



Institut für Mechanik

Masterarbeit



Einfluss der Mobilitäten der Tripelpunkte  
und Korngrenzen auf die Kinetik des  
Kornwachstums

Boris Gschöpf, BSc

Februar 2021

Eidesstattliche Erklärung:

Ich erkläre an Eides statt, dass die vorliegende Arbeit von mir selbständig und nur unter Verwendung der angeführten Literatur erstellt wurde.

Leoben, 21.12.2020

Boris Gschöpf

# 1 Kurzfassung

Die Eigenschaften von polykristallinen Materialien werden durch ihr Gefüge bestimmt. Daher spielen Kornwachstumsprozesse in allen polykristallinen Materialien, das sind z. B. Metalle, Keramiken und intermetallischen Phasen eine große Rolle.

Zur Untersuchung dieser Kornwachstumsprozesse wurde eine Einheitszelle, bestehend aus einem Quadrat, 2 Sechsecken und einem Achteck modelliert und verschiedensten Berechnungen unterzogen. Hierfür wurde in FORTRAN eine "Finite Differenzen"- Routine programmiert, welche ein explizites Integrationschema nutzt. In der vorliegenden Arbeit wurde eine Parameterstudie durchgeführt, in der sowohl die Mobilitäten der Korngrenzen als auch der Tripelpunkte variiert wurden.

Die Ergebnisse dieser Berechnungen liefern Aufschluss darüber, welchen Einfluss nicht nur die Topologie des Gefüges, sondern auch die Mobilitäten selbst auf die Kornwachstumsprozesse haben. Bei all diesen Berechnungen war ersichtlich, dass es, unabhängig von den Mobilitäten der einzelnen Mikrostrukturelemente, immer zum Wachstum des achteckigen Kornes auf Kosten des quadratischen Kornes kam. Die beiden Sechsecke wuchsen bzw. schrumpften unterschiedlich stark, abhängig von ihren Tripelpunkts- und Korngrenzenmobilitäten. Interessanterweise stellte sich heraus, dass höhere Mobilitäten nicht zwangsläufig auch zu größeren Körnern führen. Geringere Mobilitäten können eher mit abnormalen Kornwachstum in Verbindung gebracht werden, solange den dissipativen Prozessen genügend Zeit gegeben wird.

Weiters wurden die einzelnen Berechnungen mit anderen Modellen aus der Literatur verglichen. Die Schlussfolgerungen aus den Modellrechnungen wurden mit dem auftretenden Kornwachstum in einem mikrolegierten Röhrenstahl verglichen. Eine Verbreiterung der Korngrößenverteilung bei kleinen Tripelpunktsmobilitäten und stark gestreckte Körner können sowohl im verwendeten Modell, als auch im Experiment gefunden werden.

## 2 Abstract

The properties of polycrystalline materials are determined by their microstructure. Due to this fact, the kinetics of grain growth play an important role for polycrystalline materials, such as metals, ceramics and intermetallics.

For better understanding of these kinetics, an artificial grain topology, consisting of a quadratic, two six-sided, and one eight-sided grain, is designed. The grain growth process is simulated by means of a "Finite Difference"-routine programmed in FORTRAN using an explicit integration scheme. Parameter studies were carried out, where triple point and grain boundary mobilities were varied. The results of these simulations showed, that not only the topology of the microstructure play an important role, but also mobilities of the microstructural entities. All these simulations showed, that the eight-sided grain always grows at the expense of the quadratic grain, independently of their microstructural mobilities. The two six-sided grains grew or shrank differently, depending on their mobilities. It turned out that higher mobilities in triple junctions and grain boundaries do not always lead to larger grains. Lower mobilities provided that the dissipative process can occur and can be associated to abnormal grain growth.

Furthermore, the several simulations were compared with calculations from other models found in literature. The simulated results were also compared with micrographs for verification. A broadening of the grain size distribution at small triple point mobilities can be found in the used model and in the experimental data.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Kurzfassung</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Abstract</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Einleitung und Aufgabenstellung</b>	<b>5</b>
<b>4</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>6</b>
4.1	Kornwachstum . . . . .	6
4.2	Simulation von Kornwachstumsprozessen . . . . .	9
4.2.1	Monte Carlo Verfahren . . . . .	9
4.2.2	Phasenfeld Modelle . . . . .	12
4.2.3	Level Set Modelle . . . . .	13
4.2.4	Vertex Modelle . . . . .	15
4.2.5	Zelluläre Automaten Modelle . . . . .	17
4.2.6	3D-Simulationen von Kornwachstumsprozessen . . . . .	18
<b>5</b>	<b>Verwendete Methoden und Problembeschreibung</b>	<b>20</b>
5.1	Beschreibung der numerischen Methode . . . . .	20
5.2	Geometrische Anordnung . . . . .	20
<b>6</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>23</b>
6.1	Vergleich von korngrenzenkontrolliertem und tripelpunktkontrolliertem Kornwachstum . . . . .	23
6.2	Strukturelemente mit reduzierten Mobilitäten . . . . .	30
6.2.1	Tripelpunkte mit reduzierten Mobilitäten . . . . .	30
6.2.2	Korngrenzen mit reduzierten Mobilitäten . . . . .	35
6.2.3	Pinnung von Tripelpunkten und Korngrenzen . . . . .	38
<b>7</b>	<b>Diskussion der Ergebnisse</b>	<b>46</b>
7.1	Fazit . . . . .	50
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>51</b>
<b>9</b>	<b>Referenzen</b>	<b>52</b>

### 3 Einleitung und Aufgabenstellung

Forderungen der Industrie nach immer höher werdenden Wirkungsgraden und Lebensdauern führen zu dem Versuch die eingesetzten Materialien immer weiter zu verbessern. Daher werden die Funktionswerkstoffe wie moderne Stähle [1], [2], Superlegierungen [3], intermetallische Phasen [4] und Keramiken [5] ständig weiter entwickelt. Alle diese Entwicklungen laufen auf der mikrostrukturellen Ebene von Werkstoffen ab.

Kenntnisse über die mikrostrukturellen Veränderungen während der Verarbeitung und des Einsatzes sind daher von größter Bedeutung. Feinkörnige Mikrostrukturen mit einer einheitlichen Korngrößenverteilung weisen häufig bessere mechanische Eigenschaften als grobkörnige Gefüge auf. Zur Einstellung und Erhaltung feinkörniger Gefüge ist es daher notwendig, die grundlegenden physikalischen Vorgänge beim Wachsen von Körnern zu untersuchen, um daraus Erkenntnisse für deren Herstellung und Verarbeitung zu gewinnen.

Die Triebkraft für das Wachsen von Körnern in einem Werkstoff ist die Minimierung der Energie der Korngrenzen in einem Material. Um den Ablauf von Kornwachstum in Materialien besser verstehen zu können, bedient sich die Materialforschung mehr und mehr Computersimulationen. Mithilfe solcher Computersimulationen ist es möglich, die Entwicklung einer Mikrostruktur vorherzusagen [6].

In dieser Masterarbeit wurden, angelehnt an die Publikation (Gamsjäger et al. [7]) verschiedenste Berechnungen an einer Einheitszelle, bestehend aus einem quadratischen Korn, zwei sechseckigen Körnern und einem achteckigen Korn durchgeführt, ausgewertet und mit Modellen aus der Literatur verglichen. Die Simulationen wurden zum Teil noch mit reellen Gefügebildungen von Metallen verglichen, um die ablaufenden Kornwachstumsprozesse besser verstehen und beschreiben zu können.

## 4 Theoretische Grundlagen

### 4.1 Kornwachstum

Kornwachstum ist ein Phänomen, welches in polykristallinen Materialien auftritt, damit diese Materialien ihre sogenannte freie Gibbsenergie  $G$  minimieren können. Kornwachstum basiert auf der Bewegung von Korngrenzen. Bewegt sich nun eine Korngrenze zufolge einer Triebkraft  $p$  [ $\text{J}/\text{m}^3$ ], gewinnt jedes einzelne Atom den freien Energiebeitrag  $pb^3$ , wobei  $b^3$  dem Volumen des einzelnen Atoms entspricht, wenn dieses sich vom schrumpfenden in das wachsende Korn bewegt, siehe Abbildung 1, [8].

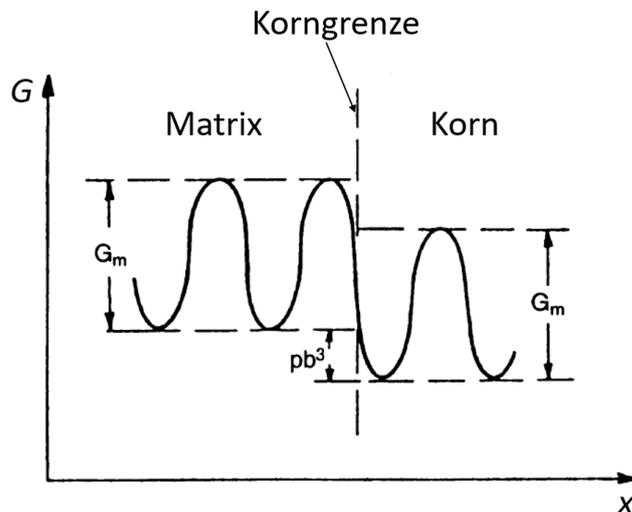


Abbildung 1: Schematische Darstellung der freien Energiekurve  $G$  an einer Korngrenze unter Einwirkung der Triebkraft  $p$ , siehe [8]

Bei einer Korngrenze handelt es sich um eine komplexe, atomistische Struktur. Um deren Aufbau in einem Werkstoff zu bestimmen, welche beispielsweise die mechanischen, chemischen und elektrischen Eigenschaften von Werkstoffen bestimmt, wurden unzählige Untersuchungen durchgeführt. Im Bereich der Nanomaterialien, dort wo man mit Korngrößen kleiner 100nm zu tun hat, werden die Eigenschaften der Korngrenzen immer entscheidender, weil man mit kleinerer Korngröße einen größeren Anteil an Korngrenzen im Einheitsvolumen erhält.

Eine Korngrenze trennt zwei Bereiche der selben Kristallstruktur mit unterschiedlichen Orientierungen [9]. Um Kornwachstumsprozesse theoretisch beschreiben und simulieren zu können, wird meist die von Neumann-Mullins Beziehung verwendet [10], [11]. Diese Beziehung beschreibt, wie die Wachstumsgeschwindigkeit eines Kornes von seiner sogenannten topologischen Klasse abhängt, welche über die Zahl der Ecken "n" definiert wird. Dabei werden 3 Annahmen getroffen:

1. Einheitliche Korngrenzen, d.h. alle Korngrenzen weisen die gleiche Korngrenzenergie und Mobilität auf. Energiedifferenzen aufgrund unterschiedlicher, kristallographischer Orientierungen der Korngrenzen werden nicht berücksichtigt.
2. Die Mobilität der Korngrenze hängt nicht von ihrer Geschwindigkeit ab.
3. Tripelpunkte beeinflussen die Wachstumskinetik nicht. Tripelpunkte weisen in der von Neumann-Mullins Beziehung eine unendliche Mobilität auf.

Die von Neumann-Mullins-Theorie weist jeder topologischen Klasse  $n$  eines Kornes eine spezifische Wachstumsrate  $dS/dt$  zu.

$$\frac{dS}{dt} = M_{GB}\gamma\frac{\pi}{3}(n - 6) \quad (1)$$

$S$  entspricht dabei der Flächenänderung,  $t$  der verstrichenen Zeit,  $M_{GB}$  der Mobilität der Korngrenzen,  $\gamma$  der Korngrenzenenergie und  $n$  der Zahl der Ecken eines Kornes.

Die resultierende Bewegung einer Korngrenze ist immer in Richtung des Krümmungsmittelpunktes. Nach von Neumann-Mullins befindet sich ein regelmäßiges Sechseck, mit einem Eckwinkel von  $120^\circ$  im Gleichgewicht. Besitzt ein Korn nun weniger als 6 Ecken, ist der mittlere Winkel zwischen den Seiten also kleiner als  $120^\circ$ , dann kommt es zur Ausbildung von konvexen Korngrenzen. Da sich eine Korngrenze beim Wachsen immer in Richtung des Krümmungsmittelpunktes bewegt, schrumpfen daher Körner mit weniger als 6 Ecken. Körner mit mehr als 6 Ecken bilden konkave Korngrenzen aus, daher wachsen Körner mit mehr als 6 Ecken, [10], [11].

Die Annahme der einheitlichen Korngrenzen schließt Energieunterschiede aus, die aufgrund unterschiedlicher kristallographischer Orientierungen entstehen. Lazar et al. [12] berücksichtigten in ihren Berechnungen die Form der Körner und konnten somit zeigen, dass für die Simulation von Kornwachstumsprozessen die Form der Körner auch beachtet werden sollte.

Folgt man der von Neumann-Mullins Beziehung ist die Mobilität der Tripelpunkte unendlich hoch. In den meisten Studien wird also angenommen, dass Tripelpunkte keinen Einfluss auf die Bewegung der Korngrenzen haben. Während Kornwachstumsprozessen müssen sich die Tripelpunkte mit ihren zugehörigen Korngrenzen bewegen, um sicher zustellen, dass das thermodynamische Gleichgewicht der Körner erreicht werden kann [13]. Shvindlerman et al. [14] berücksichtigten zum ersten Mal den Einfluss von endlichen Tripelpunktmobilitäten auf die Bewegung von Korngrenzen. Zur Bestimmung des Einflusses von endlichen Tripelpunktmobilitäten, wurde der dimensionslose Parameter  $\Lambda_T$  herangezogen. Dieser beschreibt den Einfluss einer endlichen Tripelpunktmobilität  $M_T$  auf die Entwicklung des Systems und ist durch folgenden Zusammenhang gegeben:

$$\Lambda_T = \frac{M_T \cdot a}{M_{GB}} \quad (2)$$

$M_{GB}$  entspricht dabei der Mobilität der Korngrenzen,  $a$  entspricht der Korngröße. Wenn nun  $\Lambda_T \ll 1$  ist, bestimmt die Mobilität des Tripelpunktes die Korngrenzenbewegung. Ist  $\Lambda_T \gg 1$ , wird die Entwicklung des Systems durch die Korngrenzenmobilität bestimmt. [13]

Immer mehr Studien berücksichtigen nicht nur die Bewegung von Korngrenzen sondern auch zusätzlich die Bewegung von Tripelpunkten, siehe [15] und [16].

Dass die untersuchten Tripelpunktmobilitäten einen Einfluss haben, konnten Huang et al. [17] zeigen, indem sie der Bewegung von Tripelpunkten experimentell eine Schlüsselrolle in der Erholung von stark verformten Metallen wie z.B. Aluminium zuweisen konnten.

## 4.2 Simulation von Kornwachstumsprozessen

Viele physikalische Eigenschaften (Festigkeit, Zähigkeit, elektrischer Widerstand,...) eines metallischen Werkstoffes können mit seinem Gefüge in Verbindung gebracht werden. Der Zusammenhang zwischen bestimmten Gefügemerkmalen und bestimmten Eigenschaften ist daher von großem Interesse. Computersimulationen kommen hierbei zwei Aufgaben zu. Experimentell wird eine Eigenschaft gefunden, welche man anschließend oft versucht durch Computersimulationen zu erklären. Oder aber eine Computersimulation liefert ein bestimmtes Ergebnis, welches man anschließend versucht experimentell zu bestätigen. Da es sich bei Kornwachstumsprozessen um Prozesse mit sehr vielen Einflussfaktoren handelt, gibt es auch sehr viele unterschiedliche Ansätze um dieses am Besten nachzuahmen. Welchen Ansatz man verfolgt, hängt stark von der Problemstellung ab.

Um die Kinetik von metallischen Werkstoffen in der Größenordnung von Mikrometer zu Nanometer zu simulieren werden Monte Carlo Methoden [18] und Phasenfeld Modelle [19] verwendet. Level Set Methoden [20] und Vertex Modelle [21] finden in Größenordnungen von Mikrometer zu Millimeter Anwendung. Um die gesamte Mikrostruktur eines Werkstoffes nachstellen zu können, werden Zelluläre Automaten Simulationen [22] verwendet.

### 4.2.1 Monte Carlo Verfahren

Beim Monte Carlo Verfahren werden die einzelnen Atome der Mikrostruktur einem diskreten zwei- oder dreidimensionalen Gitter zugeordnet. Abhängig davon ob man zwei- oder dreidimensionale Simulationsrechnungen durchführt, hat ein diskreter Punkt entweder vier Nachbarn (2D-Fall) oder sechs Nachbarn (3D-Fall). Das Gitter wird initialisiert, indem jedem Gitterplatz eine zufällige ganze Zahl  $S_i$  zwischen 1 und  $Q$  zugeordnet wird, wobei  $S_i$  der Anzahl an kristallographischen Orientierungen eines Gitterplatzes entspricht.  $Q$  entspricht der Gesamtanzahl unterschiedlicher Orientierungen im gesamten simulierten System. Allen Gitterplätzen eines Kornes wird dieselbe Orientierungszahl  $S_i$  zugeordnet. Korngrenzen sind bei Monte Carlo Simulationen Grenzflächen zwischen zwei benachbarten Körnern, welche unterschiedliche Orientierungsnummern aufweisen. Die Berechnung erfolgt in folgender Reihenfolge [23]:

1. Zufällige Auswahl eines Gitterplatzes.
2. Zuweisung einer neuen Orientierungsnummer  $S_i$ , welche zufällig aus den verschiedenen möglichen  $Q - 1$  Orientierungsnummern des Gitterplatzes erfolgt.
3. Berechnung der Energieänderung  $\Delta E$  des Systems aufgrund der Umorientierung des Gitterplatzes. Die Energie der Korngrenzen wird meist über die Gitterplatzenergie ausgedrückt:

$$E = J \sum_{k=1}^N \sum_{j \in k} (1 - \delta_{S_i S_j}) \quad (3)$$

wobei  $J$  der Korngrenzenenergie entspricht,  $\delta_{S_i S_j}$  ist das sogenannte Kronecker Delta. Hier  $S_i$  steht für den ausgewählten Gitterplatz,  $S_j$  für einen benachbarten Gitterplatz.  $N$  entspricht der Gesamtanzahl an benachbarten Atomen.

4. Wenn  $\Delta E \leq 0$  kommt es zu einer Minimierung der Gesamtenergie des Systems; die neue Orientierung des berechneten Gitterplatzes wird beibehalten. Wenn  $\Delta E \geq 0$  wird per Zufallsgenerator eine Zahl zwischen eins und null generiert. Diese Zahl wird dann mit der Boltzmann Wahrscheinlichkeit  $p = e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$  verglichen, wobei  $k$  der Boltzmann Konstante und  $T$  der Temperatur des Systems entspricht, verglichen. Wenn die zufällig generierte Zahl kleiner als  $p$  ist bleibt die Originalorientierung des Gitterplatzes erhalten, ist die zufällig generierte Zahl aber größer als  $p$ , wird die Umorientierung durchgeführt.
5. Dieser Vorgang wird  $N$  mal wiederholt, wobei  $N$  der Gesamtanzahl der Gitterplätze in einem Gitter entspricht.

Anwendung findet die Monte Carlo Simulationsmethode in der Simulierung von Oberflächensegregationen, in der Abscheidung dünner Schichten, sowie in der Simulation von kinetischen Materialvorgängen [6], [18]. Die Vorteile der Monte Carlo Simulationsmethoden liegen in deren großen Flexibilität, ihrer numerischen Einfachheit und der relativ geringen Berechnungszeiten. Das Fehlen von intrinsischen mikrostrukturellen Skalierungen kann als Nachteil aufgeführt werden [24].

Mithilfe von Monte Carlo Simulationen untersuchte Zöllner [25] den Einfluss der Topologie auf das Wachsen einzelner Körner. Die Simulationen zeigen, dass nicht die Form der Körner, sondern vielmehr die Umgebung in welcher die Körner wachsen einen Einfluss auf die Wachstumskinetik hat. Solange die Körner in einer sich nicht verändernden Umgebung wachsen, folgen sie dem linearen von Neumann-Mullins Gesetz. Kommt es durch die Kornwachstumsprozesse auch zu stärkeren Änderungen der benachbarten Körner, tritt nicht lineares Wachstum von Körnern auf. Die Monte Carlo Simulationen von polykristallinen Werkstoffen zeigen, dass das von Neumann-Mullins Gesetz nur statistisch auf einzelne Körner zutrifft. Manche Körner wachsen stärker oder schwächer als nach dem von Neumann-Mullins Gesetz, [25].

Das die Umgebung der Körner einen großen Einfluss auf die Kinetik hat, wird durch Zöllner et al. [26] gestützt. Mithilfe von Monte Carlo Simulationen konnten sie zeigen, dass je stärker die Missorientierung eines Kornes zu seiner Umgebung ist, umso stärker fällt das Wachsen bzw. Schrumpfen des entsprechenden Kornes aus. Im Falle eines fünfeckigen Kornes kam es zu langsamerem Schrumpfen je kleiner der Missorientierungswinkel des Kornes war. Ein sieben-eckiges Korn wuchs schneller, je größer der entsprechende Missorientierungswinkel zu seiner Umgebung war [26].

In einer weiteren Arbeit untersuchten Zöllner et al. [27], wie das Wachstum von einem einzelnen, großen Korn in einer polykristallinen Matrix abläuft. Ihre Simulationen zeigten, dass ein großes Korn, welches über viele Nachbarkörner verfügt, nicht sehr stark auf Kosten der anderen Körner wächst. Vielmehr kommt es durch den Verlust von Nachbarkörnern, gemäß Gleichung (1), zu einer Verlangsamung der Wachstumsrate. Das große Korn wird also beim Wachstum eher von den umgebenden Körnern eingeholt. Interessanterweise konnte in der selben Arbeit auch gezeigt werden, dass mehrere große Körner in einer polykristallinen Mikrostruktur ihren Größenvorteil während des Wachstums behalten. Diese Ergebnisse stützen wiederum die Behauptung, dass sind nicht nur die Korngrenzenenergie  $\gamma$ , sowie die Tripelpunkts- und Korngrenzenmobilitäten  $m_T, m_{GB}$  der jeweiligen Körner ausschlaggebend sind, sondern dass auch die Umgebung der wachsenden Körner einen Einfluss auf die Kinetik hat.

### 4.2.2 Phasensfeld Modelle

In Phasensfeld Modellen wird die gesamte Mikrostruktur, bestehend aus unterschiedlichen Konzentrationsbereichen, Strukturbereichen und Grenzflächen, als Ganzes mithilfe einer bestimmten Anzahl an Feldvariablen, beschrieben. Diese sogenannten Feldvariablen sind stetig entlang der Grenzflächen. Feldvariablen können zwei unterschiedliche Größen sein. Erhaltungsgrößen und Größen, die nicht erhalten bleiben. Phasensfeld Modelle beschreiben die Entwicklung der Mikrostruktur ohne explizite Beschreibung der Grenzflächen. Als Eingangsgrößen werden in Phasensfeld Modellen nur thermodynamische Informationen benötigt. Anwendung findet die Phasensfeld Modell Methode in der Simulation von Kornwachstum, Phasenumwandlungen im festen Zustand, in der zeitlichen Entwicklung von Versetzungen, uvm. [28].

In den meisten Simulationsmethoden werden die Korngrenzen oder Grenzflächen als sehr scharf angenommen, ihre Dicke geht dabei gegen 0. Im diffusen Grenzflächen Phasensfeld Modell werden die Grenzflächen als diffusive Grenzflächen mit einer endlichen Dicke angenommen. Hierzu wird eine zufällige polykristalline Mikrostruktur durch eine bestimmte Anzahl an kontinuierlichen Feldvariablen  $(\eta_1(r), \eta_2(r), \dots, \eta_p(r))$  beschrieben. Die Anzahl der möglichen Orientierungen wird durch  $p$  beschrieben,  $\eta_i (i = 1, \dots, p)$ , die sogenannten Orientierungsfeldvariablen. Die Gesamtenergie des Systems ergibt sich zu:

$$F = \int \left[ f_o(\eta_1(r), \eta_2(r), \dots, \eta_p(r)) + \sum_{i=1}^p \frac{\kappa_i}{2} (\nabla \eta_i(r))^2 \right] d^3r \quad (4)$$

Hier ist  $f_o$  die lokale freie Energiedichte, als Funktion der Feldvariablen  $\eta_i$ , und der Gradienten der Energiekoeffizienten  $\kappa_i$ . Die Energie der Korngrenzen ergibt sich durch den Term  $(\nabla \eta_i)^2$ . Die räumliche und zeitliche Entwicklung der Orientierungsfeldvariablen wird durch die Ginzburg-Landau Gleichung beschrieben:

$$\frac{d\eta_i(r, t)}{dt} = -L_i \frac{\delta F}{\delta \eta_i(r, t)} = -L_i \left( \frac{\partial f_o}{\partial \eta_i} - \kappa_i \nabla^2 \eta_i \right) \quad (5)$$

Hierbei wird die Mobilität der einzelnen Korngrenzen durch  $L$  berücksichtigt,  $t$  entspricht der Zeit und  $F$  der freie Energie, welche durch Gleichung (4) beschrieben wird [29].

Mithilfe einer Phasenfeld Simulation konnten auch Liu et al. [30] zeigen, dass die Orientierung eines Kornes zu seiner Umgebung, eine sehr starke Rolle für das Wachstum eines Kornes spielt. Der stärkste Zuwachs wurde für einen Missorientierungswinkel eines Kornes von  $40 - 44^\circ$  gefunden werden. Liegt der Missorientierungswinkel aber bei  $20^\circ$ ,  $30^\circ$  oder  $50^\circ$  so unterscheidet sich das Wachstum einzelner Körner nicht sehr stark von jenem Fall, indem kein Missorientierungswinkel zwischen den einzelnen Körnern vorhanden ist. Sollte es zusätzlich zu ungünstigen Missorientierungswinkeln auch noch starke Unterschiede in den Tripelpunkts- und Korngrenzenmobilitäten geben, kann dies zu abnormalen Kornwachstum führen, [30].

Jamshidian et al. [31] untersuchten mithilfe einer Phasenfeld Simulation den Effekt eines verzernten Gefüges auf das Kornwachstum. Mithilfe ihrer Simulation konnten sie zeigen, dass ein zu Beginn verzerntes Gefüge im Zuge seines Wachstums einen ähnlichen Zustand erreicht, wie ein zu Beginn unverzerntes Gefüge. Wichtig zu erwähnen hierbei ist, dass die längsgestreckten Körner so wachsen das keine Streckung mehr in eine Richtung beobachtbar ist. Die Simulationen zeigen, dass eine höhere Ausgangstreckung der Körner auch zu einer schnelleren Wachstumsrate zu Beginn des Kornwachstums führt. Je stärker die Körner also verformt sind, umso schneller versuchen sie, bei Einsetzen von Kornwachstum, in ein homogenes gleichmäßiges Gefüge zu wachsen.

### 4.2.3 Level Set Modelle

Mithilfe von Level Set Simulationen wird die Bewegung einer Linie im 2D-Fall oder die Bewegung einer Fläche im 3D-Fall simuliert. Zwei Beispiele für die Anwendung von Level Set Modellen sind die Ausbreitung einer Flammenfront bei einer Verbrennung und die Simulation von Kristallwachstum [32].

Man betrachtet eine  $(N - 1)$ -dimensionale geschlossene Hyperoberfläche  $\Gamma(t = 0)$  welche sich unter einer Geschwindigkeit  $v$  entlang ihrer Normalrichtung bewegt.  $v$  ist hierbei eine Funktion, die von mehreren Variablen abhängen kann. Die Idee der Level Set Methode besteht nun darin, diese sich bewegende Hyperoberfläche mithilfe einer höherdimensionalen Funktion  $\phi$  einzubetten.  $\phi$  sei folgendermaßen definiert:

$$\phi(x, t = 0) = \pm d \tag{6}$$

wobei  $d$  der Abstand von  $x$  zu  $\Gamma(t = 0)$  ist. Positive Vorzeichen erhält man, wenn  $x$  außerhalb der startenden Hyperfläche  $\Gamma(t = 0)$  liegt, ein negatives Vorzeichen, wenn  $x$  innerhalb liegt. Es wird nun versucht eine Gleichung für  $\phi(x, t)$  zu entwickeln, welche die eingeschlossene Bewegung von  $\Gamma(t)$  enthält und dabei  $\phi$  minimiert. Um dies zu erreichen definiert man  $x(t)$  als den Weg, den die ausbreitende Fläche zurücklegt. Somit ist  $x(t = 0)$  ein Punkt auf der startenden Hyperoberfläche  $\Gamma(t = 0)$  und  $x_t \cdot n = v(x(t))$ , wobei der Vektor  $x_t$  normal auf die Hyperoberfläche im Punkt  $x(t)$  steht. Mithilfe der Level Set Methode wird nun festgelegt, dass die sich entwickelnde Funktion  $\phi$  mit der sich ausbreitenden Hyperoberfläche übereinstimmt:

$$\phi(x(t), t) = 0 \quad (7)$$

Wenn man Gleichung 7 nach der Zeit ableitet erhält man:

$$\phi_t + \nabla\phi(x(t), t) \cdot x'(t) = 0 \quad (8)$$

Wenn  $v$  dabei der Geschwindigkeit der sich ausbreitenden Fläche normal auf die Oberfläche entspricht, dann erhält man über den Zusammenhang  $x'(t) \cdot n = v$ , wobei  $n = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}$  ist, folgende Entwicklungsgleichung für  $\phi$ :

$$\phi_t + v |\nabla\phi| = 0 \quad (9)$$

Gleichung (9) entspricht der Level Set Gleichung, gefunden von Osher und Sethian [33].

Mießen et al. [34] nutzen Level Set Modelle um das Wachsen von Körnern aufgrund ihrer topologischen Klasse zu untersuchen. Auch Mießen et al. fanden wie von Neumann-Mullins gemäß Gleichung (1) heraus, dass Körner mit mehr als 6 Nachbarkörner wachsen und Körner mit weniger als 6 Nachbarn schrumpfen. Je geringer die Zahl der Nachbarn, umso stärker schrumpft ein Korn. Dasselbe gilt auch umgekehrt. Je mehr Nachbarn ein Korn hat, umso stärker wächst es. Zusätzlich untersuchen Sie noch den Effekt von reduzierten Tripelpunktmobilitäten auf das Wachsen eines viereckigen Kornes. Umso kleiner die Tripelpunktmobilität des viereckigen Kornes, im Vergleich zu den benachbarten Körner ist, desto langsamer ist auch die Flächenabnahme des viereckigen Kornes.

#### 4.2.4 Vertex Modelle

In Vertex Modellen wird die Mikrostruktur des Werkstoffes durch Eckpunkte abgebildet. Diese Eckpunkte sind durch Korngrenzen miteinander verbunden. Entscheidend für die zeitliche Entwicklung der Mikrostruktur sind hier die Positionen  $r$  der Eckpunkte und deren Geschwindigkeiten  $v$ . In 2D Modellen hat der Knotenpunkt  $i$  die Position  $r_i = (x_{ij}, y_{ij})$  und die Geschwindigkeit  $v_i$ . Die Korngrenze, welche zwischen den Körnern A und B liegt, wird durch die Knotenpunkte  $i$  und  $j$  und somit durch den Vektor  $r_{ij} = r_i - r_j$  charakterisiert. Zudem wird eine Korngrenze noch durch den Normalenvektor  $n_{ij}$ , welcher sich zu folgendem Ausdruck ergibt

$$n_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} \begin{pmatrix} -y_{ij} \\ x_{ij} \end{pmatrix} \quad (10)$$

charakterisiert, siehe Abbildung 2.

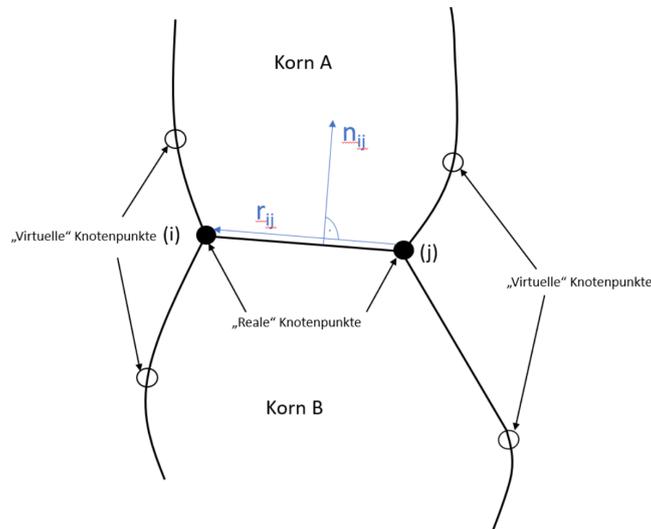


Abbildung 2: Schematische Darstellung von Korngrenzen mithilfe von Vertex Modellen

In Abbildung 2 ist der Ausschnitt eines Korngrenzennetzwerkes zu sehen. Der Unterschied zwischen realen Knotenpunkten und virtuellen Knotenpunkten ist, dass reale Knotenpunkte den tatsächlichen Knotenpunkten eines Korngrenzennetzwerkes entsprechen. Die virtuellen Knotenpunkte werden benötigt,

um die Krümmung der einzelnen Korngrenzensegmente zu erzeugen. Um mithilfe von Vertex Modellen reale Vorgänge in Werkstoffen simulieren zu können, müssen den einzelnen Korngrenzen  $r_{ij}$  noch bestimmte Eigenschaften wie z. B.: Korngrenzenergien  $\gamma_{ij}$  und Mobilitäten  $m_{ij}$  zugewiesen werden.

Das Kornwachstum wird getrieben durch die Minimierung der Gesamtenergie des Systems. Die Gesamtenergie ergibt sich zu

$$E = E_{\text{GB}} + E_{\text{SE}} \quad (11)$$

wobei  $E_{\text{GB}}$  der gesamten Korngrenzenergie und  $E_{\text{SE}}$  der gespeicherten Energie in den Körnern entspricht. Unter Annahme einer konstanten Dicke der Korngrenze  $h$  kann die Energie der Korngrenzen folgendermaßen berechnet werden:

$$E_{\text{GB}} = \frac{1}{2} h \sum_{i=1}^N \sum_j^{(i)} \gamma_{ij} \| r_{ij} \| \quad (12)$$

Hierbei entspricht  $N$  der Gesamtanzahl der Knotenpunkte und die Summe von  $j$  bis  $(i)$  berücksichtigt alle Knotenpunkte  $j$ , die mit dem zu berechnenden Knotenpunkt  $i$  verbunden sind.

Unter der Annahme einer konstanten Energie innerhalb jedes Kornes, ergibt sich die gesamt gespeicherte Energie zu:

$$E_{\text{SE}} = h \sum_G E_G A_G \quad (13)$$

$E_G$  entspricht der gespeicherten Energiedichte innerhalb eines Kornes und  $A_G$  der Fläche des Kornes.

Die treibende Kraft  $f_i$  hinter diesem Prozess ergibt sich zu:

$$f_i = -\frac{1}{h} \frac{\partial \nu}{\partial r_i} = -\frac{1}{2} \sum_j^{(i)} \gamma_{ij} \frac{r_{ij}}{\| r_{ij} \|} - \frac{1}{2} \sum_j^{(i)} \begin{pmatrix} y_j - y_i \\ x_i - x_j \end{pmatrix} \Delta E_{ij} \quad (14)$$

wobei  $\Delta E_{ij}$  der Differenz der gespeicherten Energie zwischen den beiden benachbarten Körnern entspricht [35].

In der Arbeit [36] untersuchte Barrales Mora, mithilfe eines Vertex Modells den Einfluss von verschiedenen hohen Tripelpunktmobilitäten auf die zeitliche Entwicklung einer eigenen Mikrostruktur. Geringe Tripelpunktmobilitäten

führen bei den präsentierten Berechnungen zu einer nicht linearen Zunahme der Fläche eines Kornes. Durch größer werdende Tripelpunktmobilitäten nähert sich das Kornwachstum einem linearen Verhalten an. Die Simulationen zeigen aber, dass bei allen Tripelpunktmobilitäten ein lineares Wachstum erreicht wird. Durch geringere Tripelpunktmobilitäten dauert es aber länger bis dieser lineare Zustand erreicht werden kann. Eine Erklärung hierfür ist, dass geringere Tripelpunktmobilitäten die Korngrenze in ihrer Bewegung ausbremsen. Zudem ändern verschieden hohe Tripelpunktmobilitäten auch die Form der sich entwickelnden Korngrenzen, da unterschiedliche Tripelpunktmobilitäten auch zu verschiedenen hohen Gleichgewichtswinkeln führen, [36]. Dieses Ergebnis wurde schon durch den experimentellen Nachweis durch Untersuchungen an Zinkkristallen bestätigt [13].

#### 4.2.5 Zelluläre Automaten Modelle

Zelluläre Automaten sind mathematische Beschreibungen von physikalischen Systemen. Hierfür wird der Raum in eine große Anzahl von sogenannten Zellen unterteilt. Zusätzlich kommt es bei Zellulären Automaten Modellen noch zu einer Diskretisierung der Zeit. Der Wert oder Zustand jeder einzelnen diskreten Zelle variiert mit der Zeit. Die zeitliche Entwicklung eines solchen physikalischen Systems wird nun von der zeitlichen Entwicklung der individuellen Zellen bestimmt. Der Zustand einer Zelle zum Zeitpunkt  $t + dt$  wird nun ausschließlich durch die Zustände der benachbarten Zellen zur Zeit  $t$  bestimmt. Durch Anwendung der von Neumann Definition von benachbarten Zellen gilt für den Übergangsprozess folgender Zusammenhang:

$$x(i, j, t + dt) = F \cdot \left[ x(i, j, t), x(i, j + 1, t), x(i + 1, j, t), x(i - 1, j, t), x(i, j - 1, t) \right] \quad (15)$$

wobei  $x(i, j, t)$  der Zustand der  $ij$ -ten Zelle zur Zeit  $t$  ist. Die Funktion  $F$  entspricht dabei der Übergangsbedingung und kann, abhängig von der Fragestellung, verschieden definiert werden.

Das Ergebnis einer solchen Zellulären Automaten Simulation hängt hauptsächlich von der Übergangsbedingung ab [37]. Ein sehr gutes Beispiel für die

Komplexität und Vielfalt für Zelluläre Automaten Modelle zeigt das Spiel des Lebens in [38].

So wie auch Jamshidian, [31] konnte auch Raghavan, [39] zeigen, das die Körner versuchen so zu wachsen, das keine Streckung mehr in eine Richtung vorhanden ist. Raghavan et al., [39] simulierten auch das Kornwachstum in einem Gefüge in der ein Korngrößengradient vorhanden ist. Sie nahmen einen Gradienten an, der eine ursprüngliche Kornstruktur erzeugte, indem die Körner an der Oberseite um einen bestimmten Faktor größer waren als auf der Unterseite. Die Kornwachstumsimulationen dieser Mikrostruktur zeigen auch, das die Körner so wachsen, das dieser Gradient mit fortlaufender Zeit immer kleiner wird. Je größer die Kornstreckung bzw. der Korngrößengradient war, umso schneller wuchs das Ausgangsgefüge zu Beginn. Begründet kann dies durch die Tatsache werden, das zu Beginn viele kleine Körner im Gefüge vorhanden sind und zudem viele dieser Körner sehr geringe Mobilitäten aufweisen, da ihr Missorientierungswinkel hoch ist. Raghavan et al., [39] verwendeten für ihre Simulationen ein zelluläres Automaten Modell.

Mithilfe einer Mikrostruktursimulation, basierend auf einem zellulären Automaten Modell, untersuchten He et al. [40] wie bestimmte Körner schrumpfen, bevor sie vollständig verschwinden. Bereits 1953 stellte Smith [41] die Behauptung auf, das zuerst immer die kürzeste Korngrenze eines Kornes verschwindet. Zudem stellte er die Behauptung auf, dass Körner, mit einer topologischen Klasse zwischen drei und sechs, immer zu einem Korn der topologischen Klasse 3 schrumpfen bevor diese verschwinden. He et al. [40] fanden in ihren Simulationen heraus, das dies nicht immer der Fall ist. Viereckige und fünfeckige Körner können auch ohne, dass sie zu einem dreieckigen Korn werden, ihre Form während des Schrumpfen behalten, bevor sie verschwinden. Dieser direkte Schrumpfvorgang wurde auch experimentell beobachtet, siehe [42].

#### **4.2.6 3D-Simulationen von Kornwachstumsprozessen**

Mikrostrukturen sind aus Körnern aufgebaut, welche in alle 3 Raumrichtungen ausgedehnt sind. Am besten zugänglich ist die Mikrostruktur eines Werkstoffes aber über zweidimensionale Gefügebildungen. Daher werden die Ergebnisse von verschiedensten Mikrostruktursimulationen meist mit zweidimensionalen

Gefügebildungen verglichen. Es besteht also großes Interesse die bereits entwickelten Mikrostruktursimulationen für zweidimensionales Kornwachstum, auch auf dreidimensionales Kornwachstum, anzuwenden. Um Kornwachstum in 3D Fällen zu simulieren, werden hauptsächlich voxelbasierte Korndarstellungen benutzt. Am häufigsten verwendet man hierbei die Monte Carlo Potts Methode, Zelluläre Automaten Methoden, Level Set Methoden, sowie Phasenfeldmodelle. Mit diesen Methoden kann man die Oberflächen und Volumeneigenschaften des jeweiligen Werkstoffes kombinieren [43].

Ivasishin et al. [44] entwickelten ein 3D Monte Carlo Modell, mit welchem die zeitliche Entwicklung eines Gefüges und einer Textur, sowie deren gegenseitige Wechselwirkung simuliert werden können. Mithilfe ihres Modells können beliebige Variationen von Ausgangsgefüge, Texturgrad und verschiedenen hohen Korngrenzenmobilitäten simuliert werden. Yang et al. [45] verwendeten ein 3D Monte Carlo Modell um die Entwicklung der Mikrostruktur, in der Wärmeeinflusszone, von geschweißtem Titan zu simulieren. Ihre Simulationsdaten wurden durch hohe Übereinstimmungen anhand von Untersuchungen an geschweißtem Titan bestätigt.

Bernacki et al. [46] verwendeten zur Simulation von Rekristallisationsvorgängen in polykristallinen Materialien eine Finite Elemente Simulation, basierend auf einem Level Set Rahmen. Hiefür wurden von ihnen verschiedene Fälle, wie z.B. Keimbildung oder mechanische Belastungen, simuliert.

Mithilfe eines Phasenfeld Modells simulierten Krill III et al. [47] die Vergrößerung von Körnern für den 3-dimensionalen Fall in einem polykristallinen Material.

Janssens [48] verwendete ein Zelluläres Automaten Modell, um die zeitliche Entwicklung der Mikrostruktur während Kornwachstum- und Rekristallisationsvorgängen zu simulieren.

## 5 Verwendete Methoden und Problembeschreibung

Um den Einfluss der Mobilitäten der Tripelpunkte und Korngrenzen auf die Kornwachstumskinetik zu untersuchen, wurden Simulationsrechnungen durchgeführt.

### 5.1 Beschreibung der numerischen Methode

Die Kornwachstumskinetik wird mithilfe einer Finiten Differenzen Methode, welche in einer FORTRAN-Routine programmiert wurde, simuliert. Es wurde ein explizites Integrationsverfahren verwendet. Genaue Details zu den Entwicklungsgleichungen und den Kontaktbedingungen können aus [51] entnommen werden.

Die Korngrenzen werden zu Beginn durch 100 Knotenpunkte diskretisiert. Im Zuge der Simulation kommt es zu Dehnungen und Stauchungen der jeweiligen Korngrenzen. Mithilfe der Simulation werden überall dort, wo sich die benachbarten Knotenpunkte zu weit voneinander entfernen neue Knotenpunkte erzeugt. Kommen sich mehrere Knoten zu nahe werden in diesem Bereich Knotenpunkte gelöscht. Mithilfe des Modells ist es möglich, den Korngrenzen und Tripelpunkten verschieden große Mobilitäten zuzuordnen. So kann die zeitliche Entwicklung der Mikrostruktur verfolgt werden, und es ist möglich die dominierenden Mechanismen aufzuzeigen.

### 5.2 Geometrische Anordnung

Die Simulationsrechnungen wurden anhand der Einheitszelle, siehe Abbildung 3, durchgeführt. Die Einheitszelle besteht aus einem quadratischen Korn I, zwei sechseckigen Körnern II, III und einem achteckigen Korn IV. Diese vier Körner sind so angeordnet, dass sich die, in Abbildung 3 dargestellte Einheitszelle ergibt. Die Ebene wird lückenlos durch Aneinanderreihung solcher Einheitszellen gefüllt.

Die einzelnen Tripelpunkte sind mit  $T_1$  bis  $T_{16}$  nummeriert, die Korngrenzen mit den arabischen Ziffern von 1 bis 19. Der Ursprung des Koordinatensystems liegt im Tripelpunkt  $T_1$ , wobei die  $x$ -Achse in waagrechte Richtung und die  $y$ -Achse

in senkrechte Richtung verläuft. Aufgrund der verwendeten Translationsinvarianz folgt, dass einige Tripelpunkte und Korngrenzen gleich sind. So entspricht der Tripelpunkt  $T_1$  dem Tripelpunkt  $T_9$ , durch eine Verschiebung um den rot eingezeichneten Vektor  $\underline{u}$ . Die Tripelpunkte  $T_{12}, T_{13}$  und  $T_{14}$  werden ebenfalls durch eine Verschiebung um den Vektor  $\underline{u}$  durch die Tripelpunkte  $T_4, T_5$  und  $T_6$  erzeugt. Die Tripelpunkte  $T_{10}$  und  $T_{11}$  werden durch die Verschiebung um den blau eingezeichneten Vektor  $\underline{v}$ , ausgehend von den Tripelpunkten  $T_3$  und  $T_4$  erzeugt. Durch Verschiebung der Tripelpunkte  $T_6$  und  $T_7$  um den Vektor  $\underline{u} - \underline{v}$  werden die Tripelpunkte  $T_{15}$  und  $T_{16}$  generiert. In der verwendeten Einheitszelle erhält man in Summe 19 Korngrenzen, wobei aber durch die oben beschriebenen Verschiebungen nur 12 Korngrenzen unabhängig voneinander sind. So entspricht Korngrenze 3 der Korngrenze 13, Korngrenze 4 entspricht der Korngrenze 14, Korngrenze 5 ist äquivalent zu Korngrenze 15, usw.

Durch die oben beschriebenen Äquivalenzen lässt sich folgern, dass somit ganze Strukturelemente gleich sind, so entspricht das Strukturelement bestehend aus  $T_3, T_4$  und Korngrenze 3 dem Strukturelement, welches aus  $T_{10}, T_{11}$  und Korngrenze 13 besteht. Die Gesamtfläche der Einheitszelle ändert sich nicht, die Anteile der einzelnen Körner ändern sich mit der Zeit. Die Simulationen werden abgebrochen, wenn das quadratische Korn verschwindet, oder ein Gleichgewichtszustand erreicht wird. Topologische Transformationen werden nicht berücksichtigt.

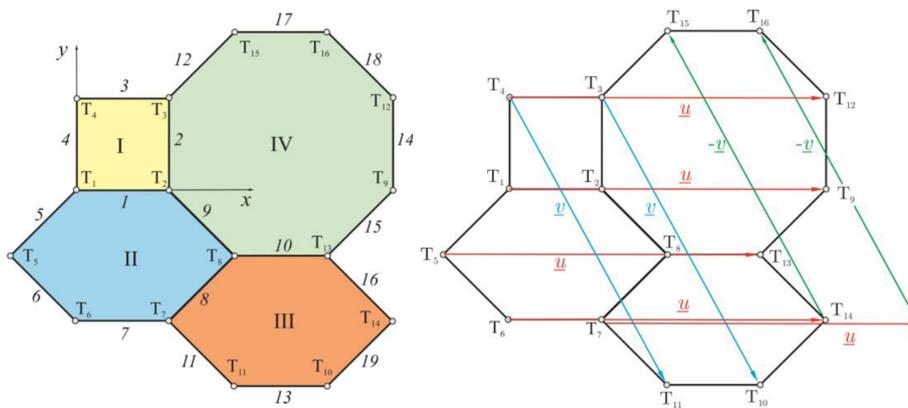


Abbildung 3: Anordnung der Einheitszelle, sowie geometrische Zusammenhänge in der Einheitszelle

## 6 Ergebnisse

Mithilfe der unterschiedlichen Simulationsrechnungen wurde die Kinetik der oben beschriebenen Einheitszelle untersucht. Dies wurde durch Zuweisung von unterschiedlichen spezifischen Korngrenzenenergien  $\gamma_{\text{GB},j}$ , sowie unterschiedlichen Mobilitäten zu den jeweiligen Korngrenzen  $M_{\text{GB},j}$  und durch Zuweisung von unterschiedlichen Mobilitäten zu den jeweiligen Tripelpunkten  $M_{\text{T},i}$  ermöglicht. Durch dieses Modell ist es möglich, Variationen in den Korngrenzen- und Tripelpunktmobilitäten zu simulieren, welche beispielsweise durch Niobkarbide in Stählen, siehe [52] und [53], auftreten.

Als Referenzlänge wurde immer die Ausgangslänge des quadratischen Korns herangezogen. Jene Zeit, die zum Verschwinden des quadratischen Korns verging, entspricht hier der Referenzzeit. Die spezifische Energie der Korngrenze wurde bei allen Simulationen auf den Wert  $\gamma_{\text{GB},j} = 1$  gesetzt, aber das Produkt aus  $M_{\text{GB},j} \cdot \gamma_{\text{GB},j}$  ist unterschiedlich für die einzelnen Korngrenzen aufgrund der unterschiedlichen Korngrenzenmobilitäten  $M_{\text{GB},j}$ . Durch die Normalisierung der Zeit und Länge wurden die unterschiedlichen Korngrenzenmobilitäten  $M_{\text{GB},j}$ , sowie die spezifischen Korngrenzenenergie  $\gamma_{\text{GB},j}$  als dimensionslose Größen angenommen. Bei den normalisierten Tripelpunktmobilitäten  $M_{\text{T},i}$  handelt es sich um Vielfache des Verhältnisses von ursprünglicher Korngrenzenmobilität zu Ausgangslänge des quadratischen Korn I:

$$M_{\text{T}} = \frac{M_{\text{GB}}}{a} \quad (16)$$

### 6.1 Vergleich von korngrenzenkontrolliertem und tripelpunkt-kontrolliertem Kornwachstum

Bei diesen Berechnungen wurden die Mobilitäten aller Tripelpunkte  $M_{\text{T},i}$ , innerhalb einer Simulation gleichgesetzt. In den unterschiedlichen Simulationen wurden verschiedene Werte für die Tripelpunktmobilitäten  $M_{\text{T},i}$  gewählt. Die Mobilitäten der Korngrenzen wurden in allen Simulationen auf den Wert  $M_{\text{GB}} = 1$  gesetzt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4 zu sehen.

Die zeitliche Entwicklung wird durch unterschiedliche normalisierte Zeiten  $\bar{t}$  dargestellt, wobei  $\bar{t} = \frac{t}{t_f}$  entspricht.  $t_f$  ist hierbei die benötigte Zeit, der Simulationsrechnung einen Zeitschritt bevor eine Korngrenze des quadratischen Kornes

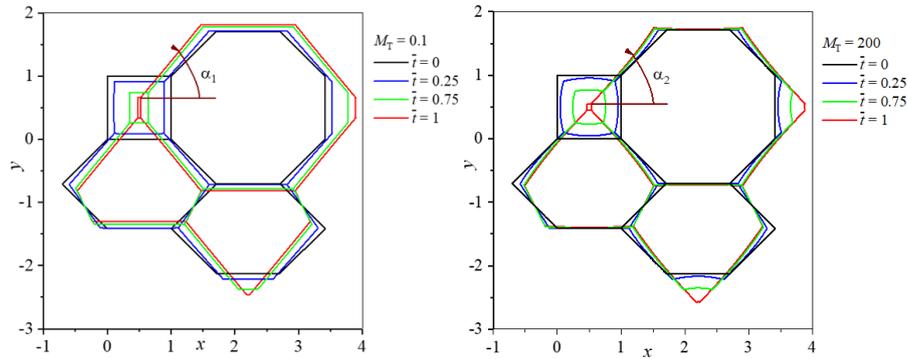


Abbildung 4: Zeitliche Entwicklung der Einheitszelle für verschieden hohe Tripelpunktmobilitäten

verschwindet. Man erwartet, dass für sehr geringe Tripelpunktmobilitäten das Kornwachstum durch die sehr geringen Mobilitäten der Tripelpunkte bestimmt wird. Dieser Fall ist in Abbildung 4 auf der linken Seite zu sehen.

Hier bleiben die Korngrenzen geradlinig. Auf der rechten Seite in Abbildung 4 wurden für die jeweiligen Tripelpunktmobilitäten hohe Werte,  $M_T = 200$ , gewählt. Die geradlinigen Korngrenzen krümmen sich hier viel stärker. Einen weiteren Unterschied zwischen hohen und niedrigen Tripelpunktmobilitäten findet man in der zeitlichen Entwicklung von Korn I. Im Fall hoher Tripelpunktmobilitäten krümmen sich zwar die Korngrenzen des quadratischen Kornes stark, aber das Korn behält seine ursprüngliche Form. Im Gegensatz dazu führen geringe Tripelpunktmobilitäten zu geradlinigen Korngrenzen von Korn I, aber hier kommt es zu einer starken Streckung. Zudem entwickeln sich verschieden große Winkel zwischen Korn I und Korn IV in den beiden Fällen.

Der Einfluss von begrenzten Tripelpunktmobilitäten auf die Gleichgewichtswinkel zwischen Körnern wurde theoretisch erstmals von Gottstein et al. [54] untersucht. Barrales Mora [36] fand heraus, dass eine verringerte Tripelpunktmobilität zu einem größeren Gleichgewichtswinkel zwischen den entsprechenden Körnern führt. Dazu verwendete er eine spezielle Anordnung von Körnern, in der 4 Körner auf deren Kinetik untersucht wurden, siehe Abbildung 5.

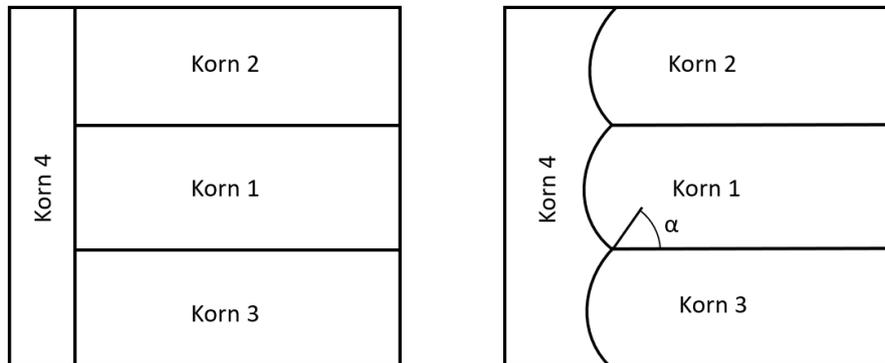


Abbildung 5: Anordnung der Körner bei der verwendeten Simulation; links Ausgangszustand, rechts simuliertes Kornwachstum [36]

Barrales Mora zeigte, dass der in Abbildung 5 eingezeichnete Winkel  $\alpha$  kleiner wird, umso größer die Tripelpunktmobilitäten von Korn 1 werden. Dieser Zusammenhang wurde auch in Abbildung 4 gefunden. Die Berechnung der beiden eingezeichneten Winkel  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  ergibt für  $\alpha_1$  einen Winkel von  $50.87^\circ$ , für  $\alpha_2$  erhält man  $50.67^\circ$ .

Die Kornstreckung wird durch das  $\frac{a}{b}$  Verhältnis beschrieben, wobei  $a$  der horizontalen Länge des quadratischen Korns zwischen  $T_1$  und  $T_2$  entspricht und  $b$  der vertikalen Länge des quadratischen Korns zwischen  $T_2$  und  $T_3$  entspricht. In Abbildung 6 ist die zeitliche Entwicklung des  $\frac{a}{b}$  Verhältnis dargestellt. Aus Abbildung 6 erkennt man, dass es mit abnehmender Tripelpunktmobilität zu einer zunehmenden Streckung von Korn I kommt. Durch hohe Tripelpunktmobilitäten kann die ursprüngliche Form annähernd behalten werden.

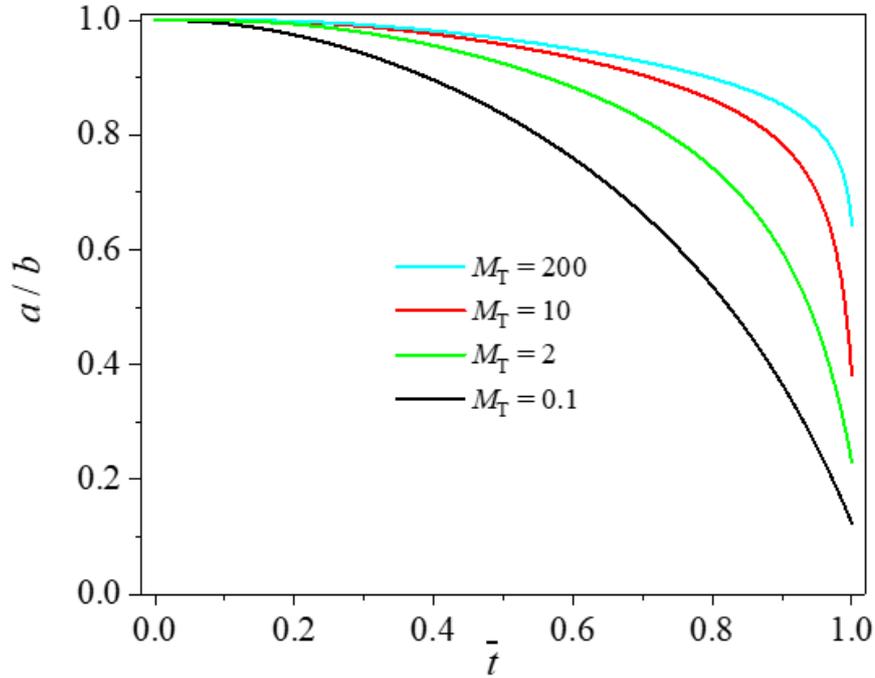


Abbildung 6: Zeitliche Entwicklung des  $a/b$  Verhältnis für unterschiedliche Tripelpunkt mobilitäten

Die Zeit bis einer der Korngrenzen verschwindet  $t_f$  ist in Abbildung 7 über  $M_T$  aufgetragen. Die eingezeichneten Kreise in Abbildung 7 entsprechen den benötigten Zeiten bis eine der Korngrenzen verschwindet für die verschiedenen Tripelpunkt mobilitäten.

Mit zunehmender Tripelpunkt mobilität nimmt die benötigte Zeit ab, wobei es eine untere Grenze gibt. Diese wird durch die rote Linie dargestellt. Bei sehr hohen Tripelpunkt mobilitäten wird das Kornwachstum durch die Krümmung zwischen den einzelnen Tripelpunkten getrieben. Bei sehr kleinen Tripelpunkt mobilitäten folgt die Zeit der grün eingezeichneten Linie. Die grüne Linie in Abbildung 7 wurde mithilfe der 4 kleinsten Tripelpunkt mobilitäten berechnet, wobei  $t_f = \frac{K}{M_T}$  ist. Der mathematische Fit ergab, dass  $K = (1.375 \pm 0.002)$  entspricht. In diesem Bereich wird das Kornwachstum durch die Tripelpunkt mobilität dominiert. Ein Übergangsbereich wurde zwischen  $0.1 \leq M_T \leq 50$  beobachtet.

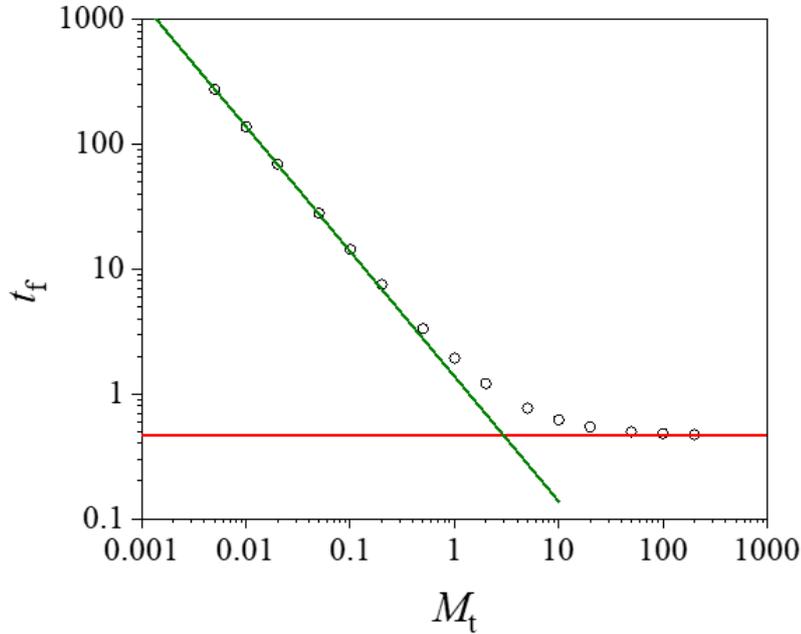


Abbildung 7: Benötigte Zeit bis eine Korngrenze verschwindet in Abhängigkeit der Tripelpunktmobilität  $M_T$

Bereits Barrales Mora zeigt in [36], dass mit steigender Mobilität der Tripelpunkte die Kinetik des Kornwachstums mehr und mehr linear wird. In Abbildung 8 ist die Änderung der Fläche über die Zeit der einzelnen Körner für unterschiedliche Tripelpunktmobilitäten dargestellt. Bei sehr hohen Tripelpunktmobilitäten wachsen oder schrumpfen die einzelnen Körner in einem annähernd linearen Zusammenhang über die finale Zeit  $t_f$ , siehe die grün und rot punktierte Linie in Abbildung 8. Betrachtet man das Wachstum der Flächen bei geringen Tripelpunktmobilitäten zeigt sich, dass diese in einem nicht linearen Zusammenhang wachsen/schrumpfen, anhand der schwarzen und blauen Linie in Abbildung 8 erkennbar. Die beiden Flächen der Körner II und III bleiben annähernd konstant für hohe Tripelpunktmobilitäten, z. B.  $M_T = 200$ . Bei geringen Tripelpunktmobilitäten, z. B.  $M_T = 0.1$  schrumpfen die Flächen stärker auf Kosten des Wachstums von Korn IV. Weiters fällt auf, dass Korn IV umso größer wird, je geringer die Tripelpunktmobilität ist, weil mehr Zeit zum Wachsen zur Verfügung steht.

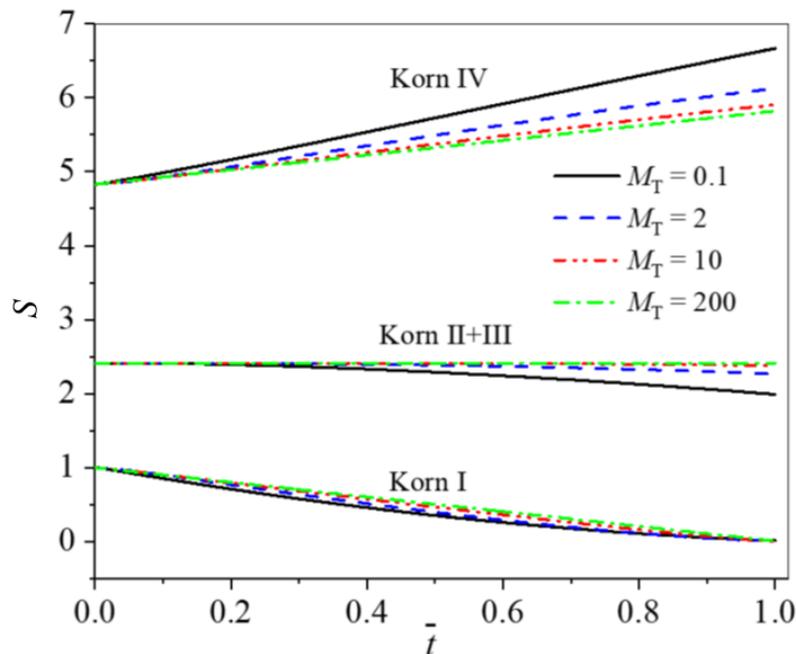


Abbildung 8: Zeitliche Entwicklung der Flächen der Körner I-IV für verschiedene  $M_T$

Vergleicht man nun das Wachstum der einzelnen Körner des verwendeten Modells mit der von Neumann-Mullins Theorie (Gleichung 1) ergibt sich folgender Zusammenhang:

	von Neumann-Mullins Modell	verwendetes Modell	
		$M_T = 0.1$	$M_T = 200$
viereckiges Korn	-2.1204	-0.0697	-2.1204
sechseckige Körner	-	-0.0295	0.0008
achteckiges Korn	2.094	0.1281	2.103

Abbildung 9: Vergleich des Flächenwachstums  $dS/dt$  für das verwendete Modell und die von Neumann-Mullins Theorie

Bei einer Tripelpunktmobilität von 200,  $M_T = 200$ , liefert das verwendete Modell für das achteckige Korn eine Steigung  $dS/dt$  von 2.103 und Gleichung (1) liefert eine Steigung von 2.094. Die beiden sechseckigen Körner wachsen/schrumpfen nach Gleichung (1) nicht, das Modell liefert eine Wachstumsrate

von 0.0008. Für das viereckige Korn lauten die Ergebnisse nach Gleichung (1)  $-2.1204$  und für das Modell  $-2.1204$ . Vergleicht man nun die Wachstumsrate nach von Neumann-Mullins mit jener des Modells bei einer Tripelpunktsmobilität von 0.1,  $M_T = 0.1$  erhält man folgende Ergebnisse: Die Vorhersagen der von Neumann-Mullins Theorie bleiben bei den selben Werten, da diese ja von unendlich hohen Tripelpunktsmobilitäten ausgehen. Das achteckige Korn hat nach dem Modell eine Steigung von 0.1281, die sechseckigen Körner schrumpfen mit  $-0.0295$  und das viereckige schrumpft mit einer Rate von  $-0.0697$ . Aus den obigen Berechnungen wird klar, je größer die Tripelpunktsmobilitäten umso höher ist die Übereinstimmung mit der von Neumann-Mullins Theorie. Dieser Vergleich liegt nahe, da von Neumann-Mullins ja von unendlich hohen Tripelpunktsmobilitäten ausgehen. Werden die Tripelpunktsmobilitäten sehr gering, so kommt es zu großen Unterschieden zwischen dem verwendeten Modell und der von Neumann-Mullins Theorie. Für diese Berechnungen wurde das Kornwachstum linear angenähert.

## 6.2 Strukturelemente mit reduzierten Mobilitäten

Bei den folgenden Simulationsrechnungen wurden verschiedenste Kombinationen von Korngrenzen- und Tripelpunktmobilitäten berechnet. Zu Beginn kam es zur sogenannten Pinnung (Verringerung der Mobilität) von verschiedensten Tripelpunkten. Danach wurden die Mobilitäten einzelner Korngrenzen verringert. Abschließend kam es zur Pinnung ganzer sogenannter Strukturelemente, welche aus einem Tripelpunkt und den Korngrenzen die von diesem Tripelpunkt ausgehen, bestehen.

### 6.2.1 Tripelpunkte mit reduzierten Mobilitäten

Im ersten Fall (Fall 1) wurden die zu Korn I gehörenden Tripelpunktmobilitäten auf den Wert 1 gesenkt,  $M_{T,i} = 1$ , ( $i = 1, 2, 3, 4$ ), die restlichen Tripelpunktmobilitäten wurden auf den Wert 100 erhöht,  $M_{T,i} = 100$ , ( $i = 5, 6, 7, 8$ ). Im zweiten Fall (Fall 2) wurden jene Tripelpunktmobilitäten verringert, welche nicht zum quadratischen Korn gehören,  $M_{T,i} = 1$ , ( $i = 5, 6, 7, 8$ ) und die zu Korn I gehörenden Tripelpunktmobilitäten wurden erhöht,  $M_{T,i} = 100$ , ( $i = 1, 2, 3, 4$ ). Fall 1 ist in Abbildung 10a) auf der linken Seite, Fall 2 ist in Abbildung 10b) auf der rechten Seite zu sehen.

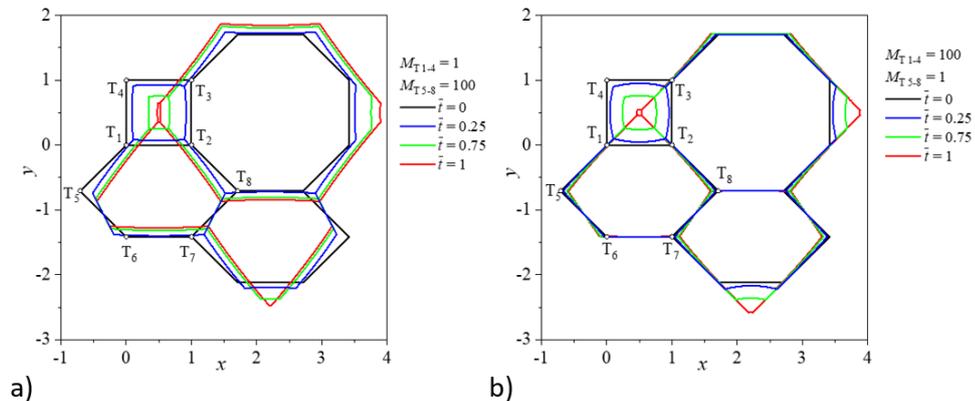


Abbildung 10: Zeitliche Entwicklung der Einheitszelle mit Verringerung von mehreren Tripelpunktmobilitäten; a) Fall 1, b) Fall 2

In Abbildung 10 erkennt man, dass die Position der gepinnten Tripelpunkte einen sehr starken Einfluss auf die Kinetik des Kornwachstums hat. So wur-

de die Fläche von Korn IV in Fall 1 größer als in Fall 2. Durch die Pinnung, der zum quadratischen Korn gehörigen Tripelpunkte, konnte wiederum eine starke Streckung des quadratischen Korns, wie durch Herabsenken aller Tripelpunktmobilitäten, erreicht werden. Im Gegensatz dazu blieb in Fall 2 die ursprüngliche Form des quadratischen Korns beinahe erhalten. Durch Pinnung der Tripelpunkte 5, 6, 7, 8 konnte das achteckige Korn hauptsächlich durch die Schrumpfung des quadratischen Korns wachsen. Wurden aber wie in Fall 1, die Tripelpunkte 1 bis 4 gepinnt, wuchs das achteckige Korn auf Kosten der anderen Körner bevor Korn I verschwand. Im ersten Fall kam es auch zu einer stärkeren Formänderung der beiden sechseckigen Körner als in Fall 2.

Die Beobachtungen zum Schrumpfen des viereckigen Korns in den beiden Fällen 1 und 2 zeigt hohe Übereinstimmungen mit den Simulationen von Mießen et al. [34]. Auch in Ihren Simulationen war das Schrumpfen des viereckigen Korns abhängig von dessen Tripelpunktmobilitäten. Bei hohen Tripelpunktmobilitäten von Korn I ging das Schrumpfen viel schneller als bei geringen Tripelpunktmobilitäten. Aufgrund der Tatsache, dass Mießen et al. [34] das Wachstum eines viereckigen Korns, ohne Nachbarkörner untersuchten, kann kein Vergleich zur topologischen Entwicklung im hier berechneten Fall vorgenommen werden.

Durch die einzelne Betrachtung des Wachstums eines viereckigen Korns, stellten Mießen et al. [34] fest, dass sich die Korngrenzen umso schneller begradigen, je höher die Tripelpunktmobilität ist. Der Vergleich von Fall 1 und 2 zeigt zusätzlich, dass es darauf ankommt welche Tripelpunkte eine reduzierte Mobilität aufweisen. Abhängig davon werden gewisse Korngrenzen sich krümmungskontrolliert bewegen, während andere stark durch die Mobilität der Tripelpunkte beeinflusst sind.

Im dritten Fall wurde nur die Mobilität des Tripelpunktes 2 auf den Wert 1 gesenkt,  $M_{T_2} = 1$ , und die restlichen Tripelpunktmobilitäten wurden auf den Wert 100 gesetzt. Im Vergleich dazu wurden im vierten Fall die Mobilitäten der Tripelpunkte 2 und 8 auf den Wert 1 gesetzt,  $M_{T_{2,8}} = 1$  und die restlichen Tripelpunktmobilitäten wieder auf den Wert 100 gesetzt.

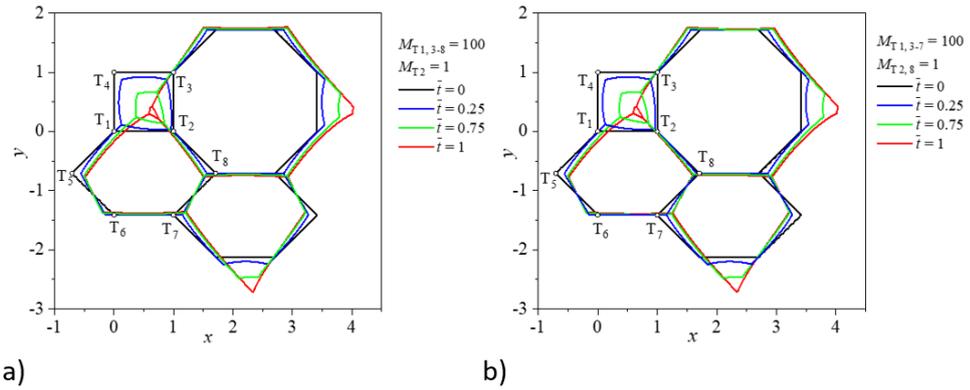


Abbildung 11: Zeitliche Entwicklung der Einheitszelle mit Verringerung der Mobilität von Tripelpunkt 2 (links) sowie Tripelpunkt 2 und 8 (rechts); a) Fall 3, b) Fall 4

Beim Vergleich der beiden Fälle 3 und 4 fällt auf, dass die zeitliche Entwicklung der Einheitszelle am stärksten durch Verringerung der Tripelpunktmobilitäten, welche zu Korn I gehören, abhängt. Wird wie im Fall 4 zusätzlich noch die Mobilität von Tripelpunkt 8 gesenkt, hat dies keinen merklichen Einfluss auf die Topologie der Einheitszelle. Beide Mikrostrukturen sehen sehr ähnlich aus, bevor Korn I verschwindet. In beiden Fällen ist ersichtlich, dass die Herabsetzung einer Mobilität eines Tripelpunktes, welcher zum quadratischen Korn gehört zu einer starken Verzerrung von Korn I führt.

Zöllner et al. [25], zeigten in Ihren Simulationen das es bei einer Verkürzung einer Korngrenze, gegenüber den restlichen Korngrenzen, eines Kornes zum gleichen Phänomen kommt wie in Fall 3. Hier wird durch die Pinnung des einzelnen Tripelpunktes das ehemalige viereckige Korn zu einem dreieckigen Korn bevor es verschwindet. Bei Zöllner et al. wurde ein fünfeckiges Korn zu einem viereckigen Korn. Diese Verringerung der topologischen Klasse von fünf- und viereckigen

Körnern wurde auch von Palmer et al. [42] in ihrem Zellulären Automaten Modell gefunden. Im Gegensatz dazu zeigten deren experimentellen Untersuchungen das fünf- und viereckige Körner direkt verschwinden ohne Verringerung der topologischen Klasse.

Hier kommt der Umstand, dass es sich bei Körnern um dreidimensionale Objekte handelt, zum Tragen. In verschiedenen Simulationsmodellen wird zwar die Verringerung der topologischen Klasse vorhergesagt, aber experimentell wird auch ein direktes Verschwinden von Körnern, ohne Verringerung der topologischen Klasse, beobachtet. In zweidimensionalen Gefügeaufnahmen ist nicht feststellbar, wie einzelne Körner im Werkstoff liegen. So wird in manchen Fällen eine Verringerung, wie von den einzelnen Simulationen gezeigt, gefunden und in anderen Fällen scheint es so, dass Körner direkt verschwinden.

Für Fall 5 wurde den vier Tripelpunkten von Korn I verschieden hohe Mobilitäten zugewiesen, siehe Abbildung 12a), linke Seite. Bei Fall 6 kam es zu einer vollständigen Pinnung des quadratischen Korns (Tripelpunktmobilitäten würden auf 0 gesetzt), siehe Abbildung 12b) rechte Seite.

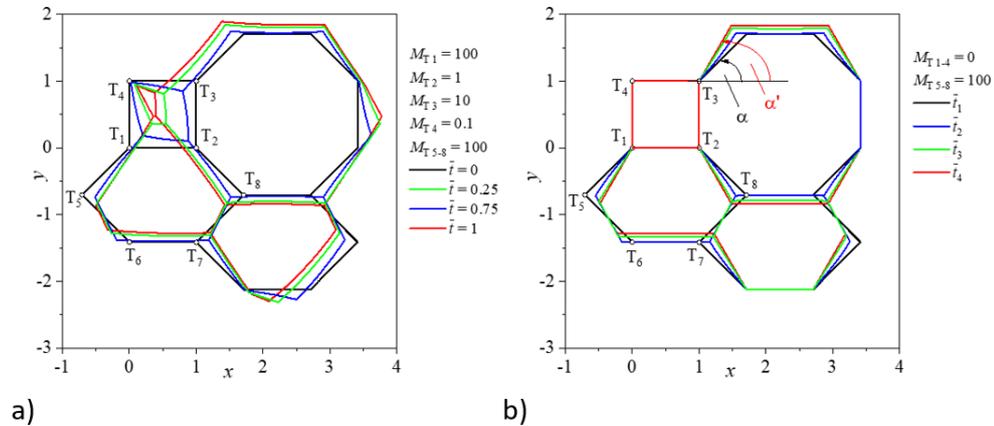


Abbildung 12: Zeitliche Entwicklung der Einheitszelle mit verschiedenen hohen Tripelpunktmobilitäten des quadratischen Korns (links), und vollständiger Pinnung des quadratischen Korns (rechts); a) Fall 5, b) Fall 6

Durch die Konfiguration in Fall 5 konnte eine vermeintlich schwache Verdrehung von Korn III und IV beobachtet werden. Korn IV konnte auf Kosten der übrigen Körner wachsen. Fall 5 zeigt auch auf, dass die unregelmäßigen Struktu-

ren, welche in vielen Kornwachstumsexperimenten beobachtet werden, aufgrund von unterschiedlichen Mobilitäten der einzelnen Strukturelemente entstehen.

Fall 5 ist auch in sehr guter Übereinstimmung mit den Erkenntnissen von Zöllner et al. [25], sowie Palmer et al. [42]. Genau wie diese beiden Arbeiten zeigen, dass Körner mit weniger als 6 Ecken im Zuge ihres Schrumpfens ihre topologische Klasse nach und nach um 1 verringern, kann diese Tendenz auch in Fall 5 beobachtet werden. Würde die Simulation weiter laufen, dann würde das ursprünglich quadratische Korn seine topologische Klasse verringern. Diese Verringerung passiert solange bis ein dreieckiges Korn vorhanden ist, dieses wird dann vollständig von den umgebenden Körnern überwachsen.

Für Fall 6 (Pinnung aller Tripelpunkte des quadratischen Kornes) bleiben alle Körner in der Mikrostruktur erhalten. Die Mikrostruktur geht in ein metastabiles Gleichgewicht. In Fall 6 werden für die Zeiten andere Variablen verwendet als in den übrigen Fällen.  $\bar{t}_1$  ist die Mikrostruktur zu Beginn,  $\bar{t}_4$  ist die Mikrostruktur zu einem sehr späten Zeitpunkt bei welchem keine Bewegung der Korngrenzen mehr festgestellt werden konnte.  $\bar{t}_2$  und  $\bar{t}_3$  wurden so gewählt, dass die Fläche von Korn IV seine Fläche um 25% bzw. 75% erhöht. Zusätzlich sind in Fall 6 noch 2 Winkel eingezeichnet. Beide Winkel,  $\alpha$  und  $\alpha'$ , entsprechen dem Winkel zwischen der horizontalen Linie durch Tripelpunkt 3 und Korngrenze 12. Der Ausgangswinkel  $\alpha$  wurde berechnet und ergab  $\frac{\pi}{4}$ . Durch die Simulation der Mikrostruktur stellt sich der Winkel  $\frac{\pi}{3}$  für  $\alpha'$  ein, was einem Gleichgewichtswinkel von  $60^\circ$  entspricht. Dies stimmt völlig mit der von Neumann-Mullins Theorie überein, siehe [10] und [11].

## 6.2.2 Korngrenzen mit reduzierten Mobilitäten

Im Folgenden wird der Einfluss von reduzierten Korngrenzenmobilitäten auf die Mikrostruktur untersucht. Hierfür mussten die Mobilitäten der Tripelpunkte auf einen hohen Wert gesetzt werden, damit diese Verdrehungen infolge von wandernden Korngrenzen mitmachen können. In den folgenden Simulationen wurden die Tripelpunktmobilitäten  $M_{T,i}$  auf den Wert 100 gesetzt. Es wurden, wie bereits zuvor, verschiedenste Korngrenzenmobilitäten verringert und deren Einfluss auf die zeitliche Entwicklung der Mikrostruktur untersucht.

Im Fall 7 wurde die Mobilität der Korngrenze 1 auf den Wert 0,1,  $M_{GB,1} = 0.1$ , gesetzt und die üblichen Korngrenzenmobilitäten auf den Wert 1,  $M_{GB,2-12} = 0.1$ . Dies ist in Abbildung 13a) auf der linken Seite dargestellt. Auf der rechten Seite in Abbildung 13b) befindet sich Fall 8. Für diesen Fall wurde die Mobilität von Korngrenze 4 auf den Wert 0,1,  $M_{GB,4} = 0.1$  und die restlichen Korngrenzenmobilitäten auf den Wert 1 gesetzt.

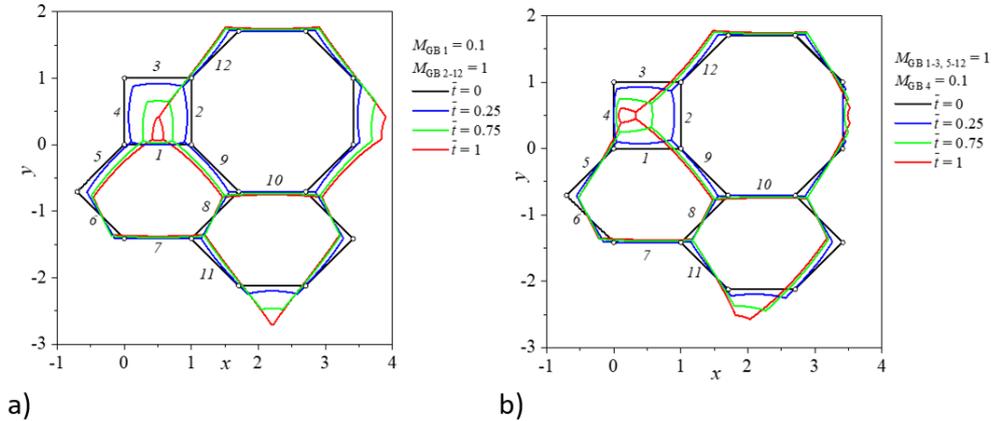


Abbildung 13: Zeitliche Entwicklung der Einheitszelle mit Verringerung einzelner Korngrenzenmobilitäten des quadratischen Korns; a) Fall 7, b) Fall 8

Im siebenten Fall verschwindet durch die Verringerung von Korngrenzenmobilität 1 Korngrenze 3 als Erstes. Zusätzlich kommt es durch die gezielte Verringerung auch zu einer Streckung von Korn I. Im Gegensatz dazu führt eine Verringerung von Korngrenzenmobilität 4, wie in Fall 8, zu einer horizontalen Streckung von Korn I. Es ist aus beiden Fällen ersichtlich, dass es in Fall 7 zu

einer stärkeren Streckung von Korn I kommt, als in Fall 8. Fall 7 stimmt auch mit den Arbeiten von Zöllner [25] und Palmer et al. [42] überein, bei denen ebenfalls Körner mit einer topologischen Klasse  $< 6$  ihre topologische Klasse infolge des Schrumpfprozesses verringern.

Das sich infolge von Kornwachstum auch gestreckte Körner, geradlinige und gekrümmte Korngrenzen wie in Fall 8 bilden können, zeigten Lepinoux et al. [49]. Sie simulierten Kornwachstum mithilfe eines Vertex Modells. Mithilfe ihres Modells simulierten sie das Kornwachstum in einem polykristallinem Material unter zufälligen Verteilungen von gepinnten Korngrenzen in der Ausgangsmikrostruktur.

In den beiden folgenden Fällen kam es zur Verringerung von Korngrenzenmobilitäten von ganzen Körnern. So wurden im Fall 9 alle Korngrenzen des achteckigen Korn IV verkleinert, also  $M_{\text{GB},2,4,5,7,9-12} = 1$  und den restlichen Korngrenzen wurde eine Mobilität von 10 zugewiesen. Im zehnten Fall wurden die Korngrenzen des quadratischen Korn verringert,  $M_{\text{GB},1-4} = 0.1$  und den restlichen Korngrenzen wurde eine Mobilität von 1 zugewiesen.

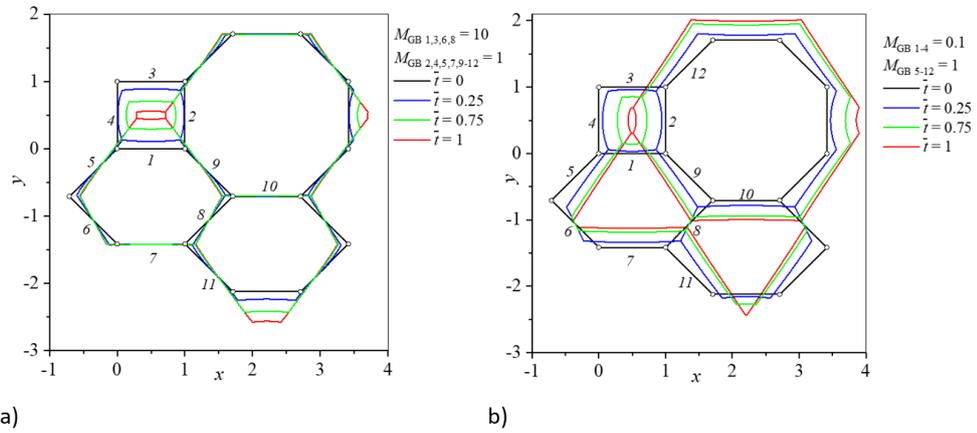


Abbildung 14: Zeitliche Entwicklung der Einheitszelle mit Reduktion der Korngrenzenmobilitäten einzelner Körner, links Reduktion der Korngrenzenmobilitäten des Achtecks, rechts Verringerung der Korngrenzenmobilitäten des Quadrats; a) Fall 9, b) Fall 10

Durch die Verringerung der Korngrenzenmobilitäten des achteckigen Korn (Fall 9), wuchsen die beiden sechseckigen Körner, Korn II und III mehr auf Kos-

ten des quadratischen Kornes als das achteckige Korn. In beiden Fällen schrumpfte das quadratische Korn, wobei es in Fall 9 zu einer horizontalen und in Fall 10 zu einer vertikalen Streckung von Korn I kam, bevor dieses verschwand. Vergleicht man das Wachstum von Korn IV in beiden Fällen, so ist klar ersichtlich, dass die Reduktion der Korngrenzenmobilitäten des achteckigen Kornes dieses am Wachsen hindert, aber in Fall 10 wuchs Korn IV sehr stark.

He et al. [50] fanden auch verschieden hohe Korngrenzenmobilitäten in einer  $Fe_{81}Ga_{19}$  Legierung. Der Unterschied in den Korngrenzenmobilitäten der einzelnen Körner ergab sich durch den Umstand, dass einige Körner eine gewünschte Textur ausbildeten. Jene Körner, welche bei Temperaturerhöhung in der gewünschten Textur wuchsen, zeigten höhere Korngrenzenmobilitäten als Körner welche zufällig orientiert in der Mikrostruktur wuchsen. So kam es wie in Fall 9 auch zu dem Umstand, dass Körner mit mehr als 6 Ecken, welche zufällige Orientierungen in der Matrix zeigten, nicht merklich wuchsen.

Auch Streckungen einzelner Körner aufgrund von Wachstum benachbarter Körner haben He et al. [50] beobachtet. Anfangs große Körner, wie beispielsweise Korn IV, wuchsen wie in Fall 10 sehr stark auf Kosten ihrer Umgebung, wenn diese in der entsprechenden Textur wuchsen und dadurch sehr hohe Korngrenzenmobilitäten aufwiesen. Die beiden sechseckigen Körner, Korn II und III in Fall 10, folgen auch den Beobachtungen Zöllner, [25] und Palmer et al. [42]. Beide Körner verringern ihre topologische Klasse infolge ihres Schrumpfens um 1. Im Gegensatz dazu schrumpft Korn I in Fall 9 und 10 völlig als viereckiges Korn ohne seine topologische Klasse zu verringern.

### 6.2.3 Pinnung von Tripelpunkten und Korngrenzen

Abschließend wurden noch vollständige mikrostrukturelle Bereiche gepinnt. Mit mikrostrukturellen Bereichen sind jeweils ein Tripelpunkt und alle von diesem Tripelpunkt ausgehenden Korngrenzen gemeint.

In Fall 11 wurde die Mobilität des Tripelpunkts 8 sowie die Mobilität der Korngrenzen 8, 9, 10 gepinnt, also diese Mobilitäten auf den Wert 0 gesetzt. Den verbliebenen Tripelpunkten wurde eine Mobilität von 100 zugewiesen. Die übrigen Korngrenzenmobilitäten wurden auf den Wert 1 gesetzt. Fall 11 ist in Abbildung 15a) auf der linken Seite zu sehen. Im Gegensatz dazu, kam es in Fall 12 zur Pinnung des Tripelpunktes 3 und der Korngrenzen 2, 3 und 12, also deren Mobilitäten wurden auf 0 gesetzt. Sowie in Fall 11 wurden auch in Fall 12 die restlichen Tripelpunktmobilitäten auf den Wert 100 gesetzt und die übrigen Korngrenzen wurde eine Mobilität mit dem Wert 1 zugewiesen. Fall 12 ist in Abbildung 15b) auf der rechten Seite zu sehen.

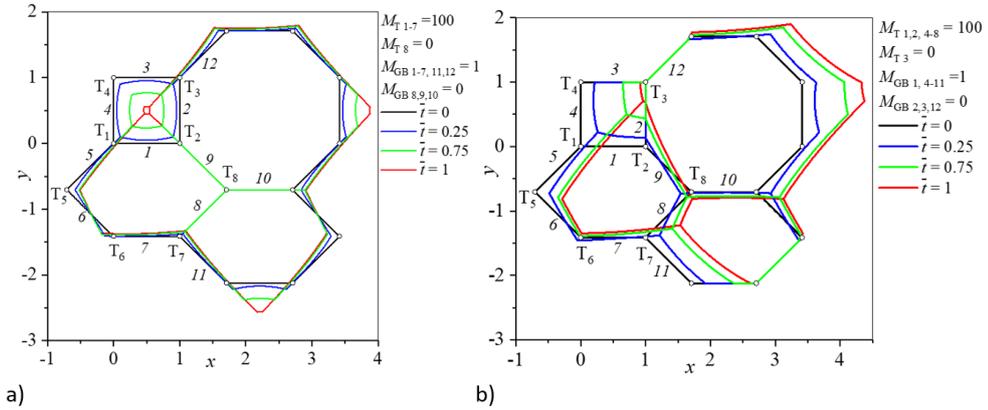


Abbildung 15: Zeitliche Entwicklung der Einheitszelle mit Pinnung mikrostruktureller Bereiche; a) Fall 11, b) Fall 12

Fall 11 zeigt eine sehr ähnliche zeitliche Entwicklung wie Fall 2. Auch hier hat die Pinnung von Tripelpunkt 8 keinen nennenswerten Einfluss auf die zeitliche Entwicklung des quadratischen Kornes, welches als erstes aufgrund der hohen Tripelpunktmobilitäten verschwindet. Diese Simulation stützt die Aussage, dass die Lage von mikrostrukturellen Bereichen geringerer Mobilität einen sehr großen Einfluss auf das Kornwachstum hat. Im Vergleich dazu kommt es im

Fall 12 zu einer starken Verzerrung von Korn I. Aufgrund der Pinnung von Tripelpunkt 3 und seinen zugehörigen Korngrenzen entwickeln sich Korn II und III völlig unterschiedlich. Korn II wächst sehr stark auf Kosten des quadratischen Kornes, Korn III wird durch das Wachsen des achteckigen Kornes selbst am Wachsen gehindert. In beiden Fällen kommt es zur Bildung von geradlinigen und gekrümmten Korngrenzen, wobei die Krümmungen im Fall 12 sehr viel ausgeprägter sind.

In den beiden Fällen 13 und 14 wurde jeweils ein Tripelpunkt und zwei Korngrenzen des quadratischen Kornes, sowie die dritte von diesem Tripelpunkt ausgehende Korngrenze gepinnt. So wurde in Fall 13 Tripelpunkt 1, sowie die Korngrenzen 1, 4 und 5 gepinnt. Im Fall 14 kam es zur Pinnung von Tripelpunkt 2 und den Korngrenzen 1, 2 und 9. Den übrigen Tripelpunkten wurde wieder die Mobilität 100 zugewiesen und die Mobilitäten der verbliebenen Korngrenzen wurden auf den Wert 1 gesetzt. Fall 13 ist in Abbildung 16a) auf der linken Seite dargestellt, Fall 14 auf der rechten Seite in Abbildung 16b).

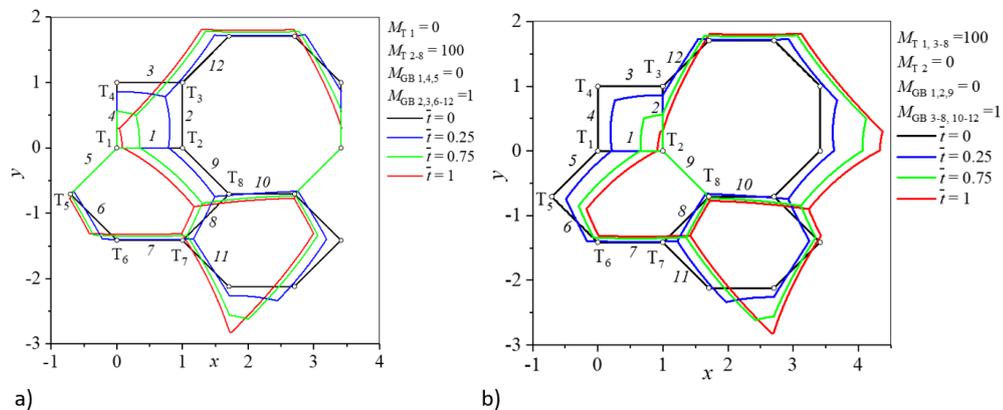


Abbildung 16: Zeitliche Entwicklung der Einheitszelle mit Pinnung mikrostruktureller Bereiche; a) Fall 13, b) Fall 14

In beiden Fällen wächst das achteckige Korn IV sowie das rechte sechseckige Korn III sehr stark auf Kosten des quadratischen Kornes. Korn II schrumpft in beiden Fällen. Vergleicht man Fall 13 und 14 so fällt auf, dass sich die Mikrostruktur in beiden Fällen gleich aber in unterschiedliche Richtungen entwickelt. In Fall 13 wachsen das achteckige und das rechte sechseckige Korn nach

links, in Fall 14 wachsen beide nach rechts. Vergleicht man diese beiden Fälle nun mit Fall 12 so entwickelt sich hier die Mikrostruktur auch gleich, mit dem Unterschied das durch die Pinnung von Tripelpunkt 3 in Fall 12 nicht das rechte sondern das linke sechseckige Korn II wächst.

Das Ausmaß in welchem die Körner wachsen und schrumpfen ist in den 3 Fällen völlig identisch. So kann durch die Pinnung einzelner Bereiche die Richtung zwar vorgegeben werden, aber die Entwicklung der Mikrostruktur läuft bezogen auf die Flächen völlig gleich ab. Die Fälle 12, 13 und 14 zeigen bezogen auf das Schrumpfen des viereckigen Korn I sehr gute Übereinstimmungen mit den Simulationsrechnungen von Gamsjäger et al. [51].

Gamsjäger et al. untersuchten das Schrumpfen eines quadratischen Korns, mit verschiedenen hohen Tripelpunktmobilitäten, an den Eckpunkten. So wie in den Fällen 12, 13 und 14 schrumpfte auch hier das quadratische Korn ausgehend von jenem Tripelpunkt mit der höchsten Mobilität am stärksten. Die hohe Tripelpunktmobilitäten führten auch zur Ausbildung von stark gekrümmten Korngrenzen, welche an den Tripelpunkten mit geringen Mobilitäten aber gepinnt wurden, gleiches zeigt sich in den Fällen 12, 13 und 14. Durch die gezielte Pinnung eines Eckes von Korn I zeigt sich beim Schrumpfen auch dasselbe Ergebnis wie bei den Simulationen von Zöllner, [25]. Auch hier verringert das viereckige Korn seine topologische Klasse um 1 bevor es verschwindet, sowie auch in den Fällen 12, 13 und 14.

Die simulierten Fälle zeigen, dass das Wachsen bzw. Schrumpfen der einzelnen Körner von den einzelnen Tripelpunkts- und Korngrenzenmobilitäten abhängt. Das Wachstum des achteckigen Korn IV ist in Abbildung 17 dargestellt. Die in Abbildung 17 mit untere Grenze bezeichnete Linie entsteht, wenn alle Korngrenzen der Einheitszelle, bis auf jene des quadratischen Korns gepinnt wurden. Ein geringer Zuwachs in der Fläche  $A_4$  wurde auch im Fall 11, in welchem der Tripelpunkt 8 und die Korngrenzen 8, 9 und 10 gepinnt wurden, beobachtet. Kommt man nun in den Bereich des rein tripelpunktgesteuerten Kornwachstums, ist der Zuwachs von Korn IV,  $A_4$  auch nicht so hoch, siehe schwarz punktiert strichlierte Linie in Abbildung 17. Die blaue Linie in Abbildung 17 repräsentiert die Fälle 12, 13 und 14. Hier wächst das achteckige Korn sehr stark auf Kosten des quadratischen Korns. Der höchste Zuwachs in

der Fläche  $A_4$  wurde in Fall 10 beobachtet. Hier kam es zur Verringerung der Tripelpunktmobilitäten des quadratischen Korns, was dazu führte, dass Korn IV sehr stark auf Kosten aller übrigen Körner wuchs.

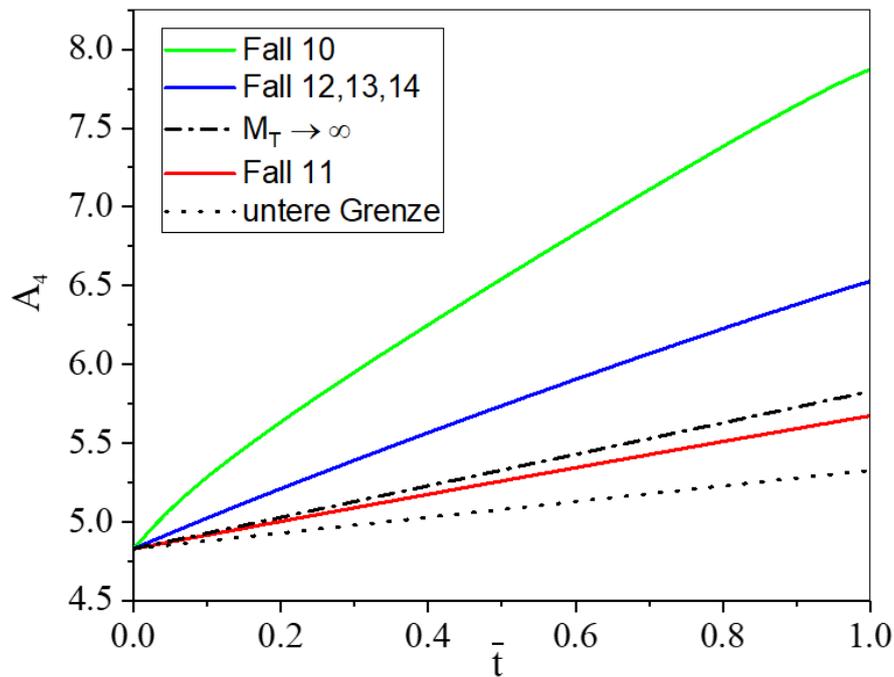


Abbildung 17: Zeitliche Entwicklung der Fläche  $A_4$  für verschiedene Fälle

In Abbildung 17 ist die Fläche  $A_4$  des achteckigen Korns gegen die Zeit  $\bar{t}$  aufgetragen.  $\bar{t}$  ist die Zeit, welche benötigt wird, damit Korn I verschwunden ist. Aus den gezeigten Simulationen lässt sich schließen, dass die Verbreiterung der Korngrößenverteilung vor allem in Systemen mit reduzierten Tripelpunkts- und Korngrenzenmobilitäten auftritt. Alle gezeigten Simulationen folgen aber der Grundannahme, dass sich die einzelnen Bedingungen (konstante Tripelpunkts- und Korngrenzenmobilitäten) während des Kornwachstumsprozesses nicht verändern, also konstant sind.

Ein Beispiel für einen Werkstoff mit verschiedenen Tripelpunkts- und Korngrenzenmobilitäten untersuchten Graux et al. [55] in ihrer Arbeit. Sie verwendeten für ihre Untersuchungen einen mikrolegierten Stahl, welcher hinsichtlich seiner Eigenschaften, bezogen auf die Wachstumskinetik des Auste-

nitkorns während einer gezielten Wärmebehandlung näher untersucht wurde. In solchen mikrolegierten Stählen kommt es durch Zulegieren von Titan und Niob zur Ausbildung von (Ti,Nb)C Ausscheidungen. Diese Ausscheidungen hemmen die Bewegung von Tripelpunkten und Korngrenzen, auch bei höheren Temperaturen, wie beispielsweise in den oben gezeigten Simulationsrechnungen. Die chemische Zusammensetzung des Stahls in Massenbrüche der Legierungskomponenten in % sah folgendermaßen aus: 0.062% C, 1.91% Mn, 0.085% Ti, 0.039% Nb, 0.003% S und 0.006% N.

In der Arbeit von Graux et al. [55] wurden die darin gezeigten Gefügebildungen des mikrolegierten Stahls, für die weiteren Untersuchungen verwendet. Die drei präsentierten Gefügebildungen zeigen die Mikrostruktur nach 10 Minuten halten bei den Temperaturen 1000°C, 1100°C und 1200°C.

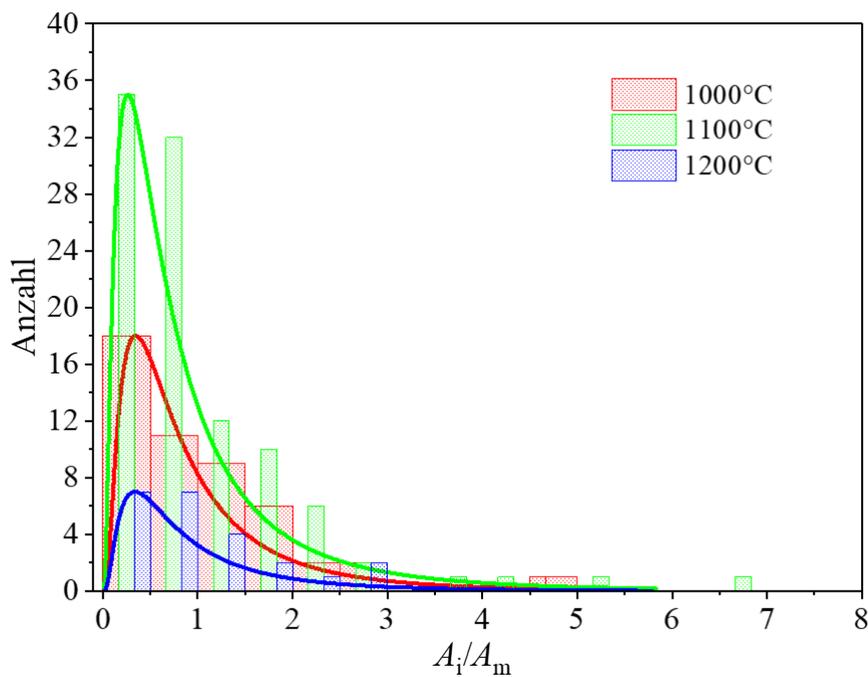


Abbildung 18: Säulendiagramm und Lognormal-Verteilung der Körner bei verschiedenen hohen Haltetemperaturen

In Abbildung 18 ist die Verteilung der Austenitkörner in einem Säulendiagramm dargestellt. Auf der x-Achse ist das Flächenverhältnis  $\frac{A_i}{A_m}$  dargestellt,

wobei  $A_i$  der Fläche eines bestimmten Kornes entspricht und  $A_m$  der durchschnittlichen Korngröße.

Durch einen Lognormal-Fit können die beiden Verteilungen bei den Halte-temperaturen  $1000^\circ$  (rot) und  $1200^\circ$  (blau) gut abgebildet werden. Bei einer Halte-temperatur von  $1100^\circ$  (grün) passt der Lognormal-Fit der Korngrößen nicht so gut, da sich diese Mikrostruktur in Richtung einer bimodalen Verteilung geht. Die in [55] dargestellten Gefügaufnahmen wurden mithilfe der Software Fiji [56] auf deren Streckung ausgewertet. Untersucht wurde die Streckung der Körner, das  $\frac{c}{d}$  Verhältnis. Dafür wurden die Körner durch Ellipsen angenähert. Eine solche Ellipse ist in Abbildung 19 dargestellt.

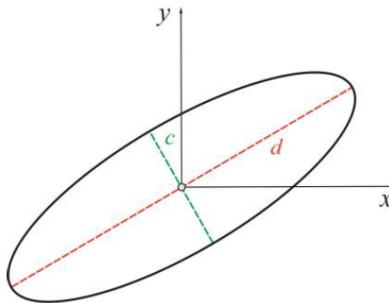


Abbildung 19: Skizze einer Ellipse mit der Nebenachse  $c$  und der Hauptachse  $d$ , entnommen aus [7]

Das  $\frac{c}{d}$  Verhältnis, oder die Streckung der Körner, gibt an, wie groß die Abweichung der Körner von einem kreisförmigen Querschnitt ist. (Das Verhältnis  $c/d$  für einen Kreis ergibt den Wert 1). Die, mithilfe der Software Fiji ausgewerteten Bilder, sind in Abbildung 20 zu sehen.

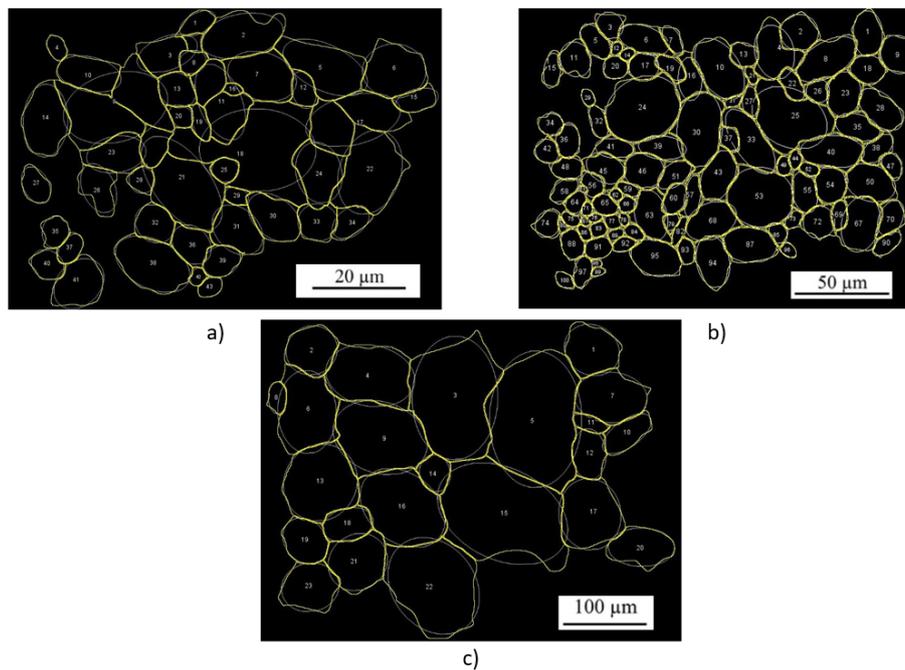


Abbildung 20: Ausgewertete Gefügebildungen bei den 3 unterschiedlichen Haltetemperaturen

Die gelb umrandeten Bereiche stellen die einzelnen Körner dar. Diese Körner wurden durch Fiji mithilfe von Ellipsen, welche weiß eingezeichnet sind, angenähert. Die so erhaltene Verteilung des  $\frac{c}{d}$ -Verhältnisses ist in Abbildung 21 dargestellt. Die verschiedenen Haltetemperaturen werden durch 3 verschiedene Farben dargestellt, wobei hier rot wieder für 1000° steht, grün für 1100° und blau für 1200°.

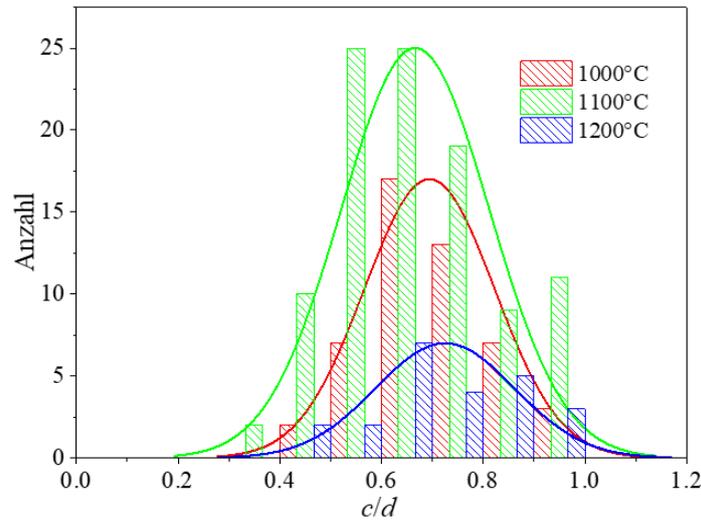


Abbildung 21:  $\frac{c}{d}$  Verteilung der elliptisch angenommenen Körnern, ausgewertet anhand der Gefügebildungen bei den 3 unterschiedlichen Haltetemperaturen

Das  $\frac{c}{d}$ -Verhältnis sollte sich mit steigender Temperatur immer mehr der Kreisform ( $\frac{c}{d}$ -Verhältnis =1) annähern, siehe [31], [39]. Diese Aussage trifft für 1000° und 1200° zu, da mit steigender Temperatur von 1000° auf 1200° die Streckung der Körner leicht abnimmt. Im Fall von 1100° ist das  $\frac{c}{d}$ -Verhältnis aber zu größeren Streckungen hin verschoben.

Wie man in Abbildung 20b erkennt, liegen hier viele kleine Körner und große stärker gestreckte Körner vor. Eine mögliche Erklärung für die gefundene Abweichung ist, dass die (Ti,Nb)C Ausscheidungen die kleinen Körner noch am Wachsen hindern (Herabsetzen der Trippel- und Korngrenzenmobilität), während diese Ausscheidungen bei den großen Körnern schon in Lösung gegangen sind und diese dadurch schon stärker wachsen. Der Umstand, dass sie Ausscheidungen teilweise noch stabil sind, führt dazu, dass benachbarte Körner stärker in eine Richtung wachsen. Bei einer Temperatur von 1200° sind alle Ausscheidungen in Lösung, sodass sich das  $\frac{c}{d}$ -Verhältnis mehr dem Wert 1 annähert.

## 7 Diskussion der Ergebnisse

Das von Neumann-Mullins Gesetz, siehe [10], [11], besagt, dass die Änderung der Fläche eines Korns nur von der Anzahl seinen Nachbarn abhängt, unter der Voraussetzung, dass die Korngrenzenmobilität und Korngrenzenenergie konstant während des Prozesses bleibt. Zöllner et al. [57] untersuchten den Zusammenhang von von Neumann-Mullins unter der Voraussetzung von reduzierten Tripelpunktmobilitäten. Sie fanden einen ähnlichen Zusammenhang für die Änderung des Radius eines Korns  $\dot{R}$  unter der Voraussetzung konstanter Tripelpunktmobilitäten und Korngrenzenenergien. Die Änderungsrate  $\dot{a}$ , wobei  $a$  der Länge der horizontalen Korngrenze von Korn I entspricht, ist ähnlich zu  $\dot{R}$  in [57]. Diese Änderungsrate  $\dot{a}$  ist proportional zur Mobilität der Tripelpunkte im Falle von tripelpunkt-kontrolliertem Wachstum von Korn I:

$$\dot{a} = -C \cdot M_T \quad (17)$$

wobei  $C$  eine positive Konstante ist. Integriert man Gleichung (16) so erhält man folgenden Zusammenhang:

$$t_f = \frac{a_0}{C} \cdot \frac{1}{M_T} = \frac{K}{M_T} \quad (18)$$

Die Endzeit  $t_f$  ist invers proportional zur Tripelpunktmobilität  $M_T$ . In Gleichung (17) entspricht  $a_0$  der Ausgangslänge der horizontalen Korngrenze von Korn I und  $K$  einer positiven Konstanten. Für Kornwachstum kann man zwischen zwei Extremfällen unterscheiden. Einerseits kann es sich um korngrenzenkontrolliertes Kornwachstum oder tripelpunkt-kontrolliertes Kornwachstum handeln, siehe Abbildung 6. Im Falle von korngrenzenkontrolliertem Kornwachstum hängt die Endzeit  $t_f$  nicht von der Tripelpunktmobilität  $M_T$  ab, siehe rote Linie in Abbildung 6. Dieser Fall gilt für hohe Tripelpunktmobilitäten  $M_T$ . Im Gegensatz dazu zeigt sich bei geringen Tripelpunktmobilitäten  $M_T$ , dass die Endzeit  $t_f$  invers proportional zur Tripelpunktmobilität  $M_T$  ist. Der Zusammenhang ist in Gleichung (17) dargestellt, wobei sich  $K$  zu  $1.375 \pm 0.002$  ergibt, siehe Seite 26. Zwischen den beiden Extremfällen wurde ein Übergangsbereich gefunden, indem das Kornwachstum durch Kombination von Tripelpunkt- und korngrenzenkontrolliertem Wachstum abläuft, siehe Abbildung 7.

In allen Simulationen wurden die Korngrenzenenergien  $\gamma_{GB,j}$  auf einen konstanten Wert gesetzt. Es wurden auch die Korngrenzenmobilitäten,  $M_{GB,j}$ , und die Tripelpunktsmobilitäten,  $M_{T,i}$ , innerhalb der einzelnen Simulationen auf konstante Werte gesetzt. Diese änderten sich während den Simulationen nicht mit z.B. mit den entsprechenden Winkeln zwischen den einzelnen Körnern oder mit den Krümmungen der Korngrenzen.

In allen Simulationen zeigte sich, dass geringe Tripelpunktsmobilitäten  $M_T$  zu sehr geradlinigen Korngrenzen führen. Durch diese beinahe "Pinnung" der Tripelpunkte bleibt den Korngrenzen genug Zeit sich zu begradigen und dadurch ihre Energie zu minimieren. Zusätzlich führen geringe Tripelpunktsmobilitäten  $M_T$  auch zu einer breiteren Verteilung der Korngrößenverteilung, siehe Abbildung 4. Dieser Effekt kommt dadurch zustande, dass bei geringeren Tripelpunktsmobilitäten  $M_T$  das achteckige Korn IV zwar langsamer wächst, aber insgesamt mehr Zeit zum Wachsen hat, bevor Korn I verschwindet. Dieser Zusammenhang ist nochmals in Abbildung 7 dargestellt. Abbildung 7 zeigt auch, dass die beiden sechseckigen Körner II und III bei hohen Tripelpunktsmobilitäten ihre Fläche kaum verändern. Bei geringen Tripelpunktsmobilitäten aber schrumpfen auch die sechseckigen Körner auf Kosten des achteckigen Korns, weil diesem mehr Zeit zum Wachsen zur Verfügung steht. Kommt es zudem zu tripelpunktskontrolliertem Wachstum, führt dies zu einer starken Streckung von Korn I. Die Streckung von Korn I ist für verschiedene Tripelpunktsmobilitäten in Abbildung 5 dargestellt. Sinkt also die Tripelpunktsmobilität so steigt die Streckung von Korn I. Dieser Effekt ist wieder durch die mehr zu Verfügung stehende Zeit für das Wachstum von Korn IV erklärbar. Dieses wächst je länger der Prozess dauert auf Kosten aller anderen Körner, wobei bei kurzen Endzeiten  $t_f$  wächst Korn IV nur auf Kosten von Korn I.

Mehrere Simulationen zeigen, dass die Kinetik in den jeweiligen Berechnungen zu starken Verzerrungen der einzelnen Körner führen kann, siehe Abbildung 9 und 10 links. Dies kommt vorallem durch die Verringerung von spezifischen Tripelpunktsmobilitäten zustande. Mikrostrukturen- bestehend aus stark verzerrten Körnern, geradlinigen Korngrenzen, stark gekrümmten Korngrenzen und stark gestreckte Körner können beispielsweise in mikrolegierten Stählen gefunden werden, siehe [58]. Aufgrund der chemischen Zusammensetzung von

mikrolegierten Stählen, kommt es zu einer inhomogenen Verteilung der effektiven Korngrenzen- und Tripelpunktmobilitäten. Diese effektiven Mobilitäten sind gering wegen der Pinnung einzelner Bereiche durch die Mikrolegierungselemente Niob, Vanadium und Titan.

Die Verteilung der einzelnen Mikrolegierungselemente sollte möglichst gleichmäßig sein. Die Pinnung von bestimmten Bereichen spielt in gewissen Fällen keine große Rolle bezogen auf die Kinetik des Kornwachstums, siehe Abbildung 11 und Abbildung 16. Diese Beispiele zeigen ganz klar, dass die örtliche Position der gepinnten Bereiche keinen sehr starken Einfluss auf die Wachstumskinetik hat. Interessant ist auch der Vergleich der Fälle 12, 13 und 14.

Durch die Pinnung bestimmter mikrostruktureller Bereiche kommt es bei allen 3 Fällen zu einem sehr starken Wachstum des achteckigen Korn IV auf Kosten von Korn I. Zusätzlich zeigen diese 3 Fälle völlig gleiches Wachstum mit der Zeit. Durch die verschiedenen Pinnungen unterscheiden sich nur die Richtungen in welche das achteckige Korn und eines der beiden sechseckigen Körner wächst. Eine solche örtliche Pinnung von Bereichen könnte zum Beispiel durch ungünstig geführte Wärmebehandlungen entstehen. Örtliche Ansammlungen von Karbiden in Stählen könnten so negative Auswirkungen auf die resultierenden mechanischen Eigenschaften haben, besonders wenn diese Stähle in Prozessen eingesetzt werden, in denen es zu erhöhten Temperaturen kommt. Alle Simulationen zeigen, dass eine Reduzierung der Korngrenzen- und Tripelpunktmobilitäten, von Körnern mit weniger als 6 Ecken, das Wachstum des achteckigen Korn mehr beschleunigt als das der sechseckigen Körner. Abbildung 15 zeigt wie sich das Wachstum des achteckigen Korn IV in den einzelnen Fällen verhält. Das stärkste Wachstum zeigte sich in Fall 10, wo die Korngrenzenmobilität des quadratischen Korn herabgesetzt war. Fall 12, 13 und 14 zeigen vollkommen gleiches Wachstum. Kommt es nun zu tripelpunktskontrolliertem Wachstum, durch sehr hohe Tripelpunktmobilitäten, ist der Zuwachs von Fläche  $A_4$  nicht so stark wie man vermuten würde. Durch die sehr hohe Tripelpunktmobilität kommt es zu sehr raschem Verschwinden des quadratischen Korn und die Simulation stoppt. Fall 9 zeigt auch ein schwaches Wachstum der Fläche des achteckigen Korn. Dieses Ergebnis war zu erwarten, da es in diesem Fall zur Pinnung eines Bereichs des achteckigen Korn kommt, welches

sehr nahe am quadratischen Korn liegt. Am geringsten fällt das Wachstum von Korn IV aus, wenn alle Korngrenzenmobilitäten verringert werden, bis auf jene des quadratischen Kornes.

Generell zeigen die durchgeführten Simulationen gute Übereinstimmungen mit Arbeiten aus der Literatur. Die Aussage, dass niedrige Tripelpunktmobilitäten eher zu gekrümmten Korngrenzen führen, von Barraes Mora in [36], zeigte sich auch in den Fällen 1, 2, 3, 4 und 5. Auch die von Zöllner, [25] und Palmer et al., [42] getätigte Aussage, der Verringerung der topologischen Klasse von Körnern mit weniger als 6 Ecken beim Schrumpfen, zeigte sich in den Fällen 3, 4, 5, 7, 8, 12, 13 und 14. In den Fällen 1, 2, 3, 4, 5, 7, 10, 11, 12, 13 und 14 verringerten auch sechseckige Körner ihrer topologische Klasse während des Kornwachstums.

Das in Abbildung 16 gezeigte Flächenverhältnis weicht für eine Anlasstemperatur von 1100°C stark von einer unimodalen Verteilung ab. Im Gegensatz dazu zeigt das Flächenverhältnis bei den Haltetemperaturen von 1000°C und 1200°C gute Übereinstimmungen mit einer unimodalen Verteilung. Kommt es in Anwendungsfällen zu erhöhten Temperaturen und geringeren effektiven Mobilitäten bestimmter mikrostruktureller Bereiche, z. B. durch (Ti,Nb)C Ausscheidungen, kann dies zu einer starken Streckung einzelner Körner führen. Ein solches Beispiel ist in Abbildung 21 zu sehen. Mit steigender Temperatur sollte das  $\frac{c}{d}$ -Verhältnis sich an 1 annähern. Dies passiert zwar für 1200°C aber nicht für 1100°C. Eine mögliche Erklärung hierfür könnte eine inhomogene Verteilung der (Ti,Nb)C sein. Solche stark gestreckten Körner können zu anisotropen mechanischen Eigenschaften des Werkstoffes führen und sollten daher vermieden werden.

## 7.1 Fazit

Basierend auf den unterschiedlichen Simulationen können folgende Aussagen getroffen werden:

1. Die von Neumann-Mullins Theorie (Gleichung 1) zeigt eine gute Näherung für die Beschreibbarkeit von krümmungsgetriebenen Kornwachstumsprozessen. Berücksichtigt man zusätzlich auch endlich hohe Mobilitäten für Tripelpunkte, können sehr starke Abweichungen zu der Theorie gefunden werden.
2. Es wurde gezeigt, dass verschieden hohe Tripelpunkts- und Korngrenzenmobilitäten eines Korns einen sehr starken Einfluss auf das Wachstum dieses Korns haben. Kleine Unterschiede in den einzelnen Mobilitäten werden immer auftreten aufgrund von gelösten Elementen in den jeweiligen Werkstoffen. Diese können sich auf verschiedenste Weise an den Korngrenzen und Tripelpunkten anlagern und so deren Mobilitäten beeinflussen.
3. Verfügt ein Korn über vollkommen gleiche Korngrenzen- und Tripelpunktsmobilitäten so wird das Wachstum des Korns von der Höhe der entsprechenden Mobilität bestimmt. Mikrostrukturen mit geringeren effektiven Tripelpunktsmobilitäten werden eher stark verformte Körner ausbilden. Zusätzlich führen geringe effektive Mobilitäten auch dazu, dass jene Körner am stärksten wachsen, welche die höchste Anzahl an benachbarten Körnern haben. In Mikrostrukturen mit geringen Tripelpunktsmobilitäten kommt es auch zu einer breiteren Verteilung der Korngrößen als in Mikrostrukturen, wo korngrenzenkontrolliertes Wachstum auftritt.
4. Die Simulationen zeigten auch, dass verringerte Mobilitäten von mikrostrukturellen Bereichen zur Ausbildung von stark gestreckten Körnern führen können. Unterhalb gewisser Temperaturen können (Ti,Nb)C Ausscheidungen zu einer solchen Verringerung führen. Ab gewissen Temperaturen gehen diese Ausscheidungen in Lösung. Durch die Pinnung gebildete, stark gestreckte Körner werden sehr schnell verschwinden aufgrund des ungehinderten Wachstums bereits großer gebildeter Körner.

## 8 Zusammenfassung

Mithilfe einer FORTRAN-Routine wurden Simulationsrechnungen für verschiedene Fälle von Kornwachstum simuliert. In den einzelnen Fällen kam es jeweils zu einer Änderung der einzelnen Tripelpunkts- und Korngrenzenmobilitäten. So konnte gezeigt werden, dass verschieden hohe effektive Mobilitäten der einzelnen mikrostrukturellen Bestandteile zu verschiedenen Kornwachstumsszenarien führen. Es konnte in korngrenzen- und tripelpunktsgesteuertes Wachstum unterteilt werden. Sollten in einer Mikrostruktur überall gleich hohe Mobilitäten auftreten, so hängt die resultierende Mikrostruktur durch Kornwachstum selbst auch noch von der Höhe dieses Wertes ab.

Bei allen Simulationen zeigte sich, dass jene Körner am meisten wachsen welche die höchste Anzahl an benachbarten Körnern haben. Werden einzelne Bereiche in der Mikrostruktur vollständig gepinnt, führt dies zur Ausbildung stark gestreckter Körner, welche anisotrope Eigenschaften auf die mechanischen Eigenschaften haben können. Der größte Flächenzuwachs der einzelnen Körner wurde nicht bei sehr hohen Mobilitäten gefunden, sondern bei geringeren Mobilitäten welche mehr Zeit zum Wachsen zur Verfügung hatten, bevor ein Korn vollständig verschwand.

## 9 Referenzen

### Literatur

- [1] Schnitzer,R.; Radis, R.; Nöhner,M.; Schober, M.; Hochfellner, R.; Zinner, S.; Povoden-Karadeniz, E.; Kozeschnik, E.; Leitner, H.; Reverted austenite in PH13-8 Mo maraging steels; *Mater. Chem. Phys.*, **2010**, 122, 138-145.
- [2] Jiang, S.; Wang, H.; Liu, X.; Chen, H.; Yao, M.; Gault, B.; Ponge, D.; Raabe, D.; Hirata, A.; Chen, M.; Wang, Y.; Lu, Z.; Ultrastrong steel via minimal lattice misfit and high-density nanoprecipitation; *Nature*, **2017**, 544, 460-464.
- [3] Kolb, M.; Freund, L.P.; Fischer, F.; Povstugar, I.; Makineni, S.K.; Gault, B.; Raabe,D.; Müller, J.; Spiecker, E.; Neumeier, S.; Göken,M.; On the grain boundary strengthening effect of boron in  $\gamma/\gamma'$ Cobalt-base superalloys; *Acta Mater.* **2018**, 145, 247-254
- [4] Huber, D.; Werner, R.; Clemens, H.; Stockinger, M.; Influence of process parameter variation during thermo-mechanical processing of intermetallic  $\beta$  - stabilized -  $\gamma$ -TiAl based alloy; *Mater. Charact.*, **2015**, 109, 116-121
- [5] Danzer, R.; On the relationship between ceramic strength and the requirements for mechanical design; *J. Eur. Ceram. Soc.*, **2014**, 34, 3435-3460.
- [6] Raabe, D.; *Computational Materials Science*; Wiley-VCH: Weinheim, Germany, **1998**, ISBN 3-527-29541-0.
- [7] Gamsjäger, E.; Gschöpf, B; Svoboda, J.; Influence of finite mobilities of triple junctions on the grain morphology and kinetics of grain growth; *Metals*,**2020**, 10, 185
- [8] Gottstein, G.; *Physical Foundations of Material Science*; Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH: Aachen, Germany, **2004**, pp.327, ISBN 978-3-642-07271-0.
- [9] Priester, L.; *Grain Boundaries and Crystalline Plasticity*; John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, USA, **2011**, pp.1 ff., ISBN 978-1-84821-327-2.

- [10] von Neumann, J.: Metal interfaces; *American Society for Testing Materials*, Cleveland, **1952**, 108.
- [11] Mullins, W.W.: Two-Dimensional Motion of Idealized Grain Boundaries; *J. Appl. Phys.*, **1956**, 27, 900.
- [12] Lazar, E.A; Mason, J.K; MacPherson R.D.; Srolovitz D.J.; A more accurate three-dimensional grain growth algorithm; *Acta mater.*, **2011**, Vol.59, pp.6837-6847
- [13] Czubayko, U.; Sursaeva, V.G.; Gottstein, G.; Shvindlerman, L.S.; Influence of triple junctions on grain boundary motion; *Acta mater.*, **1998**, Vol 46, No. 16, pp.5863-5871.
- [14] Galina, A.V.; Fradkov, V.E.; Shvindlerman, L.S.; *Phys. Met. Metallography*, **1987**; pp. 63-165.
- [15] Streitenberger, P.; Zöllner, D.; von Neumann-Mullins-type evolution equations for triple and quadruple junction controlled grain growth; *Scripta Materialia*, **2015**, 109, pp.52-55
- [16] Melans, N.; Blanpain, B.; Wollants, P.; A phase field model for the simulation of grain growth in materials containing finely dispersed incoherent second-phase particles; *Acta Materialia*, **2005**, 53, pp. 1771-1781
- [17] T L Huang et. al.; IOP Conf. Ser.: *Mater. Sci. Eng.*, **2015**, 89, 012028
- [18] Anderson, M.P; Srolovitz, G.S.; Grest, G.S.; Sahni, P.S.; Computer simulation of grain growth - I. Kinetics; *Acta metall.*, **1984**, Vol.32, No.5, pp. 783-791
- [19] Moelans, N.; Wendler, F.; Nestler, B.; Comparative study of two phase-field models for grain growth; *Computational Materials Science*, **2009**, 46, pp. 479-490
- [20] Fausty, J.; Bozzole, N.; Munoz, D.P.; Bernacki, M.; A novel level-set finite element formulation for grain growth with heterogeneous grain boundary energies; *Materials and Design*, **2018**, 160, pp. 578-590

- [21] Mellbin, Y.; Hallberg, H.; Ristinmaa, M.; An extended vertex and crystal plasticity framework for efficient multiscale modeling of polycrystalline materials; *International Journal of Solids and Structures*, **2017**, 125, pp. 150-160
- [22] Raghavan, S.; Shay, S.S.; Modeling the grain growth kinetics by cellular automaton; *Material Science and Engineering*, **2007**, 445-446, 203-209
- [23] Anderson, M.P.; Grest, G.S.; Srolovitz, J.; Grain growth in three dimensions: A lattice model; *Scripta Metallurgica*, **1985**, Vol. 19, pp. 225-230
- [24] Raabe, D.; Scaling Monte Carlo Kinetics of the Potts Model using rate theory; *Acta Mater.*, **2000**, 48, 1617-1628
- [25] Zöllner, D.; Influence of the local topology on the von Neumann-Mullins-relation; *Computational Materials Science*, **2017**, 137, 67-74
- [26] Zöllner, D.; Zlotnikov, I.; Modelling texture dependent grain growth by 2D Potts model simulations: A detailed analysis; *Computational Material Science*, **2018**, 155, 180-196
- [27] Zöllner, D.; Rios, P.R.; On the topology and size advantage of potentially abnormal grains; *Computational Materials Science*, **2018**, 153, 382-391
- [28] Chen, L.Q.; Phase-Field Models for microstructure evolution; *Annu.Rev.Mater.Res.*, **2002**, 113-40
- [29] Fan, D.; Geng, C.; Chen, L.Q.; Computer simulation of topological evolution in 2-D grain growth using a continuum diffuse-interface field model; *Acta.Mater.*, **1997**, Vol. 45, No.3, pp. 1115-1126
- [30] Liu, Y; Militzer, M.; Perez, M.; Phase Field Modelling of Abnormal Grain Growth; *materials*, **2019**, 12, 4048
- [31] Jamshidian, M.; Zi, G.; Rabczuk, T.; Phase field modeling of ideal grain growth in a distorted microstructure; *Computational Materials Science*, **2014**, 95, 663-671
- [32] Osher, S.; Sethian, J.A.; Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations; *Journal of computational Physics*, **1988**, 79, 12-49

- [33] Sethian, J.A.; Level Set Methods: Evolving interfaces in geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science; *Cambridge University Press*, **1996**, ISBN: 0-521-57202-9, pp. 3-18
- [34] Mießen, C.; Liesenjohann, M.; Barrales-Mora, L.A.; Shvindlerman, L.S.; Gottstein, G.; An advanced level set approach to grain growth - Accounting for grain boundary anisotropy and finite triple junction mobility; *Acta Materialia*, **2015**, 99, 39-48
- [35] Mellbin, Y.; Hallberg, H.; Ristinmaa, M.; An extended vertex and crystal plasticity framework for efficient multiscale modeling of polycrystalline materials; *International Journal of Solids and Structures*, **2017**, 125, pp. 150-160
- [36] Barrales Mora, L.A.; 2D vertex modeling for the simulation of grain growth and related phenomena; *Mathematics and Computers in Simulation*, **2010**, 80, 1411-1427
- [37] Liu, Y.; Baudin, T.; Penelle, R.; Simulation of normal grain growth by cellular automata; *Scripta materialia*, **1996**, Vol.34, No.11, pp. 1679-1683
- [38] Vichinac, G.Y.; Disorder systems and biological organization; *Springer Verlag Berlin Heidelberg*, **1986**, ISBN:978-3-642-82659-7, pp.3-20
- [39] Raghavan, S.; Sahay, S.S.; Modeling the topological features during grain growth by cellular automaton; *Computational Materials Science*, **2009**, 46, 92-99
- [40] He, Y.; Ding, H.; Liu, L.; Shin, K.; Computer simulation of 2D grain growth using a cellular automata model based on the lowest energy principle; *Materials Science and Engineering*, **2006**, A 429, 236-246
- [41] Smith, C.S.; *Trans. Am. Soc. Met.*, **1953**, 45, 533
- [42] Palmer, M.; Rajan, K.; Glicksman, M.; Fradkov, V.E.; Nordberg, J.; Two-Dimensional grain growth in rapidly solidified Succinonitrile films; *Metallurgical and Materials Transactions A*; **1995**, Volume 26A, 1061-1066

- [43] Syha, M.; Weygand, D.; A generalized vertex dynamics model for grain growth in three dimensions; *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **2010**, 18, 19pp.
- [44] Ivasishin, O.M.; Shevchenko, S.V.; Vasiliev, N.L.; Semiatin, S.L.; 3D Monte-Carlo simulation of texture-controlled grain growth; *Acta Materialia*, **2003**, 51, pp.1019-1033
- [45] Yang, Z.; Sista, S.; Elmer, J.W.; Debroy, T.; Three dimensional Monte Carlo simulation of grain growth during GTA welding of titanium; *Acta mater.*, **2000**, 48, pp.4813-4825
- [46] Bernacki, M.; Resk, H.; Coupez, T.; Loge, R.E.; Finite element model of primary recrystallization in polycrystalline aggregates using a level set framework; *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **2009**, 17, 22pp.
- [47] Krill III, C.E.; Chen, L.Q.; Computer simulation of 3-D grain growth using a phase field model; *Acta Materialia*, **2002**, 50, pp. 3057-3073
- [48] Janssens, K.G.F.; Random, grid, three dimensional, space-time coupled cellular automata for the simulation of recrystallization and grain growth; *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **2003**, 11, 157-171
- [49] Lepinoux, J.; Weygand, D.; Verdier, M.; Modeling grain growth and related phenomena with vertex dynamics; *C. R. Physique*, **2010**, 11, 265-273
- [50] He, Z.; Sha, Y.; Shan, N.; Gao, Y.; Lei, F.; Zhang, F.; Zuo, L.; Secondary Recrystallization Goss Texture Development in a Binary  $Fe_{81}Ga_{19}$  Sheet Induced by Inherent Grain Boundary Mobility; *Metals*, **2019**, 9, 1254
- [51] Gamsjäger, E.; Ogris, D.M.; Svoboda, J.; Kinetics of grain boundary networks controlled by triple junction and grain boundary mobility; *Metals*, **2018**, 8, 977
- [52] Maalekian, M.; Radis, R.; Militzer, M.; Moreau, A.; Poole, W.J.; In situ measurement and modelling of austenite grain growth in a Ti/Nb microalloyed steel; *Acta Materialia*, **2012**, 60, 1015-1026
- [53] Bhattacharyya, M.; Langlier, B.; Zurob, H.S.; Effect of solute Nb on grain growth in Fe-30 Pct Mn steel; *Metall. Mater. Trans. A*, **2019**, 50, 3674-3682

- [54] Gottstein, G.; Shvindlerman, L.S.; Triple junction drag and grain growth in 2D polycrystals; *Acta materialia*, **2002**, 50, 703-713
- [55] Graux, A.; Cazottes, S.; De Castro, D.; San Martin, D.; Capdevila, C.; Cabrera, J.M.; Molas, S.; Schreiber, S.; Mirkovic, D.; Danoix, F.; Bugnet, M.; Fabregue, D.; Perez, M.; Precipitation and grain growth modelling in Ti-Nb microalloyed steels; *Materialia*, **2019**, 5, 100233
- [56] Fiji; Available online: <https://imagej.net/Fiji>; 25.9.2019
- [57] Zöllner, D.; Rios, P.R.; Investigating the von Neumann-Mullins relation under triple junction dragging; *Acta Mater.*, **2014**, 70, 290-297
- [58] Esterl, R.; Gschöpf, B.; Schnitzer, R.; Influence of V and Nb micro-alloying on direct quenched and tempered ultra-high strength steels; *steel research int.*, **2019**, 90, 800640