Verformungsinduzierte Strukturänderungen bei amorphem $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$ in Molekulardynamik-Simulationen

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultäten
der Georg-August-Universität zu Göttingen

Vorgelegt von
Kevin Brinkmann
aus Bückeburg

Göttingen 2006

D7

Referent:	Prof. Dr. H. Teichler
Korreferent:	Prof. Dr. K. Samwer
Tag der mündlichen Prüfung:	31. 10. 2006

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis **iv**

Tabellenverzeichnis **vi**

1. Einleitung **1**

2. Plastische Verformung metallener Gläser **6**

2.1. Herstellung metallener Gläser 6
2.2. Aspekte zum Glasübergang 10
2.3. Mechanische Eigenschaften 14

3. Modell und Methoden **21**

3.1. Molekulardynamik-Simulationsmethode 21
3.2. Beschreibung von amorphem NiZr 22
3.3. Realisierung virtueller Verformungen 24
3.3.1. Verformung mit vorgegebenen Spannungen 25
3.3.2. Verformungen mit vorgegebener Scherrate 26
3.4. Herstellung der Ausgangsproben 27
3.5. Größen zur Beschreibung des Systems 28
3.5.1. Partielle radiale Verteilungsfunktionen 28
3.5.2. Wendt-Abraham-Parameter und potenzielle Energie 30
3.5.3. Atomare Charakteristika 31
3.6. Auswertemethoden 40
3.6.1. Berechnung von Spannungen und Dehnungen 40
3.6.2. Signifikanztests 42
3.6.3. Korrelationsanalyse 47
3.6.4. Methoden zur Analyse des Materietransports 49

4. Simulationen zur plastischen Verformung **55**

4.1. Vorbemerkungen 55
4.2. Die Spannungs-Dehnungs-Kurve 55
4.2.1. Abhängigkeit von der Temperatur 56

4.2.2. Abhängigkeit von der Verformungsrate 58
4.2.3. Abhängigkeit von der Verformungsebene 59
4.2.4. Abhängigkeit von der Systemgröße 60
4.2.5. Bestimmung von η, G und n 61
4.3. Untersuchung der Topologieänderungen 62
4.3.1. Räumliche Verteilung von Atomen mit massiven Topologieänderungen . 64
4.3.2. Atomare Eigenschaften unterschiedlicher Atomgruppen 72
4.3.3. Bewertung der atomaren Eigenschaften unterschiedlicher Atomgruppen 85
4.4. Verformungsverhalten vorverformter Proben 99
4.4.1. Nachverformung mit konstanter äußerer Scherspannung 100
4.4.2. Richtungsänderung/Scherebenenänderung im dynamischen Scherversuch 103
4.4.3. Einfluss der Topologieänderung auf nachfolgende Umlagerungen 106
4.5. Abschließende Bemerkungen 118

5. Simulationen zur Langzeit-Relaxation 126
5.1. Vorbemerkungen 126
5.2. Startkonfigurationen der Langzeitsimulationen 127
5.3. Ergebnisse der Langzeitsimulationen 128
5.3.1. Zeitliche Entwicklung der potenziellen Energie 128
5.3.2. Zeitliche Entwicklung des Systemvolumens 130
5.4. Vergleich mit Daten von abgeschreckten Hochtemperaturkonfigurationen . . . 132
5.4.1. Zeitliche Entwicklung der potenziellen Energie 132
5.4.2. Zeitliche Entwicklung des Volumens 133
5.5. Abschließende Bemerkungen 133

6. Diskussion der Ergebnisse 136
6.1. Verformung im amorphen $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$ 136
6.2. Phänomenologie der Spannungs-Dehnungs-Kurven 138
6.3. Zur Deutung der Spannungs-Dehnungs-Kurven 139
6.4. Übergang von newtonschem zu nicht-newtonschem Fließen 141
6.5. Ausbildung von Scherbändern in Computersimulationen 148
6.6. Versagenskriterien für metallische Gläser 152

7. Zusammenfassung 155

A. Tensorinvarianten 157

B. Herleitung der Form des Dehnungsratentensors 160

C. Berechnung der Größen zur Topologieuntersuchung **162**

D. Anderson-Darling Test für die atomaren Charakteristika **164**

E. Ergebnisse der Signifikanztests für verschiedene Scherungen **167**

E.1. $\lambda_1 = 3$ und $\lambda_2 = 1$ 167

E.2. $\lambda_2 = 2$ und $\lambda_2 = 2$ 183

Literaturverzeichnis **198**

Abbildungsverzeichnis

2.1. Schematischer Verlauf der intermediären Streufunktion. 13

3.1. Potenzialverlauf für das $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System 23
3.2. Temperatur gegen Zeit für $N = 5184$ und $N = 17500$ 27
3.3. $g_{\mathrm{AB}}(r)$ für die Ausgangsproben 29
3.4. Wendt-Abraham-Parameter der Ausgangsproben 31
3.5. Zusammenhang zwischen $R_{WA}(T)$ und $E_{pot}(T)$ 31
3.6. Verteilung und Mittelwert der pot. Energien von Ni und Zr 33
3.7. Verteilung und Mittelwerte der Atomvolumina von Ni und Zr 35
3.8. Verteilung und Mittelwerte der Q_4-Ordnungsparameter von Ni und Zr 36
3.9. Verteilung und Mittelwerte der Q_5-Ordnungsparameter von Ni und Zr 37
3.10. Verteilung und Mittelwerte der Q_6-Ordnungsparameter von Ni und Zr 37
3.11. Verteilung und Mittelwerte der φ_i^p von Ni und Zr 39
3.12. Verteilung und Mittelwerte der φ_i^τ von Ni und Zr 39
3.13. Schematische Darstellung von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ 51
3.14. Anteil von Atomen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 0$ 52
3.15. Anteil von Atomen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 0, 1, 2, 3, 4, 5, >= 6$ bei 700 K 53
3.16. Anteil von Atomen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 0, 1, 2, 3, 4, 5, >= 6$ bei 1000 K 53

4.1. Spannungs-Dehnungs-Kurve zur Erläuterung grundlegender Begriffe 56
4.2. Spannungs-Dehnungs-Kurven: T-Abhängigkeit 57
4.3. Spannungs-Dehnungs-Kurven: $\dot{\epsilon}$-Abhängigkeit 58
4.4. Spannungs-Dehnungs-Kurven: Richtungs-Abhängigkeit 60
4.5. Spannungs-Dehnungs-Kurven: Systemgrößen-Abhängigkeit 61
4.6. Dehnungsmarken für die Berechnung von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ 64
4.7. Atome mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) > 4$ oder $= 0$ für 700 K 65
4.8. Atome mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) > 4$ oder $= 0$ für 810 K 66
4.9. Atome mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) > 4$ oder $= 0$ für 1000 K 67
4.10. Atome mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) > 4$ oder $= 0$, $N = 17500$, $T = 700$ K, $\dot{\epsilon} = 10.0$ %/ns . . . 69
4.11. Atome mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) > 4$ oder $= 0$ für 700 K und $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns 70
4.12. Atome mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) > 4$ oder $= 0$ für 700 K und $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns 70

4.13. Atome mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau,t) > 4$ oder $= 0$ für 1000 K und $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns 71
4.14. Atome mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau,t) = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5$ für 700 K und $\dot{\epsilon} = 10$ %/ns 71
4.15. Räumliche Verteilung von λ_i^{Zr} 73
4.16. Atomare Eigenschaften unterschiedlicher Atomgruppen 74
4.17. Mittlere potenzielle Energie unterschiedlicher Atomgruppen 87
4.18. Mittleres Voronoivolumen unterschiedlicher Atomgruppen 89
4.19. Q_4-Parameter unterschiedlicher Atomgruppen 91
4.20. Q_5-Parameter unterschiedlicher Atomgruppen 93
4.21. Q_6-Parameter unterschiedlicher Atomgruppen 94
4.22. φ_i^p unterschiedlicher Atomgruppen 95
4.23. φ_i^τ unterschiedlicher Atomgruppen 97
4.24. Wendt-Abraham-Parameter unterschiedlicher Atomgruppen 99
4.25. Kriechkurven vorverformter Konfigurationen bei 700 K 102
4.26. Verformungszyklen für 700 K und 1000 K 105
4.27. Hauptspannungen bei Richtungsänderung im dyn. Scherversuch 106
4.28. Atome mit Topologieänderungen bei Verformungszyklen 109
4.29. Topologieänderungen rückverformter Proben bei Nachverformung mit $\dot{\epsilon} = \mathrm{const}$ 110
4.30. Topologieänderungen bei dyn. Scherversuch mit Änderung der Scherebene . . 110
4.31. Topologieänderungen im Kriechversuch, Proben bei $\dot{\epsilon} = \mathrm{const}$ vorverformt . . . 111
4.32. Spannung gegen Zeit für 700 K und 1000 K 119
4.33. Atome mit Topologieänderungen. Hin- und Rückverformung 120
4.34. Zusammenstellung der Unterschiede atomarer Eigenschaften 122

5.1. Auswahl der Startkonfigurationen für die Langzeitsimulationen 127
5.2. Potenzielle Energie bei den Langzeitsimulationen 128
5.3. Abfall der pot. Energie bei den Langzeitsimulationen 129
5.4. Normiertes Volumen bei den Langzeitsimulationen 131
5.5. Potenzielle Energie abgeschreckter Konfigurationen 132
5.6. Potenzielle Energie nach Scherratenreduktion auf 0 %/ns 134

6.1. Viskosität in Abhängigkeit von der Scherrate 143
6.2. Topologieänderungen für $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns bei 1000 K 145
6.3. Topologieänderungen für $\dot{\epsilon} = 0.01$ %/ns bei 1000 K 146
6.4. Vergleich von λ_i^{Zr} und D_{min}^2 150
6.5. Vergleich von λ_i^{Zr} und E_{pot} 151
6.6. Zusammenhang zwischen Streckgrenze und Schermodul 154

B.1. Scherdehnung gegen Zeit, unterschiedliche Rate 161

Tabellenverzeichnis

2.1. Herstellungsverfahren konventioneller metallischer Gläser 6

3.1. Koeffizienten des Wechselwirkungspotenzials 23
3.2. Parameter für den Volumengasterm 24
3.3. Mittlere Anzahl nächster Zr-Nachbarn 51

4.1. Ergebnisse für η, G und n 63
4.2. Resultate der Signifikanztests für eine Beispielsimulation ($(3,1)$ bzw. $(2,2)$) . 76
4.3. Resultate der Signifikanztests für eine weitere Simulation ($(3,1)$ bzw. $(2,2)$) . 78
4.4. Daten der Referenzproben für die Kriechexperimente 101
4.5. Bedingte Wahrscheinlichkeiten für Prozess 1 113
4.6. Bedingte Wahrscheinlichkeiten für Prozess 2 114
4.7. Bedingte Wahrscheinlichkeiten für Prozess 3 115
4.8. Bedingte Wahrscheinlichkeiten Weiterverformung mit $\sigma = const$ 116
4.9. Korrelationskoeffizienten aus Korrelationstest zwischen $\bar{\lambda}_i^{\mathrm{Zr}}(Z_1)$ und $\bar{\lambda}_i^{\mathrm{Zr}}(Z_2)$ . . 117

5.1. Anpassparameter der Gln. (5.1) und (5.2) 130

6.1. Anpassparameter der Gln. (6.1) 143

D.1. Testresultate Anderson-Darling-Test 165

E.1. Simulationparameter für $\lambda_1 = 3$ und $\lambda_2 = 1$ 168
E.2. Resultate der Signifikanztests für $E_{pot,i}$ Ni 169
E.3. Resultate der Signifikanztests für $E_{pot,i}$ Zr 170
E.4. Resultate der Signifikanztests für $\mathcal{V}_i$ Ni 171
E.5. Resultate der Signifikanztests für $\mathcal{V}_i$ Zr 172
E.6. Resultate der Signifikanztests für Q_4 Ni 173
E.7. Resultate der Signifikanztests für Q_4 Zr 174
E.8. Resultate der Signifikanztests für Q_5 Ni 175
E.9. Resultate der Signifikanztests für Q_5 Zr 176
E.10. Resultate der Signifikanztests für Q_6 Ni 177
E.11. Resultate der Signifikanztests für Q_6 Zr 178

E.12. Resultate der Signifikanztests für φ_i^p Ni 179
E.13. Resultate der Signifikanztests für φ_i^p Zr 180
E.14. Resultate der Signifikanztests für φ_i^τ Ni 181
E.15. Resultate der Signifikanztests für φ_i^τ Zr 182
E.16. Simulationparameter für $\lambda_1 = 2$ und $\lambda_2 = 2$ 183
E.17. Resultate der Signifikanztests für $E_{pot,i}$ Ni 184
E.18. Resultate der Signifikanztests für $E_{pot,i}$ Zr 185
E.19. Resultate der Signifikanztests für $\mathcal{V}_i$ Ni 186
E.20. Resultate der Signifikanztests für $\mathcal{V}_i$ Zr 187
E.21. Resultate der Signifikanztests für Q_4 Ni 188
E.22. Resultate der Signifikanztests für Q_4 Zr 189
E.23. Resultate der Signifikanztests für Q_5 Ni 190
E.24. Resultate der Signifikanztests für Q_5 Zr 191
E.25. Resultate der Signifikanztests für Q_6 Ni 192
E.26. Resultate der Signifikanztests für Q_6 Zr 193
E.27. Resultate der Signifikanztests für φ_i^p Ni 194
E.28. Resultate der Signifikanztests für φ_i^p Zr 195
E.29. Resultate der Signifikanztests für φ_i^τ Ni 196
E.30. Resultate der Signifikanztests für φ_i^τ Zr 197

1. Einleitung

Gläser begleiten den Menschen in seiner Geschichte seit Jahrtausenden. Ist in der Vorzeit zunächst der natürliche Obsidian als scharfkantiges Werkzeug, wohl aber auch als Schmuck von Bedeutung, wird schon früh die Technik der künstlichen Glasherstellung entwickelt. Es gilt als unumstritten, dass erste Beschreibungen dazu bereits in der Bibliothek des Assur-Bani-pal[1] zu finden sind. Frühe Beispiele sind auch die berühmten etruskischen Trinkgefäße aus der vorrömischen Zeit. Die damals aus Glas hergestellten Gegenstände dienten weitgehend dekorativen Zwecken. Hinzu kam die Herstellung von Behältnissen aller Art. Als technische Anwendungen sind vor allem die optischen Linsen im späten Mittelalter und zu Beginn der Neuzeit zu erwähnen.

Die damals verwendeten Gläser sind die auch heute noch gemeinhin als *Glas* bekannten Silikat-Gläser (SiO_2 mit Zusätzen), zu welchen unter anderem das jedem vertraute Fensterglas gehört [1]. Die Herstellung von Gläsern, die auf metallischen chemischen Elementen aufbauen, gelang Kramer in den 1930er Jahren (z. B. [2]) durch Kondenstation aus der Dampfphase, und später, Ende der 1950er, Anfang der 1960er Jahre Duwez [3, 4] durch Abschrecken einer Legierungsschmelze. Diese Experimente kennzeichnen den Beginn der wissenschaftlichen Untersuchung von Gläsern bestehend aus Metallen, welche den Weg für eine Vielzahl von Anwendungsmöglichkeiten geebnet haben. Die Anwendungen beruhen auf den besonderen physikalischen Eigenschaften der neuen Materialgruppe — bezeichnet als *metallene* bzw. *metallische Gläser* oder *amorphe Metalle* —, welche maßgeblich durch deren Elektronenstruktur und atomare Anordnung gegeben sind: Metallische Gläser zeichnen sich im Gegensatz zu kristallinen (metallenen) Materialen durch das Fehlen einer periodischen Anordnung der Atome aus. Hervorzuheben sind die elektromagnetischen Eigenschaften [5, 6, 7, 8] und die bemerkenswerten mechanischen Eigenschaften [5, 6, 9, 10]: Metallene Gläser zeigen eine überaus große Härte, die über der von stark gehärteten Stählen liegen kann, wobei zum Erreichen dieser hohen Härtewerte nicht einmal eine besondere thermische Behandlung notwendig ist. Dazu kommt, dass sie sich durch Biegen sehr leicht verformen lassen, wie z. B. wickeln. Sie können, im Prinzip etwa wie Plastik, bei höheren Temperaturen in beliebige Formen gegossen werden, in denen kristalline Materialien nicht ohne weiteres herstellbar sind. Aufgrund der magnetischen Weichheit infolge fehlender Kristallanisotropie und fehlender Haftzentren für die Blochwände führen Polarisationswechsel in metallenen Gläsern zu einem geringen Ener-

[1] Assyrischer König 669 – 627 v. Chr., Gründer der Bibliothek von Ninive.

gieverlust, was eine Verarbeitung zu qualitativ hochwertigen Transformatorblechen gestattet. Weiterhin sind die Oberflächen metallener Gläser aufgrund der fehlenden kristallinen Struktur im Allgemeinen sehr glatt, sodass bei diesen Materialien eine hohe Abriebfestigkeit vorhanden ist. In Verbindung mit den magnetischen Eigenschaften geeigneter Gläser erlaubt dies z. B. die Herstellung von langlebigen Tonköpfen. Die zusätzliche Korrosionsbeständigkeit, die auch eine Folge der glatten Oberflächen ist, macht den Einsatz mechanischer Bauteile aus metallischen Gläsern in aggressiven Umgebungen möglich, etwa als Autoventile [5].

Die Struktur metallischer Gläser, die als *ungeordnet* oder *flüssigkeitsähnlich* beschrieben werden kann, entzieht sich der direkten experimentellen Abbildung, z. B. mit Hilfe elektronenmikrospischer Darstellungen, aufgrund fehlender Fernordnung. Informationen erhält man im Wesentlichen aus Streuexperimenten (als Mittelwerte über relativ große Volumenbereiche) in Form des Strukturfaktors oder seiner Fouriertransformierten, der radialen Verteilungsfunktion, in jüngster Zeit aber auch aus Abbildungen im Ortsraum mit der tomographischen Atomsonde [11, 12, 13]. Die Streuexperimente zeigen, dass metallene Gläser trotz fehlender kristalliner Struktur eine stark ausgeprägte Nahordnung (engl.: *short-range order*) aufweisen. Vorliegende Versuche, zum Verständnis der Struktur der metallischen Gläser beizutragen, gehen zurück auf die Beschreibungen der Flüssigkeitsstruktur im Bild der dichten zufälligen Packung harter Kugeln (engl: *dense random packing of hard spheres*) nach Bernal [14, 15]. Dieses Modell beschreibt monoatomare Systeme oder Legierungen mit wenig unterschiedlichen Atomgrößen der Legierungspartner und zusätzlich schwach ausgeprägter chemischer Nahordnung. Viele binäre metallische Glasbildner (insbesondere Metall-Metalloid) fallen aus dieser Kategorie heraus, sodass andere Beschreibungen wie die von Gaskell [16, 17] nötig sind, um deren Struktur zu verstehen. Von Gaskell stammt die Idee, dass diese Art Gläser aus lokalen strukturellen Einheiten (einem Zentralatom und seinen nächsten Nachbarn) aufgebaut sind, die die gleichen sterischen Beziehungen zueinander haben, wie die Einheiten in einer kristallinen Verbindung gleicher Zusammensetzung (und gleicher Elemente natürlich). Wie sich die strukturellen Einheiten zum Füllen des Raumes anordnen und damit eine Ordnung für mittlere Reichweiten (engl.: *medium-range order*) [18] erzeugen, ist eine noch nicht ausreichend geklärte Frage (z. B. [19]).

Das auch heute noch eingeschränkte Verständnis der Struktur der amorphen Festkörper führt zu einem unbefriedigenden Wissensstand über die atomistischen Grundlagen für die mechanischen Eigenschaften, speziell die Verformungseigenschaften, metallener Gläser. Die makroskopischen Charakteristika der Plastizität dieser Materialien sind dagegen lange bekannt und klassifiziert [20]. Es wird zwischen zwei Arten der Verformung unterschieden: i) Homogene Verformung für höhere Temperaturen und moderate Verformungsraten und ii) heterogene Verformung für geringere Temperaturen und größere Verformungraten. Treten Verformungen im homogenen Modus auf, ist kein Volumenbereich der Probe besonders ausgezeichnet und jeder

Teil der Probe ist an der Verformung nahezu gleichartig beteiligt. Die heterogene Verformung verläuft hingegen hauptsächlich innerhalb sehr kleiner Volumenbruchteile, den so genannten *Scherbändern*, ohne dass der Rest der Probe Anzeichen für eine Verformung aufweist.

Die gängigen Konzepte zur atomistischen Deutung des mechanischen Verhaltens und der Plastizität kristalliner Materialien sind auf die amorphen Metalle aufgrund ihrer Struktur kaum übertragbar. Plastisches Verhalten kristalliner Materialien basiert auf der Bewegung von Versetzungen, welche als Mikrostrukturelemente angesehen werden können, die als Abweichung vom idealen periodischen Kristallaufbau definert sind. Es wird im Allgemeinen nicht unterschieden, ob es sich um Metalle, Legierungen, Halbleiter, Ionenkristalle oder andere Hartstoffe wie Oxide, Karbide oder Nitride handelt [21, 22] (Ausnahmen sind Prozesse beim Korngrenzfließen in feindispersen poly- bzw. nanokristallinen Materialien). Versetzungen gehören zur Struktur realer kristalliner Phasen und beeinflussen maßgeblich den Zustand eines betrachteten Materials. Eine kristalline Probe kann unter äußerer Last z. B. seine inneren Spannungen durch Umlagerung von Versetzungen verringern. Der Einbau von zusätzlichen Versetzungen verändert unter anderem die Energie des Kristalls — aufgrund der Linienenergie der Versetzungen und ihrer Wechselwirkungen — und seine Entropie, weil die atomare Strukur in der Umgebung der Versetzungen eine Modifikation der Schwingungszustände erfährt.

Eine besondere Eigenschaft metallischer Gläser, die Änderungen innerhalb der amorphen Struktur hervorruft, wird seit langem diskutiert: Metallene Gläser, durch rasches Abschrecken hergestellt, sind Nichtgleichgewichts-Systeme, die das Phänomen der *strukturellen Relaxation* zeigen, eine durch irreversible atomare Umlagerungen getragene Optimierung der amorphen Struktur; alternativ wird der Begriff der *Alterung* verwendet. Viele Eigenschaften der metallischen Gläser hängen vom Grad der strukturellen Relaxation — dem *Alter* — der Probe ab. Zu nennen ist unter anderem eine Zunahme der Viskosität [9, 23] und der mechanischen Härte [24, 25] oder eine Verringerung der Diffufisionskonstanten [26, 27] und des elektrischen Widerstandes [28].

So wie die strukturelle Relaxation Auswirkungen auf die mechanischen Eigenschaften hat, ist umgekehrt eine Beeinflussung der amorphen Struktur infolge einer von außen aufgebrachten mechanischen Belastung möglich. Besonders offensichtlich ist eine Modifikation der Struktur in den Scherbändern, die sich beim heterogenen Verformungmodus ausbilden. Experimente zeigen, dass Bereiche mit hoher Scherbanddichte eine bevorzugte Ätzbarkeit [29, 30] aufweisen, einen im Vergleich zum unverformten Material geänderten Elektronenbeugungskontrast [31] haben und Hinweise auf eine geänderte Nahordnung [32, 33] liefern. Nicht ganz so offensichtlich ist eine Beeinflussung der Struktur bei homogener Verformung, wobei neue Experimente zum homogenen Fließen eines PdNiCuP-Systems von Heggen, Spaepen und Feuerbacher [34] stark darauf hinweisen, dass auch dieser Verformungsmodus wohl durch eine Modifizierung der Probenstruktur begleitet wird.

Vor diesem Hintergrund beschäftigt sich die vorliegende Arbeit mit den durch plastische Verformung in den metallischen Gläsern hervorgerufenen strukturellen Änderungen. Die Untersuchungen erfolgen mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen eines Modells mit den Parametern eines NiZr-Systems. Die Verwendung von Computersimulationen bietet die Möglichkeit, Eigenschaften und Prozesse zu studieren, welche experimentell nur schwer bzw. nicht mit dem notwendigen atomaren Auflösungsvermögen, oder noch gar nicht zugänglich sind. Ziel dieser Arbeit ist, ein vertieftes Verständnis über die Eigenschaftsänderungen während der plastischen Verformung am Beispiel des ausgewählten NiZr-Modells zu erhalten. Dieses Modell zeigt in Simulationen zu Phänomenen wie Glasübergang, Diffusion und Kristallisation gute Übereinstimmung mit Experimenten [35, 36, 37, 38]. Speziell soll der für das $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System im dynamischen Scherversuch[2] gefundene Übergang in den als *Fließzustand* bezeichneten niedrig viskosen Zustand leichterer Verformbarkeit [39, 40] näher betrachtet werden. Strukturell unterscheidet sich der Fließzustand von dem Systemzustand vor der Verformung durch eine erhöhte potentielle Energie und eine Abnahme der Nahordnung. Letztere wird durch den Wendt-Abraham-Parameter charakterisiert, der aus der radialen Verteilungsfunktion gewonnen wird[3]. Sowohl die geänderte Energie als auch der Wendt-Abraham-Parameter liefern als skalares Maß keinerlei räumliche Information. Daher bleibt in [39, 40] die Frage nach einem möglicherweise räumlich heterogen stattfindenden Übergang in den Fließzustand ungeklärt.

Da ein Zustandswechsel nachhaltig eine Topologieänderung erfordert, wird zum Auffinden etwaiger Heterogenitäten des Übergangs in den Fließzustand im dynamischen Scherversuch die Topologie der Atomanordnung und deren Änderungen analysiert. Der Vorteil der Betrachtung der Topologie im Gegensatz zur einfachen Analyse der atomaren Verschiebung ist, dass dabei die relativen Positionen der Atome zu ihren Nachbaratomen von Bedeutung sind. Diese werden nicht wie die Einzelatomverschiebungen durch eine Änderung der Simulationszellenabmessungen beeinflusst, die ihrerseits durch die simulierten Verformungen hervorgerufen wird. Die räumliche Verteilung der Atome und Atomgruppen mit unterschiedlich starken Änderungen der Topologie stellen ein geeignetes Maß dar, mesoskalische räumliche Heterogenitäten der *plastischen* Verformung des Systems unter Last zu charakterisieren. Eine Reihe von Eigenschaften des Systems, die den einzelnen Atomen zugeordnet werden können (potenzielle Energie, Käfigvolumen eines Atoms, Ordnungsparameter zur Charakterisierung der Geometrie der Atomanordnung in der nächsten Nachbarschale eines Atoms oder die auf ein Atom wirkenden Spannungen), werden im Weiteren herangezogen, um über statistische Analysen Unterschiede in der mikroskopischen Struktur der Atomgruppen mit unterschiedlicher Topologieänderung aufzuzeigen. Zusätzlich durchgeführte Simulationen zur Verformung bereits

[2] Die Verformung erfolgt als reine Scherung unter Vorgabe einer konstanten Scherrate.

[3] Er ist der Quotient aus den Werten des ersten Minimums und des ersten Maximums der radialen Verteilungsfunktion.

vorverformter Proben und die Analyse der Topologieänderungen für diese Simulationen sollen zudem zu einem tieferen Verständnis der in dem betrachteten Modell heterogen ablaufenden Verformungsprozesse beitragen.

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: Das zweite Kapitel beschäftigt sich mit grundlegenden Eigenschaften metallischer Gläser. Darunter fallen Aspekte zur Herstellung, zum Glasübergang sowie zu den mechanischen Eigenschaften. Im dritten Kapitel steht das Modell und die Simulationsmethode, sowie die für diese Arbeit relevanten Auswertemethoden im Mittelpunkt. Kapitel vier und fünf stellen die Ergebnisse unserer Simulationen und deren Auswertungen dar. Im sechsten Kapitel werden einige zentrale Ergebnisse mit Blick auf die Literatur diskutiert, bevor im siebten Kapitel eine Zusammenfassung folgt.

2. Plastische Verformung metallener Gläser

Dieses Kapitel bietet einen Überblick über Eigenschaften, spezielle Phänomene und Konzepte metallischer Gläser, die im Zusammenhang mit dieser Arbeit von Bedeutung sind.

2.1. Herstellung metallener Gläser

Metallene Gläser, auch als metallische Gläser oder amorphe Metalle bezeichnet, weil sie hauptsächlich (aber nicht ausschließlich) aus Metallen bestehen, sind Materialien, die im festkörperartigen Zustand keine langreichweitige kristalline Ordnung aufweisen. Bereits in den 1930er Jahren zeigen Experimente von Kramer, dass durch Kondensation aus der Dampfphase metallene Gläser erzeugt werden können (z. B. [2]), was den Weg ebnet für einen deutlich breiter gefassten Begriff Glas, unter den bis dahin einzig die Silikatgläser (das Fensterglas) fielen. In den 1950er Jahren konnten Buckel und Hilsch nichtkristalline Metalle durch Abschrecken einer Schmelze zu sehr tiefen Temperaturen erzeugen [41] und Ende der 1950er, Anfang der 1960er Jahre konnte Duwez durch schnelles Abkühlen von Legierungsschmelzen metallene Gläser auch bei Raumtemperatur stabilisieren [3, 4]. Neben der Methode des Abschreckens einer Schmelze oder der Kondensation eines Metalldampfes sind weitere Methoden zur Herstellung entwickelt worden. Die unterschiedlichen Techniken sind in Tabelle 2.1 kurz zusammengefasst.

Tabelle 2.1: Zusammenstellung der Verfahren zur Herstellung konventioneller metallener Gläser.

Methode	Beschreibung
Splat quench Technik	Eine geringe Menge einer Legierung wird in den flüssigen Zustand überführt und als Tropfen zwischen zwei massiven kalten Metallblöcken eingeklemmt. Mit dieser Methode können nur kleine unzusammenhängende Proben hergestellt werden [42].

Fortsetzung auf nächster Seite

Fortsetzung von vorheriger Seite	
Melt spinning Verfahren	Eine Schmelze der gewünschten Legierung wird unter Druck auf ein rotierendes Rad gespritzt und dadurch rasch abgekühlt. Es werden lange dünne Bänder erzeugt [3].
Kondensation aus der Dampfphase	Legierungspartner werden in einer UHV-Anlage zusammen verdampft und auf einem geeigneten Substrat kondensiert [41].
Laserschmelzen	Die Oberfläche einer massiven Probe wird mit einem Laser kurzzeitig aufgeschmolzen und sofort wieder abgekühlt. Die Ableitung der Wärme geschiet direkt über die Probe [43, 44].
Festkörperreaktion	Zwei oder mehrere Schichten von Reinelementen oder Legierungen werden auf einem Substrat übereinander aufgedampft. Beim Erhitzen diffundieren die Atome der Schichten ineinander, wobei es zu amporphen Zwischenschichten zwischen den kristallinen Schichten kommen kann [45].
Ionenzerstrahlen	Durch Ionenbeschuss können kleine Probenbereiche amorphisiert werden [46]. Die Atome werden aus der geordneten Lage herausgeschossen und die so entstehenden ungeordneten Bereiche können nicht mehr in die stabile kristalline Gleichgewichtslage relaxieren.
Mechanisches Legieren	Durch fortlaufendes Mahlen mehrerer reiner Elemente (oder unterschiedlicher Legierungen) in einer Kugelmühle zu ultrafeinem Pulver kann ein Materietransfer zwischen den einzelnen Elementen auftreten, der eine amorphe Verbindung zur Folge hat [47].
Mechanisches Mahlen	Eine intermetallische Verbindung zweier oder mehrerer Elemente wird in einer Kugelmühle gemahlen [48]. Durch das Mahlen werden im Kristall genügend Defekte induziert, sodass die Fernordnung weitestgehend abgebaut ist. Die amorphe Struktur hat dann gegenüber der kristallinen Phase mit eingebauten Defekten eine geringere freie Energie, sodass die Umwandlung in die amorphe Phase die freie Energie minimieren kann. Es ist kein Materietransfer zwischen einzelnen Pulverkomponenten nötig.

Unter den verschiedenen Herstellungsmethoden (Tabelle 2.1) ist die Herstellung eines Glases durch Abschrecken der Schmelze die bekannteste Methode. Dies zum einen, weil sie in

verwandter Form für die Wandlung einer Schmelze in einen Festkörper, nicht durch Abschrecken sondern durch langsames Abkühlen, bereits seit Jahrhunderten für die Herstellung von oxidischen Gläsern zum Einsatz kommt. Zum anderen weil sie eine sehr einfache Art der Herstellung ist. Im Vergleich dazu ist beispielsweise die Amorphisierung durch Festkörperreaktion [45] — ein Schlüsselexperiment um die thermodynamische Eigenständigkeit der glasartigen (metastabilen) Phase zu zeigen — durch einen zusätzlichen Aufwand bei der Herstellung der Ausgangslegierungsschichten gekennzeichnet.

Wird eine Metallschmelze genügend schnell abgekühlt, so spricht man von einem metallenen Glas, wenn die Viskosität einen, häufig angegebenen, Wert von 10^{13} poise = 10^{12} Pa s übersteigt. Der Glasübergang manifestiert sich in charakteristischen Änderungen extensiver thermodynamischer Größen wie dem Volumen oder der Entalphie mit abnehmender Temperatur, die sich vom Verhalten bei auftretender Kristallisation unterscheiden. Aus der Schmelze kommend, zeigt unter anderem das Volumen bei Temperaturverringerung eine kontinuierliche Abnahme. Tritt Kristallisation auf, macht das Volumen einen Sprung bei der Schmelztemperatur. Ist die Abkühlrate hoch genug, wird die Kristallisation vermieden, und das Volumen fällt mit gleichbleibender Rate. Man beobachtet meist bei einer je nach Abkühlrate unterschiedlichen Temperatur eine leichte Änderung in der Temperaturabhängigkeit der Volumenverringerung, was den Bereich der unterkühlten Schmelze (eine Schmelze unterhalb der Schmelztemperatur) vom Bereich des Glases abgrenzt. Dieser Knickpunkt, als kalorische Glastemperatur T_g bezeichnet, markiert einen Punkt an dem die Ableitung thermodynamischer Größen wie Volumen oder Entalphie nach der Temperatur einen Sprung aufweist. Der Glasübergang wird daher manchmal als thermodynamischer Phasenübergang zweiter Ordnung interpretiert (siehe z. B. [49]), was er aufgrund der Abhängigkeit von der Kinetik nicht ist. Die Glastemperatur ist keine feste Temperatur, sondern sie hängt ab von der Vorgeschichte oder den Abkühlbedingungen [50, 51].

Wie weiter oben bereits angedeutet, hat eine Schmelze bei Abkühlung zwei Möglichkeiten: i) Sie kristallisiert, oder ii) Kristallisation wird unterbunden und es entsteht ein amorpher Festkörper[1]. Die entscheidende Größe ist die Abkühlrate, die hoch genug sein muss, um die Nukleation von Kristallkeimen und deren Wachsen zu verhindern. Die kritische Abkühlrate — also die Kühlrate die nötig ist, um Kristallisation zu unterdrücken — hängt von der Komplexität der Kristallkeime ab: Es ist relativ schwierig für Polymere oder kovalent gebundene oxidische Schmelzen Nukleationskeime zu bilden, sodass für diese Stoffklassen geringe Abkühlraten ausreichen. Dahingegen sind die strukturellen Einheiten der Kristallbildung bei

[1] Im Prinzip gibt es noch die Möglichkeit, dass sich ein Gemisch aus Nanokristalliten und amorpher Phase bildet [52]. Dies wollen wir hier nicht genauer berücksichtigen.

metallische Schmelzen weniger komplex aufgebaut und die Diffusion der Atome kann deutlich höher sein[2], was sehr hohe Abkühlraten erforderlich macht.

Im Allgemeinen bestimmt die beim Abschrecken vorliegende Abkühlrate die charakteristischen Abmessungen der hergestellten metallischen Gläser. Ganz grob unterscheidet man zwischen einfachen (häufig nur binären) Legierungssystemen, die nur bei Abschreckraten in der Größenordnung von 10^3 K/s – 10^6 K/s amorph zu erhalten sind, und den oft aus drei oder mehr Komponenten zusammengesetzten Legierungen, die für die Herstellung in amorpher Form Abschreckraten in der Größenordnung von 1 K/s – 10^2 K/s erfordern. Erstere werden als *konventionelle Gläser* bezeichnet und sind nicht selten nur in Form extrem dünner Bänder (Mikrometer) herzustellen, letztere werden als Massivgläser (engl.: *bulk metallic glasses*) bezeichnet und weisen Abmessungen in allen drei Raumrichtungen in der Größenordnung von einigen Millimetern bis wenigen Zentimetern auf. Einige spezielle Beispiele sollen die in den vergangenen Jahren gelungenen Fortschritte bei der Verringerung der Kühlraten, und damit verbunden die Vergrößerung der hergestellten Gläser verdeutlichen:

Die $Au_{0.75}Si_{0.25}$-Legierung — welche im übrigen auch bei Raumtemperatur instabil ist —, hergestellt am Caltech [3], bei einer Kühlrate von 10^7 K/s, ist nur ein 10 µm dünner Film. Spätere palladiumbasierte Gläser, hergestellt durch Abschrecken in Wasser (Abkühlraten von 10^2 K/s bis 10^3 K/s) [54, 55, 56], liefern 1 mm bis 3 mm große Proben. Beide vorangegangenen Beispiele können als konventionelle Gläser angesehen werden. Weitere Steigerungen der Abmessungen durch aufwendigere Verfahren gelingen z. B. Drehman *et al.* [57], die bei Kühlraten von 1.4 K/s eine $Pd_{0.4}Ni_{0.4}P_{0.2}$-Probe mit 5.3 mm Durchmesser herstellen oder Kui *et al.* [58], die bei einer Abkühlrate von ungefähr 4 K/s eine 10 mm Dicke $Pd_{0.4}Ni_{0.4}P_{0.2}$-Probe erzeugen. Diese beiden Beispiele können durchaus schon zu den Massivgläsern gezählt werden.

Einen erneuten Sprung in den charakteristischen Abmessungen metallischer Gläser kennzeichnet die Entdeckung sehr leicht sogar auf Zentimeterskala herstellbarer Massivgläser Ende der 1980er Anfang der 1990er an der Tohoku Universität und am Caltech. Inoue und Mitarbeiter (Tohuku) untersuchen sytematisch die Herstellung drei- bis fünfkomponentiger Legierungen wie z. B. Mg-TM-Ln, Ln-Al-TM oder Zr-Al-TM (TM steht dabei für Übergangsmetall, von engl: **T***ransition* **M***etal*), die mit kritischen Kühlraten von 10^1 K/s bis 10^2 K/s Proben einer Dicke bis zu 1 cm herzustellen gestattet [59]. Peker und Johnson (Caltech) berichten von einer Familie von Massivgläsern basierend auf dem Zr-Ti-Cu-Ni-Be-System, zum Beispiel in der Zusammensetzung $Zr_{0.412}Ti_{0.138}Cu_{0.125}Ni_{0.1}Be_{0.225}$ (auch bekannt als Vitreloy 1) [60], was mit einer kritischen Kühlrate von 1 K/s in Stäben mit bis zu 5 cm Durchmesser hergestellt werden kann.

[2]Das führt selbst für die besten metallischen Glasbildner zu niedrigeren Viskositäten (bei normalisierter Temperatur T_g/T als die ihrer polymeren oder oxidischen Gegenstücke [53].

2.2. Aspekte zum Glasübergang

Die Glasbildung ist ein materialunspezifisches Phänomen, welches man für unterschiedliche Materialklassen wie oxidischen Gläsern, einigen Chalkogeniden, molekularen Systemen, Polymeren und Oligomeren, bei metallischen Legierungen, kolloidalen Lösungen, im übertragenen Sinne auch bei Spingläsern, Orientierungsgläsern und z. B. auch der Flußlinienverteilung in Supraleitern findet. Für technische Anwendungsmöglichkeiten sind metallische Gläser und andere glasbildende Materialien wie die polymeren Gläser in den letzten Jahren immer wichtiger geworden. Dennoch ist das Phänomen des Glasübergangs und die Natur des Glaszustandes bislang nur unvollständig verstanden [61, 62, 63, 64].

Gekennzeichnet ist der Glasübergang durch den Übergang der Flüssigkeit in einen amorphen Festkörper ohne das Auftreten von latenter Wärme. Er zeigt nicht die für strukturelle Phasenübergänge charakteristischen Symmetrieänderungen oder einen strukturellen Ordnungsparameter. Weiterhin sind wichtige Details, wie bereits oben erwähnt, z. B. die kalorische Glastemperatur, von der Abkühlrate abhängig. Der Glasübergang wird daher weniger als ein konventioneller Phasenübergang betrachtet. Vielmehr lassen sich verschiedene Aspekte besser verstehen, wenn der Glasübergang als ein Übergang in der dem System zugrunde liegenden Dynamik angesehen wird.

Die Literatur enthält eine Reihe von theoretischen Modellen, die zur Beschreibung der mit dem Glasübergang in Zusammenhang stehenden dynamischen Phänomene vorgeschlagen werden. Wichtige Beispiele sind die *Freie-Volumen-Theorie* nach Cohen und Turnbull [65, 66, 67] und ihre Erweiterungen nach Cohen und Grest [68, 69], das *Konfigurationsentropie-Modell* oder *CRR-Modell* nach Adam und Gibbs [70] bzw. Gibbs und DiMarzio [71] aus dem das Konzept der sich koopperativ umlagernden Bereiche (CRR, von engl.: *cooperatively rearranging regions*) stammt, das *Kopplungsmodell* nach Ngai [72, 73], das *Trapping-Diffusion-Modell* nach Odagaki [74] oder die *Modenkopplungstheorie*. Letztere wird von Leutheusser [75] und von Bengtzelius, Götze und Sjögren [76] unabhängig voneinander auf Grundlage der Moden-Kopplungstheorie für dichte Flüssigkeiten vorgeschlagen. Die typischen Beobachtungen, die mit den Modellen erklärt werden sollen beziehen sich auf die Temperaturabhängigkeit spezieller Eigenschaften wie der Scherviskosität oder den strukturellen Relaxationszeiten, aber auch die Zeitabhängigkeit von Antwortfunktionen, wie sie bei spektralen Untersuchungen der dielektrischen Suszeptibilität, der inelastischen Neutronenstreuung oder Lichtstreuung sichbar werden.

Eine wichtige Größe die mit den mechanischen Eigenschaften der metallischen Gläser in Verbindung steht und anhand derer die dramatische Verlangsamung der Dynamik beim Abkühlen der Schmelze deutlich wird, ist die Viskosität. Kriechexperimente bestätigen eine Zunahme um mehrere Größenordnungen beim Durchlaufen der Glasübergangsregion. Der analytische

Zusammenhang zwischen Temperatur und Viskosität ist für viele Gläser durch eine Vogel-Fulcher-Tammann-Beziehung (VFT), Gl. (2.1), gegeben.

$$\eta(T) = \eta_0 \exp\left(\frac{B}{T - T_0}\right) \tag{2.1}$$

In Gl. (2.1) bedeuten η_0, B und T_0 materialspezifische Konstanten. Kovalent gebundene Netzwerkgläser wie die Silikatgläser zeigen eher eine Arrhenius-Beziehung, Gl. (2.2), für die temperaturabhängige Viskosität.

$$\eta(T) = \eta_0' \exp\left(\frac{B'}{T}\right) \tag{2.2}$$

In Gl. (2.2) sind η_0' und B' materialspezifische Konstanten. Nach Angell [61] klassifiziert man Gläser als *stark*, wenn sie eine Arrhenius-Beziehung von $\eta(T)$ zeigen, als *fragil*, wenn eine VFT-Beziehung vorliegt.

Oben dargestellter empirischer Zusammenhang zwischen Temperatur und Viskosität ist eine Folgerung zweier bereits erwähnter Modelle. Zum einen liefert die Freie-Volumen-Theorie einen Zusammenhang der Form

$$\eta^{FV}(T) = \eta_0^{FV} \exp\left(\frac{\gamma v^*}{v_f(T)}\right). \tag{2.3}$$

Die Freie-Volumen-Theorie basiert auf der Annahme, dass jedem Atom ein Zusatzvolumen über den eigentlichen Platzbedarf hinaus zusteht, welches ohne Energieaufwand umgelagert werden kann. Atomare Umlagerungen treten auf, wenn das freie Volumen eines Atoms den kritischen Wert v^* übersteigt. $v_f(T)$ bedeutet das mittlere freie Volumen pro Atom der unterkühlten Schmelze, γ ist ein Faktor, der den Überlapp zwischen den Atomvolumina unterschiedlicher Atome berücksichtigt. Aus der Temperaturabhängigkeit des mittleren freien Volumens $v_f(T) = \alpha(T - T_0)v_0$ (α ist der thermische Ausdehnungskoeffizient und T_0 eine Temperatur, bei der das freie Volumen verschwindet) folgt dann die Beziehung (2.1).

Aus dem Entropie-Modell (CRR-Modell) folgt ein Zusammenhang zwischen Viskosität und Temperatur (eigentlich der Temperaturabhängigkeit einer den Relaxationsprozess charakterisierenden Zeit $\tau^{Entr}(T)$, die gemäß der Beziehung $\tau = \eta/G_\infty$ einen Zusammenhang zwischen Scherviskosität, Schermodul (bei hohen Frequenzen bestimmt) und Relaxationszeit herstellt):

$$\eta^{Entr}(T) = \eta_0^{Entr} \exp\left(\frac{C}{T\Delta S_c}\right). \tag{2.4}$$

Dabei ist C eine Konstante, welche die minimale Konfigurationsentropie Δs_c^* einer CRR und eine für ihre Aktivierung nötige Energie $\Delta\mu$ enthält. ΔS_c ist die Konfigurationsentropie der betrachteten unterkühlten Schmelze (genauer die Differenz der Entropie der unterkühlten

Schmelze und der der entsprechenden kristallinen Konfiguration), die aus Messungen der spezifischen Wärme erhalten werden kann. Würde sich die unterkühlte Schmelze immer im Gleichgewicht befinden, würde diese Entropie bei einer Temperatur T_K, der Kauzmann-Temperatur, Null werden [77]. Linearisierung von $T\Delta S_c(T)$ um T_K[3] liefert dann automatisch einen Zusammenhang vergleichbar mit Gl. (2.1) (eine genauere Herleitung geht von der speziellen Form der Differenz der spezifischen Wärmen $\Delta C_p(T)$ aus [78, 79]).

Die Erweiterung der Freie-Volumen-Theorie nach Cohen und Grest liefert einen Zusammenhang von Viskosität und Temperatur nach

$$\eta^{CG}(T) = \eta_0^{CG} \exp\left(\frac{D}{T - T_0 + [(T - T_0)^2 + AT]^{1/2}}\right). \tag{2.5}$$

Dies resultiert aus der statistischen Beschreibung des freien Volumens. Danach werden die lokalen Atomvolumina in *flüssigkeitsähnliche* oder *festkörperähnliche* Zellen geteilt, wobei flüssigkeitsähnliche Zellen ein mittleres Atomvolumen v größer als ein kritisches Volumen v_c besitzen, womit für diese Zellen ein freies Volumen $v_f = v - v_c$ vorliegt. Für Atome in festkörperartigen Zellen gilt $v < v_c$. Sie enthalten kein freies Volumen und können nur atomare Vibrationen ausführen. Das freie Volumen in den flüssigkeitsähnlichen Zellen soll wiederum ohne Energieaufwand umgelagert werden können. Basierend auf einer Perkolationstheorie wird die statistische Verteilung der Zellvolumina für Vorhandensein eines bestimmten Anteils an flüssigkeitsähnlichen Zellen bestimmt. Letzlich resultiert obiges Ergebnis für die Viskosität, welches aufgrund der speziellen Form sowohl Vogel-Fulcher-Verhalten (für höhere Temperaturen) als auch Arrhenius-Verhalten (für geringere Temperaturen) beschreiben kann. Außerdem gelingt es mit Hilfe der Erweiterung der Freie-Volumen-Theorie, das Relaxationsverhalten in glasbildenden Sytemen zu erklären [80]. Die Autoren finden, dass eine bereits 1854 von Kohlrausch eingeführte und von Williams und Watts auf dielektrische Relaxationen erweiterte Kohlrausch-Williams-Watts-Funktion (oder auch kurz nur Kohlrausch-Funktion) [81, 82]

$$R(t) = \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{\beta}\right] \tag{2.6}$$

gut geeignet ist, das Relaxationsverhalten von Gläsern in Abhängigkeit von der Zeit zu beschreiben.

Konzeptionell von den im Beispiel zur Viskosität vorgeführten Modellen verschieden ist die Modenkopplungstheorie (MCT, vom engl. Begriff *mode-coupling theory*). Sie charakterisiert den Glasübergang als einen Prozess, bei dem die Flüssigkeit bei einer kritischen Tem-

[3] Setze $\Delta S_c(T) = \kappa(T - T_K)$, dann gilt für $f(T) = T\Delta S_c(T)$ nah bei T_K: $f(T) \approx f(T_K) + f'(T_K) \cdot (T - T_K) = \kappa'(T - T_K)$, mit $\kappa' = \kappa \cdot T_K$.

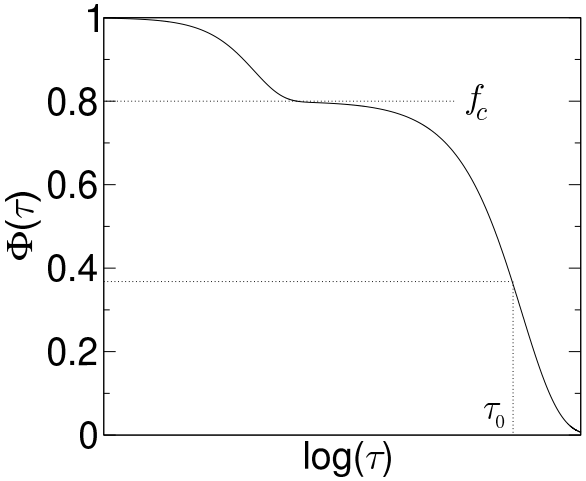

Abbildung 2.1: Schematischer Verlauf der intermediären Streufunktion.

peratur $T_c > T_g$ aus einem ergodischen in einen nicht-ergodischen Zustand übergeht. Diese Temperatur markiert einen Übergang von unkorrelierter Dynamik, typisch für stark wechselwirkende Flüssigkeiten, hin zu einer mehr und mehr kollektiven Dynamik typisch für Gläser. Vorhersagen liefert diese Theorie für die als intermediäre Streufunktion bezeichnete, sowohl in Computersimulationen aus den Atompositionen als auch in Experimenten durch Neutronenstreuung (Messung des dynamischen Strukturfaktors $S(\mathbf{q}, \omega)$ [83]) gut zugängliche, Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion $\Phi_{\mathbf{q}}(\tau)$ ($\mathbf{q}$ bedeutet hier den Wellenvektor). Dabei stellt die MCT die zentrale Aussage auf, dass für den Satz an Funktionen $\{\Phi_{\mathbf{q}}(\tau)\}$ ein geschlossenes System von Gleichungen existiert. Dieses Gleichungssystem ist sehr kompliziert und kann im Rahmen einer Näherung für nur einen Korrelator $\Phi(\tau)$ durch eine Integro-Differential-Gleichung (retardierte Oszillator-Gleichung) angegeben werden [62], worauf wir hier aber nicht weiter eingehen wollen. Aus dem schematischen Modell der Modenkopplungstheorie folgt unter anderem ein Skalengesetz, nach dem sich eine charakteristische Relaxationszeit, und damit dynamische Größen wie die Viskosität η, bei Abkühlung gegen die dynamische Glastemperatur T_c verhalten wie

$$\eta \sim |T - T_c|^{-\gamma} \,. \tag{2.7}$$

Der Vollständigkeit wegen sei hier noch auf die Form der intermediären Streufunktion eingegangen. Diese zeigt für unterkühlte Flüssigkeiten und Gläser einen zweistufigen Verlauf. Schematisch ist das in Abbildung 2.1 dargestellt. Der anfängliche Zerfall rührt von atomaren Vibrationen her. Darauf hin erfolgt das Einmünden in das Plateau der ersten *Stufe*, deren Höhe bei f_c liegt. Dieses Plateau und seine Umgebung wird als β-Regime bezeichnet. Den anschließenden asymptotischen Zerfall nennt man α-Prozess. Für große Zeiten, im Bereich des α-Prozesses, kann $\Phi(\tau)$ häufig sehr gut durch einen gestreckt exponentiellen Zerfall (wie

Gl. 2.6) angepasst werden [62]. Die dabei eingeführte charakteristische Relaxationszeit, τ_0, ist ein Maß für den Grad an strukturellem Arrest, den das System erreicht hat.

Ein unterschiedlicher Verlauf von $\Phi(\tau)$ je nach Zeitfenster wird für den Bereich des β-Regimes aus der Modenkopplungstheorie [62] vorhergesagt und z. B. von Kob und Anderson [84] bei MD-Simulationen für ein Lennard-Jones System gefunden. Für Zeiten $\tau \leq \tau_\beta \ll \tau_0$, im frühen β-Regime, liegt ein funktionaler Zusammenhang nach Gleichung (2.8) vor.

$$\Phi(\tau) = f_c + \frac{B}{\tau^a}. \tag{2.8}$$

Für wesentlich größere Zeiten, im späten β-Regime, $\tau \geq \tau_\beta$ (aber immer noch $\tau \ll \tau_0$) liegt das von-Schweidler-Gesetz nach Gleichung (2.9) vor.

$$\Phi(\tau) = f_c - C\tau^b. \tag{2.9}$$

Die Parameter a, b und β sind über den so genannten Exponenten-Parameter λ [62] über die Beziehungen nach Gleichung (2.10) verbunden.

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{\Gamma^2(1-a)}{\Gamma(1-2a)} = \frac{\Gamma^2(1+b)}{\Gamma(1+2b)} \\ \beta &= -\frac{\log 2}{\log(1-\lambda)} \end{aligned} \tag{2.10}$$

$\Gamma(x)$ stellt die aus der Mathematik bekannte Gamma-Funktion dar. Für die Auswertung von $\Phi(\tau)$ mit Bezug zur Modenkopplungs-Theorie siehe Teichler [85, 86] und Mutiara [87, 88].

2.3. Mechanische Eigenschaften

Nach allgemeinem Verständnis der Materialphysik wird das experimentell beobachtete Verhalten der Materialien bei (plastischer) mechanischer Verformung durch die atomare Struktur und durch mikrostrukturelle Elemente auf dieser Struktur, wie Versetzungen, bestimmt. Bei metallenen Gläsern oder allgemein bei amorphen Festkörpern liegt keine periodische atomare Anordnung wie bei einem Kristall vor. Die Konzepte, die für (ein-)kristalline Materialien herangezogen werden, um deren Verformungsverhalten zu deuten, beruhen weitgehend auf der Periodizität der Kristalle. Sie sind auf Gläser zumeist nicht übertragbar. Die regellose Atomanordnung in den Gläsern verbietet insbesondere die Beschreibung ihrer plastischen Verformung durch das Wirken von Versetzungen und Gleitsystemen, wie dies bei der Plastizität von Kristallen möglich ist [22].

Für die Beschreibung der makroskopischen elastischen Eigenschaften der Gläser ist die genaue Kenntnis der atomaren Struktur nicht entscheidend. Es wird, wie auch bei kristallinen Materialien, das Hook'sche Gesetz verwendet, welches eine direkte Proportionalität zwischen Spannung σ und Dehnung ϵ mit einer materialabhängigen elastischen Konstanten M nach Gleichung (2.11) voraussagt,

$$\sigma = M \cdot \epsilon. \tag{2.11}$$

Ein amorpher Festkörper ist im Wesentlichen isotrop, was bedeutet, dass die Anordnung seiner Bestandteile in allen Raumrichtungen gleich ist. Im Gegensatz dazu findet man bei Kristallen häufig Richtungen besonders großer Atompackungsdichte aber auch Richtungen mit geringerer Packungsdichte [22, 89]. Für isotrope Materialien kann das elastische Verhalten allein aus zwei elastischen Konstanten berechnet werden, z. B. aus dem Kompressionsmodul, Gl. (2.12), und dem Schermodul, Gl. (2.13), welche die Festigkeit bezüglich einer allseitigen Kompression bzw. einer Scherung festlegen [90],

$$B = -\left(\frac{d\epsilon_V}{dP}\right)^{-1}, \tag{2.12}$$

$$G = -\frac{1}{2}\left(\frac{d\epsilon}{d\tau}\right)^{-1}. \tag{2.13}$$

In den Gln. (2.12) und (2.13) bedeutet ϵ_V die Volumendehnung, die sich bei einem hydrostatischen Druck P einstellt, und ϵ die Dehnung, die aus einer Scherung mit der Spannung τ resultiert.

Elastische Verformung tritt unmittelbar bei Anlegen einer äußeren Spannung auf und ist reversibel. Neben den elastischen Verformungen, die als instantan auftretend anzusehen sind, gibt es auch bei den Gläsern Verformungen, die von der Zeit abhängen (bei Kristallen wird häufig von anelastischen Nachwirkungen gesprochen). Dabei ist zu unterscheiden, ob es sich um reversible oder irreversible zeitabhängige Formänderungen handelt. Reversible Formänderungen bilden sich bei Abschalten der Last zurück, wohingegen irreversible Verformungen bestehen bleiben. Letztere werden als plastische Verformungen bezeichnet.

Um die zeitabhängigen reversiblen, d. h. anelastischen Eigenschaften, der Gläser phänomenologisch zu beschreiben, werden (ähnlich wie bei der Beschreibung anelastischer Effekte in kristallinen Materialien) Erweiterungen des Hook'schen Gesetzes eingeführt [9]. Eine häufig benutzte Moodifizierung des Hook'schen Gesetzes ist

$$\frac{\sigma}{M_r} + \frac{\tau\dot{\sigma}}{M_u} = \epsilon + \tau\dot{\epsilon}. \tag{2.14}$$

Dabei ist τ eine charakteristische Relaxationszeit für das Anwachsen der anelastischen Dehnung ϵ nach Aufbringung einer Last σ. M_r gibt die Proportionalität zwischen Dehnung und Spannung für eine Zeit an, die wesentlich größer ist als die Relaxationszeit. M_u ist die Proportionalitätskonstante für Zeiten, die kleiner sind als die Relaxationszeit. Daraus erklären sich die Indizees r für relaxiert und u für unrelaxiert. Als Zeitabhängigkeit der Dehnung nach Aufbringung einer Last σ_0 erhält man als Lösung der Gleichung (2.14) einen Zusammenhang nach Gl. (2.15), wobei $\epsilon_0 = \sigma_0 M_u^{-1}$ und $\epsilon_{an} = \sigma_0(M_r^{-1} - M_u^{-1})$ gilt.

$$\epsilon(t) = \epsilon_0 + \epsilon_{an}(1 - \mathrm{e}^{-t/\tau}) \tag{2.15}$$

Mit Hilfe dieser Beziehung kann eine Messung der Dehnung auf direktem Weg zu einer Bestimmung der Relaxationszeit herangezogen werden (siehe z. B. [91]).

Anelastisches Verhalten bei metallenen Gläsern wird auf verschiedene Ursachen zurückgeführt. Es gibt eine thermoelastische Relaxation, die in praktisch jedem Material auftritt. Wird eine Probe periodisch komprimiert, so führt dies zu einer lokalen inhomogenen Erwärmung, die ihrerseits einen Wärmefluss nach sich zieht, wodurch elastische Verformungsenergie dissipiert wird [9]. Weiterhin führt in magnetisch geordneten Gläsern die Bewegung von Bloch- oder Neelwänden unter Einfluss einer äußeren Spannung in Proben mit Bereichen unterschiedlicher magnetischer Polarisation zu einem Energieverlust [9].

Das makroskopische plastische Verhalten metallischer Gläser kann ohne Blick auf die relevanten mikroskopischen Prozesse grundsätzlich in zwei verschiedene, gut voneinander zu unterscheidende Arten geteilt werden [92, 93]. Nahe der kalorischen Glastemperatur T_g und für geringe Verformungsraten wird die Verformung von jedem Volumenelement in gleicher Weise getragen, man spricht daher von homogener Verformung. Für geringere Temperaturen und/oder hohen Verformungsraten wird die Verformung hauptsächlich durch einige wenige, sehr schmale Bereiche, den so genannten Scherbändern getragen, die meist entlang von Ebenen maximaler Scherspannung orientiert sind. Diese Art der Verformung wird als inhomogene Verformung bezeichnet. Die Scherbänder können einen relativ großen Anteil an plastischer Verformung tragen, wodurch metallische Gläser oft eine hohe Duktilität bei Verformungen in Kompression, beim Biegen oder Walzen aufweisen. Bei Zugversuchen dagegen findet die Verformung meist innerhalb eines sich ausbildenden Scherbandes statt und die Probe geht ohne eine merkliche plastische Verformung zu Bruch. Charakteristisches Merkmal der Bruchkanten ist ein *Adernmuster* [28, 94, 30, 95].

Mikroskopische Prozesse und Modelle der plastischen Verformung

Die mikroskopischen Prozesse in Gläsern, die für die plastische Verformung von Bedeutung sind, sind bis heute nicht vollständig verstanden. Wie bereits erwähnt, fehlt den Gläsern die

langreichweitige Ordnung, sodass Mikrostrukturelemente wie die Versetzungen der Kristalle (deren Kinetik die Verformung in Kristallen bewirkt) nicht definiert werden können. Es ist daher konzeptionell sinnvoller, Plastizität in metallischen Gläsern als Folge von lokalen Scherprozessen anzusehen, von denen jeder einzelne eine geringe Anzahl von Atomen umfasst. Makroskopische Verformung ist in diesem Bild eine Folge von gleichzeitiger Anregung mehrerer lokaler Scherprozesse auf Ebenen maximaler Scherspannung.

Spaepen und Turnbull [96] nehmen an, dass die *Scherdefekte* in Gläsern kleine, schwer zu identifizierende Atomgruppen sind, welche die Fähigkeit zu einem elementaren Scherprozess besitzen, vorausgesetzt es existiert ein gewisser Anteil an freiem Volumen im Bereich der betreffenden Atomgruppe. Bereits sehr früh durchgeführte Modellverformungen wie die an Seifenschaumblasen von Argon und Kuo [97] oder die Computersimulationen nach Vitek *et al.* [98] bestätigen die Annahme von sehr lokalen Prozessen nach [96], da innerhalb der Modelle keine Defekte vergleichbar mit langreichweitigen Versetzungen gefunden werden.

Konkreter wird ein Verformungsmechanismus in Spaepens Modell von 1977 [20] angegeben. Dort ist die makroskopische Verformung eine Folge diffusiver Sprünge einzelner Atome, welche bei hohen Temperaturen in Bereichen lokal erhöhtem Volumens stattfinden; das freie Volumen seinerseits entsteht durch thermische Fluktuationen. Die atomaren Sprünge werden durch eine von außen angelegte Last so polarisiert, dass eine gerichtete Diffusion erzeugt wird, welche das Glas makroskopisch verformt. In [20] wird oben geschilderter Mechanismus (Einzelsprünge) auch bei tiefen Temperaturen angenommen. Allerdings soll in metallenen Gläsern bei tiefen Temperaturen nur ein geringes freies Volumen vorliegen, weshalb Spaepen davon ausgeht, dass bei diesen Temperaturen das Hineindrücken eines Atoms in eine zu kleine freie Stelle die Erzeugung von freiem Volumen nach sich zieht. Damit verbunden ist die lokale Erweichung der Probe, womit die bei tieferen Temperaturen experimentell gefundenen Scherbänder erklärt werden sollen. Das erzeugte freie Volumen wird durch nicht näher spezifizierte diffusive Umlagerungen abgebaut. Das Gleichgewicht der aufgrund der Last induzierten Erzeugung von freiem Volumen und dessen Vernichtung durch diffusive Umlagerungen führt zu einer Abhängigkeit der Verformung von der Last bei niedrigen Temperaturen.

Argon [99] betrachtet in seinem Modell die Umlagerung von Atomgruppen bestehend aus mehreren Atomen. Er unterscheidet zwischen dem Mechanismus der atomaren Umlagerungen bei tiefen Temperaturen und dem bei hohen Temperaturen. Für hohe Temperaturen wird die Umlagerung einer ellipsoidförmigen Region angenommen, welche durch ein relativ großes freies Volumen charakterisiert ist. Die plastische Verformung findet statt, wenn die Anzahl der Verformungszentren in einem Glas so groß wird, dass die Umlagerung einzelner ellipsoidförmiger Bereiche durch die Umlagerung anderer beieinflusst wird. Dann fehlt die für die Zurückverformung nach Lastentnahme nötige Rückspannung, welche durch die direkt benachbarte, elastisch verformte Umgebung erzeugt wird. Die Folge ist, dass die geänderte Form erhalten

bleibt. Ansonsten lässt sich das Verhalten als anelastische Nachwirkung beschreiben. Argon geht davon aus, dass die Verformung bei niedrigen Temperaturen durch Abgleiten auf dicht gepackten Flächenelementen gegeneinander erfolgt, wofür weniger freies Volumen notwendig ist. Weiterhin liefert Argon's Modell eine Abschätzung der Temperaturbereiche, in denen die unterschiedlichen Mechanismen vorliegen. Für $T \gtrsim 0.60 \cdot T_g$ findet die Verformung über lokale ellipsoidförmige Bereiche statt, für Temperaturen $\lesssim 0.6 \cdot T_g$ tritt der Abgleitungsmechanismus auf.

Beide Modelle (Spaepen, Argon) basieren auf den Ideen der Freie-Volumen-Theorie (vgl. Abschn. 2.2), denn Voraussetzung für den je nach Modell unterschiedlichen Elementarschritt eines Scherdefekts ist ein genügend vorhandenes freies Volumen. Ein wichtiges Ergebnis beider Modelle ist eine Vorhersage des Zusammenhanges zwischen der Dehnungsrate $\dot{\epsilon}$ und der anliegenden Spannung σ im homogenen Verformungsbereich,

$$\dot{\epsilon} \sim \sinh\left(\frac{\alpha\sigma}{kT}\right). \tag{2.16}$$

Der Faktor α in Gl. (2.16) ist für die verschiedenen Modelle unterschiedlich und beinhaltet im Wesentlichen ein Aktivierungsvolumen. Die Vorhersage der sinh-Abhängigkeit der Dehnungsrate von der Spannung aus Gl. (2.16) wird experimentell schon früh von Taub [100] bestätigt. Der für niedrige Spannungen experimentell gefundene linearen Zusammenhang zwischen Dehnungsrate und Spannung [101] (newtonsches Fließen) kann mit Hilfe der Entwicklung des sinh in Gl. (2.16) für Spannungen mit $\alpha\sigma \ll kT$ erklärt werden. Neuere Messungen von Ocelik *et al.* [102] zeigen auch für sehr niedrige Spannungen ein klar nicht-newtonsches Fließverhalten, sodass der oft gefundene lineare Zusammenhang als Näherung anzusehen ist.

In einer Arbeit von 1983 finden Strolovitz *et al.* [103] bei Computersimulationen zur plastischen Verformung metallener Gläser, dass die Verformung im Wesentlichen durch die als *τ-Defekte* [104] bezeichneten Bereiche ihres Modells getragen wird. Diese zeichnen sich im Gegensatz zu den *p*- bzw. *n-Defekten*, die als kleine Bereiche mit einer erhöhten bzw. einer verringerten Dichte anzusehen sind [104], nicht durch eine geänderte Dichte aus. Die von Spaepen bzw. Argon beschriebenen Mechanismen sind dagegen maßgeblich durch ein erhöhtes freies Volumen und damit einer verringerten Dichte in den Umlagerungsbereichen gekennzeichnet.

Tomida und Egami [105] schlagen einen weiteren Mechanismus vor, der die plastische Verformung ihrer im Computer simulierten Modelle erklären soll. Danach wird die Verformung im Wesentlichen durch Umordnung atomarer Bindungen hervorgerufen. Dieser als Bindungs-Wechsel-Mechanismus (engl.: *bond-exchange-mechanism*) bezeichnete Prozess soll durch das Wirken einer Scherspannung initiiert werden und basiert maßgeblich auf einer Instabilität in der lokalen Topologie der Gläser. Diese ist ohne weiteres aufgrund der starken Nahordnung auch für metallische Gläser und nicht nur für Netzwerk bildende Gläser gegeben (vgl. dazu den

aktuellen Rückblick von Egami [106]). Je nach Dichte der auftretenden Bindungs-Wechsel ist eine anelastische Verformung (keine Umordnung von nah benachbarten Bindungen) und eine plastische Verformung (unmittelbare Nachbarschaft wechselt auch die Bindungen) möglich.

In einer neueren Arbeit entwickeln Falk und Langer [107] ein Verformungsmodell anhand zweidimensionaler Computersimulationen eines binären Lennard-Jones Systems unter Last bei $T = 0\,\mathrm{K}$, d. h. ohne Berücksichtigung thermisch aktivierter Umlagerung der Atome. Grundannahme ihres Modells ist, dass in jedem amorphen Festkörper ein Bruchteil seiner Atome in so genannten Scher-Transformations-Zonen (STZ) liegt. Diese STZ sind idealisierte zwei-Niveau-Systeme, welche die Zustände "+" und "−" annehmen. Sie bestehen aus einigen ellipsoidförmig angeordneten Atomen. Ihre Anzahl und Ausrichtung bestimmt den inneren Zustand des amorphen Materials. Die Umlagerung der STZ unter Last ist verantwortlich für die plastische Verformung. Die Theorie besteht aus drei gekoppelten Ratengleichungen, welche die makroskopische plastische Dehnungrate mit den intrinsischen Eigenschaften des amorphen Festkörpers und einer äußeren Belastung, charakerisiert durch eine Spannung, in Verbindung bringen. Die intrinsischen Eigenschaften kennzeichnen den Zustand des Systems, welcher durch die Ratengleichungen der Anzahldichten $n_\pm$ für die Zustände "+" und "−" der STZ beschrieben wird. Das Gleichungssystem muss im Allgemeinen numerisch gelöst werden, wobei für einige Spezialfälle auch analytische Lösungen möglich sind [107]. Diese Theorie ist ein Beispiel zur Formulierung eines Modells der Plastizität amorpher Festkörper, das den inneren Zustand eines Systems explizit mit berücksichtigt. Eine Reihe weiterer Arbeiten zur STZ-Theorie bestätigt ihr eine Vielzahl möglicher Phänomene zu reproduzieren. Am interessantesten ist sicherlich der Befund, dass in der Theorie eine Instabilität besteht, die die Ausbildung von periodischen Anordnungen so genannter Mikroscherbänder fördert [108]. Die Einarbeitung von thermischen Effekten führt zu einer guten Übereinstimmung mit experimentellem Fließverhalten [109].

Neben den oben dargestellten Arbeiten enthält die Literatur eine Vielzahl weiterer phänomenologischer Modelle, die für die Beschreibung verschiedener Aspekte des Verhaltens metallischer Gläser unter Verformung entwickelt werden. Zu nennen ist hier das Modell der gerichteten strukturellen Relaxation (engl.: *directional structural relaxation model*) nach Khonik *et al.* [110, 111], welches eine Vielzahl von Erscheinungen der homogenen Verformung metallener Gläser reproduziert. Es handelt sich um eine statistische Formulierung von nicht näher spezifizierten, räumlich voneinander getrennten, unkorreliert und irreversibel ablaufenden elementaren atomaren Umlagerungen, die durch eine Verteilung von Aktivierungsenergien zu beschreiben ist. Weiterhin entwickelt Persson [112] eine Theorie der zeitabhängigen plastischen Verformung ungeordneter Systeme basierend auf dem Konzept einer Spannungsverteilungsfunktion, die für eine bestimmte Zeit festgelegt ist durch extern erzeugte Spannungsfelder und Temperaturgradienten, denen ein betrachteter Körper in allen vorangegangen Zeiten ausge-

setzt war. In einer anderen Arbeit entwickeln Huang *et al.* [113] ein theoretisches Modell zur Beschreibung von inhomogener Verformung metallener Gläser, welches das freie Volumen als Ordnungsparameter enthält.

In den bisher genannten Arbeiten wird eine Menge an physikalischem Verständnis meist *per Hand* in die Modelle eingebaut. Daneben gibt es in der Literatur Entwicklungen, die Dynamik von glasartigen Systemen welche durch externe Kräfte getrieben sind auf Grundlage rein mikroskopischer Betrachtungen zu beschreiben. Diese Modelle sind als Erweiterung der Moden-Kopplungs-Theorie zu sehen. Berthier, Barrat und Kurchan [114] analysieren die Entwicklung eines getriebenen glasartigen Systems durch Berechnung von Korrelations- und Antwortfunktionen aus den zugrunde liegenden Langevin-Gleichungen in einer geeigneten Näherung. Sie zeigen, dass ihr System einem sog. *zwei-Zeitskalen Szenario* (engl.: *two-time-scale scenario*) gehorcht, wobei die langsamen Zeitskalen, die mit der strukturellen Relaxation in Verbindung gebracht werden durch die externen Kräfte beschleunigt werden, wohingegen die schnellen Zeitskalen, im Wesentlichen durch die Vibrationen im System gegeben, unverändert bleiben. Dieses Konzept kann dahingehend erweitert werden, dass eine *effektive Temperatur* zur Beschreibung des Systemzustandes eingeführt wird, die nicht mit der aktuellen thermodynamischen Temperatur übereinzustimmen braucht. Analysen basierend auf der Auswertung von geeigneten Fluktuations-Dissipations-Theoremen für ein geschertes binäres Lennard-Jones System legen die Einführung einer solchen effektiven Temperatur nahe [115, 116].

3. Modell und Methoden

In diesem Kapitel werden einige grundlegende Elemente der in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen vorgestellt. Nach einer kurzen Darstellung der Simulationsmethode folgt die Beschreibung des Computermodells des Glases und eine kurze Erläuterung zu der Umsetzung der Verformungexperimente im Computer.

3.1. Molekulardynamik-Simulationsmethode

Molekulardynamik(MD)-Simulationen haben sich, neben den ebenfalls häufig verwendeten Monte-Carlo(MC)-Simulationen, in vielen Bereichen der Naturwissenschaften als Hilfsmittel durchgesetzt, um komplexe Vorgänge zu untersuchen, die experimentell oder theoretisch nur schwer zugänglich sind, wie z. B. in der Quantenfeldtheorie [117] oder der Astrophysik [118]. Im Bereich der Materialphysik [119, 120, 121, 122] hat die Entwicklung der so genannten *ab-initio*-Methoden entscheidend dazu beigetragen, den vorhersagenden Charakter der Simulationen in diesem Bereich zu erweitern.

Grundsätzlich wird durch die MD-Simulation die zeitliche Entwicklung eines physikalischen Systems beschrieben, deren Objekte über vorgegebene Wechselwirkungen miteinander in Beziehung stehen. Für diese Objekte werden die Bewegungsgleichungen numerisch integriert, sodass im Prinzip für jedes Objekt sein Ort und sein Impuls in Abhängigkeit von der Zeit bestimmbar ist und aufgezeichnet werden kann.

Bei der Simulation metallischer Festkörper in der Materialphysik werden die Atome als klassische Punktteilchen betrachtet, deren Dynamik durch die Orts- und Impulskoordinaten $\{\mathbf{x}_i(t), \mathbf{p}_i(t)\}_{i\in[1,N]}$ der N Atome gegeben ist. Die Wechselwirkung untereinander wird über ein effektives Potenzial $\Phi_{eff}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N)$ beschrieben, womit die Bewegungsgleichungen für jedes Atom lauten:

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i = -\nabla_i \Phi_{eff}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N). \tag{3.1}$$

Dabei ist m_i die Masse des i-ten Atoms. In das effektive Potenzial geht die Wechselwirkung der Atomkerne und ein Beitrag des Elektronensystems ein. Dies folgt aus der Born-Oppenheimer-Näherung. Dort wird angenommen, dass das System der leichten Elektronen bei einer Bewegung der viel schwereren Atomkerne praktisch immer im Gleichgewicht ist, wodurch die Paarwechselwirkung der Atomkerne nur durch einen zusätzlichen additiven Potenzialterm, hervorgerufen durch das Elektronensystem, ergänzt wird.

Viele Computeranalysen beschränken sich auf Modelle mit Paarwechselwirkungen zwischen den Atomen und verwenden als effektives Paarpotenzial das so genannte Lennard-Jones-Potenzial [123]. Dieser Ansatz ist gut geeignet für die Beschreibung von (einfachen) Gasen und Flüssigkeiten und ist in den ersten Simulationen zu flüssigem Argon [124, 125] verwendet worden. Auch in neueren Arbeiten zu Themen wie Glasübergang, Dynamik unterkühlter metallischer Schmelzen oder Verformung von metallenen Gläsern findet er häufig Verwendung. Allerdings ist er unzureichend zur Beschreibung realer Systeme über die flüssigen Edelgase hinaus [126]. Vor allem erfordern Simulationen von metallenen Legierungssystemen deutlich realistischere Modellpotenziale, die auf Grundlage der Elektronentheorie der Kohäsion und der Theorie der Bindungen in Metallen entwickelt werden können [122].

3.2. Beschreibung von amorphem NiZr

Die Definition der atomaren Wechselwirkungen steht bei jeder MD-Simulation an erster Stelle. Durch die Wechselwirkungen wird das zu untersuchende Material festgelegt, welches in der vorliegenden Arbeit die Legierung aus den Übergangsmetallen Nickel (Ni) und Zirconium (Zr) ist, speziell in der Zusammensetzung $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$.

Die potenzielle Energie setzt sich additiv aus einem reinen Paaranteil und einem nur vom Volumen abhängigen Teil zusammen und ist für ein System mit N Atomen über die Formel

$$E_{pot} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} E_{ij}(r) + E_{vol} \tag{3.2}$$

gegeben, wobei r der Abstand der Atome i und j ist. Für das Paarpotenzial $E_{ij}(r)$ wird die Form nach Stillinger und Weber [127] benutzt, mit den von Teichler [128] an elektronentheoretische Berechnungen von Hausleitner und Hafner [129] angepassten Parametern:

$$E_{ij}(r) = \begin{cases} A\left(\frac{1}{(\alpha r)^n} - 1\right) \exp\left(\frac{1}{\alpha r - a_1}\right) & : 0 < r \leq r_{cut} \\ 0 & : r > r_{cut} \end{cases} \tag{3.3}$$

Die hier verwendeten Parameter sind in Tabelle (3.1) zusammengefasst und eine Darstellung der Potenzialverläufe ist in Abbildung 3.1 zu sehen. Der *cut-off*-Radius, die maximale Reichweite des Potenzials, ist definiert durch $r_{cut} = a_1/\alpha$. Die Zr-Zr-Bindungen sind für das $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System am stärksten, was durch den tiefsten Potenzialtopf in Abb. 3.1 zu erkennen ist, die Ni-Ni-Bindungen sind sehr schwach. Der nur vom Volumen abhängige Teil E_{vol} beschreibt die Kohäsionsenergie, die aus den s- und p-Elektronenzuständen des Systems re-

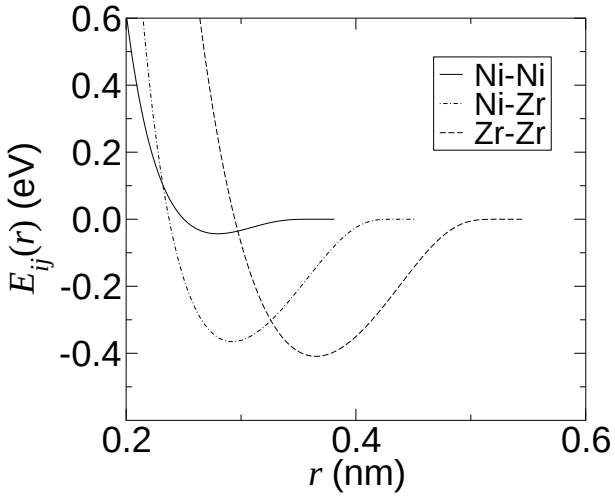

Abbildung 3.1: Wechselwirkungspotenziale E_{ij} für das $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System.

sultiert, und ist für ein System von N Atomen im Volumen V gegeben (nach Finnis [130]) durch

$$E_{vol} = Z_s \cdot \left(\frac{a}{r_{WS}^2} - \frac{b}{r_{WS}} + c \cdot \ln\left(\frac{r_{WS}}{a_0}\right) - d \right), \tag{3.4}$$

mit der mittleren s-Elektronenzahl Z_s. Diese wird berechnet aus den Konzentrationen c_{Ni} und c_{Zr} der beiden Atomsorten und den Elektronenzahlen $Z_{s,\mathrm{Ni}}$ und $Z_{s,\mathrm{Zr}}$ für Nickel und Zirconium, die unter Berücksichtigung der s-d-Hybridisierung selbstkonsistent bestimmt werden müssen ($Z_{s,\mathrm{Ni}} = 1.32$ bzw. $Z_{s,\mathrm{Zr}} = 1.38$ [129]):

$$Z_s = c_{\mathrm{Ni}} \cdot Z_{s,\mathrm{Ni}} + c_{\mathrm{Zr}} \cdot Z_{s,\mathrm{Zr}}. \tag{3.5}$$

Die Größen der Gleichung (3.4) sind r_{WS}, der Elektronenradius (Wigner-Seitz-Radius), gegeben durch

$$r_{WS} = \sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi N}}, \tag{3.6}$$

Tabelle 3.1: Koeffizienten des Wechselwirkungspotenzial, Gl. (3.3), nach Teichler [128].

ij	A (eV)	α (eV)	n	a_1
NiNi	1.170	4.00	5	1.527
NiZr	2.476	4.22	5	1.908
ZrZr	4.387	3.40	3	1.854

Tabelle 3.2: Parameter der Gl. (3.4) für den Beitrag der s- und p-Elektronenzustände zur potenziellen Energie [129].

a (eVnm^2)	b (eVnm)	c (eVnm)	d (eVnm)
0.037332	0.51241	0.42172	1.4966

der Bohr'sche Radius a_0, der sich aus den Naturkonstanten der Dielektrizitätskonstanten des Vakuums ϵ_{vac}, der Elektronenladung e, dem Planck'schen Wirkungsquantum (geteilt durch 2π) $\hbar$ und der Elektronenmasse m_e zu

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_{vac}\hbar^2}{e^2 m_e} \tag{3.7}$$

berechnet, sowie die in Tabelle (3.2) angegebenen Parameter, deren Herleitung bei Finnis [130] zu finden ist.

3.3. Realisierung virtueller Verformungen

Als Simulationsprogramm wird ein Programmpaket verwendet, welches in der Arbeitsgruppe über mehrere Stationen, ausgehend von der ursprünglichen Variante nach Teichler [128], entwickelt worden ist. Speziell wird hier ein Code benutzt, den Böddeker im Rahmen seiner Dissertation [131, 132] auf Grundlage der Variante von Aspelmeier [133] erstellt hat. Das Programm ist in der Programmiersprache C++[134] geschrieben, die sich aufgrund der objektorientierten Darstellung besonders gut für die Modellierung materialphysikalischer Fragestellungen eignet [135] und sich wegen erheblicher Entwicklungen in der Compilertechnologie (Erzeugung von optimalem Maschinencode) [136, 137, 138, 139] zunehmend auch im Bereich der wissenschaftlichen Hochleistungsrechnungen durchsetzt [140, 141, 142, 143]. Es besteht die Möglichkeit, das Programm sequentiell oder parallel zu verwenden, wobei die parallele Variante für die Rechnerarchitektur Cray T3E optimiert ist [131, 132]. Hier folgen einige Aspekte des Simulationsprogramms:

- Als Integrationsalgorithmus wird ein modifiziertes Gear-Prädiktor-Korrektor Verfahren fünfter Stufe verwendet. Der Zeitschritt beträgt 2 fs.

- Die Verwendung beliebiger analytischer Potenziale mit Hilfe der Approximation durch stückweise Polynome ist vorgesehen.

- Es besteht die Möglichkeit, auch so genannte EAM-Potenziale (EAM: *embedded atom method*) zu verwenden.

- Die Temperaturregulierung erfolgt wahlweise im isokinetischen Modus über die Skalierung der Teilchengeschwindigkeiten oder im kanonischen Modus durch Ankopplung an ein Wärmebad durch langevinsche stochastische Kräfte. Ebenfalls möglich ist ein isoenergetischer, d. h. mikrokanonischer Modus.

- Durch periodische Randbedingungen in allen drei Raumrichtungen wird *Bulkmaterial* simuliert.

- Durch Aufhebung der Periodizität in z-Richtung können freie Oberflächen erzeugt werden, wodurch Simulationen in der Filmgeometrie möglich werden.

- Simulationen im isochoren Modus sind durch Festhalten der Abmessungen der Periodizitätszellenlängen $L_i, i = x, y, z$, möglich. Dies erlaubt Simulationen im NVT-Ensemble.

- Simulationen im isobaren Modus sind durch veränderbare Zellenabmessungen L_i und damit Einstellung eines wählbaren Drucks möglich, womit im NpT-Ensemble simuliert wird.

Zwei wichtige Modifikationen im Rahmen meiner Arbeit betreffen einerseits die Portierung der parallelen Version von der Cray T3E auf die IBM p690 Architektur, was nötig ist, weil die Cray T3E aufgrund ihrer Veralterung aus den Rechenzentren verschwindet. Andererseits wird ein Verformungsmodus implementiert, der die Verformung der Periodizitätszelle unter vorgegebener Dehnungsrate realisiert und damit dem aus Experimenten bekannten dynamischen Zugversuch vergleichbar ist[1].

Die Portierung bestand im Wesentlichen daraus, die im ursprünglichen Code von Böddeker verwendeteten crayspezifischen *shared-memory*-Routinen durch entsprechende Varianten aus dem MPI-Standard [144] zu ersetzen [145]. Da im alten Code vor allem die einseitigen Kommunikationsroutinen `shmem_put` und `shmem_get` von Cray [146] verwendet werden, für die es erst im MPI2-Standard [147] Entsprechungen gibt, werden nur grundlegende allseitige Kommunikationsroutinen von MPI verwendet.

3.3.1. Verformung mit vorgegebenen Spannungen

Dieser Verformungsmodus ist bereits in früheren Varianten des Simulationscodes implementiert (Teichler [128], Aspelmeier [133], Böddeker [131]). Es handelt sich um einen anisotropen

[1] Es wird nicht in einer Richtung gestreckt, sondern in zwei entgegengesetzten Richtungen gestaucht und gestreckt, sodass eine reine Scherung resultiert. Daher wird der Begriff dynamischer Scherversuch verwendet.

Berendsen-Barostat [148], bei dem Zug- und Druckspannungen $P_{\alpha\alpha}$ ($\alpha = x, y, z$) innerhalb eines Simulationszeitschritts Δt zu einer Boxlängenänderung nach

$$\frac{\Delta L_\alpha}{L_\alpha} = \Delta t \frac{1}{\eta_{eff}} \cdot P_{\alpha\alpha} \tag{3.8}$$

führen, mit η_{eff} als der Viskosität eines phänomenologischen *Bades*, das dafür sorgt, dass die Boxlängenänderungen als viskoses Fließen erfolgen. Für die Simulationen in dieser Arbeit ist der Wert der Größe η_{eff} für das System mit 5184 Atomen etwa $1 \cdot 10^{-5}$ Pa s, für das System mit 17500 Atomen etwa $1 \cdot 10^{-6}$ Pa s.

Im einzelnen erlaubt der isobare Modus die Vorgabe des Druckes auf die sechs Außenflächen der Simulationszelle in Form der Diagonalelemente des Spannungstensors $P_{\alpha\beta}$. Berechnet wird das zeitliche Mittel des Spannungstensors, der über die Gleichung 3.9 definiert ist.

$$P_{\alpha\beta} = \frac{1}{V}\left(\sum_{i=1}^{N} m_i \dot{x}_i^\alpha \dot{x}_i^\beta + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N}(x_i^\alpha - x_j^\alpha) f_{ij}^\beta\right) + \delta_{\alpha\beta} P_{vol} \tag{3.9}$$

V : Volumen der Probe

m_i : Masse von Atom i

$\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$

x_i^α : α-Komponente der Atomposition von Atom i

f_{ij}^β : β-Komponente der Kraft zwischen Atom i und j

$\delta_{\alpha\beta}$: Kronecker-Delta-Symbol

P_{vol} : Druckanteil des s-Elektronenbeitrags $(-\partial E_{vol}/\partial V)$

3.3.2. Verformungen mit vorgegebener Scherrate

Zur Realisierung dieses Verformungsmodus wird der Barostat abgestellt und eine definierte Änderung der Abmessungen der Periodizitätszelle durchgeführt. Die Boxlängen werden so geändert, dass mit einer konstanten Scherrate verformt wird. Der Druck im System wird sich entsprechend der Zellenänderung aufbauen, sodass dieser Modus der Aufnahme einer Spannungs-Dehnungs-Kurve entspricht.

Im einzelnen sind reine Scherungen implementiert, bei denen jeweils zwei zueinander senkrechte Richtungen gestaucht und gestreckt werden. Beispielsweise wird eine reine Scherung in der xy-Ebene so durchgeführt, dass die Periodzitätszelle in x-Richtung gedehnt wird und in y-Richtung gestaucht. Dazu wird die Boxlänge in x-Richtung, L_x, alle m Integrationsschritte mit einem konstanten Wert c multipliziert und die Länge in y-Richtung, L_y, alle m Schritte

durch den Faktor c dividiert. Die Wahl von m und c legt damit die Dehnungsrate fest. Der Dehnungsratentensor einer solchen Verformung hat die Form (vergleiche dazu Anhang B):

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \dot{\epsilon}_0 & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\epsilon}_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.10}$$

Entsprechende Darstellungen ergeben sich für die Scherung in einer anderen Ebene. In den Simulationen dieser Arbeit wird zusätzlich die Dehnung in z- und die Stauchung in x-Richtung durchgefürt, was durch $\dot{\epsilon}_{xx} = -\dot{\epsilon}_0$, $\dot{\epsilon}_{zz} = \dot{\epsilon}_0$ und $\dot{\epsilon}_{\alpha\beta} = 0$, sonst beschrieben wird.

Wir wollen hier festlegen, dass eine reine Scherung in der xy-Ebene, bzw. eine xy-Scherung, bedeutet, dass in x-Richtung gedehnt wird, und in y-Richtung gestaucht. Das heißt, die erste Koordinate gibt die Streckrichtung, die zweite die Stauchrichtung an. Weiterhin wollen wir festlegen, dass eine Richtungsänderung einfach durch ein negatives Vorzeichen gekennzeichnet sein soll, also dass eine Stauchung in x- und Dehnung in y-Richtung (yx-Scherung) ebenso als $-xy$-Scherung bezeichnet wird. Ferner sei hier noch angemerkt, dass wir Dehnungen in der $-xy$-Scherung negativ bzw. in der Zeit abnehmend beschreiben wollen, wohingegen eine xy-Scherung eine zunehmende bzw. positive Dehnung bedeuten soll.

3.4. Herstellung der Ausgangsproben

Die Simulationen werden mit zwei unterschiedlichen Systemgrößen durchgeführt. Das kleine System enthält $N = 5184$ Atome, wovon jeweils 2592 Atome Nickel und Zirconium sind. Das große System besteht aus jeweils 8750 Atomen beider Sorten und somit aus $N = 17500$ Atomen.

Ausgangskonfiguration des kleinen Systems ist die Endkonfiguration einer Abkühlsimulation, deren Temperatur-Zeit-Verlauf in Abb. 3.2 links gezeigt ist. Dort wird eine NiZr-Schmelze der entsprechenden Zusammensetzung von 2000 K in einer nominellen Zeit von etwa 270 ns auf eine Temperatur von 1020 K gekühlt (dies entspricht etwa 1.36×10^8 Integrationsschritten) und bei dieser Temperatur weitere 100 ns gehalten. Von 1020 K wird mit einer Rate von $\dot{T} = 10^{10}$ K/s weiter bis auf 700 K abgekühlt. Aus diesem Simulationslauf werden dann Konfigurationen bei 1000 K, 810 K und 700 K herausgenommen und für weitere Simulationen verwendet.

Für das große System wird eine neue Simulationszelle zusammengesetzt. Ausgangspunkt ist eine sehr gut ausgelagerte 1000 K Probe. Zur Beseitigung möglicher Artefakte des Zusammenbauens wird diese noch einmal auf 2000 K gebracht und von dort mit einer Rate von $\dot{T} = 2 \cdot 10^{10}$ K/s auf 1000 K gekühlt und dort für nominell 60 ns ausgelagert. Ein weiterer Ab-

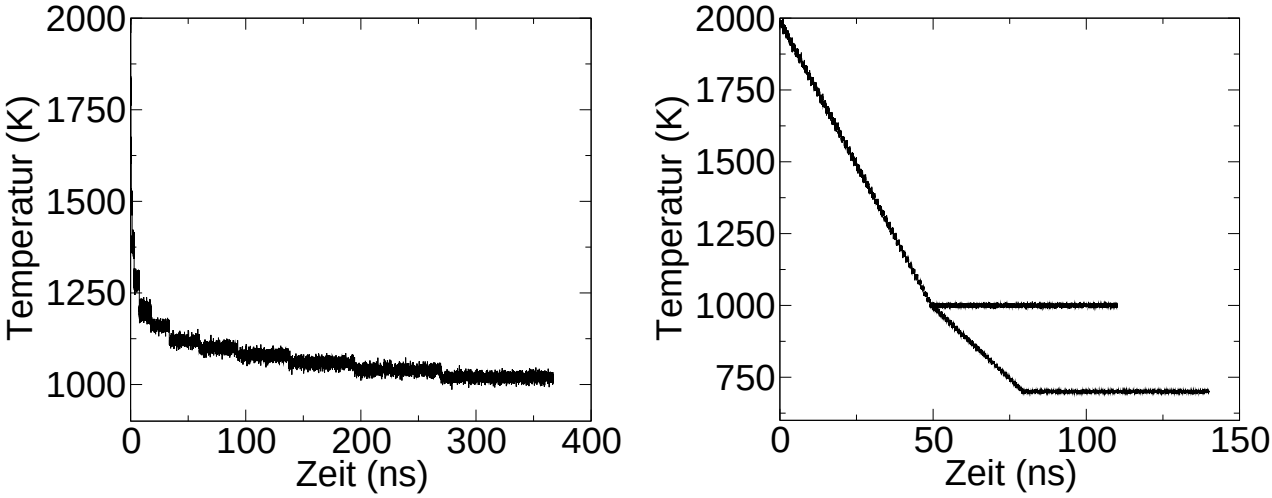

Abbildung 3.2: Links: Temperatur gegen die Zeit für die Simulation, deren Endkonfiguration als gut ausgelagerte Probe für die weiteren Simulationen verwendet wird. Rechts: Temperatur gegen Zeit für die Simulationen zur Herstellung der Ausgangsproben für die Verformungssimulationen eines großen Systems ($N = 17500$ Atome).

kühllauf bringt die Probe von 1000 K auf 700 K, diesmal mit einer Rate $\dot{T} = 10^{10}$ K/s, wo sie weitere 60 ns gehalten wird. Der Verlauf der Temperatur gegen die Zeit dieser Simulationen ist in Abb. 3.2 rechts gezeigt.

3.5. Größen zur Beschreibung des Systems

Für die Auswertung der Simulationen werden verschiedene Größen benötigt. Sie bieten eine Möglichkeit, den Zustand des Systems zu charakterisieren und sollen im Folgenden kurz vorgestellt werden.

3.5.1. Partielle radiale Verteilungsfunktionen

Informationen über die lokalen Atomanordnungen erhält man mit Hilfe der partiellen radialen Verteilungsfunktionen $g_{\mathrm{AB}}(r)$, wobei hier A und B sowohl für Ni als auch für Zr stehen können. Berechnet werden kann sie über die Formel

$$g_{\mathrm{AB}}(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N_{\mathrm{A}} N_{\mathrm{B}}} \left\langle \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{A}}} \sum_{j=1}^{N_{\mathrm{B}}}{}' \int_{r-\Delta r/2}^{r+\Delta r/2} \delta(r' - |\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_j(t)|) \cdot \frac{dr'}{\Delta r} \right\rangle_t , \tag{3.11}$$

mit dem Probenvolumen V und der Dirac'schen Deltafunktion $\delta(\,\cdot\,)$. Die Mittelung erfolgt über die Zeit. (Der Strich an der zweiten Summe soll andeuten, dass im Diagonalfall A = B der Beitrag $j = i$ entfällt.)

Die räumliche Isotropie der amorphen Festkörper führt dazu, dass die (partiellen) radialen Verteilungsfunktionen nur vom Betrag des Abstandsvektors beider Atome abhängen. Anschaulich ist die radiale Verteilungsfunktion $g_{\mathrm{AB}}(r)$ ein Maß für die mittlere Teilchendichte in einer Kugelschale $(r, r + \Delta r)$ um ein gegebenes Teilchen bezogen auf die Ausgangsdichte in einer amorphen Struktur. Für große Abstände nähert sich die Funktion $g_{AB}(r)$ dem Wert 1, da in großen Abständen die mittlere Dichte der Ausgangsdichte entsprechen muss. Wegen der bei sehr kleinen Abständen auftretenden abstoßenden Wechselwirkung zwischen den Atomen nähert sich $g_{\mathrm{AB}}(r)$ dort dem Wert 0. Ferner kann aus der Position des n-ten Maximums die Gleichgewichtsposition eines Atoms der n-ten Nachbarschale ermittelt werden und bei Integration über das n-te Maximum ergibt sich die Anzahl der n-ten Nachbarn.

Für binäre Systeme, hier speziell dem NiZr-System, treten drei radiale Verteilungsfunktionen auf, je nachdem, ob die Verteilungen im Ni-Subsystem, im Zr-Subsystem oder zwischen Ni- und Zr-Atomen untersucht werden.

In Abbildung 3.3 sind die radialen Verteilungsfunktionen der Ausgangsproben gezeigt. Besonderes Merkmal ist die Aufspaltung im zweiten Maximum von $g_{\mathrm{NiZr}}(r)$, was charakteristisch für den Glaszustand, aber auch die unterkühlte Schmelze ist [149]. Die radialen Verteilungsfunktionen der Simulationen stehen in guter Übereinstimmung zu experimentellen Daten des $\mathrm{Ni}_{0.5}\mathrm{Zr}_{0.5}$-Systems [129, 128]. Der hier untersuchte Temperaturbereich ist nicht durch starke Unterschiede in den einzelnen Verteilungsfunktionen gekennzeichnet.

3.5.2. Wendt-Abraham-Parameter und potenzielle Energie

Zur Charakterisierung der Struktur wird ein einfaches Maß für die Nahordnung verwendet. Es handelt sich um den auch schon in [40] verwendeten Wendt-Abraham-Parameter, Gleichung (3.12), der berechnet wird als Quotient aus der Höhe des ersten Minimums und des ersten Maximums der radialen Verteilungsfunktion:

$$R_{WA}(T) = \frac{g_{\mathrm{ZrZr},min}(T)}{g_{\mathrm{ZrZr},max}(T)}. \tag{3.12}$$

Für die vorliegenden Analysen verwenden wir den Parameter des Zr-Subsystems. Es wird jeweils im ersten Maximum und im ersten Minimum von $g_{\mathrm{ZrZr}}(r)$ ein kubisches Polynom angepasst, und daraus die Werte $g_{\mathrm{ZrZr},min}(T)$ und $g_{\mathrm{ZrZr},max}(T)$ bestimmt.

Eingeführt wird der Parameter von Wendt und Abraham [150] basierend auf ihren Monte-Carlo-Simulationen eines 108 Atome enthaltenden Lennard-Jones-Systems. Er bietet ein empirisches Kriterium zur Bestimmung der Grenze zwischen unterkühlter Schmelze und Glas und ermöglicht die Untersuchung des Glasübergangs in einatomigen Systemen. Eine Auftragung

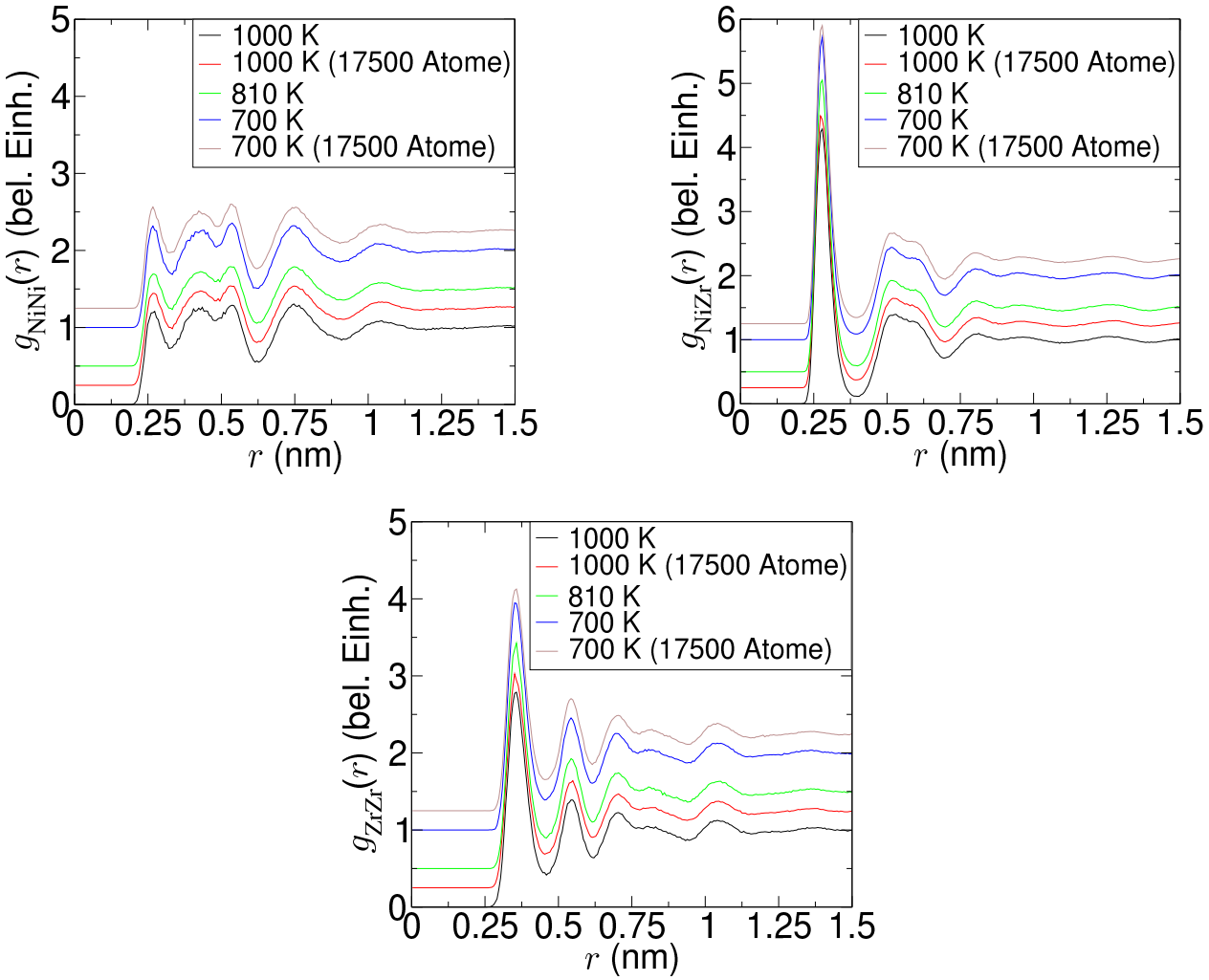

Abbildung 3.3: Partielle radiale Verteilungsfunktionen $g_{\mathrm{NiNi}}(r)$, $g_{\mathrm{NiZr}}(r)$ und $g_{\mathrm{ZrZr}}(r)$ für die Ausgangsproben bei 700, 810 und 1000 K. Die Kurven sind vertikal verschoben.

von R_{WA} gegen die Temperatur offenbart einen Knick bei der kalorischen Glastemperatur T_g. Die Steigung unterhalb von T_g ist niedriger als die oberhalb davon.

Basak *et al.* [151] zeigen, dass R_{WA}, einfachen Modellvorstellungen zu Folge, unterhalb der Glastemperatur linear in T ist. Sie demonstrieren dies durch experimentelle Daten eines binären $\mathrm{Nb}_{0.4}\mathrm{Ni}_{0.6}$-Systems. Das Abknicken bei der Glastemperatur kennzeichnet den Beginn diffusiver Atombewegungen, die über die reinen atomaren Vibrationen hinausgehen. Diese Dynamik ist ebenfalls durch eine lineare Temperaturabhängigkeit ausgezeichnet [151].

In Abbildung 3.4 ist der Verlauf des Wendt-Abraham-Parameters des Zr-Subsystems in Abhängigkeit von der Temperatur dargestellt, herausgehoben sind die Werte der Ausgangsproben. Die Daten vom Wendt-Abraham-Parameter für die Ausgangsproben mit 17500 Atomen liegen höher als die der kleineren Proben, was eine Folge der gegenüber diesen deutlich geringeren Equilibrierungszeit und somit eines schlechteren Relaxiertheitsgrades ist.

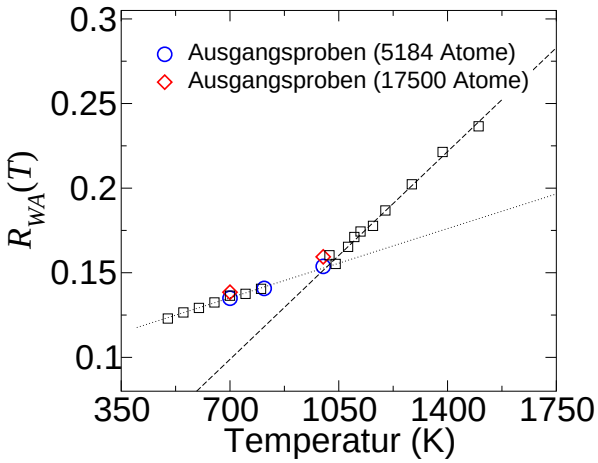

Abbildung 3.4: Temperaturabhängigkeit des Wendt-Abraham-Parameters (□). Zusätzlich sind die berechneten Werte für die Ausgangsproben dargestellt. Die Geraden sind Regressionen für die tiefen Temperaturen (gepunktete Linie) und den Hochtemperaturbereich (gestrichelte Linie).

Die kalorische Glastemperatur kann aus dem Schnittpunkt der eingezeichneten Regressionsgeraden zu $T_g = 1011\ \mathrm{K} \pm 76\ \mathrm{K}$ abgeschätzt werden. Dieser Wert stimmt gut mit dem von Teichler angegebenen Wert von 1050 K [85, 37] überein, der aus dem Temperaturverlauf der reduzierten[2] Enthalpie für ein 648 Atome enthaltendes $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System bestimmt wird.

Begründet ist die gute Übereinstimmung durch die hohe Korrelation zwischen der potenziellen Energie der Atomkonfiguration und dem Wendt-Abraham-Parameter. Dies ist in Abbildung 3.5 demonstriert: Der qualitative Verlauf der Energie stimmt mit dem des Wendt-Abraham-Paramertes überein (Abb. 3.5 links). Die Auftragung beider Größen gegeneinander belegt die sehr hohe Korrelation (Abb. 3.5 rechts). Die angegebenen Werte des Korrelationskoeffizienten sind nach Pearson, Spearman oder Kendall berechnet (vgl. Abschnitt 3.6.3).

3.5.3. Atomare Charakteristika

Aus den generierten Daten der MD-Simulation lassen sich grundsätzlich alle Größen berechnen, die nur von den Orts- und Impulskoordinaten $\{\mathbf{x}_i(t), \mathbf{p}_i(t)\}$ der Atome im simulierten Zeitfenster abhängen. Häufig berechnete, den Zustand des Systems zu einer bestimmten Zeit (oder in einem geeignet gewählten Zeitfenster) beschreibende, charakteristische Größen sind beispielsweise die Energie (potenzielle oder kinetische), der Druck im System oder die Temperatur.

[2] Das bedeutet, um einen Energiebeitrag $3k_BT$ reduziert.

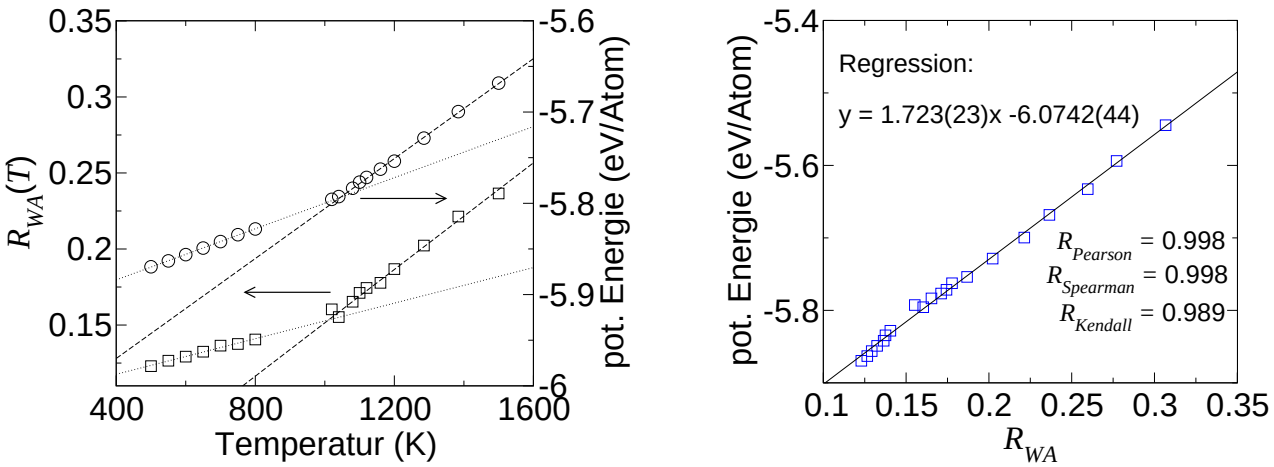

Abbildung 3.5: Oben: Verlauf des Wendt-Abraham-Parameters des Zr-Subsystems und die potenzielle Energie pro Atom (Nickel und Zirkonium) gegen die Temperatur. Unten: Potenzielle Energie pro Atom gegen Wendt-Abraham-Parameter.

Wird mit $A(t)$ eine Zustandsgröße des Systems zur Zeit t bezeichnet, so wird diese als Summe über alle *atomaren* Größen $a_i(t)$ bestimmt:

$$A(t) = \sum_i a_i(t). \tag{3.13}$$

Der Index der Summe läuft über alle N Atome des Systems. Bei Auswahl bestimmter Untergruppen von Atomen wird nur die Summe der betrachteten Atomgruppe nach Gl. (3.13) berechnet. Speziell können das Ni- und das Zr-Subsystem separat untersucht werden, wobei gilt:

$$A_{\mathrm{Ni}}(t) = \sum_{i\in\{\mathrm{Ni}\}} a_i(t), \quad A_{\mathrm{Zr}}(t) = \sum_{i\in\{\mathrm{Zr}\}} a_i(t), \tag{3.14}$$

$$A(t) = c_{\mathrm{Ni}} A_{\mathrm{Ni}}(t) + c_{\mathrm{Zr}} A_{\mathrm{Zr}}(t). \tag{3.15}$$

Die Symbole {Ni} und {Zr} unter den Summenzeichen der Gl. (3.14) stehen für die Indexmenge der jeweiligen Atome, c_{Ni} und c_{Zr} sind die bereits in Abschnitt 3.2 erwähnten Konzentrationen.

Durch Mittelung über eine bestimmte Zeit $\tau = n \cdot \Delta t$ wird der mittlere Wert A der in der Zeit fluktuierenden Größe $A(t)$ bestimmt:

$$A = \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} A(t)dt \quad \text{bzw.} \quad A = \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^{n} A(t_0 + j \cdot \Delta t). \tag{3.16}$$

Aufgrund der Beziehung von Gl. (3.13) ist die Größe A über die mittleren atomaren Größen a_i nach Gl. (3.17) gegeben.

$$A = \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^{n} A(t_0 + j \cdot \Delta t) = \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^{n} \sum_{i=1}^{N} a_i(t_0 + j \cdot \Delta t) = \sum_{i} a_i. \tag{3.17}$$

Im Folgenden sollen die für die Analysen dieser Arbeit relevanten atomaren Größen eingeführt werden. Es handelt sich um die potenzielle Energie pro Atom, die atomaren Käfigvolumina, atomare Ordnungsparameter, welche die lokalen Symmetrien beschreiben, sowie Größen zur Berechnung atomarer Spannungen.

Potenzielle Energie der Atome

In Abschnitt 3.2 wird gezeigt, wie sich die gesamte potenzielle Energie des Systems aus dem Paaranteil und dem volumenabhängigen Teil zusammensetzt (Gl. (3.2) und Gl. (3.4)). Entsprechend kann die atomare potenzielle Energie eines Atoms i in einem System mit N Atomen durch die Größe $E_{pot,i}$ bestimmt werden gemäß der Gleichung (3.18)

$$E_{pot,i} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} E_{ij}(r) + E_{vol}/N. \tag{3.18}$$

Abbildung 3.6 a) zeigt die Verteilung der potenziellen Energien nach Atomsorten getrennt. Die Darstellung zeigt die normierten Histogramme (die Fläche unter den Kurven ist Eins) am Beispiel für die Ausgangskonfiguration ($N = 5184$ Atome) bei 700 K. Ni liegt im Mittel bei -5 eV, Zr im Mittel zwischen -6.5 eV und -7 eV. Die Verteilung für Ni weist neben dem Hauptmaximum noch zwei schwach ausgeprägte Nebenmaxima auf, und zeigt damit mehr Struktur als die schiefe Zr-Verteilung.

Der Verlauf der Mittelwerte[3] der Verteilungen ist in Abbildung 3.6 b) dargestellt. Die Daten für die Ausgangsproben sind farblich hervorgehoben (blau: 5184 Atome, rot: 17500 Atome). Die mittlere atomare potenzielle Energie der einzelnen Atomsorten zeigt den gleichen qualitativen Verlauf wie die Gesamtenergie (vgl. Abb. 3.5). Die Werte der potenziellen Energie der großen (17500 Atome) Proben liegen im Vergleich zu den Werten der kleinen (5184 Atome) Proben im Ni-Subsystem leicht, im Zr-Subsystem auffällig höher (die Skala auf beiden Seiten der Abbildung ist nur verschoben, nicht gestaucht oder gestreckt).

[3]Hier und im Folgenden verwenden wir jeweils das arithmetische Mittel der betrachteten atomaren Größe.

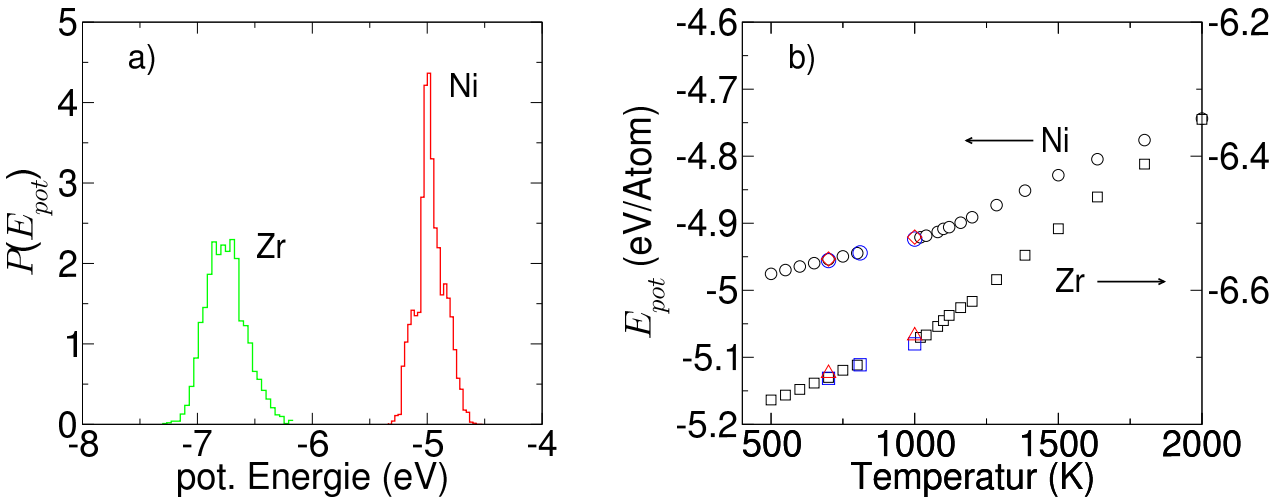

Abbildung 3.6: a) Statistische Verteilung der potenziellen Energie der Ni- und Zr-Atome in der Ausgangskonfiguration mit 5184 Atomen bei 700 K. b) Temperaturverlauf des Mittelwertes der Verteilung der potenziellen Energie nach Atomsorten getrennt. Die schwarzen Kreise und Quadrate sind aus Daten alter Simulationen bestimmt. Die Daten für die Ausgangsproben sind farblich herausgehoben: 5184 Atome in blau, 17500 Atome in rot (Ni: Kreise und Diamanten, Zr: Quadrate und Dreiecke).

Atomares Volumen

Jedem Atom einer Anordnung kann ein Bereich des ihn umgebenden Raumes so zugewiesen werden, dass weder Überschneidungen auftreten noch Lücken übrig bleiben. Speziell wird jedem Atom ein Polyeder zugewiesen, dessen Flächen jeweils senkrecht auf den Verbindungslinien zwischen mittlerem Atom und seinen Nachbarn stehen und diese halbieren. Das Volumen eines jeden Polyeders, den man als Voronoi- oder Wigner-Seitz-Zelle des betreffenden Atoms ansehen kann, wird mit $\mathcal{V}_i$ bezeichnet und ist als ein Maß für das Käfigvolumen des Atoms zu verstehen. Die Konstruktion bedingt, dass die Summe über alle atomaren Werte das Volumen der Zelle ergibt[4]. Berechnet wird die Voronoi-Zelle und dessen Volumen mit Hilfe des Quellcodes der frei zugänglichen *Qhull*-Software [152].

Abbildung 3.7 a) zeigt die Verteilung der Käfigvolumina $P(\mathcal{V}_i)$ für die beiden Atomsorten. Auch hier wird die 5184-Atome Ausgangskonfiguration bei 700 K zur Bestimmung der Histogramme verwendet. Die mittleren Atomvolumina für Ni und Zr liegen etwa bei 17.5×10^{-3} nm^3 und 20×10^{-3} nm^3.

Das mittlere Atomvolumen für die einzelnen Atomsorten in Abhängigkeit von der Temperatur ist in Abbildung 3.7 b) gezeigt. Die Ausgangsproben sind wie schon in der Abbildung für die potenzielle Energie farblich hervorgehoben. Die Werte für das kleine und große System sind vergleichbar. Das mittlere Atomvolumen wird mit abnehmender Temperatur kleiner. Der

[4] Andere Definitionen für das atomare Volumen (vgl. Fußnote 5 auf Seite 38) müssen sich nicht notwendigerweise zum Gesamtvolumen aufsummieren.

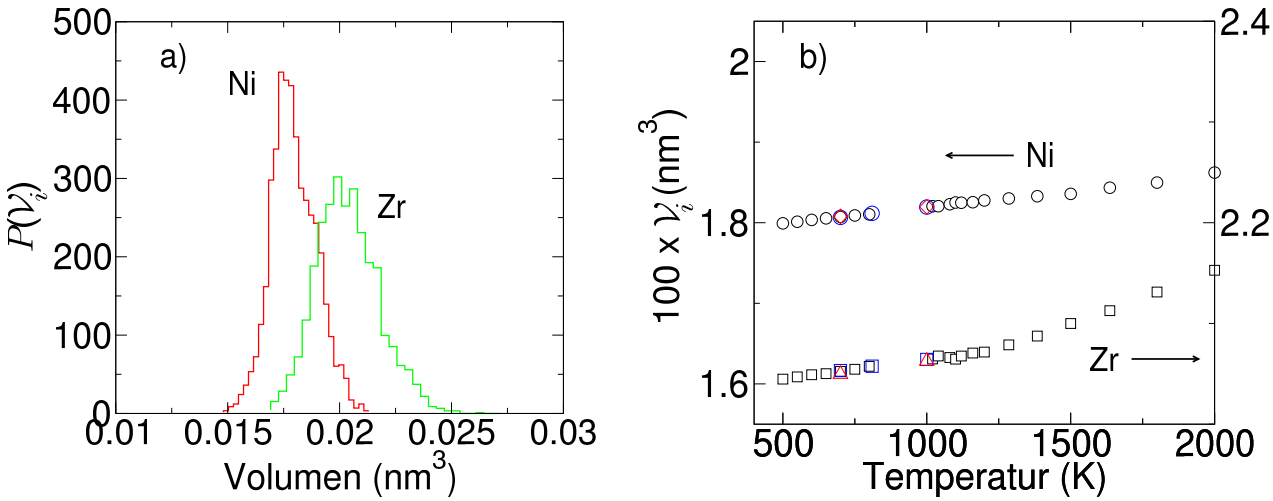

Abbildung 3.7: a) Statistische Verteilung des Atomvolumens der Ni- und Zr-Atome Verteilungen für die in der Ausgangskonfiguration mit 5184 Atomen bei 700 K. b) Temperaturverlauf des Mittelwertes der Verteilung des atomaren Volumens nach Atomsorten getrennt. Die schwarzen Kreise und Quadrate sind aus Daten alter Simulationen bestimmt. Die Daten für die Ausgangsproben sind farblich herausgehoben: 5184 Atome in blau, 17500 Atome in rot (Ni: Kreise und Diamanten, Zr: Quadrate und Dreiecke).

Verlauf für Zr zeigt einen merklichen Knick bei etwa 1100 K. Im Ni-Verlauf ist kein Knick zu erkennen.

Ordnungsparameter pro Atom

Zur Untersuchung der atomaren Nahordnung werden die von Steinhardt *et al.* [153] eingeführten Ordnungsparameter Q_l verwendet. Sie bieten die Möglichkeit, lokale Symmetrien von Atomanordnungen anhand einer Analyse der Bindungsverhältnisse zwischen nächsten Nachbarn zu bewerten (vgl. [154]).

Speziell betrachten wir die Parameter Q_4, Q_5 und Q_6, welche über die allgemeine Definition

$$Q_l = \left(\frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} \left| \langle Y_{lm}(\theta(\mathbf{r}_{ij}), \phi(\mathbf{r}_{ij})) \rangle_{j \in NN(i)} \right|^2 \right)^{1/2} \tag{3.19}$$

berechnet werden können [153]. Dabei sind die $Y_{lm}(\theta, \phi)$ Kugelflächenfunktionen der Ordnung l, m. Die Winkel $\theta(\mathbf{r}_{ij})$ und $\phi(\mathbf{r}_{ij})$ bezeichnen den Azimutalwinkel und den Polwinkel des Verbindungsvektors $\mathbf{r}_{ij}$ zwischen Atom i und j (wobei i und j nächste Nachbarn sind) in einem Koordinatensystem, dessen Zentrum das Atom i ist.

In [153] wird gezeigt, dass die geradzahligen Werte von Q_l, $l = 2, 4, \ldots, 10$, für verschiedene perfekte Anordnungen wie z. B. einfach kubische (sc), kubisch flächenzentrierte (fcc), kubisch raumzentrierte (bcc), hexagonal dichtest gepackte (hcp) und ikosaedrische (ico) bestimmte,

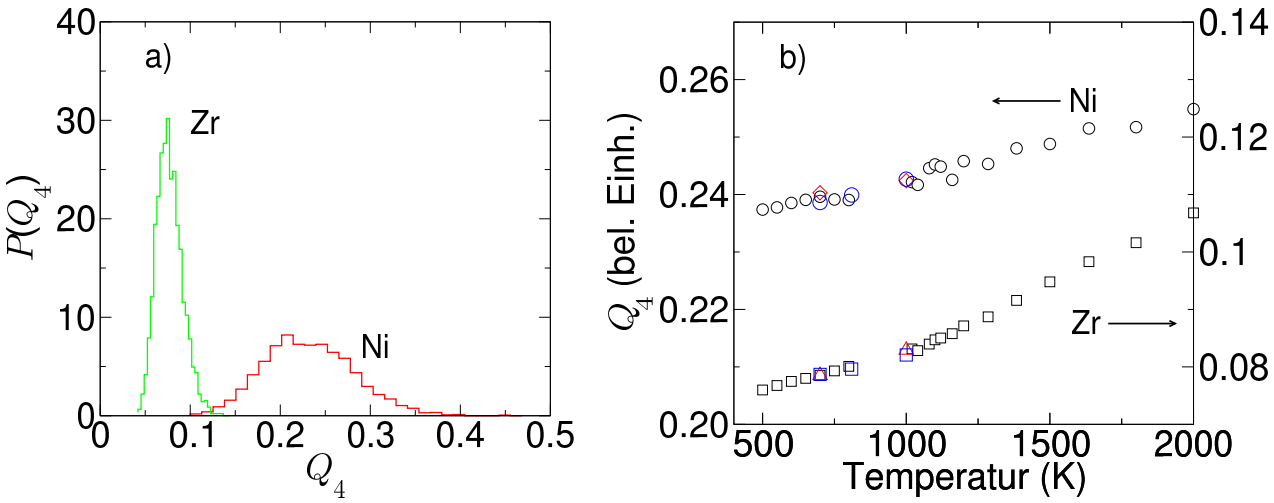

Abbildung 3.8: a) Statistische Verteilung der Q_4-Ordnungsparameter für Ni und Zr in der Ausgangskonfiguration mit 5184 Atomen bei 700 K. b) Temperaturverlauf des Mittelwertes der Verteilung des Q_4-Ordnungsparameters für Ni und Zr. Die schwarzen Kreise und Quadrate sind aus Daten alter Simulationen bestimmt. Die Daten für die Ausgangsproben sind farblich herausgehoben: 5184 Atome in blau, 17500 Atome in rot (Ni: Kreise und Diamanten, Zr: Quadrate und Dreiecke).

unterscheidbare Werte annehmen. Besonderes Merkmal der ico-Struktur ist, dass sie nur für $l = 6$ und $l = 10$ von Null verschiedene Q_l-Werte liefert.

Die Verteilungen $P(Q_l)$ für die beiden Atomsorten sind in Abbildung 3.8 a), 3.9 a) und 3.10 a) gezeigt. Wie bereits oben wird auch hier für die Bestimmung der Histogramme beispielhaft die Ausgangskonfiguration bei 700 K verwendet. Qualitativ sind die Histogramme für Q_4 und Q_5 vergleichbar. Zr weist eine deutlich schmalere Verteilung als Ni auf. Die Mittelwerte für Q_4 sind sowohl für Ni als auch für Zr zu geringeren Werten verschoben, bei Ni stärker als bei Zr. Die Verteilung für Q_6 unterscheidet sich von denen für Q_4 und Q_5 durch eine größere Ähnlichkeit zwischen Ni und Zr. Im Mittel zeigt Ni, wie auch für Q_4 und Q_5 einen höheren Wert als Zr.

Der Verlauf der Mittelwerte von Q_4, Q_5 und Q_6 für Ni und Zr getrennt ist in den Abbildungen 3.8 b), 3.9 b) und 3.10 b) dargestellt. Im Mittel zeigt Q_4 für Ni und Zr mit sinkender Temperatur eine Abnahme. In beiden Verläufen wird ein Knick um 1000 K sichtbar. Der Mittelwert der Q_4-Verteilung des großen Systems (17500 Atome) ist für Ni bei 700 K, für Zr bei 1000 K höher als der des kleinen Systems. Beim Q_5-Parameter zeigt Zr einen mit Q_4 vergleichbaren Verlauf. Für Ni hingegen nimmt der Mittelwert von Q_5 mit sinkender Temperatur zu. Ein Knick ist sowohl für Ni als auch für Zr bei etwa 1000 K zu erkennen (Ni zeigt einen Übergang von einer stärker negativen Steigung bei höheren T zu einer schwächer negativen Steigung). Die Mittelwerte von Q_5 der kleinen (5184 Atome) und großen (17500 Atome) Systeme stimmen in etwa überein, eine Ausnahme ist der etwas geringere Mittelwert von Q_5 bei

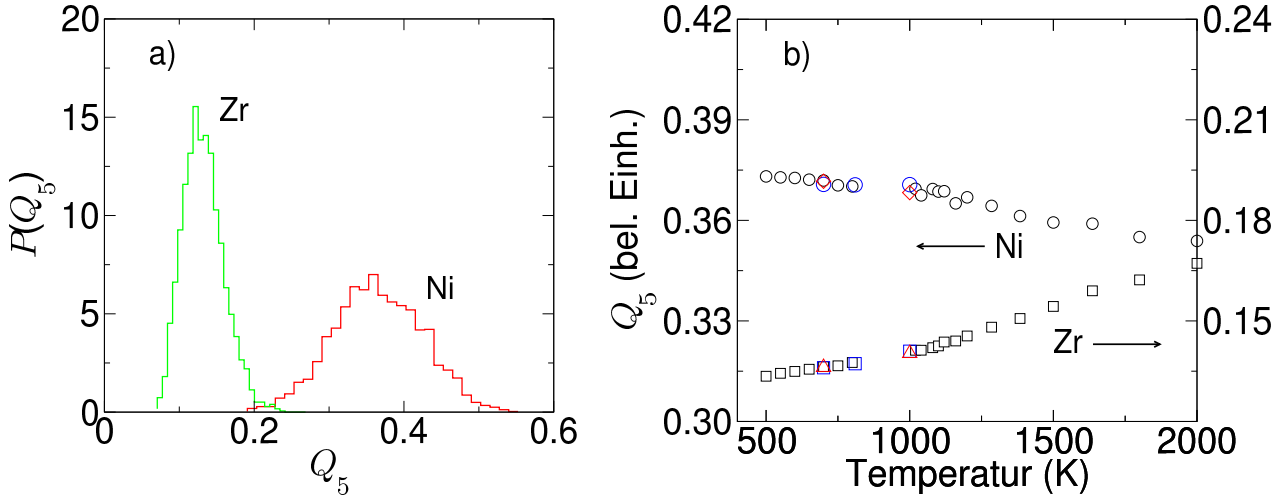

Abbildung 3.9: a) Statistische Verteilung der Q_5-Ordnungsparameter für Ni und Zr in der Ausgangskonfiguration mit 5184 Atomen bei 700 K. b) Temperaturverlauf des Mittelwertes der Verteilung des Q_5-Ordnungsparameters für Ni und Zr. Die schwarzen Kreise und Quadrate sind aus Daten alter Simulationen bestimmt. Die Daten für die Ausgangsproben sind farblich herausgehoben: 5184 Atome in blau, 17500 Atome in rot (Ni: Kreise und Diamanten, Zr: Quadrate und Dreiecke).

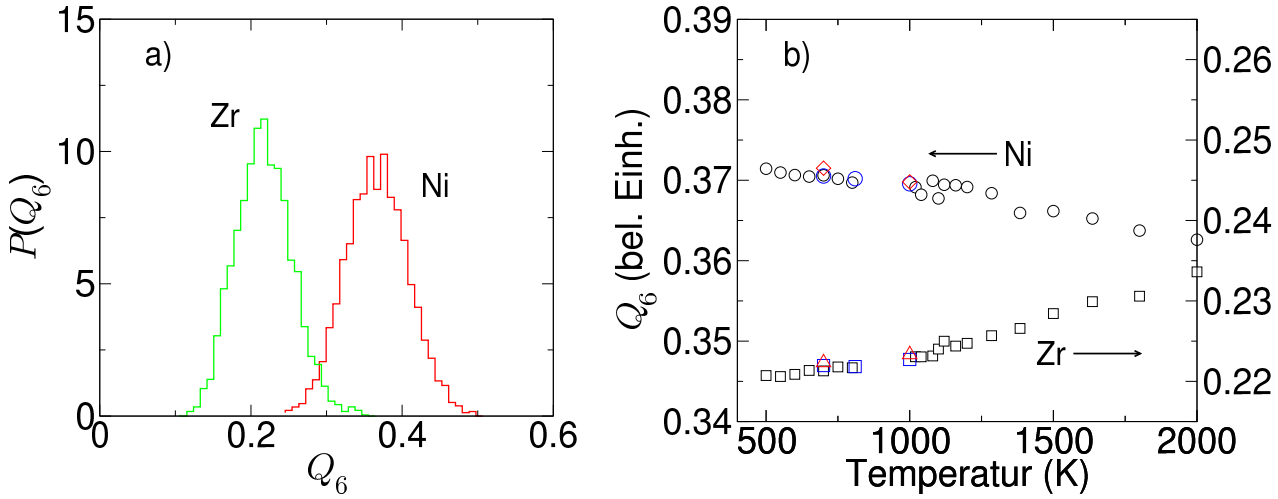

Abbildung 3.10: a) Statistische Verteilung der Q_6-Ordnungsparameter für Ni und Zr in der Ausgangskonfiguration mit 5184 Atomen bei 700 K. b) Temperaturverlauf des Mittelwertes der Verteilung des Q_6-Ordnungsparameters für Ni und Zr. Die schwarzen Kreise und Quadrate sind aus Daten alter Simulationen bestimmt. Die Daten für die Ausgangsproben sind farblich herausgehoben: 5184 Atome in blau, 17500 Atome in rot (Ni: Kreise und Diamanten, Zr: Quadrate und Dreiecke).

1000 K für Ni. Die Temperaturabhängigkeit der Mittelwerte des Q_6-Parameters zeigt qualitativ den Verlauf wie er für die Daten aus Q_5 bestimmt ist, die Werte als solche liegen etwas höher. Der Knick für Ni und Zr ist weniger ausgeprägt als bei Q_5. Bei den Daten für Zr hat das große System (17500 Atome) einen etwas größeren Q_6-Mittelwert als das kleine System. Für Ni liegen die Datenpunkte des großen Systems für 1000 K kaum merklich höher als die des kleinen, bei 700 K ist der Unterschied deutlich.

Druck und Scherspannungen der Atome

Zur Bewertung der lokalen Spannungen an den Atomen wird der atomare Doppelkrafttensor $\varphi_i^{\alpha\beta}$ benötigt. Dieser lässt sich für Atom i nach Gleichung (3.20) aus den interatomaren Wechselwirkungspotenzialen (bzw. den daraus bestimmten Kräften) und den Positionen der Atome bestimmen.

$$\varphi_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\sum_{j\neq i}(x_i^\alpha - x_j^\alpha)f_{ij}^\beta \tag{3.20}$$

Die Größen x_i^α, x_j^α und f_{ij}^β sind bereits in Gleichung (3.9) erläutert. Zwischen dem Doppelkrafttensor und dem atomaren Spannungstensor $\sigma_i^{\alpha\beta}$ [155, 156] besteht die Beziehung

$$\varphi_i^{\alpha\beta} = \Omega_i \sigma_i^{\alpha\beta}, \tag{3.21}$$

wobei Ω_i das Atomvolumen (des i-ten Atoms) bedeutet. Die Einheit des Doppelkrafttensors ist die einer Energie. Vorteilhaft an der Nutzung des Doppelkrafttensors ist seine Unabhängigkeit von der Definition des Atomvolumens[5].

Im Zusammenhang mit der Berechnung von Druck- oder Spannungstensor des Systems, Gl.(3.9), sei an dieser Stelle angemerkt, dass der Anteil des Volumengases zum Druck in den atomaren Doppelkrafttensor, Gl. (3.20), nicht mit aufgenommen wird, weil er für jedes Atom gleich ist. Außerdem wird der Term mit den Atomimpulsen (vgl. Gl. (3.9)) bei der Berechnung der atomaren Größen nicht hinzugefügt, weil er verglichen mit dem Anteil aus den Wechselwirkungspotenzialen klein ist[6].

Da die einzelnen Komponenten des Doppelkrafttensors von der Wahl des Koordinatensystems abhängen, bilden wir zur Vereinfachung zwei der drei Invarianten des Tensors (siehe

[5] Man könnte $\Omega_i = \mathcal{V}_i$ verwenden (vgl. Abschnitt 3.5.3), jedoch sind auch andere Defintionen für Ω_i denkbar. Beispielsweise wird in der Literatur häufig eine Definition nach Strolovitz *et al.* [157] gefunden:

$$\Omega_i = \frac{4\pi}{3}a_i^3 \quad \text{mit} \quad a_i = \frac{\sum_j r_{ij}^{-1}}{\sum_j r_{ij}^{-2}}. \tag{3.22}$$

Dabei läuft die Summe über die nächsten Nachbaratome j von i, deren Abstand ist durch r_{ij} gegeben.

[6] Die Verwendung des Impulsanteils in der Definition atomarer Spannungen diskreter Systeme muss in anbetracht neuerer Literatur [158] kritisch hinterfragt werden.

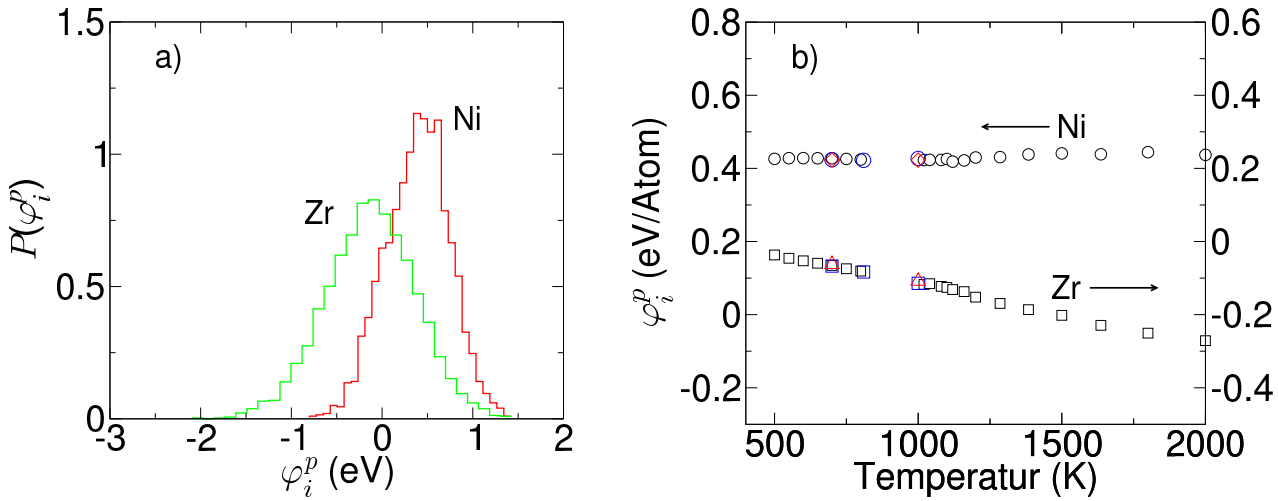

Abbildung 3.11: a) Statistische Verteilung der Größe φ_i^p für Ni und Zr in der Ausgangskonfiguration mit 5184 Atomen bei 700 K. b) Temperaturverlauf des Mittelwertes der Verteilung von φ_i^p für Ni und Zr. Die schwarzen Kreise und Quadrate sind aus Daten alter Simulationen bestimmt. Die Daten für die Ausgangsproben sind farblich herausgehoben: 5184 Atome in blau, 17500 Atome in rot (Ni: Kreise und Diamanten, Zr: Quadrate und Dreiecke).

Anhang A). Die hydrostatischen Spannungen werden mit Hilfe der ersten Invariante des Doppelkrafttensors bewertet, die Scherspannungen mit Hilfe der zweiten Invariante. Sie sollen symbolisch durch φ_i^p (erste Invariante) und φ_i^τ (zweite Invariante) dargestellt werden.

Abbildung 3.11 a) zeigt die Verteilungen $P(\varphi_i^p)$, Abb. 3.12 a) $P(\varphi_i^\tau)$ nach Atomsorten getrennt. Für die Darstellung der Histogramme werden Daten der kleinen ($N = 5184$ Atome) Ausgangskonfiguration bei 700 K verwendet. Die Verteilung der Größe φ_i^p ist für Ni und Zr schief, wobei beide Verteilungen auf der rechten Seite steiler sind. Zr weist eine breitere Verteilung auf. Der Mittelwert für Zr liegt etwa bei Null, Ni hat einen positiven (≈ 0.5 eV) Mittelwert. Im Unterschied zu den Verteilungen der φ_i^p sind für φ_i^τ sehr geringe Unterschiede in der Form zwischen Ni und Zr zu sehen. Beide Verteilungen haben in etwa die gleiche Breite und auch Schiefe. Lediglich der Mittelwert der Ni-Verteilung ist kleiner als der für Zr (0.75 eV zu 1 eV).

Der Verlauf der Mittelwerte für φ_i^p in Abhängigkeit von der Temperatur nach Atomsorten getrennt ist in Abbildung 3.11 b) gezeigt, die Daten für φ_i^τ in Abbildung 3.12 b). Farblich hervorgehoben sind jeweils die Daten der Ausgangskonfigurationen. Der Mittelwert von φ_i^p zeigt für Ni keine Abhängigkeit von der Temperatur; er liegt mit geringen Schwankungen um 0.4 eV. Für Zr ist mit sinkender Tempertur eine deutliche Zuhnahme des Mittelwertes von φ_i^p verbunden. Da der Mittelwert für Zr unterhalb von Null liegt, bedeutet dies eine Abnahme der Zugspannungen auf die Zr-Komponente. Die Daten für das kleine und große System sind vergleichbar. Der Verlauf des Mittelwerts der Verteilung von φ_i^τ zeigt sowohl für Ni als auch für Zr eine Verringerung mit abnehmender Temperatur. Beiden Verläufen gemeinsam ist ein

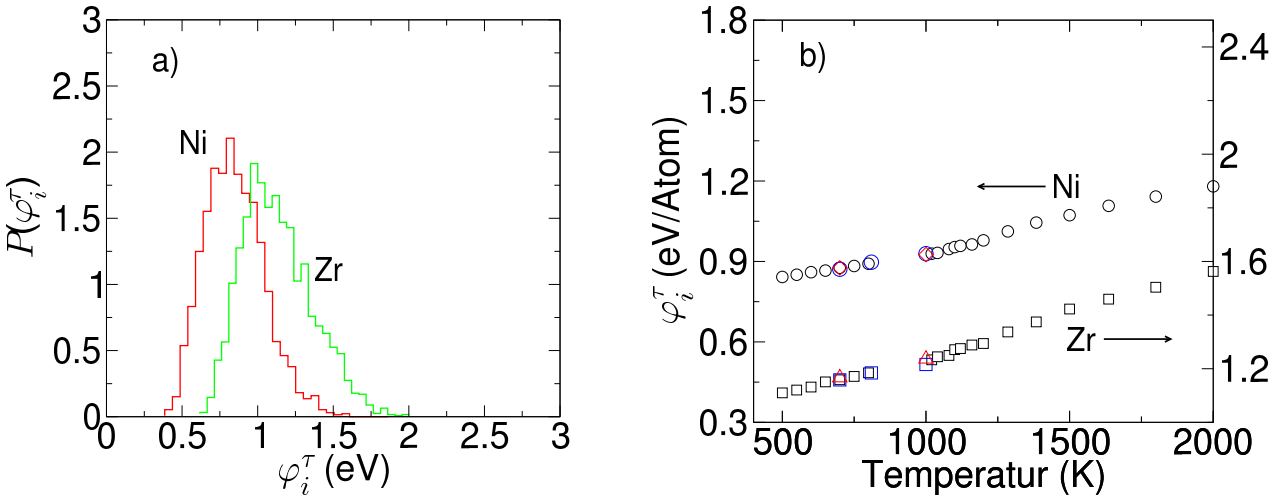

Abbildung 3.12: a) Statistische Verteilung der Größe φ_i^τ für Ni und Zr in der Ausgangskonfiguration mit 5184 Atomen bei 700 K. b) Temperaturverlauf des Mittelwertes der Verteilung von φ_i^τ für Ni und Zr. Die schwarzen Kreise und Quadrate sind aus Daten alter Simulationen bestimmt. Die Daten für die Ausgangsproben sind farblich herausgehoben: 5184 Atome in blau, 17500 Atome in rot (Ni: Kreise und Diamanten, Zr: Quadrate und Dreiecke).

Knick um 1000 K, der eine leichte Änderung der Steigung beider Kurven markiert. Auch für diese Größe liegen die Daten der großen und kleinen Ausgangsproben sehr nah beieinander, wobei die Werte des großen Systems für Zr geringfügig höher sind als die des kleinen.

3.6. Auswertemethoden

In den hier folgenden Unterkapiteln sollen einige grundlegende Aspekte der zur Auswertung nötigen Methoden dargestellt werden. Diese beziehen sich einerseits auf die Bestimmung der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven, die Bewertung von Unterschieden in den Verteilungen der atomaren Charakteristika sowie der Analyse der Topologie der Atomanordnung und deren Änderung.

3.6.1. Berechnung von Spannungen und Dehnungen

Verformungen mit konstanter Scherrate werden durch einen Dehnungsratentensor, Gl. (3.23), beschrieben.

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \dot{\epsilon}_{xx} & \dot{\epsilon}_{xy} & \dot{\epsilon}_{xz} \\ \dot{\epsilon}_{yx} & \dot{\epsilon}_{yy} & \dot{\epsilon}_{yz} \\ \dot{\epsilon}_{zx} & \dot{\epsilon}_{zy} & \dot{\epsilon}_{zz} \end{pmatrix} . \tag{3.23}$$

Im Allgemeinen wird durch die Deformation ein Spannungszustand im System eingestellt, der durch den (zeitabhängigen) Spannungstensor

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \tag{3.24}$$

beschrieben werden kann. Es gilt $\tau_{\alpha\beta} = \tau_{\beta\alpha}$ für $\alpha \neq \beta \in \{x, y, z\}$. Der Spannungstensor wird häufig zerlegt in einen hydrostatischen Anteil, der für Volumenänderungen verantwortlich ist, und einen reinen Scheranteil (Spannungsdeviator), bei dem die Spur (Anhang A) verschwindet (die Symmetrie ist bei folgender Formel bereits berücksichtigt):

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (\sigma_{xx} - p) & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & (\sigma_{yy} - p) & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & (\sigma_{zz} - p) \end{pmatrix}. \tag{3.25}$$

Die Spur des Spannungstensors ist mit dem hydrostatischen Druck p in dem System nach Gleichung (3.26) verbunden.

$$Sp(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{\alpha\beta=xx}^{zz} \sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} = 3p \tag{3.26}$$

In der Theorie der Plastizität ist es häufig von Bedeutung, das Einsetzen plastischer Verformung (und damit meist eine Zerstörung eines betrachteten Gegenstands) anhand vorgegebener Kriterien vorherzusehen. Diese *Fließbedingungen* werden meistens durch Bedingungen formuliert, denen die Invarianten (siehe Anhang A) des Spannungstensors, Gl. (3.24), oder bestimmte aus seinen Komponenten berechnete Größen genügen müssen. Bekannteste Beispiele dafür sind das von Mises Kriterium, nach dem die zweite Invariante des Spannungsdeviators (C_2' in Anhang A) einen bestimmten kritischen Wert nicht überschreiten darf oder das Tresca Kriterium, bei dem die maximale Schubspannung unter dem Wert der Streckgrenze bleiben muss (z. B. [159]). Weitere sind beispielsweise das Mohr-Coulomb-Kriterium (z. B. [160]) oder das Drucker-Prager-Kriterium [161].

Üblicherweise wird die Entwicklung der Spannung in Abhängigkeit von der Dehnung durch Invarianten, wie sie in den Fließkriterien vorkommen, dargestellt. Wir verwenden hier speziell die zweiten Invarianten von Spannungs- und Dehnungstensor (bzw. die Wurzeln daraus; die Einheit der zweiten Invariante des Spannungstensors hat die Einheit einer Spannung zum Qua-

drat), die als Maß der im System auftretenden Scherspannungen bzw. -dehnungen anzusehen sind[7]. Im Einzelnen gilt

$$\begin{aligned} &\text{Intensität der Scherspannungen} \equiv \\ &\qquad \sigma = \left(\frac{1}{6}\left[(\sigma_{\mathrm{I}}-\sigma_{\mathrm{II}})^2+(\sigma_{\mathrm{II}}-\sigma_{\mathrm{III}})^2+(\sigma_{\mathrm{I}}-\sigma_{\mathrm{III}})^2\right]\right)^{\frac{1}{2}}, \\ &\text{Intensität der Scherdehnungen} \equiv \\ &\qquad \epsilon = \left(\frac{1}{6}\left[(\epsilon_{\mathrm{I}}-\epsilon_{\mathrm{II}})^2+(\epsilon_{\mathrm{II}}-\epsilon_{\mathrm{III}})^2+(\epsilon_{\mathrm{I}}-\epsilon_{\mathrm{III}})^2\right]\right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{3.27}$$

Ziel dieser Arbeit ist nicht die Prüfung von Fließbedingungen für das vorliegende NiZr-System. Die Literatur enthält wenige Arbeiten in denen mit Hilfe von von Computersimulationen — insbesondere MD — Fließbedingungen amorpher Metalle analysiert werden. Beispiele sind die Arbeiten von Rottler und Robbins [162, 163] und die von Lund und Schuh [164, 165]. Experimentelle Befunde für metallische Gläser bezüglich der Fließbedingungen (z. B. [166, 167]) liefern gegensätzliche Befunde, sodass ein universelles Fließkriterium für metallische Gläser nicht angegeben werden kann (vgl. auch [168]), — was bei der Vielzahl der unterschiedlichen Arten von Gläsern auch nicht verwunderlich ist.

3.6.2. Signifikanztests

Wie in Abschnitt 3.5.3 dargelegt, ist der aktuelle Zustand eines Systems durch die Verteilung der atomaren Größen gegeben. Beispielsweise wird die potenzielle Energie pro Atom durch die Gesamtenergie geteilt durch die Anzahl der Atome angegeben; nach Gl. (3.13) bzw. (3.17) ist das der Mittelwert der atomaren Größen:

$$\text{pot. Energie pro Atom } = E_{pot}/N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} E_{pot,i}. \tag{3.28}$$

Ganz allgemein werden wir die a_i in dieser Arbeit als N Realisierungen, oder, anders ausgedrückt, eine Stichprobe vom Umfang N, einer zugrundeliegenden (unbekannten) Verteilung $P(a)$ ansehen. N muss nicht notwendigerweise die Gesamtzahl bedeuten. Es kann sich auch um eine geeignet gewählte Untermenge von Atomen handeln, deren atomare Größen betrachtet werden. Die Bewertung unterschiedlicher Stichproben geschieht mit Hilfe statistischer Analyseverfahren.

[7] In der Literatur werden diese Größen auch als *von Mises*-Spannungen bzw. -Dehnungen bezeichnet.

Basiswissen Signifikanztests

Signifikatests sind darauf ausgelegt, Aussagen über die einer Stichprobe zugrundeliegenden Verteilungsdichtefunktionen zu machen. Die Frage eines Statistikers lautet z. B., ob eine Stichprobe einer vorgegebenen Grundgesamtheit[8] entstammt, oder etwa ob zwei Stichproben einer gemeinsamen Grundgesamtheit angehören. Jeder statistische Test beruht auf der Formulierung einer Nullhypothese, deren Wahrscheinlichkeit gegenüber einer Alternativhypothese getestet wird. Signifikanztests sind dazu angelegt, die Nullhypothese zu verwerfen, sie liefern keinen Beweis für die aufgestellte Nullhypothese.

Jedem Test ist ein jeweiliger Wert der Teststatistik, seine Prüfgröße, zugeschrieben, die nach einer bestimmten Formel aus den Stichprobenwerten berechnet wird. Diese Prüfgröße gehorcht einer, je nach verwendetem Test, unterschiedlichen Verteilungsfunktion. Der Wert der Prüfgröße erlaubt damit die Berechnung der so genannten Irrtumswahrscheinlichkeit (auch p-Wert genannt, vom englischen p-value, ***p****robability*-value), die eine Aussgage darüber macht, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, dass der aus den Daten gewonnene Wert der Teststatistik (unter Annahme der Gültigkeit der Nullhypothese) rein zufällig entstanden ist. Folgender allgemeiner Sprachgebrauch hat sich eingebürgert (in Klammern sind Abkürzungen bzw. Symbole für die einzelnen Signifikanzniveaus angegeben):

$p > 0.05$ nicht signifikant (ns)

$p \leq 0.05$ signifikant ($*$)

$p \leq 0.01$ sehr signifikant ($**$)

$p \leq 0.001$ höchst signifikant ($***$)

Bei einem p-Wert größer als 0.05 macht es keinen Sinn von der Nullhypothese abzusehen — sie wird akzeptiert[9] —, weil die Wahrscheinlichkeit eines zufällig zustande gekommenden Ergebnisses größer als 5 % ist. Je kleiner der p-Wert ist, desto kleiner ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein gefundenes Testergebnis bei Annahme der Richtigkeit der Nullhypothese nur durch Zufall auftreten kann. Es macht dann Sinn, und zwar mit höherer Berechtigung je kleiner der p-Wert ist, die Nullhypothese zu verwerfen. Erst durch die Verbesserung der Computertechnologie und der numerischen Statistik in den vergangenen Jahrzehnten ist es möglich, den p-Wert für beliebige Tests direkt auszurechnen. Daher war es früher nötig, vor einem Signifikanztest eine Grenze für die Irrtumswahrscheinlichkeit festzulegen, das so genannte Signifikanzniveau

[8] Grundgesamtheit bedeutet hier einfach Verteilungsdichtefunktion.

[9] Hier sei nochmals betont, dass das nicht-verwerfen der Nullhypothese nicht deren Aussage beweist. Vielmehr besagt dieses Testresultat, dass es unter den gegebenen Bedingungen keinen Grund zu der Annahme gibt, dass die Nullhypothese falsch ist. Das ist ein feiner Unterschied.

α (z. B. $\alpha = 0.05$). Zu diesem Niveau konnte dann bei Kenntnis der Verteilung, der die Daten die zu Prüfen waren gehorchten, der Wert der Teststatistik berechnet werden. Ablehnung oder Beibehalten der Nullhypothese erfolgte dann durch einen Vergleich der Teststatistik mit einer für den Test charakteristischen Verteilungstabelle.

Im Zusammenhang mit den statistischen Signifikanztests ist von Bedeutung, dass es zwei unterschiedliche Arten von Fehlern gibt: Es ist einerseits möglich, die Nullhypothese abzulehnen obwohl sie wahr ist (Fehler 1. Art), andererseits kann man sie beibehalten obwohl sie falsch ist (Fehler 2. Art). Wird eine Grenze von $p = 0.001$ gewählt (Aussage des Tests ist höchst signifikant), ist die Wahrscheinlichkeit einen Fehler 1. Art zu begehen sehr gering — nämlich gerade $\leq 100 \cdot p = 0.1$ %. Die Wahrscheinlichkeit einen Fehler 2. Art zu machen hängt von den Stichprobenumfängen, der Größe des Unterschieds in den zugrundeliegenden Grundgesamtheiten und von der Art des verwendeten Tests ab. Ist das Testergebnis nicht signifikant, ist die Gefahr eines Fehlers 2. Art umso kleiner, je größer die im Test errechnete Irrtumswahrscheinlichkeit, der p-Wert, ist.

Wie oben bereits angedeutet, können einzelne Stichproben bzgl. ihrer Grundgesamtheit analysiert werden oder zwei Stichproben miteinander verglichen werden. Im ersten Fall könnte man sich beispielsweise fragen, ob eine gegebene Stichprobe einer Normalverteilung mit Mittelwert μ_0 entspricht, oder nicht. Die Nullhypothese wäre dann: Der Mittelwert der Grundgesamtheit ist μ_0. Die Alternativhypothese vielleicht: Der Mittelwert der Grundgesamtheit ist nicht μ_0. Im zweiten Fall, ob zwei verschiedene Stichproben die gleiche Streuung aufweisen. Hier lautet die Nullhypothese: Die Streuungen sind gleich, also $\sigma_1 = \sigma_2$. Die zugehörige Alternativhypothese kann sein: Die Varianzen unterscheiden sich, also $\sigma_1 \neq \sigma_2$. Es gibt Tests, deren Aussagekraft von der Wahl der Alternativhypothese abhängt. Im Beispiel mit den Varianzen wäre als Alternative auch vorstellbar: Die Varianz der Stichprobe 1 ist größer als die von Stichprobe 2, also $\sigma_1 > \sigma_2$.

Bekannte Tests zum Vergleich zweier Stichproben sind der *Student*'sche t-Test auf übereinstimmende Mittelwerte oder der F-Test für den Vergleich der Varianzen. Beiden Tests ist gemeinsam, dass sie als Voraussetzung die Annahme haben, dass die Grundgesamtheit der Stichproben einer Normalverteilung entspricht. Es gibt weitere so genannte parameterfreie Tests, die zum einen auf die Annahme einer normalverteilten Grundgesamtheit verzichten können und darüberhinaus nicht auf, aus den Stichproben berechnete, Größen wie z. B. Mittelwert, Median, Varianz etc. zurückgreifen müssen (daher parameterfrei). Darunter fällt unter anderem der Wilcoxon-Mann-Whitney Test auf unterschiedliche Mittelwerte (sind die Verteilungen gegeneinander Verschoben) oder der Kolmogorov-Smirnov Test, der die aus den Stichproben ermittelten (empirischen) Verteilungsfunktionen (nicht die Dichtefunktionen) miteinander vergleicht, und aufgrund der maximalen Differenz zwischen beiden

Verteilungsfunktionen eine Aussage darüber gestattet, ob die zugrundeliegenden kontinuierlichen Verteilungen beider Stichproben gleich oder unterschiedlich sind.

Auswahl der Signifikanztests

Die in Abschnitt 3.5.3 gezeigten Verteilungen der unterschiedlichen atomaren Charakteristika zeigen auffällige Abweichungen von der Normalverteilungsform. Wie weiter oben bemerkt, können Stichproben auch auf die Zugehörigkeit zu einer bestimmten Population, d. h. Grundgesamtheit hin, untersucht werden. Eine Möglichkeit eines solchen Tests ist in Anhang D dargestellt. Die Analyse bestätigt die auch schon visuell in den Histogrammen erkennbare Nichtnormalität. Die Möglichkeit einer Transformation der Daten (vgl. Anhang D) wird nicht durchgeführt, da es geeignete parameterfreie Tests gibt, die für unsere Zwecke ausreichend sind.

Prinzipiell können Stichproben bzgl. bestimmter, die Verteilung charakterisierender, Eigenschaften untersucht werden. Man unterscheidet dabei

Lokalisationsmaße: Maße für die mittlere Lage einer Verteilung (arithmetischer, geometrischer und harmonischer Mittelwert, Median, Dichtemittel, Interdezilbereich).

Dispersionsmaße: Maße, die die Variabilität der Verteilung kennzeichnen (Varianz, Standardabweichung, Spannweite, Variationskoeffizient, Interdezilbereich).

Formmaße: Maße, die die Abweichung einer Verteilung von der Normalverteilung charakterisieren (einfache Schiefe- und Wölbungsmaße sowie die Momentenkoeffizienten a_3 und a_4[10]).

Wir wählen speziell folgende Tests:

- Testen auf Lageunterschiede mit Hilfe des Wilcoxon-Mann-Whitney Tests.
- Testen auf gleiche Dispersion mit Hilfe des Ansari-Bradley Tests.
- Testen auf andere Unterschiede mit Hilfe des Kolmogorov-Smirnov Tests.

[10] Sie können für eine Stichprobe mit n Werten x_i geschätzt werden über:

$$a_3 = \frac{\sum f_i (x_i - \bar{x})^3}{n \cdot s^3} \qquad a_4 = \frac{\sum f_i (x_i - \bar{x})^4}{n \cdot s^4} - 3,$$

mit den relativen Häufigkeiten f_i, dem arithm. Mittel $\bar{x}$ und der Standardabweichung s.

Lageunterschiede Es wird der auf dem Wilcoxon-Test für unabhängige Stichproben basierende Rangtest nach Mann und Whitney [169] benutzt. Dieser Test ist sensitiv auf Lageunterschiede (Mittelwert, Median). Man bildet aus den einzelnen Stichproben $(x_1, \ldots, x_{n_1})$ und $(y_1, \ldots, y_{n_2})$ eine der Größe nach geordnete Folge $(z_1, \ldots, z_{n_1+n_2})$. Die Nummer, die jedem Stichprobenwert zukommt wird als *Rang*, *Rangplatz* oder *Rangzahl* bezeichnet. Der Rang von z_i ist daher i. Die Summe der Rangzahlen, die auf Stichprobenwerte aus der x-Stichprobe entfallen sei mit R_1 bezeichnet, entsprechend die die auf Werte der y-Stichprobe fallen mit R_2. Es werden die Werte

$$U_1 = n_1 \cdot n_2 + \frac{n_1(n_1+1)}{2} - R_1 \qquad U_1 = n_1 \cdot n_2 + \frac{n_2(n_2+1)}{2} - R_2 \tag{3.29}$$

mit

$$U_1 + U_2 = n_1 \cdot n_2 \tag{3.30}$$

gebildet, der kleinere der beiden Größen U_1 bzw. U_2 ist die Prüfgröße U. Der Test wird mit Hilfe der Statistiksoftware R [170] berechnet. Die Software bietet eine Anzahl an Daten des Tests an. Unter anderem den p-Wert, hier als p_{WMW} bezeichnet, und eine Schätzung für den Unterschied in den Medianen der Grundgesamtheiten $\Delta\hat{\mu} = \hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2$[11] mit zusätzlichem 95 %-Vertrauensbereich (engl.: *confidence interval*).

Unterschiede in den Streuungen Um die Dispersion in zwei Datensätzen miteinander zu vergleichen, wird der parameterfreie Test nach Ansari-Bradley (z. B. [171]) aus der Software R verwendet. Da die Routine voraussetzt, dass sich beide Datensätze nicht in ihrem Mittelwert unterscheiden, wird mit transformierten Stichproben nach

$$x_i' = x_i - \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{n} \tag{3.31}$$

gerechnet. Die Streuung der Daten bleibt trotz der Verschiebung erhalten. Resultate dieser Routine sind beispielweise der p-Wert, als p_{AB} bezeichnet, der den Fehler angibt den man

[11] Es handelt sich um den Hodges-Lehmann-Schätzer der Differenz, der definiert ist durch

$$\Delta\hat{\mu} = \text{median}\left\{x_i - y_j \quad | \quad i = 1, \ldots, n_1; j = 1, \ldots, n_2\right\}.$$

macht bei Ablehnung der Nullhypothese. Weiterhin wird eine Schätzung des Quotienten σ_1/σ_2 der Standardabweichungen der Grundgesamtheiten[12] (plus Konfidenzintervall) ausgegeben.

Andere Unterschiede Um zu prüfen, ob sich die Verteilungen auf eine andere Weise signifikant unterscheiden, also zusätzlich zu einer möglichen Verschiebung oder eines Unterschieds in den Streuungen, werden die Stichproben skaliert nach

$$x_i' = \frac{x_i - \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{n}}{s} \tag{3.32}$$

mit

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(x_i - \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{n} \right), \tag{3.33}$$

und damit ein parameterfreier Kolmogorov-Smirnov Test [172] durchgeführt. Dieser bewertet den maximalen Unterschied der aus den Stichproben bestimmten empirischen Verteilungsfunktionen. Auch hierfür wird die Software R verwendet.

3.6.3. Korrelationsanalyse

Um zu testen, wie stark zwei verschiedene atomare Größen, oder allgemeiner, zwei beliebige Merkmale, voneinander abhängen, wird die Korrelation anhand des Korrelationskoeffizienten R[13] berechnet. Anschaulich gesprochen bildet man eine Auftragung zweier Kenngrößen a_i gegen b_i und bewertet deren lineare Abhängigkeit.

Basiswissen Korrelationsanalyse

Der Korrelationskoeffizient kann zwischen -1 und 1 liegen. Werte, die dem Betrag nach nah bei 1 liegen, kennzeichnen einen hohen Grad an Abhängigkeit, Werte um 0 bedeuten eine sehr schwache Korrelation. Negative Werte bedeuten eine gegensätzliche Abhängigkeit, d. h. der Zunahme der einen Größe entspricht die Abnahme der anderen. Andersherum spricht man von positiver Korrelation, wenn die Zunahme der einen Variablen gleichzeitig ein Zunehmen der anderen bedeutet. Folgender Sprachgebrauch hat sich eingebürgert (siehe z. B. [173]):

$0 < |R| < 0.2$ sehr geringe Korrelation

$0.2 < |R| < 0.5$ geringe Korrelation

[12] Es handelt sich auch hier um den Hodges-Lehmann-Schätzer für den Quotienten der Streuungen, der bestimmt wird durch

$$\sigma_1/\sigma_2 = \text{median}\left\{x_i/y_j \quad | \quad i = 1, \ldots, n_1; j = 1, \ldots, n_2\right\}.$$

[13] Kursives R, nicht zu verwechseln mit der Statistiksoftware R.

$0.5 < |R| < 0.7$ mittlere Korrelation

$0.7 < |R| < 0.9$ hohe Korrelation

$0.9 < |R| < 1$ sehr hohe Korrelation

Eine statistische Korrelationsanalyse beinhaltet zum einen eine Abschätzung des Korrelationskoeffizienten, zum anderen bewertet sie die Signifikanz der Abhhängigkeit (es gelten die p-Werte wie oben). Zwei zu vergleichende Stichproben können höchst signifikant korreliert sein aber trozdem einen nur auf sehr geringe Korrelation hindeutenden Wert für R aufweisen. Die verwendeten Tests unterscheiden sich hinsichtlich der Berechnung des Korrelationskoeffizienten und werden mit Hilfe der Statistiksoftware R [170] durchgeführt.

Es kann der Pearson'sche Korrelationskoeffizient bestimmt werden. Dieser wird für zwei Stichproben x_i und y_i, $i = 1, \ldots, N$, über folgende Formel bestimmt:

$$R_P = \frac{N \sum_i (x_i \cdot y_i) - \sum_i x_i \cdot \sum_i y_i}{\sqrt{(N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2) \cdot (N \sum_i y_i^2 - (\sum_i y_i)^2)}}. \tag{3.34}$$

Unter der Annahme normalverteilter Stichproben kann die Signifikanzprüfung anhand der t-verteilten ($N - 2$ Freiheitsgrade) Größe

$$t_P = |R_P| \cdot \sqrt{\frac{N-2}{1-R_P^2}} \tag{3.35}$$

erfolgen.

Außerdem kann der Spearman'sche Rangkorrelationskoeffizient bestimmt werden. Dieser berechnet sich über die Differenzen der Ränge d_i jedes Wertepaares über die Formel:

$$R_S = 1 - \frac{6 \cdot \sum_i d_i^2}{N(N^2 - 1))}. \tag{3.36}$$

Die Signifikanzprüfung erfolgt über die Prüfgröße

$$t_S = |R_S| \cdot \sqrt{\frac{N-2}{1-R_S^2}}, \tag{3.37}$$

die mit $df = N - 2$ Freiheitsgraden t-verteilt ist, unabhängig von der zugrundeliegenden Verteilungsfunktion der Stichproben.

Eine dritte Berechnung kann mit Hilfe von Kendalls Tau Methode durchgeführt werden. Dazu werden die Werte der einen Variable der Größe nach sortiert, sodass eine monoton aufsteigende Rangreihe entsteht (Ankerreihe, Rangplätze von 1 bis N). Die Rangplätze der

anderen Variable (auf die gleiche Weise umsortiert wie die Ankerreihe) werden zugeordnet (Vergleichsreihe). Die Zahl der Inversionen I ist die Häufigkeit, mit der ein fester Rangplatz der Vergleichsreihe von einem kleineren Rangplatz gefolgt wird. Die Zahl der Proversionen P gibt an, wie häufig ein größerer Wert folgt. Mit den Größen $S = P - I$ und

$$R_K = \frac{2S}{N(N-1)} \tag{3.38}$$

kann die Signifikanzprüfung über die, bei beliebigen Verteilungen der Stichproben, normalverteilte Prüfgröße

$$z_K = \frac{|R_K|}{\sqrt{\frac{2(2N+5)}{9N(N-1)}}} \tag{3.39}$$

durchgeführt werden.

Aufgrund der in dieser Arbeit vorliegenden Daten werden wir uns hauptsächlich auf die Verwendung der ersten zwei Berechnungsmethoden beschränken (Pearson, Spearman).

3.6.4. Methoden zur Analyse des Materietransports

Bei Computersimulationen in der Festkörper- und Materialphysik ist es von Bedeutung, Atome entsprechend ihrer Postitionsänderungen oder ähnlicher Eigenschaften innerhalb der Probe auszuwählen und damit weitere Analysen zu machen oder sie einfach abzubilden. Speziell auf dem Gebiet der metallischen Gläser werden aus den in der Simulation zugänglichen Atomtrajektorien Aussagen über mögliche atomare Prozesse und deren räumlicher Verteilung gewonnen. Im Vordergrund dabei stehen Fragen nach der Diffusion und den Relaxationsphänomenen in Gläsern. Eine übliche Methode, um beispielsweise Bereiche hoher Mobilität — also Bereiche erhöhter atomarer Dynamik — darzustellen, ist die Auswertung der mittleren quadratischen Verschiebung aller Atome in einer festgelegten Zeit. Die Atome, die einen bestimmten Wert überschreiten, können ausgewählt und grafisch dargestellt werden.

Dazu in enger Beziehung steht das Verhalten unter mechanischer Beanspruchung, welches seinerseits nachhaltig auf Materietransport in der betrachteten Probe beruht. Zur Untersuchung des Materietransports bzw. der atomaren Umlagerungen werden zum einen die atomaren Verschiebungen und zum anderen die Änderung in der der Struktur zugrundeliegenden Topologie betrachtet.

Atomare Verschiebungen

Aus der Position eines Atoms zu zwei unterschiedlichen Zeiten t und $t+\tau$ wird die Differenz nach Gl. (3.40) gebildet. $\mathbf{x}_i(\,\cdot\,)$ sind die Koordinaten des i-ten Atoms zu den jeweiligen Zeitpunkten.

$$\mathbf{u}_i(\tau, t) = \mathbf{x}_i(t+\tau) - \mathbf{x}_i(t) \tag{3.40}$$

Aus diesen Verschiebungsvektoren wird ein skalares Maß $u_i(\tau, t) = |\mathbf{x}_i(t+\tau) - \mathbf{x}_i(t)|$ durch Normbildung gewonnen, sodass eine einfache Vergleichsmöglichkeit gegeben ist. Atome mit einem hohen Wert von $u_i(\tau, t)$ sind beweglicher als die, welche für die gleiche Zeitdifferenz einen deutlich geringeren Wert aufweisen. Für Untersuchungen der Richtungsabhängigkeit können auch die Koordinaten des Verschiebungsvektors, $\mathbf{u}_i(\tau, t) = (u_i^x(\tau, t), u_i^y(\tau, t), u_i^z(\tau, t))$, separat betrachtet werden.

Mit Hilfe der atomaren Verschiebungen kann durch Mittelung über die Zeit t und die Atome der Sorte ℓ (Ni oder Zr) das mittlere Verschiebungsquadrat nach Gl. (3.41) bestimmt werden.

$$U_\ell^2(\tau) = \left\langle\left\langle u_i^2(\tau, t)\right\rangle\right\rangle_{i\in\ell,t} \tag{3.41}$$

Für große Zeiten ist dies proportional zur Diffusionskonstante der betrachteten Atomsorte.

$$D_\ell \sim \lim_{\tau\to\infty} \frac{U_\ell^2(\tau)}{\tau} \tag{3.42}$$

Topologieänderungen

Aussagen über die Einzelbewegung eines jeweils herausgegriffenen Atoms heraus erhält man durch die Betrachtung der Topologieänderungen im System. Änderungen in der Topologie erlauben die Analyse der Verschiebung von Atomen bzw. Atomgruppen relativ zueinander. Das ist von Bedeutung, da es einen Unterschied macht, wenn sich ein Atom um einen bestimmten Wert verschiebt, ob dieses Atom und seine Nachbarn eine gleichwertige Bewegung ausführen oder ob sich das betrachtete Atom aus dem Verbund seiner Nachbarn herausbewegt, ohne dass diese sich mitbewegen.

Teichler hat gezeigt [128], dass die strukturelle Relaxation im NiZr-System im Bild der Topologieänderungen beschreibbar ist. Eine Topologie im System wird definiert, basierend auf der ausgeprägten Nahordnung, die in den starken Fluktuationen bei kurzen Abständen in den radialen Verteilungsfunktionen (Abschnitt 3.5.1) deutlich wird: Zwei Atome i und j der Atomsorte I bzw. J werden als (topologisch) gebunden angesehen, wenn ihr Abstand kleiner ist als das erste Minimum R_{IJ} der radialen Verteilungsfunktion $g_{\mathrm{IJ}}(r)$. Um zu bewerten, ob zwei Atome eine Bindung ausgebildet haben oder nicht, besteht einerseits die Möglichkeit der Verwendung der Atomkoordinaten der lokalen Potenzialminima $\mathbf{x}_i^0(t)$ (wie in [128]). Ande-

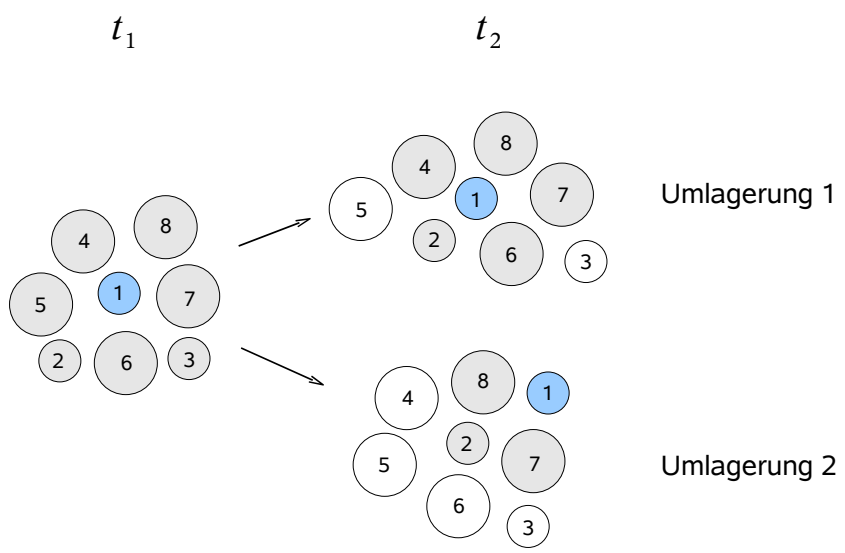

Abbildung 3.13: Zwei mögliche Umlagerungen einer 2-dimensionalen binären Atomkonfiguration. Das blau skizzierte Atom sei dasjenige, für welches die Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ ausgewertet werden soll. Die grauen Atome sollen eine Bindung mit dem blauen haben. Für den Umlagerungsschritt 1 gilt ($t_2 = t_1 + \tau$): $\lambda_1^{\mathrm{Zr}}(\tau, t_1) = 1$, für Schritt 2: $\lambda_1^{\mathrm{Zr}}(\tau, t_1) = 3$.

rerseits können direkt die Koordinaten $\mathbf{x}_i(t)$ aus der Simulation verwendet werden. Für die Auswertungen dieser Arbeit wird durchweg letztere Variante verwendet.

Sind Bindungen zwischen Atomen einer Konfiguration bestimmt, ist es möglich, die Änderungen in den Nächste-Nachbar-Beziehungen zu untersuchen. Speziell führen wir für jedes Atom die Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ ein, die angibt, wieviele Zr-Nachbaratome das entsprechende Atom zwischen den Zeiten t und $t + \tau$ verloren hat:

$$\begin{aligned} \lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) \equiv\ & \text{Anzahl der Zr-Nachbarn von Atom } i \text{ zur Zeit } t \\ & - \text{Anzahl der Zr-Atome, die bei } t \text{ und } t + \tau \text{ Nachbarn von } i \text{ sind.} \end{aligned} \tag{3.43}$$

Zur Veranschaulichung dieser Größe ist in Abbildung 3.13 eine schematische Darstellung (2-dimensional) von Nachbarschaftsänderungen gegeben. Es sind zwei unterschiedliche Umlagergungsschritte einer Atomgruppe dargestellt. Im ersten Fall (Umlagerung 1) handelt es sich um eine moderate Änderung der Struktur der Atomgruppe, dass betrachtete Atom bleibt mehr oder weniger in seinem Käfig *gefangen*. Der zweite Fall (Umlagerung 2) stellt das Entweichen des zentralen Atoms aus dem Käfig seiner Nachbaratome dar.

Für spätere Auswertungen ist es von Bedeutung, die Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ noch ein wenig zu untersuchen. Vorab muss angemerkt werden, dass der Wert von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ für ein beliebig herausge-

griffenes Atom den Wert der Anzahl seiner nächsten Zr-Nachbarn zur Zeit t nicht übersteigen kann: Maximal verliert ein Atom alle seine zur Zeit t vorliegenden nächsten (Zr-)Nachbarn. Tabelle 3.3 listet die mittlere Anzahl nächster Zr-Nachbarn auf, wobei für die kleinen Systeme über zehn, bei den großen über fünf Konfigurationen gemittelt wird. Zr-Atome um Ni werden gezählt, wenn sie näher als 0.39 nm liegen, um Zr, wenn sie einen Abstand kleiner als 0.45 nm haben (vgl. auch die radialen Verteilungsfunktionen in Abschnitt 3.5.1). Für die angegebenen Temperaturen und die beiden Systemgrößen liegt die mittlere Anzahl der Zr-Atome um ein gegebenes Ni-Atom bei 7. Dagegen besitzt ein Zr-Atom im Mittel 10 Zr-Nachbarn.

In [128] wird anhand des Zerfalls der Korrelation der Nächste-Nachbar-Beziehungen gezeigt, dass die strukturelle Relaxation, d. h. atomare Umlagerungen, Topologieänderungen hervorruft. Der Einfluss solcher Topologieänderungen auf die Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ sei hier kurz anhand der Daten der Ausgangskonfigurationen gezeigt.

Abbildung 3.14 zeigt den relativen Anteil an Ni- und Zr-Atomen, die im Vergleich mit einer beliebig gewählten Startkonfiguration (aus den Herstellungssimulationen) keinen ihrer Zr-Nachbarn verloren haben in Abängigkeit von der Zeit. Bereits innerhalb der ersten 100 ps führen Temperaturfluktuationen für beide Atomsorten zu einem Abfall auf etwa 90 % bzw. 84 % im Falle des Ni und etwa 74 % und 65 % für Zr bei 700 bzw. 1000 K. Der weitere Zerfall für die geringe Temperatur ist sehr schwach im Vergleich zu den Daten für 1000 K. Nach einer nominellen Zeit von 200 ns bleiben es bei 700 K noch immer ca. 87 % der Ni-Atome und etwa 71 % der Zr-Atome die keinen ihrer Zr-Nachbarn aus der Anfangskonfiguration verloren haben. Bei der höheren Temperatur sind es aufgrund der deutlich höheren Dynamik noch etwa 42 % Ni und 48 % Zr.

Tabelle 3.3: Mittlere Anzahl nächster Zr-Nachbarn bei einem nächsten Nachbarabstand (Minimum der radialen Verteilungsfunktion) von 0.39 nm für Ni-Zr-Abstände und 0.45 nm für Zr-Zr-Abstände.

Temperatur (K)	Systemgröße	Sorte	Anzahl Zr-Nachbarn
700	5184	Ni	7.21
700	5184	Zr	9.99
810	5184	Ni	7.21
810	5184	Zr	9.97
1000	5184	Ni	7.21
1000	5184	Zr	9.94
700	17500	Ni	7.22
700	17500	Zr	9.97
1000	17500	Ni	7.21
1000	17500	Zr	9.93

Die Abnahme des Anteils der Atome, die keinen ihrer Zr-Nachbarn verloren haben führt unweigerlich zu einer Zunahme von Atomen, die eine gewisse Anzahl von Zr-Atomen verloren haben. Um dies zu demonstrieren, ist in Abbildung 3.15 und 3.16 der jeweilige Anteil von Ni- bzw. Zr-Atomen mit einem bestimmten Wert von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ für $\tau = 0.5$ ns, 1 ns, 5 ns, 10 ns und 50 ns dargestellt. Die gezeigten relativen Anteile werden gewonnen durch Mittelung über vier bis fünf Ausgangszeiten t. Abbildung 3.15 zeigt, dass der Anteil der Ni- und der Zr-Komponente mit bestimmten Werten von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ auf einer Zeitskala von 50 ns bei 700 K kaum variiert. Für Ni ist eine sehr leichte Tendenz der Abnahme für $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 0$ erkennbar, was dazu führt, dass für $\tau = 50$ ns immerhin (im Mittel) 0.13 % der Ni Atome ein Wert von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 5$ und 0.07 % > 5 zeigen. Für Zr gibt es im Mittel nach 50 ns 0.03 % mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 4$. Das sind für die Konfigurationen mit jeweils 2592 Ni- und Zr-Atomen allerdings nicht mehr als etwa 1 – 3 Atome.

Deutlich mehr Veränderung findet bei den Werten der relativen Anteile für 1000 K statt, zu sehen in Abb. 3.16. Mit zunehmender Zeit ist hier ein stetiger Abfall des Anteils der Atome (Ni und Zr) mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 0$ zu sehen (das, was auch in Abb. 3.14 ersichtlich ist). Für Ni und Zr nimmt mit zunehmender Zeit τ der Anteil an Atomen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) \geq 2$ zu. Hervorzuheben ist der Verlauf des Anteils an Ni-Atomen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 1$: Diese Größe bleibt bei 1000 K relativ konstant und nimmt zu größeren Zeiten τ sogar ab. Der Grund dafür liegt in der unterschiedlichen Konfigurationsdynamik beider Atomsorten. Die Kurzzeitfluktuationen auf der Pikosekundenskala, beispielsweise atomare Vibrationen oder sehr geringe Verschiebungen der Nachbaratome (vgl. Umlagerung 1 in Abb. 3.13), führen dazu, dass Atome schnell einen, vielleicht sogar zwei, ihrer zur Ausgangszeit vorliegenden Zr-Nachbarn verlieren. Auf längeren Zeitskalen zeigen dann vor allem Ni-Atome bei der höheren Temperatur Prozesse,

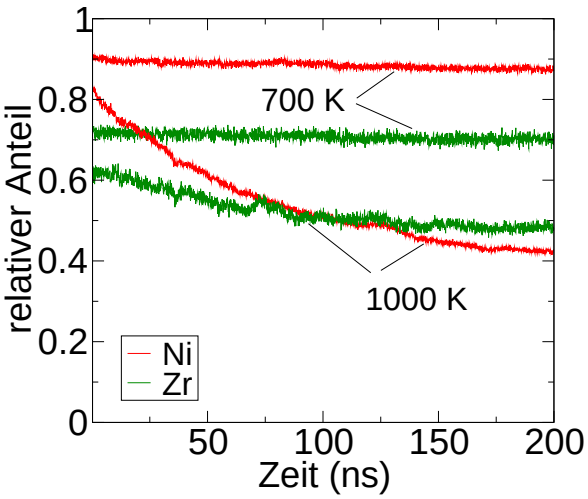

Abbildung 3.14: Relativer Anteil von Ni- bzw. Zr-Atomen, für die $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 0$ gilt bei 700 und 1000 K. Die Zeit misst den zeitlichen Abstand τ von der Vergleichskonfiguration.

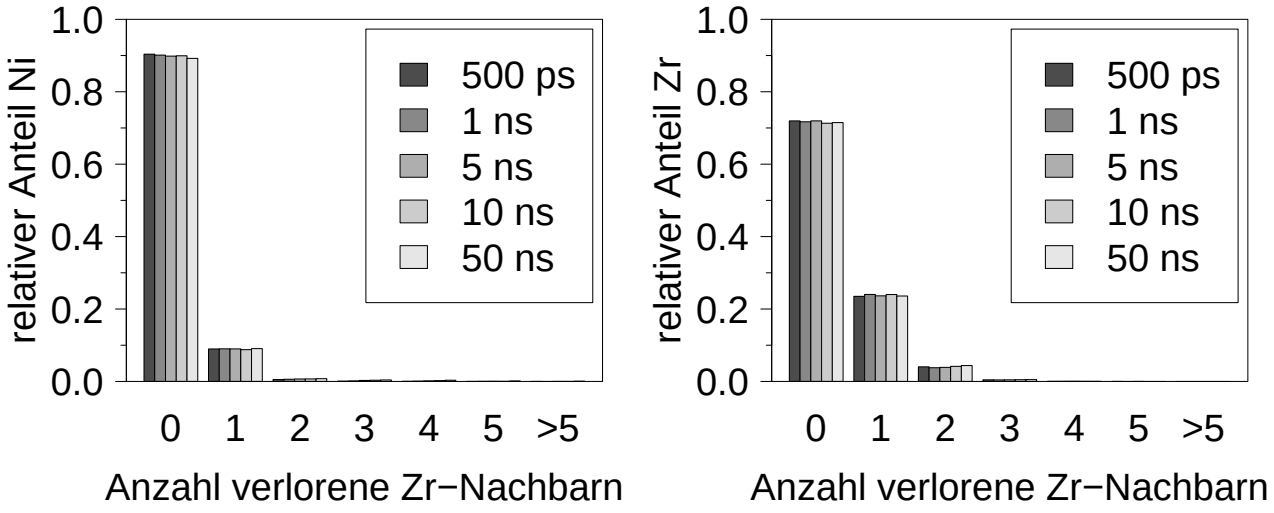

Abbildung 3.15: Relativer Anteil von Ni- (links) bzw. Zr-Atomen (rechts) mit unterschiedlichen Werten für $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ bei 700 K und verschiedenen 'Wartezeiten' τ.

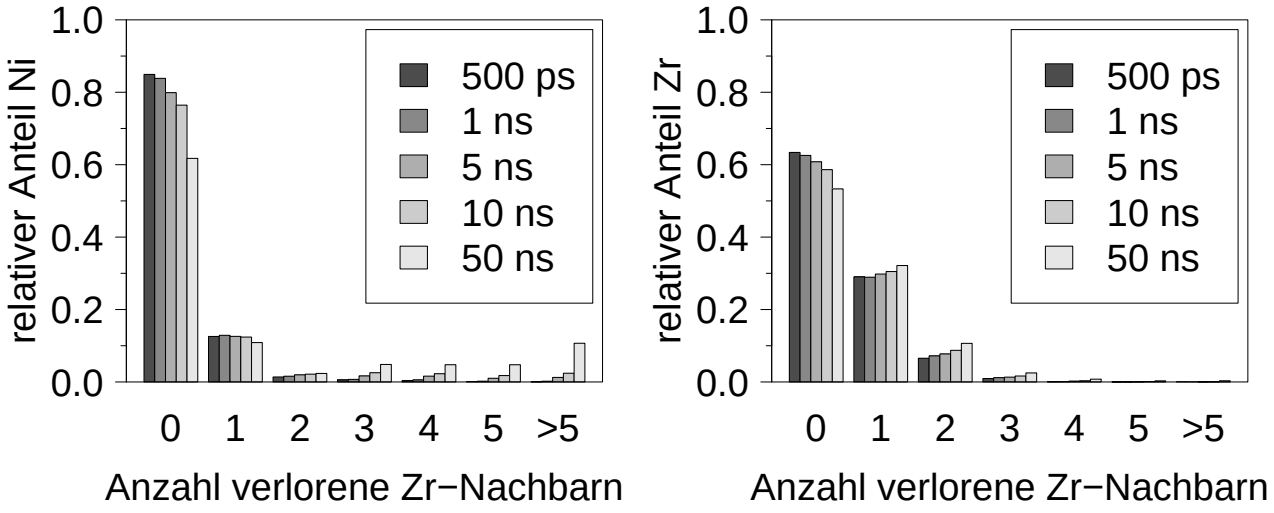

Abbildung 3.16: Wie Abbildung 3.15, hier bei 1000 K

die als Verlassen des aus den Nachbaratomen gebildeten Käfigs angesehen werden können (vgl. Umlagerung 2 in Abb. 3.13), womit der Anteil an Ni-Atomen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) = 1$ deutlich geringer wird als für kurze Zeitabstände τ.

4. Simulationen zur plastischen Verformung

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit den Simulationen zur plastischen Verformung und deren Analyse. Zum einen werden volumentreue, reine Scherungen mit konstanter Scherrate der Ausgangsproben betrachtet, zum anderen Nachverformungen von vorverformten Proben, die einerseits durch erneute Scherungen bei konstanter Scherrate verformt werden und andererseits durch Verformung unter einer aufgebrachten Spannung.

4.1. Vorbemerkungen

Die Verformung unter vorgegebener Scherrate führt für unser $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Modellsystem zu sehr charakteristischen Spannungs-Dehnungs-Kurven [39]. Die spezielle Form, die in Abschnitt 4.2 genauer dargestellt wird, ist ein besonderes Merkmal der Verformung metallischer Gläser bei hohen Scherraten und ist gekennzeichnet durch einen linearen Anstieg für geringe Dehnungen und ein Fließen bei konstanter Fließspannung bei hohen Dehnungen; der Übergang in den Fließbereich ist geprägt durch ein deutlich ausgebildetes Spannungsmaximum. Analysen der Konfigurationen aus dem Fließbereich zeigen, dass dieser durch eine erhöhte potenzielle Energie pro Atom gekennzeichnet ist, durch eine Änderung in der Struktur (in [39] anhand des Wendt-Abraham-Parameters für das Zr-Subsystem (vgl. Abschnitt 3.5.2)) und durch ein stark geändertes Fließverhalten (Abnahme der Viskosität um bis zu vier Größenordnungen). Verantwortlich für diese Änderungen ist ein Übergang vom relaxierten Glas zu einem verformungsinduzierten getriebenen *Fließzustand*. In [39] werden nur über die gesamte Probe gemittelte Größen betrachtet, womit eine Auskunft über möglicherweise unterschiedliche Beteiligung verschiedener Raumbereiche an dem Übergang in den Fließzustand unauflösbar bleibt.

4.2. Die Spannungs-Dehnungs-Kurve

Um den prinzipiellen Verlauf der Spannungs-Dehnungs-Kurven aufzuzeigen und die im weiteren häufig verwendeten Begriffe zu erläutern, sei an dieser Stelle als Beispiel eine Verformungssimulation betrachtet. Es handelt sich um einen dynamischen Scherversuch mit einer vorgegebenen Scherrate von $\dot{\epsilon} = 10$ %/ns bei einer Temperatur von 700 K.

Der Verlauf der Spannung in Abhängigkeit von der Dehnung lässt sich in drei Bereiche einteilen (vgl. Abb. 4.1):

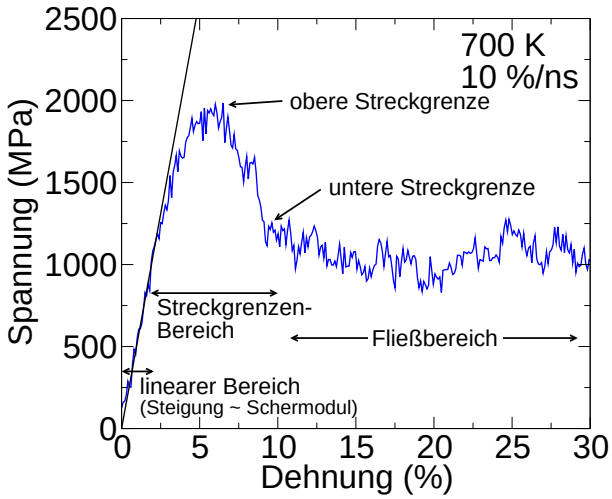

Abbildung 4.1: Spannungs-Dehnungs-Kurve (blau) zur Erläuterung der unterschiedlichen Bereiche und zur Begriffsfestlegung. Die Scherrate ist 10 %/ns, die Simulationstemperatur 700 K.

- *linearer Bereich*: Die Zunahme der Spannung hängt linear von der Dehnung ab. Dieser Bereich kann als elastischer Bereich angesehen werden. Die Steigung ist proportional zum Schermodul des Systems (Steigung $= 2 \cdot G$).

- *Streckgrenzenbereich*: In diesem Dehnungsintervall beginnt die Spannung vom linearen Anstieg abzuweichen, durchläuft dann ein Maximum und fällt im hinteren Teil dieses Bereiches ab auf einen Wert, der deutlich unter dem Maximalwert liegt. Der Maximalwert wird hier als *obere Streckgrenze*, der Abknickpunkt am Ende dieses Bereiches als *untere Streckgrenze* bezeichnet.

- *Fließbereich*: Nach dem Abknicken am Ende des Streckgrenzenbereichs erfolgt die Dehnungänderung ohne eine merkliche Änderung der Spannung. Die Spannung wird in diesem Bereich als mehr oder weniger konstant angesehen und im Folgenden als *Fließspannung* oder *Plateauspannung* bezeichnet.

In den nächsten Abschnitten werden die Änderungen der Spannungs-Dehnungs-Kurven bei Variation bestimmter Parameter dargestellt. Hier ist besonderes Augenmerk auf die Phänomenologie gelegt. Dabei geht es in den Abschnitten 4.2.1 bis 4.2.3 vor allem um die Änderung physikalischer Parameter, wohingegen Abschnitt 4.2.4 die Frage nach der Abhängigkeit der Ergebnisse von der Systemgröße behandelt.

4.2.1. Abhängigkeit von der Temperatur

Abbildung 4.2 zeigt Spannungs-Dehnungs-Kurven für jeweils drei Temperaturen unterhalb der kalorischen Glastemperatur 1050 K für eine Scherrate von 10 %/ns und 1 %/ns. Die Daten

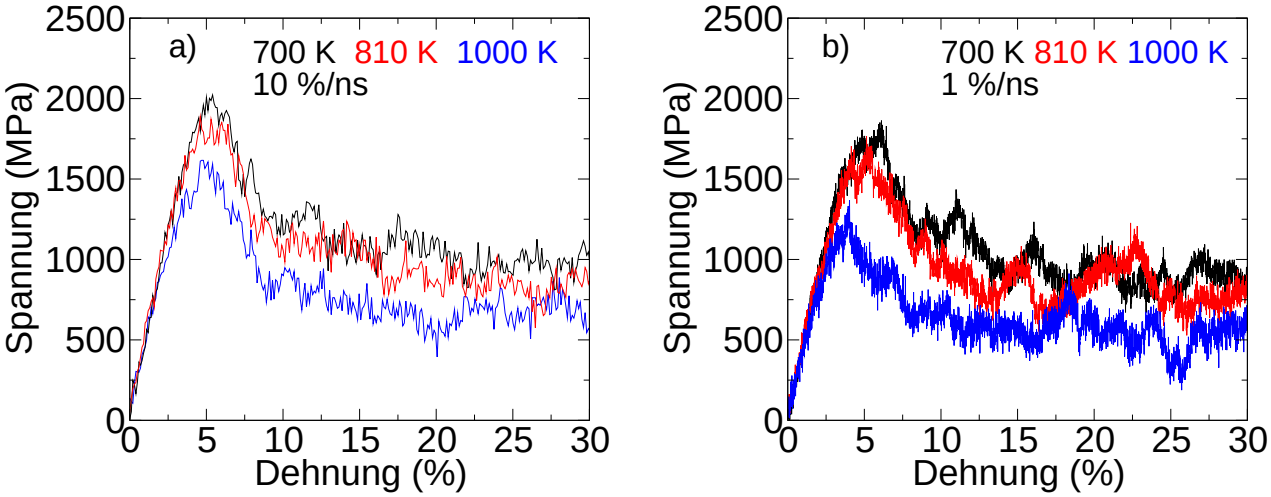

Abbildung 4.2: Aus den Simulationen für das kleine System (5184 Atome) berechnete Spannungs-Dehnungs-Kurven für 700 K, 810 K und 1000 K. a) Scherrate 10 %/ns, b) Scherrate 1 %/ns.

werden alle 10 ps gespeichert, was bei einer höheren Scherrate zu einer geringeren Anzahl von Punkten führt; daraus erklärt sich hier — sowie auch im Folgenden — der Unterschied in den Linienstärken zwischen den Spannungs-Dehnungs-Kurven verschiedener Scherraten in Abb. 4.2 a) und b).

Für die Scherrate 10 %/ns erkennt man zunächst einen übereinstimmenden linearen Bereich. Der Streckgrenzenbereich beginnt bei höheren Temperaturen bereits bei niedrigeren Dehnungen, d. h. das Abweichen vom linearen Verhalten beginnt früher. Die obere und untere Streckgrenze sind bei nahezu gleichen Dehnungswerten erreicht, wobei die jeweils erreichten Spannungen mit steigender Temperatur systematisch zu geringeren Werten verschoben sind. Die Fließspanung zeigt denselben qualitativen Abfall mit zunehmender Temperatur, wobei aufgrund starker Fluktuationen der Unterschied zwischen den Kurven für 700 K und 810 K nicht sehr ausgeprägt ist.

In den Spannungs-Dehnungs-Kurven bei 1 %/ns Scherrate ist der lineare Bereich für die drei Temperaturen nicht zu unterscheiden, so wie es bei der höheren Scherrate, Abb. 4.2 a), der Fall ist. Abweichungen vom linearen Verhalten treten bei der Kurve für 1000 K — hier besonders deutlich zu trennen — bei niedrigeren Dehnungen auf als bei denen für 700 K und 810 K, dort sind Unterschiede schwer erkennbar. Obere und untere Streckgrenze zeigen wie bei 10 %/ns Scherrate einen Abfall in den Spannungen mit zunehmender Temperatur. Allerdings ist die obere Streckgrenze für die geringere Scherrate mit steigender Temperatur zu niedrigeren Dehnungen verschoben. Der Spannungsabfall von der oberen zur unteren Streckgrenze ist nicht ganz so abrupt wie bei der höheren Scherrate, sodass ein moderater Übergang in den Fließbereich stattfindet. Für 1000 K scheint der Fließbereich verglichen mit den Kurven bei 700 K und 810 K bei einer geringeren Dehnung erreicht zu sein (etwa 10 % Dehnung im

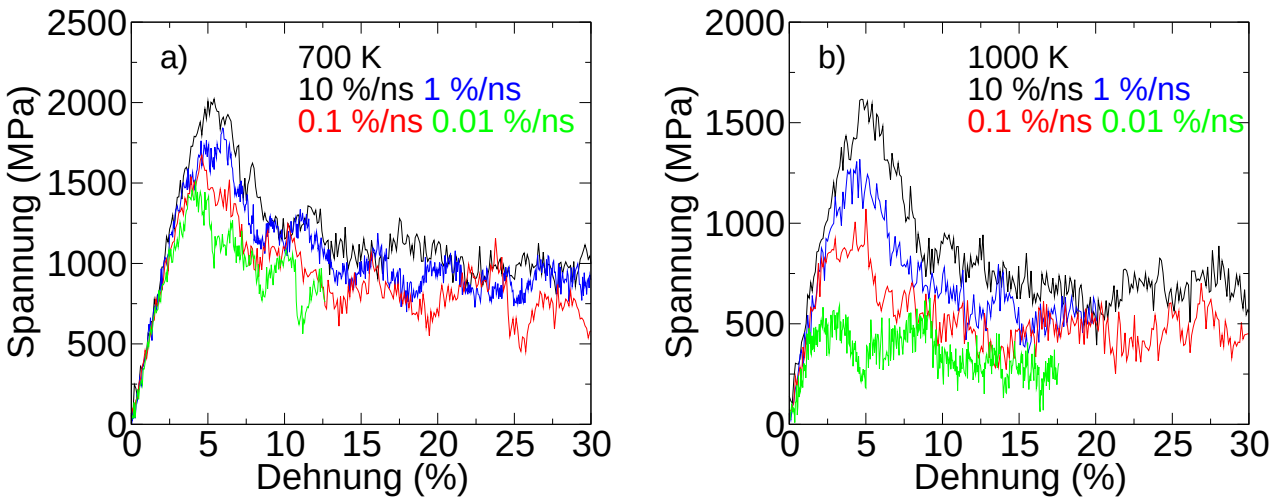

Abbildung 4.3: Aus den Simulationen für das kleine System (5184 Atome) berechnete Spannungs-Dehnungs-Kurven für verschiedene Scherraten bei a) 700 K, b) 1000 K.

Vergleich zu etwa 12 % – 13 %), wobei hier betont werden muss, dass diese Bewertung ohne einen festgelegten Algorithmus zur Berechnung der unteren Streckgrenze, und damit dem Übergang in den Fließbereich, nicht zu streng genommen werden sollte. Die Fließspannung zeigt einen Abfall mit steigender Temperatur wie schon bei der Scherrate 10 %/ns, wobei, wie bereits oben erwähnt, die Kurven für 700 K und 810 K sehr geringe Unterschiede zueinander zeigen.

4.2.2. Abhängigkeit von der Verformungsrate

Zur Untersuchung der Scherratenabhängigkeit werden Simulationen bei 700 K und 1000 K verglichen. Abbildung 4.3 a) zeigt die Spannungs-Dehnungs-Kurven für 10 %/ns, 1 %/ns, 0.1 %/ns und 0.01 %/ns Scherrate, Abb. 4.3 b) die für 1000 K. In dieser Abbildung sind für die unterschiedlichen Dehnungsraten nicht die gesamten Datenpunkte dargestellt, sondern mit geringer werdender Dehnungsrate ein jeweils kleinerer Bruchteil, und zwar so, dass etwa alle 0.1 % Dehnung ein Datenpunkt vorliegt.

Bei 700 K zeigt Abb. 4.3 a) für alle vier Scherraten einen übereinstimmenden linearen Bereich. Das Abknicken vom linearen Verlauf beginnt für kleinere Scherraten zu niedrigeren Dehnungen verschoben. Die obere Streckgrenze zeigt systematisch niedrigere Spannungswerte mit abnehmender Scherrate. Für 10 %/ns, 0.1 %/ns und 0.01 %/ns scheint eine Tendenz vorzuliegen, wonach die obere Streckgrenze mit geringer werdenden Scherraten bei kleineren Dehnungen auftritt. Die Kurve für 1 %/ns zeigt dagegen, neben dem Abfall des Spannungswertes, im Rahmen der Fluktuationen keine Verschiebung des Dehnungswertes. Trotz erheblicher Unterschiede in den Scherraten zeigen sich beim Übergang in den Fließbereich und dabei

insbesondere bei der Fließspannung nur sehr geringe Unterschiede in den verschiedenen Kurvenverläufen.

In Abb. 4.3 b) für 1000 K wird ein vergleichbares Verhalten erkennbar. Es liegt ein gleicher linearer Bereich vor, gefolgt von einem mit kleiner werdender Scherrate immer schwächer ausgeprägten Streckgrenzenbereich. Dieser zeigt einen mit abnehmender Dehnungsrate zu geringeren Spannungswerten und geringeren Dehnungen verschobene obere Streckgrenze. Der Fließbereich ist, mit Blick auf die um Größenordnungen unterschiedlichen Scherraten, für alle Kurvenverläufe vergleichbar.

Die Spannungs-Dehnungs-Kurven bei 0.01 %/ns zeigen qualitative Unterschiede für 700 K und 1000 K. Dies wird besonders deutlich beim Vergleich mit den jeweils höheren Scherraten bei gleicher Temperatur. Zeigt die Kurve für 0.01 %/ns in Abb. 4.3 a) noch klar den ausgeprägten Streckgrenzenbereich, wie in der schematischen Unterteilung aus Abschnitt 4.2 dargelegt, ist dieser für die gleiche Scherrate in Abb. 4.3 b) nur noch schwach ausgebildet. Es bleibt zwar möglich, die obere und untere Streckgrenze bei 2.5 % bzw. 5 % anzusetzen, jedoch ist es durchaus denkbar, die Spannungs-Dehnungs-Kurve um 10 % zu höheren Dehnungen zu verschieben, ohne einen merklichen Unterschied zu den anderen Kurven im Fließbereich zu sehen, abgesehen vom linearen Anstieg.

4.2.3. Abhängigkeit von der Verformungsebene

Die Spannungs-Dehnungs-Kurven der Abbildung 4.4 zeigen Ergebnisse von Verformungssimulationen mit Scherraten von a) 10 %/ns, b) 1 %/ns und c) 0.1 %/ns für 700f K und 1000 K mit jeweils zwei unterschiedlichen Zug- bzw. Druckrichtungen. Einerseits wird in x-Richtung gestreckt und in y-Richtung gestaucht (xy), andererseits wird in z-Richtung gestreckt und in x-Richtung gestaucht (zx).

Für 10 %/ns erkennt man — im Rahmen der Fluktuationen — keine Unterschiede in den Kurvenverläufen. Auch für 1 %/ns und 0.1 %/ns stimmen die Kurven sehr gut überein, wobei sich für die Simulationen bei 700 K stärkere Unterschiede in den Schwankungen im Fließbereich zeigen als bei 1000 K.

Ein Merkmal, das bei den Kurven für 1 %/ns und 0.1%/ns bei 700 K ins Auge fällt, sei noch erwähnt: Die Schwankungen im Bereich von 10 % Dehnung für die jeweiligen xy- und zx-Scherungen sind sehr ähnlich. Besonders deutlich wird dies aufgrund der gegenläufigen Zu- bzw. Abnahme der Scherspannungen in diesem Dehnungsbereich, wobei die Kurve der xy-Scherung jeweils eine höhere Spannung zeigt als die der zx-Scherung.

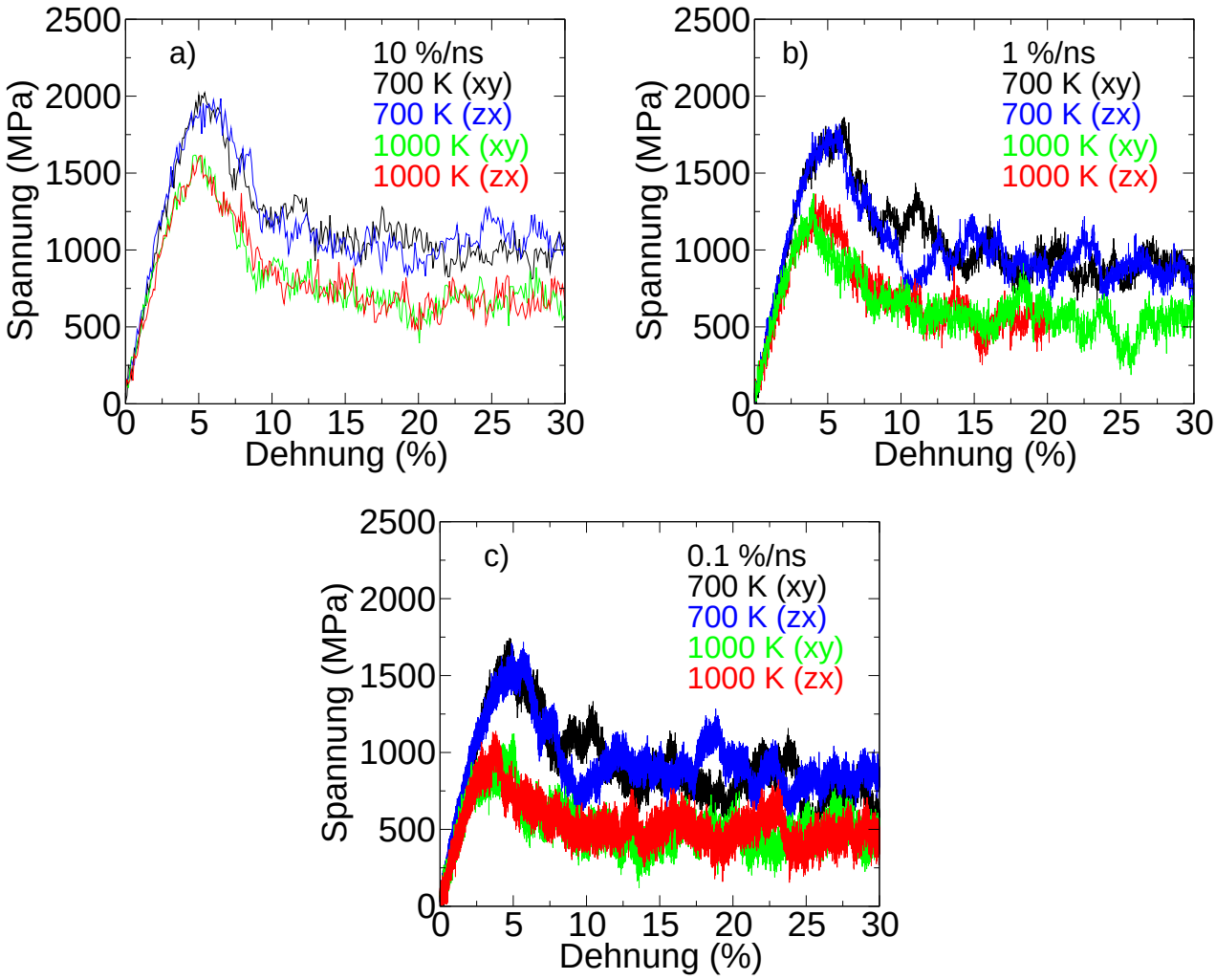

Abbildung 4.4: Aus den Simulationen für das kleine (5184 Atome) System berechnete Spannungs-Dehnungs-Kurven für Verformungen in zwei unterschiedliche Richtungen mit den Scherraten a) 10 %/ns, b) 1 %/ns und c) 0.1 %/ns. xy: Dehnung in x-Richtung, Stauchung in y-Richtung, zx: Dehnung in z-Richtung, Stauchung in x-Richtung.

4.2.4. Abhängigkeit von der Systemgröße

Abbildung 4.5 enthält Spannungs-Dehnungs-Kurven für jeweils zwei Scherraten und zwei Temperaturen, wobei die Simulationen zum einen mit 5184 Atomen, zum anderen mit 17500 Atomen in der Periodizitätszelle durchgeführt werden.

Für beide Temperaturen und beide Scherraten liegt für beide Systemgrößen ein vergleichbarer linearer Bereich vor. In Abb. 4.5 a) bis d) weicht das große System bereits bei geringeren Dehnungen vom linearen Verhalten ab. Die obere Streckgrenze ist für das große Sytem jeweils geringer als für das kleine System. Das Einmünden in den Fließbereich und insbesondere der Wert der Fließspannung ist größenunabhängig. Die Fluktuationen in den Kurvenverläu-

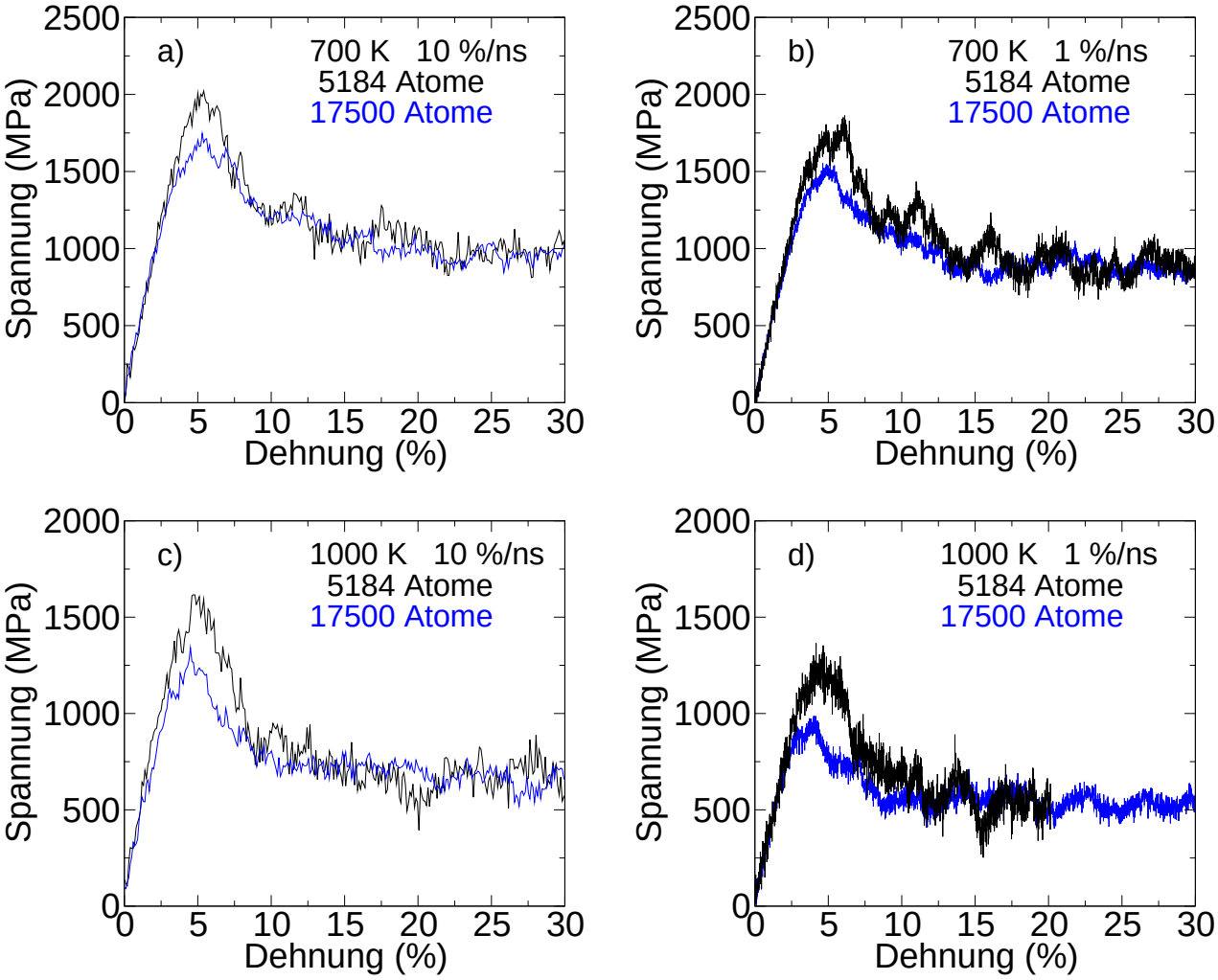

Abbildung 4.5: Aus den Simulationen für das kleine (5184 Atome) und das große System (17500 Atome) berechnete Spannungs-Dehnungs-Kurven. Bei a) 700 K, Scherrate 10 %/ns, b) 700 K, Scherrate 1 %/ns, c) 1000 K, Scherrate 10 %/ns und d) 1000 K, Scherrate 1 %/ns.

fen sowie die längerperiodischen Schwankungen im Fließbereich sind durch deutlich geringere Amplituden gekennzeichnet (bei 1 %/ns besser erkennbar).

4.2.5. Bestimmung von Viskosität, Schermodul und Dehnungsratensensitivität

Aus den Spannungs-Dehnungs-Kurven lassen sich charakteristische Größen wie die Scherviskosität $\eta = \sigma/\dot{\epsilon}$, der dehnungsratenabhängige Schermodul G aus der anfänglichen Steigung und die Dehnungsratensensitivität n aus der Beziehung $\sigma_Y \sim \dot{\epsilon}^n$, welche den Zusammenhang zwischen Streckgrenze — nach Abb. 4.1 genauer: oberer Streckgrenze — und Scherrate darstellt, bestimmen.

Die Daten sind in Tabelle 4.1 zusammengestellt. Die Bestimmung der Viskosität erfolgt durch Mittelung der Spannung zwischen 10 % und 30 % Dehnung, der Fehler ist die Stan-

dardabweichung. Für die Berechnung des Schermoduls wird eine lineare Regression der Daten der Spannungs-Dehnungs-Kurven für Dehnungswerte kleiner als 1 % durchgeführt. Die Steigung ist dann das doppelte des Schermoduls. Die Dehnungsratensensitivität ist die Steigung der Regressionsgeraden für die (logarithmierten) Werte der Streckgrenze in Abhängigkeit von der (logarithmierten) Scherrate, wobei die Werte für die Streckgrenze durch Ablesen[1] der maximalen Spannung in der Spannungs-Dehnungs-Kurve gewonnen werden.

Die Viskosität zeigt eine sehr ausgeprägte Dehnungsratenabhängigkeit und belegt somit für alle Temperaturen ein nicht-newtonsches Fließen. Eine Zunahme der Temperatur hat zudem eine Abhnahme in der Viskosität zur Folge. Im Rahmen der Genauigkeit der Daten ist zwischen den verschiedenen Zug/Druck-Richtungen kein Unterschied zu sehen. Anhand der Daten der Viskosität für die großen Proben (17500 Atome) ist im Vergleich mit den Daten der kleinen Proben bei zugehöriger Dehnungsrate kein wesentlicher Unterschied erkennbar.

Der Schermodul zeigt eine deutlich geringere Abhängigkeit von der Dehnungsrate als die Viskosität. Tendenziell wird er mit zunehmender Scherrate größer, man beachte aber die z. T. großen Fehler bei den hohen Scherraten, bei denen für die Regression nicht so viele Daten vorliegen wie für die geringeren Scherraten. Auch die Abhängigkeit von der Temperatur ist nicht so ausgeprägt wie bei der Viskosität, sie deutet auf eine leichte Abnahme mit zunehmender Temperatur. Bei den Daten für die kleinen Systeme (5184 Atome) bei 700 K und 810 K fällt ein Unterschied im Schermodul bei niedrigeren Dehnungsraten je nach Zug/Druck-Richtung auf. Bei 700 K ist der Schermodul für Verformungen in der zx-Ebene größer, bei 810 K liegen höhere Werte für die xy-Scherung vor. Eine genaue Untersuchung dieses Aspektes ist nicht Gegenstand dieser Arbeit.

Die Streckgrenze wächst mit zunehmender Scherrate, wobei höhere Temperaturen zu geringeren Werten führen. Die als schlechter relaxiert anzusehenden größeren Proben zeigen eine jeweils geringere Streckgrenze für die gleichen Temperaturen bzw. Scherraten. Die aus den Daten berechneten Werte für die Dehnungsratensensitivität werden bei zunehmender Temperatur größer.

4.3. Untersuchung der Topologieänderungen

Dieser Abschnitt beinhaltet die weitergehenden Analysen der deformierten Proben. Hier geht es im Besonderen um die Analyse der Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ für die Atome während der Verformung.

[1] Das *Ablesen* erfolgt durch Anpassen einer Funktion $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^4$ im Bereich der oberen Streckgrenze. Der Fehler ergibt sich dann als der Vorhersagefehler für den Wert im Maximum.

Tabelle 4.1: Zusammenstellung der Daten für die Viskosität η, den Schermodul G und die Dehnungsratensensitivität n, bestimmt aus den Simulationen zum dynamischen Scherversuch. Für die großen Proben liegen nur Daten für zwei Dehnungsraten vor. Die Werte für n dieser Proben sind demnach nur als Richtwerte gedacht.

			Dehnungsrate (10^8 s^{-1})				
T (K)	Zug/Druck	N	0.001	0.01	0.1	1	
			Viskosität (Pa s)				
700	xy	5184	8370(1370)	818(142)	95(13)	11(1)	
700	zx	5184	–	883(104)	92(11)	11(1)	
700	xy	17500	–	–	90(7)	10(1)	
700	zx	17500	–	–	93(6)	10(1)	
810	xy	5184	–	730(87)	83(12)	9(1)	
810	zx	5184	–	731(121)	78(13)	9(1)	
1000	xy	5184	2748(719)	461(82)	56(10)	7(1)	
1000	zx	5184	–	485(86)	56(9)	7(1)	
1000	xy	17500	–	–	54(5)	7(1)	
1000	zx	17500	–	–	54(6)	6(1)	
			Schermodul (GPa)				
700	xy	5184	20.8(1)	22.1(2)	22.7(6)	24(3)	
700	zx	5184	–	26.4(2)	27(1)	27(4)	
700	xy	17500	–	–	23.5(4)	28(2)	
700	zx	17500	–	–	23.1(3)	25(2)	
810	xy	5184	–	24.3(2)	25(1)	29(2)	
810	zx	5184	–	21.0(2)	21(1)	25(3)	
1000	xy	5184	13.9(1)	19.3(3)	23(1)	25(3)	
1000	zx	5184	–	18.8(3)	21(1)	22(7)	
1000	xy	17500	–	–	19(1)	22(3)	
1000	zx	17500	–	–	17(1)	22(3)	
			Streckgrenze (MPa)				n
700	xy	5184	1384(134)	1561(119)	1724(140)	1956(99)	0.049(2)
700	zx	5184	–	1547(118)	1726(117)	1922(147)	0.0471(2)
700	xy	17500	–	–	1491(55)	1692(65)	(0.05)
700	zx	17500	–	–	1446(60)	1697(55)	(0.07)
810	xy	5184	–	1340(108)	1582(136)	1798(127)	0.064(4)
810	zx	5184	–	1251(110)	1455(143)	1740(129)	0.072(3)
1000	xy	5184	522(141)	919(150)	1161(134)	1591(125)	0.12(1)
1000	zx	5184	–	939(151)	1212(117)	1538(115)	0.107(2)
1000	xy	17500	–	–	913(68)	1263(90)	(0.14)
1000	zx	17500	–	–	947(62)	1251(103)	(0.12)

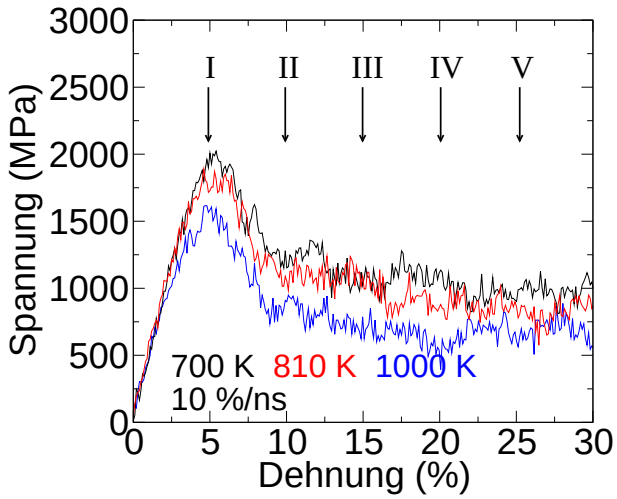

Abbildung 4.6: Spannungs-Dehnungs-Kurven für 700 K, 810 K und 1000 K bei einer Scherrate von 10 %/ns. Die Markierungen geben die Dehnungen an, zu denen jeweils die nächsten Nachbar Beziehungen mit der am Start der Simulation vorliegenden verglichen werden.

4.3.1. Räumliche Verteilung von Atomen mit massiven Topologieänderungen

In Abbildung 4.6 sind drei ausgewählte Spannungs-Dehnungs-Kurven eines simulierten dynamischen Scherversuchs für eine Scherrate von 10 %/ns bei 700 K, 810 K und 1000 K dargestellt. In allen drei Fällen handelt es sich um eine xy-Scherung (vgl. Abschnitt 4.2.3). Die mit den Pfeilen markierten Dehnungen, ϵ_{I} bis ϵ_{V}, ergeben mittels der Beziehung $t_k = \epsilon_k/\dot{\epsilon}, k = \mathrm{I}, \ldots, \mathrm{V}$, Zeitpunkte, für die jeweils die Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(t_k, 0)$ für jedes Atom i bestimmt werden soll. Im Folgenden werden die Konfigurationen, die bei einer bestimmten Dehnung gespeichert werden entsprechend ihres Dehnungswertes benannt. Die Ausgangskonfiguration ist die Startkonfiguration des jeweiligen Simulationslaufs, bei der die Dehnung 0 % ist, daher wird sie beispielsweise als Konfiguration 0 bezeichnet.

Die Abbildungen 4.7 bis 4.9 zeigen Darstellungen der Konfigurationen ϵ_{I} bis ϵ_{V} für 700 K, 810 K und 1000 K. Es sind die Atome abgebildet, für die $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(t_k, 0) > 4$ gilt oder, in der Zelle jeweils in der Mitte rechts, die Atome für die $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(t_k, 0) = 0$ ist. Zusätzlich, untere Reihe, sind zwei Ansichten der Konfiguration ϵ_{IV} mit allen Atomen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(t_{\mathrm{IV}}, 0) > 4$ und einmal die Konfiguration ϵ_{IV} wobei diesmal der Vergleich mit Konfiguration ϵ_{III} gemacht wird (Atome werden abgebildet, falls $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(t_{\mathrm{IV}} - t_{\mathrm{III}}, t_{\mathrm{III}}) > 4$).

Anhand der Abbildung für 700 K sieht man, dass die Verformung bis zur Streckgrenze (Pfeil I in Abb. 4.6) nur moderate Topologieänderungen hervorruft. Der Verlust von fünf und mehr Zr-Nachbarn bedeutet (siehe Tab. 3.3), dass von den ursprünglichen Nachbarn nur noch weniger als die Hälfte vorhanden sind. Der Spannungseinbruch wird begleitet (Konfiguration ϵ_{II}) durch das Auftreten eines Bereichs mit starken Änderungen der Nächste-Nachbar-Beziehungen, der sich mit forlaufender Verformung zu einem stark ausgeprägten Band aus-

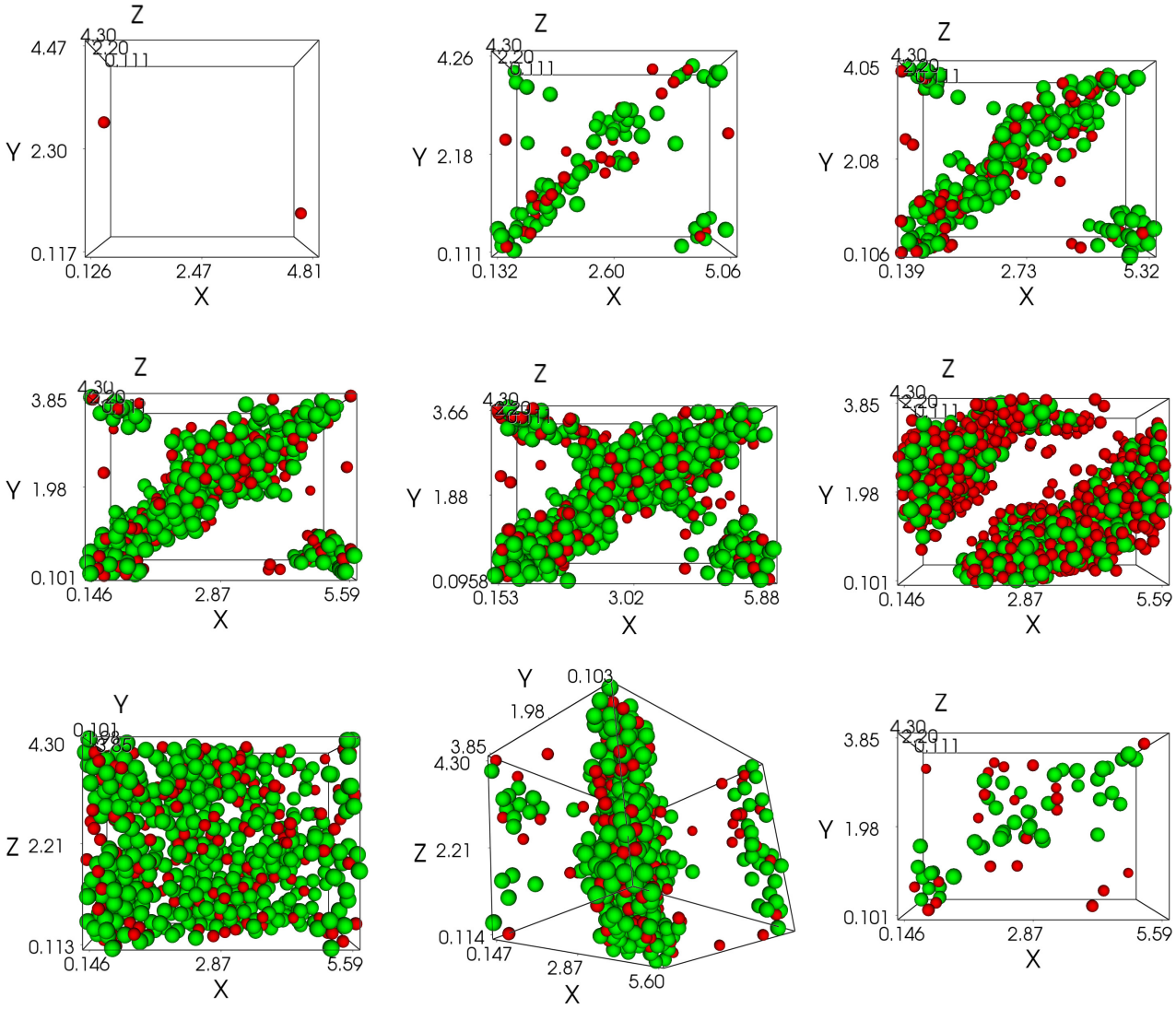

Abbildung 4.7: Darstellung der Atome der Simulationszelle mit mehr als 4 verlorenen Zr-Nachbarn bei 700 K, verformt (Rate (10 %/ns)) bis zu einer Dehnung von 5 % (oben links), 10 % (oben mitte), 15 % (oben rechts), 20 % (mitte links), 25 % (mitte) und ohne verlorene Zr-Nachbarn bis 20 % (mitte rechts). Zwei weitere Ansichten der Zelle bei einer Dehnung von 20 % (unten links, unten mitte) und eine Darstellung aller Atome mit mehr als vier verlorenen Zr-Nachbarn zwischen 15 und 20 % (unten rechts).

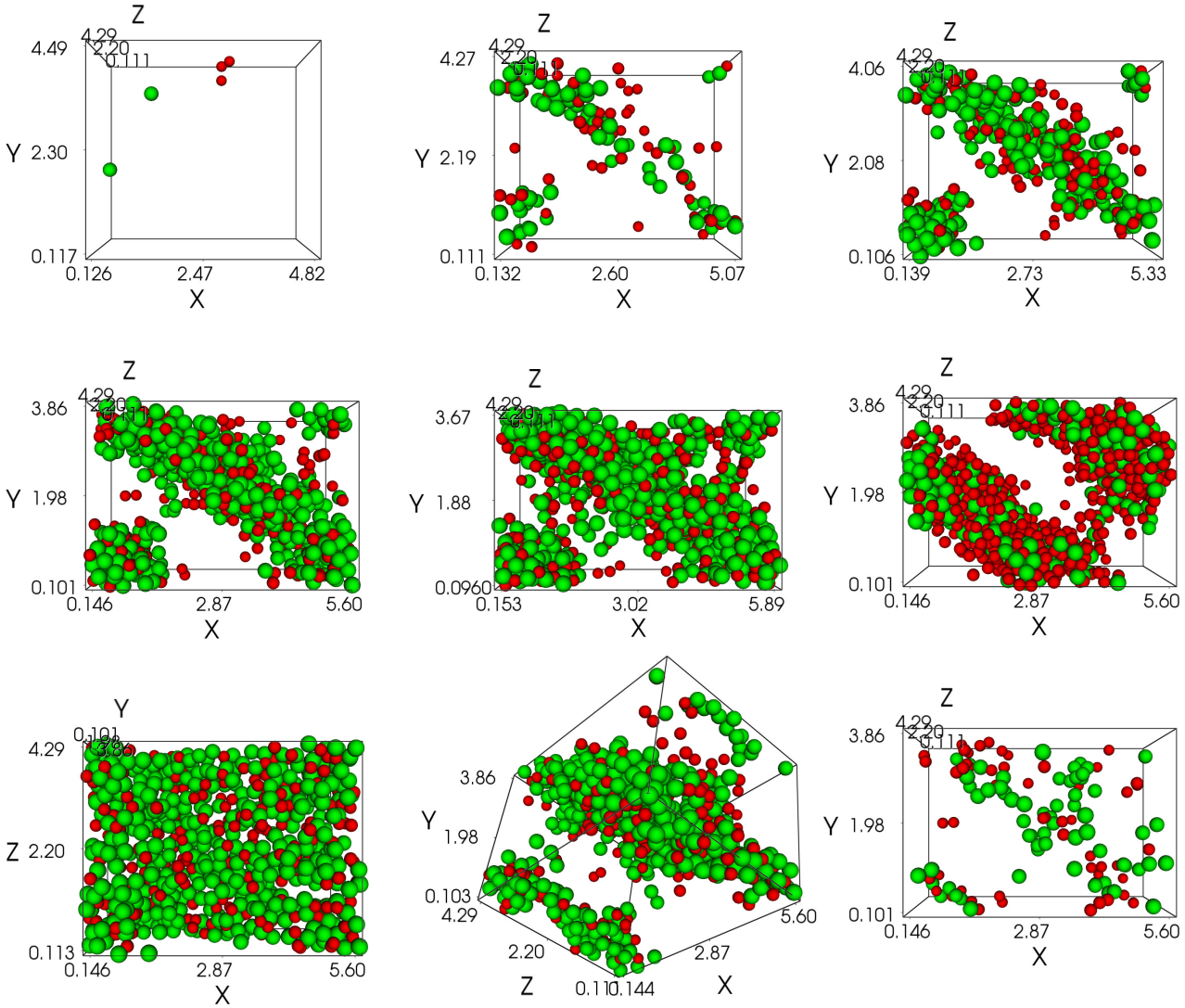

Abbildung 4.8: Darstellung der Atome der Simulationszelle mit mehr als 4 verlorenen Zr-Nachbarn bei 810 K, verformt (Rate (10 %/ns)) bis zu einer Dehnung von 5 % (oben links), 10 % (oben mitte), 15 % (oben rechts), 20 % (mitte links), 25 % (mitte) und ohne verlorene Zr-Nachbarn bis 20 % (mitte rechts). Zwei weitere Ansichten der Zelle bei einer Dehnung von 20 % (unten links, unten mitte) und eine Darstellung aller Atome mit mehr als vier verlorenen Zr-Nachbarn zwischen 15 und 20 % (unten rechts).

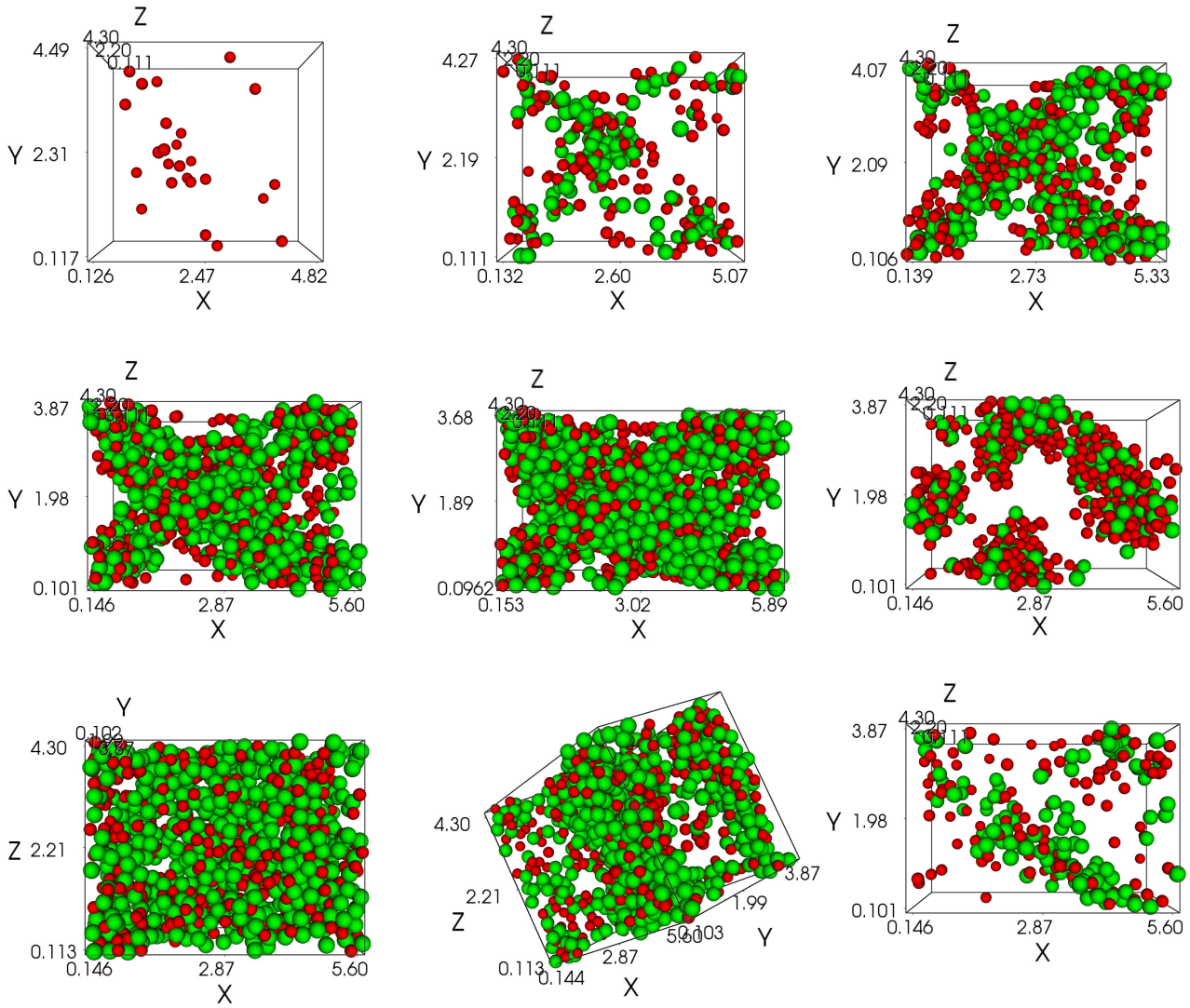

Abbildung 4.9: Darstellung der Atome der Simulationszelle mit mehr als 4 verlorenen Zr-Nachbarn bei 1000 K, verformt (Rate (10 %/ns)) bis zu einer Dehnung von 5 % (oben links), 10 % (oben mitte), 15 % (oben rechts), 20 % (mitte links), 25 % (mitte) und ohne verlorene Zr-Nachbarn bis 20 % (mitte rechts). Zwei weitere Ansichten der Zelle bei einer Dehnung von 20 % (unten links, unten mitte) und eine Darstellung aller Atome mit mehr als vier verlorenen Zr-Nachbarn zwischen 15 und 20 % (unten rechts).

weitet. Die Variation der Ansicht zeigt, dass es sich näherungsweise um eine diagonale Symmetrieebene der Periodizitätzelle handelt, deren Normale senkrecht zur xy-Normalen steht. Außerdem wird neben dem Hauptbereich ein weiterer Bereich massiver Topologieänderung ausgebildet — bei Konfiguration ϵ_{V} besonders deutlich —, der im Bereich der zweiten diagonalen Symmetrieebene mit Normale senkrecht zur xy-Normalen liegt. Die Darstellung von Konfiguration ϵ_{IV}, Abb. 4.7 untere Reihe ganz rechts, diesmal verglichen mit Konfiguration ϵ_{III} und nicht Konfiguration 0, zeigt einerseits, dass sich die Ausbildung des Bandes aus der Superposition von Einzelereignissen ergibt. Andererseits belegt die Darstellung ein bevorzug-

tes Auftreten der Einzelereignisse entlang der diagonalen Symmetrieebene. Die Zelle in der mittleren Reihe ganz rechts, in der alle Atome abgebildet werden, die bis zu einer Dehnung von 20 % keinen Zr-Nacharn verloren haben (verglichen mit den Zr-Nachbarn am Start der Simulation), wird ersichtlich, dass große Bereiche außerhalb des Verformungsbandes keinerlei Änderungen der Nächtste-Nachbar-Beziehungen unterworfen sind.

Für die Simulation bei 810 K zeigt sich nach Abb. 4.8 ein Verhalten in qualitativer Übereinstimmung mit der Beschreibung für 700 K, mit dem Unterschied, dass hier das Hauptverformungsband dem Nebenband bei 700 K entspricht und umgekehrt. Desweiteren führt die höhere Temperatur zu einem etwas stärkerem Aufweiten der Bereiche mit Atomen, für die $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(t_k, 0) > 4$ ist.

In Abbildung 4.9 ist der Verformungslauf für 1000 K dokumentiert. Die deutlich höhere Temperatur führt zu einem weniger stark lokalisiertem Verformungsband. Die zwei Diagonalen bleiben zwar noch erkennbar, jedoch wachsen die Bereiche der Zelle mit massiven Topologieänderungen hier viel schneller, d. h. Atome zeigen eine massive Topologieänderung bereits bei geringeren Dehnungen als für die tieferen Temperaturen. Weiter sieht man, dass bei der Verformung bis zur Streckgrenze bei dieser Temperatur eine merkliche Anzahl von Ni-Atomen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(t_k, 0) > 4$ auftritt. Abb. 4.9 Mitte links zeigt auf der anderen Seite, dass es auch bei 1000 K recht große, kompakte Bereiche gibt mit Atomen die, verglichen mit der Konfiguration 0, keine ihrer dort vorliegenden Zr-Nachbarn verloren haben.

Abbildung 4.10 zeigt, wie schon die Darstellungen der Abbn. 4.7 bis 4.9, die Konfigurationen ϵ_0, ϵ_{I} etc. der Verformung eines großen Systems (17500 Atome), verformt mit einer Scherrate von 10 %/ns in der zx-Ebene bei 700 K (auf die geänderten Ansichten und die Darstellung der Topologieänderung zwischen 15 % und 20 % Dehnung sei hier verzichtet; die Spannungs-Dehnung-Kurve ist nicht in Abb. 4.6 enthalten). Im Vergleich mit den Verformungen für 700 K und 810 K (Abbn. 4.7 bzw. 4.8) fallen hier keine qualitativen Unterschiede bezüglich der Lokalisierung und der Ausbildung des Verformungsbandes auf. Dies zeigt einerseits, dass die Scherebenenänderung keinen Einfluss auf die Merkmale der Topologieänderungen hat, dass aber auch eine Systemgrößenänderung keine qualitativ anderen Prozesse herbeiführt. Dass die Streckgrenze für die Simulationen der großen Systeme eine geringere Spannung zeigt, liegt daran, dass dass die großen Systeme einen geringeren Relaxiertheitsgrad aufweisen als die sehr gut gealterten kleinen Systeme (nominelle Auslagerungszeit 1 µs). Dies ist z. B. in den Abbildungen der potenziellen Energie oder des Wendt-Abraham Parameters zu sehen (wenn dieser als ein Maß für die im System herrschenden Unordnung angesehen wird). Eine Folge des schlechteren Relaxiertheitsgrades ist unter anderem eine erhöhte atomare Dynamik. Das bedeutet, in einer im Vergleich zu den gut relaxierten Systemen gleichen Zeit können mehr atomare Umlagerungen stattfinden, wodurch sich im System kleinere Spannungen aufbauen.

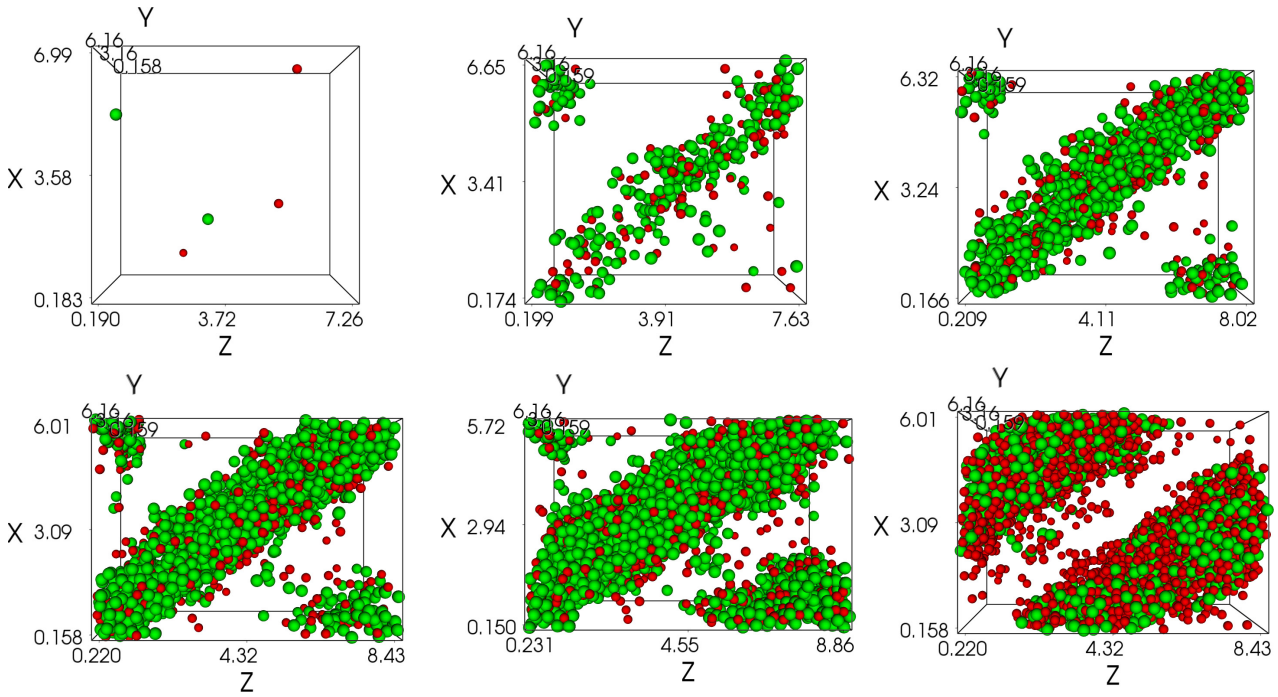

Abbildung 4.10: Darstellung der Atome der Simulationszelle mit mehr als 4 verlorenen Zr-Nachbarn einer zx-Scherung (17500 Atome) bei 700 K, verformt (Rate (1.0 %/ns)) bis zu einer Dehnung von 5 % (oben links), 10 % (oben mitte), 15 % (oben rechts), 20 % (unten links), 25 % (unten mitte) und ohne verlorene Zr-Nachbarn bis 20 % (unten rechts).

Der Einfluss der Dehnungsrate auf das Phänomen der Lokalisierung sei am Beispiel der Verformung mit 1.0 %/ns und 0.1 %/ns Scherrate bei 700 K, Abbn. 4.11 und 4.12, und für die Verformung mit $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns bei 1000 K, Abb. 4.13 (es sei bemerkt, dass die Dehnungswerte der dargestellten Konfigurationen hier geringer sind als bei den Bildern für 700 K), gezeigt.

Bei der geringeren Temperatur ist für beide Scherraten eine auffällige Lokalisierung erkennbar. Diese zeigt die schon weiter oben beschriebenen Merkmale wie die Ausbildung entlang einer Diagonalebene (vgl. oben). Allerdings wird auch ersichtlich, dass die Bereiche massiver Topologieänderung für eine bestimmte Dehnung im Vergleich mit den Bildern für die Verformung mit $\dot{\epsilon} = 10.0$ %/ns (Abb. 4.7) stärker ausgeweitet sind. Dies führt unter anderem dazu, dass in der Darstellung der Zelle mit 25 % Dehnung sowohl für $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns als auch für $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns fast das gesamte Volumen mit Atomen (Ni und Zr) gefüllt ist. Weiter zeigen die Abbildungen 4.11 und 4.12, dass die Anzahl der Ni-Atome mit massiver Topologieänderung bis zum Erreichen einer bestimmten Dehnung mit abnehmender Scherrate größer wird; dies wird — wenn nicht ganz so extrem ausgeprägt — für die Erhöhung der Temperatur bei fester Scherrate gefunden (vgl. z. B. Abb.4.7 mit Abb. 4.9).

In Abbildung 4.13 kann man sehen, dass eine Großzahl der Atome für 1000 K und $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns bereits bei deutlich geringeren Dehnungen (vgl. die angegebenen Werte in Abb. 4.13)

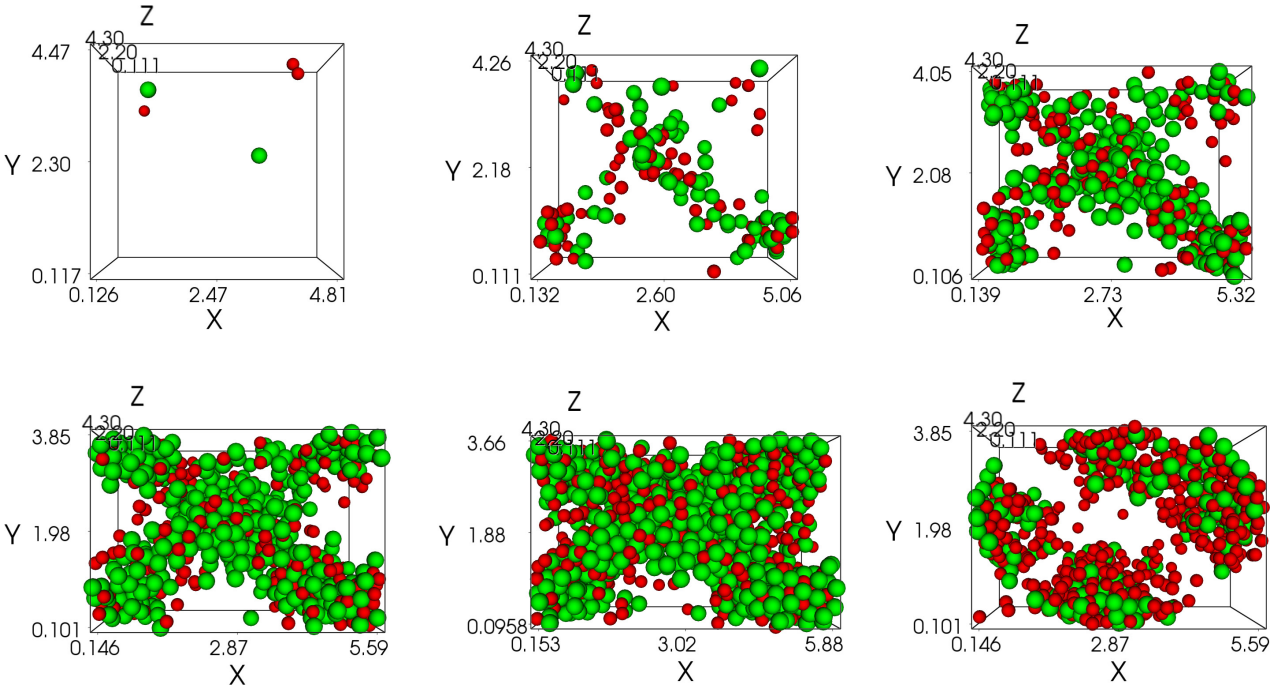

Abbildung 4.11: Darstellung der Atome der Simulationszelle mit mehr als 4 verlorenen Zr-Nachbarn bei 700 K, verformt (Rate 1.0 %/ns) bis zu einer Dehnung von 5 % (oben links), 10 % (oben mitte), 15 % (oben rechts), 20 % (unten links), 25 % (unten mitte) und ohne verlorene Zr-Nachbarn bis 20 % (unten rechts).

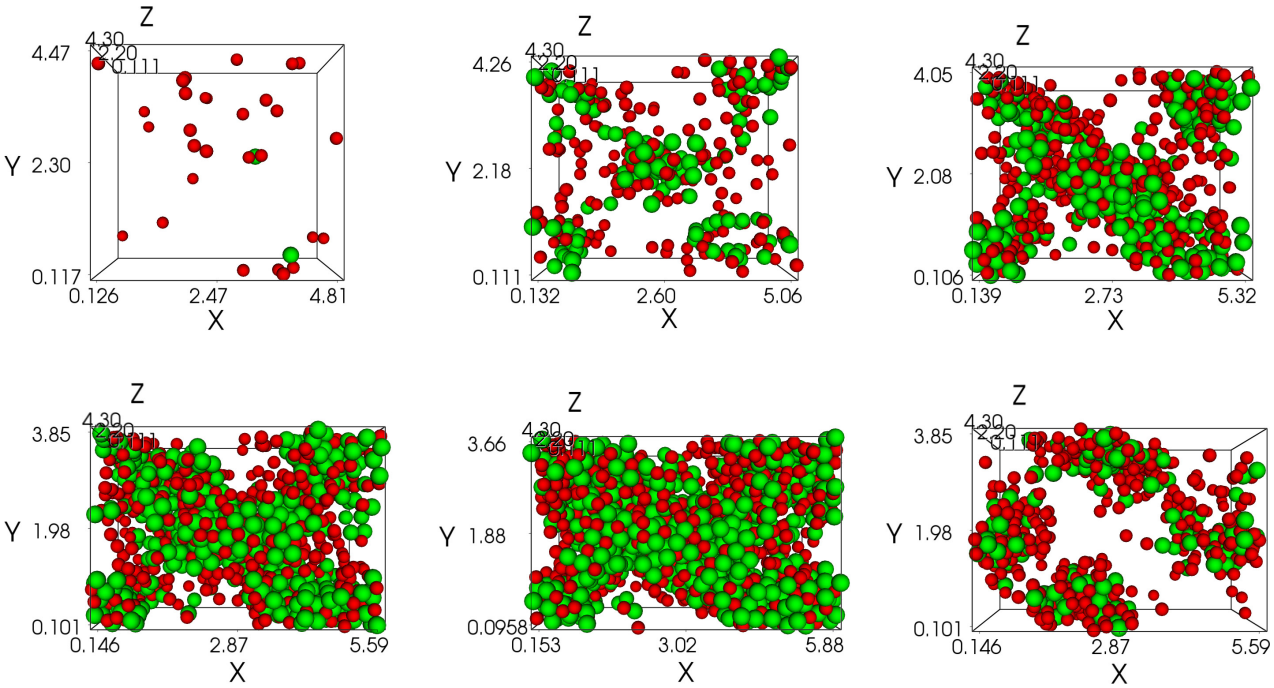

Abbildung 4.12: Darstellung der Atome der Simulationszelle mit mehr als 4 verlorenen Zr-Nachbarn bei 700 K, verformt (Rate 0.1 %/ns) bis zu einer Dehnung von 5 % (oben links), 10 % (oben mitte), 15 % (oben rechts), 20 % (unten links), 25 % (unten mitte) und ohne verlorene Zr-Nachbarn bis 20 % (unten rechts).

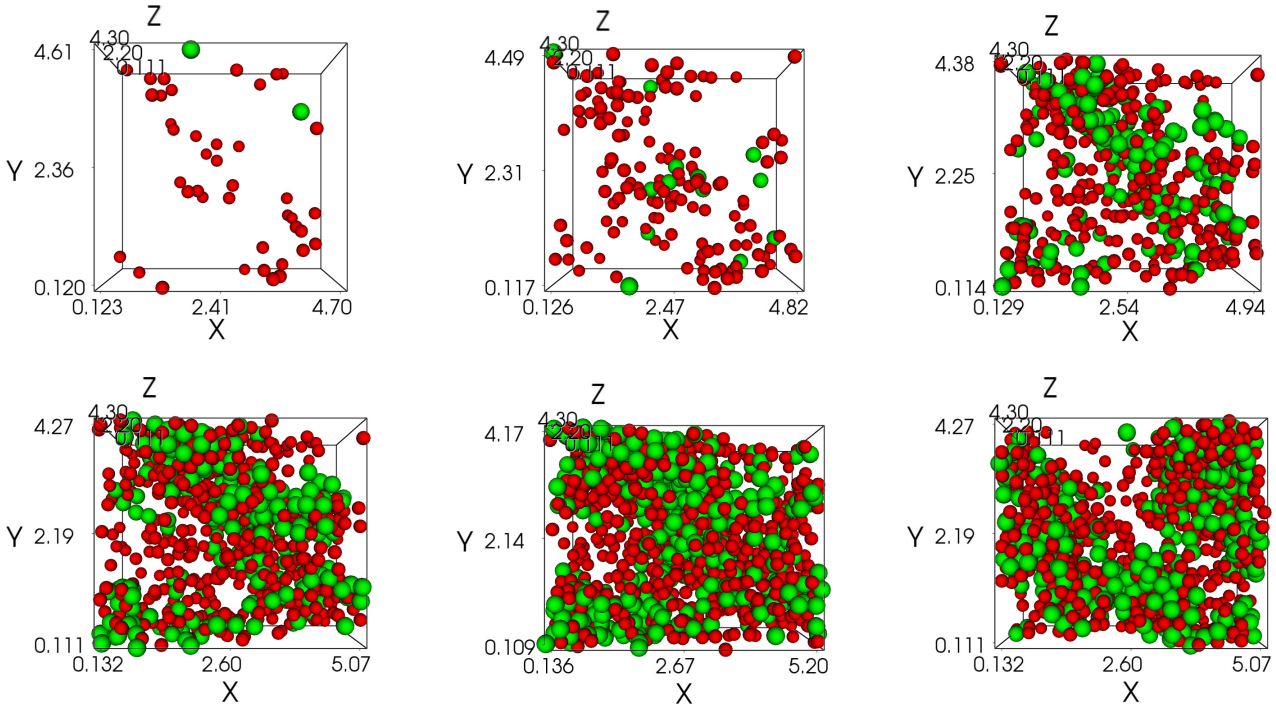

Abbildung 4.13: Darstellung der Atome der Simulationszelle mit mehr als 4 verlorenen Zr-Nachbarn bei 1000 K, verformt (Rate 1.0 %/ns) bis zu einer Dehnung von 2.5 % (oben links), 5 % (oben mitte), 7.5 % (oben rechts), 10 % (unten links), 12.5 % (unten mitte) und ohne verlorene Nachbarn bis 10 % (unten rechts).

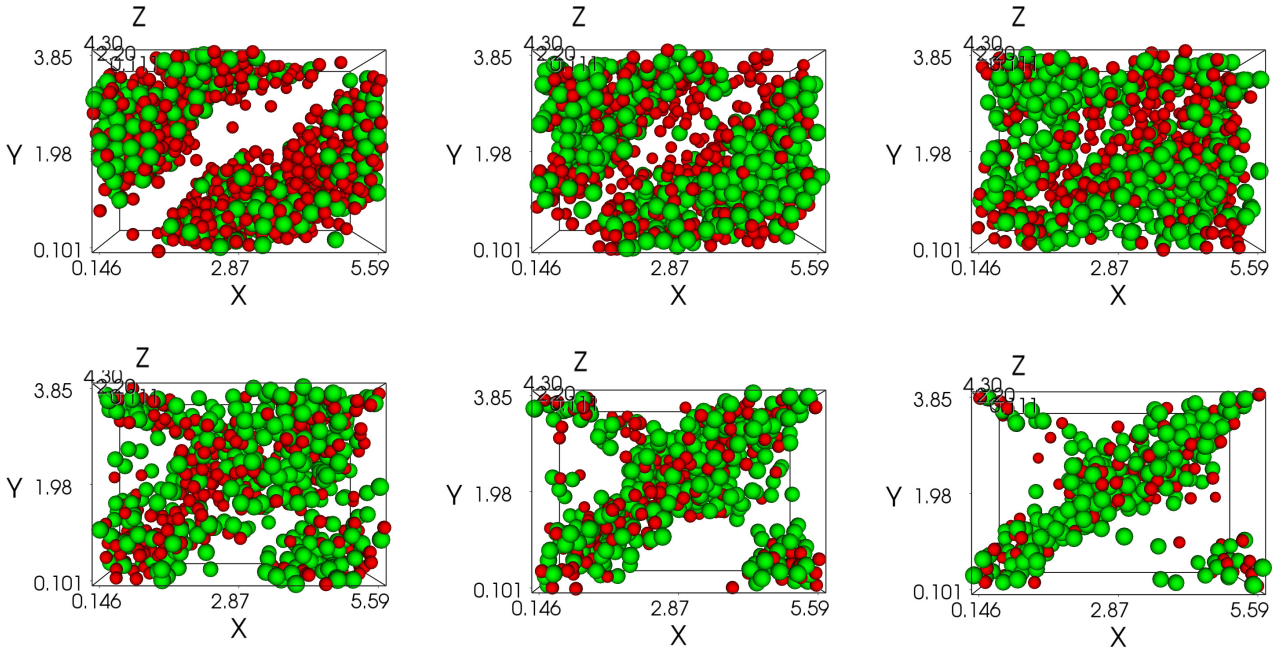

Abbildung 4.14: Darstellung der Atome der Simulationszelle einer Verformung mit Rate 10 %/ns bei 700 K für die bis zu einer Dehnung von 20 % gilt: $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau,t) = 0$ (oben links), $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau,t) = 1$ (oben mitte), $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau,t) = 2$ (oben rechts), $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau,t) = 3$ (unten links), $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau,t) = 4$ (unten mitte), $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau,t) = 5$ (unten rechts).

eine massive Topologieänderung zeigen. Viele Ni-Atome erfüllen bereits bei Dehnungen bis etwa 8 % die Bedingung $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) > 4$ und werden abgebildet, wobei im besonderen hier eine geringe Lokalisierung erkennbar ist; die Ni-Atome scheinen homogen in der Zelle verteilt an Topologieänderungen teilzunehmen. Im Vergleich dazu zeigen die Zr-Atome noch eine charakteristische Heterogenität, die als Band von links oben nach rechts unten in Abb. 4.13 unten links andeutungsweise zu sehen ist. Die verglichen mit den Darstellungen bei 700 K weitaus weniger starke, und dennoch vorhandene, Lokalisierung wird durch die Darstellung der Atome ohne Topologieänderung (Abb. 4.13 unten rechts) sichtbar.

Eine weitere Darstellung der Atome mit verschiedenen Werten für $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ ist in Abb. 4.14 gezeigt. Diesmal wird die Konfiguration ϵ_{IV} (20 % Dehnung) des Simulationslaufs aus Abb. 4.7 gezeigt, wobei jeweils nur die Atome zu sehen sind, die einen festen Wert von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$, hier speziell 0, 1, 2, 3, 4 und 5, haben. Diese Abbildung demonstriert, wie sich Atome mit mäßigen Topologieänderungen, $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) \leq 1$, und diejenigen mit massiven Topologieänderungen, etwa $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t) \geq 3$ oder > 3, zu räumlich relativ gut voneinander zu trennenden Bereichen organisieren.

4.3.2. Eigenschaften von Atomgruppen mit unterschiedlich starken Topologieänderungen

Dieser Abschnitt behandelt die Untersuchung atomarer Eigenschaften (Abschn. 3.5.3) unterschiedlicher Atomgruppen. Gegenstand der Analysen sind die Simulationen zur Scherung mit konstanter Scherrate (vgl. Abschn. 4.2), die, gezeigt durch die Darstellung der Änderung der Nächste-Nachbar-Beziehungen (Abschn. 4.3), besonders für die niedrigen Temperaturen eine stark heterogene Ausbildung von Bereichen zeigen, in denen Atome durch massive Topologieänderungen gekennzeichnet sind. Grundlegende Frage ist, ob Atome, die solch massive Änderungen ihrer Umgebung zeigen, in ihren atomaren Charakteristika von denjenigen zu unterscheiden sind, die nur moderate Topologieänderungen erfahren haben.

Verfahren zur statistischen Analyse von Unterschieden atomarer Eigenschaften verschiedener Atomgruppen

Zur Demonstration des Verfahrens zur Untersuchung der atomaren Eigenschaften wird beispielhaft die Simulation eines großen Systems (17500 Atome) im dynamischen Scherversuch bei 700 K mit $\dot{\epsilon} = 10$ %/ns, ausgelegt als zx-Scherung, verwendet (eine Darstellung der Simulationszelle ist in Abb. 4.10 zu sehen).

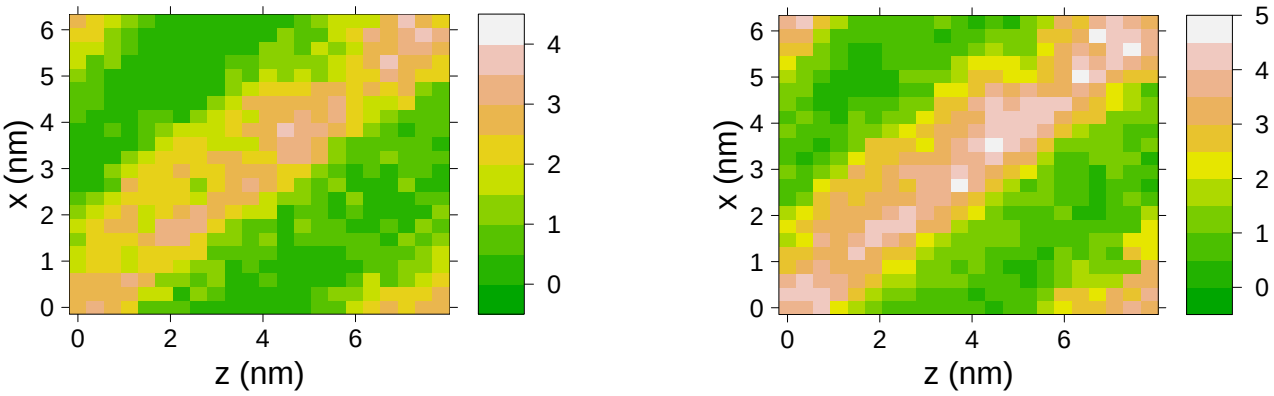

Abbildung 4.15: Verteilung von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\ \%, 0)$ für Ni (links) und Zr (rechts) für $n_x = n_z = 22$.

Auswahl zweier Untergruppen Es werden zwei Vergleichswerte λ_1 und λ_2 festgelegt. Folgende Gruppen von Atomen werden ausgewählt:

$$\text{Gruppe 1 : Atome } i \text{ mit } \lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\ \%, 0) > \lambda_1, \tag{4.1}$$

$$\text{Gruppe 2 : Atome } j \text{ mit } \lambda_j^{\mathrm{Zr}}(15\ \%, 0) < \lambda_2. \tag{4.2}$$

Werte für λ_1 und λ_2 werden so gewählt, dass Gruppe 1 jeweils die Atome enthält, die eine starke Topologieänderung erfahren, Gruppe 2 die Atome, die nur moderate Änderungen erfahren, wir wählen hier speziell $\lambda_1 = 3$ und $\lambda_2 = 1$. Abbildung 4.15 zeigt farbkodierte Verteilungen von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\ \%, 0)$ für Ni und Zr. Die Werte für λ_i^{Zr} werden entsprechend der Atomkoordinaten x, y und z des zugehörigen Atoms i zunächst in die Ebene der Scherung pojiziert, hier die zx-Ebene. Diese Ebene wird zerlegt in ein Gitter aus $n_z \times n_x$ Unterrechtecken, denen jeweils der Mittelwert der in dieses Rechteck fallenden Werte λ_i^{Zr} zugewiesen wird. Anhand dieser Darstellung wird deutlich, in welchen Raumbereichen die Atome mit starken Topologieänderungen liegen und wo diejenigen zu finden sind, die nur moderate Änderungen ihrer Nächste-Nachbar-Beziehungen erfahren haben. Es zeigt sich, dass ein sinvoller Parameterbereich für die Werte λ_i gegegeben ist durch $\{2, 3, 4, \dots\}$ für die Auswahl der Atome zur Gruppe 1 und $\{0, 1, 2\}$ zur Bestimmung der Zugehörigkeit zur Gruppe 2.

Bestimmung der mittleren atomaren Eigenschaften der Atome beider Untergruppen Wir betrachten eine spezielle Eigenschaft $a_i(t)$, aus der über Zeitmittelung für ein bestimmtes Zeitintervall die mittlere Größe a_i erhalten wird (a_i entspricht $E_{pot,i}$, $\mathcal{V}_i$, Q_ℓ etc.; siehe dazu auch Abschn. 3.5.3). Es wird eine Mittelung über 25 Konfigurationen gemacht, die zwischen 10 % und 15 % Dehnung liegen, sich also jeweils um 0.2 % Dehnung unterscheiden. Daraus erhält man die mittleren Werte in einem Bereich der Spannungs-Dehnungs-Kurve, welcher von der unteren Streckgrenze bis hinein in den Fließbereich geht.

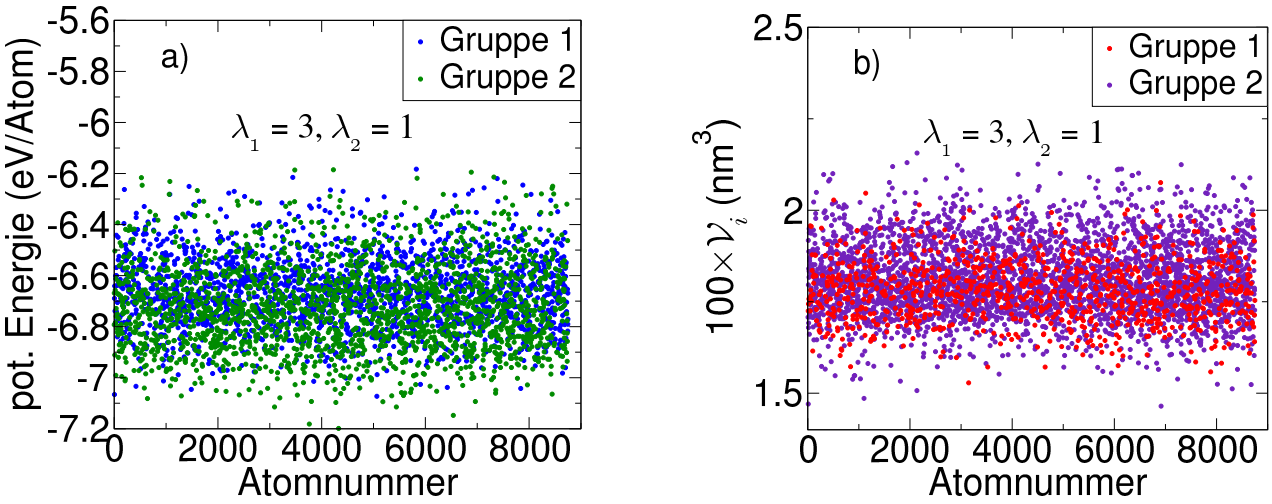

Abbildung 4.16: a) Mittlere potenzielle Energie der Zr-Atome unterschiedlicher Untergruppen im Dehnungsbereich 10 bis 15 %. Gruppe 1 sind die Zr-Atome, für die $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0) > 3$ ist, Gruppe 2 diejenigen für die $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0) < 1$ gilt. b) Mittleres Voronoi-Volumen von Ni-Atomen unterschiedlicher Atomgruppen im Dehnungsbereich 10 bis 15 %. Für Gruppe 1 gilt $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0) > 3$, für Gruppe 2 dagegen $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0) < 1$.

Abbildung 4.16 a) zeigt beispielhaft die potenzielle Energie unterschiedlicher Zr-Atome. Diese werden entsprechend der Anzahl verlorener Zr-Nachbarn in unterschiedliche Gruppen wie oben beschrieben geteilt. Die erste Gruppe enthält insgesamt 1843 Zr-Atome, Gruppe 2 dagegen 2072 (es gilt $\lambda_1 = 3$ und $\lambda_2 = 1$). Als weiteres Beispiel zeigt Abb. 4.16 b) die Atomvolumina der Ni-Atome unterschiedlicher Untergruppen. Gruppe 1 besteht dabei aus 966 Ni-Atomen, Gruppe 2 enthält 3506 Ni-Atome (entsprechend der Wahl $\lambda_1 = 3$ und $\lambda_2 = 1$). Sowohl am Beispiel der potenziellen Energie für Zr und des Atomvolumens für Ni fällt auf, dass beide Gruppen auf den ersten Blick keine deutlichen Unterschiede in den sehr stark streuenden Werten der gezeigten atomaren Charakteristik erkennen lassen. Um die beiden Untergruppen mit Blick auf Unterschieden in den einzelnen atomaren Charakteristika zu untersuchen, bietet sich eine statistische Analyse an. Diese erlaubt es zu entscheiden, ob in den Daten auftretende Differenzen, beispielsweise im Mittelwert, nur zufällig auftreten, oder ob die Unterschiede signifikant sind.

Unterschiede in den Medianen, den Varianzen und weitere Unterschiede Die atomaren Eigenschaften wie potenzielle Energie, Atomvolumen, Ordnungsparameter und Spannungen (hydrost. und von Mises) liegen für alle Atome als mittlere Größen für den Dehnungsbereich 10 % bis 15 % vor. Für beide Atomsorten werden die Gruppen 1 und 2 mit Hilfe der in Abschnitt 3.6.2 dargestellten Signifikanztests — jeweils betrachtet als zwei Stichproben — gegeneinander getestet. Zur Analyse von Medianunterschieden kommt der Wilcoxon-Mann-Whitney-Test zum Einsatz, der Ansary-Bradley-Test zur Bewertung der Varianzdifferenzen

(Datensätze vorher verschoben, vgl. Abschn. 3.6.2) und ein Kolmogorov-Smirnov-Test mit entsprechend verschobenen und skalierten Werten (Abschn. 3.6.2) zum prüfen auf andere Unterschiede.

Ergebnisse der Signifikanztests für zwei verschiedene Wertepaare $(\lambda_1, \lambda_2) = (3, 1)$ bzw. $(2, 2)$ sind in Tabelle 4.2 zusammengestellt (oberer Teil für $(3, 1)$, unterer Teil für $(2, 2)$). Die Anzahl N_1 bzw. N_2 der Atome in den einzelnen Gruppen (1 und 2) sind:

$$(3,1) \longrightarrow \text{Ni: } N_1 = 966 \text{ und } N_2 = 3506; \text{ Zr: } N_1 = 1843 \text{ und } N_2 = 2072,$$
$$(2,2) \longrightarrow \text{Ni: } N_1 = 2013 \text{ und } N_2 = 5353; \text{ Zr: } N_1 = 3161 \text{ und } N_2 = 4012.$$

Die in der Tabelle angegebenen Werte bedeuten: a_i ist die atomare Eigenschaft, die getestet wird. $p_{(\cdot)}$ ist der p-Wert des dem Index entsprechenden Signifikanztests, WMW steht dabei für den Wilcoxon-Mann-Whitney-Test, AB für den Ansari-Bradley-Test und KS für den Kolmogorov-Smirnov-Test. Hochgestellt an den jeweiligen p-Werten finden sich die Symbole für die entsprechenden Werte (vgl. Abschn. 3.6.2). Ein p-Wert von 0 ist ein Platzhalter für die Fälle, in denen die verwendete Software eine Schätzung $p < 2.2 \times 10^{-16}$ ausgibt. Die Werte $\tilde{p}_{(\cdot)}$ (WMW, AB und KS wie oben) geben die Testresultate für zwei zufällig ausgewählte Referenzgruppen an, die den gleichen Umfang haben wie Gruppe 1 und Gruppe 2. Ferner werden die durch die Software [170] bestimmten Schätzungen der Mediandifferenz $\Delta\hat{\mu}$ und der Quotienten der Streuungen σ_1/σ_2 jeweils mit den Grenzen des 95 %-Konfidenzintervalls (als kleine tiefgestellte Zahlen vor bzw. nach den Werten für $\Delta\hat{\mu}$ und σ_1/σ_2) angegeben.

Für die gewählten Werte von λ_1 und λ_2 zeigen alle atomaren Eigenschaften, mit Ausnahme des hyrdostatischen Spannungsmaßes φ_i^p für Zr, eine signifikante (in den meisten Fällen eine höchst signifikante) Verschiebung der Verteilungen der entsprechenden Größen gegeneinander (siehe die Werte für p_{WMW} in Tabelle 4.2). Die Daten der Referenzgruppen ($\tilde{p}_{WMW}$) zeigen durchweg nicht signifikante Lageunterschiede[2] an. Die Streuung der atomaren Eigenschaften der unterschiedlichen Gruppen weist deutlich signifikante Unterschiede auf (p_{AB}), wohingegen auch bei der Streuung in den Referenzgruppen keine signifikanten Unterschiede beider Gruppen zu erkennen ist ($\tilde{p}_{AB}$). Die p-Werte des Kolmogorov-Smirnov-Tests deuten sowohl für die gewählten Gruppen 1 und 2 als auch für die zufällig gewählten Referenzgruppen auf nicht signifikante Testergebnisse, woraus hier zu schließen ist, dass die atomaren Eigenschaften beider Gruppen neben Unterschieden in der Verschiebung und der Streuung keine weiteren statistisch relevanten Unterschiede (z. B. geänderte Schiefe) aufweisen.

Das Vorzeichen der geschätzten Unterschiede in den Medianen ($\Delta\hat{\mu}$) hängt von der betrachteten Größe ab. Zeigt beispielsweise die Energie einen positiven Wert für $\Delta\hat{\mu}$, was bedeutet,

[2] Das sind Verschiebungen der Verteilungen gegeneinander, die sich als Mediandifferenz oder auch Mittelwertdifferenz bemerkbar machen.

Tabelle 4.2: Resultate der Signifikanztests für die Unterschiede in den atomaren Charakteristika der im Text besprochenen Beispielsimulation (700 K, $N = 17500$, $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\text{ns}$, zx-Richtung). Oberer Teil: $(\lambda_1, \lambda_2) = (3, 1)$, unterer Teil: $(\lambda_1, \lambda_2) = (2, 2)$. Zur Erläuterung der dargestellten Werte siehe Text.

a_i	p_{WMW}	$\Delta\hat{\mu}$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
$E_{pot,i}$ Ni	$0^{(***)}$	$_{0.0618}0.0693_{0.0768}$	$0.45^{(ns)}$	$0.0012^{(**)}$	$_{0.825}0.887_{0.953}$	$0.473^{(ns)}$	$0.089^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$
$E_{pot,i}$ Zr	$0^{(***)}$	$_{0.0571}0.0669_{0.0767}$	$0.458^{(ns)}$	$2.47\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.803}0.849_{0.9}$	$0.533^{(ns)}$	$0.294^{(ns)}$	$0.82^{(ns)}$
$\mathcal{V}_i$ Ni	$1.74\text{e-}16^{(***)}$	$_{-0.000342}-0.000285_{-0.0002}$	$0.505^{(ns)}$	$4.83\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.782}0.834_{0.89}$	$0.468^{(ns)}$	$0.142^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$
$\mathcal{V}_i$ Zr	$5.73\text{e-}07^{(***)}$	$_{-0.00028}-0.000194_{-0.000121}$	$0.478^{(ns)}$	$1.64\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.757}0.8_{0.847}$	$0.537^{(ns)}$	$0.998^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
Q_4 Ni	$0.0493^{(*)}$	$_{3.29\text{e-}07}0.00274_{0.00545}$	$0.615^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.67}0.716_{0.765}$	$0.441^{(ns)}$	$0.539^{(ns)}$	$0.749^{(ns)}$
Q_4 Zr	$0^{(***)}$	$_{0.00266}0.0034_{0.00414}$	$0.552^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.664}0.704_{0.746}$	$0.458^{(ns)}$	$0.724^{(ns)}$	$0.733^{(ns)}$
Q_5 Ni	$6.82\text{e-}05^{(***)}$	$_{-0.0106}-0.0071_{-0.00358}$	$0.507^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.647}0.69_{0.735}$	$0.498^{(ns)}$	$0.935^{(ns)}$	$0.746^{(ns)}$
Q_5 Zr	$0^{(***)}$	$_{0.00519}0.00654_{0.0079}$	$0.482^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.722}0.765_{0.81}$	$0.514^{(ns)}$	$0.295^{(ns)}$	$0.755^{(ns)}$
Q_6 Ni	$0.0411^{(*)}$	$_{-0.00508}-0.00259_{-0.000102}$	$0.535^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.671}0.716_{0.765}$	$0.478^{(ns)}$	$0.986^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
Q_6 Zr	$9.72\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.00344}0.00545_{0.00743}$	$0.52^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.697}0.737_{0.78}$	$0.447^{(ns)}$	$0.958^{(ns)}$	$0.814^{(ns)}$
φ_i^p Ni	$5.71\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.0622}0.0841_{0.106}$	$0.472^{(ns)}$	$5.08\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.73}0.781_{0.835}$	$0.425^{(ns)}$	$0.26^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
φ_i^p Zr	$0.819^{(ns)}$	$_{-0.0241}0.00316_{0.0304}$	$0.532^{(ns)}$	$5.86\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.793}0.841_{0.891}$	$0.513^{(ns)}$	$0.852^{(ns)}$	$0.772^{(ns)}$
φ_i^τ Ni	$0^{(***)}$	$_{0.0697}0.0804_{0.0912}$	$0.507^{(ns)}$	$4.17\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.744}0.793_{0.846}$	$0.508^{(ns)}$	$0.814^{(ns)}$	$0.761^{(ns)}$
φ_i^τ Zr	$0^{(***)}$	$_{0.0718}0.0833_{0.0947}$	$0.478^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.732}0.775_{0.819}$	$0.48^{(ns)}$	$0.635^{(ns)}$	$0.827^{(ns)}$
$E_{pot,i}$ Ni	$0^{(***)}$	$_{0.0457}0.0512_{0.0566}$	$0.533^{(ns)}$	$0.00966^{(**)}$	$_{0.886}0.933_{0.983}$	$0.543^{(ns)}$	$0.112^{(ns)}$	$0.781^{(ns)}$
$E_{pot,i}$ Zr	$0^{(***)}$	$_{0.0428}0.05_{0.0573}$	$0.503^{(ns)}$	$0.00916^{(**)}$	$_{0.904}0.944_{0.986}$	$0.572^{(ns)}$	$0.496^{(ns)}$	$0.795^{(ns)}$
$\mathcal{V}_i$ Ni	$1.83\text{e-}20^{(***)}$	$_{-0.000271}-0.000225_{-0.000189}$	$0.525^{(ns)}$	$1.7\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.815}0.855_{0.897}$	$0.458^{(ns)}$	$0.267^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
$\mathcal{V}_i$ Zr	$0.000407^{(***)}$	$_{-0.000164}-9.19\text{e-}05_{-4.2\text{e-}05}$	$0.569^{(ns)}$	$6.47\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.827}0.864_{0.903}$	$0.471^{(ns)}$	$0.988^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$
Q_4 Ni	$0.00297^{(**)}$	$_{0.001}0.00294_{0.00486}$	$0.478^{(ns)}$	$1.03\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.793}0.832_{0.873}$	$0.431^{(ns)}$	$0.91^{(ns)}$	$0.771^{(ns)}$
Q_4 Zr	$0^{(***)}$	$_{0.00188}0.00244_{0.00296}$	$0.478^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.786}0.82_{0.856}$	$0.451^{(ns)}$	$0.48^{(ns)}$	$0.804^{(ns)}$
Q_5 Ni	$0.000355^{(***)}$	$_{-0.00692}-0.00445_{-0.00202}$	$0.454^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.715}0.751_{0.787}$	$0.481^{(ns)}$	$0.998^{(ns)}$	$0.757^{(ns)}$
Q_5 Zr	$0^{(***)}$	$_{0.0038}0.0048_{0.00579}$	$0.523^{(ns)}$	$1.81\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.849}0.885_{0.924}$	$0.458^{(ns)}$	$0.841^{(ns)}$	$0.812^{(ns)}$
Q_6 Ni	$0.00815^{(**)}$	$_{-0.0041}-0.00237_{-0.000606}$	$0.508^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.745}0.782_{0.82}$	$0.576^{(ns)}$	$0.945^{(ns)}$	$0.838^{(ns)}$
Q_6 Zr	$2.36\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.0021}0.0036_{0.00507}$	$0.44^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.791}0.827_{0.863}$	$0.496^{(ns)}$	$0.731^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
φ_i^p Ni	$0^{(***)}$	$_{0.0534}0.0692_{0.085}$	$0.542^{(ns)}$	$2.15\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.819}0.86_{0.904}$	$0.501^{(ns)}$	$0.427^{(ns)}$	$0.804^{(ns)}$
φ_i^p Zr	$0.722^{(ns)}$	$_{-0.0167}0.00369_{0.0241}$	$0.535^{(ns)}$	$0.000183^{(***)}$	$_{0.88}0.919_{0.961}$	$0.486^{(ns)}$	$0.857^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
φ_i^τ Ni	$0^{(***)}$	$_{0.0483}0.056_{0.0637}$	$0.519^{(ns)}$	$7.06\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.811}0.852_{0.893}$	$0.437^{(ns)}$	$0.305^{(ns)}$	$0.791^{(ns)}$
φ_i^τ Zr	$0^{(***)}$	$_{0.0556}0.0641_{0.0725}$	$0.435^{(ns)}$	$2.59\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.829}0.865_{0.903}$	$0.445^{(ns)}$	$0.707^{(ns)}$	$0.742^{(ns)}$

dass die mittlere potenzielle Energie der Atome mit massiven Topologieänderungen signifikant höher ist als die der Atome mit moderaten Änderungen, ist das Voronoizellenvolumen für Ni- und Zr-Atome mit massiven Topologieänderung im Mittel signifikant kleiner als das der anderen Atome. Für Ni und Zr ist der Q_4-Ordnungsparameter in Gruppe 1 größer als in Gruppe 2, wogegen für Q_5 und Q_6 jeweils für Ni signifikant ein geringerer Wert vorliegt, für Zr dagegen ein größerer Wert. Die Größen φ_i^p für Ni und φ_i^τ für Ni und Zr sind für Atome mit stark geänderter Topologie signifikant größer gegenüber den Werten der Atome, die durch moderate Topologieänderungen gekennzeichnet sind.

Unterschiede in den Streuungen werden für alle atomaren Eigenschaften gefunden. Die Schätzung des Quotienten (σ_1/σ_2) ist in allen Fällen kleiner als eins, woraus folgt, dass die Streuung in den Daten der Atome mit starken Änderungen in der Topologie ($\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\ \%, 0) > 3$ bzw. > 2) sowohl für die Ni- als auch die Zr-Atome signifikant geringer ist als für die jeweils andere Gruppe (moderate Topologieänderungen).

Durch die Wahl zweier Wertepaare (λ_1, λ_2) ist gezeigt, dass die Vergrößerung der Stichproben keine qualitative Änderung der gefundenen Resultate bewirkt. Unterschiede treten auf in den bei den Tests berechneten Schätzungen der Lageunterschiede bzw. des Quotienten der Streuungen. Die Vergrößerung der Stichproben führt zu einer Verringerung des Absolutwerts $|\Delta\hat{\mu}|$ der geschätzten Unterschiede im Median und einer Vergrößerung (Annäherung an der Wert 1) von σ_1/σ_2.

Eine weitere Zusammenstellung von Resultaten der Signifikanztests einer anderen Simulation ist zum Vergeich in Tabelle 4.3 gegeben. Es handelt sich um die simulierte Scherung einer kleinen Probe (5184 Atome) mit $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns in der xy-Ebene bei 700 K. Für die Anzahl N_1 und N_2 der Atome beider Gruppen gilt für die zwei Wertepaare (λ_1, λ_2):

$$(3,1) \longrightarrow \text{Ni: } N_1 = 407 \text{ und } N_2 = 749;\ \text{Zr: } N_1 = 586 \text{ und } N_2 = 362,$$
$$(2,2) \longrightarrow \text{Ni: } N_1 = 714 \text{ und } N_2 = 1394;\ \text{Zr: } N_1 = 1090 \text{ und } N_2 = 942.$$

Ähnlich wie bei den Ergebnissen der Simulation des großen Systems bei einer höheren Scherrate (Tab. 4.2) zeigen sich auch bei dem mit geringerer Rate verformten kleinen System statistisch signifikante (häufig höchst signifikante) Unterschiede in den Medianen (d. h. der mittleren Lage der Verteilungen) der atomaren Eigenschaften unterschiedlicher Atomgruppen. Ausnahme ist einerseits, wie schon beim großen System (Tab. 4.2), die Größe φ_i^p für Zr, andererseits die Größen Q_4 und Q_5 für Ni und Q_6 für Ni und Zr. In diesen Fällen ist eine Ablehnung der Nullhypothese aufgrund der Daten nicht erforderlich. Die zufällig gewählten Referenzgruppen zeigen durchweg nicht signifikante Testergebnisse. Die geschätzten Verschiebungen zeigen die gleichen Tendenzen wie bei der Simulation des großen Systems, z. B. eine höhere potenzielle

Tabelle 4.3: Resultate der Signifikanztests für die Unterschiede in den atomaren Charakteristika einer weiteren Simulation (700 K, $N = 5184$, $\dot{\epsilon} = 1.0\,\%/\mathrm{ns}$, xy-Richtung). Oberer Teil: $(\lambda_1, \lambda_2) = (3, 1)$, unterer Teil: $(\lambda_1, \lambda_2) = (2, 2)$. Zur Erläuterung der dargestellten Werte siehe Text.

a_i	p_{WMW}	$\Delta\hat{\mu}$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
$E_{pot,i}$ Ni	$0^{(***)}$	$_{0.0535}0.0651_{0.0769}$	$0.508^{(ns)}$	$0.00713^{(**)}$	$_{0.756}0.849_{0.955}$	$0.437^{(ns)}$	$0.391^{(ns)}$	$0.748^{(ns)}$
$E_{pot,i}$ Zr	$1.5\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.05}0.07_{0.09}$	$0.456^{(ns)}$	$0.0422^{(*)}$	$_{0.793}0.891_{0.996}$	$0.49^{(ns)}$	$0.998^{(ns)}$	$0.799^{(ns)}$
$\mathcal{V}_i$ Ni	$1.83\text{e-}07^{(***)}$	$_{-0.000399}-0.00028_{-0.000179}$	$0.581^{(ns)}$	$7.27\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.726}0.807_{0.896}$	$0.485^{(ns)}$	$0.0303^{(*)}$	$0.786^{(ns)}$
$\mathcal{V}_i$ Zr	$0.00365^{(**)}$	$_{-0.000376}-0.000216_{-4.64\text{e-}05}$	$0.564^{(ns)}$	$0.0677^{(ns)}$	$_{0.8}0.898_{1.01}$	$0.534^{(ns)}$	$0.167^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
Q_4 Ni	$0.134^{(ns)}$	$_{-0.00106}0.00352_{0.00803}$	$0.592^{(ns)}$	$2.8\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.621}0.694_{0.775}$	$0.568^{(ns)}$	$0.9^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
Q_4 Zr	$1.81\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.00273}0.00417_{0.00557}$	$0.443^{(ns)}$	$0.000309^{(***)}$	$_{0.726}0.811_{0.908}$	$0.499^{(ns)}$	$0.844^{(ns)}$	$0.753^{(ns)}$
Q_5 Ni	$0.595^{(ns)}$	$_{-0.00746}-0.00158_{0.00422}$	$0.54^{(ns)}$	$1.11\text{e-}15^{(***)}$	$_{0.558}0.625_{0.7}$	$0.616^{(ns)}$	$0.36^{(ns)}$	$0.817^{(ns)}$
Q_5 Zr	$4.62\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.00457}0.00747_{0.0103}$	$0.482^{(ns)}$	$3.44\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.664}0.747_{0.845}$	$0.428^{(ns)}$	$0.902^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
Q_6 Ni	$0.711^{(ns)}$	$_{-0.0032}0.00071_{0.00467}$	$0.481^{(ns)}$	$1.08\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.665}0.742_{0.825}$	$0.449^{(ns)}$	$0.986^{(ns)}$	$0.769^{(ns)}$
Q_6 Zr	$0.152^{(ns)}$	$_{-0.00108}0.00293_{0.00691}$	$0.51^{(ns)}$	$4.37\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.685}0.773_{0.875}$	$0.502^{(ns)}$	$0.762^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
φ_i^p Ni	$1.76\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.056}0.0896_{0.123}$	$0.544^{(ns)}$	$6\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.665}0.747_{0.836}$	$0.415^{(ns)}$	$0.287^{(ns)}$	$0.799^{(ns)}$
φ_i^p Zr	$0.817^{(ns)}$	$_{-0.0462}0.00617_{0.0575}$	$0.516^{(ns)}$	$0.00463^{(**)}$	$_{0.738}0.833_{0.944}$	$0.448^{(ns)}$	$0.995^{(ns)}$	$0.786^{(ns)}$
φ_i^τ Ni	$3.73\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.0512}0.0684_{0.0859}$	$0.496^{(ns)}$	$0.000104^{(***)}$	$_{0.728}0.81_{0.9}$	$0.515^{(ns)}$	$0.835^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
φ_i^τ Zr	$6.49\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.0597}0.0824_{0.105}$	$0.482^{(ns)}$	$4.4\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.701}0.787_{0.883}$	$0.513^{(ns)}$	$0.876^{(ns)}$	$0.783^{(ns)}$
$E_{pot,i}$ Ni	$0^{(***)}$	$_{0.0405}0.0493_{0.0582}$	$0.546^{(ns)}$	$0.00118^{(**)}$	$_{0.79}0.862_{0.942}$	$0.504^{(ns)}$	$0.0307^{(*)}$	$0.775^{(ns)}$
$E_{pot,i}$ Zr	$1.23\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.0374}0.0506_{0.0638}$	$0.526^{(ns)}$	$0.015^{(*)}$	$_{0.839}0.908_{0.981}$	$0.534^{(ns)}$	$0.723^{(ns)}$	$0.773^{(ns)}$
$\mathcal{V}_i$ Ni	$3.07\text{e-}09^{(***)}$	$_{-0.00029}-0.000225_{-0.000133}$	$0.556^{(ns)}$	$3.77\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.777}0.842_{0.913}$	$0.455^{(ns)}$	$0.00715^{(**)}$	$0.761^{(ns)}$
$\mathcal{V}_i$ Zr	$0.000264^{(***)}$	$_{-0.000304}-0.00017_{-6.8\text{e-}05}$	$0.537^{(ns)}$	$0.0153^{(*)}$	$_{0.842}0.909_{0.982}$	$0.504^{(ns)}$	$0.186^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
Q_4 Ni	$0.277^{(ns)}$	$_{-0.00145}0.00182_{0.00509}$	$0.506^{(ns)}$	$2.69\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.725}0.788_{0.856}$	$0.476^{(ns)}$	$0.844^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
Q_4 Zr	$2.25\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.00173}0.00269_{0.00361}$	$0.457^{(ns)}$	$0.000107^{(***)}$	$_{0.798}0.86_{0.928}$	$0.512^{(ns)}$	$0.85^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
Q_5 Ni	$0.456^{(ns)}$	$_{-0.00585}-0.00157_{0.00265}$	$0.507^{(ns)}$	$2.42\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.692}0.752_{0.817}$	$0.546^{(ns)}$	$0.754^{(ns)}$	$0.832^{(ns)}$
Q_5 Zr	$4.29\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.00369}0.00552_{0.00732}$	$0.502^{(ns)}$	$0.000217^{(***)}$	$_{0.792}0.858_{0.931}$	$0.53^{(ns)}$	$0.277^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
Q_6 Ni	$0.618^{(ns)}$	$_{-0.00221}0.000734_{0.00368}$	$0.452^{(ns)}$	$6.27\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.751}0.814_{0.881}$	$0.531^{(ns)}$	$0.808^{(ns)}$	$0.825^{(ns)}$
Q_6 Zr	$0.112^{(ns)}$	$_{-0.00052}0.00216_{0.00482}$	$0.522^{(ns)}$	$7.76\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.757}0.819_{0.885}$	$0.454^{(ns)}$	$0.898^{(ns)}$	$0.773^{(ns)}$
φ_i^p Ni	$4.58\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.0447}0.0696_{0.0949}$	$0.538^{(ns)}$	$2.27\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.749}0.814_{0.886}$	$0.449^{(ns)}$	$0.203^{(ns)}$	$0.759^{(ns)}$
φ_i^p Zr	$0.331^{(ns)}$	$_{-0.0177}0.0175_{0.0525}$	$0.542^{(ns)}$	$0.00326^{(**)}$	$_{0.821}0.888_{0.961}$	$0.523^{(ns)}$	$0.957^{(ns)}$	$0.775^{(ns)}$
φ_i^τ Ni	$0^{(***)}$	$_{0.0423}0.0548_{0.0674}$	$0.484^{(ns)}$	$0.000106^{(***)}$	$_{0.787}0.852_{0.924}$	$0.485^{(ns)}$	$0.972^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
φ_i^τ Zr	$6.1\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.0358}0.0509_{0.0661}$	$0.492^{(ns)}$	$4.47\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.786}0.851_{0.919}$	$0.538^{(ns)}$	$0.832^{(ns)}$	$0.84^{(ns)}$

Energie oder ein geringeres Voronoizellenvolumen der Atome mit starken Topologieänderungen im Vergleich zu denen mit moderaten Änderungen. Neben der vergleichbaren Tendenz in den Verschiebungen zeigen die Werte für $\Delta\hat{\mu}$ zusätzlich eine gute Übereinstimmung zwischen den zwei dargestellten Simulationen.

Die Ergebnisse der Signifikanztests für die zwei Wertepaare (λ_1, λ_2) bzgl. der Streuung in den verschiedenen Größen stimmen sehr gut mit den Befunden für das große System überein. Atome mit starken Topologieänderungen (Gruppe 1) zeigen signifikante Unterschiede in der Streuung der atomaren Eigenschaften verglichen mit den Werten der Streuung für die Atome der jeweiligen Gruppe 2. Die Referenzgruppen deuten in allen Fällen auf keine signifikanten Unterschiede (die Daten erzwingen nicht die Ablehnung der Nullhypothese). Am Beispiel der Streuung in den Volumendaten der Zr-Atome fällt auf, dass für das Wertepaar (3,1) ein Unterschied anhand der vorliegenden Daten nicht als auf dem 5 %-Niveau statistisch gesichert angenommen werden muss, eine Vergrößerung der Stichproben (Wertepaar (2,2)) aber auf einen signifikanten Unterschied (mit einer statistischen Sicherheit von 95 %) deutet.

Neben den auf signifikante Unterschiede hindeutenden Ergebnissen für die Mittelwerte und die Streuung, geben auch die entsprechend verschobenen und skalierten Werte für $\mathcal{V}_i$ für Ni und (zumindest für das Wertepaar (2,2)) E_{pot} für Ni Anlass zur Annahme eines zusätzlich vorliegenden Unterschieds in den Verteilungen (Schiefe oder Exzess, engl: *skewness*, *kurtosis*), die hier aber nicht eingehender analysiert werden sollen.

Ergebnisse weiterer Signifikanztests In Anhang E ist eine Zusammenstellung der Signifikanztests zur Untersuchung der Unterschiede in der potenziellen Energie, der atomaren Käfigvolumina, der Q_l-Ordnungsparameter, der hydrostatischen Spannungen und der von Mises Spannungen zweier verschiedener Atomgruppen für einen Großteil der simulierten Scherungen gegeben. Neben den Daten für 700 K sind dort auch die Ergebnisse der Signifikanztests der Scherungen mit Raten 0.1 %/ns, 1.0 %/ns und 10.0 %/ns für 810 K und 1000 K zu finden. Im Folgenden werden die Resultate kurz dargestellt.

Potenzielle Energie Die Daten der potenziellen Energie zeigen für Ni und Zr die bereits oben dargestellten signifikanten Lageunterschiede der Verteilungen für Gruppe 1 und Gruppe 2. Die geschätzten Verschiebungen zeigen geringe Verkleinerungen mit zunehmender Temperatur und tendenziell eine Zunahme bei Erhöhung der Scherrate (bei Zr nicht so deutlich ausgeprägt). Die Werte der Verschiebung liegen grob zwischen 0.04 eV/Atom und 0.1 eV/Atom und damit höher als die Tiefe des Potenzials der Ni-Ni-Wechselwirkungen (≈ -0.0434 eV, vgl. Abb. 3.1, Seite 23). Nimmt man 0.07 eV als Richtwert, beträgt die Verschiebung knapp 20 % der Potenzialtiefe der Ni-Zr-Wechselwirkungen oder 17 % der Tiefe der Zr-Zr-Wechselwirkungen. Positive Verschiebung bedeutet, dass die Atome der jeweiligen Gruppe 1 (massive Topologieum-

lagerungen) eine höhere potenzielle Energie haben als die Atome der Gruppe 2 (moderate Topologieumlagerungen). Die Daten der jeweiligen Referenzgruppen zeigen keine signifikanten Unterschiede in den Medianen zueinander.

Die Varianzunterschiede der potenziellen Energien zwischen Gruppe 1 und Gruppe 2 sind für Ni bei 810 K und 1000 K nicht signifikant (sowohl für $(\lambda_1, \lambda_2) = (3, 1)$ als auch $(2, 2)$), für 700 K finden sich Simulationen mit signifikanten Unterschieden und solche, deren Test nicht auf signifikante Unterschiede deutet. Für Zr dagegen liegen für alle Temperaturen auf signifikante Varianzunterschiede hindeutende Testergebnisse vor. Wie für Ni, so auch für Zr sind die Testergebnisse der Referenzgruppen durchweg nicht signifikant.

Bei den Tests auf Unterschiede neben der Verschiebung und der Streuung ergeben sich signifikante Testergebnisse für Ni bei den großen Systemen sowohl bei 700 K (dort nur für die Verformung mit $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns) als auch für die Simulationen bei 1000 K. Auch bei den kleinen Systemen treten, abhängig von der Wahl von (λ_1, λ_2) signifikante Testergebnisse auf. Beim Zr zeigt keine der Simulationen einen Hinweis auf weitere Unterschiede. Für beide Atomsorten zeigen die zufällig ausgewählten Referenzgruppen kein signifikantes Resultat des Kolmogorov-Smirnov-Tests.

Atomares Käfigvolumen Beim atomaren Käfigvolumen liegen wie bereits bei den oben dargestellten Simulationen für Ni bei den meisten Simulationen signifikante Lageunterschiede vor. Ausnahmen bilden z. B. die Scherungen bei 1000 K mit der geringen Rate (0.1 %/ns). Beim Zr treten für beide Wertepaare ((3,1) und (2,2)) etwa gleichhäufig Testresultate auf, die auf signifikante Medianunterschiede hindeuten und solche die diese Annahme nicht erfordern. Auffälligerweise ist häufig die xy-Scherung durch signifikante Testergebnisse gekennzeichnet, die zx-Scherung dagegen nicht (z. B. Simulation 1 und 2 bei 700 K, 14 und 15 bei 810 K oder 22 und 23 bei 1000 K, vgl. Tab. E.1 und E.16 für die Parameter der jeweiligen Simulationsnummern). Die Schätzungen der Verschiebung fallen für Ni etwas größer aus als für Zr, für beide Atomsorten deuten die Werte an, dass das mittlere Käfigvolumen von Atomen der Gruppe 1 kleiner ist als das der Atome von Gruppe 2. Es liegt eine leichte Abhängigkeit von der Scherrate vor, wobei eine höhere Scherrate eine etwas stärkere Verschiebung bewirkt. Die geschätzten Verschiebungen schwanken je nach Verformungsrichtung und Atomsorte und liegen zwischen -0.5×10^{-4} nm^3 bis etwa -4×10^{-4} nm^3. Zur Einordnung der Änderung folgendes Beispiel: Mit einem Richtwert von ungefähr 100.287 nm^3 für das Gesamtvolumen des kleinen Systems (5184 Atome) bei 810 K würde eine Verkleinerung des Käfigvolumens jedes Atoms im Mittel um 0.1×10^{-4} nm^3 eine Verkleinerung des Gesamtvolumens auf $100.287\ \text{nm}^3 - 5184 \cdot 4 \times 10^{-4}\ \text{nm}^3 \approx 100.235\ \text{nm}^3$ bedeuten, also um ungefähr 0.05 %. Bei Verkleinerung im Mittel um 0.3×10^{-4} nm^3 entsprechend eine Verringerung des

Gesamtvolumens um ca. 0.15 %. Die Verschiebungen der Verteilungen der zufällig gewählten Referenzgruppen gegeneinander sind jeweils nicht signifikant.

Die Streuungen der Käfigvolumina der unterschiedlichen Gruppen zeigt für alle Simulationen (Ausnahmen lediglich $\mathcal{V}_i$ für Ni bei Simulation 5 für Wertepaar $(2, 2)$ und Simulation 18 bei Wertepaar $(3, 1)$) die bereits bei den zwei Beispielen gezeigten, auf signifikante Unterschiede hindeutenden Testergebnisse. Die geschätzten Quotienten liegen für alle Temperaturen und Scherraten relativ dicht beieinander und weisen auf geringere Streuungen bei den Atomen der Gruppe 1 im Vergleich zur Streuung der Daten der Atome aus Gruppe 2. Die Testergebnisse der Referenzgruppen deuten ausnahmslos auf nicht signifikante Unterschiede.

Die Testergebnisse der Untersuchung auf weitere Unterschiede zeigen für Ni bei allen Simulationen keine Signifikanz. Beim Zr liegen bei einer geringen Zahl der Simulation Testresultate vor, die auf weitere Unterschiede hindeuten: Unter anderem beim großen 1000 K-System (Simulationen 25, 26 und 27 für $(\lambda_1, \lambda_2) = (3, 1)$ und 25 und 27 für $(2, 2)$), aber auch beim kleinen 700 K-System (Simulation 2 und 3 für beide Wertepaare). Für Ni und Zr deuten die Testergebnisse der jeweiligen Referenzgruppen für alle Simulationen auf keine signifikanten Unterschiede in den Verteilungen (verschoben und skaliert, vgl. Abschn. 3.6.2).

Ordnungsparameter Die Daten der Signifikanztests zur Analyse der Medianunterschiede der atomaren Q_4-Parameter zweier unterschiedlicher Atomgruppen für Ni und Zr deuten für eine Vielzahl der Simulationen auf signifikante Verschiebungen der Verteilungen gegeneinander. Bei Ni gibt es Ausnahmen für alle drei Temperaturen, wonach für diese Simulationen aus den jeweiligen Daten keine Unterschiede angenommen zu werden brauchen. Beim Zr liegen ausnahmslos höchst signifikante Testergebnisse vor (Simulation 18 für Zr nur signifikant, vgl. Tab. E.7). Ist die Annahme von gleichen Medianen fragwürdig (also bei signifikanten Testergebnissen), liegen die geschätzten Mediandifferenzen bei Werten zwischen 0.002 bis 0.006 für Zr, beim Ni schwanken die Unterschiede deutlicher, von etwa 0.003 bis zu 0.015. Die Unterschiede für das Wertepaar $(2, 2)$ sind im Vergleich zu denen für $(3, 1)$ geringfügig kleiner. Im Rahmen der Schwankungen hängen die gefundenen Lageunterschiede kaum von der Temperatur ab. Unterschiede bei Tests der zwei Referenzgruppen gegeneinander sind statistisch nicht gesichert.

Sowohl für Ni als auch Zr zeigen die Daten der Tests auf Varianzdifferenzen zwischen den Q_4-Werten der zwei Gruppen für alle Simulationen die bereits oben in den zwei Beispielen gefundenen, auf signifikante Unterschiede hindeutenden Ergebnisse. Die geschätzten Unterschiede (Quotienten der Streuungen) zeigen keine ausgeprägte Abhängigkeit von der Temperatur, der Scherrate oder der Verformungsebene. Sie liegen in einem Bereich zwischen ca. 0.7 und 0.85. Bei den Tests für die jeweils etwas größeren Gruppen (vgl. Werte für N_1 und N_2 in Tab. E.16 im Vergleich zu Tab. E.1) liegen die Schätzungen der Quotienten näher zum Wert

1 (gleiche Streuung) verschoben. Die Referenzgruppen zeichnen sich durch keine signifikanten Testresultate aus.

Die Tests auf Unterschiede über die Lage- und Varianzunterschiede hinaus liefern für Ni und Zr für beide Wertepaare (λ_1, λ_2) keinen Anhaltspunkt zur Annahme solcher Differenzen. Vergleichbar sind die nicht signifikanten Testergebnisse der jeweiligen Referenzgruppen.

Der Wilcoxon-Mann-Whitney-Test bzgl. der Unterschiede zwischen den Q_5-Parametern der zwei Atomgruppen (Tab. E.8 für $(3,1)$ und Tab. E.23 für $(2,2)$ für Ni und Tab. E.9 für $(3,1)$ und Tab. E.24 für $(2,2)$ für Zr) zeigt für Ni sowohl signifikante als auch nicht signifikante Resultate. Vor allem die Simulationen der großen Systeme (8 bis 11 für 700 K und 24 bis 27 für 1000 K) geben Grund zur Annahme eines Lageunterschieds (verschiedener Mittelwert bzw. Median). Bei den kleinen Systemen lassen die Daten einen solchen Schluss seltener zu (Ausnahmen unter anderem für $(\lambda_1, \lambda_2) = (2,2)$: Simulation 6 bei 700 K oder Simulation 20 und 22 bei 1000 K). Deutlicher sind die Ergebnisse für Zr, nach denen für alle Simulationen (für beide Wertepaare (λ_1, λ_2)) die Testsergebnisse signifikant (meist höchst signifikant) ausfallen. Die Schätzungen (die Werte für $\Delta\hat{\mu}$) zeigen für Ni geringfügig kleinere Q_5-Werte für Atome der Gruppe 1 (massive Topologieänderungen) verglichen mit den Werten für Atome der Gruppe 2. Beim Zr sind die Q_5-Werte für Gruppe 1 eher höher als die für Gruppe 2. Für Ni liegen die Schätzungen der Verschiebung zwischen 0 und -0.01, beim Zr dagegen zwischen 0.0025 bis etwa 0.012.

Wie für die in den obigen Beispielen gewählten Simulationen sind die auftretenden Streuungen in den Daten der Q_5-Parameter der zwei unterschiedlichen Atomgruppen (Ni und Zr) fast ausnahmslos voneinander verschieden (auf dem 95 %-Niveau gesichert), mit Ausnahme der Simulation 18, wo die Unterschiede in der Varianz zwischen den Verteilungen der Zr-Q_5-Werte von Gruppe 1 und 2 nicht signifikant sind. Die zufällig ausgewählten Referenzproben liefern durchweg nicht signifikante Testergebnisse. Die Schätzungen der Quotienten der Streuungen der Daten von Gruppe 1 und Gruppe 2 sind sowohl für Ni als auch für Zr kleiner als eins, wonach die Atome mit massiven Topologieänderungen eine geringere Varianz in den Daten zeigen als die der Atome aus Gruppe 2. Abhängig von der Größe der Stichproben, liegen die Werte der Quotienten mal näher am Wert 1 (gleiche Streuung), mal weiter weg. Die größeren Stichproben für $(\lambda_1, \lambda_2) = (2,2)$ liegen demnach näher zur eins verschoben als die Schätzungen aus den Tests für die kleineren Stichproben für $(\lambda_1, \lambda_2) = (3,1)$.

Unterschiede zwischen den Verteilungen der Q_5-Werte für Gruppe 1 und 2 neben denen in der Streuung oder der Lage sind aus den vorliegenden Daten nicht ableitbar. Die Testergebnisse für den Kolmogorov-Smirnov-Test der transformierten (um den Mittelwert verschoben und durch die Streuung geteilt) sind durchweg, wie auch für die zufällig gewählten Referenzproben

statistisch nicht signifikant.

Aus den Signifikanztests zu Unterschieden in den Medianen der Q_6-Parameter für die zwei Atomgruppen ergeben sich Schätzungen für die Differenz $\Delta\hat{\mu}$, die eine Verschiebung der mittleren Q_6-Parameter der jeweiligen Gruppen gegeneinander bedeuten. Für Zr sind die $\Delta\hat{\mu}$-Werte jeweils positiv, d. h. die Q_6-Werte für Atome aus Gruppe 1 sind im Mittel höher als die für Atome aus Gruppe 2, für Ni hingegen liegen negative oder positive Differenzen $\Delta\hat{\mu}$ vor. Dem Betrag nach sind die geschätzten Verschiebungen für Zr größer als für Ni; sie liegen bei Ni zwischen etwa 0.002 und -0.004, für Zr zwischen 0.001 und 0.01. Beim Ni liefert der Signifikanztest für die meisten Simulationen keinen Grund, die gefundenen Unterschiede als überzufällig anzusehen. Beim Zr treten für beide Wertepaare (λ_1, λ_2) einige nicht signifikante Testergebnisse auf (unter anderem Simulation 3, 5, 6, 14, 16, 18, 20 und 22 für $(3, 1)$), alle für simulierte Scherungen in der xy-Ebene. Auch für Q_6 ergeben die Signifikanztests für zufällig gewählte Stichproben keinen Grund zur Annahme eines statistisch gesicherten Unterschieds bzgl. der Mediane zwischen den Referenzgruppen.

Wie schon beim Q_5-Parameter zeigt auch der Q_6-Parameter (Tabellen E.10, E.11, E.25 und E.26) für nahezu alle Simulationen und beide Atomsorten (nicht für Simulation 18 und 20 für $(3, 1)$ bzw. 18 für $(2, 2)$ bei Zr, oder Simulation 18 für $(3, 1)$ bei Ni) einen statistisch signifikanten Unterschied der Streuungen in den Daten der unterschiedlichen Atomgruppen (massive bzw. moderate Topologieänderungen). Die Schätzung des Quotienten der Streuung der Atome aus Gruppe 1 und Gruppe 2 liegt für die jeweils größeren Stichproben näher zum Wert 1 (gleiche Streuung) verschoben. Die Quotienten für Zr sind insgesamt etwas höher als die für Ni und sie umspannen einen Bereich von etwa 0.7 bis 0.9. Die zwei zufällig ausgewählten Referenzgruppen zeigen für alle Simulationen keine signifikanten Unterschiede in den Streuungen.

Wie schon bei Q_4 und Q_5 liefern die Tests auf Vorliegen weiterer, über die in Lage oder Streuung hinaus gehende Unterschiede auch für Q_6 sowohl für Ni als auch Zr (jeweils beide Wertepaare) keinen Grund zu ihrer Annahme. Genauso liegen auch für zufällig ausgewählte Referenzgruppen der gleichen Größe wie die der jeweiligen Gruppen 1 und 2 keine signifikanten Testsergebnisse vor.

Hyrdostatischen Spannungen Bei der Größe φ_i^p zeigen die Signifikanztests zum Testen auf Lageunterschiede (Tab. E.12 und E.27 für Ni, Tab. E.13 und E.28 für Zr) für alle Simulationen und beide Wertepaare (λ_1, λ_2), dass der Median bzw. der Mittelwert der Verteilung der atomaren hydrostatischen Spannungsmaße der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen statistisch signifikant von dem der Atome mit moderaten Topologieänderungen verschieden ist. Beim Zr dagegen liegt (von einigen wenigen Ausnahmen abgesehen) aufgrund der vorlie-

genden Daten keine Notwendigkeit vor, solche Unterschiede anzunehmen. Aus den geschätzten Medianunterschieden folgt, dass die Ni-Atome der Gruppe 1 einen höheren Mittelwert der φ_i^p haben als die der Gruppe 2. Für 700 K ist die Verschiebung etwas größer als bei 810 K und 1000 K. Kleinere Stichproben ($(\lambda_1, \lambda_2) = (3, 1)$) sind durch größere Unterschiede gekennzeichnet. Die geschätzten Werte $\Delta\hat{\mu}$ für die Daten vom Zr sind einerseits positiv (das deutet höhere Mittelwerte für Atome der Gruppe 1 im Vergleich zu denen aus Gruppe 2 an), andererseits auch negativ (Mittelwerte für Atome der Gruppe 1 kleiner als für Atome der Gruppe 2). Für Ni liegen die Werte grob zwischen 0.05 eV/Atom und 0.12 eV/Atom, beim Zr zwischen 0.05 eV/Atom und −0.02 eV/Atom (beachte, dass die gefundenen Unterschiede beim Zr meist nicht statistisch signifikant sind). Signifikanztests für zwei zufällig gewählte Referenzgruppen mit der jeweils gleichen größe wie die der Gruppen 1 und 2 sind durch nicht signifikante Lageunterschiede ausgezeichnet.

Die Verteilung der φ_i^p für die zwei Gruppen (massive bzw. moderate Topologieänderungen) zeigen für alle Simulationen statistisch signifikante Varianzunterschiede (beim Zr liegen Ausnahmen vor, bei denen die in den Daten vorliegenden Unterschiede statistisch nicht relevant sind). Die jeweiligen Referenzgruppen liefern für keine Simulation einen Hinweis auf vorliegende Unterschiede in den Streuungen. Die Schätzungen der Quotienten der Streuung beider Gruppen liefert durchweg Werte kleiner als 1, wonach die Streuung der φ_i^p in den Atomgruppen mit massiven Topologieänderungen geringer ist als in den Gruppen mit moderaten Änderungen. Ausnahme bildet die Simulation Nr. 6, bei der die Schätzung des Quotienten beider Streuungen (Gruppe 1 durch Gruppe 2) größer als 1 ausfällt (Testresultat ist in diesem Fall nicht signifikant).

Neben Lageverschiebungen und Unterschieden in den Streuungen der φ_i^p-Werte der zwei Gruppen, liegen für Zr laut Test keine weiteren Unterschiede in den Daten vor. Beim Ni gibt es drei Ausnahmen: Simulation 24, das große System bei 1000 K und $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns für $(\lambda_1, \lambda_2) = (3, 1)$ und Simulation 8, das große System bei 700 K und $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns und Simulation 27, das große System bei 1000 K und $\dot{\epsilon} = 10.0$ %/ns für $(\lambda_1, \lambda_2) = (2, 2)$.

Von Mises Spannungen Aus den Wilcoxon-Mann-Whitney-Tests der φ_i^τ-Werte zweier unterschiedlicher Atomgruppen für Ni und Zr lässt sich für alle dargestellten Simulationen (wie bereits bei den zwei Beispielen gezeigt) schließen, dass die gefundenen Unterschiede in den Medianen bzw. Mittelwerten beider Gruppen signifikant (meist höchst signifikant) sind. Zwei beliebige Referenzgruppen zeigen hingegen keinen Grund zur Annahme vorliegender Lageunterschiede. Die Schätzungen der Mediandifferenzen sind sowohl für Ni als auch Zr positiv, wonach die Ni- und Zr-Atome der Gruppe 1 (massive Topologieänderungen) einen höheren Mittelwert von φ_i^τ aufweisen als die Atome der jeweiligen Gruppe 2 (moderate Topologieänderungen). Die geschätzten Unterschiede für Zr sind geringer als die für Ni. Für beide Atomsorten

sind die Schätzungen aus den Tests der größeren Stichproben ($(\lambda_1, \lambda_2) = (2, 2)$) etwas kleiner als für die kleineren Stichproben. Für Ni ist keine ausgeprägte Temperaturabhängigkeit zu erkennen, dagegen nehmen beim Zr die Verschiebungen mit zunehmender Temperatur leicht ab. Die Verschiebungen liegen beim Ni zwischen 0.07 eV/Atom und 0.11 eV/Atom, beim Zr zwischen 0.05 eV/Atom und 0.1 eV/Atom für das Wertepaar (3,1). Für (2,2) liegt die geschätzte Verschiebung beim Ni zwischen 0.05 eV/Atom und 0.09 eV/Atom, beim Zr zwischen 0.02 eV/Atom und 0.09 eV/Atom.

Die Streuung in den Daten der φ_i^τ-Werte der zwei Gruppen unterscheiden sich in den meisten der vorliegenden Simulationen deutlich und können als (auf dem 95 %-Niveau) statistisch gesichert angenommen werden (nicht signifikante Resultate treten beim Ni etwas häufiger auf als beim Zr). Die zwei Referenzgruppen aus zufällig gewählten Atomen (jeweils mit den gleichen Gruppengrößen wie die, die aufgrund der Anzahl an verlorenen nächsten Nachbarn ausgewählt werden) deuten für keine Simulation an, dass sich ihre Streuungen unterscheiden. Die geschätzten Quotienten aus den Streuungen sind für alle Simulationen kleiner als eins, d. h. die Verteilungen der jeweiligen Atomgruppe mit massiven Topologieänderung im Dehnungsfenster 10 % bis 15 % sind durch eine geringere Streuung ausgezeichnet als die der Gruppen von Atomen mit moderaten Topologieänderungen. Die Schätzungen für den Quotienten liegen zwischen 0.7 und 0.95.

Andere Unterschiede in den Verteilungen der φ_i^τ-Werte für Ni- oder Zr-Atome aus Gruppe 1 bzw. Gruppe 2 sind auf Grundlage der Resultate aus den Kolmogorov-Smirnov-Tests wenig wahrscheinlich. Für die verschobenen und skalierten Verteilungen liegt kein signifikantes Ergebnis vor, genauso geben die zufällig gewählten Referenzgruppen keinen Anlass zur Annahme von Unterschieden über die mittlere Lage (Mittelwert bzw. Median) und die Varianz hinaus.

4.3.3. Bewertung der atomaren Eigenschaften unterschiedlicher Atomgruppen

In Abschnitt 4.3.2 wird mit Hilfe statistischer Verfahren gezeigt, dass verschiedene Atomgruppen, die beim Durchlaufen des Streckgrenzenbereichs der Spannungs-Dehnungs-Kurve durch unterschiedlich starke Topologieänderungen gekennzeichnet sind, auf statistisch gesicherter Grundlage voneinander zu differenzierende Eigenschaften haben. Hier werden die Eigenschaften der unterschiedlichen Atomgruppen (Gruppe 1 und 2, vgl. Abschn. 4.3.2) in Beziehung zu den Eigenschaften des Systems vor der Verformung gebracht. Neben den atomaren Charakteristika, wird der Wendt-Abraham-Parameter der einzelnen Atomgruppen betrachtet. Von besonderem Interesse sind an dieser Stelle die mittleren Eigenschaften der jeweiligen Atomgruppen im Vergleich zu den mittleren Charakteristika vor der Verformung.

Vorbemerkungen

Für die Bestimmung der mittleren atomaren Eigenschaften der einzelnen Atomgruppen wird in diesem Abschnitt das arithmetische Mittel der jeweiligen Werte bestimmt. Ist eine Anzahl an N_a Werten a_i gegeben, dann gilt:

$$\text{Arithm. Mittel von } a_i \equiv m_a = \frac{1}{N_a}\sum_{i=1}^{N} a_i. \tag{4.3}$$

Zudem wird ein Vertrauensbereich (95 %-Vertrauensbereich) angegeben, der sich aus der Streuung (auch Standardabweichung) s_a der Daten, bestimmbar aus der empirischen Varianz

$$s_a^2 = \frac{1}{N_a - 1}\sum_{i=1}^{N_a}(a_i - m_a) \tag{4.4}$$

der Werte ergibt:

$$95\ \%\text{-VB: } m_a \pm z\frac{s}{\sqrt{N_a}} \qquad \text{mit } z = 1.95996. \tag{4.5}$$

Der Wert z legt den Bereich $\pm z$ der Standardnormalverteilung fest, innerhalb dessen 95 % der Werte liegen, also

$$0.95 = \Phi(z) - \Phi(-z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{z}\exp(-x^2/2)dx - \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{-z}\exp(-x^2/2)dx \tag{4.6}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-z}^{z}\exp(-x^2/2)dx = 1 - \frac{2}{\sqrt{2\pi}}\int_{z}^{\infty}\exp(-x^2/2)dx. \tag{4.7}$$

Aufgrund der großen Zahl N_a der hier untersuchten Stichproben kann der Vertrauensbereich durch die Normalverteilung bestimmt werden. Andernfalls wäre z durch den Wert t der Student'schen t-Verteilung (mit $m = N_a - 1$ Freiheitsgraden) zu ersetzen innerhalb dessen 95 % der Werte dieser Verteilung liegen[3].

Wir setzen damit in diesem Abschnitt implizit die Annahme voraus, dass die atomaren Charakteristika als nahezu normalverteilt angesehen werden können. Das ist zumindest für einige der betrachteten Größen nicht gewährleistet (siehe Anhang D). Es sei hier betont, dass die Nutzung anderer Lokalisationsmaße (Maße, welche die mittlere Lage einer Verteilung

[3]Berechenbar ist dies über die Beziehung

$$0.95 = 1 - 2\frac{\Gamma(\frac{m+1}{2})}{\Gamma(\frac{m}{2})\sqrt{m\pi}}\int_{t}^{\infty}\left(1 + \frac{x^2}{m}\right)^{-\frac{m+1}{2}} dx,$$

mit m als Anzahl der Freiheitsgrade.

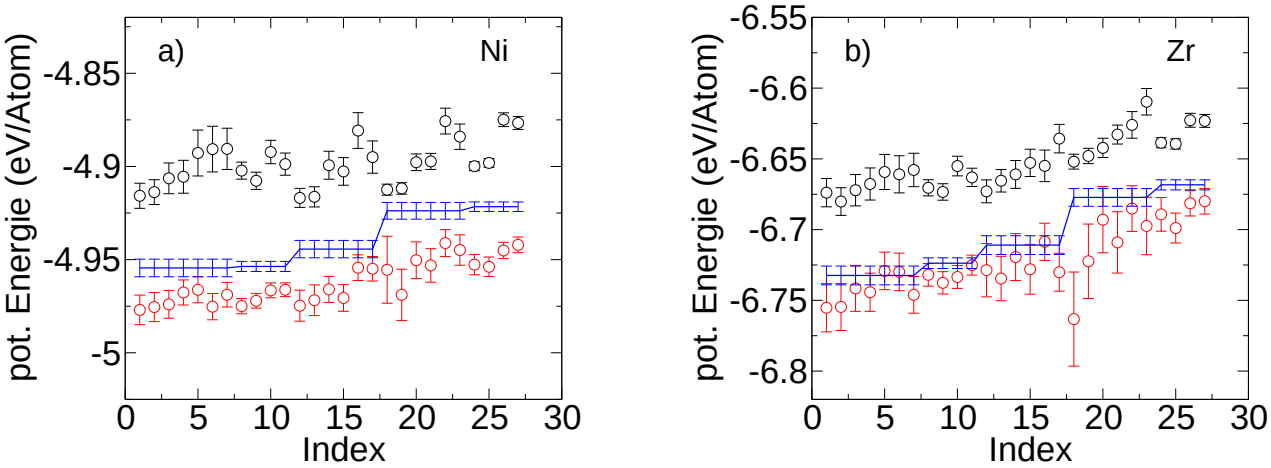

Abbildung 4.17: Daten der mittleren potenziellen Energien unterschiedlicher Atomgruppen nach Atomsorten getrennt: a) Ni, b) Zr. Dargestellt sind die Werte der Ausgangsproben (blau), der Atome aus Gruppe 1 (schwarz) und der Gruppe 2 (rot). Der Index entspricht der Nummer der betrachteten Simulation, deren Parameter in Tabelle E.1 zu finden sind.

charakterisieren), z. B. der Median, geeigneter ist zur Beurteilung der Lage[4]. Qualitative Unterschiede zu den hier aufgeführten Ergebnissen ergeben sich allerdings nicht.

Atomare potenzielle Energie

Abbildung 4.17 enthält eine Zusammenstellung der mittleren potenziellen Energien für eine Vielzahl von Simulationen des dyn. Scherversuchs nach Atomsorten getrennt. Der Index gibt die Nummer der betrachteten Simulation an, deren Parameter aus Tabelle E.1, Anhang E.1 zu entnehmen sind. Dargestellt ist die mittlere potenzielle Energie für die Ni- bzw. Zr-Atome der Ausgangskonfigurationen (blau). Diese wird im Fall der kleinen Systeme aus Mittelung der Werte der letzten zehn Konfigurationen des Relaxationslaufs erhalten (der letzten fünf bei den großen Systemen). Als schwarze Punkte werden die Mittelwerte der über ein Dehnungsfenster von 10 % bis 15 % Dehnung eines betrachteten Verformungslaufs (Tab. E.1) gemittelten atomaren Energien von Atomen der Gruppe 1 gezeigt, rote Punkte sind die Daten der Atome aus Gruppe 2. Für die hier gezeigten Daten ist $(\lambda_1, \lambda_2) = (3, 1)$ (vgl. auch Abschn. 4.3.2 und Anh. E.1), entsprechend sind die schwarzen Punkte Daten der Atome mit starken Änderungen der Topologie, die roten Datenpunkte stehen für Atome mit moderaten Änderungen in der Topologie.

Die Verläufe für die Ausgangsproben (blau) entsprechen sowohl für Ni als auch Zr den Erwartungen (Mittelwerte sind bereits in Abb. 3.6 b) auf Seite 33 eingezeichnet). Die Vertrauensbereiche sind bei den großen Systemen aufgrund der größeren Anzahl an Atomen schmaler

[4]Der Wilcoxon-Mann-Whitney-Test als nicht-parametrischer Signifikanztest testet im Übrigen auf Unterschiede in den Medianen.

(deutlich bei der blauen Kurve für Index 8 bis 11 der Simulationen bei 700 K und für Index 24 bis 27 der Simulationen bei 1000 K). Für Ni und Zr ist die mittlere potenzielle Energie der großen Ausgangsproben (Index 8 bis 11 für 700 K bzw. Index 24 bis 27 für 1000 K) etwas höher als die der kleinen Systeme.

Die mittlere potenzielle Energie im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen (Atome der Gruppe 1, $\lambda_1 = 3$, schwarze Kreise) liegt für alle Simulationen deutlich höher als der Wert der jeweiligen Ausgangsproben. Eine Erhöhung der Scherrate (vgl. Tab. E.1) führt zu einer Vergrößerung des Unterschieds (bei allen Temperaturen sichtbar), was unter anderem bei den ersten sieben Datenpunkten zu erkennen ist: Scherung bei 700 K mit $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns, Index 1 und 2, bei $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns, Index 2 und 3 und bei $\dot{\epsilon} = 10.0$ %/ns, Index 5 bis 7. Die Energie der Ni-Atome aus Gruppe 1 für eine feste Scherrate steigt geringfügig (falls überhaupt) mit der Temperatur an (Index 3 und 4 für 700 K, Index 14 und 15 für 810 K und Index 20 und 21 für 1000 K). Die Verformungsebene spielt für den Wert der mittleren Energie der Ni-Atome eine geringe Rolle. Die Werte sind jeweils (ob xy- oder zx-Verformung, vgl. Tab. E.1) innerhalb der Vertrauensbereiche vergleichbar (Index 1 und 2 für 700 K oder auch Index 16 und 17 für 810 K).

Für die Ni-Atome aus Gruppe 2 zeigt die mittlere potenzielle Energie (im Dehnungsfenster 10 % bis 15 %) ein anderes Verhalten ($\lambda_2 = 1$, rote Kreise). Die Werte liegen alle deutlich unterhalb der Werte für die jeweiligen Ausgangsproben. Vergleichbar mit den Werten der Ni-Atome von Gruppe 1, ist eine höhere Scherrate durch einen höheren Wert der mittleren potenziellen Energie gekennzeichnet. Auch bei den hohen Raten liegen die Energien der Ni-Atome mit moderaten Topologieänderungen noch unterhalb der Daten der Ausgangsproben. Eine Abhängigkeit von der Verformungsebene (xy bzw. zx) ist kaum ausgeprägt, wie schon bei den Daten der Gruppe 1. Die Abhängigkeit des Energieunterschieds (Ausgangsprobe zu Gruppe 2) von der Temperatur für eine feste Scherrate ist hier etwas stärker als bei den Daten der Gruppe 1 und spiegelt den Energieverlauf der Ausgangsproben wieder.

Die Zr-Atome mit massiven Toplogieänderungen (Abb. 4.17 b)) liegen in ihren mittleren Energien (Gruppe 1, $\lambda_1 = 3$, schwarze Kreise) weit über den Werten der jeweiligen Ausgangskonfigurationen (blau), wie bei den Ni-Atomen. Eine Scherratenerhöhung bewirkt tendenziell eine Vergrößerung des Unterschieds zwischen der Energie der Gruppe 1 und der der Ausgangskonfigurationen (blaue Kurve zu schwarzen Punkten). Im Rahmen der Ungenauigkeit der Daten ist auch für die Zr-Atome der Gruppe 1 keine Abhängigkeit von der Verformungsebene zu erkennen. Wie schon bei den Ni-Daten der Gruppe 1 nimmt der Unterschied zwischen der potenziellen Energie der Atome mit massiven Topologieänderungen und der der Ausgangskonfigurationen mit zunehmender Temperatur für eine feste Scherrate ab. Anders als bei den Ni-Daten liegen die potenziellen Energien für Zr-Atome aus Gruppe 1 für eine feste Scherrate für unterschiedliche Temperaturen deutlicher auseinander: Index 1 und 2 für 700 K und Index

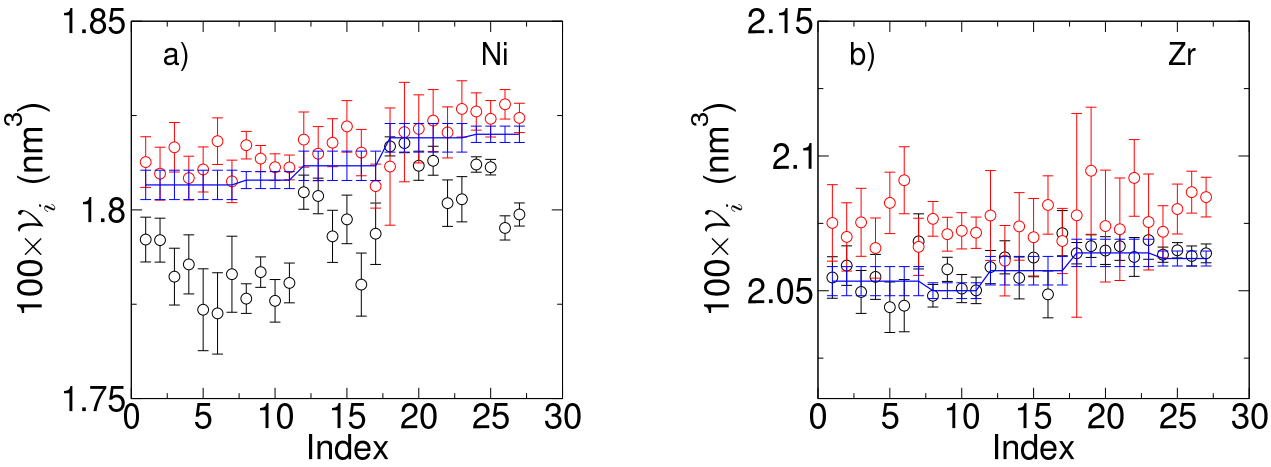

Abbildung 4.18: Daten des mittleren Käfigvolumens unterschiedlicher Atomgruppen nach Atomsorten getrennt: a) Ni, b) Zr. Dargestellt sind die Werte der Ausgangsproben (blau), der Atome aus Gruppe 1 (schwarz) und der Gruppe 2 (rot). Der Index entspricht der Nummer der betrachteten Simulation, deren Parameter in Tabelle E.1 zu finden sind.

18 und 19 für 1000 K liegen nahezu bei dem gleichen Wert, für Zr sind die Werte für 1000 K höher als die für 700 K.

Die potenzielle Energie für Zr-Atome der Gruppe 2 ($\lambda_2 = 1$, moderate Topologieänderungen, rote Kreise) liegt geringfügig unterhalb der Werte für die Ausgangsproben (blau), wenn die niedrigeren Scherraten berücksichtigt werden. Durch den Anstieg der potenziellen Energie mit zunehmender Rate (vgl. auch bei Ni) liegen die Werte für Verformungen bei 10.0 %/ns z. T. etwas oberhalb der Werte der Ausgangsproben (Index 5, 6 und 16) und teils sehr dicht darunter. Die Vertrauensbereiche von Gruppe 2 und den Ausgangsproben durchdringen sich für eine vielzahl der Simulationen stark, sodass nicht von signifikanten Unterschieden ausgegangen werden kann (entsprechende Signifikanztests müssten herangezogen werden, um dies zu bestätigen, sie sollen hier aber weggelassen werden).

Atomares Käfigvolumen

In Abbildung 4.18 ist die Zusammenstellung der Werte der mittleren Voronoizellenvolumina für die gleichen Simulationen gezeigt, wie im vorigen Abschnitt die potenzielle Energie (Simulationsparameter in Tab. E.1).

Die mittleren Käfigvolumina der Ausgangsproben (blau) zeigen für Ni und Zr den erwarteten Temperaturverlauf (vgl. auch Abb. 3.7 b) auf Seite 35), d. h. eine Zunahme mit steigender Temperatur. Die Fehler sind für die größeren Systeme geringer. In den Ausgangsproben der großen System ist das Ni-Käfigvolumen jeweils etwas größer als das der jeweiligen kleinen Systeme (Index 1 bis 7 und 8 bis 11 für 700 K bzw. Index 18 bis 23 und 24 bis 27 für 1000 K).

Beim Zr ist dagegen das Volumen der Atome der großen Systeme im Mittel kleiner als das der Atome der kleinen Systeme bei den entsprechenden Temperaturen.

Das mittlere Käfigvolumen im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen (Atome der Gruppe 1, $\lambda_1 = 3$, schwarze Kreise) liegt für alle Temperaturen niedriger als der Wert der jeweiligen Ausgangsproben, Ausnahmen sind die Werte der Scherungen mit $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns bei 1000 K (Index 18 und 19). Sie liegen sehr dicht bei den Werten der Ausgangsproben. Eine Erhöhung der Scherrate hat eine Verringerung des Käfigvolumens der Ni-Atome aus Gruppe 1 zur Folge. Der Unterschied zwischen den Werten für die Ausgangsproben (blau) und denen der Atome aus Gruppe 1 (schwarz) ist umso geringer, je höher die Temperatur ist (z. B. Index 1 und 2 für 700 K, Index 12 und 13 für 810 K und Index 18 und 19 für 1000 K). Eine Abhängigkeit von der Scherebene ist für die höheren Raten (nicht für $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns) bei 700 K und 810 K andeutungsweise erkennbar, mit größeren Unterschieden zwischen Ausgangsproben und Atomen aus Gruppe 1 für die xy-Scherung (beachte aber die überlappenden Vertrauensbereiche).

Ni-Atome aus Gruppe 2 ($\lambda_2 = 1$, moderate Topologieänderungen, rote Kreise) haben im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % jeweils leicht höhere Käfigvolumina als in den Ausgangsproben (blau), Ausnahme sind die Simulationen mit Index 17 und 18. Eine Abhängigkeit von der Scherrate ist kaum ausgeprägt und nur in wenigen Fällen liegen die jeweiligen Vertrauensbereiche so weit auseinander, dass ein deutlicher Unterschied in den Käfigvolumina zu erkennen ist (z. B. Index 3, 6, 8, 15 und 26).

Aus den Daten der Zr-Atome (Abb. 4.18 b)) ergibt sich im Vergleich zu den Daten für die Ni-Atome ein geringfügig anderes Bild. Die Zr-Atome der Gruppe 1 (massive Topologieänderung) liegen weitgehend (im Rahmen der Ungenauigkeit der Daten) bei den Werten der jeweiligen Ausgangsproben (blau), besonders bei den großen Proben und bei 1000 K. Für die 700 K-Daten ist als Trend eine Abhname des Zr-Käfigvolumens der Atome von Gruppe 1 mit zunehmender Rate erkennbar (Index 1 bis 6, Ausnahme Index 7), allerdings bleiben die Werte im Rahmen der Ungenauigkeit mit den Werten der Ausgangsproben vergleichbar. Zwei Simulationen, Index 7 und 17 (Scherung in zx-Ebene mit $\dot{\epsilon} = 10.0$ %/ns bei 700 K und bei 810 K), zeigen ein höheres Käfigvolumen.

Die Daten der Zr-Atome aus Gruppe 2 ($\lambda_2 = 1$, moderate Topologieänderung, rote Kreise) zeigen, etwas stärker als beim Ni, ein höheres Käfigvolumen als die jeweiligen Ausgangskonfigurationen (blau). Diese Erhöhung ist bei einem Großteil der Simulationen auch im Rahmen der Ungenauigkeit der Daten groß genug, um die beiden Gruppen (Atome der Ausgangsprobe und die der Gruppe 2) zu unterscheiden. Eine Scherratenabhängigkeit der Erhöhung des Käfigvolumens der Zr-Atome mit moderaten Topologieänderung gegenüber denen der Ausgangsproben ist nur schwach ausgeprägt. Unterschiede aufgrund einer verändertern Verformungsebene sind im Rahmen der Ungenauigkeit nicht vorhanden.

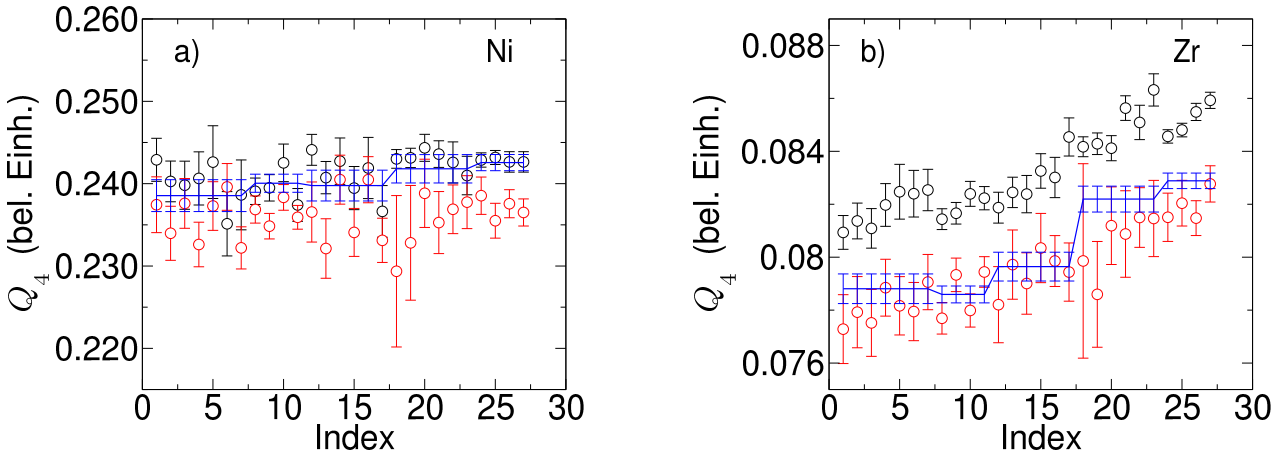

Abbildung 4.19: Daten der mitteren Q_4-Parameter unterschiedlicher Atomgruppen nach Atomsorten getrennt: a) Ni, b) Zr. Dargestellt sind die Werte der Ausgangsproben (blau), der Atome aus Gruppe 1 (schwarz) und der Gruppe 2 (rot). Der Index entspricht der Nummer der betrachteten Simulation, deren Parameter in Tabelle E.1 zu finden sind.

Ordnungsparameter

Die Abbildungen 4.19 bis 4.21 zeigen die gemittelten Q_l-Ordnungsparameter für die verschiedenen Simulationen (vgl. die Darstellung bei den potenziellen Energien).

Die mittleren Werte der Q_4-Parameter der Ausgangsproben (blau) entsprechen für Ni und Zr dem erwarteten Temperaturverlauf, wobei eine höhere Temperatur auch einen leicht höheren Wert ergibt. Der mittlere Q_4-Wert für Ni der großen Proben (Index 8 bis 11 für 700 K bzw. Index 24 bis 27 für 1000 K) ist höher als derjenige der zugehörigen kleinen Proben (Index 1 bis 7 für 700 K bzw. Index 18 bis 23 für 1000 K). In Abb. 4.19 a) etwas deutlicher erkennbar als in Abb. 3.8 b) (Seite 36) liegt der Wert für Q_4 der großen 700 K-Probe höher als der der kleinen 810 K-Probe (Index 12 bis 17). Beim Zr ist der Q_4-Wert der großen 700 K-Probe (Index 8 bis 11) nicht höher als der Wert des entsprechenden kleinen Systems (Index 1 bis 7), wie etwa bei 1000 K (Index 18 bis 23 zu Index 24 bis 27), sondern etwas niedriger.

Die mittleren Q_4-Werte im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen (schwarze Kreise) sind mit den Daten der Ausgangsproben (blau) vergleichbar. Für 700 K und 810 K gibt es Simulationen, bei denen die Q_4-Werte deutlich höher sind als die der Ausgangsproben (z. B. Index 1, 10, oder 12), aber auch niedriger (Index 6, 11 oder 17). Bei 1000 K (vor allem bei den großen Proben) ist der Unterschied gering. Eine Abhängigkeit von der Verformungsebene (xy bzw. zx, vgl. Tab. E.1) und auch der Scherrate ist im Rahmen der Streuung der Daten nicht erkennbar.

Die Werte für die Ni-Atome der Gruppe 2 (Atome mit moderaten Topologieänderungen, rote Kreise) haben im Mittel einen geringeren Wert für Q_4 im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % als die Ausgangsproben (blau). Ausnahme ist Simulation 6, welche eine andere Aus-

gangsprobe hat als die übrigen Simulationen. Dort ist der Q_4-Wert der Atome mit moderaten Topologieänderungen im Vergleich zur Ausgangsprobe größer. Die Daten zeigen eine sehr geringe Abhängigkeit von der Scherrate. Die Verformungen in der zx-Ebene zeigen, verglichen mit den Daten der xy-Verformung, für 700 K jeweils geringere Werte von Q_4 (Index 2,3 und 7 verglichen mit Index 1,3 und 5). Diese Abhängigkeit von der Ebene der Verformung ist auch für 810 K sichtbar, bei 1000 K ist sie nicht stark ausgeprägt (sowohl bei 700 K als auch bei 810 K beachte man die Fehlerbalken).

Die Q_4-Werte im Dehnungsbereich 10 K bis 15 % der Zr-Atome mit massiven Topologieänderungen (Atome der Gruppe 1, $\lambda_1 = 3$, schwarze Kreise) liegen für alle Simulationen höher als die der entprechenden Ausgangsproben (blau). Eine Erhöhung der Scherrate (vgl. Tab. E.1, Seite 168) führt zu einer Vergrößerung des Unterschieds (für alle drei Temperaturen und beide Systemgrößen). Die Abhängigkeit des Unterschieds ist durch die Wahl der Verformungsebene nicht beeinflusst. Der Unterschied ist für alle Temperaturen etwa gleich stark, sodass die gemittelten Q_4-Werte der Atome aus Gruppe 1 für eine feste Scherrate mit zunehmender Temperatur ansteigen und damit den Temperaturverlauf der Ausgangsproben spiegeln.

Für die Zr-Atome aus Gruppe 2 liegen die Q_4-Werte des Dehnungsbereichs 10 % bis 15 % für 700 K und 810 K teils unterhalb teils oberhalb, für 1000 K nur unterhalb der Werte der Ausgangsproben (blau). Die Q_4-Werte liegen etwas stärker unterhalb der Daten der Ausgangsproben, je geringer die Scherrate ist. Für 700 K und 810 K zeigt sich eine leichte Abhängigkeit von der Verformungsebene, wobei die xy-Scherung durch gerinfügig niedrigere Q_4-Parameter gekennzeichnet ist als die zx-Scherung: z. B. Index 12 und 13 bzw 14 und 15. Diese Abhängigkeit ist bei 700 K und 810 K bei den kleinen Systemen für geringere Raten (0.1 %/ns und 1.0 %/ns) ausgeprägter als für höhere. Das große 700 K-System zeigt die Abhängigkeit auch bei 10 %/ns, beim großen 1000 K-System liegt sie eher nur für diese Scherrate vor.

Die mittleren Q_5-Parameter der Ausgangsproben (Abb. 4.20, blau) entsprechen den für Ni und Zr bereits in Abb. 3.9 b), Seite 37 gezeigten Werten. Die Ni-Werte sind durch eine deutlich schwächer ausgeprägte Temperaturabhängigkeit gekennzeichnet als die Werte für Zr. Beim Ni ist Q_5 für das große System bei 700 K höher als für das entsprechende kleinere System, bei 1000 K ist der Wert des großen Systems kleiner als der der kleinen Systeme. Für Zr liegt der Wert von Q_5 für das große 700 K-System höher als der des kleinen, das große und kleine 1000 K-System hat praktisch den gleichen Wert.

Die mittleren Q_5-Parameter im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen (Gruppe 1, $\lambda_1 = 3$, schwarze Kreise) sind jeweils zu etwas geringeren Werten als die der Ausgangsproben verschoben. Der Unterschied nimmt mit zunehmender Scherrate zu. Eine Verformungsebenenabhängigkeit ist kaum ausgeprägt. Aufgrund der geringen Temperaturabhängigkeit des Q_5-Parameters, zeigen auch die Daten der jeweiligen Grup-

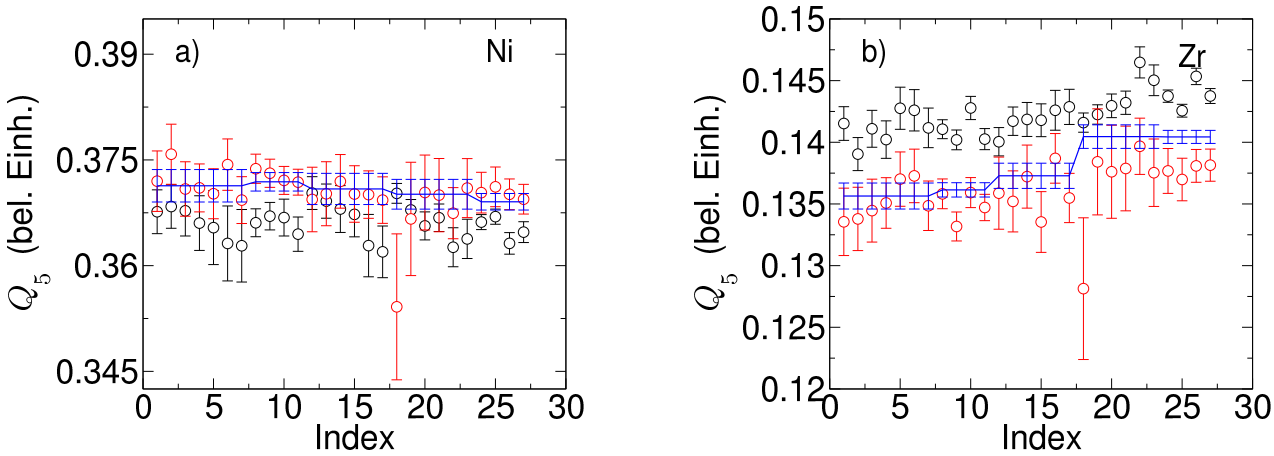

Abbildung 4.20: Daten der mitteren Q_5-Parameter unterschiedlicher Atomgruppen nach Atomsorten getrennt: a) Ni, b) Zr. Dargestellt sind die Werte der Ausgangsproben (blau), der Atome aus Gruppe 1 (schwarz) und der Gruppe 2 (rot). Der Index entspricht der Nummer der betrachteten Simulation, deren Parameter in Tabelle E.1 zu finden sind.

pen 1 eine geringe Temperaturabhängigkeit. Für 0.1 %/ns Scherrate liegen die Daten der Ni-Atome aus Gruppe 1 noch sehr nah an den entsprechenden Daten der Ausgangsproben: großer Überlapp der Vertrauensbereiche bei Index 1 und 2, kaum unterscheidbare Daten für Index 12 und 13 sowie Index 18 und 19.

Die Ni-Atome mit moderaten Topologieänderungen zeigen für den Dehnungsbereich 10 % bis 15 % eine geringe Änderung des Q_5-Parameters im Vergleich zu den jeweiligen Ausgangsproben (blau). Es liegen höhere als auch niedrigere Werte vor. Im Rahmen der Vertrauensbereiche sind die Q_5-Parameter der Ni-Atome aus Gruppe 2 mit denen der Ausgangsproben vergleichbar.

Die Werte der Q_5-Parameter der Zr-Atome aus Gruppe 1 liegen höher als die Werte der entsprechenden Ausgangsproben (blau). Eine schwach ausgeprägte Scherratenabhängigkeit liegt vor, mit größeren Unterschieden zwischen Ausgangsproben und Gruppe-1-Atomen mit zunehmender Scherrate. Eine stark ausgeprägte Abhängigkeit des Unterschieds bei variabler Verformungsrichtung ist nicht erkennbar, Ausnahme bilden die Daten des großen 1000 K-Systems. Der Trend einer Zunahme des Q_5-Werts mit zunehmender Temperatur der Ausgangsproben liegt auch in den Daten der Zr-Atome aus Gruppe 1 vor.

Verglichen mit den Q_5-Werten der Zr-Atome aus Gruppe 1 liegen die Werte der Atome aus Gruppe 2 (moderate Topologieänderungen, $\lambda_2 = 1$, rote Kreise) im Bereich der Werte der Ausgangsproben oder etwas darunter. Speziell treten beim großen 700 K-System (Index 9) und beim großen 1000 K-System (Index 25) Q_5-Werte deutlich unterhalb der Werte der Ausgangsproben auf, aber auch Simulationen mit Werten, die höher liegen als bei den Ausgangsproben (z. B. Index 5, 6 und 16). Bei 700 K und 810 K ist dies Folge einer leichten Scherratenabhän-

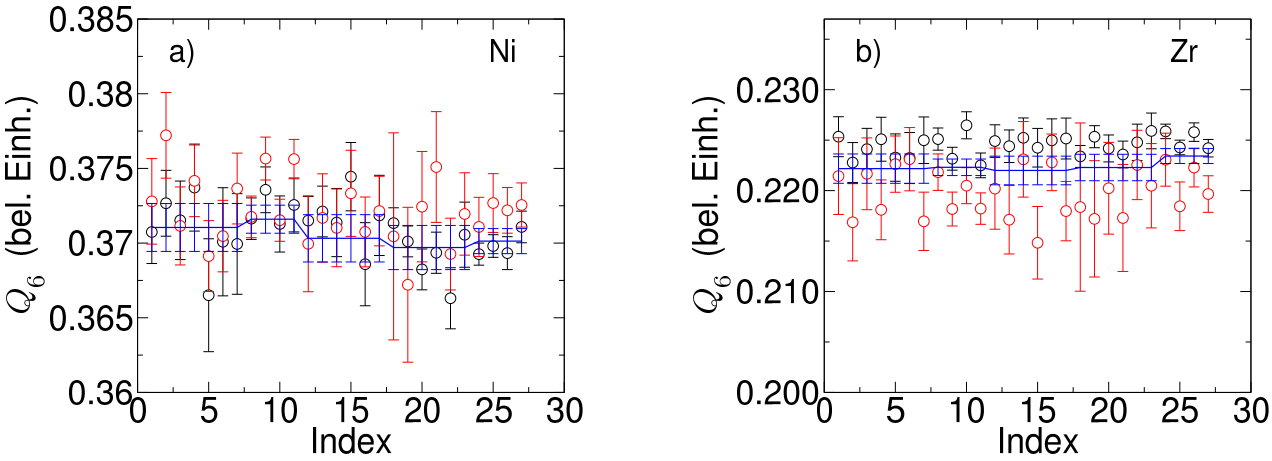

Abbildung 4.21: Daten der mitteren Q_6-Parameter unterschiedlicher Atomgruppen nach Atomsorten getrennt: a) Ni, b) Zr. Dargestellt sind die Werte der Ausgangsproben (blau), der Atome aus Gruppe 1 (schwarz) und der Gruppe 2 (rot). Der Index entspricht der Nummer der betrachteten Simulation, deren Parameter in Tabelle E.1 zu finden sind.

gigkeit, wonach Simulationen für zunehmende Scherraten wachsende Q_5-Werte zeigen. Für die Simulationen bei 1000 K ist diese Ratenabhängigkeit kaum erkennbar.

In Abb. 4.21 spiegeln die Verläufe für die Ausgangsproben (blau) die Temperaturabhängigkeit der Q_6-Parameter für Ni und Zr wider (vgl. auch Abb. 3.10 b) auf Seite 37). Während die Werte für Ni mit zunehmender Temperatur leicht fallen (die Daten der großen Proben sind jeweils höher als die der kleinen bei der gleichen Temperatur), liegen die Werte für Q_6 bei Zr für die unterschiedlichen Temperaturen nahezu auf gleicher Höhe. Der Temperaturverlauf aus Abb. 3.10 b) ist in der Auftragung aus Abb. 4.21 b) nicht gut wiedergegeben.

Die über den Dehnungsbereich 10 % bis 15 % gemittelten Q_6-Werte der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen (Atome der Gruppe 1, $\lambda_1 = 3$, schwarze Kreise) liegen teils unterhalb des Wertes der entsprechenden Ausgangsprobe (blau), teils oberhalb. Eine klar erkennbare Scherratenabhängigkeit liegt nicht vor. Die Verformungsebene (xy bzw. zx) spielt eine untergeordnete Rolle.

Im Vergleich zu den Daten der Ni-Atome von Gruppe 1 zeigen die Q_6-Werte der Ni-Atome aus Gruppe 2 (moderate Änderungen, $\lambda_2 = 1$, rote Kreise) einen ausgeprägten Trend zu höheren Werten als die der jeweiligen Ausgangsproben. Es treten aber auch Werte für die Ni-Atome aus Gruppe 2 auf, die unterhalb der Werte für die Ausgangsproben liegen (z. B. Index 5 oder Index 19), sie bilden aber eine Ausnahme. Auch für die Ni-Atome der Gruppe 2 ist die Abhängigkeit von der Scherrate kaum vorhanden und eine Abhängigkeit von der Verformungsebene nicht erkennbar.

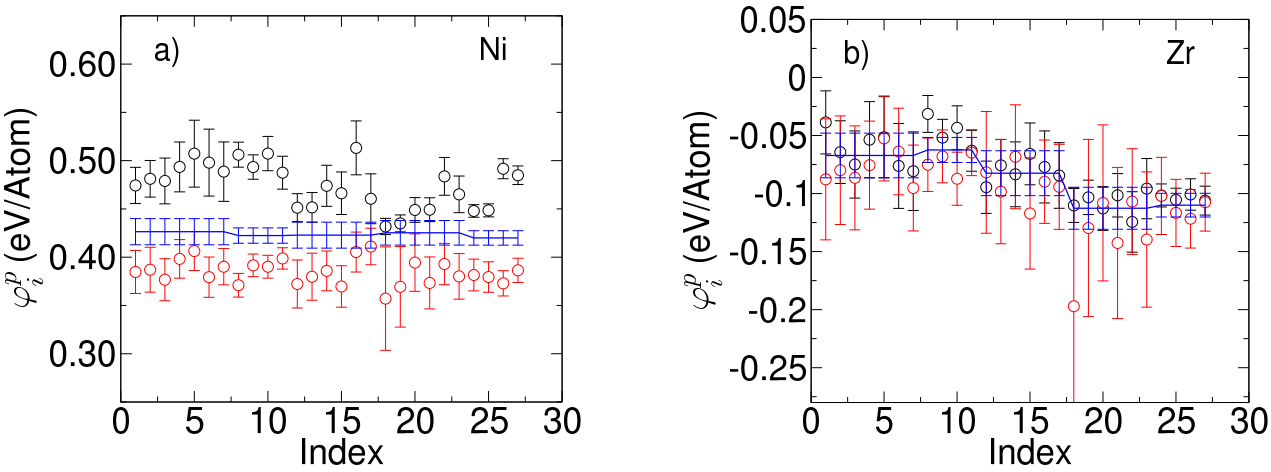

Abbildung 4.22: Daten der mitteren φ_i^p unterschiedlicher Atomgruppen nach Atomsorten getrennt: a) Ni, b) Zr. Dargestellt sind die Werte der Ausgangsproben (blau), der Atome aus Gruppe 1 (schwarz) und der Gruppe 2 (rot). Der Index entspricht der Nummer der betrachteten Simulation, deren Parameter in Tabelle E.1 zu finden sind.

Beim Zr (Abb. 4.21 b)) liegen die mittleren Q_6-Werte der Atome aus Gruppe 1 im Vergleich mit den Werten der Ausgangsproben (blau) geringfügig höher. Es finden sich auch Simulationen in denen die Werte mit denen der Ausgangsproben nahezu übereinstimmen (Index 2, 5, 6 und 11). Eine Scherratenabhängigkeit ist für keine der drei Temperaturen auszumachen. Änderungen der Verformungsebene wirken sich ebensowenig auf die Unterschiede zwischen den verschiedenen Gruppen (Gruppe 1 und Ausgangsproben) aus.

Für Zr-Atome aus Gruppe 2 liegen die im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % gemittelten Q_6-Werte unterhalb der Werte der jeweiligen Ausgangsproben. Auch hier gibt es für alle drei Temperaturen Ausnahmen. Für eine feste Temperatur liegt kaum eine Scherratenabhängigkeit vor. Weiter zeigt sich, dass Q_6-Werte für die xy-Verformungen teilweise näher bei den Daten der Ausgangsproben liegen als die Werte der in der zx-Ebene verformten Proben. Da die Verformungen als physikalisch gleichwertig anzusehen sind, spiegelt dies den Einfluss von Fluktuationen in der Ausgangsprobe wider.

Hydrostatische Spannungen

Abbildung 4.22 enthält die Zusammenstellung der gemittelten Werte für das Maß der hydrostatischen Spannungen φ_i^p (vgl. die Darstellung bei den potenziellen Energien).

Für Ni zeigen die Daten der Ausgangsproben (blau) keine starke Temperaturabhängigkeit (vgl. auch Abb. 3.11 b) auf Seite 39). Zr zeigt einen abnehmenden Wert von φ_i^p mit zunehmender Temperatur. Beim Ni liegen die Daten der großen Systeme (17500 Atome) geringfügig unterhalb der Werte der jeweiligen kleinen Systeme (5184 Atome), beim Zr dagegen sind die Werte der jeweils großen Syteme etwas höher als die der kleinen Syteme.

Die für den Dehnungsbereich 10 % bis 15 % gemittelten φ_i^p-Werte der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen (Gruppe 1, $\lambda_1 = 3$, schwarze Kreise) liegen für alle Simulationen deutlich oberhalb der Werte der entsprechenden Ausgangsproben (blau). Ausnahme bilden die Simulationen mit Index 18 und 19, die Verformungen mit $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns bei 1000 K. Für alle drei Temperaturen nimmt der Unterschied von φ_i^p zwischen den Ni-Atomen der Gruppe 1 und den Ausgangsproben mit zunehmender Scherrate zu (beim großen 700 K-System, Index 8 bis 11, nicht so stark ausgeprägt). Für die geringeren Scherraten ist der Unterschied zwischen Ausgangsprobe und Gruppe 1 für kleinere Temperaturen stärker als für höhere, bei einer Rate von $\dot{\epsilon} = 10.0$ %/ns stimmen die Werte von φ_i^p für die unterschiedlichen Temperaturen im Rahmen der Aussagegenauigkeit der Daten überein (Ausnahme Index 17 für 810 K).

Die Ni-Atome aus Gruppe 2 (moderate Topologieänderung, rote Kreise) haben im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % deutlich geringere mittlere φ_i^p-Werte im Vergleich zu ihren jeweiligen Ausgangsproben (blau) (Index 16 und 17 bei 810 K weniger deutlich). Für die kleinen Systeme bei 810 K und 1000 K und beim großen 700 K-System nimmt der Unterschied zu den Ausgangsproben mit zunehmender Rate geringfügig ab. Diese Abhängigkeit ist beim kleinen 700 K- und beim großen 1000 K-System nicht erkennbar. Eine Abhängigkeit von der Verformungsebene (xy oder zx, vgl. Tab. E.1) liegt bei allen drei Temperaturen nicht vor.

Die Zr-Atome mit massiven Topologieänderungen (Gruppe 1, $\lambda_1 = 3$, schwarze Kreise, Abb. 4.22 b)) liegen in ihren mittleren φ_i^p-Werten für alle drei Temperaturen kaum unterscheidbar mal geringfügig oberhalb, mal unterhalb der Werte der jeweiligen Ausgangsproben (blau). Simulationen mit Index 1, 8 und 10 liegen etwas stärker oberhalb der Daten der jeweiligen Ausgangsproben. Die Werte der Zr-Atome aus Gruppe 1 zeigen keine Scherraten- und keine Verformungsebenenabhängigkeit. Der Verlauf spiegelt den Temperaturverlauf der Ausgangsproben wieder.

Ähnlich wie die Zr-Atome aus Gruppe 1 zeigen die Zr-Atome mit moderaten Topologieänderungen ($\lambda_2 = 1$, rote Kreise) im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % sowohl leicht höhere als auch leicht geringere Werte für φ_i^p verglichen mit den Daten der Ausgangsproben. Weder eine deutliche Ratenabhängigkeit, noch eine Abhängigkeit von der Verformungsebene ist zu erkennen.

Von Mises Spannungen

Abbildung 4.23 stellt die Daten für das Maß der Scherspannungen, φ_i^τ, zusammen (vgl. Darstellung bei potenzieller Energie).

Die Daten der Ausgangsproben (blau) zeigen sowohl für Ni als auch für Zr den erwarteten Verlauf (vgl. auch Abb. 3.12 b) auf Seite 39). Danach nimmt der Wert für φ_i^τ für Ni und Zr mit steigender Temperatur zu. Die Werte für die großen Ausgangsproben (Index 8 bis 11 für

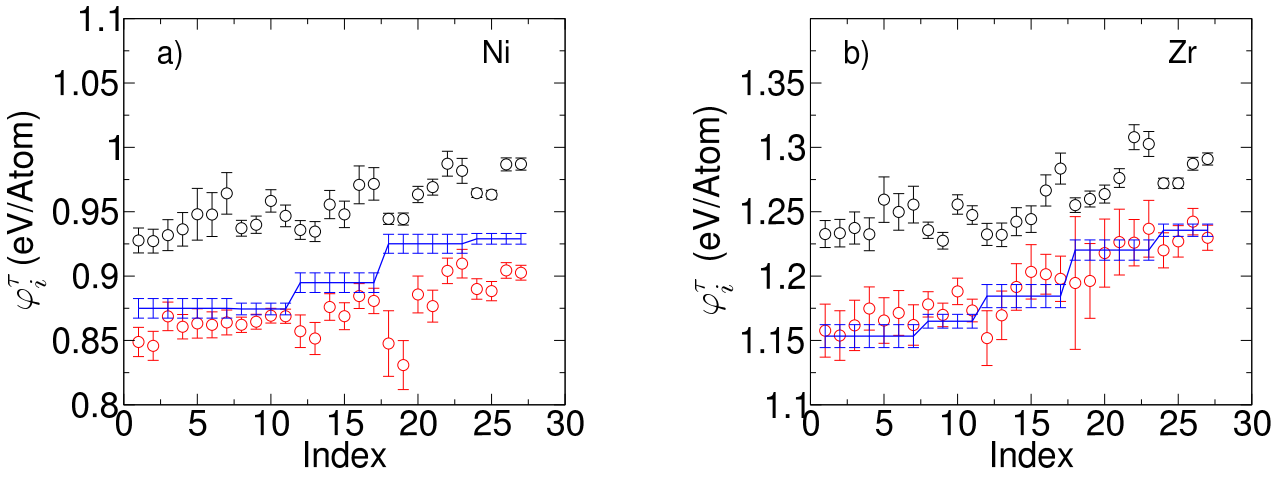

Abbildung 4.23: Daten der mitteren φ_i^τ unterschiedlicher Atomgruppen nach Atomsorten getrennt: a) Ni, b) Zr. Dargestellt sind die Werte der Ausgangsproben (blau), der Atome aus Gruppe 1 (schwarz) und der Gruppe 2 (rot). Der Index entspricht der Nummer der betrachteten Simulation, deren Parameter in Tabelle E.1 zu finden sind.

700 K, Index 24 bis 27 für 1000 K) liegen, außer für Ni bei 700 K, jeweils geringfügig höher als die der kleinen Proben. Für 700 K ist der Wert von φ_i^τ des großen Systems minimal kleiner als der Wert für die kleine Ausgangsprobe.

Der mittlere φ_i^τ-Wert im Dehnungsbereich 10 % bis 15 % der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen (Atome der Gruppe 1, $\lambda_1 = 3$, schwarze Kreise) liegt für alle Simulationen deutlich höher als der Wert der jeweiligen Ausgangsproben (blau). Eine Erhöhung der Scherrate bewirkt eine Vergrößerung des Unterschieds (bei allen Temperaturen sichtbar). Für eine feste Scherrate steigt der Wert für φ_i^τ mit steigender Temperatur schwach, sodass der Unterschied zur Ausgangsprobe mit zunehmender Temperatur bei einer festen Scherrate kleiner wird (z. B. Index 1 und 2 bei 700 K und Index 18 und 19 bei 1000 K). Die Ebene der Verformung spielt für den Wert φ_i^τ der Ni-Atome aus Gruppe 1 eine geringe Rolle.

Die Ni-Atome mit moderaten Topologieänderungen (Dehnungsfenster 10 % bis 15 %, rote Kreise) liegen überwiegend bei geringeren φ_i^τ-Werten als die Ausgangsproben (blau). Auch bei den Ni-Atomen aus Gruppe 2 nimmt der Wert mit zunehmender Scherrate zu, sodass der Unterschied zu den Ausgangsproben mit zunehmender Rate geringer wird (z. B. Index 1 und 2 bzw. 6 und 7 für 700 K oder Index 12 und 13 bzw. 16 und 17 für 810 K). Der Unterschied in den φ_i^τ-Werten zwischen Ni-Atomen mit moderaten Topologieänderungen und den Ausgangsproben ist bei fester Scherrate für höhere Temperaturen größer, sodass beispielsweise das kleine System bei 1000 K und $\dot{\epsilon} = 1.0$ %/ns einen deutlich geringeren Wert aufweist, verglichen mit der 1000 K-Ausgangsprobe, als dies für 700 K der Fall ist (Index 3, 4 für 700 K und Index 20, 21 für 1000 K). Die Verformungsebene hat kaum einen Einfluss auf die gefundenen Werte.

Bei den Zr-Atomen mit massiven Topologieänderungen (Abb. 4.23 b), schwarze Kreise) liegt φ_i^τ, wie schon beim Ni, deutlich höher als für die entsprechenden Ausgangsproben (blau). Für höhere Scherraten ist der Unterschied zwischen Atomen der Gruppe 2 und den Daten der Ausgangsproben größer (z. B. Index 1, 2 und 5, 6 oder Index 12, 13 und 16, 17). Ähnlich wie für Ni steigt der Wert von φ_i^τ für eine feste Scherrate leicht mit der Temperatur, sodass der Unterschied zu den Ausgangsproben mit zunehmender Temperatur für eine bestimmte Scherrate kleiner wird (deutlich beim Vergleich der Daten für 700 K und 810 K mit denen für 1000 K). Eine Abhängigkeit von der Wahl der Verformungsebene ist nicht erkennbar.

Die Zr-Atome der Gruppe 2 (moderate Topologieänderungen, rote Kreise) zeigen, im Gegensatz zu den Ni-Daten, eher gleiche bis geringfügig höhere Werte von φ_i^τ bei 700 K. Für 810 K und 1000 K liegen die φ_i^τ-Werte zum Teil unterhalb der Werte der Ausgangsproben (z. B. Index 12, 13 bzw. 18, 19) aber auch darüber (z. B. Index 15, 16 und 17). Grund dafür ist eine für 810 K und 1000 K deutlich erkennbare Scherratenabhängigkeit von φ_i^τ für die Zr-Atome aus Gruppe 2, mit größeren Werten bei höheren Scherraten. Es ist keine Abhängigkeit der Daten von der Ebene der Verformung (vgl. Tab. E.1, Seite 168) erkennbar.

Wendt-Abraham-Parameter

Abbildung 4.24 enthält eine Zusammenstellung von Daten des Wendt-Abraham-Parameters im Zr-Subsystem für eine Vielzahl von Simulationen. Zum einen werden die Werte von $R_{WA}(T)$, Gl. (3.12), für die Ausgangsproben (blau) gezeigt (siehe auch Abb. 3.4, Seite 31). Zum anderen wird der Wendt-Abraham-Parameter für verschiedene Atomgruppen berechnet[5]. Die schwarzen Punkte gehören zum Wendt-Abraham-Parameter der Gruppe 1 (vgl. Abschn. 4.3.2), also handelt es sich um Daten von Atomen mit massiven Topologieänderungen. Die roten Punkte entsprechen den berechneten Wendt-Abraham-Parametern der Atome mit moderaten Topologieänderungen. Die Werte werden berechnet aus den Atompositionen der Atome der betreffenden Gruppen für einen Bereich von 10 % bis 15 % Dehnung der Verformungssimulationen. Gruppe 1 erfüllt die Bedingung $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0) > 3$, Gruppe 2 dagegen $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0) < 1$ (vgl. auch Abschn. 4.3.2).

Der Verlauf des Wendt-Abraham-Parameters der Ausgangsproben (blau) entspricht den Erwartungen (vgl. Abb. 3.4, Seite 31)[6]. Danach steigt er mit zunehmender Temperatur an (Index 1 bis 7 für 700 K, Index 12 bis 17 für 700 K und Index 18 bis 27 bei 1000 K). Die Werte für die großen Systeme sind jeweils etwas höher als die Werte für die entsprechenden

[5] Dieser wird aus radialen Verteilungsfunktionen für Zr bestimmt, in denen ausschließlich solche Atompaare berücksichtigt werden, bei denen mindestens ein Atom zu der betreffenden Gruppe gehört.

[6] Die hier dargestellten Fehler resultieren aus Fehlern der Bestimmung von Maximum und Minimum der radialen Verteilungsfunktionen und sind in Abb. 3.4 nicht mit eingezeichnet.

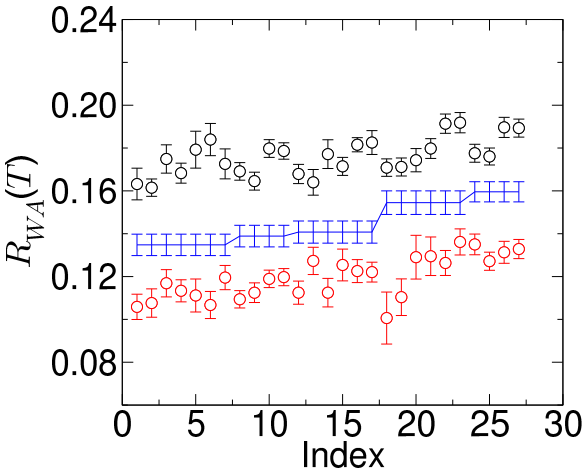

Abbildung 4.24: Wendt-Abraham-Parameter im Zr-Subsystem für unterschiedliche Atomgruppen. Dargestellt sind die Werte der Ausgangsproben (blau), der Atome aus Gruppe 1 (schwarz) und der Gruppe 2 (rot). Der Index entspricht der Nummer der betrachteten Simulation, deren Parameter in Tabelle E.1 zu finden sind.

kleinen Systeme (der Wert des großen 700 K-Systems bleibt kleiner als der Wert des kleinen 810 K-Systems).

Der Wendt-Abraham-Parameter im Dehnungsfenster 10 % bis 15 % für die Atome mit massiven Topologieänderungen (schwarze Kreise) liegt deutlich oberhalb von $R_{WA}(T)$ der jeweiligen Ausgangsproben (blau). Die Überhöhung über den Wert der jeweiligen Ausgangsproben nimmt mit zunehmender Dehnungsrate zu (z. B. Index 1 und 2 zu Index 5 bis 7 bei 700 K oder Index 18 und 19 zu Index 22 und 23 für 1000 K). Für eine feste Scherrate wird der Unterschied zwischen R_{WA} für Gruppe 1 und dem der Ausgangsproben mit steigender Temperatur kleiner. Der Einfluss der Verformungsebene auf die Werte von R_{WA} ist zu vernachlässigen.

Für die Atome aus Gruppe 2 (rote Kreise) liegt der Wendt-Abraham-Parameter (im Dehnungsfenter 10 % bis 15 %) deutlich unterhalb des Wertes der jeweiligen Ausgangsproben (blau). Eine Scherratenabhängigkeit ist schwach ausgeprägt, am deutlichsten beim kleinen 1000 K-System. Die Verformungsebene (xy oder zx, vgl. Tab. E.1, Seite 168) spielt wie bei den Atomen mit massiven Topologieänderungen keine bedeutende Rolle, auffällig hier einzig die Simulationen mit Index 12 und 13 bzw. 14 und 15 (jeweils xy und zx). Mit zunehmender Temperatur steigt R_{WA} für die Atome mit moderaten Topologieänderungen leicht an, sodass in etwa der Temperaturtrend wie für die Ausgangsproben (blau) vorliegt.

4.4. Verformungsverhalten vorverformter Proben

Dieser Unterabschnitt beinhaltet einige ausgewählte Simulationsergebnisse, die das Verformungsverhalten des Systems nach einer bereits erfolgten Vorverformung unter konstanter

Scherrate charakterisieren. Dabei wird zum einen eine Verformung unter vorgegebener äußerer Scherspannung simuliert, zum anderen wird beim dynamischen Scherversuch eine Umkehrung der Zug/Druck-Richtung vorgenommen.

4.4.1. Nachverformung mit konstanter äußerer Scherspannung

Der Hintergrund dieser Simulationen ist (vgl. [39, Abschnitt 3.1.1]), dass man trotz eines nahezu gleichen internen Spannungszustands in der Probe, gegeben durch den jeweiligen Wert im Verlauf der Spannungs-Dehnungs-Kurve, ein deutlich unterscheidbares Verhalten bei einer Kriechverformung, d. h. bei der Verformung unter vorgegebener äußerer konstanter Spannung [22], findet. In [39, 40] werden bereits Ergebnisse vergleichbarer Simulationen für die 5184-Atome-Probe bei 810 K und 1000 K dokumentiert. Hier seien deshalb nur die Phänomene bei 700 K gezeigt. Zusätzlich werden Simulationen des großen Systems mit 17500 Atomen in der Periodizitätszelle bei 700 K gezeigt, um die Unabhängigkeit von der Systemgröße zu demonstrieren.

Ausgangspunkt der hier dargestellten Simulationen sind zwei unterschiedlich stark vorverformte Konfigurationen, die während der Simulationen zum dynamischen Scherversuch gespeichert werden. Einerseits beträgt die Vorverformung nur wenige Prozent, entsprechend der Verformung in den linearen Bereich der Spannungs-Dehnungs-Kurve hinein, andererseits ist die Dehnung so groß, dass man sich hinter dem Spannungsmaximum, also im Fließzustand, befindet. Tabelle 4.4 listet die als Ausgangs- oder Referenzproben bezeichneten Konfigurationen mit einigen spezifischen Merkmalen der Vorverformung auf. Beispielsweise wird Referenz 2B im Scherversuch bei 700 K bis 13 % vorverformt, wobei eine Dehnung in z- und eine Stauchung in x-Richtung erfolgt. Die Nachverformung geschieht dann mit einer konstanten Spannung (vgl. Abschnitt 3.3.1) entsprechend einer Zugspannung in z- und einer Druckspannung in x-Richtung. Vergleichbares gilt beispielsweise für Referenz 5B, die bei 700 K bis 13 % in einer xy-Scherung gedehnt wird (mit geringerer Scherrate), um in einer Nachverformung durch eine Zugspannung in x- und eine Druckspannung in y-Richtung verformt zu werden. Andererseits wird Referenz 2B* im Scherversuch bei 700 K bis 13 % Dehung durch Zug in z und Druck in x-Richtung wie Referenz 2B vorverformt, dann aber durch Aufbringung entsprechender Spannung in einer Ebene senkrecht zur zx-Ebene nachverformt, und zwar in der xy-Ebene. In dieser Form sind die mit einem Stern markierten Referenzproben dadurch charakterisiert, dass ihre Nachverformung im virtuellen Kriechexperiment jeweils in einer zur Ebene der Vorverformung (in Tab. 4.4 angegeben) senkrechten Ebene durchgeführt wird. Eine solche Prozessführung ist in [39] nicht enthalten und wird hier beispielhaft für die tiefe

Tabelle 4.4: Daten der Referenzkonfigurationen, die einem virtuellen Kriechexperiment unterzogen werden. Angegeben ist der Name, die Temperatur, die Verformungebene, die Scherrate, die maximal erreichte Dehnung der Vorverformung, sowie die Spannung mit der die Proben im nachfolgende Kriechversuch verformt werden. Die mit einem Stern markierten Proben unterscheiden sich von denen ohne Stern dadurch, dass die Nachverformung in einer Ebene erfolgt, die senkrecht auf der Vorverformungsebenen steht (z. B. xy statt zx). Die Ausgangskonfigurationen sind sonst identisch.

Name	T (K)	N	Ebene	$\dot{\epsilon}$ (%/ns)	ϵ_{max} (%)	$\sigma(\epsilon_{max})$ (MPa)
1A	700	5184	xy	10.0	2	892
1B	700	5184	xy	10.0	13	929
2A	700	5184	zx	10.0	2	1018
2B	700	5184	zx	10.0	13	1039
2A*	700	5184	zx	10.0	2	1018
2B*	700	5184	zx	10.0	13	1039
3A	700	5184	xy	1.0	2	867
3B	700	5184	xy	1.0	13	955
5A	700	5184	xy	0.1	2	887
5B	700	5184	xy	0.1	13	837
6A	700	5184	zx	0.1	2	917
6B	700	5184	zx	0.1	13	925
6A*	700	5184	zx	0.1	2	917
6B*	700	5184	zx	0.1	13	925
7A	700	17500	xy	1.0	2	859
7B	700	17500	xy	1.0	13	895

Temperatur gezeigt. Die Verformungen des so durchgeführten virtuellen Kriechexperiments werden durch folgende Spannungstensoren beschrieben:

$$xy: \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} -\sigma_0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad zx: \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}. \tag{4.8}$$

In Abbildung 4.25 sind Kriechkurven der in Tabelle 4.4 aufgeführten Referenzkonfiguationen gezeigt. Die Simulationstemperatur ist für alle Kurven 700 K und die (von Mises-) Scherspannung ist für alle Simulationen gleich 913 MPa, mit Ausnahme der Simulation des großen Systems (Abb. 4.25 c)), wo sie 830 MPa beträgt. Wie bereits in [39] für 810 K und 1000 K gefunden, zeigt sich hier für alle Referenzprobenpaare (A,B), dass die jeweils aus dem linearen Bereich stammende — hier in allen Fällen bis 2 % vorverformte — Probe (A) nach nominell 50 ns Kriechverformung eine zu vernachlässigende Dehnung zeigt. Im Gegensatz dazu sind die Referenzproben aus dem Fließbereich (B) durch eine sehr viel leichtere Verformbar-

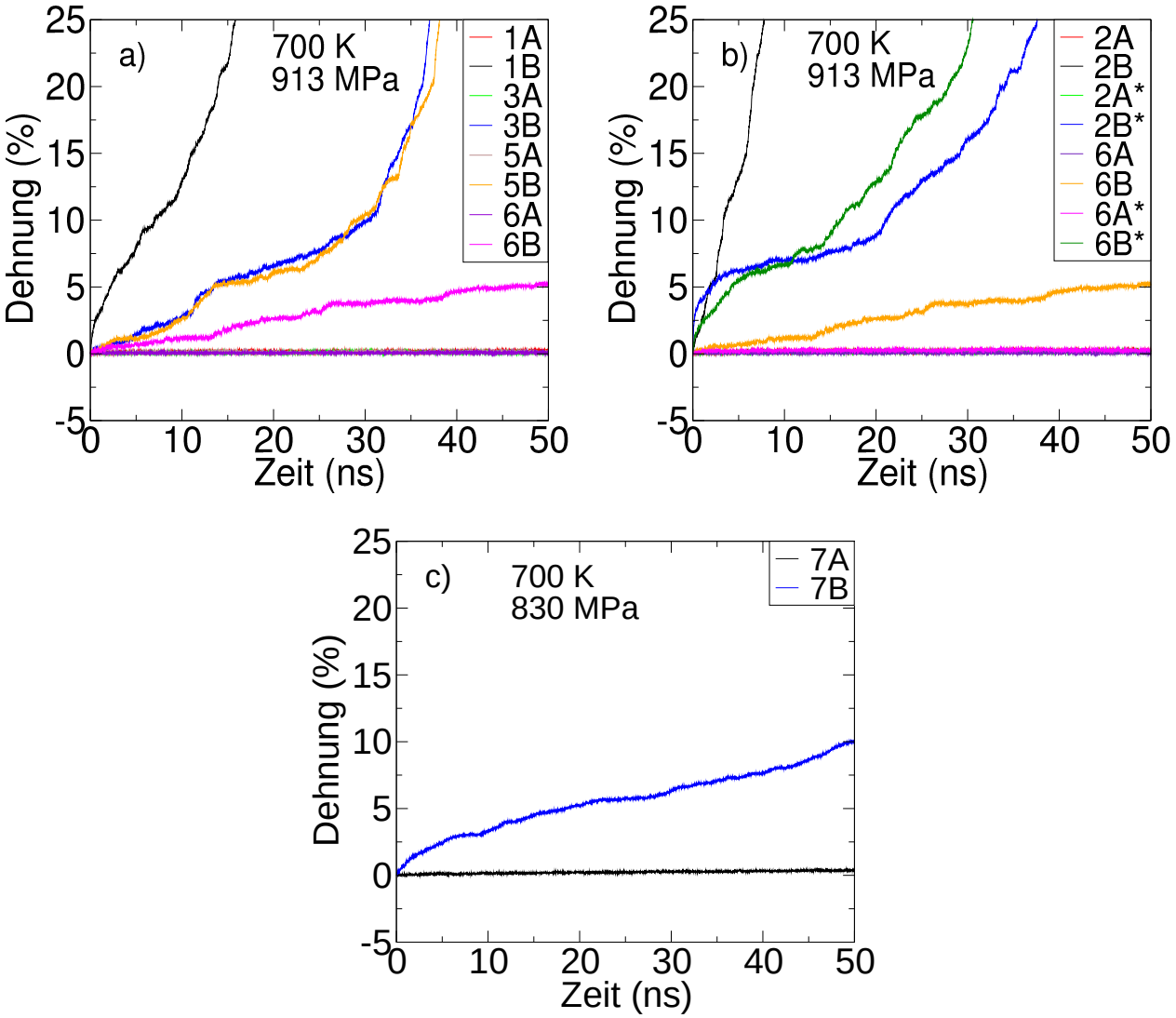

Abbildung 4.25: Ergebnisse simulierter Kriechexperimente unterschiedlich stark vorverformter Referenzproben nach Tabelle 4.4.

keit gekennzeichnet, was zu einer massiven Dehnung, teilweise nach wenigen Nanosekunden, führt.

Die Kriechkurven 1B, 3B und 6B der Abb. 4.25 a) zeigen, unter Berücksichtigung der Daten unterhalb 30 ns, eine unterschiedliche Kriechrate, die umso geringer ist, je geringer die im dynamischen Scherversuch der Vorverformung verwendetete Scherrate ist. Dass die Kriechrate nicht notwengigerweise mit der Scherrate der Vorverformung skalieren muss, bestätigt sich anhand der Referenzprobe 5B, die, vorverformt mit einer Rate von 0.1 %/ns, ein mit Probe 3B, vorverformt mit einer Rate von 1.0 %/ns, vergleichbares Kriechverhalten zeigt. Bei den Kriechkurven der Referenzproben 3B und 5B besonders deutlich erkennbar ist, dass die sich einstellenden Kriechraten mitunter sehr stark über den gesamten Verformungslauf variieren.

Beispielsweise sind die Kriechraten von 3B und 5B für Zeiten größer als 30 ns mit der Kriechraten von 1B zwischen 10 und 20 ns vergleichbar. Es sei noch angemerkt, dass die Kriechkurve mit der geringsten Steigung, Referenzprobe 6B, deren Vorverformung wie bei 5B mit 0.1 %/ns erfolgt ist, am Ende der 50 ns eine Verformung von etwa 5 % erfahren hat. Das entspricht einer mittleren Kriechrate von ungefähr 0.1 %/ns, und stimmt damit praktisch mit der Rate der Vorverformung überein.

Abbildung 4.25 b) vergleicht Kriechkurven von jeweils zwei Referenzkonfigurationen, wobei die Weiterverformung entweder in der gleichen Ebene wie bei der Vorverformung geführt wird (A,B), oder in einer zur Vorverformungsebenen senkrechten Ebene (A*,B*). Die Referenzproben aus dem linearen Bereich der Spannungs-Dehnungs-Kurven zeigen, unabhängig von der gewählten Nachverformungsebene, kaum eine merkliche Dehnung. Referenzproben aus dem Fließbereich sind durch extrem starke Verformungen gekennzeichnet. Die Kriechrate bei den Referenzproben, die in einer Ebene senkrecht zur der bei der Vorverformung verwendeten nachverformt werden (B*), sind zum Teil sehr stark zeitabhängig: Für kurze Zeiten (< 5 ns) liegt eine höhere Kriechrate vor als zwischen 5 und ≈ 20 ns. Im Bereich um etwa 20 ns beginnt die Kriechrate erneut zu steigen und liegt wieder bei einem Wert, der ähnlich hoch wie am Anfang ist. Vergleicht man die Kurven der Proben 2B* und 6B*, deren Nachverformung in einer Ebene senkrecht zur derjenigen der Vorverformung statt findet, mit denen der jeweils in der gleichen Verformungsebene nachverformten Referenzproben (2B bzw. 6B), sieht man, dass die Nachverformung in einer zur Vorverformungsebene senkrechten Ebene im Verlauf des virtuellen Kriechexperiments entweder zu geringeren Dehnungen (für $t > 5$ ns), 2B zu 2B*, oder zu stärkeren Dehnungen führen kann, 6B zu 6B*, als bei Weiterverformung ohne Scherebenenwechsel.

Die Kriechkurven der großen Probe, Abb. 4.25 c), bestätigen die Befunde für die kleinen Proben. Hat die stark vorverformte Probe 7B eine Verformung von etwa 10 % Dehnung nach nominell 50 ns Systemzeit erreicht, bleibt die Dehnung der schwach vorverformten Probe 7A unterhalb von 0.4 %.

4.4.2. Umkehrung der Verformungsrichtung und Änderung der Verformungsebene im dynamischen Scherversuch

Der Einfluss des Übergangs in den Fließzustand auf die Verformbarkeit unter konstanter Scherrate, d. h. vor allem der Einfluss auf die Spannungs-Dehnungs-Kurve im dynamischen Scherversuch, wird in diesem Abschnitt anhand von Verformungszyklen oder einer Änderung der Verformungsebene gezeigt.

Verformungszyklen

Ein Verformungzyklus bezeichnet hier den Prozess der Umkehrung der Verformung, also z. B. von xy nach $-xy$ (vgl. Abschnitt 3.3.2). Wir unterscheiden hier speziell ($\alpha\beta = xy$ bzw. zx):

Prozess 1: $\alpha\beta$-Scherung mit $\dot{\epsilon}_c$ für Zeit $t_{\alpha\beta}$, dann $-\alpha\beta$-Scherung ($\dot{\epsilon}_c$) für $2 \cdot t_{\alpha\beta}$, dann wieder $\alpha\beta$-Scherung ($\dot{\epsilon}_c$) für $2 \cdot t_{\alpha\beta}$.

Prozess 2: $\alpha\beta$-Scherung mit $\dot{\epsilon}_c$ für Zeit $t_{\alpha\beta}$, dann $-\alpha\beta$-Scherung ($\dot{\epsilon}_c$) für eine Zeit $t_{\epsilon=0}$, bei der die Spannung auf etwa Null zurückgegangen ist, dann $\alpha\beta$-Scherung (möglichweise andere Scherrate) für eine Zeit t.

Abbildung 4.26 a) zeigt einen Zyklus nach Prozess 1 für ein kleines System (5184 Atome) bei 700 K, wobei hier $\alpha\beta = zx$ und $\dot{\epsilon}_c = 10$ %/ns gilt. Abb. 4.26 b) zeigt einen entsprechenden Zyklus (Prozess 1) für ein großes System (17500 Atome) bei 1000 K, mit $\alpha\beta = xy$ und $\dot{\epsilon}_c = 10$ %/ns. Der Prozess 2 für ein kleines System bei 700 K mit $\alpha\beta = zx$ ist in Abb. 4.26 c) dargstellt. Die Zeit t_{zx} ist so gewählt, dass die Vorverformung etwa bis zur unteren Streckgrenze (vgl. Abb. 4.1) geht. Die erneute zx-Verformung wird mit $\dot{\epsilon}_c = 1$ %/ns und 10 %/ns durchgeführt.

Die in Abb. 4.26 a) und b) gezeigten Verformungszyklen zeigen für den ersten Teil von 0 bis 15 % Dehnung das bereits in Abschnitt 4.2 dargestellte Verhalten, unter anderem mit dem deutlich ausgeprägten Streckgrenzenbereich, mit einem größeren Wert für das Spannungsmaximum bei der geringeren Temperatur, gefolgt von einer starken Dehnungserweichung. Die Verformung nach Umkehrung von Zug- und Druckrichtung zeigt dann den erheblichen Anteil an plastischer Verformung, der sich als Schnittpunkt der Kurve bei Spannung Null zu knapp 12 % bei 700 und etwa 13 % bei 1000 K ergibt. Auffälligerweise fehlt die Streckgrenze bei der Verformung in entgegengesetzter Richtung und die Spannungs-Dehnungs-Kurve zeigt nach anfänglichem Anstieg eine wenig variierende (negative) Fließspannung, wie sie für den Fließzustand charakteristisch ist. Die folgende erneute Umkehrung der Verformung führt zu einem vergleichbaren Verlauf wie die erste Umkehrung, und die Spannungs-Dehnungs-Kurve fügt sich nach einem Zyklus an den Bereich nach der starken Dehnungserweichung am Ende des ersten Teils des Zyklus nahtlos an.

Abbildung 4.26 c) bestätigt das qualitative Verhalten, welches durch Prozess 1 gefunden wird, anhand von Simulationen zum Prozess 2. Gezeigt wird eine zx-Scherung bis etwa 10 % Dehnung, also bis knapp hinter die Streckgrenze, deren Rückverformung bis auf Spannung Null (plastische Verformung ungefähr 6.5 %), und anschließende erneute zx-Scherungen mit 1 %/ns und 10 %/ns. Bei den erneuten zx-Scherungen weist die Verformungskurve nicht mehr die für die Scherung der unverformten Probe charakteristische Form auf: Bei beiden Scherraten

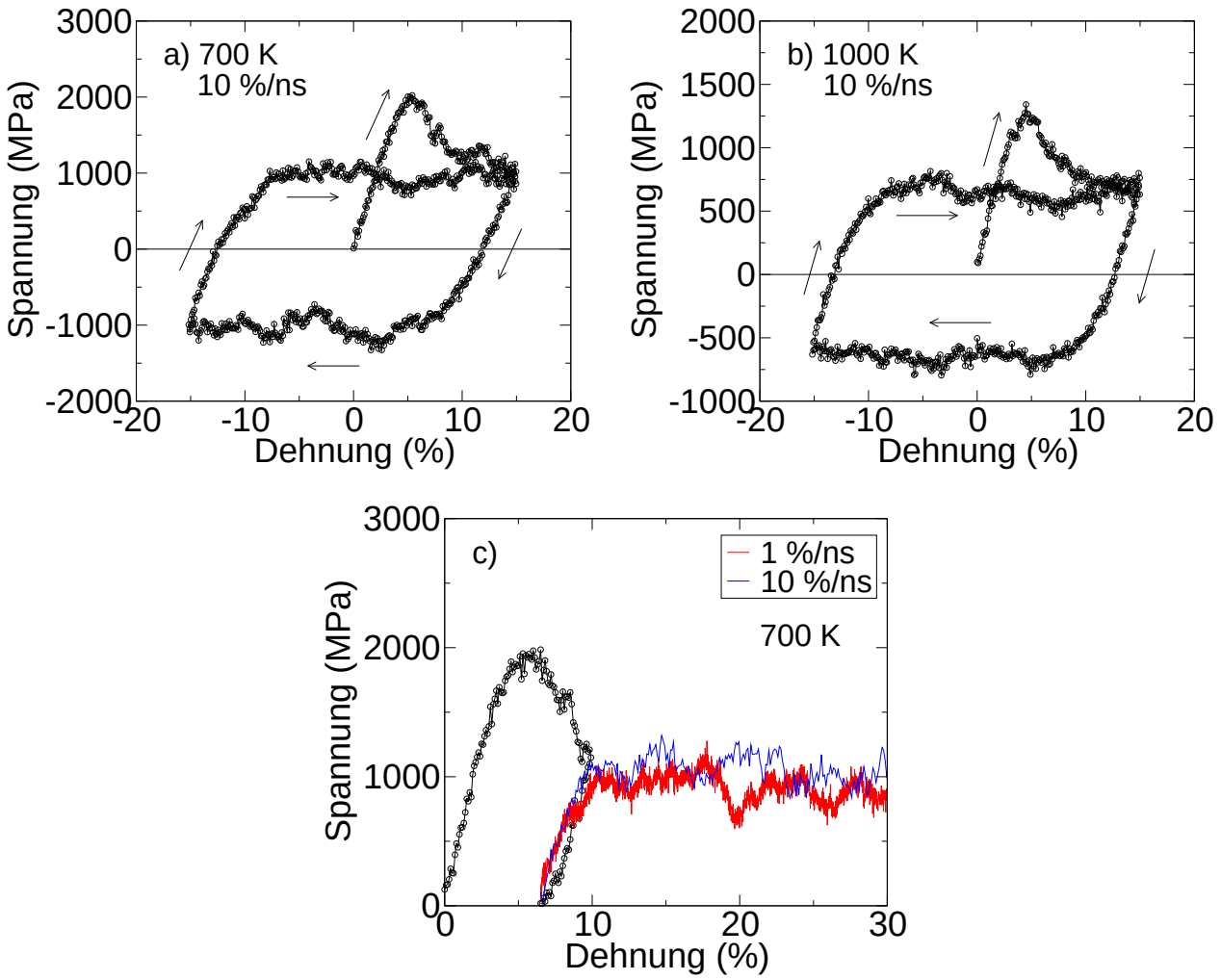

Abbildung 4.26: Verformungszyklen nach Prozess 1 für a) zx-Scherung mit 10 %/ns bei 700 K b) xy-Scherung mit 10 %/ns bei 1000 K. c) Prozess 2 für eine zx-Scherung mit 10 %/ns bei 700 K und erneute Scherung für Raten 1 %/ns und 10 %/ns.

geht der Kurvenverlauf ohne Überschießen der Spannung in den Fließzustand mit schwach veränderlicher Fließpannung über.

Änderung der Ebene der Verformung

Die Änderung der Verformungsebene während der Verformung im dynamischen Scherversuch wird durch folgenden Prozess beschrieben ($\alpha\beta = xy$ bzw. zx, $\gamma\delta = xy$ bzw. zx aber $\alpha\beta \neq \gamma\delta$):

Prozess 3: $\alpha\beta$-Scherung mit $\dot{\epsilon}_c$ für Zeit $t_{\alpha\beta}$, dann $\gamma\delta$-Scherung mit $\dot{\epsilon}_c$ für eine Zeit $t_{\gamma\delta}$, wobei gilt: $\alpha\beta \neq \gamma\delta$.

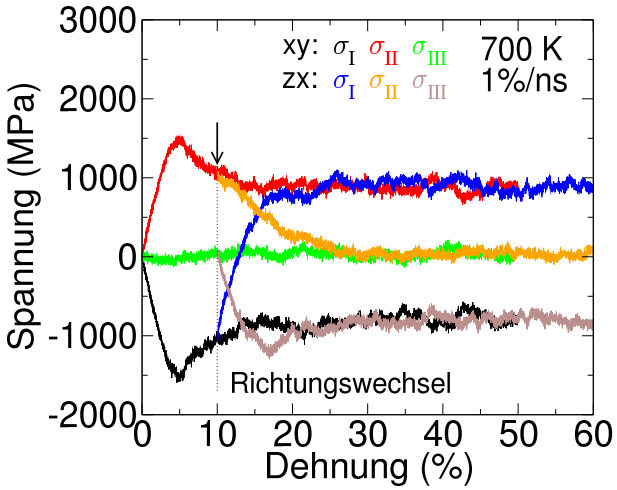

Abbildung 4.27: Ergebnisse der Simulation zu Prozess 3 für ein großes System bei 700 K. Dargestellt sind die Hauptspannungen der Vorverformung (schwarz, rot, grün) und der Verformung nach dem Richtungswechsel (blau, orange, braun).

Beispielhaft demonstriert Abbildung 4.27 den Prozess 3 für ein großes System (17500 Atome) bei 700 K, wobei hier $\alpha\beta = xy$, $\gamma\delta = zx$ und $\dot{\epsilon}_c = 1$ %/ns gilt. Im Gegensatz zur Darstellung der von Mises-Scherintensität sind die Hauptspannungen entsprechend den Spannungen in den Koordinatenrichtungen (vgl. Abschnitt 3.6.1) abgebildet, um die Scherebenenänderung deutlicher herauszustellen. Der Pfeil in Abb. 4.27 markiert den Zeitpunkt respektive die Dehnung, bei der die Änderung erfolgt. Neben den farblich anders gezeichneten Kurven, die den Verlauf der zx-Scherung zeigen, ist der Verlauf der Spannungen der xy-Scherung zu sehen, der ohne eine Änderung der Scherebene auftritt.

Die Änderung der Zug- und Druckrichtungen führt dazu, dass die Spannung in der y-Richtung gleichmäßig auf den Wert Null abfällt. Durch die Änderung der Verformung in x-Richtung von Strecken nach Stauchen geht die Spannung in x-Richtung von negativen zu positiven Werten. Dieser Verlauf ist ähnlich wie bei den Verformungszyklen, insbesondere fehlt ihm die Ausbildung einer (oberen) Streckgrenze. Im Gegensatz dazu zeigt die zunächst nicht gedehnte z-Richtung ein leichtes Spannungsüberschießen, das verglichen mit den Verläufen für σ_{I} und σ_{II} der xy-Scherung wesentlich schwächer ausgeprägt ist.

4.4.3. Einfluss der Topologieänderung auf nachfolgende Umlagerungen

Mit Hilfe der Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ kann für jedes Atom bestimmt werden, welche Anzahl der zur Zeit t vorhandenen nächsten Zr-Nachbarn im Zeitfenster $[t, t+\tau]$ verloren gehen. Abbildungen der Atome, deren Wert für $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ einen kritischen Wert λ_v überschreitet, werden in Abschnitt 4.3.1 gezeigt. Besonders für die geringeren Temperaturen und die hohen Scherraten ist dort eine deutliche räumliche Lokalisierung der Topologieänderungen zu sehen.

In diesem Abschnitt wird die Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ verwendet, um zu analysieren, inwiefern nachfolgende massive Topologieänderungen in Bereichen auftreten, die bereits durch starke Topologieänderungen gekennzeichnet sind. Zum einen soll dies rein qualitativ mit Hilfe von Darstellungen ähnlich wie in Abschnitt 4.3.1 geschehen, zum anderen anhand einer quantitativen Analyse. Besonderes Augenmerk wird dabei auf die Änderung des Verformungsverhaltens von vorverformten Konfigurationen gelegt, wie sie in den vorigen Abschnitten gezeigt werden. Unter anderem können die Analysen hilfreich sein, um mögliche Ursachen für das Verschwinden der ausgeprägten Streckgrenze oder die verglichen mit schwach verformten Konfigurationen stark erhöhte Kriechrate der bis in den Fließbereich hinein verformten Referenzkonfigurationen zu finden.

Qualitative Darstellung

Wie bereits angedeutet, werden hier jeweils zwei Simulationszellen gegenübergestellt. Die Simulationszellen enthalten dabei nur die Atome, die eine bestimmte Bedingung für $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\tau, t)$ erfüllen (vgl. auch Abschn. 4.3.1). Dazu werden zwei Zeitfenster $Z_1 = [t_{i_1}, t_{f_1}]$, $Z_2 = [t_{i_2}, t_{f_2}]$ eines bestimmten Simulationslaufs oder zweier aufeianderfolgender Simulationen definiert. Für beide Zeitfenster wird für jedes Atom die Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_k) \equiv \lambda_i^{\mathrm{Zr}}(t_{f_k} - t_{i_k}, t_{i_k}),\ k = 1, 2$ berechnet. Ist diese größer als ein festgelegter Wert λ_v, werden die Atome abgebildet. Auf folgende Simulationen wird eingegangen:

1. Zyklen im dynamischen Scherversuch (vgl. Prozess 1, Abschn. 4.4.2): Zeitfenster 1 umfasst einen Bereich von 0 bis 15 % Dehnung. Zeitfenter 2 wird so gewählt, dass es den Bereich des Zyklus enthält, bei dem die Verformung in der entgegengesetzten Richtung von 0 MPa Spannung bis zu einer Dehnung von ca. −5 % geht. Speziell werden die zwei Simulationen der Abbildung 4.26 a) und b) verwendet.

2. Weiterverformung mit konstanter Scherrate (vgl. Prozess 2, Abschn. 4.4.2): Zeitfenster 1 umfasst den Bereich von 0 bis 10 % Dehnung, das ist bis kurz vor die Rückscherung. Zeitfenster 2 wird so gewählt, dass es den Bereich von 0 MPa bis zu einer zusätzlichen Dehnung von etwa 10 % einschließt (vgl. Abb. 4.26 c)).

3. Umkehrung der Zug-/Druckrichtung (vgl. Prozess 3, Abschn. 4.4.2): Zeitfenster 1 umfasst den Bereich der Verformung in der ersten Zug-/Druckrichtung von 0 bis 10 % Dehnung (vgl. Abb. 4.27). Zeitfenster 2 dann den Bereich von 10 bis 20 % Dehnung.

4. Weiterverformung mit konstanter Spannung (vgl. Abschn. 4.4.1): Es werden Kriechkurven der Ausgangskonfigurationen aus dem Fließbereich genommen (die mit B bezeichneten Proben, vgl. Tab. 4.4). Zeitfenster 1 umfasst den Bereich der Vorverformung von

0 bis ϵ_{max} (Tab. 4.4) des dynamischen Scherversuchs (Scherrate konstant). Zeitfenster 2 umfasst einen Bereich der Kriechkurve (Spannung konstant) in der die Dehnung von 0 auf etwa 5 % angestiegen ist.

Zu 1) Die Darstellungen in diesem Abschnitt stammen aus den in Abb. 4.26 a) und b) auf Seite 105 dargestellten Spannungs-Dehungs-Zyklen. Abbildung 4.28 zeigt für jeweils zwei Simulationen eine Gegenüberstellung zweier Konfigurationen entsprechend der gewählten Zeitfenster (siehe Bildunterschrift), bei denen die Atome abgebildet werden, die mehr als vier ihrer Zr-Nachbarn verloren haben.

Für den ersten Teil des Verformungszyklus bei 700 K (Zelle oben links in Abb. 4.28) wird ein Band massiver Topologieänderungen entlang einer Diagonalebene erkennbar. Dieser Bereich entspricht dem, der bereits für die in Abschnitt 4.3.1 gezeigten Spannungs-Dehnungs-Kurven (ausgeprägte Streckgrenze, Übergang in Fließzustand) gefunden wird und ist mit diesen im Wesentlichen identisch. Die Verformung in die entgegengesetzte Richtung (Darstellung der Zelle in Abb. 4.28 oben rechts) ist durch massive Topologieänderung entlang der selben Diagonalebene gekennzeichnet.

Beim Verformungszyklus für 1000 K (Abb. 4.28, unten links) liegen die Atome mit massiven Topologieänderungen für den ersten Teil trotz geringerer Lokalisation aufgrund der starken thermischen Fluktuationen gut erkennbar entlang einer Diagonalebene der Simulationszelle. Auch im zweiten Teil des Verformungszyklus (Abb. 4.28, unten rechts) bleibt ein Verformungsband entlang der im ersten Teil des Zyklus ausgebildeten Diagonale erkennbar. Im Vergleich zum ersten Teil der Verformung ist der Bereich von Atomen mit massiven Topologieänderungen im zweiten Teil deutlich breiter: Die in Abb. 4.28 unten links noch gut zu erkennenden Zwischenräume der Simulationszelle (Bereich neben dem Verformungsband), erscheinen im Bild unten rechts stärker mit Atomen gefüllt zu sein.

Zu 2) Die in Abbildung 4.29 dargestellten Simulationszellen stammen von den Simulationen, deren Spannungs-Dehnungs-Kurven in Abb. 4.26 c) auf Seite 105 zu sehen sind. Die Simulationszelle links in Abb. 4.29 zeigt, wie aus Abschnitt 4.3.1 für die geringen Temperaturen bekannt, eine Ausbildung einer Zone mit massiven Topologieänderungen entlang einer Diagonalebene. Nach Rückscherung und erneuter Verformung mit konstanter Rate verläuft der Bereich mit massiven Topologieänderungen erneut entlang der bereits für die vorhergehende Verformung ausgebildeten Diagonale. Für $\dot{\epsilon} = 10$ %/ns (Abb. 4.29 Mitte) ist der Bereich der Zelle mit Atomen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_2) > 4$ geringfügig verbreitert gegenüber dem für die Erstverformung ausgebildeten. Bei der Scherung mit $\dot{\epsilon} = 1$ %/ns ist verglichen zur Nachverformung mit der höheren Rate eine noch stärker ausgeprägte Verbreiterung vorhanden.

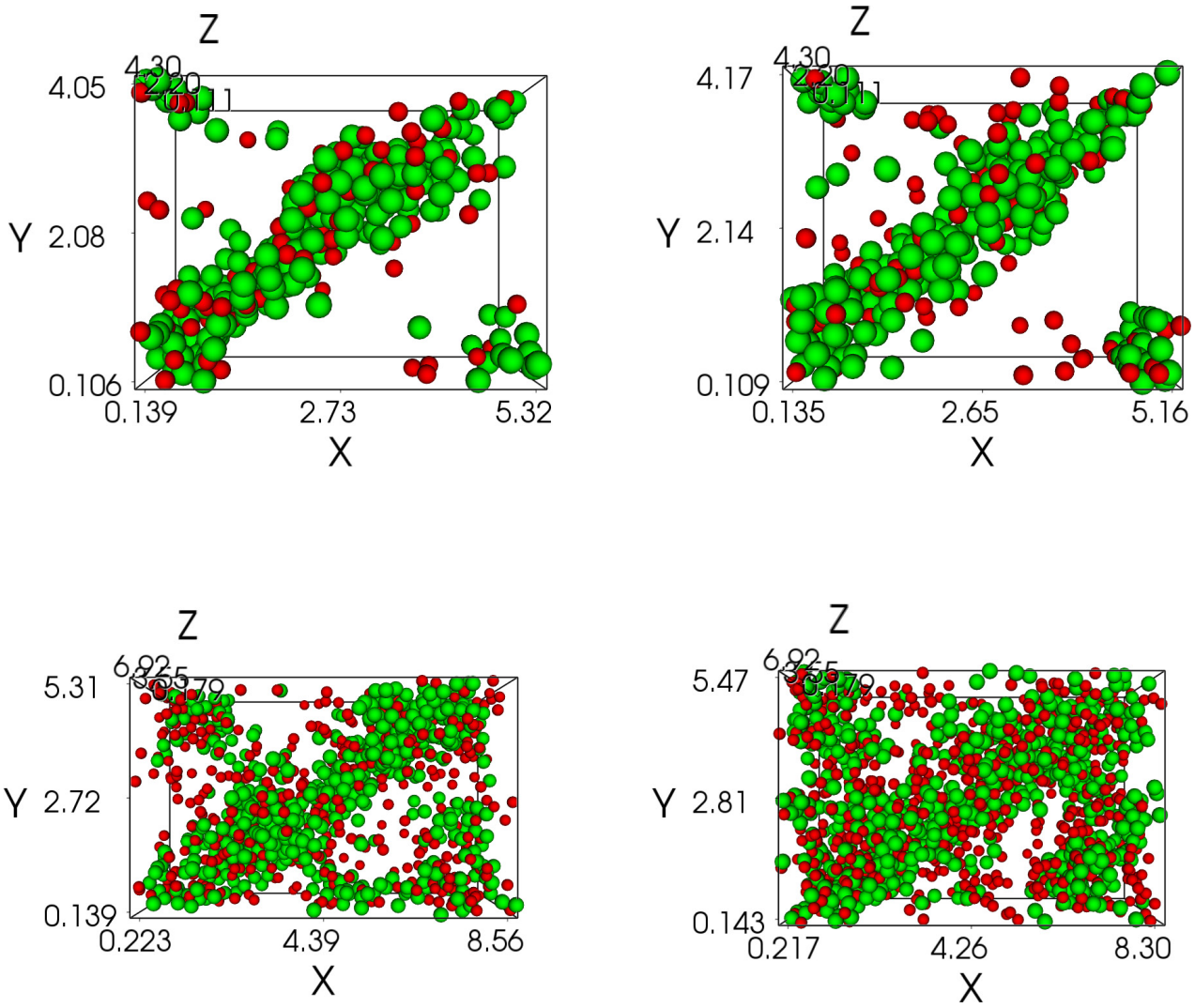

Abbildung 4.28: Oben: Verformungszyklus eines kleinen Systems mit $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\text{ns}$ bei 700 K. Für Zeitfenster 1 ist $t_{i_1} = 0$ ns und $t_{f_1} = 1.5$ ns, für Zeitfenster 2 ist $t_{i_2} = 1.8$ ns und $t_{f_2} = 3.3$ ns. Dargestellt ist Konfiguration t_{f_1} (links) und Konfiguration t_{i_2} (rechts). Unten: Verformungszyklus für das große System mit $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\text{ns}$ bei 1000 K. Zeitfenster 1 liegt zwischen $t_{i_1} = 0$ ns und $t_{f_1} = 1.5$ ns, für Zeitfenster 2 ist $t_{i_2} = 1.8$ ns und $t_{f_2} = 3.3$ ns. Dargestellt ist Konfiguration t_{f_1} (links) und Konfiguration t_{i_2} (rechts). Sowohl für 700 K als auch für 1000 K werden die Atome abgebildet, für die $\lambda_i^{\text{Zr}}(Z_k) > 4$, $k = 1, 2$.

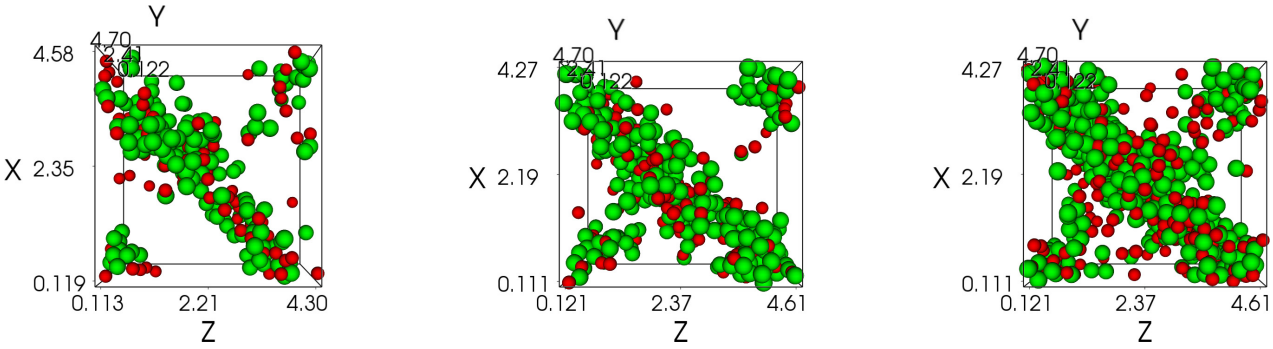

Abbildung 4.29: Links: Verformung eines kleinen Systems mit $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\text{ns}$ bei 700 K von 0 % bis 10 % Dehnung (definiert Zeitfenster 1). Dargestellt sind die Atome der Konfiguarion 0 (also zur Zeit 0 bzw. zur Dehnung 0 %), für die $\lambda_i^{\text{Zr}}(Z_1) > 4$ ist. Mitte und Rechts: Nachverformung der zunächst auf 0 MPa zurückgescherten kleinen 700 K-Probe bis 10 % Dehnung in die selbe Richtung wie die Vorverformung für $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\text{ns}$ (Mitte) und $\dot{\epsilon} = 1\,\%/\text{ns}$ (Rechts). In beiden Fällen wird die auf 0 MPa zurückverformte Konfiguration zur Darstellung verwendet ($\lambda_v = 4$).

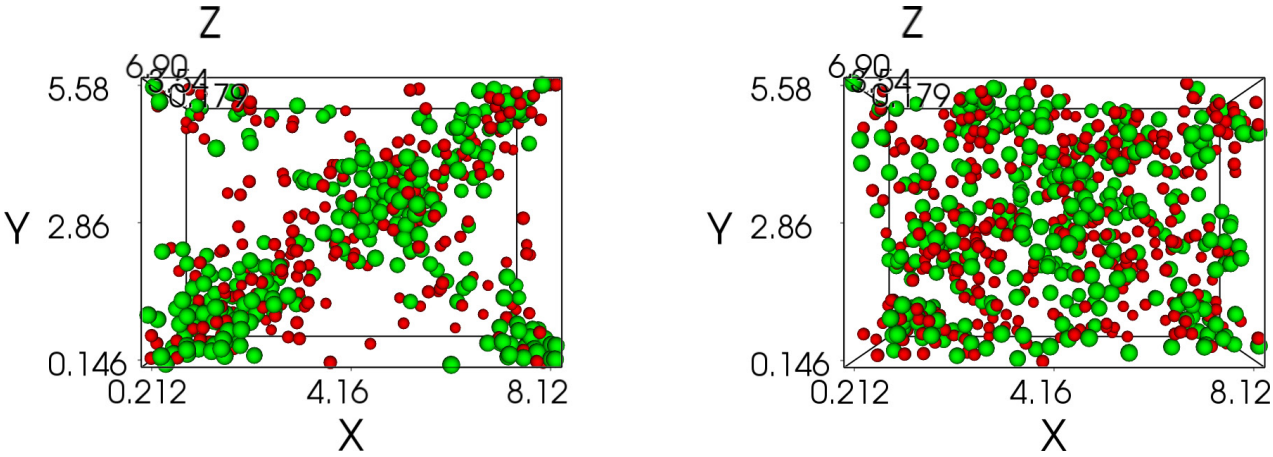

Abbildung 4.30: Links: Verformung eines großen Systems mit $\dot{\epsilon} = 1\,\%/\text{ns}$ in der xy-Ebene bei 700 K. Diese Simulation bestimmt das Zeitfenster 1. Es gilt: $t_{i_1} = 0$ ns, $t_{f_1} = 10$ ns. Dargestellt ist Konfiguration t_{f_1}, $\lambda_c = 4$. Rechts: Weiterverformung der links dargestellten Simulation in der zx-Ebene nach nominell 10 ns ($= t_{i_2}$). Für die Darstellung wird $t_{f_2} = 20$ ns und $\lambda_v = 4$ gewählt. Die Zelle ist Konfiguration t_{i_2}.

Zu 3) Abbildung 4.30 zeigt zwei Simulationszellen mit Atomen einer Nachverformungssimulation nach Prozess 3 (vgl. Abschnitt 4.4.2). Die Scherrate beträgt 1 %/ns. In der Zelle links wird die Verformung des Systems bis über die Streckgrenze (10 % Dehnung) begleitet durch das Auftreten eines Verformungsbandes entlang einer Diagonalebene. Die Darstellung der Simulationszelle in Abb. 4.30 rechts (Verformung für weitere 10 % Dehnung nach Änderung der Scherebene von xy nach zx) zeigt eine sehr homogene Verteilung von Atomen die die Bedingung $\lambda_i^{\text{Zr}}(Z_2) > 4$ erfüllen. Bei dieser Gegenüberstellung ist kaum eine Korrelation zwischen der Änderung der Topologie in dem System in Zeitfenster 1 und Zeitfenster 2 auszumachen.

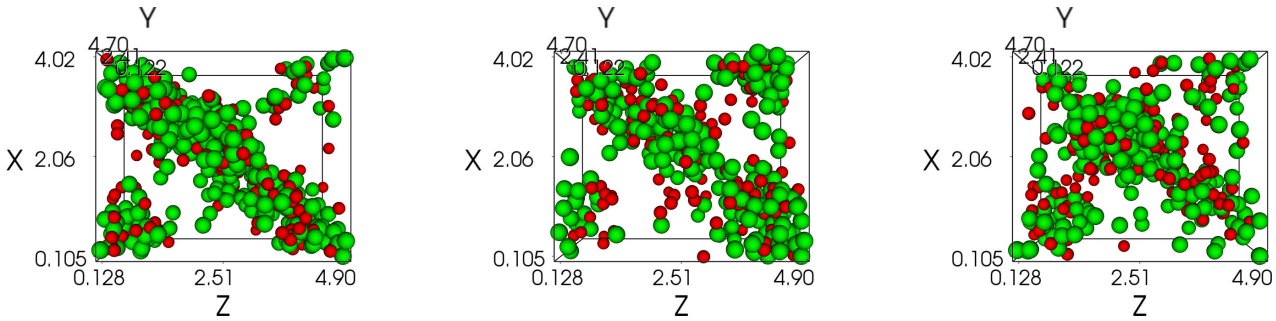

Abbildung 4.31: Links: Vorverformung eines kleinen Systems mit $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\text{ns}$ bei 700 K in der zx-Ebene; Definition für Zeitfenster 1: $t_{i_1} = 0$ ns, $t_{f_1} = 1.3$ ns. Gezeigt ist Konfiguration t_{f_1} ($\lambda_v = 3$). Mitte: Nachverformung der Konfiguration t_{f_1} mit $\sigma = 913$ MPa in der zx-Ebene (vgl. Abschnitt 4.4.2). Hier ist $\lambda_v = 3$ und für Zeitfenster 2 gilt: $t_{i_2} \hat{=} \epsilon = 13\,\%$ und $t_{f_2} \hat{=} \epsilon \approx 13\,\% + 5\,\%$. Rechts: Nachverformung der Konfiguration t_{f_1} mit $\sigma = 913$ MPa in der xy-Ebene. $\lambda_v = 3$ und Zeitfenster 2 ist für diese Simulation gegeben durch: $t_{i_2} \hat{=} \epsilon = 13\,\%$ und $t_{f_2} \hat{=} \epsilon \approx 13\,\% + 5\,\%$.

Zu 4) Abbildung 4.31 zeigt Simulationszellen mit Atomen, deren Zahl an verlorenen Zr-Nachbarn in den betrachteten Zeitfenstern (siehe Bildunterschrift) den Wert 3 übersteigt ($\lambda_v = 3$). Es handelt sich um unterschiedliche Verformungssimulationen. Zum einen um eine zx-Scherung mit $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\text{ns}$ bis 13 % Dehnung (Abb. 4.31 links), zum anderen um eine Nachverformung mit $\sigma = \text{const}$ (Kriechversuch) der bis 13 % Dehnung im dyn. Scherversuch vorverformten Probe, wobei die gleiche Verformungsebene wie bei der Vorverformung gewählt wird (Abb. 4.31 mitte). Als drittes zeigt Abb. 4.31 rechts eine Zelle bei der in dem der Vorverformung nachfolgenden Kriechversuch die Scherebene von zx nach xy gewechselt wird.

Die Vorverformung im dyn. Scherversuch führt, wie bereits an anderen Stellen gezeigt, zur heterogenen Ausbildung von Bereichen entlang einer Diagonalebene, in denen die Atome massive Topologieänderungen erfahren haben (Abb. 4.31 links). Die Weiterverformung mit konstanter Scherspannung mit gleicher Zug- und Druckrichtung zeigt (Abb. 4.31 mitte), dass für die ersten 5 % Dehnung im Kriechversuch nahezu die gleichen Bereiche durch massive Topologieänderungen gekennzeichnet sind wie für den Übergang in den Fließzustand im dynamischen Scherversuch (Zelle links). Der Vergleich mit der Darstellung der Atome in Abb. 4.31 rechts belegt, dass auch die Weiterverformung mit einer geänderten Verformungsebene (xy statt zx) maßgeblich auf der in der Vorverformung ausgebildeten Diagonalebene verläuft.

Quantitative Analyse

Um die im vorigen Abschnitt gezeigten qualitativen Übereinstimmungen zwischen den Bereichen mit massiven Topologieänderungen zu quantifizieren, werden erneut die zwei Zeitfenster $Z_1 = [t_{i_1}, t_{f_1}]$, $Z_2 = [t_{i_2}, t_{f_2}]$ eines bestimmten Simulationslaufs oder zweier aufein-

anderfolgender Simulationen betrachtet. Wieder wird für jedes Atom die Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_k) \equiv \lambda_i^{\mathrm{Zr}}(t_{f_k} - t_{i_k}, t_{i_k}),\ k = 1, 2$ berechnet. Es wird ein kritischer Werte λ_v festgelegt, der die Atome grob unterteilt in solche mit starken Änderungen in der Topologie, und solche mit geringen Änderungen.

Wir fragen in diesem Abschnitt nach der Wahrscheinlichkeit mit der ein Atom, welches im zweiten Zeitfenster zu den Atomen mit massiven Topologieänderungen (oder moderaten Topologieänderungen) gehört, auch zu den Atomen mit massiven (oder moderaten) Topologieänderungen im ersten Zeitfenster gehört. Das bedeutet mit den Wahrscheinlichkeiten

$$P(A) : \text{Atom } i \text{ erfüllt } \lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_1) > \lambda_v \tag{4.9}$$

$$P(\overline{A}) : \text{Atom } i \text{ erfüllt } \lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_1) < \lambda_v \tag{4.10}$$

$$P(B) : \text{Atom } i \text{ erfüllt } \lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_2) > \lambda_v \tag{4.11}$$

$$P(\overline{B}) : \text{Atom } i \text{ erfüllt } \lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_2) < \lambda_v \tag{4.12}$$

die Frage nach der bedingten Wahrscheinlichkeit

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} \quad \text{bzw.} \quad P(\overline{A}|\overline{B}) = \frac{P(\overline{A} \cap \overline{B})}{P(\overline{B})}. \tag{4.13}$$

Um zu prüfen, ob das gefundene Verhalten als zufällig angesehen werden kann, wird die *hypergeometrische Verteilung* (siehe unten) zur Signifikanzprüfung der bedingten Wahrscheinlichkeit 4.13 herangezogen. Das ist wie folgt zu verstehen: Betrachte eine Urne mit N Kugeln, N sei die Anzahl an Ni- oder Zr-Atomen. Eine Anzahl N_λ der Kugeln sei weiß, $N - N_\lambda$ schwarz. Die Zahl N_λ der weißen Kugeln sei die Anzahl der Atome (Ni oder Zr), die im Zeitfenster Z_1 die Bedingung $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_1) \gtrless \lambda_v$ (also entweder mehr oder weniger Zr-Nachbarn als λ_v verloren) erfüllen. Die hypergeometrische Verteilung gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass bei Ziehen von n Kugeln aus dieser Urne (nacheinander ohne Zurücklegen) eine gewisse Anzahl m von weißen Kugeln gezogen wird[7]. Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsfunktion ist gegeben durch [174]

$$P_m(N, N_\lambda, n) = \frac{\binom{N_\lambda}{m}\binom{N-N_\lambda}{n-m}}{\binom{N}{n}}, \quad (m = 0, 1, \ldots n). \tag{4.14}$$

Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass von n Ni- oder Zr-Atomen die im zweiten Zeitfenster die Bedingung $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_2) \gtrless \lambda_v$ erfüllen, zufälligerweise m diese Bedingung auch im ersten Zeit-

[7] Das ist die Verteilung, die auch die Wahrscheinlichkeit von sechs Richtigen im Lotto berechnet.

Tabelle 4.5: Wahrscheinlichkeiten nach Gln. (4.9) bis (4.13) für $\lambda_v = 2$ für die Simulationen nach 1).

Sorte	$P(A)$	$P(B)$	$P(A\|B)$	$\overline{F}_{hyp}(m_0)$	$P(\overline{A})$	$P(\overline{B})$	$P(\overline{A}\|\overline{B})$	$\overline{F}_{hyp}(m_0)$
Zyklus für 700 K, Abb. 4.26 a)								
Ni	21.4	23.8	40.7	0	62.6	59.5	78.5	0
Zr	33.7	39.1	58.3	0	46.2	42.6	71.1	0
Zyklus für 1000 K, Abb. 4.26 b)								
Ni	38	47.3	44.9	0	44.4	34.4	57.3	0
Zr	49.5	59.4	57.1	0	29.5	19.5	48.2	0

fenter erfüllen. Die Wahrscheinlichkeit, einen Wert größer oder gleich einem festen Wert m_0 zu finden, ergibt sich aus der Verteilungsfunktion

$$F_{hyp}(m_0) = \sum_{m<m_0} P_m(N, N_\lambda, n) \tag{4.15}$$

bei vorgegebenen N, N_λ und n zu $1 - F_{hyp}(m_0) \equiv \overline{F}_{hyp}(m_0)$. Ist diese kleiner als fünf Prozent, wird das Eintreten eines so großen Wertes m_0 im Sinne der Signifikanztests (Abschn. 3.6.2) als signifikant überzufällig angesehen. Im Folgenden werden erneut die bereits in der qualitativen Analyse verwendeten Simulationen betrachtet.

Zu 1) Für die Bestimmung der bedingten Wahrscheinlichkeiten wird $\lambda_v = 2$ gewählt. Wie bereits angedeutet, werden die in Abb. 4.26 a) und b) gezeigten Simulationen analysiert. Tabelle 4.5 enthält die Ergebnisse der Wahrscheinlichkeiten nach Gln. (4.9) bis (4.13) sowie deren Zufälligkeit aus $\overline{F}_{hyp}(m_0)$. Letztere belegt für diese Simulationen, dass eine Übereinstimmung solchen Ausmaßes (der Wert von m_0) sowohl für Ni als auch Zr durch Zufall praktisch nicht auftreten kann.

Bei 700 K beträgt die Wahrscheinlichkeit $P(A|B)$ für Ni knapp 41 % und für Zr etwa 58 %. Das bedeutet, mit einer Wahrscheinlichkeit von etwa 40 % für Ni und knapp 60 % für Zr haben Atome, die im zweiten Zeitfenster massive Toplogieänderungen ($\lambda_i^{\mathrm{Zr}} > 2$) erfahren, bereits im ersten Zeitfenster solche Nachbarschaftsänderungen erfahren. Atome mit moderaten Topologieänderungen im zweiten Zeitfenster haben mit einer Wahrscheinlichkeit von etwa 78 % für Ni und 71 % für Zr bereits im ersten Zeitfenster nur moderate Topologieänderungen gezeigt.

Vergleicht man dies mit den Werten für massive Topologieänderungen des Verformungszyklus bei 1000 K, fallen geringügig höhere Werte für $P(A|B)$ auf, die aus einer allgemein vorliegenden höheren Dynamik folgen, erkennbar an den erhöhten Werten für $P(A)$ und $P(B)$. Die im Vergleich zu den Daten für 700 K deutliche Abnahme in den Werten von $P(\overline{A}|\overline{B})$ für Ni und

Tabelle 4.6: Wahrscheinlichkeiten nach Gln. (4.9) bis (4.13) für $\lambda_v = 2$ für die Simulationen nach 2).

Sorte	$P(A)$	$P(B)$	$P(A\|B)$	$\overline{F}_{hyp}(m_0)$	$P(\overline{A})$	$P(\overline{B})$	$P(\overline{A}\|\overline{B})$	$\overline{F}_{hyp}(m_0)$
Weiterverformung mit 1 %/ns								
Ni	9.49	22.7	16.3	4.1e-10	78.3	62.7	87.4	0
Zr	17.9	31.9	31.1	0	62.8	47.7	77.4	0
Weiterverformung mit 10 %/ns								
Ni	9.49	13.8	15.6	2e-05	78.3	70.1	84.8	0
Zr	17.9	25.1	28	1.9e-14	62.8	52.3	75.1	0

Zr resultiert aus der bei 1000 K größeren Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Atom im Verlauf des Verformungszyklus starke Topologieänderungen erfährt. Beispielsweise kann aus den Daten von Tabelle 4.5 für Zr berechnet werden, dass bei 700 K etwa $P(\overline{A}|\overline{B}) \cdot P(\overline{B})/P(\overline{A}) \approx 65$ % der Atome, die im ersten Zeitfenster weniger als 2 Zr-Nachbarn verloren haben, im zweiten Zeitfenster erneut weniger als 2 Zr-Nachbarn verlieren. Bei 1000 K sind es von den ohnehin wenigen Zr-Atomen mit moderaten Topologieänderungen (Werte für $P(\overline{A})$ und $P(\overline{B})$) dagegen nur noch etwa $48.1 \cdot 19.5/29.5 \approx 31$ %.

Zu 2) Es werden die Simulationen betrachtet, die in Abb. 4.26 c) abgebildet sind. Die Zeitfenster sind wie oben beschrieben gewählt. Tabelle 4.6 enthält die Wahrscheinlichkeiten für die Simulationen, die mit 1 %/ns und 10 %/ns weiterverformt werden. Wie bereits bei den Daten unter 1) ist der gefundene Wert für die bedingten Wahrscheinlichkeiten sowohl für Ni als auch Zr und für beide Scherraten kaum durch zufällige Übereinstimmungen zu erklären ($\overline{F}_{hyp}(m_0)$).

Beide Datensätze unterscheiden sich nicht wesentlich in den bestimmten Wahrscheinlichkeiten $P(A|B)$ bzw. $P(\overline{A}|\overline{B})$. Ni-Atome mit starken Änderungen der nächsten Nachbarschaft ($\lambda_i^{\mathrm{Zr}} > 2$) im zweiten Zeitfenster haben mit einer Wahrscheinlichkeit von etwa 16 % bereits im ersten Zeitfenster ähnlich starke Änderungen erfahren, beim Zr ist der entsprechende Wert mit ca. 30 % etwa doppelt so groß. Moderate Topologieänderungen bei Atomen im zweiten Zeitfenster (Ni und Zr) treten mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit auch im ersten Zeitfenster auf ($P(\overline{A}|\overline{B}) \approx 84$ % bis 87 % für Ni, bzw. 75 % bis 77 % für Zr). Zu erwähnen an dieser Stelle sind die im Vergleich zur Weiterverformung mit $\dot{\epsilon} = 10$ %/ns geringeren Werte von $P(\overline{B})$ (Ni und Zr) für die Weiterverformung mit $\dot{\epsilon} = 1$ %/ns. Diese belegen eine Verkleinerung der Bereiche mit moderaten Topologieänderungen für kleinere Scherraten, die bereits in Abb. 4.29 durch ein breiteres Verformungsband in der Zelle ganz rechts im Vergleich zur mittleren Zelle zu erkennen sind.

Tabelle 4.7: Wahrscheinlichkeiten nach Gln. (4.9) bis (4.13) für $\lambda_v = 2$ für die Simulationen nach 3).

Sorte	$P(A)$	$P(B)$	$P(A\|B)$	$\overline{F}_{hyp}(m_0)$	$P(\overline{A})$	$P(\overline{B})$	$P(\overline{A}\|\overline{B})$	$\overline{F}_{hyp}(m_0)$
Ni	15	19	21.4	2.9e-15	71.7	64	76.4	0
Zr	22.5	28.2	27.6	1.3e-12	56	46.4	61.7	0

Zu 3) Tabelle 4.7 listet die Ergebnisse der Wahrscheinlichkeiten für die Simulation mit Umkehrung der Verformungsrichtung, Abb. 4.27, auf. Wie bei den bedingten Wahrscheinlichkeiten bei den anderen Verformungssimulationen ist auch hier die gefundene Übereinstimmung, d. h. der Wert von m_0 (siehe oben), praktisch nicht durch den Zufall zu erklären.

Ni-Atome, die im zweiten Zeitfenster massive Topologieänderungen zeigen, haben zu etwa 21 % auch im ersten Zeitfenster so starke Änderungen erfahren. Beim Zr liegt der Wert mit 27 % noch darüber. Die hier gefundenen Werte für $P(A|B)$ sind mit denen für die Simulationen unter Punkt 2) vergleichbar. Demnach ist die Wiederanregung zu atomaren Umlagerungen von Atomen, die in Zeitfenster 1 massive Topologieänderungen zeigen, in Zeitfenster 2 für eine Scherebenenänderung (xy nach zx) etwa so stark ausgeprägt, wie sie für die Weiterverformung in der selben Scherebene einer zuvor auf 0 MPa zurückgescherten Probe gefunden wird.

Der Vergleich der beiden Simulationszellen in Abb. 4.30 gibt qualitativ einen Eindruck von einer sehr geringen Übereinstimmung der räumlichen Verteilung der Bereiche mit massiven Topologieänderungen in beiden Zeitfenstern. Quantitativ wird dies erfasst in den Daten für die Wahrscheinlichkeiten der Atome mit moderaten Topologieänderungen. Verglichen mit den Werten für die Weiterverformung mit $\dot{\epsilon} = 1$ %/ns unter 2) (Tabelle 4.6) ist $P(\overline{A}|\overline{B})$ bei den hier betrachteten Simulationen für Ni um knapp 10 Prozentpunkte und für Zr 16 Prozentpunkte geringerer. Das deutet darauf hin, dass bei dem hier betrachten Prozess ein größerer Teil der Atome, die im ersten Zeitfenster zu den Atomen mit moderaten Topologieänderungen zählen, diese Bedingung (moderate Topologieänderung) im zweiten Zeitfenster nicht mehr erfüllt. Es sei noch darauf aufmerksam gemacht, dass der Verformungszyklus bei 700 K unter Punkt 1) zumindest für Ni auch keinen wesentlich größeren Wert für $P(\overline{A}|\overline{B})$ liefert, wohingegen qualitativ doch ein deutlicher Unterschied beim Vergleich der Darstellungen der Topologieänderungen der Simulationen unter 1) und 3) besteht (vgl. Abb. 4.28 oben links und rechts bzw. Abb. 4.30 links und rechts). Eine zusätzliche Korrelationsanalyse der Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(\,\cdot\,)$ (siehe unten) kann weitere Informationen liefern.

Zu 4) In Tabelle 4.8 sind die Resultate für die Wahrscheinlichkeiten nach Gln. (4.9) bis (4.13) der Simulationen von bis in den Fließbereich hinein verformten, nachfolgend mit konstanter Spannung verformten, Proben angegeben. Im speziellen seien hier die auch für die qualitative Darstellung betrachteten Simulationen der Referenzprobe 2B und 2B* (vgl. Tab. 4.4 auf Sei-

Tabelle 4.8: Wahrscheinlichkeiten nach Gln. (4.9) bis (4.13) für $\lambda_v = 2$ für die Simulationen nach 4).

Sorte	$P(A)$	$P(B)$	$P(A\|B)$	$\overline{F}_{hyp}(m_0)$	$P(\overline{A})$	$P(\overline{B})$	$P(\overline{A}\|\overline{B})$	$\overline{F}_{hyp}(m_0)$
				Probe 2B				
Ni	16.3	13.4	25.3	2.5e-06	67.2	73.2	73	0
Zr	28.6	22	39.8	4.9e-11	51	55.6	61	0
				Probe 2B*				
Ni	16.3	12.3	28.8	1.3e-09	67.2	72.3	75	0
Zr	28.6	22.5	52.2	0	51	54.9	64.8	0

te 101) verwendet. Wie bereits bei den Simulationen unter 1) bis 3) deuten die berechneten Werte für $\overline{F}_{hyp}(m_0)$ sowohl für Probe 2B als auch für Probe 2B* an, dass die Zahl der Atome, die gleichzeitig im zweiten und im ersten Zeitfenster die Bedingung $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_k) > 2$ bzw. < 2 erfüllen, nicht durch zufällige Auswahl zustande gekommen sein kann.

Die Simulationen der Weiterverformung in gleicher Verformungsebene (Probe 2B) machen deutlich, dass Ni-Atome, die in Zeitfenster 2 massive Topologieänderungen zeigen, dies zu etwa 25 % auch im Zeitfenster 1 tun, beim Zr sind es mit knapp 40 % erheblich mehr. Atome mit moderaten Topologieänderungen im zweiten Zeitfenster haben mit einer Wahrscheinlichkeit von 73 % für Ni und 61 % für Zr auch im ersten Zeitfenster nur moderate Topologieänderungen erfahren: $P(\overline{A}|\overline{B}) \cdot P(\overline{B})/P(\overline{A}) \approx 79$ % von den Ni-Atomen, die im ersten Zeitfenster durch geringe Nachbarschaftsänderungen gekennzeichnet sind, bleiben im zweiten Zeitfenster weiterhin mehr oder weniger in ihrer Nachbarschaft verhaftet, von den Zr-Atomen aus Zeitfenster 1 sind es immerhin noch 66 %.

Für die Weiterverformung mit konstanter Spannung in einer anderen Ebene (hier xy statt wie zx in der Vorverformung mit konstanter Scherrate) zeigt sich für die frühen Stadien der Nachverformung (die Topologieänderungen werden sowohl bei Probe 2B als auch bei Probe 2B* für die ersten 5 % Weiterdehnung bestimmt) mit 28 % für Ni und 52 % für Zr eine geringfügig (beim Zr deutlich) größere Wahrscheinlichkeit, dass ein Atom, welches in Zeitfenster 2 massive Topologieänderungen erfährt, dies bereits früher ähnlich stark erfahren hat. Die Werte $P(\overline{A}|\overline{B})$ für moderate Topologieänderungen sind verglichen mit den Daten für die Nachverformung in die gleiche Richtung (Probe 2B) sowohl für Ni als auch Zr nahezu gleich. In dieser Simulation haben rund 80 % der Ni-Atome und knapp 70 % der Zr-Atome mit moderaten Topologieänderungen in Zeitfenster 1 auch in Zeitfenster 2 nur geringe Änderungen ihrer Nachbarschaft erfahren.

Wie bereits unter Punkt 3) weiter oben angemerkt, kann eine zusätzliche Information über die räumliche Korreliertheit der Topologieänderungen aus einer Korrelationsanalyse (vgl. Ab-

Tabelle 4.9: Berechnete Korrealtionskoeffizienten nach Pearson (R_P) und Spearman (R_S) und ein Symbol, welches dem p-Wert des Korrelationstests entspricht (vgl. Abschn. 3.6.3) für die in 1) bis 4) gezeigten Simulationen. Auf die Angabe des Konfidenzbereichs sei hier verzichtet.

Simulation	R_P	R_S
Nach 1) 700 K	$0.791538^{(***)}$	$0.8002426^{(***)}$
Nach 1) 1000 K	$0.4601903^{(***)}$	$0.4603277^{(***)}$
Nach 2) $\dot{\epsilon} = 1$ %/ns	$0.6307366^{(***)}$	$0.6751639^{(***)}$
Nach 2) $\dot{\epsilon} = 10$ %/ns	$0.6066925^{(***)}$	$0.6581145^{(***)}$
Nach 3)	$0.3468063^{(***)}$	$0.3765971^{(***)}$
Nach 4) 2B	$0.5655593^{(***)}$	$0.6087835^{(***)}$
Nach 4) 2B*	$0.6912624^{(***)}$	$0.7107732^{(***)}$

schn. 3.6.3) der Größe $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_k)$ gewonnen werden. Dazu wird für jedes Atom i einer Konfiguration (wir wählen hier jeweils die erste Konfiguration des Zeitfensters Z_k) eine mittlere Größe $\bar{\lambda}_i^{\mathrm{Zr}}(Z_k)$ nach Gleichung (4.16) berechnet.

$$\bar{\lambda}_i^{\mathrm{Zr}}(Z_k) \equiv \frac{1}{n_b + 1} \cdot \left(\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(Z_k) + \sum_b \lambda_b^{\mathrm{Zr}}(Z_k) \right) \tag{4.16}$$

In Gl. (4.16) läuft die Summe über die n_b nächsten Nachbarn b von Atom i. Genau genommen wird ein Korrelationstest zwischen $\bar{\lambda}_i^{\mathrm{Zr}}(Z_1)$ und $\bar{\lambda}_i^{\mathrm{Zr}}(Z_2)$ durchgeführt, der die Frage beantwortet, ob eine Korrelation vorliegt (ist sie statistisch signifikant) und wie groß eine in den Daten vorliegende Korrelation ist. Somit ist eine Bewertung der Ähnlichkeit der Stärke der Topologieänderung von Atom i und seinen Nachbarn in zwei unterschiedliche Zeitfenstern (1 und 2) möglich. Im Vorfeld kann bereits aus den weiter oben gezeigten Wahrscheinlichkeiten gefolgert werden, dass der Test die Hypothese auf Vorliegen einer Korrelation kaum verwerfen wird.

Tabelle 4.9 enthält die nach Pearson's oder Spearman's Methode berechneten Korrelationskoeffizienten (Abschn. 3.6.3) und ein Symbol für deren Signifikanz für die Simulationen nach 1) bis 4). In allen Fällen ist die gefundene Korrelation höchst signifikant. Die Unterschiede in den berechneten Korrelationskoeffizienten R_P und R_S sind nicht sehr stark, mit leicht größeren Werten für R_S.

Die Korrelation der Topologieänderungen zwischen zwei Zeitfenstern im Verformungszyklus nach 1) für 700 K ist hoch (nach der Klassifikation der R-Werte in Abschn. 3.6.3) und positiv. Das ist in Übereinstimmung mit den Befunden der qualitativen Darstellung und der Auswertung der bedingten Wahrscheinlichkeiten. Entsprechend wird für den Verformungszyklus bei 1000 K nur noch eine geringe Korrelation gefunden, was vor allem auf das Ausweiten des Verformungsbandes zurückzuführen ist.

Die Analyse der Weiterverformung nach 2) zeigt mit Werten zwischen 0.6 und 0.68 eine mittlere Korrelation, womit die Korrelation in den Topologieänderungen deutlich größer ist als für den Verformungszyklus bei 1000 K. Das deckt sich mit den graphischen Darstellung der Topologieänderungen in den Simulationszellen (vgl. Abb. 4.28 unten und Abb. 4.29).

Am wenigsten ausgeprägt ist die Korrelation zwischen Topologieänderungen unterschiedlicher Zeitfenster für die Simulation mit einer Änderung der Scherebene im dynamischen Scherversuch nach 3). Die Werte für R_P und R_S deuten hier nur auf geringe Korrelation und sind sogar noch kleiner als für den Verformungszyklus bei 1000 K. Das ist mit den qualitativen Darstellungen für diese Simulation (Abb. 4.30, Seite 110) in voller Übereinstimmung. Somit gibt diese Analyse einen mit der visuellen Darstellung eher verträglichen Befund als die Werte $P(\overline{A}|\overline{B})$, die für diese Simulation und beispielsweise der des Verformungszyklus bei 700 K vergleichbar waren (siehe oben).

Die Korrelationskoeffifzienten berechnet zwischen Topologieänderungen während der Vorverformung mit konstanter Rate und einer Weiterverformung mit konstanter Spannung nach 4) liegen zwischen 0.56 und 0.71. Damit liegt für die Weiterverformung mit gleicher Zug- bzw. Druckrichtung und die mit zur Vorverformung senkrechten Scherebene eine mittlere bis hohe Korrelation vor. Die Korrelation für die Probe 2B* ist dabei sogar noch höher als für die Probe 2B. In beiden Fällen sind die Befunde vergleichbar mit den Daten für die Weiterverformung mit konstanter Scherrate nach 2).

4.5. Abschließende Bemerkungen

Die Untersuchungen der Topologieänderungen zeigen, dass atomare Umlagerungen, die eine Voraussetzung für das Ausbilden des Fließzustands sind, sukzessive mit Beginn des Abfalls von oberer zu unterer Streckgrenze in einem relativ kleinen Teil der Zelle auftreten. Dies ist bei 700 K stärker ausgeprägt als bei 1000 K, erkennbar an der Ausbildung eines Verformungsbandes entlang einer Diagonalebene bei 700 K. Bereiche mit starken Topologieänderungen weiten sich mit zunehmender Dehnung aus, was bei höheren Temperaturen deutlich schneller geht als bei tieferen Temperaturen. Das führt dazu, dass beispielsweise die Probe bei 1000 K bei gleicher Scherrate und gleicher nomineller Dehnung mehr Atome enthält deren λ_i^{Zr}-Wert die festgelegte Grenze übersteigt als das für die Probe bei 700 K der Fall ist. Ursache für das bei 1000 K schellere Anwachsen der Bereiche mit Atomen mit massiven Topologieänderungen ist die für höhere Temperaturen stärkere atomare Dynamik. Diese resultiert aus den erhöhten thermischen Fluktuationen, die zur Folge haben, dass verformunginduzierte Strukuränderungen mit thermisch induzierten Relaxationsprozessen vermischt werden. Die Relaxationsprozesse tragen maßgeblich zu einem Abbau innerer Spannung bei. Eine Folge dieser bei höheren Temperaturen vermehrt vorkommender Prozesse ist unter anderem in den Spannungswerten

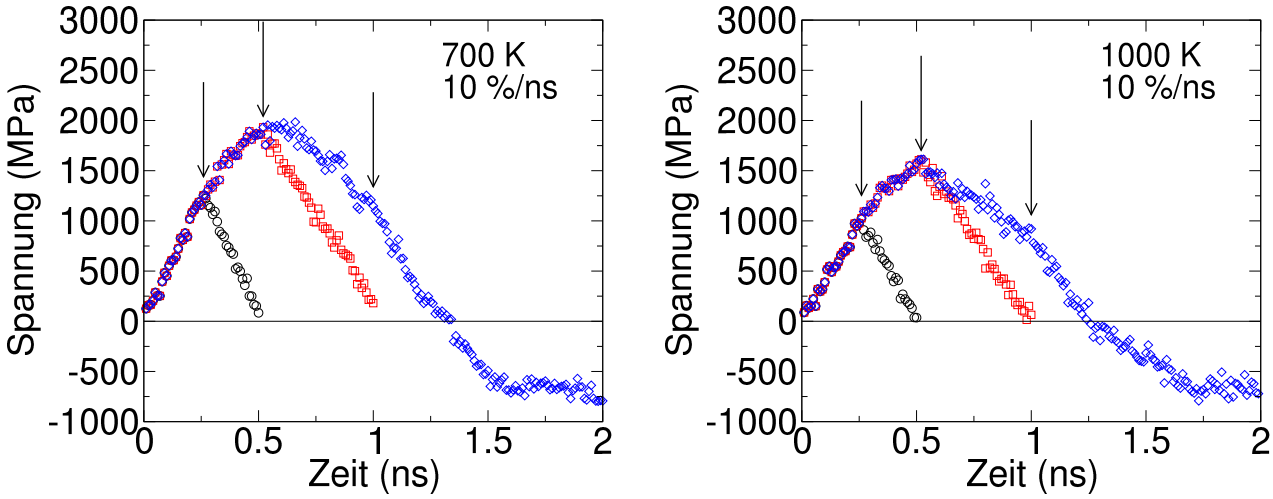

Abbildung 4.32: Hin- und Rückverformung in der zx-Ebene mit $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\text{ns}$ für 700 K (links) und 1000 K (rechts). Die Pfeile deuten die Zeiten an, bei denen die Rückverformung beginnt.

der Spannungs-Dehnungs-Kurven zu sehen. Bei fester Scherrate liegen Streckgrenze und Fließspannung für 1000 K bei geringeren Werten als für 700 K. Hat die Probe mehr Zeit für den Ablauf von Relaxationsprozessen, führt dies automatisch zu einer Verkleinerung charakteristischer Spannungswerte. Dadurch hat eine Verringerung der Scherrate einen ähnlichen Einfluss, z. B. auf die Streckgrenze, wie ein Erhöhung der Temperatur (vgl. auch die Darstellung der Topologieänderungen in der Simulationszelle).

Es sei hier nochmal betont, dass bis zur Streckgrenze nur moderate Umlagerungen auftreten, die als elastisch bzw. anelastisch angesehen werden können und die eine leichte Optimierung der Struktur als Reaktion auf die Scherung bedeuten. Um dies an dieser Stelle noch einmal zu demonstrieren werden zwei Scherungssimulationen mit $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\text{ns}$ betrachtet, einmal bei 700 K und einmal bei 1000 K. Zur Beurteilung der Auswirkung der Deformation werden die Proben für eine bestimmte Zeit t_x gedehnt und danach durch Umkehrung der Verformungsrichtung und Scherung für die gleiche Zeit t_x wieder auf die Ursprungsgröße zurückgeführt (die Verformungszyklen in Abschnitt 4.4.2 sind vergleichbar mit dieser Prozessführung, dort erfolgen Dehnungen bis über die Streckgrenze hinaus). Abbildung 4.32 zeigt den Verlauf der Spannung mit der Zeit (negative Spannungen bedeuten hier ein Aufbauen von inneren Spannung bei negativer Dehnung, die über 0 MPa hinaus gehen, vgl. Abschn. 4.4.2). Werden die Proben bis zur Streckgrenze gedehnt, stellt sich am Ende der Rückverformung wieder in etwa der Spannungswert vom Anfang der Simulation ein (sowohl für 700 K als auch für 1000 K). Werden die Proben über die Streckgrenze verformt, tritt inelastische Verformung ein. Dies ist deutlich an der für die Zurückverformung auf 0 % Dehnung nötigen Zusatzspannung (in Abb. 4.32 durch negative Spannungen charakterisiert) zu erkennen.

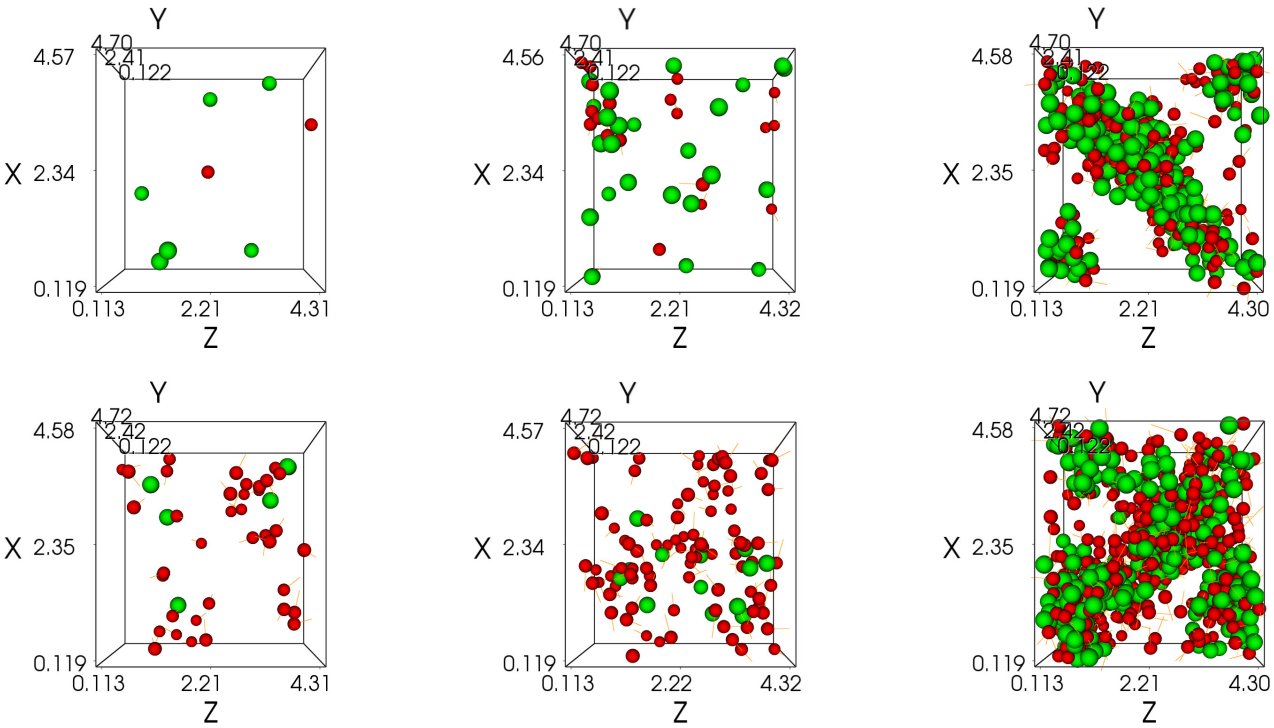

Abbildung 4.33: Atome die nach Hin- und Rückverformung bis zu einer gewissen Dehnung im Vergleich mit der Ausgangsprobe eine bestimmte Zahl an nächsten Zr-Nachbarn verloren haben für 700 K (oben) und 1000 K (unten). Oben links: 2.5 % maximale Dehnung, $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(2t_x, 0) > 2$, oben mitte: ≈ 5 % maximale Dehnung, $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(2t_x, 0) > 2$, oben rechts: 10 % maximale Dehnung, $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(2t_x, 0) > 3$. Unten links: 2.5 % maximale Dehnung, $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(2t_x, 0) > 3$, unten mitte: ≈ 5 % maximale Dehnung, $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(2t_x, 0) > 3$, unten rechts: 10 % maximale Dehnung, $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(2t_x, 0) > 4$. Die Verschiebungen der Atome sind durch Striche an den Atomen angedeutet.

Abbildung 4.33 zeigt jeweils die Atome, deren $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(2t_x, 0)$-Wert am Ende der drei Simulationen aus Abb. 4.32 einen gewissen Wert übersteigt. Bei 700 K ist die Verformung bis weit vor die Streckgrenze und zurück nur durch eine sehr geringe Anzahl von geringfügig verschobenen Zr- und Ni-Atomen zu sehen, eine Lokalisierung ist nicht erkennbar. Deutlich mehr Topologieänderung ist für die Dehnung bis etwa zur Streckgrenze (≈ 5 %) und zurück zu beobachten. Neben den homogen in der Zelle liegenden Zr-Atomen mit äußerst moderaten Verschiebungen finden sich einige Ni-Atome deren Verschiebungen deutlich größer sind. In der Ecke links oben ist eine Gruppe von etwa 15 Atomen zu sehen, die eine relativ kompakte Umlagerungsregion zeigen. Die Rückscherung nach einer Dehnung über die Streckgrenze hinweg lässt ein ausgeprägtes Verformungsband in der Zelle erscheinen.

Für 1000 K ist die Verformung bis 2.5 % Dehnung und zurück durch eine geringe Anzahl von Zr-Atomen gegeben und, bedingt durch die höhere Temperatur, einer bereits recht großen Anzahl von Ni-Atomen. Die Verschiebungen der Ni-Atome sind relativ groß (die orangen Striche an den Ni-Atomen in der Zelle in Abb. 4.33 unten links deuten auf Verschiebungen größer als den für die Darstellung gewählten Ni-Atom-Durchmesser, 0.275 nm, hin), eine Lokalisie-

rung ist zu erkennen. Für die Dehnung bis zur Streckgrenze und zurück bleibt es bei einer geringen Anzahl an Zr-Atomen, die eine ausreichende Topologieänderung zeigen. Die Zahl der Ni-Atome ist deutlich höher als für die geringere Dehnung (unten links). Die Verformung bis über die Streckgrenze und zurück erfordert einen großen Anteil an Umlagerungen, vor allem auch im Zr-System, sodass auch bei 1000 K die Ausbildung eines Verformungsbandes deutlich wird (wenn auch nicht ganz so lokalisiert wie bei 700 K).

Vergleicht man die Darstellungen beider Temperaturen, so ist ersichtlich, dass das Verhältnis von Ni- zu Zr-Dynamik für beide Temperaturen deutlich unterschiedlich ist. Bei 700 K sind Ni und Zr in etwa gleichmäßig an den Umlagerungsprozessen beteiligt. Für 1000 K ist zumindest bis zur Streckgrenze ein erheblich größerer Teil der Ni-Atome durch Topologieänderung ausgezeichnet als es Zr-Atome sind. Dies gestattet zu vermuten, dass zwar für die irreversible, d. h. plastische, Verformung massive Umlagerung in der festgebundenen Zr-Matrix nötig sind (die für beide Temperaturen vergleichbar ist und möglicherweise den numerisch erreichbaren Relaxationsgrad wiederspiegelt), dass aber die anelastischen Beiträge, die für die höhere Temperatur stärker vorliegen als für die geringere Temperatur (hier eher elastische Umlagerungen), verstärkt durch Umlagerungen im Ni-Subsystem gegeben sind.

Mit Hilfe der statistischen Analyse der Unterschiede in den atomaren Eigenschaften von verschieden stark durch Topologieänderung betroffenen Atomgruppen lassen sich präzise Aussagen über die in den Daten vorliegenden Variationen machen. Das bestätigt, dass die verschiedenen Gruppen nicht nur durch eine unterschiedliche Dynamik ausgezeichnet sind (aus λ_i^{Zr}), sondern dass zusätzlich Unterschiede — und zwar statistisch signifikant — in der Struktur vorliegen. Aus der Bewertung der atomaren Eigenschaften in den zwei ausgewählten Atomgruppen in Bezug zu den Daten der Ausgangsproben können die in den Atomgruppen mit massiven Topologieänderungen auftretenden, die Struktur betreffenden Änderungen in Verbindung mit dem Übergang in den Fließzustand gebracht werden. In [39, 40] ist der Fließzustand verglichen mit dem Ausgangszustand durch eine erhöhte potenzielle Energie und einen erhöhten Wendt-Abraham-Parameter gekennzeichnet. Vergleichbare Befunde ergeben sich für die Atome mit massiven Topologieänderungen, womit der Übergang in den Fließzustand eindeutig als ein heterogen in der Probe auftretender Zustandswechsel anzusehen ist. Darüber hinaus liegen weitere Unterschiede zwischen den zwei betrachteten Atomgruppen vor, z. B. in den sterischen Beziehungen der Atomanordnungen (Q_l) oder in den Spannungszuständen der Atome (φ_i^p und φ_i^τ).

Um diese Unterschiede hier noch einmal im Vergleich zu den Daten der Ausgangsproben und in Zusammenhang mit dem Temperaturverhalten der jeweiligen atomaren Eigenschaft zu sehen, werden in Abbildung 4.34 die Daten zweier Scherungssimulationen erneut dargestellt. Es handelt sich um die Daten einer xy-Scherung des kleinen Systems mit $\dot{\epsilon} = 10\ \%/\mathrm{ns}$ bei

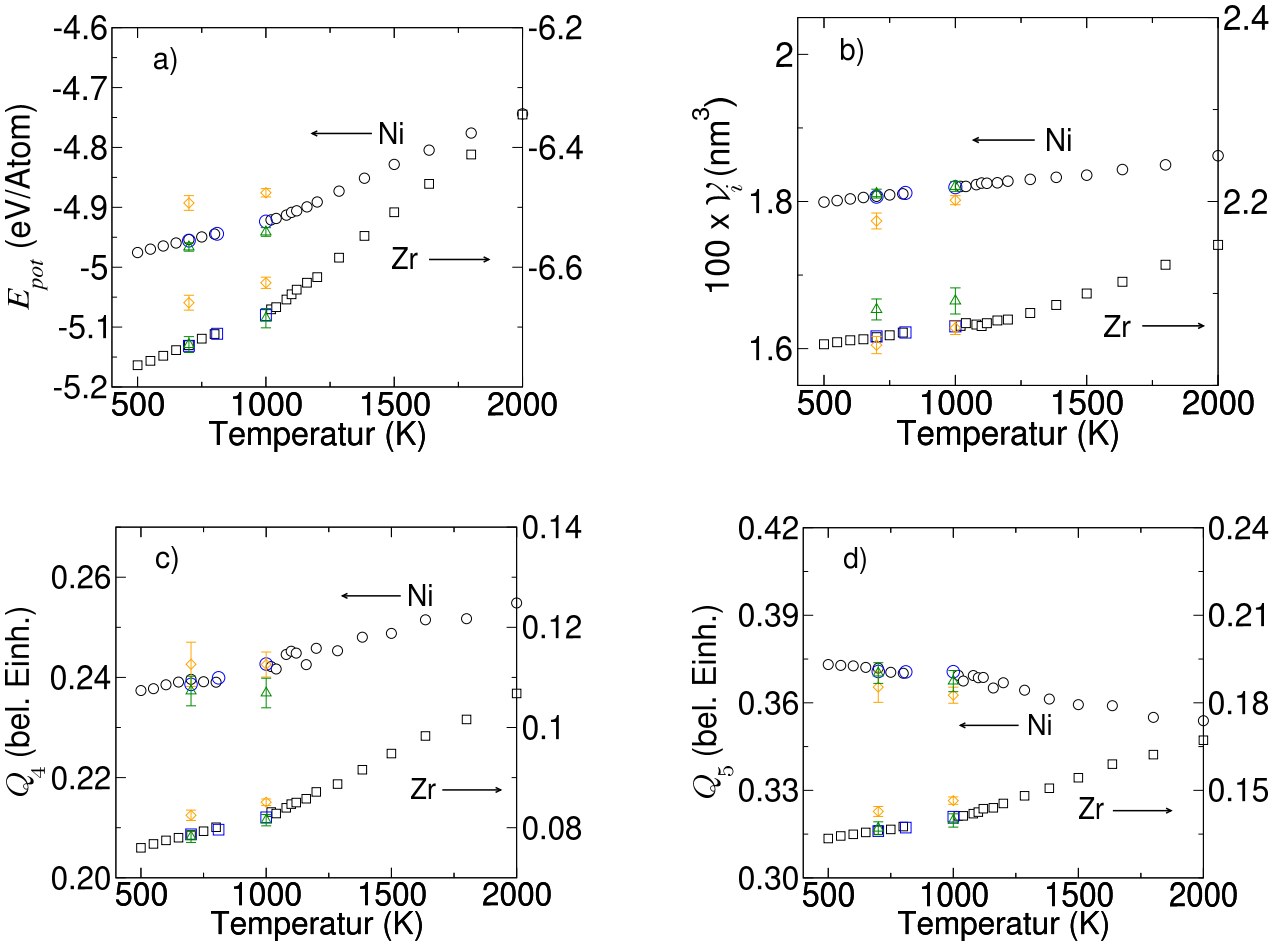

Abbildung 4.34: Daten verschiedener charakterischer Eigenschaften für verschiedene Temperaturen (schwarze Kreise: Ni, schwarze Rechtecke: Zr), den kleinen Ausgangsproben (blau), der Atomgruppe mit massiven Topologieänderungen (orange Diamanten) und der Atomgruppe mit moderaten Topologieänderungen (grüne Dreiecke). Dargestellt ist a) die potenzielle Energie $E_{pot}(T)$, b) die Käfigvolumina $\mathcal{V}_i(T)$, c) – e) die Q_l-Ordnungsparameter in Abh. von T, f) die hydrostatischen Spannungsmaße $\varphi_i^p(T)$, die von Mises Spannungsmaße $\varphi_i^\tau(T)$ und die Wendt-Abraham-Parameter $R_{WA}(T)$. Teile e) bis h) auf nächster Seite.

700 K und 1000 K. Gezeigt werden die Mittelwerte der verschiedenen atomaren Eigenschaften und des Wendt-Abraham-Parameters für verschiedene Ausgangstemperaturen (schwarz), für die kleinen Ausgangsproben (blau) und für die zwei Atomgruppen (Gruppe 1: massive Topologieänderungen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\ \%, 0) > 3$ (gelb). Gruppe 2: moderate Topologieänderungen mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\ \%, 0) < 1$ (grün)). Danach haben Atome mit massiven Topologieänderungen im Mittel eine höhere potenzielle Energie, Atome mit moderaten Topologieänderungen eine nahezu gleiche potenzielle Energie (Ni etwas geringer) als die Ausgangskonfigurationen. Beim Käfigvolumen zeichnen sich Ni-Atome mit starken Topologieänderungen durch ein verkleinertes Volumen gegenüber denen der Ausgangsproben aus. Zr-Atome mit massiven Topologieände-

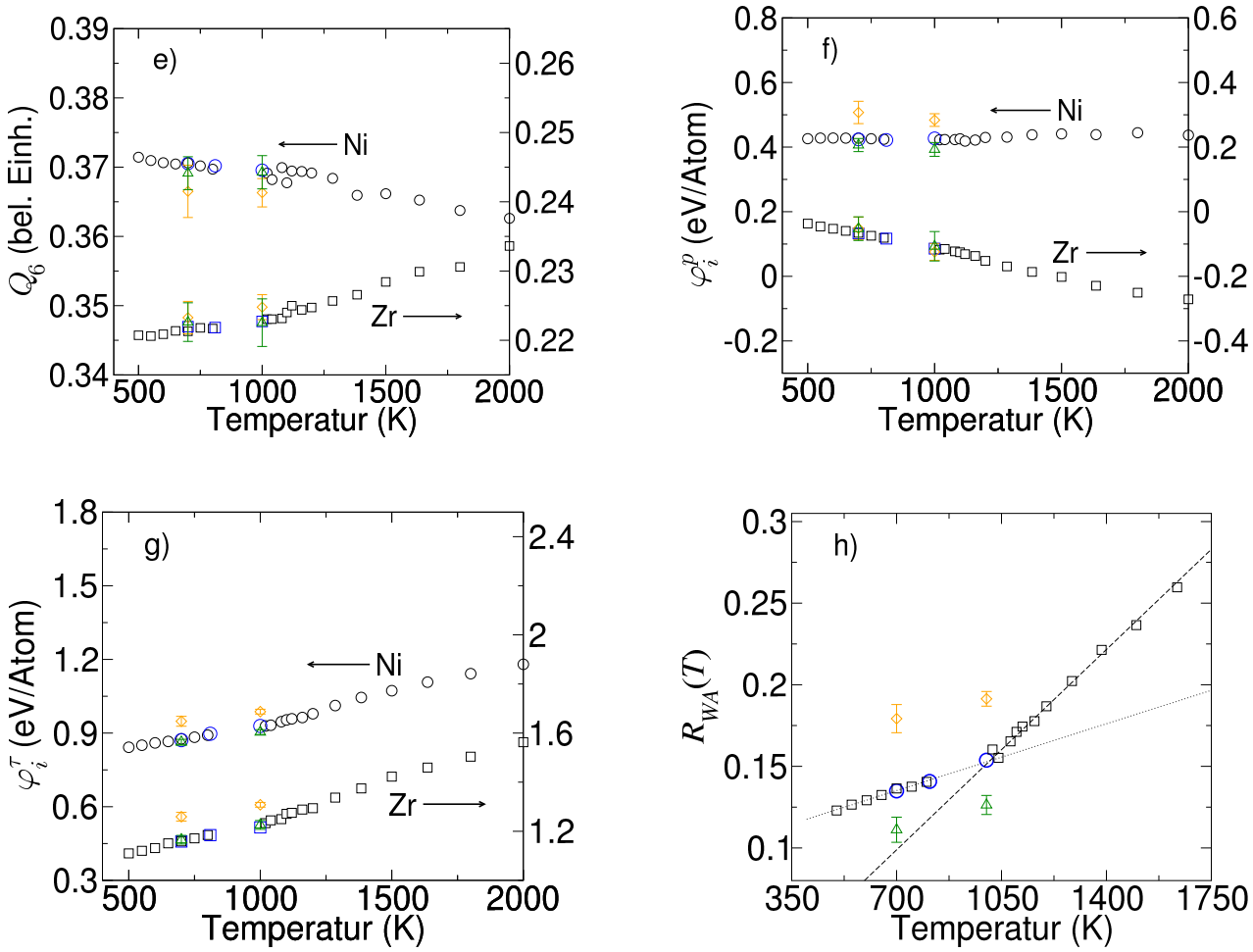

Abbildung 4.34: Fortsetzung von voriger Seite.

rungen liegen im Käfigvolumen nur sehr leicht unterhalb der Werte der Ausgangsproben. Bei 1000 K ist der Unterschied zu den Ausgangsproben kaum erkennbar. Für Atome mit moderaten Topologieänderungen ist für Ni kein Unterschied zu den Ausgangsproben zu erkennen, die Zr-Atome dagegen sind durch ein größeres Käfigvolumen ausgezeichnet. Für die Q_4-Parameter ergibt sich folgendes Bild: Der Wert von Q_4 für Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen liegt bei 700 K höher als der Wert der entsprechenden Ausgangskonfiguration, für 1000 K ist sowohl für die Ausgangsprobe als auch für die mobilen Atome (massive Topologieänderung) ein vergleichbarer Wert erkennbar. Die Q_4-Werte für die Atome mit massiven Topologieänderungen bei 700 K unterscheiden sich kaum von den Werten bei der entsprechenden Atomgruppe bei 1000 K. Die Atome mit moderaten Topologieänderungen liegen bei 700 K leicht, bei 1000 K deutlicher unterhalb der Werte der Ausgangsproben. Für Q_5 zeigen sowohl Ni als auch Zr einen gegenläufigen Trend. Beim Ni sind Atome mit $\lambda_i^{\mathrm{Zr}} > 3$ durch einen kleineren Wert charakterisiert als die entsprechenden Ausgangsproben, für Zr liegen die Werte gering-

fügig höher. Für Atome mit moderaten Topologieänderungen liegen die Q_5-Werte in etwa bei denen der Ausgangsproben. Die Q_6-Werte der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen liegen für 700 K und 1000 K unterhalb der jeweiligen Ausgangsprobenwerte. Ni-Atome mit moderaten Topologieänderungen haben bei 700 K ebenfalls einen etwas kleineren Wert, bei 1000 K ist er mit dem der Ausgangsprobe vergleichbar. Zr-Atome mit massiven Topologieänderungen haben hingegen geringfügig größere Q_6-Werte als die Ausgangsproben. Zr-Atome ohne Nachbarschaftsänderungen zeigen annähernd die Werte der Ausgangsproben. Die hydrostatischen Spannungen der Ni-Atome mit massiven Topologieänderungen liegen höher als bei den Ausgangsproben (bei 700 K stärker als bei 1000 K). Leicht geringere Werte zeigen dagegen Ni-Atome mit moderaten Topologieänderungen. Zr-Atome zeigen unabhängig von der stärke der Topologieänderungen kaum einen Unterschied in den φ_i^p-Werten im Vergleich zu den Ausgangsproben. Bei den Scherspannungen zeichnen sich Ni- und Zr-Atome mit massiven Topologieänderungen durch höhere Werte von φ_i^τ aus als für die jeweiligen Ausgangsproben gefunden, wohingegen Werte der Atome mit moderaten Topologieänderungen nahezu mit den Daten der Ausgangsproben übereinstimmen. Letzlich ist der Wendt-Abraham-Parameter für die Atome mit massiven Topologieänderungen deutlich gegenüber dem Wert der Ausgangsproben vergrößert, Atome ohne besondere Nachbarschaftsänderungen zeigen dagegen auffällig geringere Werte für R_{WA}.

Die Auswirkungen des Übergangs in den Fließzustand werden durch die Simulation von Nachverformungen deutlich. Dabei wird in den Kriechversuchen ersichtlich, dass die Änderungen der Struktur für geringe Dehnungen kaum ausreichen um eine leichtere Verformbarkeit zu ermöglichen, wohingegen mit Dehnungen bis über die Streckgrenze hinaus ein leicht weiterzuverformender Zustand resultiert. Bei Weiterverformung nach Vorverformung und Entlastung verschwindet im dynamischen Scherversuch die obere Streckgrenze sowohl bei Weiterverformung in der ursprünglichen Richtung als auch bei Umkehr der Richtung. Das ist ein klares Indiz für den Übergang in den Fließzustand. Wird während eines dynamischen Scherversuchs die Verformungsebene geändert (z. B. von xy nach zx), ist das Phänomen einer oberen Streckgrenze in deutlich schwächerer Form gegeben als für die unverformte Probe im Scherversuch.

Die Befunde lassen sich anhand der Betrachtung der Topologieänderungen in der Zelle verstehen. Offensichtlich sind es mit hoher Wahrscheinlichkeit die Bereiche der Probe, die bereits bei der Vorverformung in den Fließzustand übergegangen sind, welche bei den Nachverformungen erneut angeregt werden. In diesem Zusammenhang soll hier ein wichtiger Befund noch einmal aufgegriffen werden. Aus der Analyse der bedingten Wahrscheinlichkeit für die Verformung mit Scherebenenwechsel (Prozess 3, Abschn. 4.4.2) ergibt sich, dass ein großer Teil der Atome, die bei der Verformung vor dem Ebenenwechsel Umlagerungen erfahren, dies auch nach der Änderung der Verformungsebene tun. Genauso zeigen Atome ohne große Topo-

logieänderungen mit hoher Wahrscheinlichkeit wieder nur mäßige Nachbarschaftsänderungen. Allerdings kommen Prozesse in anderen Bereichen der Zelle hinzu, die bei der Analyse der bedingten Wahrscheinlichkeiten nicht berücksichtigt werden, sich aber in der Korrelationsanalyse der Größe $\bar{\lambda}_i^{\mathrm{Zr}}$ durch einen relativ geringen Wert für die Korrelationskoeffizienten bemerkbar machen. Daraus resultiert die Verringerung des Werts der oberen Streckgrenze (verglichen mit einer unverformten Probe) für Prozess 3 im Gegensatz zum völligen Verschwinden bei den Nachverformungen nach Prozess 1 oder 2, bei denen keine neuen Bereiche der Probe verformungsinduzierte Strukturänderungen zu erfahren brauchen.

5. Simulationen zur Langzeit-Relaxation

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit Langzeitsimulationen in der Größenordnung von nominell 1 µs. Ausgangspunkt für die Simulationen sind im dynamischen Scherversuch unterschiedlich stark vorverformte Konfigurationen.

5.1. Vorbemerkungen

Anhand der Spannungs-Dehnungs-Kurven kann ein Übergang der Probe von einem schwer verformbaren Ausgangszustand hin zu einem sehr viel leichter verformbaren *Fließzustand* beschrieben werden. Im Ausgangszustand steigt die Spannung mit zunehmender Dehnung deutlich an, im Fließzustand läuft die Verformung mit nahezu konstanter Spannung ab. Die Charakterisierung bezieht sich auf Größen wie die potenzielle Energie pro Atom, den Wendt-Abraham-Parameter oder, wie z. B. in [39, 40], anhand einer geänderten Fluktuationsdynamik. Der Fließzustand ist dabei durch eine deutlich höhere potenzielle Energie pro Atom, einen höheren Wendt-Abraham-Parameter und eine deutlich stärkere strukturelle Relaxation gekennzeichnet. Die modifizierte strukturelle Relaxation wird dabei aus dem Zerfall der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion einer unverformten und einer vorverformten Probe und deren Vergleich erkennbar [40].

In Kapitel 4 wird neben den charakteristischen Merkmalen des makroskopischen Verformungsverhaltens über die bisherigen Befunde [39, 40] hinaus mit Hilfe bestimmter für jedes Atom einzeln zu berechnender Eigenschaften gezeigt, dass der Übergang in den Fließbereich durch lokale Topologieänderungen verläuft. Bereiche, die durch massive Topogieänderungen beim Durchlaufen der Streckgrenze gekennzeichnet sind, lassen sich in ihren atomaren charakteristischen Eigenschaften (atomare pot. Energie, atomare Käfigvolumina usw.) von den Bereichen unterscheiden, die keine so stark ausgeprägten Topologieänderungen zeigen. In diesem Bild handelt es sich um einen sehr heterogenen Übergang in den Fließbereich, wobei die Stärke der Lokalisierung mit abnehmender Temperatur zunimmt.

Hier soll es darum gehen, zeitliche Änderungen bestimmter Eigenschaften des Fließzustands bei Langzeitrelaxationen zu untersuchen. Hintergrund dabei ist die Frage, wie sich die simulierte Probe nach einer starken Verformung, d. h. nach Eintritt in Fließzustand, wieder dem Ausgangszustand annähert.

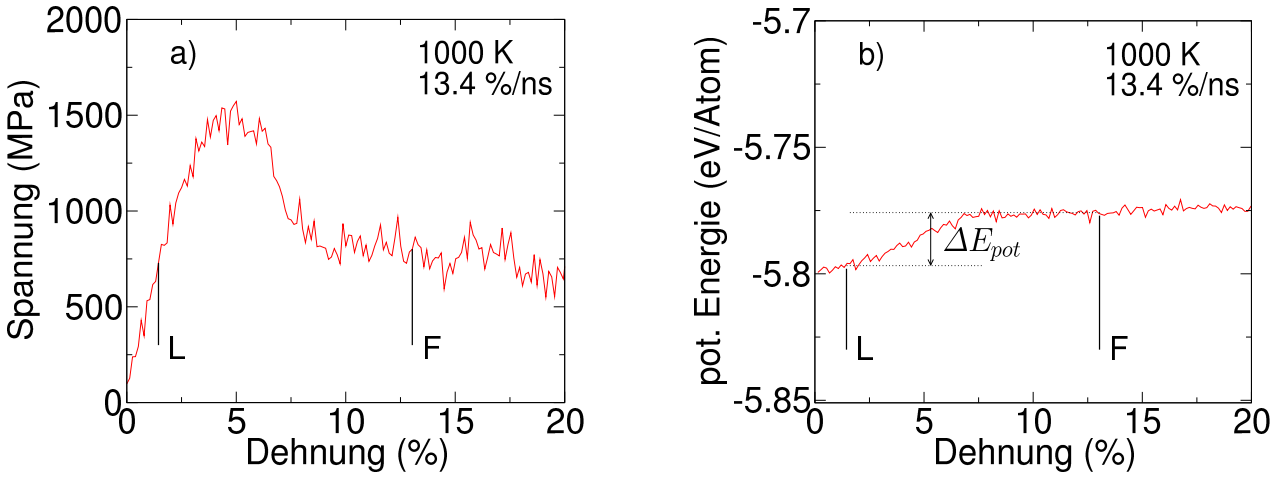

Abbildung 5.1: a) Spannungs-Dehnungs-Kurve für $\dot{\epsilon} = 13.4$ %/ns. Konfigurationen aus dem linearen Bereich (L) und dem Fließbereich (F) dienen als Ausgangskonfigurationen für die Langzeitrelaxationen. b) Verlauf der potenziellen Energie pro Atom bei der Scherung nach a). ΔE_{pot} gibt den Unterschied in den potenziellen Energien der beiden Ausgangskonfigurationen an.

5.2. Startkonfigurationen der Langzeitsimulationen

Ausgangspunkt für die Langzeitsimulationen sind im dynamischen Scherversuch verschieden stark vorverformte Konfigurationen. Ähnlich wie bei den Simulationen zum Kriechen unter vorgegebener Last (Abschnitt 4.4.1) wird eine schwach verformte, aus dem elastischen Bereich der Spannung-Dehnungs-Kurve stammende Konfiguration gewählt und eine, die bis in den Fließbereich hinein verformt wird. Abbildung 5.1 a) demonstriert die Auswahl zweier Referenzkonfigurationen L (linearer Bereich) und F (Fließbereich) aus einer Scherung ($N = 5184$) mit $\dot{\epsilon} = 13.4$ %/ns bei 1000 K. Abbildung 5.1 b) zeigt den Verlauf der potenziellen Energie für die Scherung aus Abb. 5.1 a). Die so gewählten Konfigurationen unterscheiden sich in ihrer potenziellen Energie um einen Betrag von $\Delta E_{pot} \approx 0.02$ eV/Atom. Sie dienen als Startkonfigurationen für isotherm-isobare Langzeitsimulationen. Weitere Startkonfigurationen werden aus Simulationen der kleinen Systeme (5184 Atome) bei 700 K und 810 K genommen, für die im Einzelnen gilt:

700 K L: vorverformt bis 2 %, E_{pot}: -5.84247 eV/Atom. F: vorverformt bis 20 %, E_{pot}: -5.81431 eV/Atom. Differenz $|\Delta E_{pot}| \approx 0.028$ eV/Atom.

810 K L: vorverformt bis 2.5 %, E_{pot}: -5.82374 eV/Atom. F: vorverformt bis 26.4 %, E_{pot}: -5.79828 eV/Atom. Differenz $|\Delta E_{pot}| \approx 0.025$ eV/Atom.

1000 K L: vorverformt bis 1.4 %, E_{pot}: -5.796 eV/Atom. F: vorverformt bis 13.0 %, E_{pot}: -5.77614 eV/Atom. Differenz $|\Delta E_{pot}| \approx 0.02$ eV/Atom.

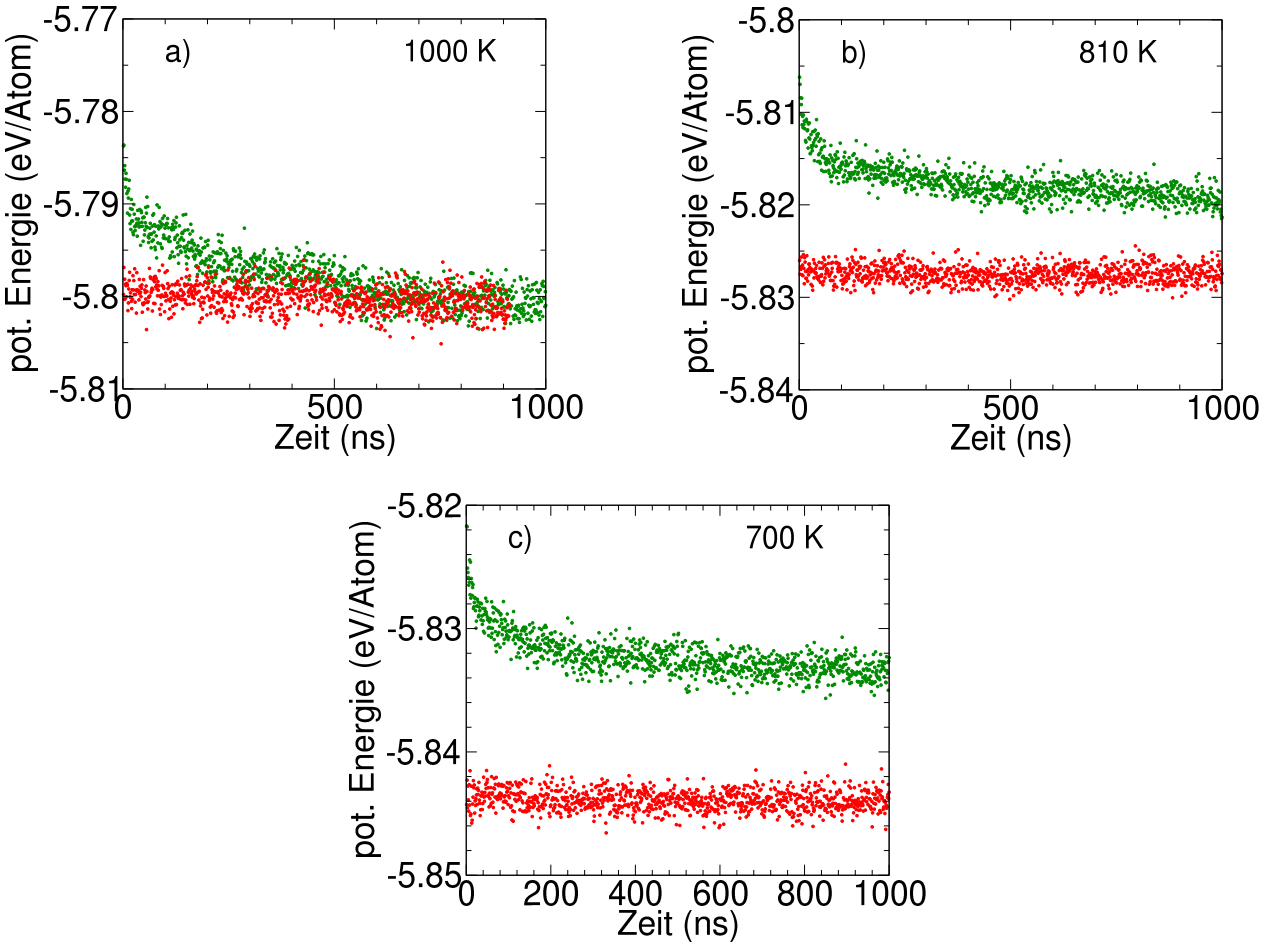

Abbildung 5.2: Zeitliche Entwicklung der potenziellen Energie für die Ausgangsproben L (rot) und F (grün) bei a) 1000 K, b) 810 K und c) 700 K.

5.3. Ergebnisse der Langzeitsimulationen

Es liegen Daten der Langzeitsimulation der Konfigurationen aus dem linearen Bereich (L) und dem Fließbereich (F) über eine nominelle Zeit von 1.0 µs vor. Im Folgenden sollen einige Ergebnisse kurz dargestellt werden.

5.3.1. Zeitliche Entwicklung der potenziellen Energie

Die potenzielle Energie ist eine für das System leicht zu berechnenden Größe. Abbildung 5.1 b) verdeutlicht anhand des Verlaufs der potenziellen Energie bei einer simulierten Scherung, dass diese für den Fließzustand deutlich höher ist als für den schwach- bzw. unverformten Zustand.

Die zeitliche Entwicklung der potenziellen Energie ist für beide Ausgangszustände (L und F) unterschiedlich, und ist in Abbildung 5.2 a) bis c) für die drei Temperaturen gezeigt. Für alle drei Temperaturen ist der Verlauf der potenziellen Energie für die Probe L mehr oder we-

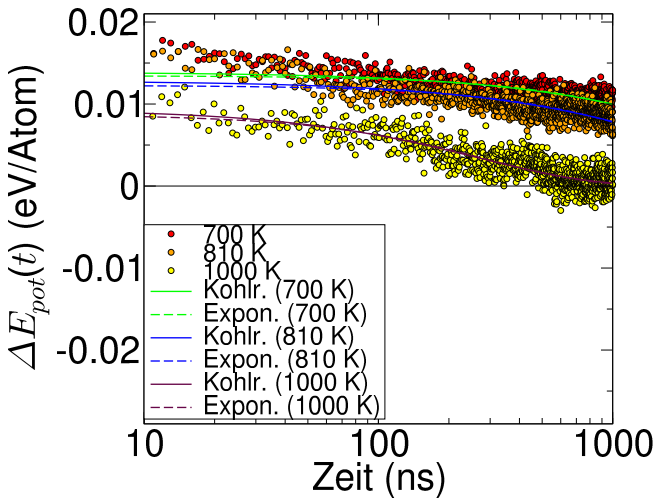

Abbildung 5.3: Verlauf von ΔE_{pot} gegen die Zeit für 700 K (rot), 810 K (orange) und 1000 K (gelb). Zusätzlich sind die angepassten Funktionen eingezeichnet: Kohlrauschfunktion (Gl. (5.1), durchgezogen), Exponentialfunktion (Gl. (5.2), gestrichelt).

niger konstant. Im Vergleich dazu zeigen die Daten der Proben aus dem Fließbereich eine sich über die Zeitskala der Simulation erstreckende Energierelaxation, bei der die deutlich höhere Energie des Fließzustands allmählich verringert wird. Geprägt ist der Abfall der potenziellen Energie der Proben aus dem Fließbereich (F) für alle drei Temperaturen durch eine extrem schnelle Verringerung der Energie innerhalb der ersten wenigen Nanosekunden. Darauf folgt ein etwas moderaterer Abfall in der potenziellen Energie. Für 1000 K reicht die Zeit von 1 µs aus, um die Unterschiede in den potenziellen Energien beider Ausgangsproben zu eliminieren. Im Gegensatz dazu zeigen sowohl die Daten für 810 K als auch für 700 K noch keine vollständige Energierelaxation.

Zum Abschätzen einer charakteristischen Relaxationszeit wird die Differenz beider Energien $\Delta E_{pot}(t) = E^{\mathrm{F}}_{pot}(t) - E^{\mathrm{L}}_{pot}(t)$ betrachtet[1]. In Abbildung 5.3 ist der Verlauf von $\Delta E_{pot}(t)$ für die drei Temperaturen in einem Zeitfenster von 10 ns bis 1000 ns abgebildet. Die Daten für 1000 K fallen innerhalb des betrachteten Zeitintervals auf Null ab, bei 810 K und 700 K bleibt die Differenz positiv. Die eingezeichneten Kurven sind Anpassungen der Datenpunkte im Bereich 10 ns bis 1000 ns an zwei verschiedene funktionale Abhängigkeiten: Einerseits wird eine Kohlrauschfunktion, Gl. (5.1), verwendet (durchgezogen), zum anderen ein einfacher expontentieller Zerfall, Gl. (5.2) (gestrichelt).

$$f_K(x) = a \cdot \exp\left(-(x/\tau_K)^{\beta}\right) \tag{5.1}$$

$$f_E(x) = b \cdot \exp\left(-(x/\tau_E)\right) \tag{5.2}$$

[1] $E^{\mathrm{L}}_{pot}(t)$ wird durch lineare Regression approximiert. Die Regressionsgerade wird dann von $E^{\mathrm{F}}_{pot}(t)$ abgezogen.

Tabelle 5.1: Werte für a, b, τ_K, τ_E und β der Gleichungen (5.1) und (5.2) für die Anpassung an die Daten von $\Delta E_{pot}(t)$.

	Kohlrauschfkt.			Exponentialfkt.	
T (K)	a (eV/Atom)	β	τ_K (ns)	b (eV/Atom)	τ_E (ns)
700	0.0139(2)	0.80(8)	4039(500)	0.0134(1)	3313(113)
810	0.0128(3)	0.80(8)	2461(168)	0.0122(1)	2199(66)
1000	0.0093(4)	0.89(6)	267(17)	0.0087(2)	295(8)

Beim Anpassen der funktionanlen Abhängigkeiten führt der Algorithmus (NL2SOL [175]) beim exponentiellen Verlauf (Gl. (5.1)) für alle drei Temperaturen und für den gestreckt exponentiellen Verlauf (Gl. (5.2)) für 1000 K bereits nach wenigen Iterationen zur Konvergenz. Die Daten für 700 K und 810 K lassen sich ohne Einschränkung des Parameterbereichs nicht sinnvoll anpassen. Daher wird auf Grundlage der Anpassung bei 1000 K der Parameter β für die Anpassungen bei den geringeren Temperaturen nach unten beschränkt. Für 700 K und 810 K konvergiert die Anpassung erst nach erreichen der unteren Grenze für β, die hier zu 0.8 gewählt wird. Die Anpassparameter sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

Die Anpassung des exponentiellen sowie des gestreckt exponententiellen Verlaufs ist für die vorliegenden Daten gleich gut geeignet. Abweichung bei Zeiten kleiner als 50 ns (besonders auffällig bei 700 K und 810 K) sind durch schnelle Abklingprozesse in diesem Zeitbereich gegeben. Unter Annahme der funktionalen Abhängigkeiten (Gln. (5.1) bzw. (5.2)) ergeben sich Relaxationszeiten zwischen 200 ns und 300 ns für 1000 K, für 810 K bereits knapp zehn mal so hohe Werte. Bei 700 K findet man Relaxationszeiten von $\approx$ 3.5 ns bis 4 µs (Exponentialfunktion bzw. Kohlrauschfunktion).

5.3.2. Zeitliche Entwicklung des Systemvolumens

Die Vorverformung, aus deren Simulation die Ausgangsproben für die Langzeitsimulationen genommen werden, findet als strikt isochore Scherung statt. Die hier dargestellten isobar-isothermen Langzeitsimulationen bedingen Fluktuationen im Volumen, da der Barostat Solldruckeinstellungen durch Variation der Boxlängen sowie der Atompositionen durchführt (vgl. Abschn. 3.3).

In Abbildung 5.4 wird die zeitliche Entwicklung des Volumens der beiden Proben (L und F) für die drei Temperaturen gezeigt. Das Gesamtvolumen ist normiert auf das Volumen, welches bei der isochoren Scherung vorliegt. Für 700 K, 810 K und 1000 K sind das 100.0531 nm^3, 100.2555 nm^3 und 100.6266 nm^3. Die Simulationen, die den Daten der als *abgeschreckt* bezeichneten Kurven zugrunde liegen, werden in Abschnitt 5.4 genauer beschrieben.

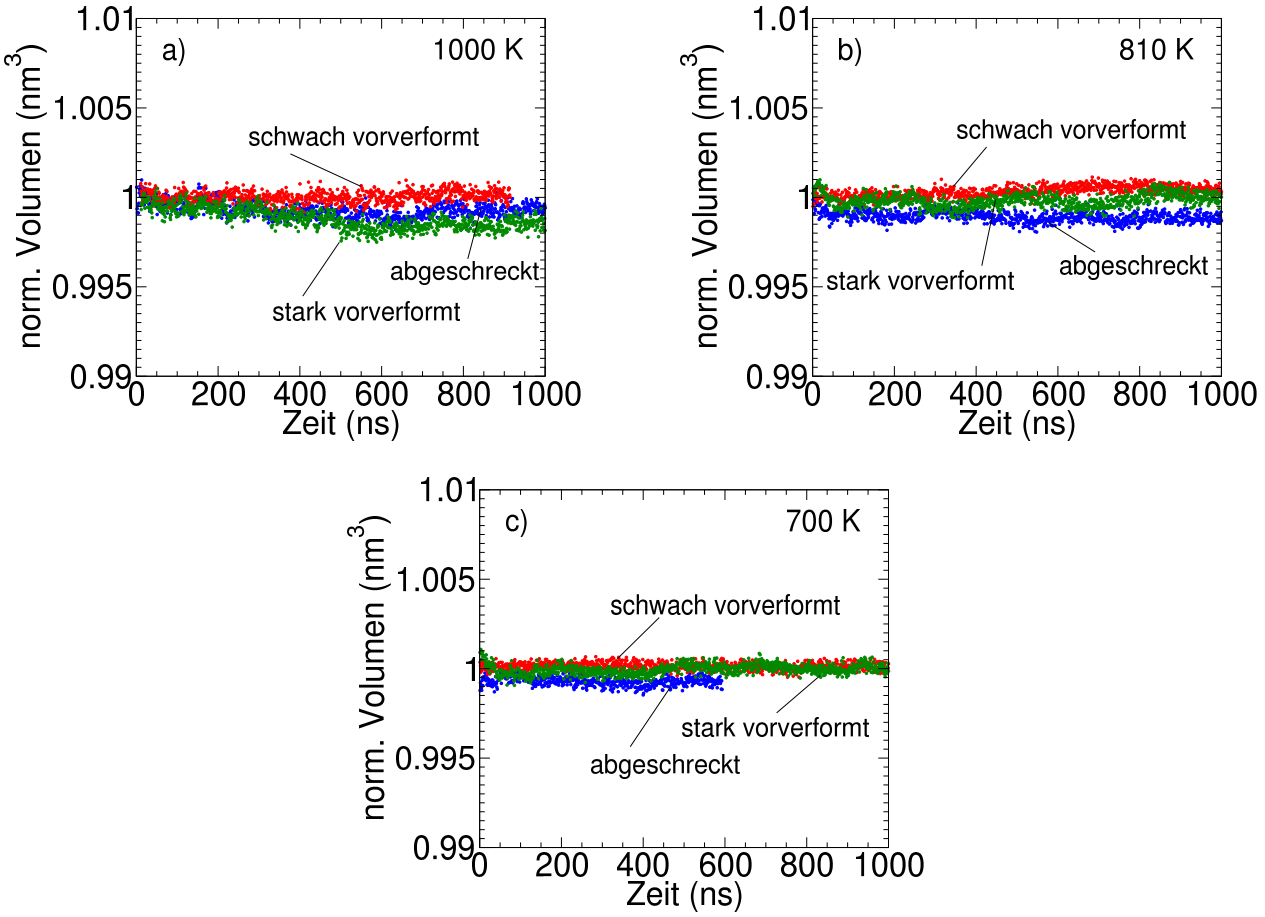

Abbildung 5.4: Zeitliche Entwicklung des normierten Volumens für die Ausgangsproben L (rot) und F (grün) bei a) 1000 K, b) 810 K und c) 700 K. Die mit *abgeschreckt* bezeichneten Verläufe gehören zu Simulationen, die in Abschn. 5.4 beschrieben sind.

Sowohl für 1000 K, 810 K und 700 K zeigen die Volumendaten für die jeweils aus dem linearen Bereich stammende Ausgangskonfiguration ein mehr oder weniger konstanten, beim Wert 1 liegenden Verlauf für das nomierte Volumen. Die Streuung in den Daten weist auf Volumenfluktuationen in der Größenordnung 0.05 % bis 0.1 % hin. Der Verlauf des normierten Volumens der F-Proben ist für 1000 K qualitativ von dem für die beiden geringeren Temperaturen zu unterscheiden. Fällt der Wert bei 1000 K auf einer Zeitskala von etwa 600 ns allmählich auf einen Wert unterhalb von 1 ab (Verringerung des Volumens um etwa 0.15 % bis 0.2 %), bleibt das normierte Volumen bei 700 K und 810 K nach 1 µs beim Wert von 1. Dennoch zeigen die Verläufe der niedrigeren Temperaturen Schwankungen: für sehr kleine Zeiten (< 50 ns) liegt ein geringfügig höherer Wert vor (knapp 0.1 % größeres Volumen), der dann wiederum auf einen Wert unterhalb von 1 abfällt. Auf der Zeitskala der Simulation schwankt das normierte Volumen dann leicht um den Wert 1 (bei 810 K deutlich ausgeprägter).

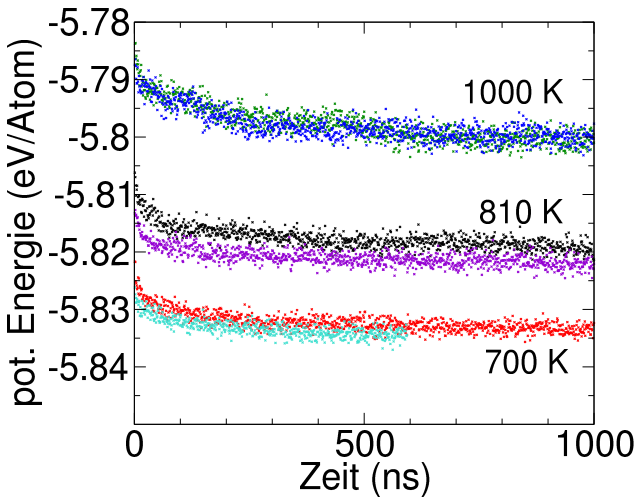

Abbildung 5.5: Zeitliche Entwicklung der potenziellen Energie für die Ausgangsproben aus dem Fließbereich (grün, schwarz, rot) im Vergleich mit den Daten für die auf 1000 K, 810 K und 700 K abgeschreckte Schmelzkonfiguration (blau, violett, türkis).

5.4. Vergleich mit Daten von abgeschreckten Hochtemperaturkonfigurationen

Die potenzielle Energie im Fließzustand ist gegenüber der im Ausgangszustand stark erhöht. Ursache sind strukturelle Unterschiede zur Ausgangsprobe, die sich im Verlauf der Verformung aufbauen. In [40] wird der Wendt-Abraham-Parameter als skalares Maß zur Beurteilung der Nahordnung im System verwendet wird, und es wird gezeigt, dass die Struktur im Fließzustand vergleichbar ist mit der einer Konfiguration einer Gleichgewichtsschmelze bei einer deutlich höheren Temperatur.

In diesem Abschnitt wird das Relaxationsverhalten einer bei 1200 K equillibrierten Konfiguration betrachtet, die jeweils instantan auf 700 K, 810 K und 1000 K abgeschreckt wird. Die potenzielle Energie der Schmelzkonfiguration liegt bei ≈ -5.75115 eV/Atom. Im Vordergrund hier steht der Vergleich der zeitlichen Entwicklung der potenziellen Energie der abgeschreckten Hochtemperaturkonfigurationen mit dem Verhalten der bis in den Fließbereich verformten Konfigurationen.

5.4.1. Zeitliche Entwicklung der potenziellen Energie

Abbildung 5.5 zeigt den Verlauf der potenziellen Energien verschiedener isobar-isothermer Simulationen über nominell 1 µs Systemzeit. Dargestellt ist der bereits in Abschnitt 5.3.1 gezeigte Verlauf der Konfigurationen aus dem Fließbereich (grün, schwarz, rot) und der durch Abschrecken einer Schmelzkonfiguration auf die jeweilige Temperatur erhaltene (blau, violett, türkis).

Bei 1000 K lässt sich zwischen den beiden Verläufen kein wesentlicher Unterschied erkennen. Die Energierelaxation ist in beiden Fällen nahezu identisch. Für 810 K und 700 K fällt auf, dass die Energie der Schmelzkonfiguration nach Abschrecken auf die jeweilige Temperatur für 810 K etwas unterhalb der der Probe aus dem Fließzustand ist. Bei 700 K unterscheidet sich die Energie der abgeschreckten Probe weniger stark von derjenigen der Probe aus dem Fließbereich als bei 810 K, aber auch hier liegt sie etwas niedriger.

5.4.2. Zeitliche Entwicklung des Volumens

Das Langzeitverhalten des Gesamtvolumens der von 1200 K auf die jeweilige Simulationstemperatur abgeschreckten Probe ist in die Abbildung 5.4 auf Seite 131 eingefügt. Wie für die Darstellungen dort, wird auch das Volumen der abgeschreckten Konfigurationen auf das Volumen bezogen, welches den Verformungssimulationen zugrunde liegt, aus denen die Proben L und F genommen werden (vgl. Abschn. 5.3.2).

Auch wenn keine besondere Beziehung zwischen den Volumina der von 1200 K abgeschreckten Konfigurationen und denen aus dem Fließbereich besteht, liegen die normierten Volumina für die abgeschreckten Proben für die drei Temperaturen nahe beim Wert 1. Für 1000 K ist der Verlauf des normierten Volumens der abgeschreckten Probe nahezu identisch mit dem Verlauf des Volumens der Probe aus dem Fließbereich. Auch die abgeschreckte Probe für 1000 K verringert ihr Volumen innerhalb der ersten 600 ns (normiertes Volumen kleiner als eins) um dann bei einem relativ konstanten Wert (knapp 0.05 % bis 0.1 % geringeres Volumen als bei der Verformung) zu bleiben.

Bei 810 K und 700 K liegt bereits zu Anfang der Langzeitsimulation der abgeschreckten Probe ein geringfügig kleinerer Wert als 1 vor. Für 810 K ist der Unterschied stärker als für 700 K (vgl. auch die Startwerte der potenziellen Energie, Abschn. 5.4.1). Trotz dieses anfänglichen Unterschieds, zeigt die Langzeitentwicklung des Volumens ansonsten einen Verlauf in qualitativer Übereinstimmung mit dem Verlauf der jeweiligen Fließbereichskonfigurationen.

5.5. Abschließende Bemerkungen

Die potenzielle Energie einer Konfiguration ist als Maß für Strukturunterschiede gut geeignet. Treten verformungsinduzierte strukturelle Änderungen auf, kann mit Hilfe der Energieentwicklung abgeschätzt werden, wie schnell die geänderte Struktur relaxiert. In den isobar-isothermen Simulationen hängt das im Wesentlichen von der strukturellen Relaxationszeit bei der entsprechenden Temperatur ab, die für 700 K sehr viel größer ist als beispielsweise für 1000 K ($T_g \approx 1050$ K).

Das Systemvolumen zeigt kaum nennenswerte Variation über den Zeitbereich der Simulationen, womit ein Einfluss von Volumenänderungen auf die Energierelaxation ausgeschlossen werden kann. Die leichten Schwankungen im Volumen sind die Folge des Anschaltens eines Barostats bei den hier dargestellten isobar-isothermen Simulationen. Die Probe im Fließzustand ist durch Spannungen innerhalb der Zelle in den einzelnen Raumrichtungen gekennzeichnet, die der Barostat durch Variation der Boxlängen und Atompositionen ausgleicht. (Die hier durchgeführten Langzeitsimulationen laufen ohne zusätzliche Druck- oder Zugbeiträge in den einzelnen Raumrichtungen ab.)

Es soll an dieser Stelle noch einmal eine ähnliche Langzeitsimulation vorgestellt werden, die ohne das Anschalten eines Barostats druchgeführt wird. Dazu werden die Verformungssimulationen wie üblich durchgeführt, wobei die Scherrate bei einer festen Dehnung (nach der Streckgrenze) auf 0 %/ns gesetzt wird. Das Probenvolumen bleibt dann per Definition für die folgende Zeit konstant.

Abbildung 5.6 zeigt Resultate für die Langzeitentwicklung der Dehnung und der potenziellen Energie für die Simulation eines dynamischen Scherversuchs mit Umschalten der Scherrate von 10 %/ns auf 0 %/ns nach nominell 2 ns (20 % Dehnung) für ein kleines System bei 700 K und 1000 K. In Teil a) ist der Verlauf der Dehnung für die hier beschriebene Prozessführung gezeigt, die für beide Temperaturen gleich ist. In b) wird die Langzeitentwicklung der potenziellen Energie dieser Simulationen zusammen mit den Daten der in Abschnitt 5.3.1 beschriebenen isobar-isothermen Langzeitsimulationen der Proben (F) abgebildet. Man erkennt,

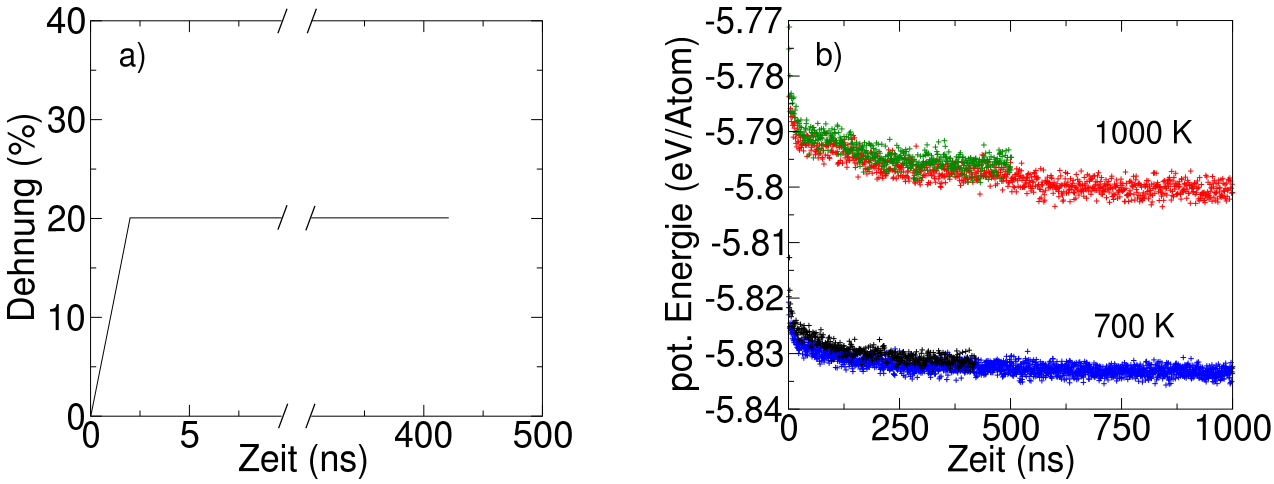

Abbildung 5.6: a) Zeitliche Entwicklung der Dehnung für eine Simulation mit Scherratenreduzierung von 10 %/ns auf 0 %/ns nach nominell 2 ns. b) Zeitliche Entwicklung der potenziellen Energie (Energierelaxation) für die Simulationen mit Anhalten der Scherung nach 20 % Dehnung für 700 K (schwarz) und 1000 K (grün). Zusätzlich sind die Verläufe der Energierelaxation von isobar-isothermen Simulationen der F-Proben (vgl. Abschn. 5.2) eingezeichnet: 700 K (blau), 1000 K (rot).

dass sowohl für 700 K als auch für 1000 K kein qualitativer Unterschied in den Kurven der Energierelaxation zu sehen ist. Auch wenn die Kurven für die hier beschriebene Prozessführung nur knapp halb so lang sind wie die vorher gewonnenen, kann hier mit gutem Recht davon ausgegangen werden, dass die Kurvenverläufe auch für die weiteren 500 ns keine wesentlichen Unterschiede aufweisen werden. Das unterstreicht den äußerst geringen Einfluss der zwar sichtbaren, aber dennoch relativ geringen Volumenänderungen, die in Abb. 5.4 gefunden werden.

Die Ergebnisse der Langzeitsimulationen abgeschreckter Hochtemperaturkonfigurationen stimmen mit denen für die Proben aus dem Fließzustand überein. Damit lässt sich der Befund aus [39, 40], nämlich dass der Fließzustand vergleichbar ist mit dem Zustand einer Gleichgewichtsschmelze bei einer deutlich höheren Temperatur (hier $\approx$ 1200 K), in gewisser Weise zusätzlich erhärten. Es sei jedoch an dieser Stelle betont, dass gerade für die geringen Temperaturen eine sehr heterogene Verteilung von strukturell verschiedenen Bereichen gefunden wird, die sich in so drastischer Weise kaum in der homogenen 1200 K-Schmelze einstellen wird. Wir kommen darauf bei der Diskussion zur Deutung der Spannungs-Dehnungs-Kurve zurück.

6. Diskussion der Ergebnisse

Dieses Kapitel fasst zunächst das mechanische Verhalten des in dieser Arbeit untersuchten $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Modells zusammenfassen. Danach werden die Befunde in Bezug zu ausgewählten Aspekten der Literatur gesetzt.

6.1. Verformung im amorphen $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$

Die Verformung eines $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Glases wird durch Verformung eines periodisch wiederholten orthorombischen Basisvolumens (mit 5184 und 17500 Atomen in der Zelle) modelliert. Die Simulationen sind als reine biaxiale Scherungen ausgelegt, wobei die vorgegebenen Scherraten dadurch realisiert werden, dass die Kantenlängen des Basisvolumens sowie die Atompositionen in dem Basisvolumen entsprechend skaliert werden. In früheren Arbeiten [39, 40] zeigt das $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Modellsystem in diesem Verformungsmodus bei 810 K und 1000 K ($T_g = 1050$ K [37]) sehr charakteristische Spannungs-Dehnungs-Kurven. Diese haben einen linearen Anstieg bei geringen Dehnungen, einen ausgeprägten Streckgrenzenbereich mit einem deutlichen Überschießen der Spannung, gefolgt von einer starken Dehnungserweichung. Letztere markiert den Übergang in den bei nahezu konstanter Spannung weiterverformbaren *Fließzustand*. In [40] wird der Fließzustand als ein durch die Verformung getriebener stationärer Zustand angesehen, der sich strukturell und dynamisch vom Ausgangszustand unterscheidet. Unter anderem zeigt er eine höhere potenzielle Energie pro Atom, eine modifizierte Fluktuationsdynamik und eine deutlich reduzierte Viskosität.

Um die strukturellen Änderungen innerhalb der Probe zu lokalisieren, und damit — über die Befunde in [39, 40] hinaus — Aussagen über den möglichen Verlauf des Übergangs in den Fließzustand zu machen, werden in dieser Arbeit die durch die Atompositionen gegebene Topologie und insbesondere deren Änderung betrachtet. Dies begründet sich aus der Notwendigkeit, ein Maß zu finden, welches unabhängig von der Formänderung der Zelle solche Atombewegungen detektiert, die für die bleibende Verformung im System verantwortlich sind.

In sehr gut ausgelagerten Systemen — Auslagerungszeit ca. 1 µs — bei 700 K[1] treten bei Verformungen bis zur oberen Streckgrenze nur moderate, räumlich homogene atomare Umlagerungen auf. Viele sind reversibel und können als (an)elstische Beiträge angesehen werden. Die starke Dehnungserweichung, deutlich beim Rückgang der Spannung von der oberen zur

[1] Die Kauzmann-Temperatur für unser $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System ist $T_K = 750$ K [37].

unteren Streckgrenze in den Spannungs-Dehnungs-Kurven, kann einer steigenden Anzahl von lokalen atomaren Umlagerungen zugeschrieben werden, denen insbesondere die Zr-Matrix unterliegt. Diese Umlagerungen liegen räumlich heterogen in einer Ebene maximaler Scherspannungen der Simulationszelle. In der akkumulierten Darstellung der Einzelereignisse wird die Bildung eines (Mikro-)Scherbandes erkennbar.

Die Erhöhung der Temperatur und die Verringerung der Scherrate hat Einfluss auf die Lokalisierung der Bereiche mit starken Atomumlagerungen: Bei 1000 K (T_g = 1050 K) fehlt aufgrund einer gestiegenen Anzahl thermisch aktivierter Umlagerung die Tendenz zur Spannungslokalisierung, welche für atomare Umlagerungen verantwortlich ist. Daraus resultiert eine wenig strukturierte Ausbildung von Bereichen mit massiven Topologieänderungen, die sehr schnell den gesamten Bereich der Simulationszelle ausfüllen.

Eine statistische Analyse zeigt, dass Bereiche mit massiven Topologieänderungen gegenüber Bereichen ohne starke Topologieänderung nicht nur durch dynamische Unterschiede (atomare Umlagerungen) charakterisiert sind, sondern dass sich beide Bereiche zusätzlich signifikant in atomaren Größen wie der potenziellen Energie, der Käfigvolumina, den Ordnungsparametern und der Spannungsmaße unterscheiden.

Durch den Vergleich der atomaren Charakteristika der unterschiedlichen Atomgruppen mit den Werten der atomaren Eigenschaften der Ausgangsproben kann der Schluss gezogen werden, dass Bereiche mit massiven Topologieänderungen, insbesondere die bei geringen Temperaturen auftretenden Mikroscherbänder, als Bereiche angesehen werden können, die in den Fließzustand übergegangen sind. Der Übergang in den Fließbereich zeigt daher einen für geringere Temperaturen stärkeren, heterogenen Charakter.

Nachverformungen belegen die bereits in [39, 40] gefundene Abnahme der Viskosität der Struktur, wenn das System weit genug (bis in den Fließbereich) gedehnt wird: Die ausgeprägte Streckgrenze im dynamischen Scherversuch verschwindet. Kriechexperimente für Referenzkonfigurationen aus dem Fließbereich zeigen eine starke Dehnung verglichen mit den Konfigurationen aus dem linearen (nur (an)elastisch verformten) Bereich der Spannungs-Dehnungs-Kurve. Bei den Nachverformungen mit konstanter Scherrate spielt es keine Rolle, ob das System entlastet und wieder in der gleichen Richtung wie zuvor verformt wird, oder in der entgegengesetzten. Da das System bereits im Fließzustand ist, ist bei der Nachverformung keine ausgeprägte Streckgrenze zu erkennen. Auch bei den Simulationen mit geänderter Zug- und Druckrichtung (und damit einer Änderung der Verformungsebene) ist eine starke Verminderung des Spannungsmaximums zu erkennen, woraus folgt, dass die an der Vorverformung beteiligten Bereiche ebenfalls wieder bei der Nachverformung mitwirken. Quantitative Analysen belegen die Befunde und zeigen, dass lokale Verformungen bei geringeren Temperaturen stärker begrenzt bleiben als bei höheren Temperaturen, wo Relaxationsprozesse in der Umgebung durch eine erhöhte thermische Aktivierung vermehrt auftreten können.

Durch Betrachtung des Abfalls der durch Verformung hervorgerufenen erhöhten potenziellen Energie des Gesamtsystems lassen sich Zeitskalen bestimmen, die nötig sind, um die Störung der Struktur rückgängig zu machen. Diese liegen bei 1000 K im Bereich einiger hundert Nanosekunden und sind damit in der der Simulation zugänglichen Zeit auflösbar. Für die geringen Temperaturen (700 K und 810 K) liegen deutlich längere Zeiten für den Ausgleich der Strukturänderungen vor. Diese können somit in der hier zugänglichen nominellen Zeit von 1 µs nur unvollständig ablaufen.

6.2. Phänomenologie der Spannungs-Dehnungs-Kurven

Die Spannungs-Dehnungs-Kurven des in dieser Arbeit betrachteten $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Modellsystems (Abb. 4.1, Seite 56) zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell für metallische Gläser gefundenen Kurven. Dabei ist nicht nur die Form als solche vergleichbar, sondern die nominellen Werte für Streckgrenze und Fließspannung liegen in der gleichen Größenordnung. Das auffälligste Merkmal, die ausgeprägte Streckgrenze, findet sich für verschiedene metallene Gläser wie u. a. $Pd_{0.2}Si_{0.8}$ [28], $Zr_{0.65}Al_{0.1}Ni_{0.1}Cu_{0.15}$ [176, 177] oder $Pd_{0.4}Ni_{0.1}Cu_{0.3}P_{0.2}$ [178], wird aber auch für andere Materialien, wie kristalline Legierungen [179], Quasikristalle [180], anorganische oxidische Gläser [181], amorphe Polymere [182] oder Beton [183], gefunden. In qualitativer Übereinstimmung mit den Experimenten (z. B. [176]) zeigt unser System unter anderem eine Abnahme der obereren Streckgrenze und der Fließspannung mit zunehmender Temperatur (Abschn. 4.2.1) und eine Zunahme der oberen Streckgrenze mit zunehmender Scherrate bei fester Temperatur (Abschn. 4.2.2, vgl. dazu die Experimente von Kato *et al.* [178]). Die Simulation großer Systeme (vgl. Abschn. 4.2.4, Abb 4.5 a) - d), Seite 61) führt auf kleinere Werte der Streckgrenze als die kleiner Systeme. Dies spiegelt eine Eigenschaft der Gläser wider, die ebenfalls experimentell gefunden wird: Je geringer der Relaxationsgrad ist, desto geringer ist die Ausprägung der Streckgrenze. Zum Beispiel zeigen Verformungen eines frisch abgeschreckten $Pd_{0.4}Ni_{0.1}Cu_{0.3}P_{0.2}$-Glases ein deutlich geringeres Überschießen in der Spannung als ein ausgelagertes Glas dieser Zusammensetzung [168]. In unseren Simulationen sind die großen Systeme deutlich kürzer als die kleinen ausgelagert. Die potenzielle Energie, die ein sensitives Maß für den strukturellen Relaxationsgrad ist, liegt bei den großen Ausgangsproben höher als bei den kleinen, vgl. Abb. 3.6 b) auf Seite 33. Daraus kann gefolgert werden, dass die großen Systeme in unserer Arbeit schlechter relaxiert sind als die kleinen Systeme.

Neben den Experimenten enthält die Literatur eine Reihe von Computermodellierungen, bei denen die charakteristische Form der Spannungs-Dehnungs-Kurve, inbesondere die ausgeprägte Streckgrenze, für verschiedene Modellsysteme reproduziert wird. Zu nennen sind die frühen Simulationen eines dreidimensionalen monoatomaren, über ein modifiziertes Johnson-

Potenzial wechselwirkenden Modells von Srolovitz, Vitek und Egami [103], in denen bereits Ansatzweise der Effekt der Dehnungserweichung auftritt, die Simulationen eines monoatomaren Systems mit Stillinger-Weber-Potenzial von Malandro und Lacks [184], die den Einfluss der mechanischen Verformung auf die potenzielle Energielandschaft analysieren, die Simulationen eines binären Lennard-Jones-Systems von Utz, Debenedetti und Stillinger [185], eines vergleichbaren Lennard-Jones-Systems von Rottler und Robbins [163], die Simulationen eines an amorphes Silicium angepassten Stillinger-Weber-Modells von Demkowicz und Argon [186], die Arbeiten zu einem an das binäre MgCu-System angepasste Modell von Bailey, Schiøtz und Jacobson [187] oder auch die Simulationen von Albano und Falk [188] oder Shi und Falk [189] zum binären Lennard-Jones-Systems.

6.3. Zur Deutung der Spannungs-Dehnungs-Kurven

Die starke Dehnungserweichung kennzeichnet einen Wechsel in den Eigenschaften des Systems, der dazu führt, dass die Verformung im weiteren Verlauf leichter geht als vor dem Wechsel. Unsere Simulationen bestätigen diesen Zustandswechsel durch die Analyse verschiedener atomarer Eigenschaften, aber auch durch die Ergebnisse zu den Nachverformungssimulationen überzeugend. Vergleichbare Befunde erhalten auch Utz *et al.* [185] aus Analysen ihrer Simulationen, die für deren Modell eine Strukturänderung (aus den radialen Verteilungsfunktionen bestimmt) und eine Erhöhung der potenziellen Energie als Folge von großen Dehnungen belegen.

Auch Experimente liefern klare Hinweise für den mit der Dehnungserweichung in Verbindung stehenden Strukturwechsel. In ihren Untersuchungen des metallischen $Pd_{0.4}Ni_{0.4}P_{0.2}$-Glases finden de Hey *et al.* [190] auffällige Verringerungen des in Wärmeflusskurven über Differentialkalorimetrie aufgezeichneten endothermen Maximums von stark verformten Proben, die auf eine Erhöhung der strukturellen Unordnung hindeuten. Andere Experimente wie die von Kawamura *et al.* [177] am $Zr_{0.65}Al_{0.1}Ni_{0.1}Cu_{0.15}$-System oder Safarik *et al.* [191] für ein $Pd_{0.4}Ni_{0.4}P_{0.2}$-Glas zeigen, dass die obere Streckgrenze deutlich geringere Werte aufweist, wenn eine Probe zuvor bereits einmal über die Streckgrenze hinweg verformt wird (vgl. auch die Nachverformungssimulationen in dieser Arbeit).

Um ihre Ergebnisse zu deuten, führen de Hey *et al* [190] eine Analyse ihrer Daten auf Grundlage von Spaepens Verformungsmodell [20] aus. Es gelingt ihnen damit, die Form der gemessenen Spannungs-Dehnungs-Kurven durch eine Zunahme des freien Volumens zu erklären (Bild 7 in [190]). Unsere Ergebnisse können diesen Zusammenhang (freies Volumen als messbares Zusatzvolumen) nicht bestätigen, da in den Verformungssimulationen des dynamischen Scherversuchs dieser Arbeit eine Zunahme des Systemvolumens während der reinen Scherung ausgeschlossen ist. Nicht ausschließen können wir jedoch, dass innerhalb unseres

simulierten Systems genug freies Volumen vorhanden ist, welches sich auf eine die Verformung begünstigende Weise umlagert.

Utz *et al.* [185] verstehen ihre Befunde als eine mechanisch induzierte Verjüngung ihrer Probe, ähnlich wie das für amorphe Polymere diskutiert wird [192]. Das Phänomen der Verjüngung ist als ein rückgängig Machen der Alterung zu deuten. Allerdings ist die Verjüngung der Polymere, im Sinne des Wortes verstanden, wohl eher eine Folge einer Fehlinterpretation der Daten [193]. Ebenso zeigen Lacks und Osborne [194] anhand von MD-Simulationen eines binären 80:20-Lennard-Jones-Systems, dass mechanische Verformung das System in Bereiche der Energielandschaft treibt, die zwar vergleichbar sind mit denen, die das System im Alterungsprozess zu durchlaufen hat, aber nicht identisch. Verjüngung als Überführen des Systems in einen Zustand, der strukturell vergleichbar ist mit dem einer höheren Temperatur (ohne eine Erhöhung der kinetischen Energie), wird durch unsere Ergebnisse zu den Änderungen der atomaren Eigenschaften der unterschiedlichen Atomgruppen zumindest teilweise belegt: Nach unserem Verständnis bedeutet das Verjüngungsszenario einen generellen Trend der atomaren Eigenschaften (für Atome im Fließzustand) zur Verschiebung zu Werten vergleichbar mit denen, die bei einer höheren Temperatur vorliegen (vgl. die Verschiebung des R_{WA}-Werts [39, 40]). Ist dies für viele Eigenschaften gegeben, verhalten sich unter anderem das Ni-Käfigvolumen oder die Werte für φ_i^p für Ni gegensätzlich (vgl. Abb. 4.34 auf Seite 123). Darüber hinaus findet in den Simulationen unseres Systems, insbesondere bei tieferen Temperaturen, eine sehr auffällige Trennung statt: zum einen in Bereiche mit Atomen, die starke Topologieänderungen zeigen und dadurch massiv zur Verformung beitragen, zum anderen in Bereiche mit Atomen, die kaum Umlagerungen erfahren. Diese verschiedenen Atomgruppen unterscheiden sich in ihren atomaren Eigenschaften (in statistisch signifikanter Weise), was als eine Aufspaltung in unterschiedliche Phasen gedeutetet werden kann. Auch in [193] (dort genau genommen für amorphe Polymere) wird die Vermutung geäußert, dass verformungsinduzierte Strukturänderungen als mechanisch induzierte Polyamorphisierung oder ein Übergang in eine verformungsinduzierte Phase zu deuten sind. Vergleichbar damit sind die Simulationsergebnisse zur Verformung amorphen Siliciums von Demkowicz und Argon [186]. Dort wird eine Trennung zwischen, wie sie es nennen, festkörperartigen und flüssigkeitsähnlichen Umgebungen (aus den Bindungsverhältnissen des stark kovalent gebundenen amorphen Siliciums) gefunden, wobei die Verformbarkeit nachaltig vom Anteil an flüssigkeitsähnlichen Bereichen abhängt.

Ein interessanter Nebenaspekt aus der Arbeit von Demkowicz und Argon [186] ist, dass die flüssige Struktur im amorphen Silicium durch eine größere Dichte gekennzeichnet ist als die feste. Die Autoren bemerken, dass damit im Gegensatz zur Verformung metallischer Gläser beim amorphen Silicium nicht ein erhöhtes freies Volumen zur Bildung so genannter *Fließdefekte* nötig ist. Vielmehr deuten sie an, dass es sinnvoller ist, einen Unterschied zwischen festkörper-

ähnlich und flüssigkeitsähnlich zu verwenden, um leicht verformbare Bereiche auch in anderen glasartigen Materialien zu klassifizieren. Das heißt, die Ersetzung des freien Volumens durch einen von der Struktur abhängigen Orndungsparameter wäre ein sinnvoller Schritt, um die Verformung metallischer Gläser zu beschreiben. Wie die Simulationen dieser Arbeit bestätigen, werden nahezu alle charakteristischen Befunde experimenteller Spannungs-Dehnungs-Kurven reproduziert, ohne dass eine Änderung im Systemvolumen nötig ist. Strukturelle Unterschiede sind hingegen bereits aus so einfachen Größen wie dem Wendt-Abraham-Parameter offensichtlich.

Auch wenn nicht direkt mit den Experimenten zur Verformung unter hohen Scherraten nahe der Glastemperatur (z. B. in [190, 178, 191]) vergleichbar, legen auch die Strukturuntersuchungen eines CuZrTi-Massivglases nach extremer Verformung (massive Dickenreduzierung durch Walzen bei kalten 150 K) von Cao *et al.* [195] eine durch Verformung hervorgerufene Phasenseparation in der Probe nahe. Inbesondere berichten Cao *et al.* von einer chemischen Entmischung und einer aus der Abnahme der Breite der Röntgenstrukturmaxima gedeuteten Zunahme der Nahordnung, wobei sie weiterhin kein Anzeichen für die Bildung von kristallinen Bereichen finden. In diesem Zusammenhang sind die in dieser Arbeit für die unterschiedlichen Atomgruppen bestimmten Q_l-Parameter von Bedeutung, zeigen doch zumindest einige der Atome mit massiven Topologieänderungen eine leichte Zunahme ($Q4$ für Ni bei 700 K, für Zr bei 700 K und 1000 K, Q_5 für Zr bei bei 700 K und 1000 K und Q_6 für Zr bei 700 K und 1000 K). Es sollte hier nicht unerwähnt bleiben, dass in [195] auch eine Zunahme der mechanischen Härte gefunden wird, die im Allgemeinen nicht durch unsere Befunde gestüzt werden kann: Der Fließzustand ist viel leichter verformbar, daher sollte eher eine Abnahme der mechanischen Härte folgen. Weitere Untersuchungen zum Aufklären der Zusammenhänge dieser Befunde sind nötig.

6.4. Übergang von newtonschem zu nicht-newtonschem Fließen

In der Diskussion der Verformungskurven treten häufig nachfolgende Begriffspaare auf, deren Bedeutung und/oder Unterschiede zunächst noch einmal erwähnt werden sollen: Zum einen wird bei der plastischen Verformung metallener Gläser zwischen *homogener* und *heterogener*[2] Verformung unterschieden. Im Wesentlichen wird damit die räumliche Lokalisierung von in der Probe ablaufenden Verformungsprozessen charakterisiert. Zum anderen wird zwischen *newtonschem* und *nicht-newtonschem* Fließen unterschieden. Diese Unterscheidung bezieht sich auf die Analyse der stationären Fließeigenschaften metallischer Gläser. Newtonsches Flie-

[2]Gleicherweise wird der Begriff *inhomogen* verwendet.

ßen ist durch eine konstante Viskosität bei variabler Verformungsrate gekennzeichnet, nicht-newtonsches Fließen bedeutet eine von der Scherrate abhängige Viskosität.

Safarik *et al.* bemerken [191], dass für metallische Gläser nicht klar ist, ob ein Übergang im Fließverhalten von newtonschem zu nicht-newtonschen Fließen ebenso auch einen Übergang im Verformungsmechanismus bedeutet, im speziellen Fall von homogen zu inhomogen. Wir wollen auf diese Frage im Folgenden näher eingehen.

Die Viskosität η des sich verformenden Systems kann über die Beziehung $\eta = \sigma/\dot{\epsilon}$ definiert werden, wobei σ die Fließspannung und $\dot{\epsilon}$ die Scherrate bedeuten. Nahe bei T_g zeigt sich in Experimenten je nach Höhe der Verformungsrate ein Übergang vom newtonschen Fließen zu einem nicht-newtonschen Fließen [178]. Für geringe Scherraten bleibt ein Überschießen (obere Streckgrenze plus deutlicher Dehnungserweichung) in der Verformungkurve aus, und es liegt newtonsches Fließen vor. Die ausgeprägte Streckgrenze für höhere Raten ist meist ein direkter Hinweis für das Vorliegen von nicht-newtonschem Fließen (vgl. [178]). In den Arbeiten von Kato *et al.* ist der Übergang besonders deutlich in der Auftragung der Viskosität eines $Pd_{0.4}Ni_{0.1}Cu_{0.3}P_{0.2}$-Glases gegen die Scherrate zu erkennen (vgl. Abb. 2 in [178]). Für geringe Scherraten ist sie konstant und knickt dann bei einer je nach Temperatur verschiedenen kritischen Rate ab, um dann schließlich mit zunehmender Scherrate im Wert abzunehmen. Vergleichbare Resultate für η in Abhängigkeit von $\dot{\epsilon}$ liegen vor für ein $Zr_{0.55}Al_{0.1}Ni_{0.05}Cu_{0.3}$-Glas [196] und ein $Zr_{0.4125}Ti_{0.1375}Cu_{0.125}Ni_{0.1}Be_{0.225}$-Glas [197].

In vielen der zitierten Arbeiten findet die Verformung in einem Temperaturbereich nahe der Glastemperatur statt. Dies ist ein Bereich, für den üblicherweise davon ausgegangen wird, dass die Verformung in der Probe homogen abläuft ($0 < T < 0.6 \cdot T_g$: inhomogen, $0.6 \cdot T_g < T < T_g$: homogen [99, 20]). In den genannten Arbeiten [190, 178, 196] wird nicht ausdrücklich darauf eingegangen, ob die Proben inhomogen oder homogen verformt werden. Kawamura *et al.* [177] weisen dagegen ausdrücklich darauf hin, dass die ausgeprägte Streckgrenze ein Phänomen bei Verformungen im homogenen Modus kennzeichnet. So betrachtet, zeichnet sich der Übergang von nicht-newtonsch zu newtonsch nicht gleichzeitig als ein Übergang von lokalisierter inhomogener Verformung zu gleichverteilter homogener Verformung aus.

Widmen wir uns nun den Daten unserer Simulationen. Abbildung 6.1 zeigt die Scherratenabhängigkeit der Viskosität des simulierten $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Systems in einer Darstellung wie in obigen Referenzen. Die durchgezogenen Linien sind Anpassungen (Parameter in Tabelle 6.1) der Daten für 700 K und 1000 K an den in [196] hergeleiteten Zusammenhang zwischen Viskosität und Scherrate, gegeben durch

$$\eta/\eta_N = 1 - \exp\left[-\left(1/t_1 \cdot \dot{\epsilon}\right)^{\beta}\right]. \tag{6.1}$$

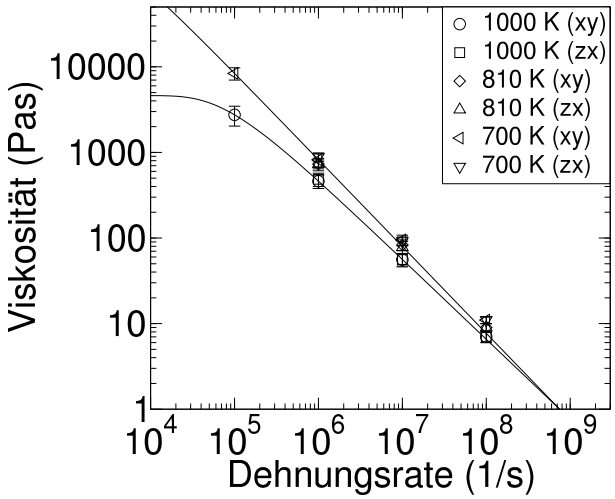

Abbildung 6.1: Verlauf von η gegen die Scherrate für verschiedene Verformungssimulationen der kleinen Systeme (5184 Atome). Die durchgezogenen Linien sind Anpassungen an die Gleichung (6.1).

η_N bedeutet dabei die konstante newtonsche Viskosität für geringe Scherraten, $t_1 = G_\infty \lambda_N / \tau^*$ ist eine Konstante, die zusammengesetzt ist aus einer Grenzspannung τ^* (an die sich die Fließspannung für immer größere Raten annähert), eine newtonsche Relaxationszeit λ_N und ein Schermodul G_∞, β wird in [196] als ein Kohlrausch-Wiliams-Watts-Streckungsparameter angegeben[3]. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass die Anpassung der Abhängigkeit der Viskosität von der Scherrate in vergleichbar guter Weise auch durch andere phänomenologische Modelle gelingt, z. B. nach dem selbstkonsistenten Modell nach Demetriou und Johnson [197] basierend auf der Erzeugung und Vernichtung von freiem Volumen im stationären Fließzustand oder einer erweiterten Version der STZ-Theorie nach Falk, Langer und Pechenik [109]. Aber auch die mikroskopische nicht-lineare erweiterte Modenkopplungstheorie liefert einen Zusammenhang, der die Daten gut reproduziert [114, 115].

Unsere Untersuchungen der Abhängigkeit der Viskosität von der Scherrate zeigen sehr deutlich, dass die Verformungen für das $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System in dem betrachten Bereich der Dehnungsraten nicht-newtonsch sind, d. h. $\eta \sim \dot{\epsilon}$. Die leichte Abnahme im Wert der Viskosität für die

[3]Die Anpassung der Energierelaxation (vgl. Abschnitt 5.3.1) verwendet eine ähnliche funktionale Abhängigkeit. Der dort bestimmte Wert des β-Parameters ist ihm Rahmen der Fehler vergleichbar mit dem hier berechneten Wert.

Tabelle 6.1: Werte für λ_N, t_1 und β der Gleichung (6.1) für die Anpassung an die Daten von $\eta(\dot{\epsilon})$.

T (K)	η_N (Pa · s)	t_1 (s)	β
700	277919	0.000311317	1.01431
1000	4610.96	0.000001111	0.934682

kleinste Scherrate ($\dot{\epsilon} = 0.01$ %/ns) bei 1000 K führt zu einem relativ schnellen Abknicken in der angepassten Kurve, woraus eine newtonsche Viskosität von $\approx$ 4610 Pa s resultiert. Die Verformung bei 1000 K für die geringste hier verwendete Scherrate liegt damit sehr nahe bei dem Bereich, in dem das Fließen in ein newtonsches übergeht (sofern man den Kurvenverlauf nach Gl. (6.1) annimmt).

Drei Dinge sind an dieser Stelle anzumerken: 1) Auch für 1000 K zeigen die Verformungen bei hohen Scherraten ein Lokalisationsphänomen, und es lassen sich Atomgruppen voneinander abgrenzen, die signifikant in ihren atomaren Eigenschaften unterscheidbar sind. 2) Je geringer die Scherraten werden, desto weniger stark ist die Lokalisation ausgeprägt, und desto geringer sind die Unterschiede zwischen den einzelnen Atomgruppen und den Ausgangsproben (vgl. die Daten für die Simulationen Nr. 18 und 19 mit $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns in den Abbildungen der gemittelten atomaren Eigenschaften der zwei Atomgruppen in Abschn. 4.3.3). 3) Die ausgeprägte Streckgrenze bei der Spannungs-Dehnungs-Kurve für $\dot{\epsilon} = 0.01$ %/ns ist bei 1000 K ist nahezu nicht mehr vorhanden (Abb. 4.3 auf Seite 58).

Es ist daher zu vermuten, dass zumindest für unser System bei 1000 K ein gewisser Zusammenhang zwischen nicht-newtonschem Fließverhalten und inhomogener Verformung besteht und dass eine deutliche Verringerung der Scherrate tatsächlich auch den Verformungsmodus beeinflusst.

Safarik *et al.* [191] zeigen, dass die so genannte *Deborah-Zahl* $De = \dot{\epsilon} \cdot \tau$, gebildet aus dem Produkt der Scherrate $\dot{\epsilon}$ und der Relaxationszeit τ, eine gute Abschätzung für den Übergang von newtonschem zu nicht-newtonschem Fließen darstellt. Diese Zahl wird bei der Untersuchung von Instabilitäten beim Fließen newtonscher Flüssigkeiten verwendet. Ein Übergang in den Fließeigenschaften wird dort für $De \approx 1$ gefunden, mit nicht-newtonschem Fließen für $De > 1$ und newtonschem Fließen für $De \ll 1$. Die Abschätzung der De-Zahl in [191] erfolgt auf Grundlage eines im Kurvenverlauf der Viskosität in Abhängigkeit von der Scherrate auftretenden Abknickpunkts und einer charakteristischen Zeit τ, welche aus der Relaxation der ausgeprägten Streckgrenze gewonnen wird (siehe dazu [191]). Demnach gilt für ihr System ($Pd_{0.4}Ni_{0.4}P_{0.2}$), dass ein Übergang von newtonschem zu nicht-newtonschem Fließen für $De = 0.5$ vorliegt, in guter Übereinstimmung mit dem Wert $De \approx 1$.

Eine Abschätzung der Deborah-Zahl für die Daten des $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Systems dieser Arbeit bei 1000 K kann aus den Langzeitsimulationen und dem Wert der geringsten Verformungsrate gewonnen werden. Nach Abb. 6.1 ist der Wert für die Viskosität bei $\dot{\epsilon} = 0.01$ %/ns $= 10^4$ s^{-1} sehr nah an dem Plateau-Wert der Viskosität (angepasste Kurve nach Gl. (6.1) als Maßstab betrachtet). Die Relaxationszeit τ_R der in den Fließzustand gebrachten Probe bei 1000 K liegt zwischen 200 ns und 300 ns. Daraus resultiert für die Deborah-Zahl ein Wert von $De = \tau_R \cdot \dot{\epsilon} = 0.02$ bzw. 0.03. Im Vergleich mit dem in [191] angegebenen Wert von ≈ 0.5 ist der Wert für unser System um einen Faktor 10 kleiner. Berücksichtigt man, dass eine Erhöhung

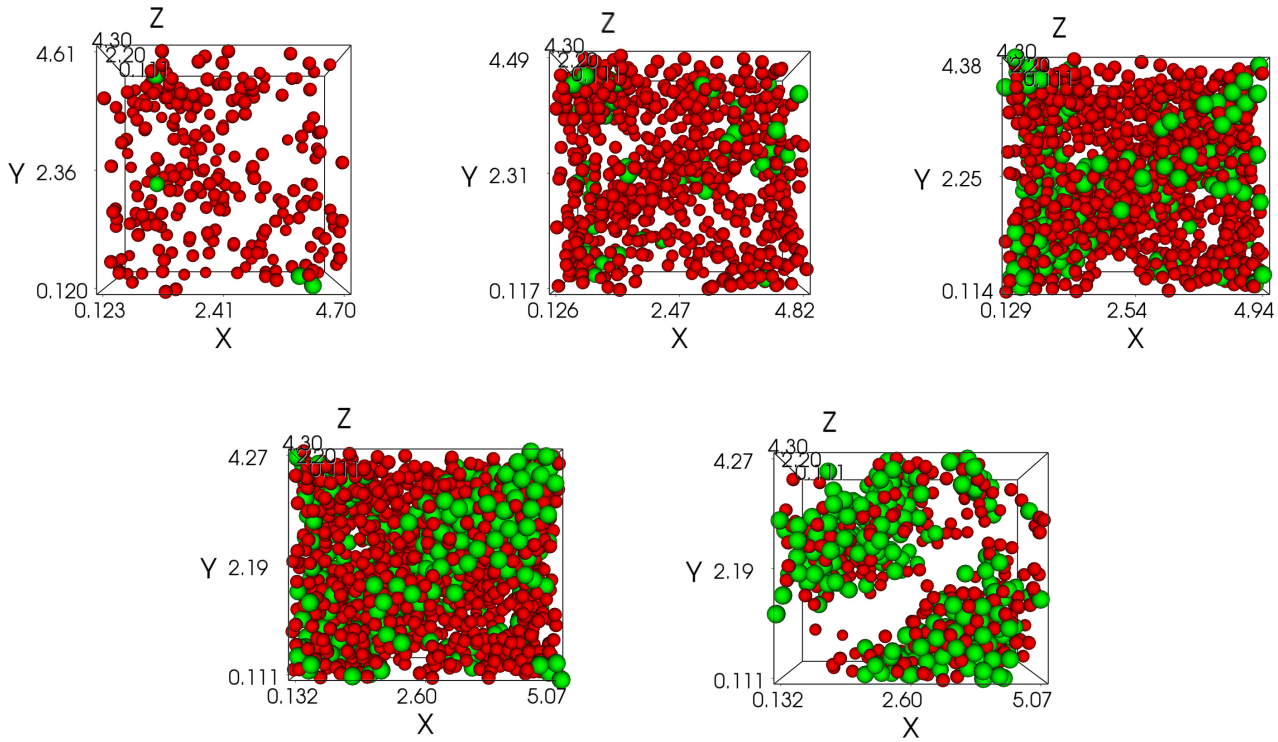

Abbildung 6.2: Darstellung der Atome der Simulationszelle mit mehr als 4 verlorenen Zr-Nachbarn bei 1000 K und $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns bis zu einer Dehnung von 2.5 % (oben links), 5 % (oben mitte), 7.5 % (oben rechts), 10 % (unten links) und ohne verlorene Zr-Nachbarn bis 10 % (unten rechts).

der Scherrate zu einer Erhöhung der Deborah-Zahl führen kann, ist zu folgern, dass der von Safarik *et al.* angegebene Wert von ≈ 0.5 für unser System bei 1000 K bereits bei einer um eine Größenordnung höheren Scherrate erreicht wird.

Abbildung 6.2 zeigt noch einmal Atome mit Topologieänderungen vergleichbar mit den Darstellungen in Abschnitt 4.3.1 bei 1000 K für $\dot{\epsilon} = 0.1$ %/ns, entsprechend $De \approx 0.3$. Deutlich erkennbar ist eine auffällig homogene Verteilung von Ni-Atomen mit massiven Topologieänderungen. Das Zr-Subsystem behält einen sehr heterogenen Verformungscharakter bei, was besonders deutlich in der Abbildung in der die Atome ohne Topologieänderungen dargestellt sind (Abb. 6.2 unten rechts) deutlich wird.

Es zwingt sich hier die Vermutung auf, dass die zwei Subsysteme getrennt voneinander betrachtet werden müssen. Entscheidend für die irreversible Verformung ist die deutlich langsamere, größere Komponente, in unserem Fall das Zr, welches eine relativ starke amorphe Matrix bildet, in der sich die Ni-Atome — sie sind deutlich schneller als die Zr-Atome — leicht hin- und herbewegen können. Die Zeitskala für den Abbau von Strukturunterschieden, welche durch eine Verformung entstanden sind, kann stärker durch die typischen Zeitskalen der schnelleren Ni-Komponente beeinflusst sein. Es ist daher möglich, dass die aus den Langzeitsimulationen bestimmte Relaxationszeit der Energieänderung deutlich geringer ausfällt, als eine typi-

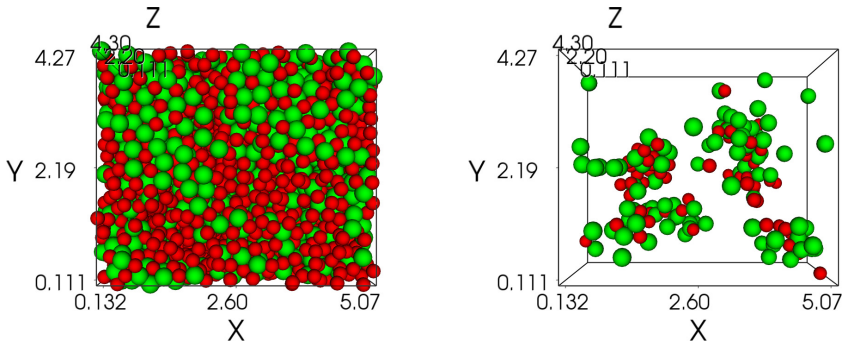

Abbildung 6.3: Darstellung der Atome der Simulationszelle mit mehr als 4 verlorenen Zr-Nachbarn bei 1000 K und $\dot{\epsilon} = 0.01$ %/ns bis zu einer Dehnung von 10 % (links) und ohne verlorene Zr-Nachbarn bis 10 % (rechts).

sche Relaxationszeit des Zr-Subsystems. Letztere kann aus der α-Relaxationszeit von Dichte-Fluktuationen im Zr-Subsystem bestimmt werden. In [39] wird die α-Relaxationszeit für den Zerfall von Dichtekorrelationen bei 1000 K separat für Ni und Zr bestimmt. Zr zeichnet sich dort durch eine um den Faktor 4 größere Relaxationszeit aus. Wird aus $De = 0.5 = 4 \cdot \tau_R \cdot \dot{\epsilon}_c$ mit $\tau_R = 300$ ns ein Wert für die kritische Scherrate bestimmt, erhält man $\dot{\epsilon} \approx 0.04$ %/ns, was nah an der geringsten in den Simulationen verwendeten Scherrate liegt. Bilder für die Topologieänderungen in der Zelle bei 1000 K und $\dot{\epsilon} = 0.01$ %/ns, dargestellt in Abb. 6.3, bestätigen auch für das Zr-Subsystem eine deutlich homogenere Verteilung der Atome, die an der Verformung beteiligt sind. Weiterführende Analysen wären erforderlich, um die Nützlichkeit der Verwendung der Deborah-Zahl zu verifiziern (möglicherweise komponentenabhängige De-Werte).

In diesem Zusammenhang ist anzumerken, dass Khonik *et al.* [198] ein mit der Deborah-Zahl vergleichbares Konzept angeben. Sie führen an, dass ein Unterscheidungskriterium für das Vorliegen von homogener oder inhomogener Verformung in metallenen Gläsern, welches lediglich auf einem Vergleich der während eines Experiments vorliegenden Temperatur mit der kalorischen Glastemperatur beruht, nicht ausreichend ist. Entscheidend für den Wechsel des Verformungsmodus ist vielmehr der Vergleich der charakteristischen Verformungszeit τ_d (durch das Experiment gegeben) mit einer charakteristischen strukturellen Relaxationszeit $\tau_{sr\sigma}$ im sich verformenden Material. Die Größe $\tau_{sr\sigma}$ hängt von der Relaxationskinetik des betrachteten Materials und der Temperatur ab [198]. Ein inhomogener Verformungsmodus liegt danach für $\tau_{sr\sigma} \gg \tau_d$ vor, wohingegen die Verformung für $\tau_{sr\sigma} \ll \tau_d$ im homogenen Modus stattfindet.

Einen mit dieser Idee übereinstimmenden Befund zeigen die Simulationen eines zweidimensionalen binären Lennard-Jones Systems nach Shi und Falk [189]. Durch verschieden schnelles Abkühlen einer Schmelze erzeugen sie künstlich Atomanordnungen, die durch unterschiedliche

Relaxationszeiten charakterisiert sind. Die Relaxationszeiten der verschieden stark abgekühlten Konfigurationen selbst sind in [189] zwar nicht angegeben, dafür aber unter anderem Werte für die potenzielle Energie. Diese zeigen deutlich, dass mit abnehmender Kühlrate auch eine Verringerung der potenziellen Energie folgt. Wir haben bereits an anderer Stelle (Abschnitt 6.2) angedeutet, dass die potenzielle Energie ein geeignetes Maß für den Relaxationszustand der Computermodelle ist. Es ist daher möglich, aus den von Shi und Falk [189] für ihre Systeme angegebenen Werten der potenziellen Energie gleichzeitig auf eine Abnahme der Relaxationszeiten mit abnehmender Kühlrate in den betreffenden Systemen zu schließen. Shi und Falk visualisieren die in verschieden stark relaxierten Proben bei Verformungen mit konstanter Scherrate auftretenden Scherdehnungen. Aus den Darstellungen erhält man den Eindruck, dass schwach relaxierte Proben (ultraschnell abgeschreckt) sich eher im homogenen Modus verformen, wohingegen gut relaxierte Proben (langsamer abgeschreckt) sich eher inhomogen verformen (vergleiche Abb. 3 a) und 3 c) in [189]). Die Spannungs-Dehnungs-Kurven einer Probe, die eine inhomogene Verformung zeigt, ist durch eine ausgeprägte Streckgrenze charakterisiert. Dagegen zeigt eine schlecht relaxierte Probe, die sich homogen verformt, kein Überschießen in der Spannung (Abb. 1 in [189]). In der Arbeit von Shi und Falk wird keine rheologische Analyse durchgeführt, sodass nicht geprüft werden kann, ob newtonsches oder nicht-newtionsches Fließen vorliegt.

Die Fließspannung der sich homogen verformenden Probe und der sich inhomogen verformenden Probe in [189] sind nahezu gleich. Ein vergleichbares Ergebnis liegt auch für experimentell bestimmte Spannungs-Dehnungs-Kurven an $Pd_{0.4}Ni_{0.4}P_{0.2}$ von de Hey *et al.* [190] vor. Schnell abgeschreckte $Pd_{0.4}Ni_{0.4}P_{0.2}$-Proben zeigen keine ausgeprägte Streckgrenze im dynamischen Scherversuch. Proben, die eine Zeit ausgelagert, d. h. relaxiert werden, zeigen dagegen eine mit der Auslagerungszeit anwachsende Streckgrenze. Das Fließen findet aber bei einer nur von der Scherrate abhängigen Spannung statt, wodurch nicht ausgeschlossen werden kann, dass der Zusammenhang zwischen der Viskosität und der Scherrate auch für schnell abgeschreckte Proben ohne ausgeprägte Streckgrenze unter genügend hohen Verformungsraten nicht-newtonsch ist. Dies wird in [190] jedoch nicht eingehender analysiert.

Aus unseren Simulationsdaten ist ersichtlich, dass für genügend gut relaxierte Strukturen[4] ein Übergang von inhomogener zu homogener Verformung auftritt, wenn die Verformungsraten schrittweise verringert werden. Dass in Experimenten bei Temperaturen nahe T_g, aber hohen Scherraten keine Anzeichen für inhomogene Verformungen evident werden, kann ein Grund für die relativ rasche Ausheilung von strukturellen Inhomogenitäten bei den entsprechenden Temperaturen sein. Unsere Simulationen zeigen, dass für 1000 K ein Ausgleich der Unterschiede zwischen Fließzustand und unverformten Zustand noch während der im Com-

[4]Wir sprechen hier von Relaxationszeiten in der Größenordnung von einigen hundert Nanosekunden.

puter zugänglichen nominellen Systemzeiten erreicht werden kann. Dagegen sind bei 810 K und 700 K die Relaxationszeiten (z. B. für die Energierelaxation) zu groß, um im Computer in den zur Verfügung stehenden Zeiten ein Ausheilen der verformungsinduzierten Änderungen zu gewährleisten. Es scheint plausibel, dass langlebige strukturelle Variationen (vgl. die 700 K ausgebildeten Verformungsbänder) nur dann auftreten, wenn die Ausheilkinetik durch genügend geringe Temperaturen sehr stark eingeschränkt ist. Durch Anätzen sichtbar gemachte Scherbänder in Gläsern, z. B. in [29, 30], können daher als lokale, bei der Verformung induzierte Bereiche mit Wechsel in den Fließzustand angesehen werden, die aufgrund der geringen Temperatur nicht genügend Zeit zu einer strukturellen Wiedererlangung der Ausgangsstruktur haben.

6.5. Ausbildung von Scherbändern in Computersimulationen

Metallische Gläser haben aufgrund der fehlenden kristallinen Fernordnung eine Reihe interessanter mechanischer Eigenschaften, die im Zusammenspiel mit den aus der ungeordneten Struktur resultierenden sehr glatten Oberflächen vielversprechende technische Anwendungsmöglichkeiten bieten [5, 199]. Allerdings bleiben einige relevante Bereiche für die Gläser unerschlossen, weil ihre Einsatzmöglichkeit aufgrund fehlender Duktilität unter Zug limitiert ist: Metallische Gläser zeigen bei Raumtemperatur unter mechanischer Belastung die Ausbildung von Scherbändern auf Ebenen maximaler Scherspannung, was meist unweigerlich zu einer Zerstörung der Probe führt [200]. Um den Anwendungsbereich metallischer Gläser zu steigern, ist die Untersuchung der physikalischen Eigenschaften von Scherbändern, wie ihre Bildung, ihre Dynamik oder auch die Wechselwirkung verschiedener Scherbänder untereinander von großer Bedeutung.

Aufgrund der ausgezeichneten Stabilität und der verglichen mit konventionellen metallischen Gläsern deutlichen Vergrößerung der Probenabmessungen, hat die Entwicklung der Massivgläser in den letzten Jahren in Verbindung mit der erheblichen Verbesserung experimenteller Analysemethoden dazu beigetragen, die Scherbänder als mikrostrukturelle Eigenschaft amorpher Festkörper näher untersuchen zu können. Bei den experimentellen Methoden hervorzuheben sind die quantitative hochauflösende Elektronenmikroskopie zur Abbildung von nanometergroßen Lücken innerhalb von Scherbändern(HRTEM: engl.: **H***igh-***R***esolution* **E***lectron* **M***icroscopy*), die Röntgenabsorptionsanalyse zur Analyse der Feinstruktur, die komponentenabhängig Informationen zur lokalen Umgebung liefert (EXAFS: engl.: **E***xtended* **X***-ray-***A***bsorption* **F***ine* **S***tructure*) oder auch die Analyse mit Hilfe von Infrarotaufnahmen, um die lokalen Erwärmungen in der Umgebung von Scherbändern zu analysieren [201, 202, 203, 204, 205, 206]. Trotzdem ist bisher noch immer wenig über die Eigenschaften einzelner Scherbänder bekannt, unter anderem sind die mikroskopischen Ursachen der

Strukturänderungen innerhalb der Scherbänder, deren makroskopische Auswirkungen in den Experimenten beobachtet werden, weit davon entfernt verstanden zu sein.

Es steht daher zu fragen, inwiefern Computersimulationen dazu beitragen können, ein tiefer gehendes Verständnis zu verschiedenen, mit den Scherbändern verknüpften Aspekten der Verformung metallener Gläser zu erlangen. Auch wenn in der vorliegenden Arbeit die Analyse von Scherbändern nicht im Vordergrund steht, sollen einige Befunde der Arbeit mit Blick auf die Computeranalysen aus der Literatur zu diesem Thema bewertet werden.

Zwei kürzlich erschienene Arbeiten untersuchen den Scherbandverformungsmodus metallischer Gläser mit Hilfe von MD-Simulationen. Zum einen analysieren Bailey *et al.* [207] ein $Mg_{0.85}Cu_{0.15}$-Modell, welches in einfacher Zuggeometrie verformt wird. Zum anderen werden von Shi und Falk [208] drei weniger realistische Modelle unter einachsiger Kompression untersucht. Beiden Arbeiten gemein ist die relativ große Anzahl an wechselwirkenden Teilchen ($N \lesssim 150000$ [208], $100000 < N < 530000$ [207]). Der Grund dafür besteht darin, wie Bailey *et al.* bemerken, dass Experimente als kleinste Abmessungen für Scherbänder Größen im Bereich von 10 nm bis 60 nm ergeben, und somit die Analyse im Computer eine erhebliche Steigerung der Systemabmessungen erfordert.

Sowohl in Ref. [208] als auch in Ref. [207] wird für die untersuchten Scherraten bei den entsprechenden Temperaturen die Ausbildung von Scherbändern gefunden. Als Maß zur Visualisierung der Scherbänder dient in beiden Arbeiten eine von Falk und Langer [107] eingeführte Größe, D^2_{min}, welche für jedes Atom die über die rein affine Verschiebung hinausgehende, und damit irreversible Umlagerung bewertet. Neben der bloßen Darstellung der Dehnungslokalisation mit Hilfe dieser Größe wird in [208] eine Analyse der strukturellen Nahordnung durchgeführt, basierend auf der Zerlegung der Atomanordnung in lokale Tetraeder. Diese deutet zumindest für zwei der drei untersuchten Modellsysteme eine Verringerung der Nahordnung in dem Bereich der Probe an, in der die Scherbänder ausgebildet werden. In [207] wird neben der Darstellung von Scherbändern besonderes Augenmerk auf die Temperatur und deren Variation sowie auf die Anzahldichte von Atomen über den Bereich der Probe gelegt. Die Autoren finden deutliche Temperaturunterschiede innerhalb des simulierten Systems[5], die auf eine erhöhte Temperatur in der Scherbandregion hindeuten. Dagegen sind die Darstellungen der Dichteunterschiede wenig aussagekräftig.

Beide Arbeiten zeigen die geschilderten Unterschiede zwischen Scherband und dem Rest der Probe auf eine mehr oder weniger qualitative Art und Weise durch die Darstellung von farbkodierten, zweidimensionalen (auf eine Querschnittsfläche projizierten) Verteilungen, vergleichbar mit den Darstellungen der Topologieänderungen dieser Arbeit in Abb. 4.15 auf

[5]Siehe [207] für eine Diskussion der Möglichkeit der Deutung von Temperaturunterschieden bei einer Simulation mit Thermostat.

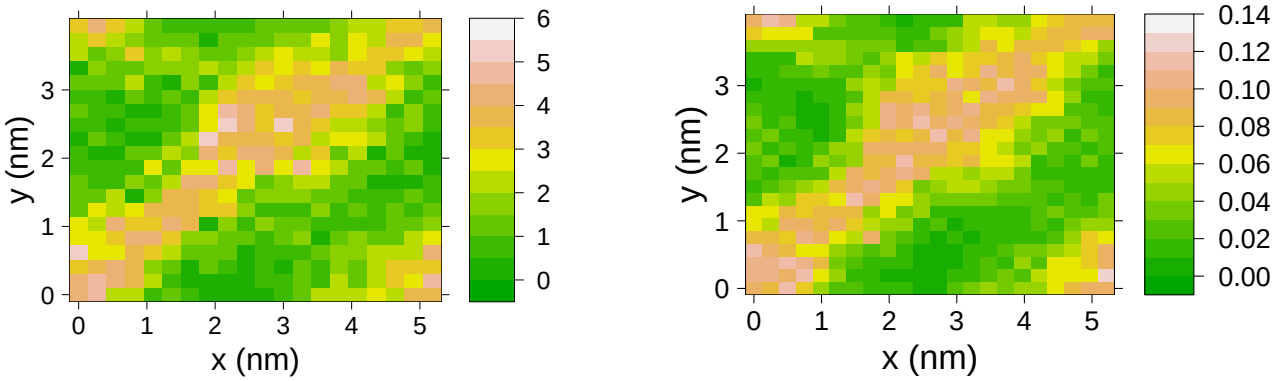

Abbildung 6.4: Links: Verteilung von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0\,\%)$ für Zr. Rechts: Verteilung von D^2_{min} für Zr (in wilk. Einheiten). In beiden Fällen gilt $n_x = n_y = 22$ (vgl. Abschn. 4.3.2).

Seite 73. Vor allem in den Abbildungen der lokalen Anzahldichten in Ref. [207] (Abb. 20 in [207]) sind kaum Unterschiede zwischen den verschiedenen Bereichen der Probe zu erkennen.

In Verbindung mit den oben genannten Arbeiten [207, 208] werden im Weiteren die Ergebnisse unserer Simulationen dargestellt. Zunächst ist anzumerken, dass zwischen der Größe D^2_{min} [107] und dem in unserer Analyse verwendeten Maß λ_i^{Zr} ein enger Zusammenhang besteht. Je größer die Anzahl der verlorenen Zr-Nachbarn zwischen zwei Zeitpunkten der Simulation ist, desto geringer ist die Wahrscheinlichkeit, die von einem Atom und seinen Nachbarn gemachten Verschiebungen durch rein affine Transformationen der Atomkoordinaten zu beschreiben. Entsprechend bedeuten massive Topologieänderungen einen hohen Wert für D^2_{min}. Um dies zu demonstrieren, wird in Abbildung 6.4 einerseits eine farbkodierte Darstellung (vgl. auch Abschn. 4.3.2) der Verteilung der λ_i^{Zr}-Werte für Zr-Atome zwischen 0 % und 15 % Dehnung für die Simulation eines dynamischen Scherversuchs bei 700 K und $\dot{\epsilon} = 10\,\%/\mathrm{ns}$ gezeigt. Andererseits wird für die Zr-Atome für das gleiche Zeitfenster die Größe D^2_{min} ausgewertet und als zweidimensionale Verteilung dargestellt.

Unsere Simulationen zeigen, dass auch in Systemen mit deutlich geringeren Abmessungen die Ausbildung von Scherbändern zu finden ist (Abb. 4.10 auf Seite 69 ist ein weiteres gutes Beispiel). Wichtig ist dabei die Tatsache, dass bei den Simulationen dieser Arbeit mit periodischen Randbedingungen in allen drei Raumrichtungen gearbeitet wird und sich dennoch Scherbänder ausbilden. In den oben genannten Arbeiten ist die Ausbildung von Scherbändern dadurch initiiert, dass eine Instabilität an der freien Oberfläche auftritt [208] oder dadurch, dass sogar künstlich eine kleine Kerbe in die Simulationszelle gebaut wird [207], um eine Spannungslokalisation herbeizuführen. Somit liefern die Simulationen zum $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System dieser Arbeit ein starkes Indiz für die intrinsische Ausbildung von lokalisierter Verformung.

Des Weiteren ist ein mehr methodischer Aspekt der Analyse der physikalischen Eigenschaften von Scherbändern mit Hilfe der Daten aus Computersimulationen zu erwähnen: Die

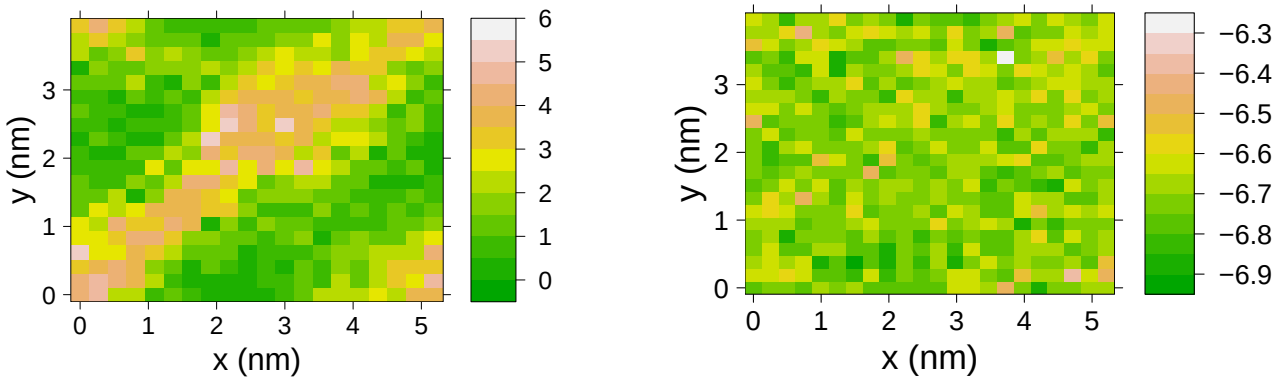

Abbildung 6.5: Links: Verteilung von $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0\,\%)$ für Zr. Rechts: Verteilung von E_{pot} für Zr. In beiden Fällen gilt $n_x = n_y = 22$ (vgl. Abschn. 4.3.2).

Arbeiten von Bailey *et al.* [207] und Shi und Falk [208], aber auch unsere Simulationen zeigen relativ überzeugend, dass die Bildung und die Ausdehnung von Scherbändern heutigen materialphysikalischen Computersimulationen zugänglich sind. Erste Ansätze zur weitergehenden Analyse der lokalen Eigenschaften der Scherbänder liegen in der Literatur bzgl. der Nahordnung [208] sowie der lokalen Temperatur und der Anzahldichte [207] vor. Darüber hinaus wird in der vorliegenden Arbeit die lokale Analyse der strukturellen oder kinetischen Eigenschaften der Verformungsbänder um einen weiteren Schritt vorangetrieben: Die statistische Analyse der atomarer Eigenschaften innerhalb von Atomgruppen, die jeweils unterschiedlich stark an der irreversiblen Verformung teilnehmen (vgl. Abschn. 4.3.2). Mit Hilfe solcher Untersuchungen können Unterschiede in den physikalischen Eigenschaften zwischen Atomen, die den Scherbandregionen zugeschrieben werden können, und solchen, die der unverformten Matrix angehören, quantitativ — und zwar auf Grundlage der mathematischen Statistik — bewertet werden.

Betrachtet man das Beispiel der Verteilung der potenziellen Energie pro Atom, so ist in einer mit Abb. 6.4 vergleichbaren Darstellung keinerlei Anzeichen für einen Unterschied zwischen der Energie der Atome des Scherbandes und der des Rests der Probe zu erkennen (vgl. Abb. 6.5). Aus der statistischen Analyse der Atomgruppen 1 und 2 (der Atome mit massiven Topologieänderungen, $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0\,\%) > 3$, und solchen mit moderaten Änderungen, $\lambda_i^{\mathrm{Zr}}(15\,\%, 0\,\%) < 1$) wird dahingegen ein höchst signifikanter Unterschied in den atomaren Charakteristika deutlich (vgl. Tab. E.3 in Anhang E). Danach ist die mittlere potenzielle Energie für die Scherbandregion um etwa 0.0765 eV/Atom größer als für die unverformten Bereiche. Dieser Unterschied entspricht immerhin etwa 18 % der Potenzialtiefe der Zr-Zr-Wechselwirkungen.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass sich Computersimulationen gut eignen, um verschiedene Fragestellungen bzgl. der Scherbandbildung, ihrer Struktur o. Ä. anzugehen. Möglicherweise werden weitere Simulationen auch helfen die Frage zu beantworten, welche

Gründe dazu beitragen, dass sich Scherbänder, wie von manchen Autoren berichtet [209, 210], gerade nicht in einem Winkel von 45° zur Probensenkrechte ausbilden, und sich sogar Asymmetrien im Scherbandwinkel ergeben, je nachdem ob eine Probe im Zug oder im Druck verformt wird. Es muss betont werden, dass die oben zitierten Computeranalysen [207, 208] und die Ergebnisse dieser Arbeit jeweils auf Scherbandwinkel von 45° hindeuten. Weitere Untersuchungen zu dieser speziellen Frage sind nötig, um ein geschlossenes Bild der Scherbänder in metallischen Gläsern zu erhalten.

6.6. Versagenskriterien für metallische Gläser

Wie an anderer Stelle schon angedeutet (Abschn. 3.6.1), ist die Prüfung von Fließbedingungen nicht Ziel dieser Arbeit. Experimentelle Studien von Bruck *et al.* [166] am Massivglas $Zr_{0.4125}Ti_{0.1375}Ni_{0.1}Cu_{0.125}Be_{0.225}$ liefern ein von Mises-Kriterium. Donovan [209] hingegen zeigt für ein $Pd_{0.4}Ni_{0.4}P_{0.2}$-Glas durch Verformung in verschiedenen Belastungsgeometrien, dass sich die Streckgrenzen durch ein Mohr-Coulomb-Kriterium beschreiben lassen. Auch Simulationen für ein an das CuZr-System angepasstes Modell nach Lund und Schuh [164] liefern Hinweise auf das Vorliegen eines Mohr-Coulomb-Kriteriums. Die Angabe eines einheitlichen Versagenskriteriums für metallische Gläser ist daher fragwürdig.

In Verbindung zu diesen Befunden ist eine jüngst erschienene Arbeit von Johnson und Samwer [211] zu nennen, die für 30 sehr unterschiedliche metallische Gläser ein universelles Verhalten für die Streckgrenze aufzeigt. Dieses ist durch einen linearen Zusammenhang zwischen Streckgrenze und Schermodul bei einer Verformung bei Raumtemperatur charakterisiert. Die Proportionalitätskonstante γ_C ergibt sich aus der Beziehung

$$\tau_Y = \gamma_C \cdot G, \tag{6.2}$$

mit dem Wert τ_Y der Streckgrenze und dem Schermodul G zu $\gamma_C = 0.0267 \pm 0.0020$. In einem einfachen Modell, welches basierend auf den Arbeiten Frenkels zur Scherstabilität von Festkörpern entwickelt wird [211], kann eine Temperaturabhängigkeit der Streckgrenze mit $(T/T_g)^{2/3}$-Verhalten entsprechend Gleichung (6.3) vorhergesagt werden,

$$\tau_{CT}/G = \gamma_{C0} - \gamma_{C1} \cdot (t)^{2/3}. \tag{6.3}$$

In Gleichung (6.3) bedeutet $t = T/T_g$ eine auf die jeweilige Glastemperatur normierte Temperatur, γ_{C0} ist die Streckgrenze für $T = 0$ K, normiert auf den Schermodul des jeweiligen Systems, und γ_{C1} ist eine Konstante, in die verschiedene Größen des Modells eingehen (vgl.

[211]), die aber in einer Anpassung als freie Parameter gewählt werden. Die Parameter werden zu $\gamma_{C0} = 0.036 \pm 0.02$ und $\gamma_{C1} = 0.016 \pm 0.002$ angegeben.

Wir wollen an dieser Stelle versuchen, die Daten für das in dieser Arbeit simulierte $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System in einen Zusammenhang zu den Befunden aus dem kooperativen Scherungsmodell (engl.: *cooperative shear model*, daher auch CSM-Modell) nach [211] zu bringen. Dabei stehen die Werte des dynamischen Schermoduls (aus den Steigungen der Spannungs-Dehnungs-Kurven) sowie der aus dem Maximum in den Spannungs-Dehnungs-Kurven bestimmten Streckgrenzen (Tabelle 4.1 auf Seite 63) für drei Temperaturen zur Verfügung. In [211] wird die Streckgrenze des jeweiligen Systems bei Raumtemperatur unter einachsigem Zug auf den Modul des ungescherten Systems bezogen. Um unsere Daten der dynamischen Größen mit denen aus Ref. [211] zu vergleichen, wird hier zunächst für alle drei Temperaturen separat ein mittlerer Zusammenhang der Form (6.2) bestimmt, der aus den für unterschiedliche Scherraten bestimmten Kenngrößen gewonnen wird.

Abbildung 6.6 a) zeigt die Auftragung der Streckgrenze gegen den zugehörigen, aus dem ersten linearen Bereich der Spannungs-Dehnungs-Kurven bestimmten Schermodul für 700 K, 810 K und 1000 K. Bezeichnet σ_Y die Streckgrenze und $G_{\dot{\epsilon}}$ den zur Scherrate $\dot{\epsilon}$ gehörenden Schermodul, dann folgt für den Zusammenhang $\sigma_Y = \gamma_T \cdot G_{\dot{\epsilon}}$ für die drei in den Simulationen verwendeten Temperaturen:

$$\begin{aligned} \gamma_{T=700\,\mathrm{K}} &= 0.065594 \pm 0.001415, \\ \gamma_{T=810\,\mathrm{K}} &= 0.062531 \pm 0.001599, \\ \gamma_{T=1000\,\mathrm{K}} &= 0.053699 \pm 0.001847. \end{aligned}$$

In Abbildung 6.6 b) wird die gefundene Proportionalitätskonstante gegen die reduzierte Temperatur (T/T_g), $T_g \approx 1050$ K [37]) aufgetragen. Die aus den Daten unserer Simulationen resultierenden Werte (blau) liegen deutlich oberhalb der Kurve, die für eine Vielzahl experimentell bestimmter Streckgrenzen den bestmöglichen Zusammenhang darstellt (vgl. [211]). Ein möglicher Grund für die zu hohen Werte kann ein zu kleiner Schermodul für das noch immer unzureichend relaxierte $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Computermodell sein (vgl. auch die Daten in Tab. 1 aus Ref. [211]).

Rubin und Schwarz [212] bestimmen den Schermodul dünner NiZr-Filme für eine Vielzahl an Zusammensetzungen über Anregung zu Oberflächenschwingungen. Der Modul für die Zusammensetzung $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$ liegt zwischen 45 GPa und 50 GPa (vgl. Abb. 5 in [212]) und deutet darauf hin, dass der Schermodul für das in dieser Arbeit simulierte System, bestimmt aus der Steigung der Spannungs-Dehnungs-Kurven, mit ≈ 20 GPa deutlich zu klein ausfällt.

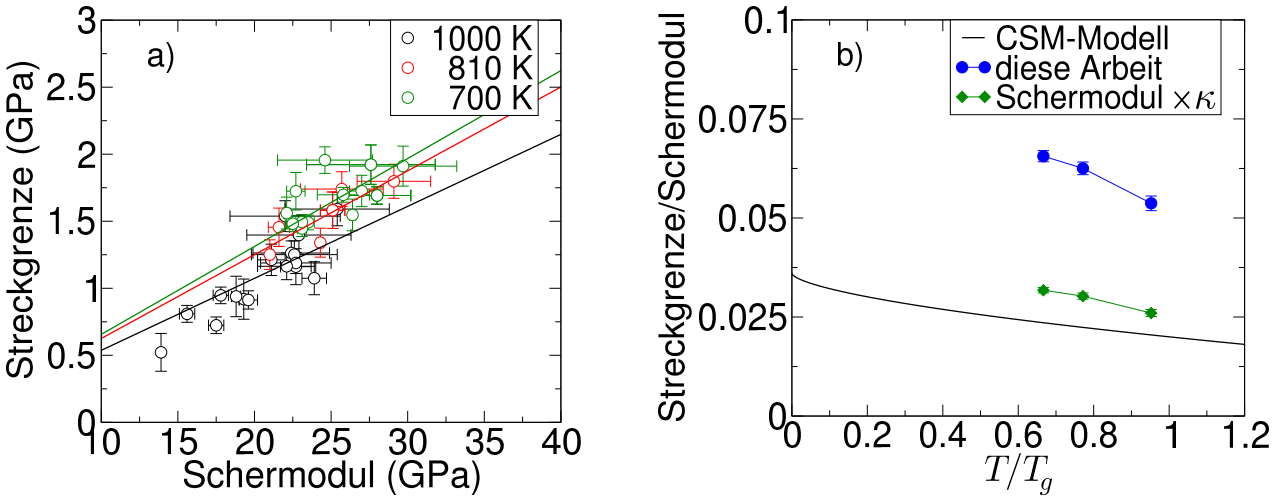

Abbildung 6.6: a) Bestimmung der Proportionalitätskonstante γ_T für 700 K, 810 K und 1000 K. Die angepassten Geraden sind eingezeichnet. b) Auftragung der Proportionalitätskonstanten gegen die reduzierte Temperatur T/T_g für die Daten der Simulationen (blau) und für simulierte Daten, bei denen der Schermodul jeweils um einen Faktor κ (siehe Text) skaliert wird (grün). Die durchgezogene Linie ist der in [211] gefundene Zusammenhang.

Daher wird eine Skalierung der aus den Spannungs-Dehnungs-Kurven gewonnenen Schermoduli durchgeführt: Aus allen vorliegenden Werten $G_{\dot{\epsilon}}$ (x-Achse in Abb. 6.6 a)) wird ein Mittelwert G bestimmt. Dieser liegt bei $G_{\text{avg}} = \bar{G}_{\dot{\epsilon}} \approx 23$ GPa. Basierend auf den Messungen von Rubin und Schwarz [212] wird ein Skalierungsfaktor $\kappa = G^{\text{RubinSchwarz}}/G_{\text{avg}}$ mit $G^{\text{RubinSchwarz}} = 47.5$ gebildet, mit dem jeder dynamische Schermodul multipliziert wird. Entsprechend wird erneut ein Zusammenhang nach Formel (6.2) bestimmt, speziell $\sigma_Y = \gamma'_T \cdot G'_{\dot{\epsilon}} = \gamma'_T \cdot \kappa \cdot G_{\dot{\epsilon}}$. Die so bestimmten Proportionalitätskonstanten

$$\gamma'_{T=700\text{ K}} = 0.0317611625 \pm 0.0006851764$$
$$\gamma'_{T=810\text{ K}} = 0.0302780945 \pm 0.0007742011$$
$$\gamma'_{T=1000\text{ K}} = 0.0260013810 \pm 0.0008941752$$

sind in Abbildung 6.6 b) zusätzlich eingezeichnet (grüne Diamanten). Die Skalierung führt dazu, dass die Werte für γ'_T recht nah bei dem Verlauf nach Gleichung (6.3) mit den entsprechenden Parametern zu liegen kommen.

Diese Überlegungen zeigen, dass der bei einer Vielzahl metallischer Gläser gefundene Zusammenhang zwischen der auf den Schermodul normierten Streckgrenze und der auf die kalorische Glastemperatur normierten Systemtemperatur auch in einem simulierten $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-System zu bestätigen ist. Allerdings wird eine akzeptable quantitative Übereinstimmung nur gefunden, wenn man bei der Normierung den experimentellen Wert des Schermoduls berücksichtigt und die simulierten Daten entsprechend skaliert.

7. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird die plastische Verformung eines metallischen Glases unter reinen Scherverformungen mit Hilfe von MD-Simulationen untersucht. Das verwendete Potenzial ist ein an elektronentheoretische Resultate von Hausleitner und Hafner angepasstes Stillinger-Weber-Potenzial mit den Parametern einer $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Legierung. Durch Abkühlen von Schmelzkonfigurationen mit nominellen Abkühlraten $\sim 10^{10}$ K/s werden im Computer Ausgangsproben für unterschiedliche Temperaturen generiert, wobei die Bewegungsgleichungen mit einem modifizierten Gear-Prädiktor-Korrektor-Verfahren mit Zeitschritt 2 fs integriert werden. Zum einen werden kleine Proben mit 5184 Atomen in der Periodizitätszelle bei 700 K, 810 K und 1000 K erzeugt, die nachträglich über eine Zeit von 1 µs ausgelagert werden. Zum anderen werden große Systeme mit 17500 Atomen in der periodischen Simulationszelle bei 700 K und 1000 K hergestellt. Die Auslagerungsszeit der großen Systeme beträgt 60 ns.

Es werden unterschiedliche Verformungsexperimente simuliert. In einem ersten Schritt werden die Ausgangsproben unter konstanter Scherrate verformt, woraus Spannung-Dehnungs-Kurven in Abhängigkeit von Temperatur und Scherrate gewonnen werden (dynamischer Scherversuch). In einem zweiten Schritt werden bereits vorverformte Proben verwendet, die jeweils bis zu einem bestimmten Dehnungsgrad geschert sind, an denen dann weitere Verformungssimulationen durchgeführt werden. Dabei wird einerseits jeweils eine Referenzprobe aus dem linearen anfänglichen Teil der Spannungs-Dehnungs-Kurve und eine aus dem späten Bereich (> 10 % Dehnung) herangezogen, mit denen dann Nachverformungen durch Aufbringung einer konstanten Last ausgeführt werden. Dies entspricht einem Kriechexperiment. Andererseits werden bei den Nachverformungen die Verformungsrichtungen oder die Verformungsebenen variiert, sodass zum einen eine in eine bestimmte Richtung vorverformte Probe wieder zurückverformt wird, und zum anderen für die Nachverformung eine Verformungsebene gewählt wird, die senkrecht auf der bei der Vorverformung verwendeten liegt. Bei der Richtungsänderung werden komplette Verformungszyklen aufgenommen. Des Weiteren werden Langzeitsimulationen durchgeführt: Bis über die Streckgrenze vorverformte Proben werden ohne mechanische Belastungen im Sinne von isobar-isothermen Relaxationen ausgelagert.

Aus den Simulationen des dynamischen Scherveruchs resultieren Spannungs-Dehnungs-Kurven mit einem ausgeprägten Streckgrenzenbereich, die dem experimentell beobachteten Verformungsverhalten metallischer Gläser unter hohen Scherraten gleichen. Werden vorverformte Proben bei entsprechend hohen Scherraten weiterverformt, zeigt sich eine deutliche

Abnahme bis hin zum Verschwinden der ausgeprägten Streckgrenze. Weiterverformungen in Kriechexperimenten zeigen, dass Proben aus dem linearen Bereich nur gering verformbar sind, wohingegen Proben, die zunächst bis über die Streckgrenze verformt wurden, eine geringe Viskosität besitzen und sehr rasch große Dehnungen entwickeln.

Analysen der lokalen atomaren Topologie zeigen, dass der Übergang von einem schwer verformbaren Glas hin zu einem leichter verformbaren mit der Ausbildung von heterogen — in der Simulationzelle entlang einer Diagonalebene — verteilten Bereichen erhöhter Topologieänderung einhergeht. Der Grad der Lokalisierung der Topologieänderung wird durch die Temperatur und die Scherrate beeinflusst, mit einer Abnahme bei Verringerung der Scherrate oder bei Erhöhung der Temperatur. Die Bereiche mit starken Änderungen der Topologie sind bei Nachverformungen erneut durch massive Topologieänderungen ausgezeichnet.

Aus den Untersuchungen der atomaren Eigenschaften zweier Atomgruppen (zur ersten gehören die Atome, die durch massive Topologieänderungen charakterisiert sind, zur zweiten die Atome, die keine Topologieänderungen zeigen) folgt, dass diese durch statistisch signifikante Unterschiede in verschiedenen strukturellen Parametern wie der potenziellen Energie, der Käfigvolumina, der sterischen Ordnungsparameter oder der atomaren Spannungsverteilung charakterisiert sind. Der Vergleich der strukturellen Parameter mit denen vor der Verformung, zusammen mit der Auswertung eines lokalen Wendt-Abraham-Parameters, deuten auf einen heterogenen Übergang in den Fließzustand des $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Systems. Dieser Übergang ist bei geringeren Temperaturen stärker lokalisiert als bei höheren Temperaturen. Strukturell ist der Fließzustand eher mit dem einer Schmelzkonfiguration bei höherer Temperatur vergleichbar. Die räumlich begrenzt in den Fließzustand übergegangenen Bereiche sind leichter verformbar und werden bei nachfolgenden Deformationen bevorzugt wieder angeregt, wodurch die Befunde zu den Topologieänderungen bei den Nachverformungen erklärbar sind.

Die Auswertung der Langzeitsimulationen bezüglich der Änderung der potenziellen Energie von in den Fließzustand hinein verformten Ausgangsproben führt auf deutlich unterschiedliche Zeitskalen, die für einen Abbau der verformungsinduzierten strukturellen Änderungen nötig sind. Diese liegen bei 1000 K im Bereich einiger hundert Nanosekunden, dagegen zeigen Abschätzungen für 700 K bereits Relaxationszeiten von mehreren Mikrosekunden.

A. Tensorinvarianten

Es sei $\mathbf{D}$ eine 3×3-Matrix mit den Komponenten $D_{xx}, D_{xy}, \ldots, D_{zz}$. Mit Hilfe der Hauptachsentransformation (HAT) kann diese Matrix in Diagonalform $\mathbf{D}'$ mit den Eigenwerten $\lambda_1, \ldots, \lambda_3$ gebracht werden:

$$\mathbf{D} \xrightarrow{\text{HAT}} \mathbf{D}' = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}. \tag{A.1}$$

Die Berechnung der Eigenwerte erfolgt über das Lösen der charakteristischen Gleichung

$$det(\mathbf{D} - \lambda\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} D_{xx} - \lambda & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} - \lambda & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^3 + C_1 \cdot \lambda^2 + C_2 \cdot \lambda + C_3 = 0, \tag{A.2}$$

mit der Einheitsmatrix $\mathbf{I}$, $det(\,\cdot\,)$ bezeichnet die Operation der Berechnung der Determinante (vgl. unten). Die dabei auftretenden Größen λ_1 bis λ_3 sind die Eigenwerte, die Konstanten C_1 bis C_3 die — neben den Eigenwerten ebenfalls — Invarianten der Matrix. Die Eigenwerte sind Lösungen der charakteristischen Gleichung, die Konstanten C_i sind gegeben über die Beziehungen:

$$C_1 = D_{xx} + D_{yy} + D_{zz} \tag{A.3}$$

$$C_2 = D_{xx}D_{yy} - D_{xy}D_{yx} + D_{xx}D_{zz} - D_{xz}D_{zx} + D_{yy}D_{zz} - D_{yz}D_{zy} \tag{A.4}$$

$$\begin{aligned} C_3 = {} & D_{xx}(D_{yy}D_{zz} - D_{zy}D_{yz}) \\ & - D_{xy}(D_{yx}D_{zz} - D_{zx}D_{yz}) + D_{xz}(D_{yx}D_{zy} - D_{zx}D_{yy}) \end{aligned} \tag{A.5}$$

Im Hauptachsensystem der Matrix besteht ein besonderer Zusammenhang zwischen den Eigenwerten λ_i und den auftretenden Konstanten C_i:

$$C_1 = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \tag{A.6}$$

$$C_2 = \lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_2\lambda_3 \tag{A.7}$$

$$C_3 = \lambda_1\lambda_2\lambda_3 \tag{A.8}$$

Weiterhin gibt es Beziehungen zwischen den Invarianten $C_1, \ldots, C_3$ und den Kenngrößen einer Matrix, wie deren Spur oder ihrer Determinante,

$$\begin{aligned}
\text{Spur der Matrix } \mathbf{D} &\equiv Sp(\mathbf{D}) = \sum_{i=xx}^{zz} D_i = D_{xx} + D_{yy} + D_{zz} \equiv C_1, \\
\text{Determinante der Matrix } \mathbf{D} &\equiv det(\mathbf{D}) \\
&= D_{xx}(D_{yy}D_{zz} - D_{zy}D_{yz}) \\
&\quad - D_{xy}(D_{yx}D_{zz} - D_{zx}D_{yz}) \\
&\quad + D_{xz}(D_{yx}D_{zy} - D_{zx}D_{yy}) \equiv C_3.
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Letztere Invarianz wird offensichtlich im Hauptachsensystem, wo die Determinante das Produkt der drei Eigenwerte ist (vgl. (A.8)).

Zusammenhang mit dem Spannungstensor

Invarianten des Spannungstensors und des Spannungsdeviators hängen zusammen. Ist die erste bis dritte Invariante C_1 bis C_3 gegeben, so ergeben sich die drei Hauptnormalspannungen σ_{I}, σ_{II}, und σ_{III} über die Beziehungen

$$\sigma_{\mathrm{I}} = \frac{C_1}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{C_1^2 - 3C_2}\cos\left(\frac{\alpha}{3}\right), \tag{A.10}$$

$$\sigma_{\mathrm{II}} = \frac{C_1}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{C_1^2 - 3C_2}\cos\left(\frac{\alpha}{3} + \frac{2\pi}{3}\right), \tag{A.11}$$

$$\sigma_{\mathrm{III}} = \frac{C_1}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{C_1^2 - 3C_2}\cos\left(\frac{\alpha}{3} + \frac{4\pi}{3}\right), \tag{A.12}$$

$$\alpha = \arccos\left(\frac{2C_1^3 - 9C_1C_2 + 27C_3}{2\left(C_1^2 - 3C_2\right)^{\frac{3}{2}}}\right). \tag{A.13}$$

Werden die drei Hauptschubspannungen mit τ_{I}, τ_{II} und τ_{III} bezeichnet, gelten folgende Beziehungen:

$$\tau_{\mathrm{I}} = \frac{|\sigma_{\mathrm{I}} - \sigma_{\mathrm{II}}|}{2} \qquad \tau_{\mathrm{II}} = \frac{|\sigma_{\mathrm{I}} - \sigma_{\mathrm{III}}|}{2} \qquad \tau_{\mathrm{III}} = \frac{|\sigma_{\mathrm{II}} - \sigma_{\mathrm{III}}|}{2} \tag{A.14}$$

Die in beliebigen Systemen auftretenden maximal auftretenden Schubspannungen kann man über

$$\tau_{max} = \frac{\max|\sigma_i - \sigma_j|}{2} \qquad i, j = \mathrm{I,II,III} \tag{A.15}$$

bestimmen. Die Hauptnormalspannungen sind die Eigenwerte des Spannungstensors. Damit sind die Invarianten C_1 bis C_3 für den Spannungstensor über die Hauptnormalspannungen wie in Gln. (A.6) bis (A.8) zu bestimmen.

Der Spannungsdeviator, üblicherweise als der spurfreie Anteil des Spannungstensors angegeben, sei hier als $\boldsymbol{s}$ bezeichnet. Sei C_1 die erste Invariante des Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$, dann ist der Spannungsdeviator

$$\boldsymbol{s} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} - \frac{C_1}{3} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_{yy} - \frac{C_1}{3} & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_{zz} - \frac{C_1}{3} \end{pmatrix}. \tag{A.16}$$

Für den Spannungsdeviator lassen sich ebenfalls seine drei Invarianten berechnen. Um sie nicht mit den Invarianten für den Spannungstensor zu verwechseln seien sie hier mit C_1', C_2' und C_3' bezeichnet (in den Gleichungen (A.17) wird die Einstein'sche Summenkonvention verwendet), wobei gilt:

$$\begin{aligned} C_1' &= 0 \\ C_2' &= \frac{1}{2} s_{ij} s_{ji} = \frac{1}{6} \left[(\sigma_{\mathrm{I}} - \sigma_{\mathrm{II}})^2 + (\sigma_{\mathrm{II}} - \sigma_{\mathrm{III}})^2 + (\sigma_{\mathrm{I}} - \sigma_{\mathrm{III}})^2 \right] \\ C_3' &= \frac{1}{3} s_{ij} s_{jk} s_{ki} \end{aligned} \tag{A.17}$$

B. Herleitung der Form des Dehnungsratentensors

Die Simulationen zur Verformung mit vorgegebener Scherrate werden dadurch erreicht, dass die Simulationszelle z. B. in x-Richtung gedehnt und in y-Richtung gestaucht wird[1]. Der Deformationsratentensor $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ kann für diese Art der Prozessführung einfach durch

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \dot{\epsilon}_0 & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\epsilon}_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{B.1}$$

dargestellt werden.

Bei der Simulation wird dies dadurch realisiert, dass die Periodizitätszellenabmessungen L_x und L_y alle m Zeitschritte skaliert werden:

$$\begin{aligned} L_x(t + m\Delta t) &= L_x(t) + \dot{\epsilon} m \Delta t \cdot L_x(t) = (1 + \dot{\epsilon} m \Delta t) \cdot L_x(t), \\ L_y(t + m\Delta t) &= \frac{1}{1 + \dot{\epsilon} m \Delta t} \cdot L_y(t). \end{aligned}$$

Dies entspricht einer Transformation der Boxlängen (der x- und y-Längen, z bleibt konstant) nach folgender Formel:

$$\boldsymbol{L}' := \begin{pmatrix} L'_x \\ L'_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \dot{\epsilon} m \Delta t & 0 \\ 0 & \frac{1}{1 + \dot{\epsilon} m \Delta t} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \end{pmatrix} =: \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{L}.$$

Für den Dehnungstensor $\boldsymbol{\epsilon}$ gilt wegen $(1 + q)^{-1} \approx 1 - q + q^2 - \dots$ bei kleinem q:

$$\begin{pmatrix} 1 + \dot{\epsilon} m \Delta t & 0 \\ 0 & \frac{1}{1 + \dot{\epsilon} m \Delta t} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 + \dot{\epsilon} m \Delta t & 0 \\ 0 & 1 - \dot{\epsilon} m \Delta t \end{pmatrix}.$$

Im Allgemeinen kann für die zeitliche Entwicklung der Boxlängen in x- und y-Richtung geschrieben werden

$$\boldsymbol{L}(t) = \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{L}(t - m\Delta t) = \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{L}(t - 2m\Delta t) = \dots = \boldsymbol{\epsilon}^n \cdot \boldsymbol{L}(0).$$

[1] Bei den ebenfalls in dieser Arbeit durchgeführten Simulation in denen in z-Richtung gedehnt und in x-Richtung gestaucht wird, müssen die folgenden Gleichungen entsprechend modifiziert werden.

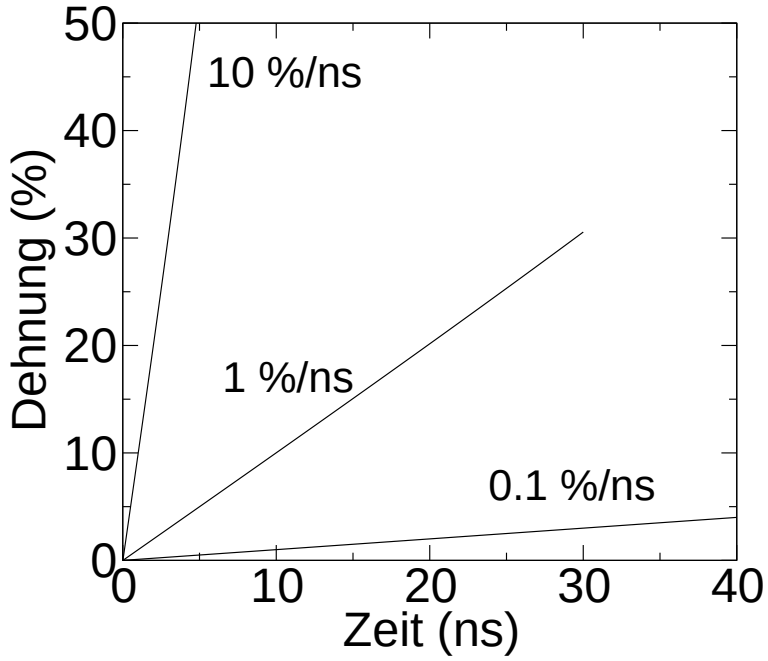

Abbildung B.1: Durch Wahl der Parameter m und $\dot{\epsilon}$ wird eine konstante Scherrate eingestellt. Hier ist die Zeitabhängigkeit der von Mises Dehnungen gezeigt. Die Daten stammen von den Simulationen des kleinen Systems (5184 Atome) bei 700 K.

Dann erhält man wegen $n \cdot m\Delta t = t$ und $(1 \pm q)^n \approx 1 \pm n \cdot q + \frac{n(n-1)}{2!} \cdot q^2 \pm \ldots$ den Dehnungsratentensor (Dehnung definiert über $L_x(t)/L_x(0)$) als Ableitung von $\boldsymbol{\epsilon}^n$ nach der Zeit t:

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}} = \frac{d}{dt}\boldsymbol{\epsilon}^n = \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} 1+\dot{\epsilon}t & 0 \\ 0 & 1-\dot{\epsilon}t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & -\dot{\epsilon} \end{pmatrix}.$$

Dieser hat die in Gleichung (B.1) beschriebene Form (hier wird nur der relevante Teil des Tensors gezeigt).

Zur Demonstration zeigt Abbildung B.1 die koordinateninvarianten von Mises Dehnungen dreier Simulationen eines dynamischen Scherversuchs in Abhängigkeit von der Zeit. Durch die Wahl unterschiedlicher Werte für m und $\dot{\epsilon}$ werden nominelle Dehnungsraten von 10, 1 und 0.1 %/ns eingestellt.

C. Berechnung der Größen zur Topologieuntersuchung

Für die Untersuchung zur Änderung der Topologie[1] in den durch eine bestimmte Atomkonfiguration $\{x_i(t)\}$ gegebenen Atompositionen werden die radialen Verteilungsfunktionen $g_{\mathrm{AB}}(r)$, Gl. C.1, benötigt. A und B stehen dabei für die Atomsorten Nickel bzw. Zirconium.

$$g_{\mathrm{AB}}(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N_{\mathrm{A}} N_{\mathrm{B}}} \left\langle \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{A}}} \sum_{j=1}^{N_{\mathrm{B}}}{}' \int_{r-\Delta r/2}^{r+\Delta r/2} \delta(r' - |\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_j(t)|) \cdot \frac{dr'}{\Delta r} \right\rangle_t \tag{C.1}$$

In Gl. C.1 ist V das Probenvolumen und $\delta(\,\cdot\,)$ die Dirac'sche Deltafunktion. Die Mittelung erfolgt über die Zeit und der Strich an der zweiten Summe soll andeuten, dass der Beitrag $j = i$ im Falle der Gleicheit der Sorten $\mathrm{A} = \mathrm{B}$ entfällt.

Aus den radialen Verteilungsfunktionen der Sorte A und B kann der Abstand R_{AB} des ersten Minimums bestimmt werden. Zwei Atome i und j werden als gebunden angesehen, wenn ihr Abstand kleiner als R_{AB} ist. Mit Hilfe der Stufenfunktion $\Theta(\,\cdot\,)$, die für Argumente kleiner Null verschwindet und sonst eins ist, kann jedes Atompaar mit Hilfe der Funktion $B_{ij}(t)$, Gl. C.2, untersucht werden.

$$B_{ij}(t) = \Theta(R_{\mathrm{AB}} - |\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_j(t)|) \tag{C.2}$$

Mit der Definition für $B_{ij}(t)$, kann die Anzahl der nächsten Nachbarn $\#\mathrm{NN}_i(t)$ oder der nächsten Nachbarn $\#\mathrm{NN}_i^{\mathrm{B}}(t)$ der Sorte B eines herausgegriffenen Atoms i zur Zeit t bestimmt werden. Zur einfacheren Notation sei bemerkt, dass sich jedem Atom einer Konfiguration eindeutig eine natürliche Zahl als Index zuweisen lässt. Bei $N = N_{\mathrm{A}} + N_{\mathrm{B}}$ Atomen sei $\mathcal{N} = \mathcal{N}_{\mathrm{A}} \bigcup \mathcal{N}_{\mathrm{B}} = \{1, 2, \ldots, N_{\mathrm{A}}, N_{\mathrm{A}} + 1, \ldots, N_{\mathrm{A}} + N_{\mathrm{B}}\} \subset \mathbb{N}$ eine Darstellung der Indexmenge einer Atomkonfiguration als Teilmenge der natürlichen Zahlen. Dann gilt:

$$\#\mathrm{NN}_i(t) = \sum_{j \in \mathcal{N} \setminus \{i\}} B_{ij}(t) \quad \text{bzw.} \quad \#\mathrm{NN}_i^{\mathrm{B}}(t) = \sum_{j \in \mathcal{N}_{\mathrm{B}} \setminus \{i\}} B_{ij}(t). \tag{C.3}$$

Für die Berechnung von $\#\mathrm{NN}_i(t)$ läuf j über alle Atome der Konfiguration ohne i. Bei $\#\mathrm{NN}_i^{\mathrm{B}}(t)$ läuft j nur über die Atome der Sorte B ohne i.

[1] Die hier dargestellten Formeln sind auf binäre System zugeschnitten.

Um für ein beliebiges, herausgegriffenes Atom i die Anzahl der verlorenen nächsten Nachbarn der Sorte B zwischen den Zeiten t_1 und t_2, $\lambda_i^{\mathrm{B}}(t_1, t_2)$, zu berechnen, benötigt man die Menge der Indizees der nächsten Nachbarn der Sorte B von i zur Zeit t_1

$$\mathcal{M}_i(t_1) = \{k \in \mathcal{N}_{\mathrm{B}} | B_{ik}(t_1) = 1, k \neq i\} \tag{C.4}$$

und die Summe der nächsten Nachbarn eines Atoms i zur Zeit t einer beliebigen Indexmenge $\mathcal{M}$ mit

$$\#\mathrm{NN}_i^{\mathcal{M}}(t) = \sum_{j \in \mathcal{M}} B_{ij}(t). \tag{C.5}$$

Mit Hilfe dieser Definitionen gilt:

$$\lambda_i^{\mathrm{B}}(t_1, t_2) = \#\mathrm{NN}_i^{\mathrm{B}}(t_1) - \#\mathrm{NN}_i^{\mathcal{M}_i(t_1)}(t_2) = \sum_{j \in \mathcal{N}_{\mathrm{B}} \setminus \{i\}} B_{ij}(t_1) - \sum_{j \in \mathcal{M}_i(t_1)} B_{ij}(t_2). \tag{C.6}$$

Offensichtlich ist:

$$\#\mathrm{NN}_i^{\mathcal{M}_i(t_1)}(t_1) = \#\mathrm{NN}_i^{\mathrm{B}}(t_1). \tag{C.7}$$

D. Anderson-Darling Test für die atomaren Charakteristika

Unbekannt verteilte Stichproben können auf ihre Zugehörigkeit zur Normalverteilung hin untersucht werden. Der Test auf Normaliät, der hier verwendet werden soll, ist der Anderson-Darling Test [213, 214]. Dieser berechnet die Prüfgröße B nach

$$B = -n - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[2i-1][\ln(p_i) + \ln(1 - p_{n-i+1})], \tag{D.1}$$

mit

$$p_i = \Phi([a_i - \overline{a}]/s), \tag{D.2}$$

und den p-Wert über eine abgeleitete Statistik, $Z = B(1.0 + 0.75/n + 2.25/n^2)$ [213]. $\overline{a}$ ist der Mittelwert der n betrachteten atomaren Größen a_i und $\Phi(x)$ die Verteilungsfunktion der Normalverteilung

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\cdot\pi}} \cdot \int_{-\infty}^{x} \exp\left(-t^2/2\right) dt. \tag{D.3}$$

Die Testresultate in Form des p-Werts des Anderson-Darling-Tests für die atomaren Größen (Mittelwerte der jeweils letzten vier Konfiguration) sind in Tabelle D.1 zusammengefasst. Dort werden auch die logarithmierten Größen verwendet, um zu prüfen ob eine Lognormalverteilung vorliegt, was für die Volumendaten in der Literatur diskutiert wird (z. B. [215, 216])[1]. Der Anderson-Darling Test belegt, dass der Unterschied zur Normalverteilung für sämtliche Verteilungen z. T. deutlich mehr als signifikant ist. Ausnahmen bildet der Q_5-Parameter für Ni bei 700 und 810 K (für die gut ausgelagerten kleinen Systeme), Q_6 für Ni bei allen drei Temperaturen und für beide Systemgrößen sowie die Größe φ_i^p für Ni bei 1000 K und für Zr bei allen Ausgangskonfigurationen[2]. Logarithmieren führt bei einigen Eigenschaften zu einer leichten Zunahme des p-Wertes. Generell bleibt in der überwiegenden Mehrzahl der Daten ein (mehr als nur) signifikanter Unterschied zu einer Normalverteilung. Anders als in den Arbeiten [215, 216] finden wir, dass das Ni-Volumen kaum lognormalverteilt ist. Bei den Daten für Zr fällt auf, dass für 1000 K (beide Systemgrößen) und für 700 K die große, wenig relaxierte

[1] Es sei betont, dass in den beiden Zitaten keine statistische Analyse der Verteilungen durchgeführt wird.

[2] Nochmal, das beweist nicht, dass die entsprechende Verteilung eine Normalverteilung ist, nur, dass die vorliegenden Daten nicht nahelegen, von der Normalverteilung abzusehen.

Tabelle D.1: Testresultate (p-Wert) des Anderson-Darling-Tests auf Normalität für die unterschiedlichen atomaren Eigenschaften.

Eigenschaft	700 K	810 K	1000 K	700 K[a]	1000 K[a]
E_{pot} (Ni)	3.3e-13	6.3e-09	5.3e-05	6.7e-32	1.5e-22
E_{pot} (Zr)	3.2e-09	6e-06	4.9e-10	6.4e-36	5.3e-22
$\mathcal{V}$ (Ni)	2.4e-12	1.1e-13	1.4e-08	4.8e-23	3.4e-19
$\mathcal{V}$ (Zr)	2.7e-11	6.8e-11	0.0016	2.5e-16	3.2e-12
Q_4 (Ni)	3.7e-13	2.2e-14	6.4e-12	6.5e-44	4.7e-30
Q_4 (Zr)	3.6e-18	7.6e-13	1.2e-11	4.9e-46	1.9e-41
Q_5 (Ni)	0.11	0.51	0.024	0.0025	0.0011
Q_5(Zr)	2.8e-15	2e-13	2.5e-09	2.8e-56	4.5e-44
Q_6 (Ni)	0.55	0.69	0.87	0.072	0.37
Q_6 (Zr)	0.00028	0.0019	0.0038	3e-23	4.5e-18
φ_i^p (Ni)	0.00028	0.0042	0.58	0.0047	0.14
φ_i^p (Zr)	0.058	0.15	0.37	0.58	0.53
φ_i^τ (Ni)	4.5e-20	4.9e-24	1.2e-20	6.2e-71	1.2e-70
φ_i^τ (Zr)	1.2e-21	3e-14	9.8e-08	1.8e-36	1.3e-30
$\log(E_{pot})$ (Ni)	4.3e-13	7.6e-09	6.8e-05	2e-31	4.8e-22
$\log(E_{pot})$ (Zr)	6e-09	9.9e-06	9.4e-10	6.8e-35	3.4e-21
$\log(\mathcal{V})$ (Ni)	7.6e-06	1.6e-07	0.00095	5e-06	0.0015
$\log(\mathcal{V})$ (Zr)	0.0017	0.0058	0.92	0.3	0.56
$\log(Q_4)$ (Ni)	8.7e-06	0.00059	1.8e-05	2.1e-22	8.4e-27
$\log(Q_4)$ (Zr)	0.35	0.014	0.00061	6.9e-12	9.8e-12
$\log(Q_5)$ (Ni)	1.1e-14	6.6e-13	4.1e-12	1.9e-45	1.6e-44
$\log(Q_5)$ (Zr)	0.025	0.0017	1.4e-05	4.6e-10	6.5e-09
$\log(Q_6)$ (Ni)	8.8e-08	1.6e-10	7.6e-12	5.4e-30	1.5e-27
$\log(Q_6)$ (Zr)	2.3e-07	4.7e-08	1.2e-09	5.7e-18	8e-18
$\log(\varphi_i^p)$ (Ni)	0.00016	0.0027	0.52	0.0013	0.063
$\log(\varphi_i^p)$ (Zr)	0.031	0.089	0.26	0.59	0.34
$\log(\varphi_i^\tau)$ (Ni)	0.00017	0.01	5.6e-07	6.9e-26	2.2e-21
$\log(\varphi_i^\tau)$ (Zr)	0.0064	0.00051	2.8e-13	6.9e-38	5.2e-37

[a]Daten für das große System

Probe die Nullhypothese nicht abgelehnt werden muss. Auch für einige andere Größen (Q_4 für Zr (kleines System bei 700 K), φ_i^p für Ni (kleines System bei 1000 K) und Zr (kleines System bei 810 und 1000 K, großes bei 700 und 1000 K)) wird die Nullhypothese nicht abgelehnt.

Das ist nicht verwunderlich, da das Logarithmieren von Stichprobenwerten ein Spezialfall der so genannten Box-Cox Transformation ist, die den Werten y_i einer Stichprobe die transformierten Werte $y_i^{(\lambda)}$ nach

$$y_i^{(\lambda)} = \begin{cases} \frac{(y_i^\lambda - 1)}{\lambda} & \text{wenn } \lambda \neq 0 \\ \log(y_i) & \text{wenn } \lambda = 0 \end{cases} \tag{D.4}$$

zuweist [217]. Diese dient dazu, unbekannt verteilte Stichpoben auf Normalverteilung zu transformieren, damit die Standardtests, welche als Grundvoraussetzung die Normalverteilung der Daten annehmen, angewendet werden können. Insbesondere dient die Transformation zum Ausgleich von Dispersionsunterschieden.

E. Ergebnisse der Signifikanztests für verschiedene Scherungen

Dieser Abschnitt enthält eine Zusammenstellung der Resultate der Signifikanztests unterschiedlicher Simulationen. Es werden Ergebnisse für zwei Wertepaare λ_1 und λ_2 dargestellt. Es handelt sich um die auch im Haupttext verwendeten Werte.

E.1. $\lambda_1 = 3$ und $\lambda_2 = 1$

Tabelle E.1 enthält eine Auflistung der Simulationsparameter mit einer zugehörigen Nummer, die bei den unten folgenden Tabellen E.2 bis E.15 als Bezug dienen. Diese enthalten die Resultate der Signifikanztests jeweils für eine spezielle atomare Eigenschaft und eine spezielle Atomsorte. Die dargestellten Resultate (wie z. B. p_{WMW} usw.) werden in Abschn. 4.3.2 erläutert.

Tabelle E.1: Parameter der Simulationen für die die Signifikanztests durchgeführt werden bei $\lambda_1 = 3$ und $\lambda_2 = 1$.

					Ni		Zr	
Nr.	T (K)	N	$\dot{\epsilon}$ (%/ns)	Zug/Druck	N_1	N_2	N_1	N_2
1	700	5184	0.1	xy	655	675	673	330
2	700	5184	0.1	zx	694	689	732	343
3	700	5184	1.0	xy	407	749	586	362
4	700	5184	1.0	zx	398	995	581	539
5	700	5184	10.0	xy	268	1034	501	612
6	700	5184	10.0	xy	223	934	490	512
7	700	5184	10.0	zx	262	1061	496	587
8	700	17500	1.0	xy	1483	2776	2134	1506
9	700	17500	1.0	zx	1481	2966	2082	1643
10	700	17500	10.0	xy	865	2958	1681	1451
11	700	17500	10.0	zx	966	3506	1843	2072
12	810	5184	0.1	xy	1073	477	924	212
13	810	5184	0.1	zx	945	546	874	326
14	810	5184	1.0	xy	532	738	627	359
15	810	5184	1.0	zx	574	692	736	322
16	810	5184	10.0	xy	336	924	544	550
17	810	5184	10.0	zx	362	932	572	468
18	1000	5184	0.1	zx	2224	77	1653	36
19	1000	5184	0.1	xy	2119	155	1462	100
20	1000	5184	1.0	xy	1283	303	1140	126
21	1000	5184	1.0	zx	1241	356	1070	147
22	1000	5184	10.0	xy	578	671	697	309
23	1000	5184	10.0	zx	584	554	746	194
24	1000	17500	1.0	xy	4566	1061	4026	500
25	1000	17500	1.0	zx	4419	1183	3899	583
26	1000	17500	10.0	xy	2077	1995	2602	961
27	1000	17500	10.0	zx	2125	2131	2750	1088

Tabelle E.2: Resultate der Signifikanztests für $E_{pot,i}$ Ni. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0^{(***)}$	$_{0.0483}0.0589_{0.0693}$	$0.542^{(ns)}$	$0.373^{(ns)}$	$_{0.843}0.947_{1.07}$	$0.489^{(ns)}$	$0.00455^{(**)}$	$0.768^{(ns)}$
2	$0^{(***)}$	$_{0.051}0.0614_{0.0718}$	$0.533^{(ns)}$	$0.135^{(ns)}$	$_{0.833}0.924_{1.02}$	$0.439^{(ns)}$	$0.265^{(ns)}$	$0.786^{(ns)}$
3	$0^{(***)}$	$_{0.0535}0.0651_{0.0769}$	$0.508^{(ns)}$	$0.00713^{(**)}$	$_{0.756}0.849_{0.955}$	$0.437^{(ns)}$	$0.391^{(ns)}$	$0.748^{(ns)}$
4	$0^{(***)}$	$_{0.0514}0.0633_{0.0748}$	$0.511^{(ns)}$	$0.0956^{(ns)}$	$_{0.805}0.905_{1.02}$	$0.48^{(ns)}$	$0.299^{(ns)}$	$0.763^{(ns)}$
5	$0^{(***)}$	$_{0.0604}0.0756_{0.0907}$	$0.484^{(ns)}$	$0.72^{(ns)}$	$_{0.852}0.976_{1.11}$	$0.499^{(ns)}$	$0.204^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$
6	$0^{(***)}$	$_{0.0729}0.0875_{0.102}$	$0.506^{(ns)}$	$0.196^{(ns)}$	$_{0.783}0.906_{1.05}$	$0.505^{(ns)}$	$0.469^{(ns)}$	$0.734^{(ns)}$
7	$0^{(***)}$	$_{0.0642}0.0773_{0.0903}$	$0.487^{(ns)}$	$0.0648^{(ns)}$	$_{0.757}0.874_{1.01}$	$0.453^{(ns)}$	$0.566^{(ns)}$	$0.765^{(ns)}$
8	$0^{(***)}$	$_{0.0673}0.0736_{0.0799}$	$0.522^{(ns)}$	$3.27\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.803}0.856_{0.914}$	$0.469^{(ns)}$	$0.0657^{(ns)}$	$0.734^{(ns)}$
9	$0^{(***)}$	$_{0.0595}0.0659_{0.0723}$	$0.519^{(ns)}$	$0.000823^{(***)}$	$_{0.846}0.899_{0.957}$	$0.411^{(ns)}$	$0.00432^{(**)}$	$0.758^{(ns)}$
10	$0^{(***)}$	$_{0.0677}0.0756_{0.0836}$	$0.47^{(ns)}$	$0.147^{(ns)}$	$_{0.876}0.945_{1.02}$	$0.441^{(ns)}$	$0.0602^{(ns)}$	$0.825^{(ns)}$
11	$0^{(***)}$	$_{0.0618}0.0693_{0.0768}$	$0.45^{(ns)}$	$0.0012^{(**)}$	$_{0.825}0.887_{0.953}$	$0.473^{(ns)}$	$0.089^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$
12	$0^{(***)}$	$_{0.0492}0.0582_{0.0675}$	$0.507^{(ns)}$	$0.278^{(ns)}$	$_{0.95}1.07_{1.2}$	$0.512^{(ns)}$	$0.127^{(ns)}$	$0.81^{(ns)}$
13	$0^{(***)}$	$_{0.0482}0.0572_{0.0662}$	$0.44^{(ns)}$	$0.684^{(ns)}$	$_{0.912}1.02_{1.15}$	$0.497^{(ns)}$	$0.115^{(ns)}$	$0.842^{(ns)}$
14	$0^{(***)}$	$_{0.0574}0.0676_{0.0778}$	$0.486^{(ns)}$	$0.565^{(ns)}$	$_{0.922}1.04_{1.17}$	$0.443^{(ns)}$	$0.284^{(ns)}$	$0.776^{(ns)}$
15	$0^{(***)}$	$_{0.0562}0.0661_{0.0763}$	$0.489^{(ns)}$	$0.104^{(ns)}$	$_{0.813}0.911_{1.02}$	$0.523^{(ns)}$	$0.388^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$
16	$0^{(***)}$	$_{0.062}0.0747_{0.0875}$	$0.52^{(ns)}$	$0.494^{(ns)}$	$_{0.841}0.953_{1.09}$	$0.459^{(ns)}$	$0.0795^{(ns)}$	$0.801^{(ns)}$
17	$0^{(***)}$	$_{0.0477}0.0591_{0.0705}$	$0.501^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$	$_{0.866}0.981_{1.12}$	$0.448^{(ns)}$	$0.02^{(*)}$	$0.768^{(ns)}$
18	$8.55\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.027}0.0441_{0.0609}$	$0.551^{(ns)}$	$0.975^{(ns)}$	$_{0.774}0.996_{1.31}$	$0.509^{(ns)}$	$0.783^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$
19	$0^{(***)}$	$_{0.0417}0.0541_{0.0668}$	$0.487^{(ns)}$	$0.115^{(ns)}$	$_{0.742}0.878_{1.03}$	$0.428^{(ns)}$	$0.142^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$
20	$0^{(***)}$	$_{0.0422}0.0525_{0.0627}$	$0.5^{(ns)}$	$0.66^{(ns)}$	$_{0.904}1.03_{1.17}$	$0.44^{(ns)}$	$0.405^{(ns)}$	$0.838^{(ns)}$
21	$0^{(***)}$	$_{0.0438}0.053_{0.0623}$	$0.515^{(ns)}$	$0.645^{(ns)}$	$_{0.909}1.03_{1.17}$	$0.555^{(ns)}$	$0.052^{(ns)}$	$0.786^{(ns)}$
22	$0^{(***)}$	$_{0.054}0.0639_{0.0737}$	$0.474^{(ns)}$	$0.395^{(ns)}$	$_{0.846}0.951_{1.07}$	$0.442^{(ns)}$	$0.122^{(ns)}$	$0.795^{(ns)}$
23	$0^{(***)}$	$_{0.0501}0.0605_{0.0708}$	$0.464^{(ns)}$	$0.495^{(ns)}$	$_{0.848}0.958_{1.08}$	$0.577^{(ns)}$	$0.197^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
24	$0^{(***)}$	$_{0.0457}0.0514_{0.057}$	$0.557^{(ns)}$	$0.419^{(ns)}$	$_{0.907}0.972_{1.04}$	$0.512^{(ns)}$	$0.0206^{(*)}$	$0.778^{(ns)}$
25	$0^{(***)}$	$_{0.0503}0.0557_{0.0611}$	$0.497^{(ns)}$	$0.0853^{(ns)}$	$_{0.882}0.943_{1.01}$	$0.469^{(ns)}$	$0.00723^{(**)}$	$0.762^{(ns)}$
26	$0^{(***)}$	$_{0.0648}0.0705_{0.0762}$	$0.506^{(ns)}$	$0.0621^{(ns)}$	$_{0.883}0.941_{1}$	$0.503^{(ns)}$	$0.018^{(*)}$	$0.808^{(ns)}$
27	$0^{(***)}$	$_{0.0586}0.064_{0.0693}$	$0.518^{(ns)}$	$0.000216^{(***)}$	$_{0.833}0.887_{0.945}$	$0.429^{(ns)}$	$0.000849^{(***)}$	$0.783^{(ns)}$

Tabelle E.3: Resultate der Signifikanztests für $E_{pot,i}$ Zr. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0^{(***)}$	$_{0.0683}0.088_{0.107}$	$0.466^{(ns)}$	$0.000435^{(***)}$	$_{0.71}0.804_{0.909}$	$0.541^{(ns)}$	$0.391^{(ns)}$	$0.818^{(ns)}$
2	$1.33e\text{-}15^{(***)}$	$_{0.0609}0.0801_{0.0992}$	$0.468^{(ns)}$	$0.0177^{(*)}$	$_{0.77}0.867_{0.975}$	$0.544^{(ns)}$	$0.816^{(ns)}$	$0.806^{(ns)}$
3	$1.5e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.05}0.07_{0.09}$	$0.456^{(ns)}$	$0.0422^{(*)}$	$_{0.793}0.891_{0.996}$	$0.49^{(ns)}$	$0.998^{(ns)}$	$0.799^{(ns)}$
4	$0^{(***)}$	$_{0.0633}0.081_{0.0987}$	$0.467^{(ns)}$	$0.000716^{(***)}$	$_{0.754}0.836_{0.926}$	$0.508^{(ns)}$	$0.611^{(ns)}$	$0.81^{(ns)}$
5	$2.22e\text{-}15^{(***)}$	$_{0.058}0.0765_{0.0947}$	$0.479^{(ns)}$	$0.0137^{(*)}$	$_{0.777}0.869_{0.971}$	$0.545^{(ns)}$	$0.323^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
6	$7.15e\text{-}13^{(***)}$	$_{0.0531}0.0724_{0.092}$	$0.478^{(ns)}$	$0.718^{(ns)}$	$_{0.918}1.02_{1.14}$	$0.47^{(ns)}$	$0.583^{(ns)}$	$0.761^{(ns)}$
7	$0^{(***)}$	$_{0.0766}0.0942_{0.112}$	$0.479^{(ns)}$	$0.0356^{(*)}$	$_{0.794}0.886_{0.992}$	$0.465^{(ns)}$	$0.599^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
8	$0^{(***)}$	$_{0.0585}0.0683_{0.0781}$	$0.458^{(ns)}$	$1.79e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.803}0.852_{0.905}$	$0.492^{(ns)}$	$0.0646^{(ns)}$	$0.754^{(ns)}$
9	$0^{(***)}$	$_{0.0589}0.0687_{0.0784}$	$0.504^{(ns)}$	$1.01e\text{-}10^{(***)}$	$_{0.773}0.821_{0.871}$	$0.441^{(ns)}$	$0.625^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
10	$0^{(***)}$	$_{0.0726}0.0833_{0.094}$	$0.464^{(ns)}$	$0.0102^{(*)}$	$_{0.862}0.919_{0.98}$	$0.466^{(ns)}$	$0.194^{(ns)}$	$0.825^{(ns)}$
11	$0^{(***)}$	$_{0.0571}0.0669_{0.0767}$	$0.458^{(ns)}$	$2.47e\text{-}08^{(***)}$	$_{0.803}0.849_{0.9}$	$0.533^{(ns)}$	$0.294^{(ns)}$	$0.82^{(ns)}$
12	$2.44e\text{-}08^{(***)}$	$_{0.038}0.0584_{0.0784}$	$0.542^{(ns)}$	$0.109^{(ns)}$	$_{0.771}0.89_{1.03}$	$0.533^{(ns)}$	$0.901^{(ns)}$	$0.758^{(ns)}$
13	$1.33e\text{-}15^{(***)}$	$_{0.055}0.0723_{0.0893}$	$0.511^{(ns)}$	$0.000219^{(***)}$	$_{0.717}0.804_{0.902}$	$0.49^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
14	$4.83e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.0446}0.0627_{0.081}$	$0.503^{(ns)}$	$0.0333^{(*)}$	$_{0.778}0.879_{0.99}$	$0.51^{(ns)}$	$0.56^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
15	$1.82e\text{-}14^{(***)}$	$_{0.0585}0.0779_{0.0973}$	$0.524^{(ns)}$	$0.00263^{(**)}$	$_{0.736}0.832_{0.939}$	$0.508^{(ns)}$	$0.95^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$
16	$7.32e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.035}0.053_{0.0709}$	$0.482^{(ns)}$	$0.00048^{(***)}$	$_{0.744}0.827_{0.92}$	$0.466^{(ns)}$	$0.854^{(ns)}$	$0.842^{(ns)}$
17	$0^{(***)}$	$_{0.0827}0.0994_{0.116}$	$0.488^{(ns)}$	$0.000419^{(***)}$	$_{0.741}0.824_{0.918}$	$0.488^{(ns)}$	$0.89^{(ns)}$	$0.813^{(ns)}$
18	$2.84e\text{-}08^{(***)}$	$_{0.0763}0.113_{0.15}$	$0.537^{(ns)}$	$0.827^{(ns)}$	$_{0.731}0.97_{1.27}$	$0.474^{(ns)}$	$0.77^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
19	$2.13e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.0545}0.0795_{0.104}$	$0.621^{(ns)}$	$0.00247^{(**)}$	$_{0.648}0.77_{0.912}$	$0.492^{(ns)}$	$0.677^{(ns)}$	$0.734^{(ns)}$
20	$1.75e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.0281}0.0512_{0.0737}$	$0.432^{(ns)}$	$0.162^{(ns)}$	$_{0.76}0.895_{1.05}$	$0.426^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
21	$1.03e\text{-}12^{(***)}$	$_{0.061}0.0827_{0.104}$	$0.543^{(ns)}$	$0.0194^{(*)}$	$_{0.702}0.822_{0.968}$	$0.477^{(ns)}$	$0.972^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$
22	$6.57e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.0451}0.064_{0.0829}$	$0.518^{(ns)}$	$0.00936^{(**)}$	$_{0.759}0.855_{0.962}$	$0.476^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$
23	$8.66e\text{-}15^{(***)}$	$_{0.0674}0.0896_{0.111}$	$0.528^{(ns)}$	$0.199^{(ns)}$	$_{0.784}0.908_{1.05}$	$0.497^{(ns)}$	$0.905^{(ns)}$	$0.781^{(ns)}$
24	$0^{(***)}$	$_{0.0405}0.0523_{0.0642}$	$0.554^{(ns)}$	$5.98e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.768}0.838_{0.913}$	$0.539^{(ns)}$	$0.964^{(ns)}$	$0.74^{(ns)}$
25	$0^{(***)}$	$_{0.0503}0.0611_{0.0718}$	$0.47^{(ns)}$	$0.0016^{(**)}$	$_{0.811}0.879_{0.952}$	$0.493^{(ns)}$	$0.851^{(ns)}$	$0.789^{(ns)}$
26	$0^{(***)}$	$_{0.0507}0.061_{0.0713}$	$0.446^{(ns)}$	$8.83e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.816}0.873_{0.934}$	$0.469^{(ns)}$	$0.625^{(ns)}$	$0.811^{(ns)}$
27	$0^{(***)}$	$_{0.0534}0.0631_{0.0729}$	$0.488^{(ns)}$	$2.51e\text{-}13^{(***)}$	$_{0.74}0.789_{0.84}$	$0.469^{(ns)}$	$0.0541^{(ns)}$	$0.791^{(ns)}$

Tabelle E.4: Resultate der Signifikanztests für $\mathcal{V}_i$ Ni. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.00047^{(***)}$	$_{-0.000266}-0.000168_{-8.3e-05}$	$0.483^{(ns)}$	$0.000594^{(***)}$	$_{0.766}0.844_{0.929}$	$0.473^{(ns)}$	$0.285^{(ns)}$	$0.737^{(ns)}$
2	$0.0114^{(*)}$	$_{-0.000213}-0.000117_{-4.24e-05}$	$0.438^{(ns)}$	$7.6e-06^{(***)}$	$_{0.727}0.8_{0.883}$	$0.514^{(ns)}$	$0.0117^{(*)}$	$0.779^{(ns)}$
3	$1.83e-07^{(***)}$	$_{-0.000399}-0.00028_{-0.000179}$	$0.581^{(ns)}$	$7.27e-05^{(***)}$	$_{0.726}0.807_{0.896}$	$0.485^{(ns)}$	$0.0303^{(*)}$	$0.786^{(ns)}$
4	$0.000348^{(***)}$	$_{-0.000288}-0.000184_{-8.67e-05}$	$0.507^{(ns)}$	$0.000576^{(***)}$	$_{0.745}0.828_{0.922}$	$0.492^{(ns)}$	$0.244^{(ns)}$	$0.777^{(ns)}$
5	$3.05e-08^{(***)}$	$_{-0.000483}-0.00035_{-0.000213}$	$0.479^{(ns)}$	$0.0183^{(*)}$	$_{0.767}0.865_{0.976}$	$0.437^{(ns)}$	$0.843^{(ns)}$	$0.808^{(ns)}$
6	$1.37e-10^{(***)}$	$_{-0.000549}-0.000433_{-0.000287}$	$0.509^{(ns)}$	$0.00545^{(**)}$	$_{0.738}0.837_{0.949}$	$0.44^{(ns)}$	$0.992^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
7	$0.000374^{(***)}$	$_{-0.000336}-0.000217_{-9.36e-05}$	$0.482^{(ns)}$	$0.000998^{(***)}$	$_{0.715}0.811_{0.919}$	$0.455^{(ns)}$	$0.29^{(ns)}$	$0.731^{(ns)}$
8	$3.24e-39^{(***)}$	$_{-0.000411}-0.000375_{-0.000338}$	$0.513^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.7}0.741_{0.784}$	$0.519^{(ns)}$	$0.0945^{(ns)}$	$0.813^{(ns)}$
9	$7.86e-22^{(***)}$	$_{-0.000332}-0.000268_{-0.000214}$	$0.531^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.74}0.782_{0.827}$	$0.388^{(ns)}$	$0.0728^{(ns)}$	$0.781^{(ns)}$
10	$9.48e-20^{(***)}$	$_{-0.000394}-0.000327_{-0.000257}$	$0.504^{(ns)}$	$3.46e-08^{(***)}$	$_{0.773}0.826_{0.884}$	$0.47^{(ns)}$	$0.035^{(*)}$	$0.795^{(ns)}$
11	$1.74e-16^{(***)}$	$_{-0.000342}-0.000285_{-0.0002}$	$0.505^{(ns)}$	$4.83e-08^{(***)}$	$_{0.782}0.834_{0.89}$	$0.468^{(ns)}$	$0.142^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$
12	$0.0152^{(*)}$	$_{-0.000192}-0.000104_{-2.02e-05}$	$0.488^{(ns)}$	$0.00338^{(**)}$	$_{0.79}0.868_{0.954}$	$0.467^{(ns)}$	$0.226^{(ns)}$	$0.855^{(ns)}$
13	$0.114^{(ns)}$	$_{-0.000147}-6.95e-05_{1.46e-05}$	$0.515^{(ns)}$	$5.41e-06^{(***)}$	$_{0.724}0.8_{0.879}$	$0.532^{(ns)}$	$0.116^{(ns)}$	$0.746^{(ns)}$
14	$4.69e-06^{(***)}$	$_{-0.000298}-0.000224_{-0.000118}$	$0.46^{(ns)}$	$0.000909^{(***)}$	$_{0.763}0.844_{0.935}$	$0.462^{(ns)}$	$0.154^{(ns)}$	$0.777^{(ns)}$
15	$9.34e-06^{(***)}$	$_{-0.000314}-0.000216_{-0.000119}$	$0.558^{(ns)}$	$4.95e-07^{(***)}$	$_{0.695}0.77_{0.853}$	$0.495^{(ns)}$	$0.153^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
16	$4.72e-08^{(***)}$	$_{-0.000424}-0.000316_{-0.000178}$	$0.521^{(ns)}$	$7.43e-06^{(***)}$	$_{0.692}0.774_{0.865}$	$0.462^{(ns)}$	$0.492^{(ns)}$	$0.813^{(ns)}$
17	$0.114^{(ns)}$	$_{-0.000186}-6.83e-05_{3.61e-05}$	$0.496^{(ns)}$	$0.0187^{(*)}$	$_{0.777}0.87_{0.977}$	$0.496^{(ns)}$	$0.173^{(ns)}$	$0.754^{(ns)}$
18	$0.203^{(ns)}$	$_{-6.18e-05}8.38e-05_{0.000253}$	$0.533^{(ns)}$	$0.135^{(ns)}$	$_{0.697}0.856_{1.05}$	$0.493^{(ns)}$	$0.587^{(ns)}$	$0.735^{(ns)}$
19	$0.319^{(ns)}$	$_{-7.43e-05}5.11e-05_{0.000178}$	$0.513^{(ns)}$	$1.77e-08^{(***)}$	$_{0.584}0.671_{0.768}$	$0.449^{(ns)}$	$0.113^{(ns)}$	$0.798^{(ns)}$
20	$0.204^{(ns)}$	$_{-0.000159}-5.01e-05_{4.39e-05}$	$0.511^{(ns)}$	$0.000646^{(***)}$	$_{0.744}0.829_{0.923}$	$0.529^{(ns)}$	$0.16^{(ns)}$	$0.804^{(ns)}$
21	$0.173^{(ns)}$	$_{-0.00015}-8.34e-05_{3.42e-05}$	$0.598^{(ns)}$	$0.0085^{(**)}$	$_{0.784}0.871_{0.965}$	$0.483^{(ns)}$	$0.355^{(ns)}$	$0.762^{(ns)}$
22	$0.00239^{(**)}$	$_{-0.000238}-0.000143_{-5.17e-05}$	$0.51^{(ns)}$	$2.84e-05^{(***)}$	$_{0.731}0.81_{0.892}$	$0.457^{(ns)}$	$0.206^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
23	$7.3e-05^{(***)}$	$_{-0.000309}-0.000194_{-9.3e-05}$	$0.455^{(ns)}$	$1.79e-05^{(***)}$	$_{0.725}0.804_{0.89}$	$0.431^{(ns)}$	$0.0646^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
24	$3.69e-05^{(***)}$	$_{-0.000159}-0.000108_{-5.92e-05}$	$0.525^{(ns)}$	$9.65e-13^{(***)}$	$_{0.763}0.809_{0.857}$	$0.465^{(ns)}$	$0.0922^{(ns)}$	$0.756^{(ns)}$
25	$0.000298^{(***)}$	$_{-0.000153}-9.23e-05_{-4.19e-05}$	$0.551^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.727}0.77_{0.816}$	$0.475^{(ns)}$	$0.00337^{(**)}$	$0.712^{(ns)}$
26	$1.23e-30^{(***)}$	$_{-0.000358}-0.000301_{-0.000233}$	$0.512^{(ns)}$	$4.44e-16^{(***)}$	$_{0.754}0.797_{0.841}$	$0.506^{(ns)}$	$0.0106^{(*)}$	$0.754^{(ns)}$
27	$1.02e-16^{(***)}$	$_{-0.000257}-0.000203_{-0.00016}$	$0.476^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.703}0.743_{0.785}$	$0.485^{(ns)}$	$0.00437^{(**)}$	$0.742^{(ns)}$

Tabelle E.5: Resultate der Signifikanztests für $\mathcal{V}_i$ Zr. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.0201^{(*)}$	$_{-0.000347}$-0.000183$_{-3.37e-05}$	$0.555^{(ns)}$	$1.76e-05^{(***)}$	$_{0.68}0.768_{0.864}$	$0.426^{(ns)}$	$0.912^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$
2	$0.171^{(ns)}$	$_{-0.000265}$-9.77e-05$_{6.26e-05}$	$0.501^{(ns)}$	$0.000375^{(***)}$	$_{0.716}0.806_{0.907}$	$0.51^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$	$0.836^{(ns)}$
3	$0.00365^{(**)}$	$_{-0.000376}$-0.000216$_{-4.64e-05}$	$0.564^{(ns)}$	$0.0677^{(ns)}$	$_{0.8}0.898_{1.01}$	$0.534^{(ns)}$	$0.167^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
4	$0.216^{(ns)}$	$_{-0.000249}$-8.57e-05$_{4.58e-05}$	$0.541^{(ns)}$	$1.2e-06^{(***)}$	$_{0.698}0.774_{0.857}$	$0.598^{(ns)}$	$0.993^{(ns)}$	$0.845^{(ns)}$
5	$1.35e-05^{(***)}$	$_{-0.00046}$-0.000314$_{-0.000205}$	$0.491^{(ns)}$	$3.04e-06^{(***)}$	$_{0.691}0.771_{0.858}$	$0.495^{(ns)}$	$0.707^{(ns)}$	$0.753^{(ns)}$
6	$1.7e-07^{(***)}$	$_{-0.000563}$-0.000424$_{-0.000269}$	$0.518^{(ns)}$	$1.11e-07^{(***)}$	$_{0.647}0.727_{0.818}$	$0.545^{(ns)}$	$0.846^{(ns)}$	$0.801^{(ns)}$
7	$0.742^{(ns)}$	$_{-0.000126}$2.76e-06$_{0.000178}$	$0.463^{(ns)}$	$0.00927^{(**)}$	$_{0.783}0.871_{0.968}$	$0.453^{(ns)}$	$0.999^{(ns)}$	$0.828^{(ns)}$
8	$7.47e-12^{(***)}$	$_{-0.000337}$-0.000262$_{-0.000206}$	$0.514^{(ns)}$	$1.38e-14^{(***)}$	$_{0.734}0.781_{0.831}$	$0.479^{(ns)}$	$0.88^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
9	$0.00815^{(**)}$	$_{-0.000185}$-9.06e-05$_{-2.14e-05}$	$0.433^{(ns)}$	$1.53e-13^{(***)}$	$_{0.752}0.798_{0.847}$	$0.438^{(ns)}$	$0.969^{(ns)}$	$0.821^{(ns)}$
10	$1.94e-06^{(***)}$	$_{-0.000318}$-0.000207$_{-0.000119}$	$0.448^{(ns)}$	$3e-10^{(***)}$	$_{0.762}0.812_{0.866}$	$0.483^{(ns)}$	$0.756^{(ns)}$	$0.792^{(ns)}$
11	$5.73e-07^{(***)}$	$_{-0.00028}$-0.000194$_{-0.000121}$	$0.478^{(ns)}$	$1.64e-14^{(***)}$	$_{0.757}0.8_{0.847}$	$0.537^{(ns)}$	$0.998^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
12	$0.0638^{(ns)}$	$_{-0.000356}$-0.000166$_{1.12e-05}$	$0.485^{(ns)}$	$5.46e-08^{(***)}$	$_{0.622}0.705_{0.799}$	$0.464^{(ns)}$	$0.694^{(ns)}$	$0.803^{(ns)}$
13	$0.652^{(ns)}$	$_{-0.000105}$3.09e-05$_{0.000147}$	$0.491^{(ns)}$	$6.31e-05^{(***)}$	$_{0.693}0.782_{0.88}$	$0.413^{(ns)}$	$0.996^{(ns)}$	$0.756^{(ns)}$
14	$0.0357^{(*)}$	$_{-0.000304}$-0.000156$_{-1.47e-05}$	$0.552^{(ns)}$	$0.00159^{(**)}$	$_{0.727}0.82_{0.928}$	$0.533^{(ns)}$	$0.984^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$
15	$0.483^{(ns)}$	$_{-0.000207}$-6.16e-05$_{8.65e-05}$	$0.417^{(ns)}$	$5.01e-06^{(***)}$	$_{0.674}0.757_{0.848}$	$0.479^{(ns)}$	$0.985^{(ns)}$	$0.746^{(ns)}$
16	$2.02e-05^{(***)}$	$_{-0.000463}$-0.000304$_{-0.00016}$	$0.411^{(ns)}$	$2.32e-05^{(***)}$	$_{0.714}0.793_{0.881}$	$0.454^{(ns)}$	$0.907^{(ns)}$	$0.749^{(ns)}$
17	$0.311^{(ns)}$	$_{-9.34e-05}$8.43e-05$_{0.000223}$	$0.551^{(ns)}$	$5.23e-06^{(***)}$	$_{0.689}0.771_{0.861}$	$0.521^{(ns)}$	$0.949^{(ns)}$	$0.826^{(ns)}$
18	$0.485^{(ns)}$	$_{-0.000483}$-0.000122$_{0.000224}$	$0.514^{(ns)}$	$0.0118^{(*)}$	$_{0.506}0.683_{0.915}$	$0.437^{(ns)}$	$0.901^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$
19	$0.0302^{(*)}$	$_{-0.000457}$-0.000233$_{-2.42e-05}$	$0.483^{(ns)}$	$0.000817^{(***)}$	$_{0.588}0.711_{0.862}$	$0.543^{(ns)}$	$0.914^{(ns)}$	$0.82^{(ns)}$
20	$0.642^{(ns)}$	$_{-0.000255}$-5.68e-05$_{0.000138}$	$0.498^{(ns)}$	$0.000148^{(***)}$	$_{0.607}0.717_{0.848}$	$0.535^{(ns)}$	$0.896^{(ns)}$	$0.758^{(ns)}$
21	$0.813^{(ns)}$	$_{-0.000207}$-2.09e-05$_{0.000156}$	$0.513^{(ns)}$	$0.000296^{(***)}$	$_{0.633}0.744_{0.872}$	$0.528^{(ns)}$	$0.95^{(ns)}$	$0.818^{(ns)}$
22	$0.000673^{(***)}$	$_{-0.000411}$-0.000269$_{-0.000113}$	$0.531^{(ns)}$	$1.11e-05^{(***)}$	$_{0.674}0.759_{0.858}$	$0.529^{(ns)}$	$0.887^{(ns)}$	$0.853^{(ns)}$
23	$0.999^{(ns)}$	$_{-0.0002}$-1e-05$_{0.000191}$	$0.498^{(ns)}$	$0.00203^{(**)}$	$_{0.686}0.794_{0.919}$	$0.44^{(ns)}$	$0.705^{(ns)}$	$0.757^{(ns)}$
24	$0.256^{(ns)}$	$_{-0.000132}$-5.27e-05$_{3.98e-05}$	$0.51^{(ns)}$	$0.00886^{(**)}$	$_{0.813}0.888_{0.97}$	$0.519^{(ns)}$	$0.239^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
25	$0.00342^{(**)}$	$_{-0.000239}$-0.000133$_{-4.5e-05}$	$0.59^{(ns)}$	$1.21e-07^{(***)}$	$_{0.738}0.801_{0.869}$	$0.516^{(ns)}$	$0.994^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
26	$3.38e-06^{(***)}$	$_{-0.000261}$-0.000198$_{-0.000126}$	$0.43^{(ns)}$	$2.22e-15^{(***)}$	$_{0.719}0.767_{0.818}$	$0.525^{(ns)}$	$0.666^{(ns)}$	$0.746^{(ns)}$
27	$2.5e-05^{(***)}$	$_{-0.000255}$-0.000145$_{-7.82e-05}$	$0.519^{(ns)}$	$1.33e-14^{(***)}$	$_{0.725}0.774_{0.825}$	$0.554^{(ns)}$	$0.62^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$

Tabelle E.6: Resultate der Signifikanztests für Q_4 Ni. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.000705^{(***)}$	$_{0.00315}0.00746_{0.0118}$	$0.417^{(ns)}$	$4.06\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.71}0.781_{0.859}$	$0.539^{(ns)}$	$0.149^{(ns)}$	$0.799^{(ns)}$
2	$0.000396^{(***)}$	$_{0.00334}0.00746_{0.0116}$	$0.396^{(ns)}$	$3.72\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.685}0.753_{0.827}$	$0.429^{(ns)}$	$0.876^{(ns)}$	$0.776^{(ns)}$
3	$0.134^{(ns)}$	$_{-0.00106}0.00352_{0.00803}$	$0.592^{(ns)}$	$2.8\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.621}0.694_{0.775}$	$0.568^{(ns)}$	$0.9^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
4	$2.55\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.0054}0.00999_{0.0145}$	$0.441^{(ns)}$	$2.1\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.618}0.688_{0.767}$	$0.508^{(ns)}$	$0.204^{(ns)}$	$0.785^{(ns)}$
5	$0.00916^{(**)}$	$_{0.00188}0.0075_{0.013}$	$0.425^{(ns)}$	$0.000126^{(***)}$	$_{0.689}0.78_{0.885}$	$0.49^{(ns)}$	$0.71^{(ns)}$	$0.732^{(ns)}$
6	$0.286^{(ns)}$	$_{-0.00864}-0.00303_{0.00261}$	$0.533^{(ns)}$	$7.35\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.608}0.686_{0.778}$	$0.442^{(ns)}$	$0.941^{(ns)}$	$0.819^{(ns)}$
7	$0.0159^{(*)}$	$_{0.00125}0.00655_{0.0118}$	$0.519^{(ns)}$	$0.000657^{(***)}$	$_{0.718}0.81_{0.913}$	$0.583^{(ns)}$	$0.831^{(ns)}$	$0.783^{(ns)}$
8	$0.00231^{(**)}$	$_{0.00135}0.00379_{0.00622}$	$0.472^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.663}0.703_{0.745}$	$0.439^{(ns)}$	$0.866^{(ns)}$	$0.792^{(ns)}$
9	$2.31\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.00336}0.00571_{0.00807}$	$0.567^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.668}0.707_{0.75}$	$0.552^{(ns)}$	$0.692^{(ns)}$	$0.74^{(ns)}$
10	$0.00141^{(**)}$	$_{0.00186}0.00481_{0.00776}$	$0.577^{(ns)}$	$1.91\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.731}0.782_{0.837}$	$0.463^{(ns)}$	$0.7^{(ns)}$	$0.759^{(ns)}$
11	$0.0493^{(*)}$	$_{3.29\text{e-}07}0.00274_{0.00545}$	$0.615^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.67}0.716_{0.765}$	$0.441^{(ns)}$	$0.539^{(ns)}$	$0.749^{(ns)}$
12	$1.85\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.00457}0.00843_{0.0122}$	$0.464^{(ns)}$	$5.36\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.708}0.785_{0.871}$	$0.51^{(ns)}$	$0.969^{(ns)}$	$0.772^{(ns)}$
13	$2.66\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.0057}0.00979_{0.0138}$	$0.538^{(ns)}$	$1.47\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.633}0.695_{0.764}$	$0.436^{(ns)}$	$0.929^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
14	$0.201^{(ns)}$	$_{-0.00148}0.00268_{0.00684}$	$0.48^{(ns)}$	$0.00145^{(**)}$	$_{0.762}0.844_{0.936}$	$0.508^{(ns)}$	$0.705^{(ns)}$	$0.838^{(ns)}$
15	$0.0014^{(**)}$	$_{0.00261}0.00671_{0.0107}$	$0.474^{(ns)}$	$1\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.664}0.736_{0.816}$	$0.566^{(ns)}$	$0.254^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
16	$0.246^{(ns)}$	$_{-0.00205}0.00285_{0.00785}$	$0.493^{(ns)}$	$3.38\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.675}0.758_{0.851}$	$0.485^{(ns)}$	$0.724^{(ns)}$	$0.815^{(ns)}$
17	$0.0296^{(*)}$	$_{0.000482}0.00498_{0.00934}$	$0.491^{(ns)}$	$2.26\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.615}0.689_{0.771}$	$0.537^{(ns)}$	$0.634^{(ns)}$	$0.795^{(ns)}$
18	$0.000168^{(***)}$	$_{0.00757}0.0155_{0.0234}$	$0.48^{(ns)}$	$0.00177^{(**)}$	$_{0.552}0.688_{0.864}$	$0.442^{(ns)}$	$0.871^{(ns)}$	$0.769^{(ns)}$
19	$6.62\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.00826}0.0143_{0.0203}$	$0.501^{(ns)}$	$2.88\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.519}0.601_{0.695}$	$0.437^{(ns)}$	$0.586^{(ns)}$	$0.762^{(ns)}$
20	$0.00558^{(**)}$	$_{0.00179}0.0061_{0.0103}$	$0.487^{(ns)}$	$5.64\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.684}0.767_{0.858}$	$0.48^{(ns)}$	$0.923^{(ns)}$	$0.812^{(ns)}$
21	$0.000183^{(***)}$	$_{0.00363}0.00759_{0.0116}$	$0.541^{(ns)}$	$7.21\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.661}0.738_{0.823}$	$0.558^{(ns)}$	$0.455^{(ns)}$	$0.819^{(ns)}$
22	$0.000589^{(***)}$	$_{0.00304}0.00709_{0.011}$	$0.505^{(ns)}$	$5.8\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.677}0.75_{0.83}$	$0.545^{(ns)}$	$0.606^{(ns)}$	$0.783^{(ns)}$
23	$0.0252^{(*)}$	$_{0.000577}0.00471_{0.00881}$	$0.499^{(ns)}$	$4.69\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.642}0.713_{0.791}$	$0.507^{(ns)}$	$0.422^{(ns)}$	$0.799^{(ns)}$
24	$3.32\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.00259}0.0049_{0.00722}$	$0.519^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.713}0.757_{0.804}$	$0.571^{(ns)}$	$0.734^{(ns)}$	$0.801^{(ns)}$
25	$2.13\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.00628}0.00841_{0.0106}$	$0.501^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.7}0.743_{0.79}$	$0.514^{(ns)}$	$0.53^{(ns)}$	$0.708^{(ns)}$
26	$9.38\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.00413}0.00625_{0.00842}$	$0.514^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.706}0.746_{0.789}$	$0.522^{(ns)}$	$0.757^{(ns)}$	$0.816^{(ns)}$
27	$3.53\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.00493}0.00699_{0.00906}$	$0.523^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.71}0.75_{0.793}$	$0.448^{(ns)}$	$0.883^{(ns)}$	$0.718^{(ns)}$

Tabelle E.7: Resultate der Signifikanztests für Q_4 Zr. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	4.79e-09$^{(***)}$	$_{0.00284}0.0042_{0.00553}$	0.47$^{(ns)}$	1.07e-09$^{(***)}$	$_{0.603}0.682_{0.769}$	0.483$^{(ns)}$	0.934$^{(ns)}$	0.773$^{(ns)}$
2	5.97e-07$^{(***)}$	$_{0.00232}0.0038_{0.00528}$	0.508$^{(ns)}$	1.32e-10$^{(***)}$	$_{0.619}0.692_{0.773}$	0.497$^{(ns)}$	0.915$^{(ns)}$	0.773$^{(ns)}$
3	1.81e-08$^{(***)}$	$_{0.00273}0.00417_{0.00557}$	0.443$^{(ns)}$	0.000309$^{(***)}$	$_{0.726}0.811_{0.908}$	0.499$^{(ns)}$	0.844$^{(ns)}$	0.753$^{(ns)}$
4	2.1e-07$^{(***)}$	$_{0.00227}0.00363_{0.00496}$	0.519$^{(ns)}$	0.000107$^{(***)}$	$_{0.725}0.806_{0.898}$	0.433$^{(ns)}$	0.472$^{(ns)}$	0.796$^{(ns)}$
5	3.26e-08$^{(***)}$	$_{0.00287}0.00444_{0.00603}$	0.51$^{(ns)}$	0.00103$^{(**)}$	$_{0.754}0.837_{0.928}$	0.475$^{(ns)}$	0.846$^{(ns)}$	0.752$^{(ns)}$
6	3.74e-11$^{(***)}$	$_{0.00349}0.00489_{0.00632}$	0.49$^{(ns)}$	1.28e-05$^{(***)}$	$_{0.7}0.782_{0.874}$	0.502$^{(ns)}$	0.905$^{(ns)}$	0.783$^{(ns)}$
7	2.81e-09$^{(***)}$	$_{0.0028}0.0041_{0.00543}$	0.549$^{(ns)}$	2.19e-10$^{(***)}$	$_{0.63}0.701_{0.783}$	0.466$^{(ns)}$	0.625$^{(ns)}$	0.757$^{(ns)}$
8	0$^{(***)}$	$_{0.00342}0.00411_{0.00481}$	0.493$^{(ns)}$	3.2e-14$^{(***)}$	$_{0.742}0.789_{0.838}$	0.538$^{(ns)}$	0.792$^{(ns)}$	0.761$^{(ns)}$
9	2.19e-13$^{(***)}$	$_{0.00209}0.00284_{0.00359}$	0.52$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.675}0.715_{0.757}$	0.557$^{(ns)}$	0.58$^{(ns)}$	0.806$^{(ns)}$
10	0$^{(***)}$	$_{0.00392}0.00471_{0.0055}$	0.544$^{(ns)}$	4.56e-13$^{(***)}$	$_{0.743}0.791_{0.842}$	0.512$^{(ns)}$	0.729$^{(ns)}$	0.773$^{(ns)}$
11	0$^{(***)}$	$_{0.00266}0.0034_{0.00414}$	0.552$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.664}0.704_{0.746}$	0.458$^{(ns)}$	0.724$^{(ns)}$	0.733$^{(ns)}$
12	4.66e-07$^{(***)}$	$_{0.00233}0.00379_{0.00522}$	0.496$^{(ns)}$	0.0215$^{(*)}$	$_{0.737}0.849_{0.976}$	0.549$^{(ns)}$	0.979$^{(ns)}$	0.778$^{(ns)}$
13	9.98e-06$^{(***)}$	$_{0.00182}0.00322_{0.00462}$	0.493$^{(ns)}$	9.33e-13$^{(***)}$	$_{0.604}0.672_{0.748}$	0.489$^{(ns)}$	0.809$^{(ns)}$	0.806$^{(ns)}$
14	1.73e-08$^{(***)}$	$_{0.00259}0.00388_{0.00519}$	0.434$^{(ns)}$	1.12e-05$^{(***)}$	$_{0.687}0.771_{0.866}$	0.527$^{(ns)}$	0.755$^{(ns)}$	0.817$^{(ns)}$
15	1.19e-06$^{(***)}$	$_{0.00211}0.00348_{0.00488}$	0.551$^{(ns)}$	8.04e-06$^{(***)}$	$_{0.68}0.766_{0.86}$	0.529$^{(ns)}$	0.927$^{(ns)}$	0.803$^{(ns)}$
16	2.02e-08$^{(***)}$	$_{0.00238}0.00364_{0.00491}$	0.476$^{(ns)}$	7.14e-06$^{(***)}$	$_{0.701}0.781_{0.869}$	0.45$^{(ns)}$	0.533$^{(ns)}$	0.79$^{(ns)}$
17	4.44e-16$^{(***)}$	$_{0.00436}0.00567_{0.00695}$	0.466$^{(ns)}$	1.04e-08$^{(***)}$	$_{0.647}0.724_{0.807}$	0.48$^{(ns)}$	0.558$^{(ns)}$	0.818$^{(ns)}$
18	0.0233$^{(*)}$	$_{0.000591}0.00428_{0.00794}$	0.428$^{(ns)}$	0.000178$^{(***)}$	$_{0.452}0.59_{0.77}$	0.524$^{(ns)}$	0.64$^{(ns)}$	0.833$^{(ns)}$
19	2.16e-08$^{(***)}$	$_{0.00376}0.00569_{0.00763}$	0.474$^{(ns)}$	0.000327$^{(***)}$	$_{0.594}0.713_{0.855}$	0.497$^{(ns)}$	0.919$^{(ns)}$	0.779$^{(ns)}$
20	0.000361$^{(***)}$	$_{0.00127}0.00278_{0.00434}$	0.462$^{(ns)}$	0.923$^{(ns)}$	$_{0.838}0.991_{1.19}$	0.483$^{(ns)}$	0.925$^{(ns)}$	0.754$^{(ns)}$
21	2.14e-08$^{(***)}$	$_{0.00311}0.00467_{0.00629}$	0.536$^{(ns)}$	2.24e-05$^{(***)}$	$_{0.604}0.711_{0.831}$	0.517$^{(ns)}$	0.842$^{(ns)}$	0.781$^{(ns)}$
22	2.93e-09$^{(***)}$	$_{0.00259}0.00387_{0.00514}$	0.519$^{(ns)}$	0.0127$^{(*)}$	$_{0.758}0.856_{0.969}$	0.445$^{(ns)}$	0.979$^{(ns)}$	0.817$^{(ns)}$
23	1.61e-10$^{(***)}$	$_{0.00359}0.00509_{0.00664}$	0.521$^{(ns)}$	0.00405$^{(**)}$	$_{0.699}0.805_{0.933}$	0.502$^{(ns)}$	0.994$^{(ns)}$	0.857$^{(ns)}$
24	1.63e-13$^{(***)}$	$_{0.00246}0.00334_{0.00422}$	0.508$^{(ns)}$	4.91e-08$^{(***)}$	$_{0.724}0.788_{0.857}$	0.476$^{(ns)}$	0.456$^{(ns)}$	0.796$^{(ns)}$
25	7.99e-15$^{(***)}$	$_{0.00249}0.0033_{0.00414}$	0.463$^{(ns)}$	1.04e-07$^{(***)}$	$_{0.742}0.804_{0.871}$	0.473$^{(ns)}$	0.115$^{(ns)}$	0.811$^{(ns)}$
26	0$^{(***)}$	$_{0.00357}0.00428_{0.005}$	0.498$^{(ns)}$	9.99e-15$^{(***)}$	$_{0.724}0.772_{0.824}$	0.413$^{(ns)}$	0.497$^{(ns)}$	0.779$^{(ns)}$
27	0$^{(***)}$	$_{0.00287}0.00355_{0.00423}$	0.545$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.667}0.712_{0.76}$	0.46$^{(ns)}$	0.967$^{(ns)}$	0.76$^{(ns)}$

Tabelle E.8: Resultate der Signifikanztests für Q_5 Ni. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.337^{(ns)}$	$_{-0.00834}-0.00269_{0.00282}$	$0.546^{(ns)}$	$2.22e\text{-}16^{(***)}$	$_{0.597}0.659_{0.725}$	$0.467^{(ns)}$	$0.287^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
2	$0.0212^{(*)}$	$_{-0.0118}-0.0063_{-0.000918}$	$0.473^{(ns)}$	$3.55e\text{-}15^{(***)}$	$_{0.614}0.676_{0.744}$	$0.45^{(ns)}$	$0.678^{(ns)}$	$0.791^{(ns)}$
3	$0.595^{(ns)}$	$_{-0.00746}-0.00158_{0.00422}$	$0.54^{(ns)}$	$1.11e\text{-}15^{(***)}$	$_{0.558}0.625_{0.7}$	$0.616^{(ns)}$	$0.36^{(ns)}$	$0.817^{(ns)}$
4	$0.0944^{(ns)}$	$_{-0.0106}-0.00487_{0.00079}$	$0.449^{(ns)}$	$2.42e\text{-}08^{(***)}$	$_{0.667}0.739_{0.82}$	$0.497^{(ns)}$	$0.922^{(ns)}$	$0.73^{(ns)}$
5	$0.254^{(ns)}$	$_{-0.0111}-0.00413_{0.00299}$	$0.435^{(ns)}$	$3.48e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.662}0.748_{0.844}$	$0.465^{(ns)}$	$0.988^{(ns)}$	$0.808^{(ns)}$
6	$0.00773^{(**)}$	$_{-0.0177}-0.0103_{-0.00276}$	$0.537^{(ns)}$	$1.25e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.612}0.699_{0.797}$	$0.45^{(ns)}$	$0.918^{(ns)}$	$0.795^{(ns)}$
7	$0.0695^{(ns)}$	$_{-0.0133}-0.00635_{0.000532}$	$0.522^{(ns)}$	$7.25e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.665}0.751_{0.851}$	$0.518^{(ns)}$	$0.922^{(ns)}$	$0.761^{(ns)}$
8	$4.67e\text{-}06^{(***)}$	$_{-0.0103}-0.00719_{-0.00412}$	$0.441^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.64}0.678_{0.719}$	$0.524^{(ns)}$	$0.676^{(ns)}$	$0.768^{(ns)}$
9	$0.000211^{(***)}$	$_{-0.00881}-0.00576_{-0.0027}$	$0.555^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.61}0.647_{0.686}$	$0.565^{(ns)}$	$0.222^{(ns)}$	$0.773^{(ns)}$
10	$0.017^{(*)}$	$_{-0.00826}-0.00454_{-0.000801}$	$0.451^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.632}0.676_{0.723}$	$0.552^{(ns)}$	$0.513^{(ns)}$	$0.8^{(ns)}$
11	$6.82e\text{-}05^{(***)}$	$_{-0.0106}-0.0071_{-0.00358}$	$0.507^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.647}0.69_{0.735}$	$0.498^{(ns)}$	$0.935^{(ns)}$	$0.746^{(ns)}$
12	$0.986^{(ns)}$	$_{-0.00491}4.08e\text{-}05_{0.00504}$	$0.419^{(ns)}$	$1.03e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.656}0.727_{0.804}$	$0.525^{(ns)}$	$0.686^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
13	$0.676^{(ns)}$	$_{-0.00595}-0.00104_{0.00388}$	$0.529^{(ns)}$	$8.56e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.677}0.747_{0.824}$	$0.526^{(ns)}$	$0.656^{(ns)}$	$0.748^{(ns)}$
14	$0.221^{(ns)}$	$_{-0.00864}-0.00334_{0.002}$	$0.456^{(ns)}$	$1.98e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.663}0.733_{0.811}$	$0.566^{(ns)}$	$0.986^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$
15	$0.342^{(ns)}$	$_{-0.00787}-0.00262_{0.00281}$	$0.452^{(ns)}$	$6.65e\text{-}12^{(***)}$	$_{0.633}0.7_{0.774}$	$0.497^{(ns)}$	$0.706^{(ns)}$	$0.74^{(ns)}$
16	$0.0257^{(*)}$	$_{-0.0128}-0.00692_{-0.000857}$	$0.478^{(ns)}$	$0.000872^{(***)}$	$_{0.743}0.829_{0.926}$	$0.425^{(ns)}$	$0.682^{(ns)}$	$0.771^{(ns)}$
17	$0.0155^{(*)}$	$_{-0.0122}-0.0068_{-0.00129}$	$0.538^{(ns)}$	$2.83e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.61}0.682_{0.761}$	$0.43^{(ns)}$	$0.864^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
18	$0.00133^{(**)}$	$_{0.00607}0.0152_{0.0244}$	$0.472^{(ns)}$	$0.00408^{(**)}$	$_{0.583}0.724_{0.899}$	$0.495^{(ns)}$	$0.919^{(ns)}$	$0.739^{(ns)}$
19	$0.494^{(ns)}$	$_{-0.00461}0.00244_{0.0094}$	$0.562^{(ns)}$	$1.85e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.578}0.675_{0.792}$	$0.495^{(ns)}$	$0.963^{(ns)}$	$0.754^{(ns)}$
20	$0.0937^{(ns)}$	$_{-0.0098}-0.00459_{0.000767}$	$0.492^{(ns)}$	$4.92e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.665}0.75_{0.849}$	$0.484^{(ns)}$	$0.925^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
21	$0.26^{(ns)}$	$_{-0.00821}-0.00299_{0.00225}$	$0.569^{(ns)}$	$1.23e\text{-}13^{(***)}$	$_{0.587}0.655_{0.73}$	$0.52^{(ns)}$	$0.949^{(ns)}$	$0.729^{(ns)}$
22	$0.107^{(ns)}$	$_{-0.00863}-0.00386_{0.000811}$	$0.486^{(ns)}$	$4.44e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.634}0.702_{0.778}$	$0.45^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$	$0.82^{(ns)}$
23	$0.00904^{(**)}$	$_{-0.0119}-0.00681_{-0.00169}$	$0.456^{(ns)}$	$1.55e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.619}0.689_{0.767}$	$0.499^{(ns)}$	$0.945^{(ns)}$	$0.733^{(ns)}$
24	$0.00208^{(**)}$	$_{-0.00736}-0.00449_{-0.00165}$	$0.478^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.693}0.739_{0.787}$	$0.536^{(ns)}$	$0.0996^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
25	$0.000802^{(***)}$	$_{-0.00772}-0.00489_{-0.00202}$	$0.479^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.657}0.697_{0.74}$	$0.531^{(ns)}$	$0.138^{(ns)}$	$0.776^{(ns)}$
26	$4.43e\text{-}07^{(***)}$	$_{-0.00963}-0.00695_{-0.00426}$	$0.522^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.669}0.708_{0.749}$	$0.491^{(ns)}$	$0.514^{(ns)}$	$0.741^{(ns)}$
27	$0.000455^{(***)}$	$_{-0.00724}-0.00466_{-0.00206}$	$0.498^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.653}0.691_{0.731}$	$0.483^{(ns)}$	$0.918^{(ns)}$	$0.763^{(ns)}$

Tabelle E.9: Resultate der Signifikanztests für Q_5 Zr. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$9.78\text{e-}09^{(***)}$	${}_{0.00571}0.00859_{0.0115}$	$0.488^{(ns)}$	$1.33\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.647}0.728_{0.819}$	$0.476^{(ns)}$	$0.883^{(ns)}$	$0.718^{(ns)}$
2	$2.75\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.00325}0.00604_{0.0088}$	$0.508^{(ns)}$	$5.46\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.697}0.783_{0.883}$	$0.457^{(ns)}$	$0.872^{(ns)}$	$0.815^{(ns)}$
3	$4.62\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.00457}0.00747_{0.0103}$	$0.482^{(ns)}$	$3.44\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.664}0.747_{0.845}$	$0.428^{(ns)}$	$0.902^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
4	$1.87\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.00309}0.00567_{0.00826}$	$0.541^{(ns)}$	$5.11\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.681}0.757_{0.842}$	$0.544^{(ns)}$	$0.991^{(ns)}$	$0.771^{(ns)}$
5	$1.8\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.00474}0.00752_{0.0103}$	$0.506^{(ns)}$	$7.36\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.657}0.736_{0.821}$	$0.518^{(ns)}$	$0.294^{(ns)}$	$0.854^{(ns)}$
6	$4.32\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.00369}0.00646_{0.00915}$	$0.529^{(ns)}$	$0.00188^{(**)}$	${}_{0.736}0.828_{0.93}$	$0.521^{(ns)}$	$0.366^{(ns)}$	$0.824^{(ns)}$
7	$1.24\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.00487}0.00736_{0.00992}$	$0.497^{(ns)}$	$7.06\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.696}0.775_{0.866}$	$0.442^{(ns)}$	$0.757^{(ns)}$	$0.808^{(ns)}$
8	$0^{(***)}$	${}_{0.00482}0.00619_{0.00757}$	$0.509^{(ns)}$	$0^{(***)}$	${}_{0.698}0.741_{0.788}$	$0.482^{(ns)}$	$0.559^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
9	$0^{(***)}$	${}_{0.00664}0.00804_{0.00943}$	$0.541^{(ns)}$	$0^{(***)}$	${}_{0.714}0.756_{0.801}$	$0.466^{(ns)}$	$0.524^{(ns)}$	$0.794^{(ns)}$
10	$0^{(***)}$	${}_{0.00614}0.00768_{0.00921}$	$0.459^{(ns)}$	$6.14\text{e-}10^{(***)}$	${}_{0.774}0.823_{0.875}$	$0.436^{(ns)}$	$0.549^{(ns)}$	$0.771^{(ns)}$
11	$0^{(***)}$	${}_{0.00519}0.00654_{0.0079}$	$0.482^{(ns)}$	$0^{(***)}$	${}_{0.722}0.765_{0.81}$	$0.514^{(ns)}$	$0.295^{(ns)}$	$0.755^{(ns)}$
12	$0.00268^{(**)}$	${}_{0.0016}0.00463_{0.0076}$	$0.461^{(ns)}$	$0.000674^{(***)}$	${}_{0.69}0.788_{0.905}$	$0.484^{(ns)}$	$0.997^{(ns)}$	$0.864^{(ns)}$
13	$3.66\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.00485}0.00739_{0.00996}$	$0.511^{(ns)}$	$7.11\text{e-}09^{(***)}$	${}_{0.632}0.709_{0.795}$	$0.386^{(ns)}$	$0.624^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
14	$4.52\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.00304}0.00579_{0.00853}$	$0.469^{(ns)}$	$2.76\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.643}0.721_{0.808}$	$0.486^{(ns)}$	$0.952^{(ns)}$	$0.791^{(ns)}$
15	$3.48\text{e-}10^{(***)}$	${}_{0.00606}0.00876_{0.0115}$	$0.491^{(ns)}$	$0.00119^{(**)}$	${}_{0.722}0.816_{0.922}$	$0.526^{(ns)}$	$1^{(ns)}$	$0.724^{(ns)}$
16	$0.000718^{(***)}$	${}_{0.00195}0.0046_{0.00719}$	$0.444^{(ns)}$	$3.39\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.667}0.741_{0.824}$	$0.499^{(ns)}$	$0.5^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
17	$1.04\text{e-}10^{(***)}$	${}_{0.00558}0.00802_{0.0104}$	$0.535^{(ns)}$	$9.67\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.714}0.796_{0.891}$	$0.493^{(ns)}$	$0.984^{(ns)}$	$0.777^{(ns)}$
18	$1.85\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.00712}0.0128_{0.0186}$	$0.554^{(ns)}$	$0.488^{(ns)}$	${}_{0.662}0.894_{1.22}$	$0.61^{(ns)}$	$1^{(ns)}$	$0.825^{(ns)}$
19	$0.01^{(*)}$	${}_{0.00118}0.00481_{0.00844}$	$0.507^{(ns)}$	$0.00758^{(**)}$	${}_{0.622}0.764_{0.927}$	$0.478^{(ns)}$	$0.948^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
20	$0.00122^{(**)}$	${}_{0.00234}0.00589_{0.00942}$	$0.452^{(ns)}$	$0.000467^{(***)}$	${}_{0.627}0.741_{0.873}$	$0.549^{(ns)}$	$0.802^{(ns)}$	$0.812^{(ns)}$
21	$0.000788^{(***)}$	${}_{0.00231}0.00552_{0.00871}$	$0.497^{(ns)}$	$0.000375^{(***)}$	${}_{0.626}0.739_{0.871}$	$0.427^{(ns)}$	$0.984^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$
22	$1.44\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.00492}0.00747_{0.00997}$	$0.49^{(ns)}$	$0.0133^{(*)}$	${}_{0.76}0.856_{0.967}$	$0.537^{(ns)}$	$0.969^{(ns)}$	$0.8^{(ns)}$
23	$5.2\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.00413}0.00722_{0.0103}$	$0.439^{(ns)}$	$0.00972^{(**)}$	${}_{0.724}0.831_{0.955}$	$0.432^{(ns)}$	$0.584^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
24	$9.33\text{e-}15^{(***)}$	${}_{0.00521}0.00691_{0.00865}$	$0.505^{(ns)}$	$1.1\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.719}0.783_{0.851}$	$0.483^{(ns)}$	$0.592^{(ns)}$	$0.735^{(ns)}$
25	$2.91\text{e-}14^{(***)}$	${}_{0.00486}0.00648_{0.00812}$	$0.52^{(ns)}$	$1.03\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.731}0.792_{0.856}$	$0.519^{(ns)}$	$0.533^{(ns)}$	$0.763^{(ns)}$
26	$0^{(***)}$	${}_{0.00663}0.00805_{0.00948}$	$0.526^{(ns)}$	$1.96\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.774}0.826_{0.882}$	$0.508^{(ns)}$	$0.815^{(ns)}$	$0.831^{(ns)}$
27	$0^{(***)}$	${}_{0.00541}0.00675_{0.00806}$	$0.478^{(ns)}$	$0^{(***)}$	${}_{0.691}0.737_{0.785}$	$0.449^{(ns)}$	$0.47^{(ns)}$	$0.831^{(ns)}$

Tabelle E.10: Resultate der Signifikanztests für Q_6 Ni. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.483^{(ns)}$	$_{-0.00479}-0.00127_{0.00226}$	$0.444^{(ns)}$	$6.53e\text{-}10^{(***)}$	$_{0.655}0.724_{0.801}$	$0.56^{(ns)}$	$0.91^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
2	$0.0207^{(*)}$	$_{-0.0082}-0.00443_{-0.000669}$	$0.538^{(ns)}$	$1.44e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.676}0.744_{0.818}$	$0.567^{(ns)}$	$0.988^{(ns)}$	$0.863^{(ns)}$
3	$0.711^{(ns)}$	$_{-0.0032}0.00071_{0.00467}$	$0.481^{(ns)}$	$1.08e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.665}0.742_{0.825}$	$0.449^{(ns)}$	$0.986^{(ns)}$	$0.769^{(ns)}$
4	$0.821^{(ns)}$	$_{-0.00451}-0.000463_{0.00356}$	$0.455^{(ns)}$	$3.36e\text{-}08^{(***)}$	$_{0.663}0.738_{0.821}$	$0.489^{(ns)}$	$0.734^{(ns)}$	$0.768^{(ns)}$
5	$0.402^{(ns)}$	$_{-0.00709}-0.00214_{0.0028}$	$0.485^{(ns)}$	$9.76e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.688}0.777_{0.883}$	$0.527^{(ns)}$	$0.393^{(ns)}$	$0.8^{(ns)}$
6	$0.873^{(ns)}$	$_{-0.00441}0.000401_{0.00531}$	$0.481^{(ns)}$	$2.89e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.629}0.72_{0.825}$	$0.463^{(ns)}$	$0.631^{(ns)}$	$0.773^{(ns)}$
7	$0.158^{(ns)}$	$_{-0.00805}-0.00341_{0.00137}$	$0.484^{(ns)}$	$9.06e\text{-}08^{(***)}$	$_{0.627}0.71_{0.803}$	$0.543^{(ns)}$	$0.854^{(ns)}$	$0.798^{(ns)}$
8	$0.741^{(ns)}$	$_{-0.00173}0.00035_{0.00247}$	$0.464^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.67}0.711_{0.753}$	$0.501^{(ns)}$	$0.803^{(ns)}$	$0.8^{(ns)}$
9	$0.0902^{(ns)}$	$_{-0.00416}-0.00192_{0.000305}$	$0.488^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.685}0.726_{0.769}$	$0.514^{(ns)}$	$0.377^{(ns)}$	$0.753^{(ns)}$
10	$0.792^{(ns)}$	$_{-0.0023}0.000344_{0.00301}$	$0.519^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.685}0.733_{0.784}$	$0.503^{(ns)}$	$0.985^{(ns)}$	$0.84^{(ns)}$
11	$0.0411^{(*)}$	$_{-0.00508}-0.00259_{-0.000102}$	$0.535^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.671}0.716_{0.765}$	$0.478^{(ns)}$	$0.986^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
12	$0.26^{(ns)}$	$_{-0.00148}0.00199_{0.00546}$	$0.503^{(ns)}$	$1.01e\text{-}08^{(***)}$	$_{0.685}0.753_{0.829}$	$0.532^{(ns)}$	$0.99^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
13	$0.997^{(ns)}$	$_{-0.00334}2.15e\text{-}05_{0.00339}$	$0.505^{(ns)}$	$9.31e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.683}0.752_{0.828}$	$0.569^{(ns)}$	$0.781^{(ns)}$	$0.756^{(ns)}$
14	$0.581^{(ns)}$	$_{-0.00261}0.00106_{0.00459}$	$0.457^{(ns)}$	$1.97e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.72}0.797_{0.883}$	$0.474^{(ns)}$	$0.308^{(ns)}$	$0.81^{(ns)}$
15	$0.542^{(ns)}$	$_{-0.00251}0.00117_{0.00484}$	$0.515^{(ns)}$	$2.45e\text{-}08^{(***)}$	$_{0.657}0.732_{0.814}$	$0.503^{(ns)}$	$0.837^{(ns)}$	$0.761^{(ns)}$
16	$0.414^{(ns)}$	$_{-0.00569}-0.0017_{0.00235}$	$0.504^{(ns)}$	$2.44e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.596}0.671_{0.754}$	$0.5^{(ns)}$	$0.854^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$
17	$0.999^{(ns)}$	$_{-0.0039}1.93e\text{-}06_{0.00397}$	$0.504^{(ns)}$	$5.83e\text{-}10^{(***)}$	$_{0.632}0.707_{0.787}$	$0.481^{(ns)}$	$0.943^{(ns)}$	$0.786^{(ns)}$
18	$0.766^{(ns)}$	$_{-0.00549}0.00091_{0.00724}$	$0.427^{(ns)}$	$0.0868^{(ns)}$	$_{0.666}0.825_{1.03}$	$0.541^{(ns)}$	$0.967^{(ns)}$	$0.808^{(ns)}$
19	$0.182^{(ns)}$	$_{-0.00157}0.00322_{0.00794}$	$0.492^{(ns)}$	$7.68e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.623}0.728_{0.85}$	$0.485^{(ns)}$	$1^{(ns)}$	$0.759^{(ns)}$
20	$0.0859^{(ns)}$	$_{-0.00686}-0.00325_{0.000461}$	$0.602^{(ns)}$	$2.69e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.665}0.751_{0.846}$	$0.412^{(ns)}$	$0.687^{(ns)}$	$0.75^{(ns)}$
21	$0.0125^{(*)}$	$_{-0.00814}-0.00456_{-0.000993}$	$0.533^{(ns)}$	$1.31e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.627}0.701_{0.785}$	$0.489^{(ns)}$	$0.865^{(ns)}$	$0.772^{(ns)}$
22	$0.119^{(ns)}$	$_{-0.00585}-0.0026_{0.000685}$	$0.516^{(ns)}$	$1.41e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.705}0.778_{0.86}$	$0.528^{(ns)}$	$0.877^{(ns)}$	$0.814^{(ns)}$
23	$0.409^{(ns)}$	$_{-0.00506}-0.00148_{0.00202}$	$0.497^{(ns)}$	$5.58e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.696}0.775_{0.864}$	$0.483^{(ns)}$	$0.871^{(ns)}$	$0.755^{(ns)}$
24	$0.138^{(ns)}$	$_{-0.00344}-0.00148_{0.000473}$	$0.508^{(ns)}$	$5.11e\text{-}15^{(***)}$	$_{0.729}0.776_{0.826}$	$0.434^{(ns)}$	$0.877^{(ns)}$	$0.762^{(ns)}$
25	$0.00578^{(**)}$	$_{-0.00489}-0.00285_{-0.000845}$	$0.572^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.663}0.703_{0.745}$	$0.521^{(ns)}$	$0.517^{(ns)}$	$0.717^{(ns)}$
26	$0.00904^{(**)}$	$_{-0.0044}-0.0025_{-0.000624}$	$0.465^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.685}0.726_{0.768}$	$0.412^{(ns)}$	$0.864^{(ns)}$	$0.811^{(ns)}$
27	$0.243^{(ns)}$	$_{-0.00298}-0.00113_{0.000753}$	$0.5^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.659}0.696_{0.735}$	$0.604^{(ns)}$	$0.566^{(ns)}$	$0.757^{(ns)}$

Tabelle E.11: Resultate der Signifikanztests für Q_6 Zr. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.0334^{(*)}$	$_{0.00036}0.00454_{0.00871}$	$0.531^{(ns)}$	$2.19\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.666}0.749_{0.843}$	$0.477^{(ns)}$	$0.978^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
2	$0.00337^{(**)}$	$_{0.00198}0.00595_{0.00995}$	$0.505^{(ns)}$	$5.11\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.663}0.748_{0.848}$	$0.57^{(ns)}$	$0.916^{(ns)}$	$0.828^{(ns)}$
3	$0.152^{(ns)}$	$_{-0.00108}0.00293_{0.00691}$	$0.51^{(ns)}$	$4.37\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.685}0.773_{0.875}$	$0.502^{(ns)}$	$0.762^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
4	$2.63\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.00425}0.00795_{0.0117}$	$0.558^{(ns)}$	$3.56\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.712}0.794_{0.885}$	$0.454^{(ns)}$	$0.688^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$
5	$0.635^{(ns)}$	$_{-0.00286}0.000922_{0.00457}$	$0.458^{(ns)}$	$6.76\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.694}0.775_{0.865}$	$0.438^{(ns)}$	$0.946^{(ns)}$	$0.762^{(ns)}$
6	$0.611^{(ns)}$	$_{-0.00307}0.00106_{0.00509}$	$0.541^{(ns)}$	$0.000228^{(***)}$	$_{0.731}0.814_{0.909}$	$0.43^{(ns)}$	$0.88^{(ns)}$	$0.821^{(ns)}$
7	$1.28\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.00552}0.00914_{0.0128}$	$0.467^{(ns)}$	$2.06\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.69}0.77_{0.859}$	$0.555^{(ns)}$	$0.956^{(ns)}$	$0.789^{(ns)}$
8	$2.67\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.00236}0.0044_{0.00648}$	$0.509^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.686}0.729_{0.775}$	$0.499^{(ns)}$	$0.734^{(ns)}$	$0.721^{(ns)}$
9	$6.43\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.00392}0.0059_{0.00788}$	$0.463^{(ns)}$	$2.31\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.744}0.79_{0.839}$	$0.499^{(ns)}$	$0.737^{(ns)}$	$0.741^{(ns)}$
10	$2.56\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.00416}0.00642_{0.00868}$	$0.428^{(ns)}$	$1.35\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.729}0.776_{0.827}$	$0.485^{(ns)}$	$0.708^{(ns)}$	$0.762^{(ns)}$
11	$9.72\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.00344}0.00545_{0.00743}$	$0.52^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.697}0.737_{0.78}$	$0.447^{(ns)}$	$0.958^{(ns)}$	$0.814^{(ns)}$
12	$0.0191^{(*)}$	$_{0.000837}0.00514_{0.00925}$	$0.478^{(ns)}$	$0.00448^{(**)}$	$_{0.713}0.818_{0.937}$	$0.493^{(ns)}$	$0.999^{(ns)}$	$0.799^{(ns)}$
13	$3.29\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.00408}0.00771_{0.0114}$	$0.514^{(ns)}$	$1.22\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.678}0.759_{0.849}$	$0.532^{(ns)}$	$0.964^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$
14	$0.069^{(ns)}$	$_{-0.000305}0.00366_{0.00763}$	$0.427^{(ns)}$	$2.03\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.663}0.747_{0.842}$	$0.45^{(ns)}$	$0.649^{(ns)}$	$0.756^{(ns)}$
15	$3.05\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.00643}0.0103_{0.0143}$	$0.458^{(ns)}$	$0.000415^{(***)}$	$_{0.718}0.808_{0.907}$	$0.508^{(ns)}$	$0.994^{(ns)}$	$0.835^{(ns)}$
16	$0.222^{(ns)}$	$_{-0.00135}0.00223_{0.0058}$	$0.518^{(ns)}$	$1.79\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.678}0.757_{0.848}$	$0.496^{(ns)}$	$0.81^{(ns)}$	$0.751^{(ns)}$
17	$0.000135^{(***)}$	$_{0.00354}0.00733_{0.011}$	$0.5^{(ns)}$	$4.2\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.646}0.719_{0.802}$	$0.583^{(ns)}$	$0.409^{(ns)}$	$0.789^{(ns)}$
18	$0.306^{(ns)}$	$_{-0.00353}0.00391_{0.0114}$	$0.482^{(ns)}$	$0.74^{(ns)}$	$_{0.755}1.06_{1.52}$	$0.523^{(ns)}$	$0.572^{(ns)}$	$0.747^{(ns)}$
19	$0.000518^{(***)}$	$_{0.00424}0.00964_{0.0149}$	$0.462^{(ns)}$	$1.66\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.564}0.676_{0.806}$	$0.499^{(ns)}$	$0.696^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
20	$0.0888^{(ns)}$	$_{-0.00059}0.00398_{0.00848}$	$0.41^{(ns)}$	$0.135^{(ns)}$	$_{0.748}0.884_{1.04}$	$0.419^{(ns)}$	$0.897^{(ns)}$	$0.673^{(ns)}$
21	$0.000509^{(***)}$	$_{0.00376}0.00852_{0.0132}$	$0.55^{(ns)}$	$4.08\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.57}0.673_{0.794}$	$0.585^{(ns)}$	$0.845^{(ns)}$	$0.728^{(ns)}$
22	$0.108^{(ns)}$	$_{-0.000706}0.00311_{0.00679}$	$0.523^{(ns)}$	$0.000942^{(***)}$	$_{0.706}0.803_{0.912}$	$0.483^{(ns)}$	$0.834^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
23	$0.0081^{(**)}$	$_{0.00155}0.00574_{0.01}$	$0.474^{(ns)}$	$0.0328^{(*)}$	$_{0.735}0.854_{0.987}$	$0.425^{(ns)}$	$0.983^{(ns)}$	$0.755^{(ns)}$
24	$0.0252^{(*)}$	$_{0.000351}0.00281_{0.00531}$	$0.535^{(ns)}$	$4.46\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.73}0.797_{0.87}$	$0.534^{(ns)}$	$0.85^{(ns)}$	$0.744^{(ns)}$
25	$4.17\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.00469}0.00698_{0.00929}$	$0.499^{(ns)}$	$2.1\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.711}0.77_{0.834}$	$0.418^{(ns)}$	$0.386^{(ns)}$	$0.816^{(ns)}$
26	$5.24\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.00224}0.00434_{0.00644}$	$0.551^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.7}0.749_{0.801}$	$0.467^{(ns)}$	$0.382^{(ns)}$	$0.789^{(ns)}$
27	$5.41\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.00371}0.00557_{0.00745}$	$0.491^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.694}0.741_{0.791}$	$0.538^{(ns)}$	$0.443^{(ns)}$	$0.712^{(ns)}$

Tabelle E.12: Resultate der Signifikanztests für φ_i^p Ni. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$7.58\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.0518}0.0811_{0.111}$	$0.463^{(ns)}$	$3.45\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.735}0.81_{0.894}$	$0.54^{(ns)}$	$0.44^{(ns)}$	$0.735^{(ns)}$
2	$2.6\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.0493}0.0796_{0.11}$	$0.536^{(ns)}$	$0.000217^{(***)}$	${}_{0.756}0.833_{0.918}$	$0.551^{(ns)}$	$0.0875^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
3	$1.76\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.056}0.0896_{0.123}$	$0.544^{(ns)}$	$6\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.665}0.747_{0.836}$	$0.415^{(ns)}$	$0.287^{(ns)}$	$0.799^{(ns)}$
4	$4.81\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.0549}0.0898_{0.125}$	$0.527^{(ns)}$	$4.64\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.726}0.805_{0.894}$	$0.444^{(ns)}$	$0.663^{(ns)}$	$0.808^{(ns)}$
5	$1.2\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.0527}0.095_{0.138}$	$0.492^{(ns)}$	$0.023^{(*)}$	${}_{0.769}0.868_{0.98}$	$0.529^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
6	$5.14\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.0686}0.112_{0.156}$	$0.489^{(ns)}$	$7.75\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.656}0.753_{0.868}$	$0.507^{(ns)}$	$0.924^{(ns)}$	$0.806^{(ns)}$
7	$2.47\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.0542}0.092_{0.13}$	$0.54^{(ns)}$	$0.000193^{(***)}$	${}_{0.692}0.786_{0.892}$	$0.46^{(ns)}$	$0.794^{(ns)}$	$0.802^{(ns)}$
8	$0^{(***)}$	${}_{0.111}0.13_{0.149}$	$0.495^{(ns)}$	$0^{(***)}$	${}_{0.686}0.727_{0.77}$	$0.578^{(ns)}$	$0.0846^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
9	$0^{(***)}$	${}_{0.079}0.0972_{0.116}$	$0.55^{(ns)}$	$0^{(***)}$	${}_{0.711}0.752_{0.796}$	$0.444^{(ns)}$	$0.479^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
10	$0^{(***)}$	${}_{0.0906}0.113_{0.136}$	$0.539^{(ns)}$	$3.2\text{e-}09^{(***)}$	${}_{0.755}0.809_{0.868}$	$0.518^{(ns)}$	$0.74^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
11	$5.71\text{e-}14^{(***)}$	${}_{0.0622}0.0841_{0.106}$	$0.472^{(ns)}$	$5.08\text{e-}13^{(***)}$	${}_{0.73}0.781_{0.835}$	$0.425^{(ns)}$	$0.26^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
12	$4.55\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.0442}0.0724_{0.101}$	$0.524^{(ns)}$	$0.000491^{(***)}$	${}_{0.763}0.839_{0.926}$	$0.483^{(ns)}$	$0.708^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$
13	$1.44\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.0397}0.067_{0.0947}$	$0.476^{(ns)}$	$5.4\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.73}0.809_{0.896}$	$0.52^{(ns)}$	$0.902^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$
14	$4.31\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.0543}0.0841_{0.115}$	$0.517^{(ns)}$	$0.000516^{(***)}$	${}_{0.742}0.827_{0.919}$	$0.467^{(ns)}$	$0.755^{(ns)}$	$0.794^{(ns)}$
15	$9.72\text{e-}09^{(***)}$	${}_{0.0613}0.0926_{0.124}$	$0.476^{(ns)}$	$0.00311^{(**)}$	${}_{0.779}0.86_{0.95}$	$0.53^{(ns)}$	$0.535^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
16	$2.81\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.0599}0.0973_{0.135}$	$0.545^{(ns)}$	$6.84\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.699}0.788_{0.884}$	$0.435^{(ns)}$	$0.263^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$
17	$0.0139^{(*)}$	${}_{0.00874}0.0427_{0.077}$	$0.49^{(ns)}$	$0.00838^{(**)}$	${}_{0.769}0.861_{0.962}$	$0.413^{(ns)}$	$0.451^{(ns)}$	$0.737^{(ns)}$
18	$0.0186^{(*)}$	${}_{0.0104}0.0616_{0.114}$	$0.5^{(ns)}$	$0.0136^{(*)}$	${}_{0.625}0.767_{0.945}$	$0.446^{(ns)}$	$0.817^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
19	$0.0137^{(*)}$	${}_{0.01}0.0489_{0.0884}$	$0.502^{(ns)}$	$3.3\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.634}0.731_{0.845}$	$0.455^{(ns)}$	$0.403^{(ns)}$	$0.706^{(ns)}$
20	$0.00139^{(**)}$	${}_{0.0196}0.0506_{0.0818}$	$0.517^{(ns)}$	$0.00509^{(**)}$	${}_{0.754}0.846_{0.951}$	$0.492^{(ns)}$	$0.864^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$
21	$6.55\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.0361}0.0634_{0.0913}$	$0.561^{(ns)}$	$0.0108^{(*)}$	${}_{0.771}0.862_{0.967}$	$0.528^{(ns)}$	$0.213^{(ns)}$	$0.731^{(ns)}$
22	$1.57\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.0505}0.0803_{0.111}$	$0.469^{(ns)}$	$3.84\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.727}0.801_{0.88}$	$0.46^{(ns)}$	$0.171^{(ns)}$	$0.829^{(ns)}$
23	$1.03\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.0509}0.0798_{0.109}$	$0.475^{(ns)}$	$0.00127^{(**)}$	${}_{0.747}0.834_{0.931}$	$0.531^{(ns)}$	$0.93^{(ns)}$	$0.737^{(ns)}$
24	$3.07\text{e-}11^{(***)}$	${}_{0.0397}0.0562_{0.073}$	$0.492^{(ns)}$	$3.58\text{e-}13^{(***)}$	${}_{0.747}0.795_{0.845}$	$0.434^{(ns)}$	$0.0284^{(*)}$	$0.792^{(ns)}$
25	$5.51\text{e-}14^{(***)}$	${}_{0.0463}0.0625_{0.079}$	$0.482^{(ns)}$	$1.07\text{e-}13^{(***)}$	${}_{0.756}0.801_{0.849}$	$0.477^{(ns)}$	$0.269^{(ns)}$	$0.77^{(ns)}$
26	$0^{(***)}$	${}_{0.0968}0.113_{0.13}$	$0.478^{(ns)}$	$6.66\text{e-}16^{(***)}$	${}_{0.746}0.79_{0.837}$	$0.505^{(ns)}$	$0.495^{(ns)}$	$0.813^{(ns)}$
27	$0^{(***)}$	${}_{0.0742}0.09_{0.106}$	$0.493^{(ns)}$	$0^{(***)}$	${}_{0.682}0.721_{0.763}$	$0.42^{(ns)}$	$0.0808^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$

Tabelle E.13: Resultate der Signifikanztests für φ_i^p Zr. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.0566^{(ns)}$	$_{-0.00154}0.0541_{0.11}$	$0.509^{(ns)}$	$3.43e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.677}0.767_{0.87}$	$0.451^{(ns)}$	$0.728^{(ns)}$	$0.738^{(ns)}$
2	$0.315^{(ns)}$	$_{-0.0265}0.0274_{0.0814}$	$0.443^{(ns)}$	$0.000637^{(***)}$	$_{0.721}0.812_{0.914}$	$0.543^{(ns)}$	$0.296^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
3	$0.817^{(ns)}$	$_{-0.0462}0.00617_{0.0575}$	$0.516^{(ns)}$	$0.00463^{(**)}$	$_{0.738}0.833_{0.944}$	$0.448^{(ns)}$	$0.995^{(ns)}$	$0.786^{(ns)}$
4	$0.276^{(ns)}$	$_{-0.0222}0.0277_{0.0774}$	$0.54^{(ns)}$	$0.0423^{(*)}$	$_{0.801}0.895_{0.996}$	$0.49^{(ns)}$	$0.87^{(ns)}$	$0.798^{(ns)}$
5	$0.969^{(ns)}$	$_{-0.049}0.000997_{0.0514}$	$0.46^{(ns)}$	$0.228^{(ns)}$	$_{0.831}0.933_{1.05}$	$0.511^{(ns)}$	$0.672^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
6	$0.861^{(ns)}$	$_{-0.0573}-0.00478_{0.0464}$	$0.457^{(ns)}$	$0.23^{(ns)}$	$_{0.954}1.07_{1.21}$	$0.506^{(ns)}$	$0.154^{(ns)}$	$0.739^{(ns)}$
7	$0.375^{(ns)}$	$_{-0.0286}0.0229_{0.0741}$	$0.549^{(ns)}$	$0.00415^{(**)}$	$_{0.765}0.854_{0.952}$	$0.545^{(ns)}$	$0.944^{(ns)}$	$0.789^{(ns)}$
8	$0.00127^{(**)}$	$_{0.0177}0.0451_{0.0726}$	$0.427^{(ns)}$	$9.31e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.771}0.819_{0.87}$	$0.498^{(ns)}$	$0.777^{(ns)}$	$0.722^{(ns)}$
9	$0.177^{(ns)}$	$_{-0.00855}0.0189_{0.0466}$	$0.489^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.724}0.77_{0.818}$	$0.487^{(ns)}$	$0.516^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
10	$0.00148^{(**)}$	$_{0.0186}0.0485_{0.0785}$	$0.502^{(ns)}$	$6.07e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.82}0.875_{0.934}$	$0.485^{(ns)}$	$0.366^{(ns)}$	$0.733^{(ns)}$
11	$0.819^{(ns)}$	$_{-0.0241}0.00316_{0.0304}$	$0.532^{(ns)}$	$5.86e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.793}0.841_{0.891}$	$0.513^{(ns)}$	$0.852^{(ns)}$	$0.772^{(ns)}$
12	$0.9^{(ns)}$	$_{-0.0601}-0.00332_{0.0529}$	$0.484^{(ns)}$	$0.0551^{(ns)}$	$_{0.769}0.879_{1}$	$0.501^{(ns)}$	$0.676^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
13	$0.441^{(ns)}$	$_{-0.0295}0.0188_{0.0669}$	$0.473^{(ns)}$	$0.00472^{(**)}$	$_{0.747}0.84_{0.949}$	$0.587^{(ns)}$	$0.927^{(ns)}$	$0.822^{(ns)}$
14	$0.632^{(ns)}$	$_{-0.0625}-0.0119_{0.0373}$	$0.542^{(ns)}$	$0.212^{(ns)}$	$_{0.814}0.924_{1.05}$	$0.44^{(ns)}$	$0.486^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
15	$0.0397^{(*)}$	$_{0.00264}0.0559_{0.11}$	$0.461^{(ns)}$	$0.0196^{(*)}$	$_{0.765}0.865_{0.978}$	$0.487^{(ns)}$	$0.892^{(ns)}$	$0.737^{(ns)}$
16	$0.504^{(ns)}$	$_{-0.0311}0.0159_{0.0638}$	$0.535^{(ns)}$	$0.0039^{(**)}$	$_{0.766}0.855_{0.951}$	$0.541^{(ns)}$	$0.946^{(ns)}$	$0.803^{(ns)}$
17	$0.535^{(ns)}$	$_{-0.0326}0.015_{0.0629}$	$0.446^{(ns)}$	$0.00246^{(**)}$	$_{0.757}0.844_{0.941}$	$0.581^{(ns)}$	$0.266^{(ns)}$	$0.844^{(ns)}$
18	$0.101^{(ns)}$	$_{-0.0181}0.0869_{0.191}$	$0.521^{(ns)}$	$0.775^{(ns)}$	$_{0.698}0.955_{1.33}$	$0.449^{(ns)}$	$0.969^{(ns)}$	$0.751^{(ns)}$
19	$0.241^{(ns)}$	$_{-0.0284}0.0422_{0.113}$	$0.526^{(ns)}$	$0.00306^{(**)}$	$_{0.62}0.747_{0.904}$	$0.506^{(ns)}$	$0.378^{(ns)}$	$0.768^{(ns)}$
20	$0.864^{(ns)}$	$_{-0.073}-0.00588_{0.0612}$	$0.406^{(ns)}$	$0.014^{(*)}$	$_{0.688}0.812_{0.959}$	$0.412^{(ns)}$	$0.978^{(ns)}$	$0.769^{(ns)}$
21	$0.0686^{(ns)}$	$_{-0.00462}0.0601_{0.124}$	$0.509^{(ns)}$	$0.00193^{(**)}$	$_{0.67}0.783_{0.912}$	$0.555^{(ns)}$	$0.613^{(ns)}$	$0.82^{(ns)}$
22	$0.759^{(ns)}$	$_{-0.0611}-0.00806_{0.0441}$	$0.477^{(ns)}$	$0.000671^{(***)}$	$_{0.72}0.811_{0.915}$	$0.53^{(ns)}$	$0.476^{(ns)}$	$0.831^{(ns)}$
23	$0.306^{(ns)}$	$_{-0.0294}0.0323_{0.0933}$	$0.472^{(ns)}$	$0.184^{(ns)}$	$_{0.794}0.912_{1.04}$	$0.442^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
24	$0.832^{(ns)}$	$_{-0.0366}-0.00358_{0.0294}$	$0.534^{(ns)}$	$4.13e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.767}0.836_{0.911}$	$0.506^{(ns)}$	$0.91^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
25	$0.481^{(ns)}$	$_{-0.019}0.0107_{0.0406}$	$0.453^{(ns)}$	$0.000347^{(***)}$	$_{0.799}0.865_{0.936}$	$0.48^{(ns)}$	$0.602^{(ns)}$	$0.817^{(ns)}$
26	$0.212^{(ns)}$	$_{-0.0104}0.0182_{0.0466}$	$0.473^{(ns)}$	$0.000384^{(***)}$	$_{0.828}0.885_{0.946}$	$0.559^{(ns)}$	$0.93^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
27	$0.507^{(ns)}$	$_{-0.0177}0.00911_{0.0359}$	$0.518^{(ns)}$	$7.51e\text{-}14^{(***)}$	$_{0.73}0.779_{0.831}$	$0.485^{(ns)}$	$0.693^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$

Tabelle E.14: Resultate der Signifikanztests für φ_i^τ Ni. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0^{(***)}$	$_{0.0706}0.0857_{0.101}$	$0.484^{(ns)}$	$0.000118^{(***)}$	$_{0.752}0.827_{0.911}$	$0.543^{(ns)}$	$0.546^{(ns)}$	$0.774^{(ns)}$
2	$0^{(***)}$	$_{0.0725}0.0871_{0.101}$	$0.522^{(ns)}$	$0.000894^{(***)}$	$_{0.776}0.853_{0.937}$	$0.47^{(ns)}$	$0.744^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
3	$3.73\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.0512}0.0684_{0.0859}$	$0.496^{(ns)}$	$0.000104^{(***)}$	$_{0.728}0.81_{0.9}$	$0.515^{(ns)}$	$0.835^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
4	$0^{(***)}$	$_{0.0613}0.0785_{0.0956}$	$0.473^{(ns)}$	$0.00107^{(**)}$	$_{0.756}0.841_{0.933}$	$0.492^{(ns)}$	$0.775^{(ns)}$	$0.768^{(ns)}$
5	$1.22\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.0661}0.09_{0.114}$	$0.551^{(ns)}$	$0.0988^{(ns)}$	$_{0.801}0.904_{1.02}$	$0.508^{(ns)}$	$0.992^{(ns)}$	$0.814^{(ns)}$
6	$3.11\text{e-}15^{(***)}$	$_{0.0668}0.0881_{0.109}$	$0.538^{(ns)}$	$0.0263^{(*)}$	$_{0.758}0.861_{0.983}$	$0.5^{(ns)}$	$0.972^{(ns)}$	$0.768^{(ns)}$
7	$0^{(***)}$	$_{0.0846}0.104_{0.124}$	$0.464^{(ns)}$	$0.000876^{(***)}$	$_{0.707}0.806_{0.913}$	$0.471^{(ns)}$	$0.941^{(ns)}$	$0.817^{(ns)}$
8	$0^{(***)}$	$_{0.0716}0.0806_{0.0896}$	$0.576^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.691}0.732_{0.775}$	$0.477^{(ns)}$	$0.41^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
9	$0^{(***)}$	$_{0.0705}0.0797_{0.0887}$	$0.495^{(ns)}$	$1.22\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.758}0.803_{0.851}$	$0.514^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$	$0.772^{(ns)}$
10	$0^{(***)}$	$_{0.0833}0.0942_{0.105}$	$0.463^{(ns)}$	$2.95\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.743}0.797_{0.855}$	$0.422^{(ns)}$	$0.345^{(ns)}$	$0.762^{(ns)}$
11	$0^{(***)}$	$_{0.0697}0.0804_{0.0912}$	$0.507^{(ns)}$	$4.17\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.744}0.793_{0.846}$	$0.508^{(ns)}$	$0.814^{(ns)}$	$0.761^{(ns)}$
12	$0^{(***)}$	$_{0.0714}0.0857_{0.1}$	$0.563^{(ns)}$	$0.00025^{(***)}$	$_{0.751}0.831_{0.918}$	$0.469^{(ns)}$	$0.156^{(ns)}$	$0.81^{(ns)}$
13	$0^{(***)}$	$_{0.0741}0.0889_{0.104}$	$0.49^{(ns)}$	$8.4\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.714}0.78_{0.854}$	$0.525^{(ns)}$	$0.65^{(ns)}$	$0.798^{(ns)}$
14	$0^{(***)}$	$_{0.0665}0.0817_{0.097}$	$0.578^{(ns)}$	$0.0323^{(*)}$	$_{0.82}0.901_{0.991}$	$0.463^{(ns)}$	$0.994^{(ns)}$	$0.733^{(ns)}$
15	$0^{(***)}$	$_{0.0665}0.0816_{0.0963}$	$0.508^{(ns)}$	$0.171^{(ns)}$	$_{0.85}0.936_{1.03}$	$0.507^{(ns)}$	$0.771^{(ns)}$	$0.763^{(ns)}$
16	$0^{(***)}$	$_{0.0737}0.0916_{0.109}$	$0.494^{(ns)}$	$0.0621^{(ns)}$	$_{0.794}0.893_{1.01}$	$0.462^{(ns)}$	$0.792^{(ns)}$	$0.799^{(ns)}$
17	$0^{(***)}$	$_{0.0773}0.0939_{0.11}$	$0.45^{(ns)}$	$3.55\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.685}0.766_{0.858}$	$0.467^{(ns)}$	$0.91^{(ns)}$	$0.77^{(ns)}$
18	$3.5\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.0728}0.0993_{0.126}$	$0.493^{(ns)}$	$0.0786^{(ns)}$	$_{0.675}0.83_{1.02}$	$0.525^{(ns)}$	$0.727^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
19	$0^{(***)}$	$_{0.0924}0.112_{0.132}$	$0.562^{(ns)}$	$0.0155^{(*)}$	$_{0.727}0.84_{0.966}$	$0.513^{(ns)}$	$0.64^{(ns)}$	$0.819^{(ns)}$
20	$0^{(***)}$	$_{0.067}0.0821_{0.0968}$	$0.536^{(ns)}$	$0.333^{(ns)}$	$_{0.835}0.942_{1.06}$	$0.511^{(ns)}$	$0.451^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
21	$0^{(***)}$	$_{0.0835}0.0971_{0.111}$	$0.515^{(ns)}$	$0.578^{(ns)}$	$_{0.868}0.969_{1.08}$	$0.522^{(ns)}$	$0.569^{(ns)}$	$0.774^{(ns)}$
22	$0^{(***)}$	$_{0.0728}0.0865_{0.1}$	$0.52^{(ns)}$	$0.0219^{(*)}$	$_{0.799}0.888_{0.983}$	$0.488^{(ns)}$	$0.64^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
23	$0^{(***)}$	$_{0.0581}0.0727_{0.0872}$	$0.56^{(ns)}$	$0.101^{(ns)}$	$_{0.819}0.911_{1.02}$	$0.524^{(ns)}$	$0.704^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
24	$0^{(***)}$	$_{0.069}0.0774_{0.0859}$	$0.487^{(ns)}$	$1.75\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.816}0.865_{0.918}$	$0.452^{(ns)}$	$0.65^{(ns)}$	$0.816^{(ns)}$
25	$0^{(***)}$	$_{0.07}0.078_{0.0859}$	$0.541^{(ns)}$	$2.68\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.82}0.869_{0.921}$	$0.48^{(ns)}$	$0.455^{(ns)}$	$0.792^{(ns)}$
26	$0^{(***)}$	$_{0.0796}0.0874_{0.0952}$	$0.5^{(ns)}$	$2.05\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.796}0.842_{0.891}$	$0.548^{(ns)}$	$0.179^{(ns)}$	$0.785^{(ns)}$
27	$0^{(***)}$	$_{0.0802}0.0877_{0.0953}$	$0.498^{(ns)}$	$2.22\text{e-}15^{(***)}$	$_{0.764}0.806_{0.85}$	$0.494^{(ns)}$	$0.899^{(ns)}$	$0.821^{(ns)}$

Tabelle E.15: Resultate der Signifikanztests für φ_i^τ Zr. Nummern gelten nach Tab. E.1.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$1.38\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.0679}0.0899_{0.111}$	$0.448^{(ns)}$	$2.38\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.667}0.749_{0.843}$	$0.535^{(ns)}$	$0.601^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$
2	$5.33\text{e-}15^{(***)}$	$_{0.0666}0.0875_{0.108}$	$0.546^{(ns)}$	$0.000304^{(***)}$	$_{0.731}0.816_{0.909}$	$0.532^{(ns)}$	$0.992^{(ns)}$	$0.736^{(ns)}$
3	$6.49\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.0597}0.0824_{0.105}$	$0.482^{(ns)}$	$4.4\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.701}0.787_{0.883}$	$0.513^{(ns)}$	$0.876^{(ns)}$	$0.783^{(ns)}$
4	$3.49\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.0466}0.0671_{0.0877}$	$0.463^{(ns)}$	$0.000159^{(***)}$	$_{0.732}0.814_{0.904}$	$0.49^{(ns)}$	$0.558^{(ns)}$	$0.777^{(ns)}$
5	$9.77\text{e-}15^{(***)}$	$_{0.0766}0.102_{0.127}$	$0.502^{(ns)}$	$0.0933^{(ns)}$	$_{0.817}0.912_{1.02}$	$0.482^{(ns)}$	$0.531^{(ns)}$	$0.831^{(ns)}$
6	$8.22\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.0609}0.0831_{0.105}$	$0.539^{(ns)}$	$5.81\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.712}0.795_{0.888}$	$0.54^{(ns)}$	$0.993^{(ns)}$	$0.783^{(ns)}$
7	$0^{(***)}$	$_{0.081}0.102_{0.123}$	$0.494^{(ns)}$	$0.00256^{(**)}$	$_{0.771}0.854_{0.945}$	$0.46^{(ns)}$	$0.49^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
8	$0^{(***)}$	$_{0.0572}0.0684_{0.0795}$	$0.433^{(ns)}$	$2.22\text{e-}15^{(***)}$	$_{0.744}0.789_{0.836}$	$0.517^{(ns)}$	$0.285^{(ns)}$	$0.722^{(ns)}$
9	$0^{(***)}$	$_{0.0501}0.0611_{0.0721}$	$0.443^{(ns)}$	$8.88\text{e-}16^{(***)}$	$_{0.738}0.783_{0.83}$	$0.493^{(ns)}$	$0.848^{(ns)}$	$0.772^{(ns)}$
10	$0^{(***)}$	$_{0.0628}0.0754_{0.088}$	$0.491^{(ns)}$	$2.78\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.74}0.789_{0.84}$	$0.496^{(ns)}$	$0.72^{(ns)}$	$0.84^{(ns)}$
11	$0^{(***)}$	$_{0.0718}0.0833_{0.0947}$	$0.478^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.732}0.775_{0.819}$	$0.48^{(ns)}$	$0.635^{(ns)}$	$0.827^{(ns)}$
12	$1\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.0648}0.0867_{0.108}$	$0.583^{(ns)}$	$0.00371^{(**)}$	$_{0.726}0.827_{0.94}$	$0.51^{(ns)}$	$0.832^{(ns)}$	$0.826^{(ns)}$
13	$1.39\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.0504}0.0705_{0.0906}$	$0.47^{(ns)}$	$0.00286^{(**)}$	$_{0.747}0.837_{0.94}$	$0.497^{(ns)}$	$0.16^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$
14	$8.36\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.0369}0.0573_{0.0777}$	$0.471^{(ns)}$	$7.55\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.701}0.787_{0.887}$	$0.477^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
15	$1.28\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.0276}0.0501_{0.0722}$	$0.506^{(ns)}$	$3.58\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.646}0.728_{0.822}$	$0.503^{(ns)}$	$0.791^{(ns)}$	$0.75^{(ns)}$
16	$1.82\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.0536}0.0737_{0.0934}$	$0.435^{(ns)}$	$2.65\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.666}0.741_{0.824}$	$0.568^{(ns)}$	$0.677^{(ns)}$	$0.835^{(ns)}$
17	$0^{(***)}$	$_{0.0709}0.0916_{0.112}$	$0.554^{(ns)}$	$2.26\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.66}0.739_{0.827}$	$0.467^{(ns)}$	$0.908^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
18	$0.0091^{(*)}$	$_{0.0162}0.0637_{0.111}$	$0.456^{(ns)}$	$0.0301^{(*)}$	$_{0.538}0.721_{0.97}$	$0.49^{(ns)}$	$1^{(ns)}$	$0.824^{(ns)}$
19	$3.12\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.0401}0.0676_{0.0953}$	$0.469^{(ns)}$	$0.00955^{(**)}$	$_{0.668}0.798_{0.946}$	$0.473^{(ns)}$	$0.973^{(ns)}$	$0.822^{(ns)}$
20	$0.000643^{(***)}$	$_{0.0201}0.0467_{0.0732}$	$0.462^{(ns)}$	$0.000215^{(***)}$	$_{0.622}0.731_{0.865}$	$0.419^{(ns)}$	$0.413^{(ns)}$	$0.802^{(ns)}$
21	$3.73\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.0344}0.058_{0.082}$	$0.532^{(ns)}$	$0.0174^{(*)}$	$_{0.706}0.827_{0.967}$	$0.483^{(ns)}$	$0.478^{(ns)}$	$0.768^{(ns)}$
22	$0^{(***)}$	$_{0.0689}0.0882_{0.108}$	$0.435^{(ns)}$	$0.00323^{(**)}$	$_{0.742}0.835_{0.944}$	$0.467^{(ns)}$	$0.875^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
23	$1.14\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.0501}0.073_{0.0958}$	$0.5^{(ns)}$	$0.0636^{(ns)}$	$_{0.753}0.87_{1.01}$	$0.459^{(ns)}$	$0.89^{(ns)}$	$0.857^{(ns)}$
24	$0^{(***)}$	$_{0.0486}0.0615_{0.0742}$	$0.492^{(ns)}$	$3.49\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.759}0.824_{0.895}$	$0.505^{(ns)}$	$0.388^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
25	$8.88\text{e-}16^{(***)}$	$_{0.0382}0.0502_{0.0622}$	$0.516^{(ns)}$	$0.00275^{(**)}$	$_{0.816}0.885_{0.958}$	$0.472^{(ns)}$	$0.481^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
26	$0^{(***)}$	$_{0.0396}0.0503_{0.0611}$	$0.418^{(ns)}$	$3.35\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.773}0.827_{0.884}$	$0.408^{(ns)}$	$0.361^{(ns)}$	$0.807^{(ns)}$
27	$0^{(***)}$	$_{0.0577}0.0678_{0.078}$	$0.514^{(ns)}$	$5.1\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.745}0.793_{0.844}$	$0.454^{(ns)}$	$0.663^{(ns)}$	$0.765^{(ns)}$

Tabelle E.16: Parameter der Simulationen für die die Signifikanztests durchgeführt werden bei $\lambda_1 = 2$ und $\lambda_2 = 2$.

					Ni		Zr	
Nr.	T (K)	N	$\dot{\epsilon}$ (%/ns)	Zug/Druck	N_1	N_2	N_1	N_2
1	700	5184	0.1	xy	979	1229	1163	884
2	700	5184	0.1	zx	1026	1227	1206	870
3	700	5184	1.0	xy	714	1394	1090	942
4	700	5184	1.0	zx	676	1531	947	1129
5	700	5184	10.0	xy	555	1622	873	1197
6	700	5184	10.0	xy	540	1562	930	1120
7	700	5184	10.0	zx	525	1630	910	1182
8	700	17500	1.0	xy	2578	4742	3647	3401
9	700	17500	1.0	zx	2491	4884	3479	3561
10	700	17500	10.0	xy	1848	5268	3246	3512
11	700	17500	10.0	zx	2013	5353	3161	4012
12	810	5184	0.1	xy	1395	841	1438	625
13	810	5184	0.1	zx	1268	987	1340	770
14	810	5184	1.0	xy	861	1310	1129	898
15	810	5184	1.0	zx	922	1248	1198	840
16	810	5184	10.0	xy	661	1503	954	1131
17	810	5184	10.0	zx	652	1516	1017	1075
18	1000	5184	0.1	zx	2357	161	2106	188
19	1000	5184	0.1	xy	2241	265	1884	354
20	1000	5184	1.0	xy	1633	641	1647	431
21	1000	5184	1.0	zx	1564	721	1603	500
22	1000	5184	10.0	xy	949	1228	1177	845
23	1000	5184	10.0	zx	964	1127	1308	690
24	1000	17500	1.0	xy	5684	2103	5688	1566
25	1000	17500	1.0	zx	5541	2248	5556	1695
26	1000	17500	10.0	xy	3329	3889	4332	2585
27	1000	17500	10.0	zx	3358	3929	4327	2672

E.2. $\lambda_1 = 2$ und $\lambda_2 = 2$

Hier folgen die Tabellen wie in Abschn. E.1 für $\lambda_1 = 2$ und $\lambda_2 = 2$. Tabelle E.16 listet die Simulationsparameter auf. Die zugehörige Nummer dient als Referenz für die Tabellen E.17 bis E.30.

Tabelle E.17: Resultate der Signifikanztests für $E_{pot,i}$ Ni. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0^{(***)}$	$_{0.0352}0.0434_{0.0516}$	$0.487^{(ns)}$	$0.933^{(ns)}$	$_{0.921}1_{1.09}$	$0.541^{(ns)}$	$0.0464^{(*)}$	$0.739^{(ns)}$
2	$0^{(***)}$	$_{0.0371}0.0453_{0.0534}$	$0.462^{(ns)}$	$0.491^{(ns)}$	$_{0.897}0.971_{1.05}$	$0.426^{(ns)}$	$0.139^{(ns)}$	$0.739^{(ns)}$
3	$0^{(***)}$	$_{0.0405}0.0493_{0.0582}$	$0.546^{(ns)}$	$0.00118^{(**)}$	$_{0.79}0.862_{0.942}$	$0.504^{(ns)}$	$0.0307^{(*)}$	$0.775^{(ns)}$
4	$0^{(***)}$	$_{0.0391}0.0482_{0.0572}$	$0.521^{(ns)}$	$0.0337^{(*)}$	$_{0.829}0.907_{0.993}$	$0.552^{(ns)}$	$0.221^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
5	$0^{(***)}$	$_{0.0497}0.0603_{0.0708}$	$0.535^{(ns)}$	$0.821^{(ns)}$	$_{0.9}0.989_{1.09}$	$0.53^{(ns)}$	$0.447^{(ns)}$	$0.765^{(ns)}$
6	$0^{(***)}$	$_{0.0498}0.06_{0.0702}$	$0.494^{(ns)}$	$0.0445^{(*)}$	$_{0.816}0.902_{0.997}$	$0.54^{(ns)}$	$0.747^{(ns)}$	$0.766^{(ns)}$
7	$0^{(***)}$	$_{0.0421}0.0519_{0.0615}$	$0.542^{(ns)}$	$0.00473^{(**)}$	$_{0.781}0.864_{0.956}$	$0.542^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
8	$0^{(***)}$	$_{0.0444}0.0492_{0.054}$	$0.482^{(ns)}$	$7.94\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.827}0.868_{0.91}$	$0.472^{(ns)}$	$0.0302^{(*)}$	$0.762^{(ns)}$
9	$0^{(***)}$	$_{0.0456}0.0505_{0.0554}$	$0.464^{(ns)}$	$3.17\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.845}0.885_{0.927}$	$0.508^{(ns)}$	$0.0319^{(*)}$	$0.709^{(ns)}$
10	$0^{(***)}$	$_{0.0491}0.0546_{0.06}$	$0.511^{(ns)}$	$0.00966^{(**)}$	$_{0.886}0.933_{0.983}$	$0.543^{(ns)}$	$0.131^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
11	$0^{(***)}$	$_{0.0457}0.0512_{0.0566}$	$0.533^{(ns)}$	$0.00966^{(**)}$	$_{0.886}0.933_{0.983}$	$0.543^{(ns)}$	$0.112^{(ns)}$	$0.781^{(ns)}$
12	$0^{(***)}$	$_{0.0371}0.0447_{0.0522}$	$0.47^{(ns)}$	$0.562^{(ns)}$	$_{0.939}1.03_{1.12}$	$0.435^{(ns)}$	$0.122^{(ns)}$	$0.747^{(ns)}$
13	$0^{(***)}$	$_{0.0355}0.0429_{0.0502}$	$0.52^{(ns)}$	$0.386^{(ns)}$	$_{0.884}0.963_{1.05}$	$0.481^{(ns)}$	$0.0512^{(ns)}$	$0.821^{(ns)}$
14	$0^{(***)}$	$_{0.0428}0.0509_{0.0591}$	$0.535^{(ns)}$	$0.472^{(ns)}$	$_{0.888}0.969_{1.06}$	$0.511^{(ns)}$	$0.295^{(ns)}$	$0.732^{(ns)}$
15	$0^{(***)}$	$_{0.0458}0.0537_{0.0616}$	$0.427^{(ns)}$	$0.138^{(ns)}$	$_{0.862}0.938_{1.02}$	$0.474^{(ns)}$	$0.415^{(ns)}$	$0.713^{(ns)}$
16	$0^{(***)}$	$_{0.0473}0.0564_{0.0657}$	$0.508^{(ns)}$	$0.085^{(ns)}$	$_{0.843}0.922_{1.01}$	$0.576^{(ns)}$	$0.167^{(ns)}$	$0.825^{(ns)}$
17	$0^{(***)}$	$_{0.0383}0.0473_{0.0561}$	$0.527^{(ns)}$	$0.203^{(ns)}$	$_{0.862}0.944_{1.03}$	$0.504^{(ns)}$	$0.087^{(ns)}$	$0.731^{(ns)}$
18	$2.58\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.0346}0.0467_{0.059}$	$0.453^{(ns)}$	$0.136^{(ns)}$	$_{0.757}0.885_{1.04}$	$0.509^{(ns)}$	$0.87^{(ns)}$	$0.754^{(ns)}$
19	$1.11\text{e-}15^{(***)}$	$_{0.0306}0.0401_{0.0498}$	$0.527^{(ns)}$	$0.55^{(ns)}$	$_{0.831}0.957_{1.1}$	$0.493^{(ns)}$	$0.87^{(ns)}$	$0.754^{(ns)}$
20	$0^{(***)}$	$_{0.035}0.0426_{0.0501}$	$0.527^{(ns)}$	$0.747^{(ns)}$	$_{0.9}0.985_{1.08}$	$0.469^{(ns)}$	$0.643^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
21	$0^{(***)}$	$_{0.0319}0.0391_{0.0462}$	$0.551^{(ns)}$	$0.572^{(ns)}$	$_{0.887}0.973_{1.07}$	$0.529^{(ns)}$	$0.189^{(ns)}$	$0.741^{(ns)}$
22	$0^{(***)}$	$_{0.041}0.0484_{0.056}$	$0.493^{(ns)}$	$0.221^{(ns)}$	$_{0.871}0.948_{1.03}$	$0.51^{(ns)}$	$0.708^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
23	$0^{(***)}$	$_{0.0351}0.0428_{0.0506}$	$0.445^{(ns)}$	$0.146^{(ns)}$	$_{0.861}0.938_{1.02}$	$0.497^{(ns)}$	$0.2^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
24	$0^{(***)}$	$_{0.0392}0.0435_{0.0478}$	$0.531^{(ns)}$	$0.158^{(ns)}$	$_{0.916}0.964_{1.01}$	$0.532^{(ns)}$	$0.0284^{(*)}$	$0.791^{(ns)}$
25	$0^{(***)}$	$_{0.0363}0.0405_{0.0447}$	$0.482^{(ns)}$	$0.00646^{(**)}$	$_{0.888}0.933_{0.981}$	$0.47^{(ns)}$	$0.00505^{(**)}$	$0.746^{(ns)}$
26	$0^{(***)}$	$_{0.0455}0.0498_{0.0541}$	$0.505^{(ns)}$	$0.00221^{(**)}$	$_{0.889}0.931_{0.975}$	$0.463^{(ns)}$	$0.036^{(*)}$	$0.77^{(ns)}$
27	$0^{(***)}$	$_{0.0448}0.0489_{0.0531}$	$0.557^{(ns)}$	$5.92\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.839}0.879_{0.921}$	$0.528^{(ns)}$	$0.0375^{(*)}$	$0.782^{(ns)}$

Tabelle E.18: Resultate der Signifikanztests für $E_{pot,i}$ Zr. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0^{(***)}$	${}_{0.0431}0.056_{0.0689}$	$0.641^{(ns)}$	$2.96\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.746}0.809_{0.877}$	$0.493^{(ns)}$	$0.85^{(ns)}$	$0.776^{(ns)}$
2	$0^{(***)}$	${}_{0.0435}0.0561_{0.0687}$	$0.498^{(ns)}$	$0.0317^{(*)}$	${}_{0.844}0.915_{0.992}$	$0.446^{(ns)}$	$0.68^{(ns)}$	$0.803^{(ns)}$
3	$1.23\text{e-}13^{(***)}$	${}_{0.0374}0.0506_{0.0638}$	$0.526^{(ns)}$	$0.015^{(*)}$	${}_{0.839}0.908_{0.981}$	$0.534^{(ns)}$	$0.723^{(ns)}$	$0.773^{(ns)}$
4	$0^{(***)}$	${}_{0.0539}0.067_{0.0799}$	$0.474^{(ns)}$	$0.000567^{(***)}$	${}_{0.808}0.873_{0.943}$	$0.584^{(ns)}$	$0.336^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
5	$0^{(***)}$	${}_{0.0463}0.06_{0.0737}$	$0.49^{(ns)}$	$0.00191^{(**)}$	${}_{0.813}0.881_{0.955}$	$0.573^{(ns)}$	$0.696^{(ns)}$	$0.75^{(ns)}$
6	$3.42\text{e-}14^{(***)}$	${}_{0.0394}0.053_{0.0666}$	$0.509^{(ns)}$	$0.556^{(ns)}$	${}_{0.906}0.978_{1.06}$	$0.482^{(ns)}$	$0.847^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$
7	$0^{(***)}$	${}_{0.0505}0.0642_{0.0779}$	$0.468^{(ns)}$	$0.00157^{(**)}$	${}_{0.814}0.881_{0.953}$	$0.517^{(ns)}$	$0.656^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
8	$0^{(***)}$	${}_{0.046}0.0529_{0.0597}$	$0.475^{(ns)}$	$3.32\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.858}0.895_{0.934}$	$0.476^{(ns)}$	$0.36^{(ns)}$	$0.737^{(ns)}$
9	$0^{(***)}$	${}_{0.0416}0.0487_{0.0559}$	$0.532^{(ns)}$	$1.78\text{e-}11^{(***)}$	${}_{0.828}0.864_{0.901}$	$0.561^{(ns)}$	$0.0989^{(ns)}$	$0.842^{(ns)}$
10	$0^{(***)}$	${}_{0.0463}0.0537_{0.0612}$	$0.542^{(ns)}$	$0.00916^{(**)}$	${}_{0.904}0.944_{0.986}$	$0.572^{(ns)}$	$0.274^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
11	$0^{(***)}$	${}_{0.0428}0.05_{0.0573}$	$0.503^{(ns)}$	$0.00916^{(**)}$	${}_{0.904}0.944_{0.986}$	$0.572^{(ns)}$	$0.496^{(ns)}$	$0.795^{(ns)}$
12	$3.58\text{e-}12^{(***)}$	${}_{0.0334}0.0463_{0.0593}$	$0.505^{(ns)}$	$0.00212^{(**)}$	${}_{0.798}0.871_{0.951}$	$0.399^{(ns)}$	$0.508^{(ns)}$	$0.817^{(ns)}$
13	$0^{(***)}$	${}_{0.0453}0.0575_{0.0697}$	$0.519^{(ns)}$	$5.12\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.751}0.813_{0.881}$	$0.511^{(ns)}$	$0.618^{(ns)}$	$0.791^{(ns)}$
14	$7.9\text{e-}14^{(***)}$	${}_{0.0362}0.0489_{0.0614}$	$0.493^{(ns)}$	$0.000515^{(***)}$	${}_{0.8}0.866_{0.939}$	$0.467^{(ns)}$	$0.432^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
15	$0^{(***)}$	${}_{0.043}0.0558_{0.0688}$	$0.511^{(ns)}$	$8.37\text{e-}05^{(***)}$	${}_{0.783}0.849_{0.921}$	$0.411^{(ns)}$	$0.903^{(ns)}$	$0.765^{(ns)}$
16	$9.48\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.0225}0.0356_{0.0485}$	$0.508^{(ns)}$	$2.55\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.767}0.83_{0.897}$	$0.574^{(ns)}$	$0.918^{(ns)}$	$0.773^{(ns)}$
17	$0^{(***)}$	${}_{0.0604}0.0728_{0.0851}$	$0.445^{(ns)}$	$1.68\text{e-}06^{(***)}$	${}_{0.771}0.83_{0.896}$	$0.481^{(ns)}$	$0.709^{(ns)}$	$0.766^{(ns)}$
18	$1.66\text{e-}10^{(***)}$	${}_{0.0413}0.0592_{0.0769}$	$0.567^{(ns)}$	$0.19^{(ns)}$	${}_{0.799}0.913_{1.05}$	$0.505^{(ns)}$	$0.974^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$
19	$0^{(***)}$	${}_{0.0464}0.0601_{0.074}$	$0.486^{(ns)}$	$0.000701^{(***)}$	${}_{0.754}0.837_{0.927}$	$0.481^{(ns)}$	$0.974^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$
20	$8.75\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.0233}0.0363_{0.0499}$	$0.48^{(ns)}$	$0.0073^{(**)}$	${}_{0.796}0.876_{0.964}$	$0.496^{(ns)}$	$0.988^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$
21	$8.37\text{e-}12^{(***)}$	${}_{0.0322}0.0448_{0.0574}$	$0.545^{(ns)}$	$0.045^{(*)}$	${}_{0.834}0.912_{0.998}$	$0.46^{(ns)}$	$0.552^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
22	$3.34\text{e-}08^{(***)}$	${}_{0.0221}0.0341_{0.0462}$	$0.582^{(ns)}$	$0.019^{(*)}$	${}_{0.841}0.91_{0.984}$	$0.561^{(ns)}$	$0.723^{(ns)}$	$0.728^{(ns)}$
23	$0^{(***)}$	${}_{0.0439}0.0565_{0.0692}$	$0.462^{(ns)}$	$0.0166^{(*)}$	${}_{0.825}0.9_{0.98}$	$0.567^{(ns)}$	$0.926^{(ns)}$	$0.85^{(ns)}$
24	$0^{(***)}$	${}_{0.0328}0.0399_{0.047}$	$0.478^{(ns)}$	$1.07\text{e-}07^{(***)}$	${}_{0.826}0.869_{0.915}$	$0.534^{(ns)}$	$0.733^{(ns)}$	$0.781^{(ns)}$
25	$0^{(***)}$	${}_{0.0364}0.0435_{0.0506}$	$0.458^{(ns)}$	$8.96\text{e-}10^{(***)}$	${}_{0.817}0.858_{0.901}$	$0.463^{(ns)}$	$0.328^{(ns)}$	$0.807^{(ns)}$
26	$0^{(***)}$	${}_{0.0338}0.0406_{0.0473}$	$0.573^{(ns)}$	$0.000219^{(***)}$	${}_{0.878}0.918_{0.961}$	$0.534^{(ns)}$	$0.614^{(ns)}$	$0.789^{(ns)}$
27	$0^{(***)}$	${}_{0.04}0.0467_{0.0533}$	$0.542^{(ns)}$	$0^{(***)}$	${}_{0.787}0.822_{0.858}$	$0.525^{(ns)}$	$0.172^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$

Tabelle E.19: Resultate der Signifikanztests für $\mathcal{V}_i$ Ni. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	2.17e-06$^{(***)}$	$_{-0.000214}$-0.000189$_{-0.000115}$	0.433$^{(ns)}$	0.00245$^{(**)}$	$_{0.826}0.89_{0.961}$	0.471$^{(ns)}$	0.523$^{(ns)}$	0.773$^{(ns)}$
2	0.00246$^{(**)}$	$_{-0.000174}$-0.000108$_{-4.3e-05}$	0.501$^{(ns)}$	1e-05$^{(***)}$	$_{0.776}0.838_{0.907}$	0.538$^{(ns)}$	0.014$^{(*)}$	0.763$^{(ns)}$
3	3.07e-09$^{(***)}$	$_{-0.00029}$-0.000225$_{-0.000133}$	0.556$^{(ns)}$	3.77e-05$^{(***)}$	$_{0.777}0.842_{0.913}$	0.455$^{(ns)}$	0.00715$^{(**)}$	0.761$^{(ns)}$
4	8.29e-05$^{(***)}$	$_{-0.000233}$-0.00015$_{-7.62e-05}$	0.534$^{(ns)}$	0.00737$^{(**)}$	$_{0.824}0.894_{0.97}$	0.476$^{(ns)}$	0.193$^{(ns)}$	0.76$^{(ns)}$
5	2.87e-09$^{(***)}$	$_{-0.000364}$-0.000281$_{-0.000181}$	0.542$^{(ns)}$	0.0913$^{(ns)}$	$_{0.853}0.929_{1.01}$	0.55$^{(ns)}$	0.767$^{(ns)}$	0.768$^{(ns)}$
6	6.53e-11$^{(***)}$	$_{-0.000372}$-0.000293$_{-0.000207}$	0.544$^{(ns)}$	0.00743$^{(**)}$	$_{0.815}0.889_{0.969}$	0.513$^{(ns)}$	0.912$^{(ns)}$	0.803$^{(ns)}$
7	0.00273$^{(**)}$	$_{-0.000207}$-0.000131$_{-4.6e-05}$	0.48$^{(ns)}$	0.000591$^{(***)}$	$_{0.778}0.852_{0.933}$	0.497$^{(ns)}$	0.155$^{(ns)}$	0.757$^{(ns)}$
8	9.08e-34$^{(***)}$	$_{-0.000301}$-0.000249$_{-0.000212}$	0.516$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.763}0.798_{0.834}$	0.523$^{(ns)}$	0.0512$^{(ns)}$	0.825$^{(ns)}$
9	2.41e-29$^{(***)}$	$_{-0.000285}$-0.000219$_{-0.000207}$	0.492$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.777}0.812_{0.849}$	0.503$^{(ns)}$	0.0847$^{(ns)}$	0.777$^{(ns)}$
10	8.18e-27$^{(***)}$	$_{-0.000309}$-0.000262$_{-0.000215}$	0.532$^{(ns)}$	1.7e-10$^{(***)}$	$_{0.815}0.855_{0.897}$	0.458$^{(ns)}$	0.231$^{(ns)}$	0.802$^{(ns)}$
11	1.83e-20$^{(***)}$	$_{-0.000271}$-0.000225$_{-0.000189}$	0.525$^{(ns)}$	1.7e-10$^{(***)}$	$_{0.815}0.855_{0.897}$	0.458$^{(ns)}$	0.267$^{(ns)}$	0.764$^{(ns)}$
12	0.00262$^{(**)}$	$_{-0.000173}$-9.84e-05$_{-2.83e-05}$	0.48$^{(ns)}$	0.0092$^{(**)}$	$_{0.84}0.906_{0.975}$	0.489$^{(ns)}$	0.184$^{(ns)}$	0.748$^{(ns)}$
13	0.00425$^{(**)}$	$_{-0.000144}$-9.68e-05$_{-5.37e-05}$	0.499$^{(ns)}$	1.19e-05$^{(***)}$	$_{0.777}0.84_{0.908}$	0.522$^{(ns)}$	0.0908$^{(ns)}$	0.745$^{(ns)}$
14	5.65e-08$^{(***)}$	$_{-0.000283}$-0.000203$_{-0.000125}$	0.494$^{(ns)}$	8.23e-08$^{(***)}$	$_{0.74}0.802_{0.869}$	0.559$^{(ns)}$	0.049$^{(*)}$	0.782$^{(ns)}$
15	1.01e-08$^{(***)}$	$_{-0.00026}$-0.000212$_{-0.000116}$	0.512$^{(ns)}$	2.19e-10$^{(***)}$	$_{0.71}0.77_{0.834}$	0.374$^{(ns)}$	0.133$^{(ns)}$	0.742$^{(ns)}$
16	1.86e-11$^{(***)}$	$_{-0.000368}$-0.000273$_{-0.000196}$	0.497$^{(ns)}$	1.51e-05$^{(***)}$	$_{0.766}0.833_{0.904}$	0.523$^{(ns)}$	0.735$^{(ns)}$	0.794$^{(ns)}$
17	0.00593$^{(**)}$	$_{-0.000193}$-0.000111$_{-2.5e-05}$	0.527$^{(ns)}$	0.0426$^{(*)}$	$_{0.836}0.913_{0.997}$	0.473$^{(ns)}$	0.0979$^{(ns)}$	0.738$^{(ns)}$
18	0.726$^{(ns)}$	$_{-0.000144}$-2.25e-05$_{9.13e-05}$	0.437$^{(ns)}$	3.61e-05$^{(***)}$	$_{0.649}0.746_{0.857}$	0.461$^{(ns)}$	0.157$^{(ns)}$	0.813$^{(ns)}$
19	0.765$^{(ns)}$	$_{-7.76e-05}$-2.94e-06$_{0.000103}$	0.547$^{(ns)}$	8.73e-08$^{(***)}$	$_{0.662}0.739_{0.826}$	0.465$^{(ns)}$	0.157$^{(ns)}$	0.813$^{(ns)}$
20	0.000718$^{(***)}$	$_{-0.000186}$-0.000107$_{-4.37e-05}$	0.49$^{(ns)}$	6.73e-05$^{(***)}$	$_{0.784}0.85_{0.921}$	0.536$^{(ns)}$	0.368$^{(ns)}$	0.741$^{(ns)}$
21	0.0583$^{(ns)}$	$_{-0.000133}$-6.19e-05$_{9.09e-06}$	0.535$^{(ns)}$	0.00142$^{(**)}$	$_{0.814}0.881_{0.952}$	0.518$^{(ns)}$	0.357$^{(ns)}$	0.805$^{(ns)}$
22	6.5e-06$^{(***)}$	$_{-0.000222}$-0.000159$_{-8.99e-05}$	0.555$^{(ns)}$	0.00123$^{(**)}$	$_{0.818}0.882_{0.952}$	0.533$^{(ns)}$	0.575$^{(ns)}$	0.79$^{(ns)}$
23	5.72e-05$^{(***)}$	$_{-0.000233}$-0.000133$_{-5.59e-05}$	0.458$^{(ns)}$	3.87e-05$^{(***)}$	$_{0.787}0.85_{0.918}$	0.378$^{(ns)}$	0.112$^{(ns)}$	0.785$^{(ns)}$
24	1.13e-12$^{(***)}$	$_{-0.000177}$-0.000144$_{-0.000108}$	0.493$^{(ns)}$	2.22e-16$^{(***)}$	$_{0.799}0.835_{0.872}$	0.478$^{(ns)}$	0.08$^{(ns)}$	0.695$^{(ns)}$
25	3.52e-07$^{(***)}$	$_{-0.000149}$-9.5e-05$_{-5.56e-05}$	0.513$^{(ns)}$	3.33e-15$^{(***)}$	$_{0.798}0.835_{0.873}$	0.497$^{(ns)}$	0.0451$^{(*)}$	0.768$^{(ns)}$
26	8.62e-35$^{(***)}$	$_{-0.000285}$-0.00024$_{-0.000215}$	0.496$^{(ns)}$	2.44e-15$^{(***)}$	$_{0.808}0.843_{0.879}$	0.483$^{(ns)}$	0.134$^{(ns)}$	0.781$^{(ns)}$
27	1.79e-24$^{(***)}$	$_{-0.000235}$-0.000212$_{-0.000167}$	0.535$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.758}0.791_{0.825}$	0.5$^{(ns)}$	0.0173$^{(*)}$	0.775$^{(ns)}$

Tabelle E.20: Resultate der Signifikanztests für $\mathcal{V}_i$ Zr. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.036^{(*)}$	$_{-0.0002}$-0.000129$_{-2.34e-06}$	$0.586^{(ns)}$	$2.26e-06^{(***)}$	$_{0.758}0.823_{0.892}$	$0.553^{(ns)}$	$0.914^{(ns)}$	$0.759^{(ns)}$
2	$0.902^{(ns)}$	$_{-0.000105}$1.81e-05$_{9.79e-05}$	$0.486^{(ns)}$	$0.000153^{(***)}$	$_{0.787}0.854_{0.926}$	$0.557^{(ns)}$	$0.89^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$
3	$0.000264^{(***)}$	$_{-0.000304}$-0.00017$_{-6.8e-05}$	$0.537^{(ns)}$	$0.0153^{(*)}$	$_{0.842}0.909_{0.982}$	$0.504^{(ns)}$	$0.186^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
4	$0.588^{(ns)}$	$_{-0.000133}$-2.3e-05$_{7.53e-05}$	$0.462^{(ns)}$	$8.76e-07^{(***)}$	$_{0.76}0.821_{0.887}$	$0.432^{(ns)}$	$0.999^{(ns)}$	$0.795^{(ns)}$
5	$2.12e-06^{(***)}$	$_{-0.000344}$-0.000274$_{-0.000134}$	$0.508^{(ns)}$	$4.76e-05^{(***)}$	$_{0.782}0.847_{0.918}$	$0.487^{(ns)}$	$0.992^{(ns)}$	$0.785^{(ns)}$
6	$0.00315^{(**)}$	$_{-0.000266}$-0.00017$_{-5.07e-05}$	$0.511^{(ns)}$	$0.000352^{(***)}$	$_{0.794}0.862_{0.935}$	$0.51^{(ns)}$	$0.911^{(ns)}$	$0.814^{(ns)}$
7	$0.12^{(ns)}$	$_{-2.62e-05}$0.000108$_{0.000197}$	$0.453^{(ns)}$	$0.016^{(*)}$	$_{0.842}0.91_{0.982}$	$0.52^{(ns)}$	$0.954^{(ns)}$	$0.851^{(ns)}$
8	$3.39e-07^{(***)}$	$_{-0.000191}$-0.000156$_{-8.65e-05}$	$0.474^{(ns)}$	$4.44e-16^{(***)}$	$_{0.8}0.835_{0.872}$	$0.45^{(ns)}$	$0.877^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
9	$0.344^{(ns)}$	$_{-8.66e-05}$-1.99e-05$_{3e-05}$	$0.506^{(ns)}$	$4.44e-16^{(***)}$	$_{0.803}0.837_{0.873}$	$0.466^{(ns)}$	$0.939^{(ns)}$	$0.826^{(ns)}$
10	$8.45e-08^{(***)}$	$_{-0.000199}$-0.000155$_{-9.6e-05}$	$0.478^{(ns)}$	$6.47e-11^{(***)}$	$_{0.827}0.864_{0.903}$	$0.471^{(ns)}$	$0.668^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
11	$0.000407^{(***)}$	$_{-0.000164}$-9.19e-05$_{-4.2e-05}$	$0.569^{(ns)}$	$6.47e-11^{(***)}$	$_{0.827}0.864_{0.903}$	$0.471^{(ns)}$	$0.988^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$
12	$0.6^{(ns)}$	$_{-0.000139}$-9.45e-06$_{7.54e-05}$	$0.504^{(ns)}$	$1.74e-08^{(***)}$	$_{0.721}0.784_{0.853}$	$0.554^{(ns)}$	$0.397^{(ns)}$	$0.801^{(ns)}$
13	$0.213^{(ns)}$	$_{-4.7e-05}$6.22e-05$_{0.000171}$	$0.48^{(ns)}$	$1.04e-06^{(***)}$	$_{0.752}0.816_{0.884}$	$0.572^{(ns)}$	$0.829^{(ns)}$	$0.824^{(ns)}$
14	$0.0495^{(*)}$	$_{-0.00019}$-9.05e-05$_{-2.65e-07}$	$0.51^{(ns)}$	$0.00916^{(**)}$	$_{0.825}0.896_{0.973}$	$0.495^{(ns)}$	$0.634^{(ns)}$	$0.818^{(ns)}$
15	$0.399^{(ns)}$	$_{-0.000133}$-4.27e-05$_{5.48e-05}$	$0.589^{(ns)}$	$1.01e-06^{(***)}$	$_{0.755}0.818_{0.887}$	$0.508^{(ns)}$	$0.827^{(ns)}$	$0.806^{(ns)}$
16	$0.000202^{(***)}$	$_{-0.000318}$-0.000192$_{-6.55e-05}$	$0.546^{(ns)}$	$6.88e-07^{(***)}$	$_{0.755}0.818_{0.885}$	$0.549^{(ns)}$	$0.989^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
17	$0.225^{(ns)}$	$_{-5.51e-05}$3.93e-05$_{0.000172}$	$0.57^{(ns)}$	$3.09e-06^{(***)}$	$_{0.76}0.822_{0.892}$	$0.448^{(ns)}$	$0.704^{(ns)}$	$0.785^{(ns)}$
18	$0.574^{(ns)}$	$_{-0.000115}$5.17e-05$_{0.000188}$	$0.524^{(ns)}$	$0.113^{(ns)}$	$_{0.773}0.893_{1.03}$	$0.505^{(ns)}$	$0.729^{(ns)}$	$0.769^{(ns)}$
19	$0.395^{(ns)}$	$_{-0.000148}$-4.94e-05$_{6.09e-05}$	$0.478^{(ns)}$	$3.34e-07^{(***)}$	$_{0.686}0.761_{0.844}$	$0.473^{(ns)}$	$0.729^{(ns)}$	$0.769^{(ns)}$
20	$0.955^{(ns)}$	$_{-0.000102}$-4.99e-06$_{0.00011}$	$0.458^{(ns)}$	$0.000794^{(***)}$	$_{0.759}0.841_{0.93}$	$0.452^{(ns)}$	$0.987^{(ns)}$	$0.777^{(ns)}$
21	$0.878^{(ns)}$	$_{-9.7e-05}$1.11e-05$_{0.000106}$	$0.488^{(ns)}$	$0.0173^{(*)}$	$_{0.809}0.89_{0.98}$	$0.544^{(ns)}$	$0.193^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$
22	$0.047^{(*)}$	$_{-0.000202}$-9.17e-05$_{1.85e-07}$	$0.539^{(ns)}$	$0.000111^{(***)}$	$_{0.783}0.851_{0.923}$	$0.432^{(ns)}$	$0.902^{(ns)}$	$0.772^{(ns)}$
23	$0.453^{(ns)}$	$_{-7.28e-05}$4.03e-05$_{0.000139}$	$0.494^{(ns)}$	$0.000555^{(***)}$	$_{0.792}0.863_{0.938}$	$0.572^{(ns)}$	$0.997^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
24	$0.23^{(ns)}$	$_{-7.65e-05}$-3.35e-05$_{1.73e-05}$	$0.484^{(ns)}$	$1.22e-05^{(***)}$	$_{0.847}0.891_{0.938}$	$0.511^{(ns)}$	$0.849^{(ns)}$	$0.82^{(ns)}$
25	$0.123^{(ns)}$	$_{-1e-04}$-4.51e-05$_{-5.22e-06}$	$0.518^{(ns)}$	$6.89e-12^{(***)}$	$_{0.795}0.836_{0.88}$	$0.519^{(ns)}$	$0.556^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
26	$0.00155^{(**)}$	$_{-0.00012}$-8.45e-05$_{-2.37e-05}$	$0.455^{(ns)}$	$4.44e-16^{(***)}$	$_{0.797}0.833_{0.87}$	$0.448^{(ns)}$	$0.709^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
27	$0.000368^{(***)}$	$_{-0.000167}$-0.000102$_{-6.49e-05}$	$0.522^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.775}0.81_{0.846}$	$0.538^{(ns)}$	$0.802^{(ns)}$	$0.765^{(ns)}$

Tabelle E.21: Resultate der Signifikanztests für Q_4 Ni. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.0235^{(*)}$	$_{0.000512}0.0038_{0.00708}$	$0.502^{(ns)}$	$1.51\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.746}0.804_{0.866}$	$0.452^{(ns)}$	$0.371^{(ns)}$	$0.758^{(ns)}$
2	$0.00257^{(**)}$	$_{0.00172}0.00487_{0.00803}$	$0.59^{(ns)}$	$2.55\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.737}0.795_{0.858}$	$0.493^{(ns)}$	$0.731^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
3	$0.277^{(ns)}$	$_{-0.00145}0.00182_{0.00509}$	$0.506^{(ns)}$	$2.69\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.725}0.788_{0.856}$	$0.476^{(ns)}$	$0.844^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
4	$0.000411^{(***)}$	$_{0.00287}0.00642_{0.00999}$	$0.426^{(ns)}$	$1.54\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.666}0.726_{0.79}$	$0.541^{(ns)}$	$0.296^{(ns)}$	$0.785^{(ns)}$
5	$0.0191^{(*)}$	$_{0.000781}0.00485_{0.00889}$	$0.492^{(ns)}$	$6.9\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.763}0.834_{0.911}$	$0.477^{(ns)}$	$0.717^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
6	$0.778^{(ns)}$	$_{-0.00429}-0.000545_{0.00325}$	$0.492^{(ns)}$	$6.24\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.682}0.741_{0.805}$	$0.448^{(ns)}$	$0.888^{(ns)}$	$0.719^{(ns)}$
7	$0.0392^{(*)}$	$_{0.000195}0.00398_{0.00776}$	$0.476^{(ns)}$	$4.31\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.719}0.788_{0.865}$	$0.406^{(ns)}$	$0.786^{(ns)}$	$0.8^{(ns)}$
8	$0.0788^{(ns)}$	$_{-0.000183}0.00164_{0.00344}$	$0.558^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.71}0.742_{0.776}$	$0.483^{(ns)}$	$0.686^{(ns)}$	$0.771^{(ns)}$
9	$0.00197^{(**)}$	$_{0.00103}0.00285_{0.00466}$	$0.523^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.722}0.755_{0.789}$	$0.412^{(ns)}$	$0.6^{(ns)}$	$0.785^{(ns)}$
10	$0.0372^{(*)}$	$_{0.000131}0.00219_{0.00427}$	$0.501^{(ns)}$	$1.03\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.793}0.832_{0.873}$	$0.431^{(ns)}$	$0.987^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
11	$0.00297^{(**)}$	$_{0.001}0.00294_{0.00486}$	$0.478^{(ns)}$	$1.03\text{e-}13^{(***)}$	$_{0.793}0.832_{0.873}$	$0.431^{(ns)}$	$0.91^{(ns)}$	$0.771^{(ns)}$
12	$0.00264^{(**)}$	$_{0.00163}0.00468_{0.00776}$	$0.474^{(ns)}$	$2.51\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.762}0.824_{0.893}$	$0.499^{(ns)}$	$0.953^{(ns)}$	$0.769^{(ns)}$
13	$0.000274^{(***)}$	$_{0.00267}0.00578_{0.00891}$	$0.48^{(ns)}$	$2.5\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.707}0.762_{0.822}$	$0.478^{(ns)}$	$0.913^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
14	$0.589^{(ns)}$	$_{-0.0023}0.000874_{0.00401}$	$0.494^{(ns)}$	$0.000413^{(***)}$	$_{0.798}0.865_{0.937}$	$0.442^{(ns)}$	$0.891^{(ns)}$	$0.753^{(ns)}$
15	$0.0157^{(*)}$	$_{0.000721}0.00379_{0.00687}$	$0.525^{(ns)}$	$3.89\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.728}0.788_{0.852}$	$0.506^{(ns)}$	$0.723^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
16	$0.152^{(ns)}$	$_{-0.000954}0.00255_{0.00607}$	$0.506^{(ns)}$	$7.55\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.762}0.827_{0.898}$	$0.525^{(ns)}$	$0.925^{(ns)}$	$0.813^{(ns)}$
17	$0.0224^{(*)}$	$_{0.000533}0.00384_{0.00712}$	$0.463^{(ns)}$	$1.88\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.673}0.733_{0.799}$	$0.585^{(ns)}$	$0.747^{(ns)}$	$0.779^{(ns)}$
18	$0.000658^{(***)}$	$_{0.004}0.00933_{0.0147}$	$0.441^{(ns)}$	$9.53\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.61}0.709_{0.823}$	$0.475^{(ns)}$	$0.853^{(ns)}$	$0.727^{(ns)}$
19	$0.000141^{(***)}$	$_{0.00417}0.00858_{0.013}$	$0.43^{(ns)}$	$2.1\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.602}0.678_{0.763}$	$0.554^{(ns)}$	$0.853^{(ns)}$	$0.727^{(ns)}$
20	$0.0555^{(ns)}$	$_{-8.65\text{e-}05}0.00295_{0.00595}$	$0.501^{(ns)}$	$1.78\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.762}0.83_{0.904}$	$0.522^{(ns)}$	$0.983^{(ns)}$	$0.746^{(ns)}$
21	$0.00227^{(**)}$	$_{0.0016}0.00448_{0.00735}$	$0.58^{(ns)}$	$1.55\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.734}0.798_{0.867}$	$0.475^{(ns)}$	$0.608^{(ns)}$	$0.774^{(ns)}$
22	$0.0376^{(*)}$	$_{0.000184}0.00322_{0.00626}$	$0.477^{(ns)}$	$8.1\text{e-}09^{(***)}$	$_{0.735}0.794_{0.858}$	$0.469^{(ns)}$	$0.549^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
23	$0.011^{(*)}$	$_{0.000844}0.00374_{0.00662}$	$0.45^{(ns)}$	$1.34\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.735}0.795_{0.86}$	$0.53^{(ns)}$	$0.7^{(ns)}$	$0.799^{(ns)}$
24	$0.000299^{(***)}$	$_{0.00144}0.0031_{0.00479}$	$0.439^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.776}0.813_{0.851}$	$0.52^{(ns)}$	$0.346^{(ns)}$	$0.794^{(ns)}$
25	$1.32\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.00373}0.00535_{0.00697}$	$0.501^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.746}0.781_{0.818}$	$0.494^{(ns)}$	$0.351^{(ns)}$	$0.776^{(ns)}$
26	$0.000509^{(***)}$	$_{0.00122}0.00279_{0.00437}$	$0.484^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.753}0.786_{0.819}$	$0.556^{(ns)}$	$0.607^{(ns)}$	$0.819^{(ns)}$
27	$2.77\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.00216}0.00369_{0.00523}$	$0.517^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.78}0.815_{0.851}$	$0.475^{(ns)}$	$0.968^{(ns)}$	$0.721^{(ns)}$

Tabelle E.22: Resultate der Signifikanztests für Q_4 Zr. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	2.77e-11$^{(***)}$	$_{0.0022}0.0031_{0.00402}$	0.493$^{(ns)}$	1.92e-13$^{(***)}$	$_{0.675}0.733_{0.796}$	0.458$^{(ns)}$	0.58$^{(ns)}$	0.808$^{(ns)}$
2	7.87e-07$^{(***)}$	$_{0.00148}0.00246_{0.00342}$	0.482$^{(ns)}$	5.45e-10$^{(***)}$	$_{0.728}0.785_{0.847}$	0.498$^{(ns)}$	0.613$^{(ns)}$	0.761$^{(ns)}$
3	2.25e-08$^{(***)}$	$_{0.00173}0.00269_{0.00361}$	0.457$^{(ns)}$	0.000107$^{(***)}$	$_{0.798}0.86_{0.928}$	0.512$^{(ns)}$	0.85$^{(ns)}$	0.793$^{(ns)}$
4	0.000287$^{(***)}$	$_{0.000831}0.00182_{0.0028}$	0.52$^{(ns)}$	1.56e-08$^{(***)}$	$_{0.739}0.798_{0.862}$	0.536$^{(ns)}$	0.239$^{(ns)}$	0.823$^{(ns)}$
5	9.55e-07$^{(***)}$	$_{0.00173}0.00288_{0.00405}$	0.505$^{(ns)}$	6.93e-06$^{(***)}$	$_{0.774}0.836_{0.904}$	0.477$^{(ns)}$	0.82$^{(ns)}$	0.799$^{(ns)}$
6	1.51e-13$^{(***)}$	$_{0.00267}0.00362_{0.00457}$	0.522$^{(ns)}$	1.33e-05$^{(***)}$	$_{0.767}0.833_{0.904}$	0.455$^{(ns)}$	0.782$^{(ns)}$	0.758$^{(ns)}$
7	1.15e-08$^{(***)}$	$_{0.00189}0.00288_{0.00386}$	0.419$^{(ns)}$	3.46e-10$^{(***)}$	$_{0.724}0.781_{0.843}$	0.46$^{(ns)}$	0.849$^{(ns)}$	0.785$^{(ns)}$
8	0$^{(***)}$	$_{0.0026}0.00311_{0.00361}$	0.51$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.797}0.831_{0.868}$	0.511$^{(ns)}$	0.502$^{(ns)}$	0.727$^{(ns)}$
9	5.42e-13$^{(***)}$	$_{0.00143}0.00197_{0.00249}$	0.528$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.74}0.772_{0.805}$	0.46$^{(ns)}$	0.282$^{(ns)}$	0.717$^{(ns)}$
10	0$^{(***)}$	$_{0.00248}0.00302_{0.00356}$	0.487$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.786}0.82_{0.856}$	0.451$^{(ns)}$	0.653$^{(ns)}$	0.778$^{(ns)}$
11	0$^{(***)}$	$_{0.00188}0.00244_{0.00296}$	0.478$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.786}0.82_{0.856}$	0.451$^{(ns)}$	0.48$^{(ns)}$	0.804$^{(ns)}$
12	2.59e-07$^{(***)}$	$_{0.00153}0.00248_{0.00342}$	0.543$^{(ns)}$	2.61e-05$^{(***)}$	$_{0.76}0.83_{0.904}$	0.535$^{(ns)}$	0.948$^{(ns)}$	0.735$^{(ns)}$
13	5.13e-08$^{(***)}$	$_{0.0017}0.00264_{0.0036}$	0.469$^{(ns)}$	9.85e-13$^{(***)}$	$_{0.694}0.751_{0.812}$	0.579$^{(ns)}$	0.944$^{(ns)}$	0.793$^{(ns)}$
14	1.05e-12$^{(***)}$	$_{0.00236}0.00323_{0.00411}$	0.493$^{(ns)}$	1.44e-05$^{(***)}$	$_{0.776}0.839_{0.908}$	0.497$^{(ns)}$	0.535$^{(ns)}$	0.744$^{(ns)}$
15	4.82e-06$^{(***)}$	$_{0.00122}0.00218_{0.00311}$	0.475$^{(ns)}$	2.94e-06$^{(***)}$	$_{0.766}0.829_{0.897}$	0.497$^{(ns)}$	0.846$^{(ns)}$	0.8$^{(ns)}$
16	1.97e-07$^{(***)}$	$_{0.00154}0.00248_{0.00339}$	0.511$^{(ns)}$	5.67e-13$^{(***)}$	$_{0.692}0.749_{0.81}$	0.561$^{(ns)}$	0.849$^{(ns)}$	0.776$^{(ns)}$
17	2.2e-14$^{(***)}$	$_{0.0026}0.00349_{0.0044}$	0.416$^{(ns)}$	2.94e-07$^{(***)}$	$_{0.751}0.813_{0.88}$	0.489$^{(ns)}$	0.545$^{(ns)}$	0.781$^{(ns)}$
18	3.13e-06$^{(***)}$	$_{0.00205}0.00345_{0.00486}$	0.556$^{(ns)}$	7.05e-06$^{(***)}$	$_{0.65}0.739_{0.842}$	0.484$^{(ns)}$	0.928$^{(ns)}$	0.808$^{(ns)}$
19	9.31e-10$^{(***)}$	$_{0.00228}0.00332_{0.00435}$	0.506$^{(ns)}$	3.53e-06$^{(***)}$	$_{0.709}0.785_{0.87}$	0.492$^{(ns)}$	0.928$^{(ns)}$	0.808$^{(ns)}$
20	4.4e-06$^{(***)}$	$_{0.00125}0.00218_{0.00313}$	0.49$^{(ns)}$	0.158$^{(ns)}$	$_{0.843}0.929_{1.03}$	0.502$^{(ns)}$	0.711$^{(ns)}$	0.747$^{(ns)}$
21	7.53e-08$^{(***)}$	$_{0.00171}0.0027_{0.00364}$	0.445$^{(ns)}$	5.46e-10$^{(***)}$	$_{0.683}0.748_{0.819}$	0.442$^{(ns)}$	0.337$^{(ns)}$	0.808$^{(ns)}$
22	3.74e-08$^{(***)}$	$_{0.00149}0.00233_{0.00316}$	0.562$^{(ns)}$	0.0011$^{(**)}$	$_{0.809}0.876_{0.948}$	0.42$^{(ns)}$	0.961$^{(ns)}$	0.76$^{(ns)}$
23	5.83e-10$^{(***)}$	$_{0.00193}0.00284_{0.0037}$	0.548$^{(ns)}$	4.12e-07$^{(***)}$	$_{0.739}0.804_{0.874}$	0.556$^{(ns)}$	0.963$^{(ns)}$	0.831$^{(ns)}$
24	1.93e-14$^{(***)}$	$_{0.00149}0.00199_{0.00251}$	0.505$^{(ns)}$	3e-10$^{(***)}$	$_{0.807}0.849_{0.893}$	0.53$^{(ns)}$	0.49$^{(ns)}$	0.775$^{(ns)}$
25	3.49e-13$^{(***)}$	$_{0.00142}0.00195_{0.00245}$	0.505$^{(ns)}$	2.33e-14$^{(***)}$	$_{0.783}0.823_{0.865}$	0.414$^{(ns)}$	0.142$^{(ns)}$	0.754$^{(ns)}$
26	0$^{(***)}$	$_{0.00217}0.00261_{0.00305}$	0.536$^{(ns)}$	2.22e-16$^{(***)}$	$_{0.796}0.832_{0.869}$	0.508$^{(ns)}$	0.643$^{(ns)}$	0.808$^{(ns)}$
27	0$^{(***)}$	$_{0.00211}0.0026_{0.00304}$	0.499$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.725}0.758_{0.793}$	0.516$^{(ns)}$	0.958$^{(ns)}$	0.734$^{(ns)}$

Tabelle E.23: Resultate der Signifikanztests für Q_5 Ni. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.852^{(ns)}$	$_{-0.00448}$-$0.000413_{0.0037}$	$0.467^{(ns)}$	5.72e-09$^{(***)}$	$_{0.732}0.792_{0.856}$	$0.512^{(ns)}$	$0.978^{(ns)}$	$0.803^{(ns)}$
2	$0.0714^{(ns)}$	$_{-0.00786}$-$0.00376_{0.000349}$	$0.591^{(ns)}$	3.95e-14$^{(***)}$	$_{0.693}0.748_{0.805}$	$0.467^{(ns)}$	$0.721^{(ns)}$	$0.808^{(ns)}$
3	$0.456^{(ns)}$	$_{-0.00585}$-$0.00157_{0.00265}$	$0.507^{(ns)}$	2.42e-11$^{(***)}$	$_{0.692}0.752_{0.817}$	$0.546^{(ns)}$	$0.754^{(ns)}$	$0.832^{(ns)}$
4	$0.169^{(ns)}$	$_{-0.0073}$-$0.00303_{0.00127}$	$0.467^{(ns)}$	2.59e-10$^{(***)}$	$_{0.704}0.765_{0.83}$	$0.475^{(ns)}$	$0.459^{(ns)}$	$0.769^{(ns)}$
5	$0.108^{(ns)}$	$_{-0.00883}$-$0.00399_{0.000924}$	$0.534^{(ns)}$	3.31e-10$^{(***)}$	$_{0.692}0.755_{0.823}$	$0.577^{(ns)}$	$0.995^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
6	$0.015^{(*)}$	$_{-0.0108}$-$0.006_{-0.00116}$	$0.51^{(ns)}$	2.27e-09$^{(***)}$	$_{0.692}0.757_{0.828}$	$0.5^{(ns)}$	$0.899^{(ns)}$	$0.765^{(ns)}$
7	$0.0533^{(ns)}$	$_{-0.00932}$-$0.0046_{6.32e-05}$	$0.486^{(ns)}$	1.05e-09$^{(***)}$	$_{0.687}0.752_{0.823}$	$0.459^{(ns)}$	$0.967^{(ns)}$	$0.806^{(ns)}$
8	$0.000123^{(***)}$	$_{-0.00676}$-$0.00447_{-0.00219}$	$0.545^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.711}0.744_{0.777}$	$0.452^{(ns)}$	$0.572^{(ns)}$	$0.798^{(ns)}$
9	5.29e-05$^{(***)}$	$_{-0.00708}$-$0.00475_{-0.00246}$	$0.53^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.699}0.731_{0.764}$	$0.47^{(ns)}$	$0.344^{(ns)}$	$0.781^{(ns)}$
10	$0.00203^{(**)}$	$_{-0.00654}$-$0.004_{-0.00148}$	$0.563^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.715}0.751_{0.787}$	$0.481^{(ns)}$	$0.704^{(ns)}$	$0.783^{(ns)}$
11	$0.000355^{(***)}$	$_{-0.00692}$-$0.00445_{-0.00202}$	$0.454^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.715}0.751_{0.787}$	$0.481^{(ns)}$	$0.998^{(ns)}$	$0.757^{(ns)}$
12	$0.335^{(ns)}$	$_{-0.00581}$-$0.00193_{0.00194}$	$0.492^{(ns)}$	2.32e-09$^{(***)}$	$_{0.721}0.781_{0.847}$	$0.486^{(ns)}$	$0.913^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$
13	$0.35^{(ns)}$	$_{-0.00199}0.00177_{0.00562}$	$0.532^{(ns)}$	1.51e-07$^{(***)}$	$_{0.756}0.816_{0.88}$	$0.503^{(ns)}$	$0.847^{(ns)}$	$0.768^{(ns)}$
14	$0.129^{(ns)}$	$_{-0.00716}$-$0.00311_{0.000897}$	$0.499^{(ns)}$	1.03e-12$^{(***)}$	$_{0.697}0.753_{0.813}$	$0.485^{(ns)}$	$0.68^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
15	$0.194^{(ns)}$	$_{-0.00656}$-$0.00261_{0.00133}$	$0.51^{(ns)}$	1.7e-08$^{(***)}$	$_{0.734}0.794_{0.86}$	$0.474^{(ns)}$	$0.859^{(ns)}$	$0.775^{(ns)}$
16	$0.164^{(ns)}$	$_{-0.00718}$-$0.00298_{0.00122}$	$0.519^{(ns)}$	1.8e-05$^{(***)}$	$_{0.769}0.834_{0.905}$	$0.489^{(ns)}$	$0.606^{(ns)}$	$0.815^{(ns)}$
17	$0.12^{(ns)}$	$_{-0.00742}$-$0.00328_{0.000861}$	$0.458^{(ns)}$	7.37e-10$^{(***)}$	$_{0.703}0.765_{0.832}$	$0.509^{(ns)}$	$0.588^{(ns)}$	$0.756^{(ns)}$
18	$0.0506^{(ns)}$	$_{-2.51e-05}0.00661_{0.0132}$	$0.531^{(ns)}$	8.19e-07$^{(***)}$	$_{0.596}0.691_{0.799}$	$0.487^{(ns)}$	$0.661^{(ns)}$	$0.744^{(ns)}$
19	$0.8^{(ns)}$	$_{-0.00463}0.000678_{0.00603}$	$0.515^{(ns)}$	1.78e-08$^{(***)}$	$_{0.625}0.704_{0.796}$	$0.455^{(ns)}$	$0.661^{(ns)}$	$0.744^{(ns)}$
20	$0.0267^{(*)}$	$_{-0.00778}$-$0.00411_{-0.000472}$	$0.449^{(ns)}$	3.23e-05$^{(***)}$	$_{0.759}0.829_{0.905}$	$0.467^{(ns)}$	$0.903^{(ns)}$	$0.818^{(ns)}$
21	$0.153^{(ns)}$	$_{-0.0063}$-$0.00265_{0.000985}$	$0.463^{(ns)}$	6.71e-12$^{(***)}$	$_{0.686}0.746_{0.81}$	$0.488^{(ns)}$	$0.963^{(ns)}$	$0.795^{(ns)}$
22	$0.0483^{(*)}$	$_{-0.00709}$-$0.00355_{-3.88e-05}$	$0.48^{(ns)}$	4.1e-11$^{(***)}$	$_{0.712}0.769_{0.831}$	$0.563^{(ns)}$	$0.843^{(ns)}$	$0.793^{(ns)}$
23	$0.105^{(ns)}$	$_{-0.00662}$-$0.00301_{0.000639}$	$0.46^{(ns)}$	7.87e-10$^{(***)}$	$_{0.717}0.777_{0.842}$	$0.457^{(ns)}$	$0.761^{(ns)}$	$0.744^{(ns)}$
24	$0.00242^{(**)}$	$_{-0.0053}$-$0.0032_{-0.00113}$	$0.485^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.751}0.787_{0.825}$	$0.451^{(ns)}$	$0.091^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$
25	$0.0152^{(*)}$	$_{-0.0047}$-$0.0026_{-0.000506}$	$0.489^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.724}0.758_{0.794}$	$0.517^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
26	1.58e-06$^{(***)}$	$_{-0.00681}$-$0.00484_{-0.00287}$	$0.445^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.734}0.766_{0.8}$	$0.544^{(ns)}$	$0.443^{(ns)}$	$0.843^{(ns)}$
27	2.57e-05$^{(***)}$	$_{-0.00604}$-$0.0041_{-0.0022}$	$0.553^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.731}0.763_{0.796}$	$0.485^{(ns)}$	$0.977^{(ns)}$	$0.747^{(ns)}$

Tabelle E.24: Resultate der Signifikanztests für Q_5 Zr. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	7.47e-12$^{(***)}$	$_{0.00469}0.00659_{0.00844}$	0.542$^{(ns)}$	1.12e-07$^{(***)}$	$_{0.748}0.809_{0.874}$	0.47$^{(ns)}$	0.997$^{(ns)}$	0.803$^{(ns)}$
2	4.98e-07$^{(***)}$	$_{0.00281}0.00459_{0.00635}$	0.483$^{(ns)}$	0.00159$^{(**)}$	$_{0.809}0.878_{0.952}$	0.506$^{(ns)}$	0.674$^{(ns)}$	0.803$^{(ns)}$
3	4.29e-09$^{(***)}$	$_{0.00369}0.00552_{0.00732}$	0.502$^{(ns)}$	0.000217$^{(***)}$	$_{0.792}0.858_{0.931}$	0.53$^{(ns)}$	0.277$^{(ns)}$	0.793$^{(ns)}$
4	2.93e-07$^{(***)}$	$_{0.00307}0.00495_{0.00681}$	0.517$^{(ns)}$	1.5e-07$^{(***)}$	$_{0.747}0.808_{0.875}$	0.47$^{(ns)}$	0.752$^{(ns)}$	0.772$^{(ns)}$
5	4.16e-08$^{(***)}$	$_{0.00375}0.00582_{0.00784}$	0.439$^{(ns)}$	1.4e-07$^{(***)}$	$_{0.744}0.806_{0.872}$	0.529$^{(ns)}$	0.373$^{(ns)}$	0.786$^{(ns)}$
6	3.16e-08$^{(***)}$	$_{0.00345}0.00533_{0.00723}$	0.451$^{(ns)}$	1.32e-05$^{(***)}$	$_{0.771}0.835_{0.905}$	0.457$^{(ns)}$	0.751$^{(ns)}$	0.803$^{(ns)}$
7	1.51e-07$^{(***)}$	$_{0.00311}0.00495_{0.00677}$	0.526$^{(ns)}$	8.1e-06$^{(***)}$	$_{0.776}0.838_{0.905}$	0.513$^{(ns)}$	0.954$^{(ns)}$	0.795$^{(ns)}$
8	0$^{(***)}$	$_{0.00423}0.00521_{0.00617}$	0.511$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.774}0.808_{0.843}$	0.481$^{(ns)}$	0.515$^{(ns)}$	0.795$^{(ns)}$
9	0$^{(***)}$	$_{0.00509}0.00607_{0.00705}$	0.593$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.782}0.816_{0.85}$	0.512$^{(ns)}$	0.813$^{(ns)}$	0.743$^{(ns)}$
10	0$^{(***)}$	$_{0.0037}0.00475_{0.00578}$	0.447$^{(ns)}$	1.81e-08$^{(***)}$	$_{0.849}0.885_{0.924}$	0.458$^{(ns)}$	0.925$^{(ns)}$	0.776$^{(ns)}$
11	0$^{(***)}$	$_{0.0038}0.0048_{0.00579}$	0.523$^{(ns)}$	1.81e-08$^{(***)}$	$_{0.849}0.885_{0.924}$	0.458$^{(ns)}$	0.841$^{(ns)}$	0.812$^{(ns)}$
12	1.03e-06$^{(***)}$	$_{0.00282}0.0047_{0.00657}$	0.495$^{(ns)}$	8.09e-05$^{(***)}$	$_{0.768}0.839_{0.915}$	0.538$^{(ns)}$	0.956$^{(ns)}$	0.77$^{(ns)}$
13	8.06e-12$^{(***)}$	$_{0.00445}0.00623_{0.00796}$	0.533$^{(ns)}$	4.13e-10$^{(***)}$	$_{0.71}0.77_{0.835}$	0.532$^{(ns)}$	0.658$^{(ns)}$	0.743$^{(ns)}$
14	1.68e-06$^{(***)}$	$_{0.00269}0.00455_{0.00638}$	0.482$^{(ns)}$	1.38e-10$^{(***)}$	$_{0.717}0.775_{0.836}$	0.488$^{(ns)}$	0.527$^{(ns)}$	0.748$^{(ns)}$
15	1.33e-08$^{(***)}$	$_{0.00347}0.00528_{0.00708}$	0.541$^{(ns)}$	2.26e-07$^{(***)}$	$_{0.742}0.806_{0.874}$	0.562$^{(ns)}$	0.97$^{(ns)}$	0.777$^{(ns)}$
16	0.00288$^{(**)}$	$_{0.000975}0.00284_{0.00469}$	0.509$^{(ns)}$	1.52e-07$^{(***)}$	$_{0.753}0.813_{0.878}$	0.493$^{(ns)}$	0.945$^{(ns)}$	0.812$^{(ns)}$
17	7.15e-09$^{(***)}$	$_{0.00337}0.00508_{0.00678}$	0.458$^{(ns)}$	3.79e-09$^{(***)}$	$_{0.732}0.791_{0.855}$	0.513$^{(ns)}$	0.961$^{(ns)}$	0.735$^{(ns)}$
18	0.00374$^{(**)}$	$_{0.00135}0.00416_{0.00699}$	0.541$^{(ns)}$	0.000157$^{(***)}$	$_{0.677}0.773_{0.882}$	0.506$^{(ns)}$	0.825$^{(ns)}$	0.809$^{(ns)}$
19	4.95e-09$^{(***)}$	$_{0.00415}0.00614_{0.00818}$	0.556$^{(ns)}$	6.2e-06$^{(***)}$	$_{0.704}0.783_{0.87}$	0.439$^{(ns)}$	0.825$^{(ns)}$	0.809$^{(ns)}$
20	0.00464$^{(**)}$	$_{0.000883}0.00288_{0.00484}$	0.465$^{(ns)}$	4.32e-05$^{(***)}$	$_{0.736}0.812_{0.896}$	0.452$^{(ns)}$	0.89$^{(ns)}$	0.826$^{(ns)}$
21	0.018$^{(*)}$	$_{0.000373}0.00214_{0.00397}$	0.549$^{(ns)}$	7.25e-05$^{(***)}$	$_{0.754}0.828_{0.91}$	0.398$^{(ns)}$	0.98$^{(ns)}$	0.733$^{(ns)}$
22	1.02e-12$^{(***)}$	$_{0.00456}0.00623_{0.00795}$	0.487$^{(ns)}$	1.9e-05$^{(***)}$	$_{0.773}0.838_{0.908}$	0.475$^{(ns)}$	0.991$^{(ns)}$	0.748$^{(ns)}$
23	1.97e-10$^{(***)}$	$_{0.00386}0.00554_{0.00727}$	0.524$^{(ns)}$	0.00682$^{(**)}$	$_{0.82}0.891_{0.969}$	0.517$^{(ns)}$	0.713$^{(ns)}$	0.768$^{(ns)}$
24	0$^{(***)}$	$_{0.00367}0.00468_{0.00571}$	0.58$^{(ns)}$	1.47e-11$^{(***)}$	$_{0.796}0.838_{0.882}$	0.524$^{(ns)}$	0.276$^{(ns)}$	0.787$^{(ns)}$
25	0$^{(***)}$	$_{0.00362}0.00464_{0.00565}$	0.493$^{(ns)}$	6.18e-12$^{(***)}$	$_{0.801}0.841_{0.883}$	0.438$^{(ns)}$	0.556$^{(ns)}$	0.758$^{(ns)}$
26	0$^{(***)}$	$_{0.00458}0.00552_{0.00646}$	0.599$^{(ns)}$	1.05e-12$^{(***)}$	$_{0.817}0.853_{0.891}$	0.501$^{(ns)}$	0.511$^{(ns)}$	0.794$^{(ns)}$
27	0$^{(***)}$	$_{0.00409}0.00499_{0.00588}$	0.492$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.757}0.792_{0.828}$	0.553$^{(ns)}$	0.0718$^{(ns)}$	0.759$^{(ns)}$

Tabelle E.25: Resultate der Signifikanztests für Q_6 Ni. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.505^{(ns)}$	$_{-0.00172}0.000908_{0.00357}$	$0.477^{(ns)}$	$8.83e\text{-}10^{(***)}$	$_{0.717}0.777_{0.842}$	$0.521^{(ns)}$	$0.926^{(ns)}$	$0.695^{(ns)}$
2	$0.119^{(ns)}$	$_{-0.00512}-0.00226_{0.000608}$	$0.466^{(ns)}$	$9.22e\text{-}08^{(***)}$	$_{0.752}0.811_{0.876}$	$0.465^{(ns)}$	$0.94^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$
3	$0.618^{(ns)}$	$_{-0.00221}0.000734_{0.00368}$	$0.452^{(ns)}$	$6.27e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.751}0.814_{0.881}$	$0.531^{(ns)}$	$0.808^{(ns)}$	$0.825^{(ns)}$
4	$0.848^{(ns)}$	$_{-0.00342}-0.000308_{0.00278}$	$0.494^{(ns)}$	$4.63e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.695}0.755_{0.821}$	$0.442^{(ns)}$	$0.679^{(ns)}$	$0.804^{(ns)}$
5	$0.271^{(ns)}$	$_{-0.00531}-0.00193_{0.00151}$	$0.533^{(ns)}$	$3.53e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.726}0.794_{0.868}$	$0.485^{(ns)}$	$0.879^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
6	$0.634^{(ns)}$	$_{-0.00243}0.000775_{0.00406}$	$0.492^{(ns)}$	$2.82e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.721}0.788_{0.862}$	$0.46^{(ns)}$	$0.48^{(ns)}$	$0.755^{(ns)}$
7	$0.082^{(ns)}$	$_{-0.00629}-0.00298_{0.000393}$	$0.49^{(ns)}$	$2.33e\text{-}10^{(***)}$	$_{0.68}0.745_{0.815}$	$0.461^{(ns)}$	$0.915^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
8	$0.943^{(ns)}$	$_{-0.00164}-5.5e\text{-}05_{0.00149}$	$0.508^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.74}0.774_{0.81}$	$0.433^{(ns)}$	$0.842^{(ns)}$	$0.737^{(ns)}$
9	$0.294^{(ns)}$	$_{-0.0026}-0.000905_{0.000783}$	$0.524^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.752}0.786_{0.821}$	$0.497^{(ns)}$	$0.925^{(ns)}$	$0.825^{(ns)}$
10	$0.714^{(ns)}$	$_{-0.00145}0.000334_{0.00212}$	$0.489^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.745}0.782_{0.82}$	$0.576^{(ns)}$	$0.98^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
11	$0.00815^{(**)}$	$_{-0.0041}-0.00237_{-0.000606}$	$0.508^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.745}0.782_{0.82}$	$0.576^{(ns)}$	$0.945^{(ns)}$	$0.838^{(ns)}$
12	$0.619^{(ns)}$	$_{-0.00205}0.000686_{0.00342}$	$0.544^{(ns)}$	$1.21e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.73}0.788_{0.85}$	$0.53^{(ns)}$	$0.995^{(ns)}$	$0.797^{(ns)}$
13	$0.445^{(ns)}$	$_{-0.00162}0.00105_{0.00374}$	$0.467^{(ns)}$	$3.76e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.737}0.795_{0.857}$	$0.469^{(ns)}$	$0.77^{(ns)}$	$0.786^{(ns)}$
14	$0.646^{(ns)}$	$_{-0.00208}0.000642_{0.00336}$	$0.505^{(ns)}$	$1.84e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.759}0.822_{0.89}$	$0.47^{(ns)}$	$0.209^{(ns)}$	$0.761^{(ns)}$
15	$0.601^{(ns)}$	$_{-0.00203}0.000774_{0.00354}$	$0.55^{(ns)}$	$6.56e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.763}0.827_{0.898}$	$0.525^{(ns)}$	$0.895^{(ns)}$	$0.762^{(ns)}$
16	$0.96^{(ns)}$	$_{-0.00297}-7.16e\text{-}05_{0.00288}$	$0.531^{(ns)}$	$9.61e\text{-}12^{(***)}$	$_{0.685}0.746_{0.811}$	$0.418^{(ns)}$	$0.745^{(ns)}$	$0.717^{(ns)}$
17	$0.805^{(ns)}$	$_{-0.00256}0.000378_{0.00327}$	$0.541^{(ns)}$	$1.97e\text{-}11^{(***)}$	$_{0.694}0.753_{0.817}$	$0.501^{(ns)}$	$0.767^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
18	$0.987^{(ns)}$	$_{-0.00451}-5.57e\text{-}05_{0.00434}$	$0.426^{(ns)}$	$0.0253^{(*)}$	$_{0.723}0.84_{0.977}$	$0.552^{(ns)}$	$0.971^{(ns)}$	$0.765^{(ns)}$
19	$0.295^{(ns)}$	$_{-0.00172}0.00192_{0.00555}$	$0.558^{(ns)}$	$5.82e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.674}0.758_{0.853}$	$0.464^{(ns)}$	$0.971^{(ns)}$	$0.765^{(ns)}$
20	$0.227^{(ns)}$	$_{-0.00414}-0.0016_{0.000974}$	$0.444^{(ns)}$	$2.54e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.728}0.794_{0.867}$	$0.501^{(ns)}$	$0.997^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
21	$0.0106^{(*)}$	$_{-0.00591}-0.00333_{-0.000782}$	$0.445^{(ns)}$	$1.71e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.733}0.797_{0.867}$	$0.57^{(ns)}$	$0.687^{(ns)}$	$0.764^{(ns)}$
22	$0.12^{(ns)}$	$_{-0.00435}-0.00191_{0.000508}$	$0.493^{(ns)}$	$2.33e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.765}0.827_{0.895}$	$0.506^{(ns)}$	$0.398^{(ns)}$	$0.802^{(ns)}$
23	$0.715^{(ns)}$	$_{-0.00304}-0.00046_{0.00208}$	$0.44^{(ns)}$	$4.14e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.759}0.824_{0.895}$	$0.491^{(ns)}$	$0.744^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$
24	$0.0792^{(ns)}$	$_{-0.00272}-0.00129_{0.000175}$	$0.501^{(ns)}$	$4.44e\text{-}16^{(***)}$	$_{0.787}0.825_{0.864}$	$0.488^{(ns)}$	$0.909^{(ns)}$	$0.752^{(ns)}$
25	$0.443^{(ns)}$	$_{-0.00209}-0.000591_{0.00091}$	$0.566^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.722}0.756_{0.791}$	$0.55^{(ns)}$	$0.478^{(ns)}$	$0.754^{(ns)}$
26	$0.0142^{(*)}$	$_{-0.0031}-0.00172_{-0.000349}$	$0.429^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.75}0.783_{0.818}$	$0.535^{(ns)}$	$0.942^{(ns)}$	$0.771^{(ns)}$
27	$0.401^{(ns)}$	$_{-0.00197}-0.000602_{0.000786}$	$0.562^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.725}0.756_{0.788}$	$0.408^{(ns)}$	$0.704^{(ns)}$	$0.751^{(ns)}$

Tabelle E.26: Resultate der Signifikanztests für Q_6 Zr. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.00124^{(**)}$	$_{0.00178}0.00455_{0.00729}$	$0.512^{(ns)}$	$6.77\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.696}0.754_{0.817}$	$0.5^{(ns)}$	$0.948^{(ns)}$	$0.804^{(ns)}$
2	$0.000882^{(***)}$	$_{0.00189}0.00459_{0.00724}$	$0.535^{(ns)}$	$4.33\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.743}0.806_{0.876}$	$0.497^{(ns)}$	$0.504^{(ns)}$	$0.812^{(ns)}$
3	$0.112^{(ns)}$	$_{-0.00052}0.00216_{0.00482}$	$0.522^{(ns)}$	$7.76\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.757}0.819_{0.885}$	$0.454^{(ns)}$	$0.898^{(ns)}$	$0.773^{(ns)}$
4	$1.3\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.00456}0.00728_{0.00999}$	$0.498^{(ns)}$	$5.55\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.787}0.85_{0.92}$	$0.494^{(ns)}$	$0.991^{(ns)}$	$0.751^{(ns)}$
5	$0.0913^{(ns)}$	$_{-0.000382}0.00244_{0.00527}$	$0.494^{(ns)}$	$3.15\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.78}0.845_{0.914}$	$0.502^{(ns)}$	$0.958^{(ns)}$	$0.805^{(ns)}$
6	$0.326^{(ns)}$	$_{-0.0014}0.00139_{0.0042}$	$0.488^{(ns)}$	$4.11\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.772}0.834_{0.9}$	$0.478^{(ns)}$	$0.999^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$
7	$1.64\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.00457}0.00726_{0.00995}$	$0.445^{(ns)}$	$2.03\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.779}0.842_{0.911}$	$0.509^{(ns)}$	$0.578^{(ns)}$	$0.781^{(ns)}$
8	$1.41\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.00323}0.00467_{0.0061}$	$0.503^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.771}0.805_{0.84}$	$0.457^{(ns)}$	$0.435^{(ns)}$	$0.786^{(ns)}$
9	$6.61\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.00335}0.00479_{0.00622}$	$0.506^{(ns)}$	$3.77\text{e-}15^{(***)}$	$_{0.805}0.84_{0.877}$	$0.472^{(ns)}$	$0.176^{(ns)}$	$0.792^{(ns)}$
10	$2.18\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.00213}0.00364_{0.00515}$	$0.54^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.791}0.827_{0.863}$	$0.496^{(ns)}$	$0.635^{(ns)}$	$0.777^{(ns)}$
11	$2.36\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.0021}0.0036_{0.00507}$	$0.44^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.791}0.827_{0.863}$	$0.496^{(ns)}$	$0.731^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
12	$0.0017^{(**)}$	$_{0.00163}0.00436_{0.00706}$	$0.565^{(ns)}$	$8.03\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.739}0.804_{0.876}$	$0.505^{(ns)}$	$0.903^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$
13	$3.79\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.00468}0.00723_{0.00979}$	$0.492^{(ns)}$	$3.91\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.716}0.775_{0.84}$	$0.43^{(ns)}$	$0.905^{(ns)}$	$0.746^{(ns)}$
14	$0.0296^{(*)}$	$_{0.000292}0.00295_{0.00557}$	$0.485^{(ns)}$	$2.46\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.73}0.792_{0.858}$	$0.487^{(ns)}$	$0.61^{(ns)}$	$0.745^{(ns)}$
15	$1.2\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.00499}0.0076_{0.0102}$	$0.452^{(ns)}$	$5.53\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.764}0.828_{0.898}$	$0.527^{(ns)}$	$0.89^{(ns)}$	$0.765^{(ns)}$
16	$0.0902^{(ns)}$	$_{-0.000359}0.00223_{0.00479}$	$0.552^{(ns)}$	$1.91\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.743}0.806_{0.874}$	$0.461^{(ns)}$	$0.962^{(ns)}$	$0.8^{(ns)}$
17	$1.68\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.00305}0.00561_{0.00817}$	$0.445^{(ns)}$	$3.23\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.697}0.753_{0.816}$	$0.523^{(ns)}$	$0.515^{(ns)}$	$0.763^{(ns)}$
18	$0.000703^{(***)}$	$_{0.00263}0.0062_{0.00971}$	$0.575^{(ns)}$	$0.541^{(ns)}$	$_{0.827}0.956_{1.11}$	$0.468^{(ns)}$	$0.867^{(ns)}$	$0.801^{(ns)}$
19	$0.000947^{(***)}$	$_{0.00195}0.00479_{0.00763}$	$0.543^{(ns)}$	$4.16\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.708}0.785_{0.869}$	$0.486^{(ns)}$	$0.867^{(ns)}$	$0.801^{(ns)}$
20	$0.0704^{(ns)}$	$_{-0.000192}0.00237_{0.00494}$	$0.439^{(ns)}$	$0.0359^{(*)}$	$_{0.82}0.904_{0.994}$	$0.467^{(ns)}$	$0.931^{(ns)}$	$0.746^{(ns)}$
21	$0.0217^{(*)}$	$_{0.000437}0.00298_{0.00549}$	$0.504^{(ns)}$	$0.00224^{(**)}$	$_{0.776}0.857_{0.946}$	$0.519^{(ns)}$	$0.912^{(ns)}$	$0.804^{(ns)}$
22	$0.691^{(ns)}$	$_{-0.00198}0.000497_{0.00297}$	$0.513^{(ns)}$	$3.25\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.773}0.839_{0.911}$	$0.549^{(ns)}$	$0.789^{(ns)}$	$0.795^{(ns)}$
23	$6.14\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.00259}0.00507_{0.00754}$	$0.456^{(ns)}$	$0.0011^{(**)}$	$_{0.797}0.869_{0.946}$	$0.523^{(ns)}$	$0.603^{(ns)}$	$0.81^{(ns)}$
24	$0.000157^{(***)}$	$_{0.00135}0.00281_{0.00426}$	$0.467^{(ns)}$	$1.23\text{e-}08^{(***)}$	$_{0.814}0.858_{0.904}$	$0.485^{(ns)}$	$0.999^{(ns)}$	$0.726^{(ns)}$
25	$9.54\text{e-}12^{(***)}$	$_{0.00358}0.00504_{0.00647}$	$0.423^{(ns)}$	$2.22\text{e-}16^{(***)}$	$_{0.767}0.807_{0.849}$	$0.533^{(ns)}$	$0.564^{(ns)}$	$0.773^{(ns)}$
26	$9\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.002}0.00331_{0.00464}$	$0.483^{(ns)}$	$1.33\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.818}0.855_{0.895}$	$0.445^{(ns)}$	$0.621^{(ns)}$	$0.759^{(ns)}$
27	$3.19\text{e-}10^{(***)}$	$_{0.00283}0.0041_{0.0054}$	$0.496^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.755}0.79_{0.826}$	$0.509^{(ns)}$	$0.126^{(ns)}$	$0.79^{(ns)}$

Tabelle E.27: Resultate der Signifikanztests für φ_i^p Ni. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	2.47e-08$^{(***)}$	$_{0.0438}0.067_{0.0904}$	0.493$^{(ns)}$	9.22e-05$^{(***)}$	$_{0.795}0.858_{0.926}$	0.501$^{(ns)}$	0.693$^{(ns)}$	0.753$^{(ns)}$
2	8.25e-07$^{(***)}$	$_{0.035}0.0582_{0.0811}$	0.488$^{(ns)}$	0.000557$^{(***)}$	$_{0.808}0.873_{0.943}$	0.527$^{(ns)}$	0.133$^{(ns)}$	0.802$^{(ns)}$
3	4.58e-08$^{(***)}$	$_{0.0447}0.0696_{0.0949}$	0.538$^{(ns)}$	2.27e-06$^{(***)}$	$_{0.749}0.814_{0.886}$	0.449$^{(ns)}$	0.203$^{(ns)}$	0.759$^{(ns)}$
4	8.23e-08$^{(***)}$	$_{0.0463}0.073_{0.0997}$	0.505$^{(ns)}$	0.000109$^{(***)}$	$_{0.784}0.85_{0.923}$	0.55$^{(ns)}$	0.577$^{(ns)}$	0.792$^{(ns)}$
5	1.53e-06$^{(***)}$	$_{0.0442}0.0745_{0.104}$	0.53$^{(ns)}$	0.0209$^{(*)}$	$_{0.827}0.903_{0.984}$	0.458$^{(ns)}$	0.241$^{(ns)}$	0.748$^{(ns)}$
6	3.42e-06$^{(***)}$	$_{0.0398}0.0685_{0.0977}$	0.564$^{(ns)}$	1.74e-07$^{(***)}$	$_{0.708}0.777_{0.853}$	0.5$^{(ns)}$	0.958$^{(ns)}$	0.735$^{(ns)}$
7	4.19e-05$^{(***)}$	$_{0.0308}0.0588_{0.0867}$	0.527$^{(ns)}$	0.000169$^{(***)}$	$_{0.763}0.837_{0.918}$	0.527$^{(ns)}$	0.917$^{(ns)}$	0.734$^{(ns)}$
8	0$^{(***)}$	$_{0.0669}0.0808_{0.0947}$	0.528$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.735}0.769_{0.804}$	0.501$^{(ns)}$	0.00985$^{(**)}$	0.757$^{(ns)}$
9	0$^{(***)}$	$_{0.0654}0.0796_{0.0938}$	0.492$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.762}0.797_{0.833}$	0.495$^{(ns)}$	0.361$^{(ns)}$	0.74$^{(ns)}$
10	0$^{(***)}$	$_{0.0715}0.0873_{0.103}$	0.469$^{(ns)}$	2.15e-09$^{(***)}$	$_{0.819}0.86_{0.904}$	0.501$^{(ns)}$	0.744$^{(ns)}$	0.75$^{(ns)}$
11	0$^{(***)}$	$_{0.0534}0.0692_{0.085}$	0.542$^{(ns)}$	2.15e-09$^{(***)}$	$_{0.819}0.86_{0.904}$	0.501$^{(ns)}$	0.427$^{(ns)}$	0.804$^{(ns)}$
12	3.86e-07$^{(***)}$	$_{0.0355}0.0579_{0.0803}$	0.503$^{(ns)}$	8.94e-05$^{(***)}$	$_{0.791}0.855_{0.925}$	0.4$^{(ns)}$	0.912$^{(ns)}$	0.796$^{(ns)}$
13	2.69e-07$^{(***)}$	$_{0.0352}0.0568_{0.0786}$	0.556$^{(ns)}$	5.47e-05$^{(***)}$	$_{0.782}0.848_{0.918}$	0.464$^{(ns)}$	0.762$^{(ns)}$	0.777$^{(ns)}$
14	4.16e-09$^{(***)}$	$_{0.0471}0.0706_{0.094}$	0.598$^{(ns)}$	0.000138$^{(***)}$	$_{0.785}0.852_{0.925}$	0.457$^{(ns)}$	0.803$^{(ns)}$	0.796$^{(ns)}$
15	2.31e-10$^{(***)}$	$_{0.0542}0.0782_{0.102}$	0.504$^{(ns)}$	0.00176$^{(**)}$	$_{0.815}0.882_{0.953}$	0.449$^{(ns)}$	0.422$^{(ns)}$	0.746$^{(ns)}$
16	6.18e-10$^{(***)}$	$_{0.0587}0.0859_{0.113}$	0.503$^{(ns)}$	2.74e-05$^{(***)}$	$_{0.767}0.834_{0.908}$	0.545$^{(ns)}$	0.666$^{(ns)}$	0.767$^{(ns)}$
17	0.000872$^{(***)}$	$_{0.018}0.0437_{0.0693}$	0.524$^{(ns)}$	0.00202$^{(**)}$	$_{0.8}0.873_{0.952}$	0.52$^{(ns)}$	0.376$^{(ns)}$	0.796$^{(ns)}$
18	0.000339$^{(***)}$	$_{0.0305}0.0672_{0.105}$	0.456$^{(ns)}$	2.46e-05$^{(***)}$	$_{0.64}0.736_{0.846}$	0.488$^{(ns)}$	0.327$^{(ns)}$	0.788$^{(ns)}$
19	0.0125$^{(*)}$	$_{0.00815}0.0383_{0.0682}$	0.531$^{(ns)}$	2.51e-06$^{(***)}$	$_{0.675}0.757_{0.85}$	0.457$^{(ns)}$	0.327$^{(ns)}$	0.788$^{(ns)}$
20	1.97e-06$^{(***)}$	$_{0.0321}0.0544_{0.0767}$	0.513$^{(ns)}$	0.00236$^{(**)}$	$_{0.805}0.876_{0.954}$	0.545$^{(ns)}$	0.615$^{(ns)}$	0.79$^{(ns)}$
21	2.2e-05$^{(***)}$	$_{0.0246}0.0454_{0.0665}$	0.572$^{(ns)}$	0.00135$^{(**)}$	$_{0.799}0.87_{0.947}$	0.506$^{(ns)}$	0.291$^{(ns)}$	0.744$^{(ns)}$
22	9.37e-08$^{(***)}$	$_{0.0397}0.0624_{0.0851}$	0.481$^{(ns)}$	0.000227$^{(***)}$	$_{0.806}0.87_{0.937}$	0.558$^{(ns)}$	0.313$^{(ns)}$	0.778$^{(ns)}$
23	4.86e-08$^{(***)}$	$_{0.0391}0.0612_{0.0832}$	0.436$^{(ns)}$	2.82e-05$^{(***)}$	$_{0.773}0.839_{0.909}$	0.464$^{(ns)}$	0.897$^{(ns)}$	0.763$^{(ns)}$
24	0$^{(***)}$	$_{0.0425}0.055_{0.0675}$	0.561$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.783}0.82_{0.86}$	0.548$^{(ns)}$	0.148$^{(ns)}$	0.734$^{(ns)}$
25	1.67e-12$^{(***)}$	$_{0.0315}0.0436_{0.0557}$	0.488$^{(ns)}$	2.62e-10$^{(***)}$	$_{0.823}0.862_{0.902}$	0.543$^{(ns)}$	0.308$^{(ns)}$	0.764$^{(ns)}$
26	0$^{(***)}$	$_{0.0657}0.078_{0.0904}$	0.517$^{(ns)}$	3.33e-14$^{(***)}$	$_{0.811}0.846_{0.883}$	0.459$^{(ns)}$	0.95$^{(ns)}$	0.743$^{(ns)}$
27	0$^{(***)}$	$_{0.0605}0.0727_{0.0849}$	0.507$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.741}0.774_{0.808}$	0.534$^{(ns)}$	0.021$^{(*)}$	0.841$^{(ns)}$

Tabelle E.28: Resultate der Signifikanztests für φ_i^p Zr. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0.0853^{(ns)}$	$_{-0.00437}0.031_{0.0671}$	$0.59^{(ns)}$	$8.7e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.768}0.833_{0.903}$	$0.535^{(ns)}$	$0.647^{(ns)}$	$0.82^{(ns)}$
2	$0.284^{(ns)}$	$_{-0.0162}0.0193_{0.0545}$	$0.466^{(ns)}$	$0.00037^{(***)}$	$_{0.8}0.866_{0.938}$	$0.511^{(ns)}$	$0.457^{(ns)}$	$0.739^{(ns)}$
3	$0.331^{(ns)}$	$_{-0.0177}0.0175_{0.0525}$	$0.542^{(ns)}$	$0.00326^{(**)}$	$_{0.821}0.888_{0.961}$	$0.523^{(ns)}$	$0.957^{(ns)}$	$0.775^{(ns)}$
4	$0.0189^{(*)}$	$_{0.00748}0.0447_{0.082}$	$0.441^{(ns)}$	$0.0233^{(*)}$	$_{0.843}0.913_{0.987}$	$0.471^{(ns)}$	$0.387^{(ns)}$	$0.815^{(ns)}$
5	$0.288^{(ns)}$	$_{-0.0177}0.0206_{0.0596}$	$0.528^{(ns)}$	$0.00769^{(**)}$	$_{0.819}0.891_{0.97}$	$0.54^{(ns)}$	$0.982^{(ns)}$	$0.734^{(ns)}$
6	$0.503^{(ns)}$	$_{-0.0485}-0.0123_{0.0238}$	$0.528^{(ns)}$	$0.449^{(ns)}$	$_{0.953}1.03_{1.12}$	$0.469^{(ns)}$	$0.409^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$
7	$0.803^{(ns)}$	$_{-0.0328}0.00461_{0.0426}$	$0.435^{(ns)}$	$0.000471^{(***)}$	$_{0.8}0.867_{0.938}$	$0.539^{(ns)}$	$0.62^{(ns)}$	$0.815^{(ns)}$
8	$1.17e\text{-}06^{(***)}$	$_{0.0284}0.0476_{0.0667}$	$0.523^{(ns)}$	$7.4e\text{-}09^{(***)}$	$_{0.843}0.88_{0.919}$	$0.498^{(ns)}$	$0.189^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$
9	$0.353^{(ns)}$	$_{-0.0104}0.00934_{0.0291}$	$0.473^{(ns)}$	$6.66e\text{-}16^{(***)}$	$_{0.8}0.835_{0.873}$	$0.507^{(ns)}$	$0.495^{(ns)}$	$0.74^{(ns)}$
10	$0.000104^{(***)}$	$_{0.0199}0.0402_{0.0604}$	$0.507^{(ns)}$	$0.000183^{(***)}$	$_{0.88}0.919_{0.961}$	$0.486^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$	$0.832^{(ns)}$
11	$0.722^{(ns)}$	$_{-0.0167}0.00369_{0.0241}$	$0.535^{(ns)}$	$0.000183^{(***)}$	$_{0.88}0.919_{0.961}$	$0.486^{(ns)}$	$0.857^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
12	$0.338^{(ns)}$	$_{-0.0182}0.0178_{0.0537}$	$0.478^{(ns)}$	$0.0088^{(**)}$	$_{0.818}0.891_{0.971}$	$0.475^{(ns)}$	$0.854^{(ns)}$	$0.757^{(ns)}$
13	$0.0885^{(ns)}$	$_{-0.00439}0.0295_{0.0634}$	$0.459^{(ns)}$	$0.000226^{(***)}$	$_{0.788}0.855_{0.93}$	$0.496^{(ns)}$	$0.911^{(ns)}$	$0.78^{(ns)}$
14	$0.762^{(ns)}$	$_{-0.0292}0.00539_{0.0396}$	$0.548^{(ns)}$	$0.0101^{(*)}$	$_{0.823}0.895_{0.974}$	$0.539^{(ns)}$	$0.758^{(ns)}$	$0.748^{(ns)}$
15	$0.00507^{(**)}$	$_{0.0155}0.0514_{0.0879}$	$0.564^{(ns)}$	$0.00161^{(**)}$	$_{0.809}0.878_{0.952}$	$0.469^{(ns)}$	$0.939^{(ns)}$	$0.798^{(ns)}$
16	$0.975^{(ns)}$	$_{-0.0351}0.00055_{0.0362}$	$0.508^{(ns)}$	$0.00813^{(**)}$	$_{0.828}0.897_{0.972}$	$0.477^{(ns)}$	$0.893^{(ns)}$	$0.783^{(ns)}$
17	$0.407^{(ns)}$	$_{-0.0202}0.0149_{0.0494}$	$0.439^{(ns)}$	$0.000142^{(***)}$	$_{0.798}0.861_{0.929}$	$0.527^{(ns)}$	$0.341^{(ns)}$	$0.749^{(ns)}$
18	$0.0731^{(ns)}$	$_{-0.00432}0.0433_{0.0901}$	$0.541^{(ns)}$	$0.283^{(ns)}$	$_{0.802}0.924_{1.07}$	$0.488^{(ns)}$	$0.981^{(ns)}$	$0.774^{(ns)}$
19	$0.0159^{(*)}$	$_{0.00867}0.047_{0.0851}$	$0.555^{(ns)}$	$0.00167^{(**)}$	$_{0.758}0.842_{0.937}$	$0.552^{(ns)}$	$0.981^{(ns)}$	$0.774^{(ns)}$
20	$0.918^{(ns)}$	$_{-0.04}-0.00197_{0.0358}$	$0.453^{(ns)}$	$1.69e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.741}0.814_{0.895}$	$0.575^{(ns)}$	$0.571^{(ns)}$	$0.795^{(ns)}$
21	$0.923^{(ns)}$	$_{-0.0348}0.00176_{0.0385}$	$0.574^{(ns)}$	$0.00177^{(**)}$	$_{0.793}0.867_{0.948}$	$0.487^{(ns)}$	$0.829^{(ns)}$	$0.835^{(ns)}$
22	$0.118^{(ns)}$	$_{-0.0611}-0.0271_{0.00702}$	$0.52^{(ns)}$	$0.00345^{(**)}$	$_{0.815}0.885_{0.96}$	$0.544^{(ns)}$	$0.717^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$
23	$0.92^{(ns)}$	$_{-0.0338}0.00176_{0.0374}$	$0.486^{(ns)}$	$0.0472^{(*)}$	$_{0.844}0.918_{0.999}$	$0.621^{(ns)}$	$0.869^{(ns)}$	$0.803^{(ns)}$
24	$0.216^{(ns)}$	$_{-0.00736}0.0125_{0.0322}$	$0.495^{(ns)}$	$6.61e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.831}0.876_{0.923}$	$0.52^{(ns)}$	$0.768^{(ns)}$	$0.736^{(ns)}$
25	$0.307^{(ns)}$	$_{-0.00915}0.00997_{0.0291}$	$0.531^{(ns)}$	$5.91e\text{-}07^{(***)}$	$_{0.835}0.878_{0.924}$	$0.58^{(ns)}$	$0.869^{(ns)}$	$0.733^{(ns)}$
26	$0.989^{(ns)}$	$_{-0.0184}0.00013_{0.0186}$	$0.529^{(ns)}$	$4.55e\text{-}05^{(***)}$	$_{0.871}0.911_{0.952}$	$0.516^{(ns)}$	$0.748^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
27	$0.354^{(ns)}$	$_{-0.0096}0.00871_{0.027}$	$0.549^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.789}0.825_{0.862}$	$0.485^{(ns)}$	$0.366^{(ns)}$	$0.766^{(ns)}$

Tabelle E.29: Resultate der Signifikanztests für φ_i^τ Ni. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	$0^{(***)}$	$_{0.0448}0.0566_{0.0682}$	$0.547^{(ns)}$	$2.12\text{e-}06^{(***)}$	$_{0.766}0.828_{0.894}$	$0.505^{(ns)}$	$0.589^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
2	$0^{(***)}$	$_{0.0458}0.0575_{0.0691}$	$0.474^{(ns)}$	$0.0128^{(*)}$	$_{0.844}0.908_{0.98}$	$0.529^{(ns)}$	$0.998^{(ns)}$	$0.831^{(ns)}$
3	$0^{(***)}$	$_{0.0423}0.0548_{0.0674}$	$0.484^{(ns)}$	$0.000106^{(***)}$	$_{0.787}0.852_{0.924}$	$0.485^{(ns)}$	$0.972^{(ns)}$	$0.796^{(ns)}$
4	$2.22\text{e-}16^{(***)}$	$_{0.044}0.0573_{0.0707}$	$0.551^{(ns)}$	$0.000156^{(***)}$	$_{0.788}0.855_{0.927}$	$0.547^{(ns)}$	$0.693^{(ns)}$	$0.8^{(ns)}$
5	$7.62\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.0497}0.0669_{0.0841}$	$0.446^{(ns)}$	$0.0567^{(ns)}$	$_{0.845}0.92_{1}$	$0.48^{(ns)}$	$0.921^{(ns)}$	$0.751^{(ns)}$
6	$0^{(***)}$	$_{0.0547}0.0686_{0.0826}$	$0.491^{(ns)}$	$0.0149^{(*)}$	$_{0.82}0.897_{0.979}$	$0.493^{(ns)}$	$0.901^{(ns)}$	$0.756^{(ns)}$
7	$0^{(***)}$	$_{0.0535}0.0676_{0.0816}$	$0.499^{(ns)}$	$0.000326^{(***)}$	$_{0.773}0.847_{0.927}$	$0.514^{(ns)}$	$0.855^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
8	$0^{(***)}$	$_{0.0497}0.0564_{0.0631}$	$0.468^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.757}0.791_{0.826}$	$0.487^{(ns)}$	$0.989^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
9	$0^{(***)}$	$_{0.0506}0.0576_{0.0646}$	$0.449^{(ns)}$	$0^{(***)}$	$_{0.79}0.825_{0.862}$	$0.48^{(ns)}$	$0.776^{(ns)}$	$0.757^{(ns)}$
10	$0^{(***)}$	$_{0.0594}0.067_{0.0746}$	$0.514^{(ns)}$	$7.06\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.811}0.852_{0.893}$	$0.437^{(ns)}$	$0.724^{(ns)}$	$0.785^{(ns)}$
11	$0^{(***)}$	$_{0.0483}0.056_{0.0637}$	$0.519^{(ns)}$	$7.06\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.811}0.852_{0.893}$	$0.437^{(ns)}$	$0.305^{(ns)}$	$0.791^{(ns)}$
12	$0^{(***)}$	$_{0.0476}0.059_{0.0704}$	$0.492^{(ns)}$	$0.000127^{(***)}$	$_{0.79}0.856_{0.926}$	$0.469^{(ns)}$	$0.223^{(ns)}$	$0.775^{(ns)}$
13	$0^{(***)}$	$_{0.0474}0.0588_{0.0701}$	$0.506^{(ns)}$	$1.79\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.761}0.819_{0.883}$	$0.517^{(ns)}$	$0.787^{(ns)}$	$0.788^{(ns)}$
14	$0^{(***)}$	$_{0.0435}0.0553_{0.067}$	$0.455^{(ns)}$	$0.0133^{(*)}$	$_{0.843}0.909_{0.98}$	$0.471^{(ns)}$	$0.887^{(ns)}$	$0.782^{(ns)}$
15	$0^{(***)}$	$_{0.0444}0.0556_{0.0668}$	$0.552^{(ns)}$	$0.115^{(ns)}$	$_{0.873}0.942_{1.01}$	$0.407^{(ns)}$	$0.727^{(ns)}$	$0.705^{(ns)}$
16	$0^{(***)}$	$_{0.0546}0.0676_{0.0808}$	$0.608^{(ns)}$	$0.0215^{(*)}$	$_{0.835}0.907_{0.986}$	$0.475^{(ns)}$	$0.808^{(ns)}$	$0.778^{(ns)}$
17	$0^{(***)}$	$_{0.0608}0.0735_{0.0861}$	$0.519^{(ns)}$	$6.13\text{e-}05^{(***)}$	$_{0.772}0.84_{0.914}$	$0.525^{(ns)}$	$0.984^{(ns)}$	$0.785^{(ns)}$
18	$1.27\text{e-}14^{(***)}$	$_{0.0566}0.0746_{0.0924}$	$0.564^{(ns)}$	$0.148^{(ns)}$	$_{0.771}0.895_{1.04}$	$0.444^{(ns)}$	$0.522^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
19	$0^{(***)}$	$_{0.0709}0.0865_{0.102}$	$0.415^{(ns)}$	$0.000771^{(***)}$	$_{0.74}0.827_{0.924}$	$0.447^{(ns)}$	$0.522^{(ns)}$	$0.76^{(ns)}$
20	$0^{(***)}$	$_{0.0447}0.0558_{0.0668}$	$0.546^{(ns)}$	$0.188^{(ns)}$	$_{0.865}0.944_{1.03}$	$0.456^{(ns)}$	$0.176^{(ns)}$	$0.784^{(ns)}$
21	$0^{(***)}$	$_{0.0543}0.0648_{0.0752}$	$0.559^{(ns)}$	$0.0555^{(ns)}$	$_{0.853}0.923_{1}$	$0.496^{(ns)}$	$0.898^{(ns)}$	$0.832^{(ns)}$
22	$0^{(***)}$	$_{0.0474}0.058_{0.0683}$	$0.538^{(ns)}$	$0.0268^{(*)}$	$_{0.851}0.918_{0.99}$	$0.488^{(ns)}$	$0.783^{(ns)}$	$0.748^{(ns)}$
23	$0^{(***)}$	$_{0.0362}0.0466_{0.0571}$	$0.447^{(ns)}$	$0.00134^{(**)}$	$_{0.803}0.872_{0.948}$	$0.53^{(ns)}$	$0.439^{(ns)}$	$0.785^{(ns)}$
24	$0^{(***)}$	$_{0.0498}0.0561_{0.0623}$	$0.488^{(ns)}$	$1.1\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.848}0.886_{0.926}$	$0.463^{(ns)}$	$0.385^{(ns)}$	$0.798^{(ns)}$
25	$0^{(***)}$	$_{0.0453}0.0513_{0.0574}$	$0.508^{(ns)}$	$9.43\text{e-}07^{(***)}$	$_{0.852}0.892_{0.934}$	$0.54^{(ns)}$	$0.429^{(ns)}$	$0.745^{(ns)}$
26	$0^{(***)}$	$_{0.053}0.0588_{0.0647}$	$0.472^{(ns)}$	$1.04\text{e-}11^{(***)}$	$_{0.825}0.861_{0.899}$	$0.521^{(ns)}$	$0.194^{(ns)}$	$0.809^{(ns)}$
27	$0^{(***)}$	$_{0.052}0.0579_{0.0637}$	$0.423^{(ns)}$	$6.66\text{e-}16^{(***)}$	$_{0.809}0.843_{0.878}$	$0.469^{(ns)}$	$0.826^{(ns)}$	$0.817^{(ns)}$

Tabelle E.30: Resultate der Signifikanztests für φ_i^τ Zr. Nummern gelten nach Tab. E.16.

Nr.	p_{WMW}	$\Delta\mu$	$\tilde{p}_{WMW}$	p_{AB}	σ_1/σ_2	$\tilde{p}_{AB}$	p_{KS}	$\tilde{p}_{KS}$
1	2.22e-16$^{(***)}$	$_{0.0475}0.0622_{0.0765}$	0.473$^{(ns)}$	8.77e-05$^{(***)}$	$_{0.789}0.853_{0.923}$	0.453$^{(ns)}$	0.269$^{(ns)}$	0.775$^{(ns)}$
2	0$^{(***)}$	$_{0.0525}0.0673_{0.0818}$	0.467$^{(ns)}$	0.000107$^{(***)}$	$_{0.798}0.861_{0.929}$	0.451$^{(ns)}$	0.814$^{(ns)}$	0.8$^{(ns)}$
3	6.1e-11$^{(***)}$	$_{0.0358}0.0509_{0.0661}$	0.492$^{(ns)}$	4.47e-05$^{(***)}$	$_{0.786}0.851_{0.919}$	0.538$^{(ns)}$	0.832$^{(ns)}$	0.84$^{(ns)}$
4	4.57e-08$^{(***)}$	$_{0.028}0.0435_{0.0588}$	0.41$^{(ns)}$	3.94e-05$^{(***)}$	$_{0.784}0.847_{0.916}$	0.495$^{(ns)}$	0.617$^{(ns)}$	0.797$^{(ns)}$
5	0$^{(***)}$	$_{0.0667}0.0858_{0.105}$	0.487$^{(ns)}$	0.0421$^{(*)}$	$_{0.851}0.92_{0.997}$	0.485$^{(ns)}$	0.466$^{(ns)}$	0.853$^{(ns)}$
6	2.22e-16$^{(***)}$	$_{0.0515}0.0671_{0.0827}$	0.545$^{(ns)}$	3.08e-05$^{(***)}$	$_{0.781}0.846_{0.915}$	0.47$^{(ns)}$	1$^{(ns)}$	0.745$^{(ns)}$
7	0$^{(***)}$	$_{0.0552}0.0705_{0.0858}$	0.469$^{(ns)}$	2.71e-05$^{(***)}$	$_{0.79}0.852_{0.919}$	0.501$^{(ns)}$	0.812$^{(ns)}$	0.808$^{(ns)}$
8	0$^{(***)}$	$_{0.0419}0.0498_{0.0577}$	0.411$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.78}0.813_{0.848}$	0.543$^{(ns)}$	0.585$^{(ns)}$	0.805$^{(ns)}$
9	0$^{(***)}$	$_{0.0366}0.0447_{0.0529}$	0.527$^{(ns)}$	0$^{(***)}$	$_{0.771}0.804_{0.839}$	0.438$^{(ns)}$	0.883$^{(ns)}$	0.766$^{(ns)}$
10	0$^{(***)}$	$_{0.0461}0.0547_{0.0634}$	0.521$^{(ns)}$	2.59e-11$^{(***)}$	$_{0.829}0.865_{0.903}$	0.445$^{(ns)}$	0.101$^{(ns)}$	0.783$^{(ns)}$
11	0$^{(***)}$	$_{0.0556}0.0641_{0.0725}$	0.435$^{(ns)}$	2.59e-11$^{(***)}$	$_{0.829}0.865_{0.903}$	0.445$^{(ns)}$	0.707$^{(ns)}$	0.742$^{(ns)}$
12	1.65e-09$^{(***)}$	$_{0.0299}0.0443_{0.0583}$	0.517$^{(ns)}$	2.83e-05$^{(***)}$	$_{0.766}0.835_{0.907}$	0.458$^{(ns)}$	0.709$^{(ns)}$	0.804$^{(ns)}$
13	1.74e-11$^{(***)}$	$_{0.0342}0.0481_{0.0618}$	0.544$^{(ns)}$	4.19e-05$^{(***)}$	$_{0.781}0.846_{0.916}$	0.482$^{(ns)}$	0.711$^{(ns)}$	0.811$^{(ns)}$
14	7.41e-11$^{(***)}$	$_{0.0326}0.0465_{0.0602}$	0.523$^{(ns)}$	0.00136$^{(**)}$	$_{0.806}0.874_{0.949}$	0.529$^{(ns)}$	0.952$^{(ns)}$	0.725$^{(ns)}$
15	7.55e-06$^{(***)}$	$_{0.0186}0.033_{0.0474}$	0.484$^{(ns)}$	3.1e-05$^{(***)}$	$_{0.78}0.844_{0.914}$	0.484$^{(ns)}$	0.954$^{(ns)}$	0.789$^{(ns)}$
16	1.21e-09$^{(***)}$	$_{0.0309}0.0454_{0.0599}$	0.494$^{(ns)}$	2.26e-09$^{(***)}$	$_{0.731}0.79_{0.853}$	0.533$^{(ns)}$	0.744$^{(ns)}$	0.792$^{(ns)}$
17	0$^{(***)}$	$_{0.0549}0.0694_{0.0838}$	0.491$^{(ns)}$	1.32e-05$^{(***)}$	$_{0.782}0.844_{0.91}$	0.531$^{(ns)}$	0.793$^{(ns)}$	0.797$^{(ns)}$
18	3.42e-05$^{(***)}$	$_{0.0216}0.0408_{0.0601}$	0.514$^{(ns)}$	0.058$^{(ns)}$	$_{0.762}0.875_{1}$	0.469$^{(ns)}$	0.819$^{(ns)}$	0.752$^{(ns)}$
19	2.54e-10$^{(***)}$	$_{0.034}0.0489_{0.064}$	0.435$^{(ns)}$	0.0417$^{(*)}$	$_{0.812}0.9_{0.996}$	0.469$^{(ns)}$	0.819$^{(ns)}$	0.752$^{(ns)}$
20	0.00242$^{(**)}$	$_{0.00778}0.0219_{0.0361}$	0.51$^{(ns)}$	0.0184$^{(*)}$	$_{0.808}0.889_{0.98}$	0.459$^{(ns)}$	0.924$^{(ns)}$	0.789$^{(ns)}$
21	8.48e-08$^{(***)}$	$_{0.0248}0.0388_{0.0528}$	0.545$^{(ns)}$	0.000146$^{(***)}$	$_{0.767}0.839_{0.918}$	0.532$^{(ns)}$	0.773$^{(ns)}$	0.789$^{(ns)}$
22	1.73e-14$^{(***)}$	$_{0.0375}0.0501_{0.0628}$	0.501$^{(ns)}$	0.00815$^{(**)}$	$_{0.834}0.9_{0.973}$	0.492$^{(ns)}$	0.976$^{(ns)}$	0.779$^{(ns)}$
23	3.97e-07$^{(***)}$	$_{0.0216}0.0352_{0.0487}$	0.499$^{(ns)}$	0.000461$^{(***)}$	$_{0.796}0.865_{0.937}$	0.449$^{(ns)}$	0.966$^{(ns)}$	0.732$^{(ns)}$
24	0$^{(***)}$	$_{0.0312}0.0389_{0.0465}$	0.553$^{(ns)}$	6.09e-08$^{(***)}$	$_{0.827}0.869_{0.914}$	0.503$^{(ns)}$	0.727$^{(ns)}$	0.797$^{(ns)}$
25	0$^{(***)}$	$_{0.03}0.0375_{0.0452}$	0.491$^{(ns)}$	3.2e-07$^{(***)}$	$_{0.835}0.877_{0.922}$	0.431$^{(ns)}$	0.271$^{(ns)}$	0.725$^{(ns)}$
26	0$^{(***)}$	$_{0.0263}0.0333_{0.0402}$	0.5$^{(ns)}$	1.16e-12$^{(***)}$	$_{0.814}0.851_{0.89}$	0.505$^{(ns)}$	0.148$^{(ns)}$	0.786$^{(ns)}$
27	0$^{(***)}$	$_{0.0441}0.051_{0.0579}$	0.514$^{(ns)}$	2.22e-16$^{(***)}$	$_{0.797}0.832_{0.869}$	0.455$^{(ns)}$	0.102$^{(ns)}$	0.769$^{(ns)}$

Literaturverzeichnis

[1] Doremus, R. H.: *Glass science*, Kapitel 6. John Wiley & Sons Inc., 1994.

[2] Luborsky, F. E.: *Amorphous metallic alloys.* In: Luborsky, F. E. (Herausgeber): *Amorphous Metallic Alloys*, Butterworths Monographs in Materials, Seiten 1–7. Butterworths, London, 1983.

[3] Klement, W. J., R. H. Willens und P. Duwez: *Non-crystalline structure in solidified gold-silicon alloys.* Nature, 187:869–870, 1960.

[4] Duwez, P.: *Metallic Glasses — Historical Background.* In: *Glassy Metals I*, Band 46 der Reihe *Topics in Applied Physics.* Springer Verlag Berlin, 1981.

[5] Greer, A. L.: *Metallic Glasses.* Science, 267:1947–1953, 1995.

[6] Anantharaman, T. R.: *Metallic Glasses: An Overview.* In: Anantharaman, T. R. (Herausgeber): *Metallic Glasses – Production, Properties and Application*, Seiten 1–29. Trans Tech Publications, 1984.

[7] O'Handley, R. C.: *Fundamental magnetic properties.* In: Luborsky, F. E. (Herausgeber): *Amorphous Metallic Alloys*, Butterworths Monographs in Materials, Seiten 257–282. Butterworths, London, 1983.

[8] Durand, J.: *Magnetic Properties of Metallic Glasses.* In: Beck, H. und H.-J. Günterodt (Herausgeber): *Glassy Metals II*, Band 53 der Reihe *Topics in Applied Physics*, Seiten 343–385. Springer-Verlag, Berlin, 1983.

[9] Künzi, H. U.: *Mechanical properties of metallic glasses.* In: Beck, H. und H.-J. Günterodt (Herausgeber): *Glassy Metals II*, Band 53 der Reihe *Topics in Applied Physics*, Seiten 169–216. Springer-Verlag, Berlin, 1983.

[10] Rama Rao, P.: *Mechanical Properties and Applications.* In: Anantharaman, T. R. (Herausgeber): *Metallic Glasses – Production, Properties and Application*, Seiten 225–248. Trans Tech Publications, 1984.

[11] Miller, M. K. und E. A. Kenik: *Atom Probe Tomography: A Technique for Nanoscale Characterization.* Microscopy and Microanalysis, 10:336–341, 2004.

[12] Miller, M. K., C. T. Liu, J. A. Wright, W. Tang und K. Hildal: *APT characterization of some iron-based bulk metallic glasses.* Intermetallics, 14:1019–1026, 2006.

[13] Shariq, A., T. Al-Kassab, R. Kirchheim, D. J. Safarik und R. B. Schwarz: *Exploring the Next Neighbourhood Relationship in Metallic Glasses utilizing the Atom Probe Tomography.* In: *19th International Vacuum Nanoelectronics Conference & 50th International Field Emission Symposium*, Seiten 19–20, 2006.

[14] Bernal, J. D.: *Geometry of the structure of monatomic liquids.* Nature, 185:68–70, 1960.

[15] Bernal, J. D.: *The structure of liquids.* Proc. R. Soc. Lond. A, 280:299–322, 1964.

[16] Gaskell, P. H.: *A new structural model for transition metal-metalloid glasses.* Nature, 276:484–485, 1978.

[17] Gaskell, P. H.: *A new structural model for amorphous transition metal silicides, borides, phosphides and carbides.* J. Non-Cryst. Solids, 32:207–224, 1979.

[18] Elliot, S. R.: *Physics of amorphous materials.* Longman, London, 2 Auflage, 1990.

[19] Gaskell, P. H.: *Medium-range structure in glasses and low-Q structure in neutron an X-ray scattering data.* J. Non-Cryst. Solids, 351:1003–1013, 2005.

[20] Spaepen, F.: *A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses.* Acta Metall., 25:407–415, 1977.

[21] McClintock, F. A. und A. S. Argon: *Mechanical behavior of Materials.* Addison-Wesley Publishing Company, 1966.

[22] Haasen, P.: *Physikalische Metallkunde.* Springer Verlag, 1980.

[23] Taub, A. I. und F. Spaepen: *Iso-configurational flow of amorphous $Pd_{82}Si_{18}$.* Scripta Mater., 13:195–198, 1979.

[24] Vaillant, M. L., V. Keryvin, T. Rouxel und Y. Kawamura: *Changes in the mechanical properties of a $Zr_{55}Cu_{30}Al_{10}Ni_5$ bulk metallic glass due to heat treatments below 540 °C.* Scripta Mater., 47:19–23, 2002.

[25] Ramamurty, U., S. Jana, Y. Kawamura und K. Chattopadhyay: *Hardness and plastic deformation in a bulk metallic glass.* Acta Mater., 53:705–717, 2005.

[26] Kronmüller, H. und W. Frank: *Unified analysis of diffusion and relaxation processes in amorphous metallic alloys.* Rad. Effects and Defects in Solids, 108:81, 1989.

[27] Zumkley, T., V. Naundorf, P. Macht, M.-P.and Fielitz und G. Frohberg: *Relation Between Time and Temperature Dependence of Diffusion and the Structural State in ZrTiCuNiBe Bulk Glasses.* Mater. Trans., 43:1921–1930, 2002.

[28] Masumoto, T. und R. Maddin: *THE MECHANICAL PROPERTIES OF PALLADIUM 20 a/o SILICON ALLOY QUENCHED FROM THE LIQUID STATE.* Acta Met., 19:725–741, 1971.

[29] Pampillo, C. A.: *Localized shear deformation in a glassy metal.* Scripta Metall., 6:915–918, 1972.

[30] Pampillo, C. A. und Chen. H. S.: *Comprehensive plastic deformation of a bulk metallic glass.* Mater. Sci. Eng., 13:181–188, 1974.

[31] Donovan, P. E. und W. M. Stobbs: *The Structure of Shear Bands in Metallic Glasses.* Acta Metall., 29:1419–1436, 1981.

[32] Popescu, M. A.: *Structural and electrochemical effects induced in metallic glasses by mechanical deformation.* J. Non-Cryst. Solids, 169:155–159, 1994.

[33] Koba, E. S., Y. V. Milman und A. P. Rachek: *Effect of plastic deformation and high pressure working on the structure and microhardness of metallic glasses.* Acta Metall. Mater., 42:1383–1388, 1994.

[34] Heggen, M., F. Spaepen und M. Feuerbacher: *Creation and annihilation of free volume during homogeneous flow of a metallic glass.* J. Appl. Phys., 97:033506, 2005.

[35] Kiefer, B.: *Molekulardynamiksimulationen zum Glasübergang in $Ni_{50}Zr_{50}$.* Diplomarbeit, Institut für Materialphysik, Georg-August-Universität Göttingen, 1993.

[36] Teichler, H.: *Atomic Dynamics in Computer Simulated Amorphous $Ni_{1-x}Zr_x$ Alloys.* Def. Diff. Forum, 143–147:717–722.

[37] Teichler, H.: *Melting transition in molecular-dynamics simulations of the $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$ intermetallic compound.* Phys. Rev. B, 59:8473–8480, 1999.

[38] Teichler, H.: *The Liquid-Glass Transition in the $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$ System: Molecular Dynamics Studies.* In: Jund, P. und R. Jullien (Herausgeber): *Physics of Glasses: Structure and Dynamics*, Band 489 der Reihe *AIP Conf. Proc.*, Seiten 203–214, 1999.

[39] Brinkmann, K.: *Molekulardynamik-Simulationen zur plastischen Verformung metallener Gläser am Beispiel des $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$-Systems.* Diplomarbeit, Institut für Materialphysik, Georg-August-Universität Göttingen, 2000.

[40] Brinkmann, K. und H. Teichler: *Flow state in molecular-dynamics-simulated deformed amorphous $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$.* Phys. Rev. B, 66:184205, 2002.

[41] Buckel, W. und H. Hilsch: *Influence of low-temperature condensation on the electrical resistance and superconductivity of various metals.* Z. Phys., Seiten 109–120, 1954.

[42] Cahn, R. W.: *Alloys rapidly quenched from the melt.* In: Cahn, R. W. und P. Haasen (Herausgeber): *Physical Metallurgy*, Band II, Kapitel 28, Seiten 1779–1852. Elsevier Science Publishers, 1983.

[43] Huber, E. und M. von Allmen: *State of Si and Sn in glassy Au alloys.* Phys. Rev. B, 31:3338–3342, 1988.

[44] Blatter, A. und M. von Allmen: *Reversible Amorphization in Laser-Quenched Titanium Alloys.* Phys. Rev. Lett., 54:2103–2106, 1985.

[45] Schwarz, R. B. und W. L. Johnson: *Formation of an Amorphous Alloy by Solid-State Reaction of the Pure Polycrystalline Metals.* Phys. Rev. Lett., 51:415–418, 1983.

[46] Ziemann, P.: *Amorphization of metallic systems by ion beams.* Mat. Sci. Eng., 69:95–103, 1985.

[47] Hellstern, E. und L. Schultz: *Amorphization of transition metal Zr alloys by mechanical alloying.* Appl. Phys. Lett., 48:124–126, 1986.

[48] Koch, C. C.: *Amorphization by mechanical alloying.* J. Non-Cryst. Solids, 117–118:670–678, 1990.

[49] Jäckle, J.: *Models of the glass transition.* Rep. Prog. Phys., 49:171–231, 1986.

[50] Lück, R., Q. Jiang und B. Predel: *Specific heat investigation of the glass transition and crystallization of amorphous $NiZr_2$ using low heating rates.* J. Non-Cryst. Solids, 117–118(Teil 2):911–914, 1990.

[51] Brüning, R. und K. Samwer: *Glass transition on long time scales.* Phys. Rev. B, 46:11318–11322, 1992.

[52] Hays, C. C., C. P. Kim und W. L. Johnson: *Microstructure controlled shear band pattern formation and enhanced plasticity of bulk metallic glasses containing in situ formed ductile phase dendrite dispersions.* Phys. Rev. Lett., 84:2901–2904, 2000.

[53] Bush, R., Y. J. Kim und W. L. Johnson: *Thermodynamics and kinetics of the undercooled liquid and the glass-transition of the $Zr_{41.2}Ti_{13.8}Cu_{12.5}Ni_{10}Be_{22.5}$ alloy.* J. Appl. Phys., 77(8):4039–4043, 1995.

[54] Chen, H. S. und D. Turnbull: *Formation, stability and structure of palladium-silicon based alloy glasses.* Acta Metall., 17:1021–1031, 1969.

[55] Chen, H. S.: *Thermodynamic considerations on the formation and stability of metallic glasses.* Acta Metall., 22:1505–1511, 1974.

[56] Chen, H. S.: *Metallic glass.* Mater. Sci. Eng., 25:59–69, 1976.

[57] Drehman, A. L., A. L. Greer und D. Turnbull: *Bulk fromation of am metallic glass: $Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$.* Appl. Phys. Lett., 41(8):716–717, 1982.

[58] Kui, H. W., A. L. Greer und D. Turnbull: *Formation of bulk metallic-glass by fluxing.* Appl. Phys. Lett., 45(6):615–616, 1984.

[59] Inoue, A., H. Yamaguchi, T. Zhang und T. Masumoto: *Al-La-Cu Amorphous Alloys With a Wide Supercooled Liquid Region.* Mater. Trans. JIM, 31:104–109, 1990.

[60] Peker, A. und W. L. Johnson: *A highly processable metallic glass: $Zr_{41.2}Ti_{13.8}Cu_{12.5}Ni_{10}Be_{22.5}$.* Appl. Phys. Lett., 63:2342–2344, 1993.

[61] Angell, C. A.: *Relaxation in liquids, polymers and plastic crystals — strong/fragile patterns and problems.* J. Non-Cryst. Solids, 131–133:13–31, 1991.

[62] Götze, W. und L. Sjögren: *Relaxation processes in supercooled liquids.* Rep. Prog. Phys., 55:241–376, 1992.

[63] Cummins, H. Z.: *The liquid-glass transition: a mode-coupling perspective.* J. Phys.: Cond. Matt., 11:A95–A117, 1999.

[64] Debenedetti, P. G. und F. H. Stillinger: *Supercooled liquids and the glass transition.* Nature, 410:259–267, 2001.

[65] Cohen, M. H. und D. Turnbull: *Molecular transport in liquids and glasses.* J. Chem. Phys., 31:1164–1169, 1959.

[66] Turnbull, D. und M. H. Cohen: *Free-volume model of the amorphous phase: glass transition.* J. Chem. Phys., 34:120–125, 1961.

[67] Turnbull, D. und M. H. Cohen: *On the free-volume model of the liquid-glass transition.* J. Chem. Phys., 52:3038–3041, 1970.

[68] Cohen, M. H. und G. S. Grest: *Liquid-glass transition, a free-volume approach.* Phys. Rev. B, 20:1077–1098, 1979.

[69] Grest, G. S. und M. H. Cohen: *Liquid-glass transition: Dependence of the glass transition on heating and cooling rates.* Phys. Rev. B, 21:4113–4117, 1980.

[70] Adam, G. und J. H. Gibbs: *On the temperature dependence of cooperative relaxation properties in glass-forming liquids.* J. Chem. Phys., 43:139–146, 1965.

[71] Gibbs, J. H. und E. A. DiMarzio: *Nature of the Glass Transition and the Glassy State.* J. Chem. Phys., 28:373–383, 1958.

[72] Ngai, K. L.: *Universality of low-frequency fluctuation, dissipation and relaxation properties of condensed matter. I.* Comm. Solid State Phys., 9:127–140, 1979.

[73] Roland, C. M. und K. L. Ngai: *Short time dynamics of glass-forming liquids.* J. Chem. Phys., 103:1152–1159, 1995.

[74] Odagaki, T. und Y. Hiwatari: *Stochastic model for the glass transition of simple classical liquids.* Phys. Rev. A, 41:929–937, 1990.

[75] Leutheusser, E.: *Dynamical model of the liquid-glass transition.* Phys. Rev. A, 29:2765–2773, 1984.

[76] Bengtzelius, U., W. Götze und A. Sjögren: *Dynamics of supercooled liquids and the glass transition.* J. Phys. C: Solid State Phys., 17:5915–5934, 1984.

[77] Kauzmann, W.: *The Nature of the Glassy State and the Behavior of Liquids at Low Temperatures.* Chem. Rev., 43:219–256, 1948.

[78] Angell, C. A.: *Entropy and Fragility in Supercooling Liquids.* J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol., 102:171–185, 1997.

[79] Hodge, I. M.: *Adam-Gibbs Formulation of Enthalpy Relaxation Near the Glass Transition.* J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol., 102:195–205, 1997.

[80] Cohen, M. H. und G. S. Grest: *Dispersion of relaxation rates in dense liquids and glasses.* Phys. Rev. B, 24:4091–4094, 1981.

[81] Kohlrausch, R.: *Theorie des elektrischen Rückstandes in der Leidener Flasche.* Ann. Phys., 91:56–82, 179–214, 1854.

[82] Williams, G. und C. C. Watts: *Non-symmetrical dielectric relaxation behavior arising from a simple empirical decay function.* Trans. Faraday Soc., 66:80–85, 1970.

[83] Lovesey, S. W.: *Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter*, Band 1. Clarendon Press, Oxford, 1987.

[84] Kob, W. und H. C. Anderson: *Testing Mode-Coupling Theory for a Supercooled Binary Lennard-Jones Mixture II. Intermediate scattering function and dynamical susceptibility.* Phys. Rev. E, 52:4134–4641, 1995.

[85] Teichler, H.: *Mode Coupling Theory and the Glass Transition in Molecular Dynamics Simulated NiZr.* Phys. Rev. Lett., 72:62–65, 1996.

[86] Teichler, H.: *Evaluation of the memory kernel for fluctuation decay in simulated glass-forming NiZr liquids.* Phys. Rev. E, 53:4287–4290, 1996.

[87] Mutiara, A. B.: *Moden-Kopplungs Theorie und Glasübergang im MD-simulierten $Ni_{20}Zr_{80}$-System.* Diplomarbeit, Institut für Materialphysik, Georg-August-Universität Göttingen, 1996.

[88] Mutiara, A. B.: *Korrelationsfunktionen und Memory-Funktionen in MD-simulierten glasbildenden NiZr-Schmelzen.* Dissertation, Institut für Materialphysik, Georg-August-Universität Göttingen, 1999.

[89] Kittel, C.: *Introduction to Solid State Physics.* John Wiley & Sons Inc., 1971.

[90] Landau, L. D. und E. M. Lifschitz: *Elastizitätstheorie*, Band 7 der Reihe *Lehrbuch der theoretischen Physik.* Akademie Verlag Berlin, 1983.

[91] Maddin, R. und T. Masumoto: *The Deformation of Amorphous Palladium-20 at.% Silicon.* Mater. Sci. Eng., 9:153–161, 1972.

[92] Spaepen, F. und A. I. Taub: *Flow and Fracture.* In: Luborsky, F. E. (Herausgeber): *Amorphous Metallic Alloys*, Butterworths Monographs in Materials, Seiten 231–256. Butterworths, London, 1983.

[93] Argon, A. S.: *Inelastic Deformation and Fracture of Glassy Solids.* In: Cahn, R. W., P. Haasen und E. J. Kramer (Herausgeber): *Plastic Deformation and Fracture of Materials*, Band 6 der Reihe *Materials Science and Technology.* VCH, Weinheim, 1993.

[94] Leamy, H. J., H. S. Chen und T. T. Wang: *Plastic flow and fracture of metallic glass (Tensile plastic flow and fracture behavior of PdSi based alloys in glassy microcrystalline and crystalline states, noting shear deformation bands).* Metall. Trans., 3:699–708, 1972.

[95] Spaepen, F.: *On the fracture morphology of metallic glasses.* Acta Metall., 23:615–620, 1975.

[96] Spaepen, F. und D. Turnbull: *A mechanism for the flow and fracture of metallic glasses.* Scripta Metall., 8:563–568, 1974.

[97] Argon, A. S. und H. Y. Kuo: *Plastic Flow in a Disordered Bubble Raft (an Analog of a Metallic Glass).* Mater. Sci. Eng., 39:101–109, 1979.

[98] Vitek, V., D. Srolovitz und T. Egami: *Atomic Level Deformation Properties of Amorphous Metals: A Computer Simulation Study.* In: Masumoto, T. und K. Suzuki (Herausgeber): *Proc. 4th Int. Conf. on Rapidly Quenched Metals*, Seiten 241–244, 1981.

[99] Argon, A. S.: *Plastic deformation in metallic glasses.* Acta Metall., 27:47–58, 1979.

[100] Taub, A. I.: *Stress-strain Rate Dependence of Homogeneous Flow in Metallic Glasses.* Acta Metall., 28:633–637, 1980.

[101] Strömbom, J., P. J. Henderson und S. J. Savage: *Creep of Amorphous Aluminium Alloys near the Glass Transition Temperature.* Scr. Metall., 27:1179–1184, 1992.

[102] Ocelik, V., Yu. V. Fursova, V. A. Khonik und K. Csach: *Non-Newtonian Deformation of Co-Based Metallic Glass at Low Stresses.* Phys. Solid State, 42:697–700, 2000.

[103] Srolovitz, D., V. Vitek und T. Egami: *An Atomistic Study of Deformation of Amorphous Metals.* Acta metall., 31:335–352, 1983.

[104] Srolovitz, D., K. Maeda, V. Vitek und T. Egami: *Structural Defects in Amorphous Solids. Statistical Analysis of a Computer Model.* Phil. Mag. A, 44:847–866, 1981.

[105] Tomida, T. und T. Egami: *Molecular-dynamics study of structural anisotropy and anelasticity in metallic glasses.* Phys. Rev. B, 48:3048–3057, 1993.

[106] Egami, T.: *Atomic Transport in Amorphous Metals.* Zeitschr. f. Metallk., 93:1071–1076, 2002.

[107] Falk, M. L. und J. S. Langer: *Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids.* Phys. Rev. E, 57:7192–7205, 1998.

[108] Langer, J. S.: *Microstructural shear localization in plastic deformation of amorphous solids.* Phys. Rev. E, 64:011504, 2001.

[109] Falk, M. L., J. S. Langer und L. Pechenik: *Thermal effects in the shear-transformation-zone theory of amorphous plasticity: Comparisons to metallic glass data.* Phys. Rev. E, 70:011507, 2004.

[110] Khonik, V. A., A. T. Kosilov, V. A. Mikhailov und V. V. Sviridov: *Isothermal creep of metallic glasses: A new approach and its experimental verification.* Acta Mater., 46:3399–3408, 1998.

[111] Khonik, V. A.: *The Kinetics of Irreversible Structural Relaxation and Homogeneous Plast Flow of Metallic Glasses.* phys. stat. sol. (a), 177:173–189, 2000.

[112] Persson, B. N. J.: *Theory of time-dependent plastic deformation in disordered solids.* Phys. Rev. B, 61:5949–5966, 2000.

[113] Huang, R., Z. Suo, J. H. Prevost und W. D. Nix: *Inhomogeneous deformation in metallic glasses.* J. Mech. and Phys. Solids, 50:1011–1027, 2002.

[114] Berthier, L., J.-L. Barrat und J. Kurchan: *A two-time-scale, two-temperature scenario for nonlinear rheology.* Phys. Rev. E, 61:5464–5472, 2000.

[115] Berthier, L. und J.-L. Barrat: *Nonequilibrium dynamics and fluctuation-dissipation relation in a sheared fluid.* J. Chem. Phys., 116:6228–6242, 2002.

[116] Berthier, L. und J.-L. Barrat: *Shearing a Glassy Material: Numerical Test of Nonequilibrium Mode-Coupling Approaches and Experimental Proposals.* Phys. Rev. Lett., 89:095702, 2002.

[117] Lippert, T., G. Bali, N. Eicker, L. Giusti, U. Glassner, S. Gusken, H. Hoeber, P. Lacock, G. Martinelli, F. Rapuano, G. Ritzenhofer, K. Schilling, G. Siegert, A. Spitz, P. Ueberholz und J. Viehoff: *SESAM and TχL Results for Wilson Action–A Status Report.* Nuclear Phys. B, 60:311–343, 1998.

[118] Fukushige, T. und D. C. Heggie: *Pre-collapse evolution of galactic globular clusters.* Monthly Notices Roy. Astronom. Soc., 276:206–218, 1995.

[119] Car, R. und M. Parinello: *Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory.* Phys. Rev. Lett., 55:2471–2474, 1985.

[120] Hausleitner, C. und J. Hafner: *Nybridized nearly-free-electron tight-binding-bond appraoch to interatomic forces in disordered transition-metal alloys. I. Theory.* Phys. Rev. B, 45:115–127, 1992.

[121] Payne, M., M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias und J. D. Joannopoulos: *Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients.* Rev. Mod. Phys., 64:1045–1097, 1992.

[122] Rössler, U.: *Interatomare Potentiale und Simulationen der Schmelzen und Gläser von Übergangsmetallen und Legierungen.* Dissertation, Institut für Materialphysik, Georg-August-Universtität Göttingen, 1995.

[123] Lennard-Jones, J. E.: *On the Determination of Molecular Fields — II. From the equation of States of a Gas.* Proc. Roy. Soc. Lond. A, 106:463–477, 1924.

[124] Rahman, A.: *Correlation in the motion of atoms in liquid Argon.* Phys. Rev., 136:A405–A411, 1964.

[125] Verlet, L.: *Computer 'Experiments' on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules.* Phys. Rev., 159:98–103, 1967.

[126] Yonezawa, F.: *Glass Transition and Relaxation of Disordered Structures.* In: Ehrenreich, H. und D. Turnbull (Herausgeber): *Solid State Phys.*, Band 45 der Reihe *Advances in Research and Applications*, Seiten 179–287. Academic Press, Inc, 1991.

[127] Weber, T. A. und F. H. Stillinger: *Local order and structural transitions in amorphous metal-metalloid alloys.* Phys. Rev. B, 31:1954–1963, 1985.

[128] Teichler, H.: *Configuration Dynamics in a Simulated Finite-Temperature Transition Metal Glass.* Phys. Stat. Sol. (b), 172:325–335, 1992.

[129] Hausleitner, C. und J. Hafner: *Hybridized nearly-free-electron tight-binding-bond approach to interatomic forces in disordered transition-metal alloys. II. Modeling of metallic glasses.* Phys. Rev. B, 45:128–142, 1992.

[130] Finnis, M. W.: *The energy and elastic constants of simple metals in terms of pairwise interactions.* J. Phys. F, 4:1645–1656, 1974.

[131] Böddeker, B.: *Oberflächennahe Dynamik amorpher, freistehender, metallener $Ni_{0,5}Zr_{0,5}$-Filme in der Molekulardynamik-Simulation.* Dissertation, Institut für Materialphysik, Georg-August-Universität Göttingen, 1999.

[132] Böddeker, B. und H. Teichler: *PARALLEL OBJECT ORIENTED MD SIMULATION PROGRAM FOR LONG TIME SIMULATIONS OF METALLIC GLASSES*

AND UNDERCOOLED LIQUIDS. In: Esser, R., P. Grassberger, J. Grotendorst und M. Lewerenz (Herausgeber): *MOLECULAR DYNAMICS ON PARALLEL COMPUTERS.* World Scientific, 1999.

[133] Aspelmeier, T.: *MD-Simulationen eines NiZr-Glases: Aspekte des Glasüberganges, der Kristallisation und mechanischer Eigenschaften.* Diplomarbeit, Institut für Materialphysik, Georg-August-Universität Göttingen, 1995.

[134] Stroustrup, Bjarne: *Die C++ Programmiersprache.* Addison-Wesley Verlag, München, 4. Auflage, 2000.

[135] Sadus, R. J.: *Molecular Simulation of Fluids. Theory, Algorithms and Object-Orientation.* Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1999.

[136] Haney, Scott W.: *Is C++ fast enough for scientific computing?* Comput. Phys., 8(6):690–694, 1994.

[137] Kirby, R. C.: *A New Look at Expression Templates for Matrix Computation.* Computing in Science and Engineering, 5(3):66–70, May/June 2003.

[138] Veldhuizen, T. L. und M. E. Jernigan: *Will C++ be faster than Fortran?* In: *Proceedings of the 1st International Scientific Computing in Object-Oriented Parallel Environments (ISCOPE'97)*, Lecture Notes in Computer Science. Springer-Verlag, 1997.

[139] Veldhuizen, Todd L.: *Scientific Computing: C++ Versus Fortran: C++ has more than caught up.* Dr. Dobb's Journal of Software Tools, 22(11):34, 36–38, 91, November 1997.

[140] Kale, L., R. Skeel, M. Bhandarkar, R. Brunner, A. Gursoy, N. Krawetz, J. Phillips, A. Shinozaki, K. Varadarajan und K. Schulten: *NAMD2 : Greater scalability for parallel molecular dynamics.* Journal of Computational Physics, 151:283–312, 1998.

[141] `http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/`.

[142] Plimpton, S. J.: *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics.* Journal of Computational Physics, 117:1–19, 1995.

[143] `http://www.cs.sandia.gov/~sjplimp/lammps.html`.

[144] Forum, Message Passing Interface: *MPI: A Message-Passing Interface Standard.* Technischer Bericht UT-CS-94-230, 1994.

[145] Desplat, J. C.: *Porting SHMEM codes to MPI-2.* Technical Report, EPCC-TR01-01, Universiä Edinburgh, June 2001.

[146] Barriuso, R. und A. Knies: *SHMEM user's guide, revision 2.0.* Technical Report, Cray Research Inc., Mendota Heights, MN, May 1994.

[147] MPIF, Message Passing Interface Forum: *MPI-2: Extensions to the Message-Passing Interface.* Technical Report, University of Tennessee, Knoxville, 1996.

[148] Berendsen, H. J. C., J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola und J. R. Haak: *Molecular dynamics with coupling to an external bath.* J. Chem. Phys., 81(8):3684–3690, 1984.

[149] Kimura, M. und F. Yonezawa: *Computer Glass Transition.* In: Yonezawa, F. und T. Ninomiya (Herausgeber): *Topological Disorder in Condensed Matter*, Band 46 der Reihe *Springer Series in Solid-State Sciences*, Seiten 80–109. Springer, Berlin / New York / London, 1983.

[150] Wendt, H. R. und F. F. Abraham: *Empirical Criterion for the Glass Transition Region Based on Monte Carlo Simulations.* Phys. Rev. Lett., 20:1244–1246, 1978.

[151] Basak, S., R. Clarke und S. R. Nagel: *Pair distribution function and its relation to the glass transition in an amorphous alloy.* Phys. Rev. B, 20(8–15):3388–3390, 1979.

[152] Barber, C. B., D. P. Dobkin und H. Huhdanpaa: *The Quickhull Algorithm for Convex Hulls.* ACM Transactions on Mathematical Software, 22(4):469–483, 1996.

[153] Steinhardt, P. J., D. R. Nelson und M. Ronchetti: *Bond-orientational order in liquids and glasses.* Phys. Rev. B, 28, 1983.

[154] Ladadwa, I. und H. Teichler: *Low-frequency dynamical heterogeneity in simulated amorphous $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$ below its glass temperature: Correlations with cage volume and local order fluctuations.* Phys. Rev. E, 73:031501, 2006.

[155] Egami, T., K. Maeda und V. Vitek: *Structural defects in amorphous solids. A computer simulation study.* Phil. Mag. A, 41:883–901, 1980.

[156] Born, M. und K. Huang: *Dynamical Theory of Crystal Lattices.* Clarendon Press, Oxford, 1954.

[157] Strolovitz, D., K. Maeda, V. Vitek und T. Egami: *Structural defects in amorphous solids. Statistitcal analysis of a computer model.* Phil. Mag. A, 44(4):847–866, 1981.

[158] Zhou, M.: *A new look at the atomic level virial stress: on continuum-molecular system equivalence.* Proc. R. Soc. Lond. A, 459:2347–2392, 2003.

[159] *Fatigue of materials.* Cambridge Solid State Science Series. Cambridge University Press, 1991.

[160] Paul, B.: *Macroscopic Criteria for Plastic Flow and Brittle Fracture.* In: Liebowitz, H. (Herausgeber): *Fracture An Advanced Treatise*, Band 2, Kapitel 4, Seiten 315–489. Academic Press, New York, 1968.

[161] Drucker, D. C. und W. Prager: *Soil Mechanics and plastic analysis or limit design.* Q. Appl. Math., 10(2):157–165, 1952.

[162] Rottler, J. und M. O. Robbins: *Yield conditions for deformation of amorphous polymer glasses.* Phys. Rev. E, 64:051801, 2001.

[163] Rottler, R. und M. O. Robbins: *Shear yielding of amorphous glassy solids: Effect of temperature and strain rate.* Phys. Rev. E, 68:011507, 2003.

[164] Lund, A. C. und C. A. Schuh: *Yield surface of a simulated metallic glass.* Acta Mater., 51:5399–5411, 2003.

[165] Lund, A. C. und C. A. Schuh: *Strength asymmetry in nanocrystalline metals under multiaxial loading.* Acta Materialia, 53:3193–3205, 2005.

[166] Bruck, H. A., T. Christman, A. J. Rosakis und W. L. Johnson: *Quasi-static Constitutive Behavior of* $Zr_{41.25}Ti_{13.75}Ni_{10}Cu_{12.5}Be_{22.5}$ *Bulk Amorphous Alloys.* Scripta Metall. Mater., 30:429–434, 1994.

[167] Vaidyanathan, R., M. Dao, G. Ravichandran und S. Suresh: *Study of Mechanical Deformation in Bulk Metallic Glass through Instrumented Indentation.* Acta Mater., 49:3781–3789, 2001.

[168] Schwarz, R. B.: *Bulk Amorphous Alloys.* In: Westbrook, J. H. und R. L. Fleischer (Herausgeber): *Intermetallic Compounds*, Band 3, Seiten 681–705. John Wiley & Sons, Ltd, 2002.

[169] Mann, H. B. und D. R. Whitney: *On a test of wheter one of two variables is stochastically larger than the other.* Ann. Math. Statist., 18:50–60, 1947.

[170] R Development Core Team: *R: A language and environment for statistical computing.* R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2004. 3-900051-07-0.

[171] Hollander, M. und D. A. Wolfe: *Nonparametric Statistical Methods.* John Wiley & Sons, New York, 1973.

[172] Conover, W. J.: *Practical nonparametric statistics.* John Wiley & Sons, New York, 1971.

[173] Zöfel, P.: *Statistik in der Praxis.* Gustav Fischer Verlag, Stuttgart, 1985.

[174] Bronstein, I. N. und K. A. Semendjajew: *Taschenbuch der Mathematik.* B. G. Teubner Verlagsgesellschaft Stuttgart, 1991.

[175] Dennis Jr., J. E., D. M. Gay und R. E. Welsch: *An Adaptive Nonlinear Least-Squares Algorithm.* ACM Trans. Math. Softw., 7, 1981.

[176] Kawamura, Y., T. Shibata, A. Inoue und T. Masumoto: *Deformation behavior of $Zr_{65}Al_{10}Ni_{10}Cu_{15}$ glassy alloy with wide supercooled liquid region.* Appl. Phys. Lett., 69:1208–1210, 1996.

[177] Kawamura, Y., T. Shibata, A. Inoue und T. Masumoto: *Stress overshoot in stress-strain curves of $Zr_{65}Al_{10}Ni_{10}Cu_{15}$ metallic glass.* Appl. Phys. Lett., 71:779–789, 1997.

[178] Kato, H. and Kawamura, Y. and Inoue, A. and Chen, H. S.: *Newtonian to non-Newtonian master flow curves of bulk glass alloy $Pd_{40}Ni_{10}Cu_{30}P_{20}$.* Appl. Phys. Lett., 73:3665–3667, 1998.

[179] Tabor, D.: *Gases, liquids and solids.* Cambridge University Press, 1979.

[180] Texier, M., J. Bonneville, A. Proult, J. Rabier, N. Baluc und P. Guyot: *On the yield point of icosahedral AlCuFe quasicrystals.* Scripta Mater., 49:41–46, 2003.

[181] Simmons, J. H., R. K. Mohr und C. J. Montrose: *Non-Newtonian viscous flow in glass.* J. Appl. Phys., 53:4075–4080, 1982.

[182] Crist, B.: *Plastic Deformation of Polymers.* In: Thomas, E. L. (Herausgeber): *Structure and Properties of Polymers*, Band 12 der Reihe *Materials Science and Technology*, Seiten 427–469. VCH, Weinheim, 1993.

[183] Lin, F.: *Materialmodelle und Querschnittsverhalten von Stahlbetonbauteilen unter extrem dynamischer Beanspruchung.* Dissertation, Institut für Konstruktiven Ingernieurbau, Ruhr-Universität Bochum, 2004.

[184] Malandro, D. L. und D. J. Lacks: *Relationships of shear-induced changes in the potential energy landscape to the mechanical properties of ductile glasses.* J. Chem. Phys., 110:4593–4601, 1999.

[185] Utz, M., P. G. Debenedetti und F. H. Stillinger: *Atomistic Simulation of Aging and Rejuvenation in Glasses.* Phys. Rev. Lett., 84:1471–1474, 2000.

[186] Demkowicz, M. J. und A. S. Argon: *High-Density Liquidlike Component Facilitates Plastic Flow in a Model Amorphous Silicon System.* Phys. Rev. Lett., 93:025505, 2004.

[187] Bailey, N. P., J. Schiøtz und K. W. Jacobsen: *Atomistic simulations of Mg-Cu metallic glasses: mechanical properties.* Mater. Sci. Eng. A, 387–389:996–1000, 2004.

[188] Albano, F. und M. L. Falk: *Shear softening and structure in a simulated three-dimensional binary glass.* J. Chem. Phys., 122:154508, 2005.

[189] Shi, Y. und M. L. Falk: *Strain Localization and Percolation of Stable Structure in Amorphous Solids.* Phys. Rev. Lett., 95:095502, 2005.

[190] Hey, P. de, J. Sietsma und A. van den Beukel: *Structural disordering in amorphous $Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$ induced by high temperature deformation.* Acta Mater., 46:5873–5882, 1998.

[191] Safarik, D. J., C. M. Cady und R. B. Schwarz: *Shear processes in bulk metallic glasses.* Acta Mater., 53:2193–2202, 2005.

[192] Struik, L. C. E.: *Physical Aging in Amorphous Polymers and Other Materials.* Elsevier, Amsterdam, 1978.

[193] McKenna, G. B.: *Mechanical rejuvenation in polymer glasses: fact of fallacy?* J. Phys.: Condens. Matter, 15:S737–S763, 2003.

[194] Lacks, D. J. und M. J. Osborne: *Energy Landscape Picture of Overaging and Rejuvenation in a Sheared Glass.* Phys. Rev. Lett., 93:255501, 2004.

[195] Cao, Q., J. Li, Y. Zhou und J. Jiang: *Mechanically driven phase separation and corresponding microhardness change in $Cu_{60}Zr_{20}Ti_{20}$ bulk metallic glass.* Appl. Phys. Lett., 86:081913, 2005.

[196] Chen, H. S., H. Kato und A. Inoue: *A fictive Stress Model and Nonlinear Viscoelastic Behaviors in Metallic Glasses.* Mater. Trans., 42:597–605, 2001.

[197] Demetriou, M. D. und W. L. Johnson: *A free-volume model for the rheology of undercooled $Zr_{41.25}Ti_{13.75}Cu_{12.5}Ni_{10}Be_{22.5}$ liquid.* Scripta Mater., 52:833–837, 2005.

[198] Khonik, V. A., K. Kitagawa, V. A. Mikhailov und A. Y. Vinogradov: *The role of structural relaxation in the plastic flow of metallic glasses.* J. Appl. Phys., 83:5724–5731, 1998.

[199] Johnson, W. L.: *Bulk glass-forming metallic alloys: Science and technology.* MRS Bull., 24:42–56, 1999.

[200] Johnson, W. L.: *Bulk Amorphous Metal: An Emerging Engineering Material.* JOM, 54:40–43, 2002.

[201] Li, J., Z. L. Wang und T. C. Hufnagel: *Characterization of nanometre-scale defects in metallic glasses by quantitative high-resolution transmission electron microscopy.* Phys. Rev. B, 65:144201, 2002.

[202] Li, J., F. Spaepen und T. C. Hufnagel: *Nanometre-scale defects in shear bands in al metallic glass.* Phil. Mag. A, 82:2623–2630, 2002.

[203] Deng, Y., L. He, Q. Zhang, H. Zhang und H. Ye: *Deformation-induced Structural Changes in Bulk Metallic Glass at Room Temperature.* Adv. Eng. Materials, 5:738–741, 2003.

[204] Morrison, M. L., B. Yang, C. T. Liu, P. .K Liaw, R. A. Buchanan, C. A. Carmichael und R. V. Leon: *In Situ Thermographic Imaging of Shear Bands During Tensile Testing.* `http://www.math.mtu.edu/~feigl/BMG/PRL_Morrison.pdf`.

[205] Luo, W. K., H. W. Sheng, F. M. Alamgir, J. M. Bai, J. H. He und E. Ma: *Icosahedral Short-Range Order in Amorphous Alloys.* Phys. Rev. Lett., 92:145502, 2004.

[206] Jiang, W. H., Pinkerton F. E. und M. Atzmon: *Mechanical behavior of shear bands and the effect of their relaxation in a rolled amorphous Al-based alloy.* Acta Mat., 53:3469–3477, 2005.

[207] Bailey, N. P., J. Schiøtz und K. W. Jacobson: *Atomistic simulation study of the shear-band deformation mechanism in Mg-Cu metallic glasses.* Phys. Rev. B, 73:064108, 2006.

[208] Shi, Y. und M. L. Falk: *Atomic-scale simulations of strain localization in three-dimensional model amorphous solids.* Phys. Rev. B, 73:214201, 2006.

[209] Donovan, P. E.: *A yield criterion for $Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$ metallic glass.* Acta Mater., 37:445–456, 1989.

[210] F., Zhang Z., J. Eckert und L. Schultz: *Difference in compressive and tensile facture mechanisms of $Zr_{59}Cu_{20}Al_{10}Ni_8Ti_3$ bulk metallic glass.* Acta Mater., 51:1167–1179, 2002.

[211] Johnson, W. L. und K. Samwer: *A Universal Criterion for Plastic Yielding of Metallic Glasses with a $(T/T_g)^{2/3}$ Temperature Dependence.* Phys. Rev. Lett., 95:195591, 2005.

[212] Rubin, J. B. und R. B. Schwarz: *Shear modulus of coevaporated $Ni_{1-x}Zr_x$ thin films.* Phys. Rev. B, 50:795–804, 1994.

[213] Stephens, M. A.: *Tests based on EDF statistics.* In: D'Agostino, R. B. und M. A. Stephens (Herausgeber): *Goodness-of-Fit Techniques.* Marcel Dekker, New York, 1986.

[214] Thode Jr., H. C.: *Testing for Normality.* Marcel Dekker, New York, 2002.

[215] Starr, F. W., S. Sastry, J. F. Douglas und S. C. Glotzer: *What Do We Learn from the Local Geometry of Glass-Forming Liquids?* Phys. Rev. Lett., 89:125501, 2002.

[216] Sheng, H. W. und E. Ma: *Atomic packing of the inherent structure of simple liquids.* Phys. Rev. E, 69:062202, 2004.

[217] Box, G. E. P. und D. R. Cox: *An Analysis of Transformations.* J. of the Royal Stat. Soc. B, 26(2):211–252, 1964.

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich ganz besonders bei meinem Doktorvater Prof. Dr. Helmar Teichler bedanken. Zum einem für seine immer vorhandene Bereitschaft zur (nicht ausschließlich) wissenschaftlichen Diskussion und seine vielen guten Ratschläge. Zum anderen dafür, dass er mir die Freiheit gegeben hat, mich meinen wissenschaftlichen Interessen entsprechend weiterzubilden, auch wenn einiges davon nicht Gegenstand meiner Doktorarbeit wurde.

Des Weiteren möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Konrad Samwer für die Übernahme des Korreferats bedanken.

Für die Bereitstellung von Parallelrechnerkapazitäten der GWDG und für die Unterstützung bei Problemen der Implementierung geht ein besonderer Dank an Prof. Dr. Oswald Haan.

Ein Großteil der in dieser Arbeit besprochenen Simulationen wurde auf Großrechnern des Forschungszentrums Jülich durchgeführt, weshalb ich an dieser Stelle für die Bereitstellung dieser Ressourcen danken möchte.

Der Arbeitsgruppe Theorie danke ich für eine unvergessliche Zeit. Darunter den aktuellen Mitgliedern Hamid, Jörg, Diana, Xiujun und Imad sowie den ehemaligen Mitstreitern Benny, Bert und Boris. Es hat wirklich Spaß gemacht, in unserer multikulturellen Arbeitsgemeinschaft zu forschen, Blödsinn zu machen, Probleme verschiedenster Art zu besprechen (und des Öfteren auch zu lösen) oder Kaffee zu trinken (soviel wie die Maschine hergab).

Bei den Netzwerk-Administratoren Kai Nörthemann, Thorsten Scharf und Denny Wagner möchte ich mich für eine interessante, konstruktive Zusammenarbeit bedanken, bei der nicht die Physik im Mittelpunkt stand.

Ein weiteres Dankeschön geht an Karin Ahlborn, Michael Hey und Dieter Bollensen für die technische Unterstützung bei Problemen mit Versuch 9 (des materialphysikalischen Praktikums) und Frank Köhler für die Hilfe bei defekten Fahrradachsen oder Türschlossblechen.

Ingeborg Saalfeld, Christine Kuba, Karin Haacke und Hue-Phong Quan gebührt ein großer Dank für die Unterstützung bei verschiedenen Problemen während meiner Zeit im Institut, vor allem für die tatkräftige Hilfe beim Ausfüllen jedweder Formulare.

Das Institutsleben wäre nur halb so schön gewesen, hätte es nicht die vielen anderen Kollegen (auch in anderen Gruppen) gegeben, bei denen ich mich bedanken möchte. Inbesondere bei: Sebastian Dreyer (als *Braindead* hätten wir fast dreimal in Folge den Meistertitel im Fakultätskickerturnier feiern können), Joachim Bankmann ("*Willste 'ne Packung?*"), Jörg Hoffmann, Erik Sueske sowie Karola und Carsten Herweg.

Ein ganz herzliches Dankeschön geht an meine Frau Silke, die mit ihrer Geduld und ihrem Verständnis in der langen Zeit maßgeblich zu einem Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat. Auch meiner Familie möchte ich für die (nicht nur finanzielle) Unterstützung in den letzten Jahren danken, da mein Studium ohne sie nicht so hätte verlaufen können, wie es das getan hat.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Kevin Brinkmann
Geburtstag	28. 5. 1973
Geburtsort	Bückeburg (Niedersachsen)
Familienstand	verheiratet
Nationalität	deutsch

Schulbildung

1980 – 1984	Grundschule Obernkirchen
1984 – 1993	Ratsgymnasium Minden (Leistungskurse Mathematik und Sozialwissenschaften)

Zivildienst

09/1993 – 11/1994	Diakonie-Sozialstation Bad Eilsen (häusliche Alten- und Krankenpflege)

Hochschulstudium

1995 – 2000	Diplomstudiengang Physik, Universität Göttingen Studienschwerpunkte: Festkörperphysik, Materialphysik Diplomarbeit: Molekulardynamik-Simulationen zur plastischen Verformung metallener Gläser am Beispiel des $Ni_{50}Zr_{50}$-Systems, Institut für Materialphysik
11/2000	Abschluss: Diplom (Note „sehr gut”)
seit 01/2001	Promotionsstudiengang Physik, Universität Göttingen wissenschaftlicher Mitarbeiter des Instituts für Materialphysik Arbeitsgruppe Theorie unter Prof. Dr. H. Teichler Dissertation: Verformungsinduzierte Strukturänderungen bei amorphem $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$ in Molekulardynamik-Simulationen Abschluss: Promotion November 2006