



بررسی تغییر شکل خرشی در آبرآلیاژهای تک کریستالی پایه نیکل با استفاده از پلاستیسیته نابجایی‌های گسسته

سیامک سلیمانی شیشوان

استادیار، مهندسی سازه، دانشگاه تبریز، تبریز
sshishvan@tabrizu.ac.ir *تبریز، صندوق پست ۵۱۶۶۶۱۶۴۷۱

چکیده

خرش در دمای بالا در آبرآلیاژهای تک کریستالی پایه نیکل با استفاده از پلاستیسیته نابجایی‌های گسسته مورد بررسی قرار می‌گیرد. برای این منظور، یک مدل سلول واحد دو بعدی از میکرو ساختار آبرآلیاژ تحت تنش تک محوری ثابت استفاده می‌شود که مشکل از فاز گاما (به صورت ماتریس) و فاز گامایپریم (به صورت ذره) می‌باشد. در حالی که تغییر شکل در فاز گاما به صورت الاستیک و پلاستیک ناشی از حرکت گلاید و صعود نابجایی‌ها می‌باشد، تغییر شکل در فاز گامایپریم ترکیب رفتار الاستیک و نفوذ سطحی (در سطح مابین فازها) می‌باشد. حرکت صعود نابجایی‌ها هم درگیر با نفوذ نهی جایی‌ها می‌باشد که به صورت صریح در نظر گرفته شده‌اند. این مدل، علاوه بر اینکه توصیف مناسبی از شروع مرحله سوم خرش در آبرآلیاژها برای شرایط دمایی و تشیی متوسط را ارائه می‌دهد، بررسی اثر پارامترهای مانند درصد حجمی ذرات گامایپریم را در رفتار خرشی آبرآلیاژها فراهم می‌نماید. شبیه‌سازی‌های صورت گرفته برای سه مقدار درصد حجمی ذرات گامایپریم نشان می‌دهد که این پارامتر نقش مهمی در مقاومت خرشی آبرآلیاژها دارد. نتایج حاصل از این تحقیق می‌توانند در معادلات ساختاری مربوط به مدل‌سازی‌های کانتینیومی از اجزای سازه‌ای مورد استفاده قرار گیرد.

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل	دریافت: ۲۹ فوریه ۱۳۹۶
پذیرش: ۲۲ خرداد ۱۳۹۶	ارائه در سایت: ۲۲ تیر ۱۳۹۶
کلید واژگان:	آبرآلیاژ تک کریستالی
	خرش در دمای بالا
	دینامیک نابجایی‌های گسسته
	نفوذ نهی جایی
	نفوذ سطحی

Discrete dislocation plasticity investigation of creep deformation in nickel-based single crystal superalloys

Siamak Soleimani Shishvan*

Department of Structural Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran.
*P.O.B. 5166616471, Tabriz, Iran, sshishvan@tabrizu.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 18 April 2017
Accepted 19 June 2017
Available Online 13 July 2017

Keywords:
Single crystal superalloy
High temperature creep
Discrete dislocation plasticity
Vacancy diffusion
Interfacial diffusion

ABSTRACT

High temperature creep in nickel-based superalloys is investigated by discrete dislocation plasticity (DDP). A two-dimensional unit cell model representing micro-structure of superalloy and comprising γ' particles in γ matrix phase is considered under uniaxial constant stress loading. While plastic deformation of γ phase occurs by a combination of dislocation glide and dislocation climb coupled to the diffusion of vacancies, elastic γ' particles undergo deformation due to the stress-driven interfacial diffusion at the γ/γ' interfaces in addition to bulk elastic deformation. It is noted that diffusion of vacancies is explicitly considered where local concentration of vacancies determines climb of dislocations. This model predicts the onset of tertiary creep in superalloys as extensively observed in experiments for commercially important nickel-based superalloys at moderate stress and temperature levels. Possible associated mechanisms are accordingly discussed. Moreover, effects of parameters such as volume fraction of γ' particles are studied and discussed. Superalloys with three values for volume fraction of γ' particles are investigated and obtained results indicate that the volume fraction of γ' particles plays an important role in the creep behaviour of superalloys. Results of this study can be used in a continuum constitutive rule to investigate structural components under operational conditions.

تقریباً مکعبی شکل نیکل آلومینیايد (Ni_3Al)، فاز گامایپریم) با درصد حجمی بالا می‌باشد. سطح مابین فازها^۱ به صورت منسجم^۲ می‌باشد و از عناصری مانند Cr, Co, Mo, Re, W و Ru با درصد نسبتاً پایین برای بهبود رفتار این آلیاژها برهه برده شود [2,1]. به طور کلی، نحوه طراحی مواد و فرآیند ساخت آبرآلیاژها با استفاده از یافته‌های تجربی و روش‌های آزمون و خطا

آبرآلیاژهای تک کریستالی پایه نیکل به صورت عمده در پرهای موتورهای هوایپیما و توربین‌های گازی که در دمای بالا کار می‌کنند مورد استفاده قرار می‌گیرند و رفتار خرشی این آبرآلیاژها غالباً تعیین کننده عمر سرویس دهی اجزای مورد نظر می‌باشد. میکروساختار آن‌ها به طور تقریبی از دو فاز تشکیل شده است به طوری که یک ماتریس نیکل (Ni)، فاز گاما) در برگیرنده‌ی ذرات

۱- مقدمه

¹ Interface
² Coherent

Please cite this article using:

S. Soleimani Shishvan, Discrete dislocation plasticity investigation of creep deformation in nickel-based single crystal superalloys, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 7, pp. 171-179, 2017 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

www.mme.ir

ساختار مقاله مطابق زیر می‌باشد. در بخش ۲، مدل‌سازی آبرآلیاژها توسط روش DDP که در آن نفوذ سطحی نیز اعمال شده به صورت اجمالی بیان می‌شود. پارامترهای مادی و مدل‌سازی در بخش ۳ آورده می‌شود. در بخش ۴، نتایج عددی به همراه بحث‌های مربوطه ارائه می‌گردد.

2- مدل‌سازی آبرآلیاژها توسط روش DDP

روش‌های محاسباتی مختلفی جهت بررسی ساختار و حرکت نابجایی‌های منفرد تهیه و ارایه شده است [13]. نابجایی‌ها به عنوان اصلی ترین عامل در پلاستیسیته کریستالی شناخته شده‌اند و دینامیک دسته جمعی آنها پاسخ مواد به شرایط بارگذاری مختلف را تعیین می‌کند. در این خصوص روش دینامیک نابجایی‌ها برای بررسی دینامیک مجموعه‌ای از نابجایی‌ها پایه‌بریزی شده است. مسلماً، شبیه‌سازی دینامیک نابجایی‌ها یک روش افزایشی (در زمان) خواهد بود به طوری که در هر گام زمانی میدان‌های مربوطه محاسبه می‌شوند و متعاقب آن ساختار نابجایی‌ها به روز می‌شود. بنابراین، هدف در این روش، تعیین تغییر و تکامل (شبه استاتیکی) تغییرشکل و حالت تنش برای یک جامد دارای نابجایی به ازای یک تاریخچه بارگذاری اعمالی است.

شبیه‌سازی دینامیک نابجایی‌ها در ادبیات فنی به صورت دو بعدی و سه بعدی گزارش شده است. نابجایی‌ها که در اصل به صورت نقص‌های خطی با بردار برگز آمیخته هستند، در یک مدل دو بعدی (به عنوان نمونه [14,15]) به صورت نابجایی‌هایی که خط نابجایی عمود بر صفحه مورد مطالعه است در نظر گرفته می‌شوند. عموماً شرایط کرنش مسطح برای مدل‌سازی‌های دو بعدی استفاده شده است و برای این شرایط از نابجایی‌های لبه‌ای استفاده می‌شود. نابجایی‌ها می‌توانند با توجه به سیستم لغزش مفروض حرکت کنند و اندرکنش نابجایی‌ها و تغییر در ساختار آن‌ها توسط یکسری قوانین ساختاری از پیش تعیین شده کنترل می‌شوند. علیرغم این که با این روش دو بعدی تعدادی از عوامل فیزیکی پلاستیسیته کریستالی قابل حصول است ولی با این حال رفتار واقعی نابجایی‌ها توسط عوامل دخیل در اندرکنش سه بعدی نابجایی‌ها کنترل می‌شود.

مدل‌های سه بعدی دینامیک نابجایی‌ها (به عنوان نمونه [17,16]) با استفاده از ابزار محاسباتی بسیار قوی در صدد برآورد نتایج واقعی (اما محدود) برآمده‌اند. این مدل‌ها با محدودیت محاسباتی روبرو هستند به طوری که در مرجع [17]، نتایج مدل سه بعدی دینامیک نابجایی‌ها برای یک سلول پریودیک از ماده در دمای پایین تحت کشش تک محوری تا کرنش کمتر از 2% و دانسیته نسبتاً کم نابجایی‌ها با استفاده از قوی ترین ابرایانه گزارش شده است.

با در نظر گرفتن این محدودیتها برای مدل‌های دو بعدی و سه بعدی، پیشنهاد شده است که در قالب مدل دو بعدی از فرآیندهای سه بعدی به صورت قوانین ساختاری استفاده شود تا هم عوامل فیزیکی واقعی تری در مدل دو بعدی لحاظ شوند و هم هزینه محاسبات کم شود [18]. در این روش‌ها، اندرکنش‌های با برد دور بین نابجایی‌ها به صورت مستقیم با استفاده از تئوری الاستیسیته در نظر گرفته می‌شوند ولی یکسری قوانین ساختاری لازم هستند تا حرکت نابجایی (گلایید و صعود)، تولید نابجایی، انهدام نابجایی و سایر اندرکنش‌های کوتاه برد مانند قفل شدگی نابجایی با نابجایی‌ها یا با موانع را بیان نمایند.

یکی از اولین کاربردهای روش DDP، بررسی تغییرشکل کامپوزیت‌های با ماتریس تک کریستالی شامل ذره‌های الاستیک بوده است [10] که در آن حرکت گلایید نابجایی‌ها در نظر گرفته شده بود. در نظر گرفتن امکان صعود

صورت می‌گیرد که بسیار برهزینه می‌باشد و در آزمایشگاه‌های پیشرفته امکان پذیر هستند. یکی از راه‌های کاهش هزینه در روند طراحی، استفاده از پیش‌بینی‌های رفتار ماده توسط روش‌های چند مقیاسی و میکرومکانیکی به عنوان یک "راهنما" می‌باشد. در تحقیق حاضر نیز از روش پلاستیسیته نابجایی‌های گستته^۱ به عنوان یک روش میکرومکانیکی برای پیش‌بینی رفتار آبرآلیاژهای تک کریستالی پایه نیکل استفاده می‌شود.

مکانیسم تغییرشکل عمومی که برای یک آبرآلیاژ دوفازی با توجه به میکروساختار آن در آزمایشات خزش در دمای بالا گزارش شده [3]، به این صورت است که تغییرشکل در فاز گاما عمدتاً به صورت پلاستیک و در فاز گام‌پریم به صورت الاستیک است. همچنین ملاحظه شده است که، رفتار خزشی آبرآلیاژهای تک کریستالی وابسته به مقدار تنش و دما می‌باشد به طوری که در هر محدوده‌ی تنشی و دمایی، مکانیسم‌های تغییرشکل تغییر می‌کند [3,1] (به شکل‌های 3.51 و 3.52 رجوع شود). در تنش‌های بالا (بیشتر از 700 MPa) و دماهای پایین (کمتر از 800 °C) وقوع برش در ذره‌ها توسط نابجایی‌ها مشاهده شده است و در منحنی خزش عمدتاً شاهد مرحله اول^۲ هستیم [3]. در تنش‌های پایین (کمتر از 200 MPa) و دماهای بالا (بیشتر از 1000 °C) پدیده‌ی رفتینگ^۳ وجود می‌آید و منحنی خزش شامل مرحله اول و مرحله دوم^۴ می‌باشد [3]. در محدوده‌ی تنشی و دمایی مابین این دو حالت، مشخصه منحنی خزش به این صورت است که پس از مرحله اول خرش (که محدود ب کرنش‌های کوچک است)، عموماً کرنش خزشی همواره در حال افزایش است به طوری که منحنی وارد مرحله سوم^۵ می‌شود بدون اینکه شاهد خسارت خزشی در آبرآلیاژ باشیم. در این محدوده، منحنی‌وار شدن و دندانه دندانه شدن سطح مابین فازها نیز در آزمایشات مشاهده شده است [5,4] که به نفوذ آلومنیوم در مجاورت سطح مابین فازها در اثر تنش‌های ناشی از نابجایی‌ها نسبت داده است. هرچند، ارتباط این مکانیسم نفوذ سطحی^۶ به رفتار خزشی آبرآلیاژها به صورت آزمایشگاهی بررسی نشده است؛ اخیراً، شیشوان و همکاران [6] با استفاده از مدل‌سازی دینامیک نابجایی‌های گستته (DDP) شامل نفوذ سطحی (در سطح مابین فارهای) نشان داده‌اند که مکانیسم تغییرشکل ناشی از نفوذ آلومنیوم در شروع مرحله سوم منحنی خزش آبرآلیاژهای نیکل موثر است و در مقاله حاضر نیز از این فرمول‌بندی، که در مرجع [7] پایه‌بریزی شده، استفاده می‌شود (رجوع شود به بخش 2).

در صد حجمی ذرات فاز گام‌پریم، نقش مهمی در رفتار خزشی آبرآلیاژها دارد به طوری که با استفاده از بررسی‌های آزمایشگاهی می‌توان درصد حجمی بهینه برای داشتن رفتار مطلوب خزشی را تعیین نمود (به عنوان نمونه [8]). همچنین، در مدل‌های کانتینیومی پایه‌بریزی شده برای پیش‌بینی خزش آبرآلیاژها، درصد حجمی به عنوان یکی از پارامترهای مهم مطرح شده است (به عنوان نمونه [9])، با توجه به موقیت‌های روش DDP در بررسی مکانیسم‌های تغییرشکل کامپوزیت‌های دوفازی در دماهای پایین [10] و بالا [6,7,12,11]، در مقاله حاضر تاثیر درصد حجمی ذرات گام‌پریم در پاسخ خزشی آبرآلیاژ با استفاده از این روش مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در عین حال، تاثیر دانسیته منابع نابجایی‌ها نیز در آبرآلیاژها با مقادیر مختلف درصد حجمی ذرات گام‌پریم بررسی می‌شود.

¹ Discrete dislocation plasticity (DDP)

² Primary

³ Rafting

⁴ Secondary

⁵ Tertiary

⁶ Interfacial Diffusion

که $v_c^{(I)}$ ضریب دراگ گلاید می‌باشد. محاسبه سرعت صعود نابجایی γ' نسبتاً پیچیده می‌باشد چرا که به توزیع تهی جایی‌ها² در فاز گاما وابسته است. لازم به ذکر است که در نظر گرفتن حرکت صعود نابجایی‌ها در آتالیز دینامیک نابجایی‌ها، اولین بار در مرجع [20] ارائه شده است که در آن حرکت صعود مانند حرکت گلاید از یک قانون ساختاری به فرم رابطه دراگ خطی تعیین می‌کند و برای مدل‌سازی آبرآلیاژ نیز استفاده شده است [11]. متعاقباً از این رابطه دراگ خطی در حل مسائل مقدار مرزی با استفاده از روش DDP نیز بهره برده است [21,19].

لازم به ذکر است که استفاده از رابطه دراگ خطی برای صعود نابجایی‌ها باعث می‌شود که اثر صعود نابجایی‌ها در تغییرشکل کلی ماده به صورت دست بالا بروار شود [22]. در نظر گرفتن نفوذ تهی جایی‌ها در تعیین سرعت صعود نابجایی‌ها در مرجع [23] برای اولین بار وارد فرمول‌بندی DDP گردید که با استفاده از آن خوش در یک ماده تک کربیستال پیش‌بینی شد. در این فرمول‌بندی مساله نفوذ تهی جایی‌ها و دینامیک نابجایی‌ها در دو قالب زمانی مختلف حل می‌شود [24] و لذا درگیری کامل بین آن و در تعیین حرکت صعود نابجایی‌ها لحاظ نشده است. اخیراً در مرجع [25]، فرمول‌بندی درگیر³ برای این منظور ارائه شده است که قادر است مساله نفوذ تهی جایی‌ها و دینامیک نابجایی‌ها را به صورت درگیر حل نماید که در ادامه توضیح داده می‌شود.

طبق فرمول‌بندی [25]، سرعت صعود نابجایی I توسط شار تهی جایی‌ها $\dot{N}_{(v)}$ به داخل هسته نابجایی تعیین می‌شود به طوری که

$$v_c^{(I)} = -\frac{\Omega_{(v)} \dot{N}_{(v)}}{b^{(I)}} \quad (4)$$

که در آن $\Omega_{(v)}$ حجم اتمی تهی جایی و $b^{(I)}$ مقدار علامت‌دار بردار برگز نابجایی I می‌باشد. شار تهی جایی‌ها $\dot{N}_{(v)}$ بر حسب غلظت تهی جایی‌ها در موقعیت نابجایی I و مولفه صعود نیروی پیچ-کوهله تعیین می‌شود، یعنی [25]

$$\dot{N}_{(v)} = 2\pi r_c K \left[c_0 \exp\left(\frac{f_c^{(I)} \Omega_{(v)}}{b^{(I)} k T}\right) - c(x_i^{(I)}) \right] \quad (5)$$

که r_c شاعر ضبط⁴ نابجایی، K ثابت کنترل کننده شدت شار و c_0 غلظت اولیه تهی جایی‌ها در دمای T و در غیاب تنش است. غلظت

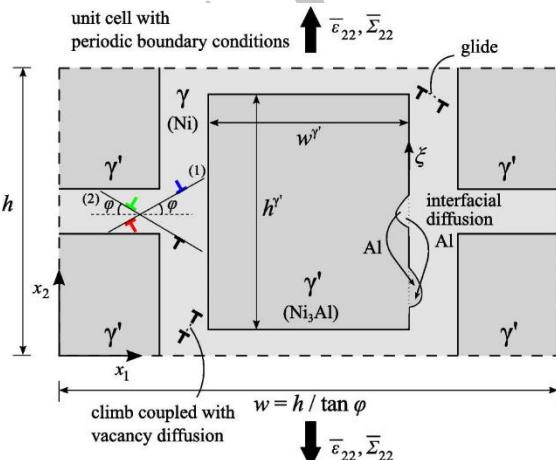


Fig. 1 A sketch showing the unit cell of the superalloy.

شکل 1 سلول واحد برای مدل‌سازی آبرآلیاژ به صورت شماتیک.

² Vacancies

³ Coupled formulation

⁴ Capture radius

نابجایی‌ها به همراه گلاید آنها در بررسی رفتار کامپوزیت‌ها در دماهای بالا نیز صورت پذیرفته است [12]. اخیراً، مکانیزم تغییرشکل در اثر نفوذ در سطوح مابین فازها نیز به فرمول بندی DDP اضافه شده است [7] و اثر آن در پیش‌بینی تغییرشکل خوش آبرآلیاژها مورد بررسی قرار گرفته است [6]. در ادامه با تمرکز بر کاربرد روش DDP در بررسی رفتار کامپوزیت‌ها در دمای بالا، جزئیات این روش ارائه می‌گردد.

مطابق "شکل 1"⁵، یک مدل دو بعدی در شرایط کرش مسطح به عنوان مدل سلول واحد آبرآلیاژ تک کربیستال پایه نیکل در نظر گرفته می‌شود که شامل ماتریس Ni (فاز گاما) و ذره‌های Ni₃Al (فاز گامایپریم) می‌باشد. سلول واحد مستطیل شکل با ابعاد $(h/\tan(\varphi)) \times h$ دارای ذرات الاستیک (فاز گامایپریم) مستطیلی با ابعاد $w^{(I)} \times h^{(I)}$ (با درصد حجمی V_f) و کانال‌های گاما با عرض یکنواخت می‌باشد. در فاز گاما، علاوه بر تغییر شکل‌های الاستیک، حرکت گلاید و صعود نابجایی‌ها منجر به تغییرشکل‌های پلاستیک می‌شود. در فاز گامایپریم، تغییرشکل نفوذی در سطوح مابین فازها به تغییرشکل الاستیک اضافه می‌گردد. در ادامه، ابتدا نفوذ در سطوح مابین فازها، سپس قوانین ساختاری در روش DDP و در نهایت کلیات مساله مقدار مرزی مربوط به مدل آبرآلیاژ ارائه می‌گردد.

2- نفوذ در سطوح مابین فازها

گردایان مکانی تنش نرمال به سطح مابین فازها (ξ) σ_n در راستای سطح مابین فازها (ξ (شکل 1) موجب نفوذ آلومینیوم فاز گامایپریم در راستای سطح مابین فازها می‌شود که این فرآیند نفوذ موجب ایجاد تغییرشکل می‌گردد. آهنگ تغییرشکل به صورت یک گستگی سرعت نرمال بین فازها در مرز مشترک آن‌ها اعمال می‌شود و عبارت است از [7]:

$$\Delta v_n = -\frac{\partial}{\partial \xi} \left(D_{(i)} \frac{\partial \sigma_n(\xi)}{\partial \xi} \right) \quad (1)$$

که در آن

$$D_{(i)} = \frac{D_b \delta_b \Omega}{kT} \quad (2)$$

ثابت نفوذ سطحی (سطح مابین فازها) می‌باشد. D_b ضریب نفوذ آلومینیوم در کربیستال نیکل، δ_b ضخامت موثر سطح مابین فازها، Ω حجم اتمی آلومینیوم، k ثابت بلترمان و T دمای مطلق است. از لغزش در سطح مابین فازها صرف نظر می‌شود و پیوستگی تراکشن‌ها در سطح مابین فازها باید برقرار باشد.

2- قوانین ساختاری در DDP

فاز گاما دارای دو سیستم لغزش که در "شکل 1" نشان داده شده‌اند می‌باشد ($\varphi = 30^\circ$) به طوری که تولید و حرکت نابجایی‌ها (که با توجه به شرایط کرش مسطح از نوع لبه‌ای هستند) بر روی این سیستم‌های لغزش صورت می‌گیرد. نابجایی‌ها به صورت نقص‌های خطی در محیط الاستیک گرفته می‌شوند و تغییرشکل‌های پلاستیک، حاصل ترکیب حرکت گلاید و صعود نابجایی‌ها است. اندرکنش‌های نابجایی‌ها با استفاده از میدان‌های الاستیک خطی آن‌ها و همچنین مجموعه قوانین ساختاری [19,18] لحاظ می‌گردد. این قوانین ساختاری وابسته به مولفه‌های گلاید $f_g^{(I)}$ و صعود $f_c^{(I)}$ نیروی پیچ - کوهله⁶ روی هر نابجایی هستند. سرعت گلاید نابجایی I با استفاده از رابطه دراگ خطی تعیین می‌شود، یعنی [13]

$$v_g^{(I)} = \frac{f_g^{(I)}}{B_g} \quad (3)$$

⁵ Peach-Koehler

در روش DDP استاندارد [18]، موقعیت تنش و کرنش با استفاده از برهم‌نهی میدان‌های الاستیک تکین نابجایی‌ها (که برای محیط نامحدود به صورت تحلیلی در دسترس اند [26]) و میدان‌های همواری که شرایط مرزی را تصحیح می‌کنند بدست می‌آید. این میدان‌های هموار با حل یک مساله مقدار مرزی الاستیک تکمیلی با استفاده از روش اجزای محدود محاسبه می‌شوند. در حضور مکانیزم نفوذ در سطوح مابین فازها، این روش نیازمند یک تصحیح اساسی است تا رابطه (1) و پیوستگی تراکشن‌های مربوطه با دقت مناسبی در روند حل اعمال گردد که این تصحیح در مرجع [7] ارائه شده است (به "شکل 2" این مرجع دقت شود) و در مقاله حاضر نیز از این روش DDP تغییرشکل ناشی از نفوذ، تاریخچه تغییرشکل در یک روند افزایشی محاسبه می‌گردد. هر گام افزایشی، شامل پنج کار محاسباتی اصلی است:

- .n. محاسبه مولفه‌های گلاید و صعود نیروی پیچ_کوهله با استفاده از موقعیت معلوم تنش در زمان t برای تک نابجایی‌ها و منابع؛
- ii. بهروزسازی میدان غلطت تهی جایی‌ها با استفاده از برهم‌نهی میدان‌های منبع/جادب تهی جایی‌ها و شرایط مرزی پریودیک؛
- iii. اعمال قوانین ساختاری نابجایی‌ها شامل به روزرسانی موقعیت آن‌ها براساس حرکت گلاید و صعود آن‌ها، از بین رفتن آن‌ها و تولید آن‌ها از منابع موجود؛
- iv. محاسبه گستتهای در جابجایی در سطوح مابین فازها (رابطه (1))؛ و
- v. تعیین موقعیت تنش و کرنش در زمان $t + \Delta t$ با حل نمودن مساله مقدار مرزی الاستیک تکمیلی با شرایط مرزی معلوم با استفاده از روش اجزای محدود.

3- پارامترهای مادی

رفتار الاستیک فازهای گاما و گامایریم یکسان و ایزوتروپیک با مدول یانگ $E = 100 \text{ GPa}$ و ضریب پواسون $\nu = 0.37$ فرض می‌شوند [26]. منابع نابجایی با دانسیته ρ_{nuc} به صورت تصادفی بر روی صفحه‌های لغزش که با فاصله b از هم قرار گرفته‌اند [7,6] پخش می‌شوند. با فرض اینکه مقاومت منابع توسط تنش اروان تعیین شود [26] و با فرض عرض کانال فاز گاما در حدود 100 nm ، مقاومت منابع از یک توزیع نرمال با میانگین $\bar{\tau}_{\text{nuc}} = 100 \text{ MPa}$ و انحراف معیار 2 MPa است با توجه به مقاومت منبع، زمان جوانه‌زنی هر منبع تعیین شود [27,15]. ولی در اینجا با توجه به انحراف معیار کم برای مقاومت منابع، زمان مربوط به جوانه‌زنی برای تمامی منابع یکسان و برابر $t_{\text{nuc}} = 10 \text{ ns}$ می‌شود. محاسبات برای مقدار مرجع دانسیته منابع $\rho_{\text{nuc}} = 500 \mu\text{m}^2$ صورت می‌گیرد. البته برای بررسی اثر دانسیته منابع نابجایی‌ها، محاسبات، بر حسب نیاز، برای μm^2 ضریب $\rho_{\text{nuc}} = 300,800 \mu\text{m}^2$ نیز انجام می‌گیرد. اندازه بردار $B_g = 10^{-4} \text{ Pa s}$ برگز برای $b = 0.25 \text{ nm}$ و ضریب دراگ گلاید برابر $\tan \varphi = 0.5$ می‌باشد [26]. کلیه محاسبات DDP در دمای $T = 950^\circ\text{C}$ صورت می‌گیرد (مطالعات آزمایشگاهی بر روی آب آلاینده‌های تجاری [29,28]). وجود مرحله سوم منحنی خزش را در این دما گزارش داده‌اند و مقادیر پارامترهای مادی مربوط به نفوذ سطحی، نفوذ تهی جایی‌ها و صعود نابجایی‌ها در جدول 1 آورده شده است.

گام زمانی لازم برای محاسبات DDP برابر $\Delta t = 0.5 \text{ ns}$ می‌باشد (چنین گام زمانی کوچکی برای دینامیک نابجایی‌ها ضروری است و تقریباً تمامی مقالاتی که از روش DDP استفاده نموده‌اند از این گام زمانی بهره

تهی جایی‌ها (x_i) در مکان و زمان تغییر می‌کند و برای تعیین تغییرات آن، باید معادله نفوذ حاکم $\frac{\partial c}{\partial t} = D_{(v)} \nabla^2 c$ با شرایط مرزی پریودیک در مرزهای سلول واحد حل شود که در آن $D_{(v)}$ ثابت نفوذ تهی جایی‌ها است. در عین حال، هر نابجایی در حال صعود به عنوان منبع یا جاذب نقطه‌ای تهی جایی‌ها با شدت ارائه شده در رابطه (5) عمل می‌کند و بنابراین حل معادله نفوذ حاکم بسیار سنگین می‌شود. برای این منظور از اصل برهم‌نهی [25] استفاده می‌کنیم که از حل تحلیلی یک منبع/جادب نقطه‌ای در محیط نامحدود [25] و تصحیح میدان براساس شرایط مرزی محیط محدود (شرایط مرزی پریودیک در این مساله [6]) بهره می‌برد. توجه به این نکته ضروری است که با هر صعود نابجایی در هر لحظه و در هر مکان، یک دنباله منبع/جادب تهی جایی‌ها در زمان به وجود می‌آید و تعداد تهی جایی‌ها به سرعت افزایش می‌یابد و محاسبات پرهزینه می‌شود. برای کاهش حجم محدوده سلول واحد یکنواخت شده به مقدار C_0 اضافه می‌گردد.

در مدل دوبعدی حاضر، تولید نابجایی‌ها در فاز گاما از طریق منابع نقطه‌ای فرانک-رید صورت می‌گیرد. در این توصیف دو بعدی، در صورتیکه مولفه گلاید نیروی پیچ_کوهله از مقاومت منبع b در مدت زمان τ_{nuc} تجاوز نماید، یک دوقطبی نابجایی تولید می‌شود، که b مقدار بردار برگز نابجایی می‌باشد. علامت نابجایی‌ها براساس جهت نیروی پیچ_کوهله تعیین می‌شود. قانون ساختاری دیگر مربوط به از بین رفتن (انهدام) نابجایی‌های غیر هم علامت (متعلق به یک سیستم لغزش) که در نزدیکی هم قرار دارند (کمتر از L_e می‌باشد. لازم به تأکید است که، فاز گامایریم غیرقابل رسوخ برای نابجایی‌ها می‌باشد و بنابراین به عنوان مانع در برابر حرکت نابجایی‌ها عمل می‌کند).

2-3- مساله مقدار مرزی

کشش تک محوری به همراه شرایط مرزی پریودیک به سلول واحد (شکل 1) اعمال می‌شود به طوری که [7]

$$\Delta \dot{u}_i = \dot{\varepsilon}_{ij} \Delta x_j \quad (6)$$

تفاوت‌های نرخ جابجایی‌های نقاط مقابل هم در مرزهای سلول واحد (که از هم فاصله Δx_j دارند) می‌باشد. در این رابطه، $\dot{\varepsilon}_{ij}$ مولفه‌های تانسور نرخ کرنش ماکروسکوپیکی سلول واحد می‌باشند.علاوه، تراکشن‌های نقاط مقابل هم در مرزهای سلول واحد با هم دیگر برابر و غیر هم علامت هستند. مولفه‌های تانسور تنش ماکروسکوپیکی سلول واحد $\bar{\varepsilon}_{ij}$ (که زوج_کار تانسور نرخ کرنش ماکروسکوپیکی سلول واحد می‌باشد) از طریق تراکشن‌های روی مرز محاسبه می‌شوند، یعنی [7]

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{\tan \varphi}{2h^2} \int_C (T_i x_j + T_j x_i) dC \quad (7)$$

که مرز سلول واحد می‌باشد. در شرایط کشش تکمحوری در راستای محور x_2 ، نیاز داریم که $\bar{\varepsilon}_{12} = 0$ باشد. با اعمال $\bar{\varepsilon}_{22} = \bar{\varepsilon}_{11}$ به مدل، مقدار $\bar{\varepsilon}_{22}$ به عنوان جواب آنالیز برحسب $\bar{\varepsilon}_{22}$ حاصل می‌شود. با رسیدن تنش به مقدار مشخص $\bar{\varepsilon}_{app}$ ، مقدار تنش ثابت نگه داشته شده و مقدار $\bar{\varepsilon}_{22}$ به عنوان جواب آنالیز برحسب زمان حاصل می‌شود و بیان کننده کرنش خزشی تحت تنش ثابت اعمالی است. برای جزئیات بیشتر در خصوص اعمال شرایط مرزی (شامل رابطه (1)) به مرجع [7] مراجعه نمایید. در ادامه، کلیات حل مساله مقدار مرزی در روش DDP و مراحل آن ارائه می‌شود.

¹ Annihilation

شكل، نشان داده نشده‌اند. مسلم‌آ، انجام شبیه‌سازی‌های خوش نمی‌تواند در تنش یکسان برای این سه آبرآلیاژ صورت گیرد. برای این منظور، تنش اعمالی برای برآورد رفتار خوشی به صورت نسبتی از مقاومت تسلیم صورت می‌گیرد که در ادامه ارائه خواهد شد. همان‌طور که قبلاً گفته شد، هر منحنی در "شکل 2"، میانگین نتایج پنج ریالیزیشن از موقعیت و مقاومت منابع نابجایی است و پراکنده‌گی نتایج با استفاده از نشان دادن انحراف معیار توسط میله‌های خطأ بر روی هر منحنی صورت گرفته است. در سایر شکل‌های این بخش برای پرهیز از شلوغ شدن شکل‌ها، فقط منحنی‌های میانگین بدون میله‌های خطأ نمایش داده خواهد شد. ذکر این نکته مفید است که مقاومت تسلیم آبرآلیاژها تقریباً برابر با مقاومت تسلیم آبرآلیاژ‌های مهم تجاری [3] می‌باشد.

رفتار تغییرشکل خوشی سه آبرآلیاژ در "شکل 3" بر حسب کرنش خوشی به صورت تابعی از زمان برای دو مقدار تنش اعمالی $\sigma_{\gamma} = 0.6 \text{ }\Sigma_{app}$ و $\sigma_{\gamma} = 0.9 \text{ }\Sigma_{app}$ نشان داده شده است. در اینجا، Σ_{app} مقدار کرنش $\Sigma_{app} = \rho_{nuc} \cdot V_f$ است. در مرحله انجام محاسبات خوش است (شامل کرنشی که تنش را به تجمعی در مرحله انجام محاسبات خوش می‌داند) و نیز زمان خوش را نشان می‌دهد. مقدار موردنظر رسانده‌ایم، نیست) و ρ_{nuc} نیز زمان خوش را نشان می‌دهد. ابتدا منحنی‌های مربوط به دانسیته مرجع منابع نابجایی $\rho_{nuc} = 500 \text{ }\mu\text{m}^2$ را در نظر می‌گیریم. مقدار خوش در تنش اعمالی بالا، نسبتاً بالا می‌باشد و خوش پس از مرحله اول که بسیار کوتاه است، وارد مرحله دوم و بالاصله وارد مرحله سوم می‌شود. در تنش اعمالی پایین و در دو آبرآلیاژ 61% و 70% گام‌پریم، منحنی خوش وارد شروع مرحله سوم شده است در حالی که در آبرآلیاژ 80% گام‌پریم، منحنی خوش در مرحله دوم باقی مانده است. می‌توان نتیجه گرفت که افزایش فاز گام‌پریم، می‌تواند، حتی با وجود نفوذ در سطح مابین فازها، رفتار خوش آبرآلیاژ را بهبود بخشد. در ادبیات فنی (مانند [3]) خوش مرحله سوم در آبرآلیاژها پایه نیکل گزارش شده است و معمولاً در پایان این مرحله، مکانیزم‌های خسارت مانند رشد حفره‌ها و خسارت سطوح مابین فازها [32,9] گزارش شده است. با این حال، مشاهدات آزمایشگاهی نشان داده‌اند که این خسارت‌ها در کرنش‌های خوش بالای 5% به وقوع می‌پوندد [33]. به این دلیل، مکانیزم‌های خسارت در مدل حاضر در نظر گرفته نشده‌اند و لذا شناسایی عامل خوش مرحله سوم که توسط مدل حاضر پیش‌بینی می‌شود، حائز اهمیت است.

در "شکل 3" ملاحظه می‌شود که با افزایش دانسیته منابع نابجایی از مقدار $\rho_{nuc} = 500 \text{ }\mu\text{m}^2$ به مقدار $\rho_{nuc} = 800 \text{ }\mu\text{m}^2$ ، آبرآلیاژ 80% گام‌پریم نیز وارد مرحله سوم خوش می‌شود. به همین ترتیب، ملاحظه

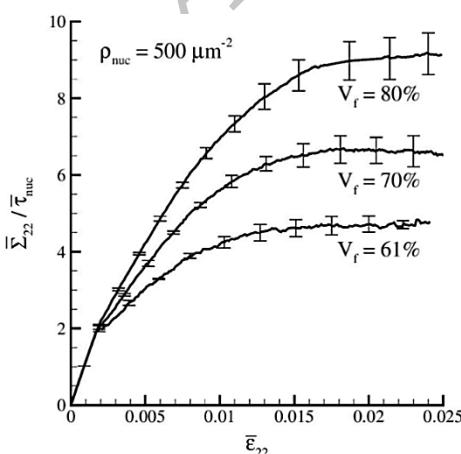


Fig. 2 Stress-strain curves for the three superalloys

شکل 2 منحنی‌های تنش کرنش برای سه آبرآلیاژ

برده‌اند. مسلم‌آ با این گام زمانی، انجام محاسبات خوش برای رسیدن به زمانی در حدود 1000 ساعت که در آزمایشات دیده می‌شود ممکن نیست. در مرجع [6] نشان داده شده است که با مقیاس نمودن دو پارامتر مادیمربوط به نفوذ یعنی ثابت نفوذ سطحی و ضریب نفوذ تهی جایی می‌توان انجام محاسبات خوش را عملی نمود به طوری که زمان t در محاسبات DDP به زمان خوش در آزمایشات t^{EXP} مرتبط می‌شود که $t^{EXP} = \lambda t$ طریق t^{EXP} از طبقه محاسبات $\lambda = \frac{\rho_{nuc}}{\rho_{nuc} + \rho_{nuc}}$ فاکتور سرعت‌دهی¹ محاسبات می‌باشد. در کلیه محاسبات DDP که در ادامه ارائه می‌شوند، از $\lambda = 5 \times 10^{10}$ می‌شود. بنابراین با توجه به مقادیر ارائه شده در جدول 1، ضریب نفوذ تهی جایی برابر $D_{(v)}^{DDP}$ و ثابت نفوذ سطحی برابر $D_{(i)}^{DDP} = 2 \times 10^5 \text{ }\mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$ و $\lambda D_{(v)} = 2 \times 10^5 \text{ }\mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$ در محاسبات DDP استفاده می‌گردد.

محاسبات برای سه آبرآلیاژ پایه نیکل با درصدهای حجمی ذره‌های گام‌پریم $V_f = 80\%$ ، $V_f = 70\%$ ، $V_f = 61\%$ در یک سلول واحد با اندازه $h = 0.6 \text{ }\mu\text{m}$ انجام می‌گیرند. عرض کanal فاز گاما برای این سه آبرآلیاژ به ترتیب برابر 60 nm ، 90 nm و 120 nm می‌باشد. از المان‌های چهارضلعی با اندازه تقریبی 10 nm برای حل اجزای محدود مساله مقدار مزی تکمیلی در روش DDP استفاده می‌شود. به علاوه برای در نظر گرفتن اثرات آماری در محاسبات DDP، برای هر آبرآلیاژ پنج ریالیزیشن از موقعیت و مقاومت منابع نابجایی در نظر گرفته می‌شود. هر آنالیز خوش بر روی یک هسته CPU انجام می‌گیرد و زمان انجام آن در حدود دو ماه می‌باشد که نشان‌دهنده هزینه بسیار بالای محاسبات DDP برای مطالعه خوش است. در مجموع، برای انجام محاسبات خوش که در ادامه می‌آیند، تقریباً بیست هزار ساعت هسته CPU مصرف شده است.

4- نتایج و بحث

در این بخش، نتایج عددی برای آبرآلیاژها با استفاده از فرمول‌بندی و پارامترهای مادی ارائه شده در بالا آورده می‌شوند. ابتدا در "شکل 2"، منحنی تنش-کرنش برای سه آبرآلیاژ با دانسیته منابع نابجایی $\rho_{nuc} = 500 \text{ }\mu\text{m}^2$ آورده شده است که در آن، تغییر در رصد فاز گام‌پریم موجب تغییر در مقاومت تسلیم آبرآلیاژ شده است. به طوری که مقاومت تسلیم آبرآلیاژ 80% گام‌پریم به بیش از دو برابر مقاومت تسلیم آبرآلیاژ 61% گام‌پریم افزایش یافته است. البته این تغییر در مقاومت به اثر اندازه ذرات نیز وابسته است ولی با توجه به تفاوت کم بین اندازه ذرات، این اثر به صورت نسبتاً محدود می‌باشد. تغییر دانسیته منابع نابجایی، موجب تغییر ملایم (در حدود 10%) در مقدار مقاومت تسلیم آبرآلیاژ می‌شود که در این شکل برای پرهیز از شلوغ شدن

جدول 1 پارامترهای مادی

Table 1 Material parameters

	مقدار	مرجع	پارامتر
[26]	$16.6 \times 10^{-12} \text{ }\mu\text{m}^3$		حجم اتمی آلومینیوم، Ω
[4]	1 nm	δ_b	ضخامت سطح مابین فازها، δ_b
[26]	$13.8 \times 10^{-12} \text{ }\mu\text{m}^3$		حجم اتمی تهی جایی، $\Omega_{(v)}$
[25]	$20 \times 10^6 \text{ }\mu\text{m}^{-3}$	c_0	غلظت اولیه تهی جایی ^(*)
[25]	50b	r_c	شعاع ضبط نابجایی، r_c
[30]	$4 \times 10^{-6} \text{ }\mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$	$D_{(v)}$	ضریب نفوذ تهی جایی ^(*)
[31]	$10^{-7} \text{ }\mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$	D_b	ضریب نفوذ آلومینیوم در گریستال نیکل ^(*)
-	$10^{-7} \text{ }\mu\text{m}^5\text{N}^{-1}\text{s}^{-1}$	$D_{(i)}$	ثابت نفوذ سطحی با استفاده از رابطه (2)

^(*) در دمای 1000 °C¹ Speed-up factor

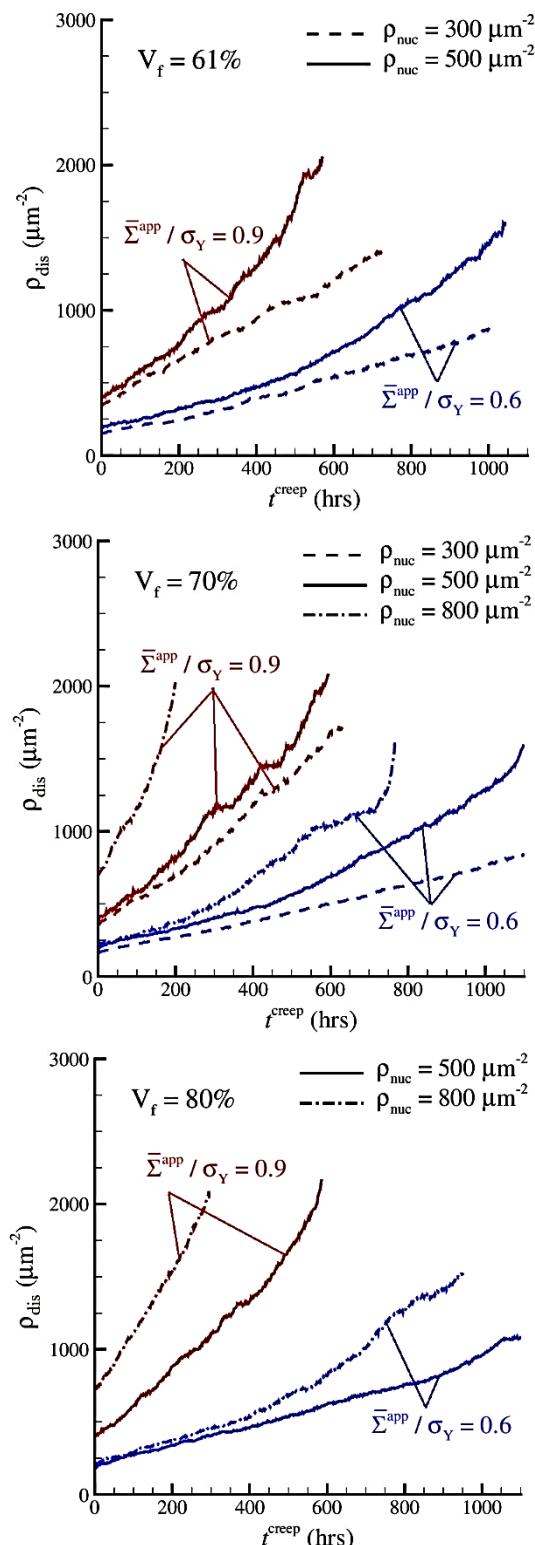


Fig. 4 Dislocation density versus creep time for the three superalloys
شکل ۴ تغییرات دانسیته نابجایی‌ها با زمان خزش برای سه آبرآلیاژ

می‌گیریم که مقدار منابع نابجایی فعال نیز نقش به سزایی در تعیین رفتار خزشی دارد. بنابراین پیشنهاد می‌شود که در طراحی این آبرآلیاژها، علاوه‌بر توجه به درصد فاز گاماپریم، می‌توان با اضافه نمودن عناصری که منابع نابجایی را در فاز گاما محدود می‌نماید، رفتار خزشی را بهبود بخشید.

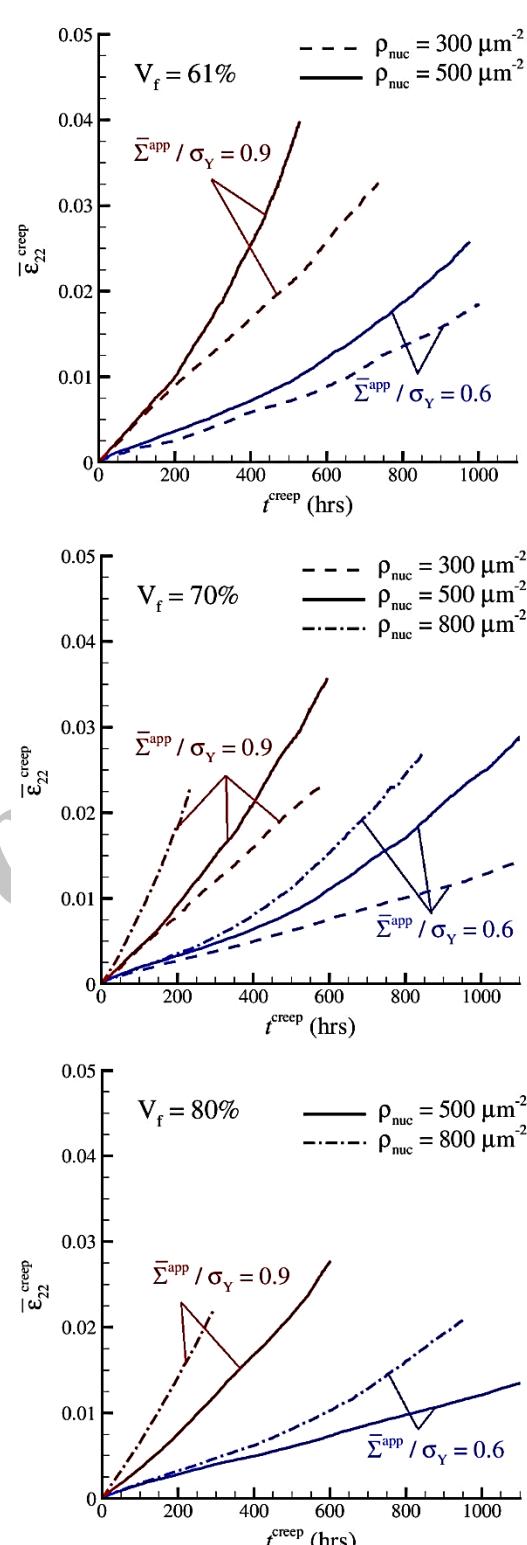


Fig. 3 Creep strain versus time responses for the three superalloys
شکل ۳ پاسخ کریش خزشی در برابر زمان برای سه آبرآلیاژ

می‌شود که با کاهش دانسیته منابع نابجایی از مقدار $\rho_{nuc} = 500 \mu m^{-2}$ به مقدار $\rho_{nuc} = 300 \mu m^{-2}$ ، خزش در آبرآلیاژ 70% گاماپریم در مرحله دوم متوقف می‌شود در حالی که این مقدار منابع نابجایی در آبرآلیاژ 61% گاماپریم منجر به شروع مرحله سوم خزش شده است. بنابراین، نتیجه

برای این منظور، "شکل 5" توزیع نابجایی‌ها در زمان خزش hrs 800 را در سه آبرآلیاژ با $\rho_{nuc} = 500 \mu\text{m}^2$ نشان می‌دهد. با توجه به عرض بیشتر کانال فاز گاما در آبرآلیاژ 61% گامایپریم، اکثر نابجایی‌ها در کانال گاما پخش شده‌اند و با کاهش عرض کانال، نابجایی‌ها در مجاورت سطح مابین فازها قرار گرفته‌اند. اگرچه، با حضور نفوذ در سطح مابین فازها و به‌علت تغییرشکل‌های موضوعی، در بخش‌هایی از کانال هم نابجایی‌ها حضور دارند. امکان صعود نابجایی‌ها باعث می‌شود که نابجایی‌ها ساختار دیوارهای و سلوی در داخل کانال فاز گاما تشکیل دهند که منطبق بر مشاهدات آزمایشگاهی [34-36] می‌باشدند. حرکت صعود نابجایی‌ها در دیوارهای این سلوول‌های نابجایی تسهیل می‌شود و به عبارت دیگر، دیوارهای نابجایی به عنوان مسیرهایی برای صعود نابجایی‌ها عمل می‌کنند. بررسی‌های قبلی توسط روش DDP نشان داده‌اند که صعود نابجایی‌ها به عنوان عامل اصلی در افزایش کرنش خزشی در دماهای بالا می‌باشد [6]. لازم به ذکر است که حرکت گلایید نابجایی‌ها با توجه به عرض بسیار کم فاز گاما بسیار محدود می‌باشد و حرکت صعود نابجایی‌ها به صورت عمده منجر به تغییرشکل پلاستیک در آبرآلیاژ می‌گردد. به هر حال همین وجود انک در حرکت گلایید در نابجایی‌ها باعث می‌شود که نابجایی‌ها بتوانند ساختارهای سلوی را تشکیل دهند.

همان‌طور که در مرجع [6] به تفصیل بررسی شده است، در غیاب نفوذ سطحی، صعود نابجایی‌ها و بالتبع نفوذ تهی‌جایی‌ها در زمان‌های اولیه خزش متوقف می‌شود چرا که تنش‌های بازگشتی ناشی از تجمع نابجایی‌ها در مقابل سطح مابین فازها مانع از ادامه تولید نابجایی‌ها می‌شوند. با توقف حرکت نابجایی‌ها، کرنش خزشی نیز متوقف می‌شود. در شرایط حضور نفوذ سطحی (نفوذ در سطوح مابین فازها) که منجر به تغییرشکل موضوعی این سطوح می‌شود، صعود نابجایی‌ها ادامه پیدا می‌کند. همین موضوع موجب کاهش تنش بازگشتی و افزایش تولید نابجایی‌ها و بالتبع تشکیل ساختار سلوی نابجایی‌ها می‌شود. همین اضافه شدن فعلیت نابجایی‌ها در فاز گاما که عمدتاً به صورت صعود نابجایی‌ها می‌باشد منجر به افزایش آهنگ کرنش خزشی و شروع مرحله سوم خزش می‌شود.

بنابراین، نقش نفوذ سطحی در تغییرشکل آبرآلیاژ به صورت غیرمستقیم می‌باشد. در "شکل 5"، ذره میانی در حالت تغییرشکل یافته (که در آن تغییرشکل‌ها با ضریب 6 بزرگنمایی شده‌اند) نشان داده شده است. در اثر نفوذ سطحی، ماده فاز گامایپریم از کنارهای ذره به بالا و پایین ذره منتقل می‌شوند ولی این تغییرشکل سهم اندکی در افزایش کرنش خزشی در راستای اعمال بار دارد [7,6]. در اینجا باید به این نکته مهم اشاره شود که در نظر گرفتن مکانیسم تغییرشکل نفوذ سطحی در مدل‌های کانتینیومی (مانند مرجع [37]) عالم‌پیش‌بینی دست بالایی برای کشیدگی ذرات در راستای تنش اعمالی در اثر مکانیسم نفوذ سطحی دارد که برخلاف مشاهدات آزمایشگاهی است. از این منظر، نتایج حاصل از DDP نزدیک به واقعیت است. بنابراین، بوجود آمدن تغییرشکل‌های موضوعی دارای اهمیت می‌باشند، چرا که این تغییرشکل‌های موضوعی در تغییر دادن میدان‌های حاصل از نابجایی‌ها و تسهیل حرکت صعودی آن‌ها نقش بهسازی دارند. مقدار این تغییر شکل‌های موضوعی در حد $10b \sim 20b$ (حدود 5% عرض کانال فاز گاما) می‌باشد که با نتایج آزمایشگاهی [5,4] تطابق دارد.

در پایان برای توصیف حرکت صعود نابجایی‌ها، توزیع غلظت تهی‌جایی‌ها در زمان خزش hrs 800 برای سه آبرآلیاژ با $\rho_{nuc} = 500 \mu\text{m}^2$ در "شکل 6" نشان داده شده است. صعود نابجایی‌ها طی یک فرایند تعاوی¹ در حرکت

در "شکل 4"، تغییرات دانسیته نابجایی‌ها (که به صورت نسبت تعداد نابجایی‌ها به سطح سلوول واحد تعریف شده) بر حسب زمان خزش آورده شده است. ملاحظه می‌شود که دانسیته نابجایی‌ها برای تنش $\bar{\Sigma}^{app}/\sigma_Y = 0.9$ مقادیر بزرگتری دارند و در مدت زمان خزش نیز به سرعت افزایش می‌یابند. همچنین ملاحظه می‌شود که دانسیته نابجایی‌ها با کرنش خزشی نشان داده شده در "شکل 3" رابطه مستقیم دارد و عملاً افزایش نابجایی‌ها در محیط، خزش نیز افزایش یافته است. برای آبرآلیاژهایی که در مرحله دوم خزش باقی مانده‌اند، دانسیته نابجایی‌ها تقریباً به صورت خطی افزایش می‌یابد و در آبرآلیاژهایی که وارد مرحله سوم خزش شده‌اند، در محدوده زمان شروع مرحله سوم، آهنگ افزایش دانسیته نابجایی‌ها نیز بیشتر شده است. به هر حال، این رابطه مستقیم بین کرنش خزشی و دانسیته نابجایی‌ها می‌تواند به صورت موثر در مدل‌های کانتینیومی مورد استفاده قرار گیرد تا در بررسی رفتار اجزای سازه‌ای تحت موقعیت‌های مختلف تنش به کار آید. البته، این مساله خارج از اهداف مقاله حاضر است. در این‌جا، هدف ما بررسی مکانیزم افزایش نابجایی‌ها در اثر اعمال تنش ثابت می‌باشد تا بتوانیم با مکانیزم‌های موثر در خزش آبرآلیاژها آشنا شویم.

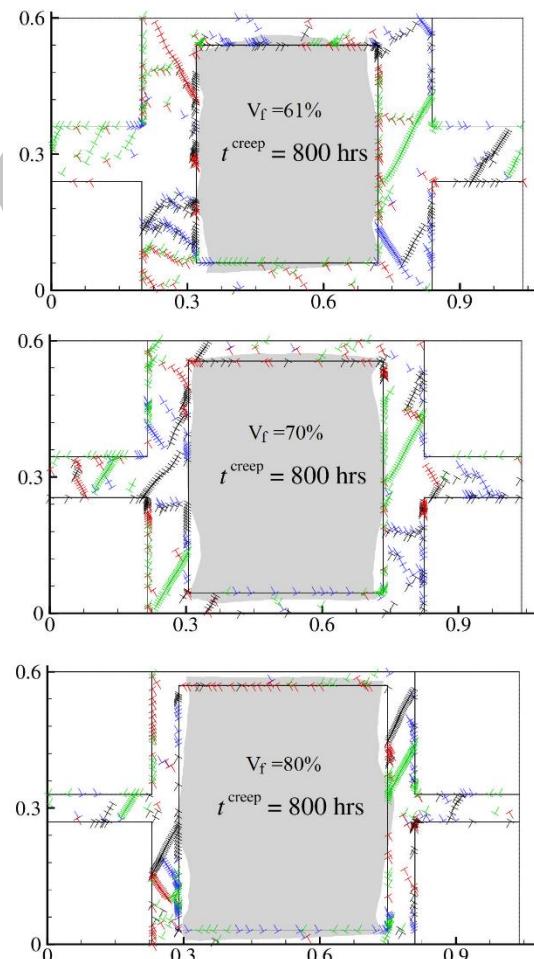


Fig. 5 Dislocation distribution at creep time 800 hrs for the three superalloys (a realization with $\rho_{nuc} = 500 \mu\text{m}^2$). The deformed shape (with a magnification factor of 6 for deformations) of central particle is included in gray

شکل 5 توزیع نابجایی‌ها در زمان 800 hrs برای سه آبرآلیاژ (یک ریالیزیشن با $\rho_{nuc} = 500 \mu\text{m}^2$). شکل تغییرشکل داده‌ی ذره میانی (با استفاده از ضریب بزرگنمایی 6 برای تغییرشکل‌ها) نیز با رنگ خاکستری نشان داده شده است

¹ Co-operative

تهی جایی‌ها می‌باشد که به صورت صریح در نظر گرفته شده‌اند. تحقیق حاضر، در ادامه‌ی دو مرجع [7,6] می‌باشد. در مرجع [7]، برای اولین بار در نظر گرفتن نفوذ سطحی در سطوح مابین فازها به فرمول‌بندی پلاستیسیته نابجایی‌های گستته اختلاف گردید و با پیش‌بینی منحنی‌های تنش-کرنش در یک کامپوزیت دوفازی با درصد حجمی ذرات پایین، اثر تغییرشکل‌های به وجود آمده در سطوح مابین فازها بررسی شد. در مرجع [6] نیز برای اولین بار این فرمول‌بندی برای بررسی خوش در آبرآلیاژها (یا یک درصد حجمی مشخص برای فاز گام‌پریم) به کار گرفته شد و ملاحظه گردید که مکانیسم جدید تغییرشکل در سطوح مابین فازها می‌تواند توصیف کننده‌ی منحنی خوش آبرآلیاژها در ورود به مرحله سوم باشد. در تحقیق حاضر و در ادامه مرجع [6]، برای اولین بار اثر درصد حجمی فاز گام‌پریم در آبرآلیاژها با این فرمول‌بندی مورد بررسی قرار گرفته است و با پیش‌بینی منحنی‌های خوش برای آبرآلیاژها با درصد حجمی فاز گام‌پریم مختلف ملاحظه شده است که افزایش درصد حجمی ذرات گام‌پریم می‌تواند اثرات ناشی از مکانیسم تغییرشکل‌های نفوذ سطحی را محدود نماید. این نتیجه بسیار حائز اهمیت است چرا که می‌تواند در طراحی مواد و فرآیند ساخت آبرآلیاژها مورد استفاده در قرار گیرد.

این مدل توصیف مناسبی از شروع مرحله سوم خوش در آبرآلیاژها برای شرایط دمایی و تنشی متوسط ارائه می‌دهد به طوری که برای یک آبرآلیاژ تحت تنش ثابت، ساختار سلولی نابجایی‌ها در فاز گام‌پریم بوجود می‌آید که منجر به افزایش دانسیته نابجایی‌ها در محیط شده و با صعود این نابجایی‌ها، تغییرشکل خوشی در آبرآلیاژ ایجاد می‌گردد. نتایج حاصل برای آبرآلیاژها با درصد حجمی ذرات گام‌پریم مختلف نشان می‌دهد که با افزایش درصد حجمی ذرات گام‌پریم، امکان تشكیل ساختار سلولی نابجایی‌ها کاهش یافته و مقاومت خوشی آبرآلیاژ افزایش می‌یابد و به عبارت دیگر منحنی خوش وارد مرحله سوم که در آن کرنش خوش همواره در حال افزایش است نمی‌شود.

کاربرد دومی که از نتایج حاصل از این تحقیق می‌توان بیان نمود، مربوط به آنالیز و طراحی اجزای سازه‌ای که از آبرآلیاژها ساخته می‌شوند، می‌باشد. مسلماً، با توجه به مقیاس اجزای سازه‌ای نمی‌توان از مدل‌های میکرومکانیکی مانند پلاستیسیته نابجایی‌های گستته استفاده نمود و باید از مدل‌های کانتینیومی که دارای متغیرهای داخلی مناسب مانند درصد حجمی فاز گام‌پریم و دانسیته اولیه نابجایی‌ها هستند استفاده شود. این متغیرهای داخلی باید توصیف کننده‌ی مناسب از رفتار میکرومکانیکی ماده باشند به طوری که بتوان رفتار ماده را با توابع مشخصی به این متغیرها (معادلات ساختاری) ارتباط داد. لازم به ذکر است که تعیین این توابع با انجام آزمایشات بسیار پرهزینه است. اگرچه، ارائه معادلات ساختاری خارج از اهداف این تحقیق است ولی نتایج ارائه شده برای نحوه تغییرات کرنش خوشی با درصد حجمی فاز گام‌پریم و دانسیته منابع نابجایی‌ها می‌تواند به طور موثر در معادلات ساختاری مربوط به مدل‌سازی‌های کانتینیومی مورد استفاده قرار گیرد.

6- تقدیر و تشکر

از پروفسور ویکرام دشپانده (دانشگاه کمبریج)، به خاطر همفرکری و بحث‌های بسیار مفیدی که در طول انجام این تحقیق داشته‌اند صمیمانه تشکر می‌شود.

7- مراجع

- [1] T. Pollock, S. Tin, Nickel-based superalloys for advanced turbine engines: chemistry, microstructure and properties, *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 22, No. 2, pp. 361–374, 2006.

نابجایی‌ها صورت می‌گیرد [25]، یعنی گروهی از نابجایی‌ها با صعود خود یک سری تهی جایی ساعت می‌کنند که گروه دیگر نابجایی‌ها با صعود خود آن‌ها را جذب می‌کنند. صعود نابجایی‌ها طی یک فرآیند تعاقنی یک ویژگی مهم در فرمول‌بندی مرجع [25] برای صعود درگیر با نفوذ تهی جایی‌ها ممید وجود می‌شود. گرادیان‌های مکانی موجود در توزیع غلظت تهی جایی‌ها ممید وجود حرکت صعود نابجایی‌ها است. ملاحظه می‌شود که در آبرآلیاژ 80% گام‌پریم، این گرادیان‌ها بسیار محدود شده‌اند و لذا صعود نابجایی‌ها هم بسیار کم شده است. این در حالی است که برای دو آبرآلیاژ دیگر، با توجه به گرادیان‌های موجود در غلظت تهی جایی‌ها، صعود بیشتری برای نابجایی‌ها انتظار می‌رود و این فعالیت بیشتر نابجایی‌ها منجر به تولید بیشتر آن‌ها و درنهایت افزایش خوش در آبرآلیاژها می‌شود.

5- نتیجه گیری

پلاستیسیته نابجایی‌های گستته (DDP) برای بررسی خوش در دمای بالا در آبرآلیاژها تک کریستالی پایه نیکل مورد استفاده قرار گرفته است. میکروساختار آبرآلیاژ به صورت فاز گاما که شامل ذره‌های گام‌پریم است در نظر گرفته شده و یک مدل سلول واحد دو بعدی از آن تحت تنش تک محوری ثابت با روش DDP آنالیز شده است. در حالی که تغییرشکل در فاز گاما به صورت الاستیک و پلاستیک ناشی از حرکت گلاید و صعود نابجایی‌ها می‌باشد، تغییرشکل در فاز گام‌پریم ترکیب رفتار الاستیک و نفوذ سطحی (در سطح مابین فازها) می‌باشد. حرکت صعود نابجایی‌ها هم درگیر با نفوذ

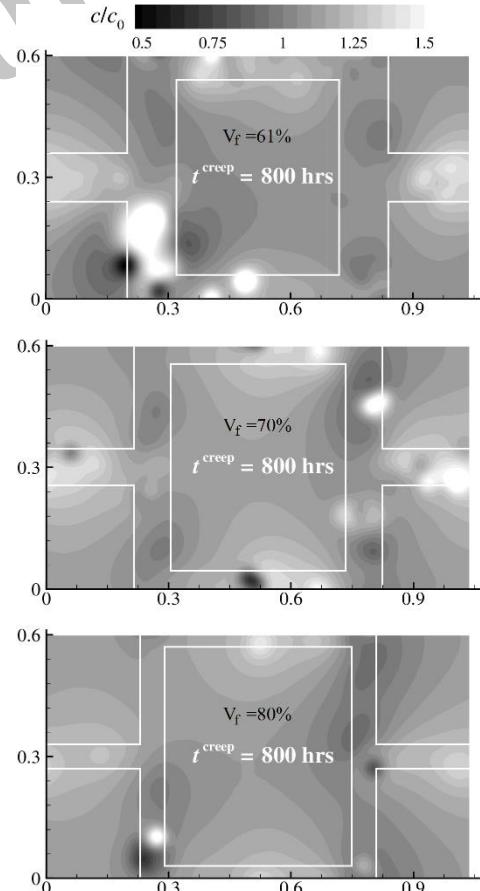


Fig. 6 توزیع غلظت تهی جایی‌ها در زمان خوش 800 hrs برای سه آبرآلیاژ (یک $\rho_{nuc} = 500 \mu\text{m}^2$).

شکل 6 توزیع غلظت تهی جایی‌ها در زمان خوش 800 hrs برای سه آبرآلیاژ (یک $\rho_{nuc} = 500 \mu\text{m}^2$).

- climb-assisted glide motion of dislocations, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 21, No. 4, pp. 045008(26pp), 2013.
- [20] D. Raabe, On the consideration of climb in discrete dislocation dynamics, *Philosophical Magazine A*, Vol. 77, No. 3, pp. 751–759, 1998.
- [21] K. M. Davoudi, L. Nicola, J. J. Vlassak, Dislocation climb in two-dimensional discrete dislocation dynamics, *Journal of Applied Physics*, Vol. 111, No.10, pp. 103522–1–7, 2012.
- [22] C. Ayas, V. S. Deshpande, M. G. D. Geers, Tensile response of passivated films with climb-assisted dislocation glide, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 60, No. 9, pp. 1626–1643, 2012.
- [23] S. M. Keralavarma, T. Cagin, A. Arsenlis, A. A. Benzerga, Power-law creep from discrete dislocation dynamics, *Physical Review Letters*, Vol. 109, No. 26, 265504(4pp), 2012.
- [24] S. M. Keralavarma, A. A. Benzerga, High-temperature discrete dislocation plasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 82, pp. 1–22, 2015.
- [25] C. Ayas, J. A. W. van Dommelen, V. S. Deshpande, Climb-enabled discrete dislocation plasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 62, pp. 113–136, 2014.
- [26] J. P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations*, second ed., pp. 59–95, New York, Wiley, 1982.
- [27] A. A. Benzerga, Y. Bréchet, A. Needleman, E. Van der Giessen, Incorporating three-dimensional mechanisms into two-dimensional dislocation dynamics, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 12, No. 3, pp. 159–196, 2004.
- [28] N. Matan, D. C. Cox, P. Carter, M. A. Rist, C. M. F. Rae, R. C. Reed, Creep of CMSX-4 superalloy single crystals: effects of misorientation and temperature, *Acta Materialia*, Vol. 47, No. 5, pp. 1549–1563, 1999.
- [29] R. C. Reed, N. Matan, D. C. Cox, M. A. Rist, C. M. F. Rae, Creep of CMSX-4 superalloy single crystals: effects of rafting at high temperature, *Acta Materialia*, Vol. 47, No. 12, pp. 3367–3381, 1999.
- [30] Z. Zhu, H. Basoalto, N. Warnken, R. C. Reed, A model for the creep deformation behaviour of nickel-based single crystal superalloys, *Acta Materialia*, Vol. 60, pp. No. 12, 4888–4900, 2012.
- [31] T. Ikeda, A. Almazouzi, H. Numakura, M. Koiwa, W. Sprengel, H. Nakajima, Single-phase inter-diffusion in Ni₃Al, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 46, No. 15, pp. 5369–5376, 1998.
- [32] A. Staroselsky, B. Cassenti, Mechanisms for tertiary creep of single crystal superalloy, *Mechanics of Time-Dependent Materials*, Vol. 12, No. 4, pp. 275–289, 2008.
- [33] L. H. Rettberg, M. Tsunekane, T. Pollock, *Rejuvenation of nickel-based superalloys GTD444(DS) and RENE N5(SX)*, M. C. Hardy, P. D. Portella, E. S. Huron, R. C. Reed, R. E. Montero (Eds.) *Superalloys 2012*, pp. 35–43, New York, Wiley, 2012.
- [34] T. M. Pollock, A. S. Argon, Creep resistance of CMSX-3 nickel base superalloy single crystals, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 40, No. 1, pp. 1–30, 1992.
- [35] L. Agudo Jacome, P. Nortershäuser, J.-K. Heyer, A. Lahni, J. Frenzel, A. Dlouhy, C. Somsen, G. Eggeler, High-temperature and low-stress creep anisotropy of single-crystal superalloys, *Acta Materialia*, Vol. 61, No. 8, pp. 2926–2943, 2013.
- [36] L. Agudo Jacome, P. Nortershäuser, C. Somsen, A. Dlouhy, G. Eggeler, On the nature of phase cutting and its effect on high temperature and low stress creep anisotropy of Ni-base single crystal superalloys, *Acta Materialia*, Vol. 69, pp. 246–264, 2014.
- [37] P. Sofronis, R. M. McMeeking, The effect of interface diffusion and slip on the creep resistance of particulate composite materials, *Mechanics of Materials*, Vol. 18, No. 1, pp. 55–68, 1994.
- [2] R. C. Reed, T. Tao, N. Warnken, Alloys-By-Design: Application to nickel-based single crystal superalloys, *Acta Materialia*, Vol. 57, No. 19, pp. 5898–5913, 2009.
- [3] R. C. Reed, *The Superalloys: Fundamentals and Applications*, pp. 174–190, Cambridge, Cambridge University press, 2006.
- [4] A. Parsa, P. Wollgramm, H. Buck, C. Somsen, A. Kostka, I. Povstugar, P. Choi, D. Raabe, A. Dlouhy, J. Müller, E. Spiecker, K. Demtroder, J. Schreuer, K. Neuking, G. Eggeler, Advanced scale bridging microstructure analysis of single crystal Ni-base superalloys, *Advances in Engineering Materials*, Vol. 17, No. 2, pp. 216–230, 2015.
- [5] V. A. Vorontsov, L. Kovarik, M. J. Mills, C. M. F. Rae, High-resolution electron microscopy of dislocation ribbons in a CMSX-4 superalloy single crystal, *Acta Materialia*, Vol. 60, No. 12, pp. 4866 – 4878, 2012.
- [6] S. S. Shishyan, R. M. McMeeking, T. M. Pollock, V. S. Deshpande, Discrete dislocation plasticity analysis of the effect of interfacial diffusion on the creep response of Ni single-crystal superalloys, *Acta Materialia*, Vol. 135, pp. 188–200, 2017.
- [7] S. S. Shishyan, T. M. Pollock, R. M. McMeeking, V. S. Deshpande, Interfacial di diffusion in high-temperature deformation of composites: a discrete dislocation plasticity investigation, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 98, pp. 330–349, 2017.
- [8] T. Murakami, T. Kobayashi, Y. Koizumi, H. Harada, Creep behavior of Ni-base single-crystal superalloys with various γ' volume fraction, *Acta Materialia*, Vol. 52, No. 12, pp. 3737–3744, 2004.
- [9] A. Ma, D. Dye, R. C. Reed, A model for the creep deformation behaviour of single-crystal superalloy CMSX-4, *Acta Materialia*, Vol. 56, no. 8, pp. 1657–1670, 2008.
- [10] H. H. M. Cleveringa, E. Van der Giessen, A. Needleman, Comparison of discrete dislocation and continuum plasticity predictions for a composite material, *Acta Materialia*, Vol. 45, No. 8, pp. 3163–3179, 1997.
- [11] S. M. Hafez Haghighat, G. Eggeler, D. Raabe, Effect of climb on dislocation mechanisms and creep rates in γ' -strengthened Ni base superalloy single crystals: A discrete dislocation dynamics study, *Acta Materialia*, Vol. 61, No. 10, pp. 3709–3723, 2013.
- [12] C. Ayas, L. C. P. Dautenberg, M. G. D. Geers, V. S. Deshpande, Climb-enabled discrete dislocation plasticity analysis of the deformation of a particle reinforced composite, *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 82, No. 7, pp. 071007–1–13, 2015.
- [13] V. V. Bulatov, W. Cai, *Computer Simulation of Dislocations*. Pp. 196–240, New York, Oxford University Press, 2006.
- [14] V. S. Deshpande, A. Needleman, E. Van der Giessen, Plasticity size effects in tension and compression of single crystals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 53, pp.2661–2691, 2005.
- [15] S. S. Shishyan, E. Van der Giessen, Distribution of dislocation source length and the size dependent yield strength in freestanding thin films, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 58, No. 12, pp. 678–695, 2010.
- [16] H. M. Zbib, M. Rhee, J. P. Hirth, On plastic deformation and the dynamics of 3D dislocations, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 40, No. 2-3, pp. 113–127, 1998.
- [17] A. Arsenlis, W. Cai, M. Tang, M. Rhee, T. Oppelstrup, M. Hiratani, G. Hommes, T. G. Pierce, V. V. Bulatov, Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 15, No. 6, pp. 553–595, 2007.
- [18] E. Van der Giessen, A. Needleman, Discrete dislocation plasticity: a simple planar model, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 3, No. 5, pp. 689–735, 1995.
- [19] K. Danas, V. S. Deshpande, Plane-strain discrete dislocation plasticity with