dehnungsentfestigung einhergeht, lassen sich beide Entfestigungsvorgänge nicht eindeutig trennen. Auffällig ist zumindest, dass die Ausprägung des zweiten Fließpunktes bei den 23 °C Kurven mit steigender Abzugsgeschwindigkeit immer geringer ausfällt. Zum Beispiel ist der zweite Fließpunkt bei der isothermen Deformation mit 0,01 mm/s in Abbildung 3.12 (a) noch deutlich ausgeprägt und zeigt eine höhere Spannung als der erste Fließpunkt. Bei der 23 °C Kurve mit 1 mm/s Abzugsgeschwindigkeit in (c) ist bereits das Spannungsniveau des ersten und zweiten Fließpunkts nahezu identisch. Das beschriebene Verhalten wird vermutlich durch die lokale Probenerwärmung und den damit verbundenen Eintritt in den Glasübergangsbereich verursacht oder zumindest stark begünstigt. Das gleiche Verhalten lässt sich auch bei den

dargestellten 40 °C Spannungs-Dehnungskurven in den Abbildungen 3.12 (b) und 3.13 (a), (c) beobachten. Die Spannungs-Dehnungskurven bei den höheren Umgebungstemperaturen von $T \geq 60$ °C in den Abbildungen 3.12 (b), (c) und 3.13 (a), (c) zeigen dieses Verhalten nicht, da hier die Deformation schon direkt von Beginn an im Glasübergangsbereich stattfindet.

In der Abbildung 3.14 sind die relativen Volumenänderungen in Abhängigkeit der Dehnung nach Gleichung (3.9) dargestellt. Die Diagramme (a) – (c) in der linken Spalte zeigen die Ergebnisse aus den quasistatischen Zugversuchen und die Diagramme (d) – (f) in der rechten Spalte die Ergebnisse aus den hochdynamischen Zugversuchen. Auffällig ist hier, dass jede dieser Kurven einen Knick bei einem bestimmten Dehnungswert aufweist. Ein Vergleich der Kurven in Abbildung 3.14 zeigt, dass bei den Versuchen mit einer Umgebungstemperatur von 25 °C der Knick bei einem Dehnungswert ε_{11} von ungefähr 0,3 auftritt. In den 40 °C Kurven bei 0,1 mm/s Abzugsgeschwindigkeit in (b) und bei allen 60 °C Kurven in (b) – (d), (f) ist der Knickpunkt zu höheren Dehnungswerten hin verschoben. Hier macht sich vermutlich erneut der Einfluss des Glasübergangsbereichs und die damit verbundene Änderung des Deformationsverhaltens bemerkbar. Diese Hypothese wird auch dadurch gestützt, dass sich mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit die Lage der Knicke bei den genannten 40 °C und 60 °C Kurven in Richtung des Dehnungswertes von 0,3 verschieben, da im gleichen Zuge die Glasübergangstemperatur T_g mit der Geschwindigkeitszunahme ansteigt. Bezüglich der Anforderungen an das Materialmodell zeigen die Kurven der relativen Volumenänderung zudem, dass auch im Bereich großer plastischer Deformationen eine Volumenänderung auftritt, welche durch die Berücksichtigung einer Kompressibilität im plastischen Materialmodell erfolgen muss.

Die Entwicklung der Dehnraten in Belastungsrichtung $\dot{\varepsilon}_{11}$ und quer zur Belastungsrichtung $-\dot{\varepsilon}_{22}$ in Form von Dehnraten-Dehnungskurven sind in Abbildung 3.15 dargestellt. In der linken Spalte (a), (b) befinden sich die Ergebnisse aus den quasistatischen Zugversuchen und in der rechten Spalte (c), (d) die Ergebnisse aus den hochdynamischen Zugversuchen. Im linearen Deformationsbereich ist bei einigen Kurven ein sprunghafter Anstieg der Dehnraten um nahezu eine Dekade zu verzeichnen. Bei anderen Kurven wiederum zeigt sich ein gleichmäßig moderater Anstieg der Dehnraten. Dieses Verhalten kann ebenfalls wieder mit dem Glasübergangsbereich von Polyamid 6 in Verbindung gebracht werden. Bei den Kurven unterhalb des Glasübergangsbereichs tritt der sprunghafte Anstieg und bei den Kurven innerhalb des Glasübergangsbereichs der moderate Anstieg der Dehnraten auf. Auch hier zeigt sich vor allem bei den 60 °C Kurven, dass mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit und der damit verbundenen Verschiebung der Glasübergangstemperatur T_g ein Übergang des Anstiegsverhaltens von moderat zu sprunghaft zu verzeichnen ist, vergleiche Diagramme (a) mit (c) und (b) mit (d).

3. Materialcharakterisierung

In Unterabschnitt 3.1.3.2 wurde bereits darauf hingewiesen, dass die Dehnungsauswertung mittels Grauwertkorrelation nicht bis zum Versagenseintritt des Zugprobekörpers durchgeführt werden konnte. Folglich enden alle der in den Abbildungen 3.12 bis 3.15 dargestellten Kurven mit einem mehr oder weniger großen Abstand zum Versagenszeitpunkt. Für die spätere Materialmodellerstellung ist es jedoch wichtig, ein möglichst umfassendes Bild über das gesamte Deformationsverhalten der Proben zu bekommen. Mit Hilfe der in den Abbildungen 3.16 bis 3.18 dargestellten Auswertungen für eine niedrige, mittlere und hohe Abzugsgeschwindigkeit bei den Umgebungstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C soll diese Informationslücke ein Stück weit geschlossen werden. Auf der linken Seite ist jeweils die wahre Zugspannung σ_{11} und die maximale Oberflächentemperatur T_{\max} in Abhängigkeit des Traversenwegs s gemeinsam in einem Diagramm dargestellt. Da die Temperatur-Wegkurven im Gegensatz zu den Spannungs-Wegkurven bis zum Versagenseintritt vorliegen, kann mit Hilfe dieses Diagramms schon qualitativ abgeschätzt werden, welchen Bereich vor Eintritt des Versagens die Kurven in den Abbildungen 3.12 bis 3.15 enthalten. Zusätzlich zu den Kurvendarstellungen in der linken Spalte sind in der rechten Spalte für vier ausgewählte Punkte des Traversenwegs die entsprechenden Thermografiebilder (obere Zeile) zusammen mit den Bildern aus der optischen Dehnungsmessung (untere Zeile) dargestellt. Die Auswertepunkte sind in den Kurvendiagrammen zur besseren Orientierung durch Symbole kenntlich gemacht. Für die Auswahl der Bilder wurde immer nur ein Wiederholungsversuch pro Diagramm ausgewählt. Die Bildaufnahmen ermöglichen somit zusätzlich die Bewertung des makroskopischen Deformationsverhaltens der Zugproben bis zum Versagenseintritt. Einige Erkenntnisse, die sich aus den Darstellungen ergeben, werden im Folgenden kurz zusammengefasst.

Die Bewertung aller dargestellten Thermografie- und Grauwertbilder sowie der zugehörigen Diagramme führte zu dem Schluss, dass eine Dehnungsauswertung mittels Grauwertkorrelation ab dem Zeitpunkt, bei dem sich die Probe signifikant einschnürte, nicht mehr möglich war. Daher ist die Zeitspanne oder der vergleichbare Traversenweg zwischen Abbruch der Dehnungsmessung und dem Versagenseintritt generell bei Versuchen mit geringen Abzugsgeschwindigkeiten und/oder hohen Umgebungstemperaturen besonders groß. Im einzelnen zeigt sich, dass das betrachtete Polyamid 6 bei 25 °C, selbst bei geringen Abzugsgeschwindigkeiten, kein ausgeprägtes Einschnürverhalten mit Fließschulterbildung und Fließschulterwandern vor Versagenseintritt zeigt, siehe jeweils Abschnitt (a) in den Abbildungen 3.16 bis 3.18. In den genannten Beispielen deckt die Dehnungsauswertung einen großen Teil des gesamten Deformationsbereichs bis hin zum Versagenseintritt erfolgreich ab. Bei den Abzugsgeschwindigkeiten von 0,1 mm/s und 10 mm/s und den Umgebungstemperaturen von 40 °C und 60 °C verhält sich das Material ausgesprochen duktil und bildet eine ausgeprägte Fließschulter mit anschließendem Fließschulterwandern, bevor ein Versagen der Probe eintritt, siehe jeweils die

3.1. Thermomechanische Charakterisierung

Abschnitte (b) und (c) in den Abbildungen 3.16 und 3.17. Hier endet die Dehnungsauswertung mit dem Einsetzen der Einschnürung bereits verhältnismäßig früh. Durch den bereits bekannten Anstieg der Glasübergangstemperatur T_g mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit zeigen auch die Versuche bei 1000 mm/s und den Umgebungstemperaturen von 40 °C und 60 °C ein deutlich vermindertes duktileres Verhalten gegenüber den entsprechenden Versuchen bei den beiden niedrigeren Geschwindigkeiten, siehe Abschnitte (b) und (c) in Abbildung 3.18. Damit war auch für die beiden letztgenannten Versuchsreihen eine Dehnungsauswertung über den größten Teil des Traversenwegs möglich.

Zudem fällt auf, dass sich während des Fließschulterwanderns bei den duktilen Deformationsvorgängen bei 40 °C und 60 °C ein Temperaturplateau ausbildet, siehe jeweils Abschnitte (b) und (c) in den Abbildungen 3.16 und 3.17. Bei der Abzugsgeschwindigkeit von 0,1 mm/s in den Abschnitten (b) und (c) in Abbildung 3.16 ist das Phänomen besonders deutlich ausgeprägt. Hier bewegt sich das lokale Temperaturmaximum bei beiden Umgebungstemperaturen von 40 °C und 60 °C im Bereich der wandernden Fließschulter auf einem nahezu gleichbleibenden Temperaturniveau. Erreicht die wandernde Fließschulter das Ende des parallelen Probenbereichs, steigt die Temperatur nochmals stark an, bis kurz darauf das Versagen der Probe an gleicher Stelle eintritt. Im Falle des Versuchs bei 60 °C, Abschnitt (c) in Abbildung 3.16, kommt es sogar zu einem Wechsel der wandernden Fließschulter. Die zunächst in der oberen Hälfte des Zugstabs lokalisierte wandernde Fließschulter wechselt bei Erreichen der oberen Probenschulter auf die untere Zugstabhälfte und wandert anschließend bis zur unteren Probenschulter. Bei den beiden letztgenannten Versuchen macht sich aufgrund der geringen Abzugsgeschwindigkeit von 0,1 mm/s und der damit verbundenen hohen Versuchsdauer auch die bereits in Unterabschnitt 3.1.2 und in Abbildung 3.4 dargestellten Problematik der Probenabkühlung bemerkbar. Dies zeigt sich vor allem durch einen leichten Temperaturrückgang während des Fließschulterwanderns in den Temperatur-Traversenwegkurven bei den 60 °C in Abschnitt (c) der Abbildung 3.16.

3. Materialcharakterisierung

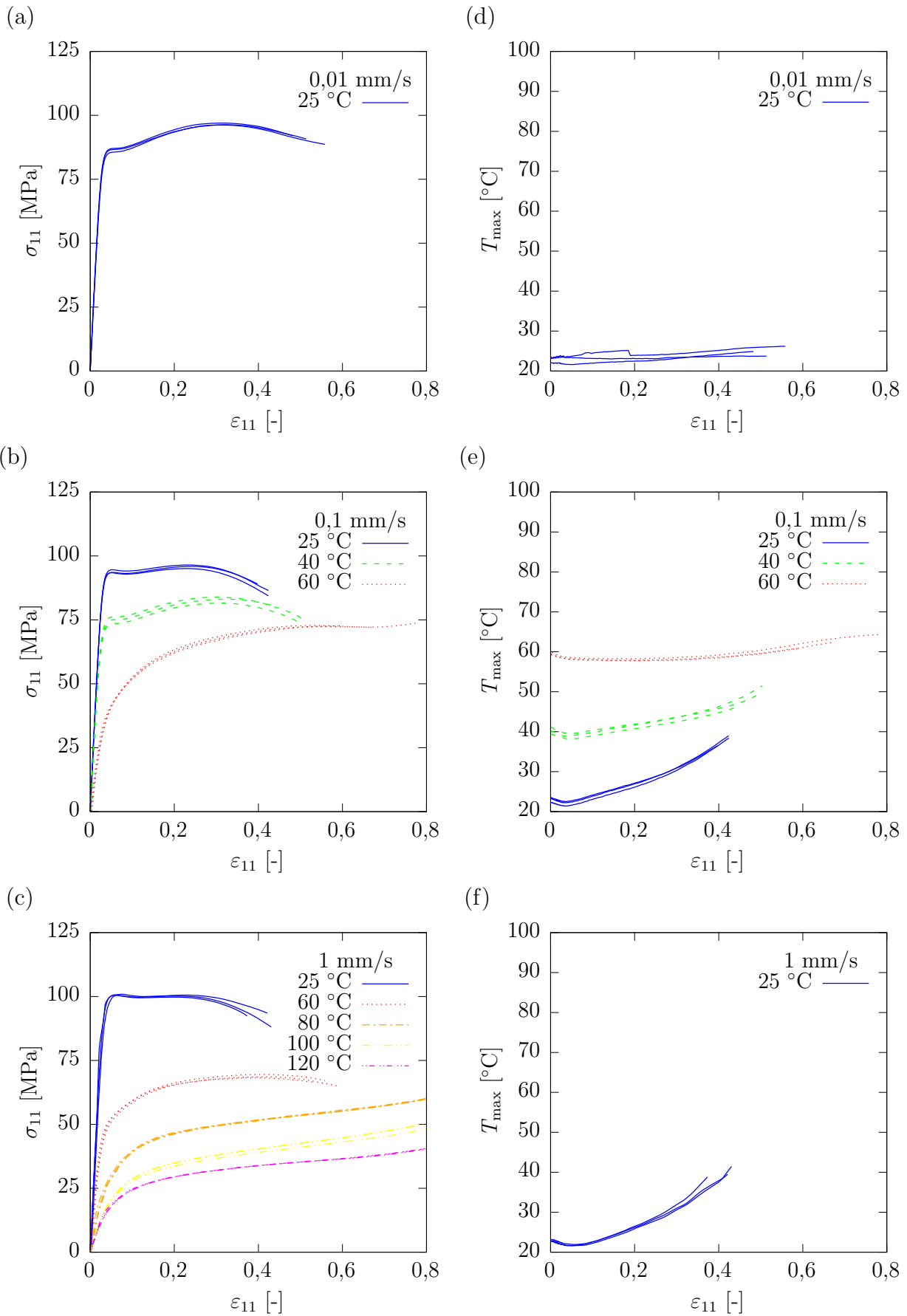


Abbildung 3.12.: Wahre Spannungs-Dehnungskurven (a)-(c) und Temperatur-Dehnungskurven (d)-(f) aus den quasistatischen Zugversuchen

3.1. Thermomechanische Charakterisierung

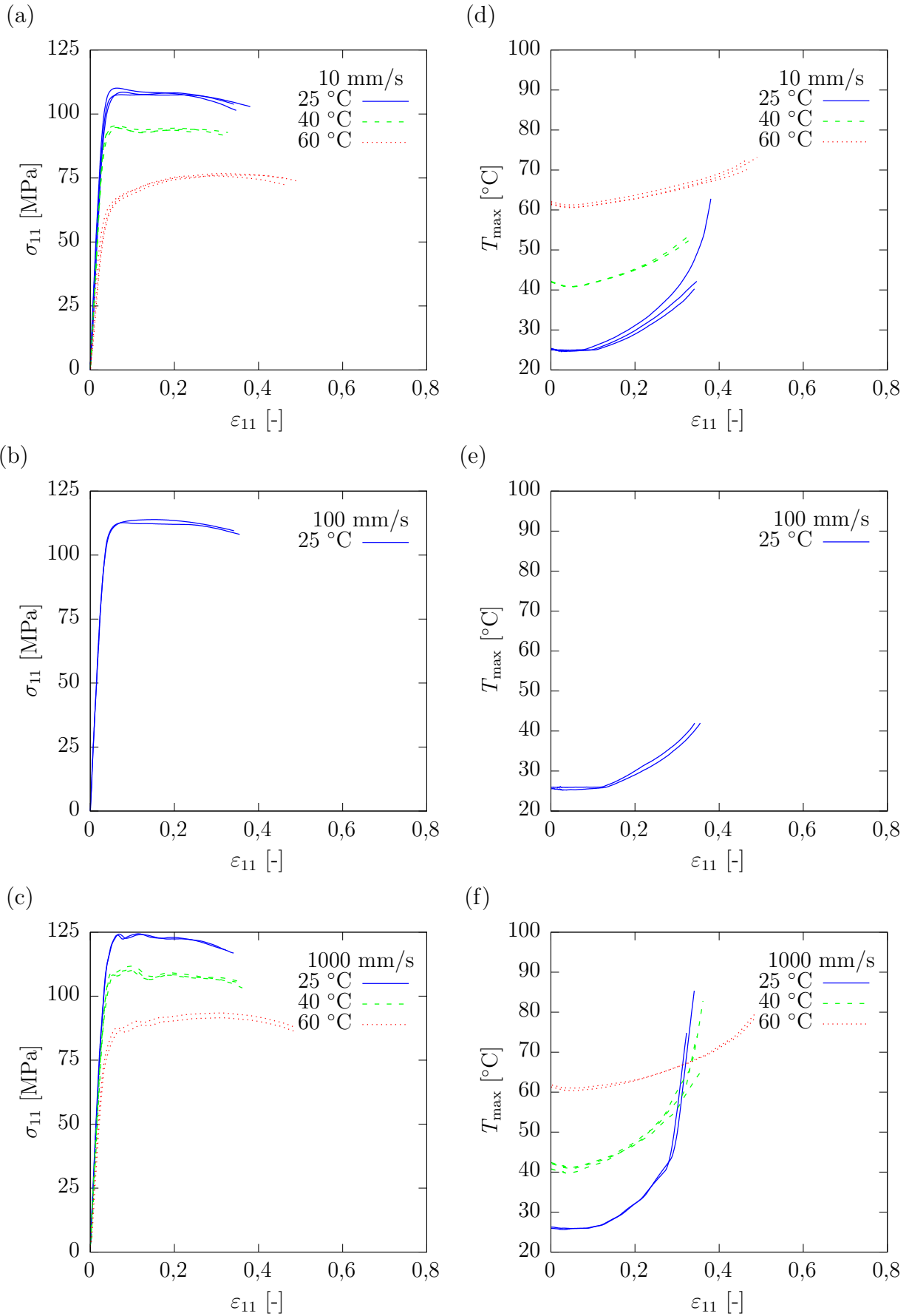


Abbildung 3.13.: Wahre Spannungs-Dehnungskurven (a)-(c) und Temperatur-Dehnungskurven (d)-(f) aus den hochdynamischen Zugversuchen

3. Materialcharakterisierung

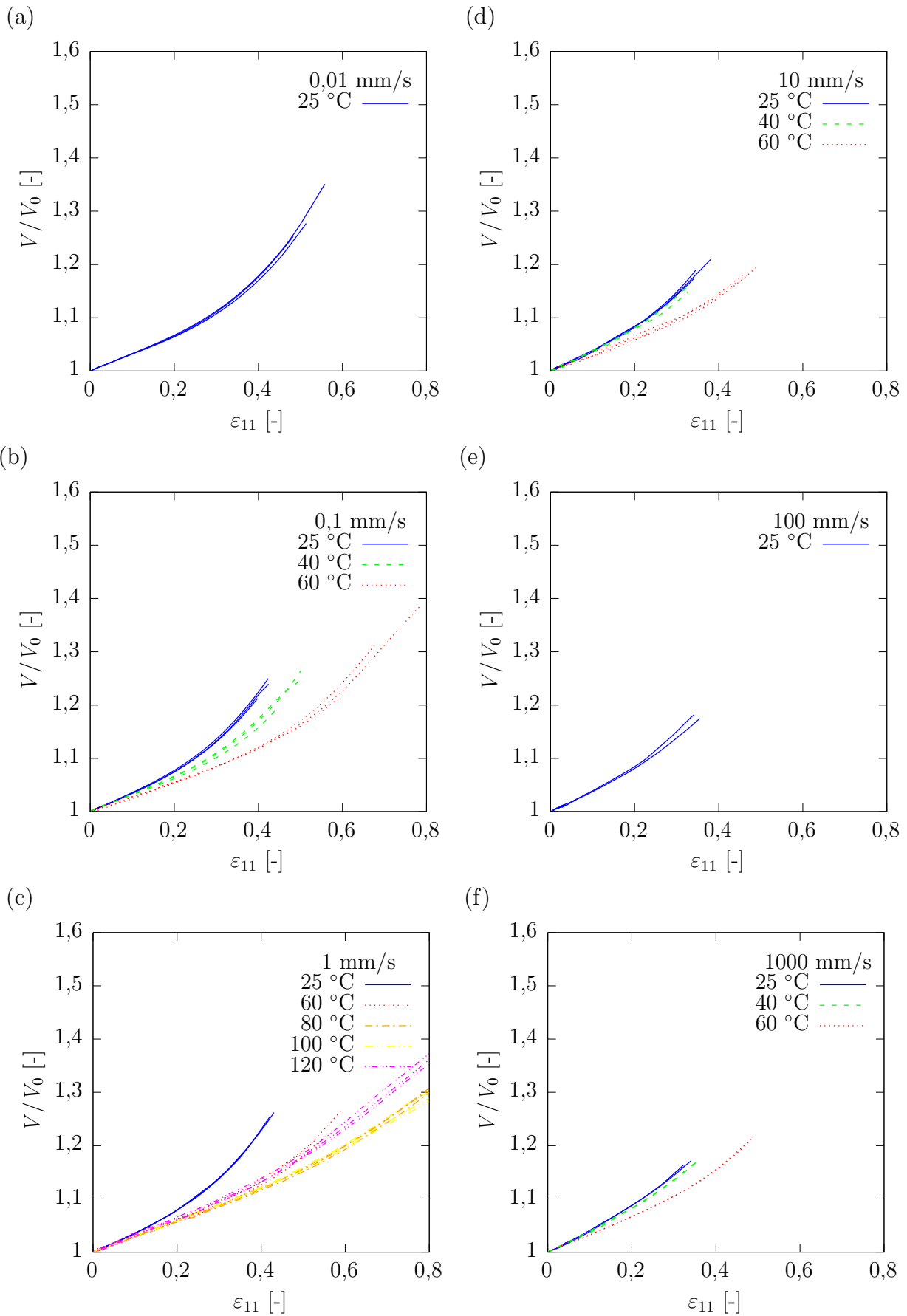


Abbildung 3.14.: Relative Volumenänderungs-Dehnungskurven aus den quasistatischen Zugversuchen (a)-(c) und den hochdynamischen Zugversuchen (d)-(f)

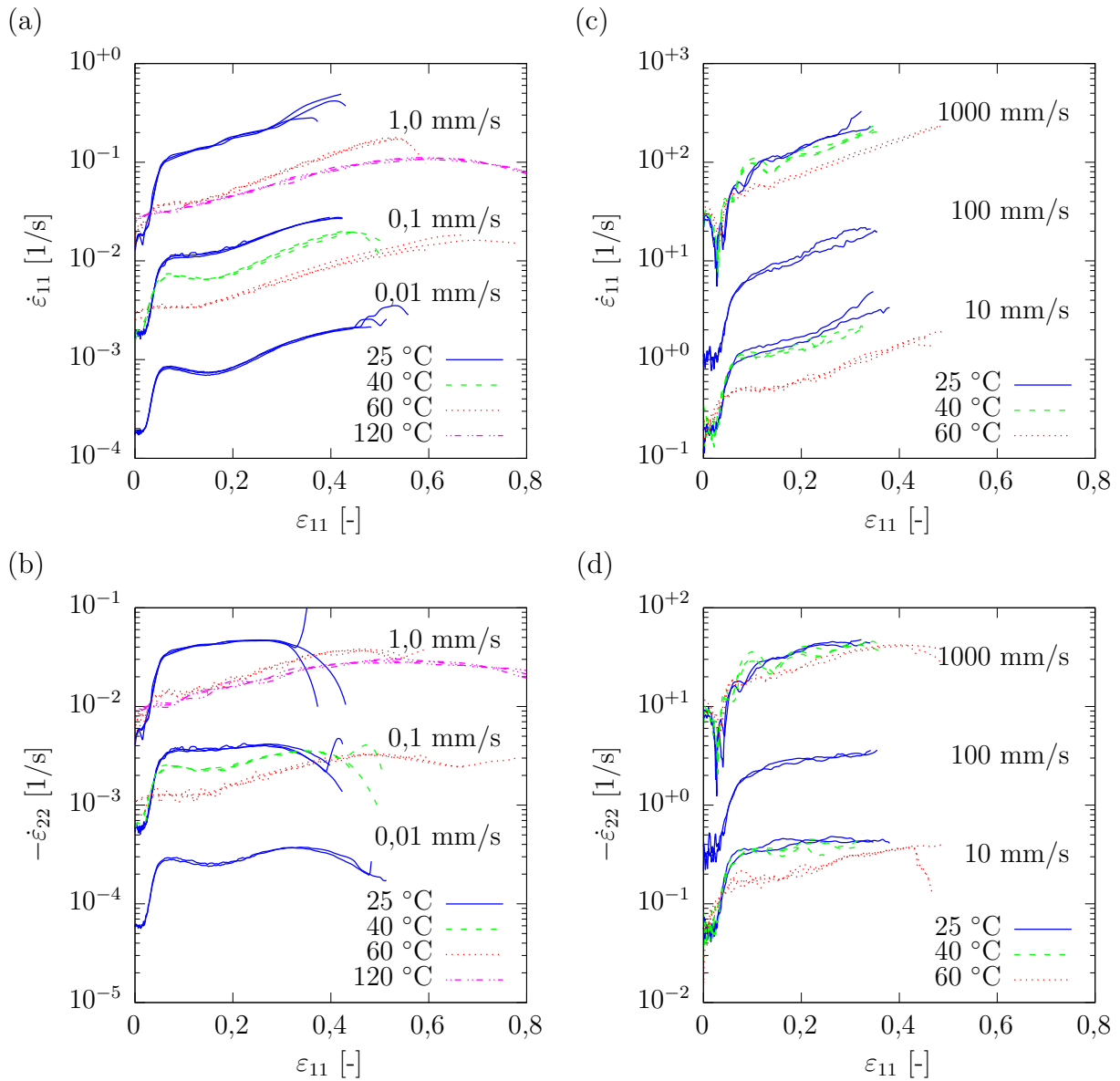


Abbildung 3.15.: Wahre Dehnraten-Dehnungskurven aus quasistatischen Zugversuchen, längs (a) und quer (b) zur Belastungsrichtung sowie wahre Dehnraten-Dehnungskurven aus hochdynamischen Zugversuchen, längs (c) und quer (d) zur Belastungsrichtung

3. Materialcharakterisierung

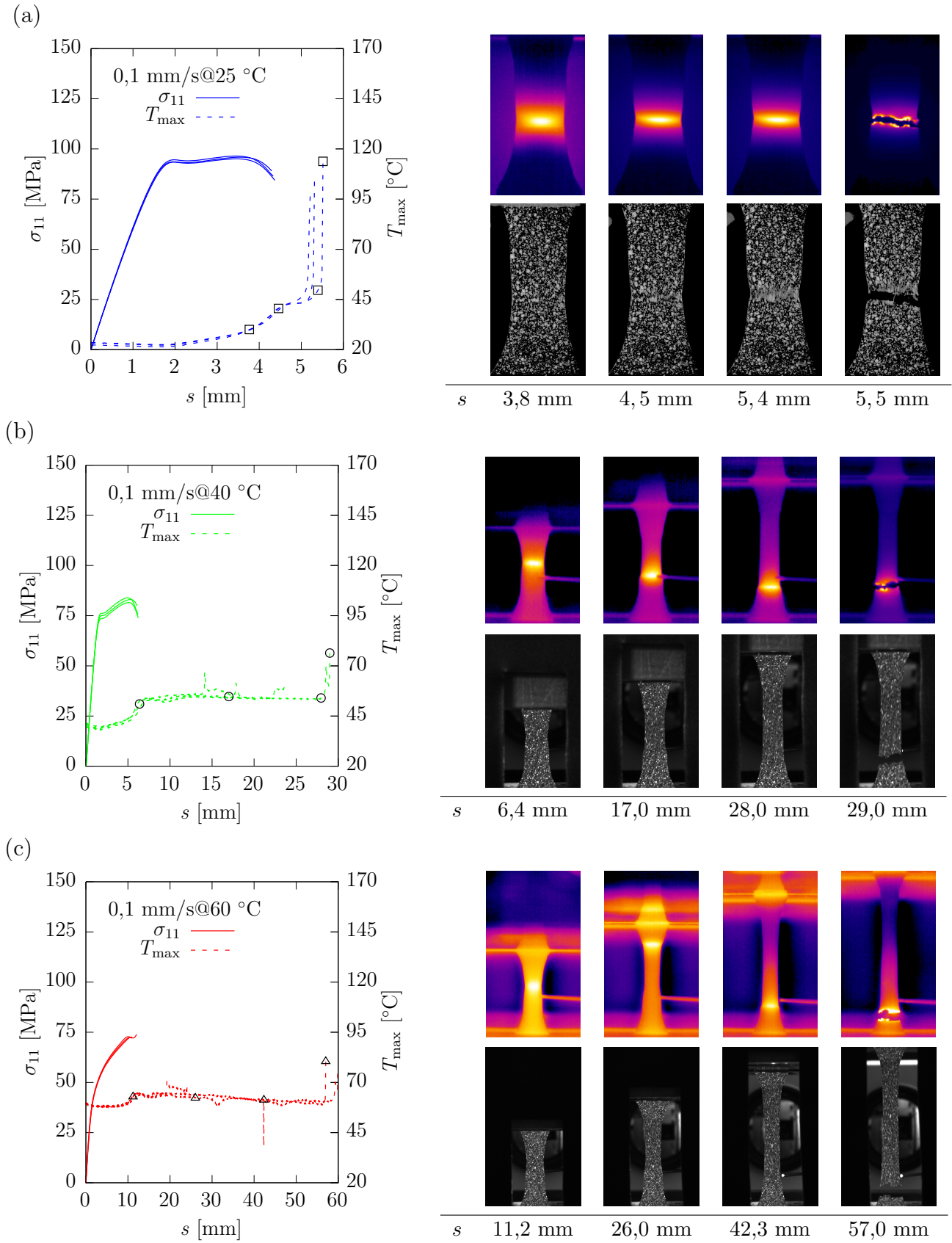


Abbildung 3.16.: Deformationsverhalten bis Versagenseintritt im quasistatischen Zugversuch bei 0,1 mm/s und verschiedenen Umgebungstemperaturen (a) – (c), Gegenüberstellung von Thermografie- und Grauwertbildern

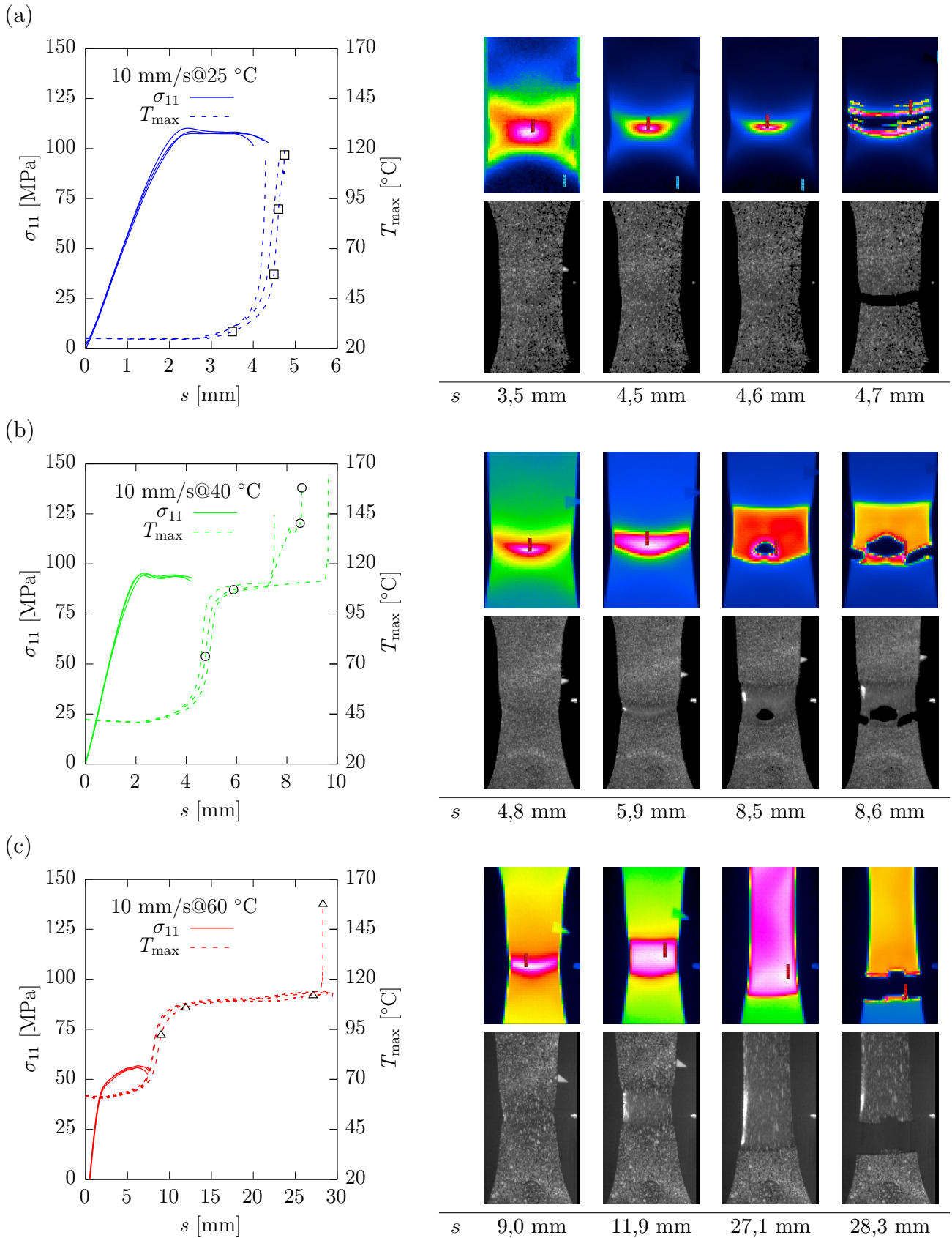


Abbildung 3.17.: Deformationsverhalten bis Versagenseintritt im hochdynamischen Zugversuch bei 10 mm/s und verschiedenen Umgebungstemperaturen (a) – (c), Gegenüberstellung von Thermografie- und Grauwertbildern

3. Materialcharakterisierung

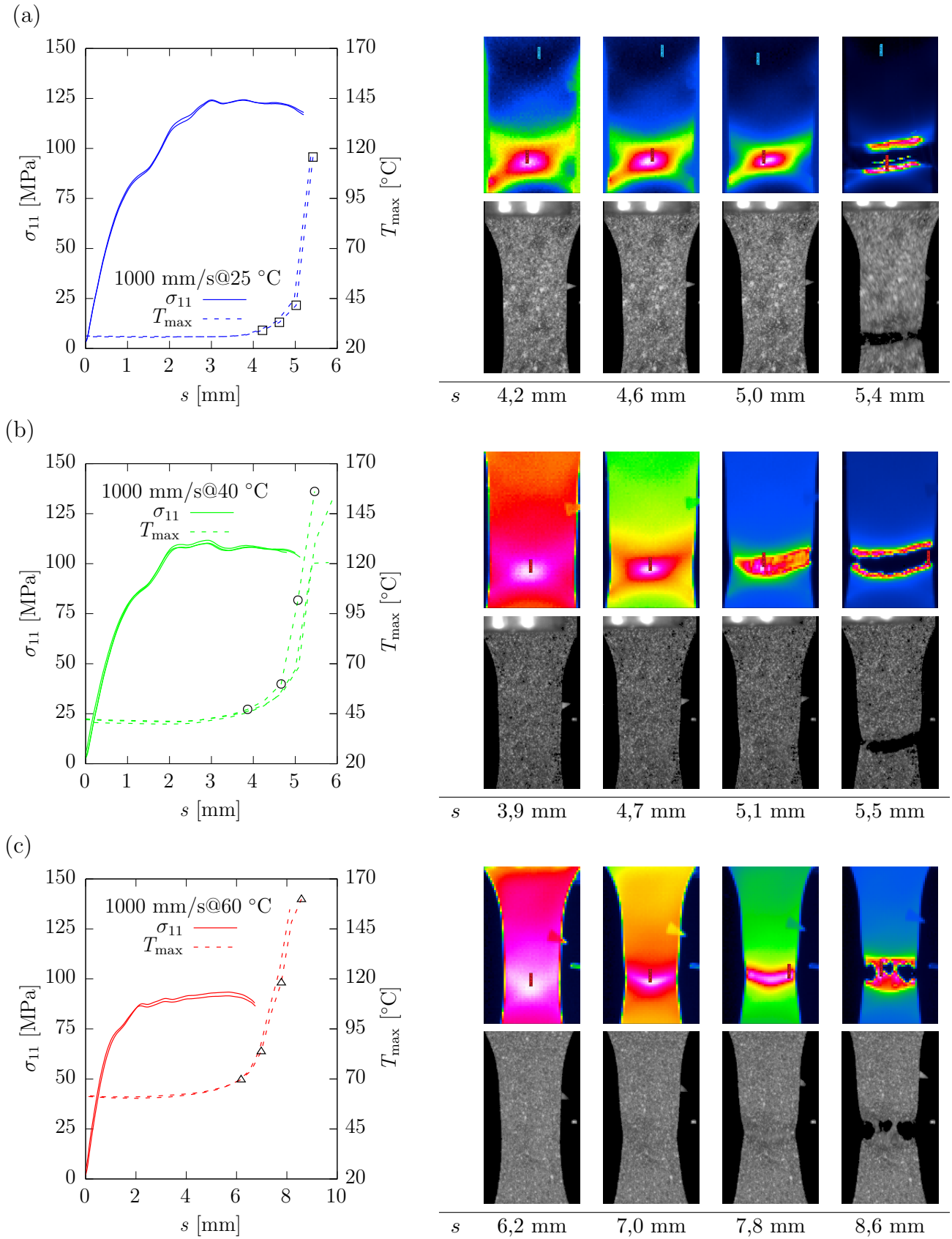


Abbildung 3.18.: Deformationsverhalten bis Versagenseintritt im hochdynamischen Zugversuch bei 1000 mm/s und verschiedenen Umgebungstemperaturen (a) – (c), Gegenüberstellung von Thermografie- und Grauwertbildern

3.1.4.2. Schubversuchsergebnisse

Die Schubversuche wurden mit konstanten Abzugsgeschwindigkeiten im Bereich von 0,01 mm/s bis 10 mm/s und bei Umgebungstemperaturen zwischen 25 °C und 60 °C durchgeführt. Die Abbildungen 3.19 und 3.20 enthalten jeweils auf der linken Seite die wahren Spannungs-Dehnungskurven (Diagramme (a) – (c)) und auf der rechten Seite jeweils die Temperatur-Dehnungskurven (Diagramme (d) – (f)) aus den durchgeführten quasistatischen und hochdynamischen Schubversuchen. Entsprechend dem Deformationsverhalten der Zugversuche ist auch bei den Schubversuchen eine ausgeprägte Dehnraten- und Temperaturabhängigkeit zu beobachten. Das Double-Yield Phänomen ist ansatzweise in Abbildung 3.19 bei den 25 °C und 40 °C Kurven mit den Abzugsgeschwindigkeiten von 0,01 mm/s (a) und 0,1 mm/s (b) zu erkennen. Das sich ändernde Deformationsverhalten im Glasübergangsbereich zeigt sich am deutlichsten in den wahren Spannungs-Dehnungskurven bei der Abzugsgeschwindigkeit von 0,1 mm/s in Abbildung 3.19 (b). Die Auswirkungen der thermischen Effekte auf die Probestemperatur konnten ebenfalls bei den Schubversuchen beobachtet werden. Im Falle der niedrigsten Abzugsgeschwindigkeit von 0,01 mm/s und der Umgebungstemperatur von 25 °C in Abbildung 3.19 (d) liegt noch eine isotherme Deformation vor. Bei den Versuchen in den Abbildungen 3.19 (e), (f) und 3.20 (b) tritt der irreversible thermische Effekt mit zunehmender Abzugsgeschwindigkeit durch eine lokale Erwärmung der Proben immer stärker hervor. Ein signifikanter Temperaturrückgang im linearen Deformationsbereich trat erwartungsgemäß nicht auf, da im Schubversuch keine für den thermoelastischen Effekt benötigte Volumenänderung erfolgt (siehe Gleichung (1.3)). Die Entwicklung der Dehnraten $\dot{\epsilon}_{12}$ ist in Abbildung 3.21 für die quasistatischen Schubversuche in Diagramm (a) und die hochdynamischen Schubversuche in Diagramm (b) in Form von Dehnraten-Dehnungskurven dargestellt. Ähnlich wie bei den Zugversuchen ist auch hier ein sprunghafter Anstieg der Dehnraten im linearen Deformationsbereich in Abhängigkeit des Glasübergangsbereichs zu verzeichnen.

Abschließend ist noch wichtig zu erwähnen, dass die Messung des Deformationsverhaltens im Schubversuch im Allgemeinen nicht trivial ist. Spätestens beim Einsetzen von plastischen Deformationen bei duktilen Materialien, wie zum Beispiel dem Polyamid 6, liegt bei der verwendeten Z-Probe kein reiner Schubzustand mehr vor. Zugspannungen überlagern mit zunehmender Deformation den Schubanteil. Unter diesem Gesichtspunkt sind die dargestellten Schubversuchsergebnisse mit einem gewissen Vorbehalt zu betrachten. Möglicherweise sind die lokalen Temperaturerhöhungen in den Proben, welche durch den irreversiblen thermischen Effekt hervorgerufen werden, zum Teil den unter Zugbeanspruchung erzeugten plastischen Deformationen zuzuordnen. Für die Ermittlung der Materialmodellparameter sind die Schubversuchsergebnisse daher nur eingeschränkt nutzbar. Darauf wird an entsprechender Stelle in Kapitel 5 nochmals eingegangen.

3. Materialcharakterisierung

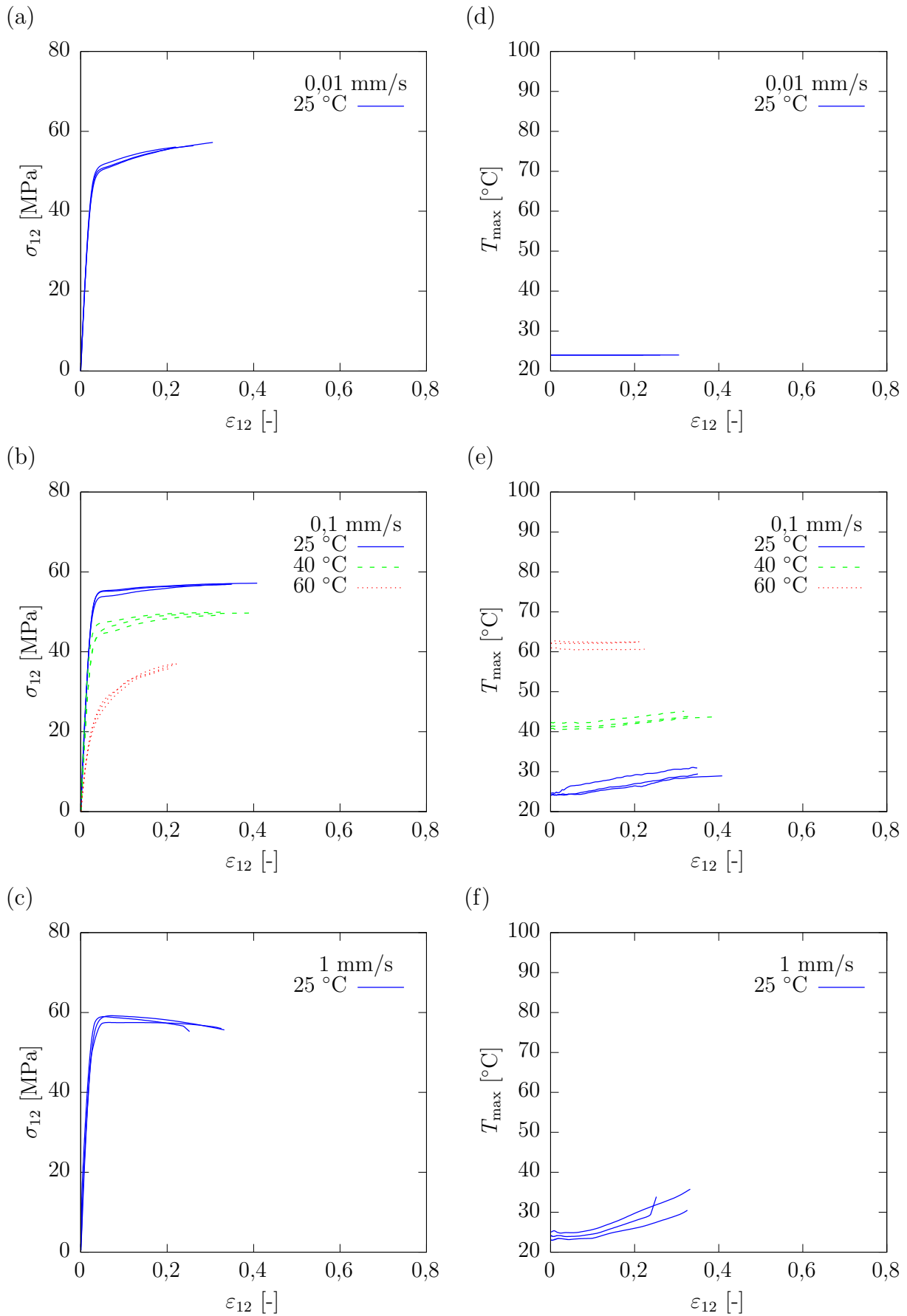


Abbildung 3.19.: Wahre Spannungs-Dehnungskurven (a)-(c) und Temperatur-Dehnungskurven (d)-(f) aus quasistatischen Schubversuchen

3.1. Thermomechanische Charakterisierung

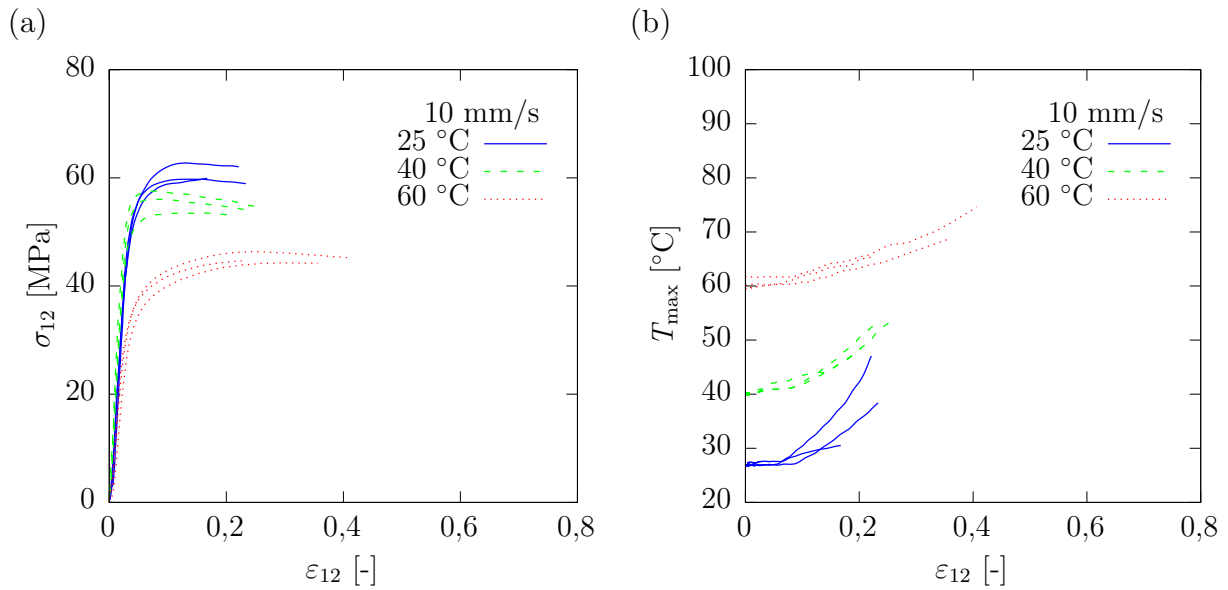


Abbildung 3.20.: Wahre Spannungs-Dehnungskurven (a) und Temperatur-Dehnungskurven (b) aus hochdynamischen Schubversuchen

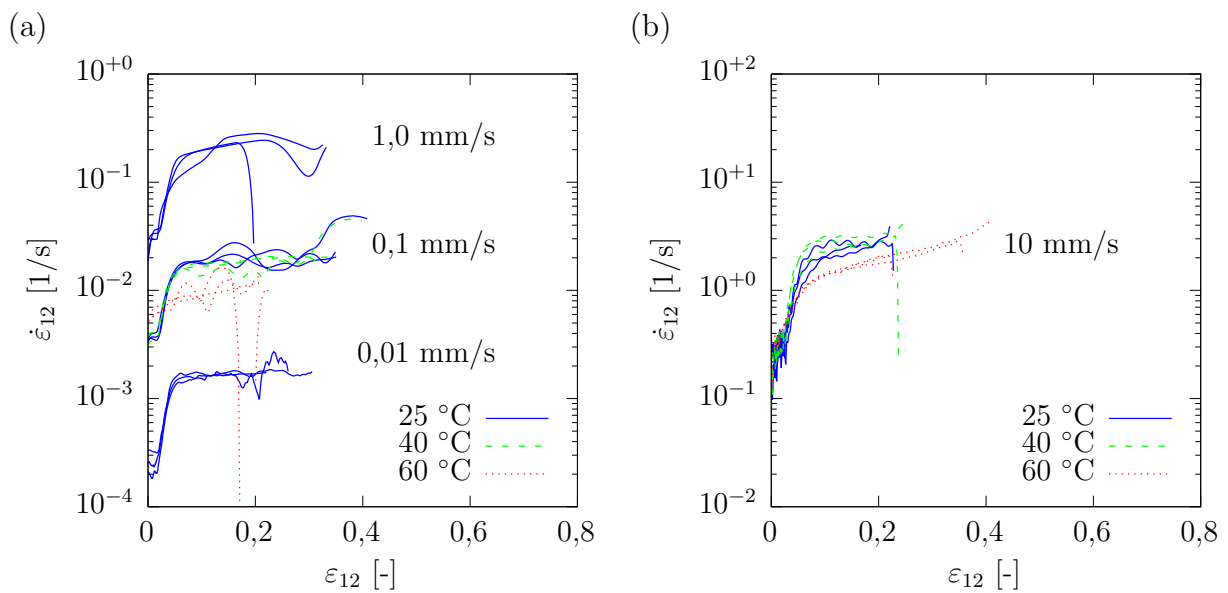


Abbildung 3.21.: Wahre Dehnraten-Dehnungskurven aus quasistatischen (a) und hochdynamischen (b) Schubversuchen

3. Materialcharakterisierung

3.1.4.3. Druckversuchsergebnisse

Die Druckversuche wurden mit zwei konstanten Abzugsgeschwindigkeiten von 0,001 mm/s und 0,01 mm/s und bei Umgebungstemperaturen zwischen 25 °C und 60 °C durchgeführt. Eine Aufzeichnung der Oberflächentemperatur mittels Infrarotthermografie hat in diesem Fall nicht stattgefunden. In Abbildung 3.22 sind die wahren Spannungs-Dehnungskurven in den Diagrammen (a) und (b) sowie die relativen Volumenänderungskurven in den Diagrammen (c) und (d) dargestellt.

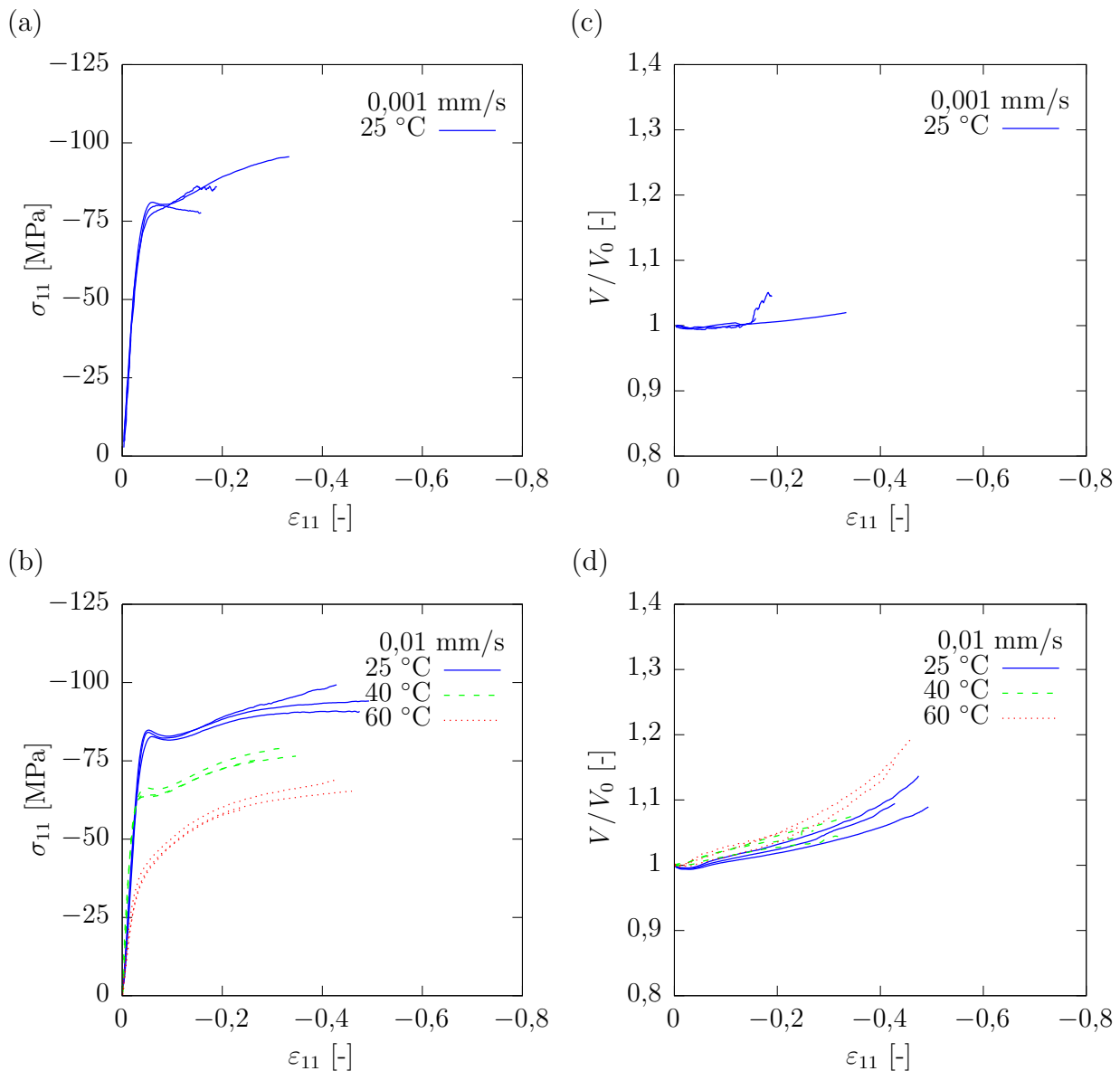


Abbildung 3.22.: Wahre Spannungs-Dehnungskurven (a)-(b) und relative Volumenänderungs-Dehnungskurven (c)-(d) aus quasistatischen Druckversuchen

Eine Dehnraten- und Temperaturabhängigkeit ist auch bei dieser Belastungsart zu verzeichnen. Bei den Umgebungstemperaturen von 25 °C und 40 °C ist eindeutig das Auftreten des

Double-Yield Phänomens in den wahren Spannungs-Dehnungskurven in Abbildung 3.22 (a), (b) zu erkennen. Ein nicht zu erwartendes Verhalten zeigt sich bei der relativen Volumenänderung in Abbildung 3.22 (c), (d). Nach einer minimalen Volumenabnahme im linearen Deformationsbereich tritt eine deutliche Volumenzunahme im nichtlinearen Verformungsbereich bei allen drei Umgebungstemperaturen auf. Eine Volumenzunahme unter Kompression bei Polyamid 6 ist möglicherweise mit dem Aufbau und der Struktur des Polymers oder durch Ungenauigkeiten bei der optischen lokalen Dehnungsmessung zu erklären. Die Entwicklung der Dehnraten $-\dot{\epsilon}_{11}$ längs zur Belastungsrichtung sowie $\dot{\epsilon}_{22}$ quer zur Belastungsrichtung in Form von Dehnraten-Dehnungskurven sind in den Diagrammen (a) und (b) der Abbildung 3.23 zu sehen. Ein sprunghafter Anstieg der Dehnraten im linearen Deformationsbereich ist auch bei den Druckversuchen sichtbar. Eine Abschwächung dieses Verhaltens mit zunehmender Temperatur fällt im Vergleich zu den Zug- und Druckversuchen wesentlich geringer aus.

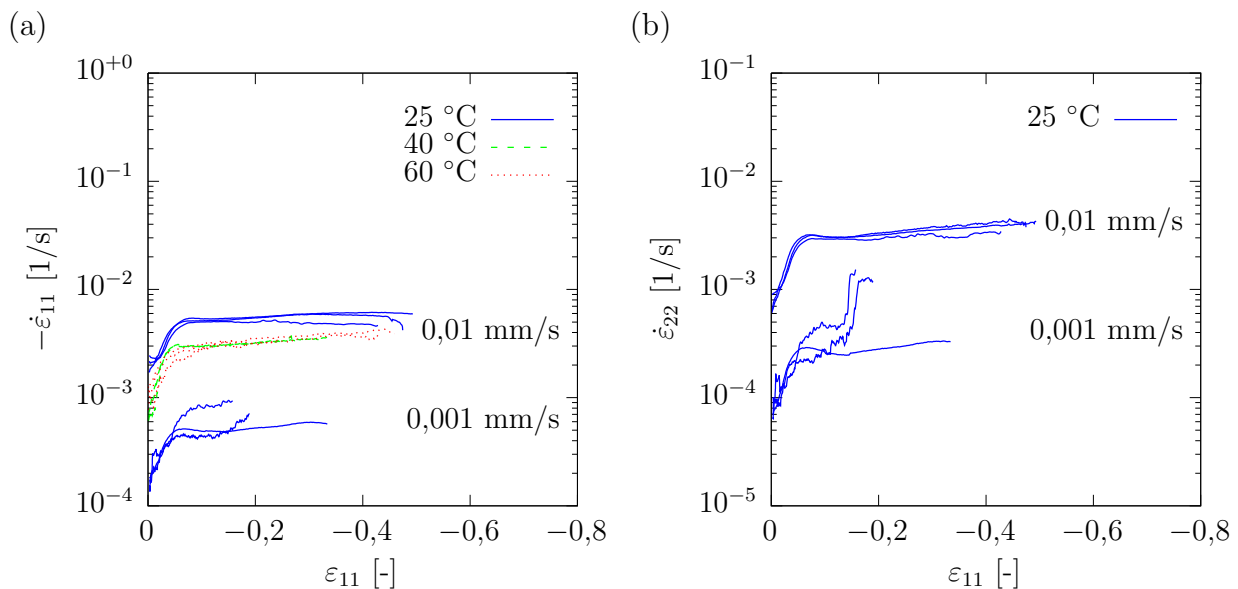


Abbildung 3.23.: Wahre Dehnraten-Dehnungskurven aus quasistatischen Druckversuchen, längs (a) und quer (b) zur Belastungsrichtung

3.1.4.4. Ergebnisbilanz

Die in diesem Abschnitt vorgestellten und diskutierten Ergebnisse aus der thermomechanischen Charakterisierung zeigen, dass das Materialverhalten von Polyamid 6 sehr komplex ist. Äußere Einflussfaktoren wie die Belastungsgeschwindigkeit und die Umgebungstemperatur wirken sich signifikant auf das Deformations- und Versagensverhalten aus. Hinzu kommt, dass der Werkstoff im anwendungstechnisch relevanten Temperaturbereich einen Glasübergangsbereich aufweist, der sowohl das lineare als auch das nichtlineare Deformationsverhalten stark beeinflusst. Im untersuchten Geschwindigkeits- und Temperaturbereich konnte ein unterschiedliches Deformations- und Versagensverhalten entsprechend der in Abbildung 2.6 gezeigten Ty-

3. Materialcharakterisierung

pen c bis e festgestellt werden. Durch die Aufzeichnung des Temperaturfelds in Zug- und Schubversuchen ist es zudem möglich, mit zunehmender Verformungsgeschwindigkeit eine steigende Probenerwärmung durch innere Reibungsvorgänge nachzuweisen. Beim Eintritt in den nichtlinearen Deformationsbereich steigt die Temperatur aufgrund des irreversiblen thermischen Effekts in den Proben teilweise lokal sehr stark an, was zu lokalen Unterschieden im Deformations- und Versagensverhalten führt. Dies ist vor allem dann zu beobachten, wenn Versuche bei hohen Geschwindigkeiten und Umgebungstemperaturen unterhalb des Glasübergangsbereichs stattfinden. Bei diesen Versuchen wurde zum Teil im Versuchsverlauf durch die Erwärmung der Glasübergangstemperaturbereich erreicht oder durchlaufen. Bei Versuchen, die bei sehr geringen Geschwindigkeiten durchgeführt wurden, war eine ausreichende Abfuhr der Wärmeenergie über die Probenoberfläche möglich, so dass es zu keinem signifikanten Temperaturanstieg kam. Auch Versuche bei hohen Abzugsgeschwindigkeiten und höheren Umgebungstemperaturen ($T > 25 \text{ °C}$) zeigten lokale Temperaturerhöhungen. Zudem konnte mit Hilfe der durchgeführten Versuche das Auftreten des Double-Yield-Phänomens bestätigt werden. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass die dargestellten Versuchsergebnisse das bereits in Kapitel 2.1 aufbereitete Grundlagenwissen zum Deformationsverhalten von Polyamid 6 bestätigen. Gleiches gilt für die Ergebnisse der Literaturrecherche zu den thermischen Effekten in Abschnitt 1.2.

3.2. Thermische Analysen

Zur Durchführung einer voll gekoppelten thermomechanischen Simulation unter Einbeziehung der Wärmeleitungsgleichung werden neben den temperatur- und dehnratenabhängigen Spannungs-Dehnungskurven aus Abschnitt 3.1 noch weitere Kenngrößen benötigt. Hierzu gehören der thermische Ausdehnungskoeffizient α , die Wärmeleitfähigkeit κ und die spezifische Wärmekapazität c . In den folgenden Abschnitten werden die thermischen Analyseverfahren zur Bestimmung dieser Kennwerte kurz erläutert und die jeweiligen Messergebnisse dargestellt. Alle in Abschnitt 3.2 vorgestellten Messungen wurden bei der Robert Bosch GmbH, Zentralbereich Forschung und Vorausentwicklung, Abteilung Produktionstechnik Kunststoffe CR/APP durchgeführt.

3.2.1. Thermomechanische Analyse

Bei Kunststoffen wird zur Messung des linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten üblicherweise die thermomechanische Analyse (TMA) eingesetzt. In thermischen Übergangsbereichen (siehe auch Unterabschnitt 2.1.2) ändert sich der thermische Ausdehnungskoeffizient aufgrund der sich ändernden Molekülbeweglichkeit und sollte daher auch in Abhängigkeit der Temperatur T im relevanten Bereich gemessen werden. Bei der TMA wird eine kleine planparallele

zylindrische oder quaderförmige Probe zunächst über einen Quarzstempel mit einer geringen Auflast von wenigen Gramm beaufschlagt. Die Probe befindet sich in einem Ofen und wird mit einer geringen Aufheizrate von wenigen Kelvin pro Minute aufgeheizt. Die Messung der Längenänderung $L - L_0$ der Probe mit der Ausgangslänge L_0 erfolgt über ein induktives Messsystem. Der differentielle thermische Längenausdehnungskoeffizient $\alpha_{\text{th,diff}}$ ist als lokale Steigung der Tangente an die Kurve $\Delta L/L_0$ definiert und kann über die Gleichung

$$\alpha_{\text{th,diff}} = \frac{1}{L_0} \frac{dL}{dT} \quad (3.13)$$

berechnet werden. In der Simulationssoftware Abaqus wird jedoch der globale oder technische Ausdehnungskoeffizient als Eingabegröße benötigt. Dieser bezieht sich immer auf eine Referenztemperatur T_{ref} , bei der die Länge der Probe L_0 entspricht. Der globale thermische Ausdehnungskoeffizient stellt die Sekante mit Ursprung im Punkt $\Delta L/L_0 = 0$ und $T = T_0$ an die Kurve $\Delta L/L_0$ dar und kann mit Hilfe der Gleichung

$$\alpha_{\text{th}} = \frac{1}{L_0} \frac{L - L_0}{T - T_{\text{ref}}} \quad (3.14)$$

angegeben werden.

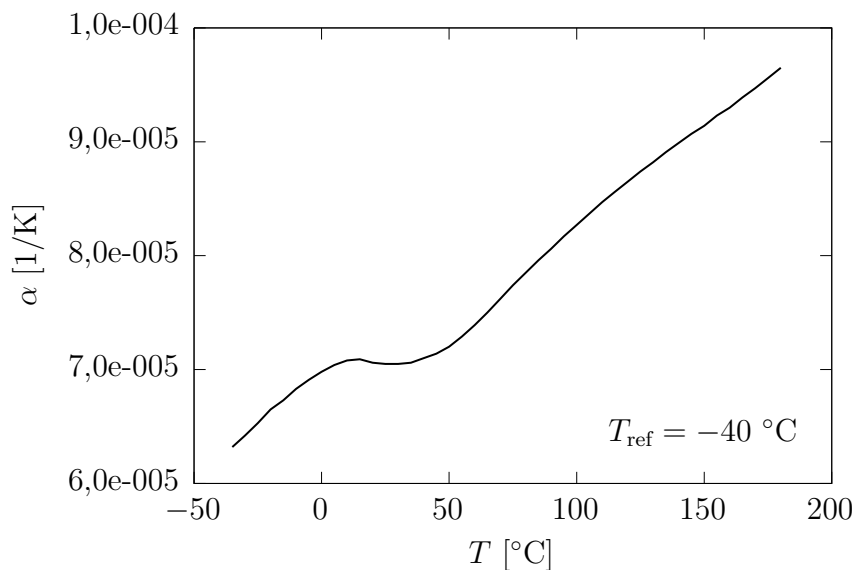


Abbildung 3.24.: Globaler temperaturabhängiger linearer thermischer Ausdehnungskoeffizient von Polyamid 6 (trocken)

Eine detaillierte Beschreibung der Analyseverfahren ist zum Beispiel in [35] gegeben. Für das in dieser Arbeit untersuchte Polyamid 6 wurde eine quaderförmige Probe mit den Abmessungen von $5 \times 5 \times 2 \text{ mm}^3$ aus einem spritzgegossenen Plattenhalbzeug heraus präpariert. Die Messung erfolgte mit einem thermomechanischen Analysator vom Typ EXSTAR6000 TMA/SS des

3. Materialcharakterisierung

Herstellers Seiko Electronics. Während der Messung wurde die Probe mit einer Auflast von 10 g beaufschlagt. Es erfolgte im ersten Lauf eine Aufheizung von -60 °C auf 205 °C mit der Heizrate 5 °C/min , anschließend im zweiten Lauf eine Abkühlung von 205 °C auf 20 °C mit der Abkühlrate von 30 °C/min . Das Messergebnis ist in Form des globalen thermischen Ausdehnungskoeffizienten α bezogen auf die Referenztemperatur $T_{\text{ref}} = -40\text{ °C}$ im Temperaturbereich zwischen -40 °C und 180 °C in Abbildung 3.24 dargestellt.

3.2.2. Dynamische Differenzkalorimetrie

Die dynamische Differenzkalorimetrie (DSC) wird unter anderem zur Bestimmung der spezifischen Wärmekapazität c eingesetzt. In der Praxis kommen dabei zwei unterschiedliche Messmethoden zum Einsatz [35]. Bei der Wärmestromdifferenzkalorimetrie (Heat Flux DSC) befinden sich zwei linsengroße Tiegel mit der Probe und einem Referenzmaterial gemeinsam in einem zylindrischen Ofen, der mit einer konstanten Heizrate erwärmt wird. Dabei zeigen sich Unterschiede in den Temperaturverläufen zwischen Probe und Referenzmaterial aufgrund der unterschiedlichen spezifischen Wärmekapazitäten beider Materialien. Aus den zeitlichen Verläufen der zugeführten Wärmemenge und des Temperaturunterschieds kann anschließend die spezifische Wärmekapazität der Probe berechnet werden. Bei der Leistungskompensationskalorimetrie (Power Compensating DSC) hingegen werden beide Tiegel jeweils mit einem eigenen Heizelement versehen. Durch eine Regelung erfolgt der Aufheizvorgang derart, dass sich im Versuchsverlauf kein Temperaturunterschied zwischen Probe und Referenzmaterial einstellt. Gemessen wird die zum Temperatúrausgleich der beiden Tiegel benötigte Heizleistung. Aus der zugeführten Wärmemenge $Q(T)$ kann über die Beziehung

$$c = \frac{1}{m} \frac{dQ}{dT} \quad (3.15)$$

die temperaturabhängige spezifische Wärmekapazität c der eingewogenen Probe mit der Masse m berechnet werden. Die Messung der spezifischen Wärmekapazität des hier betrachteten Polyamid 6 erfolgte mit dem Analysegerät DSC7 der Firma Perkin Elmer, welches auf dem Leistungskompensationsverfahren basiert. Die Probe wurde im Temperaturbereich zwischen -10 °C und 200 °C mit einer Aufheizrate von 20 K/min unter einer Stickstoffatmosphäre durchgeführt. Die Blocktemperatur betrug während der Messung -45 °C . In Abbildung 3.25 ist die spezifische Wärmekapazität des untersuchten Polyamid 6 im Temperaturbereich zwischen 0 °C und 190 °C dargestellt. Der Glasübergangsbereich ist im Kurvenverlauf als Stufe zwischen 50 °C und 70 °C deutlich erkennbar.

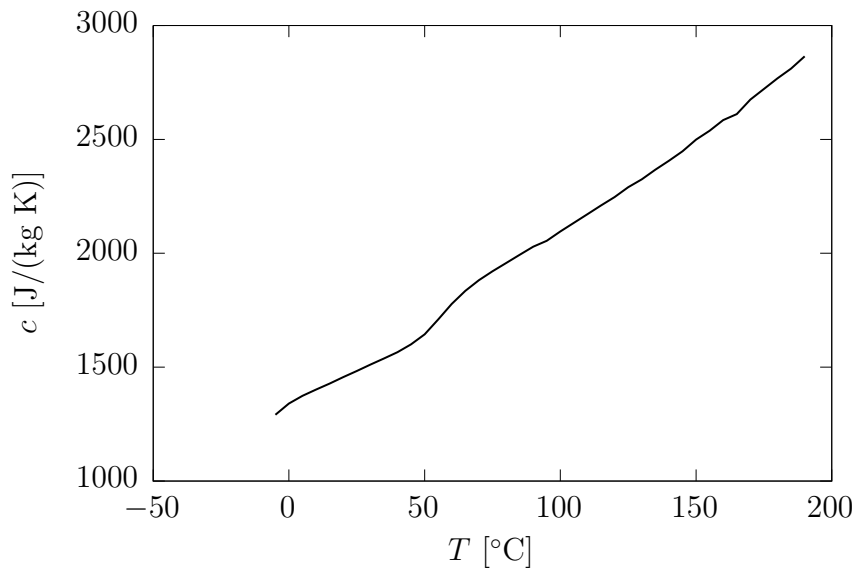


Abbildung 3.25.: Temperaturabhängige spezifische Wärmekapazität von Polyamid 6 (trocken)

3.2.3. Laser Flash Analyse

Die Laser Flash Analyse (LFA) ist ein nichtstationäres Prüfverfahren zur Messung der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeiten von festen und flüssigen Werkstoffen. Im Vergleich zu stationären Messverfahren sind die Messungen mit der LFA-Methode weniger zeitaufwändig, weisen jedoch auch eine geringere Messgenauigkeit auf [35]. Im vorliegenden Fall kam zur Messung der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit κ von Polyamid 6 der Analysator LFA 447 NanoFlash des Herstellers Netzsch-Gerätebau GmbH zum Einsatz. Der Probekörper mit den Abmessungen von $12,7 \times 12,7 \times 2 \text{ mm}^3$ wurde aus einem spritzgegossenen Plattenhalbzeug heraus präpariert. Die Proben werden in dem Analysator mit Hilfe einer Heizung auf die gewünschte Temperatur gebracht. Ein Wärmepuls, welcher in dem LFA 447 durch eine Xenon Blitzröhre erzeugt wird, bringt auf der Unterseite der Kunststoffprobe eine definierte Wärmemenge ein. Auf der gegenüberliegenden Seite der Probe misst ein Infrarot-Detektor den zeitlichen Temperaturverlauf als Antwortsignal. Aus diesem Antwortsignal wird mit Hilfe des mathematischen Modells

$$a = 0,1388 \frac{d^2}{t_{1/2}} \quad (3.16)$$

zunächst die Temperaturleitfähigkeit a bestimmt. Bei der Größe d handelt es sich um die Probendicke und bei $t_{1/2}$ um die Halbzzeit (Zeitwert auf halber Signalthöhe bezogen auf ΔT_{\max}) [74]. Die Wärmeleitfähigkeit κ kann anschließend mit der Gleichung

$$\kappa = a\rho c \quad (3.17)$$

3. Materialcharakterisierung

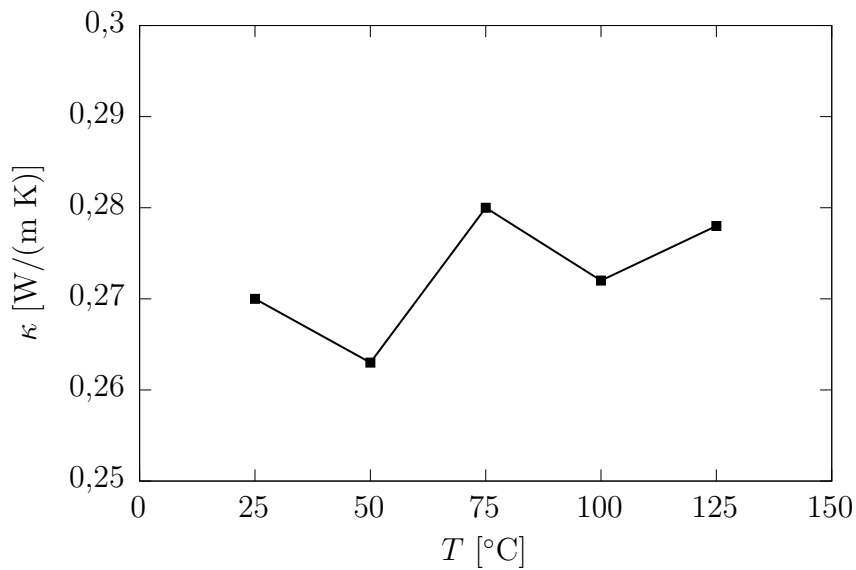


Abbildung 3.26.: Temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit von Polyamid 6 (trocken)

berechnet werden. Darin ist ρ die Dichte und c die spezifische Wärmekapazität. Diese Größen sind in der Regel auch temperaturabhängig, wobei in der vorliegenden Arbeit für das Polyamid 6 eine konstante Dichte von 1150 kg/m^3 angenommen wurde. Die temperaturabhängige spezifische Wärmekapazität ist bereits aus dem vorherigen Unterabschnitt 3.2.2 bekannt. Die Messungen für das Polyamid 6 erfolgten im Temperaturbereich von 25 °C bis 125 °C in 25 °C Abständen. Die Messungen bei einer Temperatur wurden fünfmal wiederholt und daraus anschließend ein Mittelwert gebildet. Die Streuungen der Wiederholungsmessungen wurden nicht dokumentiert. Die Mittelwertkurve der Wärmeleitfähigkeit im gemessenen Temperaturbereich ist in Abbildung 3.26 gezeigt.

4. Materialmodellierung

Das vorliegende Kapitel beginnt mit einer kurzen Einführung und Begründung der Auswahl des Materialmodells. Anschließend werden die mehrachsigen Konstitutivgleichungen hergeleitet. Materialspezifische einachsige Modellerweiterungen speziell für das Polyamid 6 und die Anpassung deren Parameter auf Basis der experimentellen Daten folgen. Der letzte Abschnitt des Kapitels beschreibt die Energiequellterme, welche zur Berücksichtigung der thermischen Effekte in der Energiegleichung berücksichtigt werden müssen.

4.1. Anforderungen an das Materialmodell

Die in Abschnitt 3.1.4 dargestellten Ergebnisse der experimentellen Materialcharakterisierung zeigen, dass das Deformationsverhalten von Polyamid 6 sehr komplex ist und signifikant von verschiedenen Einflussgrößen abhängt. Die Haupteinflussgrößen sind die Temperatur und die Dehnrate, sowohl im Anfangsbereich kleiner elastischer Deformationen als auch im Bereich großer inelastischer Deformationen. Durch die thermischen Effekte kommt es mitunter zu großen Temperaturänderungen während eines Belastungsvorganges. Im Falle des Polyamid 6 kann sich dabei der thermische Zustandsbereich ändern, was mit einer verstärkten Änderung der mechanischen Eigenschaften einhergeht, siehe zum Beispiel Abbildung 2.5. Des Weiteren wurde bei Polyamid 6 im Bereich inelastischer Deformationen das Auftreten von zwei Fließpunkten beobachtet (Double-Yielding-Phänomen). Abschließend seien noch die Zug-, Schub-, Druckasymmetrie sowie die plastische Kompressibilität genannt, welche sich im inelastischen Deformationsverhalten deutlich bemerkbar machen. Das ausgewählte Materialmodell soll nun möglichst gut die genannten Materialeigenschaften mit Hilfe phänomenologischer Ansätze beschreiben.

Bei der Simulation von kurzzeitdynamisch belasteten Bauteilen aus unverstärkten duktilen Thermoplasten wurden bereits erfolgreich elastisch-viskoplastische Materialmodelle entwickelt und eingesetzt, siehe [44, 48, 51]. Da im Rahmen dieser Anwendungsfälle die Berechnung der maximalen Verformung bis hin zum Versagen oder die maximale Energieaufnahme im Vordergrund stehen, spielt die präzise Beschreibung von Entlastungsvorgängen üblicherweise keine große Rolle. Deshalb kommen viskoelastische Materialmodelle hier seltener zur Anwendung. Im

4. Materialmodellierung

Rahmen dieser Arbeit wird daher ebenso auf den Typ eines elastisch-viskoplastischen Materialmodells zurückgegriffen. Durch die Berücksichtigung der thermischen Effekte und der damit einhergehenden Wärmeströmungen im Material muss notwendigerweise eine thermisch-mechanische Kopplung der Bilanzgleichungen in der Simulation erfolgen. Die Materialgleichungen sind zudem temperaturabhängig zu formulieren. Wie bereits erwähnt wurde, werden phänomenologische Ansätze verwendet, obgleich bekannt ist, dass das Deformations- und Versagensverhalten von Polyamid 6 durch mikromechanische Deformationsprozesse stark beeinflusst wird, siehe [66]. Diese mikromechanischen Prozesse zeigen durch die teilkristalline Mikrostruktur des Materials auf der Mikroebene auch eine Richtungsabhängigkeit (Anisotropie), die sich im makroskopischen Verhalten teilweise auch bemerkbar machen kann. Eine mikromechanisch basierte Modellierung ist jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht vorgesehen. Eine besondere Herausforderung bei der Aufstellung des Materialmodells für das Polyamid 6 stellt die Beschreibung des Materialverhaltens im thermischen Übergangsbereich dar. Hierfür mussten neue Ansätze zur Beschreibung des dehnraten- und temperaturabhängigen elastischen Verhaltens sowie der dehnraten- und temperaturabhängigen Verfestigungsfunktion entwickelt werden, siehe Unterabschnitte 5.1 und 5.2.1. Die neue Verfestigungsfunktion berücksichtigt ebenfalls das Double-Yield-Phänomen. Die Beschreibung der Zug-, Schub- und Druckasymmetrie erfolgt über eine druckabhängige Fließflächenformulierung sowie über ein druckabhängiges plastisches Potential, siehe Unterabschnitte 4.2.2.1 und 4.2.2.2. Die Abbildung der thermischen Effekte im Materialmodell wurde durch die Verwendung zweier Energiequellterme realisiert, siehe Abschnitt 4.3. Das Materialmodell wurde als Benutzeroutine in das Finite-Elemente Softwarepaket ABAQUS/EXPLICIT implementiert.

4.2. Konstitutivgesetz

Wie bereits in Unterabschnitt 2.2.3 erwähnt, spielen die Materialeigenschaften erst bei der Verknüpfung der kinematischen mit den kinetischen Größen eine Rolle. Diese Verknüpfung erfolgt über die sogenannten Konstitutivgleichungen oder Materialmodelle. Hierbei ist es wichtig zu erwähnen, dass die Deformationen in unverstärkten Thermoplasten, wie zum Beispiel dem untersuchten Polyamid 6, unter den gegebenen kurzzeitdynamischen Belastungen beträchtlich werden können. Die eingesetzte Software ABAQUS/EXPLICIT verwendet bereits standardmäßig numerische Algorithmen zur Beschreibung großer Deformationen. Die Implementierung von inelastischen Materialmodellen mit Hilfe der softwarespezifischen Benutzeroutine VUMAT kann hierbei auf zwei verschiedene Weisen erfolgen:

1. Das Materialmodell wird direkt in Abhängigkeit des Deformationsgradienten \mathbf{F} formuliert. Die Zerlegung der Gesamtdeformation erfolgt multiplikativ in den elastischen und inelastischen Anteil. Diese Art der Materialmodellierung kann sich aufgrund der multipli-

kativen Zerlegung des Deformationsgradienten vor allem für inelastische Materialien als sehr komplex und damit sehr aufwendig erweisen.

2. Alternativ kann das Materialmodell in einem sogenannten logarithmischen Verzerrungsraum formuliert werden. Die Zerlegung der Gesamtverzerrungen kann hierbei additiv erfolgen, wie bei der Beschreibung kleiner Deformationen mit linearisierten Verzerrungstensoren. Voraussetzung ist die Verwendung des bereits in Unterabschnitt 2.2.2 erwähnten logarithmischen oder Hencky'schen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}$. Aufgrund der möglichen additiven Zerlegung des Verzerrungstensors bietet dieser Weg vor allem Vorteile bei der Formulierung von inelastischen Materialmodellen. Ein Nachteil dieser Methode gegenüber der ersten Methode kann sich jedoch durch eine verringerte Genauigkeit bei der Akkumulation der Verzerrungsinkremente mit fortschreitender Zeit ergeben, da das Inkrement des Verzerrungstensors iterativ approximiert wird [46]. Dieser Effekt tritt vor allem bei starken Scherungen zu Tage.

Zur Implementierung des Materialmodells im Rahmen dieser Arbeit wird der zweite Weg gewählt. Dazu erfolgt die Verknüpfung des Cauchy'schen Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$ mit dem Hencky'schen Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ durch das im Folgenden noch aufzustellende Materialmodell. Die Zerlegung des totalen Hencky'schen Verzerrungstensors erfolgt additiv in seinen elastischen, viskoplastischen und thermischen Anteil:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}. \quad (4.1)$$

4.2.1. Lineare Thermoelastizität

Der Ausgangspunkt zur Aufstellung des Materialmodells für die mehrachsige Beschreibung des Deformationsverhaltens von Polyamid 6 basiert auf dem isotropen linear elastischen Materialgesetz [2]

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} + \lambda(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}. \quad (4.2)$$

Die beiden elastischen Parameter λ und μ heißen Lamé-Koeffizienten. Die Lamé-Koeffizienten sind auf folgende Weise mit den elastischen Konstanten Elastizitätsmodul E und elastische Querkontraktionszahl ν verknüpft:

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}, \quad (4.3)$$

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}. \quad (4.4)$$

4. Materialmodellierung

Man erhält die additive Zerlegung der Gleichung (4.2) in einen volumetrischen und deviatorischen Spannungsanteil

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\mathbf{e}^{\text{el}} + \left(\frac{2}{3}\mu + \lambda\right)(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} \quad (4.5)$$

durch Einsetzen des ebenso additiv zerlegten elastischen Verzerrungstensors

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} = \mathbf{e}^{\text{el}} + \frac{1}{3}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}. \quad (4.6)$$

Hierbei beschreiben \mathbf{e}^{el} den deviatorischen und $\frac{1}{3}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}$ den volumetrischen Anteil des elastischen Verzerrungstensors. Alternativ zu den Lamé-Koeffizienten λ und μ können auch der Schubmodul

$$G = \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (4.7)$$

und der Kompressionsmodul

$$K = \frac{2}{3}\mu + \lambda = \frac{E}{3(1 - 2\nu)} \quad (4.8)$$

verwendet werden. Damit erhält man eine weitere Darstellung der Gleichung (4.2):

$$\boldsymbol{\sigma} = 2G\mathbf{e}^{\text{el}} + K(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}. \quad (4.9)$$

Eine Erweiterung von Gleichung (4.9) auf den nichtisothermen Fall bedeutet, dass die elastischen Modellkoeffizienten K und G temperaturabhängige Größen darstellen. Des Weiteren führt eine Änderung der Temperatur im Material zu thermischen Verzerrungen, welche bei isotrop elastischem Materialverhalten rein volumetrischer Natur sind. Die folgende Gleichung beschreibt den Tensor der thermischen Verzerrungen in Abhängigkeit der Temperatur T [21]:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}} = [\alpha_{\text{th}}(T - T_0) - \alpha_{\text{th,ini}}(T_{\text{ini}} - T_0)]\mathbf{I}. \quad (4.10)$$

Der zweite Term in Gleichung (4.10) ermöglicht die Annahme, dass keine initialen thermischen Verzerrungen bei einer vorgegebenen Anfangstemperatur T_{ini} vorliegen. Dieses ist vor allem dann relevant, wenn die Anfangstemperatur T_{ini} nicht der Referenztemperatur T_0 entspricht. Der lineare Wärmeausdehnungskoeffizient α_{th} ist in der Regel ebenfalls temperaturabhängig. Damit folgt für die Ratenform von Gleichung (4.10):

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{th}} = \left[\dot{\alpha}_{\text{th}}(T - T_0) + \alpha_{\text{th}}\dot{T} \right] \mathbf{I}. \quad (4.11)$$

Unter der Verwendung der additiven Zerlegung des totalen Verzerrungstensors (4.1) und der Vernachlässigung des viskoplastischen Verzerrungsanteils folgt nun das thermoelastische Materialgesetz zu

$$\boldsymbol{\sigma} = 2G\mathbf{e}^{\text{el}} + K((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}. \quad (4.12)$$

Wie in Abbildung 2.5 bereits dargestellt, zeigt das elastische Materialverhalten von Polyamid 6 neben der Temperaturabhängigkeit auch eine ausgeprägte Frequenz- beziehungsweise Dehnratenabhängigkeit. Üblicherweise wird ein solches Materialverhalten über ein viskoelastisches Materialmodell abgebildet. Im vorliegenden Fall wird diese zusätzliche Einflussgröße durch ein neu entwickeltes temperatur- und dehnratenabhängiges elastisches Teilmaterialmodell berücksichtigt. Die Herleitung und Anpassung der Funktionen für die elastischen Koeffizienten $E(\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}, T)$ und $\nu(\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}, T)$ werden in Unterabschnitt 5.1 beschrieben. Im Hinblick auf die Implementierung des Materialmodells als Benutzeroutine in ABAQUS/EXPLICIT wird nun noch die Ratenform der Gleichung (4.12) angegeben:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = 2G\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{el}} + K((\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{tot}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} + 2\dot{G}\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} + \dot{K}((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}. \quad (4.13)$$

Durch die Temperatur- und Dehnratenabhängigkeit der elastischen Koeffizienten kommen in der Ratengleichung (4.13) zwei zusätzliche Terme auf der rechten Seite hinzu, welche aus der Zeitableitung unter Anwendung der Kettenregel folgen.

4.2.2. Druckabhängige Thermoviskoplastizität

Der letzte Schritt bei der mehrachsigen Formulierung des Materialmodells ist nun der Übergang von dem linear thermoelastischen Materialmodell auf das linear thermoelastisch-thermoviskoplastische Materialmodell. Bei der Substitution der elastischen Verzerrungen gemäß der additiven Zerlegung (4.1) werden nun noch zusätzlich die viskoplastischen Verzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}$ berücksichtigt:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}. \quad (4.14)$$

Die additive Zerlegung ist ebenso für den deviatorischen Verzerrungstensor \mathbf{e}^{tot} durchführbar, wobei hier der thermische Anteil entfällt. Somit kann das linear thermoelastisch-viskoplastische Materialmodell durch die Gleichung

$$\boldsymbol{\sigma} = 2G(\mathbf{e}^{\text{tot}} - \mathbf{e}^{\text{vp}}) + K((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} \quad (4.15)$$

oder die entsprechende Ratengleichung

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\sigma}} = & 2G(\dot{\mathbf{e}}^{\text{tot}} - \dot{\mathbf{e}}^{\text{vp}}) + K((\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{tot}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{vp}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} \\ & + 2\dot{G}(\mathbf{e}^{\text{tot}} - \mathbf{e}^{\text{vp}}) + \dot{K}((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

beschrieben werden. Die irreversiblen viskoplastischen Verzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}$ sowie deren Raten $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{vp}}$ sind zunächst noch unbekannt. Die Herleitung der Gleichungen zu deren Ermittlung wird nachfolgend beschrieben.

4. Materialmodellierung

Der irreversible Verzerrungsanteil im Polyamid 6 soll durch ein isotropes druck- und temperaturabhängiges viskoplastisches Materialmodell abgebildet werden. Zur Beschreibung der irreversiblen Prozesse in Materialien können sogenannte innere Variablen eingeführt werden [2]. Das Konzept der inneren Variablen wird auch in dieser Arbeit verwendet. Bei inneren Variablen kann es sich um skalare sowie um tensorielle Größen handeln. So sind zum Beispiel die Komponenten des viskoplastischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VP}}$ innere Variablen. Weiterhin werden die im Material ablaufenden Verfestigungsmechanismen durch innere Variablen beschrieben. Bei einem isotropen Verfestigungsverhalten, welches auch in dieser Arbeit für das Polyamid 6 angenommen wird, ist bereits eine einzige skalarwertige innere Variable ausreichend. In der Regel handelt es sich dabei um die plastische oder viskoplastische Vergleichsdehnung. Eine kinematische Verfestigung hingegen erfordert bereits innere Variablen in Form eines Tensors zweiter Stufe, da mit ihr ein richtungsabhängiges Verfestigungsverhalten abgebildet werden kann [60]. Ebenso kann eine Schädigungsevolution mit skalarwertigen oder tensoriellen Größen von inneren Variablen beschrieben werden [57, 73].

Die Herleitung des hier verwendeten Viskoplastizitätsmodells erfolgt nun in drei Schritten:

1. Festlegung einer Fließfunktion Φ zur Beschreibung der Grenze zwischen elastischer (reversibler) und viskoplastischer (irreversibler) Deformation.
2. Aufstellung einer Evolutionsgleichung für den viskoplastischen Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VP}}$ auf Basis der viskoplastischen Fließregel und unter Verwendung eines plastischen Potentials Ψ .
3. Herleitung der Evolutionsgleichung für die skalarwertige innere Variable $\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}$ zur Beschreibung des Verfestigungsverhaltens.

4.2.2.1. Fließfunktion und Fließkriterium

Für einen mehrachsigen Beanspruchungszustand wird der Übergang zwischen einem reversiblen elastischen und einem irreversiblen plastischen oder viskoplastischen Deformationsverhalten durch eine Fließfläche im Spannungsraum beschrieben. Mathematisch betrachtet ist die Fließfläche eine Isofläche und verbindet verschiedene mehrachsige Spannungszustände im Spannungsraum mit einer zugehörigen skalaren Größe, der Vergleichsspannung σ_{V} . Durch die sogenannte Vergleichsspannungshypothese können mehrachsige Spannungszustände einer skalarwertigen Spannung zugeordnet und so zum Beispiel mit einer experimentell ermittelten einachsigen Spannung verglichen werden. In der klassischen Elastoplastizitätstheorie wird zum Beispiel das Verfestigungsverhalten durch die skalarwertige Vergleichsspannung σ_{F} in Abhängigkeit einer ebenfalls skalarwertigen plastischen Vergleichsdehnung $\varepsilon_{\text{V}}^{\text{pl}}$ definiert [23, 60].

Im Sonderfall der idealen Plastizität ist σ_F eine konstante Größe. Findet zum Beispiel eine isotrope Dehnungsverfestigung im Material statt, so ist dieses gleichbedeutend mit einer Erhöhung der Fließgrenze mit zunehmender plastischer Deformation. Die Fließfläche wird dabei entsprechend symmetrisch um ihren Ursprung aufgeweitet. Bei dem Polyamid 6 zeigt sich zusätzlich zur Dehnungsverfestigung noch eine Abhängigkeit der Fließgrenze von der plastischen Dehnrates und der Temperatur. Eine zunehmende Dehnrates verschiebt die Fließgrenze zu höheren Spannungswerten, wirkt also verfestigend. Eine Erhöhung der Temperatur dagegen wirkt entfestigend und verschiebt die Fließgrenze zu niedrigeren Spannungswerten.

Zur mathematischen Beschreibung der Grenze zwischen elastischer und viskoplastischer Deformation wird die folgende Fließfunktion Φ eingeführt:

$$\Phi = \sigma_V(\boldsymbol{\sigma}) - \sigma_F(\varepsilon_V^{VP}, \dot{\varepsilon}_V^{VP}, T). \quad (4.17)$$

Sie bestimmt die Differenz zwischen der skalarwertigen Vergleichsspannung σ_V eines in der Regel mehrachsigen Spannungszustands und der skalarwertigen Verfestigungsfunktion σ_F , welche als Materialeigenschaft aus experimentellen Daten gewonnen wird. Mit der Fließfunktion Φ läßt sich nun das Fließkriterium wie folgt angeben

$$\begin{aligned} \Phi < 0 &\implies \text{elastischer Bereich, d.h. kein viskoplastisches Fließen} \\ \Phi = 0 &\implies \begin{cases} \text{Fall 1: viskoplastisches Fließen bei Belastung} \\ \text{Fall 2: elastische Rückstellung bei Entlastung} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Das Kriterium besagt, dass bei Spannungszuständen innerhalb der Fließfläche nur eine elastische Deformation möglich ist. Bei Spannungszuständen, die auf der Fließfläche liegen, muss zwischen dem Belastungs- und Entlastungsfall unterschieden werden. Im Falle einer Belastung tritt viskoplastisches Fließen auf und bei Entlastung eine elastische Rückstellung der Deformation. Das bedeutet weiterhin, dass kein Spannungszustand außerhalb der Fließfläche liegen darf. Anzumerken ist in diesem Zusammenhang, dass sich dieser Modelltyp von den viskoplastischen Überspannungsmodellen vom PERZYNA-Typ unterscheidet, bei denen Spannungszustände auch außerhalb der Fließfläche existieren können [23].

Im nächsten Schritt wird die Auswahl einer geeigneten Vergleichsspannungshypothese zur Darstellung der Fließfläche diskutiert. In der Literatur gibt es eine Vielzahl von Vorschlägen zur Formulierung von Fließflächen auf Basis von Vergleichsspannungshypothesen [15, 52]. Allgemein kann eine Vergleichsspannungshypothese in Abhängigkeit aller Komponenten des Spannungstensors $\sigma_V = \sigma_V(\boldsymbol{\sigma})$ formuliert werden. Bei isotropen Materialien verwendet man jedoch üblicherweise eine Formulierung in Abhängigkeit der Hauptspannungen oder anderer Spannungsin-

4. Materialmodellierung

varianten. Die bereits in Unterabschnitt 2.2.3.3 vorgestellte von Mises Fließfläche ist aufgrund der Unabhängigkeit vom hydrostatischen Spannungsanteil zur Beschreibung der Zug-, Schub- und Druckasymmetrie im Polyamid 6 ungeeignet. Eine druckabhängige Vergleichsspannungshypothese wurde zum Beispiel von DRUCKER-PRAGER angegeben [25]. Diese Fließfläche hat die Form eines Kegels im Hauptspannungsraum. Die Vergleichsspannung σ_{DP} nach Drucker-Prager kann als Funktion der Spannungsinvarianten I_1 und J_2 oder in Abhängigkeit der skalierten Spannungsinvarianten p und q formuliert werden:

$$\sigma_{\text{DP}} = \sqrt{J_2} + \varphi I_1 = \frac{q}{\sqrt{3}} - 3\varphi p. \quad (4.19)$$

Dieser Kegel hat ebenfalls die Hydrostatenachse als Rotationsachse und wurde ursprünglich zur Formulierung des Fließkriteriums von Geomaterialien unter Schubbeanspruchung entwickelt und findet heute, teilweise in modifizierter Form, auch Verwendung bei der Beschreibung des Fließverhaltens von Polymeren [85]. Der Materialparameter φ wird als Kohäsionswinkel bezeichnet.

Eine deutlich größere Flexibilität bei der Beschreibung von Fließflächen bietet das nichtlineare Modell von BURZYŃSKI-YAGN, welches durch die Gleichung

$$3J_2 = \frac{\sigma_{\text{BY}} - \gamma_1 I_1}{1 - \gamma_1} \frac{\sigma_{\text{BY}} - \gamma_2 I_1}{1 - \gamma_2} \quad (4.20)$$

gegeben ist [3, 52]. Dieses Modell beschreibt Fließflächen in Abhängigkeit der beiden Spannungsinvarianten I_1 und J_2 und enthält die beiden Parameter γ_1 und γ_2 . Die Fließflächen nach VON MISES und nach DRUCKER-PRAGER sowie weitere bekannte Fließflächen sind als Sonderfälle mit dem BURZYŃSKI-YAGN-Modell darstellbar. Die Abbildung 4.1 zeigt zum Beispiel die Fließflächen von BALANDIN und BELTRAMI, jeweils zusammen mit der VON MISES Fließfläche. In Tabelle 4.1 sind die Parameterräume für fünf verschiedene Fließflächen angegeben. Da im Rahmen dieser Arbeit das BURZYŃSKI-YAGN-Modell in Abhängigkeit der skalierten Formen von I_1 und J_2 verwendet werden soll, wird Gleichung (4.20) auch in der Darstellung der von Mises Vergleichsspannung q und des hydrostatischen Drucks p angegeben:

$$q^2 = \frac{\sigma_{\text{BY}} + 3\gamma_1 p}{1 - \gamma_1} \frac{\sigma_{\text{BY}} + 3\gamma_2 p}{1 - \gamma_2}. \quad (4.21)$$

Zur Aufstellung der Fließfunktion nach Gleichung (4.17) muss die implizite quadratische Gleichung (4.21) noch nach der Vergleichsspannung σ_{BY} umgestellt werden:

$$\sigma_{\text{BY}} = -\frac{3(\gamma_1 + \gamma_2)}{2}p + \sqrt{\left(\frac{3(\gamma_1 - \gamma_2)}{2}\right)^2 p^2 + (1 - \gamma_1)(1 - \gamma_2)q^2}. \quad (4.22)$$

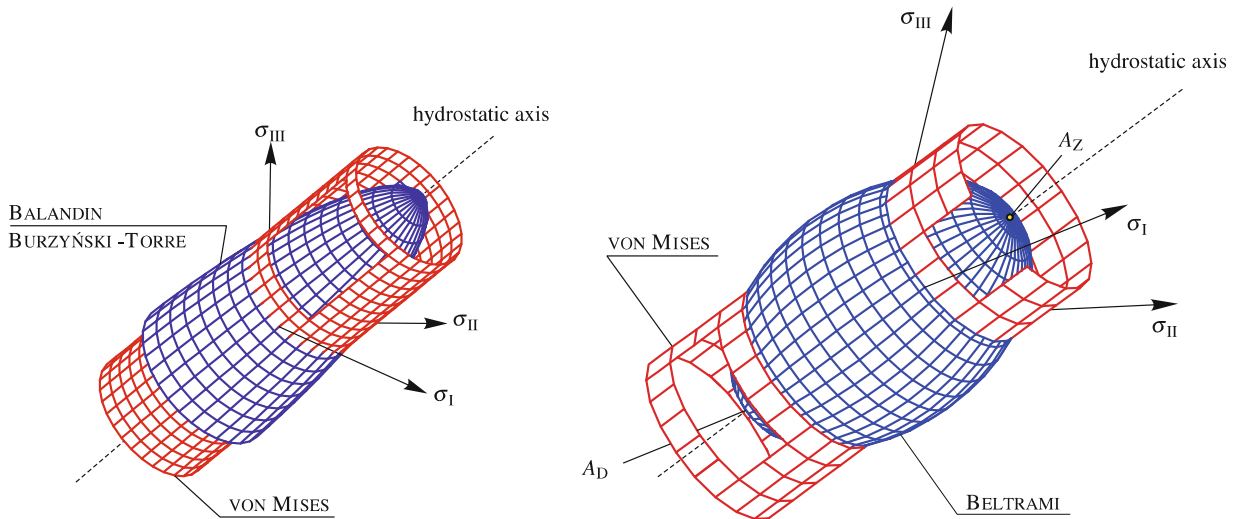


Abbildung 4.1.: Darstellung verschiedener Fließflächen mit dem BURZYŃSKI-YAGN-Modell im Hauptspannungsraum, aus [3]

Fließfläche (Vergleichsspannungshypothese)	Modellparameter γ_1, γ_2
VON MISES (Zylinder)	$\gamma_1 = \gamma_2 = 0$
DRUCKER-PRAGER (Kegel)	$\gamma_1 = \gamma_2 \in [0, 1]$
BALANDIN / BURZYŃSKI-TORRE (Paraboloid)	$\gamma_1 \in [0, 1], \gamma_2 = 0$
BELTRAMI (Ellipsoid)	$\gamma_1 = -\gamma_2, \gamma_2 \in [0, 1]$
SCHLEICHER (Ellipsoid)	$\gamma_1 \in [0, 1], \gamma_2 \in [-\infty, 0]$
BURZYŃSKI-YAGN (Hyperboloid)	$\gamma_1 \in [0, 1], \gamma_2 \in [0, \gamma_1]$

Tabelle 4.1.: Parameter für das BURZYŃSKI-YAGN-Modell zur Darstellung unterschiedlicher Fließflächen, Daten entnommen aus [3]

Es wird hier nur der positive Wurzel Ausdruck berücksichtigt, da ansonsten Vergleichsspannungen mit Werten kleiner Null auftreten. Eine weitere positive Eigenschaft der BURZYŃSKI-YAGN Fließfläche zeigt sich im Falle einer einachsigen Zugbeanspruchung. Wie in Tabelle 2.2 bereits dargestellt wurde, gilt für diesen Beanspruchungszustand der Triaxialitätsparameter $\eta = \frac{p}{q} = -\frac{1}{3}$. Ersetzt man nun in Gleichung (4.21) den hydrostatischen Druck durch $p = -\frac{1}{3}q$, so folgt nach Umstellung der Gleichung und Koeffizientenvergleich für die einachsige Zugbeanspruchung die Beziehung $\sigma_{BY} = q \equiv \sigma_+$. Damit ist die Vergleichsspannung nach Gleichung (4.22) für eine einachsige Zugbeanspruchung identisch mit der von Mises Vergleichsspannung und damit auch identisch mit der einachsigen Zugspannung σ_+ . Es folgt im Weiteren, dass die Fließfläche σ_{BY} im einachsigen Beanspruchungszustand unabhängig von den Parametern γ_1 und γ_2 ist. Diese spezielle Eigenschaft der BURZYŃSKI-YAGN Fließfläche zeigt sich später, bei

4. Materialmodellierung

der Identifikation der Modellparameter für die Fließfunktion

$$\Phi = \sigma_{\text{BY}}(p, q) - \sigma_{\text{F}}(\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}, \dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{VP}}, T) \quad (4.23)$$

als vorteilhaft. Die Verfestigungsfunktion σ_{F} kann nämlich direkt an die Daten der einachsigen Zugversuche angepasst werden, auch ohne die vorherige Kenntnis von γ_1 und γ_2 . Die bisher noch nicht definierte Verfestigungsfunktion σ_{F} wird in Unterabschnitt 5.2.1 speziell zur Beschreibung der Verfestigungseigenschaften für das untersuchte Polyamid 6 entwickelt und beschrieben.

4.2.2.2. Viskoplastische Fließregel

Die viskoplastische Fließregel

$$\dot{\varepsilon}^{\text{VP}} = \dot{\gamma} \mathbf{N} = \dot{\gamma} \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \quad (4.24)$$

beschreibt die zeitliche Entwicklung des viskoplastischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VP}}$, sobald in einem Belastungsvorgang die Fließbedingung $\Phi = 0$ erfüllt wird. Der Fließvektor \mathbf{N} gibt die Richtung des viskoplastischen Fließens vor und wird über ein plastisches Potential Ψ bestimmt. Wird die Fließfunktion Φ als plastisches Potential Ψ verwendet, handelt es sich um assoziiertes viskoplastisches Fließen. Im vorliegenden Fall wird ein plastisches Potential $\Psi \neq \Phi$ verwendet. Dieser Fall wird als nicht-assoziertes viskoplastisches Fließen bezeichnet. Der Fließvektor \mathbf{N} ist ein orthogonaler Vektor bezogen auf die Äquipotentialfläche des plastischen Potentials im Spannungsraum. Der sogenannte viskoplastische Multiplikator $\dot{\gamma}$ skaliert die Länge des Fließvektors.

Das plastische Potential kann, ebenso wie die Fließfunktion, ganz allgemein in Abhängigkeit des Spannungstensors, der Temperatur und der inneren Variablen formuliert werden. Wie sich im Rahmen der Materialcharakterisierung des untersuchten Polyamid 6 gezeigt hat, ist hier von einem kompressiblen plastischen Fließen auszugehen, siehe Abschnitt 3.1.4. Daher soll das plastische Potential in Abhängigkeit der beiden skalierten Spannungsinvarianten p und q formuliert werden. Ein bereits bekanntes plastisches Potential, welches zur Beschreibung des Fließverhaltens von kompressiblen Kunststoffschäumen und kompressiblen Thermoplasten eingesetzt wird, ist das Modell von ZHANG [3, 51]:

$$\Psi_{\text{ZH}} = \sqrt{q^2 + \omega p^2}. \quad (4.25)$$

Eine Darstellung der Äquipotentialfläche des Modells von ZHANG in der p - q -Ebene zeigt Abbildung 4.2. Geometrisch stellt diese Äquipotentialfläche einen Rotationsellipsoiden im Hauptspannungsraum und eine Halbellipse in der p - q -Ebene mit Mittelpunkt im Koordina-

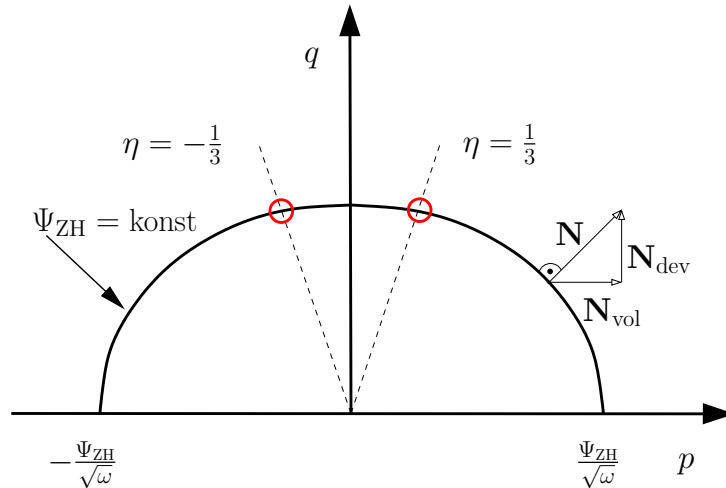


Abbildung 4.2.: Schematische Darstellung der Isofläche des plastischen Potentials Ψ_{ZH} in der p - q -Ebene

tenursprung dar. Die Längen der beiden Hauptachsen in p - und q -Richtung bestimmen sich zu $2\frac{\Psi_{ZH}}{\sqrt{\omega}}$ und $2\Psi_{ZH}$. Die Form der Ellipse wird durch den Materialparameter ω bestimmt. Um das kompressible plastische Fließen im Zug- und Druckbereich flexibler beschreiben zu können, wird jeweils ein separater Parameter ω_Z für den Zugbereich mit $p \in]-\infty, 0[$ und ω_D für den Druckbereich mit $p \in [0, \infty[$ eingeführt. Bei $p = 0$ gehen beide Teilfunktionen immer stetig ineinander über. Die Stützpunkte am Ort des einachsigen Zugs und des einachsigen Drucks, die später zur Bestimmung der beiden Materialparameter herangezogen werden, sind in Abbildung 4.2 durch rote Kreise markiert. Eine Anpassung des Potentials anhand der Messdaten erfolgt in Unterabschnitt 5.2.3. Einige wichtige Eigenschaften des vorgestellten Potentials werden im Folgenden noch kurz beschrieben.

Im reinen Schubzustand nimmt der hydrostatische Druck p den Wert Null an, siehe auch Tabelle 2.2. Aus der Theorie heraus darf also im reinen Schub nur inkompressibles (deviatorisches) Fließen stattfinden. Das wird durch das hier verwendete Potential automatisch erfüllt, da der Fließvektor in der p - q -Ebene bei $p = 0$ nur eine Komponente in q -Richtung aufweist. Im Zugbereich für $p < 0$ ist beim Polyamid 6 mit einer Volumenvergrößerung zu rechnen. Neben dem deviatorischen Anteil ist also ein positiver volumetrischer Anteil der plastischen Verzerrung zulässig. Im Druckbereich für $p > 0$ ist mit einer Volumenabnahme zu rechnen. Neben dem immer positiven deviatorischen Anteil ist also ein negativer volumetrischer Anteil zulässig. Beide zuletzt genannten Eigenschaften werden ebenfalls durch das Potential von ZHANG abgebildet. Würde das unter Unterabschnitt 4.2.2.1 vorgestellte Drucker-Prager-Modell als plastisches Potential verwendet, so wäre die Bedingung des inkompressiblen Fließens für den Schubzustand verletzt, da hier der Fließvektor auf der Kegeloberfläche immer auch eine volumetrische Komponente ungleich Null aufweist. Dazu findet, je nach Wahl eines

4. Materialmodellierung

positiven oder negativen Dilatationswinkels¹, im Zug- und Schubzustand ausschließlich eine Volumenzunahme oder eine Volumenabnahme statt.

Nachdem das plastische Potential als Funktion von p und q mit Gleichung (4.25) festgelegt ist, wird die Fließregel (4.24) durch Anwendung der Kettenregel umgeschrieben zu

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{vp}} = \dot{\gamma} \left(\frac{\partial \Psi_{\text{ZH}}}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{\sigma}} + \frac{\partial \Psi_{\text{ZH}}}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \right). \quad (4.26)$$

Ersetzt man hierin die partiellen Ableitungen

$$\frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = -\frac{1}{3} \mathbf{I} \quad (4.27)$$

und

$$\frac{\partial q}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \frac{3}{2q} \mathbf{s} \quad (4.28)$$

sowie

$$\frac{\partial \Psi_{\text{ZH}}}{\partial p} = \frac{\omega p}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}} \quad (4.29)$$

und

$$\frac{\partial \Psi_{\text{ZH}}}{\partial q} = \frac{q}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}}, \quad (4.30)$$

so erhält man

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{vp}} = \dot{\gamma} \left(-\frac{1}{3} \frac{\omega p}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}} \mathbf{I} + \frac{q}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}} \mathbf{n} \right). \quad (4.31)$$

Zusätzlich wurde mit

$$\mathbf{n} \equiv \frac{3}{2q} \mathbf{s} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{s}}{\|\mathbf{s}\|}. \quad (4.32)$$

noch ein euklidisch normierter deviatorischer Fließvektor eingeführt.

Als Zwischenbilanz lässt sich festhalten, dass mit dem thermoelastisch-thermoviskoplastischen Konstitutivmodell (4.16), der Fließregel (4.31) und der Fließfunktion (4.23) zunächst ein nicht-lineares Gleichungssystem, bestehend aus 13 Gleichungen mit den 14 unbekanntenen Größen $\sigma_{11}, \dots, \sigma_{13}, \varepsilon_{11}^{\text{vp}}, \dots, \varepsilon_{13}^{\text{vp}}, \gamma$ und $\varepsilon_{\text{V}}^{\text{vp}}$, für die Beschreibung des Materialverhaltens zur Verfügung steht. Die Komponenten des totalen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}}$ und des thermischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}$, beziehungsweise deren Raten, werden als gegeben vorausgesetzt. Die Temperatur T wurde hierbei nicht explizit als unbekannte Größe aufgeführt, da diese bei der Lösung des gesamten kontinuumsmechanischen Anfang- und Randwertproblems durch die Energieer-

¹Bei Verwendung des Drucker-Prager-Modells als plastisches Potential wird der Winkel φ nicht als Kohäsions-, sondern als Dilatationswinkel bezeichnet.

haltungsgleichung beschrieben wird. Im folgenden Unterabschnitt 4.2.2.3 wird nun noch eine Evolutionsgleichung für die innere Variable $\varepsilon_V^{\text{vp}}$ hergeleitet, mit der sich das gekoppelte Gleichungssystem vervollständigen lässt.

4.2.2.3. Rate der viskoplastischen Vergleichsdehnung

Wie bereits erwähnt, wird die akkumulierte viskoplastische Vergleichsdehnung $\varepsilon_V^{\text{vp}}$ als innere Variable zur Beschreibung des Verfestigungsverhaltens herangezogen. Zur Berechnung der zeitlichen Entwicklung dieser Vergleichsdehnung mit fortschreitender viskoplastischer Deformation wird eine Evolutionsgleichung für $\varepsilon_V^{\text{vp}}$ benötigt. Zur Herleitung der Evolutionsgleichung wird auf die Hypothese nach der Äquivalenz der plastischen Dissipationsarbeit zurückgegriffen, siehe zum Beispiel [20, 48]. Die Hypothese besagt, dass die plastische Arbeit, ausgedrückt durch das Produkt aus Vergleichsspannung σ_{BY} und viskoplastischer Vergleichsdehnrate $\dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}}$, äquivalent ist zu dem doppelten Skalarprodukt der entsprechenden tensoriellen Größen:

$$\sigma_{\text{BY}} \dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{vp}}. \quad (4.33)$$

Durch Einsetzen der Fließregel (4.31) in Gleichung (4.33) und Umstellung nach der viskoplastischen Vergleichsdehnrate folgt die Evolutionsgleichung zu:

$$\dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}} = \frac{\dot{\gamma}}{\sigma_{\text{BY}}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \left(-\frac{1}{3} \frac{\omega p}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}} \mathbf{I} + \frac{q}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}} \mathbf{n} \right). \quad (4.34)$$

Diese lässt sich durch Einsetzen von

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I} = -3p \quad (4.35)$$

und

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{n} = q \quad (4.36)$$

noch weiter vereinfachen zu:

$$\dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}} = \frac{\dot{\gamma}}{\sigma_{\text{BY}}} \sqrt{q^2 + \omega p^2} = \dot{\gamma} \frac{\Psi_{\text{ZH}}}{\sigma_{\text{BY}}}. \quad (4.37)$$

Damit ist nachgewiesen, dass der viskoplastische Multiplikator und die plastische Vergleichsdehnrate als innere Variable in direktem linearem Zusammenhang stehen. Es steht nun eine zusätzliche Gleichung zur Vervollständigung des im vorherigen Abschnitt beschriebenen nichtlinearen Gleichungssystems zur Verfügung. Aufgrund der einfachen Struktur der Gleichung (4.37) bietet es sich jedoch an, in der Fließregel (4.31) direkt den viskoplastischen Multiplikator durch

$$\dot{\gamma} = \dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}} \frac{\sigma_{\text{BY}}}{\Psi_{\text{ZH}}} \quad (4.38)$$

4. Materialmodellierung

zu ersetzen. Hier sei bereits darauf hingewiesen, dass die direkte numerische Integration dieses Gleichungssystems innerhalb der Benutzeroutine VUMAT mit einem hohen Aufwand verbunden wäre. In der Literatur sind zur Lösung solcher Gleichungssysteme effiziente Algorithmen beschrieben, siehe zum Beispiel [4]. Die Reduzierung des beschriebenen nichtlinearen Gleichungssystems und die numerische Implementierung wird in Kapitel 6 ausführlich dargestellt.

4.2.3. Übersicht Konstitutivgleichungen

In diesem Abschnitt werden die für das Materialmodell bisher hergeleiteten Gleichungen nochmal zusammengefasst:

- Additive Zerlegung des Hencky'schen Verzerrungstensors

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}$$

- Konstitutivgesetze
 - Thermoelastisch-thermoviskoplastisches Materialmodell

$$\boldsymbol{\sigma} = 2G(\mathbf{e}^{\text{tot}} - \mathbf{e}^{\text{vp}}) + K((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}$$

mit den dehnraten- und temperaturabhängigen Funktionen (siehe Unterabschnitt 5.1)

$$G(\dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}, T) = \frac{E(\dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}, T)}{2(1 + \nu(\dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}, T))}$$

und

$$K(\dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}, T) = \frac{E(\dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}, T)}{3(1 - 2\nu(\dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}, T))}.$$

- Verfestigungsfunktion (siehe Unterabschnitt 5.2.1)

$$\sigma_{\text{F}} = \sigma_{\text{F}}(\varepsilon_{\text{V}}^{\text{vp}}, \dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{vp}}, T)$$

- Fließfunktion

$$\Phi = \sigma_{\text{BY}}(p, q) - \sigma_{\text{F}}(\varepsilon_{\text{V}}^{\text{vp}}, \dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{vp}}, T)$$

mit der Vergleichsspannung (Fließfläche) nach BURZYŃSKI-YAGN

$$\sigma_{\text{BY}}(p, q) = -\frac{3(\gamma_1 + \gamma_2)}{2}p + \sqrt{\left(\frac{3(\gamma_1 - \gamma_2)}{2}\right)^2 p^2 + (1 - \gamma_1)(1 - \gamma_2)q^2}$$

- Evolutionsgleichungen der inneren Variablen

- Viskoplastische Fließregel

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{vp}} = \dot{\gamma} \left(-\frac{1}{3} \frac{\omega p}{\Psi_{\text{ZH}}} \mathbf{I} + \frac{q}{\Psi_{\text{ZH}}} \mathbf{n} \right)$$

mit dem plastischen Potential nach ZHANG (Funktion für ω , siehe Unterabschnitt 5.2.3)

$$\Psi_{\text{ZH}} = \sqrt{q^2 + \omega p^2}$$

- Isotropes Verfestigungsgesetz

$$\varepsilon_{\text{V}}^{\text{vp}} = \dot{\gamma} \frac{\Psi_{\text{ZH}}}{\sigma_{\text{BY}}}$$

- Fließkriterium in Form der Kuhn-Tucker Bedingungen

$$\Phi \leq 0, \quad \dot{\gamma} \geq 0, \quad \dot{\gamma} \Phi = 0$$

4.3. Energiequellterme

4.3.1. Reversibler thermischer Effekt

Wie in Unterabschnitt 4.2.1 beschrieben, führen lokale Temperaturänderungen zu thermisch induzierten Verzerrungen. Umgekehrt können durch äußere Kräfte verursachte elastische Verzerrungen zu lokalen Temperaturänderungen im Material führen. Dieses folgt direkt aus dem thermoelastischen Kopplungsterm in der Wärmeleitungsgleichung eines thermoelastischen Materials, siehe [18, 56]. Der thermoelastische Kopplungsterm P_e wurde bereits in Abschnitt 1.1 als Gleichung (1.3) eingeführt und erläutert. Bei Materialien mit positivem linearem Wärmeausdehnungskoeffizienten α_{th} , wie zum Beispiel beim vorliegenden Polyamid 6, kühlt das Material bei Volumenzunahme (Dilatation) ab und erwärmt sich bei einer Volumenabnahme (Kompression). Im Falle eines negativen linearen Wärmeausdehnungskoeffizienten kehrt sich dieser Effekt um. Die Wärmeabfuhr beziehungsweise die Wärmezufuhr aufgrund des thermoelastischen Effektes wird durch einen Energiequellterm in der Benutzeroutine VUMAT berücksichtigt, welcher in die Energieerhaltungsgleichung eingeht. Die folgende Gleichung beschreibt die Wärmeabfuhr beziehungsweise die Wärmezufuhr pro Masseneinheit und Zeitinkrement Δt :

$$\dot{r}^{\text{rev}} = -\frac{P_e}{\rho} = -\frac{3\alpha_{\text{th}}K\Theta_0}{\rho} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{el}} \cdot \cdot \mathbf{I}. \quad (4.39)$$

Die durch den thermoelastischen Effekt hervorgerufenen Temperaturänderungen in Polyamid 6 sind gering und liegen deutlich unterhalb von 5 °C, siehe Abschnitt 3.1.4.

4.3.2. Irreversibler thermischer Effekt

Wie im letzten Abschnitt für den thermoelastischen Effekt dargestellt, soll nun auch für den irreversiblen Wärmeeffekt ein Quellterm angegeben werden, welcher direkt aus der Wärmeleitungsgleichung eines thermoplastischen Materials folgt, siehe [18, 56]. In den irreversiblen Energiequellterm fließt der dissipative Anteil der mechanischen Leistung D unter Verwendung des Taylor-Quinney-Koeffizienten β ein. Die Größen D und β wurden ebenfalls bereits in Abschnitt 1.1 mit den Gleichungen (1.4) und (1.6) eingeführt und erläutert. Für die Wärmezufuhr pro Masseneinheit und Zeitinkrement Δt ergibt sich somit:

$$\dot{r}^{\text{irrev}} = \frac{D}{\rho} = \beta \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{\text{VP}}}{\rho}. \quad (4.40)$$

Aus dieser Gleichung geht hervor, dass der irreversible Wärmeeffekt von den volumetrischen und den deviatorischen viskoplastischen Verzerrungen getrieben wird. Der reversible Wärmeeffekt mit dem Quellterm (4.39) hängt dagegen nur von dem volumetrischen Anteil des elastischen Verzerrungstensors ab.

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

In Abschnitt 4.2 wurde die mehrachsige Formulierung des thermoelastisch-thermoviskoplastischen Materialmodells hergeleitet. Diese Gleichungen enthalten bereits das ausgewählte Modell für die Vergleichsspannung σ_{BY} nach BURZYŃSKI-YAGN sowie den Ansatz für das plastische Potential Ψ_{ZH} nach ZHANG. Die temperatur- und dehnratenabhängigen elastischen Koeffizienten E und ν , die isotrope Verfestigungsfunktion σ_{F} sowie der plastische Kompressibilitätsparameter ω wurden bisher noch nicht definiert. An dieser Stelle sei bereits erwähnt, dass im Rahmen der durchgeführten Literaturrecherche keine vollständig geeigneten Ansätze zur Beschreibung von E , ν , σ_{F} und ω in Abhängigkeit der Dehnrate und der Temperatur gefunden wurden. Daher mussten neue Modellierungsansätze auf Basis der Versuchsergebnisse entwickelt werden. Im vorliegenden Kapitel erfolgt zunächst die Bestimmung der zu modellierenden Größen E , ν , σ_{F} und ω aus den experimentellen Daten. Für jede der verwendeten Messkurven wird zuvor die entsprechende Mittelwertkurve aus den drei Wiederholungsmessungen gebildet. Anschließend werden die Modellansätze zur raten- und temperaturabhängigen Beschreibung der genannten Größen entwickelt. In diesem Zusammenhang erfolgt auch unmittelbar die Anpassung der Modelle an die experimentellen Daten mit Hilfe der numerischen Parameteroptimierung. Zur Optimierung der Parameter wurden die freien Softwarepakete SCILAB und GNU PLOT eingesetzt.

5.1. Teilmodelle der Thermoelastizität

Die Ermittlung der temperatur- und dehnratenabhängigen elastischen Koeffizienten E und ν erfolgt auf Basis der experimentellen Zugversuchsdaten. Laut Norm DIN EN ISO 527 ist der Elastizitätsmodul E im Zugversuch als Sekante im Spannungs-Dehnungsdiagramm zwischen den Dehnungswerten 0,05 % und 0,25 % zu ermitteln. Vor allem bei den durchgeführten hochdynamischen Zugversuchen traten gerade im Anfangsbereich der Spannungs-Dehnungskurven starke Schwingungen auf. Daher wurde, abweichend von der genannten Norm, eine indirekte Bestimmung des Elastizitätsmoduls über die automatisierte Anpassung einer nichtlinearen Ansatzfunktion an die Spannungs-Dehnungskurve im Dehnungsbereich zwischen 0,25 % bis 3,0 %

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

durchgeführt. Dieses Verfahren zeigt sich als vorteilhaft, da auftretende Schwingungen hierbei direkt herausgemittelt werden. Bei der verwendeten nichtlinearen Ansatzfunktion

$$\sigma = E\varepsilon \frac{1 - D_1\varepsilon}{1 + D_2\varepsilon}. \quad (5.1)$$

handelt es sich um das Dreiparametermodell von SCHMACHTENBERG [82]. Der Parameter E ist der Ursprungselastizitätsmodul und die Parameter D_1 und D_2 steuern die Nichtlinearität der Spannungs-Dehnungskurve. Mit der Methode der minimalen Fehlerquadratsumme wurde für jede der gemessenen Spannungs-Dehnungskurven bei den unterschiedlichen Abzugsgeschwindigkeiten und Umgebungstemperaturen ein optimierter Parametersatz E , D_1 , D_2 mit der Software SCI-LAB bestimmt. In Abbildung 5.1 ist beispielhaft die Kurve des angepassten Dreiparametermodells zusammen mit der Messkurve für einen Zugversuch bei 25 °C und einer Abzugsgeschwindigkeit von 1 m/s dargestellt. Zur Veranschaulichung der Schwingungen im Anfangsbereich der Messkurve wurde zusätzlich der Tangentenmodul $E_T(\varepsilon)$ aus der experimentellen Spannungs-Dehnungskurve bestimmt und auf der sekundären Ordinate in Abbildung 5.1 dargestellt. Der berechnete Tangentenmodul aus der Ableitung des Dreiparametermodells

$$E_T(\varepsilon) = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = E \frac{1 - D_1\varepsilon}{1 + D_2\varepsilon} - E\varepsilon \left(\frac{D_1(1 + D_2\varepsilon) + D_2(1 - D_1\varepsilon)}{(1 + D_2\varepsilon)^2} \right) \quad (5.2)$$

ist den experimentellen Werten gegenübergestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass durch die Verwendung eines parametrisierten Modells die Schwingungen in den Messkurven, welche zu großen Ungenauigkeiten bei der Bestimmung des Elastizitätsmoduls führen würden, erfolgreich eliminiert werden können. Die Werte des dehnraten- und temperaturabhängigen Elastizitätsmoduls, die mit Hilfe der eben beschriebenen Methode aus den experimentellen Spannungs-Dehnungskurven bestimmt wurden, sind zusammen mit dem bereits angepassten neuen Modellansatz in den beiden Diagrammen in Abbildung 5.3 dargestellt. Die Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls von der Temperatur zeigt das linke Diagramm und die Abhängigkeit von der Dehnrates ist im rechten Diagramm zu sehen.

Für den Zugversuch ist die Querkontraktionszahl

$$\nu = -\frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{11}} \quad (5.3)$$

durch das negative Verhältnis der Querdehnung ε_{22} zu der in Zugrichtung orientierten Längsdehnung ε_{11} im elastischen Deformationsbereich definiert. Die experimentelle Bestimmung dieses Wertes ist nicht trivial, da auch hier durch den Anfahrereffekt im Zugversuch auftretende Schwingungen die ohnehin schon kleinen Dehnungswerte überlagern und verfälschen können. Für die vorliegenden Messkurven wurde die Querkontraktionszahl daher erst bei einem Längs-

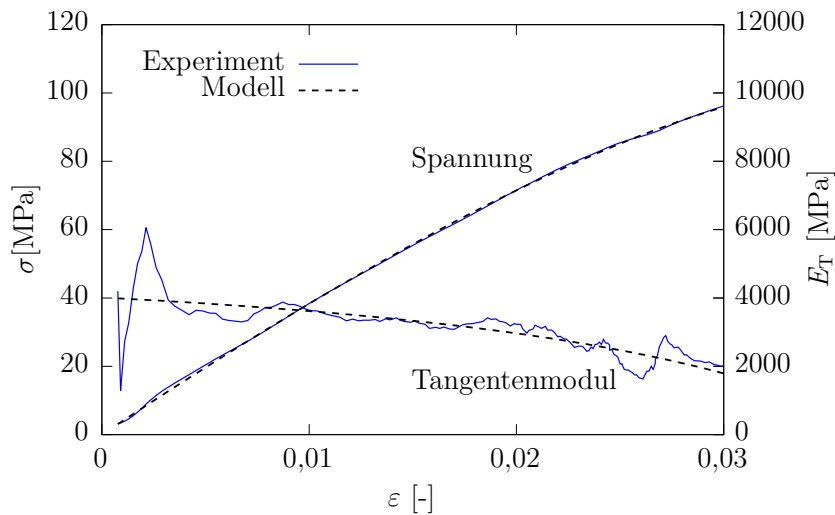


Abbildung 5.1.: Verwendung des Dreiparametermodells zur Beschreibung des Anfangsbereichs einer experimentellen Spannungs-Dehnungskurve sowie deren Tangentenmodul, beispielhaft am Datensatz für die Abzugsgeschwindigkeit von 1 m/s und einer Umgebungstemperatur von 25 °C.

dehnungswert von 1% bestimmt. Die Darstellung der auf diese Weise ermittelten dehnraten- und temperaturabhängigen Querkontraktionszahl ist zusammen mit dem bereits angepassten neuen Modellansatz in Abbildung 5.4 zu sehen. Das linke Diagramm enthält die Darstellung von ν in Abhängigkeit der Temperatur und das rechte Diagramm zeigt ν in Abhängigkeit der elastischen Vergleichsdehnrate. In den beiden Diagrammen sind die vermeintlichen Ausreißer deutlich zu erkennen. Durch die Wahl eines entsprechenden Modellansatzes für die dehnraten- und temperaturabhängige Querkontraktionszahl wird den genannten Unzulänglichkeiten bei der experimentellen Bestimmung von ν Rechnung getragen.

Die erste Idee für das im Rahmen dieser Arbeit entwickelten dehnraten- und temperaturabhängigen Modells für den Elastizitätsmodul geht auf die Arbeit von KEUERLEBER zurück [50]. Hier wird eine arctan-Funktion herangezogen, um für ein isotaktisches Polypropylen den Verschiebefaktor a_T einer Zeit-Temperaturverschiebung über den Glasübergangsbereich hinweg abzubilden. Der von KEUERLEBER verwendete empirische Ansatz zur Beschreibung des Verschiebefaktors a_T in Abhängigkeit der Temperatur T lautet

$$\ln(a_T(T)) = -a \cdot \arctan(b \cdot (T - T_{\text{Ref}})). \quad (5.4)$$

Die Größen a, b und T_{Ref} sind die Parameter des Modells. Die arctan-Funktion in Gleichung (5.4) beschreibt eine starke Temperaturabhängigkeit von $\ln(a_T)$ in der Umgebung der Referenztemperatur T_{Ref} mit einem zusätzlichen Wendepunkt bei T_{Ref} . Damit scheint die Funktion auch zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit des Elastizitätsmoduls im Glasübergangsbereich

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

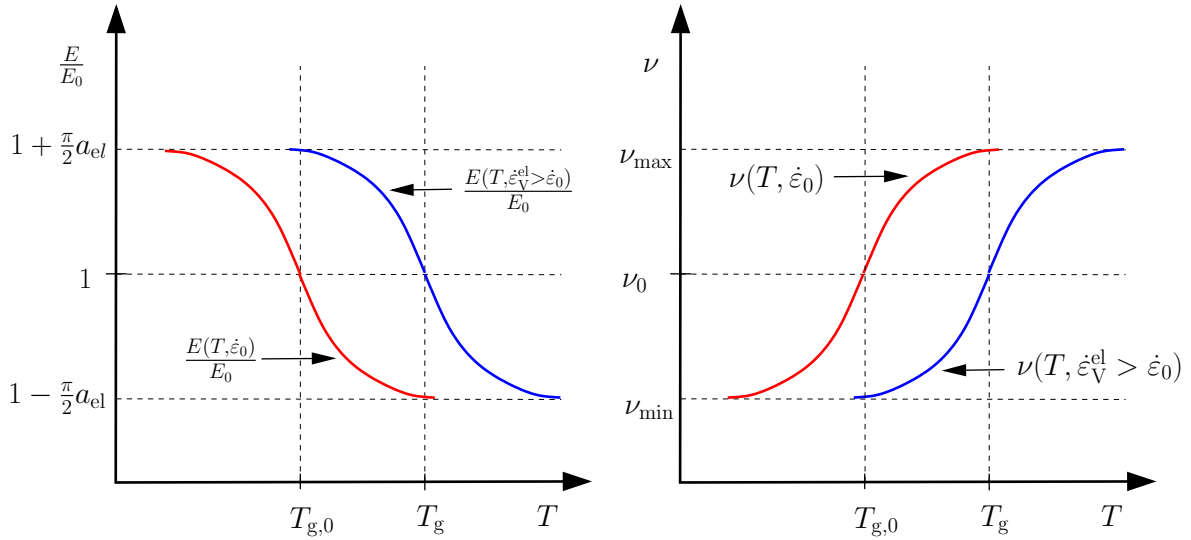


Abbildung 5.2.: Schematische Darstellung des Modells zur Beschreibung des dehnraten- und temperaturabhängigen Elastizitätsmoduls und der dehnraten- und temperaturabhängigen Querkontraktionszahl

geeignet zu sein. Im ersten Schritt wurde nur die Temperaturabhängigkeit des Elastizitätsmoduls von Polyamid 6 mit der entsprechend abgewandelten Gleichung

$$E(T) = E(T_g) [1 - a_{el} \arctan(b_{el}(T - T_g))] \quad (5.5)$$

beschrieben. Wie in den Abbildungen 2.5 und 5.3 gezeigt wird, ist der Elastizitätsmodul oberhalb und unterhalb des Glasübergangstemperaturbereichs nur geringfügig von der Frequenz beziehungsweise der elastischen Dehnrate abhängig. Dieses gilt aber nicht für den Übergangsbereich selbst. Dort zeigt sich eine verstärkte Dehnratenabhängigkeit des Elastizitätsmoduls mit einem Maximum bei der Glasübergangstemperatur T_g . Die Erweiterung der Gleichung (5.5) um einen zusätzlichen Term zur Berücksichtigung der Dehnratenabhängigkeit gelang dadurch, dass die in der Ursprungsform als konstant angenommene Glasübergangstemperatur T_g nun als Funktion der Dehnrate formuliert wird:

$$T_g(\dot{\epsilon}_V^{el}) = c_{el} \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}_V^{el}}{\dot{\epsilon}_0}\right) + T_{g,0}. \quad (5.6)$$

Durch Einsetzen von Gleichung (5.6) in Gleichung (5.5) erhält man den folgenden Ausdruck:

$$E(\dot{\epsilon}_V^{el}, T) = E_0 \left[1 - a_{el} \arctan \left(b_{el} \left(T - c_{el} \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}_V^{el}}{\dot{\epsilon}_0}\right) - T_{g,0} \right) \right) \right]. \quad (5.7)$$

Gleichung (5.7) beschreibt eine rechtsseitige Horizontalverschiebung der rein temperaturabhängigen Elastizitätsmodulkurve aus Gleichung (5.5) mit zunehmender Dehnrate. Ein schematischer Verlauf der Gleichung (5.7) ist in Abbildung 5.2 im linken Diagramm dargestellt. Die

Funktion läuft asymptotisch bei $T = \pm\infty$ gegen die Grenzwerte $1 \pm a_{\text{el}} \frac{\pi}{2}$. Über den Parameter a_{el} kann die Aufspreizung der Kurve in Vertikalrichtung gesteuert werden und b_{el} beeinflusst die Steilheit der Kurve im Übergangsbereich. Die Gleichung (5.6) beschreibt eine Gerade in der halblogarithmischen Darstellung und dessen Steigung c_{el} skaliert die Dehnratenabhängigkeit der Glasübergangstemperatur T_{g} . Der Parameter $T_{\text{g},0}$ ist die Referenzglasübergangstemperatur und definiert den Wendepunkt der Funktion bei dem Referenzelastizitätsmodul E_0 und der Referenzdehnrate $\dot{\epsilon}_0$. Die elastische Vergleichsdehnrate $\dot{\epsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}$ wird innerhalb des implementierten Materialmodells aus der zeitlichen Änderung der nach von Mises berechneten Vergleichsdehnung aus dem Deviator des elastischen Verzerrungstensors \mathbf{e}^{el} bestimmt:

$$\dot{\epsilon}_{\text{V}}^{\text{el}} = \frac{1}{\Delta t} \sqrt{\frac{2}{3} \Delta \mathbf{e}^{\text{el}} \cdot \Delta \mathbf{e}^{\text{el}}}. \quad (5.8)$$

Zur Berechnung der temperatur- und dehnratenabhängigen elastischen Querkontraktionszahl wird auf einen von EHRENSTEIN vorgeschlagenen Ansatz zurückgegriffen [28]. In seiner ursprünglichen Form beschreibt der Ansatz nur die Temperaturabhängigkeit der Querkontraktionszahl in Abhängigkeit des temperaturabhängigen Elastizitätsmoduls. Ersetzt man den temperaturabhängigen Elastizitätsmodul durch den dehnraten- und temperaturabhängigen Elastizitätsmodul, erhält man die Gleichung für die temperatur- und dehnratenabhängige Querkontraktionszahl:

$$\nu(\dot{\epsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}, T) = \nu_0 + (0,5 - \nu_0) \left(1 - \frac{E(\dot{\epsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}, T)}{E_0} \right). \quad (5.9)$$

Analog zum Referenzelastizitätsmodul E_0 in 5.7 bezeichnet ν_0 hier die Referenzquerkontraktionszahl bei der Referenzglasübergangstemperatur $T_{\text{g},0}$. Durch Einsetzen von Gleichung (5.7) in Gleichung (5.9) erhält man eine weitere Darstellungsform

$$\nu(\dot{\epsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}, T) = \nu_0 + (0,5 - \nu_0) \left[a_{\text{el}} \arctan \left(b_{\text{el}} \left(T - c_{\text{el}} \ln \left(\frac{\dot{\epsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}}{\dot{\epsilon}_0} \right) - T_{\text{g},0} \right) \right) \right]. \quad (5.10)$$

Das rechte Diagramm in Abbildung 5.2 zeigt ebenfalls den schematischen Verlauf der Gleichung (5.10). Wie bereits oben angedeutet, trägt der Modellansatz aus Gleichung (5.10) den auftretenden Messungenauigkeiten bei der Bestimmung von ν in gewisser Weise Rechnung. Die Dehnraten- und Temperaturabhängigkeit der Querkontraktionszahl wird direkt durch den dehnraten- und temperaturabhängigen Elastizitätsmodul vorgegeben. Der einzig freie Modellparameter ist die Referenzquerkontraktionszahl ν_0 , mit der eine Vertikalverschiebung der Funktion sowie gleichzeitig eine Skalierung der Aufspreizung in Vertikalrichtung gesteuert werden kann.

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

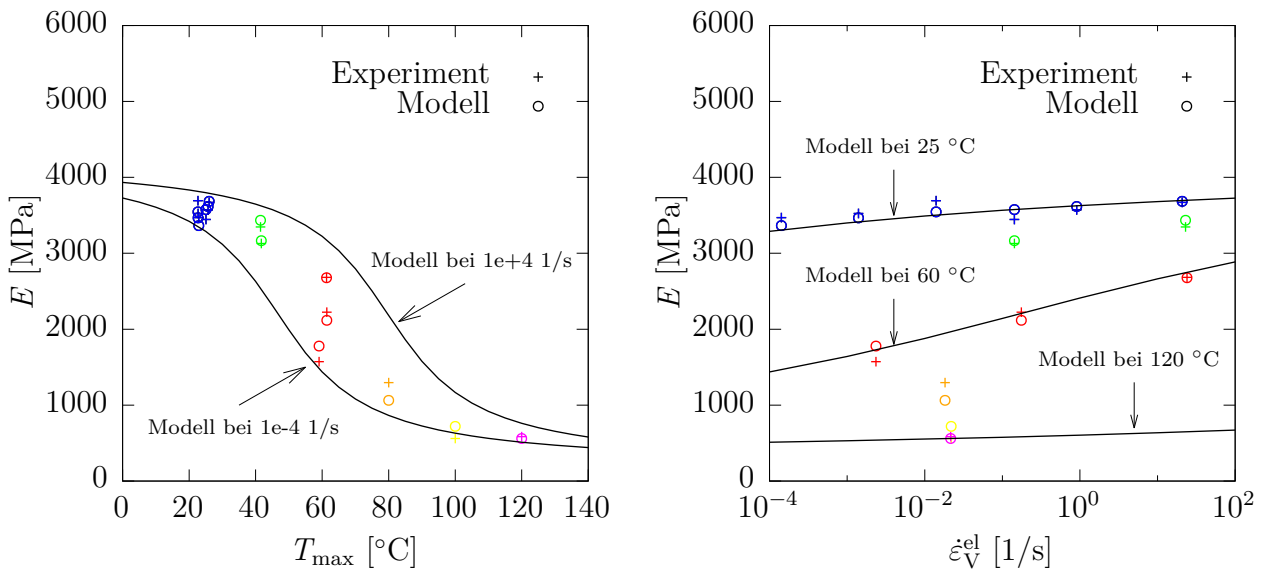


Abbildung 5.3.: Experimentelle Daten und Modell mit angepassten Parametern E_0 , a_{el} , b_{el} , c_{el} , $T_{g,0}$ zur Beschreibung des dehnraten- und temperaturabhängigen Elastizitätsmoduls

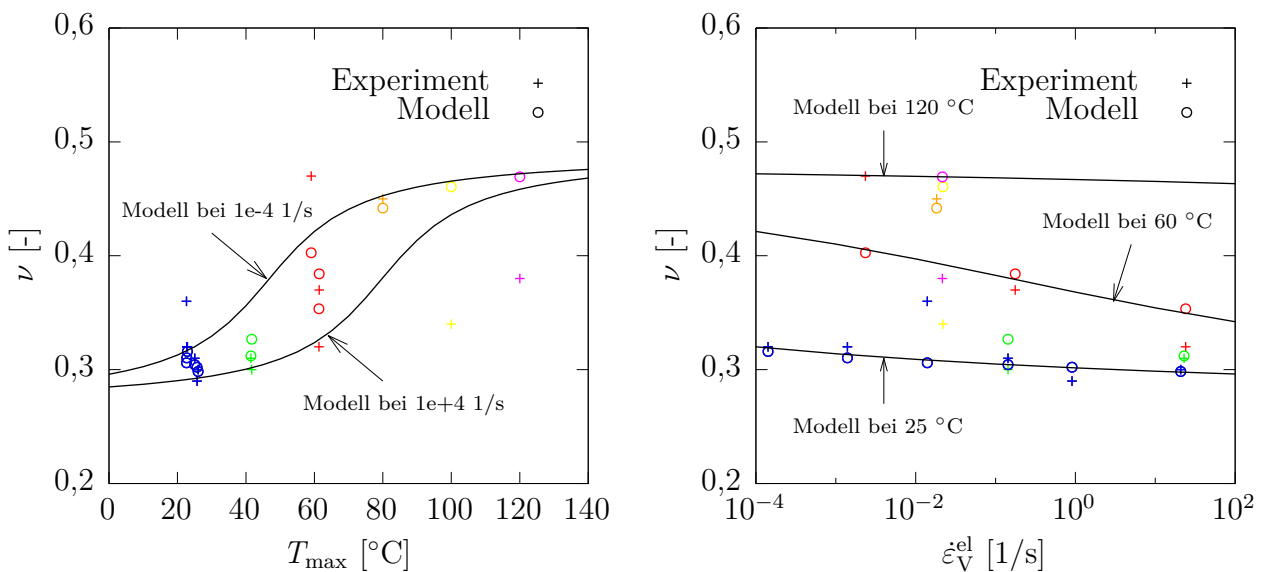


Abbildung 5.4.: Experimentelle Daten und Modell mit angepasstem Parameter ν_0 zur Beschreibung der dehnraten- und temperaturabhängigen Querkontraktionszahl

Die Parameteranpassung für die Modelle zur Beschreibung der temperatur- und dehnratenabhängigen elastischen Koeffizienten E und ν an die experimentellen Daten erfolgte mit der Software GNUPLOT. Für den Elastizitätsmodul wurden zunächst die Parameter E_0 , a_{el} , b_{el} , c_{el} , $T_{g,0}$ ermittelt. Anschließend wurde für die Querkontraktionszahl unter Vorgabe der Parameter für den Elastizitätsmodul nur noch ν_0 bestimmt. In den Abbildungen 5.3 und 5.4 sind für E und ν jeweils die Einzelwerte aus dem Experiment als '+' dargestellt. Die mit dem Modell be-

rechneten Einzelwerte für E und ν bei der jeweiligen gemessenen Temperatur und elastischen Vergleichsdehnrate, erscheinen als 'o'. Damit kann qualitativ die Anpassungsgenauigkeit der Modelle an die experimentellen Daten bewertet werden. Die Darstellung von E und ν in den Abbildungen 5.3 und 5.4 erfolgt im linken Diagramm in Abhängigkeit der Temperatur und im rechten Diagramm in Abhängigkeit der elastischen Vergleichsdehnrate. Zur besseren Veranschaulichung wurden die Modellfunktionen zusätzlich noch für zwei konstante Dehnraten bei variabler Temperatur im linken Diagramm und für drei konstante Temperaturen bei variabler elastischer Vergleichsdehnrate im rechten Diagramm dargestellt. Die ermittelten Modellparameter sind in der Übersichtstabelle A.1 in Anhang A.1 aufgelistet. Weiterhin zeigt die Abbildung A.1 im Anhang A.2 eine Darstellung der angepassten dehnraten- und temperaturabhängigen Modelle für E und ν als dreidimensionale Flächen im Raum.

5.2. Teilmodelle der Thermoviskoplastizität

5.2.1. Verfestigungsfunktion

Die Verfestigungsfunktion σ_F ist Teil der Fließfunktion Φ aus Gleichung (4.23). Sie beschreibt die lokale Spannungsentwicklung im Material während einer viskoplastischen Deformation, siehe Unterabschnitt 4.2.2.1. Aus den Anforderungen an das Materialmodell für das Polyamid 6 geht hervor, dass die isotrope Verfestigungsfunktion eine Funktion in Abhängigkeit der Vergleichsdehnung ε_V^{vp} , der viskoplastischen Vergleichsdehnrate $\dot{\varepsilon}_V^{vp}$ und der Temperatur T sein soll, siehe Abschnitt 4.1. In diesem Abschnitt soll ein Modell zur Beschreibung des Verfestigungsverhaltens entwickelt werden.

Zuvor müssen jedoch die Verfestigungskurven aus den experimentellen Spannungs-Dehnungskurven, durch Abtrennung des viskoplastischen Deformationsanteils von der Gesamtdeformation, gewonnen werden. Durch Umstellung der Gleichung (4.1) nach dem viskoplastischen Anteil und Umwandlung in die inkrementelle Form erhält man mit

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{vp} = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{tot} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{el} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{th} \quad (5.11)$$

das Inkrement des viskoplastischen Verzerrungstensors $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$ in Abhängigkeit der restlichen Verzerrungstensorinkremente $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{tot}$, $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{el}$ und $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{th}$. Das Inkrement des totalen Verzerrungstensors $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{tot}$ kann für jedes Zeitinkrement Δt direkt aus den Messdaten durch Differenzenbildung ermittelt werden. Das elastische Verzerrungsinkrement $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{el}$ wird mit Hilfe der inkrementellen Form der Gleichung [56]

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{el} = \frac{1 + \nu}{E} \Delta \boldsymbol{\sigma} - \frac{\nu}{E} (\Delta \boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I}) \mathbf{I} + \frac{\Delta \nu E - (1 + \nu) \Delta E}{E^2} \boldsymbol{\sigma} - \frac{\Delta \nu E - \nu \Delta E}{E^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I}) \mathbf{I} \quad (5.12)$$

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

berechnet. Hier gehen bereits die in Unterabschnitt 5.1 an die Messdaten angepassten Modelle für die elastischen Koeffizienten E und ν ein, siehe Gleichungen (5.7) und (5.9). Die beiden hinteren Terme auf der rechten Seite von Gleichung (5.12) folgen aus der Dehnraten- und Temperaturabhängigkeit der elastischen Koeffizienten. Der Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ und das Spannungstensorinkrement $\Delta\boldsymbol{\sigma}$ können wiederum direkt aus den Messdaten ermittelt werden. Unter Anwendung der inkrementellen Form der Gleichung (4.11) kann nun noch das Inkrement des thermischen Verzerrungstensors

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}} = [\Delta\alpha_{\text{th}}(T - T_0) + \alpha_{\text{th}}\Delta T] \mathbf{I} \quad (5.13)$$

angegeben werden. Die lokale Proben­temperatur T und das Temperaturinkrement ΔT ergeben sich aus den mittels Infrarotthermografie durchgeführten Temperaturmessungen. Hierbei handelt es sich streng genommen um die maximale Oberflächentemperatur T_{max} in dem definierten Messfenster, siehe Unterabschnitt 3.1.3.3. Der temperaturabhängige thermische Ausdehnungskoeffizient α_{th} und sein Inkrement $\Delta\alpha_{\text{th}}$ folgen aus den Ergebnissen der thermomechanischen Analyse, siehe Unterabschnitt 3.2.1. Die Anwendung der Iterationsvorschrift

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{k+1}^{\text{vp}} = \boldsymbol{\varepsilon}_k^{\text{vp}} + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{k+1}^{\text{vp}} = \boldsymbol{\varepsilon}_k^{\text{vp}} + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{k+1}^{\text{tot}} - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{k+1}^{\text{el}} - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{k+1}^{\text{th}} \quad (5.14)$$

liefert nun den diskreten zeitabhängigen viskoplastischen Verzerrungstensor. Hierbei steht der Index $k \in [1, k_{\text{max}} - 1]$ für einen diskreten Zeitpunkt innerhalb des Messbereichs $t \in [0, t_{\text{max}}]$.

Zur endgültigen Bestimmung der experimentellen Verfestigungskurven müssen aus den tensoriellen Größen noch die benötigten skalaren Größen hergeleitet werden. Wie aus der Fließfunktion (4.23) hervorgeht, zählen dazu die viskoplastische Vergleichsdehnung $\varepsilon_{\text{V}}^{\text{vp}}$, die viskoplastische Vergleichsdehnrate $\dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{vp}}$, die Temperatur T und die Verfestigungsspannung σ_{F} , wobei T bereits bekannt ist. Die Fließregel (4.31) nimmt, unter Einbeziehung des plastischen Multiplikators (4.38) und nach dem Ersetzen des normierten deviatorischen Fließvektors (4.32), folgende Form an:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{vp}} = \dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{vp}} \frac{\sigma_{\text{BY}}}{\Psi_{\text{ZH}}^2} \left(\frac{3}{2} \mathbf{s} - \frac{1}{3} \omega p \mathbf{I} \right) \quad (5.15)$$

Mit Hilfe dieser Gleichung können die gesuchten skalaren Größen für die verschiedenen Lastfälle (Zug, Schub, Druck) ermittelt werden.

Für den Fall des einachsigen Zugversuchs werden die folgenden Annahmen getroffen:

$$\sigma_{22} = \sigma_{33} = \sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0, \quad (5.16)$$

$$\varepsilon_{12}^{\text{vp}} = \varepsilon_{13}^{\text{vp}} = \varepsilon_{23}^{\text{vp}} = 0, \quad (5.17)$$

5.2. Teilmodelle der Thermoviskoplastizität

$$\varepsilon_{33}^{\text{VP}} = \varepsilon_{22}^{\text{VP}}. \quad (5.18)$$

Weiterhin gelten für diesen Lastfall

$$p = -\frac{1}{3}q, \quad (5.19)$$

$$\sigma_{\text{BY}} = q = \sigma_{11}, \quad (5.20)$$

$$\Psi_{\text{ZH}}^2 = q\left(1 + \frac{\omega}{9}\right) \quad (5.21)$$

und

$$\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3}q\mathbf{I}. \quad (5.22)$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (5.16) bis (5.22) in (5.15) kann gezeigt werden, dass die viskoplastische Vergleichsdehnrate im einachsigen Zugversuch der 11-Komponente des viskoplastischen Verzerrungsratentensors entspricht:

$$\dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{VP}} = \dot{\varepsilon}_{11}^{\text{VP}}. \quad (5.23)$$

Daraus folgt auch unmittelbar die Äquivalenz der beiden Dehnungsgrößen mit

$$\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}} = \varepsilon_{11}^{\text{VP}}. \quad (5.24)$$

Für die beiden Querdehnungsraten in 22- und 33-Richtung folgt aus der Fließregel im gleichen Zuge der folgende Zusammenhang, siehe auch [51]:

$$\dot{\varepsilon}_{22}^{\text{VP}} = \dot{\varepsilon}_{33}^{\text{VP}} = \dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{VP}} \frac{2\omega - 9}{2\omega + 18} = \dot{\varepsilon}_{11}^{\text{VP}} \frac{2\omega - 9}{2\omega + 18}. \quad (5.25)$$

Damit kann der Kompressibilitätsparameter ω ebenfalls aus den Messkurven gewonnen werden. Die Modellentwicklung für ω wird später in Unterabschnitt 5.2.3 vorgenommen. Mit Hilfe einer in der Software SCILAB implementierten Auswerterroutine wurden die experimentellen Verfestigungskurven

$$\sigma_{\text{F}} = q(\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}, \dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{VP}}, T) = \sigma_{11}(\varepsilon_{11}^{\text{VP}}, \dot{\varepsilon}_{11}^{\text{VP}}, T) \quad (5.26)$$

und der Kompressibilitätsparameter

$$\omega = -9 \frac{\dot{\varepsilon}_{22}^{\text{VP}} + \frac{1}{2}\dot{\varepsilon}_{11}^{\text{VP}}}{\dot{\varepsilon}_{22}^{\text{VP}} - \dot{\varepsilon}_{11}^{\text{VP}}} \quad (5.27)$$

aus den Zugversuchsdaten ermittelt. Die Abbildung 5.5 zeigt die experimentellen Verfestigungskurven (a), den Verlauf des Kompressibilitätsparameters ω (b), die viskoplastischen Vergleichsdehnraten (c) und die Entwicklung der maximalen Proben temperatur (d), jeweils in Abhängigkeit der viskoplastischen Vergleichsdehnung aus den Zugversuchen. Diese Ergebnisse sind die Grundlage für die Entwicklung der Modelle für die Verfestigungsfunktion $\sigma_{\text{F}}(\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}, \dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{VP}}, T)$ und der plastischen Kompressibilität in Form von $\omega(\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}, \dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{VP}}, T)$.

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

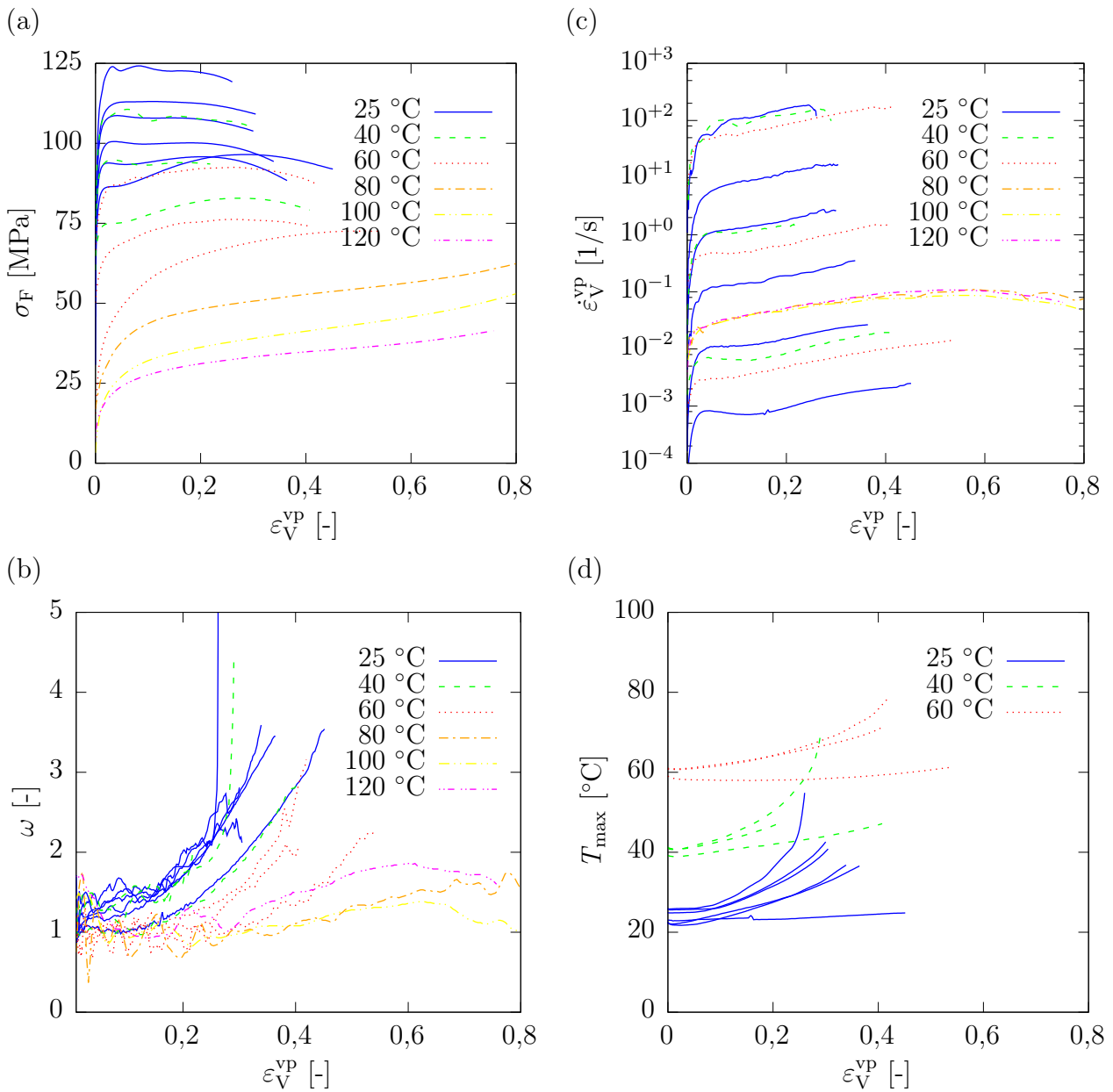


Abbildung 5.5.: Aus Zugversuchen ermittelte Verfestigungskurven (a), Kompressibilitätsparameter (b), viskoplastische Vergleichsdehnraten (c) und maximale Proben temperaturen (d), jeweils in Abhängigkeit der viskoplastischen Vergleichsdehnung

Bevor nun die Modellentwicklung für die Verfestigungsfunktion durchgeführt wird, soll noch kurz auf die mögliche Ermittlung der experimentellen Verfestigungskurven aus den Schub- und Druckversuchen eingegangen werden. Die entsprechenden Gleichungen können ebenfalls mit Hilfe der Fließregel (5.15) unter Annahme der jeweiligen lastartspezifischen Bedingungen gewonnen werden. Eine Übersicht der Formeln für alle drei Lastfälle (einachsiger Zug, Schub und einachsiger Druck) sind in Tabelle 5.1 zusammengestellt. Hier zeigt sich die bereits in

	$\eta = \frac{p}{q}$	Ψ_{ZH}^2	σ_F	ε_V^{vp}
Zug (einachsig)	$-\frac{1}{3}$	$q(1 + \frac{\omega}{9})$	q oder σ_{11}	ε_{11}^{vp}
Schub	0	q	$q\sqrt{(1-\gamma_1)(1-\gamma_2)}$ oder $\sigma_{12}\sqrt{3(1-\gamma_1)(1-\gamma_2)}$	$\frac{2}{\sqrt{3(1-\gamma_1)(1-\gamma_2)}}\varepsilon_{12}^{vp}$
Druck (einachsig)	$\frac{1}{3}$	$q(1 + \frac{\omega}{9})$	$q(1 - \gamma_1 - \gamma_2)$ oder $-\sigma_{11}(1 - \gamma_1 - \gamma_2)$	$-\frac{1}{\sqrt{1-\gamma_1-\gamma_2}}\varepsilon_{11}^{vp}$

Tabelle 5.1.: Bedingungen zur Ermittlung der experimentellen Verfestigungskurven für die unterschiedlichen Lastfälle (Zug, Schub, Druck)

Unterabschnitt 4.2.2.1 erwähnte Eigenschaft des BURZYŃSKI-YAGN-Modells. Die Berechnung der Vergleichsspannung σ_{BY} im einachsigen Zug kann ohne Kenntnis der Modellparameter γ_1 und γ_2 erfolgen. Daher ist die Ermittlung der Verfestigungskurven auf Basis der Zugversuchsdaten direkt möglich. Im Schub- und im einachsigen Drucklastfall ist dieses nur bei vorheriger Kenntnis der Modellparameter γ_1 und γ_2 möglich. Im vorliegenden Fall bietet die genannte Eigenschaft des BURZYŃSKI-YAGN-Modells große Vorteile, da die Mehrzahl der Charakterisierungsversuche im einachsigen Zugmodus durchgeführt wurden.

Die Verfestigungskurven aus den Zugversuchen des Polyamid 6 in Abbildung 5.5 (a) zeigen eine große Variabilität in ihrem Deformationsverhalten. Die Ursachen hierfür wurden bereits in Abschnitt 3.1.4 am Beispiel der Spannungs-Dehnungskurven ausführlich diskutiert. In der Literatur sind eine Vielzahl von phänomenologischen und physikalisch basierten Konstitutivmodellen zur Beschreibung des dehnraten- und temperaturabhängigen Verfestigungsverhaltens von amorphen und teilkristallinen unverstärkten Thermoplasten veröffentlicht, siehe zum Beispiel [12, 26, 37, 38, 47, 48, 51]. Im Rahmen dieser Arbeit wurden zunächst verschiedene bekannte Ansätze ausgewählt und überprüft, ob diese zur Beschreibung des Verfestigungsverhaltens von Polyamid 6 geeignet sind. Dazu gehörten zum Beispiel das G'SELL-JONAS-Modell [37, 38], das JOHNSON-COOK-Modell [47] oder Modelle zur Beschreibung der temperatur- und dehnratenabhängigen Fließspannungen, wie das auf der EYRING Theorie [31] basierende Modell von BAUWENS-CROWET et al. [10] oder ein modifiziertes Cooperative-Modell von RICHTON et al. [78]. Es stellte sich jedoch heraus, dass die untersuchten Modelle nicht geeignet sind, das Verfestigungsverhalten von Polyamid 6 über den gesamten in Abbildung 5.5 (a) dargestellten Dehnraten- und Temperaturbereich abzubilden. Die Schwierigkeiten bei der Modellierung zeigten sich vor allem in der Beschreibung des Double-Yield-Phänomens sowie der dehnraten- und temperaturabhängigen Fließspannung im Glasübergangsbereich. Daher wurde ein eigenes Verfestigungsmodell entwickelt, welches sich aus Teilen der bereits bekannten und veröffentlichten Modelle und der in Unterabschnitt 5.1 entwickelten und

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

beschriebenen Arcustangens-Funktion zusammensetzt. Die Herleitung des Modells für die Verfestigungsfunktion $\sigma_F(\varepsilon_V^{VP}, \dot{\varepsilon}_V^{VP}, T)$ wird im Folgenden beschrieben.

Zunächst wird eine Funktion für die reine Dehnungsverfestigung $f(\varepsilon_V^{VP})$ gesucht, die vor allem dem in Unterabschnitt 2.1.3 diskutierten Double-Yield-Phänomen Rechnung tragen soll. Die gewählte Funktion ist rein phänomenologischer Natur und basiert zunächst auf einer qualitativen Bewertung der Messdaten aus den eigenen Charakterisierungsversuchen am Polyamid 6 und der Veröffentlichung von SHAN et al. [86]. Dabei wird angenommen, dass bei Temperaturen unterhalb der Glasübergangstemperatur T_g die beiden Fließpunkte jeweils bei einer festen plastischen Dehnung auftreten. Dem ersten und dem zweiten Fließpunkt können somit die viskoplastischen Vergleichsdehnungen $\varepsilon_{F_1}^{VP}$ und $\varepsilon_{F_2}^{VP}$ als feste Stützpunkte zugeordnet werden. Es wird weiterhin angenommen, dass die zugehörigen Spannungswerte σ_{F_1} und σ_{F_2} an den festen Stützpunkten $\varepsilon_{F_1}^{VP}$ und $\varepsilon_{F_2}^{VP}$ von der viskoplastischen Vergleichsdehnrate $\dot{\varepsilon}_V^{VP}$ und der Temperatur T abhängige Funktionen sind. Die Hypothese, dass die beiden Fließpunkte festen viskoplastischen Dehnungswerten zugeordnet werden können, wird nun noch kurz begründet. Betrachtet man hierzu die Verfestigungskurven bei 25 °C und 40 °C in Abbildung 5.5 (a) jeweils bei der geringsten plastischen Vergleichsdehnrate, so erkennt man bei jeder der Kurven zwei ausgeprägte Fließpunkte. Der erste Fließpunkt tritt bei einer plastischen Vergleichsdehnung von circa 3 % und der zweite Fließpunkt bei einer viskoplastischen Vergleichsdehnung von circa 30 % auf. Die Ausprägung des zweiten Fließpunktes nimmt mit zunehmender viskoplastischer Vergleichsdehnrate und mit steigender Temperatur ab. Es wird also im Umkehrschluss davon ausgegangen, dass das Verschwinden des zweiten Fließpunktes mit einer steigenden Dehnrate und/oder einer steigenden Temperatur zusammenhängen muss. Da die Erhöhung der Dehnrate jedoch typischerweise zu einer Verfestigung führt, muss die primäre Ursache für das Verschwinden des zweiten Fließpunktes ein überlagerter und dominierender Temperaturanstieg sein. Die in Abbildung 5.5 (d) dargestellte Temperaturentwicklung in der Probe unterstützt diese Hypothese. Sie zeigt, dass mit steigender Abzugsgeschwindigkeit beziehungsweise mit steigender viskoplastischer Vergleichsdehnrate der irreversible thermische Effekt zur verstärkten Materialerwärmung führt. Erreichen die Versuchstemperaturen den Glasübergangsbereich, so verschwinden auch zunehmend beide Fließpunkte. Die Deformation gleicht dann zunehmend der einer homogenen oder gummielastischen Deformation, siehe Unterabschnitt 2.1.3. In diesem Fall haben die beiden Größen $\varepsilon_{F_1}^{VP}$ und $\varepsilon_{F_2}^{VP}$ keine besondere Bedeutung mehr, sondern dienen nur als feste Stützpunkte zur Anpassung der Spannungsfunktionen $\sigma_{F_1}(\dot{\varepsilon}_V^{VP}, T)$ und $\sigma_{F_2}(\dot{\varepsilon}_V^{VP}, T)$.

Die Dehnungsverfestigung soll nun durch eine Kombination von drei Skalierungsfunktionen

$f_1(\varepsilon_V^{\text{VP}})$, $f_2(\varepsilon_V^{\text{VP}})$ und $f_3(\varepsilon_V^{\text{VP}})$ beschrieben werden. Die Funktionen f_1 , f_2 und f_3 lauten

$$f_1(\varepsilon_V^{\text{VP}}) = 1 - w_1 \exp(-w_2 \varepsilon_V^{\text{VP}}), \quad (5.28)$$

$$f_2(\varepsilon_V^{\text{VP}}) = \exp(-w_3 (\varepsilon_V^{\text{VP}})^{w_4}), \quad (5.29)$$

$$f_3(\varepsilon_V^{\text{VP}}) = \exp(h (\varepsilon_V^{\text{VP}})^2) \quad (5.30)$$

und sind in Abbildung 5.6 schematisch dargestellt. Die Funktion f_1 mit den Parametern w_1 und w_2 beschreibt den Bereich vom Einsetzen der Plastizität bis zum ersten Stützpunkt bei $\varepsilon_{F_1}^{\text{VP}}$ und ist dem Modell von G'SELL-JONAS [37, 38] entnommen. Der Bereich zwischen dem ersten und dem zweiten Stützpunkt wird durch die Funktion f_2 mit den Parametern w_3 und w_4 gesteuert. Die Funktion f_2 wird als Wichtungsfunktion verwendet und tritt daher auch in der Form $(1 - f_2)$ auf. Die Funktion f_3 mit dem Parameter h beschreibt eine Dehnungsverfestigung ab dem zweiten Stützpunkt. Ebenso wie f_1 ist auch f_3 ein Teil des Modells von G'SELL-JONAS.

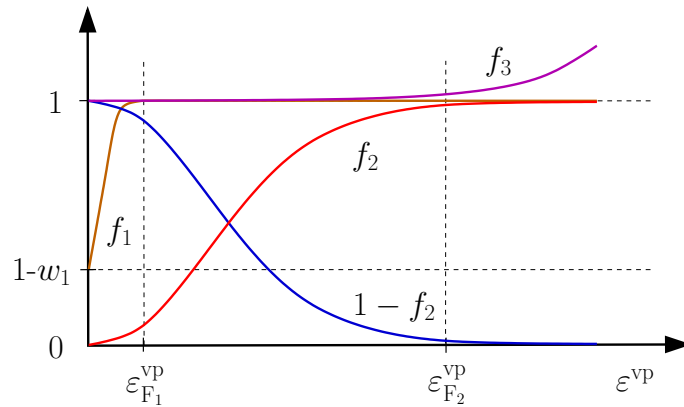


Abbildung 5.6.: Schematische Darstellung der Ansatzfunktionen f_1 , f_2 und f_3

Die drei vorgestellten Skalierungsfunktionen zur Beschreibung der Dehnungsverfestigung bilden erst unter zusätzlicher Verwendung der Spannungsfunktionen $\sigma_{F_1}(\dot{\varepsilon}_V^{\text{VP}}, T)$ und $\sigma_{F_2}(\dot{\varepsilon}_V^{\text{VP}}, T)$ das gesamte Verfestigungsverhalten $\sigma_F(\varepsilon_V^{\text{VP}}, \dot{\varepsilon}_V^{\text{VP}}, T)$ ab. Folgender Ansatz kombiniert die drei Skalierungsfunktionen f_1 , f_2 und f_3 mit den Funktionen der Fließspannungen σ_{F_1} und σ_{F_2} an den beiden Stützpunkten $\varepsilon_{F_1}^{\text{VP}}$ und $\varepsilon_{F_2}^{\text{VP}}$ zu folgender Verfestigungsfunktion:

$$\sigma_F = f_1 f_2 \sigma_{F_1} + (1 - f_2) f_3 \sigma_{F_2}. \quad (5.31)$$

Die schematische Darstellung der gesamten Dehnungsverfestigungsfunktion ist in Abbildung 5.7 zu sehen. Die Parameter der drei Skalierungsfunktionen sind derart anzupassen, dass unter Berücksichtigung der Spannungsfunktionen σ_{F_1} und σ_{F_2} die Gesamtzahl der experimentellen Verfestigungskurven möglichst gut abgebildet werden.

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

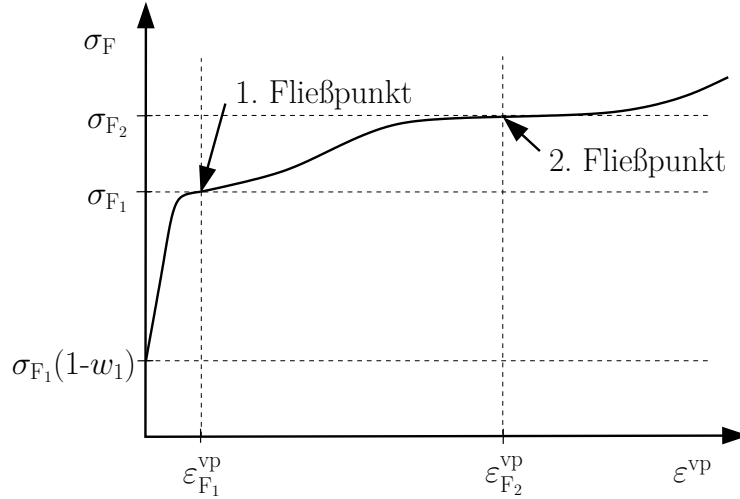


Abbildung 5.7.: Schematische Darstellung der Dehnungsverfestigungsfunktion unter Berücksichtigung von zwei Fließpunkten

Die Fließspannungen σ_{F_1} und σ_{F_2} sind nun jeweils an den beiden Stützpunkten zu beschreiben. Ähnlich wie bei dem dehnraten- und temperaturabhängigen Elastizitätsmodul zeigt sich hier bei der Auswertung der Messdaten eine verstärkte Dehnratenabhängigkeit der Fließspannungen an den beiden Stützpunkten im Glasübergangsbereich, siehe die durch '+' gekennzeichneten experimentellen Datenpunkte in den rechten Diagrammen der Abbildungen 5.8 und 5.9. Die Ansatzfunktionen für σ_{F_1} und σ_{F_2} werden somit wie folgt definiert:

$$\sigma_{F_1}(\dot{\epsilon}_V^{VP}, T) = \hat{\sigma}_{F_1} \left(1 - a_1 \arctan \left(b_1 \left(T - c_1 \ln \left(\frac{\dot{\epsilon}_V^{VP}}{\dot{\epsilon}_0} \right) - d_1 \right) \right) \right), \quad (5.32)$$

$$\sigma_{F_2}(\dot{\epsilon}_V^{VP}, T) = \hat{\sigma}_{F_2} \left(1 - a_2 \arctan \left(b_2 \left(T - c_2 \ln \left(\frac{\dot{\epsilon}_V^{VP}}{\dot{\epsilon}_0} \right) - d_2 \right) \right) \right). \quad (5.33)$$

Jede der beiden Funktionen besitzt die fünf Modellparameter a , b , c , d und $\hat{\sigma}_F$. Mit Hilfe dieser Funktionen können nun die Fließspannungen im geforderten Dehnraten- und Temperaturbereich ausreichend genau beschrieben werden. Die am Anfang bewerteten Modelle aus der Literatur zur Beschreibung der temperatur- und dehnratenabhängigen Fließspannungen [10, 78] haben gegenüber den Gleichungen (5.32) und (5.33) den Nachteil, dass sie oberhalb des Glasübergangsbereichs nicht asymptotisch gegen einen Spannungsgrenzwert laufen.

Die Anpassung der Parameter für die Verfestigungsfunktion $\sigma_F(\epsilon_V^{VP}, \dot{\epsilon}_V^{VP}, T)$ erfolgt nun in zwei Schritten. Zunächst werden die Parameter a_1 , b_1 , c_1 , d_1 und $\hat{\sigma}_{F_1}$ sowie a_2 , b_2 , c_2 , d_2 und $\hat{\sigma}_{F_2}$ der Modelle zur Beschreibung der temperatur- und dehnratenabhängigen Fließspannungen $\sigma_{F_1}(\dot{\epsilon}_V^{VP}, T)$ und $\sigma_{F_2}(\dot{\epsilon}_V^{VP}, T)$ mit GNU PLOT an die Spannungen der beiden Stützpunkte aus den experimentellen Verfestigungskurven angepasst. Die Abbildungen 5.8 und 5.9 zeigen jeweils die Messwerte und die mit dem angepassten Modell berechneten Werte für σ_{F_1} und σ_{F_2} .

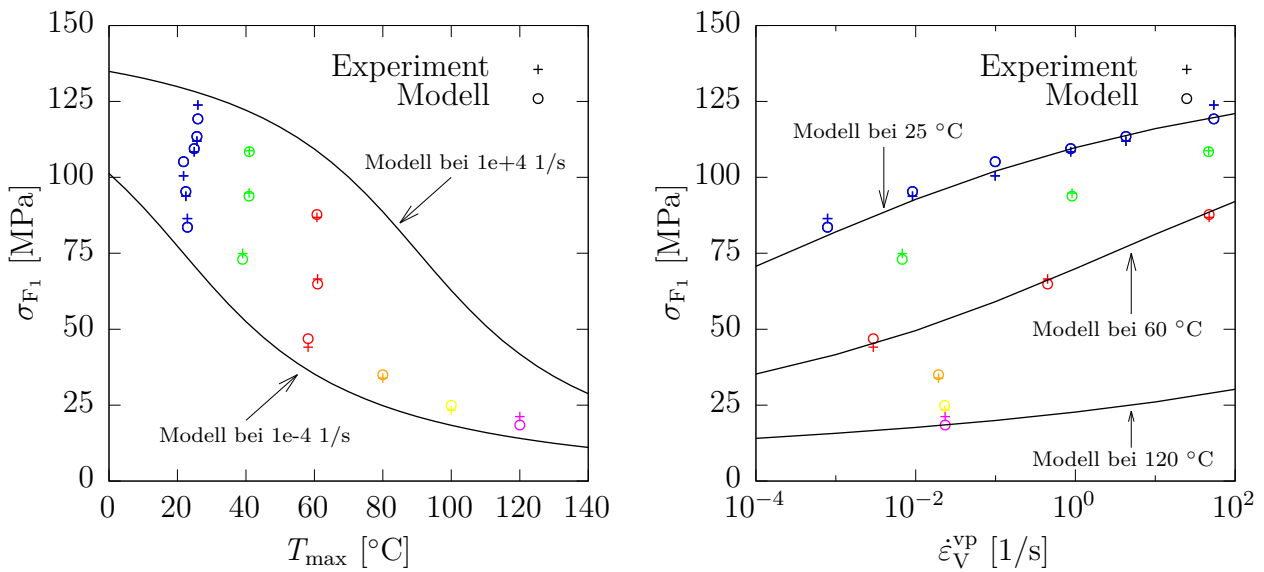


Abbildung 5.8.: Experimentelle Daten und Modell mit angepassten Parametern $\hat{\sigma}_{F_1}$, a_1 , b_1 , c_1 , d_1 zur Beschreibung der dehnraten- und temperaturabhängigen ersten Fließspannung am linken Stützpunkt bei $\epsilon_{F_1}^{\text{VP}} = 0,03$

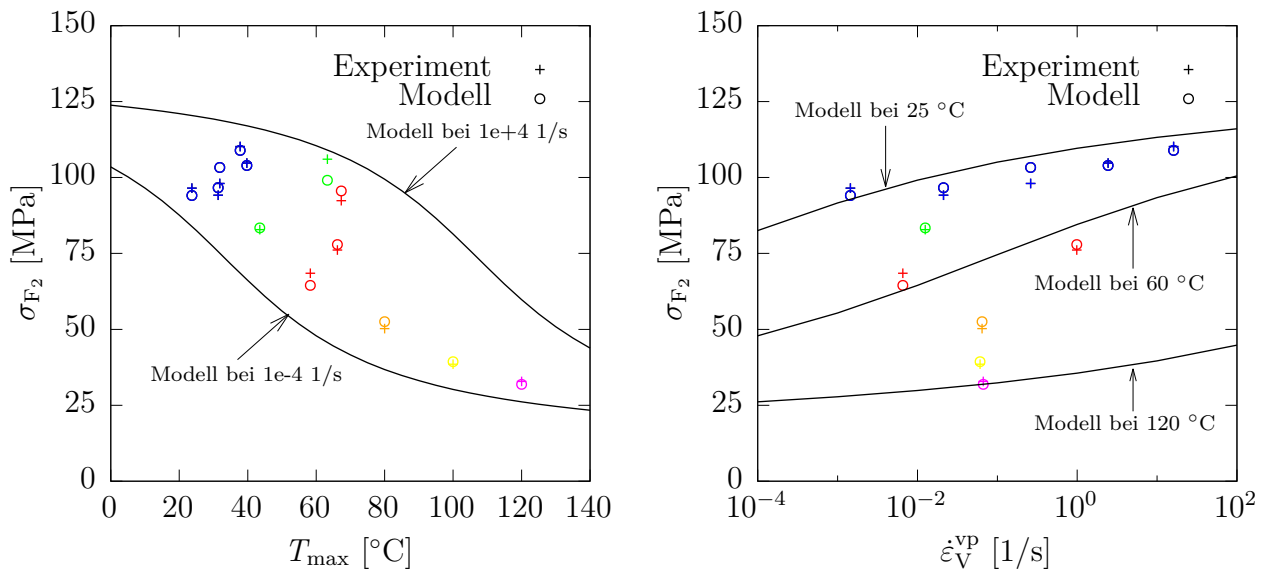


Abbildung 5.9.: Experimentelle Daten und Modell mit angepassten Parametern $\hat{\sigma}_{F_2}$, a_2 , b_2 , c_2 , d_2 zur Beschreibung der dehnraten- und temperaturabhängigen zweiten Fließspannung am rechten Stützpunkt bei $\epsilon_{F_2}^{\text{VP}} = 0,28$

Die Messwerte sind als '+' und die mit dem Modell gefitteten Werte als 'o' dargestellt. Im linken Diagramm der jeweiligen Abbildung erfolgt die Darstellung der Spannung in Abhängigkeit der Temperatur und im rechten Diagramm in Abhängigkeit der viskoplastischen Vergleichsdehnrates. Zur besseren Veranschaulichung wurden die Modellfunktionen zusätzlich noch als Kurven für zwei konstante Dehnraten bei variabler Temperatur (Diagramm links) und als Kurven für drei

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

konstante Temperaturen bei variabler viskoplastischer Vergleichsdehnrate (Diagramm rechts) dargestellt. Zusätzlich zeigt die Abbildung A.2 in Anhang A.3 die angepassten dehnraten- und temperaturabhängigen Modelle für σ_{F_1} und σ_{F_2} als dreidimensionale Flächen im Raum. Die ermittelten Modellparameter sind wiederum in der Übersichtstabelle A.1 in Anhang A.1 angegeben.

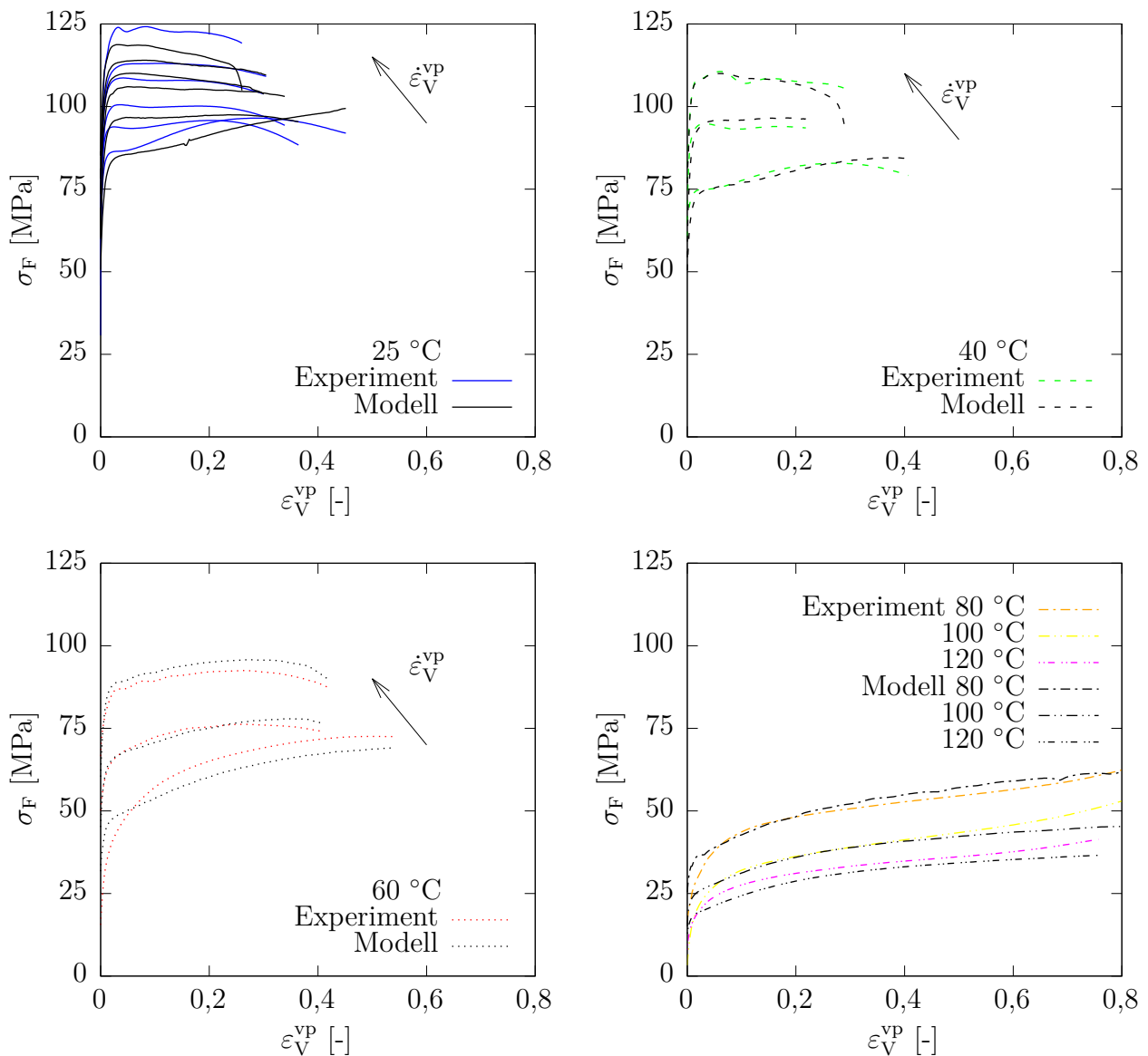


Abbildung 5.10.: Experimentelle und modellierte Verfestigungskurven mit den angepassten Parametern w_1 , w_2 , w_3 , w_4 und h zur Beschreibung der Dehnungsverfestigung bei unterschiedlichen Versuchstemperaturen

Abschließend müssen noch die Parameter w_1 , w_2 , w_3 , w_4 und h der Funktion zur Beschreibung der Dehnungsverfestigung ermittelt werden. Dazu werden die bereits in Abbildung 5.5 (a) dargestellten experimentellen Verfestigungskurven $\sigma_F(\epsilon_V^{vp}, \dot{\epsilon}_V^{vp}, T)$ mit SCILAB eingelesen und

hintereinander in eine vierspaltige Matrix geschrieben. Die Anpassung der Dehnungsverfestigungsfunktion (5.31) an die in der Matrix gespeicherten Daten, unter Einbeziehung der bereits angepassten Modelle für die Fließspannungen (5.32) und (5.33), erfolgt anschließend mit einem Optimierungsalgorithmus in der Software SCILAB. In Abbildung 5.10 sind die angepassten Verfestigungskurven den experimentellen Verfestigungskurven für unterschiedliche Versuchstemperaturen gegenübergestellt. Damit sind nun alle Parameter der Verfestigungsfunktion $\sigma_F(\varepsilon_V^{VP}, \dot{\varepsilon}_V^{VP}, T)$ für das Polyamid 6 bekannt. Die Abbildung A.3 im Anhang A.4 zeigt die Darstellung der Verfestigungsfunktion als Fläche im Raum für jeweils eine feste Temperatur.

An dieser Stelle wird noch darauf aufmerksam gemacht, dass die im Zugversuch beobachtete Einschnürung der Probe mit Ausbildung einer Fließschulter und dem anschließenden Fließschulterwachstum mit dem vorliegenden Verfestigungsmodell nicht exakt beschrieben werden kann. Man spricht hier von einem Lokalisierungsphänomen, bei dem sich inelastische Deformationen in einem schmalen Bereich, hier die Fließschulter, konzentrieren. Im Rahmen einer strukturellen Finiten-Elemente-Simulation stellt die Beschreibung solcher Phänomene einen Spezialfall dar, da eine starke Abhängigkeit der Ergebnisse von der räumlichen Diskretisierung (z.B. Elementgröße, Elementtyp) besteht. Zur Lösung dieses Problems wurden sogenannte Regularisierungsmodelle entwickelt, siehe zum Beispiel WACKERFUSS [94].

5.2.2. Anpassung der Fließfläche

Im vorliegenden Materialmodell wird die Spannungsmehrachsigkeit im viskoplastischen Teilmodell durch eine Abhängigkeit der Fließfläche σ_{BY} und des plastischen Potentials Ψ_{ZH} vom hydrostatischen Druck p und der von Mises Vergleichsspannung q berücksichtigt, siehe Unterabschnitt 4.2.2. In diesem Unterabschnitt werden die beiden Parameter γ_1 und γ_2 der BURZYŃSKI-YAGN-Fließfläche $\sigma_{BY}(p, q)$ anhand von Daten aus den Schub- und Druckversuchen ermittelt.

Aus dem Fließkriterium (4.18) folgt für viskoplastisches Fließen, dass die Fließspannung σ_F auf der Fließfläche σ_{BY} liegen muss:

$$\sigma_{BY}(p, q) = \sigma_F(\varepsilon_V^{VP}, \dot{\varepsilon}_V^{VP}, T).$$

Die Funktion zur Beschreibung der Fließspannung $\sigma_F(\varepsilon_V^{VP}, \dot{\varepsilon}_V^{VP}, T)$ ist aus dem letzten Unterabschnitt 5.2.1 bereits bekannt und die Modellparameter wurden auf Basis der Zugversuchsdaten ermittelt. Unter Berücksichtigung der Bedingungen aus Tabelle 5.1 für den Schub- und den einachsigen Drucklastfall kann nun ein zweidimensionales Gleichungssystem zur Bestimmung

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

der beiden Parameter γ_1 und γ_2 aufgestellt werden:

$$\sigma_F\left(\frac{2}{\sqrt{3(1-\gamma_1)(1-\gamma_2)}}\varepsilon_{12}^{\text{VP}}, \frac{2}{\sqrt{3(1-\gamma_1)(1-\gamma_2)}}\dot{\varepsilon}_{12}^{\text{VP}}, T\right) = \sigma_{12}\sqrt{3(1-\gamma_1)(1-\gamma_2)} \quad (5.34)$$

$$\sigma_F\left(-\frac{1}{\sqrt{1-\gamma_1-\gamma_2}}\varepsilon_{11}^{\text{VP}}, -\frac{1}{\sqrt{1-\gamma_1-\gamma_2}}\dot{\varepsilon}_{11}^{\text{VP}}, T\right) = -\sigma_{11}(1-\gamma_1-\gamma_2). \quad (5.35)$$

Die Fließspannungen auf der linken Seite können durch Einsetzen von ausgewählten Messdaten $(\varepsilon_{12}^{\text{VP}}, \dot{\varepsilon}_{12}^{\text{VP}}, T)$ aus den Schubversuchen und ausgewählten Messdaten $(\varepsilon_{11}^{\text{VP}}, \dot{\varepsilon}_{11}^{\text{VP}}, T)$ aus den einachsigen Druckversuchen mit Hilfe der angepassten Funktion (5.31) aus Unterabschnitt 5.2.1 berechnet werden. Auf der rechten Seite des Gleichungssystems wird die entsprechend zugehörige Schubspannung σ_{12} beziehungsweise die zugehörige Druckspannung $-\sigma_{11}$ aus den Messdaten benötigt. Damit können die beiden Unbekannten γ_1 und γ_2 durch Lösung des Gleichungssystems ermittelt werden. Aus mathematischer Sicht wird jeweils nur ein einziger Messpunkt aus einer Schub- und einer Druckverfestigungskurve benötigt. Das Gleichungssystem ist damit voll bestimmt. Sollen jedoch alle gemessenen Schub- und Druckverfestigungskurven in die Bestimmung von γ_1 und γ_2 einfließen, würde sich ein vielfach überbestimmtes Gleichungssystem ergeben, das nur näherungsweise mit Hilfe numerischer Verfahren gelöst werden könnte. Im vorliegenden Fall wurde einfachheitshalber jeweils der erste Fließpunkt aus der Schub- und der Druckverfestigungskurve bei 25 °C und einer Abzugsgeschwindigkeit von 0,01 mm/s zur Bestimmung von γ_1 und γ_2 ausgewählt. Die ermittelten Werte sind ebenfalls in der Tabelle A.1 enthalten. Die Fließfläche, die sich aus den Werten für γ_1 und γ_2 mit $\gamma_1 \in [0, 1]$, $\gamma_2 \in [-\infty, 0]$ ergibt, ist gemäß der Tabelle 4.1 ein Rotationsellipsoid im Hauptspannungsraum (nach SCHLEICHER).

Für die Darstellung von rotationssymmetrischen Fließflächen wird oft das zweidimensionale p - q -Diagramm beziehungsweise die vergleichbare BURZYŃSKI-Ebene verwendet, siehe Unterabschnitt 2.2.3.3 oder [3]. Hier wird ebenso eine zweidimensionale Darstellung der Fließfläche gewählt, allerdings sind die Achsen im Diagramm noch normiert. Damit ist eine dimensionslose Darstellung der Fließfläche möglich. Durch Umstellen von Gleichung (4.21) und unter Verwendung des Triaxialitätsparameters η aus Gleichung (2.31) folgt die dimensionslose Form der BURZYŃSKI-YAGN-Fließfläche mit

$$\frac{q}{\sigma_{\text{BY}}} = \left(-\frac{3}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\eta + \sqrt{\frac{9}{4}(\gamma_1 + \gamma_2)^2\eta^2 - 9\gamma_1\gamma_2\eta^2 + (1-\gamma_1)(1-\gamma_2)} \right)^{-1}. \quad (5.36)$$

Für eine einachsige Zugbelastung mit $\eta = -\frac{1}{3}$ nimmt die Gleichung (5.36) immer den Wert Eins an. Die Fließfläche nach SCHLEICHER mit den angepassten Parametern γ_1 und γ_2 für das Polyamid 6 ist in Abbildung 5.11 dargestellt. Die Stützpunkte für die Parameteranpassung sind

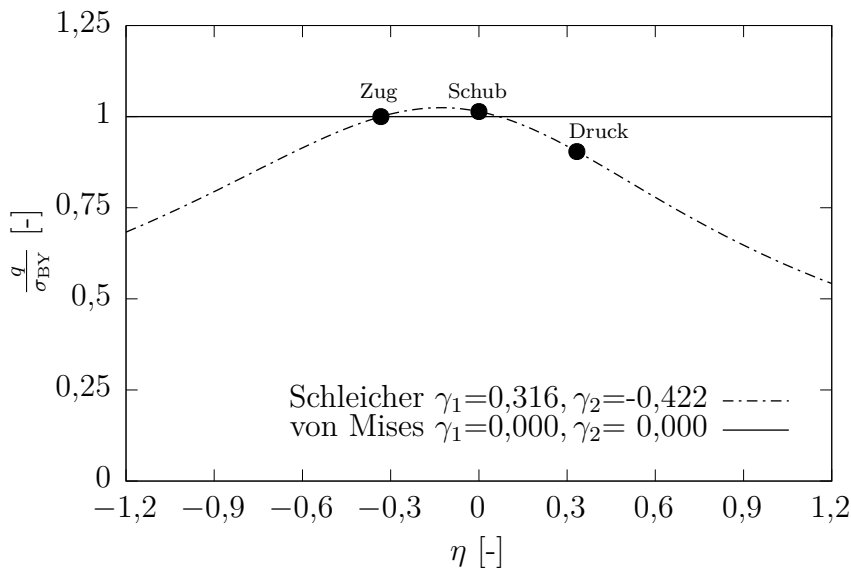


Abbildung 5.11.: Dimensionslose Darstellung der BURZYŃSKI-YAGN-Fließfläche mit den angepassten Parametern γ_1 und γ_2 für Polyamid 6, sowie zum Vergleich die VON MISES Fließfläche

mit schwarzen Punkten gekennzeichnet. Zum Vergleich wird zusätzlich die Fließfläche nach VON MISES im Diagramm gezeigt.

5.2.3. Plastische Kompressibilität

Wie im letzten Unterabschnitt 5.2.2 erwähnt, erfolgt die Berücksichtigung der Spannungsmehrachsigkeit im viskoplastischen Teilmodell auch mit dem plastischen Potential $\Psi_{ZH}(p, q)$, siehe Unterabschnitt 4.2.2. Das plastische Potential Ψ_{ZH} aus Gleichung (4.25) beeinflusst die Fließrichtung und steuert über den Parameter ω auch die viskoplastische Kompressibilität. Ist der Kompressibilitätsparameter ω gleich Null, so verhält sich das Material plastisch inkompressibel. Für das Polyamid 6 erfolgte in Unterabschnitt 5.2.1 bereits die Auswertung des plastischen Kompressibilitätsparameters ω_Z für die Zugversuche nach Gleichung (5.27). Das Diagramm (b) in Abbildung 5.5 zeigt, dass es sich bei ω_Z um keinen konstanten Parameter handelt, sondern dass ω_Z offenbar eine Funktion in Abhängigkeit der viskoplastischen Vergleichsdehnung, der viskoplastischen Vergleichsdehnrates und der Temperatur ist. Es wird wiederum deutlich der Einfluss des Glasübergangsbereichs sichtbar. Bei Temperaturen innerhalb des Glasübergangsbereichs ist eine stärkere Abhängigkeit des Kompressibilitätsparameters ω_Z von der viskoplastischen Vergleichsdehnrates $\dot{\varepsilon}_V^{pl}$ zu erkennen, siehe die verstärkte Aufspreizung der 60 °C Kurvenschar im Diagramm (b) in Abbildung 5.5. Zur phänomenologischen Beschreibung von ω_Z in Abhängigkeit von ε_V^{vp} , $\dot{\varepsilon}_V^{pl}$ und T wurde erneut die Arcustangens-Funktion herangezogen und mit einem quadratischen Term kombiniert, der die Abhängigkeit von der viskoplastischen Vergleichsdehnung berücksichtigt:

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

$$\omega_Z(\varepsilon_V^{\text{vp}}, \varepsilon_V^{\text{pl}}, T) = \omega_{Z_0} + \frac{a_3}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \left(b_3 \left(T - c_3 \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) - d_3 \right) \right) \right) (\varepsilon_V^{\text{vp}})^2 \quad (5.37)$$

Es wird weiterhin definiert, dass die Funktion (5.37) bei $\varepsilon_V^{\text{vp}} = 0$ einen konstanten Wert ω_{Z_0} annimmt, was nicht das exakte Verhalten der Kurven bei 25 °C und 40 °C beschreibt. Bei den genannten Kurven ist eine geringfügige Verschiebung von ω_Z in Abhängigkeit von $\varepsilon_V^{\text{pl}}$ zu erkennen. Die Anpassung der Funktion (5.37) an die experimentellen Zugversuchsdaten aus Diagramm (b) in Abbildung 5.5 erfolgte hier mit der Software SCILAB, gemäß der Vorgehensweise bei der Anpassung der Dehnungsverfestigungsfunktion (5.31) in Unterabschnitt 5.2.1. In den Diagrammen in Abbildung 5.12 ist die angepasste Funktion $\omega_Z(\varepsilon_V^{\text{vp}}, \varepsilon_V^{\text{pl}}, T)$ zusammen mit den experimentell ermittelten Kurven, getrennt nach Temperaturen, dargestellt. Die Abbildung A.4 im Anhang A.5 zeigt wiederum die räumliche Darstellung der angepassten Funktion, aufgeteilt auf mehrere Diagramme für verschiedene konstante Temperaturen.

Mit Hilfe der Gleichung (5.27) kann zusätzlich der Kompressibilitätsparameter ω_D aus den einachsigen Druckversuchen ermittelt und über die entsprechende viskoplastische Vergleichsdehnung

$$\varepsilon_V^{\text{vp}} = - \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_1 - \gamma_2}} \varepsilon_{11}^{\text{vp}} \quad (5.38)$$

aufgetragen werden. In Abbildung 5.13 sind die entsprechenden experimentellen Kurven dargestellt. Aufgrund der starken Oszillationen in einigen Kurven und der geringen Anzahl von durchgeführten Druckversuchen ist hier keine eindeutige Abhängigkeit des Kompressibilitätsparameters ω_D von $\varepsilon_V^{\text{vp}}$, $\varepsilon_V^{\text{pl}}$ und T zu erkennen. Auffällig ist nur, dass ω_D negative Werte annimmt. Das bedeutet, dass unter viskoplastischer Kompression das Volumen zunimmt. Dieses Verhalten wurde schon bei der Auswertung der relativen Volumenänderung in Unterabschnitt 3.1.4.3 deutlich und mögliche Ursachen wurden genannt. Im Materialmodell wird aufgrund der fehlenden Datenbasis ein konstanter Wert für ω_D von -0,5 angenommen, siehe Darstellung in Abbildung 5.13. Die Parameter des Modells zur Beschreibung des Kompressibilitätsparameters sind in Tabelle A.1 im Anhang A.1 aufgeführt.

Ähnlich wie die Fließfläche σ_{BY} , beschreibt das ZHANG-Potential Ψ_{ZH} ebenfalls eine rotationsymmetrische Äquipotentialfläche im Hauptspannungsraum und lässt sich vereinfacht in einem zweidimensionalen Diagramm darstellen, siehe auch Abbildung 4.2. Hier wird wiederum die dimensionslose Darstellung

$$\frac{q}{\Psi_{\text{ZH}}} = \left(\sqrt{1 + \omega \eta^2} \right)^{-1} \quad (5.39)$$

in Abhängigkeit des Triaxialitätsparameters η aus Gleichung (2.31) gewählt. In Abbildung 5.14

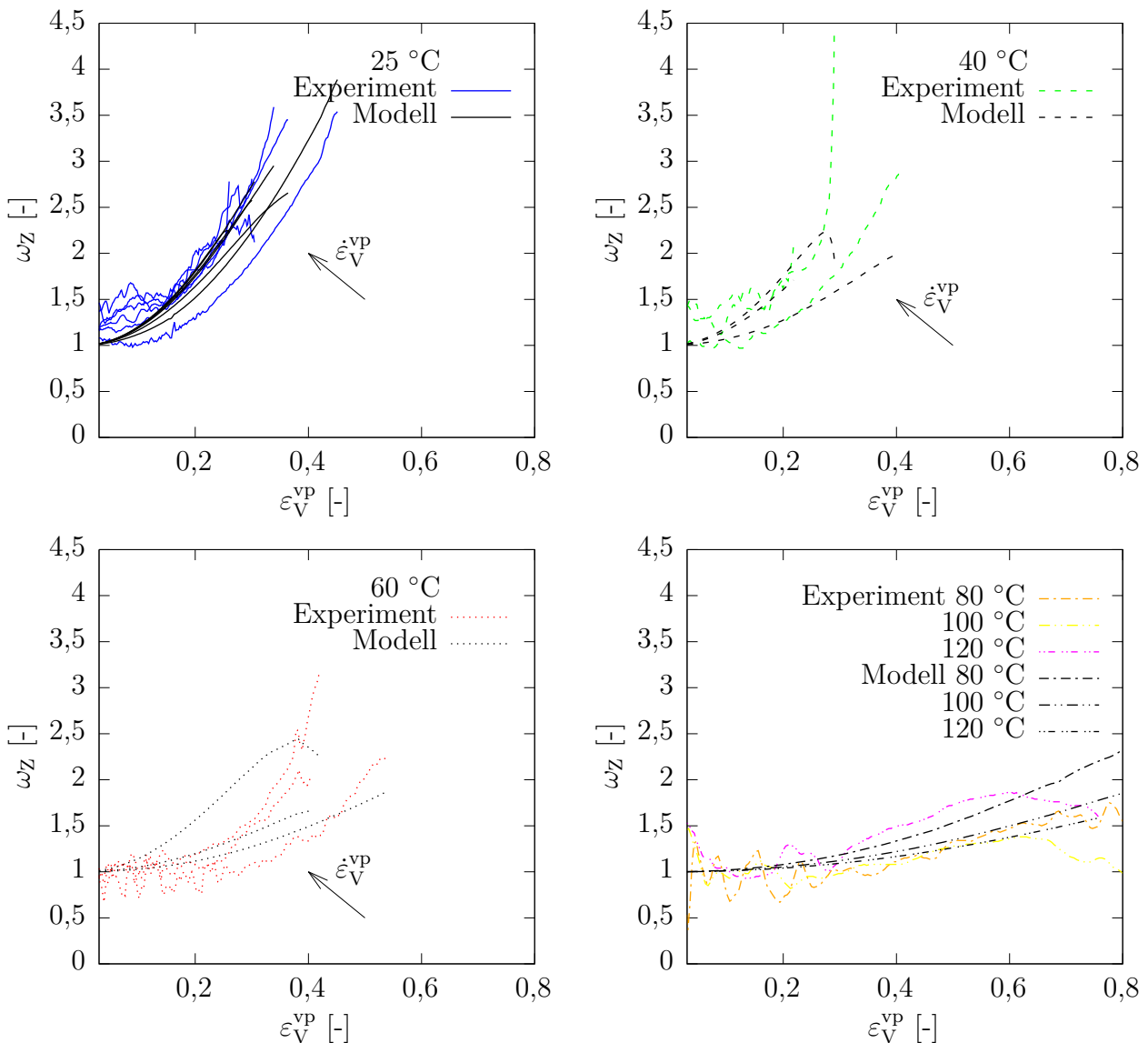


Abbildung 5.12.: Experimenteller und modellierter Kompressibilitätsparameter ω_Z mit den angepassten Parametern a_3 , b_3 , c_3 , d_3 und ω_{Z_0} , aufgeteilt nach unterschiedlichen Versuchstemperaturen

erfolgt die Darstellung des Potentials abschnittsweise, aufgeteilt in den Zugbereich ω_Z mit $\eta < 0$ und den Druckbereich ω_D mit $\eta > 0$. Für den Zugbereich sind zwei Kurven für $\omega_Z = 1$ und $\omega_Z = 4,5$ dargestellt, die in etwa den Wertebereich des untersuchten Polyamid 6 aufspannen. Zum Vergleich ist zusätzlich noch das Potential für den plastisch inkompressiblen Fall mit $\omega = 0$ (VON MISES Plastizität) gegenübergestellt.

Abschließend soll noch auf den Zusammenhang zwischen dem Kompressibilitätsparameter ω und der plastischen Querkontraktionszahl ν_{12}^{vp} sowie deren Gültigkeitsbereiche eingegangen werden. Angelehnt an die elastische Querkontraktionszahl (5.3) wird in der Literatur oft die in-

5. Modellerweiterungen und Parameteridentifikation

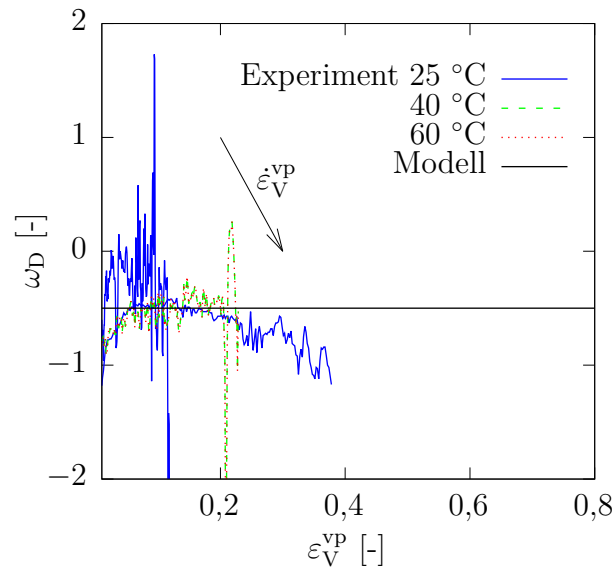


Abbildung 5.13.: Experimenteller Kompressibilitätsparameter ω_D bei unterschiedlichen Temperaturen und Dehnraten sowie der konstante Modellparameter

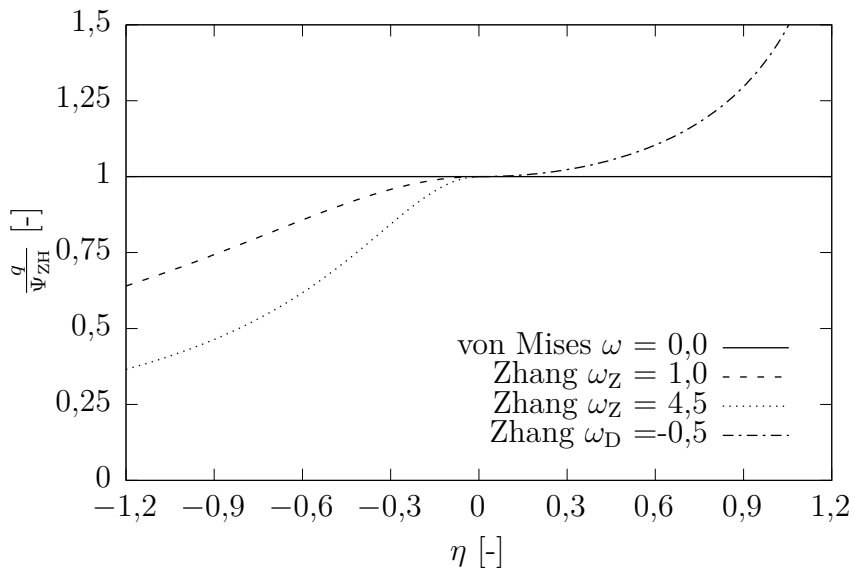


Abbildung 5.14.: Dimensionslose Darstellung des ZHANG-Potentials mit den angepassten Parametern ω_Z und ω_D für das Polyamid 6, sowie zum Vergleich das VON MISES-Potential für den plastisch inkompressiblen Fall

elastische beziehungsweise die plastische Querkontraktionszahl

$$\nu_{12}^{vp} = -\frac{\dot{\epsilon}_{22}^{vp}}{\dot{\epsilon}_{11}^{vp}} \quad (5.40)$$

verwendet [3, 51, 52]. Durch Einsetzen des Ausdrucks (5.40) in die Gleichung (5.27) erhält man ω in Abhängigkeit von ν_{12}^{vp} :

$$\omega = 9 \frac{\frac{1}{2} - \nu_{12}^{\text{pl}}}{1 + \nu_{12}^{\text{pl}}}. \quad (5.41)$$

In [51] wird ein zulässiger Wertebereich für ν_{12}^{vp} im Zusammenhang mit dem ZHANG-Potential angegeben:

$$\nu_{12}^{\text{vp}} \in [0, \frac{1}{2}]. \quad (5.42)$$

Das Einsetzen der Grenzen für die plastische Querkontraktionszahl (5.42) in Gleichung (5.41) liefert den zulässigen Wertebereich für ω :

$$\omega \in [0, \frac{9}{2}]. \quad (5.43)$$

Die Einhaltung dieser Grenzen bedeutet, dass die Äquipotentialfläche nach ZHANG eine konvexe und somit geschlossene Fläche im Hauptspannungsraum darstellt. Der für das Polyamid 6 gemessene Kompressibilitätsparameter ω_{D} verletzt offensichtlich diesen Zulässigkeitsbereich, was zu einer nichtkonvexen und damit nichtgeschlossenen Äquipotentialfläche im Hauptspannungsraum führt. Dies ist auch bereits in der zweidimensionalen Darstellung 5.14 leicht zu erkennen. Negative Auswirkungen auf die Vorhersagegenauigkeit des Materialmodells und/oder das Konvergenzverhalten, die sich möglicherweise durch den negativen Kompressibilitätsparameter im Druckbereich ergeben könnten, wurden in dieser Arbeit nicht weiter untersucht.

6. Numerische Implementierung

In diesem Kapitel wird die zeitliche Diskretisierung der Materialgleichungen vorgenommen sowie ein Algorithmus zu deren numerischen Integration aufgestellt. Das neue Materialmodell kann damit anschließend in der diskretisierten Form über die Benutzerroutine VUMAT in die Software ABAQUS/EXPLICIT implementiert werden. Die VUMAT liefert dem Anwender eine Reihe von Eingangsgrößen zu Beginn eines jeden Zeitinkrements zum Zeitpunkt t und verlangt die Berechnung und Rückgabe bestimmter Größen am Ende des Zeitinkrements zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ [22]. Bei der Implementierung des vorliegenden Materialmodells werden folgende von der Benutzerroutine zum Zeitpunkt t bereitgestellten Eingangsgrößen verwendet:

- Zeitinkrement Δt ,
- Temperatur $[T]_t$ und $[T]_{t+\Delta t}$,
- Tensor der totalen Verzerrungsincremente $\Delta \boldsymbol{\epsilon}^{\text{tot}}$,
- Cauchy'scher Spannungstensor $[\boldsymbol{\sigma}]_t$,
- Geschichtsvariablen $[\Gamma_i]_t$ mit $(i = 1, \dots, k)$,
- massenspezifische reversible Verzerrungsenergie $[r^{\text{rev}}]_t$,
- massenspezifische irreversible Verzerrungsenergie $[r^{\text{irrev}}]_t$.

Folgende Größen müssen zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ berechnet und an die VUMAT zurückgegeben werden:

- Cauchy'scher Spannungstensor $[\boldsymbol{\sigma}]_{t+\Delta t}$,
- Geschichtsvariablen $[\Gamma_i]_{t+\Delta t}$,
- massenspezifische reversible Verzerrungsenergie $[r^{\text{rev}}]_{t+\Delta t}$,
- massenspezifische irreversible Verzerrungsenergie $[r^{\text{irrev}}]_{t+\Delta t}$.

Zu den genannten Geschichtsvariablen zählen vor allem die inneren Variablen, wie die Komponenten des plastischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\epsilon}^{\text{vp}}$ und die akkumulierte plastische Vergleichsdehnung $\varepsilon_V^{\text{vp}}$. Unter anderem für Postprozessingzwecke werden jedoch noch weitere Größen als

Geschichtsvariablen mitgeführt, zum Beispiel die Komponenten des totalen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}}$, des elastischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}}$ und des thermischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}$. Der massenspezifische reversible Energieterm und der massenspezifische irreversible Energieterm fließen in die Energieerhaltungsgleichung ein. Deren Berücksichtigung in der Benutzerroutine ist nur für den Fall einer thermisch-mechanisch gekoppelten Simulation relevant. Die Ermittlung der Rückgabegrößen am Ende des Zeitinkrements geschieht durch die Anwendung der folgenden diskreten Gleichungen:

$$[\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t} = [\boldsymbol{\sigma}]_{|t} + \Delta\boldsymbol{\sigma}, \quad (6.1)$$

$$[\Gamma_i]_{|t+\Delta t} = [\Gamma_i]_{|t} + \Delta\Gamma_i, \quad (6.2)$$

$$[r^{\text{rev}}]_{|t+\Delta t} = [r^{\text{rev}}]_{|t} + \Delta r^{\text{rev}}, \quad (6.3)$$

$$[r^{\text{irrev}}]_{|t+\Delta t} = [r^{\text{irrev}}]_{|t} + \Delta r^{\text{irrev}}. \quad (6.4)$$

Die Inkremente auf der rechten Seite der Gleichungen (6.1) bis (6.4) sind die unbekanntenen Größen und mit geeigneten Diskretisierungsverfahren zu berechnen.

Eine Besonderheit bei der thermisch-mechanisch gekoppelten Simulation mit ABAQUS/EXPLICIT unter Verwendung einer VUMAT ist, dass die Temperatur zum Zeitpunkt t und am Ende des Zeitinkrements bei $t + \Delta t$ bereits als Eingangsgrößen vorgegeben werden [22]. Eine Gleichgewichtsiteration unter Einbeziehung der Temperatur innerhalb der Benutzerroutine ist somit nicht vorgesehen. Dieses bietet Vor- und Nachteile bei der Implementierung des vorliegenden Materialmodells. Der Vorteil ist, dass sich der Algorithmus zur numerischen Integration der Materialgleichungen enorm vereinfacht. Dieses kann sich jedoch negativ auf die Genauigkeit des implementierten Materialmodells auswirken. Da das gesamte Materialmodell temperaturabhängig formuliert ist, muss streng genommen eine Gleichgewichtsiteration unter Einbeziehung des elastischen, des thermischen und des plastischen Verzerrungstensors sowie der Temperatur aufgrund der thermischen Effekte erfolgen. Auf Details der Vereinfachungen des Algorithmus wird im weiteren Verlauf noch eingegangen.

6.1. Diskretisierungsverfahren

Für die Berechnung der unbekanntenen Inkremente aus den Gleichungen (6.1) bis (6.4) werden gewöhnlich Diskretisierungsverfahren erster Ordnung verwendet. Zwei häufig eingesetzte Diskretisierungsverfahren sollen am Beispiel des Spannungstensorinkrements $\Delta\boldsymbol{\sigma}$ vorgestellt werden. Bei den beiden Verfahren handelt es sich um das explizite Euler-Verfahren und das implizite Euler-Verfahren. Bei dem expliziten Euler-Verfahren erfolgt die Berechnung des Inkrements aus dem gegebenen Zeitinkrement Δt und der zeitlichen Ableitung des Spannungstensors $\dot{\boldsymbol{\sigma}}(t, \boldsymbol{\sigma})$

6. Numerische Implementierung

am Zeitpunkt t :

$$[\Delta\boldsymbol{\sigma}]_t = \Delta t \dot{\boldsymbol{\sigma}}(t). \quad (6.5)$$

Der Vorteil dieses Verfahrens ist, dass man das Inkrement direkt aus den gegebenen Größen beim Zeitpunkt t berechnen kann. Nachteilig an diesem Verfahren ist, dass es nicht bedingungslos stabil ist. Eine Zeitschrittkontrolle mit Bestimmung eines entsprechenden kritischen Zeitinkrements ist hier notwendig für eine stabile Anwendung des Verfahrens [23]. Mit dem impliziten Euler-Verfahren wird das gesuchte Inkrement aus dem gegebenen Zeitinkrement Δt und der zeitlichen Ableitung des Spannungstensors $\dot{\boldsymbol{\sigma}}(t + \Delta t)$ am Zeitpunkt $t + \Delta t$ berechnet:

$$[\Delta\boldsymbol{\sigma}]_{t+\Delta t} = \Delta t \dot{\boldsymbol{\sigma}}(t + \Delta t). \quad (6.6)$$

In diesem Fall kann die Ableitung $\dot{\boldsymbol{\sigma}}(t + \Delta t)$ nicht direkt angegeben werden, sondern muss durch Anwendung eines geeigneten numerischen Algorithmus iterativ bestimmt werden. Hierzu werden oft Newton-Verfahren oder Newtonähnliche-Verfahren eingesetzt. Vorteilhaft an dem impliziten Euler Verfahren ist, dass es kein Stabilitätslimit bezüglich des Zeitinkrements gibt [23].

In der vorliegenden Arbeit wird für die Zeitintegration der Konstitutivgleichungen innerhalb der VUMAT das implizite Euler-Verfahren verwendet. Wie die Gleichungen (6.5) und (6.6) zudem zeigen, basiert die Diskretisierung auf den zeitlichen Ableitungen (Raten) der gesuchten Größen. Daher wurden bereits in Kapitel 4 alle zu diskretisierenden Gleichungen auch in der Ratenform angegeben.

6.2. Numerischer Integrationsalgorithmus

Der im Rahmen dieser Arbeit erweiterte Algorithmus zur zeitlichen Integration der Konstitutivgleichungen basiert auf einem Algorithmus von ARAVAS [4], welcher ursprünglich für die Integration druckabhängiger Elastoplastizitätsmodelle in impliziten Finite-Elemente-Programmen entwickelt wurde. Der Originalalgorithmus berücksichtigt keine Dehnraten- und Temperaturabhängigkeit. Er wird zum Beispiel in dem ABAQUS/STANDARD Materialmodell für poröse Materialien, dem Porous-Metal-Plasticity Materialmodell, eingesetzt [21]. Das genannte Materialmodell beinhaltet neben einer druckabhängigen Plastizität auch eine Schädigungsevolutionsgleichung zur Beschreibung von Hohlraumwachstum nach GURSON [40]. In der Arbeit von JUNGINGER [48] wurde der Algorithmus nach ARAVAS bereits für die Integration eines elastisch-viskoplastischen Materialmodells in einem expliziten Finite-Elemente-Programm verwendet. In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, dass eine Erweiterung des Algorithmus zur zeitlichen Integration der thermoelastisch-thermoviskoplastischen Konstitutivgleichungen für

die Anwendung in thermisch-mechanisch gekoppelten Simulationen mit ABAQUS/EXPLICIT möglich ist.

Ausgangspunkt des Integrationsverfahrens für das vorliegende Materialmodell ist die inkrementelle Formulierung der Konstitutivgleichung in der Ratenform aus Gleichung (4.16). Unter Anwendung des impliziten Euler-Verfahrens kann das Inkrement des Cauchy'schen Spannungstensors zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ zunächst wie folgt angegeben werden:

$$\begin{aligned}
 [\Delta\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t} &= [2G(\Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{tot}} - \Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{vp}}) + K((\Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{tot}} - \Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{vp}} - \Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} \\
 &\quad + 2\Delta G(\mathbf{e}^{\text{tot}} - \mathbf{e}^{\text{vp}}) + \Delta K((\boldsymbol{\epsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\epsilon}^{\text{vp}} - \boldsymbol{\epsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}]_{|t+\Delta t}. \quad (6.7)
 \end{aligned}$$

Die Tabelle 6.1 gibt eine Übersicht der in Gleichung (6.7) enthaltenen abhängigen und unabhängigen Größen zum Zeitpunkt $t + \Delta t$. Die dritte Spalte enthält das Inkrement des viskoplastischen Verzerrungstensors $\Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{vp}}$ als einzige unbekannte unabhängige Größe bei $t + \Delta t$. Alle anderen unabhängigen Größen sind gegeben und die ersten zehn abhängigen Größen in Spalte eins können damit in jedem Zeitschritt unmittelbar berechnet werden. An dieser Stelle ist es wichtig zu erwähnen, dass bei den Funktionen der elastischen Koeffizienten G , ΔG , K und ΔK eine vereinfachende Annahme getroffen wurde. Die genannten Funktionen sind unter anderem abhängig von der elastischen Vergleichsdehnrate $\dot{\epsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}$, siehe Gleichung (5.8). Gemäß der additiven Zerlegung des totalen Verzerrungstensors nach Gleichung (4.1) ist die elastische Vergleichsdehnrate $[\dot{\epsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}]_{|t+\Delta t}$ eine Funktion der Inkremente des totalen Verzerrungstensors $[\Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{tot}}]_{|t+\Delta t}$ und des viskoplastischen Verzerrungstensors $[\Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{vp}}]_{|t+\Delta t}$:

$$[\dot{\epsilon}_{\text{V}}^{\text{el}}(\Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{tot}}, \Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{vp}})]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\sqrt{\frac{2}{3}(\Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{tot}} - \Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{vp}}) \cdot \cdot (\Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{tot}} - \Delta\boldsymbol{\epsilon}^{\text{vp}})}}{\Delta t} \right]_{|t+\Delta t}. \quad (6.8)$$

Damit würde sich während der iterativen Bestimmung des viskoplastischen Verzerrungsinkrements auch immer die elastische Vergleichsdehnrate und in Folge auch die von dieser Größe abhängigen Funktionen mit ändern. Der numerische Algorithmus müsste also die elastischen und die viskoplastischen Größen in die Gleichgewichtssiteration mit einbeziehen. Dieses würde die Komplexität des Algorithmus enorm erhöhen und das Konvergenzverhalten negativ beeinträchtigen, zumal in kurzzeitdynamischen Simulationen die Dehnraten immer sehr stark oszillieren können. Des Weiteren könnte die später vorgestellte und verwendete Return-Mapping-Methode nicht ohne Weiteres genutzt werden, da die Durchführung eines elastischen Prädiktorschritts aufgrund der von der elastischen Vergleichsdehnrate abhängigen Größen nicht möglich ist. Daher wurde die Vereinfachung getroffen, dass die elastische Vergleichsdehnrate innerhalb eines Zeitinkrements konstant bleibt. Es gilt somit innerhalb eines diskreten Zeitschritts Δt die An-

6. Numerische Implementierung

Abhängige Größen bei $t + \Delta t$	Unabhängige Größen bekannt bei $t + \Delta t$	Unabhängige Größen gesucht bei $t + \Delta t$
$G(\dot{\varepsilon}_{V t}^{\text{el}}, T)$	$\dot{\varepsilon}_{V t}^{\text{el}}, T$	-
$\Delta G(\dot{\varepsilon}_{V t}^{\text{el}}, T, \Delta T)$	$\dot{\varepsilon}_{V t}^{\text{el}}, T, \Delta T$	-
$K(\varepsilon_{V t}^{\text{el}}, T)$	$\varepsilon_{V t}^{\text{el}}, T$	-
$\Delta K(\dot{\varepsilon}_{V t}^{\text{el}}, T, \Delta T)$	$\dot{\varepsilon}_{V t}^{\text{el}}, T, \Delta T$	-
$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{ t}^{\text{tot}}, \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}})$	$\boldsymbol{\varepsilon}_{ t}^{\text{tot}}, \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}}$	-
$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}}$	$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}}$	-
$\mathbf{e}^{\text{tot}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{ t}^{\text{tot}}, \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}})$	$\boldsymbol{\varepsilon}_{ t}^{\text{tot}}, \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}}$	-
$\Delta \mathbf{e}^{\text{tot}}(\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}})$	$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}}$	-
$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}(T)$	T	-
$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}(T, \Delta T)$	$T, \Delta T$	-
$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{ t}^{\text{vp}}, \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}})$	$\boldsymbol{\varepsilon}_{ t}^{\text{vp}}$	$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}$
$\mathbf{e}^{\text{vp}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{ t}^{\text{vp}}, \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}})$	$\boldsymbol{\varepsilon}_{ t}^{\text{vp}}$	$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}$
$\Delta \mathbf{e}^{\text{vp}}(\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}})$	-	$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}$

Tabelle 6.1.: Abhängige und unabhängige Größen in der diskretisierten Konstitutivgleichung für die Cauchy'sche Spannung

nahme:

$$[\dot{\varepsilon}_{V|t+\Delta t}^{\text{el}}] \approx [\dot{\varepsilon}_{V|t}^{\text{el}}]. \quad (6.9)$$

Die Funktionen für ΔG und ΔK werden in Anhang B.1, unter Berücksichtigung der eben getroffenen Vereinfachung für die elastische Vergleichsdehnrate, ausführlich hergeleitet. Wie bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel erwähnt, würde sich eine entsprechende Erhöhung der Komplexität des numerischen Algorithmus auch bei der Einbeziehung der Temperatur in die Gleichgewichtsiteration ergeben. Aufgrund des vorgegebenen Temperaturinkrements durch die Benutzeroutine selbst und die getroffene Annahme für die elastische Vergleichsdehnrate vereinfacht sich das numerische Integrationsverfahren enorm. Es muss also nur das Inkrement des viskoplastischen Verzerrungstensors $[\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}]_{|t+\Delta t}$ innerhalb eines Zeitinkrements iterativ bestimmt werden.

Die Herleitung eines Algorithmus zur Zeitintegration inklusive der Bestimmung des viskoplastischen Verzerrungsinkrements in Anlehnung an die Veröffentlichung von ARAVAS [4] wird im Folgenden vorgestellt. Die Zeitintegration der diskretisierten Konstitutivgleichung (6.7) erfolgt hierbei mit der impliziten Return-Mapping-Methode [23]. Bei der Return-Mapping-Methode

handelt es sich um ein zweistufiges Zeitintegrationsverfahren. Zunächst wird ein elastischer Prädiktorschritt unter Vernachlässigung des viskoplastischen Dehnungsincrements durchgeführt. Durch Einsetzen von $[\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VP}}]_{|t+\Delta t} = 0$ in die Gleichung (6.7) erhält man somit das Inkrement der Prädiktorspannung

$$[\Delta \boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}} = [2G\Delta \mathbf{e}^{\text{tot}} + K((\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} + 2\Delta G\mathbf{e}^{\text{tot}} + \Delta K((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}]_{|t+\Delta t} - 2[\Delta G]_{|t+\Delta t}[\mathbf{e}^{\text{VP}}]_{|t} - [\Delta K]_{|t+\Delta t}[(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VP}} \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}]_{|t} \quad (6.10)$$

und die Prädiktorspannung

$$[\boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}} = [\boldsymbol{\sigma}]_t + [\Delta \boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}}. \quad (6.11)$$

Mit Hilfe der Fließfunktion Φ aus Gleichung (4.17) und des Fließkriteriums (4.18) erfolgt anschließend die Überprüfung, ob es sich bei dem Prädiktorschritt um einen rein elastischen Verformungsschritt handelt oder zusätzlich noch viskoplastisches Fließen auftritt. Nimmt die Fließfunktion

$$[\Phi]_{\text{pr}} = \sigma_{\text{BY}}([p]_{\text{pr}}, [q]_{\text{pr}}) - \sigma_{\text{F}}([\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}]_{|t}, [\dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{VP}}]_{|t}, [T]_{|t+\Delta t}) \quad (6.12)$$

einen Wert $[\Phi]_{\text{pr}} \leq 0$ an, dann handelt es sich um einen rein elastischen Verformungsschritt und es kann anschließend direkt zum nächsten Zeitschritt übergegangen werden. Die zweite Zeitintegrationsstufe entfällt damit. Das Inkrement des Cauchy'schen Spannungstensors zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ entspricht in diesem Fall dem Inkrement des Prädiktorschritts mit

$$[\Delta \boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t} = [\Delta \boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}}. \quad (6.13)$$

Bei einer Verletzung des Fließkriteriums mit $[\Phi]_{\text{pr}} > 0$ findet viskoplastisches Fließen statt. Folglich muss in einem Korrektorschritt (Return-Mapping) der Spannungstensor $[\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t}$ in Abhängigkeit des viskoplastischen Verzerrungsincrements $[\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VP}}]_{|t+\Delta t}$ korrigiert werden:

$$[\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t} = [\boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}} + [\Delta \boldsymbol{\sigma}(\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VP}})]_{\text{korr}}. \quad (6.14)$$

Der Korrektorschritt erfolgt durch eine iterative Anpassung des viskoplastischen Verzerrungsincrements $[\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VP}}]_{|t+\Delta t}$, so dass die Konstitutivgleichung, das Fließkriterium, die Fließregel und das isotrope Verfestigungsgesetz (siehe Unterabschnitt 4.2.3) am Ende des Zeitinkrements erfüllt werden. In Abbildung 6.1 ist die Return-Mapping-Methode schematisch dargestellt.

Aufgrund der Tatsache, dass der viskoplastische Verzerrungsanteil im vorliegenden Materialmodell nicht durch den gesamten Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$, sondern durch die beiden skalierten Invarianten p und q getrieben wird (siehe Unterabschnitt 4.2.2), kann ein reduziertes nichtli-

6. Numerische Implementierung

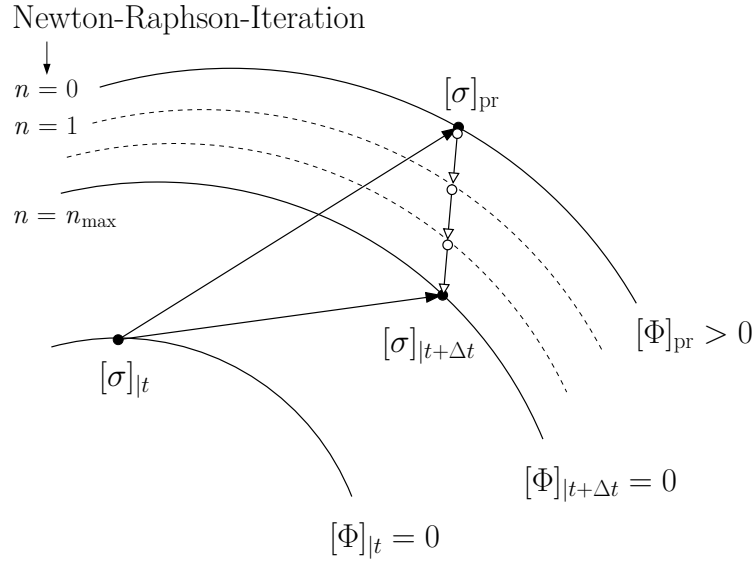


Abbildung 6.1.: Schematische Darstellung der Return-Mapping-Methode

neares Gleichungssystem zur Durchführung der Spannungskorrektur aufgestellt und iterativ mit einem Newton-Raphson-Verfahren gelöst werden. In [4] beschreibt ARAVAS das Vorgehen bereits für druckabhängige Plastizitätsmodelle. Das beschriebene Verfahren wird nun für das vorliegende Materialmodell erweitert und adaptiert. Letztendlich geht es darum, die bei der iterativen Anpassung des viskoplastischen Dehnungsincrementes zu erfüllenden Gleichungen geschickt zu vereinfachen.

Dazu wird zunächst der volumetrische und der deviatorische Skalierungsterm in der Fließregel (4.31) zu jeweils einem neuen Skalierungsfaktor zusammengefasst. Die inkrementelle Fließregel für den Zeitpunkt $t + \Delta t$ lässt sich damit wie folgt angeben:

$$[\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}]_{|t+\Delta t} = [\Delta \varepsilon_q \mathbf{n} + \frac{1}{3} \Delta \varepsilon_p \mathbf{I}]_{|t+\Delta t}. \quad (6.15)$$

Bei den Größen $\Delta \varepsilon_p$ und $\Delta \varepsilon_q$ handelt es sich um das volumetrische und das deviatorische plastische Dehnungsincrement

$$[\Delta \varepsilon_p]_{|t+\Delta t} = \left[-\Delta \gamma \frac{\omega p}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}} \right]_{|t+\Delta t} \quad (6.16)$$

und

$$[\Delta \varepsilon_q]_{|t+\Delta t} = \left[\Delta \gamma \frac{q}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}} \right]_{|t+\Delta t}. \quad (6.17)$$

Der volumetrische Anteil $\Delta \varepsilon_p$ beschreibt die plastische Kompressibilität und der deviatorische

Anteil $\Delta\varepsilon_q$ die rein plastische Gestaltänderung. Durch Division der beiden Gleichungen (6.16) und (6.17) kann der viskoplastische Multiplikator $\Delta\gamma$ eliminiert werden und es folgt nach Umstellung eine neue Bedingung in Form einer skalaren Gleichung:

$$[\Psi^*]_{|t+\Delta t} = [\Delta\varepsilon_q\omega p + \Delta\varepsilon_p q]_{|t+\Delta t} = 0. \quad (6.18)$$

Die Gleichung (6.18) wird später in dem reduzierten nichtlinearen Gleichungssystem die Fließregel ersetzen.

Durch Projektion der Gleichung (6.1) unter Verwendung des Spannungsinkrements aus Gleichung (6.7) auf den Einheitstensor \mathbf{I} und den normierten deviatorischen Fließvektor \mathbf{n} erhält man jeweils eine Gleichung für die Aktualisierung des hydrostatischen Drucks $[p]_{|t+\Delta t}$

$$[p]_{|t+\Delta t} = [p]_{\text{pr}} + [(K + \Delta K)\Delta\varepsilon_p]_{|t+\Delta t} \quad (6.19)$$

und die Aktualisierung der von Mises Vergleichsspannung $[q]_{|t+\Delta t}$

$$[q]_{|t+\Delta t} = [q]_{\text{pr}} - [3(\Delta G + G)\Delta\varepsilon_q]_{|t+\Delta t}. \quad (6.20)$$

Eine ausführliche Herleitung der beiden Gleichungen (6.19) und (6.20) befindet sich im Anhang B.2. Im Unterschied zu den in [4] veröffentlichten Gleichungen für die Aktualisierung von p und q enthalten die vorliegenden Gleichungen noch die zusätzlichen Terme $\Delta K\Delta\varepsilon_p$ beziehungsweise $-3\Delta G\Delta\varepsilon_q$, die aus der Temperaturabhängigkeit der elastischen Konstitutivgleichung (4.13) herrühren. In dem später gezeigten reduzierten nichtlinearen Gleichungssystem zur Bestimmung des viskoplastischen Verzerrungsincrements $[\Delta\varepsilon^{\text{vp}}]_{|t+\Delta t}$ ersetzen die Gleichungen (6.19) und (6.20) die Konstitutivgleichung (6.14).

Die Verknüpfung des plastischen Vergleichsdehnungsincrements $\Delta\varepsilon_{\text{V}}^{\text{vp}}$ mit dem volumetrischen plastischen Dehnungsincrement $\Delta\varepsilon_p$ und dem deviatorischen plastischen Dehnungsincrement $\Delta\varepsilon_q$ gelingt wiederum über die Äquivalenz der plastischen Dissipationsarbeit aus Gleichung (4.33) unter Berücksichtigung von Gleichung (6.15):

$$[\sigma_{\text{BY}}\Delta\varepsilon_{\text{V}}^{\text{vp}}]_{|t+\Delta t} = [\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \Delta\varepsilon^{\text{vp}}]_{|t+\Delta t} = \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot (\Delta\varepsilon_q \mathbf{n} + \frac{1}{3}\Delta\varepsilon_p \mathbf{I}) \right]_{|t+\Delta t}. \quad (6.21)$$

Hieraus folgt das Inkrement der plastischen Vergleichsdehnung mit

$$[\Delta\varepsilon_{\text{V}}^{\text{vp}}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{q\Delta\varepsilon_q - p\Delta\varepsilon_p}{\sigma_{\text{BY}}} \right]_{|t+\Delta t}. \quad (6.22)$$

6. Numerische Implementierung

Die Gleichung (6.22) ist ebenfalls Bestandteil des reduzierten nichtlinearen Gleichungssystems.

Mit dem Fließkriterium (4.18) und den eben hergeleiteten Gleichungen (6.18), (6.19), (6.20) und (6.22) kann nun das reduzierte nichtlineare Gleichungssystem zur Lösung des viskoplastischen Verzerrungsincrements angegeben werden:

1. Fließkriterium

- $[\Phi]_{|t+\Delta t} = [\sigma_{\text{BY}}(p, q) - \sigma_{\text{F}}(\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}, \dot{\varepsilon}_{\text{V}}^{\text{VP}}, T)]_{|t+\Delta t} = 0$

2. Bedingung aus Fließregel

- $[\Psi^*]_{|t+\Delta t} = [\Delta\varepsilon_q \omega p + \Delta\varepsilon_p q]_{|t+\Delta t} = 0$

3. Konstitutivgleichungen für p und q

- $[p]_{t+\Delta t} = [p]_{\text{pr}} + [(K + \Delta K)\Delta\varepsilon_p]_{t+\Delta t}$

- $[q]_{t+\Delta t} = [q]_{\text{pr}} - [3(\Delta G + G)\Delta\varepsilon_q]_{t+\Delta t}$

4. Verfestigungsgesetz

- $[\Delta\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{q\Delta\varepsilon_q - p\Delta\varepsilon_p}{\sigma_{\text{BY}}} \right]_{|t+\Delta t}$

Damit werden die Konstitutivgleichung, das Fließkriterium, die Fließregel und das isotrope Verfestigungsgesetz am Ende des Zeitinkrements erfüllt. Das ursprüngliche nichtlineare Gleichungssystem, bestehend aus 14 Gleichungen mit den 14 unbekanntenen Größen $\sigma_{11}, \dots, \sigma_{13}, \Delta\varepsilon_{11}^{\text{VP}}, \dots, \Delta\varepsilon_{13}^{\text{VP}}, \Delta\gamma$ und $\Delta\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}$, kann nun enorm vereinfacht werden. Das neue reduzierte Gleichungssystem besteht nun nur noch aus fünf gekoppelten Gleichungen mit den fünf unbekanntenen Größen $p, q, \Delta\varepsilon_p, \Delta\varepsilon_q$ und $\Delta\varepsilon_{\text{V}}^{\text{VP}}$. Nach der iterativen Lösung des Gleichungssystems innerhalb eines Zeitinkrements Δt kann der Tensor des viskoplastischen Verzerrungsincrements $[\Delta\varepsilon^{\text{VP}}]_{|t+\Delta t}$ mit Gleichung (6.15) aus $[\Delta\varepsilon_p]_{|t+\Delta t}$ und $[\Delta\varepsilon_q]_{|t+\Delta t}$ direkt berechnet werden. Der normierte deviatorische Fließvektor $[\mathbf{n}]_{|t+\Delta t}$ ist bereits aus dem Prädiktorschritt bekannt und muss zu diesem Zeitpunkt aufgrund der Koaxialität von $[\mathbf{n}]_{|t+\Delta t}$ und $[\mathbf{n}]_{\text{pr}}$ nicht neu berechnet werden. Das Ablaufschema für die implizite Zeitintegration mit der Prädiktor-Korrektor-Methode ist in Algorithmus 6.1 beschrieben. Im Rahmen der Zeitintegration muss bei einsetzender viskoplastischer Deformation der viskoplastische Korrekturterm mit Hilfe des Return-Mapping-Algorithmus ermittelt werden, siehe Verweis in Schritt 3 in Algorithmus 6.1. Das Ablaufschema für die Newton-Raphson-Iteration befindet sich in Algorithmus 6.2.

Algorithmus 6.1 Algorithmus zur Zeitintegration der Konstitutivgleichungen

1. Bestimmung des Prädiktorspannungstensors $[\boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}}$ und der skalierten Invarianten $[p]_{\text{pr}}$ und $[q]_{\text{pr}}$
 - $[\boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}} = [\boldsymbol{\sigma}]_t + [\Delta\boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}}$, mit $[\Delta\boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}}$ nach Gleichung (6.10)
 - $[p]_{\text{pr}} = -\frac{1}{3} [\boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}} \cdot \cdot \mathbf{I}$
 - $[q]_{\text{pr}} = \sqrt{\frac{3}{2} [\mathbf{s} \cdot \cdot \mathbf{s}]_{\text{pr}}}$ mit $[\mathbf{s}]_{\text{pr}} = [\boldsymbol{\sigma}]_{\text{pr}} + [p]_{\text{pr}} \mathbf{I}$
 2. Überprüfung des Fließkriteriums
 - Falls $[\Phi]_{\text{pr}} \leq 0$, es liegt ein rein elastisches Deformationsinkrement vor
-> weiter mit Schritt 5.
 - Falls $[\Phi]_{\text{pr}} > 0$, es findet viskoplastisches Fließen statt
-> weiter mit Schritt 3.
 3. Iterative Lösung des reduzierten nichtlinearen Gleichungssystems
 - Newton-Raphson-Verfahren (Alg. 6.2) $\longrightarrow [p, q, \Delta\varepsilon_p, \Delta\varepsilon_q, \Delta\varepsilon_V^{\text{vp}}]_{|t+\Delta t}$
 4. Aktualisierung des plastischen und elastischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}}$ und $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}}$
 - $[\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}]_{|t+\Delta t} = [\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}]_t + [\Delta\varepsilon_q \mathbf{n} + \frac{1}{3} \Delta\varepsilon_p \mathbf{I}]_{|t+\Delta t}$
 5. Aktualisierung des Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$, weiterer Geschichtsvariablen Γ_i und der Energierme r^{rev} und r^{irrev}
 - $[\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t} = [\frac{2}{3} q \mathbf{n} - p \mathbf{I}]_{|t+\Delta t}$
 - $[\Gamma_i]_{|t+\Delta t} = [\Gamma_i]_t + [\Delta\Gamma_i]_{|t+\Delta t}$
 - $[r^{\text{rev}}]_{|t+\Delta t} = [r^{\text{rev}}]_t + [\Delta r^{\text{rev}}]_{|t+\Delta t}$
 - $[r^{\text{irrev}}]_{|t+\Delta t} = [r^{\text{irrev}}]_t + [\Delta r^{\text{irrev}}]_{|t+\Delta t}$
-

6. Numerische Implementierung

Zur Bestimmung des viskoplastischen Korrekturterms muss das oben hergeleitete reduzierte nichtlineare Gleichungssystem gelöst werden. Dem Vorschlag von ARAVAS [4] folgend, werden zunächst das volumetrische und das deviatorische plastische Verzerrungsinkrement $\Delta\varepsilon_p$ und $\Delta\varepsilon_q$ als primäre unbekannte Größen definiert und mit Hilfe des Newton-Raphson-Algorithmus [23, 92] iterativ bestimmt. Der Lösungsvektor für die unbekanntenen Größen zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ ist wie folgt definiert:

$$\begin{bmatrix} \Delta\varepsilon_p \\ \Delta\varepsilon_q \end{bmatrix}_{|t+\Delta t}^{n+1} = \begin{bmatrix} \Delta\varepsilon_p \\ \Delta\varepsilon_q \end{bmatrix}_{|t+\Delta t}^n - \mathbf{J}_n^{-1} \begin{bmatrix} \Phi \\ \Psi^* \end{bmatrix}_{|t+\Delta t}^n. \quad (6.23)$$

Dabei bezeichnet n den Iterationsschritt und \mathbf{J} die Jakobi-Matrix

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{d\Phi}{d\Delta\varepsilon_p} & \frac{d\Phi}{d\Delta\varepsilon_q} \\ \frac{d\Psi^*}{d\Delta\varepsilon_p} & \frac{d\Psi^*}{d\Delta\varepsilon_q} \end{bmatrix}, \quad (6.24)$$

die als Komponenten die Ableitungen der Zielfunktionen Φ und Ψ^* nach den gesuchten Größen $\Delta\varepsilon_p$ und $\Delta\varepsilon_q$ enthält. In der Iterationsvorschrift (6.23) wird jedoch die Inverse der Jakobi-Matrix \mathbf{J}^{-1} benötigt, die mit folgender Gleichung berechnet werden kann:

$$\mathbf{J}^{-1} = \frac{1}{J_{11}J_{22} - J_{12}J_{21}} \begin{bmatrix} J_{22} & -J_{12} \\ -J_{21} & J_{11} \end{bmatrix}. \quad (6.25)$$

Durch die folgende Umstellung der Iterationsvorschrift (6.23) nach

$$\begin{bmatrix} \Delta\varepsilon_p \\ \Delta\varepsilon_q \end{bmatrix}_{|t+\Delta t}^{n+1} - \begin{bmatrix} \Delta\varepsilon_p \\ \Delta\varepsilon_q \end{bmatrix}_{|t+\Delta t}^n = -\mathbf{J}_n^{-1} \begin{bmatrix} \Phi \\ \Psi^* \end{bmatrix}_{|t+\Delta t}^n = - \begin{bmatrix} k_p \\ k_q \end{bmatrix}_{|t+\Delta t}^n \quad (6.26)$$

wird leicht ersichtlich, dass die Multiplikation der inversen Jakobi-Matrix mit dem Vektor der Zielfunktionen einen Korrekturvektor liefert, mit dem der Lösungsvektor aus dem vorangegangenen Iterationsschritt korrigiert wird. Die Komponenten des Korrekturvektors k_p und k_q bezeichnet man als Residuen. Mit Hilfe der Residuen wird auch das Konvergenzverhalten des Iterationsverfahrens bewertet [92]. Die Ableitungen der Zielfunktionen Φ und Ψ^* aus der Jakobi-Matrix sind im Anhang B.3 beschrieben. An dieser Stelle sei nochmals darauf hingewiesen, dass innerhalb der Newton-Raphson-Iteration die Größen $\varepsilon_V^{\text{el}}$ und T aufgrund der oben bereits erwähnten Gründe konstant gehalten werden. Folglich gilt dieses auch für die abhängigen Größen K , G , ΔK und ΔG .

Algorithmus 6.2 Newton-Raphson-Iterationsverfahren zur Bestimmung der viskoplastischen Verzerrungsinkremente

1. Iterationsschritt $n = 0$:

Definition der Startbedingungen für $[\Delta\varepsilon_p, \Delta\varepsilon_q, p, q, \varepsilon_V^{vp}, \dot{\varepsilon}_V^{vp}, T]_{|t+\Delta t}^{n=0}$

2. Aktualisiere Größen im nichtlinearen Gleichungssystem

- $[\Phi]_{|t+\Delta t}^n = [\sigma_{BY}(p, q) - \sigma_F(\varepsilon_V^{vp}, \dot{\varepsilon}_V^{vp}, T)]_{|t+\Delta t}^n = 0$
- $[\Psi^*]_{|t+\Delta t}^n = [\Delta\varepsilon_q \omega p + \Delta\varepsilon_p q]_{|t+\Delta t}^n = 0$

3. Iterationsschritt $n = n + 1$ zur Berechnung von $[\Delta\varepsilon_p]_{|t+\Delta t}^{n+1}$ und $[\Delta\varepsilon_q]_{|t+\Delta t}^{n+1}$

- $[\Delta\varepsilon_p]_{|t+\Delta t}^{n+1} = [\Delta\varepsilon_p - k_p]_{|t+\Delta t}^n$
- $[\Delta\varepsilon_q]_{|t+\Delta t}^{n+1} = [\Delta\varepsilon_q - k_q]_{|t+\Delta t}^n$

mit den Korrekturtermen k_p und k_q , siehe Gleichung (6.26)

4. Aktualisiere $[p]_{|t+\Delta t}^{n+1}$ und $[q]_{|t+\Delta t}^{n+1}$

- $[p]_{|t+\Delta t}^{n+1} = [p]_{pr} + [(K + \Delta K)]_{pr} [\Delta\varepsilon_p]_{|t+\Delta t}^{n+1}$
- $[q]_{|t+\Delta t}^{n+1} = [q]_{pr} - [3(\Delta G + G)]_{pr} [\Delta\varepsilon_q]_{|t+\Delta t}^{n+1}$

5. Aktualisiere $[\varepsilon_V^{vp}]_{|t+\Delta t}^{n+1}$ und $[\dot{\varepsilon}_V^{vp}]_{|t+\Delta t}^{n+1}$

- $[\varepsilon_V^{vp}]_{|t+\Delta t}^{n+1} = [\varepsilon_V^{vp}]_t + \left[\frac{q\Delta\varepsilon_q - p\Delta\varepsilon_p}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}} \right]_{|t+\Delta t}^{n+1}$
- $[\dot{\varepsilon}_V^{vp}]_{|t+\Delta t}^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \left[\frac{q\Delta\varepsilon_q - p\Delta\varepsilon_p}{\sqrt{q^2 + \omega p^2}} \right]_{|t+\Delta t}^{n+1}$

6. Prüfe, ob Abbruchkriterien erfüllt sind

- $[\Phi]_{|t+\Delta t}^{n+1} < \text{tol}_1$
- $[\sqrt{k_p^2 + k_q^2}]_{|t+\Delta t}^{n+1} < \text{tol}_2$

Kriterien nicht erfüllt -> Start der nächsten Iterationsschleife bei Schritt 2.

Kriterien erfüllt -> Iterationsende, weiter mit Schritt 4. in Algorithmus (6.1)

6. Numerische Implementierung

Abschließend wird noch kurz auf die Aktualisierung der Energieterme für die massenspezifische reversible und massenspezifische irreversible Verzerrungsenergie eingegangen. Die Aktualisierung dieser Energieterme erfolgt ganz am Ende der Benutzeroutine, nachdem alle Spannungs- und Verzerrungsgrößen aktualisiert wurden, siehe Algorithmus 6.1. Die Energieinkremente Δr^{rev} und Δr^{irrev} folgen direkt aus den Gleichungen (4.39) und (4.40) zu

$$[\Delta r^{\text{rev}}]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{3\alpha_{\text{th}}K\Theta_0}{\rho} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} \cdot \cdot \mathbf{I} \right]_{|t+\Delta t} \quad (6.27)$$

und

$$[\Delta r^{\text{irrev}}]_{|t+\Delta t} = \left[\beta \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}}}{\rho} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\beta \sigma_{\text{BY}} \Delta \varepsilon_{\text{V}}^{\text{vp}}}{\rho} \right]_{|t+\Delta t}. \quad (6.28)$$

In Gleichung (6.28) wurde noch eine Vereinfachung durch die Nutzung der Beziehung (6.21) vorgenommen.

7. Validierung

Mit dem in dieser Arbeit entwickelten und als Benutzeroutine VUMAT in ABAQUS/EXPLICIT implementierten Materialmodell wurden zu Validierungszwecken geometrisch einfache kurzzeitdynamische Lastfälle simuliert. Ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit den entsprechenden Messdaten ermöglicht eine Bewertung der Vorhersagegenauigkeit des Materialmodells. In den beiden Abschnitten 7.1 und 7.2 werden die Simulationsergebnisse für die kurzzeitdynamischen Zug- und Schubversuche aus der thermomechanischen Charakterisierung vorgestellt und den experimentellen Daten aus Abschnitt 3.1 gegenübergestellt. Wichtig zu erwähnen ist an dieser Stelle, dass die Zugversuchsdaten komplett in die Anpassung der Materialmodellparameter eingeflossen sind. Die Auswahl dieses Versuches für die Validierung ist dennoch sinnvoll, da bei der Parameterbestimmung der Geometrieinfluss der Proben prinzipiell nicht vollständig berücksichtigt werden kann, zum Beispiel das Auftreten von inhomogenen Dehnungs- und Spannungsverteilungen im Probenquerschnitt (siehe Unterabschnitt 3.1.3.4). Die Simulation dieser Versuche ermöglicht somit die Bewertung, ob die Geometrieinflüsse signifikant sind oder nicht. Bei den Schubversuchen ist lediglich ein quasistatischer Versuch bei 25 °C zur Anpassung der Modellparameter der BURZYŃSKI-YAGN-Fließfläche zur Berücksichtigung der Spannungsmehrachsigkeit verwendet worden, siehe Unterabschnitt 5.2.2. Bei den simulierten kurzzeitdynamischen Schubversuchen muss das Materialmodell die Materialeigenschaften für die hohen Schubdehnraten extrapolieren. Die Extrapolationseigenschaft eines Materialmodells auf komplexe Spannungszustände ist ein weiteres Bewertungskriterium im Hinblick auf die Anwendung bei der Simulation von mehrachsigt belasteten und geometrisch komplexen Bauteilen.

7.1. Kurzzeitdynamische Zugversuche

Es wurden thermomechanisch gekoppelte Simulationen der kurzzeitdynamischen Zugversuche mit den Abzugsgeschwindigkeiten von 10 mm/s und 1000 mm/s und den jeweiligen Anfangstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C in ABAQUS/EXPLICIT unter Verwendung der erstellten Benutzeroutine durchgeführt. Im Folgenden werden die wahren Spannungs-Dehnungskurven, die Temperatur-Dehnungskurven, die relative Volumenänderung und die Dehnraten-Dehnungskurven aus dem Experiment den simulierten Kurven gegenübergestellt. Des Weiteren werden für ausgewählte Deformationszustände die simulierten Temperatur-

7. Validierung

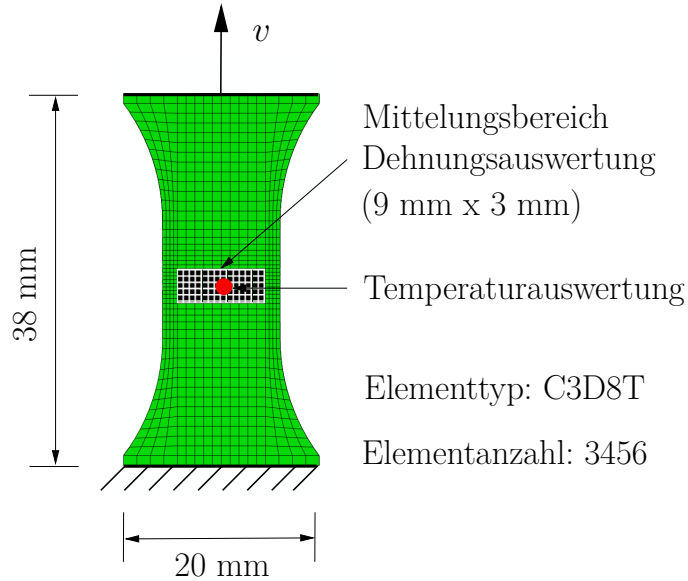


Abbildung 7.1.: Finite-Elemente-Modell für den Zugversuch an einer BZ12-Zugprobe

Anfangstemperatur: $T_{\text{ini}}[^{\circ}\text{C}] = 25; 40; 60$

Umgebungstemperatur: $T_{\text{U}}[^{\circ}\text{C}] = 25; 40; 60$

Wärmeübergangskoeffizient: $\alpha[\frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}}] = 10$

Tabelle 7.1.: Thermische Anfangs- und Randbedingungen

verteilungen auf der Probenoberfläche mit den Infrarotthermografiebildern verglichen. Die Auswertung der Simulationsdaten erfolgt in Anlehnung an die Auswertung der Versuchsdaten, siehe auch Unterabschnitt 3.1.3. Das heißt, im Finite-Elemente-Modell werden die wahren Dehnungen ε_{11} und ε_{22} in einem definierten Auswertebereich auf der Probenoberfläche bestimmt und gemittelt. Die wahre Spannung σ_{11} wird anschließend mit Hilfe der Gleichung (3.6) berechnet. Die zeitliche Temperaturentwicklung von T_{max} wird im Punkt der maximalen plastischen Deformation ausgeschrieben, welcher dem Mittelpunkt des Auswertebereichs für die Dehnungsauswertung entspricht. Das Finite-Elemente-Modell mit den Auswertepositionen ist in Abbildung 7.1 dargestellt. Weiterhin sind hier die mechanischen Randbedingungen skizziert. Der untere Rand der Zugprobe ist fixiert und am oberen Rand wird die entsprechende konstante Abzugsgeschwindigkeit v vorgegeben. Die thermischen Anfangs- und Randbedingungen sind in Tabelle 7.1 angegeben. Zusätzlich wurden für die Durchführung der thermomechanisch gekoppelten Simulationen noch die Dichte ρ , die spezifische Wärmekapazität c , die Wärmeleitfähigkeit κ und der thermische Wärmeausdehnungskoeffizient α_{th} des Polyamid 6 benötigt. Diese Materialkennwerte wurden im Rahmen dieser Arbeit gemessen und sind in Abschnitt 3.2 angegeben. In Unterabschnitt 4.3.2 wurde bereits mit Gleichung (4.40) der Energiequellterm

$\dot{\gamma}^{\text{irrev}}$ beschrieben, welcher den in Wärme umgesetzten Anteil der viskoplastischen Deformation darstellt. In den durchgeführten Simulationen wurde für den Taylor-Quinney-Koeffizienten β ein Wert von 0,75 angenommen. Die Simulationen wurden prinzipiell nur bis zum Ende der jeweiligen Messkurven ausgewertet. Wie in Unterabschnitt 3.1.3.2 schon beschrieben wurde, entspricht dieser Zeitpunkt nicht dem Ende des Versuchs, sondern dem Ende der optischen Dehnungsmessung. Eine Simulation des Deformationsverhaltens bis zur Einschnürung der Probe oder sogar darüber hinaus, ist mit dem vorliegenden Materialmodell ohnehin nicht exakt möglich, siehe Hinweis im letzten Absatz von Unterabschnitt 5.2.1.

Die Gegenüberstellung der Simulationsergebnisse und der experimentellen Daten für die Abzugsgeschwindigkeiten 10 mm/s und 1000 mm/s bei den jeweiligen Anfangstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C sind in den Abbildungen 7.2 und 7.3 dargestellt. In diesen Abbildungen zeigen die Diagramme (a) bis (d) der Reihe nach die wahren Spannungs-Dehnungskurven, die Temperatur-Dehnungskurven, die relativen Volumenänderungs-Dehnungskurven und die Dehnraten-Dehnungskurven. Für die Abzugsgeschwindigkeit von 10 mm/s zeigt sich für alle dargestellten Anfangstemperaturen eine gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den Messdaten, siehe Abbildung 7.2 (a) - (d). Bei der Abzugsgeschwindigkeit von 1000 mm/s weichen die simulierten Kurven an einigen Stellen von den Messkurven ab, siehe Abbildung 7.3 (a) - (d). Die wahre Spannungs-Dehnungskurve bei 25 °C in Diagramm (a) wird unterschätzt, wogegen die relative Volumenänderung in Diagramm (c) für alle dargestellten Anfangstemperaturen bei größeren Verzerrungen ($\epsilon_{11} > 0,2$) in der Simulation deutlich überschätzt wird. Die Temperaturverläufe in den beiden Diagrammen 7.2 (b) und 7.3 (b) werden für beide Abzugsgeschwindigkeiten dagegen von der Simulation gut wiedergegeben. Deutlich zu erkennen ist hier ebenfalls ein leichter Temperaturrückgang zu Beginn der Kurve. Dieser Temperaturrückgang wird durch den thermoelastischen Effekt hervorgerufen und damit vom Materialmodell gut beschrieben.

Des Weiteren sind in der Abbildung 7.4 (a) - (f) die Temperaturverteilungen auf der Probenoberfläche aus den Thermografiemessungen den entsprechenden simulierten Temperaturverteilungen gegenübergestellt. Die Auswertung fand hier jeweils bei zwei unterschiedlichen Deformationszuständen pro Versuchseinstellung (a) - (f) statt. Die Thermografiebilder wurden basierend auf den Rohdaten mit der Software GNU PLOT neu erstellt. Damit konnte die Farbkodierung an die der Simulationsausgabe angepasst werden. Dringend zu beachten ist, dass die Thermografiebilder technisch bedingt nur einen vergrößerten Ausschnitt der gesamten Zugprobe darstellen und diese auch nicht genau dem Simulationsmodell entsprechen. Alle dargestellten Thermografiebilder erfassen jedoch erkennbar die gesamte Probenbreite, so dass damit dem Betrachter ein Vergleich dieser Bilder mit den Simulationsbildern erleichtert

7. Validierung

wird. Des Weiteren wurde bewusst auf eine Angleichung der unteren und oberen Grenzwerte der Temperaturfarbskala von simulierten und experimentellen Temperaturbildern verzichtet. Bei einer solchen Angleichung wäre der im Folgenden zu diskutierende charakteristische Temperaturverlauf auf der Probenoberfläche nicht mehr eindeutig erkennbar. Auffällig an den experimentellen Temperaturverteilungen bei den Umgebungstemperaturen von 25 °C und 40 °C in den Diagrammen (a), (b), (d) und (e) ist das Auftreten von zwei Temperaturbändern, welche sich kreuzförmig und im Winkel von ca. $\pm 45^\circ$ zur Horizontalen durch die Probenmitte ziehen. Bei der Umgebungstemperatur von 60 °C sind diese Temperaturbänder nur noch in stark abgeschwächter Form zu erkennen, welches wahrscheinlich wieder dem Einfluss des Glasübergangs zugeschrieben werden kann. In der Simulation treten diese Temperaturbänder nicht auf. Bei der Ausbildung dieser Temperaturbänder spielen vermutlich mikromechanische Deformationsprozesse eine tragende Rolle, die von dem vorliegenden phänomenologischen Materialmodell nicht erfasst werden. Die Temperaturmaxima in der Simulation und dem Experiment liegen übereinstimmend im Bereich der Probenmitte. Daher zeigt sich auch bei den Temperatur-Dehnungskurven in den Abbildungen 7.2 (b) und 7.3 (b) eine gute Übereinstimmung. Betrachtet man jedoch den gesamten mittleren Probenbereich, so zeigt die Simulation eine deutlich vom Experiment abweichende Temperaturverteilung. Im Vergleich zum Experiment erstrecken sich die hohen Temperaturen in der Simulation über einen wesentlich größeren Querschnittsbereich. Mit fortgeschrittener Deformation zeigen Simulation und Experiment qualitativ wiederum ein ähnliches Verhalten. Der Bereich mit den höchsten Temperaturen konzentriert sich nun auf einen kleineren Bereich in der Umgebung der Probenmitte, siehe Diagramme (a) - (f) in Abbildung 7.4.

Für den ausgewählten Zugversuch bei der Umgebungstemperatur von 25 °C und der Abzugsgeschwindigkeit von 10 mm/s wurde zum einen der Einfluss der Elementgröße im Hinblick auf die Netzkonvergenz untersucht. Zum anderen sollte der Einfluss des irreversiblen thermischen Effektes auf das Deformationsverhalten durch die gezielte Modifizierung des Taylor-Quinney-Koeffizienten bewertet werden. Die Ergebnisse sind anhand der wahren Spannungs-Dehnungskurven, der Temperatur-Dehnungskurven, der relativen Volumenänderungs-Dehnungskurven und der Dehnraten-Dehnungskurven in den Diagrammen (a) - (d) in Abbildung 7.5 dargestellt.

Die Verfeinerung des Finite-Elemente-Netzes von 3456 Hexaederelemente auf 19840 Hexaederelemente zeigt, dass die numerische Lösung bereits mit dem groben Netz ausreichend konvergiert ist. Leichte Unterschiede zwischen den simulierten Kurven mit grobem und feinem Netz sind ab einem Dehnungswert von $\varepsilon_{11} > 0,3$ zu erkennen. Diese Abweichungen sind jedoch auf die beginnende Einschnürung der Probe und die damit verbundene Lokalisierungsproble-

matik zurückzuführen, siehe letzten Absatz in Unterabschnitt 5.2.1.

Alle Simulationen mit den modifizierten Taylor-Quinney-Koeffizienten $\beta = 0; 0,5; 1$ wurden mit dem groben Netz durchgeführt. Der Einfluss von β wird am deutlichsten in den wahren Spannungs-Dehnungskurven in Diagramm (a) und den Temperatur-Dehnungskurven in Diagramm (b) in Abbildung 7.5 sichtbar. Wird die gesamte viskoplastische Deformationsleistung in Wärmeenergie umgesetzt ($\beta = 1$), zeigt sich eine verstärkte Entfestigung in der Spannungs-Dehnungskurve sowie ein schnellerer Anstieg der Proben temperatur im Vergleich zur Ausgangssituation mit $\beta = 0,75$. Im Gegensatz dazu verfestigt das Material in der Simulation sogar bei ausgeschaltetem irreversiblen thermischen Effekt ($\beta = 0$) und die Probe erwärmt sich nicht. Diese Ergebnisse zeigen nochmals deutlich, dass ein Großteil der Materialentfestigung im Polyamid 6 durch den irreversiblen thermischen Effekt verursacht wird.

7. Validierung

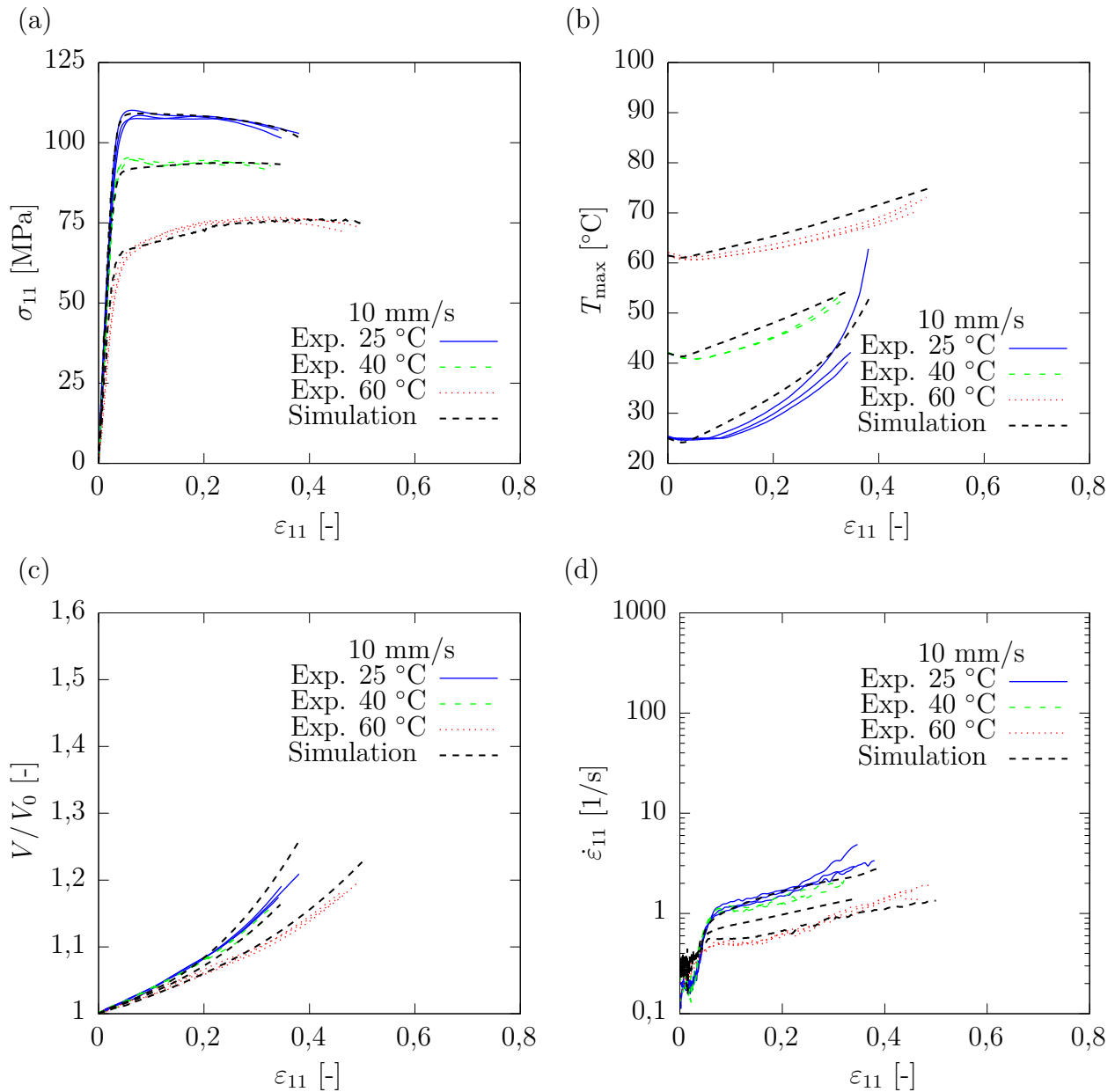


Abbildung 7.2.: Gegenüberstellung Experiment und Simulation für den Zugversuch bei 10 mm/s und den Anfangs- und Umgebungstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C mit (a) wahre Spannungs-Dehnungskurven, (b) Temperatur-Dehnungskurven, (c) relative Volumenänderungs-Dehnungskurven und (d) Dehnraten-Dehnungskurven

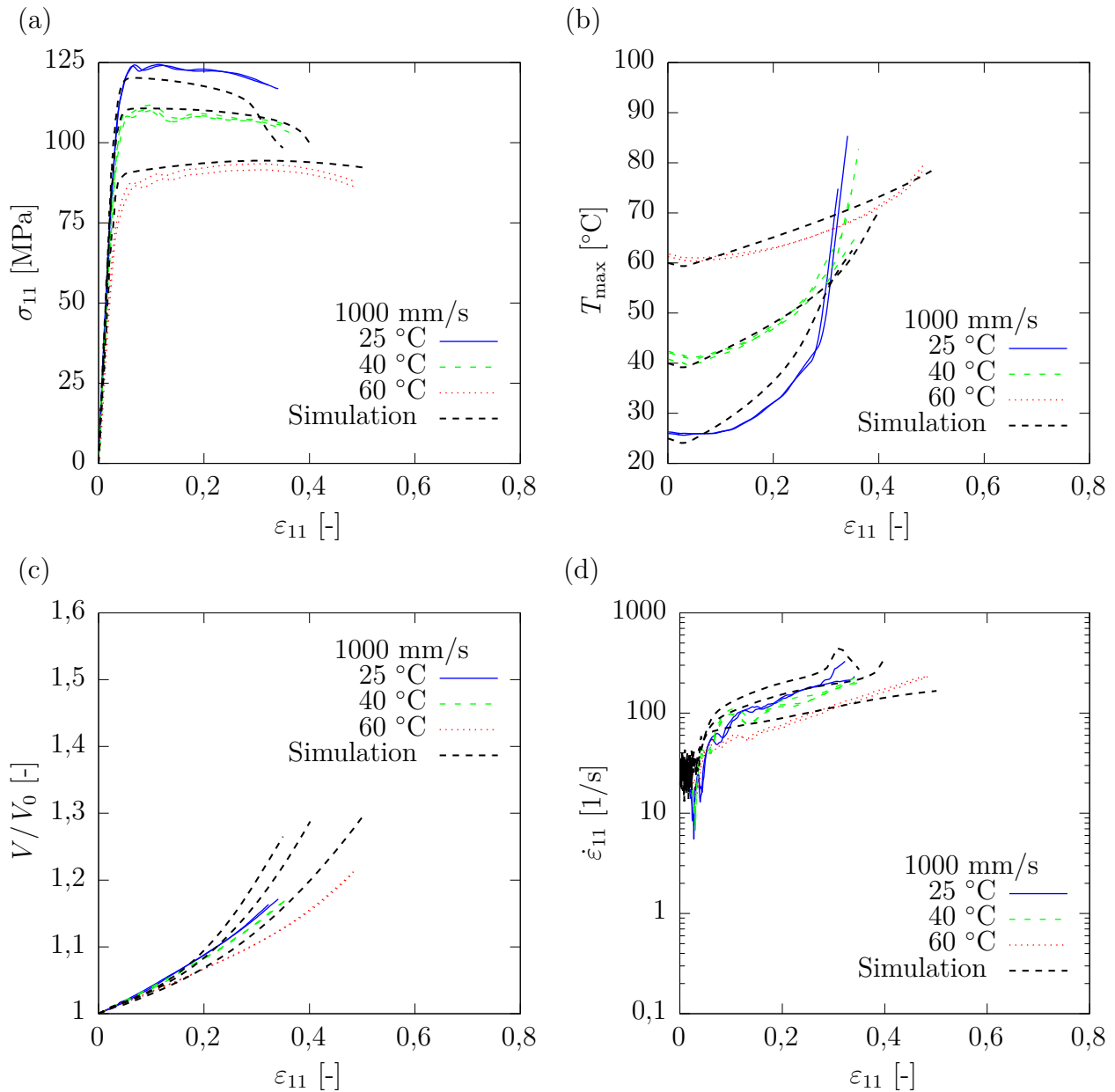


Abbildung 7.3.: Gegenüberstellung Experiment und Simulation für den Zugversuch bei 1000 mm/s und den Anfangs- und Umgebungstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C mit (a) wahre Spannungs-Dehnungskurven, (b) Temperatur-Dehnungskurven, (c) relative Volumenänderungs-Dehnungskurven und (d) Dehnraten-Dehnungskurven

7. Validierung

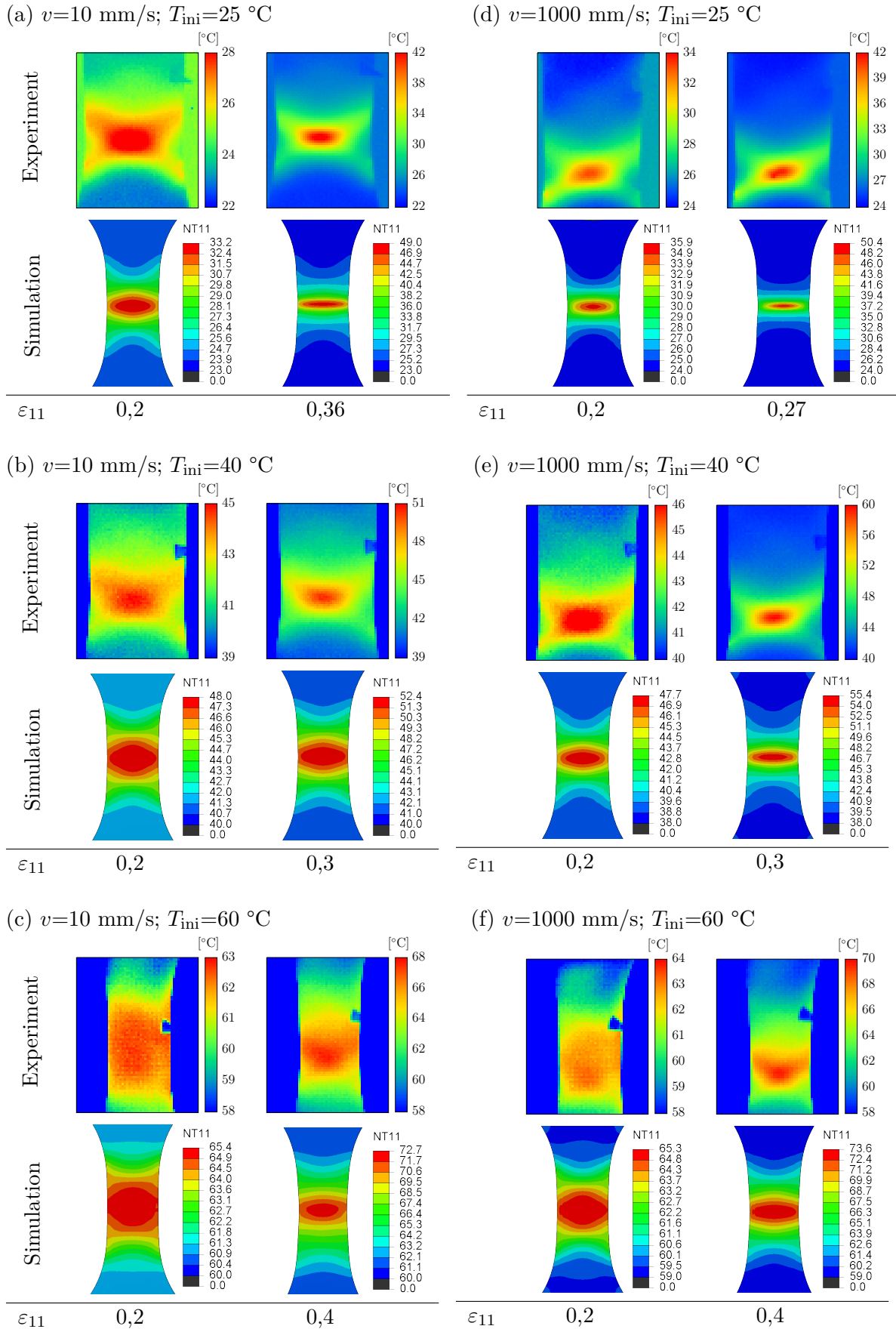


Abbildung 7.4.: Gemessene und simulierte Temperaturverteilungen auf der Zugprobenoberfläche bei zwei unterschiedlichen Deformationszuständen und für verschiedene Versuchseinstellungen (a) - (f)

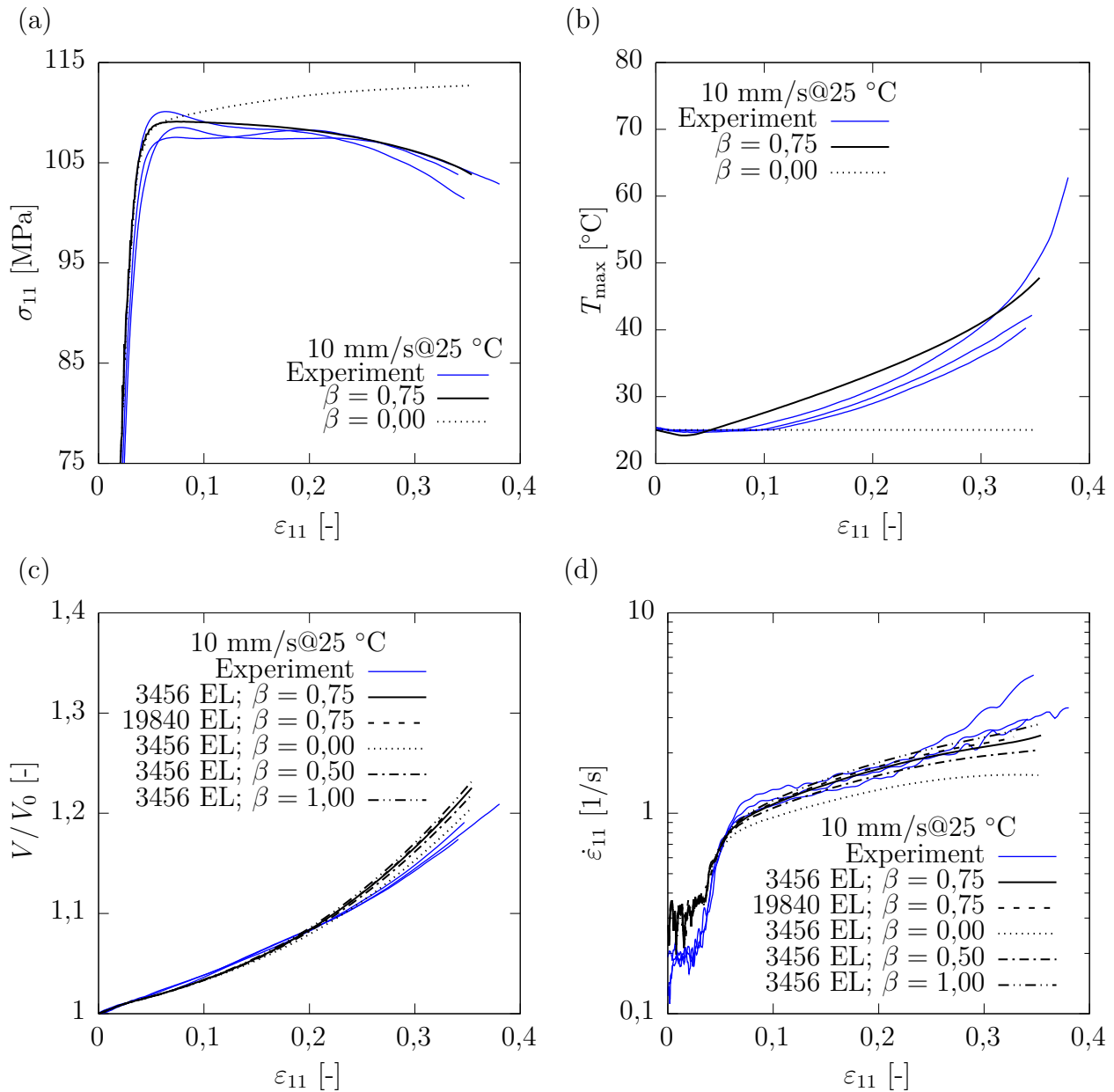


Abbildung 7.5.: Einfluss der Elementanzahl und des Taylor-Quinney-Koeffizienten auf die Simulationsergebnisse am Beispiel des Zugversuchs bei 10 mm/s und der Anfangs- und Umgebungstemperatur von 25 °C. Dargestellt sind (a) die wahren Spannungs-Dehnungskurven, (b) die Temperatur-Dehnungskurven, (c) die relative Volumenänderungs-Dehnungskurven und (d) die Dehnraten-Dehnungskurven.

7.2. Kurzzeitdynamische Schubversuche

Die thermomechanisch gekoppelten Simulationen der kurzzeitdynamischen Schubversuche wurden für die Abzugsgeschwindigkeit von 10 mm/s und die jeweiligen Anfangs- und Umgebungstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C durchgeführt. Die Auswertung der Simu-

7. Validierung

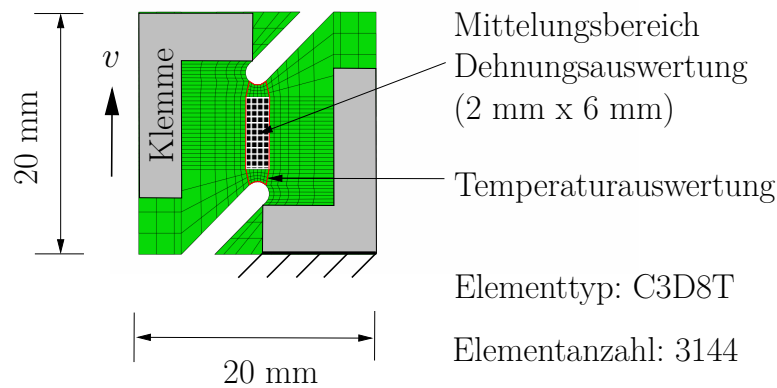


Abbildung 7.6.: Finite-Elemente-Modell für den Schubversuch an einer Z-Schubprobe

lationsdaten erfolgt, wie auch bei den Zugversuchsimulationen in Abschnitt 7.1, in Anlehnung an die Auswertung der Versuchsdaten, siehe Unterabschnitt 3.1.3. Der zeitliche Verlauf der maximalen Temperatur T_{\max} auf der Probenoberfläche wird durch das Bilden der maximalen Einhüllenden aller Temperatur-Zeitkurven in einem definierten Auswertebereich ermittelt. Dieses Vorgehen ist notwendig, da sich der Ort der maximalen plastischen Deformation und damit auch der Ort der maximalen Oberflächentemperatur im Versuchsverlauf verschiebt. Das Finite-Elemente-Modell mit den Auswertebereichen für die Dehnung und die maximale Oberflächentemperatur sowie den mechanischen Randbedingungen ist in Abbildung 7.6 dargestellt. Die Schubprobe wird in der Simulation im Bereich der rechten Klemme fixiert und im Bereich der linken Klemme mit der konstanten Abzugsgeschwindigkeit von $v = 10$ mm/s beaufschlagt. Für alle hier nicht explizit aufgeführten Materialkennwerte und Randbedingungen werden entsprechend die Daten aus den Zugversuchssimulationen in Abschnitt 7.1 herangezogen.

Die Diagramme (a) bis (c) in der Abbildung 7.7 zeigen der Reihe nach die experimentellen und simulierten wahren Spannungs-Dehnungskurven, Temperatur-Dehnungskurven und Dehnraten-Dehnungskurven für die Anfangstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C. Bei der Auswertung der simulierten wahren Spannungs-Dehnungskurven in Diagramm (a) und der Dehnraten-Dehnungskurven in Diagramm (c) wurde ein Filter verwendet, um die vorhandenen Oszillationen in den Simulationsdaten zu eliminieren. Bei dem verwendeten Filter handelt es sich um den einfachen gleitenden Mittelwert dritter Ordnung. Alle anderen in Abbildung 7.7 dargestellten experimentellen und simulierten Kurven wurden nicht gefiltert. Die in Diagramm (a) gezeigten simulierten wahren Spannungs-Dehnungskurven beschreiben gut den Verlauf im Experiment. Die Kurven bei den Anfangstemperaturen von 25 °C und 40 °C liegen mit ihrem maximalen Spannungsniveau etwas oberhalb der experimentellen Werte. Der experimentelle Verlauf der maximalen Probenoberflächentemperatur in Diagramm (b) wird von der Simulation für die Anfangstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C ebenso gut

wiedergegeben. Bei den experimentellen Kurven bei der Anfangstemperatur von 25 °C zeigt sich jedoch im Vergleich zu den anderen gemessenen Temperaturkurven eine erhöhte Streuung. Die Dehnraten-Dehnungskurven in Diagramm (c) werden vor allem im Anfangsbereich von der Simulation mit zu hohen Werten beschrieben. Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass die Schubproben im Anfahrvorgang während des Versuchs leicht verrutschen und damit nicht die vorgegebene Abzugsgeschwindigkeit von Versuchsbeginn an wirkt. Das maximal erreichte Niveau bei den Dehnraten wird von der Simulation nur noch geringfügig überschätzt.

Die Temperaturverteilungen auf der Probenoberfläche aus den Thermografiemessungen sind in der Abbildung 7.8 (a) - (c) den entsprechenden simulierten Temperaturverteilungen gegenübergestellt. Die Auswertung fand jeweils bei zwei unterschiedlichen Deformationszuständen statt. Die Thermografiebilder wurden für die dargestellten Auswertungen mit der Software GNU-PLOT neu erstellt. Aus den in Abschnitt 7.1 bereits genannten Gründen wurde auch hier auf eine Angleichung der unteren und oberen Grenzwerte der Temperaturfarbskala von simulierten und experimentellen Temperaturbildern verzichtet. Im Schubversuch ist der Anstieg der Probenoberfläche durch den irreversiblen thermischen Effekt auf einen sehr schmalen Bereich der Probe konzentriert. In den Temperaturbildern in Abbildung 7.8 verläuft dieser Bereich in vertikaler Richtung zwischen den beiden Radien der Aussparungen. Die Simulation gibt diesen auf den engen Bereich beschränkten Temperaturanstieg gut wieder. Weiterhin sind in den experimentellen und den simulierten Temperaturverteilungen zwei breitere Temperaturbänder zu erkennen, die jeweils in der Probenmitte durch den schmalen Bereich hoher Temperaturen unterbrochen werden. Das Wärmere der beiden Temperaturbänder verläuft auf einer Diagonalen zwischen links unten und rechts oben und das Kühlere auf einer Diagonalen zwischen rechts unten und links oben. In den Thermografiebildern der Versuche mit den Anfangstemperaturen von 40 °C und 60 °C in Abbildung 7.8 (b) und (c) erkennt man zudem eine stärkere Abkühlung der Proben im Randbereich auf Temperaturen unterhalb der jeweiligen Anfangstemperatur. Diese Abkühlung wird offensichtlich durch die Metallklemmen verursacht, die sich auf einem niedrigeren Temperaturniveau befinden. Die vergleichsweise kühleren Metallklemmen sind in den Thermografiebildern auch deutlich zu erkennen.

7. Validierung

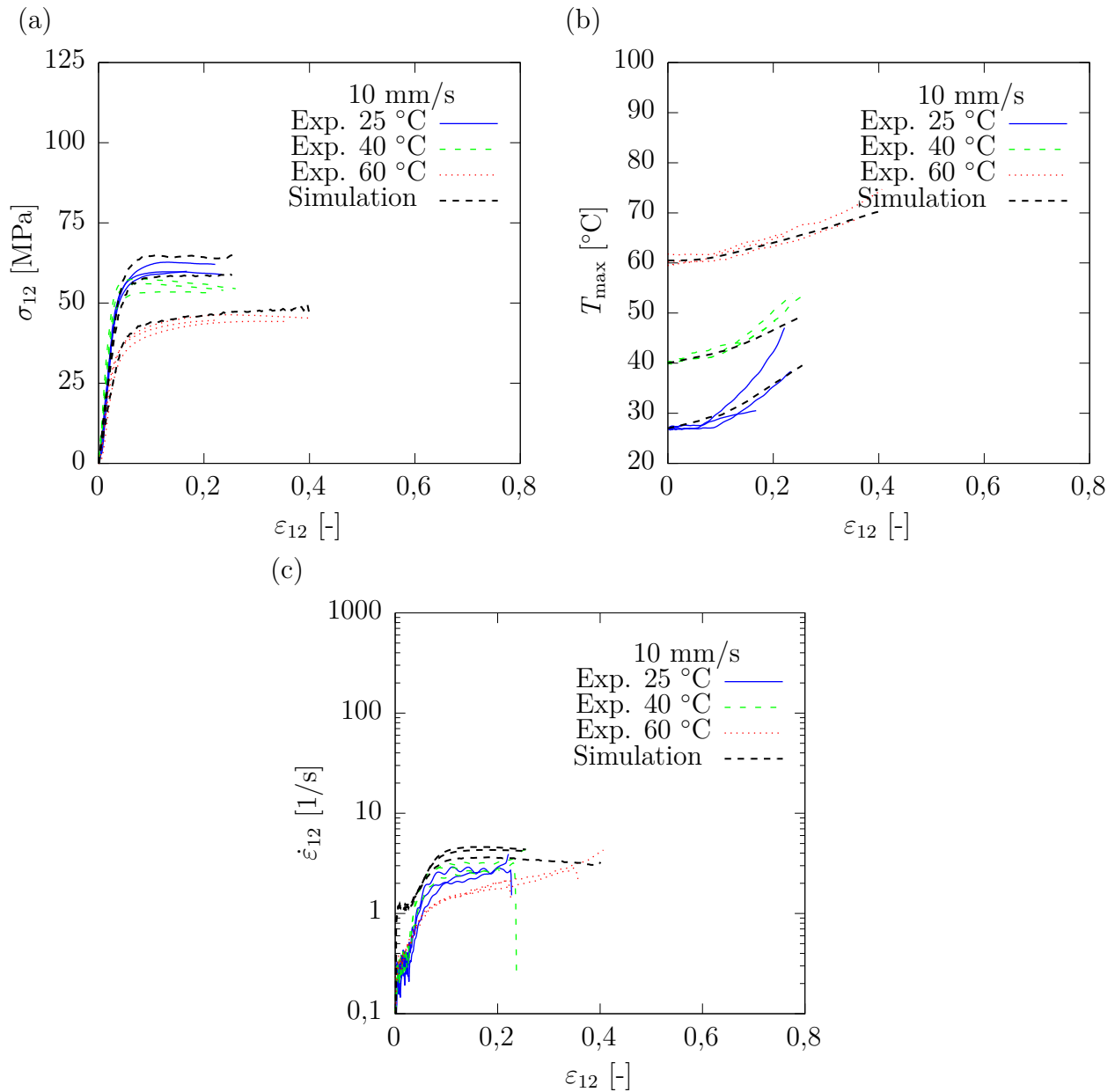


Abbildung 7.7.: Gegenüberstellung Experiment und Simulation für den Schubversuch bei 10 mm/s und den Anfangs- und Umgebungstemperaturen von 25 °C, 40 °C und 60 °C mit (a) wahre Spannungs-Dehnungskurven, (b) Temperatur-Dehnungskurven und (c) Dehnraten-Dehnungskurven

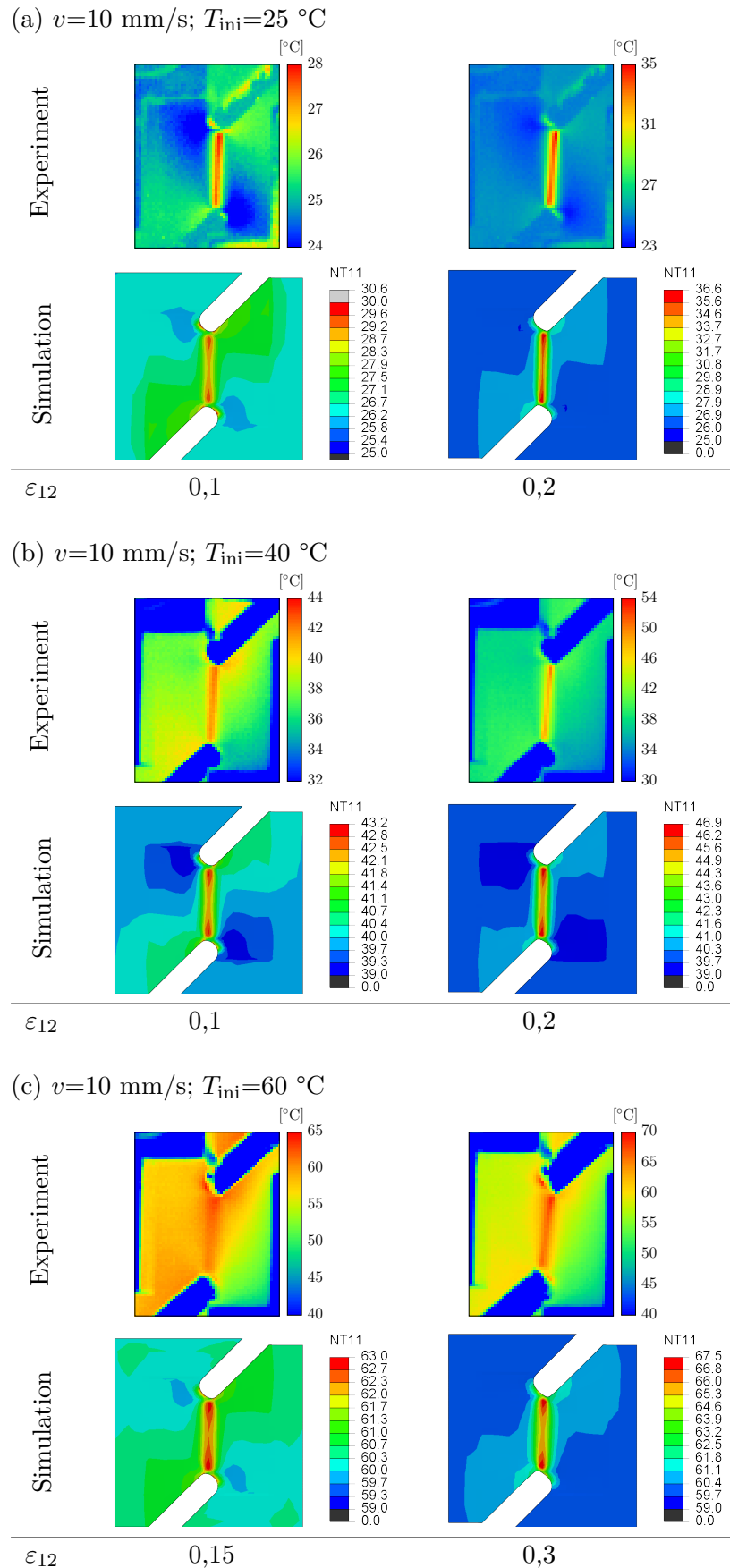


Abbildung 7.8.: Gemessene und simulierte Temperaturverteilungen auf der Schubprobenoberfläche bei zwei unterschiedlichen Deformationszuständen und für verschiedene Versuchseinstellungen (a) - (c)

7.3. Bewertung

Die in Abschnitt 7.1 dargestellten Simulationsergebnisse der kurzzeitdynamischen Zugversuche und der Vergleich mit den experimentellen Daten zeigen, dass das entwickelte Materialmodell in vielerlei Hinsicht das komplexe temperatur-, dehnraten- und druckabhängige Materialverhalten des Polyamid 6 für eine einachsige Zugbeanspruchung gut beschreibt. Die aufgrund der thermischen Effekte verursachten lokalen Temperaturänderungen in den Zugproben werden ebenfalls durch das neue Materialmodell in der Simulation abgebildet. Zudem machen die Simulationen mit den modifizierten Taylor-Quinney-Koeffizienten deutlich, dass der irreversible thermische Effekt das Verfestigungs- bzw. Entfestigungsverhalten von Polyamid 6 signifikant beeinflusst. Die in der Einleitung dieses Kapitels erwähnten Geometrieinflüsse, die bei der Ermittlung der Materialmodellparameter nicht berücksichtigt wurden, scheinen im vorliegenden Fall keinen signifikanten Einfluss auf die Simulationsergebnisse zu haben. Die aufgezeigten Unterschiede zwischen Simulation und Experiment bezüglich der Temperaturverteilungen auf der Probenoberfläche weisen jedoch auch darauf hin, dass mit einer phänomenologischen Materialbeschreibung die mikromechanischen Deformationsmechanismen nicht erfasst werden können, siehe hierzu Abschnitt 8.2.

Die Simulationsergebnisse der kurzzeitdynamischen Schubversuche aus Abschnitt 7.2 und deren Vergleich mit den experimentellen Daten zeigen, dass das entwickelte Materialmodell auch bei Schubbeanspruchungen im Bereich hoher Dehnraten valide Ergebnisse für das Polyamid 6 liefert. Die Auswirkungen der thermischen Effekte auf die lokalen Temperaturänderungen in den Proben werden auch in diesem Fall gut durch die Simulation beschrieben. Damit ist ein weiteres Bewertungskriterium im Hinblick auf die Anwendung des Materialmodells im Rahmen der Simulation von kurzzeitdynamisch und mehrachsig belasteten geometrisch komplexen Bauteilen erfüllt.

Eine nächste Stufe der Validierung des vorliegenden Materialmodells ist die Simulation von kurzzeitdynamisch mehrachsig belasteten geometrisch einfachen Teststrukturen und der Vergleich mit den entstprechenden Messdaten. Eine effiziente Testmethode für solche einfachen Strukturen ist zum Beispiel das instrumentierte Schlagpendel [33].

8. Zusammenfassung und Ausblick

8.1. Zusammenfassung

Die numerische Simulation wird heute standardmäßig zur strukturmechanischen Auslegung von Kunststoffbauteilen eingesetzt. Der steigende Kostendruck sowie die Notwendigkeit der Ressourcenschonung erfordern die optimale Ausnutzung des eingesetzten Werkstoffs unter Einhaltung der geforderten Bauteileigenschaften, wie zum Beispiel Festigkeit, Gewicht und Medienbeständigkeit. Demzufolge erhöhen sich auch die Anforderungen an die Prognosegenauigkeit der eingesetzten Simulationsmethoden. Da Kunststoffe ein komplexes Materialverhalten aufweisen, was zudem von einer Vielzahl von Einflussfaktoren abhängt, ist für die Weiterentwicklung der Simulationsmethoden auch ein immer tiefergehendes Materialverständnis gefordert.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde der Aspekt der thermischen Effekte und deren Auswirkung auf das Materialverhalten des unverstärkten thermoplastischen Kunststoffes Polyamid 6 experimentell untersucht und basierend auf den daraus folgenden Erkenntnissen ein thermoelastisch-thermoviskoplastisches Materialmodell entwickelt und in die Software ABAQUS/EXPLICIT implementiert. Im Folgenden werden die wichtigsten Erkenntnisse aus dieser Arbeit zusammengefasst.

Zug-, Schub- und Druckversuche bei verschiedenen Umgebungstemperaturen und Abzugsgeschwindigkeiten wurden durchgeführt, größtenteils mit Erfassung der Probenoberflächentemperatur. Das Auftreten und der Einfluss der thermischen Effekte auf das Deformations- und Versagensverhalten konnte durch die Experimente bestätigt werden. Das Ausmaß der Probenerwärmung durch den irreversiblen thermischen Effekt zeigte eine Abhängigkeit von der Deformationsgeschwindigkeit und der Umgebungstemperatur. In einigen Fällen wurden lokale Temperaturanstiege in der Probe von mehr als 100 °C registriert. Der reversible thermoelastische Effekt äußerte sich dagegen nur durch geringe Temperaturänderungen von wenigen Grad Celcius im elastischen Deformationsbereich.

Vor allem in den Zugversuchen wurde in Abhängigkeit der Umgebungstemperatur und der

8. Zusammenfassung und Ausblick

Abzugsgeschwindigkeit ein sehr unterschiedliches Deformations- und Versagensverhalten beobachtet. In den wahren Spannungs-Dehnungskurven zeigten sich in einigen Fällen die Ausbildung von einem oder zwei ausgeprägten Fließpunkten (Double-Yield Phänomen) mit einer geringen Einschnürung der Probe vor Versagenseintritt. In anderen Fällen fand vor dem Versagen eine Einschnürung der Probe mit anschließender Fließschulterbildung und einem Fließschulterwachstum statt, was letztendlich zu einer massiven Verstreckung der Probe führte. Zusätzlich trat bei einigen Versuchen eine nahezu homogene gummielastische Deformation, ohne Ausbildung eines Fließpunktes und/oder einer Fließschulter, auf. Dieses Verhalten ist einerseits dem Glasübergangsbereich zuzuschreiben, der sich beim Polyamid 6 im untersuchten Temperaturbereich befindet. Andererseits zeigt sich an dieser Stelle auch der Einfluss der thermischen Effekte.

Nach einer umfassenden Analyse aller Versuchsdaten konnten die Anforderungen an das Materialmodell formuliert werden:

- Dehnraten- und temperaturabhängiges elastisches Verhalten
- Dehnraten- und temperaturabhängiges plastisches Verhalten
- Berücksichtigung des Double-Yield Phänomens
- Zug-, Schub-, Druckasymmetrie in Form einer Druckabhängigkeit
- Berücksichtigung des Glasübergangsbereichs
- Berücksichtigung der thermischen Effekte in der Energiebilanz

Um diese Anforderungen an das Materialmodell zu erfüllen, mussten eigene Ansätze zur Beschreibung des dehnraten- und temperaturabhängigen elastischen und plastischen Deformationsverhaltens entwickelt und an die Messdaten angepasst werden. Die Implementierung der diskretisierten Materialgleichungen und Energiequellterme erfolgte anschließend mit Hilfe der Benutzerroutine VUMAT in der Software ABAQUS/EXPLICIT.

Die Validierung des Materialmodells an kurzzeitdynamischen Zug- und Schubversuchen konnte erfolgreich durchgeführt werden. Das Deformationsverhalten von Polyamid 6 im betrachteten Temperatur-, Dehnraten- und Dehnungsbereich wird von dem Materialmodell wiedergegeben. Eine exakte Beschreibung der in den Zugversuchen beobachteten Probeneinschnürung mit Fließschulterbildung und Fließschulterwachstum ist mit dem vorliegenden Materialmodell jedoch nicht möglich. Hierfür werden spezielle Regularisierungsmethoden benötigt.

Die vorliegende Arbeit liefert einen wesentlichen Beitrag zum besseren Verständnis des Einflusses der thermischen Effekte auf das Deformations- und Versagensverhalten von Polyamid 6. Des Weiteren ermöglicht das entwickelte Materialmodell eine signifikante Verbesserung der Prognosegenauigkeit von strukturmechanischen Simulationen für kurzzeitdynamisch belastete unverstärkte Thermoplastbauteile.

8.2. Ausblick

Eine Ausweitung der experimentellen Untersuchungen zur Aufklärung der mikromechanischen Deformations- und Schädigungsmechanismen im Polyamid 6 unter dem Einfluss der thermischen Effekte ist von großem Interesse. In diesem Zusammenhang könnte beispielsweise auch erforscht werden, inwieweit die Entstehung und die Ausprägung der beiden Fließpunkte (Double-Yield Phänomen) mit den thermischen Effekten im Zusammenhang steht.

In vielen Einsatzbereichen der numerischen Bauteilsimulation ist es notwendig, das Deformationsverhalten bis zum Versagenseintritt berechnen zu können. Eine Erweiterung des Materialmodells und der numerischen Algorithmen hinsichtlich der Beschreibung von geometrischen Einschnüreffekten, der Schädigungsentwicklung und des Versagens wäre daher eine sinnvolle Fortführung dieser Arbeit.

Eine weitere interessante wissenschaftliche Fragestellung ist, welchen Einfluss die thermischen Effekte auf das Deformations- und Versagensverhalten von verstärkten Thermoplasten haben. Hierzu könnte das vorliegende Materialmodell im Rahmen einer numerischen Homogenisierung an einem repräsentativen Volumenelement (RVE) eingesetzt werden. In einem RVE wird die Mikrostruktur durch zwei oder mehrere Phasen beschrieben. So könnte beispielsweise in einem RVE für ein glasfaserverstärktes Polyamid 6 die Matrixkomponente durch das vorliegende Materialmodell beschrieben werden. Damit ließen sich die Temperaturänderungen im Bereich von Spannungskonzentrationen an den Glasfaserenden berechnen und mögliche Auswirkungen auf das Versagen der Mikrostruktur ableiten.

Literaturverzeichnis

- [1] ADAMS G. W., FARRIS R. J. Latent energy of deformation of bisphenol a polycarbonate. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* 26, 2 (1988), 433–445.
- [2] ALTENBACH H. *Kontinuumsmechanik: Einführung in die materialunabhängigen und materialabhängigen Gleichungen*, 4 ed. Springer, 2018.
- [3] ALTENBACH H., BOLCHOUN A., KOLUPAEV V. A. Phenomenological Yield and Failure Criteria. In *Plasticity of Pressure-Sensitive Materials*, Altenbach H., Öchsner A., Ed. Springer Berlin Heidelberg, 2014, ch. 2, pp. 49–152.
- [4] ARAVAS N. On the numerical integration of a class of pressure-dependent plasticity models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 24, 7 (1987), 1395–1416.
- [5] ARGON A. S. A theory for the low-temperature plastic deformation of glassy polymers. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* 28, 4 (1973), 839–865.
- [6] ARRUDA E. M., BOYCE M. C. Evolution of plastic anisotropy in amorphous polymers during finite straining. *International Journal of Plasticity* 9, 6 (1993), 697–720.
- [7] ARRUDA E. M., BOYCE M. C. A three-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 41, 2 (1993), 389–412.
- [8] ARRUDA E. M., BOYCE M. C., JAYACHANDRAN R. Effects of strain rate, temperature and thermomechanical coupling on the finite strain deformation of glassy polymers. *Mechanics of Materials* 19, 2-3 (1995), 193–212.
- [9] BALSAMO V., MÜLLER A. J. The phenomenon of double yielding under tension in low-density polyethylene, linear low-density polyethylene and their blends. *Journal of Materials Science Letters* 12, 18 (1993), 1457–1459.
- [10] BAUWENS-CROWET C., OTS J.-M., BAUWENS J.-C. The strain-rate and temperature dependence of yield of polycarbonate in tension, tensile creep and impact tests. *Journal of Materials Science* 9 (Jul 1974), 1197–1201.

- [11] BAUWENS J. C. Relation between the compression yield stress and the mechanical loss peak of bisphenol-a-polycarbonate in the β transition range. *Journal of Materials Science* 7, 5 (May 1972), 577–584.
- [12] BECKER F. *Entwicklung einer Beschreibungsmethodik für das mechanische Verhalten unverstärkter Thermoplaste bei hohen Deformationsgeschwindigkeiten*. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2009.
- [13] BILLON N. New constitutive modeling for time-dependent mechanical behavior of polymers close to glass transition: Fundamentals and experimental validation. *Journal of Applied Polymer Science* 125, 6, 4390–4401.
- [14] BO J., WENLI D., QI C., PENGSHENG L. The phenomenon of double yielding in polyamide 6/k resin blends. *Polymer Bulletin* 57, 3 (Jul 2006), 359–367.
- [15] BOLCHOUN A., KOLUPAEV V. A., ALTENBACH H. Konvexe und nichtkonvexe Fließflächen. *Forschung im Ingenieurwesen* 75, 2 (2011), 73–92.
- [16] BOYCE M. C., PARKS D. M., ARGON A. S. Large inelastic deformation of glassy polymers. Part I: Rate dependent constitutive model. *Mechanics of Materials* 7, 1 (1988), 15–33.
- [17] BRAUER P., MÜLLER F. H. Über die Temperaturüberhöhung in der Fließzone während der Kaltver Streckung. *Kolloid-Zeitschrift* 135, 2 (1954), 65–67.
- [18] BRÖCKER C. Thermoviskoelastizität und Thermoplastizität: Modellierung, Implementierung und Simulation. Diplomarbeit, Institut für Mechanik, Universität Kassel, 2007.
- [19] CHOU S. C., ROBERTSON K. D., RAINEY H. J. The effect of strain rate and heat developed during deformation on the stress-strain curve of plastics. 422–432.
- [20] DACHSNER T. Plasticity of Cellular Metals (Foams). In *Plasticity of Pressure-Sensitive Materials*, Altenbach H., Öchsner A., Ed. Springer Berlin Heidelberg, 2014, ch. 3, pp. 153–204.
- [21] DASSAULT SYSTEMES. *Abaqus Theory Manual*, Version 6.11 ed., 2011.
- [22] DASSAULT SYSTEMES. *Abaqus User Subroutines Reference Guide*, Version 2016 ed., 2015.
- [23] DE SOUZA NETO E. A., PERIC D., OWEN D. R. J. *Computational Methods for Plasticity: Theory and Applications*. Wiley, 2008.
- [24] DILLENBERGER F. Ermittlung von Druckkennwerten an Kunststoffen. Masterarbeit, Technische Universität Darmstadt, 2011.

- [25] DRUCKER D. C., PRAGER W. Soil mechanics and plastic analysis for limit design. *Quarterly of Applied Mathematics* (1952).
- [26] DUAN Y., SAIGAL A., GREIF R., ZIMMERMAN M.A. A uniform phenomenological constitutive model for glassy and semicrystalline polymers. *Polymer Engineering and Science* 41 (08 2001), 1322 – 1328.
- [27] EDWARDS S. F., VILGIS T. The effect of entanglements in rubber elasticity. *Polymer* 27, 4 (1986), 483–492.
- [28] EHRENSTEIN G. W. *Mit Kunststoffen konstruieren: Eine Einführung*. Studentexte Kunststofftechnik. Hanser, 2002.
- [29] EHRENSTEIN G. W. *Polymer-Werkstoffe: Struktur - Eigenschaften - Anwendung*. Hanser Fachbuchverlag, 2011.
- [30] ENGELTER A., MÜLLER F. H. Thermische Effekte bei mechanischer Deformation, insbesondere von Hochpolymeren. *Kolloid-Zeitschrift* 157, 2 (1958), 89–111.
- [31] EYRING H. Viscosity, Plasticity, and Diffusion as Examples of Absolute Reaction Rates. *Journal of Chemical Physics* 4 (Apr 1936), 283–291.
- [32] FAGER L. O., BASSANI J. L. Neck propagation in polymers with adiabatic heat generation. *Mechanics of Materials* 9, 3 (1990), 183–194.
- [33] FERTSCHEJ A., REITHOFER P., ROLLANT M. 4a impetus (PART 1): Dynamic material characterization of plastics - development in the past 10 years. In *14th German LS-DYNA Conference 10th - 12th October 2016, Bamberg, Germany* (10 2016), DYNAmore GmbH.
- [34] GÖKTEPE S. *Micro-macro approaches to rubbery and glassy polymers: Predictive micromechanically-based models and simulations*. Dissertation, Universität Stuttgart, Fakultät für Bau- und Umweltingenieurwissenschaften, 2007.
- [35] GRELLMANN W., ALTSTÄDT V. *Kunststoffprüfung*. Hanser, 2005.
- [36] GREVE R. *Kontinuumsmechanik: Ein Grundkurs für Ingenieure und Physiker*. Physics and astronomy online library. Springer-Verlag GmbH, 2003.
- [37] G'SELL C., ALY-HELAL N. A., JONAS, J. J. Effect of stress triaxiality on neck propagation during the tensile stretching of solid polymers. *Journal of Materials Science* 18, 6 (Jun 1983), 1731–1742.
- [38] G'SELL C., JONAS J. J. Determination of the plastic behaviour of solid polymers at constant true strain rate. *Journal of Materials Science* 14 (1979), 583–591.

- [39] GUEGUEN O., RICHTON J., AHZI S., MAKRAZI A. Micromechanically based formulation of the cooperative model for the yield behavior of semi-crystalline polymers. *Acta Materialia* 56, 7 (2008), 1650–1655.
- [40] GURSON A. L. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I - yield criteria and flow rules for porous ductile media. *J. Eng. Mater. Technol.* 99 (1977), 2–15.
- [41] HADRICHE I., GHORBEL E., MASMOUDI N., EL HALOUANI F. Influence of strain rate on the yielding behavior and on the self heating of thermoplastic polymers loaded under tension. In *Structural Analysis of Advanced Materials* (11 2010), vol. 446 of *Key Engineering Materials*, Trans Tech Publications, pp. 63–72.
- [42] HALL I. H. The effect of strain rate on the stress-strain curve of oriented polymers. I. Presentation of experimental results. *Journal of Applied Polymer Science* 12, 4 (1968), 731–738.
- [43] HALL I. H. The effect of strain rate on the stress-strain curve of oriented polymers. II. The influence of heat developed during extension. *Journal of Applied Polymer Science* 12, 4 (1968), 739–750.
- [44] HAUFE A., DU BOIS P., KOLLING S., FEUCHT M. A semi-analytical model for polymers subjected to high strain rates. In *Proceedings of the 5th European LS-DYNA Users Conference, Birmingham, England* (2005), pp. 2b(58):1–16.
- [45] HILLMANSEN S., HAWARD R. N. Adiabatic failure in polyethylene. *Polymer* 42, 22 (2001), 9301–9312.
- [46] HUGHES T. J. R., WINGET J. Finite rotation effects in numerical integration of rate constitutive equations arising in large-deformation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 15, 12 (1980), 1862–1867.
- [47] JOHNSON G.R., C. W. A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates, and high temperatures. *Proceedings 7th International Symposium on Ballistics, The Hague* (04 1983), 541 – 547.
- [48] JUNGINGER M. *Charakterisierung und Modellierung unverstärkter thermoplastischer Kunststoffe zur numerischen Simulation von Crashvorgängen*. Epsilon - Forschungsergebnisse aus der Kurzzeitdynamik. Fraunhofer-IRB-Verlag, 2004.
- [49] KAISER W. *Kunststoffchemie für Ingenieure*. Hanser Fachbuchverlag, 2007.

- [50] KEUERLEBER M. *Bestimmung des Elastizitätsmoduls von Kunststoffen bei hohen Dehnraten am Beispiel von PP*. Dissertation, Universität Stuttgart, Holzgartenstr. 16, 70174 Stuttgart, 2006.
- [51] KOLLING S., HAUFE A., FEUCHT M., DU BOIS P. A constitutive formulation for polymers subjected to high strain rates. In *Proceedings of the 9th International LS-DYNA Users Conference, Dearborn, USA (2006)*, pp. 15:55–74.
- [52] KOLUPAEV V. A., ALTENBACH H. Einige Überlegungen zur Unified Strength Theory von Mao-Hong Yu. *Forschung im Ingenieurwesen* 74, 3 (2010), 135–166.
- [53] KOLUPAEV V. A., MOHR-MATUSCHEK U., ALTENBACH H. Application of strength hypotheses for POM (in German: Anwendung von Festigkeitshypothesen an POM). In: *Radusch H.J., Fiedler L. (eds.) 14. International Scientific Conference on Polymeric Materials P.2010, 15. - 17. September 2010, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, p. 12. Halle (Saale) (2010)*.
- [54] KOPPE S. DMA-Untersuchungen. Interner Versuchsbericht, Robert Bosch GmbH, Zentrale Forschung und Voraentwicklung, Abteilung Kunststofftechnik, Waiblingen, 2013.
- [55] KUNKEL F. *Zum Deformationsverhalten von spritzgegossenen Bauteilen aus talkumgefüllten Thermoplasten unter dynamischer Beanspruchung*. Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2017.
- [56] LEMAITRE J., CHABOCHE J.-L. *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge University Press, 1990.
- [57] LEMAITRE J., DESMORAT R. *Engineering Damage Mechanics: Ductile, Creep, Fatigue and Brittle Failures*. Springer, 2005.
- [58] LIENHARD J., HUBERTH F., DISCHER D. Experimentelle deformations- und dehnratenabhängige Temperaturfeldanalyse in der Werkstoffcharakterisierung. In *4a Technologietag 2018 "Kunststoffe Prüfen und Simulieren", Schladming (2018)*.
- [59] LIENHARD J., SCHULENBERG L. Strain rate dependent multiaxial characterization of long fiber reinforced plastic. *Composites Part B: Engineering* 141 (2018), 164 – 173.
- [60] LUBLINER J. *Plasticity Theory*. Dover Books on Engineering. Dover Publications, 2008.
- [61] LUCAS J. C., FAILLA M. D., SMITH F. L., MANDELKERN L., PEACOCK A. J. The double yield in the tensile deformation of the polyethylenes. *Polymer Engineering & Science* 35, 13 (1995), 1117–1123.

- [62] MAUREL-PANTEL A., BAQUET E., BIKARD J., BOUVARD J. L., BILLON N. A thermo-mechanical large deformation constitutive model for polymers based on material network description: Application to a semi-crystalline polyamide 66. *International Journal of Plasticity* 67 (2015), 102–126.
- [63] MENARD K. P. *Dynamic Mechanical Analysis: A Practical Introduction, Second Edition*. CRC Press, 2008.
- [64] MENGES G. *Werkstoffkunde Kunststoffe*, 4. korrigierte und aktualisierte Auflage ed. Hanser, München [u.a.], 1998.
- [65] MICHLER G. H. *Kunststoff-Mikromechanik: Morphologie, Deformations- und Bruchmechanismen*. Carl Hanser Verlag, 1992.
- [66] MICHLER G. H., BALTA-CALLEJA F. J. *Nano- and Micromechanics of Polymers: Structure Modification and Improvement of Properties*. Hanser, 2012.
- [67] MÜLLER F. H. Weitere Versuche und Betrachtungen zur Kaltverstreckung. *Kolloid-Zeitschrift* 126, 2 (1952), 65–72.
- [68] MÜLLER F. H. Analyse von Zustandsänderungen aus kalorischen und mechanischen Untersuchungen des Deformationsvorganges. *Kolloid-Zeitschrift* 165, 1 (1959), 96–116.
- [69] MÜLLER F. H., ENGELTER A. Messmethode für Wärmeeffekte bei Deformationsvorgängen. *Rheologica Acta* 1, 1 (1958), 39–53.
- [70] MÜLLER F. H., JÄCKEL K. Energie-Bilanz bei Kaltverstreckung. *Kolloid-Zeitschrift* 129, 2 (1952), 145–146.
- [71] MULLIKEN A. D., BOYCE M. C. Mechanics of the rate-dependent elastic-plastic deformation of glassy polymers from low to high strain rates. *International Journal of Solids and Structures* 43, 5 (2006), 1331–1356.
- [72] NAGASAWA T., SHIMOMURA Y. Mechanism of formation of shish kebab structures. *Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition* 12, 11 (1974), 2291–2308.
- [73] NAUMENKO K., ALTENBACH H. *Modeling of Creep for Structural Analysis*. Foundations of Engineering Mechanics. Springer, 2007.
- [74] NETZSCH-GERÄTEBAU GMBH. *Thermal Diffusivity - Thermal Conductivity: Method, Technique, Applications LFA 447 NanoFlash*, 2012.

- [75] OKADA T., ISHIGE R., ANDO S. Analysis of Thermal Radiation Properties of Polyimide and Polymeric Materials Based on ATR-IR spectroscopy. *Journal of Photopolymer Science and Technology* 29 (08 2016), 251–254.
- [76] POPA C. M., FLEISCHHAUER R., SCHNEIDER K., KALISKE M. Formulation and implementation of a constitutive model for semicrystalline polymers. *International Journal of Plasticity* 61 (10 2014).
- [77] POPLI R., MANDELKERN L. Influence of structural and morphological factors on the mechanical properties of the polyethylenes. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* 25, 3 (1987), 441–483.
- [78] RICHTON J., AHZI S., DARIDON L., RÉMOND Y. A formulation of the cooperative model for the yield stress of amorphous polymers for a wide range of strain rates and temperatures. *Polymer* 46, 16 (2005), 6035 – 6043.
- [79] RITTEL D. On the conversion of plastic work to heat during high strain rate deformation of glassy polymers. *Mechanics of Materials* 31 (02 1999), 131–139.
- [80] ROETLING J. A. Yield stress behaviour of polymethylmethacrylate. *Polymer* 6, 6 (1965), 311 – 317.
- [81] SCHINDEL B. *Thermografie in der Theorie und Praxis*. 2007.
- [82] SCHMACHTENBERG E. *Die mechanischen Eigenschaften nichtlinear viskoelastischer Werkstoffe*. Dissertation, Rheinisch Westfälische Technische Hochschule Aachen, 1985.
- [83] SEDIGHIAMI A., GOVAERT L. E., VAN DOMMELEN J. A. W. Micromechanical modeling of the deformation kinetics of semicrystalline polymers. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* 49, 18 (2011), 1297–1310.
- [84] SEGUELA R., DARRAS O. Phenomenological aspects of the double yield of polyethylene and related copolymers under tensile loading. *Journal of Materials Science* 29, 20 (1994), 5342–5352.
- [85] SELTZER R., CISILINO A. P., FRONTINI P. M., MAI Y. W. Determination of the Drucker-Prager parameters of polymers exhibiting pressure-sensitive plastic behaviour by depth-sensing indentation. *International Journal of Mechanical Sciences* 53, 6 (2011), 471–478.
- [86] SHAN G. F., YANG W., YANG M. B., XIE B. H., FENG J. M., FU Q. Effect of temperature and strain rate on the tensile deformation of polyamide 6. *Polymer* 48, 10 (2007), 2958–2968.

- [87] STOMMEL M., STOJEK M., KORTE W. *FEM zur Berechnung von Kunststoff- und Elastomerbauteilen*. Carl Hanser Verlag, 2011.
- [88] STRAUCH J., ALTENBACH H., KOLLING S. Simulation kurzzeitdynamischer Vorgänge unter Berücksichtigung thermomechanischer Effekte in der Materialmodellierung von Polyamid 6. In *Hanser Tagung "Kunststoffe + Simulation 2013", München (2013)*.
- [89] STRAUCH J., ALTENBACH H., KOLLING S. Influence of thermal effects on the deformation behavior of polyamide-6, Experimental investigations and constitutive modeling. In *9th International Conference on Advanced Computational Engineering and Experimenting, Munich (2015)*.
- [90] STRAUCH J., ALTENBACH H., KOLLING S., BECKER F. Simulation kurzzeitdynamischer Vorgänge unter Berücksichtigung thermomechanischer Effekte in der Materialmodellierung von Polyamid 6. In *4a Technologietag 2012 "Kunststoffe Prüfen und Simulieren", Schladming (2012)*.
- [91] TAYLOR G. I., QUINNEY H. The latent energy remaining in a metal after cold working. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 143, 849 (1934), 307–326.
- [92] TÖRNIG W., S. P. *Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker: Band 1: Numerische Methoden der Algebra*. Springer Berlin Heidelberg, 1988.
- [93] VARGHESE A. G., BATRA R. C. Constitutive equations for thermomechanical deformations of glassy polymers. *International Journal of Solids and Structures* 46, 22 (2009), 4079 – 4094.
- [94] WACKERFUSS J. *Theoretische und numerische Beiträge zur Beschreibung von Lokalisierungsphänomenen in der Strukturmechanik*. Shaker Verlag, Juni 2005.
- [95] WU T., CAO Y., YANG F., XIANG M. Investigation on double yielding behavior under tensile loading in isotactic polypropylene. *Materials & Design* 60 (2014), 153–163.

A. Ergänzungen zum Materialmodell

A.1. Übersicht Modellparameter

Die Tabelle A.1 enthält alle Parameter des angepassten druckabhängigen thermoelastisch-thermoviskoplastischen Materialmodells für das Polyamid 6 (trocken).

Modelle	Modellparameter					
Elastische Koeffizienten Gleichungen (5.7), (5.9)	E_0 [MPa]	a_{el} [-]	b_{el} [1/°C]	c_{el} [°C]	$T_{g,0}$ [°C]	ν_0 [-]
	2209,9	0,58731	0,0506932	1,78765	46,6226	0,3791
1. Fließspannung Gleichung (5.32)	$\hat{\sigma}_{F_1}$ [MPa]	a_1 [-]	b_1 [1/°C]	c_1 [°C]	d_1 [°C]	
	75,253	0,679181	0,0259054	3,73468	21,5752	
2. Fließspannung Gleichung (5.33)	$\hat{\sigma}_{F_2}$ [MPa]	a_2 [-]	b_2 [1/°C]	c_2 [°C]	d_2 [°C]	
	73,5697	0,549011	0,0275302	4,0124	33,1939	
Dehnungsverfestigung Gleichung (5.31)	w_1 [-]	w_2 [-]	w_3 [-]	w_4 [-]	h [-]	
	0,230204	229,882	10,3373	1,24814	0,240128	
Fließfläche Gleichung (4.21)	γ_1 [-]	γ_2 [-]				
	0,316	-0,422				
Plastisches Potential Gleichungen (4.25), (5.37)	ω_{z_0} [-]	a_3 [-]	b_3 [1/°C]	c_3 [°C]	d_3 [°C]	ω_D [-]
	1,0	22,5888	0,0896067	3,75104	17,4925	-0,5

Tabelle A.1.: Übersicht der Materialmodellparameter

A.2. 3D-Darstellungen der elastischen Koeffizienten

Linkes Diagramm:

- $E(\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}, T) = E_0 \left[1 - a_{\text{el}} \arctan \left(b_{\text{el}} \left(T - c_{\text{el}} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) - T_{\text{g},0} \right) \right) \right]$

Rechtes Diagramm:

- $\nu(\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}, T) = \nu_0 + (0,5 - \nu_0) \left[a_{\text{el}} \arctan \left(b_{\text{el}} \left(T - c_{\text{el}} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) - T_{\text{g},0} \right) \right) \right]$

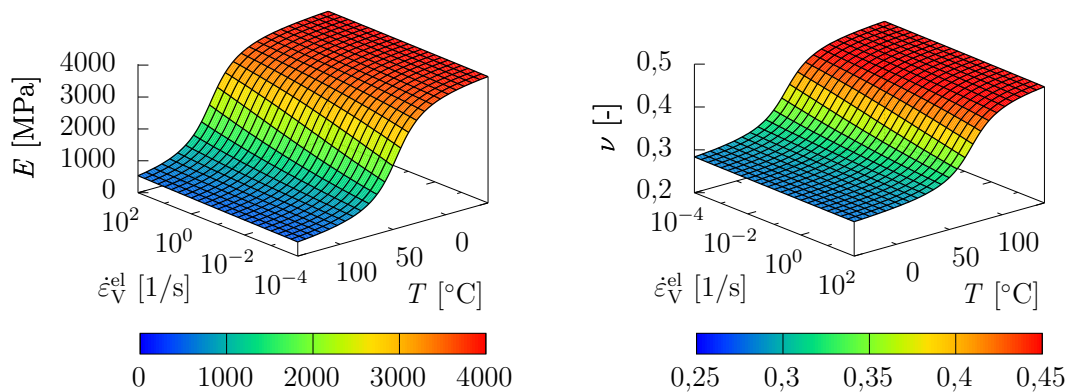


Abbildung A.1.: Dreidimensionale Darstellung des dehnraten- und temperaturabhängigen Modells für den Elastizitätsmodul und die Querkontraktionszahl

A.3. 3D-Darstellungen der Fließspannungen

Linkes Diagramm:

- $\sigma_{F_1}(\dot{\varepsilon}_V^{vp}, T) = \hat{\sigma}_{F_1} \left(1 - a_1 \arctan \left(b_1 \left(T - c_1 \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_V^{vp}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) - d_1 \right) \right) \right)$

Rechtes Diagramm:

- $\sigma_{F_2}(\dot{\varepsilon}_V^{vp}, T) = \hat{\sigma}_{F_2} \left(1 - a_2 \arctan \left(b_2 \left(T - c_2 \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_V^{vp}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) - d_2 \right) \right) \right)$

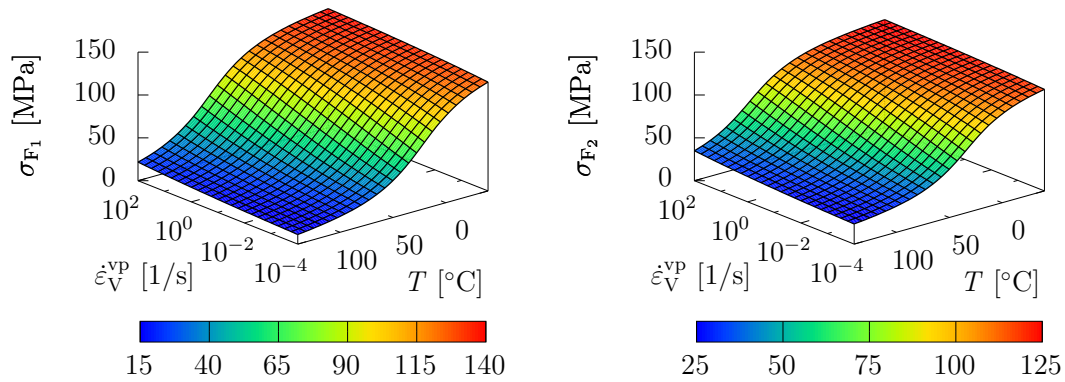


Abbildung A.2.: Dreidimensionale Darstellung des dehnraten- und temperaturabhängigen Modells für die erste und die zweite Fließspannung

A.4. 3D-Darstellung der Verfestigungsfunktion

Diagramme für konstante Temperaturen $T[^\circ\text{C}] = 25; 40; 60; 80; 100; 120$:

- $$\sigma_F(\varepsilon_V^{\text{vp}}, \dot{\varepsilon}_V^{\text{pl}}, T) = (1 - w_1 \exp(-w_2 \varepsilon_V^{\text{vp}})) (\exp(-w_3 (\varepsilon_V^{\text{vp}})^{w_4})) \sigma_{F_1}(\dot{\varepsilon}_V^{\text{pl}}, T) + (1 - \exp(-w_3 (\varepsilon_V^{\text{vp}})^{w_4})) \exp(h (\varepsilon_V^{\text{vp}})^2) \sigma_{F_2}(\dot{\varepsilon}_V^{\text{pl}}, T)$$

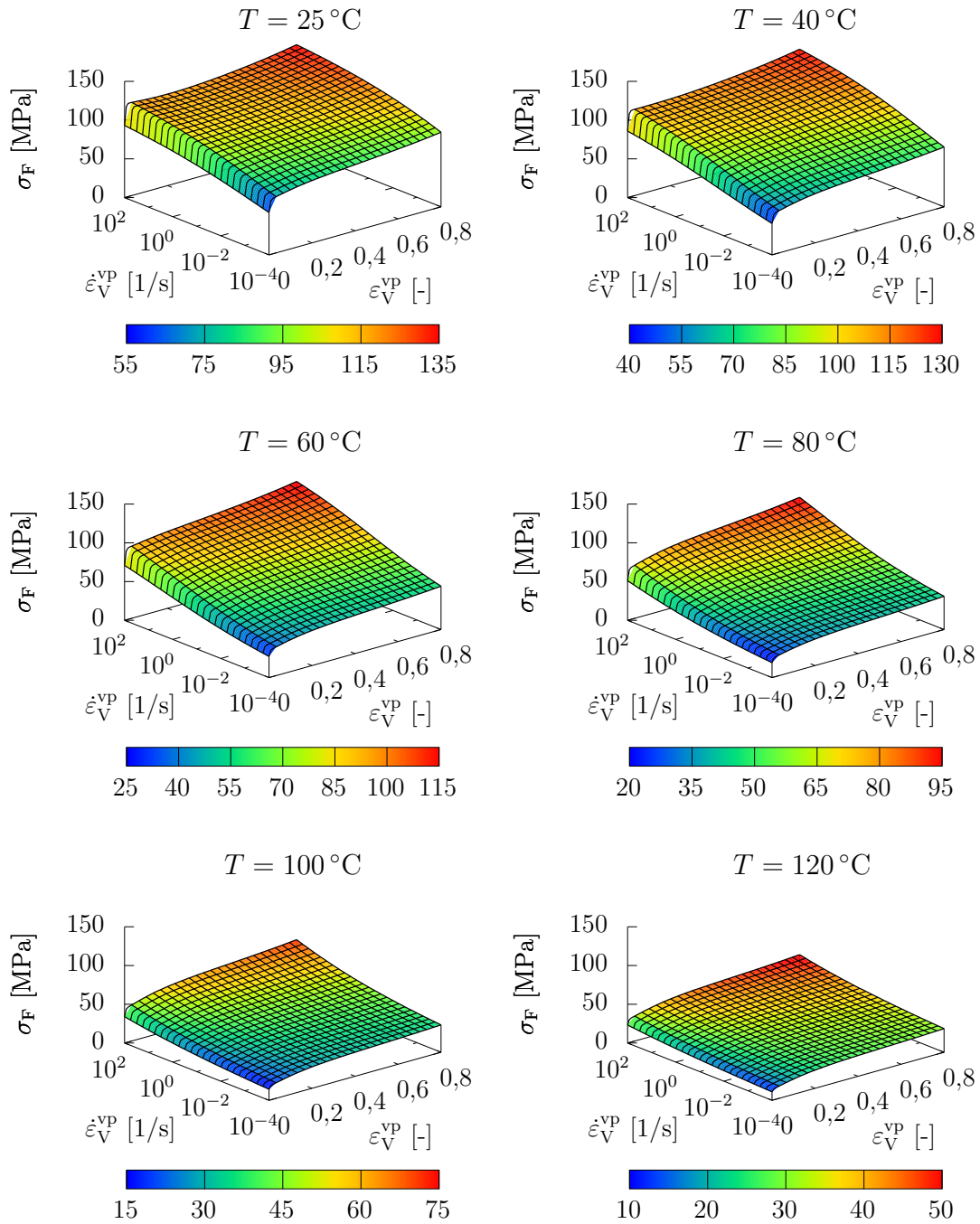


Abbildung A.3.: Dreidimensionale Darstellung der dehnungs-, dehnraten- und temperaturabhängigen Verfestigungsfunktion

A.5. 3D-Darstellung der Kompressibilitätsfunktion

Diagramme für konstante Temperaturen $T[^\circ\text{C}] = 25; 40; 60; 80; 100; 120$:

- $\omega_Z(\varepsilon_V^{\text{vp}}, \dot{\varepsilon}_V^{\text{pl}}, T) = \omega_{Z_0} + \frac{a_3}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \left(b_3 \left(T - c_3 \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) - d_3 \right) \right) \right) (\varepsilon_V^{\text{vp}})^2$

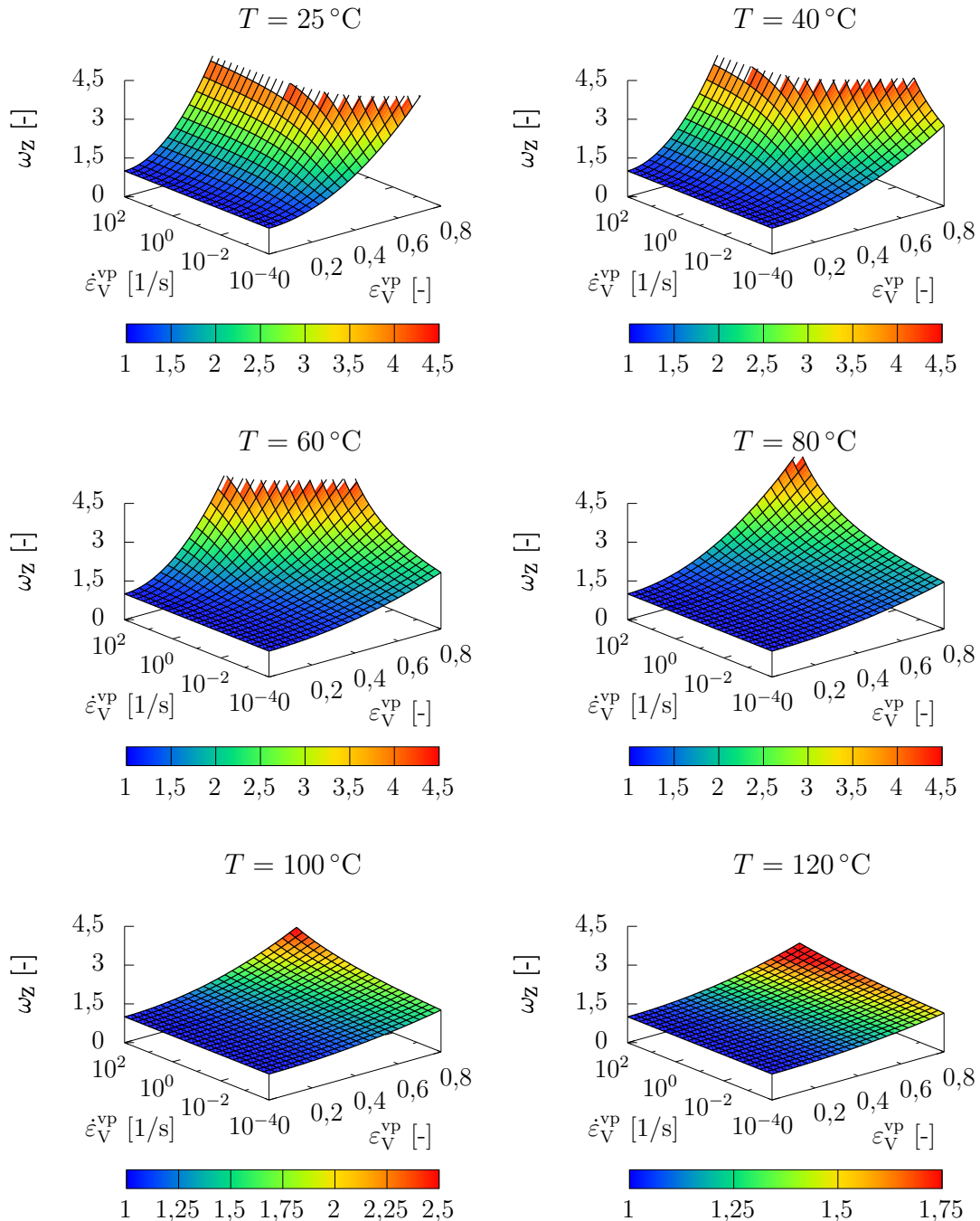


Abbildung A.4.: Dreidimensionale Darstellung der dehnungs-, dehnraten- und temperaturabhängigen Funktion für den plastischen Kompressibilitätsparameter im Zugmodus

B. Ergänzungen zum Algorithmus

B.1. Inkremente des Kompressions- und Schubmoduls

Gegeben sind die Funktionen der elastischen Koeffizienten

$$K(E, \nu) = \frac{E}{3(1 - 2\nu)}, \quad (\text{B.1})$$

$$G(E, \nu) = \frac{E}{2(1 + \nu)}, \quad (\text{B.2})$$

$$E(\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}, T) = E_0 \left[1 - a_{\text{el}} \arctan \left(b_{\text{el}} \left(T - c_{\text{el}} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) - T_{\text{g},0} \right) \right) \right] \quad (\text{B.3})$$

und

$$\nu(\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}, T) = \nu_0 + (0,5 - \nu_0) \left[a_{\text{el}} \arctan \left(b_{\text{el}} \left(T - c_{\text{el}} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) - T_{\text{g},0} \right) \right) \right]. \quad (\text{B.4})$$

Aus dem totalen Differential von K

$$dK = \frac{\partial K}{\partial E} dE + \frac{\partial K}{\partial \nu} d\nu \quad (\text{B.5})$$

folgt unter der Annahme, dass während der Iteration die elastische Vergleichsdehnrate $\dot{\varepsilon}_V^{\text{el}}$ konstant gehalten wird, die totale Ableitung nach der Zeit

$$\begin{aligned} \frac{dK}{dt} &= \frac{\partial K}{\partial E} \frac{dE}{dt} + \frac{\partial K}{\partial \nu} \frac{d\nu}{dt} \\ &= \left(\frac{\partial K}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial T} + \frac{\partial K}{\partial \nu} \frac{\partial \nu}{\partial T} \right) \frac{dT}{dt}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Damit kann das zeitliche Inkrement des Kompressionsmoduls angegeben werden

$$\Delta K = \left(\frac{\partial K}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial T} + \frac{\partial K}{\partial \nu} \frac{\partial \nu}{\partial T} \right) \Delta T. \quad (\text{B.7})$$

Daraus folgt unter Berücksichtigung der Funktionen (B.3) und (B.4)

B. Ergänzungen zum Algorithmus

$$\Delta K = - \left(\frac{E_0}{3(1-2\nu)} - \frac{(1-2\nu_0)E}{3(1-2\nu)^2} \right) \frac{a_{\text{el}} b_{\text{el}}}{1 + b_{\text{el}}^2 (T - c_{\text{el}} \ln(\frac{\varepsilon_{\text{el}}}{\varepsilon_0}) - T_{\text{g},0})^2} \Delta T. \quad (\text{B.8})$$

Die Bestimmung des zeitlichen Inkrements vom Schubmodul verläuft analog zum Kompressionsmodul und liefert zunächst

$$\Delta G = \left(\frac{\partial G}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial T} + \frac{\partial G}{\partial \nu} \frac{\partial \nu}{\partial T} \right) \Delta T. \quad (\text{B.9})$$

Einsetzen der Gleichungen (5.7) und (5.10) in (B.9) ergibt

$$\Delta G = - \left(\frac{E_0}{2(1+\nu)} + \frac{(\frac{1}{2} - \nu_0)E}{2(1+\nu)^2} \right) \frac{a_{\text{el}} b_{\text{el}}}{1 + b_{\text{el}}^2 (T - c_{\text{el}} \ln(\frac{\varepsilon_{\text{el}}}{\varepsilon_0}) - T_{\text{g},0})^2} \Delta T. \quad (\text{B.10})$$

Die Gleichungen (B.8) und (B.10) sind somit Funktionen von T und ΔT .

B.2. Projektionen des diskretisierten Spannungstensors

Ausgehend von der Gleichung für die Aktualisierung des zeitdiskretisierten Spannungstensors nach dem impliziten Euler-Verfahren

$$[\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t} = [\boldsymbol{\sigma}]_{|t} + [\Delta \boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t} \quad (\text{B.11})$$

unter Einbeziehung des aus der Ratengleichung des Konstitutivgesetzes (4.16) folgenden Spannungsinkrements

$$\begin{aligned} [\Delta \boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t} &= [2G(\Delta \mathbf{e}^{\text{tot}} - \Delta \mathbf{e}^{\text{vp}}) + K((\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} \\ &\quad + 2\Delta G(\mathbf{e}^{\text{tot}} - \mathbf{e}^{\text{vp}}) + \Delta K((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I}]_{|t+\Delta t} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

werden die Projektionen auf den Einheitstensor \mathbf{I} und den skalierten Fließvektor $[\mathbf{n}]_{|t+\Delta t}$ in den nächsten beiden Unterabschnitten B.2.1 und B.2.2 durchgeführt.

B.2.1. Projektion von $[\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t}$ auf \mathbf{I}

Die Projektion von $[\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t}$ auf den Einheitstensor \mathbf{I} erfolgt durch Bildung des doppelten Skalarprodukts

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t+\Delta t} &= [\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t} \\ &\quad + [2G(\Delta \mathbf{e}^{\text{tot}} - \Delta \mathbf{e}^{\text{vp}}) \cdot \cdot \mathbf{I} + K((\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} \cdot \cdot \mathbf{I} \\ &\quad + 2\Delta G(\mathbf{e}^{\text{tot}} - \mathbf{e}^{\text{vp}}) \cdot \cdot \mathbf{I} + \Delta K((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})\mathbf{I} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t+\Delta t} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

B.2. Projektionen des diskretisierten Spannungstensors

Durch Einsetzen der folgenden Beziehungen

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t+\Delta t} = -3[p]_{|t+\Delta t}, \quad (\text{B.14})$$

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t} = -3[p]_{|t}, \quad (\text{B.15})$$

$$[\Delta \mathbf{e}^{\text{tot}} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t+\Delta t} = 0, \quad (\text{B.16})$$

$$[\Delta \mathbf{e}^{\text{vp}} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t+\Delta t} = 0, \quad (\text{B.17})$$

$$[\mathbf{e}^{\text{tot}} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t+\Delta t} = 0, \quad (\text{B.18})$$

$$[\mathbf{e}^{\text{vp}} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t+\Delta t} = 0, \quad (\text{B.19})$$

$$\mathbf{I} \cdot \cdot \mathbf{I} = 3, \quad (\text{B.20})$$

$$[\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t+\Delta t} = [\Delta \varepsilon_p]_{|t+\Delta t} \quad (\text{B.21})$$

und

$$[\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t+\Delta t} = [\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t} + [\Delta \varepsilon_p]_{|t+\Delta t} \quad (\text{B.22})$$

in Gleichung (B.13) folgt für die Aktualisierung des hydrodynamischen Drucks

$$\begin{aligned} [p]_{|t+\Delta t} &= [p]_{|t} - [K((\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I}) + \Delta K((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})]_{|t+\Delta t} \\ &\quad + [K \Delta \varepsilon_p]_{|t+\Delta t} + [\Delta K]_{|t+\Delta t} \left([\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t} + [\Delta \varepsilon_p]_{|t+\Delta t} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Mit Anwendung der Prädiktor-Korrektor-Methode zur Aktualisierung des hydrostatischen Drucks

$$[p]_{|t+\Delta t} = [p]_{\text{pr}} + [\Delta p]_{\text{korr}} \quad (\text{B.24})$$

können die Terme in Gleichung (B.23) dem Prädiktordruck (bei $\Delta \varepsilon_p = 0$)

$$[p]_{\text{pr}} = [p]_{|t} - [K((\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I}) + \Delta K((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I})]_{|t+\Delta t} + [\Delta K]_{|t+\Delta t} [\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} \cdot \cdot \mathbf{I}]_{|t} \quad (\text{B.25})$$

und dem viskoplastischen Korrekturanteil

$$[\Delta p]_{\text{korr}} = [(K + \Delta K) \Delta \varepsilon_p]_{|t+\Delta t} \quad (\text{B.26})$$

zugeordnet werden.

B.2.2. Projektion von $[\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t}$ auf $[\mathbf{n}]_{|t+\Delta t}$

Die Projektion von $[\boldsymbol{\sigma}]_{|t+\Delta t}$ auf den skalierten Fließvektor $[\mathbf{n}]_{|t+\Delta t}$ erfolgt durch Bildung des doppelten Skalarprodukts

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{n}]_{|t+\Delta t} &= [\boldsymbol{\sigma}]_{|t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{|t+\Delta t} \\ &+ [2G(\Delta \mathbf{e}^{\text{tot}} - \Delta \mathbf{e}^{\text{vp}}) \cdot \cdot \mathbf{n} + K((\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I}) \mathbf{I} \cdot \cdot \mathbf{n} \\ &+ 2\Delta G(\mathbf{e}^{\text{tot}} - \mathbf{e}^{\text{vp}}) \cdot \cdot \mathbf{n} + \Delta K((\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{tot}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{vp}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{th}}) \cdot \cdot \mathbf{I}) \mathbf{I} \cdot \cdot \mathbf{n}]_{|t+\Delta t} \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Durch Einsetzen der folgenden Beziehungen

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot \cdot \mathbf{n}]_{|t+\Delta t} = \frac{3}{2} \left[\frac{\mathbf{s} \cdot \cdot \mathbf{s}}{q} \right]_{|t+\Delta t} = [q]_{|t+\Delta t}, \quad (\text{B.28})$$

$$[\boldsymbol{\sigma}]_{|t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{|t+\Delta t} = [\mathbf{s}]_{|t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{|t+\Delta t}, \quad (\text{B.29})$$

$$[\mathbf{I} \cdot \cdot \mathbf{n}]_{|t+\Delta t} = 0, \quad (\text{B.30})$$

$$[\Delta \mathbf{e}^{\text{vp}} \cdot \cdot \mathbf{n}]_{|t+\Delta t} = \frac{3}{2} [\Delta \varepsilon_q]_{|t+\Delta t} \quad (\text{B.31})$$

und

$$[\mathbf{e}^{\text{vp}} \cdot \cdot \mathbf{n}]_{|t+\Delta t} = [\mathbf{e}^{\text{vp}}]_{|t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{|t+\Delta t} + \frac{3}{2} [\Delta \varepsilon_q]_{|t+\Delta t} \quad (\text{B.32})$$

in Gleichung (B.27) folgt für die Aktualisierung der von Mises Spannung

$$\begin{aligned} [q]_{|t+\Delta t} &= [\mathbf{s}]_{|t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{|t+\Delta t} + [2G\Delta \mathbf{e}^{\text{tot}} + 2\Delta G\mathbf{e}^{\text{tot}}]_{|t+\Delta t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{|t+\Delta t} \\ &- [2\Delta G]_{|t+\Delta t} [\mathbf{e}^{\text{vp}}]_{|t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{|t+\Delta t} - 3[\Delta G\Delta \varepsilon_q]_{|t+\Delta t} - 3[G\Delta \varepsilon_q]_{|t+\Delta t} \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

Unter Berücksichtigung der Zeitintegration nach dem Prädiktor-Korrektor-Methode

$$[q]_{|t+\Delta t} = [q]_{\text{pr}} + [\Delta q]_{\text{korrr}} \quad (\text{B.34})$$

und der Annahme der Koaxialität von $[\mathbf{n}]_{|t+\Delta t}$ und $[\mathbf{n}]_{\text{pr}}$ [4] können der von Mises Spannungsprädiktor (bei $\Delta \varepsilon_q = 0$)

$$[q]_{\text{pr}} = [\mathbf{s}]_{|t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{\text{pr}} + [2G\Delta \mathbf{e}^{\text{tot}} + 2\Delta G\mathbf{e}^{\text{tot}}]_{|t+\Delta t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{\text{pr}} - [2\Delta G]_{|t+\Delta t} [\mathbf{e}^{\text{vp}}]_{|t} \cdot \cdot [\mathbf{n}]_{\text{pr}} \quad (\text{B.35})$$

und der viskoplastische Korrekturanteil für die von Mises Spannung

$$[\Delta q]_{\text{korrr}} = -[3(\Delta G + G)\Delta \varepsilon_q]_{|t+\Delta t} \quad (\text{B.36})$$

angegeben werden.

B.3. Jakobi-Matrix aus dem Newton-Raphson-Verfahren

Im Kapitel 6 beschriebenen Newton-Raphson-Iterationsverfahren zur Bestimmung der viskoplastischen Verzerrungssinkremente (Algorithmus 6.2) muss in jedem Iterationsschritt die Jakobi-Matrix $[\mathbf{J}]_{|t+\Delta t}$ zum Zeitpunkt $t + \Delta t$

$$[\mathbf{J}]_{|t+\Delta t} = \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} \end{bmatrix}_{|t+\Delta t} = \begin{bmatrix} \frac{d\Phi}{d\Delta\varepsilon_p} & \frac{d\Phi}{d\Delta\varepsilon_q} \\ \frac{d\Psi^*}{d\Delta\varepsilon_p} & \frac{d\Psi^*}{d\Delta\varepsilon_q} \end{bmatrix}_{|t+\Delta t} \quad (\text{B.37})$$

neu berechnet werden. Die in \mathbf{J} enthaltenen Ableitungen der Funktionen Φ und Ψ^* nach den gesuchten Größen $\Delta\varepsilon_p$ und $\Delta\varepsilon_q$ werden in den folgenden Unterabschnitten B.3.1 bis B.3.4 angegeben. Die Funktionen Φ und Ψ^* hängen nicht nur von den primären Größen $\Delta\varepsilon_p$ und $\Delta\varepsilon_q$ ab, sondern sind auch indirekt abhängige Funktionen der Variablen p , q , $\varepsilon_V^{\text{vp}}$, $\dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}}$ und T . Somit sind die Komponenten der Jakobi-Matrix als totale Ableitungen zu behandeln. Die Funktionen Φ und Ψ^* sind wie folgt definiert:

$$\Phi(p, q, \varepsilon_V^{\text{vp}}, \dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}}, T) = \sigma_{\text{BY}}(p, q) - \sigma_{\text{F}}(\varepsilon_V^{\text{vp}}, \dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}}, T), \quad (\text{B.38})$$

$$\Psi^*(\Delta\varepsilon_p, \Delta\varepsilon_q, p, q) = \Delta\varepsilon_q \omega p + \Delta\varepsilon_p q. \quad (\text{B.39})$$

Damit können die totalen Differentiale

$$d\Phi = \frac{\partial\Phi}{\partial p} dp + \frac{\partial\Phi}{\partial q} dq + \frac{\partial\Phi}{\partial\varepsilon_V^{\text{pl}}} d\varepsilon_V^{\text{vp}} + \frac{\partial\Phi}{\partial\dot{\varepsilon}_V^{\text{pl}}} d\dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}} + \frac{\partial\Phi}{\partial T} dT \quad (\text{B.40})$$

und

$$d\Psi^* = \frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_p} d\Delta\varepsilon_p + \frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_q} d\Delta\varepsilon_q + \frac{\partial\Psi^*}{\partial p} dp + \frac{\partial\Psi^*}{\partial q} dq. \quad (\text{B.41})$$

gebildet werden. Diese werden in den folgenden Abschnitten zur Bildung der totalen Ableitungen verwendet.

B.3.1. Berechnung der Komponente J_{11}

Aus Gleichung (B.40) folgt die totale Ableitung $[J_{11}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{d\Phi}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t}$:

$$[J_{11}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\partial\sigma_{\text{BY}}}{\partial p} \frac{dp}{d\Delta\varepsilon_p} + \frac{\partial\sigma_{\text{BY}}}{\partial q} \frac{dq}{d\Delta\varepsilon_p} - \frac{\partial\sigma_{\text{F}}}{\partial\varepsilon_V^{\text{vp}}} \frac{d\varepsilon_V^{\text{vp}}}{d\Delta\varepsilon_p} - \frac{\partial\sigma_{\text{F}}}{\partial\dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}}} \frac{d\dot{\varepsilon}_V^{\text{vp}}}{d\Delta\varepsilon_p} - \frac{\partial\sigma_{\text{F}}}{\partial T} \frac{dT}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t}. \quad (\text{B.42})$$

Die einzelnen Ableitungen auf der rechten Seite dieser Gleichung werden nun der Reihe nach angegeben:

B. Ergänzungen zum Algorithmus

1.
$$\left[\frac{\partial \sigma_{BY}}{\partial p} \right]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{3(\gamma_1+\gamma_2)}{2} + \frac{2\left(\frac{3(\gamma_1-\gamma_2)}{2}\right)^2 p}{\sqrt{\left(\frac{3(\gamma_1-\gamma_2)}{2}\right)^2 p^2 + (1-\gamma_1)(1-\gamma_2)q^2}} \right]_{|t+\Delta t}$$
2.
$$\left[\frac{dp}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = [K + \Delta K]_{|t+\Delta t}$$
3.
$$\left[\frac{\partial \sigma_{BY}}{\partial q} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{2(1-\gamma_1)(1-\gamma_2)q}{\sqrt{\left(\frac{3(\gamma_1-\gamma_2)}{2}\right)^2 p^2 + (1-\gamma_1)(1-\gamma_2)q^2}} \right]_{|t+\Delta t}$$
4.
$$\left[\frac{dq}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = 0$$
5.
$$\left[\frac{\partial \sigma_F}{\partial \varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\left(\frac{\partial f_1}{\partial \varepsilon_V^{VP}} f_2 + f_1 \frac{\partial f_2}{\partial \varepsilon_V^{VP}} \right) \sigma_{F_1} - \left(\frac{\partial f_2}{\partial \varepsilon_V^{VP}} f_3 - (1-f_2) \frac{\partial f_3}{\partial \varepsilon_V^{VP}} \right) \sigma_{F_2} \right]_{|t+\Delta t}$$
 - $[f_1]_{|t+\Delta t} = [1 - w_1 \exp(-w_2 \varepsilon_V^{VP})]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial f_1}{\partial \varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t} = [w_1 w_2 \exp(-w_2 \varepsilon_V^{VP})]_{|t+\Delta t}$
 - $[f_2]_{|t+\Delta t} = [\exp(-w_3 (\varepsilon_V^{VP})^{w_4})]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial f_2}{\partial \varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t} = [-w_3 w_4 (\varepsilon_V^{VP})^{(w_4-1)} \exp(-w_3 (\varepsilon_V^{VP})^{w_4})]_{|t+\Delta t}$
 - $[f_3]_{|t+\Delta t} = [\exp(h (\varepsilon_V^{VP})^2)]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial f_3}{\partial \varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t} = [2h \varepsilon_V^{VP} \exp(h (\varepsilon_V^{VP})^2)]_{|t+\Delta t}$
 - $[\sigma_{F_1}]_{|t+\Delta t} = \left[\hat{\sigma}_{F_1} \left(1 - a_1 \arctan \left(b_1 \left(T - c_1 \ln \left(\frac{\varepsilon_V^{el}}{\varepsilon_0} \right) - d_1 \right) \right) \right) \right]_{|t+\Delta t}$
 - $[\sigma_{F_2}]_{|t+\Delta t} = \left[\hat{\sigma}_{F_2} \left(1 - a_2 \arctan \left(b_2 \left(T - c_2 \ln \left(\frac{\varepsilon_V^{el}}{\varepsilon_0} \right) - d_2 \right) \right) \right) \right]_{|t+\Delta t}$
6.
$$\left[\frac{d\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{d}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} [\varepsilon_V^{VP}]_t + \left[\frac{d\Delta\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t}$$
 - $\left[\frac{d}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} [\varepsilon_V^{VP}]_t = 0$
 - $$\left[\frac{d\Delta\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\partial \Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial \Delta\varepsilon_p} + \frac{\partial \Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial \Delta\varepsilon_q} \frac{d\Delta\varepsilon_q}{d\Delta\varepsilon_p} + \frac{\partial \Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial p} \frac{dp}{d\Delta\varepsilon_p} + \frac{\partial \Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial q} \frac{dq}{d\Delta\varepsilon_p} + \frac{\partial \Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial \sigma_{BY}} \frac{d\sigma_{BY}}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t}$$
 - $[\Delta\varepsilon_V^{VP}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{q\Delta\varepsilon_q - p\Delta\varepsilon_p}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial \Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial \Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{p}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial \Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial \Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{q}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{d\Delta\varepsilon_q}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = 0$
 - $\left[\frac{\partial \Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial p} \right]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{\Delta\varepsilon_p}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$

- $\left[\frac{dp}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = [K + \Delta K]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial q} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\Delta\varepsilon_q}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{dq}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = 0$
 - $\left[\frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{q\Delta\varepsilon_q - p\Delta\varepsilon_p}{(\sigma_{BY})^2} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{d\sigma_{BY}}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\partial\sigma_{BY}}{\partial p} \frac{dp}{d\Delta\varepsilon_p} + \frac{\partial\sigma_{BY}}{\partial q} \frac{dq}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t}$, Ableitungen siehe Punkte 1. bis 4.
7. $\left[\frac{\partial\sigma_F}{\partial\varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t} = \left[f_1 f_2 \frac{\partial\sigma_{F1}}{\partial\varepsilon_V^{VP}} + (1 - f_2) f_3 \frac{\partial\sigma_{F2}}{\partial\varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t}$
- $\left[\frac{\partial\sigma_{F1}}{\partial\varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\hat{\sigma}_{F1}}{\varepsilon_V^{VP}} \frac{a_1 b_1 c_1}{1 + \left(b_1 T - b_1 d_1 - b_1 c_1 \ln\left(\frac{\varepsilon_V^{el}}{\varepsilon_0}\right) \right)^2} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial\sigma_{F2}}{\partial\varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\hat{\sigma}_{F2}}{\varepsilon_V^{VP}} \frac{a_2 b_2 c_2}{1 + \left(b_2 T - b_2 d_2 - b_2 c_2 \ln\left(\frac{\varepsilon_V^{el}}{\varepsilon_0}\right) \right)^2} \right]_{|t+\Delta t}$
8. $\left[\frac{d\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{1}{\Delta t} \frac{d\Delta\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t}$, Ableitung siehe Punkt 6.
9. $\left[\frac{\partial\sigma_F}{\partial T} \right]_{|t+\Delta t} = \left[f_1 f_2 \frac{\partial\sigma_{F1}}{\partial T} + (1 - f_2) f_3 \frac{\partial\sigma_{F2}}{\partial T} \right]_{|t+\Delta t}$
- $\left[\frac{\partial\sigma_{F1}}{\partial T} \right]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{\hat{\sigma}_{F1} a_1 b_1}{1 + \left(b_1 T - b_1 d_1 - b_1 c_1 \ln\left(\frac{\varepsilon_V^{el}}{\varepsilon_0}\right) \right)^2} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial\sigma_{F2}}{\partial T} \right]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{\hat{\sigma}_{F2} a_2 b_2}{1 + \left(b_2 T - b_2 d_2 - b_2 c_2 \ln\left(\frac{\varepsilon_V^{el}}{\varepsilon_0}\right) \right)^2} \right]_{|t+\Delta t}$
10. $\left[\frac{dT}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = 0$, da ΔT durch Benutzeroutine VUMAT vorgegeben.

B.3.2. Berechnung der Komponente J_{12}

Aus Gleichung (B.40) folgt die totale Ableitung $[J_{12}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{d\Phi}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t}$:

$$[J_{12}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\partial\sigma_{BY}}{\partial p} \frac{dp}{d\Delta\varepsilon_q} + \frac{\partial\sigma_{BY}}{\partial q} \frac{dq}{d\Delta\varepsilon_q} - \frac{\partial\sigma_F}{\partial\varepsilon_V^{VP}} \frac{d\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_q} - \frac{\partial\sigma_F}{\partial\varepsilon_V^{VP}} \frac{d\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_q} - \frac{\partial\sigma_F}{\partial T} \frac{dT}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t}. \quad (\text{B.43})$$

Die einzelnen Ableitungen auf der rechten Seite dieser Gleichung werden nun der Reihe nach angegeben:

1. $\left[\frac{\partial\sigma_{BY}}{\partial p} \right]_{|t+\Delta t}$, siehe Unterabschnitt B.3.1 Punkt 1.

B. Ergänzungen zum Algorithmus

2. $\left[\frac{dp}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = 0$
3. $\left[\frac{\partial\sigma_{BY}}{\partial q} \right]_{|t+\Delta t}$, siehe Unterabschnitt B.3.1 Punkt 3.
4. $\left[\frac{dq}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = [-3(\Delta G + G)]_{|t+\Delta t}$
5. $\left[\frac{\partial\sigma_F}{\partial\varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t}$, siehe Unterabschnitt B.3.1 Punkt 5.
6. $\left[\frac{d\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{d}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} [\varepsilon_V^{VP}]_t + \left[\frac{d\Delta\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{d}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} [\varepsilon_V^{VP}]_t = 0$
 - $\left[\frac{d\Delta\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial\Delta\varepsilon_q} + \frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial\Delta\varepsilon_p} \frac{d\Delta\varepsilon_p}{d\Delta\varepsilon_q} + \frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial p} \frac{dp}{d\Delta\varepsilon_q} + \frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial q} \frac{dq}{d\Delta\varepsilon_q} + \frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial\sigma_{BY}} \frac{d\sigma_{BY}}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $[\Delta\varepsilon_V^{VP}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{q\Delta\varepsilon_q - p\Delta\varepsilon_p}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{q}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{p}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{d\Delta\varepsilon_p}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = 0$
 - $\left[\frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial p} \right]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{\Delta\varepsilon_p}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{dp}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = 0$
 - $\left[\frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial q} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\Delta\varepsilon_q}{\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{dq}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = [-3(\Delta G + G)]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{\partial\Delta\varepsilon_V^{VP}}{\partial\sigma_{BY}} \right]_{|t+\Delta t} = \left[-\frac{q\Delta\varepsilon_q - p\Delta\varepsilon_p}{(\sigma_{BY})^2} \right]_{|t+\Delta t}$
 - $\left[\frac{d\sigma_{BY}}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\partial\sigma_{BY}}{\partial p} \frac{dp}{d\Delta\varepsilon_q} + \frac{\partial\sigma_{BY}}{\partial q} \frac{dq}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t}$, Ableitungen siehe 1. bis 4.
7. $\left[\frac{\partial\sigma_F}{\partial\varepsilon_V^{VP}} \right]_{|t+\Delta t}$, siehe Unterabschnitt B.3.1 Punkt 7.
8. $\left[\frac{d\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{1}{\Delta t} \frac{d\Delta\varepsilon_V^{VP}}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t}$, Ableitung siehe Punkt 6.
9. $\left[\frac{\partial\sigma_F}{\partial T} \right]_{|t+\Delta t}$, siehe Unterabschnitt B.3.1 Punkt 9.
10. $\left[\frac{dT}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = 0$, da ΔT durch Benutzeroutine VUMAT vorgegeben.

B.3.3. Berechnung der Komponente J_{21}

Aus Gleichung (B.41) folgt die totale Ableitung $[J_{21}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{d\Psi^*}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} :$

$$[J_{21}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_p} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_q} \frac{d\Delta\varepsilon_q}{d\Delta\varepsilon_p} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial p} \frac{dp}{d\Delta\varepsilon_p} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial q} \frac{dq}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t}. \quad (\text{B.44})$$

Die einzelnen Ableitungen auf der rechten Seite dieser Gleichung werden nun der Reihe nach angegeben:

1. $\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = [q]_{|t+\Delta t}$
2. $\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = [\omega p]_{|t+\Delta t}$
3. $\left[\frac{d\Delta\varepsilon_q}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = 0$
4. $\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial p} \right]_{|t+\Delta t} = [\Delta\varepsilon_q \omega]_{|t+\Delta t}$
5. $\left[\frac{dp}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = [K + \Delta K]_{|t+\Delta t}$
6. $\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial q} \right]_{|t+\Delta t} = [\Delta\varepsilon_q]_{|t+\Delta t}$
7. $\left[\frac{dq}{d\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = 0$

B.3.4. Berechnung der Komponente J_{22}

Aus Gleichung (B.41) folgt die totale Ableitung $[J_{22}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{d\Psi^*}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} :$

$$[J_{22}]_{|t+\Delta t} = \left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_q} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_p} \frac{d\Delta\varepsilon_p}{d\Delta\varepsilon_q} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial p} \frac{dp}{d\Delta\varepsilon_q} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial q} \frac{dq}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t}. \quad (\text{B.45})$$

Die einzelnen Ableitungen auf der rechten Seite dieser Gleichung werden nun der Reihe nach angegeben:

1. $\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = [\omega p]_{|t+\Delta t}$
2. $\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial\Delta\varepsilon_p} \right]_{|t+\Delta t} = [q]_{|t+\Delta t}$
3. $\left[\frac{d\Delta\varepsilon_p}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = 0$
4. $\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial p} \right]_{|t+\Delta t} = [\Delta\varepsilon_q \omega]_{|t+\Delta t}$

B. Ergänzungen zum Algorithmus

$$5. \left[\frac{dp}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = 0$$

$$6. \left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial q} \right]_{|t+\Delta t} = [\Delta\varepsilon_p]_{|t+\Delta t}$$

$$7. \left[\frac{dq}{d\Delta\varepsilon_q} \right]_{|t+\Delta t} = [-3(\Delta G + G)]_{|t+\Delta t}$$