



## مشخصه‌یابی پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ با ترکیب آزمون نانو فروروندگی و شبیه‌سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته

علی آقابالائی وحید<sup>۱\*</sup>، ولی علی میرزالو<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> دانشجوی دکتری، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه ارومیه، ارومیه، ایران

<sup>۲</sup> دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه ارومیه، ارومیه، ایران

یادداشت تحقیقاتی، تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۹/۱۹؛ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۱/۱۶؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۵/۰۹

### چکیده

پاسخ مکانیکی مواد کریستالی متأثر از جریان و سخت‌شوندگی نایجابی‌هاست؛ که برای توصیف آنها به‌عنوان مدل ماده در محاسبات اجزا محدود، پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی در یک کد کریستال پلاستیسیته پیاده‌سازی می‌شوند. در این مطالعه، با ترکیب آزمون نانو فروروندگی تجربی و شبیه‌سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی، پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ مشخص شدند. با مقایسه منحنی‌های تنش-کرنش آزمون کشش تک‌محوری تجربی و شبیه‌سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی بر روی مدل‌های تک‌کریستال و پلی‌کریستال، پارامترهای استخراج‌شده اعتبارسنجی شدند. همچنین، اثر ضریب اصطکاک در تعیین پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی مورد بحث قرار گرفت. نتایج این مطالعه نشان داد که (i) پارامترهای تنش تسلیم اولیه، نرخ کرنش برشی مرجع و تنش اشباع به ترتیب بیش‌ترین همبستگی مثبت را با حداکثر بار دارند؛ (ii) منحنی بار-جابجایی به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی آزمون نانو فروروندگی با پارامترهای مشخصه‌یابی‌شده، دارای خطای نسبی ۰/۵۰٪ نسبت به آزمون نانو فروروندگی تجربی در حداکثر عمق فرورفتگی است؛ (iii) پارامترهای مشخصه‌یابی‌شده به‌طور قابل‌توجهی توانایی تخمین تنش تسلیم و مقاومت کشش نهایی را به ترتیب با خطای نسبی ۲/۶۰٪ و ۰/۲۰٪ برای مدل تک‌کریستال و ۱۰/۱۸٪ و ۱۲/۴۴٪ برای مدل پلی‌کریستال دارند. باین‌حال، ضمن مدل‌سازی دقیق ناحیه تسلیم در مدل پلی‌کریستال، دقت پارامترهای مشخصه‌یابی‌شده تحت تأثیر جهت‌گیری مرزخانه‌هاست.

**کلمات کلیدی:** پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی؛ روش اجزا محدود؛ کریستال پلاستیسیته؛ نانو فروروندگی؛ آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰.

## Characterization of Flow and Hardening Parameters of 1100 Aluminium Alloy by Combining Nanoindentation Test and Crystal Plasticity Finite Element Simulation

Ali Aghabalaeivahid<sup>1\*</sup>, Vali Alimirzaloo<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Ph.D. Student, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Urmia University, Urmia, Iran

<sup>2</sup> Assoc. Prof., Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Urmia University, Urmia, Iran

### Abstract

The mechanical response of crystalline materials is affected by the flow and hardening of dislocations; that to describe them as a material model in finite element calculations, the flow and hardening parameters are implemented in the crystal plasticity code. In the present study, flow and hardening parameters for 1100 aluminium alloy were characterized by combining the experimental nanoindentation test and 3D crystal plasticity finite element simulations. Extracted parameters were validated by comparing the stress-strain curves of the experimental uniaxial tensile test and simulation of 3D crystal plasticity finite element on single crystal and polycrystal models. Also, the effect of the friction coefficient in determining the flow and hardening parameters was discussed. The results of this study showed that (i) parameters of initial yield stress, reference shear strain rate, and saturation stress, respectively, had the highest positive correlation with the maximum load; (ii) the load-displacement curve obtained from the simulation of the nanoindentation test using the characterized parameters has a relative error of 0.50% compared to the experimental nanoindentation test at the maximum indentation depth; (iii) The characterized parameters significantly can estimate the yield stress and ultimate tensile strength with a relative error of 2.60% and 0.20% for the single crystal model and 10.18% and 12.44% for the polycrystal model, respectively. However, while accurately modeling the yield zone in the polycrystal model, the accuracy of the characterized parameters is affected by the grain boundary orientation.

**Keywords:** Flow and Hardening Parameters; Finite Element Method; Crystal Plasticity; Nanoindentation; 1100 Aluminium Alloy.

## ۱- مقدمه

تئوری‌های پلاستیسیته مورد استفاده در ماکرو مکانیک مثل مدل جانسون-کوک<sup>۱</sup> که با عنوان پلاستیسیته پدیداری<sup>۲</sup> شناخته می‌شوند، به پدیده‌های تغییر شکل در فلزات با یک دید محیط پیوسته نگاه کرده و تغییر شکل را بدون در نظر گرفتن مکانیزم‌های تغییر شکل پلاستیک، به صورت یکنواخت فرض می‌کنند. این در حالی است که ناهمسانگردی ذاتی خواص الاستیک و پلاستیک تک کریستال‌ها در فرایند تغییر شکل فلزات بیانگر ناهمگنی تغییر شکل مواد در مقیاس میکرو می‌باشد. از این رو مواد پلی کریستال در مقیاس میکرو و مزو<sup>۳</sup> رفتار بسیار متفاوتی از آنچه در مقیاس ماکرو دارند را از خود نشان می‌دهند و این امر چالش برانگیز بودن پیش‌بینی پاسخ مکانیکی و تکامل درونی مواد کریستالی را بیان می‌کند [۱]. بدین صورت که تنش‌های محلی و کرنش‌های درون تک کریستال‌ها به صورت غیر یکنواخت و ناپیوسته هستند و تنش‌ها و کرنش‌ها نه تنها به جهت‌گیری تک کریستال‌ها بستگی دارند بلکه از محدودیت‌هایی که تک کریستال‌های مجاور ایجاد می‌کنند نیز تأثیر می‌پذیرند. همچنین از آنجایی که تغییر شکل پلاستیک در مقیاس ماکروسکوپی، نیازمند ایجاد لغزش در سیستم‌های لغزشی فعال در مقیاس میکروسکوپی است [۲]؛ پس می‌توان برای بررسی پاسخ مکانیکی یک ماده کریستالی در مقیاس ماکرو، کریستال‌های آن ماده را با مدل‌سازی قوانین فیزیکی حاکم در مقیاس میکروسکوپی مورد بررسی قرار داده و نتایج را به کل ماده تعمیم داد [۱].

یکی از راه‌های شناسایی صحیح مقادیر پارامترهای تشکیل دهنده مواد برای پیش‌بینی پاسخ مکانیکی، استفاده از آزمون‌های تجربی تغییر شکل پلی کریستالی (ماکروسکوپی) مثل آزمون کشش یا فشار تک‌محوره برای توصیف مدل کریستال پلاستیسیته<sup>۴</sup> مواد است [۳]. در این روش، تعیین خواص تک کریستال‌ها مبتنی بر کالیبراسیون پارامترهایی است که خواص تک کریستال را با پاسخ‌های تنش-کرنش نتایج تجربی پلی کریستال‌های بارگذاری شده در جهت‌های مختلف و نتایج شبیه‌سازی‌های المان محدود آنها بر اساس روش‌های

میدان میانگین یا همگن‌سازی محاسباتی<sup>۵</sup> برآزش می‌کنند [۴]. از مطالعات انجام شده در این زمینه می‌توان به پژوهش لی و همکاران (۲۰۱۳) [۵] بر روی کالیبره کردن پارامترهای مدل کریستال پلاستیسیته با استفاده از آزمون‌های کشش تک‌محوره بر روی یک مدل کریستال پلاستیسیته با المان حجمی نماینده<sup>۶</sup> سه بعدی اشاره کرد.

در این میان مدل کریستال پلاستیسیته به عنوان یک رویکرد مستقیم‌تر با احتساب ناهمسانگردی ذاتی خواص الاستیک و پلاستیک ماده در سطح کریستال‌ها (مقیاس مزو) و خطوط لغزش، در محاسبات و پیش‌بینی‌های پاسخ مکانیکی مواد کریستالی موفق عمل کرده و ابهامات ایجاد شده در اثر تغییر شکل و برهم‌کنش‌های هم‌زمان چندین کریستال را از بین برده است [۴]. گرچه پیچیدگی توصیف اساسی تغییر شکل و سینتیک ساختار در بین رویکردهای مختلف کریستال پلاستیسیته متفاوت است، اما دقت پیش‌بینی پاسخ مکانیکی برای همه آنها تا حد زیادی بستگی به شناسایی صحیح مقادیر پارامترهای سازنده دارد. رویکرد مقایسه شبیه‌سازی‌های عددی از مقیاس ماکرو تا مقیاس نانو مثل مقایسه مدل‌های کریستال پلاستیسیته با شبیه‌سازی‌های اتمی از جمله رویکردهایی است که به منظور استخراج مقادیر پارامترهای سازنده جهت پیش‌بینی رفتار مواد کریستالی به طور گسترده توسط محققین استفاده شده است [۶-۹]. از دیگر رویکردها، ترکیب شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته و آزمون نانو فروروندگی<sup>۷</sup> برای استخراج خواص الاستوپلاستیک مواد، از اندازه‌گیری‌های بار-جابجایی و توپوگرافی سطح است. در این رویکرد، شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته به سبب مزیت‌هایی که دارد، امکان آنالیز مکانیسم تغییر شکل دقیق ناحیه داخلی فرورفتگی را که به سبب ایجاد کرنش غیر یکنواخت، تغییر شکل نسبتاً پیچیده‌ای دارد، فراهم می‌کند و درک نسبتاً جامعی از فرآیند نانو فروروندگی را ارائه می‌دهد [۱۰].

در میان تحقیقات انجام شده در مورد به کارگیری آزمون‌های نانو فروروندگی به عنوان روشی برای تعیین خواص

<sup>6</sup> Representative Volume Element (RVE)

<sup>7</sup> Nanoindentation

<sup>1</sup> Johnson-Cook

<sup>2</sup> Phenomenological Plasticity

<sup>3</sup> Meso

<sup>4</sup> Crystal Plasticity

<sup>5</sup> Computational Homogenization

داده‌های شبیه‌سازی شده و تجربی تعیین کردند و صحت پارامترهای کالیبره شده را با تطابق منحنی‌های شبیه‌سازی شده با منحنی‌های تجربی تأیید کردند.

همانطور که بحث شد، مواد پلی کریستال در مقیاس میکرو و مزو رفتار بسیار متفاوتی از آنچه در مقیاس ماکرو دارند را از خود نشان می‌دهند. این امر چالش برانگیز بودن مشخصه‌یابی پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی و تکامل درونی مواد کریستالی را با آزمون‌های مرسوم نظیر آزمون کشش و فشار بیان می‌کند [۱]. تاکنون مطالعات متعددی در رابطه با مشخصه‌یابی و تعیین پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی مواد مختلف از جمله آلومینیوم خالص با ترکیب آزمون نانو فروروندگی و آزمون کشش انجام شده است [۱۶]؛ اما برای آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰، صرفاً به پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی مستخرج از نتایج آزمون کشش و فشار اکتفا شده است [۱۷-۱۹]. نوآوری این پژوهش، ترکیب آزمون نانو فروروندگی تجربی و شبیه‌سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی برای مشخصه‌یابی پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ با احتساب تقارن بازتابی در هر بخش چرخشی در جهات کریستالی [۲۰] و [۱۱۰]، با بررسی ضریب اصطکاک به‌عنوان یکی از عوامل تأثیرگذار بر مشخصه‌یابی پارامترها و اعتبارسنجی پارامترهای مشخصه‌یابی شده به‌وسیله شبیه‌سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی آزمون کشش تک‌محوری بر روی مدل‌های تک کریستال و پلی کریستال می‌باشد.

## ۲- اصول تئوری و روش حل معادلات کریستال

### پلاستیسیته اجزا محدود

#### ۲-۱- اصول تئوری کریستال پلاستیسیته

اصول تئوری کریستال پلاستیسیته مبتنی بر تئوری تغییر شکل الاستو-ویسکوپلاستیک است که به‌طور گسترده برای نمایش جریان نابجایی‌ها در امتداد سیستم‌های لغزشی در فلزات کریستالی برحسب تنش برشی مؤلفه شده<sup>۴</sup>، استفاده می‌شود. این تئوری به مطالعات رایس [۲۰]، پیرس [۲۱] و

مواد، می‌توان به پژوهش لیو و همکاران [۱۱] بر روی تعیین خواص مکانیکی تک کریستال مس در مقیاس مزو، با به‌کارگیری ترکیبی شبیه‌سازی عددی و نانو فروروندگی اشاره نمود. آنها با استفاده از پارامترهای مزو پلاستیک<sup>۱</sup> استخراج شده از روش برازش منحنی‌های بار-جابجایی، رابطه تنش- کرنش تک کریستال مس را در مقیاس مزو تعیین کردند. بر اساس نتایجی که به‌دست آوردند، گزارش کردند که رویکرد ترکیبی نانو فروروندگی/روش اجزا محدود پاسخ مکانیکی را از سطح میکرو تا سطح ماکرو به‌خوبی پیش‌بینی می‌کند. وو (Wu) و همکاران [۱۲] مطالعه‌ای را در مورد پیش‌بینی پلاستیسیته و رفتار شروع آسیب فولاد C45E+N با مدل‌سازی میکرومکانیکی انجام دادند. هدف تحقیقاتشان، توسعه روشی برای ادغام تأثیر ویژگی‌های میکرو در کالیبراسیون پارامترهای یک مدل مکانیک آسیب وابسته به حالت تنش برای فولاد C45 بود. آنها توانستند مدل کریستال پلاستیسیته ارائه‌شده‌شان را با در نظر گرفتن عوامل تأثیرگذاری نظیر نرخ کرنش، اندازه دانه و ضریب اصطکاک به‌وسیله‌ی اندازه‌گیری‌های پاسخ‌های منحنی بار-جابجایی در آزمون نانو فروروندگی با موفقیت کالیبره کنند. هم‌کویست و نایرن [۱۳] یک مدل عددی نانو فروروندگی را با استفاده از روش نقطه ماده<sup>۲</sup> برای انجام آنالیز معکوس باهدف استخراج خواص دقیق‌تر مواد از آزمایش‌های نانو فروروندگی توسعه دادند و این روش را به‌عنوان روشی کارآمد برای شناسایی پارامترهای مواد به‌وسیله‌ی برازش منحنی‌های بار-جابجایی با آزمایش‌ها پیشنهاد دادند. عین‌القضاتی و عاصم‌پور [۱۴] با استفاده از روش کریستال پلاستیسیته، رفتار ورق‌های فولادی کروی شده و تأثیرات ویژگی‌های ریزساختار در رفتار آن را مورد مطالعه قرار دادند. آنها هریک از متغیرهای سخت‌شوندگی را با استفاده از شبیه‌سازی کریستال پلاستیسیته آزمون کشش تک‌محوری با تغییر هر یک از سطوح پیش‌بینی شده برای آنها، با منحنی تجربی تنش-کرنش مورد مقایسه قرار دادند و بدین ترتیب متغیرهای سخت‌شوندگی را کالیبره کردند. یین و همکاران [۱۵] پارامترهای تشکیل‌دهنده کریستال پلاستیسیته فاز  $\alpha_2$  در آلیاژ تیتانیوم آلومینیوم<sup>۳</sup> را با برازش منحنی‌های بار-جابجایی

<sup>3</sup> TiAl

<sup>4</sup> Resolved Shear Stress

<sup>1</sup> Mesoplastic

<sup>2</sup> Material Point Method (MPM)

در این مقاله از قانون سخت‌شوندگی پیرس و همکاران [۲۳] که خود سخت‌شوندگی و سخت‌شوندگی مکمل سیستم‌های لغزشی را برای شناسایی اثر سخت‌شوندگی در مواد کریستالی پیشنهاد می‌کند، استفاده شده است. این دو نوع سخت‌شوندگی به صورت رابطه (۳) تعریف می‌شوند.

$$\begin{cases} h_{\alpha\alpha} = h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| & (\alpha = \beta) \\ h_{\alpha\beta} = qh(\gamma) & (\alpha \neq \beta) \end{cases} \quad (3)$$

در رابطه (۳)  $h_0$  نشان‌دهنده مدول سختی اولیه،  $\tau_0$  تنش تسلیم اولیه،  $\tau_s$  تنش اشباع (تنش مرحله  $I$ )،  $\gamma$  کرنش برشی انباشته شده تیلور در تمامی سیستم‌های لغزش و پارامتر  $q$  نسبت سخت‌شوندگی مکمل به خود سخت‌شوندگی است و درجه برهمکنش سیستم‌های لغزش را مشخص می‌کند.  $\gamma$  از رابطه (۴) به دست می‌آید [۲۱].

$$\gamma = \sum_{\alpha=0} \int_0^t |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (4)$$

## ۲-۲- روش حل معادلات کریستال پلاستیسیته اجزاء محدود

از آنجایی که مدل ماده‌ی کریستال پلاستیسیته در نرم‌افزار آباکوس تعریف نشده است، این مدل ماده باید در قالب کد زیربرنامه UMAT<sup>۲</sup> که از قابلیت‌های نرم‌افزار آباکوس برای تعریف مدل مواد جدید می‌باشد، به کار گرفته شود. این کد قابلیت انجام تحلیل‌های تغییر شکل‌های کوچک، تغییر شکل‌های بزرگ با به‌کارگیری تئوری کرنش محدود و چرخش محدود را دارا می‌باشد. همچنین امکان انجام تحلیل‌های تنش کریستال‌ها در نرم‌افزار آباکوس را فراهم می‌کند. در این کد نمو استحکام لغزشی، کرنش‌های برشی، بردار عمود بر صفحات لغزش، جهات لغزش و کرنش برشی کل به‌عنوان متغیرهای حالت وابسته به حل در نظر گرفته شده‌اند.

روش حل معادلات کریستال پلاستیسیته اجزاء محدود به‌گونه‌ای است که در هر کرنش معین و در هر مرحله از تکرار، کد UMAT فراخوانی می‌شود و پس از تعیین مقادیر اولیه برای متغیرهای حالت، به محاسبه کرنش برشی با استفاده از روابط (۱) تا (۴) می‌پردازد و در ادامه مقادیر جدید کرنش برشی را با استفاده از این متغیرهای حالت محاسبه می‌کند. چنانچه

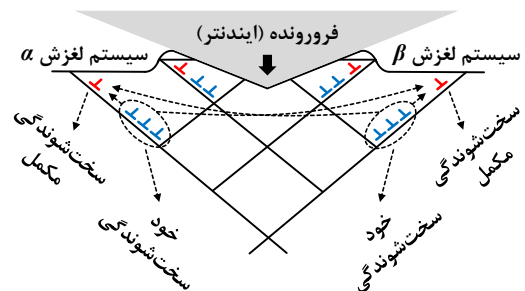
آسارو [۲۲] در زمینه تئوری کریستال پلاستیسیته برمی‌گردد. در چارچوب این تئوری، تانسور اشمید<sup>۱</sup> که نمایانگر ساختارهای تغییر شکل ابتدایی است، بر روی هر یک از صفحات لغزشی پیش‌بینی می‌شود. قانون توان ویسکو-پلاستیک برای نرخ کرنش برشی در سیستم لغزش آلفا ( $\alpha$ ) به صورت رابطه (۱) بیان می‌شود [۲۱].

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left\{ \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right\}^n \quad (1)$$

در رابطه فوق  $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ ،  $\tau^{(\alpha)}$ ،  $g^{(\alpha)}$  و  $n$  به ترتیب نرخ کرنش برشی، نرخ کرنش برشی مرجع (اولیه)، تنش برشی مؤلفه شده، استحکام لغزشی سیستم لغزش آلفا ( $\alpha$ ) و پارامتر حساسیت نرخ کرنش هستند. معادله نمو استحکام  $g^{(\alpha)}$  بر اساس مدول‌های سخت‌شوندگی تعریف می‌شود و به صورت رابطه (۲) بیان می‌شود [۲۱].

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (2)$$

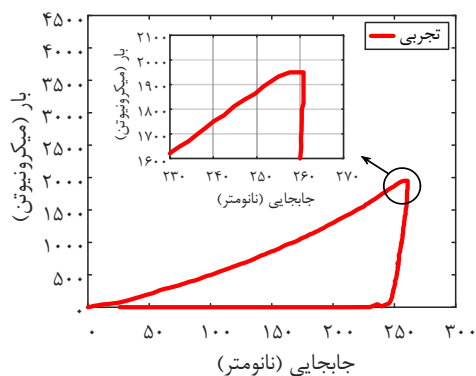
$h_{\alpha\beta}$  مدول سختی لغزش است و نماینده مجموع تنش‌های جریانی می‌باشد که بر نابجایی‌های متحرک در هر سیستم لغزشی اثر می‌کند. همچنین می‌توان مدول سختی لغزش را به خود سخت‌شوندگی ناشی از نابجایی‌ها که متعلق به همان سیستم لغزش است ( $\alpha=\beta$ ) و سخت‌شوندگی مکمل از نابجایی‌ها که به‌نوبه خود متعلق به سایر سیستم‌های لغزشی است ( $\alpha \neq \beta$ )، تقسیم کرد. شکل ۱ برهمکنش بین سیستم‌های لغزشی را در آزمون نانو فروروندگی نشان می‌دهد.



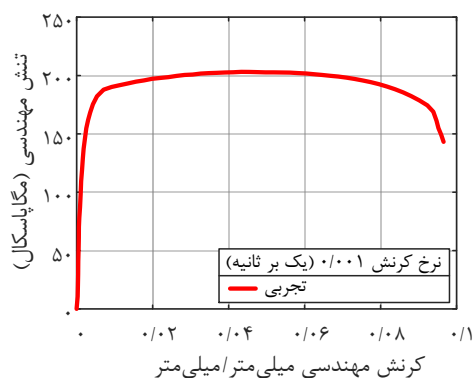
شکل ۱- برهمکنش بین سیستم‌های لغزشی در آزمون نانو فروروندگی.

<sup>2</sup> User MATerial Subroutine

<sup>1</sup> Schmid Tensor



(الف)



(ب)

شکل ۲- الف) منحنی بار-جابجایی حاصل از آزمون تجربی نانو فروروندگی و ب) منحنی تنش-کرنش مهندسی حاصل از آزمون کشش تک‌محوری تجربی نمونه آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ مرجع [۲۵].

شد. این ابعاد با احتساب جلوگیری از بروز اثر لبه محاسبه شده که بدین منظور ابعاد نمونه استوانه‌ای در راستای شعاع ۲۰ برابر و در راستای طول ۱۵ برابر حداکثر عمق فرورفتگی (۲۶۰ نانومتر) می‌باشد (شکل ۳ الف)). با توجه به تقارن بازتابی در هر بخش چرخشی در جهات کریستالی [۰۰۱] و [۱۱۰]، فرآیند مدل‌سازی ساده‌سازی شد؛ بدین‌صورت که یک‌هشتم نمونه برای انجام شبیه‌سازی فرورفتگی‌های صفحه (۰۰۱) استفاده شد (شکل ۳ ب)).

از آنجایی که در کریستال‌های آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰، لغزش در صفحات (۱۱۱) و در جهات [۱۱۰] رخ می‌دهد؛ مجموعه سیستم لغزش [۱۱۰] (۱۱۱) که دارای ۱۲ سیستم لغزش

اختلاف میان این دو کرنش برشی از میزان ترم خطای تعریف‌شده در ورودی کوچک‌تر باشد، حل را پایان داده و به محاسبه ماتریس ژاکوبین و مقادیر تنش‌ها خواهد پرداخت. در نهایت از کد خارج‌شده و حل را در نرم‌افزار اجزا محدود آباکوس ادامه می‌دهد و این روند به‌صورت مکرر تا پایان حل ادامه می‌یابد. جزئیات روش حل معادلات کریستال پلاستیسیته اجزا محدود در مرجع [۲۴] تشریح شده است.

### ۳- شبیه‌سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته

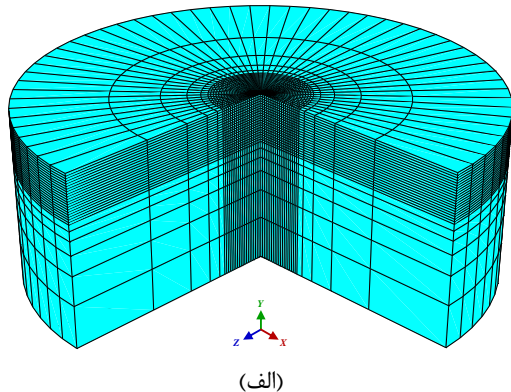
#### سه‌بعدی

هدف اصلی این مقاله بررسی پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ بر اساس پاسخ‌های نانو فروروندگی است؛ بنابراین، مطالعات تجربی برای به دست آوردن پاسخ‌های نانو فروروندگی ذاتی ماده حیاتی است. به همین جهت در این بخش، آزمون نانو فروروندگی بر روی مدل تک‌کریستال و آزمون کشش تک‌محوری بر روی مدل‌های تک کریستال و پلی‌کریستال آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ به روش اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی بر اساس شرایط آزمون‌های تجربی مرجع [۲۵] شبیه‌سازی شده است و از این‌رو نتایج حاصل از آزمون‌های تجربی مرجع [۲۵] به‌عنوان نتایج تجربی این پژوهش پذیرفته شده است. منحنی بار-جابجایی حاصل از آزمون تجربی نانو فروروندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ در شکل ۲ الف) نشان داده شده است که بر اساس آن حداکثر عمق فرورفتگی در آزمون‌ها ۲۶۰ نانومتر با اعمال بار فرورفتگی ۱۹۴۹ میکرونیوتن گزارش شده است. همچنین منحنی تنش-کرنش مهندسی حاصل از آزمون کشش تک‌محوری تجربی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ در شکل ۲ ب) نمایش داده شده است [۲۵].

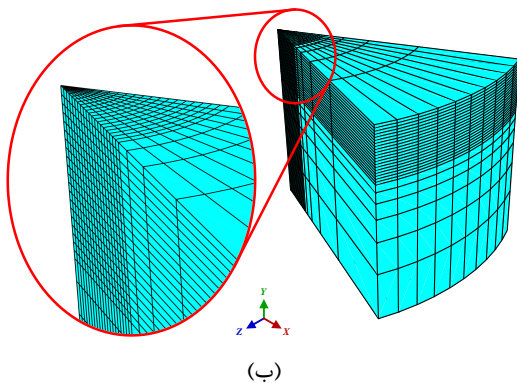
### ۳-۱- شبیه‌سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته

#### سه‌بعدی آزمون نانو فروروندگی

به‌منظور شبیه‌سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی آزمون نانو فروروندگی، فرورونده مخروطی با زاویه مخروطی ۷۰/۳ درجه و با شعاع نوک ۲۰۰ نانومتر در محیط آباکوس به‌صورت صلب مدل‌سازی شد و نمونه استوانه‌ای با قطر ۰/۰۱۰۴ میلی‌متر و طول ۰/۰۰۳۹ میلی‌متر در نظر گرفته



(الف)

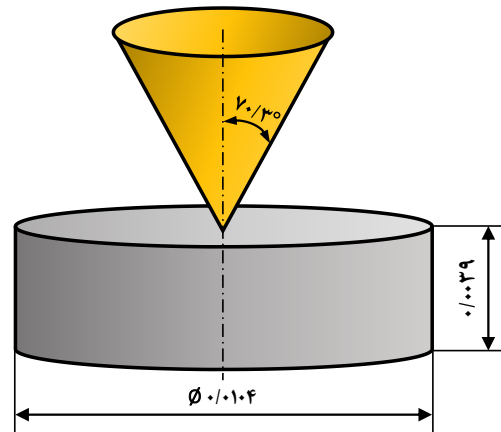


(ب)

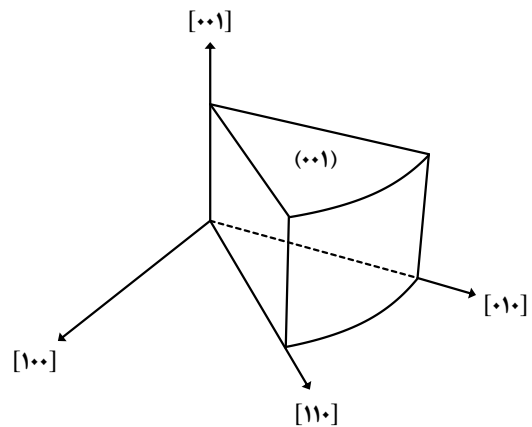
شکل ۴- مش اجزاء محدود سه‌بعدی نمونه (الف) کامل و (ب) ساده‌سازی شده.

تغییر شکل قابل توجه نیست؛ لذا نسبت بالای ابعاد المان مشکلی در تحلیل شبیه‌سازی ایجاد نمی‌کند. شکل ۴ (الف) مش اجزاء محدود سه‌بعدی مدل استوانه‌ای کامل (بدون ساده‌سازی) و شکل ۴ (ب) مش اجزاء محدود سه‌بعدی مدل استوانه‌ای ساده‌سازی شده را نشان می‌دهد. یک چهارم مدل استوانه‌ای بدون ساده‌سازی در شکل ۴ (الف) جهت مشاهده مش داخل مدل (ناحیه زیر فرورونده) بریده شده است.

برای اعمال شرایط مرزی، گره‌های سطح پایین در امتداد جهت فرورونده محدود شدند، اما اجازه داده شده تا آزادانه در جهت عمود بر جهت فرورونده، حرکت کنند. دو صفحه متقارن از استوانه فقط می‌توانند در داخل صفحات خود جابجا شوند. جابجایی عمودی فرورونده با نرخ بارگذاری ۶۵ میکرونیوتن بر ثانیه و به‌عنوان عمق فرورفتگی تا عمقی مطابق آزمون تجربی (۲۶۰ نانومتر)، تنظیم شد. شرایط مرزی اعمال شده برای شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی آزمون



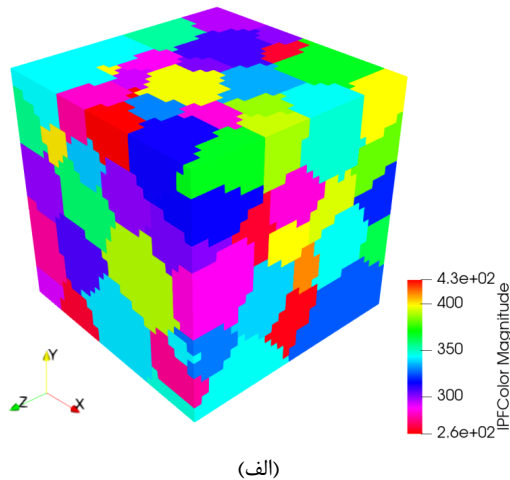
(الف)



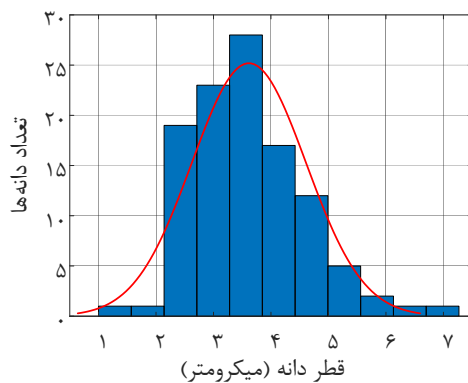
(ب)

شکل ۳- نمای شماتیک (الف) مدل آزمون نانو فروروندگی همراه با ابعاد نمونه و فرورونده (برحسب میلی‌متر) و (ب) مدل ساده‌سازی شده به سبب تقارن بازتابی در هر بخش چرخشی در جهات کریستالی [۰۰۱] و [۱۱۰].

متفاوت است برای شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته در نظر گرفته شد. برای مش بندی نمونه از المان‌های ۸ گرهی C3D8R و ۶ گرهی C3D6 استفاده شد. از آنجایی که تمرکز اصلی در آزمون نانو فروروندگی، ناحیه زیر فرورونده است، از مش بسیار ظریف در نزدیکی نوک فرورونده و مش درشت‌تر برای ناحیه باقی‌مانده استفاده شد. بدین ترتیب نسبت ابعاد المان در محل فرورفتگی رعایت شده و نزدیک ۱ است. در فاصله‌های دور از ناحیه زیر فرورونده، با توجه به اینکه



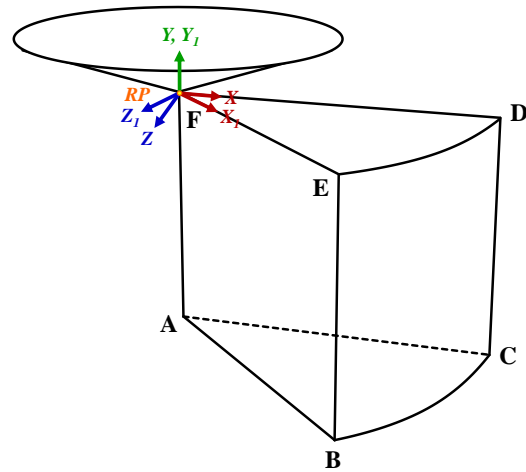
(الف)



(ب)

شکل ۶- الف) نمای المان حجمی نماینده تولیدشده شامل ۱۱۰ دانه با جهات کریستالی متفاوت و ب) هیستوگرام توزیع اندازه دانه‌های المان حجمی.

کریستالی مشابه با دانه‌های پلی کریستال واقعی باشند. به منظور مدل سازی مدل پلی کریستال، المان حجمی نماینده میکرو ساختار سه بعدی پلی کریستالی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ با ابعاد  $0.3 \times 0.3 \times 0.3$  میلی متر و با ۱۱۰ دانه به وسیله نرم افزار Dream.3D تولید شد. این المان حجمی نماینده در شکل ۶ الف) و هیستوگرام توزیع اندازه دانه‌های آن، که اندازه دانه‌ها در آن به صورت تصادفی تعیین شده است، در شکل ۶ ب) نشان داده شده است. برای مشخص بندی از المان‌های خطی هگزاهدردال C3D8 استفاده شد و تعداد المان‌های مدل برابر با ۲۷۰۰۰ المان می باشد. از آنجایی که در این شبیه سازی از مدل پلی کریستال استفاده شده است، لازم است که تفاوت جهت گیری کریستالی دانه‌ها که به صورت تصادفی ایجاد شده اند



$U_{ABC}^{X,Y,Z} = 0$	$U_{R_{ABC}}^{X,Y,Z} = 0$	$U_{R_{P_{initial}}}^Y = \text{آزاد}$
$U_{R_{P_{load}}}^Y = -0.00026$	$U_{R_{P_{unload}}}^Y = 0.00026$	
$U_{\overline{FD}, \overline{DC}}^Z = 0$	$U_{\overline{FD}, \overline{DC}}^{X,Y} = 0$	$U_{\overline{FE}, \overline{EB}}^{Z_1} = 0$
$U_{\overline{FE}, \overline{EB}}^{X_1, Y_1} = 0$	$U_{\overline{FA}}^{Y_1, Z_1} = 0$	$U_{\overline{FA}}^{X_1} = 0$

شکل ۵- شرایط مرزی اعمال شده برای شبیه سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه بعدی آزمون نانو فروروندگی.

نانو فروروندگی در شکل ۵ تشریح شده است. نتایج حاصل از این شبیه سازی در بخش ۴ شرح داده خواهد شد و مورد بحث قرار خواهد گرفت.

### ۳-۲- شبیه سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه بعدی آزمون کشش تک محوری

آزمون کشش تک محوری برای اعتبارسنجی پارامترهای جریان و سخت شوندگی مستخرج به کار گرفته شد. آزمون کشش تک محوری به روش اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه بعدی، هم بر روی مدل تک کریستال و هم بر روی مدل پلی کریستال شبیه سازی شده است. ابتدا به تشریح شبیه سازی آزمون کشش تک محوری مدل پلی کریستال پرداخته می شود که برای این مدل باید المان حجمی نماینده با همان خواص پلی کریستال واقعی تولید شود. منظور از المان حجمی نماینده، مجموعه ای از دانه‌های پلی کریستال است که دارای جهت گیری

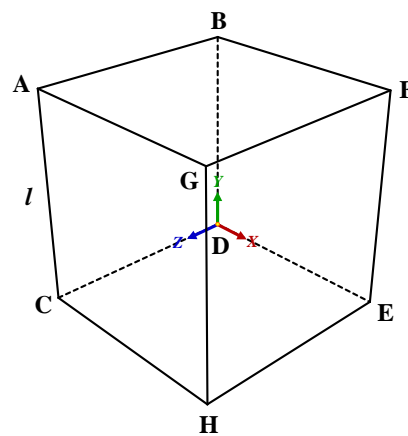
سه‌بعدی آزمون کشش تک‌محوری همانند شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی آزمون نانو فروروندگی، برای هر دو مدل تک‌کریستال و پلی‌کریستال استفاده شد. برای اعمال شرایط مرزی، هر دو مدل در صفحات تقارن، در سه جهت اصلی مقید شده‌اند که در شکل ۷ تشریح شده است. در نهایت مدل‌های ایجاد شده تحت شبیه‌سازی کشش تک‌محوره با نرخ کرنش  $0.01$  یک بر ثانیه مطابق آزمون تجربی مرجع [۲۵] قرار گرفتند. نتایج حاصل از این شبیه‌سازی‌ها در بخش ۴ شرح داده خواهند شد و مورد بحث قرار خواهند گرفت.

### ۳-۳- سطوح آزمایش

در این مقاله، پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ با تعیین مجموعه‌ای از خواص موادی که تطابق نتایج شبیه‌سازی بهتری با داده‌های تجربی هدف دارند، تعیین می‌شوند؛ از این رو، می‌توان از یک طرح آزمایشی معروف یک فاکتور در یک زمان<sup>۲</sup> استفاده کرد که امکان کاوش شرایط پارامترها را با تغییر سطوح در یک زمان فراهم می‌کند [۲۶]. روش یک فاکتور در یک زمان، رویکرد آزمایشی مورد استفاده در انجام این پژوهش است که در آن تنها یک عامل در یک زمان تغییر می‌کند، در حالی که عوامل دیگر ثابت نگه‌داشته می‌شوند؛ بنابراین، تنها با تغییر یک پارامتر برای هر شبیه‌سازی می‌توان تأثیر هر یک از پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی را مشاهده کرد.

در جدول ۱، مقادیر سه سطح در نظر گرفته شده هر یک از پارامترهای جریان شامل  $\dot{\gamma}_0^{(a)}$  نرخ کرنش برشی مرجع (اولیه) و  $n$  پارامتر حساسیت نرخ کرنش و پارامترهای سخت‌شوندگی شامل  $h_0$  مدول سختی اولیه،  $\tau_0$  تنش تسلیم اولیه،  $\tau_s$  تنش اشباع و پارامتر  $q$  نسبت سخت‌شوندگی مکمل به خود سخت‌شوندگی ذکر شده است. مقدار مدول الاستیسیته بر اساس داده‌های تجربی [۲۷] منحنی بار-جابجایی برابر  $79/84$  گیگاپاسکال و ضریب پواسون  $0.33$  در نظر گرفته شد. همچنین تأثیر ضریب اصطکاک در تعیین پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی در سه سطح مورد بررسی قرار گرفت.

در تحلیل مشاهده شود. بدین منظور تفاوت جهت‌گیری کریستالی دانه‌ها از طریق کانتور نمودار قطبی معکوس<sup>۱</sup> در مدل اجزاء محدود شکل ۶ (الف) قابل تشخیص است که هر طیف رنگی نمایانگر یک جهت‌گیری کریستالی متمایز است. در شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی آزمون کشش تک‌محوری مدل تک‌کریستال آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰، ابعاد مدل تک‌کریستال برابر با میانگین اندازه دانه تولید شده در مدل پلی‌کریستال در نظر گرفته شد. بدین ترتیب، ابعاد مدل تک‌کریستال  $0.036 \times 0.036 \times 0.036$  میلی‌متر با ابعاد مدل پلی‌کریستال C3D8 و تعداد المان‌های  $1000$  المان اتخاذ شد. جهت کریستالی مدل تک‌کریستال، [۰۰۱] و مطابق با شبیه‌سازی آزمون نانو فروروندگی در نظر گرفته شد. همچنین لازم به ذکر است که مدل تک‌کریستال در شبیه‌سازی آزمون کشش تک‌محوری در این جهت کشیده شد. با توجه به لغزش کریستال‌های آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ در صفحات (۱۱۱) و در جهات [۱۱۰]، از مجموعه سیستم لغزش [۱۱۰][۱۱۱] در شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته



$U_{ABCD}^x = \cdot$	$U_{CDEH}^y = \cdot$	$U_{BDEF}^z = \cdot$
$U_{ABFG}^y = 0.16 l$		

شکل ۷- شرایط مرزی اعمال شده برای شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی آزمون کشش تک‌محوری.

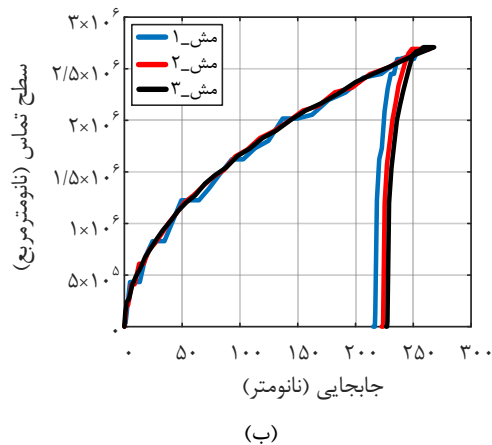
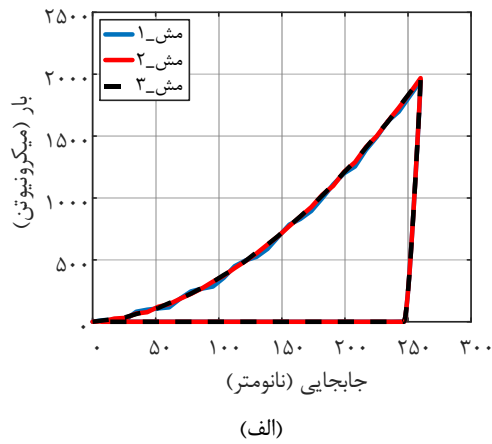
<sup>2</sup> One Factor At a Time (OFAT)

<sup>1</sup> Inverse Pole Figure (IPF)



جدول ۱- پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی و سطوح انتخاب‌شده در آزمایش.

پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی	سطح ۱	سطح ۲	سطح ۳
$n$	۸	۱۲	۲۰
$\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ (یک بر ثانیه)	۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۰۱	۰/۰۱
$h_0$ (مگاپاسکال)	۱۲۰	۲۴۰	۳۶۰
$\tau_s$ (مگاپاسکال)	۱۰۵	۲۱۰	۳۱۵
$\tau_0$ (مگاپاسکال)	۹۰	۱۸۰	۲۷۰
$q$	۱	۱/۴	۲
$FC$	۰	۰/۳	۰/۶



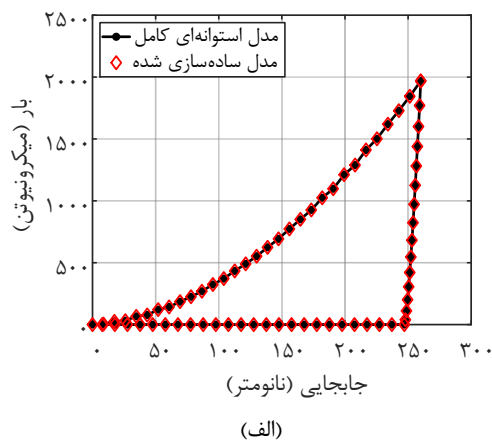
#### ۴- نتایج و بحث

##### ۴-۱- حساسیت مش

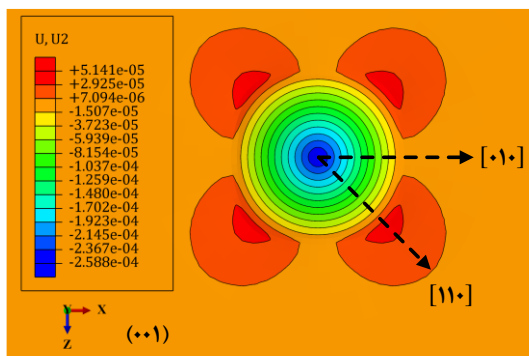
برای شبیه‌سازی آزمون نانوفروروندگی از سه دسته اندازه المان مختلف در ناحیه فرورفتگی برای بررسی حساسیت مش استفاده شد: ۱۱ نانومتر (مش\_۱)، ۵/۵ نانومتر (مش\_۲) و ۳/۶ نانومتر (مش\_۳). تعداد کل المان‌های مدل در مش\_۱، مش\_۲ و مش\_۳ هم به ترتیب ۹۶۰۰، ۴۴۲۰۰ و ۱۲۶۰۰۰ المان می‌باشد. منحنی‌های بار-جابجایی شبیه‌سازی شده برای هر یک از اندازه المان‌ها در شکل ۸ مقایسه شده است. برای مش\_۱ با بزرگترین اندازه المان (۱۱ نانومتر)، دامنه نوسانات در منحنی بار-جابجایی بزرگتر از دو حالت دیگر است که به ناپایداری شکل المان تحت بار تماسی برمی‌گردد. گرچه منحنی‌های سطح تماس-جابجایی مش\_۲ با مش\_۳ با یکدیگر انطباق صددرصدی ندارند (شکل ۸ (ب))، اما اثر نوسانی در منحنی بار-جابجایی به سرعت با کاهش اندازه مش کاهش یافته است، به طوری که مش‌های متوسط و ریز نتایج تقریباً یکسانی تولید کرده و مستقل از حساسیت مش هستند. نتایج حاصل از مش\_۲ در مقایسه با مش\_۳ قابل قبول است. علاوه بر این، زمان اجرای هر آزمایش با مش\_۲ بسیار کمتر از مش\_۳ است؛ بنابراین، مش\_۲ برای همه شبیه‌سازی‌های آزمون نانو فروروندگی در نظر گرفته شده است.

شکل ۸- نتایج آزمون همگرایی مش در الف) منحنی‌های بار-جابجایی و ب) منحنی‌های سطح تماس-جابجایی.

با توجه به اینکه در شبیه‌سازی‌های اجزا محدود کریستال پلاستیسیته مدل تک کریستال، در جهت کریستالی [۰۰۱] تغییر شکل به صورت همگن اتفاق می‌افتد؛ بنابراین حساسیت مش وجود ندارد [۲۸]. بدین ترتیب نیازی به بررسی حساسیت مش در شبیه‌سازی آزمون کشش تک‌محوری مدل تک کریستال آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ وجود ندارد. در شبیه‌سازی‌های اجزا محدود کریستال پلاستیسیته مدل پلی کریستال، هر یک از دانه‌ها توسط بسیاری از المان‌ها گسسته می‌شوند تا ناهمگنی‌های درون دانه‌ها را با دقت حل نمایند؛ بنابراین، تعداد المان‌ها در هر دانه معیار مهمی در حساسیت مش علاوه بر تعداد کل المان در کل مدل پلی کریستال است. علاوه بر این تعداد کل دانه‌ها و توزیع اندازه دانه‌های المان



(الف)



(ب)

شکل ۹- الف) مقایسه منحنی‌های بار-جابجایی تولیدشده از شبیه‌سازی با مدل ساده‌سازی شده و مدل استوانه‌ای کامل؛ ب) پروفیل سطح ناشی از نانو فروروندگی در مرحله اتمام بارگذاری در صفحه (۰۰۱) مدل استوانه‌ای کامل.

شکل ۹ ب)، پروفیل سطح ناشی از نانو فروروندگی را در مرحله اتمام بارگذاری در صفحه (۰۰۱) مدل استوانه‌ای کامل نمایش می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، مدل به‌درستی در جهات کریستالی [۰۰۱] و [۱۱۰]، ساده‌سازی شده است. به‌طوری‌که انباشتگی‌ها با توجه به تقارن بازتابی در هر بخش چرخشی در جهات کریستالی [۰۰۱] و [۱۱۰]، پدیدار شده اند.

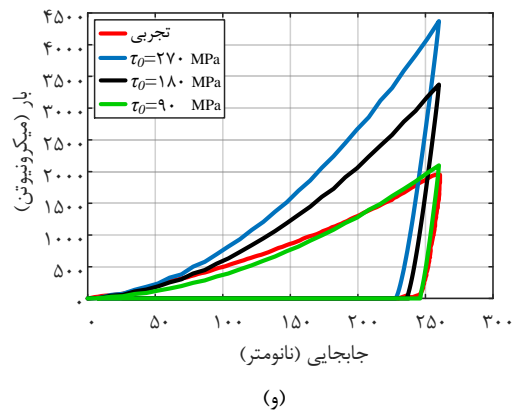
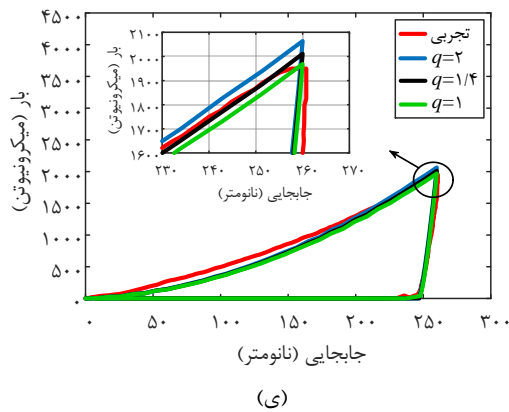
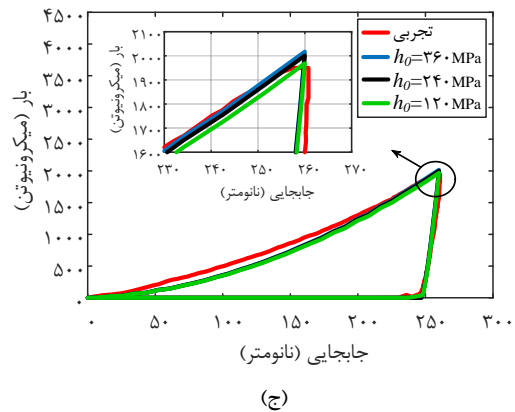
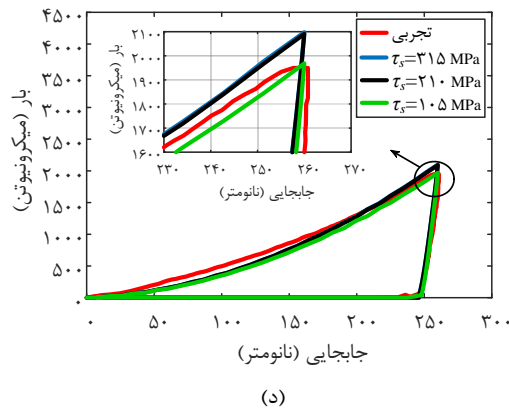
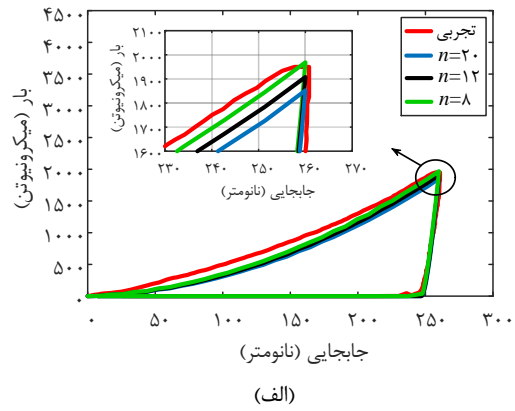
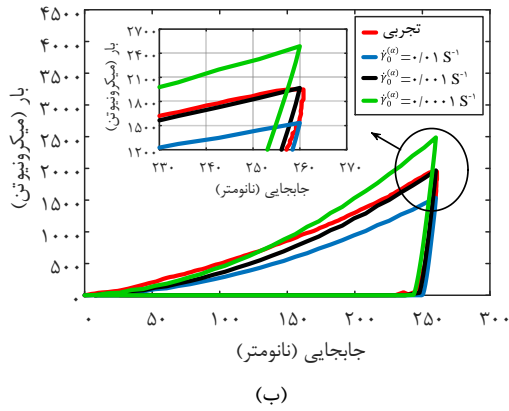
۳-۴- مشخصه‌یابی پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی در این بخش رویکرد تعیین هر یک از پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ با ترکیب آزمون نانو فروروندگی و شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته

حجمی در مدل پلی کریستال نیز نتایج خروجی شبیه‌سازی را تحت‌الشعاع قرار می‌دهند. بدین منظور در شبیه‌سازی آزمون کشش تک‌محوری مدل پلی کریستال آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰، بهینه‌ترین تعداد المان‌ها در هر دانه، تعداد کل دانه‌ها و توزیع اندازه دانه‌های المان حجمی، از نظر دقت و سرعت محاسباتی بر اساس نتایج مرجع [۲۸] مورد بررسی قرار گرفتند و انتخاب شدند. به‌طوری‌که تعداد المان‌ها در هر دانه، تعداد کل دانه‌ها و توزیع اندازه دانه‌های المان حجمی، به ترتیب  $6^3$  المان در هر دانه (به‌طور میانگین)، ۱۱۰ دانه و توزیع اندازه دانه‌ها به‌صورت نرمال انتخاب شدند. انتظار می‌رود که بر اساس نتایج مرجع [۲۸]، میزان خطای نسبی حاصل از این اتخاذها، برای تعداد المان‌ها در هر دانه و تعداد کل دانه‌ها در کرنش ۰/۰۵ در شبیه‌سازی آزمون کشش تک‌محوری مدل پلی کریستال، به ترتیب ۸-۶٪ و ۱-۱/۵٪ باشد.

#### ۴-۲- صحت نتایج مدل ساده‌سازی شده

آزمایش اعتبار عددی شرایط مرزی متقارن اعمال شده بر یک بخش زاویه‌ای از ناحیه استوانه‌ای در مرکز محور تورفتگی برای صحت نتایج مدل ساده‌سازی شده، انجام شد (شکل ۵). بدین منظور، یک سری شبیه‌سازی مقایسه‌ای با استفاده از مدل ساده‌سازی شده (یک‌هشتم مدل استوانه‌ای کامل) و مدل استوانه‌ای کامل انجام شد. از مش ۲ برای مش بندی هر دو مدل استفاده شد، با این توضیح که به سبب یک‌هشتم بودن مدل ساده‌سازی شده نسبت به مدل استوانه‌ای کامل، تعداد المان‌های مدل ساده‌سازی شده نیز، یک‌هشتم مدل استوانه‌ای کامل می‌باشد.

مطابقت خوبی بین منحنی‌های بار-جابجایی برای هر دو مجموعه شرایط مرزی به‌دست آمد که در شکل ۹ الف) نمایش داده شده است. به‌طوری‌که میانگین و ماکزیمم خطای نسبی نقاط در مدل ساده‌سازی شده نسبت به مدل استوانه‌ای کامل، به ترتیب  $0.0004\%$  و  $0.14\%$  می‌باشد. بر این اساس از مدل ساده‌سازی شده برای همه شبیه‌سازی‌های آزمون نانو فروروندگی استفاده شد؛ چراکه تعداد المان‌های مدل ساده سازی شده از ۴۴۲۰۰ المان در مدل استوانه‌ای کامل به ۵۵۲۵ المان کاهش یافت و این امر منجر به افزایش سرعت محاسباتی شد.



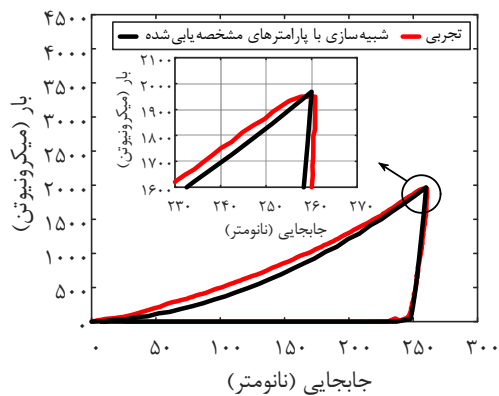
شکل ۱۰- تأثیر پارامترهای الف) حساسیت نرخ کرنش، ب) نرخ کرنش برشی مرجع، ج) مدول سختی اولیه، د) تنش اشباع، و) تنش تسلیم اولیه و ی) نسبت سخت‌شوندگی بر منحنی‌های بار-جابجایی شبیه‌سازی شده و مقایسه با منحنی بار-جابجایی تجربی مرجع [۲۵].

سخت‌شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ مشخص شدند که در جدول ۲ آورده شده است.

شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته آزمون نانوفروروندگی با به‌کارگیری پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی مشخصه‌یابی شده برای آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ در جدول ۲، مجدداً انجام شده و منحنی بار-جابجایی حاصل در شکل ۱۱ (الف) نمایش داده شده است.

جدول ۲- پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی مشخصه‌یابی شده برای آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰.

مقدار	نماد	پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی
۸	$n$	حساسیت نرخ کرنش
۰/۰۰۱	$\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$	نرخ کرنش برشی مرجع (یک بر ثانیه)
۱۲۰	$h_0$	مدول سختی اولیه (مگاپاسکال)
۱۰۵	$\tau_s$	تنش اشباع (مگاپاسکال)
۹۰	$\tau_0$	تنش تسلیم اولیه (مگاپاسکال)
۱	$q$	نسبت سخت‌شوندگی مکمل به خود سخت‌شوندگی
۰	$FC$	ضریب اصطکاک

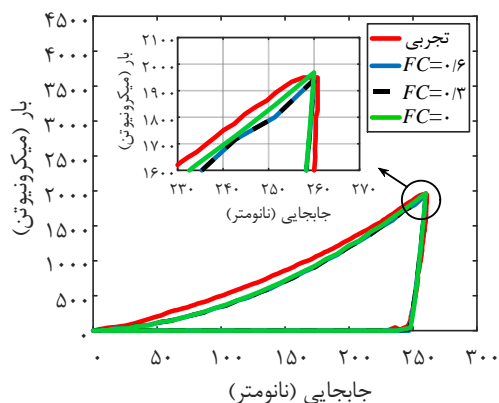


شکل ۱۱- منحنی بار-جابجایی شبیه‌سازی با پارامترهای مشخصه‌یابی شده و مقایسه با منحنی بار-جابجایی تجربی مرجع [۲۵].

سه‌بعدی تشریح شده است. شکل ۱۰ اثر پارامترهای جریان شامل  $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$  نرخ کرنش برشی مرجع (اولیه) و  $n$  پارامتر حساسیت نرخ کرنش و پارامترهای سخت‌شوندگی شامل  $h_0$  مدول سختی اولیه،  $\tau_0$  تنش تسلیم اولیه،  $\tau_s$  تنش اشباع و پارامتر  $q$  نسبت سخت‌شوندگی مکمل به خود سخت‌شوندگی را در منحنی‌های بار-جابجایی نمایش می‌دهد. تمامی این نمودارها شامل تغییرات در هر پارامتر نسبت به مقادیر ذکر شده در جدول ۱ هستند که برای حصول مقادیر مناسب هر پارامتر، منحنی‌های بار-جابجایی اعم از منحنی‌های حاصل از شبیه‌سازی و نتیجه تجربی در هر یک از نمودارها با یکدیگر مقایسه شدند.

با توجه به شکل‌های ۱۰ (الف)، (ج)، (د) و (ی) مشاهده می‌شود که منحنی‌های بار-جابجایی به‌طور قابل‌توجهی تحت تأثیر مقادیر  $n$  پارامتر حساسیت نرخ کرنش،  $h_0$  مدول سختی اولیه،  $\tau_s$  تنش اشباع و پارامتر  $q$  نسبت سخت‌شوندگی مکمل به خود سخت‌شوندگی نیستند. برای مثال، تغییر حساسیت نرخ کرنش از ۸ تا ۱۲ یا ۲۰ تغییر ملموسی در نتایج موردنظر ایجاد نمی‌کند اما با توجه به تطبیق بهتر حساسیت نرخ کرنش ۸ بر منحنی بار-جابجایی تجربی نسبت به سایر سطوح از این پارامتر، مقدار ۸ برای این پارامتر مشخص می‌شود (شکل ۱۰ (الف)). به‌طور مشابه، با تغییر پارامتر مدول سختی اولیه از ۱۲۰ مگاپاسکال تا ۲۴۰ و ۳۶۰ مگاپاسکال تغییر محسوسی دیده نمی‌شود (شکل ۱۰ (د)). شکل ۱۰ (ی) به‌وضوح نشان می‌دهد که منحنی بار-جابجایی به‌سختی تحت تأثیر تغییرات  $q$  بین ۱ و ۲ قرار می‌گیرد که این محدوده، محدوده فیزیکی مربوط به  $q$  را برای کریستال‌های FCC پوشش می‌دهد. البته تأثیر محسوس این پارامترها بر منحنی بار-جابجایی ممکن است به دلیل کسر سطحی کمتر تک‌کریستال در مقایسه با پلی‌کریستال‌ها هم باشد.

بر اساس شکل‌های ۱۰ (و) و (ب)،  $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$  نرخ کرنش برشی مرجع و  $\tau_0$  تنش تسلیم اولیه غالب‌ترین پارامترهایی هستند که خصوصیات ماده را تحت‌الشعاع قرار دادند. بدین ترتیب با به‌کارگیری رویکرد ترکیبی آزمون نانو فروروندگی و شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته ارائه‌شده در این پژوهش و از طریق همبستگی منحنی‌های بار-جابجایی شبیه‌سازی شده با منحنی بار-جابجایی تجربی، مقادیر پارامترهای جریان و



شکل ۱۲- نتایج منحنی‌های بار-جابجایی شبیه‌سازی شده با ضرایب اصطکاک متفاوت و مقایسه با منحنی بار-جابجایی تجربی مرجع [۲۵].

#### ۴-۵- اعتبارسنجی پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی مشخص شده

هدف از اعتبارسنجی در این مقاله، اتصال مقیاس از ماده تک کریستالی در آزمون نانو فروروندگی به بعد فنی مرتبط در آزمون کشش تک‌محوری می‌باشد که برای این کار باید ویژگی‌های ناهمگن پلی‌کریستال را در نظر گرفت؛ بدین ترتیب، با به‌کارگیری پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی مشخص شده آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ به‌عنوان پارامترهای ماده در شبیه‌سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی آزمون کشش تک‌محوری بر روی مدل‌های تک‌کریستال و پلی کریستال و مقایسه منحنی‌های تنش-کرنش مهندسی مستخرج از شبیه‌سازی‌ها با منحنی تنش-کرنش مهندسی تجربی، پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی مشخص شده اعتبارسنجی شدند.

بر این اساس منحنی‌های تنش-کرنش مهندسی تجربی و شبیه‌سازی که در شکل ۱۳ (الف) نشان داده شده‌اند، انطباق و دقت بسیار بالای پارامترهای مشخص شده را در مدل تک کریستال برای کرنش‌های بزرگتر از ۰/۰۰۵ تصدیق می‌کنند. به‌طوری‌که از توانایی تخمین دقیق تنش تسلیم (YS) و مقاومت کشش نهایی (UTS) به ترتیب با خطای نسبی ۲/۶۰٪ و ۰/۲۰٪ در مدل تک‌کریستال آزمون کشش تک‌محوره برخوردار می‌باشند. تسلیم شدن ناگهانی ماده در ناحیه الاستیسیته در منحنی مدل تک‌کریستال ناشی از تغییر شکل

همانطور که در شکل ۱۱ نشان داده شده است، منحنی بار-جابجایی شبیه‌سازی شده توسط پارامترهای شناسایی شده، مطابقت خوبی با منحنی بار-جابجایی تجربی دارد. به‌طوری‌که حداکثر عمق فرورفتگی در شبیه‌سازی آزمون نانو فروروندگی با پارامترهای شناسایی شده، ۲۶۰ نانومتر با اعمال بار فرورفتگی ۱۹۶۸/۵ میکرونیوتن با خطای نسبی ۰/۵۰٪ نسبت به آزمون نانو فروروندگی تجربی که در آن حداکثر عمق فرورفتگی ۲۶۰ نانومتر با اعمال بار فرورفتگی ۱۹۴۹ میکرونیوتن است، حاصل شده است.

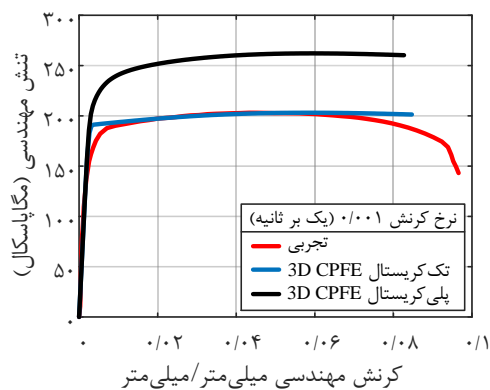
#### ۴-۴- تأثیر ضریب اصطکاک بر مشخصه یابی پارامترهای جریان و سخت‌شوندگی

محققان متعددی [۲۹-۳۱] گزارش کرده‌اند که اصطکاک می‌تواند تأثیر قابل‌توجهی بر نتیجه آزمایش نانو فروروندگی داشته باشد؛ این بدان معنی است که باید تأثیر ضریب اصطکاک در استخراج قابل‌اعتماد خواص مواد از داده‌های نانو فروروندگی، به‌عنوان یکی از عوامل تأثیرگذار بر مشخصه‌یابی پارامترها مورد ارزیابی قرار گیرد.

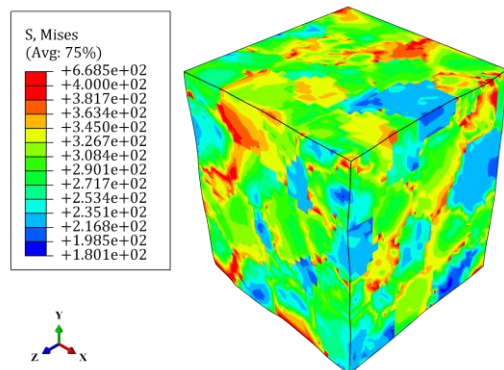
در شکل ۱۲ به تأثیر ضرایب اصطکاک مختلف با توجه به مقادیر ذکر شده در جدول ۱ بر منحنی بار-جابجایی پرداخته شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، عمق فرورفتگی تحت تأثیر ضریب اصطکاک قرار نگرفته و متعاقباً منحنی بار-جابجایی نیز تحت تأثیر ضریب اصطکاک قرار نگرفته است؛ بنابراین عمق فرورفتگی برای هر سه سطح از ضریب اصطکاک ثابت و مستقل از ضریب اصطکاک است.

همچنین با توجه به اینکه منحنی‌های بار-جابجایی طبق شکل ۱۲ در محدوده نوسانی یکسانی می‌باشند، در نتیجه منحنی‌های بار-جابجایی شبیه‌سازی شده تحت تأثیر ضریب اصطکاک در سطح تماس بین نانو فرورونده و نمونه قرار نمی‌گیرند. این نتیجه‌گیری مطابق با سایر نتایج تحقیقاتی موجود در این زمینه است که محدوده ضریب اصطکاک ۰-۰/۶ را به‌عنوان مناسب‌ترین محدوده معرفی کرده‌اند؛ زیرا هر مقدار ضریب اصطکاک در این محدوده نتایج بسیار مشابهی ایجاد می‌کند [۳۲، ۳۳].

کشش نهایی (UTS) در آزمون کشش تک‌محوره مدل پلی کریستال مورد توجه قرار بگیرند، می‌توان به‌طور متوسط ۷٪ از خطاهای نسبی را به خطاهای ناشی از تعداد المان‌ها در هر دانه و تعداد کل دانه‌ها مرتبط دانست و مابقی انحرافات منحنی تنش-کرنش مدل پلی کریستال را به اثر مرزدانه‌ها و سایر پارامترهای تأثیرگذار که در این پژوهش مورد بررسی قرار نگرفته‌اند، ربط داد.



(الف)



(ب)

شکل ۱۳- (الف) منحنی‌های تنش-کرنش مهندسی تجربی مرجع [۲۵] و شبیه‌سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته سه‌بعدی (3D CPFE) آزمون کشش تک‌محوری آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰؛ (ب) کانتور تنش مایز آزمون کشش تک محوری مدل پلی کریستال.

همگن در جهت کریستالی [۰۰۱] است [۲۸]. بدین ترتیب گرچه در کرنش‌های پایین (کوچک‌تر از ۰/۰۰۵) به سبب تغییر شکل همگن در جهت کریستالی [۰۰۱]، انحرافات جزئی وجود دارد، اما پارامترهای مشخصه‌یابی شده، اعتبار و قابل‌اطمینان بودنشان را در پیش‌بینی تنش‌های ماکروسکوپی در مقایسه با منحنی تجربی نشان می‌دهند. همچنین این نتایج حاکی از آن است که انرژی‌های مصرف‌شده در تغییر شکل آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ در مقیاس ماکرو (مقیاس آزمون تجربی) و تک کریستال یکسان هستند و در هر دو، انرژی یکسانی برای مجموعه سیستم لغزش [۱۱۰] [۱۱۱] تشکیل شده است. به‌طور مشخص، می‌توان نتیجه‌گیری کرد که مکانیزم‌های سخت‌شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ در مقیاس ماکرو و در تک کریستال‌هایی که در مجموعه سیستم لغزش [۱۱۰] [۱۱۱] دچار تغییر شکل می‌شوند، نیز یکسان است. این نتایج همسو با نتایج هاو و ایلام می‌باشد [۳۴].

همانطور که نشان داده شد، مدل تک کریستال توانایی بسیار مناسبی برای شبیه‌سازی تغییر شکل و مقایسه آن با نتایج ماکروسکوپی دارد؛ با این حال، به‌محض اینکه در مدل پلی کریستال مرزدانه‌ها وارد عمل شده‌اند، دقت منحنی تنش-کرنش به جهت‌گیری این مرزدانه‌ها با توجه به بار خارجی بستگی پیدا کرده است. به‌طوری‌که در مرزدانه‌ها، جایی که جهات کریستالی در آن تغییر پیدا می‌کنند، تمرکز تنش بیشتری دیده می‌شود و به عبارتی پدیده سخت‌شوندگی موضعی در مرزدانه‌ها رخ داده است (نواحی قرمز رنگ در شکل ۱۳ (ب)). گرچه روند رفتاری منحنی تنش-کرنش مدل پلی کریستال مطابق با منحنی تنش-کرنش تجربی است، به‌خصوص در ناحیه تسلیم که ناشی از ناهمگنی جهات کریستالی پلی کریستال است، اما با توجه به اینکه در این پژوهش اثر مرزدانه‌ها نادیده گرفته شده است، می‌توان نتیجه‌گیری کرد که بخشی از انحرافات منحنی تنش-کرنش مدل پلی کریستال ناشی از همین موضوع باشد.

خطای نسبی تنش تسلیم (YS) و مقاومت کشش نهایی (UTS) در آزمون کشش تک‌محوره مدل پلی کریستال به ترتیب ۱۰/۱۸٪ و ۱۲/۴۴٪ می‌باشند. چنانچه اثر میزان خطای نسبی حاصل از تعداد المان‌ها در هر دانه و تعداد کل دانه‌ها که در بخش مربوط به حساسیت مش تشریح شده است، در بررسی میزان خطای نسبی تنش تسلیم (YS) و مقاومت

## ۵- نتیجه گیری

در این مقاله، با ترکیب آزمون نانو فروروندگی تجربی و شبیه سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه بعدی، پارامترهای جریان و سخت شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ با احتساب تقارن بازتابی در هر بخش چرخشی در جهات کریستالی [۰۰۱] و [۱۱۰] و همچنین بررسی ضریب اصطکاک به عنوان یکی از عوامل تأثیرگذار بر مشخصه یابی پارامترها، مشخصه یابی شدند. در نهایت پارامترهای مشخصه یابی شده به وسیله شبیه سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه بعدی آزمون کشش تک محوری بر روی مدل های تک کریستال و پلی کریستال، اعتبارسنجی شدند.

نتایج این تحقیق نشان داد که:

- (۱) پارامترهای تنش تسلیم اولیه، نرخ کرنش برشی مرجع و تنش اشباع به ترتیب بیشترین همبستگی مثبت را با حداکثر بار دارند.
- (۲) پارامترهای جریان و سخت شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ که با ترکیب آزمون نانو فروروندگی و شبیه سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته مشخصه یابی شده اند، از دقت بالایی برخوردارند. به طوری که منحنی بار-جابجایی به دست آمده از شبیه سازی آزمون نانو فروروندگی با پارامترهای مشخصه یابی شده، دارای خطای نسبی  $0.50\%$  نسبت به آزمون نانو فروروندگی تجربی در حداکثر عمق فرورفتگی است.
- (۳) پارامترهای مشخصه یابی شده جریان و سخت شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰، به طور قابل توجهی توانایی تخمین تنش تسلیم (YS) و مقاومت کشش نهایی (UTS) به ترتیب با خطای نسبی  $2.60\%$  و  $0.20\%$  را در شبیه سازی اجزا محدود کریستال پلاستیسیته سه بعدی مدل تک کریستال آزمون کشش تک محوره دارند. این نتیجه حاکی از یکسان بودن انرژی های مصرف شده در تغییر شکل و همچنین مکانیزم های سخت شوندگی آلیاژ آلومینیوم ۱۱۰۰ در مقیاس تک کریستال با مقیاس ماکرو (مقیاس آزمون تجربی) است.
- (۴) ضمن مدل سازی دقیق ناحیه تسلیم در مدل پلی کریستال آزمون کشش تک محوره، دقت پارامترهای مشخصه یابی شده در این مدل تحت تأثیر جهت گیری مرز دانه هاست. باین وجود، پارامترهای مشخصه یابی شده

توانایی تخمین تنش تسلیم (YS) و مقاومت کشش نهایی (UTS) را به ترتیب با خطای نسبی  $1.18\%$  و  $12.44\%$  در مدل پلی کریستال دارند.

(۵) مدل شبیه سازی ارائه شده ویژگی های اصلی آزمون نانو فروروندگی را نیز به دست آورده است. به طوری که با افزایش عمق فرورفتگی، نیروی مقاومت بر روی فرورونده افزایش یافته و به محض برگشت و خروج فرورونده این نیرو به سرعت کاهش یافته است. همچنین منحنی بار-جابجایی شبیه سازی شده به خوبی با منحنی بار-جابجایی تجربی در بارگذاری و باربرداری حین آزمون نانو فروروندگی مطابقت دارد.

## مراجع

- [1] Phillips, R., Crystals, defects and microstructures: modeling across scales. 2001: Cambridge University Press.
- [2] Asaro, R. and V. Lubarda, Mechanics of solids and materials. 2006: Cambridge University Press.
- [3] Herrera-Solaz, V., et al., An inverse optimization strategy to determine single crystal mechanical behavior from polycrystal tests: Application to AZ31 Mg alloy. International J. Plastic., 2014. 57: p. 1-15.
- [4] Chakraborty, A. and P. Eisenlohr, Evaluation of an inverse methodology for estimating constitutive parameters in face-centered cubic materials from single crystal indentations. Europ. J. Mech.-A/Solids, 2017. 66: p. 114-124.
- [5] Li, L., et al., Three-dimensional crystal plasticity finite element simulation of nanoindentation on aluminium alloy 2024. Materials Science and Engineering: A, 2013. 579: p. 41-49.
- [6] Horstemeyer, M., et al., A multiscale analysis of fixed-end simple shear using molecular dynamics, crystal plasticity, and a macroscopic internal state variable theory. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2003. 11(3): p. 265.
- [7] Aghabalaevahid, A. and M. Shalvandi, Microstructure-based crystal plasticity modeling of AA2024-T3 aluminum alloy defined as the  $\alpha$ -Al,  $\theta$ -Al<sub>2</sub>Cu, and S-Al<sub>2</sub>CuMg phases based on real metallographic image. Materials Research Express, 2021. 8(10): p. 106521.
- [8] Zirkle, T. and D.L. McDowell, Modeling cyclic deformation of austenitic stainless steels at elevated temperatures using a physically-based mesoscale

- metal plasticity. *J. Mech. Physic. Solids*, 1971. 19(6): p. 433-455.
- [21] Peirce, D., R.J. Asaro, and A. Needleman, Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta metallurgica*, 1983. 31(12): p. 1951-1976.
- [22] Asaro, R.J., *Crystal plasticity*. 1983.
- [23] Peirce, D., R. Asaro, and A. Needleman, An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta metallurgica*, 1982. 30(6): p. 1087-1119.
- [24] Huang, Y., *A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the ABAQUS finite element program*. 1991: Harvard Univ.
- [25] Karimzadeh, A., M. Ayatollahi, and M. Alizadeh, Finite element simulation of nano-indentation experiment on aluminum 1100. *Computational Materials Science*, 2014. 81: p. 595-600.
- [26] Retamoso, C., et al., Exploration of the initial photocatalytic activity parameters of  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-rutile for methylene blue discoloration in water through the OFAT process. *J. Photochem. Photobio. A: Chemistry*, 2023. 438: p. 114495.
- [27] Evans, J.A., et al., Determining elastic anisotropy of textured polycrystals using resonant ultrasound spectroscopy. *J. Materials Sci.*, 2021. 56(16): p. 10053-10073.
- [28] Lim, H., et al., Investigating mesh sensitivity and polycrystalline RVEs in crystal plasticity finite element simulations. *Int. J. Plastic.*, 2019. 121: p. 101-115.
- [29] Mata, M. and J. Alcala, The role of friction on sharp indentation. *J. Mech. Physic Solids*, 2004. 52(1): p. 145-165.
- [30] Burley, M., et al., Johnson-Cook parameter evaluation from ballistic impact data via iterative FEM modelling. *Int. J. Impact Eng.*, 2018. 112: p. 180-192.
- [31] Durst, K., M. Göken, and G.M. Pharr, Finite element simulation of spherical indentation in the elastic-plastic transition. *Int. J. Materials Research*, 2022. 93(9): p. 857-861.
- [32] Liu ,M., et al., A crystal plasticity study of the effect of friction on the evolution of texture and mechanical behaviour in the nano-indentation of an aluminium single crystal. *Computational materials science*, 2014. 81: p. 30-38.
- [33] Karthik, V., et al., Finite element analysis of spherical indentation to study pile-up/sink-in crystal plasticity framework. *Materials Science and Engineering: A*, 2022. 832: p. 142377.
- [9] Jasim, S.A., et al., Role of Alloying Composition on Mechanical Properties of CuZr Metallic Glasses During the Nanoindentation Process. *Metals and Materials International*, 2022: p. 1-8.
- [10] Viswanathan, G., et al., Direct observations and analyses of dislocation substructures in the  $\alpha$  phase of an  $\alpha/\beta$  Ti-alloy formed by nanoindentation. *Acta materialia*, 2005. 53(19): p. 5101-5115.
- [11] Liu, Y., et al., Combined numerical simulation and nanoindentation for determining mechanical properties of single crystal copper at mesoscale. *J.Mech. .Physic. Solids*, 2005. 53(12): p. 2718-2741.
- [12] Wu, B., et al., Prediction of plasticity and damage initiation behaviour of C45E+ N steel by micromechanical modelling. *Materials & Design*, 2017. 121: p. 154-166.
- [13] Hammerquist, C.C. and J.A. Nairn, Modeling nanoindentation using the material point method. *J. Materials Research*, 2018. 33(10): p. 1.۱۳۸۱-۳۶۹
- [۱۴] عین القضاتی، مونا و عاصم‌پور، احمد. (۱۴۰۰). تاثیر ویژگی‌های ریزساختار بر رفتار فولاد با سمانتیت کروی شده با استفاده از روش پلاستیسیتته کریستالی. نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر. ۵۳ (شماره ۶ (Special Issue)): ۴۰۹۴-۴۰۷۹.
- [15] Yin, B., et al., Experiments and crystal plasticity simulations for the deformation behavior of nanoindentation: Application to the  $\alpha 2$  phase of TiAl alloy. *Materials Science and Engineering: A*, 2022. 831: p. 142283.
- [16] Liu, M., et al., A combined experimental-numerical approach for determining mechanical properties of aluminum subjects to nanoindentation. *Scientific reports*, 2015. 5(1): p. 1-16.
- [17] Durán, A.I., et al., Experimental and Numerical Analysis on the Formability of a Heat-Treated AA1100 Aluminum Alloy Sheet. *J. Materials Eng. . Perform.*, 2015. 24(10): p. 4156-4170.
- [18] Tang, D., et al., Evolution of the material microstructures and mechanical properties of AA1100 aluminum alloy within a complex porthole die during extrusion. *Materials*, 2018. 12(1) p. 16.
- [19] Kim, M.-S., et al., Unraveling the formation mechanism of deformation bands in AA1100 alloy during plane forging and return-plane forging. *International J. Mech. Sci.*, 2022. 223: p. 107268.
- [20] Rice, J.R., Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to



[34] Howe, S. and C. Elbaum, The relation between the plastic deformation of aluminium single crystals and polycrystals. Philosophical Magazine, 1961. 6(61): p. 37-48.

phenomena in steels and experimental validation. International J. Mech. Sci., 2012. 54(1): p. 74-83.