مجله مهندسی مکانیک مدرس، مهر 1396، دوره 17، شماره 7، ص‌ص 171-179

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

بررسی تغییرشکل خزشی در آبَرآلیاژهای تک کریستالی پایه نیکل با استفاده از پلاستیسیته‌ی نابجایی‌های گسسته

سیامک سلیمانی شیشوان*

استادیار، مهندسی سازه، دانشگاه تبریز، تبریز

*تبریز، صندوق پستی 5166616471، sshishvan@tabrizu.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 29 فروردین 1396
پذیرش: 22 خرداد 1396
ارائه در سایت: 22 تیر 1396

کلید واژگان:
آبَرآلیاژ تک کریستالی
خزش در دمای بالا
دینامیک نابجایی‌های گسسته
نفوذ تهی‌جایی
نفوذ سطحی

چکیده

خزش در دمای بالا در آبَرآلیاژهای 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 آبَرآلیاژ تحت تنش تک محوری ثابت استفاده می‌شود که متشکل از فاز گاما (به صورت ماتریس) و فاز گاماپریم (به صورت ذره) می‌باشد. در حالی که تغییرشکل در فاز گاما به صورت الاستیک و پلاستیک ناشی از حرکت گلاید و صعود نابجایی‌ها می‌باشد، تغییرشکل در فاز گاماپریم ترکیب رفتار الاستیک و نفوذ سطحی (در سطح مابین فازها) می‌باشد. حرکت صعود نابجایی‌ها هم درگیر با نفوذ تهی‌جایی‌ها می‌باشد که به صورت صریح در نظر گرفته شده‌اند. این مدل، علاوه بر اینکه توصیف مناسبی از شروع مرحله سوم خزش در آبَرآلیاژها برای شرایط دمایی و تنشی متوسط را ارائه می‌دهد، بررسی اثر پارامترهایی مانند درصد حجمی ذرات گاماپریم را در رفتار خزشی آبَرآلیاژها فراهم می‌نماید. شبیه‌سازی‌های صورت گرفته برای سه مقدار درصد حجمی ذرات گاماپریم نشان می‌دهد که این پارامتر نقش مهمی در مقاومت خزشی آبَرآلیاژها دارد. نتایج حاصل از این تحقیق می‌تواند در معادلات ساختاری مربوط به مدل‌سازی‌های کانتینیومی از اجزای سازه‌ای مورد استفاده قرار گیرد.

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

Siamak Soleymani 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.

1- مقدمه

آبَرآلیاژهای تک کریستالی پایه نیکل به صورت عمده در پره‌های موتورهای هواپیما و توربین‌های گازی که در دماهای بالا کار می‌کنند مورد استفاده قرار می‌گیرند و رفتار خزشی این آبَرآلیاژها غالباً تعیین‌کننده عمر سرویس‌دهی اجزای مورد نظر می‌باشد. میکروساختار آن‌ها به طور تقریبی از دو فاز تشکیل شده است به‌طوری که یک ماتریس نیکل (Ni، فاز گاما) در برگیرنده‌ی ذرات تقریبا مکعبی شکل نیکل آلومیناید (Ni_3Al، فاز گاماپریم) با درصد حجمی بالا می‌باشد. سطح مابین فازها[1] به‌صورت منسجم[2] می‌باشد و از عناصری مانند Cr، Co، Mo، W، Re و Ru با درصد نسبتاً پایین برای بهبود رفتار این آلیاژها بهره برده می‌شود [2,1]. به طور کلی، نحوه طراحی مواد و فرآیند ساخت آبَرآلیاژها با استفاده از یافته‌های تجربی و روش‌های آزمون وخطا

[1] Interface
[2] Coherent

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

S. Soleymani 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)

صورت می‌گیرد که بسیار پرهزینه می‌باشند و در آزمایشگاه‌های پیشرفته امکان‌پذیر 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 گسسته[1] به‌عنوان 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 گاماپریم 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[2] هستیم [3]. در تنش‌های پایین (کمتر از 200 MPa) و دماهای بالا (بیشتر از 1000 °C) پدیده‌ی رفتینگ[3] بوجود می‌آید و منحنی خزش شامل مرحله اول و مرحله دوم[4] می‌باشد [3]. در محدوده تنشی و دمایی مابین این دو حالت، مشخصه منحنی خزش به این صورت است که پس از مرحله اول خزش (که محدود به کرنش‌های کوچک است)، معمولا کرنش خزشی همواره در حال افزایش است به طوری که منحنی وارد مرحله سوم[5] 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 آلومینیوم در مجاورت سطح مابین فازها در اثر تنش‌های ناشی از نابجایی‌ها نسبت داده شده است. هرچند، ارتباط این مکانیسم نفوذ سطحی[6] به رفتار خزشی آبرآلیاژها به صورت آزمایشگاهی بررسی نشده است؛ اخیراً، شیشوان و همکاران [6] با استفاده از مدل‌سازی دینامیک نابجایی‌های گسسته (DDP) شامل نفوذ سطحی (در سطح مابین فازها) نشان داده‌اند که مکانیسم تغییرشکل ناشی از نفوذ سطحی در شروع مرحله سوم منحنی خزش آبرآلیاژهای نیکل موثر است و در مقاله حاضر نیز از این فرمول‌بندی، که در مرجع [7] پایه‌ریزی شده، استفاده می‌شود (رجوع شود به بخش 2).

درصد حجمی ذرات فاز گاماپریم، 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 پایه‌ریزی شده برای پیش‌بینی خزش آبرآلیاژها، درصد حجمی به‌عنوان یکی از پارامترهای مهم مطرح شده است (به عنوان نمونه [9]). با توجه به موفقیت‌های 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 گاماپریم 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 گاماپریم بررسی می‌شود.

ساختار مقاله مطابق زیر می‌باشد. در بخش 2، مدل‌سازی آبرآلیاژها توسط روش DDP که در آن نفوذ سطحی نیز اعمال شده به صورت اجمالی بیان می‌شود. پارامترهای مادی و مدل‌سازی در بخش 3 آورده می‌شود. در بخش 4، 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 به‌عنوان اصلی‌ترین عامل در پلاستیسیته‌ی 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 پایه‌ریزی شده است. مسلما، شبیه‌سازی دینامیک نابجایی‌ها یک روش افزایشی (در زمان) خواهد بود به‌طوری‌که 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 برگرز 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. معمولا 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 این‌که 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 سه‌بعدی دینامیک نابجایی‌ها (به‌عنوان نمونه [17,16]) با استفاده از ابزار محاسباتی بسیار قوی در صدد برآورد نتایج واقعی‌تر (اما محدود) برآمده‌اند. این مدل‌ها با محدودیت محاسباتی روبرو هستند به‌طوری 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 قوی‌ترین ابررایانه 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 واقعی‌تری 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 (گلاید و صعود)، تولید نابجایی، انهدام نابجایی و سایر اندرکنش‌های کوتاه برد مانند قفل‌شدگی 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 گلاید نابجایی‌ها در نظر گرفته شده بود. در نظر گرفتن امکان صعود

[1] Discrete dislocation plasticity (DDP)
[2] Primary
[3] Rafting
[4] Secondary
[5] Tertiary
[6] Interfacial Diffusion

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 خزشی 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"، یک مدل دو بعدی در شرایط کرنش مسطح به عنوان مدل سلول واحد آبرآلیاژ تک کریستالی پایه نیکل در نظر گرفته می‌شود که شامل ماتریس Ni (فاز گاما) و ذره‌های Ni_3Al (فاز گاماپریم) می‌باشد. سلول واحد مستطیل شکل با ابعاد $(h/\tan\varphi)\times h$ حاوی ذرات الاستیک (فاز گاماپریم) مستطیلی با ابعاد $w^{\gamma'}\times h^{\gamma'}$ (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 گاماپریم، 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 می‌گردند.

2-1- نفوذ در سطوح مابین فازها

گرادیان مکانی تنش نرمال به سطح مابین فازها $\sigma_n(\xi)$ در راستای سطح مابین فازها ξ (شکل 1) موجب نفوذ آلومینیوم فاز گاماپریم در راستای سطح مابین فازها می‌شود که این فرآیند نفوذ موجب ایجاد تغییرشکل می‌گردد. آهنگ تغییرشکل به‌صورت یک گسستگی سرعت نرمال بین فازها در مرز مشترک آن‌ها اعمال می‌شود و عبارت است از [7]:

$$\Delta v_n = -\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\mathcal{D}_{(i)}\frac{\partial\sigma_n(\xi)}{\partial\xi}\right) \tag{1}$$

که در آن

$$\mathcal{D}_{(i)} = \frac{D_b\delta_b\Omega}{kT} \tag{2}$$

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

2-2- قوانین ساختاری در DDP

فاز گاما دارای دو سیستم لغزش که در "شکل 1" نشان داده شده‌اند می‌باشد ($\varphi = 30°$) به‌طوری که تولید و حرکت نابجایی‌ها (که با توجه به شرایط کرنش مسطح از نوع لبه‌ای هستند) بر روی این سیستم‌های لغزش صورت می‌گیرد. نابجایی‌ها به‌صورت نقص‌های خطی در محیط الاستیک در نظر 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 می‌گردند. این قوانین ساختاری وابسته به مولفه‌های گلاید $f_g^{(I)}$ و صعود $f_c^{(I)}$ نیروی پیچ ـ کوهلر[1] روی هر نابجایی هستند. سرعت گلاید نابجایی I با استفاده از رابطه دراگ خطی تعیین می‌شود، یعنی [13]

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

[1] Peach-Koehler

که B_g ضریب دراگ گلاید می‌باشد. محاسبه سرعت صعود نابجایی $v_c^{(I)}$ نسبتاً پیچیده می‌باشد چرا که به توزیع تهی‌جایی‌ها[2] در فاز گاما وابسته است. لازم به ذکر است که در نظر گرفتن حرکت صعود نابجایی‌ها در آنالیز 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 تبعیت 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 شده 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 برآورد شود [22]. در نظر گرفتن نفوذ تهی‌جایی‌ها در تعیین سرعت صعود نابجایی‌ها در مرجع [23] برای اولین بار وارد فرمول‌بندی DDP گردید که با استفاده از آن خزش در یک ماده تک کریستالی پیش‌بینی شد. در این فرمول‌بندی مساله نفوذ تهی‌جایی‌ها و دینامیک نابجایی‌ها در دو قالب زمانی مختلف حل می‌شود [24] و لذا درگیری کامل بین آن دو در تعیین حرکت صعود نابجایی‌ها لحاظ نشده است. اخیراً در مرجع [25]، فرمول‌بندی درگیر[3] برای این منظور ارائه شده است که قادر است مساله نفوذ تهی‌جایی‌ها و دینامیک نابجایی‌ها را به صورت درگیر حل نماید که در ادامه توضیح داده می‌شود.

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

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

که در آن $\Omega_{(v)}$ حجم اتمی تهی‌جایی و $b^{(I)}$ مقدار علامت‌دار بردار برگرز نابجایی I می‌باشد. شار تهی‌جایی‌ها $\dot{N}_{(v)}$ برحسب غلظت تهی‌جایی‌ها در موقعیت نابجایی I و مولفه صعود نیروی پیچ‌ـکوهلر تعیین می‌شود، یعنی [25]

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

که r_c شعاع ضبط[4] نابجایی، K ثابت کنترل کننده شدت شار و c_0 غلظت اولیه تهی‌جایی‌ها در دمای T و در غیاب تنش است. غلظت

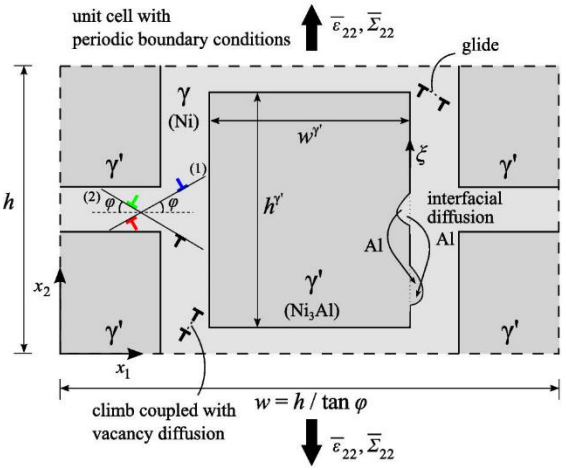

Fig. 1 A sketch showing the unit cell of the superalloy.

شکل 1 سلول واحد برای مدل‌سازی آبرآلیاژ به صورت شماتیک.

[2] Vacancies
[3] Coupled formulation
[4] Capture radius

تهی‌جایی‌ها $c(x_i)$ در مکان و زمان تغییر می‌کند و برای تعیین تغییرات آن، باید معادله نفوذ حاکم $\partial c/\partial t = D_{(\mathrm{v})}\nabla^2 c$ با شرایط مرزی پریودیک در مرزهای سلول واحد حل شود که در آن $D_{(\mathrm{v})}$ ثابت نفوذ تهی‌جایی‌ها است. در عین حال، هر نابجایی در حال صعود به عنوان منبع یا جاذب نقطه‌ای تهی‌جایی‌ها 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/جاذب 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/جاذب تهی‌جایی‌ها در زمان به‌وجود می‌آید و تعداد تهی‌جایی‌ها به سرعت افزایش می‌یابد و محاسبات پرهزینه می‌شود. برای کاهش حجم محاسبات، یک منبع/جاذب تهی‌جایی بعد از گذشت زمان $h^2/(4D_{(\mathrm{v})})$ از زمان تولید آن از فرآیند برهم‌نهی حذف شده و غلظت مربوطه (که در محدوده سلول واحد یکنواخت شده) به مقدار c_0 اضافه می‌گردد.

در مدل دوبعدی حاضر، تولید نابجایی‌ها در فاز گاما از طریق منابع نقطه‌ای فرانک‌ـرید صورت می‌گیرد. در این توصیف دو بعدی، در صورتیکه مولفه گلاید نیروی پیچ‌ـکوهلر از مقاومت منبع $\tau_{\mathrm{nuc}}b$ در مدت زمان t_{nuc} تجاوز نماید، یک دوقطبی نابجایی تولید می‌شود، که b مقدار بردار برگرز نابجایی می‌باشد. علامت نابجایی‌ها براساس جهت نیروی پیچ ـ کوهلر تعیین می‌شود. قانون ساختاری دیگر مربوط به از بین رفتن (انهدام[1]) نابجایی‌های غیر هم علامت (متعلق به یک سیستم لغزش) که در نزدیکی هم قرار دارند (کمتر از L_{e}) می‌باشد. لازم به تاکید است که، فاز گاماپریم غیرقابل رسوخ برای نابجایی‌ها می‌باشد و بنابراین به‌عنوان مانع در برابر حرکت نابجایی‌ها عمل می‌کند.

3-2- مساله مقدار مرزی

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

$$\Delta\dot{u}_i = \dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}\Delta x_j \tag{6}$$

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

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

که C مرز سلول واحد می‌باشد. در شرایط کشش تک‌محوری در راستای محور x_2، نیاز داریم که $\bar{\Sigma}_{11} = \bar{\Sigma}_{12} = 0$ باشد. با اعمال $\dot{\bar{\varepsilon}}_{22}$ به مدل، مقدار $\bar{\Sigma}_{22}$ به عنوان جواب آنالیز برحسب $\bar{\varepsilon}_{22}$ حاصل می‌شود. با رسیدن تنش به مقدار مشخص $\bar{\Sigma}^{\mathrm{app}}$، 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.

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 دسترس‌اند [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 تصحیح‌یافته استفاده می‌شود. با توجه به ماهیت غیرخطی حرکت نابجایی‌ها و تغییرشکل ناشی از نفوذ، تاریخچه تغییرشکل در یک روند افزایشی محاسبه می‌گردد. هر گام افزایشی، شامل پنج کار محاسباتی اصلی است:

i. محاسبه مولفه‌های گلاید و صعود نیروی پیچ‌ـکوهلر با استفاده از موقعیت معلوم تنش در زمان t برای تک تک نابجایی‌ها و منابع؛
ii. به‌روزرسانی میدان غلظت تهی‌جایی‌ها با استفاده از برهم‌نهی میدان‌های منبع/جاذب تهی‌جایی‌ها 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 گسستگی 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 گاماپریم یکسان و ایزوتروپیک با مدول یانگ $E = 100\ \mathrm{GPa}$ 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 $100b$ 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 $\sim 100\ \mathrm{nm}$، مقاومت منابع از یک توزیع نرمال با میانگین $\bar{\tau}_{\mathrm{nuc}} = 100\ \mathrm{MPa}$ و انحراف معیار $2\ \mathrm{MPa}$ انتخاب می‌شوند. اگر چه، بهتر 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 $t_{\mathrm{nuc}} = 10\ \mathrm{ns}$ انتخاب می‌شود. محاسبات برای مقدار مرجع دانسیته منابع $\rho_{\mathrm{nuc}} = 500\ \mathrm{\mu m^2}$ صورت می‌گیرد. البته برای بررسی اثر دانسیته منابع نابجایی‌ها، محاسبات، بر حسب نیاز، برای $\rho_{\mathrm{nuc}} = 300,800\ \mathrm{\mu m^2}$ نیز انجام می‌گیرد. اندازه بردار برگرز برابر $b = 0.25\ \mathrm{nm}$ و ضریب دراگ گلاید برابر $B_{\mathrm{g}} = 10^{-4}\ \mathrm{Pa\,s}$ می‌باشد [26]. کلیه محاسبات DDP در دمای $T = 950\ ^{\circ}\mathrm{C}$ صورت می‌گیرد (مطالعات آزمایشگاهی بر روی آبرآلیاژهای تجاری [29,28]، وجود مرحله سوم منحنی خزش را در این دما گزارش داده‌اند) و مقادیر پارامترهای مادی مربوط به نفوذ سطحی، نفوذ تهی‌جایی‌ها و صعود نابجایی‌ها در جدول 1 آورده شده است.

گام زمانی لازم برای محاسبات DDP برابر $\Delta t = 0.5\ \mathrm{ns}$ 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

[1] Annihilation

برده‌اند). مسلماً با این گام زمانی، انجام محاسبات خزش 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 تهی‌جایی می‌توان انجام محاسبات خزش را عملی نمود به‌طوری که زمان t در محاسبات DDP به زمان خزش در آزمایشات t^{EXP} از طریق $t^{\mathrm{EXP}} = \lambda t$ مرتبط می‌شود که $\lambda = \dot{\varepsilon}^{\mathrm{DDP}}/\dot{\varepsilon}^{\mathrm{EXP}}$ فاکتور سرعت‌دهی[1] 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 تهی‌جایی برابر $D_{(\mathrm{v})}^{\mathrm{DDP}} = \lambda D_{(\mathrm{v})} = 2 \times 10^{5}\ \mu\mathrm{m}^2\mathrm{s}^{-1}$ و ثابت نفوذ سطحی برابر $\mathcal{D}_{(\mathrm{i})}^{\mathrm{DDP}} = \lambda \mathcal{D}_{(\mathrm{i})} = 5 \times 10^{3}\ \mu\mathrm{m}^5\mathrm{N}^{-1}\mathrm{s}^{-1}$ در محاسبات DDP استفاده می‌گردد.

محاسبات برای سه آبرآلیاژ پایه نیکل با درصدهای حجمی ذره‌های گاماپریم $V_{\mathrm{f}} = 61\%$، $V_{\mathrm{f}} = 70\%$ و $V_{\mathrm{f}} = 80\%$ در یک سلول واحد با اندازه $h = 0.6\ \mu\mathrm{m}$ انجام می‌گیرند. عرض کانال فاز گاما برای این سه آبرآلیاژ به ترتیب برابر 120 nm، 90 nm و 60 nm می‌باشد. از المان‌های چهارضلعی با اندازه تقریبی 10 nm برای حل اجزای محدود مساله مقدار مرزی تکمیلی در روش DDP استفاده می‌شود. به‌علاوه 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 خزش 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 خزش است. در مجموع، برای انجام محاسبات خزش که در ادامه می‌آیند، تقریبا 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 دانسیته‌ی منابع نابجایی $\rho_{\mathrm{nuc}} = 500\ \mu\mathrm{m}^2$ آورده شده است که در آن، تغییر درصد فاز گاماپریم موجب تغییر در مقاومت تسلیم آبرآلیاژ شده است. به‌طوری که مقاومت تسلیم آبرآلیاژ 80% گاماپریم به بیش از دو برابر مقاومت تسلیم آبرآلیاژ 61% گاماپریم 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 شکل، نشان داده نشده‌اند. مسلماً، انجام شبیه‌سازی‌های خزش نمی‌تواند در تنش یکسان برای این سه آبرآلیاژ صورت گیرد. برای این منظور، تنش اعمالی برای برآورد رفتار خزشی به‌صورت نسبتی از مقاومت تسلیم صورت می‌گیرد که در ادامه ارائه خواهند شد. همان‌طور که قبلا گفته شد، هر منحنی در "شکل 2"، میانگین نتایج پنج ریالیزیشن از موقعیت و مقاومت منابع نابجایی است و پراکندگی نتایج با استفاده از نشان دادن انحراف معیار توسط میله‌های خطا بر روی هر منحنی صورت گرفته است. در سایر شکل‌های این بخش برای پرهیز از شلوغ شدن شکل‌ها، فقط منحنی‌های میانگین بدون میله‌های خطا نمایش داده خواهند شد. ذکر این نکته مفید است که مقاومت تسلیم آبرآلیاژها تقریبا برابر با مقاومت تسلیم آبرآلیاژهای مهم تجاری [3] می‌باشد.

رفتار تغییرشکل خزشی سه آبرآلیاژ در "شکل 3" برحسب کرنش خزشی به صورت تابعی از زمان برای دو مقدار تنش اعمالی $\bar{\Sigma}^{\mathrm{app}}/\sigma_{\mathrm{Y}} = 0.6$ و $\bar{\Sigma}^{\mathrm{app}}/\sigma_{\mathrm{Y}} = 0.9$ نشان داده شده است. در این‌جا، $\varepsilon^{\mathrm{creep}}$ مقدار کرنش تجمعی در مرحله انجام محاسبات خزش است (شامل کرنشی که تنش را به مقدار موردنظر رسانده‌ایم، نیست) و t^{creep} نیز زمان خزش را نشان می‌دهد. ابتدا منحنی‌های مربوط به دانسیته مرجع منابع نابجایی $\rho_{\mathrm{nuc}} = 500\ \mu\mathrm{m}^2$ را در نظر می‌گیریم. مقدار خزش در تنش اعمالی بالا، نسبتاً بالا می‌باشد و خزش پس از مرحله اول که بسیار کوتاه است، وارد مرحله دوم و بلافاصله وارد مرحله سوم می‌شود. در تنش اعمالی پایین و در دو آبرآلیاژ 61% و 70% گاماپریم، منحنی خزش وارد شروع مرحله سوم شده است در حالی که در آبرآلیاژ 80% گاماپریم، منحنی خزش در مرحله دوم باقی مانده است. می‌توان نتیجه گرفت که افزایش فاز گاماپریم، می‌تواند، حتی با وجود نفوذ در سطح مابین فازها، رفتار خزش آبرآلیاژ را بهبود بخشد. در ادبیات فنی (مانند [3]) خزش مرحله سوم در آبرآلیاژهای پایه نیکل گزارش شده است و معمولا 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 خزشی بالای 5%~ به وقوع می‌پیوندند [33]. به این دلیل، مکانیزم‌های خسارت در مدل حاضر در نظر گرفته نشده‌اند و لذا شناسایی عامل خزش مرحله سوم که توسط مدل حاضر پیش بینی می‌شود، حائز اهمیت است.

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

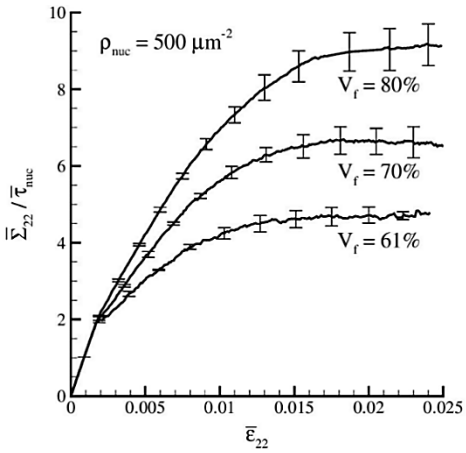

Fig. 2 Stress-strain curves for the three superalloys

شکل 2 منحنی‌های تنش کرنش برای سه آبرآلیاژ

جدول 1 پارامترهای مادی

Table 1 Material parameters

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

(*) در دمای $T \cong 1000\ ^{\circ}\mathrm{C}$.

[1] Speed-up factor

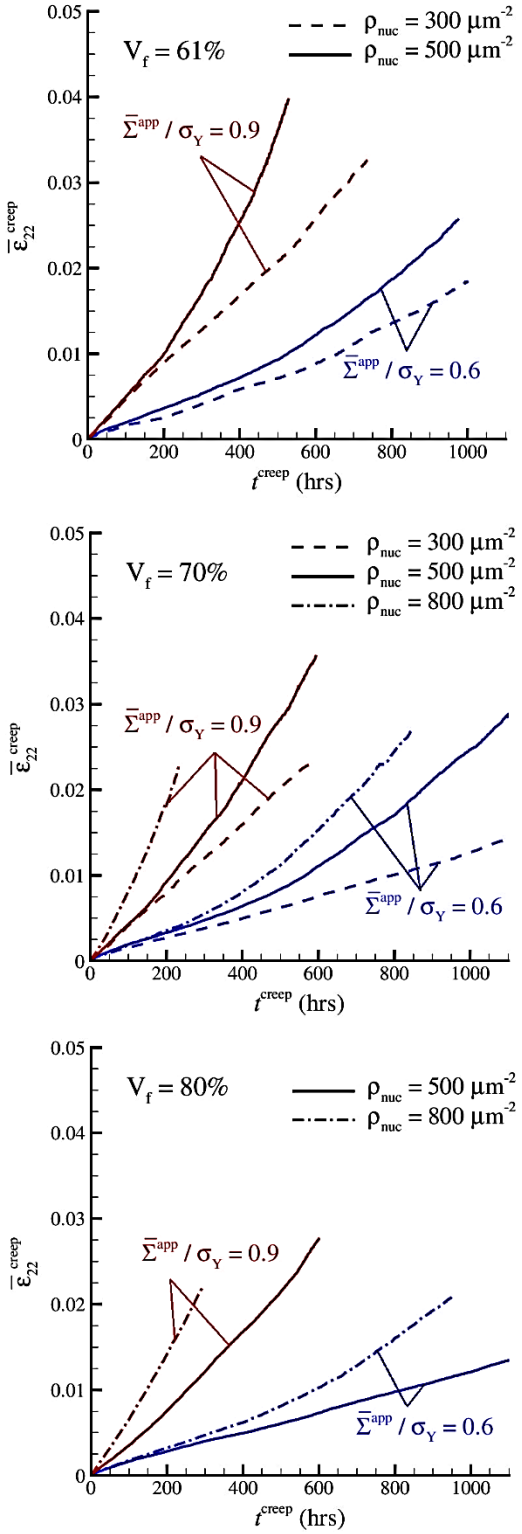

Fig. 3 Creep strain versus time responses for the three superalloys

شکل 3 پاسخ کرنش خزشی در برابر زمان برای سه آبرآلیاژ

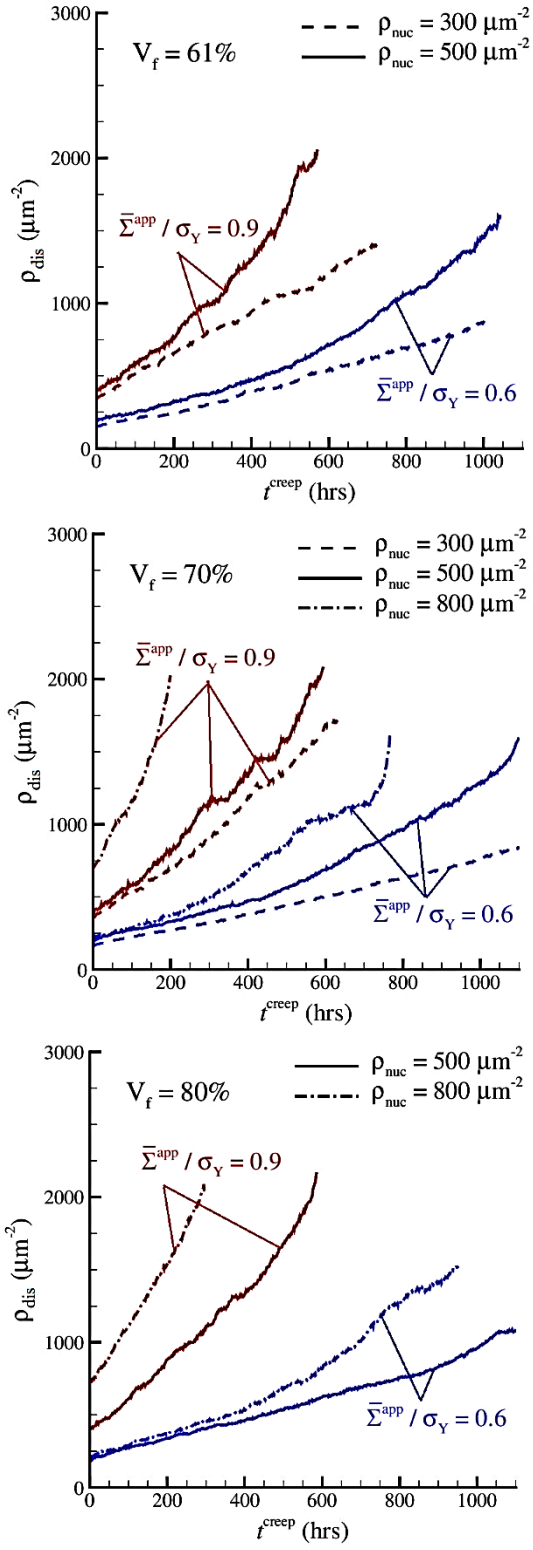

Fig. 4 Dislocation density versus creep time for the three superalloys

شکل 4 تغییرات دانسیته نابجایی‌ها با زمان خزش 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 حالی‌که این مقدار منابع نابجایی در آبرآلیاژ 61% گاماپریم منجربه شروع مرحله سوم خزش شده است. بنابراین، نتیجه 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.

در "شکل 4"، تغییرات دانسیته نابجایی‌ها (که به صورت نسبت تعداد نابجایی‌ها به سطح سلول واحد تعریف شده) برحسب زمان خزش آورده شده است. ملاحظه می‌شود که دانسیته نابجایی‌ها برای تنش $\bar{\Sigma}^{\mathrm{app}}/\sigma_{\mathrm{Y}} = 0.9$ 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 با 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 به‌صورت 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.

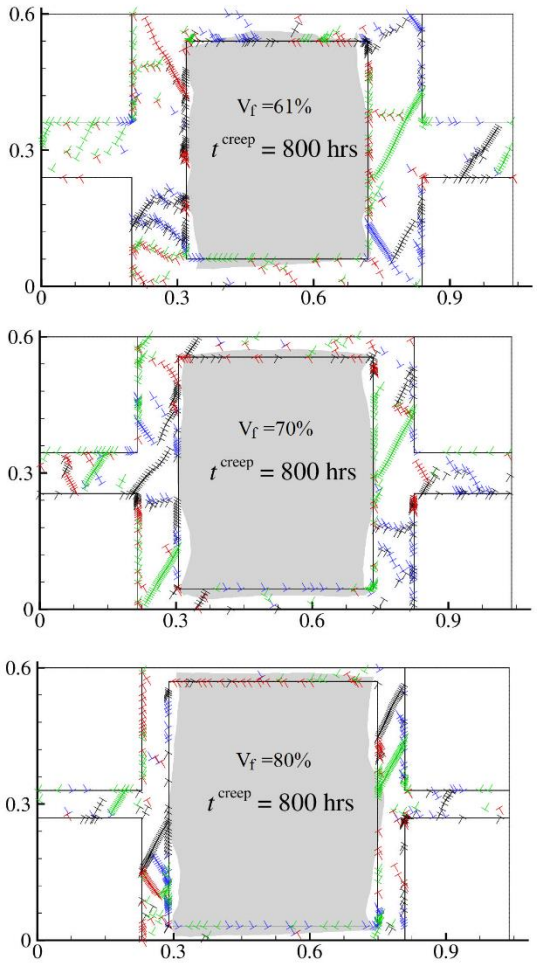

Fig. 5 Dislocation distribution at creep time 800 hrs for the three superalloys (a realization with $\rho_{\mathrm{nuc}} = 500\ \mu\mathrm{m}^2$). The deformed shape (with a magnification factor of 6 for deformations) of central particle is included in gray

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

برای این منظور، "شکل 5" توزیع نابجایی‌ها در زمان خزش 800 hrs را در سه آبرآلیاژ با $\rho_{\mathrm{nuc}} = 500\ \mu\mathrm{m}^2$ نشان می‌دهد. با توجه به عرض بیشتر کانال فاز گاما در آبرآلیاژ 61% گاماپریم، اکثر نابجایی‌ها در کانال گاما پخش شده‌اند و با کاهش عرض کانال، نابجایی‌ها درمجاورت سطح مابین فازها قرار گرفته‌اند. اگرچه، با حضور نفوذ در سطح مابین فازها و به‌علت تغییرشکل‌های موضعی، در بخش‌هایی از کانال هم نابجایی‌ها حضور دارند. امکان صعود نابجایی‌ها باعث می‌شود که نابجایی‌ها ساختار دیواره‌ای و سلولی در داخل کانال فاز گاما تشکیل دهند که منطبق بر مشاهدات آزمایشگاهی [34-36] می‌باشند. حرکت صعود نابجایی‌ها در دیواره‌های این سلول‌های نابجایی تسهیل می‌شود و به‌عبارت دیگر، دیواره‌های نابجایی به‌عنوان مسیرهایی برای صعود نابجایی‌ها عمل می‌کنند. بررسی‌های قبلی توسط روش DDP نشان داده‌اند که صعود نابجایی‌ها به‌عنوان عامل اصلی در افزایش کرنش خزشی در دماهای بالا می‌باشد [6]. لازم به ذکر است که حرکت گلاید 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 اندک حرکت گلاید در نابجایی‌ها باعث می‌شود که نابجایی‌ها بتوانند ساختارهای سلولی 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 موضعی این سطوح می‌شود، صعود نابجایی‌ها ادامه پیدا می‌کند. همین موضوع موجب کاهش تنش بازگشتی و افزایش تولید نابجایی‌ها و بالتبع تشکیل ساختار سلولی نابجایی‌ها می‌شود. همین اضافه شدن فعالیت 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 گاماپریم از کناره‌های 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]) عملاً پیش‌بینی 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 موضعی دارای اهمیت می‌باشند، چرا که این تغییرشکل‌های موضعی در تغییر دادن میدان‌های حاصل از نابجایی‌ها و تسهیل حرکت صعودی آن‌ها نقش به‌سزایی دارند. مقدار این تغییر شکل‌های موضعی در حد $10b$~$20b$ (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 800 hrs برای سه آبرآلیاژ با $\rho_{\mathrm{nuc}} = 500\ \mu\mathrm{m}^2$ در "شکل 6" نشان داده شده است. صعود نابجایی‌ها طی یک فرایند تعاونی[1] در حرکت

[1] Co-operative

نابجایی‌ها صورت می‌گیرد [25]، یعنی گروهی از نابجایی‌ها با صعود خود یک سری تهی‌جایی ساتع می‌کنند که گروه دیگر نابجایی‌ها با صعود خود آن‌ها را جذب می‌کنند. صعود نابجایی‌ها طی یک فرآیند تعاونی یک ویژگی مهم در فرمول‌بندی مرجع [25] برای صعود درگیر با نفوذ تهی‌جایی‌ها محسوب می‌شود. گرادیان‌های مکانی موجود در توزیع غلظت تهی‌جایی‌ها موید وجود حرکت صعود نابجایی‌ها است. ملاحظه می‌شود که در آبرآلیاژ 80% گاماپریم، 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 تهی‌جایی‌ها، صعود بیشتری برای نابجایی‌ها انتظار می‌رود و این فعالیت بیشتر نابجایی‌ها منجر به تولید بیشتر آن‌ها و درنهایت افزایش خزش در آبرآلیاژها می‌شود.

5- نتیجه‌گیری

پلاستیسیته نابجایی‌های گسسته (DDP) برای بررسی خزش در دمای بالا در آبرآلیاژهای تک کریستالی پایه نیکل مورد استفاده قرار گرفته است. میکروساختار آبرآلیاژ به صورت فاز گاما که شامل ذره‌های گاماپریم 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 گاماپریم ترکیب رفتار الاستیک و نفوذ سطحی(در سطح مابین فازها) می‌باشد. حرکت صعود نابجایی‌ها هم درگیر با نفوذ

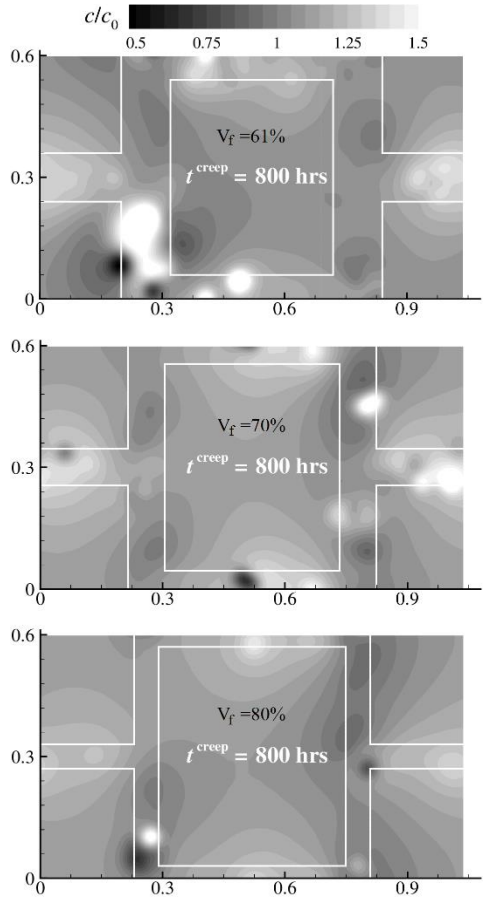

Fig. 6 Distribution of vacancy concentration at creep time 800 hrs for the three superalloys (a realization with $\rho_{\mathrm{nuc}} = 500\ \mu\mathrm{m}^2$).

شکل 6 توزیع غلظت تهی‌جایی‌ها در زمان خزش 800 hrs برای سه آبرآلیاژ (یک ریالیزیشن با $\rho_{\mathrm{nuc}} = 500\ \mu\mathrm{m}^2$).

تهی‌جایی‌ها 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 گسسته اضافه گردید و با پیش‌بینی منحنی‌های تنش-کرنش در یک کامپوزیت دوفازی با درصد حجمی ذرات پایین، اثر تغییرشکل‌های به‌وجود آمده در سطوح مابین فازها بررسی شد. در مرجع [6] نیز برای اولین بار این فرمول‌بندی برای بررسی خزش در آبرآلیاژها (با یک درصد حجمی مشخص برای فاز گاماپریم) به‌کار گرفته شد و ملاحظه گردید که مکانیسم جدید تغییرشکل در سطوح مابین فازها می‌تواند توصیف‌کننده‌ی منحنی خزش آبرآلیاژها در ورود به مرحله سوم باشد. در تحقیق حاضر و در ادامه مرجع [6]، برای اولین بار اثر درصد حجمی فاز گاماپریم در آبرآلیاژها با این فرمول‌بندی مورد بررسی قرار گرفته است و با پیش‌بینی منحنی‌های خزش برای آبرآلیاژها با درصد حجمی فاز گاماپریم مختلف ملاحظه شده است که افزایش درصد حجمی ذرات گاماپریم 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 قرار گیرد.

این مدل توصیف مناسبی از شروع مرحله سوم خزش در آبرآلیاژها برای شرایط دمایی و تنشی متوسط ارائه می‌دهد به‌طوری که برای یک آبرآلیاژ تحت تنش ثابت، ساختار سلولی نابجایی‌ها در فاز گاماپریم بوجود می‌آید که منجر به افزایش دانسیته نابجایی‌ها در محیط شده و با صعود این نابجایی‌ها، تغییرشکل خزشی در آبرآلیاژ ایجاد می‌گردد. نتایج حاصل برای آبرآلیاژها با درصد حجمی ذرات گاماپریم مختلف نشان می‌دهد که با افزایش درصد حجمی ذرات گاماپریم، امکان تشکیل ساختار سلولی نابجایی‌ها کاهش یافته و مقاومت خزشی آبرآلیاژ افزایش می‌یابد و به‌عبارت دیگر منحنی خزش وارد مرحله سوم که در آن کرنش خزش 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 گسسته استفاده نمود و باید از مدل‌های کانتینیومی که دارای متغیرهای داخلی مناسب مانند درصد حجمی فاز گاماپریم 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 نحوه‌ی تغییرات کرنش خزشی با درصد حجمی فاز گاماپریم 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 همفکری 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.

[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. B. Parsa, P. Wollgramm, H. Buck, C. Somsen, A. Kostka, I. Povstugar, P. Choi, D. Raabe, A. Dlouhy, J. Mller, 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. Shishvan, 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. Shishvan, T. M. Pollock, R. M. McMeeking, V. S. Deshpande, Interfacial di ffusion 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. Murakamu, 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. Dautzenberg, M. G. D. Geers, V. S. Deshpande, Climb-enabled discrete dislocation plasticity analysis of the deformation of a particle reinforced composte, *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. Shishvan, 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 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, *Physcal 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-nabled 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 Ni_3Al, *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 Materilas*, 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. Nortershauser, 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. Nortershauser, 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, *Mechics of Materials*, Vol. 18, No. 1, pp. 55–68, 1994.