



Franz Roters

Su Leen Wong

Max-Planck-Institut für Eisenforschung

### Ziele 3. Phase

#### Inhalt

- Durchführung von Repräsentativen Volumen Element (RVE) Simulationen um die komplexe Wechselwirkung des Modells mit anderen Feldern zu verstehen
- Anwendung der Modelle auf komplexe Mikrostrukturen
- Bereitstellung konstitutiver Modelle für andere TPs

#### Methoden

- Hochwertige mechanische konstitutive Modelle, analytische und Kristallplastizitäts Formulierungen
- Zusätzliche globale Felder, Temperatur, Schädigung, Diffusion, für multi-Physik-Simulationen
- Schnelle Spektrallöser für hochaufgelöste stark gekoppelte Systeme

#### Input

- **A1, A2** ab initio Enthalpien
- **A3** thermodynamische Daten (SFE)
- **A5** Mechanismenkarten
- **B2** Rückfederungsverhalten
- **B4, B6** Textur Daten
- **B6** Fließkurven
- **C1** experimentelle SFE
- **C2** mechanische Daten (global)
- **C3** mechanische Daten (lokal)
- **C6** Schädigungsmodelle
- **C10** Mikrostrukturdaten, Verformungsmechanismen

**Multifeld Mikromechanik**

*Active Verformungsmechanismen: Versetzungen, Zwillinge, Phasentransformation*

*Dehnungs-/Spannungs-Partitionierung: Mehrphasige Kristallplastizität*

*H Diffusion*

*Zweiphasige Mikrostruktur*

*H-stabilisierte, thermisch aktivierte Leerstellen-Kondensation und Porenbildung*

*Thermo-mechanische Kopplung*

#### Output

- Plastisches Verhalten → **A9**
- Konstitutives Modell → **B2, B6, C6**
- Versetzungsdichten → **B4**
- Anisotropie Daten → **C2**

#### Ziele/Impact

- Überbrückung der Lücke zwischen Atomistik und Kontinuumsmechanik durch konstitutive Modelle
- Beitrag zum besseren Verständnis der Verformung von hoch Mangan Stählen unter komplexen Belastungen
- Bereitstellung eines universellen Werkzeugs für Multifeld Mikromechanik:

DAMASK - The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit is free software licensed under the terms of the GNU General Public License.

damask.mpie.de

#### Arbeitspakete

- Berücksichtigung des Einflusses von Wasserstoff im konstitutiven Modell
- Durchführung thermo-mechanisch gekoppelter Simulationen
- Erzeugung von RVEs für multiphasen Mikrostrukturen
- Implementierung eines Schädigungsmodells (TP C6)
- Untersuchung der Rückfederung von hoch Mangan Stählen