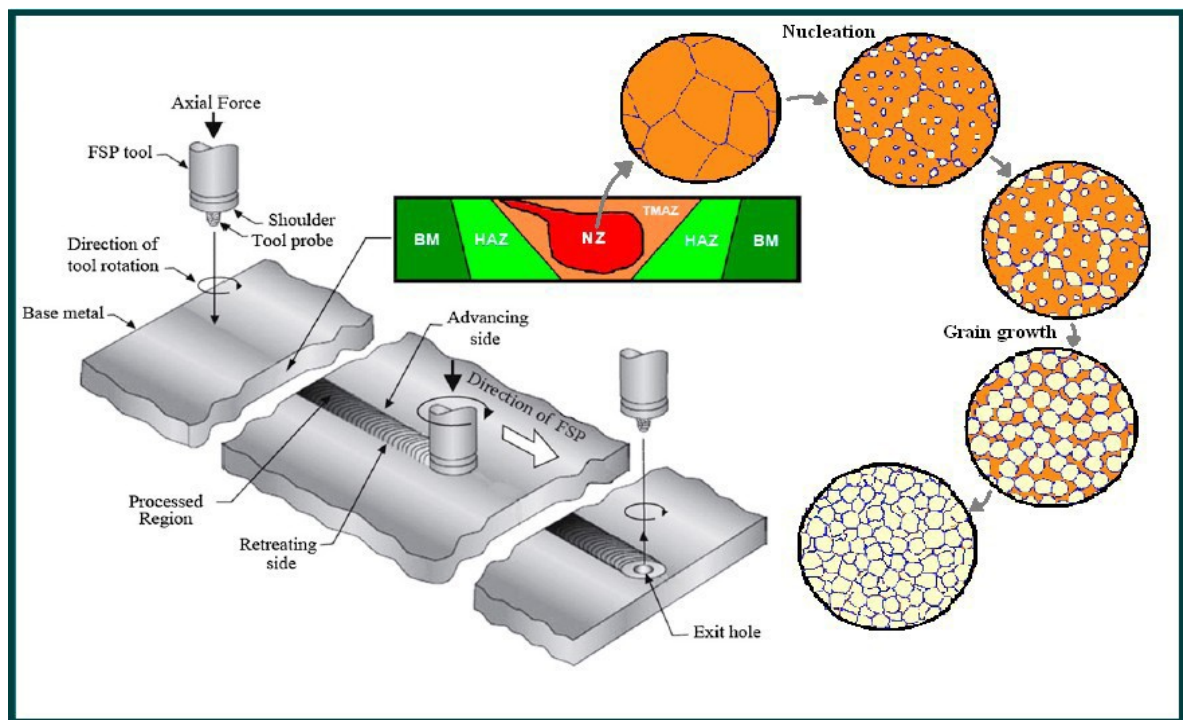




Διπλωματική Εργασία

**Υπολογιστική προσομοίωση χρονικής εξέλιξης μικροδομής στη ζώνη
ανάδευσης συγκολλήσεων FSW, με την μέθοδο του πολυφασικού πεδίου**



ΧΡΗΣΤΟΣ ΠΡΟΣΓΟΛΙΤΗΣ Α.Μ:1434

ΕΠΙΒΛΕΠΟΥΣΑ

Δρ. Α. Ζερβάκη

ΒΟΛΟΣ 2017

*Η παρούσα εργασία αφιερώνεται
στους γονείς μου Γιώργο και Ελένη*

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής Δρ. Άννα Ζερβάκη
(Επιβλέπουσα) ΕΔΙΠ, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής Δρ. Γρηγόρης Χαϊδεμενόπουλος
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής Δρ. Αλέξης Κερμανίδης
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Copyright © 2017 Προσβολίτης Χρήστος

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα (Ν. 5343/32, αρ. 202).

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στο τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας το ακαδημαϊκό έτος 2016-2017. Είχε ως αντικείμενο την ανάπτυξη ενός μοντέλου για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής στη ζώνη ανάδευσης συγκολλήσεων FSW του κράματος Mg AZ31.

Οι πειραματικές μετρήσεις και οι υπολογιστικές προσομοιώσεις έγιναν στο Εργαστήριο Υλικών του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά όλους τους ανθρώπους που συνέβαλλαν στη διεκπαιρέωση αυτής της εργασίας.

Πρώτα απ' όλα, θέλω να ευχαριστήσω την επιβλέπουσα της διπλωματικής μου εργασίας, κα. Άννα Ζερβάκη, για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγησή της, κατά τη διάρκεια της εκπόνησης και συγγραφής της εργασίας μου.

Επίσης, είμαι ευγνώμων στα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της διπλωματικής μου εργασίας, Καθηγητές κκ. Γρηγόρη Χαϊδεμενόπουλο και Αλέξη Κερμανίδη για την προσεκτική ανάγνωση της εργασίας μου και για τις πολύτιμες υποδείξεις τους.

Οφείλω ευχαριστίες στον Dr. Samuel Lambrakos, επιστήμονα στο NRL, για τον υπολογισμό του θερμικού κύκλου που αναφέρεται στην ενότητα 3.3. Ευχαριστώ το συμφοιτητή μου Κωνσταντίνο Τάτσιο για την πολύτιμη συμβολή του στην εκτέλεση της πειραματικής διαδικασίας στην ενότητα 3.1.

Ευχαριστώ την αδερφή μου Ευαγγελία, τον σύζυγό της Θωμά και τον φίλο μας Θάνο για την ηθική τους υποστήριξη και τις όμορφες στιγμές που μου χάρισαν σε όλη τη διάρκεια της φοιτητικής μου σταδιοδρομίας. Επίσης, ευχαριστώ την αγαπημένη μου γιαγιά Ευαγγελία για την δύναμη που μου εκπέμπει σε όλες μου τις προσπάθειες.

Πάνω απ' όλα, είμαι ευγνώμων στους γονείς μου, Γεώργιο και Ελένη, για την ολόψυχη αγάπη, υποστήριξη και κατανόησή τους όλα αυτά τα χρόνια. Αφιερώνω αυτή την εργασία στην μητέρα μου και στον πατέρα μου.

Χρήστος Προσγολίτης

Υπολογιστική προσομοίωση χρονικής εξέλιξης μικροδομής στη ζώνη ανάδευσης συγκολλήσεων FSW, με την μέθοδο του πολυφασικού πεδίου

ΧΡΗΣΤΟΣ ΠΡΟΣΓΟΛΙΤΗΣ

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, 2017

Επιβλέπουσα Καθηγήτρια: Δρ. Άννα Ζερβάκη, ΕΔΙΠ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η μέθοδος συγκόλλησης διά τριβής και ανάδευσης (FSW) είναι μέθοδος συγκόλλησης στερεάς κατάστασης που τα τελευταία χρόνια διερευνάται ως μία υποσχόμενη τεχνική συγκόλλησης για τα κράματα μαγνησίου, εξαιτίας της εξάλειψης των προβλημάτων που σχετίζονται με την στερεοποίηση. Αρκετά αποτελέσματα έχουν δημοσιευτεί στην βιβλιογραφία αλλά ακόμα οι πληροφορίες είναι ελλιπείς είτε στις πειραματικές διαδικασίες είτε στην προσομοίωση των φαινομένων που εξελίσσονται κατά τη διάρκεια της διεργασίας. Η παρούσα εργασία επικεντρώνεται στην προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής στη ζώνη ανάδευσης (nugget zone (NZ)) κατά τη διάρκεια της FSW στο κράμα μαγνησίου AZ31. Ο στόχος είναι η συσχέτιση των παραμέτρων της διεργασίας (γεωμετρικά χαρακτηριστικά του εργαλείου, ταχύτητα περιστροφής, ταχύτητα πρόωσης, εφαρμοζόμενο φορτίο) με τα τελικά χαρακτηριστικά της μικροδομής στην NZ της συγκόλλησης (μέγεθος και αριθμός κόκκων).

Για τις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό MICRESS. Το MICRESS βασίζεται στην μέθοδο πολυφασικού πεδίου (multi phase-field) και παρέχει τη δυνατότητα προσομοίωσης των φαινομένων δυναμικής ανακρυστάλλωσης που συμβαίνουν στη NZ κατά τη διάρκεια του θερμικού κύκλου της συγκόλλησης. Στην NZ η υψηλή θερμοκρασία προέρχεται από την θερμότητα λόγω τριβής, καθώς και από τον υψηλό ρυθμό παραμόρφωσης εξαιτίας της έντονης πλαστικής παραμόρφωσης, οδηγώντας στην δημιουργία λεπτών ανακρυσταλλωμένων κόκκων.

Οι παράμετροι που εισάγονται στο προτεινόμενο μοντέλο περιλαμβάνουν τη γεωμετρία του εργαλείου, την εφαρμοζόμενη κάθετη δύναμη, την ταχύτητα συγκόλλησης, την ταχύτητα περιστροφής του εργαλείου, καθώς και το θερμικό κύκλο της συγκόλλησης. Η ενέργεια ανακρυστάλλωσης, η κινητικότητα του συνόρου του κόκκου και οι ιδιότητες του υλικού, όπως η πυκνότητα των γραμμοαταξιών και το μέτρο διάτμησης αξιολογήθηκαν από την διαθέσιμη βιβλιογραφία για το κράμα AZ31.

Τα αποτελέσματα παρέχουν την εξέλιξη της μικροδομής στη ζώνη ανάδευσης κατά τη διάρκεια του θερμικού κύκλου της συγκόλλησης και περιγράφουν καλά την τελική μικροδομή, όπως τον αριθμό και το μέγεθος των εκλεπτυνσμένων κόκκων, καθώς και τον βαθμό πυρήνωσης. Υπάρχει καλή συμφωνία μεταξύ των αποτελεσμάτων από τις προσομοιώσεις και τα πειράματα, στα χαρακτηριστικά των δυνάμεων συγκόλλησης, της ιστορίας της θερμοκρασίας και το μέγεθος των κόκκων.

ABSTRACT

Friction Stir Welding (FSW) has recently been emerged as a promising joining technique for the Mg alloys due to the expected elimination of the problems associated with solidification. Several results have been published and but still the information is insufficient either on the experiments performed or the simulation of the various phenomena which are evolved during the process. The current work, focuses on the simulation of the microstructure evolution in the nugget zone (NZ) during FSW of the AZ31 Mg alloy. The aim is to correlate the process parameters (tool geometrical characteristics, rotational speed, travel speed, applied load) with the resulting microstructural features in the NZ of the weld (grain size, grain population).

The MICRESS software was employed for the simulations. MICRESS is based on the phase-field approach and provides the possibility to simulate the dynamic recrystallization phenomena (DRX) occur in the NZ during the weld thermal cycle. In the NZ the high temperature came from the frictional heat, as well as, the high strain rate, due to the severe plastic deformation, leads to the generation of fine recrystallized grains.

The input parameters in the proposed model include the tool geometry, the applied axial force, the welding velocity, the tool rotational speed as well as the thermal cycle of the weld. The recrystallization energy, grain boundary mobility and specific material properties as dislocation density and shear modulus were assessed from the data available in the open literature for the AZ31 alloy.

The results provide the evolution of the microstructure in the NZ during the weld thermal cycle and describe well the final microstructure i.e. the number and the size of refined grains as well as the nucleation rate. There is a good agreement between results from the simulations and experiments in the aspects of welding forces, temperature history and grain size.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΚΥΡΙΑ ΑΚΡΩΝΥΜΙΑ	1
1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ	4
2. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ	6
2.1 Μέθοδος Phase-field	6
2.1.1 Ιστορική αναδρομή	7
2.1.2 Θεωρητικό υπόβαθρο	10
2.1.3 Θερμοδυναμική	12
2.1.4 Θερμοδυναμική μη αντιστρεπτών διεργασιών	12
2.1.5 Μοντέλο MPF (Multi-Phase-Field)	12
2.1.6 Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα μοντέλου phase-field	13
2.1.7 Phase-field και ανακρυστάλλωση	14
2.2 Φαινόμενα ανακρυστάλλωσης	14
2.2.1 Δυναμική Ανακρυστάλλωση (DRX)	16
2.2.1.1 Ορολογία	16
2.2.1.2 Παράγοντες που επηρεάζουν τη DRX	17
2.2.2 Ασυνεχής Δυναμική Ανακρυστάλλωση (DDRX)	20
2.2.2.1 Μηχανισμοί DDRX	21
2.2.3 Συνεχής Δυναμική Ανακρυστάλλωση (CDRX)	22
2.2.3.1 Μηχανισμοί CDRX	24
2.2.4 Γεωμετρική Δυναμική Ανακρυστάλλωση (GDRX)	27
2.2.4.1 Μηχανισμοί GDRX	28
2.2.5 Μηχανισμοί Ανακρυστάλλωσης στη FSW	29
2.3 Εφαρμογή της μεθόδου στη FSW για κράματα Mg	30
2.4 Μέθοδος FSW - Κράματα Mg	36
2.4.1 Μέθοδος FSW	36
2.4.2 Κράματα Mg	38
3. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ	40
3.1 Πειραματική διαδικασία	40
3.2 Αριθμητική διαδικασία	43
3.2.1 Πως δουλεύει το MICRESS	43
3.2.2 Διαδικασία προσομοίωσης και παράμετροι MICRESS	44
3.3 Θερμικός κύκλος	47

4. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	50
4.1 Αποτελέσματα από υποθετικούς θερμικούς κύκλους	50
4.1.1 Σχέσεις αριθμού και διαμέτρου κόκκων συναρτήσει του ρυθμού ψύξης	51
4.1.2 Σχέσεις αριθμού και διαμέτρου κόκκων συναρτήσει της αρχικής θερμοκρασίας	53
4.1.3 Σχέση μεταξύ της παραμέτρου Zener–Hollomon, της διαμέτρου και τον αριθμό των κόκκων	56
4.2 Αποτελέσματα από πραγματικό θερμικό κύκλο	57
4.2.1 Διαγράμματα μεταβολών φυσικών μεγεθών	58
4.2.2 Εξέλιξη της μικροδομής κατά τη διάρκεια της FSW	61
5. ΣΥΖΗΤΗΣΗ	75
6 . ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ – ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ – ΣΧΟΛΙΑ	77
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ	80
ΑΝΑΦΟΡΕΣ.	88

ΚΥΡΙΑ ΑΚΡΩΝΥΜΙΑ

CA	Cellular Automaton
CDRX	Continuous Dynamic Recrystallization Συνεχής δυναμική ανακρυστάλλωση
CSRX	Continuous Static Recrystallization Συνεχής στατική ανακρυστάλλωση
DDRX	Discontinuous Dynamic Recrystallization Ασυνεχής δυναμική ανακρυστάλλωση
DRV	Dynamic Recovery Δυναμική αποκατάσταση
DRX	Dynamic Recrystallization Δυναμική ανακρυστάλλωση
DSRX	Discontinuous Static Recrystallization Ασυνεχής στατική ανακρυστάλλωση
ECAP	Equal Channel Angular Pressing
FEM	Finite Elements Method Μεθόδος πεπερασμένων στοιχείων
FSP	Friction Stir Processing
FSW	Friction Stir Welding Συγκόλληση δια τριβής και ανάδευσης
GDRX	Geometric Dynamic Recrystallization Γεωμετρική δυναμική ανακρυστάλλωση
HAGB	High Angle Grain Boundary Σύνоро κόκκου μεγάλης γωνίας
HAZ	Heat Affected Zone Θερμο-επηρεασμένη ζώνη
HCP	Hexagonal Close Packed
HPT	High Pressure Torsion
KM	Kocks-Mecking
LAGB	Low Angle Grain Boundary Σύνоро κόκκου μικρής γωνίας

LJ	Laasraoui-Jonas
MC	Monte Carlo
MDRX	Metadynamic Recrystallization, Μεταδυναμική ανακρυστάλλωση
MPF	Multi-Phase-Field
NZ	Nugget Zone
PF	Phase-field
RX	Recrystallization Ανακρυστάλλωση
SFE, γ_{SFE}	Stacking Fault Energy Ενέργεια σφάλματος στοιβάγματος
SPD	Severe Plastic Deformation
SRV	Static Recovery Στατική αποκατάσταση
SRX	Static Recrystallization Στατική ανακρυστάλλωση
TMAZ	Thermo-Mechanically Affected Zone Θερμο-μηχανικά επηρεασμένη ζώνη
Z	Zener-Hollomon
H.M.Σ.	Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Σαρώσεως

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής στη ζώνη ανάδευσης (NZ) κατά την διάρκεια συγκόλλησης FSW του κράματος μαγνησίου AZ31. Το μοντέλο που αναπτύχθηκε στηρίζεται στην επίδραση της αποθηκευμένης ενέργειας, η οποία προέρχεται από την θερμότητα που μεταφέρεται μέσω του εργαλείου (pin, shoulder) στο υλικό και του υψηλού ρυθμού παραμόρφωσης, λόγω της πλαστικής παραμόρφωσης, κατά την διάρκεια της συγκόλλησης FSW και μελετάται η πυρήνωση και τα στάδια ανάπτυξης των νέων κόκκων. Για την προσομοίωση χρησιμοποιείται το λογισμικό MICRESS, το οποίο βασίζεται στη μέθοδο φασικού πεδίου (Phase-Field) και λαμβάνει υπόψιν παραμέτρους όπως είναι η ενέργεια ανακρυστάλλωσης του κόκκου, η κινητικότητα και η ενέργεια του συνόρου του κόκκου.

Η FSW (Friction Stir Welding) είναι μία διεργασία συγκόλλησης στερεής κατάστασης στην οποία μεταλλικά υλικά συγκολλούνται, ενώ η μέγιστη θερμοκρασία φτάνει στο 80-90% του σημείου τήξης του υλικού. Παρόλο που οι κύριες εφαρμογές της μεθόδου έχουν αναπτυχθεί για τα κράματα Al, τα τελευταία χρόνια μελετάται ως μία πολλά υποσχόμενη τεχνική συγκόλλησης και για τα κράματα Mg. Η βασική διαφορά μεταξύ των συμβατικών τεχνικών συγκόλλησης με τήξη και της FSW είναι ότι στην τελευταία δεν προστίθεται θερμότητα στο σύστημα, αντίθετα η θερμότητα παράγεται εσωτερικά μέσω της τριβής στη διεπιφάνεια εργαλείου-τεμαχίου, με αποτέλεσμα την πλαστική παραμόρφωση του υλικού γύρω από τη ζώνη ανάδευσης. Κατά τη διάρκεια της FSW, το υλικό υποβάλλεται σε έντονη πλαστική παραμόρφωση σε θερμοκρασία 80-90% του σημείου τήξης, με αποτέλεσμα την παραγωγή λεπτότερων κόκκων λόγω ανακρυστάλλωσης.

Η ανακρυστάλλωση προέρχεται από την πλαστική παραμόρφωση η οποία διαμορφώνει μία νέα δομή κόκκων μέσω μετασχηματισμού και μετανάστευσης των HAGBs οδηγούμενη από την αποθηκευμένη ενέργεια. Η ανακρυστάλλωση μπορεί να συμβεί ετερογενώς με καθαρή πυρήνωση και στάδια ανάπτυξης (ασυνεχής) ή ομοιόμορφα έτσι ώστε οι μικροδομές να εξελίσσονται προοδευτικά (συνεχής). Συνήθως, στα περισσότερα μεταλλικά υλικά που υπόκεινται σε θερμή παραμόρφωση, συμβαίνει δυναμική ανακρυστάλλωση (DRX). Κατά τη διάρκεια της θερμής παραμόρφωσης, παρατηρείται συχνά DDRX στα υλικά με χαμηλή SFE και για υψηλές θερμοκρασίες.

Η μέθοδος phase-field είναι ένα μαθηματικό μοντέλο για την επίλυση προβλημάτων διεπιφανειών και εφαρμόζεται κυρίως ως μια μέθοδος για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής κατά τη στερεοποίηση. Στη μέθοδο phase-field, η κατάσταση ολόκληρης της μικροδομής αντιπροσωπεύεται συνεχώς από μία και μόνο μεταβλητή, γνωστή ως (order parameter) παράμετρο τάξης ϕ . Η μέθοδος αντικαθιστά τις οριακές συνθήκες στη διεπιφάνεια με μία μερική διαφορική εξίσωση καθιστώντας το πρόβλημα πιο εύκολο προς επίλυση.

Το λογισμικό MICRESS χρησιμοποιείται για την προσομοίωση φαινομένων στεροποίησης, ανάπτυξης κόκκων, ανακρυστάλλωσης και μετασχηματισμών στερεής κατάστασης μεταλλικών κραμάτων. Η εξέλιξη της μικροδομής οδηγείται κυρίως από θερμοδυναμικά ισοζύγια. Το MICRESS βασίζεται στη μέθοδο multi-phase-field, η οποία καθορίζει μία παράμετρο phase-field για κάθε υπάρχουσα φάση.

Οι παράμετροι που εισάγονται στο προτεινόμενο μοντέλο περιλαμβάνουν τη γεωμετρία του εργαλείου, την εφαρμοζόμενη δύναμη, την ταχύτητα συγκόλλησης, την ταχύτητα περιστροφής του εργαλείου, καθώς και το θερμικό κύκλο της συγκόλλησης. Επιπλέον παράμετροι που απαιτούνται για το λογισμικό προσομοίωσης είναι η ενέργεια ανακρυστάλλωσης, η κινητικότητα του συνόρου του κόκκου και οι ιδιότητες του υλικού, όπως η πυκνότητα των γραμμοαταξιών και το μέτρο διάτμησης.

Η μελέτη της ανάπτυξης των κόκκων κατά τη διάρκεια της DRX και η παραγόμενη τελικά μικροδομή είναι πρωτεύουσας σημασίας για τον καθορισμό των συνθηκών συγκόλλησης και την βελτιστοποίησή τους, επειδή η τελική μικροδομή επηρεάζει σημαντικά τις μηχανικές ιδιότητες της συγκόλλησης.

Οι δυσκολίες στην διαδικασία προσομοίωσης της FSW οφείλεται σε αδυναμίες του λογισμικού, καθώς και στο γεγονός της έλλειψης δεδομένων για συγκεκριμένες παραμέτρους του κράματος AZ31, που οδήγησε στην χρήση προσεγγιστικών τιμών. Βέβαια, αυτό ίσως να μην επιφέρει μεγάλα σφάλματα, επειδή το φαινόμενο της δυναμικής ανακρυστάλλωσης εξελίσσεται πολύ γρήγορα και μικρές μεταβολές στις παραμέτρους εκτιμάται ότι δεν έχουν μεγάλη επίδραση στα αποτελέσματα.

Η συνεισφορά της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι ότι με το συγκεκριμένο μοντέλο προσομοίωσης παρέχεται η δυνατότητα συσχέτισης των συνθηκών συγκόλλησης (γεωμετρικά χαρακτηριστικά του εργαλείου, ταχύτητα περιστροφής, ταχύτητα πρόωσης, εφαρμοζόμενο κάθετο φορτίο), με τις παραμέτρους της διεργασίας (ρυθμός παραμόρφωσης, θερμικός κύκλος) και τις ιδιότητες του υλικού (πυκνότητα γραμμοαταξιών, κινητικότητα συνόρου κόκκου) με τα τελικά χαρακτηριστικά της μικροδομής στην NZ της συγκόλλησης (μέγεθος και αριθμός κόκκων).

Με τον τρόπο αυτό, μπορεί να υπάρξει πρόβλεψη της μικροδομής κατά τη FSW χωρίς τη διεξαγωγή πειραμάτων, γεγονός το οποίο μειώνει το κόστος, το χρόνο και την πολυπλοκότητα της διαδικασίας. Επίσης, με αυτόν τον τρόπο μπορούν να προβλεφθούν οι κατάλληλες συνθήκες συγκόλλησης, έτσι ώστε να προκύψει η βέλτιστη επιθυμητή μικροδομή και μακροδομή συγκόλλησης.

Η διπλωματική εργασία αναπτύσσεται στα εξής κεφάλαια:

Στο **Κεφάλαιο 2** παρουσιάζονται και επεξηγούνται εκτενώς οι όροι φασικό πεδίο (phase-field), ανακρυστάλλωση (αναφέρονται τα είδη και οι μηχανισμοί ανακρυστάλλωσης), FSW, και παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο πάνω στο οποίο στηρίζεται το μοντέλο που αναπτύσσεται. Επίσης, γίνεται μία σύντομη αναφορά στα κράματα Mg.

Στο **Κεφάλαιο 3** παρουσιάζεται η υπολογιστική διαδικασία που ακολουθήθηκε και γίνεται αναφορά στο υπολογισμό του θερμικού κύκλου στη NZ. Παράλληλα περιγράφεται και η πειραματική διαδικασία FSW στο κράμα AZ31.

Στο **Κεφάλαιο 4** παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που προκύπτουν από τις προσομοιώσεις που έγιναν στη βάση διαφορετικών θερμικών κύκλων της συγκόλλησης. Επίσης, δίδονται διαγράμματα και εικόνες που υποστηρίζουν την κατανόηση και επεξήγηση του φαινομένου της ανακρυστάλλωσης, καθώς και χρήσιμες σχέσεις που προκύπτουν από την ανάλυση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων.

Στο **Κεφάλαιο 5** αξιολογούνται τα αποτελέσματα, σχολιάζονται οι αποκλίσεις και αναλύονται αδυναμίες του λογισμικού και σφάλματα της υπολογιστικής διαδικασίας.

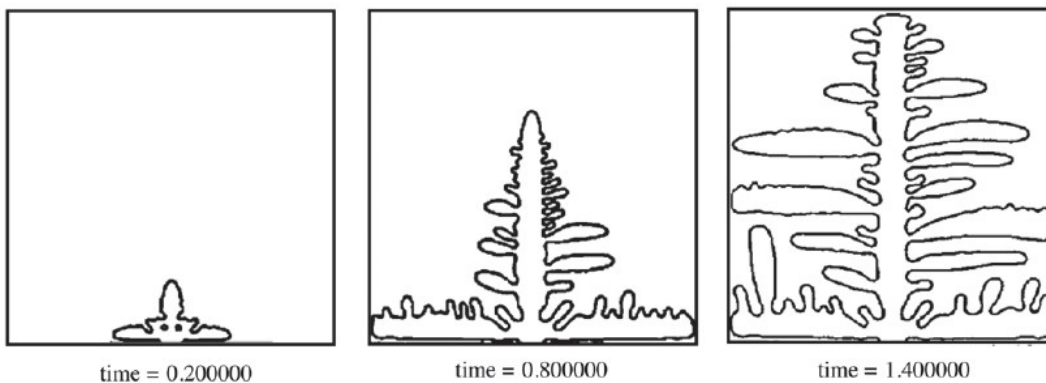
Τέλος στο **Κεφάλαιο 6** δίδονται τα τελικά συμπεράσματα της διπλωματικής εργασίας, οι παραδοχές που χρησιμοποιήθηκαν, και προτείνονται κατευθύνσεις για περαιτέρω έρευνα και βελτιώσεις.

2. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ

2.1 Μέθοδος Phase-Field

Η μέθοδος του φασικού πεδίου (phase field method), άρχισε να χρησιμοποιείται ως επιλογή για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής κατά τη διάρκεια της στερεοποίησης, με βάση την εργασία του Alain Karma το 2001. Στην εργασία αυτή υπολογίστηκε ποσοτικά η έναρξη της δενδριτικής στερεοποίησης, και έκτοτε αποτελεί το ορόσημο προς την κατεύθυνση της ποσοτικής προσομοίωσης της στερεοποίησης. Πριν τον Karma ο Rio Kobayasi είχε οπτικοποιήσει την ανάπτυξη δενδρίτη από καθαρή ουσία σε τήγμα με μεγάλη υπέρψυξη (Σχ. 1). Η μεθοδολογία που ακολούθησε είναι ανάλογη με αυτή που σήμερα αποκαλείται phase field, και περιελάμβανε δύο μερικές διαφορικές εξισώσεις. Τη διαφορική εξίσωση για το θερμοκρασιακό πεδίο $T(\vec{x}, t)$ και την εξίσωση της εξέλιξης μιας συνάρτησης φασικού πεδίου $\Phi(\vec{x}, t)$, η οποία και ξεχώριζε δύο φάσεις: $\Phi=1$ αντιστοιχούσε στο στερεό και $\Phi=0$ στο υγρό, και υπήρχε ομαλή μετάβαση μεταξύ 0 και 1 αντιστοιχώντας στη διεπιφάνεια.

Η πρόοδος που σημειώθηκε έκτοτε είναι πολύ σημαντική, και έτσι με τα σημερινά μέσα σε υπολογιστική δύναμη μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο εκτός της στερεοποίησης και σε άλλες εφαρμογές που αφορούν μετασχηματισμούς φάσεων κατά τη διάρκεια θερμικών κατεργασιών, συγκολλήσεων, καθώς σε συνθήκες χρήσης τεχνικών κραμάτων.



Σχήμα 1: Προσομοίωση 2D με τη μέθοδο φασικού πεδίου, ανάπτυξης δενδρίτη από καθαρή ουσία σε τήγμα με μεγάλη υπέρψυξη. Η στερεοποίηση ξεκινάει από πυρήνα ο οποίος τοποθετήθηκε στο κάτω όριο της περιοχής προσομοίωσης.

Το μοντέλο phase-field είναι ένα μαθηματικό μοντέλο για την επίλυση προβλημάτων διεπιφανειών. Έχει κυρίως εφαρμοστεί σε δυναμική στερεοποίηση [1], αλλά έχει επίσης εφαρμοστεί σε άλλες καταστάσεις όπως viscous fingering, fracture dynamics, vesicle dynamics, κτλ.

Η μέθοδος phase-field έχει αποδειχθεί ότι είναι εξαιρετικά ισχυρή στην απεικόνιση της ανάπτυξης της μικροδομής χωρίς να χρειάζεται να παρακολουθείται η εξέλιξη των μεμονωμένων διεπιφανειών. Όπως αναφέρει και ο Alain Karma στην αναφορά του σχετικά με την δενδριτική στερεοποίηση κραμάτων, η προσέγγιση του phase-field έχει αναδειχθεί ως μια μέθοδος για την

προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής κατά τη στερεοποίηση, το οποίο σηματοδοτεί μια σημαντική ανακάλυψη για την ποσοτική προσομοίωση. Σήμερα μπορούμε να διευρύνουμε το φάσμα των εφαρμογών από τη στερεοποίηση μέχρι την εξέλιξη της μικροδομής κατά την επεξεργασία υλικών, σε μία ευρεία ποικιλία υλικών και διεργασιών. Με αυτόν τον τρόπο το επίπεδο πολυπλοκότητας ανταγωνίζεται με το επίπεδο ποσοτικοποίησης, γιατί ιδιαίτερα στη στερεή κατάσταση οι μηχανισμοί του μετασχηματισμού μερικές φορές δεν είναι τόσο σαφείς όσο στην στερεοποίηση και η διαμόρφωση ενός μοντέλου γίνεται δύσκολη [2].

Παρόλα αυτά, οι ποσοτικές μέθοδοι που έχουν αναπτυχθεί για τη στερεοποίηση χρησιμοποιούνται επίσης και στη στερεή κατάσταση και το ενδιαφέρον για τους υπολογισμούς πρόβλεψης αντικαθιστά όλο και περισσότερο τον καθαρά ποιοτικό προσδιορισμό των αποτελεσμάτων [3,4,5].

Η μέθοδος επιτρέπει επίσης, στο πλαίσιο της μη-αντιστρεπτής θερμοδυναμικής (irreversible thermodynamics) πολλά φυσικά φαινόμενα να αντιμετωπίζονται ταυτόχρονα. Οι εξισώσεις του phase-field έχουν αρκετά απλή μορφή και είναι σαφής για όλους να τις κατανοήσουν, αλλά οι λεπτομέρειες, οι προσεγγίσεις και οι περιορισμοί που οδηγούν στην μαθηματική μορφή δεν είναι ίσως τόσο διαφανείς για εκείνους που ενδιαφέρονται για την εφαρμογή της μεθόδου [1,4].

Στη μέθοδο phase-field, η κατάσταση ολόκληρης της μικροδομής αντιπροσωπεύεται συνεχώς από μία και μόνο μεταβλητή, γνωστή ως (order parameter) παράμετρο τάξης ϕ . Η μέθοδος αντικαθιστά τις οριακές συνθήκες στη διεπιφάνεια με μία μερική διαφορική εξίσωση για την εξέλιξη ενός βοηθητικού πεδίου (το phase field) που παίρνει το ρόλο της παραμέτρου τάξης (order parameter). Για παράδειγμα, κατά την ανάπτυξη ενός κόκκου σε ένα διφασικό υλικό η μεταβλητή ϕ διαχωρίζει τις φάσεις. Το $\phi = 1$ υποδηλώνει το στερεό, $\phi = 0$ το υγρό και η ομαλή μετάβαση του $\phi(x, t)$ μεταξύ 1 και 0 υποδηλώνει τη διεπιφάνεια στερεού-υγρού. Η μέθοδος phase-field έχει το πλεονέκτημα ότι μπορεί να περιγράψει την εξέλιξη του phase-field με μία συνάρτηση, σε συνδυασμό με τις εξισώσεις για τη μάζα και τη αγωγή θερμότητας, δηλαδή τρεις εξισώσεις στο σύνολο, ανεξάρτητα από τον αριθμό των σωματιδίων στο σύστημα, σε σύγκριση με άλλες μεθόδους (π.χ μέθοδος sharp interface)[6].

2.1.1 Ιστορική αναδρομή

Το κύριο χαρακτηριστικό των μοντέλων phase-field είναι η διαχυτότητα (diffuseness) στην διεπιφάνεια μεταξύ δύο φάσεων, το οποίο μερικές φορές ονομάζεται "diffuse interface model". Η διεπιφάνεια αυτή χαρακτηρίζεται από μια απότομη, αλλά συνεχή, μετάβαση (σε πραγματικό χώρο x) της μεταβλητής phase-field $\phi(x,t)$ μεταξύ δύο φάσεων. Αυτή η ιδέα της «διεπιφάνειας διάχυσης» (diffuse interface) χρονολογείται από το van der Waals, ο οποίος ανέλυσε τις δυνάμεις μεταξύ των ατόμων και των μορίων. Από γενικές θερμοδυναμικές εκτιμήσεις αιτιολόγησε ότι μια διεπιφάνεια διάχυσης μεταξύ σταθερών φάσεων ενός υλικού είναι πιο φυσικό από την παραδοχή μιας απότομης διεπιφάνειας με ασυνέχεια σε μια τουλάχιστον ιδιότητα του υλικού.

Ένα δεύτερο χαρακτηριστικό των μοντέλων phase-field είναι ότι μπορούν να θεωρηθούν γενικά καταστάσεις μη ισορροπίας. Η μεταβλητή phase-field ξεχωρίζει ανάμεσα στις διαφορετικές καταστάσεις του υλικού, η οποία μπορεί να είναι ίδια σε όλες τις άλλες μεταβλητές κατάστασης, όπως θερμοκρασία, συγκέντρωση, πίεση κ.λπ. Ως εκ τούτου, η μεταβλητή phase-field είναι μια ανεξάρτητη μεταβλητή κατάστασης. Στην περίφημη θεωρία τους για την μετάβαση της φάσης, οι Ginzburg και Landau χρησιμοποίησαν αυτή την παρατήρηση για την επέκταση των θερμοδυναμικών συναρτήσεων, το οποίο ονόμασαν «παράμετρο τάξης». Ο Hillert ανέπτυξε το

πρώτο μοντέλο για το διαχωρισμό καμψής (spinodal decomposition), όπου η παράμετρος τάξης χρησιμοποιήθηκε σαν μία (διακριτή) μεταβλητή πεδίου στο χώρο και στο χρόνο. Οι Cahn και Hilliard αντιμετώπισαν το ίδιο πρόβλημα και χρησιμοποίησαν τη συγκέντρωση του κράματος ως παράμετρο τάξης. Όλα αυτά τα πρώτα μοντέλα θεώρησαν τη διαχυτικότητα της διεπιφάνειας ως πραγματική και μια ιδιότητα της διεπιφάνειας που μπορεί να προβλεφθεί από την θερμοδυναμική.

Μία πιο ρεαλιστική άποψη του Langer, αναφέρει ότι η διαχυτότητα του phase-field υφίσταται σε μια κλίμακα που είναι κάτω από τη κλίμακα της μικροδομής. Έτσι το πάχος μπορεί να ρυθμιστεί ως μια τιμή που είναι κατάλληλη για μια αριθμητική προσομοίωση. Αναφορά πρέπει επίσης να γίνει και στη θεωρία της μικροελαστικότητας του Khachaturyan που δημιούργησε τη βάση για μια ολόκληρη σχολή μοντέλων phase-field που εφαρμόζονται κυρίως στην εξέλιξη της μικροδομής σε στερεά κατάσταση [4,7]. Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα μοντέλα Kobayashi's dendrite και το μοντέλο WBM για τη στερεοποίηση κραμάτων.

Kobayashi's dendrite

Ο Ryo Kobayashi είχε αναπτύξει ένα σύστημα για να λύσει το πρόβλημα Stefan για τη στερεοποίηση μιας καθαρής ουσίας σε ένα ψυχώμενο τήγμα αντικαθιστώντας το πρόβλημα της διεπιφάνειας με κινούμενο σύνορο με ένα σύστημα διεπιφάνειας διάχυσης. Το σύστημα αυτό είχε μια εντυπωσιακή απλότητα και αποδείχτηκε να είναι ταυτόσημο με τις θεωρητικές έννοιες που καλούμε σήμερα phase-field. Το σύστημα αποτελείται από δύο μερικές διαφορικές εξισώσεις, την εξίσωση διάχυσης για το πεδίο της θερμοκρασίας $T(x, t)$ και την εξίσωση εξέλιξης μιας συνάρτησης, την phase-field $\phi(x, t)$, η οποία διαχωρίζει τις φάσεις. Το $\phi = 1$ υποδηλώνει το στερεό, $\phi = 0$ το υγρό και η ομαλή μετάβαση του $\phi(x, t)$ μεταξύ 1 και 0 υποδηλώνει τη διεπιφάνεια στερεού-υγρού. Στο σύστημα του Kobayashi η εξίσωση phase-field και η εξίσωση για την θερμοκρασία, δίνονται από τις σχέσεις

$$\tau \dot{\phi} = \varepsilon \nabla^2 \phi + \gamma \cdot \phi(1-\phi) \cdot \left(\phi - \frac{1}{2} + m_o(T_m - T) \right) \quad (1)$$

$$\dot{T} = \nabla(\lambda_T \nabla T) + \frac{L}{c_p} \dot{\phi} \quad (2)$$

όπου τ είναι μια σταθερά χαλάρωσης που ρυθμίζει το χρονικό διάστημα, ε και γ είναι ανάλογα με την διεπιφανειακή ενέργεια, που εξαρτάται γενικά από τον προσανατολισμό της διεπιφάνειας σε σχέση με τον προσανατολισμό του κρυστάλλου, T_m είναι η θερμοκρασία ισορροπίας μεταξύ στερεού και υγρού μιας καθαρής ουσίας (θερμοκρασία τήξης). Το m_o είναι ανάλογο προς την ενθαλπία σύντηξης L , το λ_T είναι η θερμική διαχυτότητα και c_p η θερμοχωρητικότητα.

Αυτές οι δύο εξισώσεις είναι απλές παραβολικές διαφορικές εξισώσεις από τη δομή τους. Ωστόσο, και οι δύο εξισώσεις είναι στενά εξαρτημένες. Το $\dot{\phi}$ στην εξίσωση (1) εξαρτάται από την θερμοκρασία T και το \dot{T} στην εξίσωση (2) εξαρτάται από $\dot{\phi}$. Όμως, το σύστημα των εξισώσεων έτσι γίνεται εξαιρετικά μη γραμμικό.

Επιπλέον, μπορεί να φανεί ότι οι εξισώσεις (1) και (2) προέρχεται από μία σειρά θερμοδυναμικών συναρτήσεων με τη χρήση δυναμικής χαλάρωσης (relaxational dynamics). Στη συγκεκριμένη περίπτωση, επιδιώκουμε μια εξίσωση η οποία να είναι συμβατή με την αρχή της μεγιστοποίησης της εντροπίας, κατάλληλη για αδιαβατικά συστήματα με μεταβολές της θερμοκρασίας, όπως αυτή προκύπτει από τον Wang. Η συνάρτηση εντροπίας S ορίζεται από το ολοκλήρωμα της πυκνότητας

εντροπίας s πάνω από το χωρίο Ω . Έχει σχέση με την εσωτερική πυκνότητα ενέργειας e και την ελεύθερη πυκνότητα ενέργειας f στις σχέσεις (3) και (4)

$$S = \int_{\Omega} s = \frac{\int_{\Omega} e - f}{T} \quad (3)$$

$$e = c_p T + L(1 - \varphi) \quad (4)$$

$$f = \frac{1}{2} \varepsilon (\nabla \varphi)^2 + \frac{\gamma}{4} \varphi^2 (1 - \varphi)^2 - L \frac{T_m - T}{T_m} \phi \left(\frac{\varphi^2}{2} - \frac{\varphi^3}{3} \right) \quad (5)$$

Ο πρώτος όρος είναι η συνεισφορά της κλίσης της ενέργειας. Είναι ευαίσθητος στις μεταβολές της μεταβλητής phase-field, π.χ για τις διεπιφάνειες. Ο δεύτερος όρος είναι το περίφημο διπλό δυναμικό $f_{DW} = \gamma \varphi^2 (1 - \varphi)^2$ που ορίζει τα ελάχιστα της ελεύθερης ενέργειας στο $\varphi = 0$ και $\varphi = 1$ με ένα φράγμα ενεργοποίησης του ύψους $\gamma / 16$. Και οι δύο όροι, η κλίση και ο δυναμικός όρος, συμβάλλουν ισομερώς στην ενέργεια διεπιφάνειας. Ο τελευταίος όρος στην εξίσωση (5) ανάλογος του L αλλάζει την ελάχιστη ενέργεια στο $\varphi = 1$ προς τα πάνω ή προς τα κάτω ανάλογα με την απόκλιση της θερμοκρασίας της διεπιφάνειας από τη θερμοκρασία τήξης $T - T_m$. Για $T = T_m$ και οι δύο φάσεις έχουν την ίδια ελεύθερη ενέργεια και καμία αλλαγή φάσεις δε θα συμβεί. Οποιαδήποτε απόκλιση της θερμοκρασίας από τη θερμοκρασία τήξης θα ευνοήσει είτε το στερεό είτε το υγρό. Ωστόσο, η θερμοκρασία στο πρόβλημά μας δεν είναι σταθερή, αλλά εξαρτάται από την εξέλιξη του φ μέσω του τελευταίου όρου $L \phi$ στην (2).

The WBM model of alloy solidification

Το μοντέλο WBM για την στερεοποίηση κράματος αναπτύχθηκε από τους Wheeler, Boettinger και McFadden το 1993. Συνδύασαν το μοντέλο Cahn-Hilliard και τα μοντέλα phase-field των Langer, Collins και Levine, Caginalp και Kobayashi. Η βασική προσέγγιση τους είναι η κατασκευή μιας γενικευμένης συνάρτησης για την ελεύθερη ενέργεια που εξαρτάται τόσο από τη συγκέντρωση όσο και από την φάση, μέσω υπέρθεσης των δύο ελεύθερων ενεργειών των φάσεων και σταθμίζοντας τις μέσω της συγκέντρωσης του κράματος. Η πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας, ισοδύναμη με τη σχέση (5), για ένα διφασικό κράμα με συγκέντρωση c ατόμων A και $(1-c)$ ατόμων B, δίνεται από τη σχέση:

$$f = \frac{1}{2} \varepsilon (\nabla \varphi)^2 + c f_{DW}^A + (1-c) f_{DW}^B - m^{AB}(c, T) \left(\frac{\varphi^2}{2} - \frac{\varphi^3}{3} \right) + \frac{RT}{v_m} [c \ln c + (1-c) \ln(1-c)] \quad (6)$$

$$f_{DW}^{AB} = \gamma^A / B \varphi^2 (1 - \varphi)^2 \quad (7)$$

όπου f_{DW}^{AB} είναι τα δυναμικά των καθαρών κρυστάλλων A και B, αντίστοιχα, v_m ο μοριακός όγκος και R η σταθερά των αερίων. Το συνολικό δυναμικό τώρα είναι τόσο συνάρτηση του φ όσο και του c .

Το σημαντικό σημείο αυτού του μοντέλου είναι ότι η συγκέντρωση αντιμετωπίζεται ως συνεχής πάνω στη διεπιφάνεια. Αυτό συνεπάγεται ότι η διεπιφανειακή ενέργεια γίνεται ουσιαστικά εξαρτώμενη από την τοπική συγκέντρωση και δεν μπορεί να αντιμετωπίζεται ως ανεξάρτητη [8].

2.1.2 Θεωρητικό υπόβαθρο

Ορισμένες βασικές έννοιες που βοηθούν στη βαθύτερη κατανόηση της φυσικής είναι το όριο Gibbs-Thomson, η ανισοτροπία και το λεπτό όριο διεπιφάνειας.

Όριο Gibbs-Thomson

Όριο Gibbs-Thomson ονομάζεται το όριο της μεθόδου phase-field όπου τα αποτελέσματα της προσομοίωσης είναι ανεξάρτητα από το πλάτος της διεπιφάνειας. Ωστόσο, επιδράσεις θα προκύψουν στη διεπιφάνεια εάν η εξίσωση phase-field συνδέεται με μια εξίσωση μεταφοράς και οι κινητήριες δυνάμεις δεν είναι σταθερές.

Κοντά στην ισορροπία, οι παράμετροι του μοντέλου μπορούν να συσχετισθούν με φυσικά μετρήσιμες ποσότητες, όπως η διεπιφανειακή ενέργεια σ , η διεπιφανειακή κινητικότητα μ , η απόκλιση από θερμοδυναμική ισορροπία Δg και το διεπιφανειακό πλάτος η . Η πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας και η εξίσωση phase-field για $0 \leq \varphi \leq 1$ γίνονται

$$f = \left\{ \frac{\sigma}{\eta} [(\eta \nabla \varphi)^2 + \pi^2 \varphi(1-\varphi)] + 2\pi h_{DO}(f) \Delta g \right\} \frac{4}{\pi^2} \quad (8)$$

$$\dot{\varphi} = \mu \left[\frac{\sigma}{\eta} \left(\eta \nabla^2 \varphi + \frac{\pi^2}{\eta} \left(\varphi - \frac{1}{2} \right) \right) - \frac{\pi}{\eta} \sqrt{\varphi(1-\varphi)} \Delta g \right] \quad (9)$$

Η έκφραση στις αγκύλες είναι αδιάστατη ποσότητα μετρούμενη στην διεπιφάνεια της δομής. Η h_{DO} είναι μονότονα αύξουσα συνάρτηση. Η παράγωγος της συνάρτησης είναι ανάλογη με την κλίση του φ , $\nabla \varphi = (\pi/\eta) \sqrt{\varphi(1-\varphi)}$.

Ανισοτροπία και διάνυσμα-ξ

Η ανισοτροπία της διεπιφανειακής ενέργειας και της κινητικότητας αντανακλά την κρυσταλλογραφική δομή του ατόμου στις διεπιφάνειες του υλικού. Αυτή η ανισοτροπία, στα περισσότερα μεταλλικά υλικά, είναι αδύναμη για τις διεπιφάνειες στερεού-υγρού, αλλά μπορεί να είναι και ισχυρή οδηγώντας σε δομές με πολύπλευρες διεπιφάνειες, όπως στο πυρίτιο [9].

Γενικά, η διεπιφανειακή ενέργεια θα είναι συνάρτηση της κανονικής διεπιφάνειας σε σχέση με τη στερεά φάση στη στερεοποίηση $\vec{n} = \nabla \varphi / |\nabla \varphi|$. Στο μετασχηματισμό στερεάς-στερεάς κατάσταση είναι, επιπλέον, μια συνάρτηση της διαφοράς του προσανατολισμού (misorientation) των γειτονικών στερεών φάσεων. Δεδομένου ότι η τελευταία μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι ανεξάρτητη από τη λύση του phase-field, θα μπορούσαμε να τη θέσουμε σταθερή, όταν έχει θεωρηθεί μόνο μία διεπιφάνεια μεταξύ δύο φάσεων. Η μεταβολή της κλίσης του όρου της ενέργειας στην εξίσωση phase-field στο συμβολισμό (8) με το $\nabla \varphi$ γίνεται

$$\nabla \frac{\partial}{\partial \nabla \varphi} \sigma \frac{(\vec{n})}{\eta} [(\eta \nabla \varphi)^2 + \pi^2 \varphi(1-\varphi)] = 2\eta \sigma(\vec{n}) \nabla^2 \varphi + \nabla_{\xi}(\vec{n}) \frac{[(\eta \nabla \varphi)^2 + \pi^2 \varphi(1-\varphi)]}{\eta} \quad (10)$$

όπου $\xi = \partial \sigma(\vec{n}) / \partial \nabla \varphi$ είναι το λεγόμενο διάνυσμα ξ που αντιπροσωπεύει τη γενικευμένη ροπή Herring του μοντέλου phase-field. Ο δεύτερος όρος στην εξίσωση (10) συμβάλλει έντονα σε ανισότροπα συστήματα και προκαλεί προνομακή ανάπτυξη μιας διεπιφάνειας στην ασθενή του κατεύθυνση.

Λεπτό όριο διεπιφάνειας

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, οι περισσότερες εφαρμογές της μεθόδου phase-field ασχολούνται με την κίνηση της διεπιφάνειας σε διεργασίες μεγάλης κλίμακας, όπως η διάχυση μίας διαλυμένης ουσίας που προκαλείται από την ανακατανομή της διαλυμένης ουσίας στη διεπιφάνεια κατά τη στερεοποίηση ενός κράματος. Εφόσον η ταχύτητα της διεπιφάνειας εξαρτάται από τον τοπικό υπερκορεσμό και συνεπώς το προφίλ της συγκέντρωσης στη διεπιφάνεια, η ωθούσα δύναμη $\Delta g = \Delta g(c(x))$ δεν θα είναι σταθερή αν υπάρχει μία σημαντική κλίση της συγκέντρωσης της τάξης του πάχους της διεπιφάνειας η που χρησιμοποιείται στους αριθμητικούς υπολογισμούς.

Αν το πάχος της διεπιφάνειας που χρησιμοποιείται στους αριθμητικούς υπολογισμούς υπερβαίνει το ατομικό πάχος, απαιτείται ένα σύστημα το οποίο αποτελείται από την εξίσωση phase-field και την εξίσωση διάχυσης για την υγρή φάση (η διάχυση στη στερεή φάση είναι αμελητέα). Για ένα κράμα πολλών συστατικών αυτές οι εξισώσεις δίνονται από τις σχέσεις:

$$\dot{\varphi} = \mu^{eff} \left[\sigma \left(\nabla^2 \varphi + \frac{\pi^2}{\eta^2} \left(\varphi - \frac{1}{2} \right) \right) + \frac{\pi}{\eta} \sqrt{(\varphi(1-\varphi))} \Delta g \right] \quad (11)$$

$$\dot{c}^i = \nabla M_i^{ij} (1-\varphi) \nabla \frac{df^c}{dc_j^j} + \nabla A^i \dot{\varphi} \vec{n} \quad (12)$$

όπου μ^{eff} είναι η ενεργή (effective interface mobility) κινητικότητα διεπιφάνειας. Η χημική ελεύθερη ενέργεια $f^c = \varphi f_s(c_s^i) + (1-\varphi) f_l(c_l^i)$ είναι μία συνάρτηση των συγκεντρώσεων c_s^i και c_l^i στην στερεή και υγρή φάση, το άθροισμα των οποίων δίνει την μεικτή συγκέντρωση $c^i = \varphi c_s^i + (1-\varphi) c_l^i$. Οι συγκεντρώσεις είναι διανύσματα στο πεδίο των συστατικών i ενός πολυσυνθετικού κράματος. Το M_i^{ij} είναι το μητρώο κινητικότητας στην υγρή φάση. Ο τελευταίος όρος στην εξίσωση (12) είναι η κλίση του ονομαζόμενου anti-trapping current $j_A^i = A^i \dot{\varphi} \vec{n}$.

Η ωθούσα δύναμη λόγω της κλίσης της συγκέντρωσης στη διεπιφάνεια είναι ανάλογη της ταχύτητας της διεπιφάνειας v_n , μέσω της ενεργής (effective mobility) κινητικότητας διεπιφάνειας μ^{eff} και δίνεται από τη σχέση

$$v_n = \frac{\mu^{eff}}{1 - \mu^{eff} \frac{\eta}{g} \Delta S m_i^i [D_i^{ij}]^{-1} (c_s^j - c_l^j)} \Delta g^i = \mu \Delta g^i \quad (13)$$

Η τελευταία εξίσωση είναι απλά ο προσδιορισμός της φυσικής κινητικότητας μ ως η αναλογική σταθερά μεταξύ της ταχύτητας και της ωθούσας δύναμης.

Αντιστρέφοντάς την μπορούμε να ορίσουμε την ενεργή κινητικότητα

$$\mu^{eff} = \mu \left(1 + \mu \frac{\eta}{g} \Delta S m_i^i [D_i^{ij}]^{-1} (c_s^j - c_l^j) \right) \quad (14)$$

όπου $D_i^j = M_i^j (\partial^2 f^c / \partial c_i^j \partial c_i^k)$ είναι το μητρώο διάχυσης στην υγρή φάση και $m_i^i < 0$ είναι η κλίση της liquidus.

Παρατηρούμε ότι, στο όριο της διεπιφάνειας, όταν $\eta \rightarrow 0$ τότε η διόρθωση της ενεργής κινητικότητας εξαφανίζεται και $\mu^{\text{eff}} = \mu$, άρα η μ^{eff} υπερέρχει για πεπερασμένο η και μεγάλες φυσικές κινητικότητες μ . Για $\mu \rightarrow \infty$ η ενεργή κινητικότητα γίνεται ανεξάρτητη της μ και η επίδραση της ανισότροπης κινητικής, η οποία θα μπορούσε να αντιπροσωπεύεται από μία ανισοτροπία στην μ , χάνεται στην εξίσωση.

2.1.3 Θερμοδυναμική

Η θερμοδυναμική συνάρτηση που επιλέγεται για τη προσομοίωση του phase-field εξαρτάται από τον ορισμό του προβλήματος. Η εντροπία είναι κατάλληλη για ένα απομονωμένο σύστημα το οποίο δεν είναι ισοθερμικό, η ελεύθερη ενέργεια Gibbs είναι κατάλληλη για ένα ισοθερμικό σύστημα σταθερής πίεσης και η ελεύθερη ενέργεια Helmholtz όταν η θερμοκρασία και ο όγκος διατηρούνται σταθερά [6].

Η ελεύθερη ενέργεια (G) για ένα ετερογενή σύστημα δίνεται από τη σχέση:

$$G = \int_V [g_o(\varphi, c, T) + \frac{\varepsilon^2}{2} (\nabla \varphi)^2] dV \quad (15)$$

όπου $g_o \{w, c, T\}$ είναι η ελεύθερη ενέργεια ανά μονάδα όγκου για ετερογενή φάση με σύσταση c σε θερμοκρασία T , V ο όγκος που ολοκληρώνουμε και $\varepsilon^2 = \partial^2 g_o / \partial (\nabla \varphi)^2 - 2 \partial (\partial g_o / \partial \nabla^2 \varphi) / \partial \varphi$ είναι συντελεστής κλίσης της ενέργειας.

2.1.4 Θερμοδυναμική μη αντιστρεπτών διεργασιών

Ο προσδιορισμός του ρυθμού αλλαγών απαιτεί μια σχέση μεταξύ του χρόνου, της ελεύθερης ενέργειας και της παραμέτρου φ . Η μέθοδος phase-field στηρίζεται σε μια θεμελιώδη προσέγγιση της θερμοδυναμικής μη αντιστρεπτών διεργασιών, όπου η ροή που περιγράφει το ρυθμό είναι ανάλογη με τη δύναμη που είναι υπεύθυνη για την αλλαγή. Για μη αντιστρεπτές διαδικασίες οι εξισώσεις της κλασικής θερμοδυναμικής γίνονται ανισότητες. Η θερμοδυναμική των μη αντιστρεπτών διεργασιών ασχολείται με συστήματα τα οποία δεν είναι σε ισορροπία, αλλά παρόλα αυτά είναι σταθερά. Ασχολείται, ως εκ τούτου, με διεργασίες σταθερής κατάστασης όπου η ελεύθερη ενέργεια καταναλώνεται καθιστώντας τη διαδικασία θερμοδυναμικά μη αντιστρεπτή, αφού μετά την εφαρμογή μιας απειροελάχιστη δύναμης, το σύστημα δεν μπορεί να επανέλθει στην αρχική του κατάσταση μετά την απομάκρυνση αυτής της δύναμης.

2.1.5 Μοντέλο MPF (Multi-Phase-Field)

Οι προηγούμενες περιγραφές αφορούσαν προβλήματα αλλαγής δύο φάσεων, ουσιαστικά αλλαγή φάσης από στερεό σε υγρό. Τα πρώτα μοντέλα phase-field για το πρόβλημα αλλαγής τριών φάσεων, αναπτύχθηκαν από τους Karma και Wheeler για ευτηκτικά συστήματα. Για να

εφαρμόζεται η μέθοδος phase-field σε έναν αυθαίρετο αριθμό διαφορετικών φάσεων ή κόκκων της ίδιας φάσης, αλλά διακριτών από τον προσανατολισμό τους, αναπτύχθηκε το λεγόμενο μοντέλο MPF. Κάθε κόκκος ξεχωρίζει από τους άλλους, είτε από τον προσανατολισμό του ή την φάση του (ή και τα δύο). Ιστορικά αυτό μπορεί να θεωρηθεί ως ένα μοντέλο δείκτη-παραμέτρου τάξης, όπως αυτό του Landau. Ένα παρόμοιο μοντέλο για το MPF αναπτύχθηκε ταυτόχρονα από τους Fan και Chen. Αργότερα, ο Kobayashi και ο Warren ανέπτυξαν ένα μοντέλο που χρησιμοποιεί τον προσανατολισμό του κόκκου ως μία παράμετρο τάξης και επιτρέπει την προσομοίωση της στερεοποίησης και της ανάπτυξης των κόκκων.

Παράμετρος τάξης ϕ για μοντέλα MPF

Για την γενική περίπτωση N φάσεων, θα υπάρχει ένας αντίστοιχος αριθμός μεταβλητών phase-field $\phi_i=1$ μέχρι N . Το $\phi_i=1$ αντιπροσωπεύει την περιοχή όπου υπάρχει φάση i , $\phi_i=0$ όπου είναι απύσχα και $0<\phi_i<1$ οριακές διεπιφάνειες. Υποθέτοντας ότι η μήτρα εκπροσωπείται από ϕ_0 τότε είναι απαραίτητο ότι σε οποιαδήποτε θέση ισχύει $\sum_{i=0}^N \phi_i=1$. Προκύπτει ότι η διεπιφάνεια μεταξύ των φάσεων 1 και 2, όπου $0<\phi_1<1$ και $0<\phi_2<1$ δίνεται από $\phi_1+\phi_2=1$. Παρομοίως, για ένα τριπλό δεσμό μεταξύ τριών φάσεων όπου $0<\phi_i<1$ για $i=1,2,3$, με $\phi_1+\phi_2+\phi_3=1$. Η συνάρτηση ϕ μπορεί επίσης να εκφραστεί ως μια διανυσματική συνάρτηση, για παράδειγμα στην αναπαράσταση της μεταβολής της διεπιφανειακής ενέργειας ως συνάρτηση της προσανατολισμού της διεπιφάνειας και αυτό το είδος της θεωρίας έχει χρησιμοποιηθεί και σε μοντελοποίηση με phase-field κρυσταλλικών σχημάτων [10,11].

2.1.6 Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα μοντέλου phase-field

Η μέθοδος phase-field παρέχει ένα εργαλείο για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής σε σύνθετα υλικά. Βασίζεται στην θερμοδυναμική περιγραφή για καταστάσεις μη ισορροπίας σε υλικά που περιλαμβάνουν διεπιφάνειες. Το phase-field μορφοποιείται σαν μία μεταβλητή κατάσταση στο χώρο και το χρόνο, η εξέλιξη της οποίας ελέγχει την πορεία προς την ισορροπία [2]. Οι εξισώσεις δυναμικής προέρχονται από την αρχή της μεγιστοποίησης της εντροπίας. Το όριο της λεπτής διεπιφάνειας μαζί με την κινητική και τη διόρθωση του anti-trapping για μετασχηματισμούς στερεής κατάστασης, εγγυάται μία μέγιστη αριθμητικά απόδοση, λόγω της διαχυτικότητας σε περιοχή της διεπιφάνειας πέραν της ατομικής κλίμακας. Επιπλέον, η μέθοδος MPF παρέχει ένα ευέλικτο πλαίσιο για να συμπεριλάβει μεταβάσεις μεταξύ πολλών φάσεων σε πολυσύνθετα υλικά.

Πλεονεκτήματα:

1. Κατάλληλο ιδιαίτερα για την προσομοίωση της ανάπτυξης της μικροδομής
2. Απλή αριθμητική επίλυση λίγων εξισώσεων
3. Ο αριθμός των εξισώσεων που πρέπει να λυθεί είναι πολύ λιγότερο από τον αριθμό των σωματιδίων στο σύστημα.
4. Ευέλικτη μέθοδος με φαινόμενα όπως αλλαγές της μορφολογίας, συνένωση ή διάσπαση σωματιδίων και επικάλυψη των πεδίων διάχυσης. Υπάρχει η δυνατότητα να περιλαμβάνει, συνήθως, μια ποικιλία φυσικών φαινομένων, όπως η εξάρτηση της κινητικότητας, του ρυθμού παραμόρφωσης, ανισοτροπίας κλπ.

Μειονεκτήματα:

1. Πολύ λίγες ποσοτικές συγκρίσεις με την πραγματικότητα, οι περισσότερες εφαρμογές περιορίζονται στην παρατήρηση του σχήματος
2. Υπολογιστικά απαιτητικό για μεγάλες περιοχές.
3. Το πλάτος διεπιφάνειας είναι μία ρυθμιζόμενη παράμετρος που μπορεί να ρυθμιστεί σε μη-ρεαλιστικές τιμές. Πράγματι, σε πολλές προσομοιώσεις το πάχος έχει οριστεί σε τιμές πέραν εκείνων που είναι γνωστές για το σύστημα που μοντελοποιείται. Αυτό μπορεί να οδηγήσει σε απώλεια λεπτομερειών και μη-φυσικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ διαφορετικών διεπιφανειών.
4. Δεν είναι σαφές το σημείο στο οποίο οι παραδοχές της μη αντιστρεπτής θερμοδυναμικής θα αποτύχει.
5. Ο καθορισμός της μεταβολής της πυκνότητας της ελεύθερης ενέργειας στα όρια είναι κάπως αυθαίρετος

2.1.7 Phase-field και ανακρυστάλλωση

Οι μέθοδοι Phase-field (PF) έχουν λάβει σημαντικό ενδιαφέρον τα τελευταία χρόνια σε προσομοιώσεις φυσικών διεργασιών, συμπεριλαμβανομένης και της ανακρυστάλλωσης [2,5]. Στα μοντέλα PF ανακρυστάλλωσης, η μικροδομή κόκκων περιγράφεται από μεταβλητές phase-field.

Αυτές είναι συναρτήσεις που είναι συνεχείς στο χώρο και διακρίνονται μεταξύ διατηρήσιμων και μη διατηρήσιμων μεταβλητών. Μία διατηρήσιμη μεταβλητή είναι τυπικά ένα μέτρο της τοπικής σύνθεσης ενώ μια μη διατηρήσιμη μεταβλητή περιέχει πληροφορίες σχετικά με την τοπική δομή και θα μπορούσε να αντιπροσωπεύει, για παράδειγμα, το κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό. Μέσα σε ένα κόκκο, η τιμή μιας phase-field μεταβλητής διατηρείται σχεδόν σταθερή και αντιστοιχεί στις ιδιότητες του εν λόγω κόκκου. Τα σύνορα του κόκκου αναπαριστώνται ως διεπιφάνειες όπου η τιμή της μεταβλητής phase-field κυμαίνεται σταδιακά μεταξύ των τιμών των γειτονικών κόκκων. Τα σύνορα των κόκκων, ως εκ τούτου περιγράφονται ως περιοχές μετάβασης της διάχυσης από τις μεταβλητές phase-field [12,13].

Η υπολογιστική προσπάθεια για την αντιμετώπιση των ραγδαία μεταβαλλόμενων τομέων στις διεπιφάνειες διάχυσης και της διατύπωσης της πυκνότητας ενέργειας για τον προσδιορισμό φυσικών χαρακτηριστικών της μικροδομής είναι πολύ μεγάλη [14]. Επιπλέον, τοπικές αλλαγές, όπως η πυρήνωση των νέων κόκκων δεν αντιμετωπίζονται εύκολα.

2.2 Φαινόμενα Ανακρυστάλλωσης

Τα περισσότερα από τα μεταλλικά υλικά, έχουν μελετηθεί σε θερμή παραμόρφωση, κατά την οποία συχνά συμβαίνει δυναμική ανακρυστάλλωση (dynamic recrystallization, DRX). Η τελική μικροδομή και οι μηχανικές ιδιότητες των κραμάτων καθορίζονται σε μεγάλο βαθμό από την ανακρυστάλλωση και τα φαινόμενα ανόπτησης. Η έρευνα σχετικά με την ανακρυστάλλωση χρονολογείται πριν από 150 χρόνια. Η γρήγορη ανάπτυξη της θεωρίας της DRX από το 1960 συνοψίζεται από το McQueen το 2004. Πολλοί παράγοντες μπορεί να έχουν σημαντική επίδραση στην DRX [15], σε αυτά περιλαμβάνονται η ενέργεια σφάλματος στοιβάγματος (stacking fault energy, SFE), οι θερμο-μηχανικές συνθήκες της διεργασίας (thermo-mechanical processing, TMP),

το αρχικό μέγεθος των κόκκων, η χημεία και μικροχημεία του υλικού όσον αφορά το επίπεδο διαλυμένης ουσίας και των σωματιδίων της δεύτερης φάσης κλπ.

Κατά τη διάρκεια της θερμής παραμόρφωσης, παρατηρείται συχνά ασυνεχής δυναμική ανακρυστάλλωση (discontinuous dynamic recrystallization, DDRX) στα υλικά με χαμηλή SFE και για υψηλές θερμοκρασίες ($T > 0.5 T_m$), όπου συμβαίνει πυρήνωση νέων κόκκων και αυτοί οι κόκκοι αναπτύσσονται περισσότερο στις περιοχές που είναι γεμάτες γραμμοαταξίες. Κελιά ή δομές υποκόκκων (subgrain) με σύνορα κόκκου μικρής γωνίας (low angle grain boundaries LAGBs) σχηματίζονται κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης των υλικών με υψηλή SFE εξαιτίας της δυναμικής αποκατάστασης (dynamic recovery), που σταδιακά εξελίσσονται σε σύνορα κόκκου μεγάλης γωνίας (high angle grain boundaries HAGBs) σε μεγαλύτερες παραμορφώσεις, μια διαδικασία η οποία είναι γνωστή ως συνεχής δυναμική ανακρυστάλλωση (continuous dynamic recrystallization, CDRX) [22]. Εκτός των DDRX και CDRX, μια άλλη σχετικά νέα ιδέα της γεωμετρικής δυναμικής ανακρυστάλλωσης (geometric dynamic recrystallization, GDRX), παρατηρήθηκε, επίσης, στην παραμόρφωση του αλουμινίου για μεγάλες καταπονήσεις σε υψηλές θερμοκρασίες. Σε αυτή την περίπτωση, οι παραμορφωμένοι κόκκοι γίνονται επίμηκες με τοπικές αιχμές (serrations), αλλά παραμένουν ευδιάκριτοι κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης για μεγάλες καταπονήσεις, εκτός εάν το πάχος τους είναι κάτω από 1-2 φορές το μέγεθος του υποκόκκου (subgrain), χρόνος κατά τον οποίο οι ανεπτυγμένες αιχμές στενεύουν και σχηματίζονται ισοαξονικοί κόκκοι με HAGBs. Ουσιαστικά μέσω της επιμήκυνσης και της στένωσης του κόκκου πραγματοποιείται εκλέπτυνση των κόκκων. Έχουν αναπτυχθεί αριθμητικά μοντέλα για αυτούς τους τρεις τύπους DRX, τα περισσότερα από αυτά επικεντρώνονται στην DDRX και λιγότερα μοντέλα για CDRX και GDRX.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι δεν υπάρχει αυστηρή διαχωριστική γραμμή μεταξύ αυτών των τριών τύπων. Για παράδειγμα, η CDRX παρατηρήθηκε κατά τη διάρκεια έλασης λεπτόκοκκου 304 ωστενιτικού ανοξειδωτού χάλυβα, που είναι χαμηλής SFE, η DDRX αναφέρθηκε για υψηλής SFE Al, υψηλής καθαρότητας, οι CDRX και DDRX μπορεί ακόμη και να συνυπάρχουν κατά τη διάρκεια θερμής κατεργασίας κράματος Mg-3Al-1Zn ή duplex ανοξειδωτού χάλυβα. Κατά το σχεδιασμό νέων κραμάτων, η προσθήκη κραματικών στοιχείων στο υλικό βάσης μπορεί να τροποποιήσει την SFE [16] και έτσι να αλλάξει η μέθοδος ανακρυστάλλωσης. Ακόμη και για το ίδιο υλικό, αλλάζοντας τις συνθήκες TMP [17] ή το αρχικό μέγεθος των κόκκων [18] μπορεί να γίνει μετάβαση από DDRX σε CDRX. Εν τω μεταξύ, οι CDRX και GDRX μπορούν να δράσουν ταυτόχρονα, όπως π.χ στο Zircaloy-4. Επίσης, έχει παρατηρηθεί ότι η CDRX συμβαίνει σε όλα τα μέταλλα και κράματα, ανεξάρτητα από την SFE, όταν η θερμοκρασία είναι σχετικά χαμηλή ($T < 0.5 T_m$). Λόγω των αυξανόμενων απαιτήσεων σχετικά με την ικανότητα διαμόρφωσης των μεταλλικών υλικών, εξαρτήματα τα οποία προηγουμένως διαμορφώνονταν σε θερμοκρασία δωματίου, όπου η DRX είναι γενικά αμυδρή, τώρα συχνά υποβάλλονται σε επεξεργασία σε υψηλές θερμοκρασίες [19,20]

Δεν είναι εύκολο να εντοπιστεί απλά πιο από τα τρία είδη DRX συμβαίνει σε συγκεκριμένες συνθήκες TMP δεδομένου ότι μοιράζονται κάποιες ομοιότητες και μπορεί να λαμβάνουν χώρα ταυτόχρονα ή/και μεταβατικά. Είχε γίνει το 1997 μία γενική αναφορά για το φαινόμενο της ανακρυστάλλωσης, επειδή τότε έχει διαδοθεί ευρέως η τεχνική EBSD, η οποία μπορεί να παρέχει πολύτιμες πληροφορίες για την εξέλιξη των κρυσταλλογραφικών προσανατολισμών και ευχέρεια στην κατανόηση των διαφόρων διαδικασιών DRX. Για τις CDRX και DDRX έγινε πρόσφατα μία αναφορά [21], ωστόσο, η GDRX δεν καλυπτονταν.

2.2.1 Δυναμική Ανακρυστάλλωση (DRX)

2.2.1.1 Ορολογία

Υπάρχουν διαφορετικές φαινομενολογικές κατηγορίες ανακρυστάλλωσης, πολλές από αυτές συνδέονται μεταξύ τους και τα όρια μεταξύ αυτών δεν είναι πάντα ξεκάθαρα. Υπάρχουν επιπλέον και κάποιες ορολογίες στον τομέα της ανακρυστάλλωσης οι οποίες αξίζει να αναφερθούν πριν φτάσουμε σε λεπτομέρειες της δυναμικής ανακρυστάλλωσης (DRX). Ατέλειες όπως οι γραμμοαταξίες και οι διεπιφάνειες αυξάνονται κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης, γεγονός που καθιστά το υλικό θερμοδυναμικά ασταθές. Όταν παραμορφώνεται ένα υλικό σε υψηλές θερμοκρασίες, ενεργοποιούνται θερμικές διαδικασίες που τείνουν να αφαιρέσουν αυτά τα ελαττώματα ώστε να μειωθεί η ελεύθερη ενέργεια του συστήματος. Η μικροδομή και οι ιδιότητες μπορεί τοπικά να επανέλθουν στις αρχικές τους τιμές πριν την παραμόρφωση, από αποκατάσταση (recovery) μέσω αφανισμού και αναδιάταξη των γραμμοαταξιών. Η αποκατάσταση γενικά φέρνει σχετικά ομοιογενείς αλλαγές στη μικροδομή και γενικά δεν εμπλέκεται στην μετανάστευση (migration) των HAGBs μεταξύ των παραμορφωμένων κόκκων. Παρόμοια διαδικασία αποκατάστασης, ίσως συμβαίνει κατά τη διάρκεια της ανόπτησης ή κατά τη διάρκεια παραμόρφωσης, τα οποία είναι γνωστά ως στατική αποκατάσταση (static recovery, SRV) και δυναμική αποκατάσταση (dynamic recovery, DRV), αντίστοιχα.

Η ανακρυστάλλωση προέρχεται από την πλαστική παραμόρφωση η οποία διαμορφώνει μία νέα δομή κόκκων, μέσω μετασχηματισμού και μετανάστευσης των HAGBs οδηγούμενη από την αποθηκευμένη ενέργεια. Η ανακρυστάλλωση μπορεί να συμβεί ετερογενώς με καθαρή πυρήνωση και στάδια ανάπτυξης, και στην περίπτωση αυτή περιγράφεται ως ασυνεχής διαδικασία. Αντιθέτως, μπορεί επίσης να λάβει χώρα ομοιόμορφα έτσι ώστε οι μικροδομές να εξελίσσονται προοδευτικά, χωρίς σαφή πυρήνωση και στάδια ανάπτυξης, παρουσιάζοντας ένα συνεχή χαρακτήρα. Η στατική ανακρυστάλλωση (static recrystallization, SRX) αναφέρεται στη διαδικασία ανακρυστάλλωσης κατά τη διάρκεια της ανόπτησης, ενώ δυναμική ανακρυστάλλωση (DRX) ονομάζεται όταν συμβαίνει κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης σε υψηλές θερμοκρασίες. Κατά τη διάρκεια των πρώτων σταδίων της ανόπτησης, σχηματίζονται λεπτοί κρύσταλλοι χωρίς αταξίες μέσω SRV, οι πυρήνες αυτοί μεγαλώνουν οδηγούμενοι από την αποθηκευμένη ενέργεια που συνδέεται με τις γραμμοαταξίες ή / και με τα υπο-σύνορα (sub-boundaries). Αυτή η διαδικασία είναι η πιο μελετημένη και ευρέως χρησιμοποιούμενη διαδικασία ανακρυστάλλωσης, η οποία μπορεί να χαρακτηριστεί ως ασυνεχής στατική ανακρυστάλλωση (discontinuous static recrystallization, DSRX). Η SRX μπορεί επίσης να συμβεί ομοιογενώς χωρίς καθαρή πυρήνωση και στάδια ανάπτυξης, ένα καλό παράδειγμα είναι όταν γίνεται ανόπτηση σε υψηλές θερμοκρασίες σε κράματα Al με σωματίδια σταθεροποιημένης δομής. Λεπτά σωματίδια καθιζάνουν κατά μήκος των συνόρων των κόκκων, ενώ σταδιακή ανάπτυξη subgrains πραγματοποιείται κατά την διάρκεια μεταγενέστερης ανόπτησης, λόγω της διεύρυνσης των σωματιδίων διασποράς και οι προσανατολισμοί των LAGBs αυξάνονται προοδευτικά μέχρι να μετατραπούν σε HAGBs. Με αυτόν τον τρόπο, μια νέα μικροδομή αναπτύσσεται ομοιόμορφα σε όλη την παραμορφωμένη μήτρα και ως εκ τούτου χαρακτηρίζεται ως συνεχής στατική ανακρυστάλλωση (continuous static recrystallization, CSRX) ή εκτενής αποκατάσταση (extended recovery).

Επιστρέφοντας στην DRX, αξίζει να σημειωθεί ότι, αν η παραμόρφωση σταματήσει μετά την κρίσιμη παραμόρφωση για DDRX αλλά η θερμοκρασία ανόπτησης δεν πέσει αρκετά γρήγορα, οι πυρήνες ανακρυστάλλωσης που παράχθηκαν στο υλικό θα αυξηθούν χωρίς καθυστέρηση στη μήτρα η οποία έχει υψηλότερη αποθηκευμένη ενέργεια. Αυτό το φαινόμενο είναι γνωστό ως μεταδυναμική ανακρυστάλλωση (metadynamic recrystallization, MDRX) [21].

Έχει καθιερωθεί εδώ και πολλά χρόνια ότι οι πυρήνες της ανακρυστάλλωσης δεν σχηματίζονται τυχαία, όπως στην περίπτωση του μετασχηματισμού φάσης, αλλά σχηματίζονται από μικρούς όγκους που υπάρχουν ήδη στην παραμορφωμένη μικροδομή [22]. Για αυτούς τους μικρούς όγκους, συνήθως subgrains, για να αναπτυχθούν επιτυχώς οι νέοι κόκκοι είναι απαραίτητο να έχουν μεγάλη γωνία διαφοράς προσανατολισμού, καθώς και ένα πλεονέκτημα ενέργειας.

2.2.1.2 Παράγοντες που επηρεάζουν τη DRX

- **Stacking fault energy**

Η ενέργεια σφάλματος στοιβάγματος (stacking fault energy, SFE, γ_{SFE}) του υλικού έχει σημαντική επίδραση στην DRX. Η SFE καθορίζει τον βαθμό στον οποίο ομάδες γραμμοαταξιών διαχωρίζονται σε επιμέρους γραμμοαταξίες. Τυπικές τιμές της SFE για διάφορα μέταλλα και κράματα (σε θερμοκρασία δωματίου) παρουσιάζονται στον Πίνακα 1. Θα πρέπει να αναφερθεί ότι η μέτρηση με ακρίβεια της SFE είναι δύσκολη λόγω της μικρής απόστασης μεταξύ των επιμέρους αταξιών, ωστόσο έχουν προταθεί κάποιες εναλλακτικές μεθόδους.

Πίνακας 1 SFE μετάλλων και κραμάτων μετρημένη σε θερμοκρασία δωματίου

Metal	γ_{SFE} (mJ m ⁻²)	Metal	γ_{SFE} (mJ m ⁻²)
Aluminium	166	Zinc	140
Copper	78	Magnesium	125
Silver	22	91Cu:9Si	5
Gold	45	Zirconium	240
Nickel	128	304 Stainless steel	21
Cobalt (FCC)	15	70Cu:30Zn	20

Είναι ακόμη πιο δύσκολο να μετρηθεί η SFE σε υψηλές θερμοκρασίες λόγω των επιπλέον αλλαγών των ελαστικών σταθερών και της μικροχημείας.

Κατά τη διάρκεια της αποκατάστασης (recovery), η αποθηκευμένη ενέργεια του υλικού κυρίως χαμηλώνει μέσω της καταστροφής και της αναδιάταξης των γραμμοαταξιών σε χαμηλότερη ενεργειακή τάξη, εκ των οποίων και τα δύο επιτυγχάνονται μέσω της ολίσθησης πλήρων γραμμοαταξιών, σταυρολίσθηση και αναρρίχηση. Κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης σε υψηλές θερμοκρασίες, για υλικά με υψηλή SFE, όπως κράματα AI, α-σίδηρος και νικέλιο, συμβαίνει ταχεία DRV, το οποίο γενικά εμποδίζει τη συσσώρευση γραμμοαταξιών για να στηρίξει τη DDRX. Κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης παρατηρούνται καλά ανεπτυγμένες δομές subgrain με μόνο περιορισμό τις γραμμοαταξίες μέσα σε αυτούς και η διαφορά προσανατολισμού των συνόρων των subgrains αυξάνεται προοδευτικά, το οποίο μπορεί να οδηγήσει σε HAGBs σε μεγαλύτερες παραμορφώσεις, αυτή η διαδικασία είναι γνωστή ως CDRX. Εάν το υλικό με υψηλή SFE παραμορφώνεται σημαντικά προς μία κατεύθυνση, π.χ., με τη θερμή έλαση ή θερμή συμπίεση, τότε οι αρχικοί κόκκοι επιμηκύνονται και μπορεί να λάβει μέρος GDRX.

Από την άλλη πλευρά, στα υλικά με χαμηλή SFE, όπως ωστενιτικοί ανοξείδωτοι χάλυβες, σχηματίζονται ευρύτερα σφαλμάτα στοιβάγματος, το οποίο κάνει την ολίσθηση πιο δύσκολη. Για αυτά τα υλικά είναι δύσκολο να σχηματίσουν δομές subgrain κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης από DRV, αντ' αυτού, η πυκνότητα των γραμμοαταξιών αυξάνει σε υψηλό επίπεδο και τελικά μερικές από τις τοπικές διαφορές στην πυκνότητα γραμμοαταξιών γίνονται αρκετά μεγάλες για να

ξεπεραστεί το όρο για το σχηματισμό νέων κόκκων. Τέλος, αποκτάται μία νέα μικροδομή και αυτή η δυναμική διαδικασία είναι γνωστή ως DDRX.

Αυτό εξηγεί γιατί οι CDRX και GDRX παρατηρούνται συνήθως σε υλικά με υψηλή γ_{SFE} ενώ η DDRX αναμένεται για υλικά με χαμηλή SFE. Θα πρέπει να τονιστεί ότι η SFE δεν είναι ο μόνος παράγοντας που καθορίζει το είδος της DRX.

- **Αρχικό μέγεθος κόκκου**

Τα σύνορα των κόκκων εμποδίζουν την κίνηση των γραμμοαταξιών, έτσι μεταβάλλοντας το μέγεθος του κόκκου είναι δυνατόν να μεταβληθεί η ευκολία με την οποία κινείται η γραμμοαταξία. Αυτό ισχύει προφανώς και για τα τρία είδη DRX. Εκτός των μηχανικών ιδιοτήτων, το αρχικό μέγεθος κόκκων επηρεάζει επίσης την ανάπτυξη της μικροδομής και στις τρεις διαδικασίες DRX, αλλά με διαφορετικούς τρόπους.

Κατά τη διάρκεια της DDRX, τα σύνορα των κόκκων προσφέρονται ως θέσεις για την πυρήνωση, έτσι ένα μεγάλο αρχικό μέγεθος κόκκου παρέχει λιγότερες θέσεις για πυρήνωση και η κινητική της ανακρυστάλλωσης είναι πιο αργή. Ταυτόχρονα, ετερογένειες, όπως ζώνες παραμόρφωσης και διάτμησης, οι οποίες είναι επίσης θέσεις για πυρήνωση, είναι πιο εύκολο να σχηματιστούν σε υλικά με μεγάλα μεγέθη κόκκων [22]. Εκτός από την κινητική της ανακρυστάλλωσης, το αρχικό μέγεθος των κόκκων καθορίζει επίσης σε μεγάλο βαθμό το σχήμα της καμπύλης τάσης-παραμορφωσης κατά τη διάρκεια DDRX, δηλαδή, απλή κορυφή ή πολλαπλές κορυφές.

Οι Sakai and Jonas έχουν αναφέρει ότι αν ο λόγος του ανακρυσταλλωμένου προς το αρχικό μέγεθος κόκκου (D_s/D_0) είναι μεγαλύτερος από 2 (grain coarsening), η καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης θα έχει πολλαπλές κορυφές. Χαμηλότερος λόγος από 2, $D_s/D_0 < 2$ (grain refining) οδηγεί σε μία ομαλή καμπύλη με μία κορυφή.

Πρέπει να αναφερθεί ότι το μέγεθος του ανακρυσταλλωμένου κόκκου (D_s) σε μόνιμη κατάσταση δεν συνδέεται με το αρχικό μέγεθος των κόκκων, αντί αυτού, εξαρτάται από τα T και $\dot{\epsilon}$, τα οποία καθορίζουν την ροή τάσης σε σταθερή κατάσταση. Αυτό σημαίνει ότι το ίδιο μέγεθος ανακρυσταλλωμένου κόκκου μπορεί να αποκτηθεί αν δοκίμια με διαφορετικά μεγέθη αρχικών κόκκων παραμορφώνονται στις ίδιες συνθήκες, είτε με μεγέθυνση είτε με εκλέπτυνση κόκκων.

Το αρχικό μέγεθος των κόκκων παίζει επίσης ένα ρόλο για τον καθορισμό του είδους της DRX που λαμβάνει χώρα κατά τη διάρκεια της θερμής παραμόρφωσης. Πειραματικές μελέτες για θερμή παραμόρφωση σε διάφορα μεταλλικά υλικά επιβεβαιώνουν ότι το μέγεθος του ανακρυσταλλωμένου κόκκου δεν εξαρτάται από το αρχικό μέγεθος του κόκκου, όταν συμβαίνει CDRX.

- **Θερμομηχανικές συνθήκες διεργασίας**

Οι περισσότερες από τις εργαστηριακές μελέτες σε DRX επικεντρώνονται σε σταθερές TMP συνθήκες, δηλαδή η θερμοκρασία και ο ρυθμός παραμόρφωσης διατηρούνται αμετάβλητοι κατά τη διάρκεια όλων των διαδικασιών DRX. Για τη μελέτη της DRX ορίζεται η παράμετρος Zener-Hollomon (Z), η οποία ενσωματώνει τον ρυθμό παραμόρφωσης ($\dot{\epsilon}$) και τη θερμοκρασία (T) σε μία ενιαία παράμετρο, ως εξής:

$$Z = \dot{\epsilon} \exp\left(\frac{Q}{R \cdot T}\right) \quad (16)$$

όπου R είναι η σταθερά των αερίων, το Q είναι η ενέργεια ενεργοποίησης που συχνά ίδια με την ενέργεια αυτο-διάχυσης.

Σε γενικές γραμμές, για τη διαδικασία της DDRX, εμφανίζεται καμπύλη ροή τάσης με πολλαπλές κορυφές όταν T είναι υψηλή και $\dot{\epsilon}$ είναι χαμηλό (χαμηλό Z), και καμπύλη ροή τάσης με μονή κορυφή αν T χαμηλή και $\dot{\epsilon}$ υψηλό (υψηλό Z). Για CDRX και GDRX, οι καμπύλες τάσεων-παραμορφώσεων είναι ακόμα λιγότερο λεπτομερές, επειδή η μεγάλη παραμόρφωση που χρειάζεται συνήθως επιτυγχάνεται με μεθόδους (severe plastic deformation, SPD) όπως (equal channel angular pressing, ECAP), ή (high pressure torsion, HPT), οι οποίες δεν επιτρέπουν την καταγραφή της καμπύλης τάσης-παραμόρφωσης.

Το μέγεθος του ανακρυσταλλωμένου κόκκου σε μόνιμη κατάσταση (D_s) της DRX, το οποίο έχει μεγάλη σημασία για τις μηχανικές ιδιότητες του υλικού, όπως είναι η αντοχή, η ολκιμότητα κτλ, είναι επίσης στενά συνδεδεμένο με τις συνθήκες παραμόρφωσης, που συνήθως εκφράζονται ως συνάρτηση του Z.

Μια γνωστή σχέση μεταξύ της κανονικοποιημένης ροής τάσης σε μόνιμες συνθήκες και το κανονικοποιημένο μέγεθος κόκκου, για ένα ευρύ φάσμα υλικών, έχει αναφερθεί από το Derby:

$$\frac{\sigma_s}{G} \cdot \left(\frac{D_s}{b} \right)^{2/3} = K_2, 1 < K_2 < 10 \quad (17)$$

όπου σ_s είναι η τάση σε μόνιμη κατάσταση, G το μέτρο διάτμησης και b ο δείκτης Burgers.

- **Σωματίδια δεύτερης φάσης**

Τα σωματίδια δεύτερης φάσης παίζουν μεγάλο ρόλο στην ανακρυστάλλωση. Λεπτά σωματίδια διασποράς τείνουν να παρεμποδίζουν την κίνηση των συνόρων και να καθυστερούν την ανακρυστάλλωση και την ανάπτυξη κόκκων μέσα από την επίδραση της αντίστασης Zener (Zener drag effect).

Η πίεση Zener είναι ανάλογη του $\gamma_{GB} \cdot V_f / \bar{r}$, όπου γ_{GB} είναι η ενέργεια του συνόρου του κόκκου, V_f είναι το κλάσμα όγκου των σωματιδίων και \bar{r} είναι το μέσο μέγεθος των σωματιδίων. Αντίθετα, τα χονδροειδή σωματίδια μπορούν να επιταχύνουν την ανακρυστάλλωση μέσω των σωματιδίων που διεγείρουν την πυρήνωση (particle stimulated nucleation, PSN), λόγω του μεγάλου ποσού της αποθηκευμένης ενέργειας που είναι αποθηκευμένη στη ζώνη παραμόρφωσης. Από την άλλη πλευρά, η επίδραση της αντίστασης της διαλυμένης ουσίας, μειώνει την κινητικότητα του συνόρου, εξαρτώμενο από την ταχύτητα του συνόρου του κόκκου. Τόσο η εναπόθεση Zener με τα λεπτά σωματίδια όσο και η αντίσταση της διαλυμένης ουσίας μέσω των κραματικών στοιχείων στο διάλυμα επιβραδύνουν την μετανάστευση των συνόρων των κόκκων.

Η επίδραση των λεπτών σωματιδίων δεύτερης φάσης στην DRX ποικίλλει ανάλογα με το εάν υπάρχουν πριν από την έναρξη της ανακρυστάλλωσης, δημιουργούνται κατά τη διάρκεια της ανακρυστάλλωσης ή μετά την ολοκλήρωση της ανακρυστάλλωσης. Κατά τη διάρκεια της DRX όπου ταυτόχρονα λαμβάνει χώρα καθίζηση, η κινούσα δύναμη ανακρυστάλλωσης και η δύναμη εναπόθεσης Zener εξελίσσονται με το χρόνο. Σύμφωνα με την κλασική θεωρία εναπόθεσης Zener, το μέγεθος και η χωρική κατανομή των σωματιδίων θεωρείται ότι είναι ομοιόμορφη, το οποίο δεν συμβαίνει ποτέ στην πραγματικότητα. Ιζήματα μπορεί να διαλυθούν στο διάλυμα με εκ νέου καθίζηση πάλι αργότερα, όπως κατά τη διάρκεια του θερμικού κύκλου συγκόλλησης, κατά τη

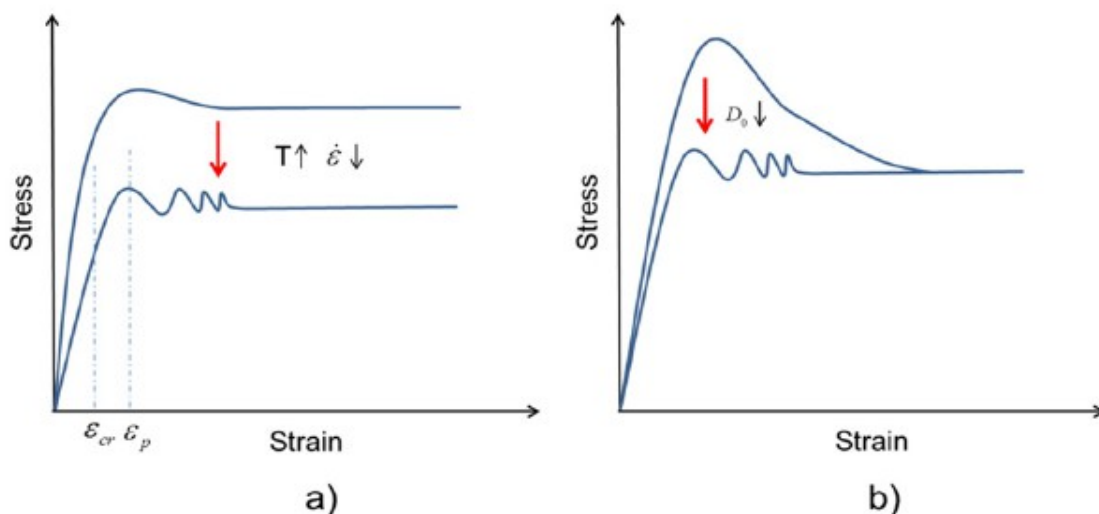
διάρκεια της συγκόλλησης FSW, όπου η CDRX είναι συχνά ένας σημαντικός μηχανισμός για την εκλέπτυνση των κόκκων.

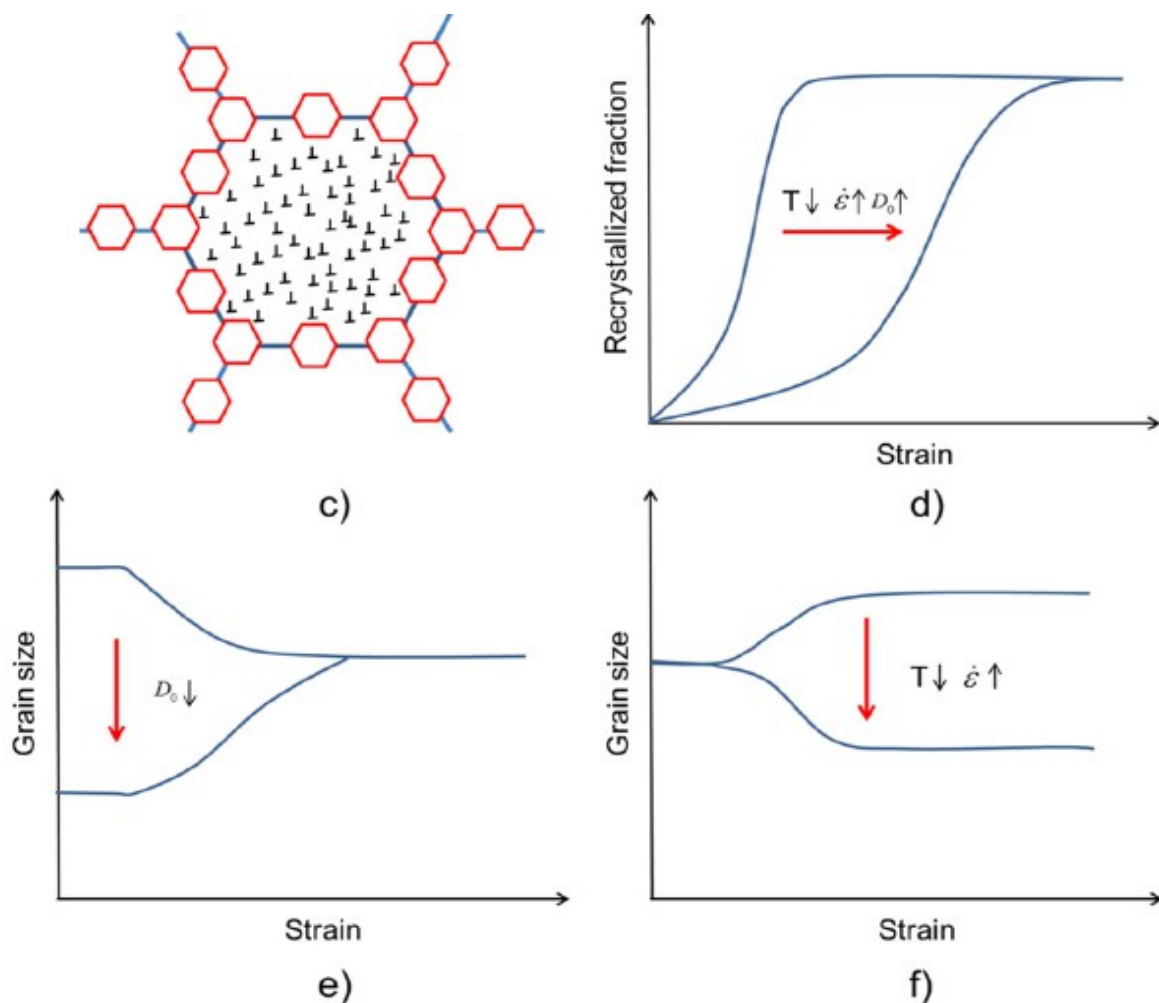
Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή, υπάρχουν τρία είδη DRX, οι DDRX, CDRX, GDRX, οι οποίες θα αναλυθούν εκτενώς στη συνέχεια.

2.2.2 Ασυνεχής Δυναμική Ανακρυστάλλωση (DDRX)

Η DDRX συμβαίνει συνήθως κατά τη διάρκεια θερμής παραμόρφωσης, σε κράματα με χαμηλής έως μέση SFE. Κράματα που υφίστανται DDRX εμφανίζουν ορισμένα γενικά χαρακτηριστικά τα οποία είναι καθορισμένα από πειράματα και μπορούν να συνοψιστούν ως εξής:

- i) Πριν συμβεί DDRX πρέπει να επιτευχθεί μία κρίσιμη παραμόρφωση ϵ_{cr} , κάπως χαμηλότερη από την μέγιστη παραμόρφωση ϵ_p . Τόσο αυτή η κρίσιμη παραμόρφωση όσο και η μέγιστη παραμόρφωση μειώνονται σταθερά με τη μείωση της παραμέτρου Zener-Hollomon.
- ii) Ανάλογα με την θερμοκρασία παραμόρφωσης, τον εφαρμοζόμενο ρυθμό παραμόρφωσης και το αρχικό μέγεθος κόκκου του υλικού, μπορεί να παρατηρηθεί στην καμπύλη τάσεων-παραμορφώσεων, απλή κορυφή ή πολλαπλές κορυφές. Η τάση μόνιμης κατάστασης σχετίζεται με την παράμετρο Zener-Hollomon και είναι ανεξάρτητη από το αρχικό μέγεθος κόκκου (Σχ. 2a και b).
- iii) Η πυρήνωση στη DDRX αρχίζει συνήθως σε προϋπάρχοντα σύνορα κόκκων, έτσι μορφοποιείται μια δομή κολιέ (necklace structure) με ισοαξονικούς κόκκους, όταν υπάρχει μεγάλη διαφορά μεταξύ του μεγέθους του αρχικού κόκκου και του ανακρυσταλλωμένου κόκκου (Σχ. 2c).
- iv) Η κινητική της ανακρυστάλλωσης επιταχύνεται με την μείωση του μεγέθους του αρχικού κόκκου και του ρυθμού παραμόρφωσης, καθώς και την αύξηση της θερμοκρασίας παραμόρφωσης (Σχ. 2c).
- v) Κατά τη διάρκεια της DDRX, το μέγεθος του κόκκου εξελίσσεται προς μια τιμή κορεσμού D_s το οποίο στη συνέχεια δεν αλλάζει όσο προχωρά η ανακρυστάλλωση. Πραγματοποιείται είτε εκλέπτυνση των κόκκων ή μεγέθυνση των κόκκων ανάλογα με το αρχικό μέγεθος κόκκων και τις συνθήκες παραμόρφωσης (Σχ. 2e και f).





Σχήμα 2: Σχηματική επεξήγηση των πειραματικών χαρακτηριστικών της DDRX που παρατηρούνται καθώς μεταβάλλονται οι συνθήκες παραμόρφωσης (T , $\dot{\epsilon}$) και το αρχικό μέγεθος κόκκου (D_0): a) και b) μετάβαση τάσης-παραμόρφωσης από καμπύλη με μία κορυφή σε πολλαπλές κορυφές, c) Η δομή κολιέ κατά τη διάρκεια της DDRX, d) Επίδραση των συνθηκών παραμόρφωσης και του αρχικού μεγέθους κόκκου στην κινητική της ανακρυστάλλωσης, e) Εξέλιξη του μέσου μεγέθους κόκκου, εξαρτώμενο από το αρχικό μέγεθος κόκκου D_0 , f) Εξέλιξη του μέσου μεγέθους κόκκου, εξαρτώμενο από τις συνθήκες παραμόρφωσης. Στα e) και f) αποκτιέται μέγεθος κόκκου μόνιμης κατάστασης D_s .

2.2.2.1 Μηχανισμοί DDRX

- **Εργοσκλήρυνση και DRV**

Η εμφάνιση της DDRX εξαρτάται από τη συσσώρευση των γραμμοαταξιών στα υλικά που παραμορφώνονται. Λαμβάνουν χώρα ταυτόχρονα δύο διαδικασίες: η συνεχής παραγωγή αταξιών κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης (δηλαδή εργοσκλήρυνση) και η DRV με τη μορφή της καταστροφής της αταξίας:

$$\frac{dp}{d\epsilon} = \frac{dp^+}{d\epsilon} + \frac{dp^-}{d\epsilon} \quad (18)$$

Η κρίσιμη πυκνότητα γραμμοαταξίας μπορεί να επιτευχθεί για υλικά με χαμηλή γ_{SFE} επειδή η DRV είναι λιγότερο ραγδαία, όπως περιγράφεται στην ενότητα 2.2.1. Αυτό οδηγεί στην έναρξη της DDRX, όπου πυρήνες θα δημιουργηθούν στα σύνορα των κόκκων ή σε άλλα εσωτερικά ελαττώματα του κρυστάλλου, όπως ζώνες διάτμησης, ζώνη παραμόρφωσης γύρω από μεγάλα σωματίδια, δηλαδή, περιοχές που συνδέονται με μεγάλη αποθηκευμένη ενέργεια.

Η πυκνότητα γραμμοαταξίας, ρ , θεωρείται συνήθως ως μια ενιαία παράμετρος για υλικά με χαμηλή γ_{SFE} , πράγμα που σημαίνει ότι η ρ μπορεί εύλογα να θεωρηθεί ως ομοιογενώς κατανομημένη. Αυτό δεν είναι ισχύει στην περίπτωση για υλικά με υψηλή γ_{SFE} .

- **Μετανάστευση του συνόρου του κόκκου**

Η βασική διαδικασία κατά τη διάρκεια της μετανάστευσης των HAGBs μπορεί να θεωρηθεί ως η μεταφορά ατόμων δίπλα από το σύνορο, από τον κόκκο που συρρικνώνεται στον κόκκο που αυξάνεται. Είναι γενικά αποδεκτό ότι ένα σύνορο κόκκου κινείται με ταχύτητα (v) σε γραμμική σχέση με την πραγματική πίεση (P_{eff}) που εφαρμόζεται στο όριο:

$$v = m P_{eff} \quad (19)$$

με $m = m_0 \exp(Q/RT)$ η κινητικότητα του συνόρου, όπου m_0 είναι ένας προ-εκθετικός παράγοντας, Q η ενέργεια ενεργοποίησης, R η σταθερά των αερίων.

Η κινητικότητα του συνόρου του κόκκου έχει αποδειχθεί πως εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την κρυσταλλογραφία, δηλαδή τη διαφορά του προσανατολισμού των γειτονικών κόκκων και τον προσανατολισμό των GB σε ένα κρύσταλλο.

- **Πυρήνωση στη DDRX**

Αν η DRV δεν είναι αρκετά γρήγορη για να καταστρέψει τις γραμμοαταξίες που δημιουργούνται κατά τη διάρκεια της εργοσκλήρυνσης, η πυκνότητα γραμμοαταξίας θα συνεχίσει να αυξάνεται έως ότου μία κρίσιμη κατάσταση της DDRX, στην οποία διαμορφώνεται η πρώτη ομάδα των πυρήνων. Χρησιμοποιείται συνήθως η κρίσιμη παραμόρφωση (ϵ_{cr}^{DDRX}) για την ταυτοποίηση της κρίσιμης κατάστασης, αντί της κρίσιμης πυκνότητας γραμμοαταξιών (ρ_{cr}^{DDRX}). Ο λόγος είναι ότι η ϵ_{cr}^{DDRX} μπορεί εμπειρικά να σχετίζεται με τη μέγιστη παραμόρφωση (ϵ_p^{DDRX}), το οποίο είναι εύκολο να υπολογιστεί από την καμπύλη ροής τάσης, που συνήθως βρίσκει κανείς μια σχέση του τύπου: $\epsilon_{cr}^{DDRX} = A \epsilon_p^{DDRX}$, όπου το A είναι σταθερά του υλικού με την τιμή να ποικίλλει μεταξύ 0.2 και 0.8 ανάλογα με το υλικό που ερευνάται.

2.2.3 Συνεχής Δυναμική Ανακρυστάλλωση (CDRX)

Τα τελευταία χρόνια, έχει καταστεί προφανές ότι οι νέοι κόκκοι με HAGBs μπορεί να σχηματίζονται κατά την παραμόρφωση από την προοδευτική περιστροφή των subgrains σύμφωνα με τους Perdrix και Montheillet. Σε τέτοιες περιπτώσεις, η μικροδομή εξελίσσεται σχετικά ομοιογενώς, χωρίς αναγνωρίσιμη πυρήνωση και ανάπτυξη των ανακρυσταλλωμένων κόκκων και αυτό το φαινόμενο ως εκ τούτου εμπίπτει στην φαινομενολογική κατάταξη της CDRX [1]. Η CDRX έχει ερευνηθεί πολύ λιγότερο σε σύγκριση με τη DDRX, επειδή έχει από καιρό αποδειχτεί ότι η DRV είναι ο μόνος μηχανισμός softening σε μέταλλα με υψηλή SFE.

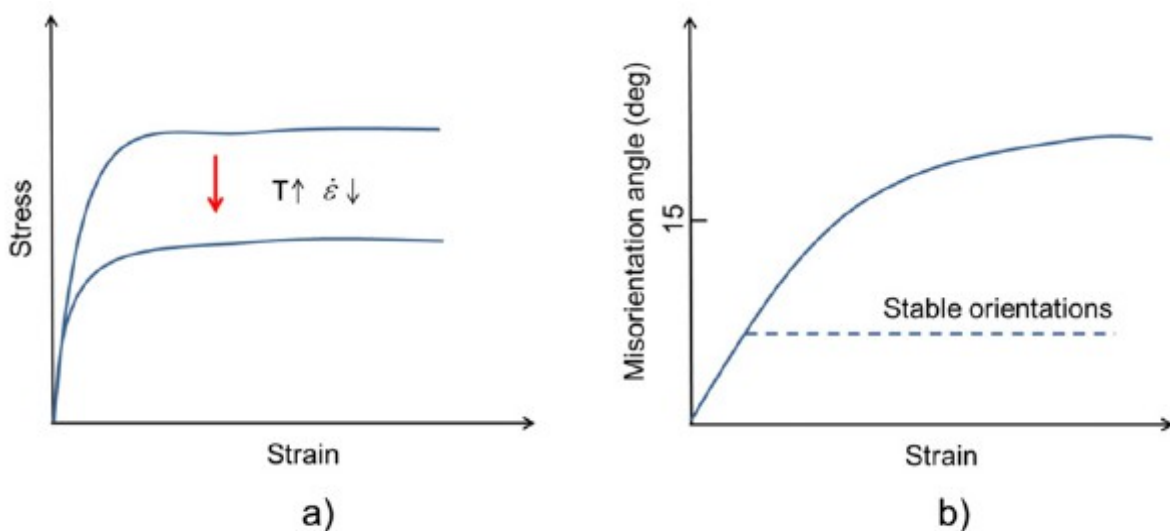
Τα κύρια χαρακτηριστικά της CDRX που παρατηρούνται σε θερμή παραμόρφωση μπορούν να συνοψιστούν λαμβάνοντας υπόψιν τα παρακάτω στοιχεία [17,21,22]:

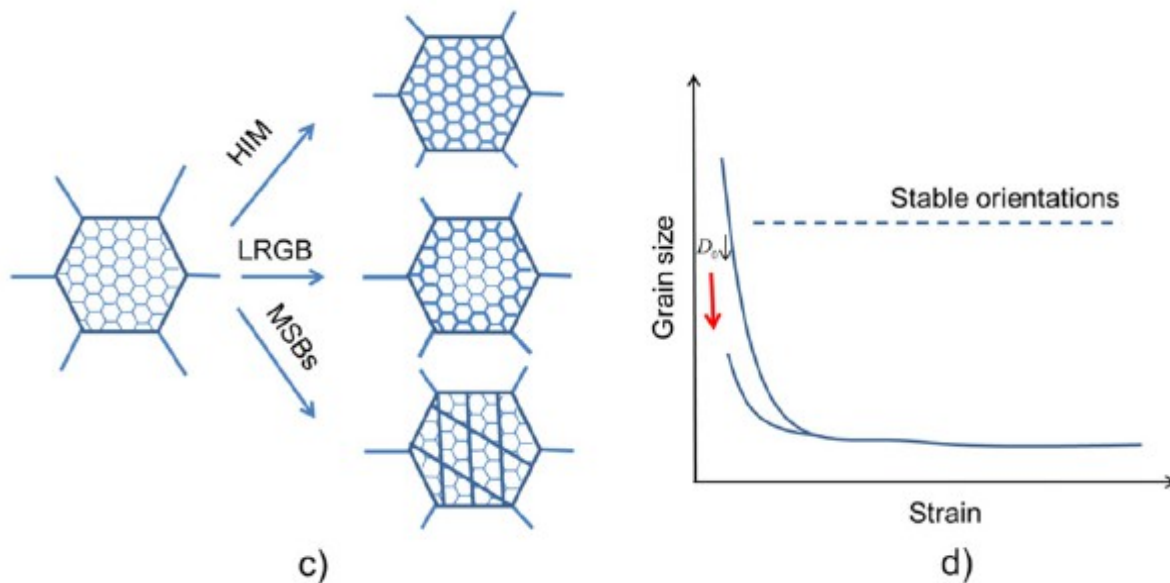
i) Καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης: Η τάση αυξάνει με την παραμόρφωση, και σε μεγάλες παραμορφώσεις η τάση σε μόνιμη κατάσταση που επιτυγχάνεται αυξάνει με τη μείωση της θερμοκρασίας και την αύξηση του ρυθμού παραμόρφωσης και είναι ανεξάρτητη από το αρχικό μέγεθος των κόκκων, βλέπε Σχ. 3a. Μονή κορυφή έχει παρατηρηθεί στη καμπύλη τάσεων-παραμορφώσεων για κράματα Al και Mg, ενώ δεν υπάρχουν σαφείς πληροφορίες για ανοξείδωτο χάλυβα και χαλκό.

ii) Μέση παραμόρφωση που προκαλείται από τη διαφορά του προσανατολισμού του συνόρου του (υπο)κόκκου (Average strain induced (sub)grain boundary misorientation): Η μέση διαφορά προσανατολισμού αυξάνει με την παραμόρφωση και οι χαμηλοί ρυθμοί παραμόρφωσης επιταχύνουν τη διαδικασία αυτή, ενώ οι υψηλότερες θερμοκρασίες μπορεί είτε να αυξήσουν είτε να μειώσουν την τιμή σταθερής κατάστασης ανάλογα με την θερμοκρασία παραμόρφωσης και τις ποσότητες των κραματικών στοιχείων. Υπάρχουν κάποιοι σταθεροί προσανατολισμοί, για τους οποίους η αύξηση της διαφοράς του προσανατολισμού δεν είναι επαρκής για να μετασχηματίσει σε HAGBs, όπως φαίνεται στο Σχ. 3b.

iii) Ο μετασχηματισμός των LAGBs σε HAGBs αναφέρεται μέσω μίας ομογενούς αύξησης της διαφοράς του προσανατολισμού (homogeneous increase of misorientation, HIM) των LAGBs σε πολύ υψηλή θερμοκρασία, με προοδευτική περιστροφή του πλέγματος κοντά στα σύνορα των κόκκων (lattice rotation near grain boundaries, LRGB), ή με το σχηματισμό ζωνών μικροδιάτμησης (microshear bands, MSBs) σε μεγαλύτερες παραμορφώσεις, που απεικονίζεται σχηματικά στο Σχ. 3c.

iv) Κρυσταλλικό μέγεθος (Crystallize size): Το μέσο μέγεθος κρυστάλλου μειώνεται με την παραμόρφωση και φθάνει σε μία «σταθερή τιμή» σε μεγάλες παραμορφώσεις (βλέπε Σχ. 3d), ενώ κάποιοι σταθεροί αρχικοί κόκκοι παραμένουν ακόμη σε μεγάλες παραμορφώσεις. Μια μείωση του αρχικού μεγέθους κόκκου μπορεί να επιταχύνει σημαντικά την κινητική της εκλέπτυνσης των κόκκων κάτω από μία μεγάλη παραμόρφωση και η διαδρομή της παραμόρφωσης έχει μικρή επίδραση στην κινητική CDRX.





Σχήμα 3: Σχηματική επεξήγηση τυπικών πειραματικών χαρακτηριστικών για CDRX: a) καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης, b) Εξέλιξη της μέσης παραμόρφωσης που προκαλείται από τη διαφορά του προσανατολισμού του συνόρου του (υπο)κόκκου σε υψηλές θερμοκρασίες ($>0.5T_m$), d) Μηχανισμοί μορφοποίησης της CDRX, όπου οι λεπτές γραμμές αναπαριστούν τα LAGBs, οι παχιές γραμμές τα HAGB ή τις ζώνες μικροδιάτμησης, d) Εξέλιξη του μέσου μεγέθους του κόκκου.

2.2.3.1 Μηχανισμοί CDRX

- **CDRX μέσω ομογενούς αύξησης της διαφοράς του προσανατολισμού**

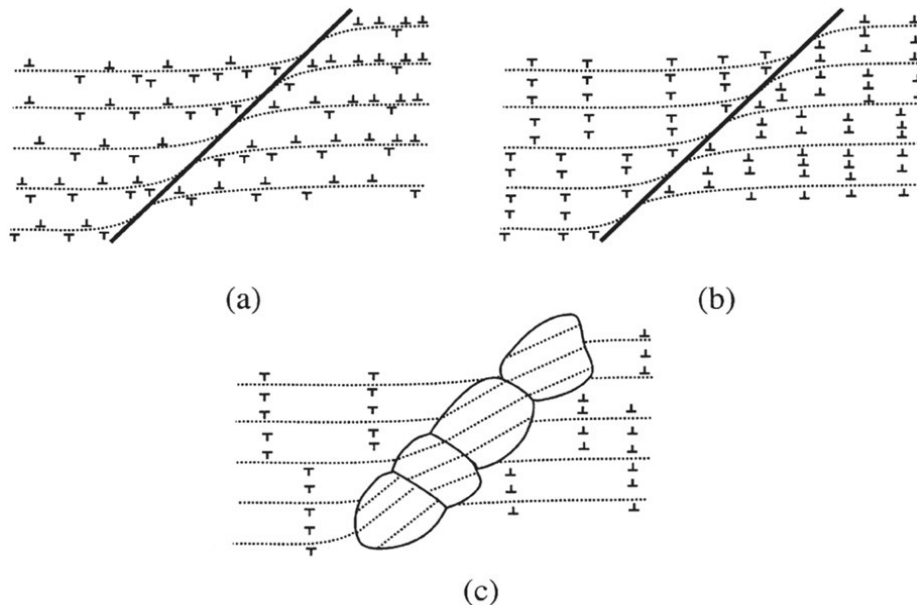
Σε σχετικά υψηλές θερμοκρασίες παραμόρφωσης, συνήθως αναπτύσσεται μία ομοιογενής μικροδομή, ενώ σε χαμηλές θερμοκρασίες, η παραμόρφωση και τα φαινόμενα μικροδιάτμησης γίνονται λιγότερο σημαντικά. Κάτω από αυτές τις συνθήκες, συμβαίνει CDRX με την προοδευτική συσσώρευση των γραμμοαταξιών σε LAGBs που αυξάνουν τη διαφορά του προσανατολισμού τους και τελικά σχηματίζονται HAGBs όταν οι γωνίες misorientation φτάσουν μια κρίσιμη τιμή θ_c ($\theta_c \approx 15^\circ$). Αυτός ο μηχανισμός έχει παρατηρηθεί σε AI και κράματα AI, ωστενιτικό ανοξείδωτο χάλυβα τύπου 304 σε 1073-1273 K και microduplex ανοξείδωτο χάλυβα.

Υπάρχουν επίσης ενδείξεις ότι ο μετασχηματισμός των LAGBs σε HAGBs ενισχύεται όταν στα σύνορα υπάρχουν καρφίτσωμένα (pinned) μικρά σωματίδια, τα οποία χρησιμοποιούνται για την παραγωγή λεπτόκοκκων δομών που παρουσιάζουν υπερπλαστικότητα [22].

Αυτή η μέθοδος περιλαμβάνει μια διαδικασία δύο σταδίων, δηλαδή, τη ψυχρή ή/και θερμή παραμόρφωση για την αύξηση της πυκνότητας γραμμοαταξιών, ακολουθούμενη από θερμή παραμόρφωση κατά την οποία σχηματίζονται γρήγορα subgrains. Στα sub-boundaries συγκεντρώνονται μικρά σωματίδια μετά από ένα ορισμένο βαθμό παραμόρφωσης, και γραμμοαταξίες συνεχώς παγιδεύονται σε αυτά τα σύνορα, το οποίο τελικά οδηγεί στον μετασχηματισμό τους σε HAGBs.

- **CDRX μέσω σταδιακής περιστροφής του πλέγματος κοντά στα σύνορα του κόκκου**

Υπάρχουν ενδείξεις, ότι η CDRX μπορεί, σε ορισμένα υλικά, να επιτευχθεί με την προοδευτική περιστροφή των subgrains δίπλα σε προϋπάρχοντα σύνορα κόκκων κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης, παρόμοια με την λεγόμενη ανακρυστάλλωση περιστροφής (rotation recrystallization) που εμφανίζεται σε πολλά ορυκτά. Έχει αναφερθεί ότι σε κράματα μαγνησίου, η προοδευτική περιστροφή του πλέγματος, που συμβαίνει στα σύνορα των κόκκων, μπορεί να οδηγήσει στο σχηματισμό νέων κόκκων. Ο Iον πρότεινε έναν απλό μηχανισμό για να εξηγήσει το σχηματισμό νέων κόκκων κατά τη διάρκεια της θερμής παραμόρφωση κραμάτων Mg, με ενδιάμεσο εύρος θερμοκρασιών (473-523 K) [22], όπως απεικονίζεται στο Σχ. 4. Η παραμόρφωση στα κράματα Mg είναι μη ομογενής λόγω της έλλειψης των ανεξάρτητων συστημάτων ολίσθησης τα οποία συχνά βρίσκονται σε δομές HCP, ως εκ τούτου, η τοπική διάτμηση αναπτύσσεται πρώτα κοντά στα σύνορα των κόκκων (Σχ. 4a). Καθώς η τοπική διάτμηση προχωρά σε περιστροφή του πλέγματος κοντά στο σύνορο, λαμβάνει επίσης μέρος και DRV (Σχ. 4b) σχηματίζοντας subgrains στην περιοχή του συνόρου (Σχ. 4c). Τελικά, η μετακίνηση των sub-boundaries οδηγεί στη συνένωση των συνόρων και τη δημιουργία νέων κόκκων με HAGBs.

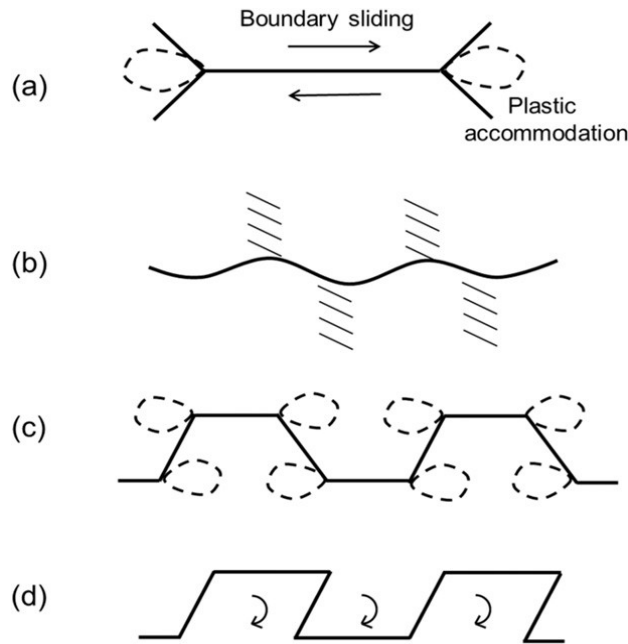


Σχήμα 4: Σχηματικό γράφημα που απεικονίζει το μηχανισμό της DRX στο μαγνήσιο, μέσω προοδευτικής περιστροφής του πλέγματος και DRV στα σύνορα του κόκκου.

Η περιστροφή του πλέγματος στα σύνορα των κόκκων κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης δεν είναι αποκλειστικά μόνο για κράματα Mg, έχει επίσης εντοπιστεί, για παράδειγμα, στα κράματα Al που περιέχουν σημαντικές προσθήκες διαλυμένης ουσίας, όπως κράματα Al-Mg και κράματα Al-Zn.

Η εξέλιξη της μικροδομής κατά τη διάρκεια θερμής παραμόρφωσης για Al-Mg εξηγήθηκε με τον ακόλουθο τρόπο. Η ολίσθηση του συνόρου κόκκου συμβαίνει, κατά προτίμηση, στα ευνοϊκά προσανατολισμένα σύνορα, όπως φαίνεται στο Σχ. 5a. Η μετανάστευση των HAGBs οδηγείται από τη διαφορά της αποθηκευμένης ενέργειας ανάμεσα σε αυτά τα σύνορα, οδηγώντας στο σχηματισμό οδοντώσεων (serrations) (Σχ. 5b). Επειδή η ολίσθηση του συνόρου του κόκκου, όπως φαίνεται στο Σχ. 5a, μπορεί να αφαιρέσει τις μικρές αιχμές που αναπτύχθηκαν, θα πρέπει πρώτα να αναπτυχθούν

μεγάλες οδοντώσεις-αιχμές ή εξογκώματα σε σύνορα μη-ολίσθησης (non-sliding boundaries) σε μεγάλες παραμορφώσεις, όπως φαίνεται στο Σχ. 5c. Μόλις τα εξογκώματα (bulges) σχηματιστούν, η ολίσθηση των συνόρων των κόκκων μπορεί ακόμα να είναι ενεργοποιημένη σε τμήματα με προεξοχές και έτσι, τα υπόλοιπα τμήματα του συνόρου πρέπει να φιλοξενήσουν την παραμόρφωση με τη μορφή πλαστικής παραμόρφωσης, η οποία οδηγεί σε τοπική περιστροφή του πλέγματος και ασύμμετρο σχήμα του συνόρου και τελικά στο σχηματισμό subgrain, όπως φαίνεται στο Σχ. 5d. Οι νέοι κόκκοι σχηματίζονται όταν η διαφορά προσανατολισμού (misorientation) του subgrain γίνεται επαρκώς μεγάλη.



Σχήμα 5: Σχηματικό διάγραμμα που απεικονίζει τη CDRX μέσω τοπικής περιστροφής του πλέγματος. (a) Ολίσθηση του συνόρου του κόκκου, οδηγούμενη από τις συγκεντρώσεις τάσης στους τριπλούς δεσμούς, (b) Εξογκώματα(bulges) συνόρου σχηματισμένα από τοπική μετανάστευση, (c) Μερική ολίσθηση και μερική κίνηση γραμμοαταξίας, (d) Διάτμηση των εξογκωμάτων (bulges), οδηγούμενη από ασύμμετρα εξογκώματα (bulges) και τοπική περιστροφή του πλέγματος.

- **Ζώνη μικροδιάτμησης που διευκολύνει τη CDRX**

Ένας άλλος μηχανισμός της CDRX που έχει επίσης καταστεί εμφανής κατά τη διάρκεια του SPD για τον σχηματισμό εξαιρετικά λεπτόκοκκων (ultra-fine grained, UFG) μικροδομών, είναι μέσω των ζωνών μικροδιάτμησης. Στο εσωτερικό των κόκκων μπορούν να σχηματίζονται πολλαπλές ζώνες μικροδιάτμησης οδηγώντας στην ταχεία αύξηση της μέσης διαφοράς του προσανατολισμού. Η επακόλουθη παραμόρφωση οδηγεί σε ταχεία αύξηση της πυκνότητας των ζωνών μικροδιάτμησης, καθώς και στα HAGBs και LAGBs. Αλλά αυτά τα φαινόμενα δεν συμβαίνουν ομοιόμορφα εντός του υλικού, αλλά εμφανίζονται κυρίως μέσα στις ζώνες microshear.

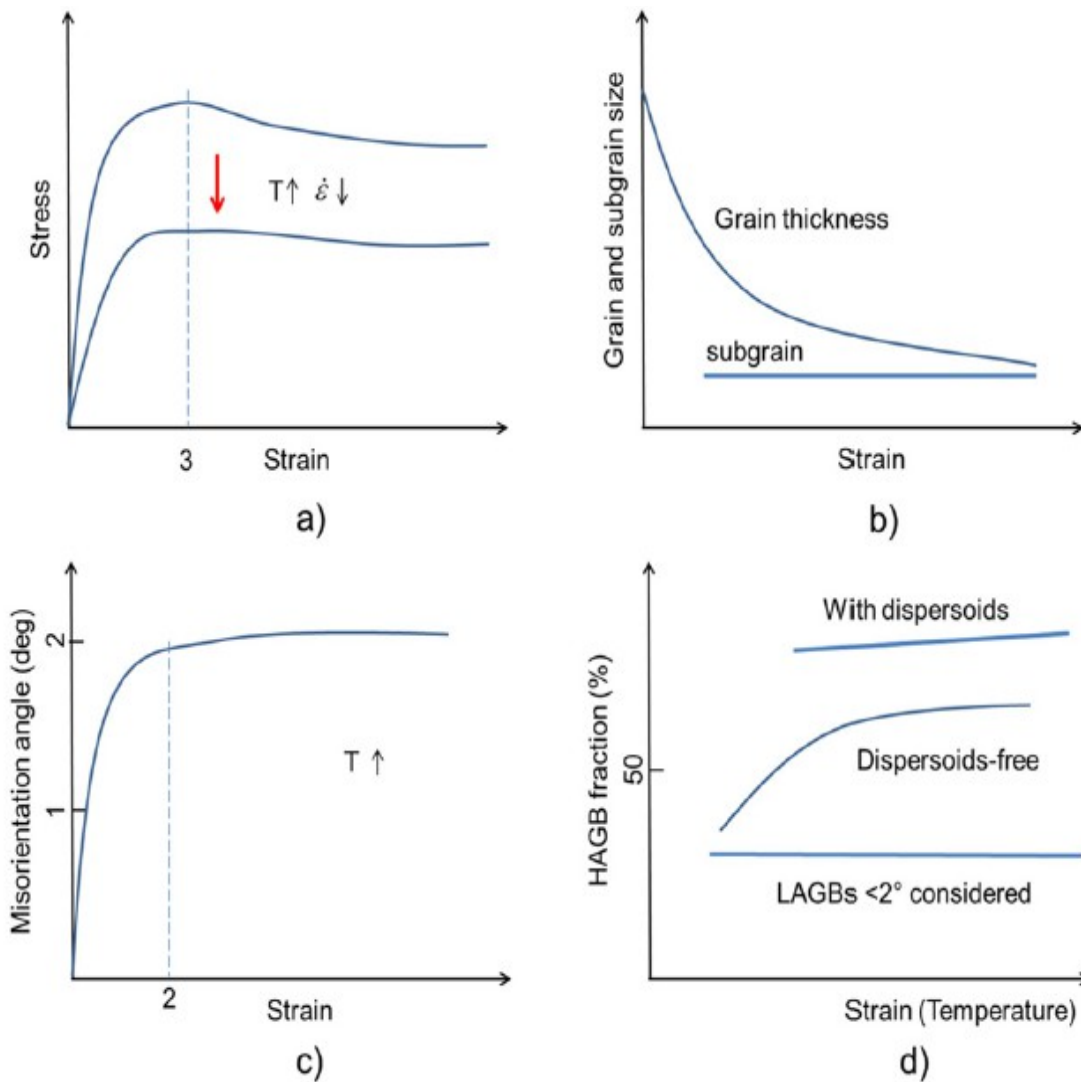
Παρόμοια με τον προηγούμενο μηχανισμό, οι νέοι κόκκοι στην πραγματικότητα σχηματίστηκαν πρώτα σε ετερογενώς παραμορφωμένες ζώνες, δηλαδή, κοντά στα αρχικά HAGBs ή στις ζώνες microshear. Κατά τη διάρκεια περαιτέρω παραμόρφωσης εξαπλώνονται πιο ομοιόμορφα, με αυτόν τον τρόπο διαφέρουν από τη συμβατική DDRX, όπου παρατηρείται μία σαφής διαδικασία δύο σταδίων πυρήνωσης και ανάπτυξης των ανακρυσταλλωμένων κόκκων.

2.2.4 Γεωμετρική Δυναμική Ανακρυστάλλωση (GDRX)

Η παραγωγή υλικών με λεπτόκοκκη μικροδομή μπορεί να πραγματοποιηθεί χρησιμοποιώντας τόσο διαδικασίες SPD μέσω CDRX, όσο και συμβατικές τεχνικές, όπως έλαση μέσω GDRX, μια ιδέα η οποία προήλθε το 1980 από τον McQueen και τους συναργάτες του, κατά την οποία μια νέα μικροδομή σχηματίζεται μέσω της αλλαγής της γεωμετρίας των κόκκων κατά την διάρκεια της παραμόρφωσης. Η GDRX έχει αναφερθεί σε αρκετά διαφορετικά υλικά, όπως υψηλής καθαρότητας Al και εμπορικής καθαρότητας Al, Cu, καθαρό Zr, Al-Mg, κράματα AA5083 και AA 6015, κράματα Mg-Al-Zn και Mg-Zn-Zr. Αυτό σημαίνει ότι GDRX συμβαίνει σε καθαρά μέταλλα, κράματα με διαλυμένη ουσία και κράματα που περιέχουν σωματίδια. Η GDRX θεωρήθηκε από τους Humphreys και Hatherly [22] ως ένα είδος CDRX .

Τα κύρια χαρακτηριστικά της GDRX συνοψίζονται παρακάτω:

- i) Συνθήκες για GDRX: Η GDRX παρατηρείται κυρίως στα υλικά με υψηλή SFE που παραμορφώνονται σε υψηλές θερμοκρασίες με χαμηλούς ρυθμούς παραμόρφωσης. Σε χαμηλές θερμοκρασίες παραμόρφωσης κυριαρχεί DRV, επειδή η κινητικότητα των HAGBs είναι πολύ χαμηλή για να μεταναστεύσουν και να σχηματίσουν οδοντώσεις-αιχμές, ενώ η ανάπτυξη των κόκκων πραγματοποιείται σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες παραμόρφωσης.
- ii) Καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης: Η τάση αρχικά αυξάνεται σε μία σχετικά υψηλή τάση και μετά μειώνεται αργά σε μία σταθερή κατάσταση για μεγάλες παραμορφώσεις (Σχ. 6a).
- iii) Μέγεθος subgrain: Οι υποκόκκοι σχηματίζονται μετά από μια κρίσιμη παραμόρφωση, πρώτα κοντά στα αρχικά HAGBs και παραμένουν περίπου ισοαξονικοί και σταθεροί σε μέγεθος (Σχ. 6b). Το μέγεθος των sugrains σε σταθερή κατάσταση μειώνεται με την αύξηση της παραμέτρου Zener-Hollomon.
- iv) Subgrain misorientation: Η γωνία διαφοράς του προσανατολισμού για τον σχηματισμό των συνόρων, μέσω της αλληλεπίδρασης των γραμμοαταξιών, είναι περίπου 2° (Βλέπε Σχ. 6c), σε αντίθεση με τη CDRX.
- v) Κρυσταλλογραφική δομή: Σε αντίθεση με τη DDRX, η ανακρυσταλλωμένη δομή κατά τη διάρκεια της GDRX παραμένει σε μεγάλο βαθμό αμετάβλητη, π.χ. ισχυρή δομή έλασης κατά τη διάρκεια θερμής έλασης, επειδή δεν εμπλέκεται μεγάλη μετανάστευση HAGB. Ωστόσο, η softening δομή θεωρείται υπεύθυνη για τη μείωση της τάσης μετά την πρώτη κορυφή, βλέπε Σχ 6a.
- vi) Επίδραση διαλυμένης ουσίας και σωματιδίων: Όταν εμπλέκονται η αντίσταση της διαλυμένης ουσίας ή/και το η εναπόθεση σωματιδίων, η κρίσιμη παραμόρφωση για το σχηματισμό subgrains και το ποσοστό των HAGBs αυξάνονται (Σχ. 6d), αλλά το μέγεθος των υποκόκκων για σταθερή κατάσταση μειώνεται, πράγμα που σημαίνει πως απαιτείται επίσης μεγάλη παραμόρφωση για την ολοκλήρωση της GDRX .



Σχήμα 6: Η εξέλιξη της πυκνότητας των κόκκων και του μεγέθους των subgrains κατά τη διάρκεια της GDRX. a) καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης, b) Εξέλιξη μεγέθους κόκκου και υποκόκκου, c) Εξέλιξη της διαφοράς της γωνίας προσανατολισμού των LAGB, d) Εξέλιξη των HAGBs, όπου περιλαμβάνεται και η περίπτωση των LAGBs μικρότερων από 2° για σύγκριση.

2.2.4.1 Μηχανισμοί GDRX

Η GDRX έχει περιγραφεί σαν το σχηματισμό ισοαξονικών κόκκων κατά τη διάρκεια θερμής παραμόρφωσης μέσω (i) της μετανάστευσης των HAGBs για να σχηματίσουν οδοντώσεις-αιχμές, (ii) της λέπτυνσης του πάχους των κόκκων και (iii) της πρόσκρουσης των οδοντωτών HAGBs όταν πλησιάζουν σε απόσταση 1-2 μέγεθος subgrain (Σχ. 6b). Σε σύγκριση με τις άλλες δύο διαδικασίες DRX, ο μηχανισμός του GDRX είναι σχετικά απλός και αυτό εξηγείται στη συνέχεια.

Υπάρχουν τρεις πτυχές που πρέπει να εξεταστούν, για το μηχανισμό της GDRX, κατά τη διάρκεια θερμής παραμόρφωσης.

Πρώτον, θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη η εξέλιξη της μορφολογίας των κόκκων. Μια βασική προϋπόθεση για την εμφάνιση της GDRX είναι ο σχηματισμός οδοντώσεων στα HAGBs. Κατά τη διάρκεια θερμής παραμόρφωσης, τα σύνορα των subgrains αναπτύσσονται πρώτα κοντά στα αρχικά HAGBs σε μικρές παραμορφώσεις. Οι οδοντώσεις σχηματίζονται και στις δύο πλευρές των HAGBs, με τοπική μετανάστευση των HAGBs στους δεσμούς, με τα σύνορα subgrain να σχηματίζονται μέσω DRV. Στη συνέχεια, σχηματίζονται δομές subgrains σε υψηλές παραμορφώσεις, ακόμη και στο εσωτερικό των κόκκων, έως ότου το πάχος των HAGBs μειωθεί σε απόσταση 1-2 μέγεθος subgrain αφήνοντας μία περίπου ισοαξονική μικροδομή.

Δεύτερον, θα πρέπει να θεωρείται η μετανάστευση των HAGB. Αν δεν υπάρχει μετανάστευση HAGB, τότε μετά την κρίσιμη παραμόρφωση, θα σχηματιστεί μια ινώδης δομή κόκκων (fibrous grain structure) με επιμήκη δομή subgrain αντί ισοαξονικής δομής subgrain, το οποίο είναι ουσιαστικά μία εξαιρετικά παραμορφωμένη μικροδομή. Η ωθούσα δύναμη για μετανάστευση των HAGB, με στόχο την μείωση της πυκνότητας των HAGBs, οφείλεται στη καμπυλότητα του συνόρου. Σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες παραμόρφωσης, η μετανάστευση των HAGB ίσως γίνει σημαντική οδηγώντας σε σαφή δυναμική ανάπτυξη των κόκκων.

Τρίτον, δεν πρέπει να αγνοηθεί η εισαγωγή νέων HAGBs είτε από υποδιαίρεση των κόκκων είτε από τα μετασχηματισμένα LAGB. Η υποδιαίρεση των κόκκων είναι πιο σημαντική κατά τη διάρκεια των αρχικών σταδίων της παραμόρφωσης. Επίσης, οι υψηλές θερμοκρασίες παραμόρφωσης ευνοούν την ομοιογενή παραμόρφωση, δηλαδή μειωμένη υποδιαίρεση κόκκων. Ο μετασχηματισμός των LAGBs σε HAGBs κατά τη διάρκεια θερμής παραμόρφωσης έχει συζητηθεί κατά την εξέταση της CDRX στην ενότητα 2.2.3.

2.2.5 Μηχανισμοί Ανακρυστάλλωσης στη FSW

Τα προηγούμενα μοντέλα που αναπτύχθηκαν (DRX, DRV) περιλαμβάνουν συνθήκες περίπου ομοιόμορφης έντασης και ισόθερες συνθήκες παραμόρφωσης. Μελέτες θερμής κατεργασίας ασχολούνται συχνά με μεθόδους δοκιμών θερμής συμπίεσης ή θερμής στρέψης που μπορεί να επιτρέψει την έρευνα της τάσης και του ρυθμού παραμόρφωσης επικαλύπτοντας τις μεθόδους FSW/P [23].

Μια λεπτομερής παρατήρηση της μικροδομής του υλικού στην περιοχή της συγκόλλησης διακρίνει διαφορετικές περιοχές: το μητρικό υλικό στο οποίο δεν έχει συμβεί κάποια παραμόρφωση, τη θερμο-επηρεασμένη ζώνη (heat affected zone, HAZ), στην οποία το υλικό έχει υποστεί ένα θερμικό κύκλο ο οποίος έχει τροποποιήσει την μικροδομή ή / και τις μηχανικές ιδιότητες, τη θερμο-μηχανικά επηρεασμένη ζώνη (thermo-mechanically affected zone, TMAZ) στην οποία το υλικό έχει παραμορφωθεί πλαστικά από το εργαλείο και η ροή θερμότητας έχει ασκήσει επίσης κάποια επίδραση πάνω στο υλικό. Στον πυρήνα της συγκόλλησης, η ζώνη nugget (NZ) χαρακτηρίζεται από λεπτούς ανακρυσταλλωμένους κόκκους σε μια ονομαστική διάσταση των λίγων μm [24,25].

Έχουν διεξαχθεί την τελευταία δεκαετία πολυάριθμες έρευνες της μικροδομής που προκαλείται από την μέθοδο FSW. Έχουν συμπεριληφθεί τεχνικές μικροσκοπίας, όπως μέθοδοι μικροδομής και μικροσκοπία απεικόνισης προσανατολισμού (Orientation Imaging Microscopy, OIM), καθώς και τεχνικές οπτικής και μικροσκοπία μετάδοσης ηλεκτρονίου (Transmission Electron Microscopy TEM). Για παράδειγμα, μια μελέτη που σχεδιάστηκε για να εξετάσει μικροδομές στις θέσεις γύρω από το εργαλείο της FSW έχει δείξει ότι subgrains σχηματίζονται μπροστά από το εργαλείο και αναπτύσσουν μεγαλύτερες διαφορές προσανατολισμών σε περιοχές κοντά στο εργαλείο [26]. Ωστόσο, οι περιοχές στη ζώνη ανάδευσης που ήταν δίπλα στο pin του εργαλείου ήταν δύσκολο να

χαρακτηριστούν επειδή η ποιότητα της δέσμης των ηλεκτρονίων που σκεδάζονται υποβαθμίζεται σοβαρά λόγω της παραμόρφωσης. Πειράματα με βύθιση του εργαλείου και στατική απόπτωση έχουν προσπαθήσει να αντιγράψουν τους θερμομηχανικούς κύκλους των FSW / P.

Συνολικά, οι DRV, GDRX και DDRX έχουν αναφερθεί ως μηχανισμοί που μπορεί να ευθύνονται για την εκλέπτυνση των κόκκων σε FSW/P σε διάφορα κράματα. Οι δύο πρώτοι μηχανισμοί ανακρυστάλλωσης παρατηρούνται στα υλικά με υψηλή SFE.

2.3 Εφαρμογή της μεθόδου στη FSW για κράματα Μαγνησίου

Η μέθοδος Friction Stir Welding (FSW) εφαρμόζεται πλέον σε πολλές διαφορετικές βιομηχανίες, όπως αεροδιαστημική, αυτοκινητοβιομηχανία, ναυπηγική και χρησιμοποιείται επίσης στη συγκόλληση διαφορετικών κραμάτων, μερικά από τα οποία ταξινομούνται ως πρακτικά αδύνατον να συγκολληθούν με την χρήση συμβατικών μεθόδων συγκόλλησης [27–30].

Πρόσφατα κάποιοι ερευνητές προσομοίωσαν τη μέθοδο FSW χρησιμοποιώντας μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων (FEM) ώστε να καθορίσουν τις σχέσεις μεταξύ των δυνάμεων του εργαλείου και των παραμέτρων της διεργασίας και επιδράσεις της γεωμετρίας του εργαλείου στην ροή του υλικού, τη δύναμη συγκόλλησης, την θερμοκρασία και στην κατανομή των τάσεων [31,32]. Όμως, η έλλειψη της δυναμικής ανακρυστάλλωσης (DRX) και της μοντελοποίησης της μικροδομής κατά την διεργασία της μεθόδου FSW είναι σημαντικά αισθητή.

Είναι φανερό ότι το μέγεθος των κόκκων στην ζώνη συγκόλλησης επηρεάζει σημαντικά τις μηχανικές ιδιότητες της συγκόλλησης και η εκλεπτυσμένη δομή θα μπορούσε να τις βελτιώσει. Όμως, είναι δύσκολο και χρονοβόρο να εξεταστεί πειραματικά η μικροδομή της συγκόλλησης. Σε αυτή την περίπτωση, η προσομοίωση μπορεί να είναι μία αποτελεσματική εναλλακτική λύση [33].

Από την πλευρά της μοντελοποίησης της μικροδομής, ποικίλες προσεγγίσεις έχουν αναπτυχθεί για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής κατά την διάρκεια μίας διεργασίας, όπως το cellular automaton (CA), το μοντέλο Monte Carlo (MC) και το μοντέλο phase field. Μεταξύ αυτών, το μοντέλο CA είναι περισσότερο εφαρμόσιμο λόγω της μεγάλης ευελιξίας του. Πολλοί ερευνητές έχουν δείξει ότι το CA προσφέρει έναν υπολογιστικά αποτελεσματικό πλάνο για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής [33].

Πρώτοι οι Goetz και Seetharaman προσπάθησαν να προσομοιώσουν τη DRX χρησιμοποιώντας τη μέθοδο CA. Επίσης, οι Chuan κ.ά σχεδίασαν ένα μοντέλο για μη-συνεχή DRX σε κράμα τιτανίου κατά την διάρκεια ισόθερμης θερμής συμπίεσης. Ο Svyetlichnyy περιέγραψε μία προσέγγιση frontal cellular automata (FCA) για την μοντελοποίηση της μικροδομής κατά την διάρκεια μίας διεργασίας παραμόρφωσης, συμπεριλαμβάνοντας πυρήνωση και στάδια ανάπτυξης κόκκου. Ο Wang κ.ά προσομοίωσαν την DRX για θερμή συμπίεση χάλυβα χρησιμοποιώντας τη μέθοδο CA. Όμως, η μέθοδος CA δεν μπορεί να εξετάσει τις επιπτώσεις των παραμέτρων της διεργασίας (π.χ θερμοκρασία και ρυθμός παραμόρφωσης) και τις επιπτώσεις στη DRX, όπως είναι η πυρήνωση, το ποσοστό και το μέσο μέγεθος των ανακρυσταλλωμένων κόκκων και η κατανομή της πυκνότητας γραμμοαταξιών [33]. Συγκριτικά με το μοντέλο MC η μέθοδος CA method πιο στοχαστική, αλλά σχετικά ευέλικτη στην προσομοίωση διαφορετικών φυσικών συστημάτων και αποτελεσματική στους υπολογισμούς [34].

Επειδή η πυκνότητα γραμμοαταξιών παίζει σημαντικό ρόλο στην πυρήνωση και την εξέλιξη της μικροδομής κατά τη διάρκεια της DRX, πολλά μοντέλα έχουν αναπτυχθεί για να αξιολογούν την πυκνότητα γραμμοαταξιών, μερικά από τα οποία είναι τα Laasraoui-Jonas (LJ), Kocks-Mecking (KM) και μοντέλα δύο παραμέτρων. Αυτά τα μοντέλα λαμβάνουν υπόψιν την μεταβολή της πυκνότητας γραμμοαταξιών και ασχολούνται με τον υπολογισμό της ροής της τάσης και την αξιολόγηση της πυκνότητας γραμμοαταξιών κατά την διάρκεια διεργασιών θερμής παραμόρφωσης. Επιπροσθέτως, το τροποποιημένο μοντέλο LJ που σχεδιάστηκε από τους Gourdet και Montheullet λαμβάνει υπόψιν την επίδραση της μετακίνησης των συνόρων των κόκκων στην πυκνότητα αταξιών. Ως εκ τούτου, το τροποποιημένο μοντέλο LJ παρέχει μια πιο ρεαλιστική εξέλιξη για την πυκνότητα των γραμμοαταξιών.

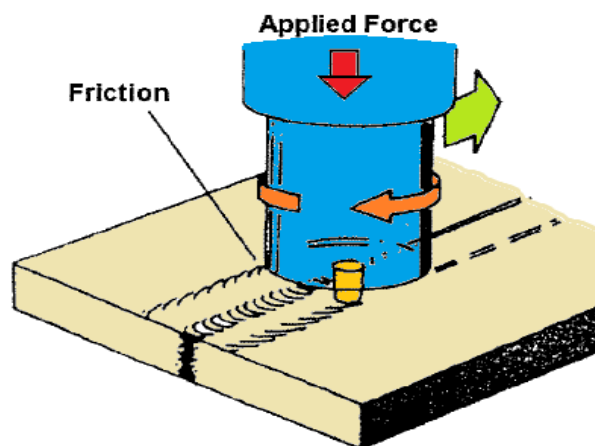
Παρόλα αυτά, είναι λίγες οι έρευνες που έχουν διεξαχθεί για την προσομοίωση της δυναμικής ανακρυστάλλωσης κατά την διάρκεια της διεργασίας FSW. Μία από αυτές, είναι η εργασία των Asadi, Besharati Givi και Akabari, οι οποίοι κατασκεύασαν ένα μοντέλο για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής του AZ31 κράματος μαγνησίου κατά την διάρκεια της διεργασίας FSW. Χρησιμοποίησαν ένα μοντέλο FEM το οποίο το ενσωμάτωσαν στο λογισμικό Deform-3D, το οποίο βασίζεται στον συνδυασμό των μεθόδων CA, LJ και KM [35].

Στην παρούσα εργασία, κατασκευάζεται ένα μοντέλο με στόχο την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής στη ζώνη ανάδευσης κατά την διάρκεια FSW του AZ31 κράματος μαγνησίου. Το μοντέλο στηρίζεται στην επίδραση της αποθηκευμένης ενέργειας, η οποία προέρχεται από την θερμότητα που μεταφέρεται μέσω του εργαλείου (pin, shoulder) στο υλικό και του υψηλού ρυθμού παραμόρφωσης, λόγω της πλαστικής παραμόρφωσης, κατά την διάρκεια της μεθόδου FSW και μελετάται η πυρήνωση και τα στάδια ανάπτυξης των νέων κόκκων. Για την προσομοίωση χρησιμοποιείται το λογισμικό MICRESS, το οποίο βασίζεται στο μοντέλο Phase-Field και λαμβάνει υπόψιν παραμέτρους όπως η ενέργεια ανακρυστάλλωσης του κόκκου, η κινητικότητα και η ενέργεια των συνόρων του κόκκου.

Η ενέργειας ανακρυστάλλωσης προκύπτει από την αποθηκευμένη ενέργεια ανά κόκκο (J/cm^3 ή Mpa) η οποία ορίζεται μέσω της μέσης πυκνότητας γραμμοαταξιών ανά κόκκο (m^{-2}), από τη σχέση

$$E_{RX}=aGb^2\rho \quad (20)$$

όπου a είναι ο συντελεστής αλληλεπίδρασης αταξιών, G είναι το μέτρο διάτμησης (GPa), b είναι το διάνυσμα Burgers (m) και ρ η πυκνότητα γραμμοαταξιών (m^{-2}).



Εικόνα 1 Σχηματική απεικόνιση της μεθόδου FSW

Σύμφωνα με αποδεκτές υποθέσεις για τη διεργασία της FSW [36], η θερμότητα που εισάγεται από το shoulder του εργαλείου μπορεί να υπολογιστεί από την θερμότητα λόγω τριβής που παράγεται στην διεπιφάνεια μεταξύ του περιαιχένιου (shoulder) και του κατεργαζόμενου τεμαχίου κατά τη διάρκεια της συγκόλλησης (εικ. 1). Η δύναμη τριβής F_f μπορεί να υπολογιστεί από τη σχέση

$$F_f = \mu \cdot F_n \quad (21)$$

όπου F_f είναι η δύναμη τριβής (N), μ ο συντελεστής τριβής και F_n η κάθετη δύναμη που εφαρμόζεται στο κατεργαζόμενο τεμάχιο.

Έτσι, ο ρυθμός παραγωγής θερμότητας στο shoulder μπορεί να υπολογιστεί ως

$$Q_{sh} = F_f \cdot v \quad (22)$$

όπου Q_{sh} είναι ο ρυθμός παραγωγής θερμότητας στο shoulder (W) και v η σχετική ταχύτητα ολίσθησης (m/s).

Επειδή, $v = \omega \cdot R_s$ και $\omega = 2\pi \cdot N$, τότε

$$Q_{sh} = 2\pi \cdot \mu \cdot F_n \cdot R_s \cdot N \quad (23)$$

όπου N είναι η ταχύτητα περιστροφής του εργαλείου (rpm) και R_s η ακτίνα του shoulder.

Η θερμότητα που παράγεται από το pin (πέιρο) του εργαλείου θεωρείται ότι οφείλεται μόνο εξαιτίας της πλαστικής παραμόρφωσης κατά την διάρκεια της συγκόλλησης. Η θερμότητα αυτή απλοποιείται σε μία ομοιόμορφη παραγωγή θερμότητας σε έναν κυλινδρικό όγκο (εικ. 2). Η διάμετρος του κυλίνδρου αντιπροσωπεύει το πλαστικά παραμορφωμένο υλικό και εξαρτάται από την ταχύτητα περιστροφής και την γεωμετρία του pin.

Η θερμότητα που παράγεται από το pin, λόγω πλαστικής παραμόρφωσης, αποτελείται από τρία μέρη: (α) τη θερμότητα που παράγεται από την διάτμηση του υλικού, (β) τη θερμότητα που παράγεται λόγω τριβής στην επιφάνεια του σπειρώματος και (γ) τη θερμότητα που παράγεται λόγω τριβής στην κάθετη επιφάνεια του pin. Η συνολική παραγόμενη θερμότητα από το pin Q_{pin} μπορεί να υπολογιστεί από [37]

$$Q_{pin} = \frac{2\pi \cdot R_p \cdot h \cdot \bar{Y} \cdot v_m}{\sqrt{3}} + \frac{2\pi \cdot R_p \cdot h \cdot \bar{Y} \cdot \mu \cdot v_{rp}}{\sqrt{3}(1 + \mu^2)} + \frac{4\mu \cdot F_p \cdot v_m \cdot \cos\theta}{\pi} \quad (24)$$

όπου

$$\theta = 90^\circ - \lambda - \tan^{-1}(\mu)$$

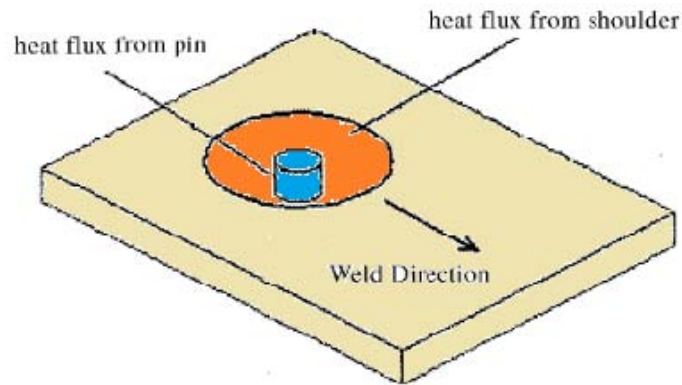
$$v_m = \frac{\sin(\lambda)}{\sin(180 - \theta - \lambda)} \cdot v_p$$

$$v_{rp} = \frac{\sin(\theta)}{\sin(180 - \theta - \lambda)} \cdot v_p$$

$$v_p = R_p \cdot \omega$$

όπου R_p είναι η ακτίνα του pin του εργαλείου, h είναι το πάχος του κατεργαζόμενου ελάσματος, \bar{Y} είναι η μέση τάση διάτμησης του υλικού, F_p είναι η μεταφερόμενη δύναμη κατά τη συγκόλληση ($F_p \sim F_n/3$) και λ είναι η γωνία ελίκωσης του σπειρώματος.

Για την εφαρμογή του μοντέλου που χρησιμοποιείται στο λογισμικό MICRESS, για τον προσδιορισμό της αποθηκευμένης ενέργειας, απαιτείται η μετατροπή της ενέργειας από μονάδες Watt σε Pascal.



Εικόνα 2 Όγκοι μεταφοράς θερμότητας κατά τη FSW

Ο όγκος (V_{sh}) που μεταφέρεται η θερμότητα από το shoulder του εργαλείου θεωρείται κυλινδρικός δακτύλιος με εξωτερική ακτίνα την ακτίνα του shoulder, εσωτερική ακτίνα την ακτίνα του pin και ύψος το πάχος του κατεργάσιμου ελάσματος (Εικ. 2). Άρα,

$$V_{sh} = \pi \cdot (R_s^2 - R_p^2) \cdot h \quad (25)$$

Ο όγκος που μεταφέρεται η θερμότητα από το pin του εργαλείου θεωρείται:

(α) κυλινδρικός δακτύλιος για τη θερμότητα που παράγεται από την διάτμηση του υλικού

$$V_{pin1} = \frac{\pi \cdot (D_p^2 - D_o^2)}{4} \cdot h_{pin} \quad (26a)$$

(β) κυλινδρικός δακτύλιος για τη θερμότητα που παράγεται λόγω τριβής στην επιφάνεια του σπειρώματος

$$V_{pin2} = \frac{\pi \cdot (D_e^2 - D_p^2)}{4} \cdot h_{pin} \quad (26b)$$

(γ) κύλινδρος για τη θερμότητα που παράγεται λόγω τριβής στην κάθετη επιφάνεια του pin

$$V_{pin3} = \frac{\pi \cdot D_p^2}{4} \cdot (h - h_{pin}) \quad (26c)$$

όπου D_p είναι η διάμετρος του pin, D_o είναι η εσωτερική διάμετρος του σπειρώματος, h_{pin} είναι το μήκος του pin, D_e είναι η εξωτερική διάμετρος του σπειρώματος.

Έτσι, οι τελικές σχέσεις που χρησιμοποιούνται για την μετατροπή της θερμότητας από μονάδες

Watt σε Pascal είναι οι εξής:

$$\text{Για το shoulder } P_{sh} = \frac{2\pi \cdot \mu \cdot F_n \cdot R_s \cdot N}{\pi \cdot (R_s^2 - R_p^2) \cdot h} \cdot t \quad (27)$$

$$\text{Για το pin } P_{pin} = \frac{8 \cdot R_p \cdot h \cdot \bar{Y} \cdot v_m}{\sqrt{3} \cdot (D_p^2 - D_o^2) \cdot h_{pin}} \cdot t + \frac{8\mu \cdot \bar{Y} \cdot R_p \cdot h \cdot v_{rp}}{\sqrt{3}(1 + \mu^2)(D_e^2 - D_p^2) \cdot h_{pin}} \cdot t + \frac{16\mu \cdot F_p \cdot v_m \cdot \cos\theta}{\pi^2 \cdot D_p^2 \cdot (h - h_{pin})} \cdot t \quad (28)$$

όπου t είναι ο χρόνος αλληλεπίδρασης μεταξύ του εργαλείου και του κατεργαζόμενου ελάσματος, κατά την διάρκεια της συγκόλλησης.

Επειδή το μοντέλο του λογισμικού MICRESS δεν μπορεί να προβλέψει αλλαγές στις γραμμοαταξίες λόγω πλαστικής παραμόρφωσης και εργοσκληρυνσης, τότε στην ενέργεια ανακρυστάλλωσης προσθέτουμε και την ενέργεια που οφείλεται στην πλαστική παραμόρφωση (υπό την μορφή θερμότητας).

Έτσι, η συνολική ενέργεια E_{tot} (σε Pascal) που αναπτύσσεται κατά την διάρκεια του FSW ισούται με:

$$E_{tot} = E_{RX} + P_{sh} + P_{pin} \quad (29)$$

Με βάση την θεωρία [38], καθώς η πλαστική παραμόρφωση εξελίσσεται, η πυκνότητα των γραμμοαταξιών αυξάνεται έως ότου φτάσει σε μία κρίσιμη τιμή [35] στην οποία ενεργοποιείται η DRX και νέοι πυρήνες αρχίζουν να εμφανίζονται στα σύνορα των αρχικών κόκκων.

Η κρίσιμη πυκνότητα γραμμοαταξιών για να συμβεί πυρήνωση δίνεται από την σχέση [39,40]

$$\rho_{crit} = \left(\frac{20 \cdot \gamma \cdot \dot{\epsilon}}{3 \cdot b \cdot l \cdot M \cdot \tau^2} \right)^{1/3} \quad (30)$$

όπου γ (J/m²) είναι η ενέργεια στα σύνορα του κόκκου, η οποία μπορεί να υπολογιστεί από την εξίσωση Read-Shockley, $\dot{\epsilon}$ (s⁻¹) είναι ο ρυθμός παραμόρφωσης, b (m) το διάνυσμα Burgers [41,42], l (m) είναι η μέση ελεύθερη διαδρομή της γραμμοαταξίας, M (m⁴/Js) είναι η κινητικότητα των συνόρων του κόκκου και τ (N) είναι η ενέργεια γραμμής της γραμμοαταξίας

Η ενέργεια γ , στα όρια του κόκκου παριστάνεται ως εξής [43]:

$$\gamma = \begin{cases} \gamma_m & , \theta_i \geq 15^\circ \\ \gamma_m \frac{\theta_i}{\theta_m} \left(1 - \ln \left(\frac{\theta_i}{\theta_m} \right) \right) & , \theta_i < 15^\circ \end{cases} \quad (30\alpha)$$

όπου θ_i είναι η διαφορά προσανατολισμού μεταξύ του i κόκκου και του γειτονικού του.

Η ενέργεια των HAGB μπορεί να γραφτεί ως ακολούθως:

$$\gamma_m = \frac{G \cdot b \cdot \theta_m}{4\pi \cdot (1-\nu)} \quad (30\beta)$$

όπου γ_m είναι η ενέργεια στα σύνορα, θ_m η διαφορά προσανατολισμού μεταξύ HABs, b είναι το διάνυσμα Burgers και ν είναι ο λόγος Poisson.

Ο ρυθμός παραμόρφωσης ($\dot{\epsilon}$) προσδιορίζεται από τη σχέση [44,45,46]

$$\dot{\epsilon} = \frac{N \cdot \pi \cdot R_{nug}}{D_{nug}} \quad (30\gamma)$$

όπου N η ταχύτητα περιστροφής του εργαλείου (rpm), R_{nug} η ενεργή ακτίνα και D_{nug} το ενεργό βάθος της δυναμικά ανακρυσταλλωμένης ζώνης αντίστοιχα.

Η μέση ελεύθερη διαδρομή (l) της γραμμοαταξίας μπορεί να προσδιοριστεί από την εξής σχέση [38]:

$$l = \frac{K \cdot G \cdot b}{\sigma_{shear}} \quad (30\delta)$$

όπου K είναι μία σταθερά ~ 10 για τα περισσότερα πολυκρυσταλλικά υλικά, σ_{shear} η τάση διάτμησης.

Η κινητικότητα των συνόρων του κόκκου καθορίζεται από την εξίσωση [47,48]

$$M = M_0 \cdot \exp\left(\frac{-Q_b}{RT}\right) \quad (30\epsilon)$$

όπου M_0 είναι προεκθετικός όρος (m^4/Js), Q_b είναι η ενέργεια ενεργοποίησης (kJ/mol), R η σταθερά των αερίων (8,314 J/mol K) και T η θερμοκρασία (K)

Η ενέργεια γραμμής της γραμμοαταξίας μπορεί να προσδιοριστεί από τη σχέση [22,38]

$$\tau = \frac{G \cdot b^2 \cdot f(\nu)}{4\pi} \cdot \ln\left(\frac{D}{r_o}\right) \quad (31)$$

όπου D είναι η άνω ακτίνα αποκοπής ($\approx \rho^{-1/2}$), r_o είναι η εσωτερική ακτίνα αποκοπής ($b \leq r_o \leq 5b$) και $f(\nu) = \frac{(1-\nu/2)}{(1-\nu)}$

Έτσι, η κρίσιμη ενέργεια πάνω από την οποία ενεργοποιείται η δυναμική ανακρυστάλλωση, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (20) και (30) ισούται με:

$$E_{RX\,crit} = a \cdot G \cdot b^2 \cdot \rho_{crit} \quad (32)$$

Οπότε, το κριτήριο για την έναρξη της DRX διαμορφώνεται ως εξής:

Όταν $E_{tot} \geq E_{RX\,crit}$ τότε πραγματοποιείται ανακρυστάλλωση.

Στην συνέχεια με τη βοήθεια του λογισμικού MICRESS κατασκευάζεται το πρόγραμμα-κώδικας για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής κατά τη διάρκεια της διεργασίας FSW, το οποίο είναι βασισμένο στο μοντέλο phase-field περιλαμβάνοντας θερμοδυναμικά αξιώματα. Οι απαιτούμενες τιμές των παραμέτρων αποκτήθηκαν μέσω πειραματικών και υπολογιστικών δεδομένων. Επίσης, περιγράφεται η πυρήνωση, τα στάδια ανάπτυξης των κόκκων στο μέσο της nugget zone (NZ) και η τελική μικροδομή και το μέγεθος των κόκκων που προκύπτει από το μοντέλο προσομοίωσης και τέλος, συγκρίνεται με εκείνο του πειράματος για επαλήθευση των αποτελεσμάτων.

2.4 Μέθοδος FSW - Κράματα Mg

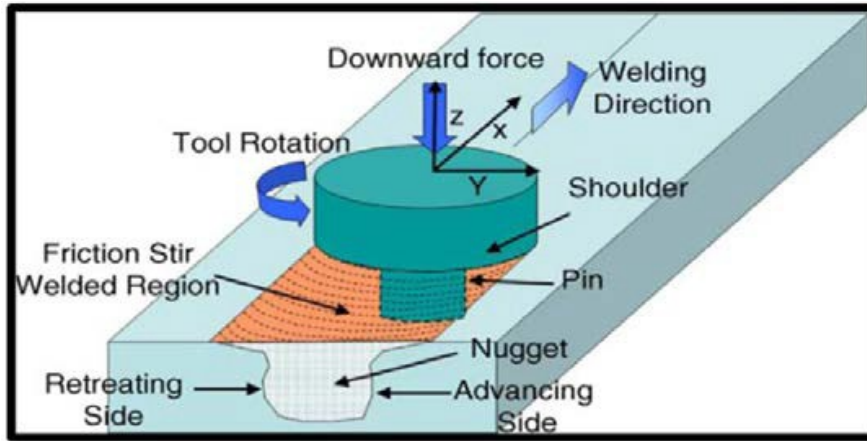
2.4.1 Μέθοδος FSW

Η Friction Stir Welding (Συγκόλληση δια τριβής και ανάδευσης) είναι μία διεργασία συγκόλλησης στερεής κατάστασης στην οποία μεταλλικά τεμάχια συγκολλούνται χωρίς να φτάσουμε τη θερμοκρασία τήξης. Η Friction Stir Welding (FSW) επινοήθηκε από τον Wayne Thomas στο TWI (The Welding Institute) και οι πρώτες πιστοποιημένες εφαρμογές ταξινομούνται στην Αγγλία τον Δεκέμβριο του 1991[49].

Ένα μη καταναλισκόμενο περιστρεφόμενο εργαλείο με ειδικά σχεδιασμένο πείρο (pin) και κατάλληλο περιουχένιο (shoulder), εισέρχεται μεταξύ των επαπτόμενων ακμών των προς συγκόλληση ελασμάτων ή πλακών (ορθογώνιων ή κυκλικών) και μετατοπίζεται κατά μήκος της ακμής σύνδεσης (τόξου στην περίπτωση της κυκλικής συγκόλλησης) της συγκόλλησης. Το εργαλείο εξυπηρετεί δύο κύριες λειτουργίες: (α) την θέρμανση των τεμαχίων μέσω του περιστρεφόμενου shoulder και (β) την μεταφορά υλικού, σε μία πολτώδη κατάσταση, μεταξύ των δύο τεμαχίων, με την μηχανική ανάδευση που προκαλείται από το pin.

Η θεμελιώδης διαφορά μεταξύ των συμβατικών τεχνικών συγκόλλησης με τήξη και της τεχνικής συγκόλλησης στερεάς κατάστασης με τριβή και ανάδευση (FSW) είναι ότι στη FSW καμία θερμότητα δεν προστίθεται στο σύστημα, αντίθετα η θερμότητα παράγεται εσωτερικά μέσω της τριβής στη διεπιφάνεια εργαλείου-τεμαχίου, με αποτέλεσμα την πλαστική παραμόρφωση του υλικού γύρω από τη ζώνη ανάδευσης. Η θέρμανση επιτυγχάνεται από την τριβή μεταξύ του εργαλείου και των επιφανειών του τεμαχίου με αποτέλεσμα την πλαστική παραμόρφωση του κατεργαζόμενου τεμαχίου [50]. Η τοπική θέρμανση μαλακώνει το υλικό γύρω από τον πείρο και ο συνδυασμός της περιστροφής του εργαλείου και της τριβής οδηγεί στην μετακίνηση υλικού από το μπροστινό μέρος του πείρου προς το πίσω μέρος του πείρου. Ως αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας, παράγεται μία συγκόλληση στερεάς κατάστασης. Ένα σχηματικό διάγραμμα της διεργασίας παρουσιάζεται στο σχ. 7.

Κατά τη διάρκεια του FSW, το υλικό υποβάλλεται σε έντονη πλαστική παραμόρφωση σε υψηλή θερμοκρασία, με αποτέλεσμα την παραγωγή λεπτών κόκκων. Οι μετασχηματισμένοι, ισοαξονικοί κόκκοι, σε ορισμένες περιπτώσεις, είναι μια ένδειξη για ανακρυστάλλωση που μπορεί να επιτευχθεί με τη θερμότητα που παράγεται λόγω τριβής μεταξύ των ακμών της συγκόλλησης. Η λεπτόκοκκη μικροδομή στην ζώνη συγκόλλησης της FSW παράγει καλές μηχανικές ιδιότητες [51].



Σχήμα 7: Σχηματικό διάγραμμα της διεργασίας FSW

Η (FSW) μπορεί να θεωρηθεί ως πράσινη τεχνολογία, γιατί δεν εκλύονται αέρια κατά τη διεργασία. Επίσης, δεν υπάρχουν τοξικές αναθυμιάσεις ή καπνός που παράγεται κατά τη διάρκεια ή μετά τη συγκόλληση. Η διαδικασία είναι ενεργειακά αποδοτική και φιλική προς το περιβάλλον [49]. Κανονικά τα περισσότερα μέταλλα και τα κράματα είναι συγκολλησιμα με συγκόλληση τήξης, όμως σε μερικές συγκολλήσεις υλικών που έχουν χαμηλή ικανότητα συγκόλλησης μπορεί να βρεθούν ελαττώματα. Μερικά κράματα Al, Cu, Ti και Mg δεν είναι καθόλου συγκολλησιμα με τήξη και ως εκ τούτου, η FSW είναι χρήσιμη για την συγκόλλησης τέτοιου είδους μεταλλικών υλικών.

Πλεονεκτήματα FSW έναντι των συμβατικών συγκολλήσεων:

- Καλές μηχανικές ιδιότητες στην συγκόλληση
- Βελτιωμένη ασφάλεια λόγω της απουσίας τοξικών αναθυμιάσεων ή πιτσίλισμα του τηγμένου υλικού
- Οχι αναλώσιμα – Ένας πείρος (pin) από εργαλειοχάλυβα (π.χ. H13) μπορεί να ενώσει πάνω από 1 km από αλουμίνιο και χωρίς υλικό γέμισης ή προστατευτικό αέριο
- Αυτοματοποιούνται εύκολα σε απλές μηχανές φρέζας - χαμηλότερο κόστος εγκατάστασης
- Μπορεί να λειτουργήσει σε όλες τις θέσεις (οριζόντια, κάθετη, κλπ), καθώς δεν υπάρχει λίμνη συγκόλλησης
- Σε γενικές γραμμές καλή εμφάνιση συγκόλλησης, μειώνοντας έτσι την ανάγκη για δαπανηρές κατεργασίες μετά τη συγκόλληση
- Μικρές επιπτώσεις στο περιβάλλον

Μειονεκτήματα της μεθόδου:

- Οπή όταν εργαλείο αποσύρεται
- Μεγάλες πιεστικές δυνάμεις που απαιτούν βαρέως τύπου σύσφιξη για να κρατήσει τα προς συγκόλληση ελάσματα
- Λιγότερο ευέλικτη από χειροκίνητες διαδικασίες συγκόλλησης τόξου (δυσκολίες με τις παραλλαγές του πάχους και μη-γραμμικές συγκολλήσεις)

Η FSW είναι μια εξαιρετικά πολύπλοκη διαδικασία που περιλαμβάνει τον συνδυασμό πολλών (και μη-γραμμικών) φυσικών φαινομένων. Τα φαινόμενα αυτά περιλαμβάνουν μεγάλη πλαστική παραμόρφωση, ροή υλικού, μηχανική ανάδευση, επιφάνεια αλληλεπίδρασης μεταξύ του εργαλείου και του κατεργαζόμενου τεμαχίου, δυναμική εξέλιξη της δομής και παραγωγή θερμότητας ως αποτέλεσμα της τριβής και της πλαστικής παραμόρφωσης. Πολλές παράμετροι επηρεάζουν σε μεγάλο βαθμό την ποιότητα της συγκόλλησης με FSW. Κατά συνέπεια, η FSW έχει αποτελέσει το αντικείμενο πολλών πειραματικών και αριθμητικών μελετών. Οι Mishra και Ma αναφέρουν περιεκτικά τόσο τη FSW όσο και τις διεργασίες με τριβή και ανάδευση. Οι Nandan et al. δίνουν μια πολύ περιεκτική αναφορά σχετικά με τη διαδικασία, τη δομή και τις ιδιότητες της FSW. Οι Threadgill et al. παρέχουν μια εκτενή ανασκόπηση της FSW σε κράματα αλουμινίου και ο Ham κάνει εκτενή ανασκόπηση της FSW σε άλλα κράματα.

Παρά τον μεγάλο αριθμό μελετών που διεξάγονται για την προώθηση της τεχνολογίας FSP (friction stir processing), οι επιδράσεις της FSP σε διάφορες μηχανικές ιδιότητες και ιδιότητες της μικροδομής χρειάζονται περαιτέρω έρευνες [52]. Επιπλέον, οι συσχετίσεις μεταξύ των παραμέτρων της FSP, τις μηχανικές ιδιότητες και τα χαρακτηριστικά της μικροδομής δεν είναι ακόμη πλήρως κατανοητά. Απαιτούνται ακριβείς συσχετισμοί για την επιτυχή μοντελοποίηση και βελτιστοποίηση της διαδικασίας.

Οι ιδιότητες των συγκολλήσεων με FSW δεν επηρεάζονται μόνο από τη γεωμετρία του εργαλείου αλλά επίσης από διάφορες παραμέτρους της διεργασίας. Η σύνθετη γεωμετρία τέτοιου είδους συγκολλήσεων και η τριών διαστάσεων μορφή τους, καθιστούν πολύ δύσκολο την ανάπτυξη ενός συνολικού συστήματος εξισώσεων για την πρόβλεψη της συμπεριφοράς της συγκόλλησης. Επιπλέον, η μη-γραμμικότητα του υλικού λόγω πλαστικής συμπεριφοράς είναι δύσκολο να ενσωματωθεί επειδή η μαθηματική ανάλυση γίνεται πολύ πολύπλοκη. Τα πειράματα είναι συχνά χρονοβόρα και δαπανηρά. Για να ξεπεραστούν αυτά τα προβλήματα, από τη δεκαετία του 2000, χρησιμοποιείται συχνά η αριθμητική ανάλυση [53].

Η αριθμητική ανάλυση έχει βρει ευρεία εφαρμογή στην FSW, παρέχοντας έναν αποτελεσματικό τρόπο για την ανάλυση κατά τον σχηματισμό συγκόλλησης. Σημαντική πρόοδος έχει σημειωθεί στη θεμελιώδη κατανόηση τόσο της διαδικασίας της FSW όσο και στις ιδιότητες των συγκολλήσεων. Ωστόσο, μέχρι στιγμής δεν έχει αναφερθεί καμία περιεκτική αναφορά για την αριθμητική ανάλυση της FSW.

2.4.2 Κράματα Mg

Τα κράματα μαγνησίου έχουν αποτελέσει αντικείμενο πολυάριθμων μελετών κατά την τελευταία δεκαετία λόγω της χαμηλής τους πυκνότητας ($1,7 \text{ g/cm}^3$) και συνεπώς, τη δυνατότητά τους να συμβάλουν στη μείωση του βάρους σε οχήματα και άλλες κατασκευές [54]. Φέρνοντας εξαρτήματα από Mg στην αγορά απαιτείται, ανάλογα με την εφαρμογή, η αύξηση της μηχανικής αντοχής και της ολκιμότητά τους, η μείωση της ανισοτροπία τους, προκειμένου να βελτιωθεί η διαμορφωσιμότητά τους, και η ενίσχυση της αντίστασή τους στη διάβρωση. Είναι επίσης, σημαντικό η βελτιστοποίηση της συμπεριφοράς των κραμάτων Mg υπό συνθήκες κρούσης, π.χ σε υψηλούς ρυθμούς παραμόρφωσης, ειδικά όταν τα τεμάχια Mg έχουν σχεδιαστεί για να χρησιμοποιηθούν σε εξαρτήματα αυτοκινήτων.

Το μαγνήσιο είναι το ελαφρύτερο μέταλλο κατασκευών στη γη, είναι 35% ελαφρύτερο από το αλουμίνιο και 78% ελαφρύτερο από το ατσάλι. Το μαγνήσιο προσφέρει μεγάλες δυνατότητες για τη μείωση του βάρους αντικαθιστώντας το χάλυβα και το αλουμίνιο, με κατάλληλες προϋποθέσεις στο

νέο σχεδιασμό [52].

Μέχρι τώρα τα περισσότερα από τα παραγόμενα τεμάχια μαγνησίου είναι χυτά εξαρτήματα, όμως δεν μπορεί να επιτευχθεί σημαντική μείωση του βάρους αν η χρησιμότητα του μαγνησίου δεν επεκταθεί για να καλύψει και άλλες εφαρμογές, κυρίως σε μορφή ελάσματος.

Η υποδεέστερη ολκιμότητα του μετάλλου σε θερμοκρασία δωματίου εξακολουθεί να εμποδίζει την ευρεία χρήση του. Το AZ31 κράμα μαγνησίου είναι εμπορικά διαθέσιμα σε μορφή ελάσματος και προσφέρει καλές μηχανικές ιδιότητες. Δυστυχώς, αυτό το κράμα παρουσιάζει πολύ περιορισμένη ολκιμότητα συνοδευόμενη από εύθραυστη συμπεριφορά σε θερμοκρασία δωματίου. Πρόσφατα αποτελέσματα, ωστόσο ανέδειξαν ότι είναι δυνατόν να σχηματιστούν ελάσματα AZ31 σε υψηλές θερμοκρασίες υπό ορισμένες προϋποθέσεις, επιτυγχάνοντας ακόμα και υπερπλαστική συμπεριφορά. Τα αποτελέσματα δείχνουν επίσης ότι η βελτιωμένη ολκιμότητα και διαμορφωσιμότητα μπορεί να επιτευχθεί με εκλέπτυνση και ομογενοποίηση της δομής των κόκκου του ελάσματος. Η FSP έχει τη δυνατότητα να γίνει ένα αποτελεσματικό εργαλείο για την τροποποίηση της μικροδομής των μεταλλικών ελασμάτων.

3. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ

3.1 Πειραματική Διαδικασία

Το υλικό που χρησιμοποιήθηκε σε αυτή την εργασία είναι το AZ31 κράμα μαγνησίου στην μορφή ελάσματος πάχους 2mm, η χημική σύσταση του οποίου παρουσιάζεται στον Πίνακα 2. Τα προς συγκόλληση ελάσματα είχαν διαστάσεις 100mm μήκος και 50mm πλάτος. Για τη συγκόλληση χρησιμοποιήθηκε μια τροποποιημένη φρεζομηχανή, εικ. 3, όπου ο χρήστης έχει την δυνατότητα χειροκίνητου ελέγχου της ταχύτητας περιστροφής και της κλίσης της κεφαλής, του κάθετου φορτίου και της ταχύτητας πρόωσης. Η περιστρεφόμενη κεφαλή είναι κατασκευασμένη από εργαλειοχάλυβα H-13 και αποτελείται από έναν ειδικά σχεδιασμένο πείρο, με σπειροειδή μορφή (υψηλής αντοχής) με διάμετρο 5mm και ύψος 1.8 mm και κατάλληλο περιουχένιο με διάμετρο 14mm, εικ. 4. Η κλίση της κεφαλής είναι ίση με 2°. Επιπλέον γεωμετρικά χαρακτηριστικά και συνθήκες συγκόλλησης δίνονται στον Πίνακα 3.

Πίνακας 2 Χημική σύσταση (% κ.β) του AZ31 κράματος μαγνησίου που χρησιμοποιήθηκε στην εργασία

Al	Mn	Zn	Si	Cu	Ni	Fe	Impurity	Mg
2.8–3.2	0.2–1.0	0.8–1.2	≤0.05	≤0.05	≤0.005	≤0.005	≤0.3	Bal.



Εικόνα 3 Μηχανή συγκόλλησης



Εικόνα 4 Εργαλείο συγκόλλησης

Πίνακας 3 Τιμές παραμέτρων συγκόλλησης και γεωμετρικών χαρακτηριστικών εργαλείου

Παράμετρος	Τιμή
Ταχύτητα περιστροφής (N)	830 rpm
Κάθετη δύναμη (F_n)	4120 N
Ταχύτητα πρόωσης (v)	60 mm/min
Γωνία ελίκωσης σπειρώματος πείρου (λ)	3.25°

Τα ελάσματα συγκρατούνται στην ειδικά διαμορφωμένη τράπεζα τις εργαλειομηχανής και τα συγκολλημένα ελάσματα έχουν την μορφή όπως φαίνεται στην εικόνα 5.



Εικόνα 5 Συγκολλημένα ελάσματα

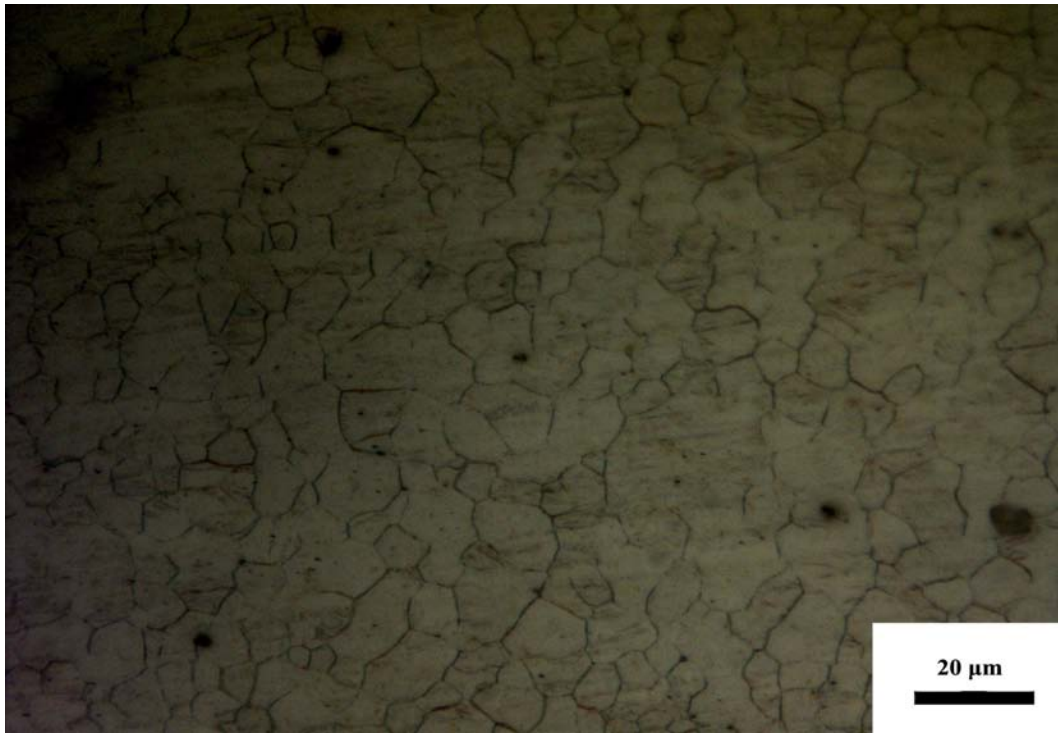
Στο σημείο αυτό αξίζει να σημειωθεί ότι, ένα μέρος της πειραματικής διαδικασίας εκτελέστηκε από τον φοιτητή Τάτσιο Κωνσταντίνο, το οποίο αποτελούσε αντικείμενο μελέτης, στα πλαίσια της εκπόνησης της διπλωματικής του εργασίας.

Στη συνέχεια τα συγκολλημένα ελάσματα (εικ. 5) κόπηκαν εγκάρσια στη ραφή συγκόλλησης και προετοιμάστηκαν με τις κατάλληλες μεταλλογραφικές διαδικασίες ώστε να παρατηρηθούν στο οπτικό μικροσκόπιο.

Έπειτα από τις παρατηρήσεις στο οπτικό μικροσκόπιο προέκυψαν τα παρακάτω δεδομένα για τον αριθμό και το μέγεθος των κόκκων στο βασικό μέταλλο (base metal) και τη ζώνη nugget (nugget zone).

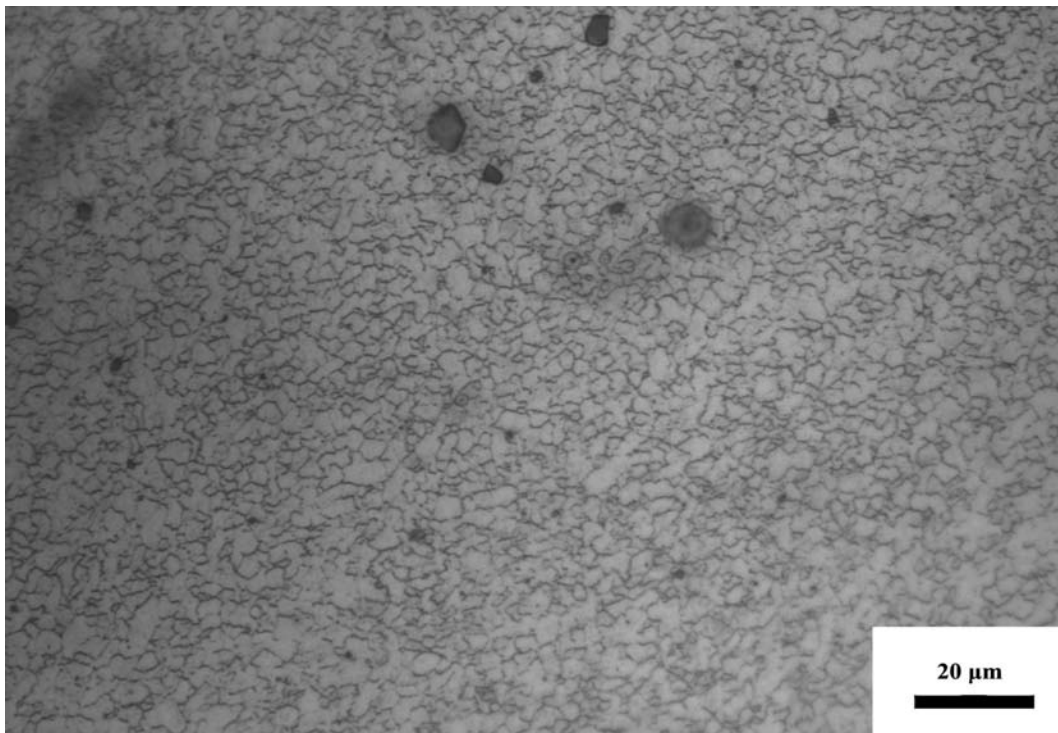
Στο βασικό μέταλλο (εικ. 6) υπολογίζεται μία μέση διάμετρος κόκκου (d_{bm}) ίση με 14.5 μm και μία διακύμανση περίπου ίση με $\pm 7\mu\text{m}$.

Επίσης, σε μία περιοχή διαστάσεων 100 μm x 100 μm , υπολογίζεται πως υπάρχουν περίπου 100 κόκκοι.



Εικόνα 6 Μικροδομή βασικού μετάλλου

Στη nugget zone (εικ. 7) υπολογίζεται μία μέση διάμετρος κόκκου (d_{nz}) ίση με $4,5\mu\text{m}$ και μία διακύμανση περίπου ίση με $\pm 2,7\mu\text{m}$. Ο μέσος αριθμός κόκκων σε μία περιοχή $100 \times 100 \mu\text{m}$, στη nugget zone, ισούται περίπου με 1785.



Εικόνα 7 Μικροδομή Ζώνης ανάδευσης

3.2 Αριθμητική Διαδικασία

Για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής κατά τη διάρκεια της διεργασίας FSW χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό MICRESS, το οποίο παρέχει εκπληκτικές δυνατότητες για την μελέτη φαινομένων στερεοποίησης, ανακρυστάλλωσης και μετασχηματισμό φάσεων.

3.2.1 Πως δουλεύει το MICRESS

Το λογισμικό MICRESS (MICROstructure Evolution Simulation Software) έχει αναπτυχθεί για την επίλυση χρόνο- και χώρο- αριθμητικής προσομοίωσης της στερεοποίησης, ανάπτυξης κόκκων, ανακρυστάλλωσης και μετασχηματισμών στερεής κατάστασης μεταλλικών κραμάτων. Το MICRESS καλύπτει εξέλιξη φάσης, διαλυτή και θερμική διάχυση και μετασχηματισμό στερεής κατάστασης. Αυτό επιτρέπει τον υπολογισμό της μορφοποίησης της μικροδομής κατά το χρόνο και το χώρο επιλύοντας το πρόβλημα του ελεύθερου συνόρου για κινούμενα όρια της φάσης.

Η εξέλιξη της μικροδομής οδηγείται κυρίως από θερμοδυναμικά ισοζύγια, διάχυση και καμπύλωση. Το MICRESS βασίζεται στη μέθοδο πολυφασικού πεδίου (multi-phase-field), η οποία καθορίζει μία παράμετρο phase-field για κάθε υπάρχουσα φάση. Η παράμετρος phase-field περιγράφει το ποσοστό κάθε φάσης σαν μία συνεχή συνάρτηση με το χώρο και το χρόνο. Κάθε κόκκος αποδίδεται σε μία ξεχωριστή παράμετρο phase-field και αντιμετωπίζεται σαν ένα ατομικό αντικείμενο στην μικροδομή. Έτσι, προκύπτει ένα σύστημα μερικών διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν την εξέλιξη της παραμέτρου phase-field μαζί με τη συγκέντρωση, τη θερμοκρασία και την τάση. Οι εξισώσεις επιλύονται με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Επίσης, παρέχεται η δυνατότητα προσομοιώσεων 2D και 3D.

Υπόβαθρο του MICRESS

Ο απώτερος στόχος του λογισμικού προσομοίωσης MICRESS είναι να είναι σε θέση να ακολουθήσει την εξέλιξη της μικροδομής καθ' όλη τη διάρκεια της ζωής ενός υλικού, ξεκινώντας από τη τήξη και την ανάπτυξή του με το χρόνο και τις αλλαγές της θερμοκρασίας.

Η αριθμητική προσομοίωση πραγματικών διεργασιών, όπως η εξέλιξη της μικροδομής, απαιτεί μαθηματικά μοντέλα τα οποία περιγράφουν το υπάρχον φυσικό πρόβλημα. Το MICRESS λύνει το λεγόμενο πρόβλημα Stefan με μία τροποποιημένη σχέση Gibbs-Thomson για την μοντελοποίηση της εξέλιξης της μικροδομής. Η επίλυση του μαθηματικού μοντέλου περιλαμβάνει παραμέτρους του υλικού και της διεργασίας, περιγραφή των αρχικών συνθηκών και κριτήριο πυρήνωσης. Επίσης, απαιτούνται για τους υπολογισμούς μερικές θεωρήσεις κάποιων αριθμητικών παραμέτρων. Η μέθοδος phase-field χρησιμοποιείται από το MICRESS σαν μία αριθμητική προσέγγιση του προβλήματος Stefan.

Μέχρι σήμερα, η μέθοδος phase-field είναι η πιο κατάλληλη αριθμητική προσέγγιση γεφυρώνοντας τις κλίμακες μεγέθους μεταξύ του τριχοειδούς μήκους διεπιφάνειας (interface capillarity length) από λίγα νανόμετρα μέχρι και την κλίμακα μιλιμέτρων της διάχυσης. Το κύριο χαρακτηριστικό του μοντέλου phase-field είναι η διαχυτότητα στη διεπιφάνεια μεταξύ δύο φάσεων. Η διεπιφάνεια περιγράφεται σαν μία απότομη αλλά συνεχής μεταβολή της μεταβλητής phase-field $\phi(x,t)$ μεταξύ των δύο φάσεων. Όμως, τεχνικά τα κράματα αποτελούνται από πολλαπλούς κόκκους, πολλαπλές

φάσεις και πολλά συστατικά. Η περιγραφή τους απαιτεί, εκτός των άλλων, την εισαγωγή πολλαπλών phase-field, την περιγραφή της διάχυσης πολλών συστατικών και τη σύζευξη θερμοδυναμικών βάσεων δεδομένων.

3.2.2 Διαδικασία προσομοίωσης και παράμετροι MICRESS

Στο αριθμητικό μοντέλο που αναπτύχθηκε στη συγκεκριμένη εργασία, χρησιμοποιήθηκε ένα πλέγμα με διαστάσεις 500 x 500 κελιά και διάσταση κελιού ίση με 0.2 μm . Έτσι, μελετήθηκαν οι μεταβολές της μικροδομής του AZ31 κράματος μαγνησίου, κατά τη διάρκεια της FSW, σε μία περιοχή με διαστάσεις 100 μm x 100 μm στο κέντρο της ζώνης ανάδευσης (nugget zone, NZ).

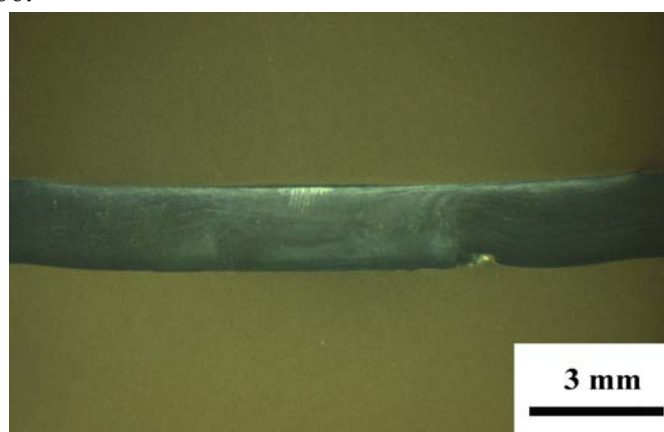
Για την κατασκευή της αρχικής μικροδομής, χρησιμοποιήθηκε μία συνάρτηση τυχαίας τοποθέτησης των κόκκων στο πλέγμα, ενώ ο αριθμός και το μέγεθος των κόκκων υπολογίστηκε από τα δεδομένα της πειραματικής διαδικασίας (στην περίπτωση μας 102 κόκκοι με μέση διάμετρο 14 μm). Ο προσανατολισμός των κόκκων τέθηκε με τυχαίο τρόπο μεταξύ 0° και 180°. Επίσης, η φάση του υλικού θεωρήθηκε ανισότροπη με εξαγωνική κρυσταλλική δομή (HCP).

Όπως γνωρίζουμε κατά την διεργασία FSW πραγματοποιείται πυρήνωση και ανακρυστάλλωση των κόκκων.

Για την ανακρυστάλλωση επιλέχθηκε το μοντέλο, που παρέχεται από το λογισμικό MICRESS, το οποίο βασίζεται στην αποθηκευμένη ενέργεια του κόκκου, όπως αναφέρθηκε στη σχέση (20), στην ενότητα 2.3. Έτσι, η συνολική ενέργεια ανακρυστάλλωσης του κόκκου, συμπεριλαμβανομένης και της θερμότητας που αναπτύσσεται κατά τη FSW, E_{tot} , υπολογίστηκε από τη σχέση (29).

Για την πυρήνωση επιλέχθηκαν ως θέσεις φύτρων (seeds) οι τριπλοί δεσμοί, οι διεπιφάνειες και το εσωτερικό (bulk) των μητρικών κόκκων. Η κρίσιμη ενέργεια ανακρυστάλλωσης, $E_{\text{RX crit}}$, πάνω από την οποία συμβαίνει DRX, δίνεται από τη σχέση (32), όπου η κρίσιμη πυκνότητα γραμμοαταξιών, ρ_{crit} υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τη σχέση (30). Επειδή η κρίσιμη πυκνότητα γραμμοαταξιών είναι συνάρτηση της θερμοκρασίας, μέσω της κινητικότητας $M=M(T)$, ο υπολογισμός της έγινε στη θερμοκρασία $T=95\%T_m$. Η ενέργεια ανακρυστάλλωσης των νέων κόκκων θεωρήθηκε μηδενική. Επίσης, το θερμοκρασιακό εύρος μέσα στο οποίο πραγματοποιείται πυρήνωση τέθηκε από 580K έως 860K, που ισούνται περίπου με το 65% και 95% της θερμοκρασίας τήξης (T_m) του μαγνησίου, αντίστοιχα [55].

Για τον υπολογισμό του ρυθμού παραμόρφωσης, $\dot{\epsilon}$, χρησιμοποιήθηκε η σχέση (30γ), όπου οι τιμές των R_{nug} , D_{nug} προσδιορίστηκαν από την εικόνα 8, όπου φαίνεται η τομή της συγκόλλησης, μέσω του στερεοσκοπίου.



Εικόνα 8 Μακροδομή συγκόλλησης

Κατά την ανακρυστάλλωση πραγματοποιείται μετακίνηση των συνόρων των κόκκων και τα LAGBs που σχηματίζονται μετατρέπονται σε HAGBs σε μεγάλες παραμορφώσεις. Η ενέργεια γ_m στα σύνορα του κόκκου μεγάλης γωνίας (HAGB) τέθηκε σταθερή και υπολογίστηκε από τη σχέση (30β). Η κινητικότητα των HAGB υπολογίστηκε από την σχέση (30ε) δίνοντας στον προεκθετικό όρο M_0 μία προσεγγιστική τιμή, λόγω έλλειψης δεδομένων για το συγκεκριμένο φυσικό μέγεθος για το AZ31 κράμα μαγνησίου.

Επίσης, λήφθηκε υπόψιν η επίδραση της διαφοράς του προσανατολισμού στην μεταβολή της διεπιφανειακής ενέργειας και της κινητικότητας των LAGB. Η μείωση της διεπιφανειακής ενέργειας συναρτήσει της γωνίας misorientation (θ) προσδιορίζεται από τον τύπο Read-Shockley:

$$\gamma(\theta) = \gamma_m \frac{\theta_i}{\theta_m} \left[1 - \ln \left(\frac{\theta_i}{\theta_m} \right) \right] \quad (33)$$

και η μείωση της κινητικότητας, από τον νόμο Humphreys, μέσω του τύπου:

$$m(\theta) = m \left[1 - e^{-B \left(\frac{\theta_i}{\theta_m} \right)^n} \right] \quad (34)$$

όπου m είναι η κινητικότητα των HAGB, θ_i είναι η διαφορά προσανατολισμού μεταξύ του i κόκκου και του γειτονικού του, θ_m είναι η διαφορά προσανατολισμού μεταξύ HAGBs, B και n είναι δύο πειραματικοί παράμετροι οι οποίοι έχουν προεπιλεγεί με τιμές 5 και 4, αντίστοιχα.

Ακόμα, εκτός από τις παραμέτρους του υλικού και της διεργασίας, καθώς και του κριτηρίου πυρήνωσης, έγιναν μερικές θεωρήσεις κάποιων αριθμητικών παραμέτρων που απαιτούνται για τους υπολογισμούς και την επίλυση του μαθηματικού μοντέλου.

Τέλος, η προσομοίωση πραγματοποιήθηκε τόσο για υποθετικούς θερμικούς κύκλους, με την αρχική θερμοκρασία να κυμαίνεται μεταξύ $0.8-0.95 T_m$ και για ρυθμούς ψύξης από -1 έως -2800 K/s όσο και για τον πραγματικό θερμικό κύκλο στην NZ κατά τη διάρκεια της συγκόλλησης.

Παρακάτω, στους πίνακες 4 και 5 παρατίθενται οι τιμές τόσο των ιδιοτήτων του κράματος μαγνησίου AZ31 όσο και των παραμέτρων των εξισώσεων που χρησιμοποιήθηκαν.

Πίνακας 4 Ιδιότητες του υλικού (AZ31 κράμα μαγνησίου)

Ιδιότητα	Τιμή
G	17 GPa [56]
b	0.61 nm [41]
ρ	$4 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ [57]
μ	0.6
\bar{Y}	130 Mpa
σ_{shear}	130 Mpa
Q_b	134 kJ/mol [58]
T_m	618 °C [52]

Πίνακας 5 Τιμές παραμέτρων που χρησιμοποιούνται στις εξισώσεις

Παράμετρος	Τιμή
a	0.5
θ_m	15° [15]
ν	0.35 [59]
R_{nug}	0.83 mm (Υπολ)
D_{nug}	1.39 mm (Υπολ)
Mo	$2.7 \cdot 10^{-3} \text{ m}^4/\text{Js}$ (Υπολ)
γ_m	0.332 J/m ² (Υπολ)
$\dot{\epsilon}$	25.95 s ⁻¹ (Υπολ)
l	0.798 μm (Υπολ)
τ	$2.848 \cdot 10^{-9} \text{ N}$ (Υπολ)
ρ_{crit}	$1.345 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ (Υπολ)

Οι ενδιάμεσες τιμές, των σχέσεων (20)-(32), για τον τελικό υπολογισμό των τιμών των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν στον κώδικα του λογισμικού MICRESS δίνονται στον πίνακα 6.

Πίνακας 6 Ενδιάμεσες και τελικές τιμές παραμέτρων

$Q_{sh}=1504 \text{ W}$
$\theta=55.78^\circ$
$v_p=0.2173 \text{ m/s}$
$v_m=0.01436 \text{ m/s}$
$v_{rp}=0.20956 \text{ m/s}$
$Q_{pin}=296.562 \text{ W}$
$P_{sh}=78.4 \text{ GPa}$
$V_{pin1}=12.723 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3$
$V_{pin2}=33.93 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3$
$V_{pin3}=3.927 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3$
$P_{pin}=61.56 \text{ GPa}$
$E_{RX}=0.1256 \text{ MPa}$
$E_{tot}=139.96 \text{ GPa}$
$E_{RX \text{ crit}}= 4.254 \text{ MPa}$

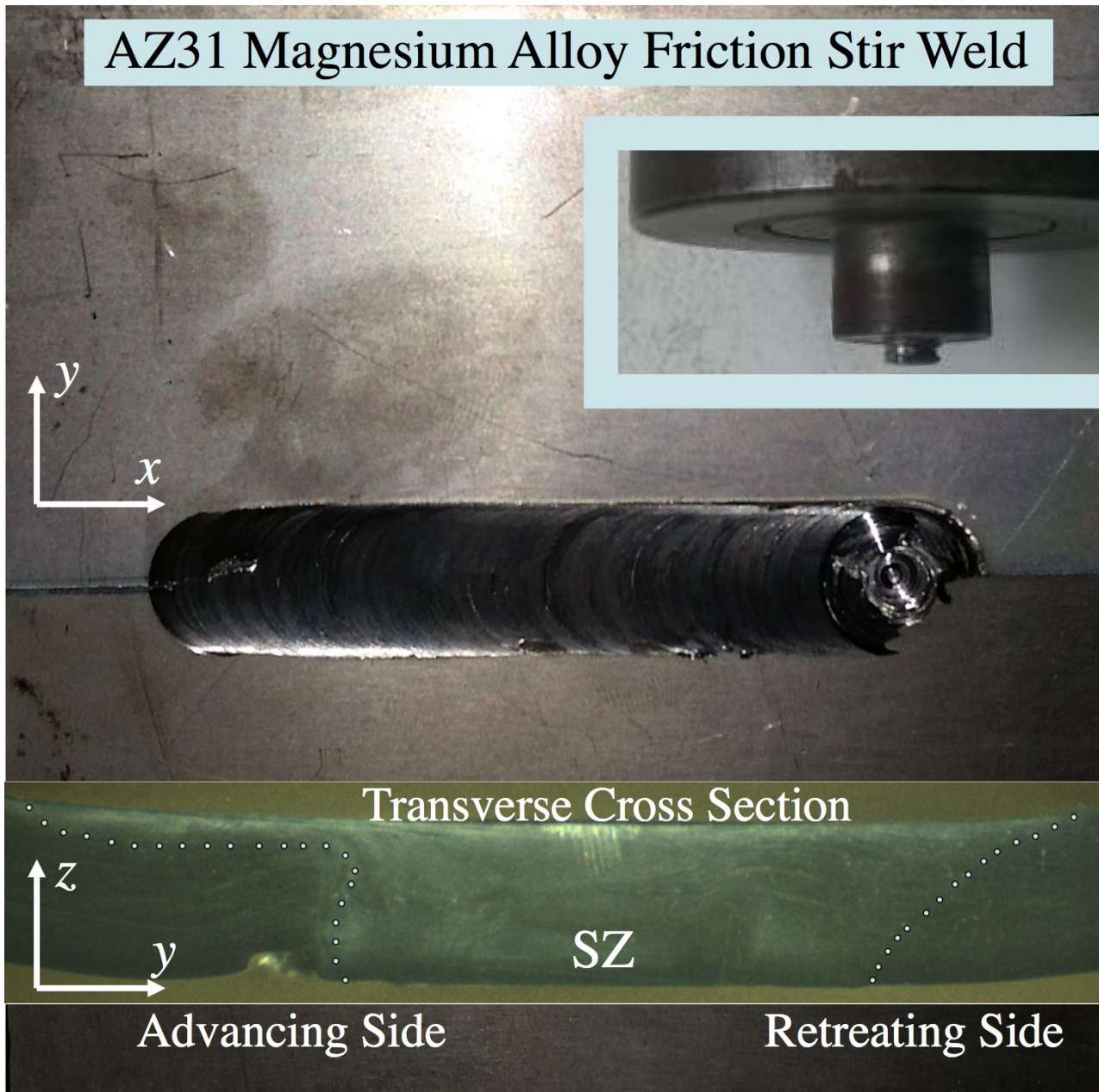
Στο παράρτημα παρατίθεται τμήμα του εκτελέσιμου κώδικα για να γίνει πιο κατανοητή η διαδικασία της προσομοίωσης και η λειτουργία του λογισμικού MICRESS.

3.3 Θερμικός κύκλος

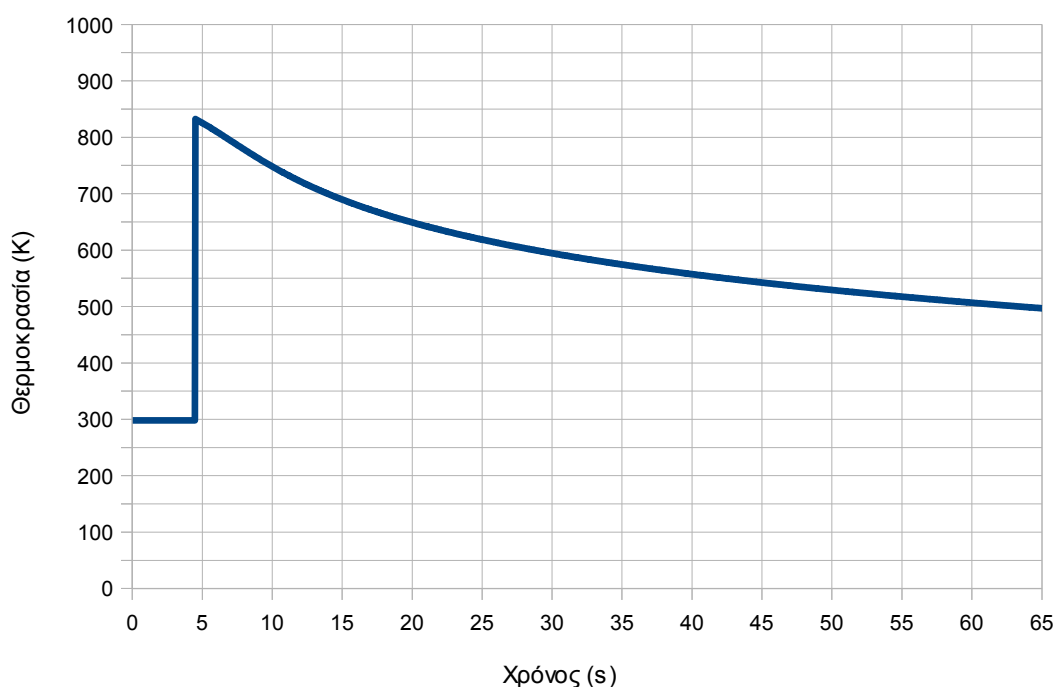
Ο θερμικός κύκλος στη ζώνη ανάδευσης(NZ), κατά την διάρκεια της συγκόλλησης με τη μέθοδο FSW που πραγματοποιήθηκε κατά την πειραματική διαδικασία με συνθήκες:

ταχύτητα περιστροφής 830 rpm, ταχύτητα πρόωσης 60 mm/min και επιβαλλόμενο φορτίο 4120N (Σχ. 8), υπολογίστηκε αναλυτικά και παρουσιάζεται στο σχήμα 9.

Ο υπολογισμός του θερμικού κύκλου πραγματοποιήθηκε με τη μέθοδο inverse analysis στο Naval Research Laboratory από τον Dr Samuel Lambrakos [60].



Σχήμα 8: Μακροδομή συγκόλλησης (top view και εγκάρσια τομή) στην οποία έγιναν οι υπολογισμοί του θερμοκρασιακού πεδίου

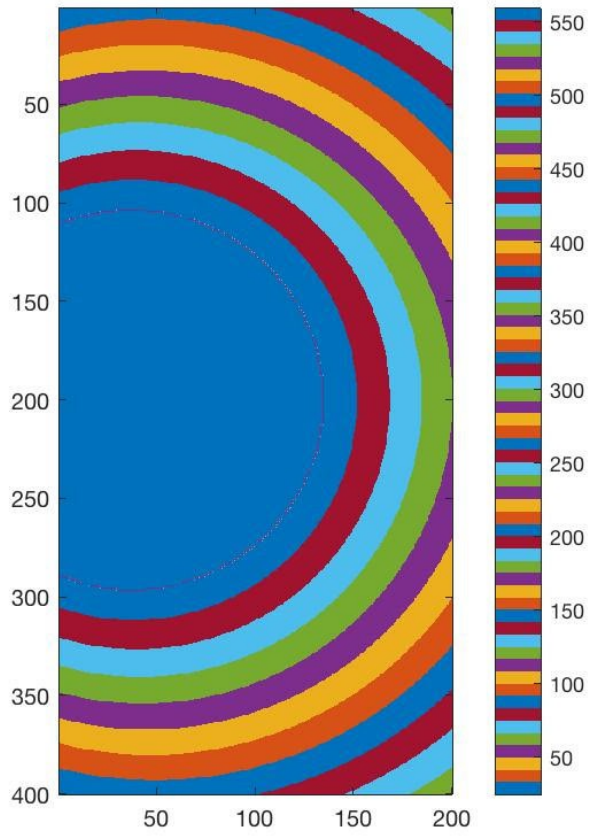


Σχήμα 9: Θερμικός κύκλος στην NZ της συγκόλλησης

Παρατηρούμε ότι, η θερμοκρασία από τη στιγμή της εισόδου του εργαλείου στο τεμάχιο μέχρι την έξοδο του κυμαίνεται από 830K έως 498K. Η μέγιστη θερμοκρασία ισούται με 832 K, η οποία αντιστοιχεί περίπου στο 93% της θερμοκρασίας τήξης ($T_m=891$ K) του AZ31 κράματος μαγνησίου, ενώ η ελάχιστη ισούται με 498 K, η οποία αντιστοιχεί περίπου στο 56% της T_m .

Αυτό το θερμοκρασιακό εύρος περιλαμβάνει την κρίσιμη θερμοκρασία για ανακρυστάλλωση η οποία κυμαίνεται μεταξύ $0.5-0.7 T_m$, σύμφωνα με τις αναφορές [55,56] για το AZ31 κράμα μαγνησίου, κατά την οποία η ανακρυστάλλωση και οι αυξομειώσεις των κόκκων είναι έντονες.

Αξίζει να σημειωθεί ότι ο θερμικός κύκλος είναι ομοιόμορφος σε κάθε σημείο μέσα στη ζώνη ανάδευσης (Σχ. 10), δηλαδή η θερμοκρασία μεταβάλλεται μόνο ως προς τον χρόνο t και όχι ως προς το χώρο z . Αυτό επαληθεύεται από το γεγονός ότι το μέγεθος των κόκκων είναι ομοιογενή σε όλη την NZ, χωρίς σοβαρές αυξομειώσεις, όπως προκύπτει από την εικόνα 7 στην ενότητα της πειραματικής διαδικασίας.



Σχήμα 10: Ισοθερμοκρασιακές κατανομές στην ζώνη ανάδευσης (top view)

4. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Το λογισμικό MICRESS έχει τη δυνατότητα για τον υπολογισμό και την εξαγωγή δεδομένων όπως είναι ο αριθμός και το μέγεθος των κόκκων, η ωθούσα δύναμη, η κινητικότητα, η ενέργεια ανακρυστάλλωσης, το ποσοστό ανακρυστάλλωσης, η πυκνότητα γραμμοαταξιών, ο προσανατολισμός των κόκκων, κ.ά.

Χρησιμοποιώντας τα δεδομένα του MICRESS και σε συνδυασμό με επιπρόσθετους υπολογισμούς προέκυψαν τα τελικά αποτελέσματα.

4.1 Αποτελέσματα από υποθετικούς θερμικούς κύκλους

Εκτελώντας προσομοιώσεις για υποθετικούς θερμικούς κύκλους, μεταβάλλοντας παραμετρικά την αρχική θερμοκρασία και τον ρυθμό ψύξης, υπολογίστηκαν ο αριθμός και το μέγεθος των κόκκων στην τελική μικροδομή. Τα αποτελέσματα παρατίθενται συγκεντρωτικά στον πίνακα 7.

Πίνακας 7 Αποτελέσματα υποθετικών θερμικών κύκλων

Αρχική θερμοκρασία (K)	Ρυθμός ψύξης (K/s)	Αριθμός κόκκων	Μέση διάμετρος κόκκων (μm)
860	-1	1152	5.5
	-10	1051	5.48
	-28	1254	5.3
	-280	1634	4.9
	-2800	1670	4.76
800	-2	2014	4.3
	-22	2014	4.3
	-220	2043	4.28
768	-18.8	2304	4.21
	-188	2345	4.2
705	-12.5	2995	3.05

Πρέπει να σημειωθεί ότι, για αρχική θερμοκρασία (T_0) 768K και κλίση -1880K/s, για $T_0=705$ K και κλίση -125K/s, για $T_0=705$ K και κλίση -1250K/s δεν πραγματοποιήθηκε πλήρης ανακρυστάλλωση και το ποσοστό αυτής ήταν 80%, 99.48% και 7.14% αντίστοιχα.

Από τον πίνακα 7 είναι εμφανές ότι, καθώς η αρχική θερμοκρασία T_0 μειώνεται ο αριθμός των κόκκων αυξάνεται (η μέση διάμετρος κόκκου μειώνεται), ενώ για δεδομένη T_0 καθώς ο ρυθμός ψύξης μειώνεται τότε και ο αριθμός των κόκκων μειώνεται (η μέση διάμετρος κόκκου αυξάνεται).

Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι, όσο πιο κοντά στο μέσο του θερμοκρασιακού εύρους πυρήνωσης βρισκόμαστε (στην παρούσα εργασία έχει τεθεί από 580K έως 860K) τόσο πιο έντονη είναι η δημιουργία νέων κόκκων και άρα μεγαλύτερος πληθυσμός κόκκων στην τελική μικροδομή (με μικρότερη μέση διάμετρο).

Επίσης, όσο πιο αργός είναι ο ρυθμός με τον οποίο μειώνεται η θερμοκρασία τόσο μεγαλύτερη είναι η κινητικότητα και άρα ταχύτερη η ανάπτυξη των κόκκων, με αποτέλεσμα μικρότερο πληθυσμό κόκκων στην τελική μικροδομή (με μεγαλύτερη μέση διάμετρο).

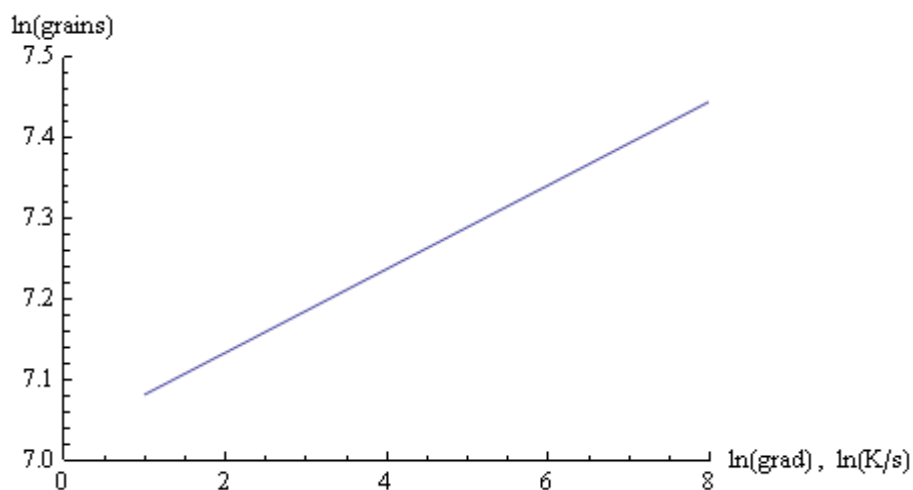
4.1.1 Σχέσεις αριθμού και διαμέτρου κόκκων συναρτήσει του ρυθμού ψύξης

Ο αριθμός των κόκκων (grains) συναρτήσει της κλίσης της θερμοκρασίας (grad), για δεδομένη αρχική θερμοκρασία (T_0) μπορεί να περιγραφεί με μία συνάρτηση της μορφής:

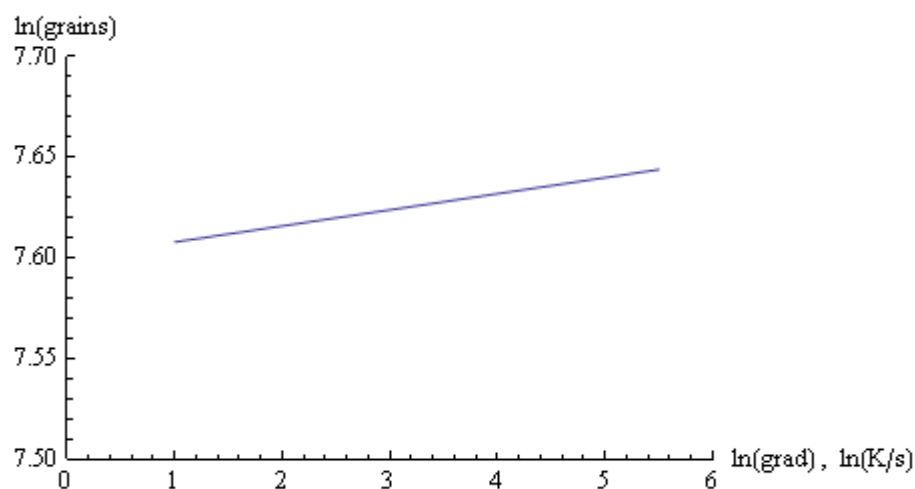
$\ln(\text{grains}) = A + B \ln(\text{grad})$, όπου A, B σταθερές και $\text{grad} = |\text{grad}|$.

Παρακάτω δίνονται οι σχέσεις και τα διαγράμματα για διάφορες αρχικές θερμοκρασίες. Καθώς η κλίση μειώνεται, ο αριθμός των κόκκων μειώνεται επίσης.

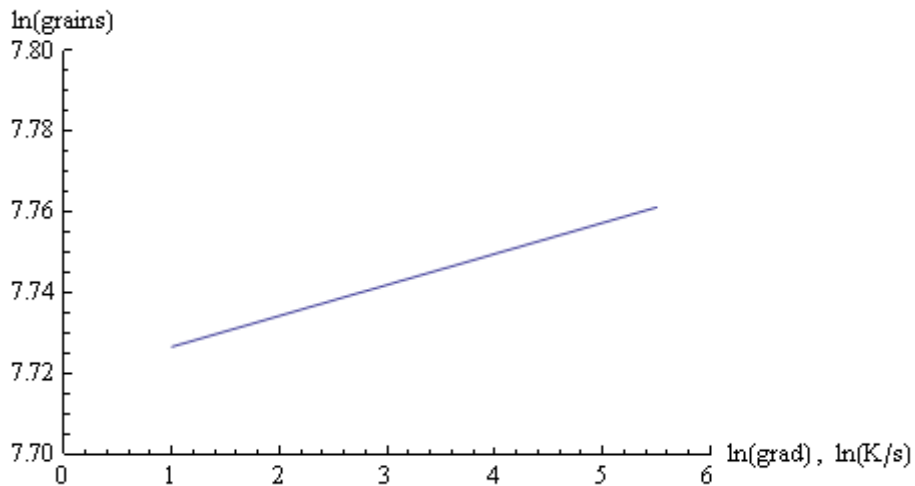
- $T_0 = 860\text{K}$: $\ln(\text{grains}) = 7.03 + 0.052 \ln(\text{grad})$



- $T_0 = 800\text{K}$: $\ln(\text{grains}) = 7.6 + 0.008 \ln(\text{grad})$



- **To=768K : $\ln(\text{grains})=7.719 + 0.00768\ln(\text{grad})$**

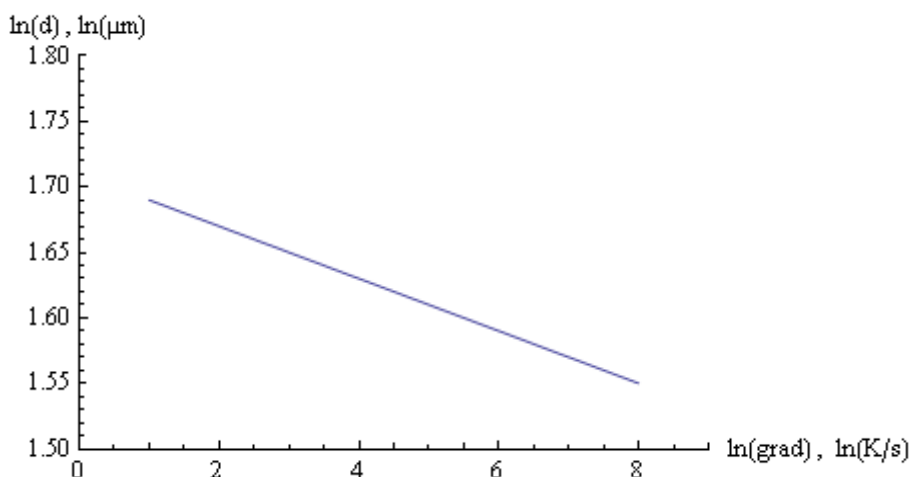


Παρατηρούμε ότι, όσο μειώνεται η αρχική θερμοκρασία T_0 τόσο αυξάνεται η σταθερά A και μειώνεται η σταθερά B . Η σταθερά A λαμβάνει τιμές περίπου 7-8 και η σταθερά B από 0.007 έως 0.05.

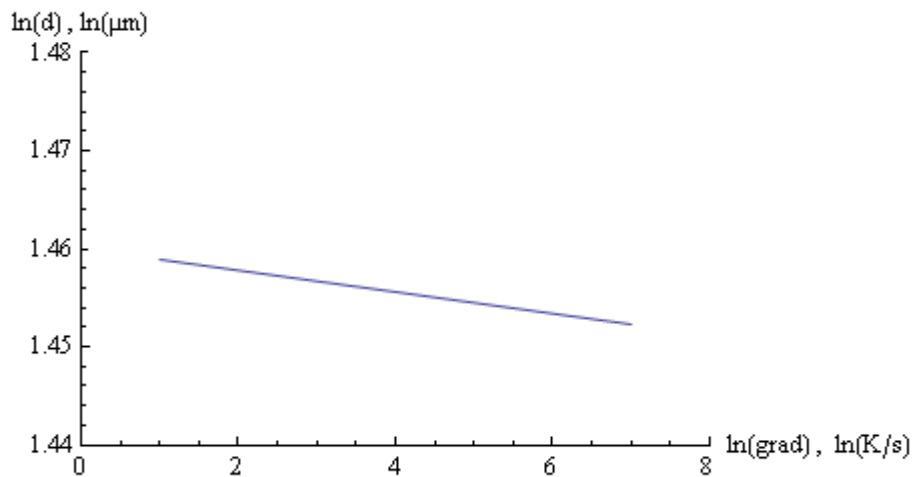
Παρόμοια περιγράφεται το μέγεθος των κόκκων (d_{GRAIN}) συναρτήσει της κλίσης (grad), για δεδομένη αρχική θερμοκρασία (T_0) μέσω της συνάρτησης της μορφής: $\ln(d_{\text{GRAIN}})=A - B \ln(\text{grad})$, όπου A, B σταθερές και $\text{grad}=|\text{grad}|$.

Παρακάτω δίνονται οι σχέσεις και τα διαγράμματα για διάφορες αρχικές θερμοκρασίες. Καθώς η κλίση μειώνεται, το μέγεθος των κόκκων αυξάνεται.

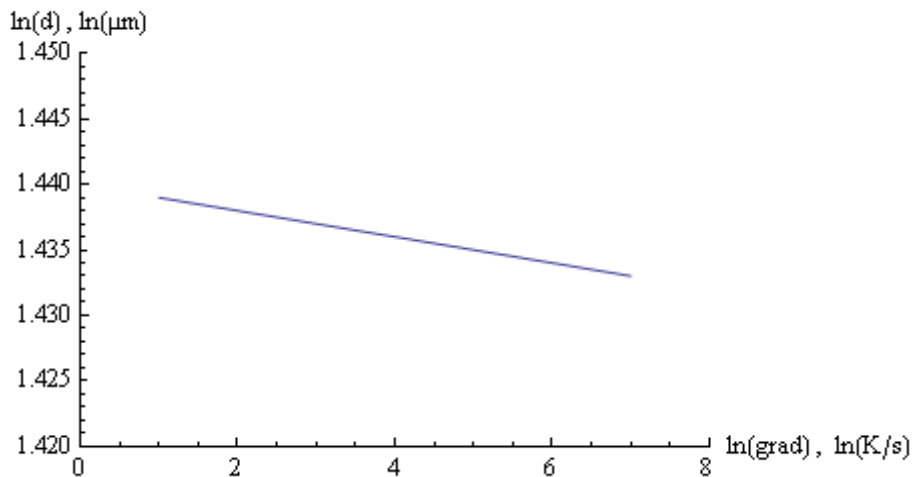
- **To=860K : $\ln(d_{\text{GRAIN}})=1.71 - 0.02 \ln(\text{grad})$**



- $T_0=800\text{K}$: $\ln(d_{\text{GRAIN}})=1.46 - 0.0011 \ln(\text{grad})$



- $T_0=768\text{K}$: $\ln(d_{\text{GRAIN}})=1.44 - 0.001 \ln(\text{grad})$



Όσο μειώνεται η αρχική θερμοκρασία T_0 τόσο οι σταθερές A και B μειώνονται. Η σταθερά A λαμβάνει τιμές από 1.45 έως 1.7 και η σταθερά B από 0.001 έως 0.02.

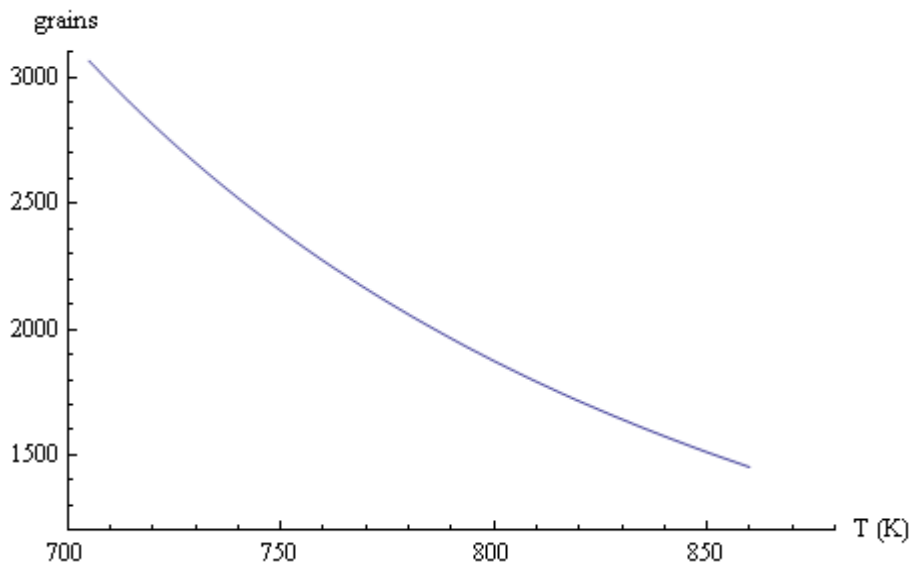
4.1.2 Σχέσεις αριθμού και διαμέτρου κόκκων συναρτήσει της αρχικής θερμοκρασίας

Ο αριθμός των κόκκων (grains) συναρτήσει της αρχικής θερμοκρασίας (T_0), για δεδομένο ρυθμό ψύξης (grad) μπορεί να περιγραφεί με μία συνάρτηση τύπου Arrhenius: $\text{grains}=A \exp(B/T_0)$, όπου A , B σταθερές και $T_0 > 0$ σε Kelvin.

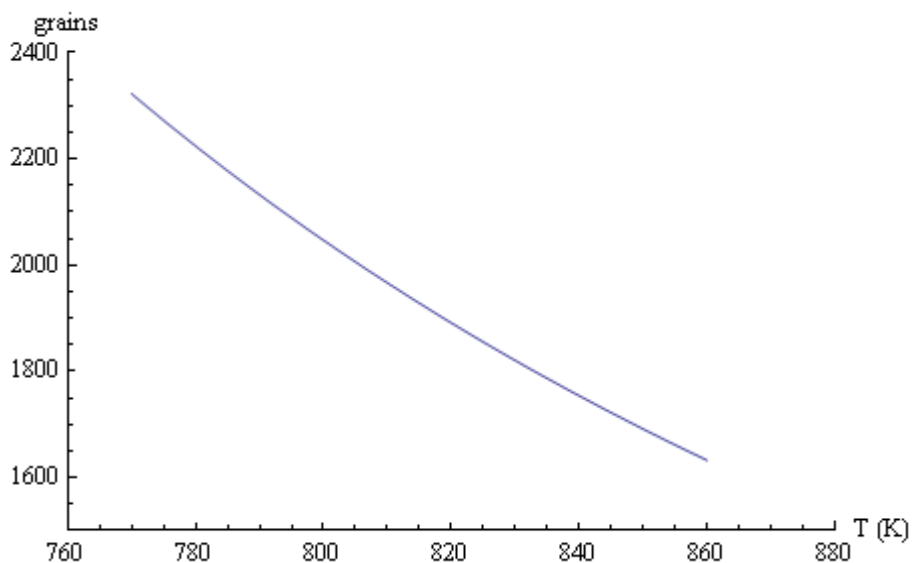
Παρακάτω δίνονται οι σχέσεις και τα διαγράμματα για κλίσεις τάξης μεγέθους του -10 και του -100 K/s.

Καθώς η αρχική θερμοκρασία μειώνεται, ο αριθμός των κόκκων αυξάνεται.

- Κλίση 0(-10) : $\text{grains}(T_0)=48.42 \exp(2925/T_0)$



- Κλίση 0(-100) : $\text{grains}(T_0)=79.86 \exp(2595/T_0)$



Παρατηρούμε ότι, όσο αυξάνεται η κλίση τόσο αυξάνεται ο προεκθετικός όρος A, ενώ η σταθερά B μειώνεται. Η σταθερά A λαμβάνει τιμές περίπου από 48 έως 80 και η σταθερά B από 2595 έως 2925.

Αξιολογώντας τις σχέσεις για τις διαφορετικές κλίσεις και τροποποιώντας τις σταθερές A,B στην μορφή $A= a (\text{grad} + c)$ και $B= b (\text{grad} + d)$, τότε μπορεί να κατασκευαστεί μία συνολική σχέση που θα μελετά την μεταβολή του αριθμού των κόκκων συναρτήσει της αρχικής θερμοκρασίας, για διάφορες κλίσεις.

Επίσης, αν τεθεί $B = \Delta H/R$, η σχέση $\text{grains} = A \exp(B/T_0)$ θα μετατραπεί στην μορφή $\text{grains} = A \exp(\Delta H/RT_0)$, όπου ΔH η ενέργεια ενεργοποίησης (J/mol), η οποία υπολογίζεται από την σχέση $\Delta H = b(\text{grad} + d)$ και R η σταθερά των αερίων (8.314 J/mol K).

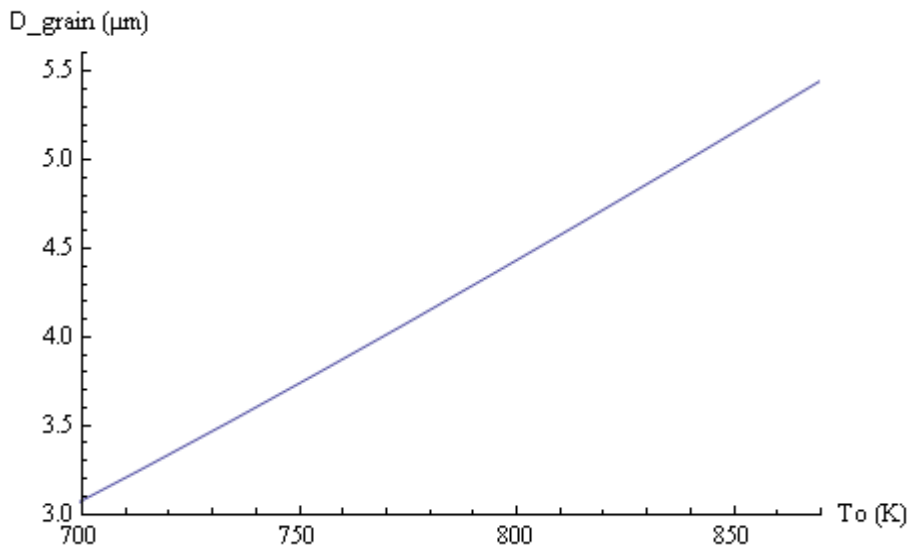
Για την τελευταία σχέση οι παράμετροι της σχέσης παίρνουν τις εξής τιμές:
 $a = 0.349$, $b = 0.1028$, $c = -128.73$, $d = 236477$.

Παρόμοια περιγράφεται και το μέγεθος των κόκκων (d_{GRAIN}) συναρτήσει της αρχικής θερμοκρασίας (T_0), για δεδομένη κλίση (grad), μέσω της συνάρτησης τύπου Arrhenius: $d_{\text{GRAIN}} = A \exp(-B/T_0)$, όπου A , B σταθερές και $T_0 > 0$ σε Kelvin.

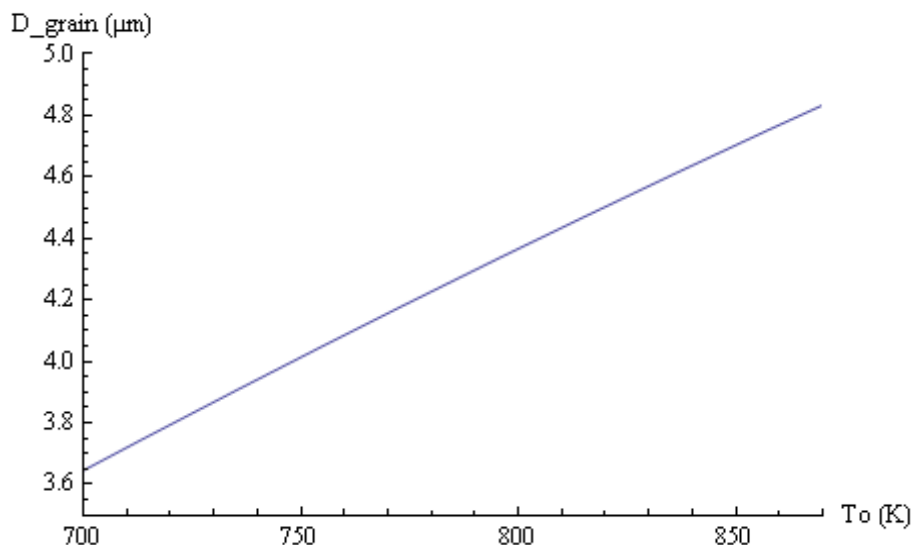
Παρακάτω δίνονται οι σχέσεις και τα διαγράμματα για κλίσεις τάξης μεγέθους του -10 και του -100 K/s.

Καθώς η αρχική θερμοκρασία μειώνεται, το μέγεθος των κόκκων μειώνεται.

- **Κλίση 0(-10) :** $d_{\text{GRAIN}}(T_0) = 57.44 \exp(-2049.05/T_0)$



- **Κλίση 0(-100) :** $d_{\text{GRAIN}}(T_0) = 15.47 \exp(-1011.98/T_0)$



Όσο αυξάνεται η κλίση τόσο ο προεκθετικός όρος A όσο και η σταθερά B μειώνονται. Η σταθερά A λαμβάνει τιμές από 15 έως 57 και η σταθερά B από 1000 έως 2050.

Μετατρέποντας τη σχέση $d_{\text{GRAIN}}=A \exp(-B/T_0)$ στην μορφή $d_{\text{GRAIN}}=A \exp(-\Delta H/RT_0)$, μπορεί να μελετηθεί η μεταβολή της μέσης διαμέτρου των κόκκων συναρτήσει της αρχικής θερμοκρασίας, για διάφορες κλίσεις,

όπου η σταθερά A (σε μm) και η ενέργεια ενεργοποίησης ΔH (σε J/mol) δίνονται από τις σχέσεις $A= a (\text{grad} + c)$ και $\Delta H= b (\text{grad} + d)$ και $R=8.314 \text{ J/mol K}$.

Στην συγκεκριμένη σχέση οι σταθερές a,b,c,d παίρνουν τις τιμές 0.4663, 95.802, 133.17, 187.82 αντίστοιχα.

4.1.3 Σχέση μεταξύ της παραμέτρου Zener–Hollomon, της διαμέτρου και τον αριθμό των κόκκων

Στην βιβλιογραφία σχετική με FSP για το AZ31 κράμα μαγνησίου [46,55], έχουν αναπτυχθεί εμπειρικές σχέσεις για τον υπολογισμό του μεγέθους του κόκκου μέσω της παραμέτρου Zener–Hollomon.

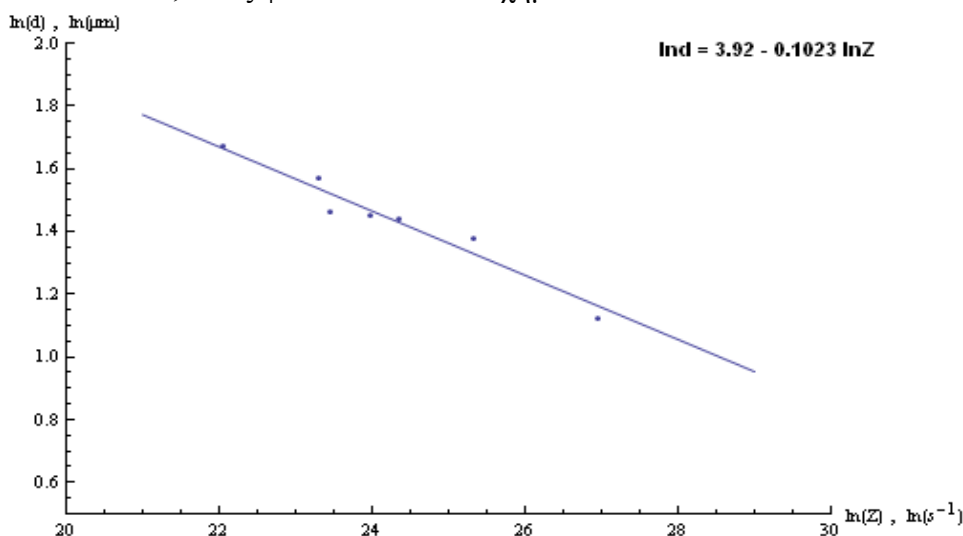
Μοντέλο Chang : $\ln(D_{\text{nugget}}) = 9.0 - 0.27 \ln Z$

όπου D_{nugget} το μέγεθος του κόκκου στην NZ και Z η παράμετρος Zener–Hollomon.

Η παράμετρος Zener–Hollomon μπορεί να περιγραφεί από τη σχέση (16) $Z = \dot{\epsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT}\right)$ όπως αναφέρεται στην ενότητα 2.2, όπου Q είναι η ενέργεια ενεργοποίησης (134 kJ/mol), R η σταθερά των αερίων, T η θερμοκρασία στη NZ και $\dot{\epsilon}$ ο ρυθμός παραμόρφωσης.

Για τις συνθήκες διεργασίας της συγκεκριμένης εργασίας η σχέση μεταξύ της παραμέτρου Zener–Hollomon και της μέσης διαμέτρου του κόκκου (d, μm) δίνεται από τη σχέση:

$\ln d = 3.92 - 0.1023 \ln Z$, όπως φαίνεται και στο σχήμα 11.

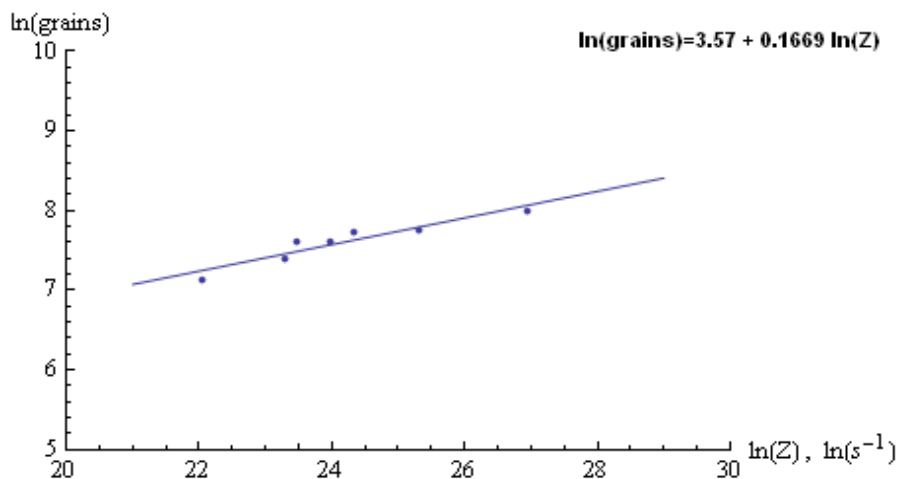


Σχήμα 11: Σχέση μεταξύ μεγέθους κόκκου και παραμέτρου Z

Παρατηρούμε ότι, καθώς αυξάνεται η παράμετρος Z , δηλαδή αυξάνεται ο ρυθμός παραμόρφωσης $\dot{\epsilon}$ ή μειώνεται η θερμοκρασία T , η διάμετρος του κόκκου μειώνεται το οποίο επαληθεύεται από την αναφορά [15].

Παρόμοια με το μέγεθος κόκκων, μπορεί να υπολογιστεί μία σχέση που να περιγράφει την αλλαγή του αριθμού των κόκκων ως προς την παράμετρο Zener–Hollomon.

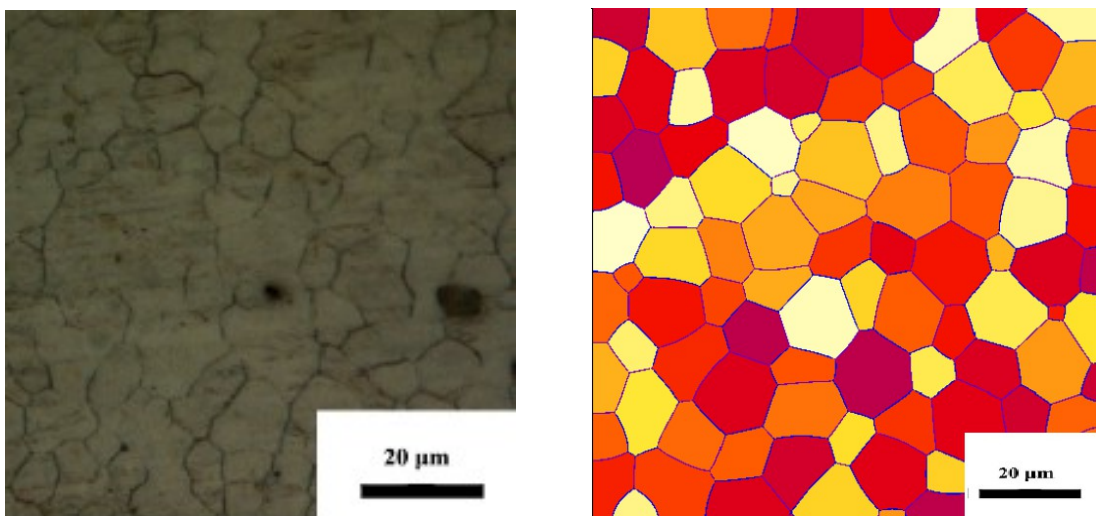
Η σχέση μεταξύ της παραμέτρου Zener–Hollomon και τον αριθμό των κόκκων δίνεται από τη σχέση: $\ln(\text{grains}) = 3.57 + 0.1669 \ln Z$, όπως φαίνεται και στο σχήμα 12.



Σχήμα 12: Σχέση μεταξύ αριθμού κόκκων και παραμέτρου Z

4.2 Αποτελέσματα από πραγματικό θερμικό κύκλο

Όπως αναφέρεται και στην ενότητα 3.1 η μικροδομή του βασικού μετάλλου του πειραματικού δοκιμίου σε μία περιοχή διαστάσεων $100\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$, εικ. 9α, περιέχει περίπου 100 κόκκους με διάμετρο $14.5 \mu\text{m}$. Στην εικόνα 9 παρατίθενται η μικροδομή του βασικού μετάλλου τόσο από την πειραματική διαδικασία όσο και από την προσομοίωση.



(α)

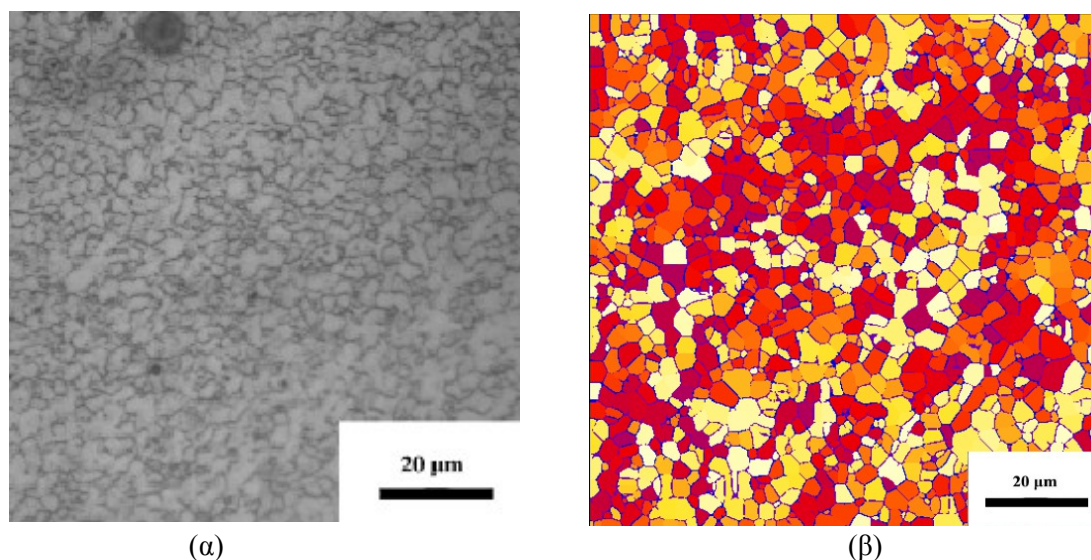
(β)

Εικόνα 9 Μικροδομή βασικού μετάλλου (α) από πείραμα και (β) από προσομοίωση

Η μικροδομή του βασικού μετάλλου που προκύπτει από την προσομοίωση φαίνεται στην εικόνα 9β, στην οποία οι κόκκοι με διαφορετικό προσανατολισμό αναπαριστώνται με διαφορετικό χρώμα, ενώ οι σκούρες γραμμές δείχνουν τα σύνορα των κόκκων. Η μέση διάμετρος κόκκου ισούται περίπου με 14.5 μm και περιέχει 102 κόκκους στην περιοχή διαστάσεων 100 μm x 100 μm .

Έπειτα σε αυτή την περιοχή καθορίζεται ένας αριθμός πυρήνων που κατανέμεται τυχαία στα σύνορα και το εσωτερικό των μητρικών κόκκων, που στη συνέχεια αναπτύσσονται.

Αντίστοιχα, η τελική μικροδομή που προκύπτει στην NZ παρουσιάζεται στην εικόνα 10.



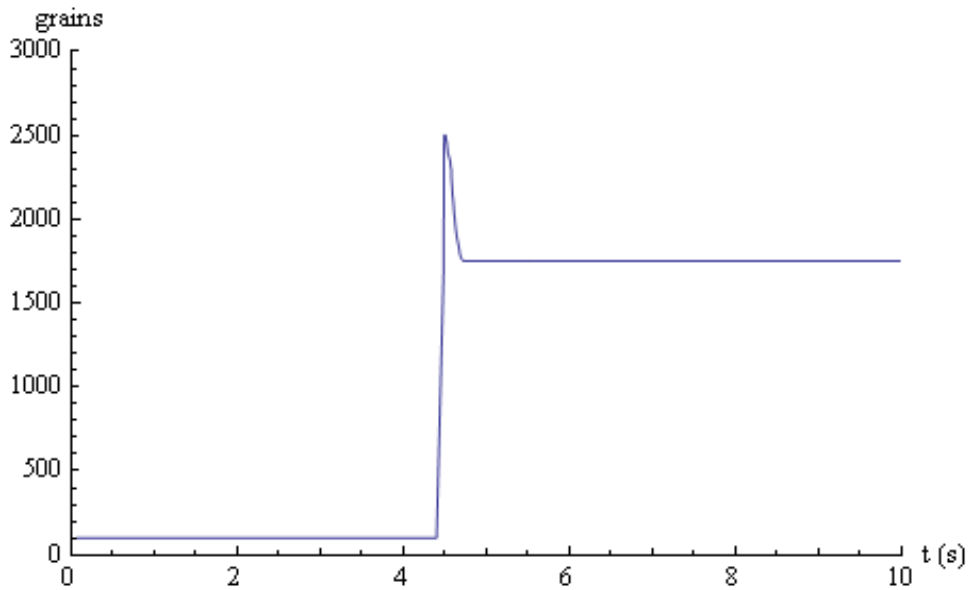
Εικόνα 10 Μικροδομή NZ (α) από πείραμα και (β) από προσομοίωση

Σε μία περιοχή διαστάσεων 100 μm x 100 μm , η μικροδομή στη NZ του πειραματικού δοκιμίου περιέχει περίπου 1785 κόκκους με διάμετρο 4.5 μm , εικ. 10α, ενώ η μικροδομή από την προσομοίωση περιέχει 1774 κόκκους με μέση διάμετρο 4.6 μm , εικ. 10β.

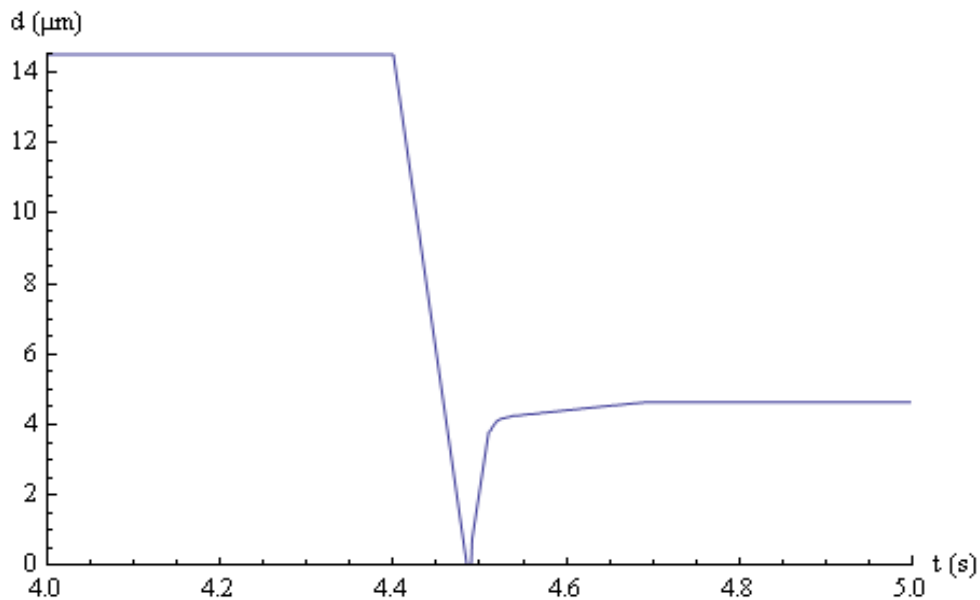
4.2.1 Διαγράμματα μεταβολών φυσικών μεγεθών

Παρακάτω παρατίθενται τα δεδομένα που προκύπτουν από το λογισμικό MICRESS, για τις συνθήκες συγκόλλησης και τον θερμικό κύκλο της παρούσας εργασίας, στην μορφή διαγραμμάτων ως προς το χρόνο και το ποσοστό ανακρυστάλλωσης, για την καλύτερη κατανόηση των μηχανισμών και των φαινομένων που εξελίσσονται στην NZ κατά τη διάρκεια της FSW.

Όπως γνωρίζουμε, κατά την πυρήνωση δημιουργούνται νέοι κόκκων, έτσι αυξάνεται ο αριθμός των κόκκων έως μια μέγιστη τιμή (στην περίπτωση που εξετάζουμε ισούται με 2500 κόκκους). Έπειτα, καθώς αναπτύσσονται οι νέοι κόκκοι, λόγω της κινητικότητας στα σύνορα των κόκκων, μειώνεται ο αριθμός τους και αυξάνεται η διάμετρός τους έως ότου να ολοκληρωθεί ο μηχανισμός και σταθεροποιηθούν στις τελικές τους τιμές (1774 κόκκοι με διάμετρο 4.6 μm), όπως παρουσιάζεται στα διαγράμματα 1 και 2. Το μέγεθος των νέων πυρήνων θεωρείται μηδενικό, όπως φαίνεται στο διάγραμμα 2.



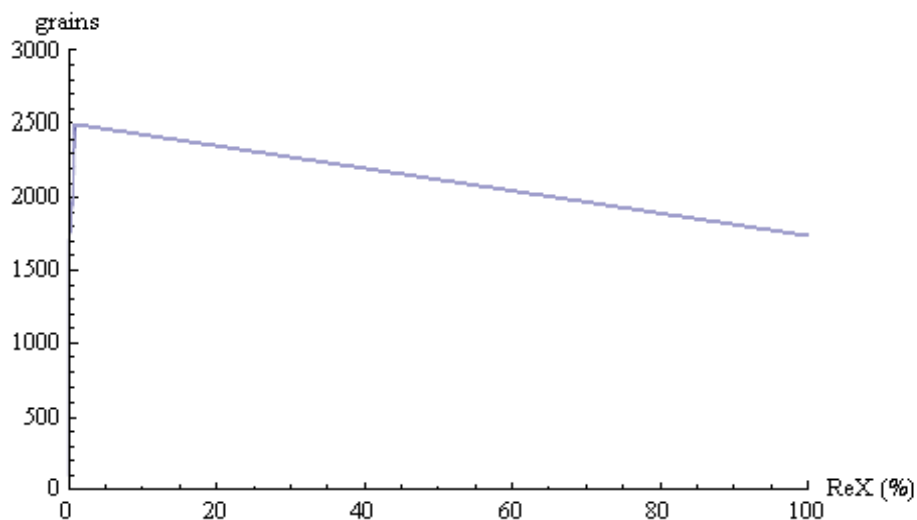
Διάγραμμα 1 Μεταβολή αριθμού κόκκων συναρτήσει του χρόνου



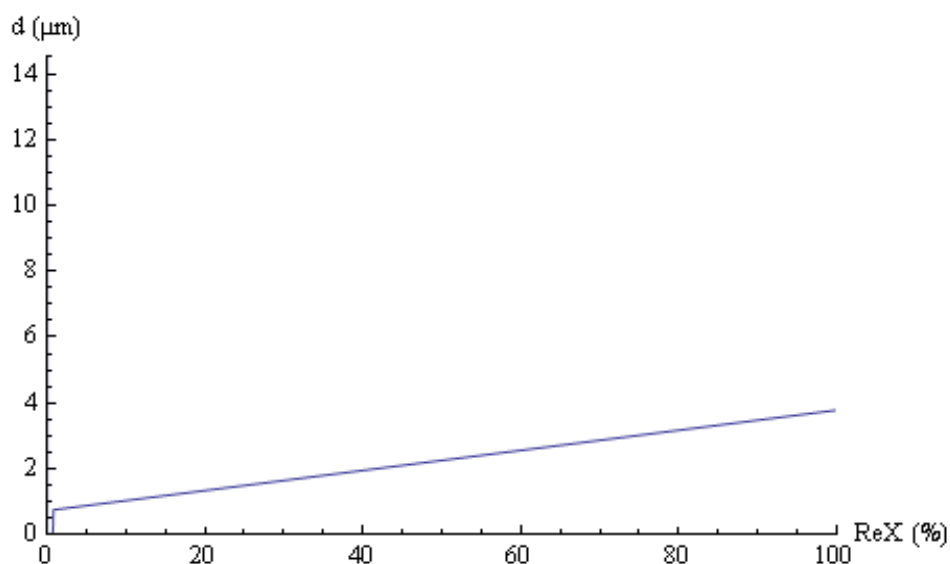
Διάγραμμα 2 Μεταβολή μέσης διαμέτρου συναρτήσει του χρόνου

Αν αναπαραστήσουμε γραφικά τον αριθμό των κόκκων ως προς το ποσοστό της ανακρυστάλλωσης, θα παρατηρήσουμε, παρόμοια με την μεταβολή του με το χρόνο, ότι ξεκινά από την αρχική μικροδομή (102 κόκκοι) και αποκτά μία μέγιστη τιμή λόγω της πυρήνωσης και έπειτα μειώνεται, εξαιτίας της ανάπτυξης των νέων κόκκων, σχεδόν γραμμικά με το ποσοστό της ανακρυστάλλωσης, μέχρι να φτάσει την τελική τιμή (1774 κόκκοι) στο 100% της RX, διάγραμμα 3.

Αντίστοιχα, η διάμετρος των κόκκων αποκτά σχεδόν μηδενική τιμή (διάμετρος πυρήνων) και στην συνέχεια αυξάνεται έως ότου αποκτήσει την τελική τιμή (4.6 μm) στο 100% της RX, διάγραμμα 4.

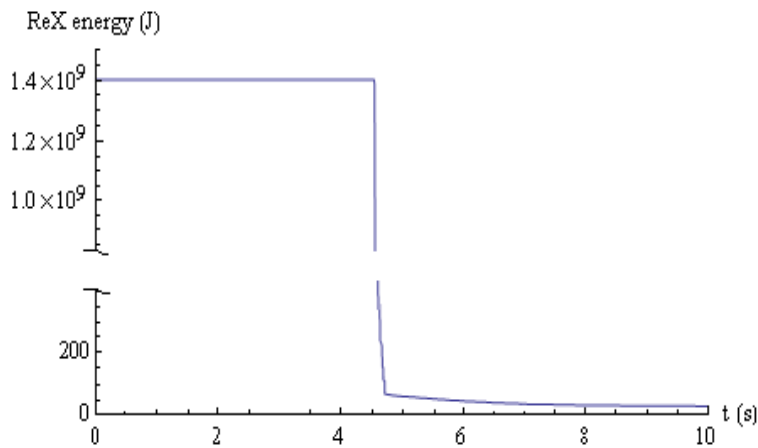


Διάγραμμα 3 Μεταβολή αριθμού κόκκων συναρτήσει του ποσοστού ανακρυστάλλωσης

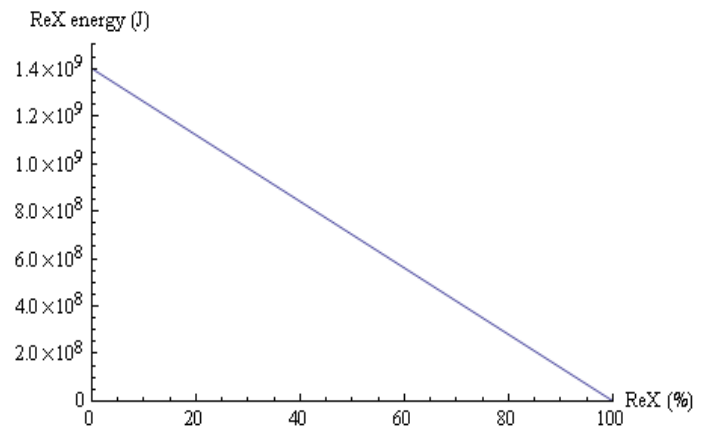


Διάγραμμα 4 Μεταβολή μέσης διαμέτρου συναρτήσει του ποσοστού ανακρυστάλλωσης

Επίσης, η ενέργεια ανακρυστάλλωσης ξεκινά από την μέγιστή της τιμή και μειώνεται τόσο με τον χρόνο καθώς δημιουργούνται οι νέοι κόκκοι και ενώ μειώνεται η θερμοκρασία, διάγραμμα 5α, όσο και καθώς αυξάνεται το ποσοστό της ανακρυστάλλωσης, διάγραμμα 5β. Έτσι, οι νέοι κόκκοι έχουν σχεδόν μηδενική ενέργεια RX, όπως έχει οριστεί στο συγκεκριμένο μοντέλο προσομοίωσης.



(α)



(β)

Διάγραμμα 5 Μεταβολή της ενέργειας ανακρυστάλλωσης συναρτήσει (α) του χρόνου και (β) του ποσοστού ανακρυστάλλωσης

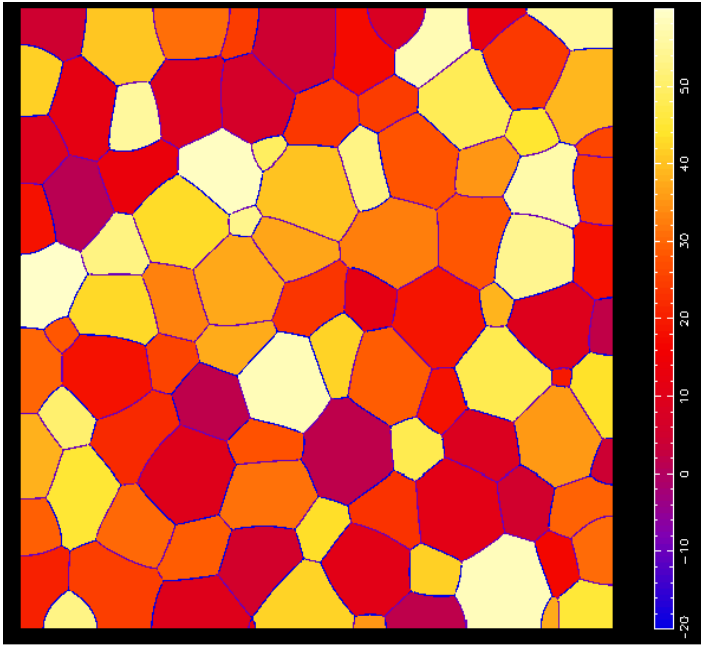
4.2.2 Εξέλιξη της μικροδομής κατά τη διάρκεια της FSW

Η πυρήνωση και τα στάδια ανάπτυξης των κόκκων, όπως προσομοιώνονται στο παρόν μοντέλο, μελετώντας την εξέλιξη της μικροδομής στην NZ κατά την διάρκεια της μεθόδου FSW, παρουσιάζονται στις εικόνες 11,12. Οι εικόνες 11,12 α-κ αντιστοιχούν σε διαφορετικά στάδια (διαφορετικό ποσοστό ανακρυστάλλωσης) κατά την ανάπτυξη των νέων κόκκων.

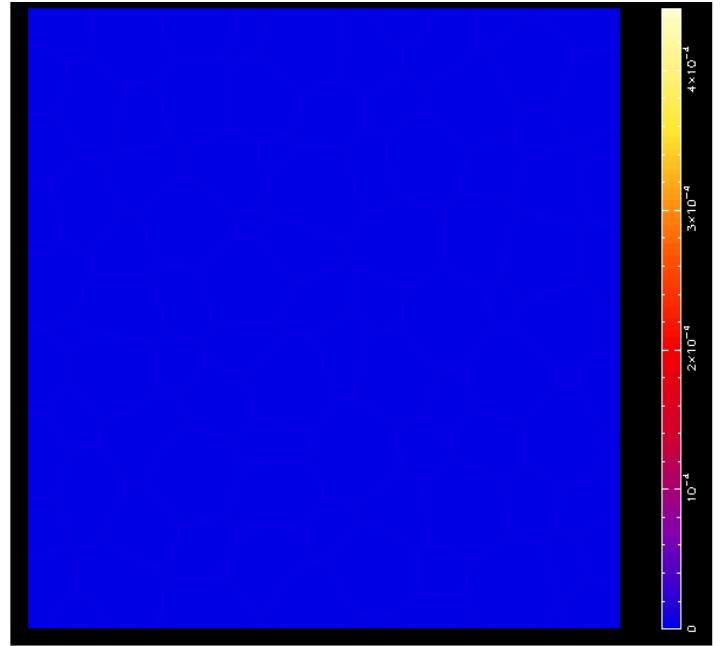
Οι εικόνες α,β,γ,δ,ε,στ,ζ,η,θ,ι,κ αντιστοιχούν περίπου στο 0, 0.7, 2.3, 6.8, 17, 39, 73, 91, 99, 99.5, 100 της εκατό του ποσοστού της ανακρυστάλλωσης, αντίστοιχα.

Στην εικόνα 11 το I δείχνει την μικροδομή, το II την μεταβολή της κινητικότητας. Τα διαφορετικά χρώματα αναφέρονται σε διαφορετικές τιμές των φυσικών μεγεθών, συγκεκριμένα στον προσανατολισμό των κόκκων και την τιμή της κινητικότητας.

(α)

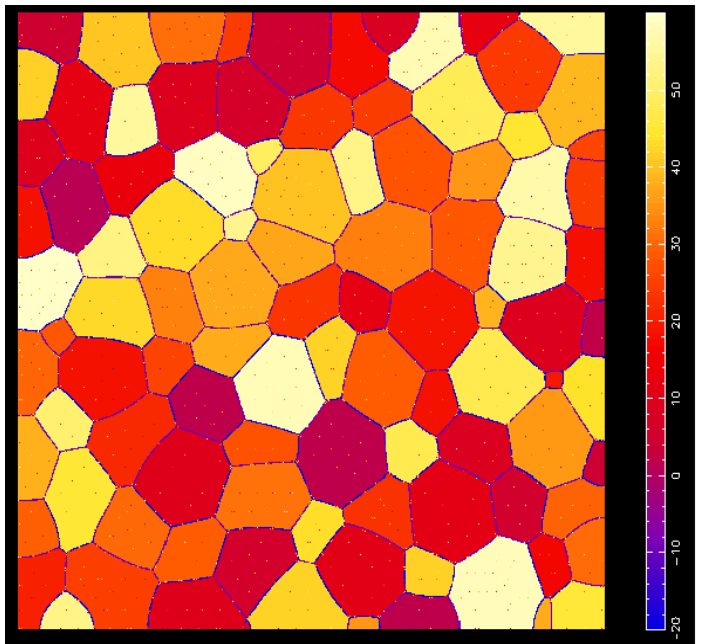


(I)

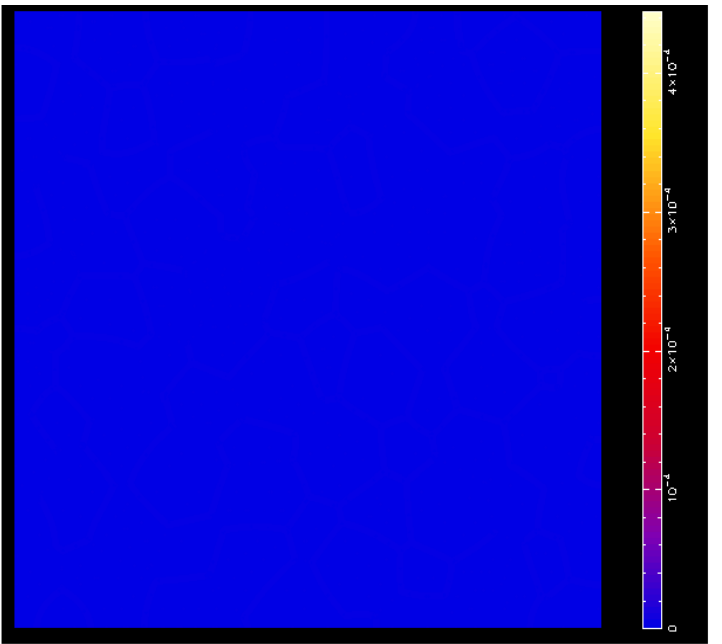


(II)

(β)

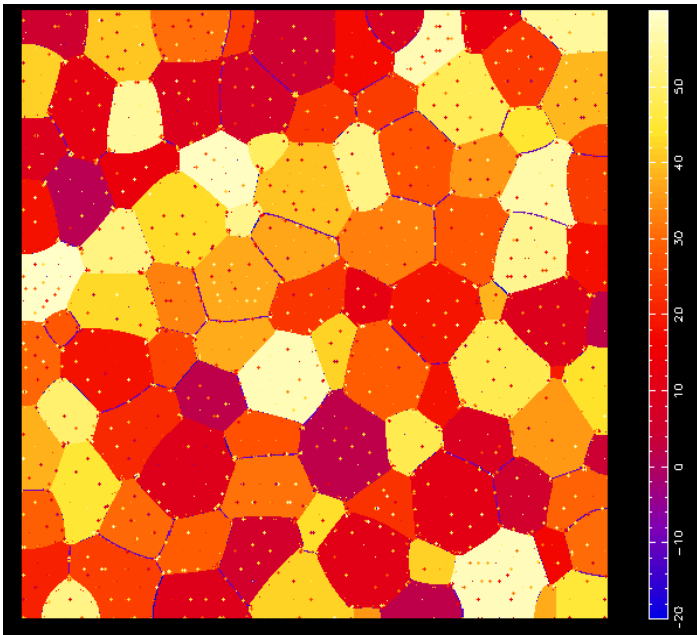


(I)

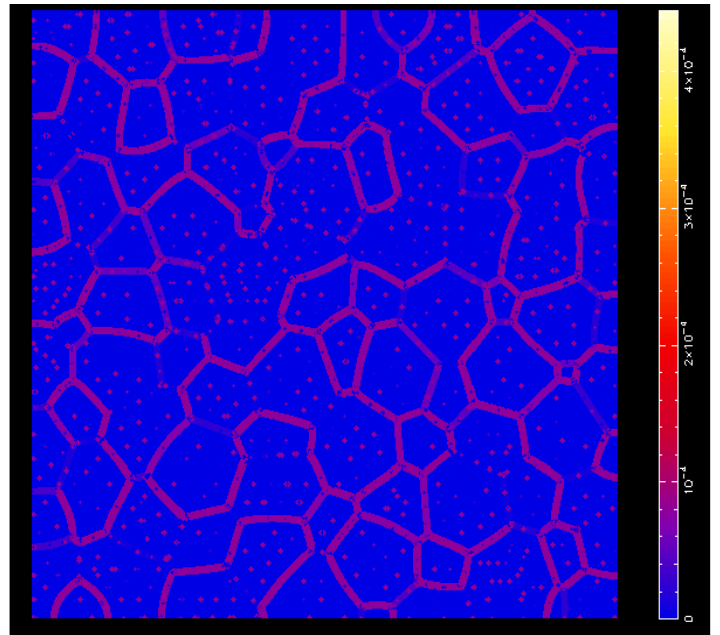


(II)

(γ)

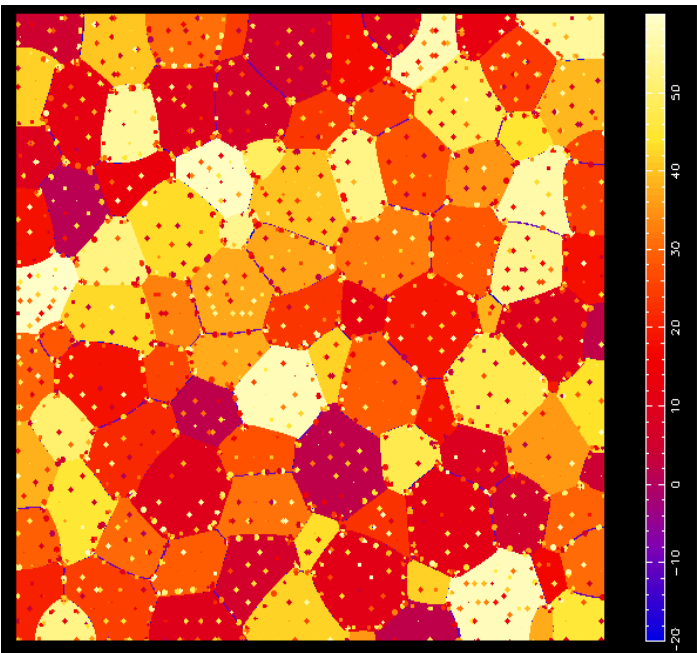


(I)

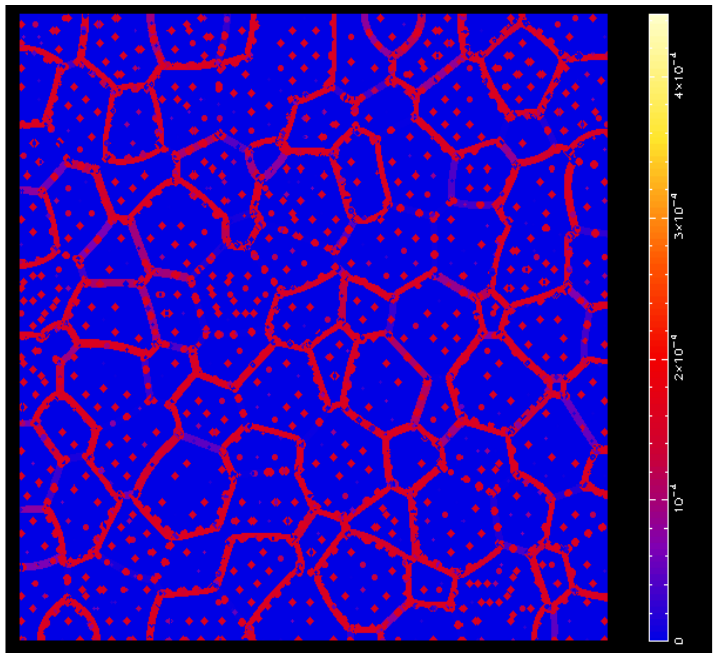


(II)

(δ)

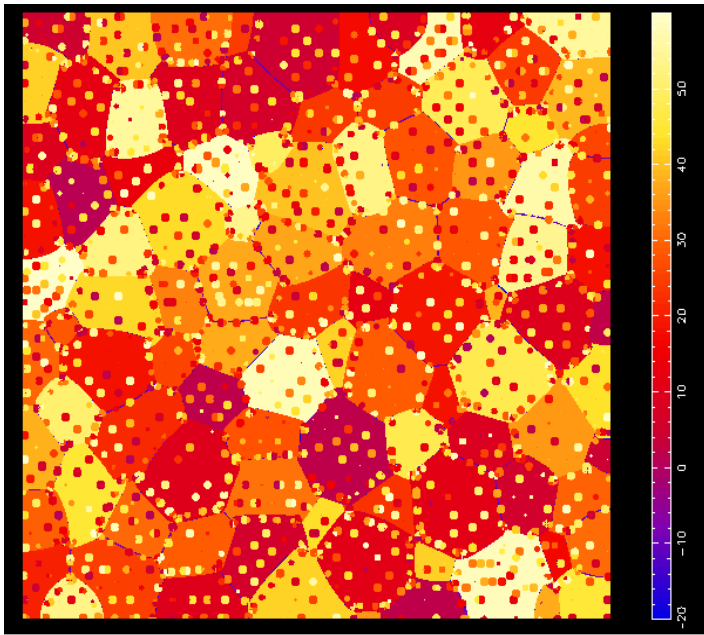


(I)

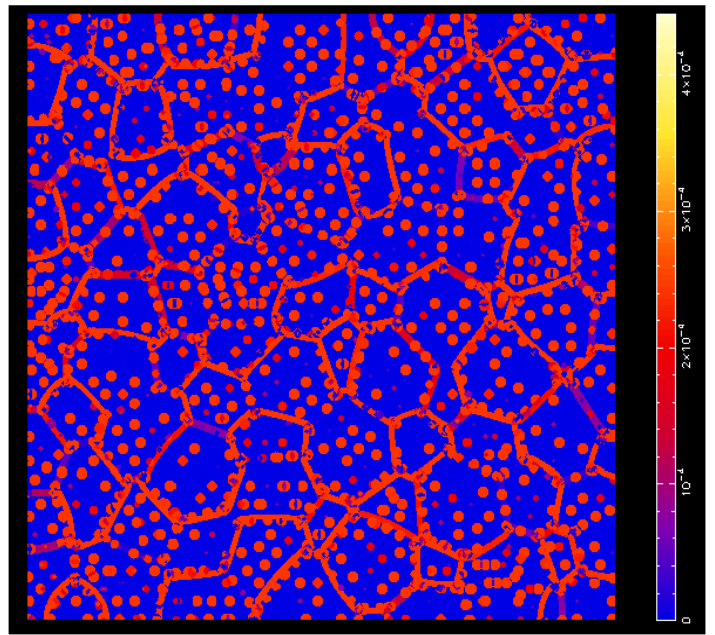


(II)

(ε)

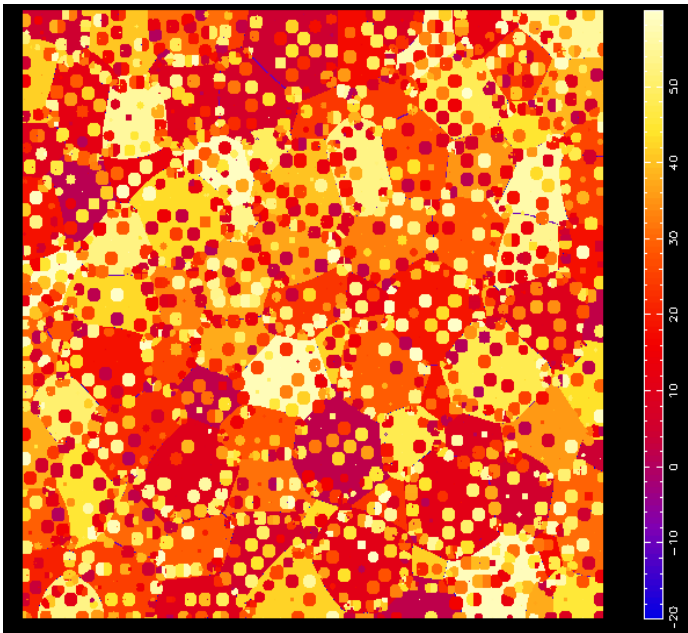


(I)

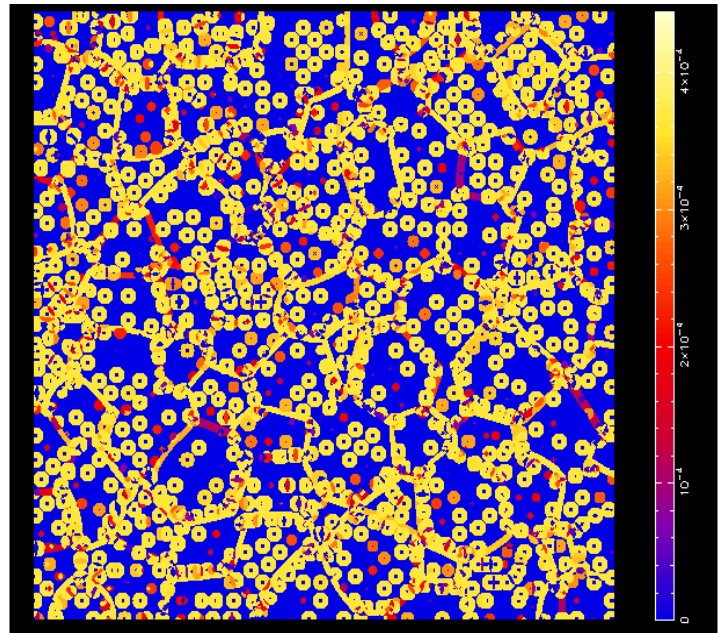


(II)

(σ)

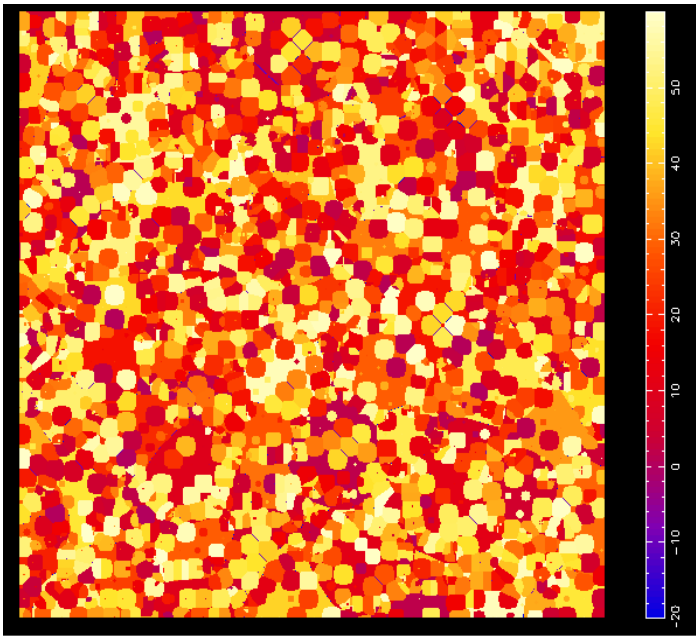


(I)

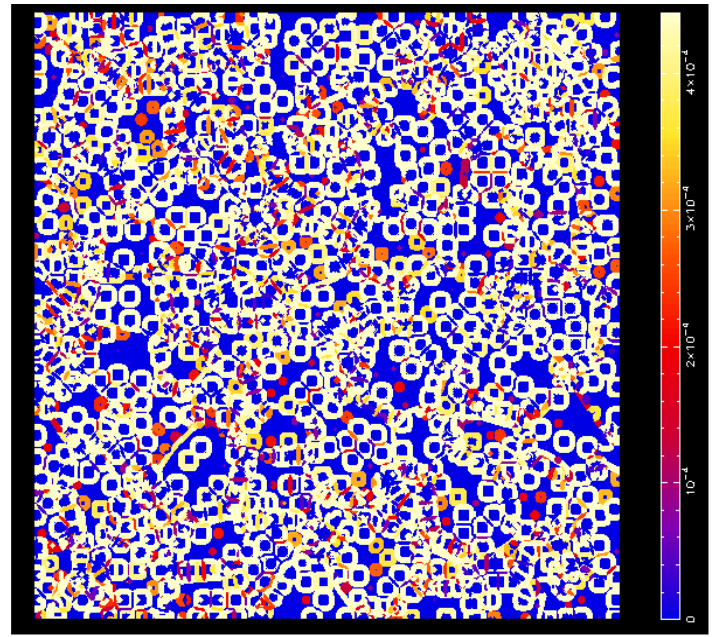


(II)

(ζ)

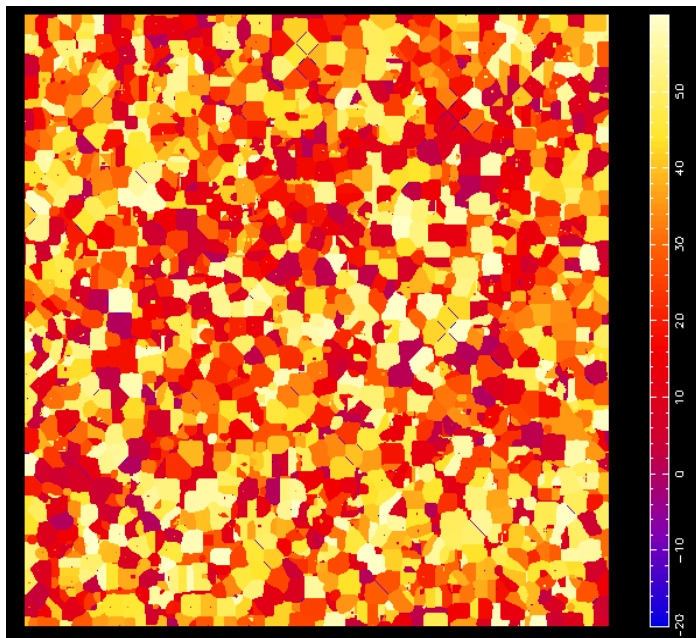


(I)

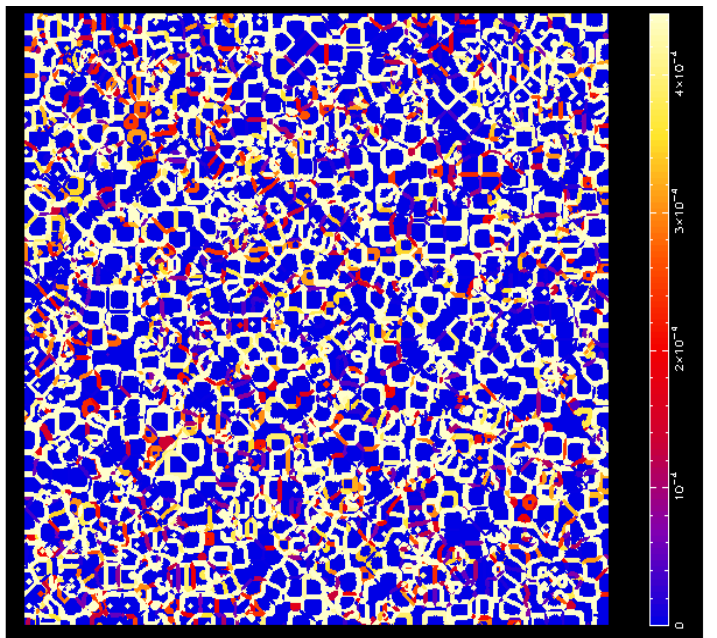


(II)

(η)

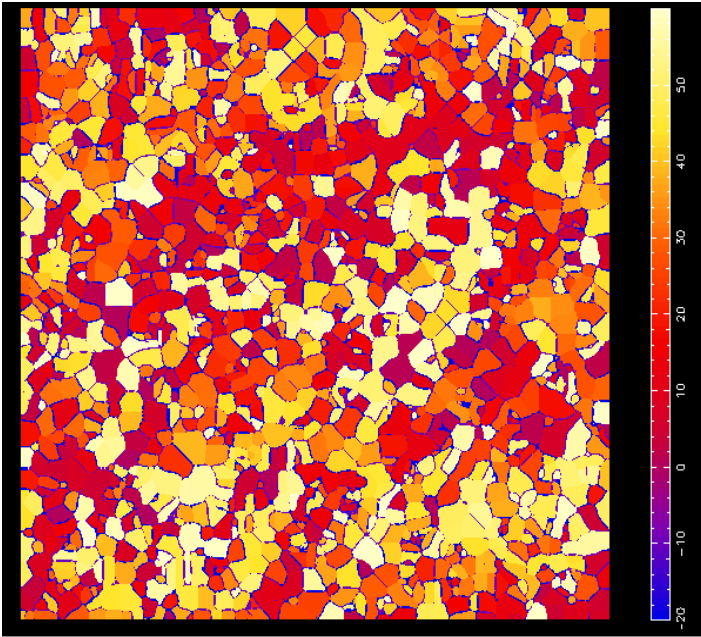


(I)

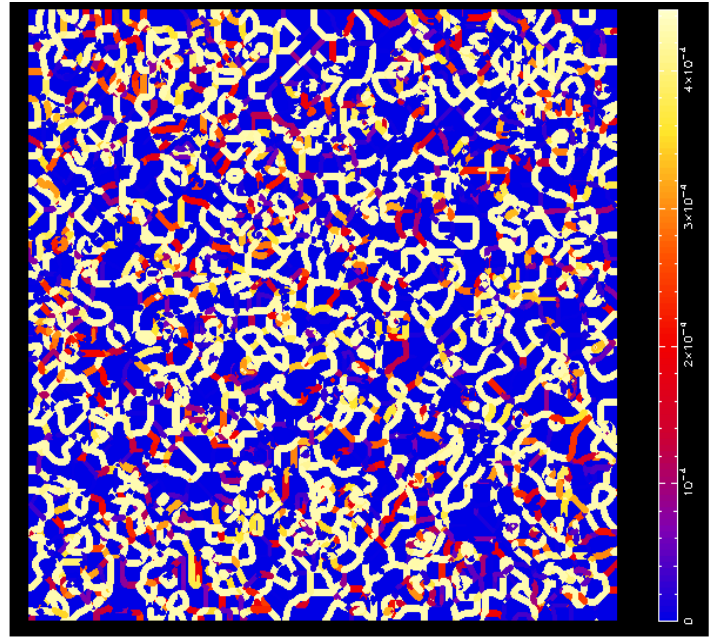


(II)

(θ)

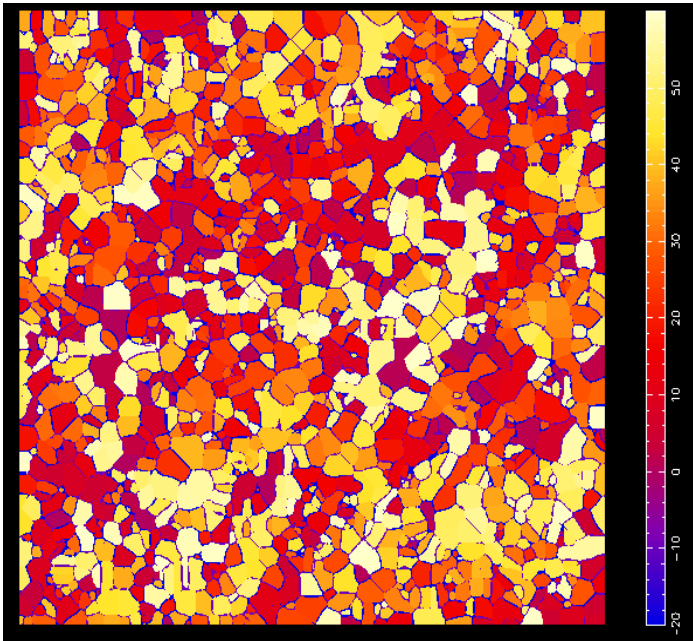


(I)

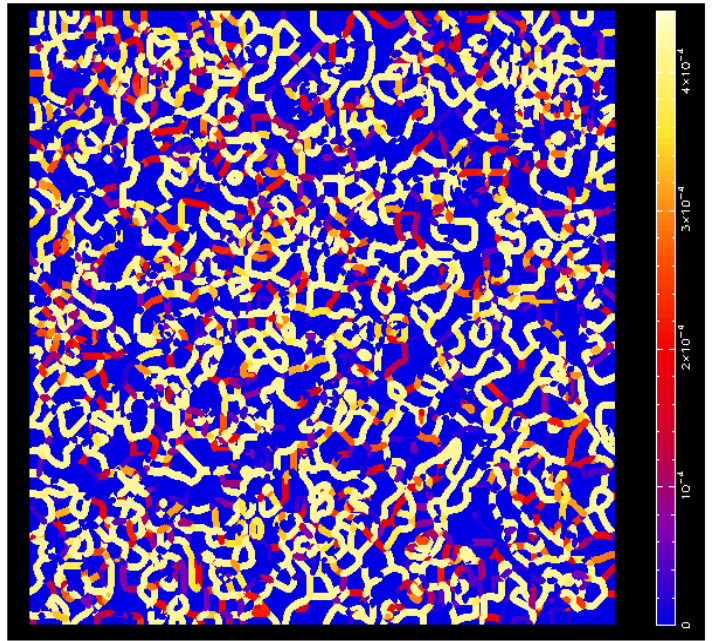


(II)

(t)

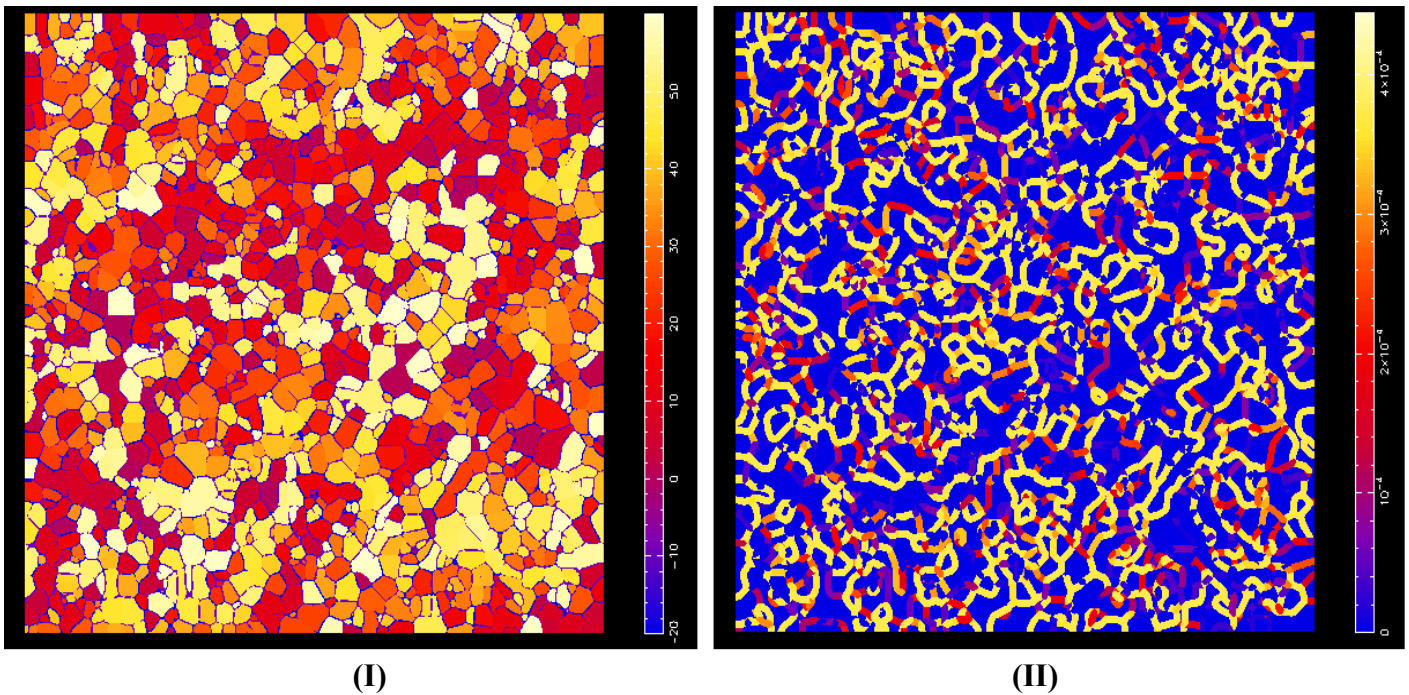


(I)



(II)

(κ)



Εικόνα 11 α-κ Πυρήνωση και στάδια ανάπτυξης των κόκκων, όπως προσομοιώνονται από το παρόν μοντέλο, για την πρόβλεψη και αναπαράσταση της εξέλιξης της μικροδομής στην NZ. (I) μικροδομή και προσανατολισμός κόκκων της NZ κατά τη διάρκεια της DRX, (II) μεταβολή της κινητικότητας των συνόρων.

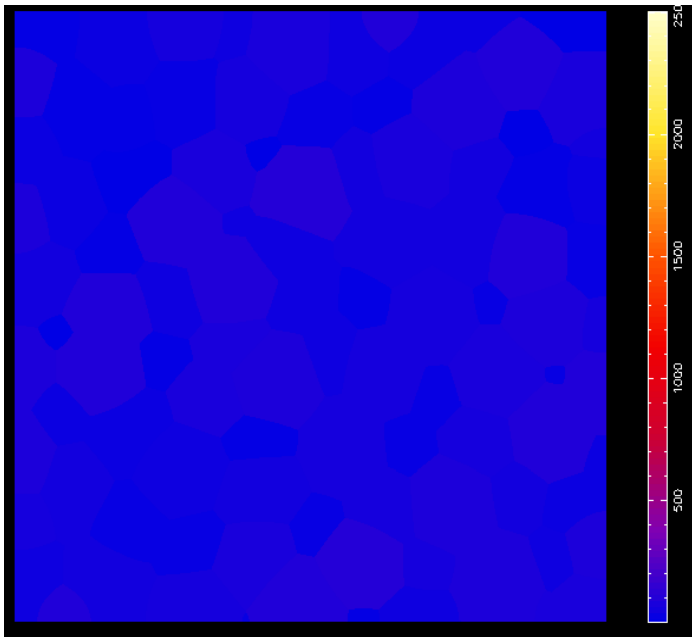
Οι εικόνες 11β και γ δείχνουν ότι η πυρήνωση συμβαίνει στους τριπλούς δεσμούς, διεπιφάνειες και εσωτερικό του κόκκου του μητρικού υλικού, όπως έχει αναφερθεί και στην παράγραφο 3.2.2 κατά την κατασκευή του κώδικα προσομοίωσης, και έπειτα αρχίζουν να αναπτύσσονται (εικ. 11δ-στ (I)). Εφόσον έχει πραγματοποιηθεί πυρήνωση νέων κόκκων, στις προαναφερθείσες περιοχές, τότε εξαιτίας του κατάλληλου θερμοκρασιακού πεδίου και κατά συνέπεια της ενέργειας ανακρυστάλλωσης, οι κόκκοι αρχίζουν να μεγαλώνουν καθώς αυξάνεται παράλληλα και η κινητικότητα των συνόρων (εικ. 11β-ζ (II)).

Η κινητικότητα του συνόρου του κόκκου αρχικά είναι μηδενική (εικ. 11α (I)). Καθώς όμως, η πλαστική παραμόρφωση εξελίσσεται και η θερμοκρασία μεταβάλλεται, η κινητικότητα στα σύνορα των κόκκων αυξάνεται (εικ. 11β-ζ (II)) μέχρι να φτάσει μία μέγιστη τιμή (εικ. 11η (II)). Στην συνέχεια καθώς σχηματίζονται τα σύνορα των ανακρυσταλλωμένων κόκκων και η θερμοκρασία μειώνεται, μειώνεται επίσης και η κινητικότητα, διότι όπως έχει αναφερθεί και στην ενότητα 2.3 η κινητικότητα μειώνεται εκθετικά με τη θερμοκρασία μέσω του τύπου Arrhenius, (εικ. 11θ-κ (II)) και δεν επιδρά πλέον στην μεταβολή του μεγέθους και σχήματος του κόκκου.

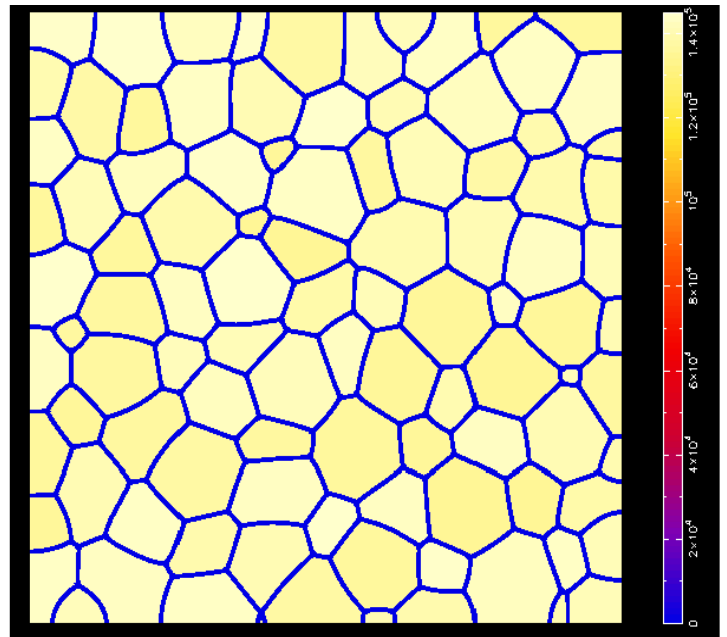
Επειδή στο κέντρο της ζώνης ανάδευσης υπάρχει υψηλός ρυθμός παραμόρφωσης και επικρατούν υψηλές θερμοκρασίες, η τελική μικροδομή είναι ομοιομορφή αποτελούμενη από ισοαξονικούς κόκκους (εικ. 11κ (I)).

Στην εικόνα 12 το I δείχνει τον αριθμό των κόκκων, το II την ενέργεια ανακρυστάλλωσης. Τα διαφορετικά χρώματα αναφέρονται σε διαφορετικές τιμές των φυσικών μεγεθών.

(α)

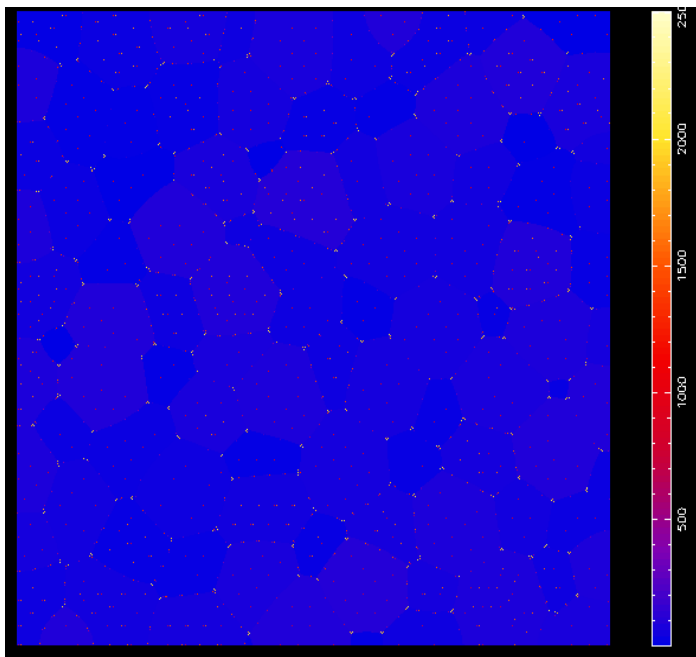


(I)

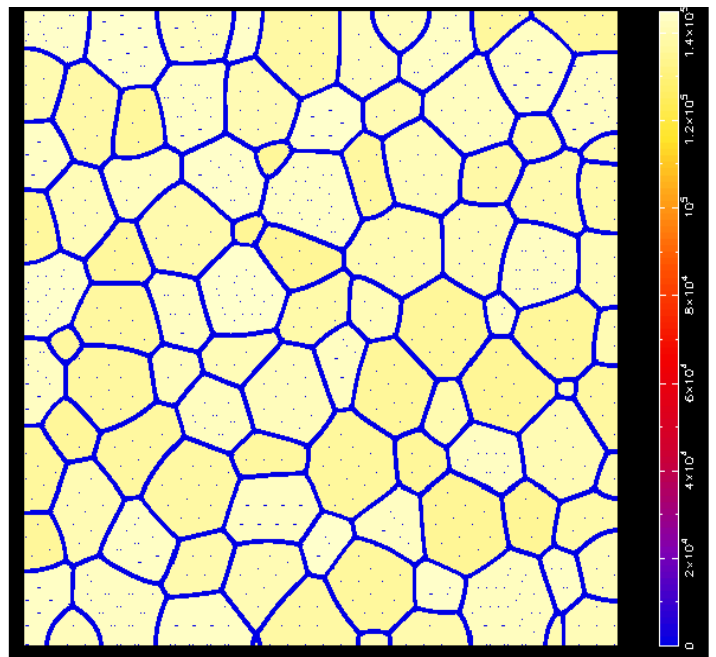


(II)

(β)

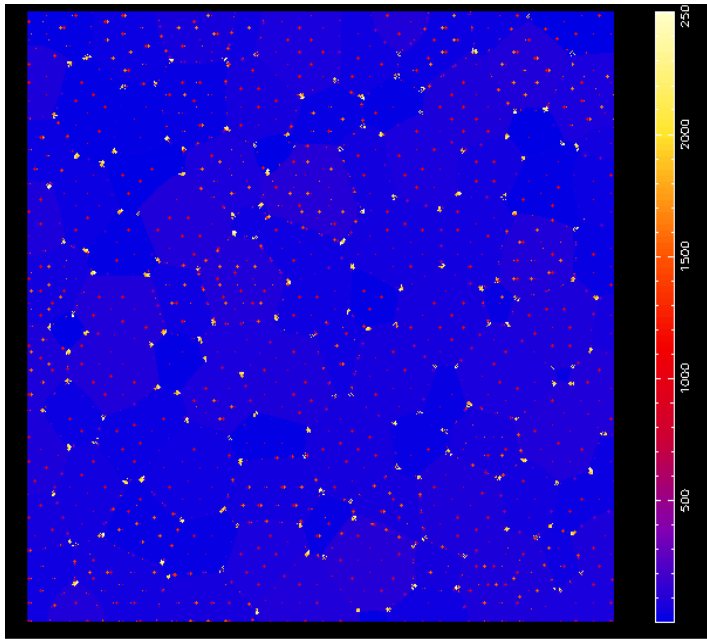


(I)

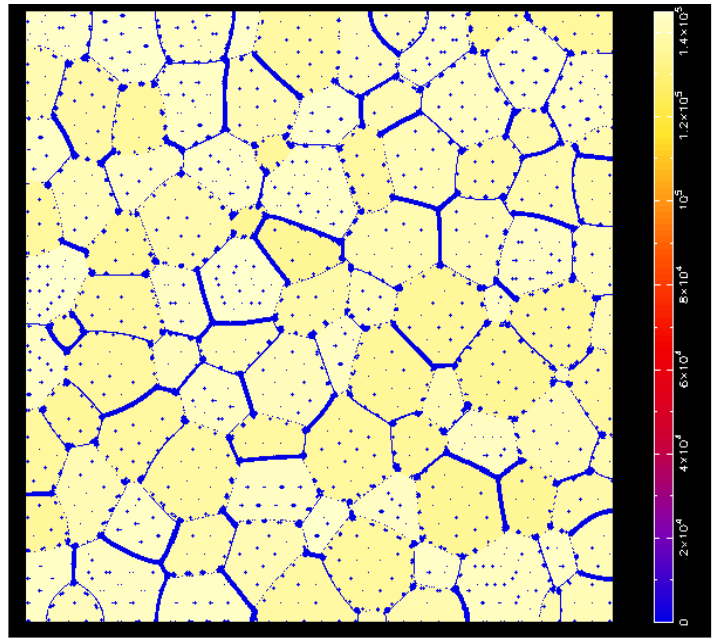


(II)

(γ)

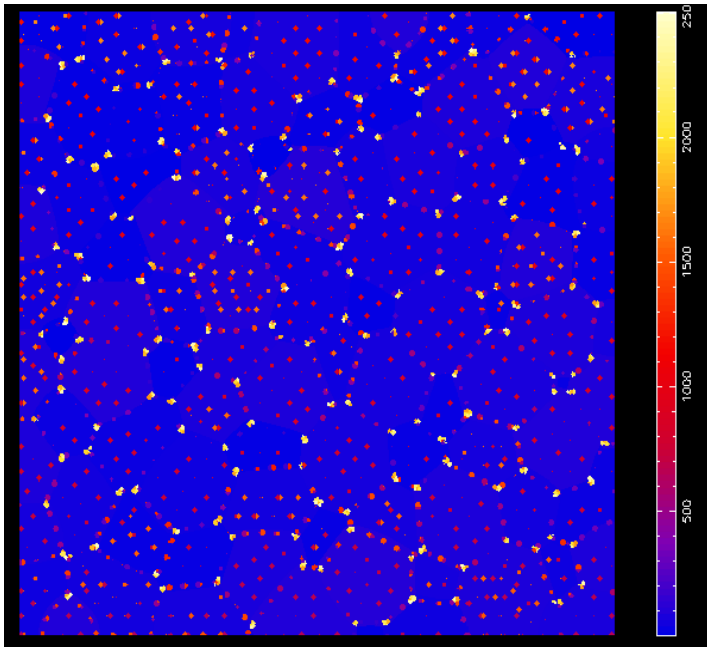


(I)

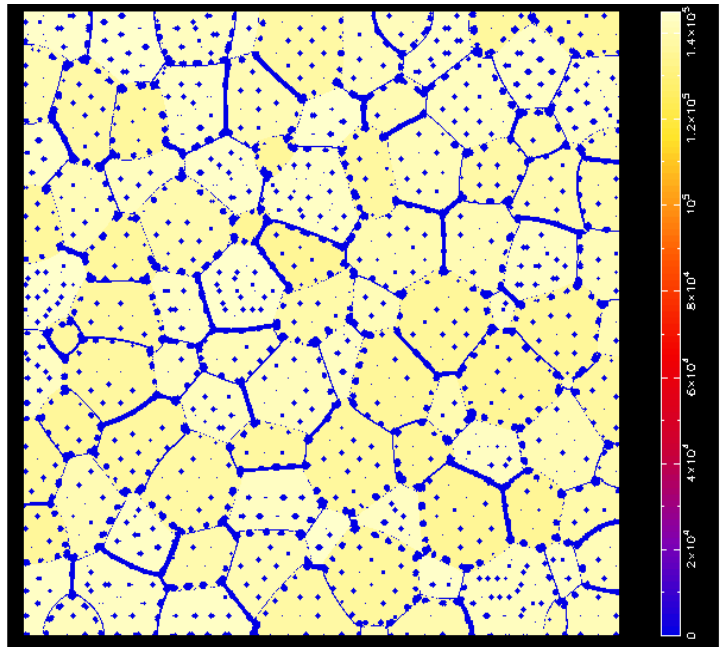


(II)

(δ)

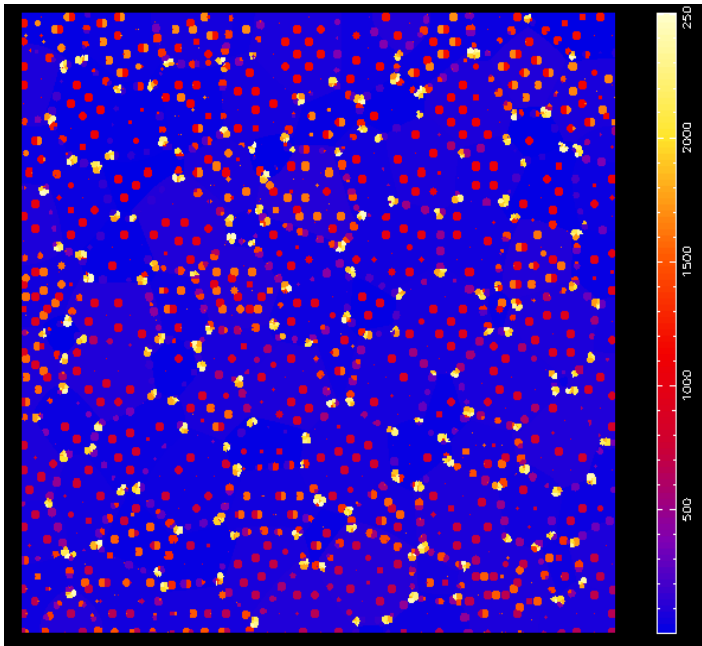


(I)

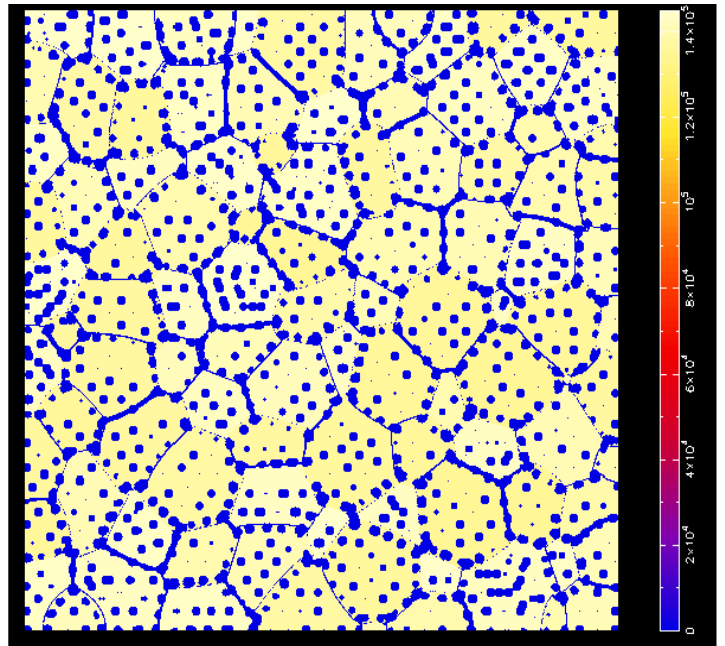


(II)

(ε)

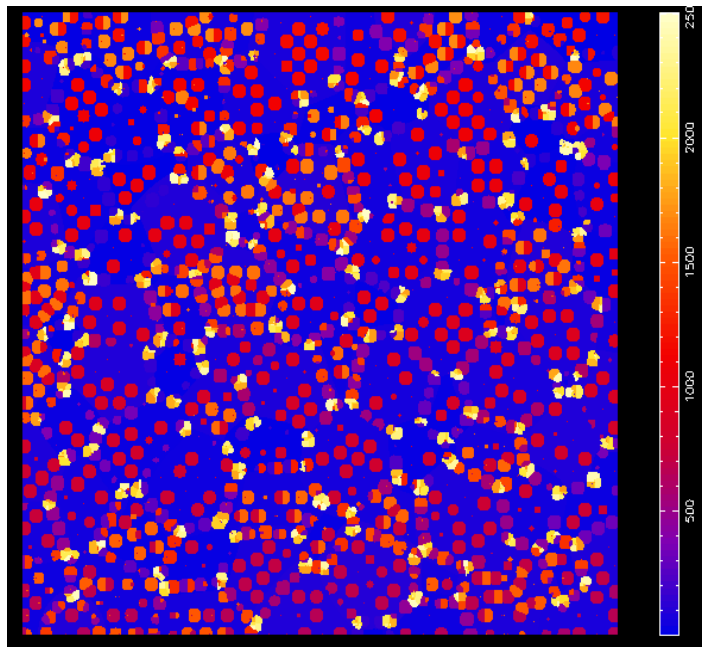


(I)

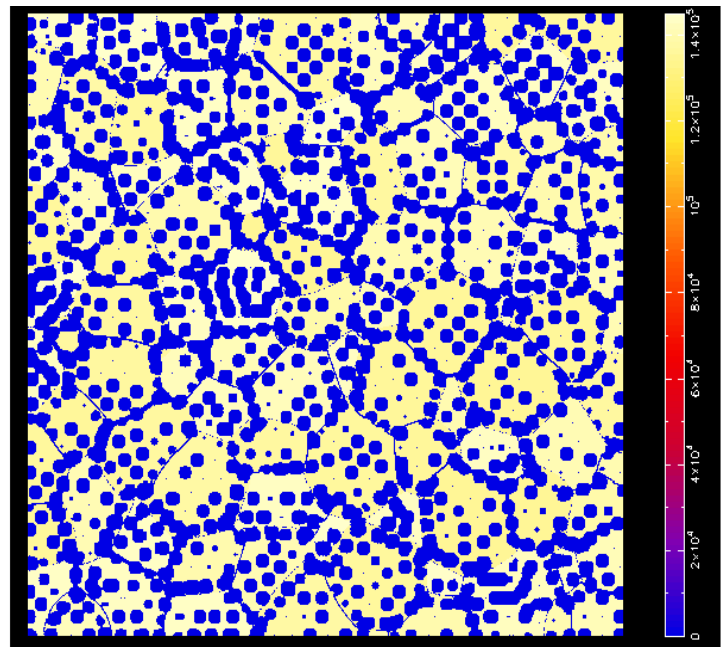


(II)

(σ)

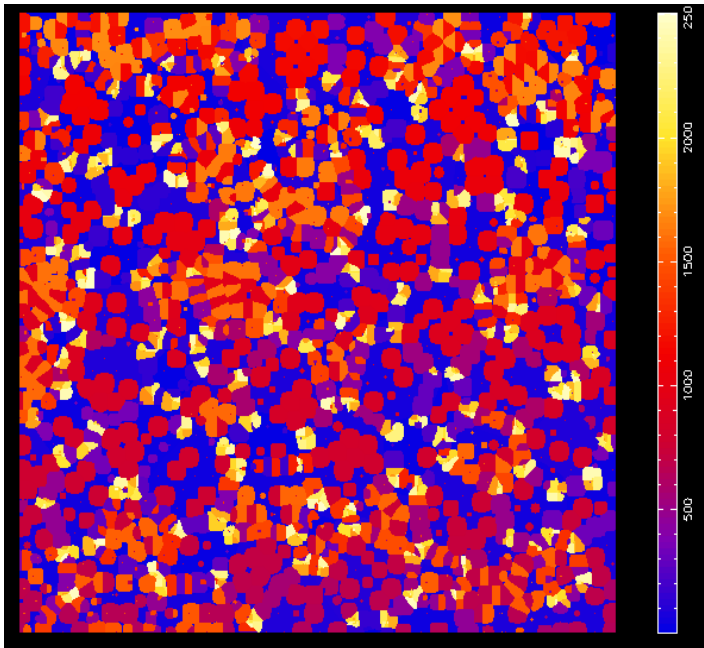


(I)

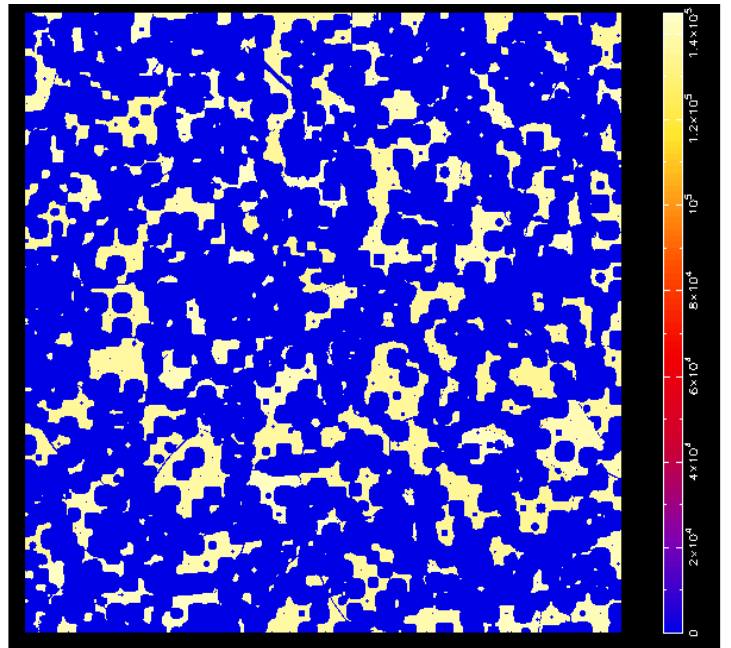


(II)

(ζ)

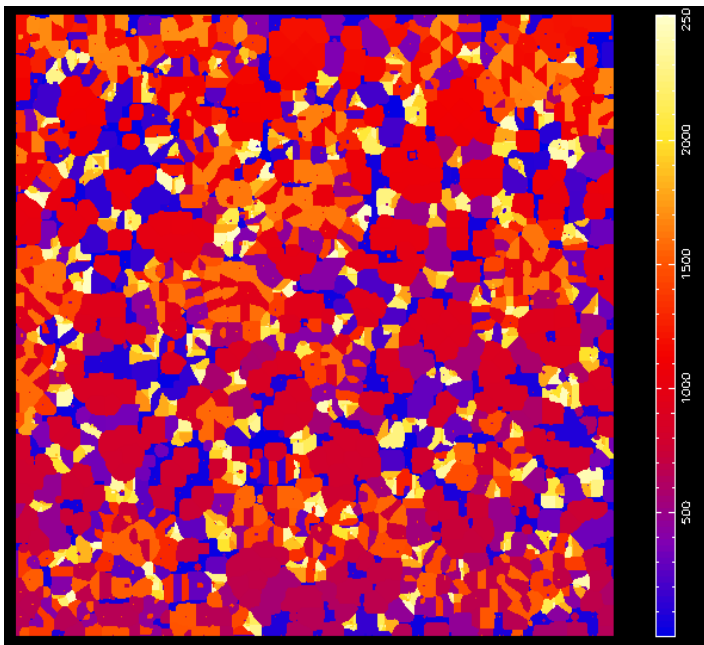


(I)

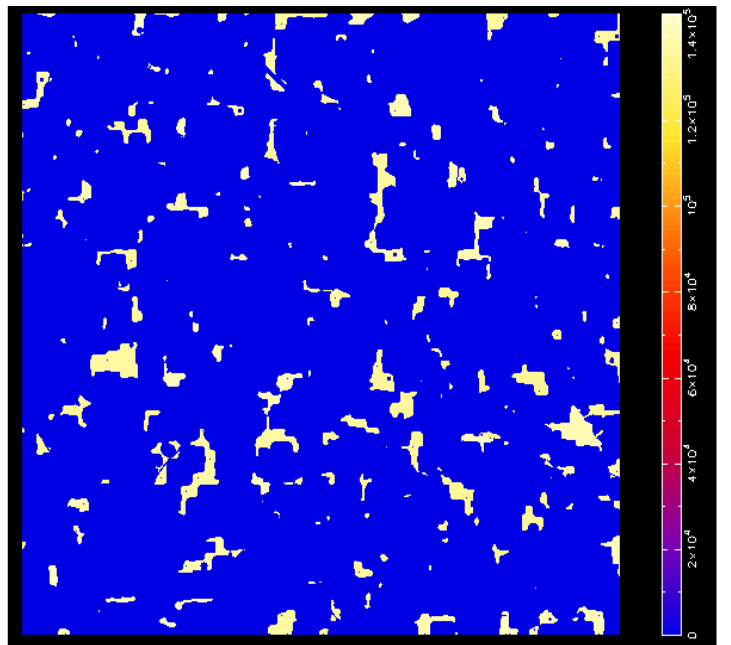


(II)

(η)

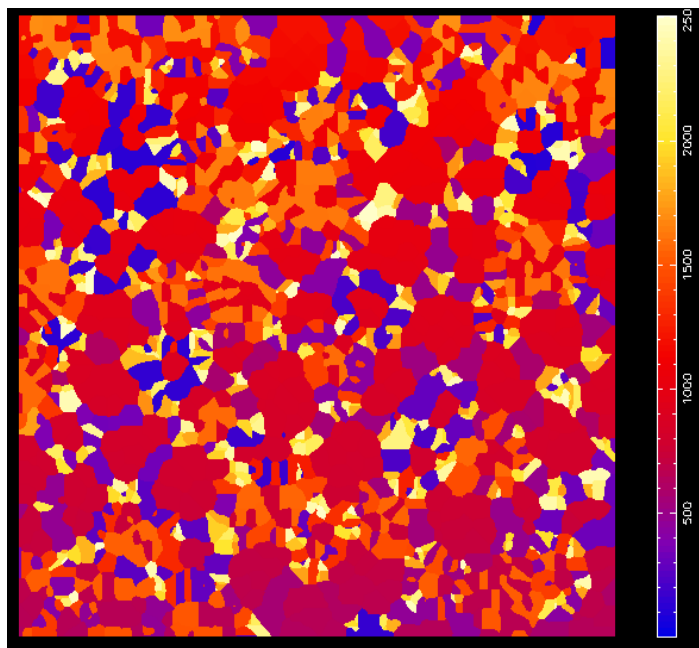


(I)

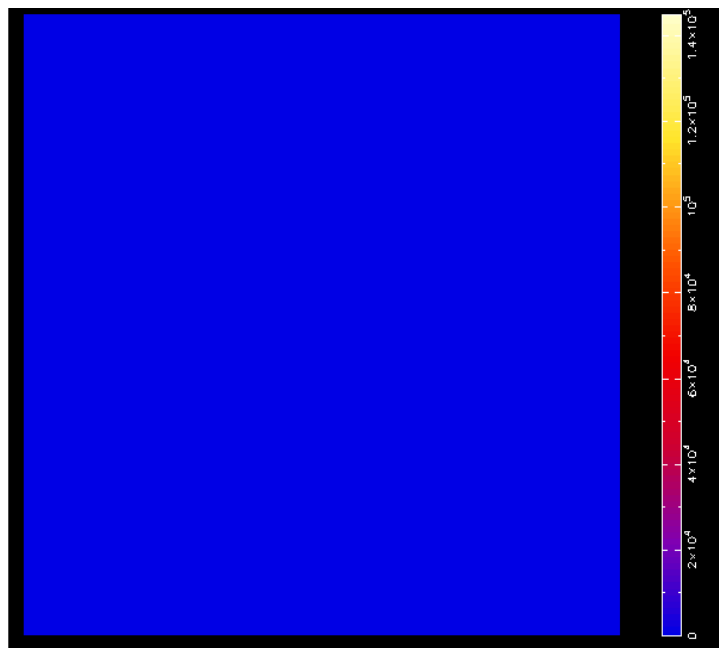


(II)

(θ)

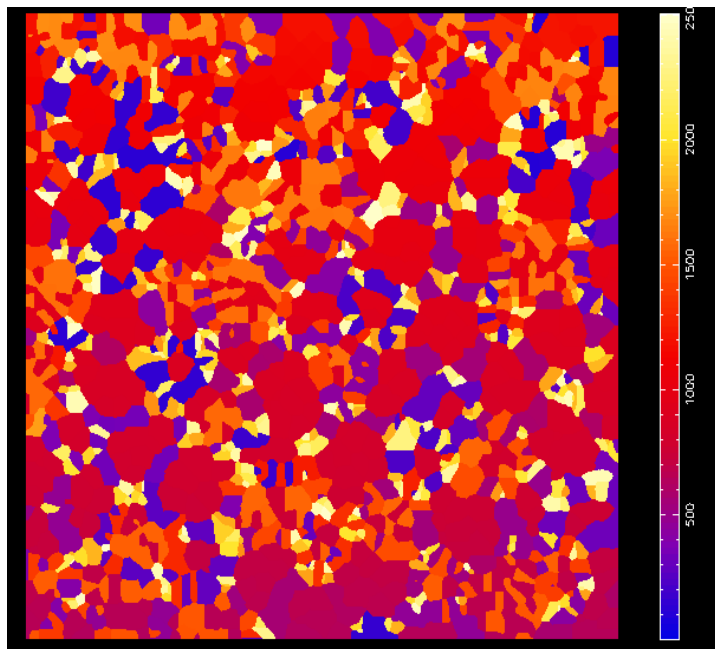


(I)

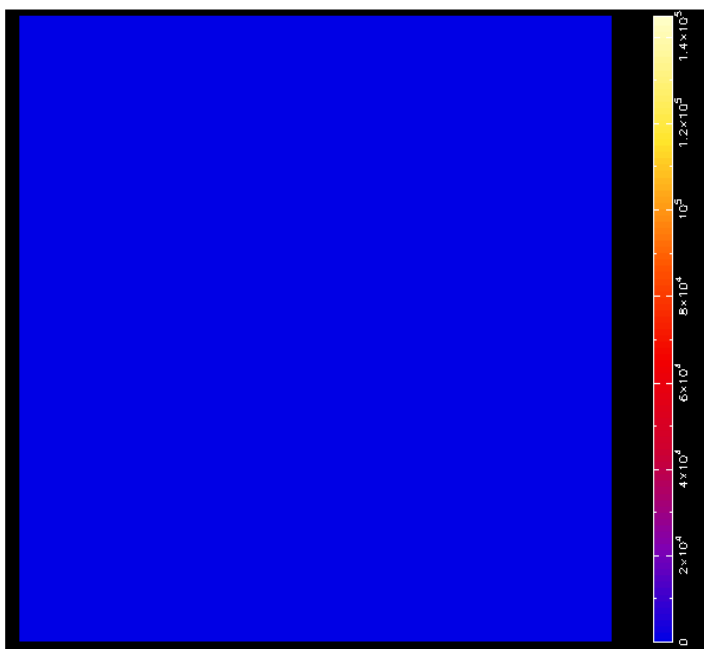


(II)

(t)

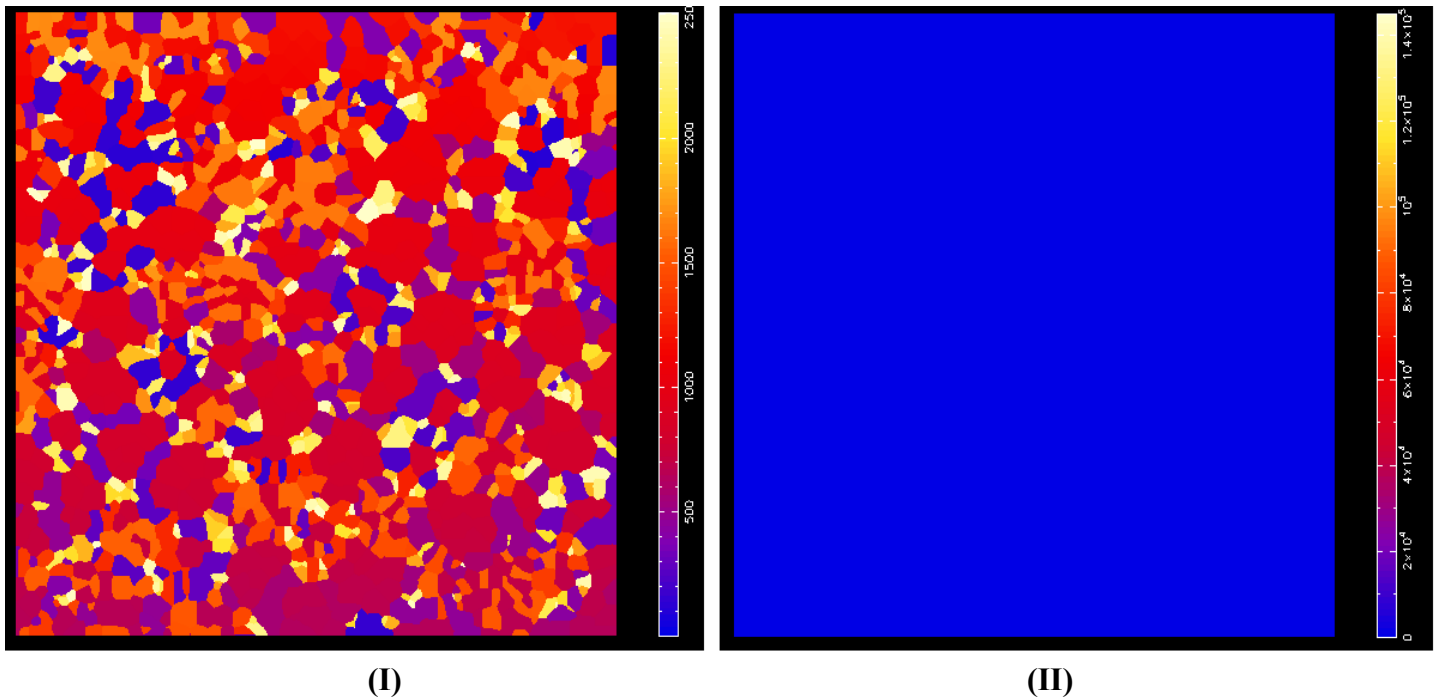


(I)



(II)

(κ)



Εικόνα 12 α-κ Πυρήνωση και στάδια ανάπτυξης των κόκκων, για την πρόβλεψη και αναπαράσταση της εξέλιξης της μικροδομής στην NZ. (I) μικροδομή και αριθμός κόκκων στη NZ κατά τη διάρκεια της DRX, (II) μεταβολή της αποθηκευμένης ενέργειας των κόκκων.

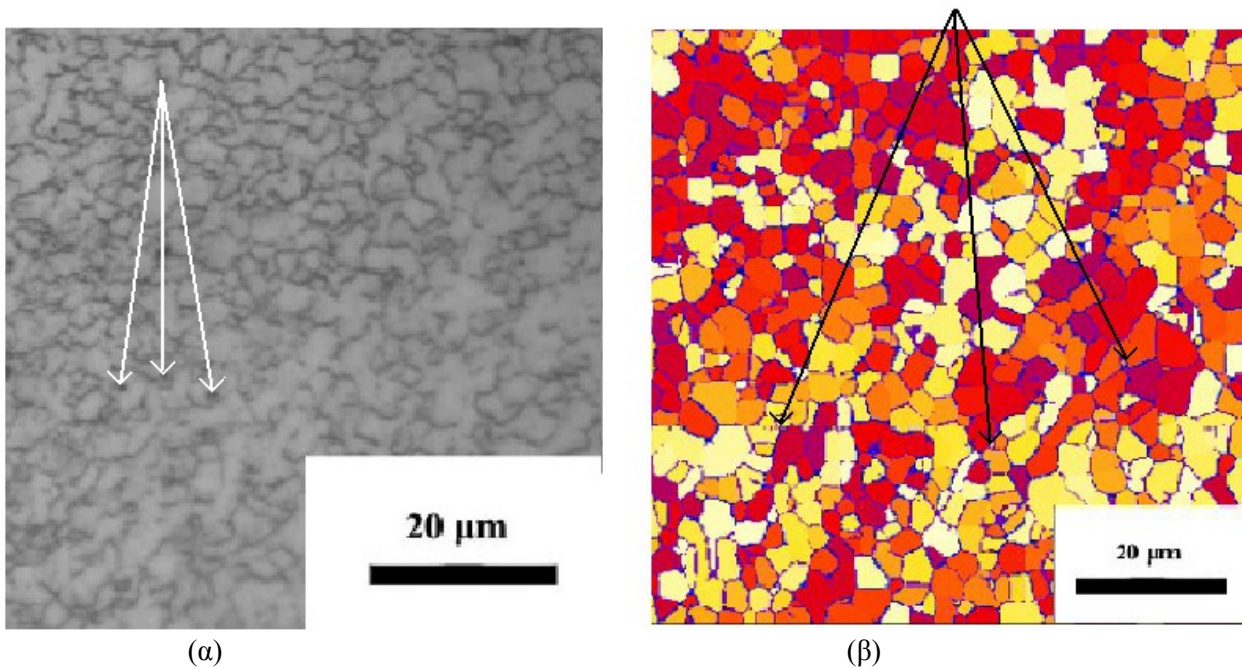
Στην εικ. 12α (I) φαίνεται η αρχική μικροδομή (βασικό μέταλλο) που αποτελείται από 102 κόκκους. Στην συνέχεια λαμβάνει χώρα η πυρήνωση, όπου προκαλεί αύξηση του αριθμού των νέων κόκκων (εικ. 12 β-στ (I)), έως ότου να φτάσει σε ένα μέγιστο αριθμό κόκκων (εικ. 12 ζ (I)). Στην συνέχεια, εξαιτίας της πλαστικής παραμόρφωσης, της θερμότητας και της κινητικότητας, οι νέοι κόκκοι μετακινούνται με αποτέλεσμα να μειωθεί ο αριθμός τους και να αυξηθεί το μέγεθός τους (εικ. 12 η-κ (I)), φτάνοντας τελικά τους 1774 κόκκους.

Στην εικόνα 12 (II), όπου αναπαριστάται η μεταβολή της αποθηκευμένης ενέργειας, παρατηρείται πως οι μητρικοί κόκκοι έχουν υψηλή ενέργεια λόγω της θερμότητας, εξαιτίας της τριβής και της πλαστικής παραμόρφωσης, γεγονός που οδηγεί στην πυρήνωση (εικ. 12β,γ (II)) και ανάπτυξη των νέων κόκκων (εικ. 12δ-στ (II)). Οι νέοι ανακρυσταλλωμένοι κόκκοι, όπως έχει καθοριστεί από το μοντέλο προσομοίωσης του κώδικα του λογισμικού MICRESS, έχουν μηδενική ενέργεια ανακρυστάλλωσης, το οποίο επαληθεύεται από τις εικόνες 12στ-ζ (II). Έτσι, σύμφωνα με το μοντέλο που αναπτύσσεται στην παρούσα εργασία, όπως και στην εργασία του Asadi [35], η τελική δομή αποτελείται από εκλεπτυνσμένους κόκκους με μηδενική ενέργεια ανακρυστάλλωσης (εικ. 12κ (II)).

Αυτό είναι σε αναλογία με το πειραματικό αποτέλεσμα, όπου καθώς η διαδικασία της DRX πραγματοποιείται η πυκνότητα των γραμμοαταξιών μεταβάλλεται, όπως μειώνεται και η κινητικότητα των συνόρων των κόκκων με την μείωση της θερμοκρασίας.

Επίσης, πρέπει να σημειωθεί ότι, παρόλο που οι νέοι κόκκοι αρχίζουν να μεγαλώνουν με μηδενική ενέργεια ανακρυστάλλωσης, εξαιτίας της εργοσκλήρυνσης δημιουργούνται γραμμοαταξίες στο εσωτερικό αυτών, με αποτέλεσμα τη μείωση της ωθούσας δύναμης για την μετανάστευση των συνόρων των κόκκων μέχρι τον τερματισμό της ανάπτυξής τους [35].

Ακόμα, προσέχοντας την εικ.11κ (I), μπορεί να παρατηρηθεί ότι υπάρχει ένας αριθμός μη-αναπτυγμένων κόκκων (πολύ μικρού μεγέθους). Όπως φαίνεται και στην εικόνα 13, τόσο στην μικροδομή από τη πειραματική διαδικασία (εικ. 13α) όσο και από την προσομοίωση (εικ. 13β), οι νέοι μη-αναπτυγμένοι κόκκοι είναι ευδιάκριτοι, μερικοί από τους οποίους επισημαίνονται με βέλη.



Εικόνα 13 Μικροδομή (α) από πειραματική διαδικασία και (β) από προσομοίωση, όπου φαίνονται οι μη-αναπτυγμένοι κόκκοι

Η παραπάνω παρατήρηση έρχεται σε συμφωνία με την εργασία του Asadi για την μελέτη της DRX κατά την διεργασία της FSW [35].

5. ΣΥΖΗΤΗΣΗ

Τα αποτελέσματα που προκύπτουν από τους υποθετικούς θερμικούς κύκλους, παρατηρούμε ότι εμπεριέχουν χρήσιμα δεδομένα τα οποία μπορούν να μας παρέχουν πληροφορίες τόσο για την μικροδομή όσο και για άλλες φυσικές ιδιότητες που μεταβάλλονται κατά τη διάρκεια της διεργασίας FSW, χωρίς να είναι απαραίτητη η εκτέλεση της πειραματικής διαδικασίας. Οι σχέσεις και τα διαγράμματα που αποκτώνται επαληθεύουν την θεωρία και τις αντίστοιχες μελέτες άλλων ερευνητών και επιβεβαιώνεται η ορθότητά τους.

Στη συνέχεια γνωρίζοντας τον πραγματικό θερμικό κύκλο που αναπτύχθηκε στην NZ κατά τη συγκόλληση, για να επιβεβαιωθεί η ικανότητα του παρόντος μοντέλου να περιγράψει την εξέλιξη της ανάπτυξης των κόκκων και να προβλέπει την μικροδομή στην NZ, συγκρίθηκε η τελική μικροδομή από την προσομοίωση με αυτή του πειράματος (με συνθήκες συγκόλλησης: ταχύτητα περιστροφής 830 rpm, κάθετη δύναμη 4120 N, ταχύτητα πρόωσης 60 mm/min), εικ. 10. Η απόκλιση του μέσου μεγέθους κόκκου μεταξύ των αποτελεσμάτων από την πειραματική διαδικασία ($d_{av}=4.5 \mu\text{m}$) και της προσομοίωσης ($d_{av}=4.6 \mu\text{m}$) ισούται περίπου με 2%. Όμοια η απόκλιση του μέσου αριθμού κόκκων μεταξύ των αποτελεσμάτων από την πειραματική διαδικασία (1785 κόκκοι) και της προσομοίωσης (1774 κόκκοι) ισούται περίπου με 0.5%. αυτό δείχνει ότι το παρόν μοντέλο για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής στη NZ κατά τη διάρκεια της διεργασίας FSW σε κράμα μαγνησίου AZ31 λειτουργεί με μεγάλη ακρίβεια και μπορεί να περιγράψει ορθά την πυρήνωση, τα στάδια ανάπτυξης των κόκκων και την τελική μικροδομή στο μέσο της ζώνης ανάδευσης.

Συγκρίνοντας τις μικροδομές για το βασικό μέταλλο και τη ζώνη ανάδευσης (εικόνες 9 και 10) και όπως εκτενώς αναφέρθηκε στο κεφάλαιο 4, το μέγεθος του κόκκου στη NZ μειώνεται δραστικά κατά τη FSW (από 14.5 μm στο βασικό μέταλλο σε 4.5 μm στη ζώνη ανάδευσης). Μεγάλη αλλαγή συμβαίνει και στον αριθμό των κόκκων ο οποίος αυξάνεται (από 100 κόκκους στο βασικό μέταλλο σε 1785 κόκκους στη ζώνη ανάδευσης), μεταβάλλοντας έτσι την μηχανική συμπεριφορά του υλικού και κατασκευάζοντας με τον τρόπο αυτό μία περιοχή με διαφορετικές, βελτιωμένες ιδιότητες. Ο συνδυασμός της υψηλής θερμοκρασίας (περίπου 0.9Tm), εξαιτίας της θερμότητας λόγω τριβής και του υψηλού ρυθμού παραμόρφωσης, εξαιτίας της έντονης πλαστικής παραμόρφωσης, οδηγούν σε υψηλή αποθηκευμένη ενέργεια η οποία προκαλεί τη δημιουργία λεπτών ανακρυσταλλωμένων κόκκων στη NZ (εικ. 10) [35]. Έτσι, η εκλέπτυνση των κόκκων συμβαίνει μέσω της DRX, συμπεριλαμβανομένης της πυρήνωσης και την ανάπτυξη των νέων κόκκων.

Οι μικρές αυτές διαφορές μεταξύ της πειραματικής και της μικροδομής από την προσομοίωση, πιθανόν οφείλονται σε σφάλματα κατά τον ορισμό του μοντέλου και τον καθορισμό των τιμών των παραμέτρων, καθώς επίσης και σε αδυναμίες του λογισμικού MICRESS για την περιγραφή της FSW.

Πρέπει να σημειωθεί πως για την μετατροπή της θερμότητας από μονάδες Watt σε Pascal (σχέσεις 27 και 28), για τον υπολογισμό της αποθηκευμένης ενέργειας (ενέργειας ανακρυστάλλωσης), ίσως, η θεώρηση των όγκων μεταφορές της θερμότητας και οι χρόνοι αλληλεπίδρασης να μην είναι πολύ ακριβής.

Επίσης, το λογισμικό MICRESS δεν παρέχει τη δυνατότητα να οριστεί η ενέργεια ανακρυστάλλωσης ως μεταβλητή με το χρόνο, παρά μόνο σταθερή, γεγονός το οποίο προσθέτει κάποιο σφάλμα. Διότι, στην πραγματικότητα η αποθηκευμένη ενέργεια του κόκκου, όπως και η πυκνότητα των γραμμοαταξιών, μεταβάλλεται κατά τη διάρκεια της FSW.

Ακόμα, στον υπολογισμό της κινητικότητας του συνόρου (σχέση 30ε), λόγω έλλειψης δεδομένων για τον προεκθετικό όρο M_0 για κράματα μαγνησίου, η τιμή του ορίστηκε προσεγγιστικά με βάση δεδομένα για παρόμοια κράματα.

Σφάλμα μπορεί επίσης να προστέθηκε και ο από το θερμικό κύκλο, ο οποίος υπολογίστηκε μετά το πέρας της συγκόλλησης.

Ένα επιπλέον μειονέκτημα που παρουσιάζει το MICRESS είναι η αδυναμία να συμπεριλάβει άμεσα στο εξεταζόμενο φαινόμενο την εργοσκήρυνση και τις πλαστικές παραμορφώσεις. Για να εξισορροπηθεί αυτό το πρόβλημα, όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 2.3, θεωρήθηκε ότι στην αποθηκευμένη ενέργεια έχει εισαχθεί και η πλαστική παραμόρφωση υπό την μορφή θερμότητας.

Τέλος, μικρά σφάλματα είναι πιθανόν να υπάρχουν και κατά τον υπολογισμό της κρίσιμης πυκνότητας γραμμοαταξιών (σχέση 30), όπου ο ρυθμός παραμόρφωσης που υπολογίστηκε από την εικ. 8 μέσω της σχέσης 30γ θεωρήθηκε σταθερός, ενώ η κινητικότητα του συνόρου υπολογίστηκε στο 0.95 της T_m . Στην πραγματικότητα η κρίσιμη πυκνότητα γραμμοαταξιών, εξαρτώμενη τόσο από την θερμοκρασία μέσω της κινητικότητας όσο και του ρυθμού παραμόρφωσης, είναι μεταβαλλόμενη με το χρόνο και όχι σταθερή.

Παρά όλες αυτές τις υποθέσεις και παραδοχές, το συγκεκριμένο μοντέλο που αναπτύσσεται στην παρούσα εργασία μπορεί να περιγράψει με αρκετά υψηλή ακρίβεια τις αλλαγές που συμβαίνουν στην μικροδομή κατά τη διάρκεια της FSW, γεγονός το οποίο αποδίδεται στο ότι το φαινόμενο αναπτύσσεται τόσο γρήγορα (σε πολύ μικρούς χρόνους) και κατά συνέπεια ο ορισμός μερικών μεταβλητών φυσικών μεγεθών ως σταθερών με το χρόνο δεν επιφέρει σημαντική επιρροή στα αποτελέσματα.

6. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Σκοπός της παρούσας εργασίας ήταν η προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής στην ζώνη ανάδευσης του AZ31 κράματος μαγνησίου κατά τη διεργασία της FSW. Για την επίτευξη αυτού του στόχου, κατασκευάστηκε και παρουσιάστηκε ένα μοντέλο βασισμένο στην επίδραση της αποθηκευμένης ενέργειας, η οποία προέρχεται από την θερμότητα που μεταφέρεται μέσω του εργαλείου (pin, shoulder) στο υλικό και του υψηλού ρυθμού παραμόρφωσης, λόγω της πλαστικής παραμόρφωσης, κατά την διάρκεια της μεθόδου FSW, το οποίο είναι ικανό να μελετήσει την πυρήνωση και τα στάδια ανάπτυξης των νέων κόκκων.

Οι παράμετροι που εισήχθησαν στο προτεινόμενο μοντέλο περιλαμβάνουν τη γεωμετρία του εργαλείου, τις συνθήκες συγκόλλησης (εφαρμοζόμενη δύναμη, ταχύτητα πρόωσης, ταχύτητα περιστροφής του εργαλείου), καθώς και το θερμικό κύκλο στην NZ της συγκόλλησης. Η αποθηκευμένη ενέργεια, η κινητικότητα του συνόρου του κόκκου, η ενέργεια στο σύνορο του κόκκου, ο ρυθμός παραμόρφωσης και οι ιδιότητες του υλικού, όπως η πυκνότητα των γραμμοαταξιών και το μέτρο διάτμησης συμπεριλήφθηκαν στο μοντέλο και συγκρίθηκαν με την διαθέσιμη βιβλιογραφία για το κράμα AZ31. Κατά την κατασκευή του μοντέλου έγιναν οι εξής παραδοχές:

- Οι όγκοι μεταφοράς της θερμότητας θεωρήθηκαν κυλινδρικοί με διαμέτρους ίσες με του pin και του shoulder
- Η τιμή του προεκθετικού όρου M_0 για τον υπολογισμό της κινητικότητας του συνόρου ορίστηκε προσεγγιστικά με βάση δεδομένα για παρόμοια κράματα μαγνησίου
- Ο ρυθμός παραμόρφωσης τέθηκε σταθερός
- Η κρίσιμη πυκνότητα γραμμοαταξιών θεωρήθηκε σταθερή με τη θερμοκρασία
- Δεν λήφθηκε υπόψιν η επίδραση της ενδομεταλλικής ένωσης $Mg_{17}Al_{12}$

Για την προσομοίωση της FSW χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό MICRESS, το οποίο βασίζεται στο μοντέλο Phase-Field και παρέχει την δυνατότητα μελέτης φαινομένων, όπως της DRX, λαμβάνοντας υπόψιν παραμέτρους για την πυρήνωση και την ανάπτυξη των ανακρυσταλλωμένων κόκκων. Έτσι, προσαρμόζοντας κατάλληλα το ανεπτυγμένο μοντέλο στις δυνατότητες του λογισμικού MICRESS, μελετήθηκε η εξέλιξη της μικροδομής στην NZ κατά τη διάρκεια της FSW. Πρέπει να σημειωθεί ότι το συγκεκριμένο λογισμικό παρουσιάζει τις εξής αδυναμίες:

- Η ενέργεια ανακρυστάλλωσης (καθώς και η κρίσιμη ενέργεια ανακρυστάλλωσης) δεν μπορεί να οριστεί μεταβλητή ούτε με τη θερμοκρασία ούτε με το χρόνο
- Δεν μπορεί να ληφθεί υπόψιν το φαινόμενο της εργοσκλήρυνσης
- Δεν μπορεί να συμπεριλάβει πλαστικές παραμορφώσεις

Τα αποτελέσματα αναπαριστούν την εξέλιξη της μικροδομής (πυρήνωση, στάδια ανάπτυξης νέων κόκκων) κατά τη διάρκεια του θερμικού κύκλου της συγκόλλησης και περιγράφουν με μεγάλη ακρίβεια την τελική μικροδομή, όπως τον αριθμό και το μέγεθος των εκλεπτυνσμένων κόκκων, καθώς και τον βαθμό πυρήνωσης. Υπάρχει καλή συμφωνία μεταξύ των αποτελεσμάτων από τις προσομοιώσεις και τα πειράματα.

Με το συγκεκριμένο μοντέλο μας παρέχεται η δυνατότητα να συσχετίσουμε τις συνθήκες συγκόλλησης (γεωμετρικά χαρακτηριστικά του εργαλείου, ταχύτητα περιστροφής, ταχύτητα πρόωσης, εφαρμοζόμενο φορτίο), τις παραμέτρους της διεργασίας (ρυθμός παραμόρφωσης, θερμικός κύκλος) και τις ιδιότητες του υλικού (πυκνότητα γραμμοαταξιών, κινητικότητα συνόρου κόκκου) με τα τελικά χαρακτηριστικά της μικροδομής στην NZ της συγκόλλησης (μέγεθος κόκκου, αριθμός κόκκων).

Έτσι, μπορεί να κατασκευαστεί μία βάση δεδομένων με τις κατάλληλες συνθήκες που αποδίδουν τα βέλτιστα αποτελέσματα τόσο στην μικροδομή όσο και στην μακροδομή των συγκολλούμενων ελασμάτων. Με αυτόν τον τρόπο μειώνεται η πιθανότητα εμφάνισης ατελειών και αστοχιών στη συγκόλληση.

Κατασκευάζοντας το παρόν μοντέλο προσομοίωσης και μελετώντας τα αποτελέσματα, γεννιούνται οι εξής προσδοκίες:

- Η μελέτη της διεργασίας για διαφορετικές συνθήκες συγκόλλησης
- Η μελέτη της διεργασίας FSW σε κάποια άλλη ζώνη της συγκόλλησης (π.χ TMAZ)
- Η μελέτη της διεργασίας FSW σε ολόκληρη τη συγκόλληση

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω η μελέτη της εξέλιξης της μικροδομής για διαφορετικές συνθήκες είναι εφικτή μέσω της κατάλληλης αλλαγής των παραμέτρων (αποθηκευμένη ενέργεια, θερμικός κύκλος) του μοντέλου που αυτές θα επιφέρουν.

Για την μελέτη της εξέλιξης της μικροδομής είτε σε κάποια άλλη ζώνη της συγκόλλησης είτε σε ολόκληρη τη συγκόλληση, εκτός από τους αντίστοιχους θερμικούς κύκλους και τις νέες τιμές των παραμέτρων, ίσως απαιτούνται επιπλέον δεδομένα και γνώσεις για την μεταβολή της μικροδομής, λόγω θερμομηχανικών φαινομένων που συμβαίνουν στις γύρω περιοχές και αλληλεπιδράσεων μεταξύ των διαφορετικών ζωνών.

Τέλος, για την επίτευξη των παραπάνω στόχων, απαιτείται υποχρεωτικά η αναβάθμιση του λογισμικού προσομοίωσης, ώστε να δίνεται στο χρήστη η δυνατότητα να ορίζει ,πρώτον, διαφορετικές τιμές στις παραμέτρους ανάλογα με τη ζώνη συγκόλλησης που μελετάται και δεύτερον, κάποιες παραμέτρους (π.χ ενέργεια ανακρυστάλλωσης) ως μεταβαλλόμενες και όχι ως σταθερές.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Εκτελέσιμος κώδικας για προσομοίωση της ανάπτυξης της μικροδομής στη NZ, με το λογισμικό MICRESS, κατά τη διάρκεια της FSW στο AZ31 κράμα μαγνησίου.

```
#
# Flags and settings
# =====
#
# Geometry
# -----
# Grid size?
# (for 2D calculations: AnzY=1, for 1D calculations: AnzX=1, AnzY=1)
# AnzX:
500
# AnzY:
1
# AnzZ:
500
# Cell dimension (grid spacing in micrometers):
0.200
#
# Flags
# -----
# Type of coupling?
# Options:  phase concentration temperature temp_cyl_coord
#           [stress] [stress_coupled] [flow]
phase
# Type of potential?
# Options:  double_obstacle  double_well  multi_obstacle
multi_obstacle
#
# Phase field data structure
# -----
# Coefficient for initial dimension of field iFace
# [minimum usage] [target usage]
0.1
# Coefficient for initial dimension of field nTupel
# [minimum usage] [target usage]
0.1
#
#
# Time input data
# =====
```

```

# Finish input of output times (in seconds) with 'end_of_simulation'
# 'regularly-spaced' outputs can be set with 'linear_step'
# or 'logarithmic_step' and then specifying the increment
# and end value
# ('automatic_outputs' optionally followed by the number
# of outputs can be used in conjunction with 'linear_from_file')
linear_step
end_of_simulation
# Time-step?
# Options: (real) automatic [0<factor_1<=1] [0<=factor_2] [max.] [min.]
# (Fix time steps: just input the value)
automatic
# Coefficient for phase-field criterion 1.00
# Number of iterations for initialisation?
2500
#
#
# Phase data
# =====
# Number of distinct solid phases?
1
#
# Data for phase 1:
# -----
# Simulation of recrystallisation in phase 1 ?
# Options: recrystall no_recrytall
recrystall
# Which recrystallisation model
# Options: energy mean_disloc local_disloc [all_interfaces]
energy all_interfaces
# Energy threshold for recrystallisation model? [J/cm**3 or MPa]
2E-02
# Is phase 1 anisotrop?
# Options: isotropic anisotropic faceted
anisotropic
# Crystal symmetry of the phase?
# Options: none cubic hexagonal tetragonal orthorhombic
hexagonal
# Should grains of phase 1 be reduced to categories?
# Options: categorize no_categorize
no_categorize
#
# Orientation
# -----
# How shall grain orientations be defined?
# Options: angle_2d
#          euler_zxz
#          angle_axis
#          miller_indices
angle_2d

```

```

#
#
# Grain input
# =====
# Type of grain positioning ?
# Options: deterministic random from_file
random
# Integer for randomization?
15
# Number of different types of grains?
1
# Number of grains of type 1?
102
# Input for grain type 1
# -----
# Geometry of grain type 1
# Options: round rectangular elliptic
round
# Minimal value of x-coordinates? [micrometers]
-1.0000000
# Maximal value of x-coordinates? [micrometers]
101.000000
# Minimal value of z-coordinates? [micrometers]
-1.0000000
# Maximal value of z-coordinates? [micrometers]
101.0000000
# Minimum grain radius? [micrometers]
7.100000
# Maximum grain radius? [micrometers]
7.300000
# Shall grain type 1 be stabilized or shall
# an analytical curvature description be applied?
# Options: stabilisation analytical_curvature
stabilisation
# Voronoi criterion for grains of type 1 will be applied
# Options: voronoi no_voronoi
no_voronoi
# Phase number for grain type 1? (int)
1
# Minimum of recrystallisation energie? [J/cm**3]
135000.0
# Maximum of recrystallisation energie? [J/cm**3]
145000.0
# Determination of grain orientations?
# options: random fix range
range
# Minimal value of rotation angle ? [Degree]
0.0000000
# Maximal value of rotation angle ? [Degree]
180.0000000

```

```

# Minimal distance between grains (real) [micrometers]?
8.9000
#
#
# Data for further nucleation
# =====
# Enable further nucleation?
# Options:  nucleation    no_nucleation
nucleation
# Additional output for nucleation?
# Options:  out_nucleation  no_out_nucleation
no_out_nucleation
#
# Number of types of seeds?
3
#
# Input for seed type 1:
# -----
# Type of 'position' of the seeds?
# Options:  bulk region interface triple quadruple [restrictive]
interface
# Phase of new grains?
1
# Reference phase?
1
# Substrat phase?
# (for taking into account curvature undercooling, set to 1 to disable)
1
# maximum number of new nuclei 1?
800
# Grain radius [micrometers]?
0.000
# Choice of growth mode:
# Options:  stabilisation analytical_curvature
stabilisation
# critical recrystallisation energy [J/cm**3]?
4.2540
# Determination of nuclei orientations?
# Options:  random  fix  range  parent_relation
random
# Shield effect:
# Shield time [s] ?
0.00
# Shield distance [micrometers]?
2.5000
# Input of minimal and maximal energy of the nuclei:
# Minimum of recrystallisation energy? [J/cm**3 or MPa]
0.0000
# Maximum of recrystallisation energy? [J/cm**3 or MPa]
0.0000

```

```

# Nucleation range
# min. nucleation temperature for seed type 1 [K]
580.00
# max. nucleation temperature for seed type 1 [K]
860.0
# Time between checks for nucleation? [s]
1E-3
# Shall random noise be applied?
# Options:  nucleation_noise  no_nucleation_noise
no_nucleation_noise
#
# Input for seed type 2:
# -----
# Type of 'position' of the seeds?
# Options:  bulk  region  interface  triple  quadruple [restrictive]
triple
# Phase of new grains?
1
# Reference phase?
1
#1 to disable effect of substrate curvature ???
1
# maximum number of new nuclei 2?
800
# Grain radius [micrometers]?
0.000
# Choice of growth mode:
# Options:  stabilisation analytical_curvature
stabilisation
# critical recrystallisation energy [J/cm**3]?
4.2540
# Determination of nuclei orientations?
# Options:  random  fix  range  parent_relation
random
# Shield effect:
# Shield time [s] ?
0.00
# Shield distance [micrometers]?
2.5000
# Input of minimal and maximal energy of the nuclei:
# Minimum of recrystallisation energy? [J/cm**3 or MPa]
0.0000
# Maximum of recrystallisation energy? [J/cm**3 or MPa]
0.0000
# Nucleation range
# min. nucleation temperature for seed type 1 [K]
580.0
# max. nucleation temperature for seed type 1 [K]
860.0
# Time between checks for nucleation? [s]

```

```

1E-3
# Shall random noise be applied?
# Options:  nucleation_noise  no_nucleation_noise
no_nucleation_noise
#
# Input for seed type 3:
# -----
# Type of 'position' of the seeds?
# Options:  bulk  region  interface  triple  quadruple  [restrictive]
bulk
# Phase of new grains?
1
# Reference phase?
1
# Which nucleation model shall be used?
# Options:  seed_undercooling  seed_density
seed_undercooling
# maximum number of new nuclei 3?
800
# Grain radius [micrometers]?
0.000
# Choice of growth mode:
# Options:  stabilisation  analytical_curvature
stabilisation
# critical recrystallisation energy [J/cm**3]?
4.2540
# Determination of nuclei orientations?
# Options:  random  fix  range  parent_relation
random
# Shield effect:
# Shield time [s] ?
0.00
# Shield distance [micrometers]?
2.5000
# Input of minimal and maximal energy of the nuclei:
# Minimum of recrystallisation energy? [J/cm**3 or MPa]
0.0000
# Maximum of recrystallisation energy? [J/cm**3 or MPa]
0.0000
# Nucleation range
# min. nucleation temperature for seed type 3 [K]
580.00
# max. nucleation temperature for seed type 3 [K]
860.0
# Time between checks for nucleation? [s]
1E-3
# Shall random noise be applied?
# Options:  nucleation_noise  no_nucleation_noise
no_nucleation_noise
#

```

```

#
# Seed for random-number generator initialisation
# -----
#6
#
# Max. number of simultaneous nucleations?
# -----
# (set to 0 for automatic)
0
#
# Shall metastable small seeds be killed?
# -----
# Options:  kill_metastable  no_kill_metastable
no_kill_metastable
#
#
# Phase interaction data
# =====
#
# Data for phase interaction 0 / 1:
# -----
# Simulation of interaction between phase 0 and 1 ?
# Options: phase_interaction  no_phase_interaction
#         [standard|particle_pinning|solute_drag]
no_phase_interaction
#
# Data for phase interaction 1 / 1:
# -----
# Simulation of interaction between phase 1 and 1 ?
# Options: phase_interaction  no_phase_interaction
#         [standard|particle_pinning|solute_drag]
phase_interaction
# Type of surface energy definition between phases 1 and 1?
# Options: constant temp_dependent
constant
# Surface energy between phases 1 and 1? [J/cm**2]
0.332E-04
# Type of mobility definition between phases 1 and 1?
# Options: constant temp_dependent sd_kth  dg_dependent
temp_dependent
# File for Kinetic coefficient mu between phases 1 and 1? [cm**4/(Js)]
Mobility.txt
# Shall misorientation be considered?
# Optionen: misorientation  no_misorientation
misorientation
# Input of the misorientation coefficient:
# Modification of surface energy for low angle boundaries
# Options: factor  Read-Shockley
Read-Shockley
# Modification of the mobility for low angle boundaries

```

```

# Options: factor Humphreys
Humphreys
#
#
# Boundary conditions
# =====
# Type of temperature trend?
# Options: linear linear_from_file sinus
linear_from_file
#
Therm.txt
# Moving-frame system in z-direction?
# Options: moving_frame no_moving_frame
no_moving_frame
#
# Boundary conditions for phase field in each direction
# Options: i (insulation) s (symmetric) p (periodic/wrap-around) g (gradient) f (fixed)
# Sequence: E W (N S, if 3D) B T borders
iiii
# Unit-cell model symmetric with respect to the x/y diagonal plane?
# Options: unit_cell_symm no_unit_cell_symm
no_unit_cell_symm
#
#
# Other numerical parameters
# =====
# Phase minimum?
5.00E-03
# Interface thickness (in cells)?
5.00
#

```


1. Boettinger, W. J., Warren, J. A., Beckermann, C., Karma, A. (2002) "Phase-Field Simulation of Solidification". *Annual Review of Materials Research*.32: 163–194
2. Steinbach I (2009) "Phase-field models in materials science Modelling Simul.". *Mater. Sci. Eng.* 17 1–31
3. Karma A (2001) "Phase-field methods Encyclopedia of Materials Science and Technology". (Oxford, UK: Elsevier) pp 6873–86
4. L.-Q. Chen (2002) "Phase-field models for microstructure evolution". *Ann. Rev. Mater. Sci.*, 32, 113–140
5. Moelans N, Blanpain B and Wollants P (2008) "An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution". *Comp. Coupling Phase Diagr. Thermochem.* 32 268–94
6. R. S. Qin and H. K. Bhadeshia (2010) "Phase field method". *Materials Science and Technology*
7. Wang Y and Khachaturyan A G (2006) "Multi-scale phase field approach to martensitic transformation". *Mater.Sci. Eng. A* 438–440 55–63
8. Kim S G, Kim W T and Suzuki T (1999) "Phase-field model for binary alloys". *Phys. Rev. E* 60 7186–97
9. Steinbach I and Apel M (2007) "Phase-field simulation of rapid crystallization of silicon on substrate". *Mater. Sci. Eng. A* 449 95–8
10. R. S. Qin and H. K. D. H. Bhadeshia (2009) "Phase-field model study of the effect of interface anisotropy on the crystal morphological evolution of cubic metals". *Acta Mater.*, 57, 2210–2216
11. R. S. Qin and H. K. D. H. Bhadeshia (2009) "Phase-field model study of the crystal morphological evolution of hcp metals". *Acta Mater.*, 57, 3382–2290
12. Miodownik M A (2002) "A review of microstructural computer models used to simulate grain growth and recrystallisation in aluminium alloys" *J. Light Met.* 2 125–35
13. Fan D and Chen L-Q (1997) "Computer simulation of grain growth using a continuum field model". *Acta Mater.* 45 611–22
14. Hakan Hallberg (2013) "A modified level set approach to 2D modeling of dynamic recrystallization". *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 21
15. K. Huang, R.E. Loge (2016) "A review of dynamic recrystallization phenomena in metallic materials". *Materials and Design* 111 548–574
16. D.T. Pierce, J.A. Jimenez, J. Bentley, D. Raabe, J.E. Wittig (2015) "The influence of stacking fault energy on the microstructural and strain-hardening evolution of Fe–Mn–Al–Si steels during tensile deformation". *Acta Mater.* 100 178–190
17. A. Galiyev, R. Kaibyshev, G. Gottstein (2001) "Correlation of plastic deformation and dynamic recrystallization in magnesium alloy ZK60". *Acta Mater.* 49 1199–1207
18. A. Dehghan-Manshadi, P.D. Hodgson (2008) "Dependency of recrystallization mechanism to the initial grain size". *Metall. Mater. Trans. A* 39A 2830–2840
19. K. Wang, G. Liu, J. Zhao, J. Wang, S. Yuan (2016) "Formability and microstructure evolution for hot gas forming of laser-welded TA15 titanium alloy tubes". *Mater. Des.* 91 269–277
20. X. Fan, Z. He, P. Lin, S. Yuan (2016) "Microstructure, texture and hardness of Al–Cu–Li alloy sheet during hot gas forming with integrated heat treatment". *Mater. Des.* 94 449–456
21. T. Sakai, A. Belyakov, R. Kaibyshev, H. Miura, J.J. Jonas (2014) "Dynamic and post-

- dynamic recrystallization under hot, cold and severe plastic deformation conditions". *Prog. Mater. Sci.* 60 130–207
22. F.J. Humphreys, M. Hatherly (2004) "Recrystallization and Related Annealing Phenomena". 2nd edn. Elsevier, Oxford
 23. T.R. McNelley, S. Swaminathan and J.Q. Su (2008) "Recrystallization mechanisms during friction stir welding/processing of aluminum alloys". *Scripta Materialia* 58 349–354
 24. I. Shigematsu, Y.J. Kwon, K. Suzuki, T. Imai, N. Saito (2003) "Joining of 5083 and 6061 aluminum alloys by friction stir welding". *J. Mater. Sci. Lett.*, 22, pp. 343–356
 25. G. Liu, L.E. Murr, C.S. Niou, J.C. McClure, F.R. Vega (1997) "Microstructural aspects of the friction-stir welding of 6061-T6 aluminum alloy". *Scrip. Mater.*, 37, pp. 355–361
 26. R.W. Fonda, J.F. Bingert, K.J. Colligan (2004) "Development of grain structure during friction stir welding". *Scripta Mater.* 51:243
 27. Farrokhi H, Heidarzadeh A, Saeid T (2013) "Frictions stir welding of copper under different welding parameters and media". *Sci Technol Weld Join* 18(8):697–702
 28. Asadi P, Besharati Givi MK, Parvin N, Araei A, Taherishargh M, Tutunchilar S (2012) "On the role of cooling and tool rotational direction on microstructure and mechanical properties of friction stir processed AZ91". *Int J Adv Manuf Technol* 63:987–997
 29. Afrin N, Chen DL, Cao X, Jahazi M (2008) "Microstructure and tensile properties of friction stir welded AZ31B magnesium alloy". *Mater Sci Eng A* 472:179–186
 30. Motaleb-nejad P, Saeid T, Heidarzadeh A, Darzi K, Ashjari M (2014) "Effect of tool pin profile on microstructure and mechanical properties of friction stir welded AZ31B magnesium alloy". *Mater Des* 59:221–226
 31. Asadi P, Akbari M, Karimi-Nemch H (2014) "Simulation of friction stir welding and processing. In: *Advances in friction stir welding and processing*". Woodhead Publishing Limited, Elsevier 499–542
 32. Marzbanrad J, AkbariM, Asadi P, Safaee S (2014) "Characterization of the influence of tool pin profile on microstructural and mechanical properties of friction stir welding". *Metall Mater Trans B* 45(5):1887–1894
 33. Liu X, Li LX, He F, Zhou J, Zhu B, Zhang L (2013) "Simulation on dynamic recrystallization behavior of AZ31 magnesium alloy using cellular automaton method coupling Laasraoui–Jonas model". *Trans Nonferrous Metals Soc China* 23(9):2692–2699
 34. Xiao H, Xie H B, Yan Y H, Jun Y G (2004) "Simulation of dynamic recrystallization using cellular automaton method". *Journal of Iron and Steel Research International*, 11(2): 42–45.
 35. Parviz Asadi, Mohammad Kazem Besharati Givi, Mostafa Akbari (2016) "Simulation of dynamic recrystallization process during friction stir welding of AZ91 magnesium alloy". *Int J Adv Manuf Technol* 83:301–311
 36. Song M, Kovacevic R (2003) "Numerical and experimental study of the heat transfer process in friction stir welding". *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part B Journal of Engineering Manufacture*
 37. Colegrove P (2000) "3 dimensional flow and thermal modeling of the friction stir welding process". In *Proceedings of the 2nd International Symposium on Friction Stir Welding, Sweden*
 38. Song KJ, Dong ZB, Fang K, Zhan XH, Wei YH (2014) "Cellular automaton modelling of dynamic recrystallisation microstructure evolution during friction stir welding of titanium alloy". *Mater Sci Technol* 30(6):700–711
 39. W. Roberts and B. Ahlbom (1978) "A nucleation criterion for dynamic recrystallization during hot working". *Acta Metallurgica*, 26:801–813
 40. Hallberg H, Wallin M, Ristinmaa M (2010) "Simulation of discontinuous dynamic recrystallization in pure Cu using a probabilistic cellular automaton". *Computational Materials Science* 49 1 (pp. 25-34)

41. Yoo, Morris, Ho, and Agnew (2002) "Nonbasal Deformation Modes of HCP Metals and Alloys: Role of Dislocation Source and Mobility". *Met. and Mat. Trans A*, vol 33A
42. Bin Li, Logan Shannahan, Evan Ma, and Kaliatt T. Ramesh (2012) "Deformation Mechanisms and High Strain Rate Properties of Magnesium (Mg) and Mg Alloys". Army Research Laboratory, Aberdeen Proving Ground, MD 21005-5066
43. Shelton R K, Duand D C (1996) "Computer modeling of particle pushing and clustering during matrix crystallization". *Acta Materialia*, 44(11): 4571–4585.
44. Chang, C.I.; Du, X.H.; Huang, J.C (2008) "Producing nano grained microstructure in Mg–Al–Zn alloy by twostep friction stir processing". *Scripta Mater.*, 59, 356–359.
45. Fang Chai, Datong Zhang and Yuanyuan Li (2014) "Effect of Thermal History on Microstructures and Mechanical Properties of AZ31 Magnesium Alloy Prepared by Friction Stir Processing". *Materials*, 7, 1573-1589
46. Lorelei Commin, Myriam Dumont, Jean-Eric Masse, Laurent Barrallier (2009) "Friction stir welding of AZ31 magnesium alloy rolled sheets: Influence of processing parameters". *Acta Materialia*, Elsevier, 57 (2), pp.326-334.
47. Frost H J, Ashby M F (1982) "Deformation-mechanism maps: The plasticity and creep of metal and ceramics". Oxford: Pergamon Press: 44.
48. Sakai T (1995) "Dynamic recrystallization microstructures under hot working conditions". *Journal of Materials Processing Technology*, 53(1–2): 549–561.
49. Esther T. Akinlabi, and Stephen A. Akinlabi (2012) "Friction Stir Welding Process: A Green Technology". *World Academy of Science, Engineering and Technology* 71
50. Heena K Sharma, Kamlesh Bhatt, Krunal Shah, Unnati Joshi (2016) "Experimental Analysis of Friction Stir Welding of Dissimilar Alloys AA6061 and Mg AZ31 Using Circular Butt Joint Geometry". *Procedia Technology* 23 566 – 572
51. R.S. Mishra, Z.Y. Ma (2005) "Friction stir welding and processing". *Materials Science and Engineering R* 50 1–78
52. B.M. Darras, M.K. Khraisheh, F.K. Abu-Farha, M.A. Omar (2007) "Friction stir processing of commercial AZ31 magnesium alloy". *Journal of Materials Processing Technology* 191 77–81
53. Xiacong He, Fengshou Gu, Andrew Ball (2014) "A review of numerical analysis of friction stir welding". *Progress in Materials Science* 65 1–66
54. I. Ulacia, N.V. Dudamell, F. Gálvez, S. Yi, M.T. Perez-Prado, I. Hurtado (2010) "Mechanical behavior and microstructural evolution of a Mg AZ31 sheet at dynamic strain rates". *Acta Materialia* 58 2988–2998
55. C.I. Chang, C.J. Lee, J.C. Huang (2004) "Relationship between grain size and Zener–Holloman parameter during friction stir processing in AZ31 Mg alloys". *Scripta Materialia* 51 509–514
56. Mingtao Wang, B.Y. Zong, Gang Wang (2009) "Grain growth in AZ31 Mg alloy during recrystallization at different temperatures by phase field simulation". *Computational Materials Science* 45 217–222
57. Takashi Shintani, Yoshinori Murata, Yoshihiro Terada and Masahiko Morinaga (2010) "Evaluation of Dislocation Density in a Mg–Al–Mn–Ca Alloy Determined by X-ray Diffractometry and Transmission Electron Microscopy". *Materials Transactions*, Vol. 51, No. 6 pp. 1067-1071
58. Liu X, Li LX, He F, Zhou J, Zhu B, Zhang L (2013) "Simulation on dynamic recrystallization behavior of AZ31 magnesium alloy using cellular automaton method coupling Laasraoui–Jonas model". *Trans Nonferrous Metals Soc China* 23(9):2692–2699
59. Leonardo Contri Campanelli, Uceu Fuad Hasan Suhuddin, Armando Ntalo Sette Antonioli, Jorge Fernandez dos Santos, Nelson Guedes de Alcântara, Claudemiro Bolfarini (2013) "Metallurgy and mechanical performance of AZ31 magnesium alloy friction spot welds".

- Journal of Materials Processing Technology 213 515– 521
60. A. P. Iliopoulos, J. G. Michopoulos and S. Lambrakos (2016) "Reduced Order Modeling for Inverse Parameter Identification of Ti-5111 Friction Stir Welding". ASME 2016 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference. Volume 1A: 36th Computers and Information in Engineering Conference Charlotte, North Carolina, USA, August 21–24

