



**Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο**

**Σχολή Μεταλλειολόγων- Μεταλλουργών Μηχανικών**

**Επιστήμη και Τεχνολογία Υλικών**

**Διπλωματική Εργασία**

**«ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΗΣ ΑΝΤΟΧΗΣ ΤΟΥ ΑΛΟΥΜΙΝΙΟΥ  
ΣΕ ΕΦΕΛΚΥΣΜΟ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΜΕΘΟΔΩΝ  
ΠΛΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΥ»**

**Μπούση Φωτεινή**

Υπεύθυνος: Dr. -Ing. Παπαευθυμίου Σπυρίδων, Αν. Καθ. ΕΜΠ

Αθήνα, Οκτώβριος 2023









**Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο**

**Σχολή Μεταλλειολόγων- Μεταλλουργών Μηχανικών**

**Επιστήμη και Τεχνολογία Υλικών**

**Υπολογισμός της αντοχής του αλουμινίου σε εφελκυσμό με  
χρήση μεθόδων πλαστικότητας κρυστάλλου**

Διπλωματική Εργασία

**Μπούση Φωτεινή**

Υπεύθυνος: Dr. - Ing. Παπαευθυμίου Σπυρίδων, Αν. Καθ. ΕΜΠ

Εγκρίθηκε από την τριμελή επιτροπή στις ..../..../...

.....

Ξενίδης Άνθιμος

Καθ. ΕΜΠ

.....

Πάνιας Δημήτριος

Καθ. ΕΜΠ

.....

Παπαευθυμίου Σπυρίδων

Αν. Καθ. ΕΜΠ



Copyright ©, Μπούση Φωτεινή, 2023

Με επιφύλαξη κάθε δικαιώματος. All rights reserved.





## ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Καταρχήν ευχαριστώ τον αναπληρωτή καθηγητή Dr. – Ing. Σπυρίδωνα Παπαευθυμίου για την ανάθεση του θέματος, την εμπιστοσύνη του στο πρόσωπό μου και για την επίβλεψη της διπλωματικής εργασίας. Επίσης, ευχαριστώ τον Υποψήφιο Διδάκτορα κ. Βασίλη Λουκαδάκη για την καθοδήγηση του και τη βοήθεια που μου προσέφερε σε όλο αυτό το διάστημα.

Ευχαριστώ θερμά τα μέλη της τριμελούς εξεταστικής επιτροπής, τον Καθ. Α. Ξενίδη και τον Καθ. Δ. Πάνια για τον πολύτιμο χρόνο που αφιέρωσαν στη μελέτη της εργασίας μου και για τα εποικοδομητικά τους σχόλια.

Ακόμη, ευχαριστώ τον Δρ. Αθανάσιο Βαζδιρβανίδη για την διάθεση των πειραματικών δεδομένων και την ευκαιρία που μου έδωσε να γνωρίσω το τμήμα Μεταλλογραφίας και Οπτικής Μικροσκοπίας του ΕΛΚΕΜΕ Α.Ε. παράλληλα με την εκπόνηση της διπλωματικής μου εργασίας.

Τέλος, αφιερώνω τη διπλωματική μου εργασία στους γονείς μου και τον αδερφό μου που αποτέλεσαν το στήριγμα μου κατά τη διάρκεια όλης αυτής της ιδιαίτερης χρονιάς.



## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η χρήση αριθμητικών και υπολογιστικών προσομοιώσεων για την κατανόηση της μηχανικής απόκρισης των υλικών αποτελεί σημαντική πτυχή της σύγχρονης επιστήμης των υλικών. Αυτού του είδους προσομοιώσεις μπορούν να ελαττώσουν τις εργαστηριακές πειραματικές διαδικασίες και ταυτόχρονα να μελετήσουν διάφορα φαινόμενα σε δύσκολες συνθήκες. Στην παρούσα διπλωματική εργασία γίνεται χρήση του υπολογιστικού πακέτου ανοιχτού κώδικα DAMASK (Düsseldorf Advanced Materials Simulation Kit), το οποίο ενσωματώνει μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας. Το προς μελέτη υλικό είναι το κράμα αλουμινίου AA6063, το οποίο χρησιμοποιείται ευρέως σε αρχιτεκτονικές εφαρμογές αλλά και στην αυτοκινητοβιομηχανία λόγω της ειδικής του αντοχής και της υψηλής διαμορφωσιμότητας του. Στόχος της εργασίας είναι ο προσδιορισμός της μέγιστης εφελκυστικής αντοχής του κράματος αλουμινίου AA6063 μέσω της χρήσης των μοντέλων κρυσταλλικής πλαστικότητας του υπολογιστικού πακέτου DAMASK. Για αυτόν τον σκοπό χρησιμοποιούνται δύο διαφορετικά μοντέλα πλαστικότητας κρυστάλλου και εξετάζονται τα αποτελέσματα που προκύπτουν σύμφωνα με πειραματικά δεδομένα. Τα αποτελέσματα της μελέτης παρέχουν μια επισκόπηση της τρέχουσας κατάστασης της χρήσης του προγράμματος και φανερώνουν τη συμβολή της υπολογιστικής μοντελοποίησης στον κλάδο της επιστήμης των υλικών.



# ABSTRACT

The use of numerical and computational simulations to understand the mechanical response of materials is an important aspect of modern materials science. These types of simulations can reduce laboratory experimental procedures and simultaneously investigate various phenomena under challenging conditions. In this thesis, the program that is used is the open-source computational package DAMASK (Düsseldorf Advanced Materials Simulation Kit), which incorporates models of crystal plasticity. The material that is examined is the aluminum alloy AA6063, which is widely used in architectural applications and the automotive industry due to its specific strength and high formability. The aim of this work is to determine the maximum tensile strength of aluminum alloy AA6063 by applying the crystal plasticity models of the DAMASK computational package. For this purpose, two different crystal plasticity models are used, and the results obtained are compared to experimental data. The results of the study provide an up to date overview of the program and illustrate the contribution of computational modeling to the field of materials science.



## ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

---

1	Εισαγωγή .....	1
2	Θεωρητικό Μέρος.....	3
2.1	Μεταλλουργικά στοιχεία .....	3
2.1.1	Το αλουμίνιο και τα κράματά του.....	3
2.1.2	Κρυσταλλογραφικός Ιστός.....	8
2.1.3	Κρυσταλλικές Ατέλειες.....	10
2.2	Δοκιμή Εφελκυσμού .....	17
2.2.1	Πρότυπα Δοκιμής Εφελκυσμού.....	17
2.2.2	Κρίσιμοι Παράγοντες.....	17
2.3	Κρυσταλλική Πλαστικότητα .....	19
2.3.1	Ιστορική Αναδρομή.....	19
2.3.2	Θεωρία και Μοντέλα Κρυσταλλικής Πλαστικότητας .....	20
2.3.3	Υπολογιστικές μέθοδοι κρυσταλλικής πλαστικότητας .....	26
3	Πειραματικό Μέρος .....	31
3.1	Αρχείο εισόδου “Material.yaml” .....	31
3.2	Αρχείο εισόδου “Geom.vti”.....	32
3.3	Αρχείο εισόδου “Load.yaml” .....	33
4	Αποτελέσματα και συζήτηση .....	34
4.1	Σύγκριση μοντέλων.....	34
4.1.1	Σύγκριση φαινομενολογικού μοντέλου κρυσταλλικής πλαστικότητας με πειραματικά δεδομένα.....	35
4.1.2	Σύγκριση φυσικού μοντέλου με πειραματικά δεδομένα .....	36
4.1.3	Οπτικοποίηση αποτελεσμάτων στο Paraview .....	37
4.1.4	Καμπύλη πυκνότητας διαταραχών.....	39
4.1.5	Συζήτηση αποτελεσμάτων.....	40
4.2	Damage Module.....	41

4.3	Πιθανή επίδραση στους στόχους βιώσιμης ανάπτυξης.....	44
4.3.1	Γενικά.....	44
4.3.2	Διπλωματική εργασία και στόχοι βιώσιμης ανάπτυξης .....	45
5	Συμπεράσματα .....	47
6	Παράρτημα .....	49
7	Βιβλιογραφία .....	50



## ΛΙΣΤΑ ΕΙΚΟΝΩΝ

Εικόνα 1: Προσανατολισμός των βελονοειδών ζωνών GP προς την κατεύθυνση $\langle 100 \rangle$ σε μικρογραφία κράματος της σειράς 6XXX [12].....	7
Εικόνα 2: Ψεύδο-διμερές διάγραμμα φάσεων Al-Mg <sub>2</sub> Si [7] [14]. .....	7
Εικόνα 3: Κρυσταλλογραφικός ιστός κράματος 6063 έπειτα από διαδικασία διέλασης [24]. .....	9
Εικόνα 4: Δισδιάστατη αναπαράσταση σημειακών ατελειών (κενής και ενδιάμεσης θέσης). .....	10
Εικόνα 5: Δισδιάστατη αναπαράσταση ατόμων παρεμβολής και αντικατάστασης. ..	11
Εικόνα 6: Δισδιάστατη αναπαράσταση των ορίων των κόκκων .....	11
Εικόνα 7: Τέλεια και ελαττωματική ακολουθία στοίβαξης για έναν κρύσταλλο FCC [30]. .....	12
Εικόνα 8: Τρισδιάστατη απεικόνιση (a) τέλειου κρυστάλλου, (b) εισαγόμενου ημιεπιπέδου ατόμων και (c) διαταραχής ακμής στο κάτω άκρο του επιπέδου ημιεπιπέδου. Το b απεικονίζει το διάνυσμα Burgers [31].....	13
Εικόνα 9: Ο βρόχος Burgers για μια διαταραχή ακμής: (A) Τέλειος κρύσταλλος και (B) κρύσταλλος με διαταραχή [32].....	13
Εικόνα 10: Τρισδιάστατη απεικόνιση (a) τέλειου κρυστάλλου, (b), (c) κοπής και διάτμησης του κρυσταλλικού πλέγματος με απόσταση ενός ατόμου. Η γραμμή κατά μήκος της οποίας γίνεται η διάτμηση είναι μια διαταραχή κοχλία και το b απεικονίζει το διάνυσμα Burgers [31].....	14
Εικόνα 11: Ο βρόχος Burgers για μια διαταραχή με προσανατολισμό κοχλία. (A) Τέλειος κρύσταλλος και (B) κρύσταλλος με διαταραχή [32].....	14
Εικόνα 12: Σχηματική απεικόνιση της γραμμής διαταραχής, του επιπέδου ολίσθησης και του διανύσματος ολίσθησης (Burgers) για (α) μια διαταραχή ακμής και β) μια διαταραχή κοχλία [31].....	16
Εικόνα 13: Climb μιας διαταραχής ακμής [32]. .....	16
Εικόνα 14: Αναπαράσταση της παραγόμενης διατμητικής τάσης σε ένα σύστημα ολίσθησης [47]. .....	23
Εικόνα 15: Ιεραρχική δομή ενός υλικού σημείου [52] .....	27
Εικόνα 16: Δομή του μοντέλου υλικού σημείου [56].....	29
Εικόνα 17: Σχήμα υπολογισμού για τον προσδιορισμό του S ως συνάρτηση του F [56]. .....	29

Εικόνα 18: RVE του κράματος AA6063 μέσω του λογισμικού Naper .....	33
Εικόνα 19: Κατανομή τάσεων εντός της μικροδομής του φαινομενολογικού μοντέλου μετά τον εφελκυσμό. ....	37
Εικόνα 20: Κατανομή τάσεων εντός της μικροδομής του φυσικού μοντέλου μετά τον εφελκυσμό.....	37
Εικόνα 21: Στόχοι Βιώσιμης Ανάπτυξης (SDGs) [60].....	44

## **ΛΙΣΤΑ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ**

Εξίσωση 1: Εξίσωση διατμητικής δύναμης.....	21
Εξίσωση 2: Εξίσωση διατμητικής τάσης.....	21
Εξίσωση 3: Εξίσωση εμβαδού επιπέδου ολίσθησης.....	21
Εξίσωση 4: Εξίσωση διατμητικής τάσης.....	22
Εξίσωση 5: Εξίσωση διατμητικής τάσης.....	22
Εξίσωση 6: Εξίσωση διατμητικής τάσης με χρήση του παράγοντα Schmid .....	22
Εξίσωση 7: Εξίσωση σύνδεσης των βαθμίδων παραμόρφωσης.....	23
Εξίσωση 8: Εξίσωση γενικευμένου τύπου του Hooke.....	24
Εξίσωση 9: Εξίσωση της πεπερασμένης ελαστικής παραμόρφωσης .....	24
Εξίσωση 10: Νόμος ροής.....	24
Εξίσωση 11: Κλίση του διανύσματος ρυθμού πλαστικής παραμόρφωσης $L_p$ .....	24
Εξίσωση 12: Εξίσωση μέσης τιμής $\xi_a$ [50].....	25
Εξίσωση 13: Εξίσωση μέσης τιμής $\gamma_a$ [50].....	25
Εξίσωση 14: Εξίσωση Orowan.....	25
Εξίσωση 15: Εξίσωση ταχύτητας της διαταραχής.....	26
Εξίσωση 16: Εξίσωση αντίστασης της ολίσθησης .....	26
Εξίσωση 17: Εξίσωση δεύτερης Piola-Kirchhoff τάσης.....	28

## **ΛΙΣΤΑ ΠΙΚΑΝΩΝ**

Πίνακας 1: Χημική σύσταση κράματος 6063.....	5
Πίνακας 2: Συστατικά κρυσταλλογραφικών ιστών στα υλικά που κρυσταλλώνονται στο FCC [23].....	9

Πίνακας 3: Συγκεντρωτικός πίνακας τιμών των βασικών παραμέτρων από τη βιβλιογραφία για το φαινομενολογικό μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας .....	49
Πίνακας 4: Συγκεντρωτικός πίνακας τιμών των βασικών παραμέτρων από τη βιβλιογραφία για το μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας πυκνότητας διαταραχών .....	49



# 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

---

Σε μια εποχή που χαρακτηρίζεται από ραγδαίες τεχνολογικές εξελίξεις και την ολοένα αυξανόμενη ζήτηση για υλικά με βελτιωμένες ιδιότητες, ο τομέας της επιστήμης των υλικών βρίσκεται στην πρώτη γραμμή της επιστημονικής καινοτομίας. Μεταξύ των πολλών υλικών που έχουν συγκεντρώσει την προσοχή, το αλουμίνιο, με την υψηλή ειδική αντοχή του έναντι μετάλλων όπως ο χαλκός, ο ορείχαλκος, ο ψευδάργυρος και ο σίδηρος, κατέχει κομβική θέση [1]. Η παρούσα διπλωματική εργασία ξεκινά ένα ταξίδι για να εξερευνήσει τις περίπλοκες πτυχές της αντοχής του αλουμινίου και των κραμάτων αυτού, στον εφελκυσμό, μια θεμελιώδη ιδιότητα που χρησιμοποιείται και ως μέσο σύγκρισης σε πολλές βιομηχανικές εφαρμογές. Με τον τρόπο αυτό, επιδιώκει να αντιμετωπίσει ένα πειστικό ερευνητικό πρόβλημα: την ανάγκη για ακριβείς και αποτελεσματικές μεθόδους πρόβλεψης και κατανόησης της εφελκυστικής αντοχής των κραμάτων αλουμινίου, μέσω της μοντελοποίησης.

Η χρήση αριθμητικών και υπολογιστικών προσομοιώσεων για την κατανόηση της συμπεριφοράς των υλικών όταν υπόκεινται σε κατεργασίες διαμόρφωσης έχει γίνει ολοένα και πιο σημαντική τα τελευταία χρόνια. Η ικανότητα πρόβλεψης της μικροδομής και της ανάπτυξης υφής ενός υλικού κάτω από διαφορετικές συνθήκες φόρτωσης παρέχει πολύτιμες πληροφορίες για τη βελτιστοποίηση αυτών των κατεργασιών [2]. Τέτοιες μέθοδοι προσομοίωσης αποτελούν τα μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας, τα οποία λαμβάνουν υπόψη τη δομή του κρυσταλλικού πλέγματος και την ανισοτροπία της πλαστικής παραμόρφωσης [3]. Στα μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας, το υλικό αναπαρίσταται ως μια συλλογή μεμονωμένων κόκκων, καθένας από τους οποίους μπορεί να παραμορφωθεί διαφορετικά υπό φορτίο [4].

Στην παρούσα διπλωματική εργασία το κράμα αλουμινίου που μελετάται είναι το 6063, ένα κράμα με ευρεία χρήση στην αυτοκινητοβιομηχανία, ενώ το υπολογιστικό μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας που χρησιμοποιείται είναι το DAMASK (Düsseldorf Advanced Materials Simulation Kit) [4]. Το μεγάλο πλεονέκτημα της μοντελοποίησης είναι η δυνατότητα προσομοίωσης των κατεργασιών σε δύσκολες συνθήκες, όπως για παράδειγμα σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες. Έτσι, μέσω της εργασίας επιτυγχάνεται η προσομοίωση και η πρόβλεψη της συμπεριφοράς του

αλουμινίου σε εφελκυσμό σε δύσκολες και διαφορετικές θερμοκρασιακές συνθήκες. Αξίζει να αναφερθεί εδώ, πως το μοντέλο που χρησιμοποιείται στηρίζεται σε φυσικές παραμέτρους του υλικού.

Στο πρώτο μέρος της παρούσας εργασίας γίνεται αρχικά αναφορά σε διάφορα μεταλλουργικά στοιχεία που αφορούν το αλουμίνιο, τα διάφορα κράματά του και τις κρυσταλλικές ατέλειες που συναντώνται στα μεταλλικά υλικά, καθώς και πληροφορίες για τη δοκιμή εφελκυσμού και αναλύεται διεξοδικά η θεωρία της κρυσταλλικής πλαστικότητας με αναφορές σε καταστατικούς νόμους σε διαφορετικά μοντέλα/ μεθόδους κρυσταλλικής πλαστικότητας, θέτοντας έτσι το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο.

Στη συνέχεια, στο «Πειραματικό Μέρος» αναλύεται η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε προκειμένου να πραγματοποιηθούν τα επιθυμητά πειράματα. Κυρίως, γίνεται αναφορά στα αρχεία εισόδου που χρησιμοποιήθηκαν στο πρόγραμμα και στις ιδιαίτερες παραμέτρους τους.

Εν συνεχεία, ακολουθεί το 4<sup>ο</sup> κεφάλαιο «Αποτελέσματα και Συζήτηση», στο οποίο γίνεται παρουσίαση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων μέσω γραφημάτων και σχολίων, ενώ καταγράφεται και η επίδραση της εργασίας στους στόχους βιώσιμης ανάπτυξης. Στο 5<sup>ο</sup> κεφάλαιο «Συμπεράσματα» καταγράφονται τα συμπεράσματα που προέκυψαν συνολικά από την εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας. Τέλος, ακολουθεί η αναλυτική λίστα των αναφορών που χρησιμοποιήθηκαν.

## 2 ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΜΕΡΟΣ

---

### 2.1 ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

#### 2.1.1 Το αλουμίνιο και τα κράματά του

##### 2.1.1.1 Αλουμίνιο

Το αργίλιο (Al) ή αλουμίνιο αποτελεί ένα από τα επικρατέστερα μεταλλικά υλικά που χρησιμοποιείται ευρέως σε ποικίλες βιομηχανίες λόγω του μικρού βάρους, της υψηλής αντοχής και της εξαιρετικής αντιδιαβρωτικής συμπεριφοράς του [5], [6]. Είναι το τρίτο πιο διαδεδομένο στοιχείο στον φλοιό της γης μετά το οξυγόνο (O) και το πυρίτιο (Si) και βρίσκεται σε μια σειρά ορυκτών, συμπεριλαμβανομένου του βωξίτη ( $Al_2O_3 \cdot H_2O / AlO(OH)$ ), ο οποίος είναι η κύρια πηγή αλουμινίου για εμπορική χρήση [5]. Κρυσταλλώνεται στην εδροκεντρομένη κυβική δομή (FCC) ανήκει στην IIIA ομάδα και 3<sup>η</sup> περίοδο του περιοδικού πίνακα έχει ειδικό βάρος  $2,7g/cm^3$ , ειδική ηλεκτρική αντίσταση  $0,029\Omega \cdot mm^2/m$  και σχετική ηλεκτρική αγωγιμότητα 63%, ενώ για καθαρότητα 99,5% (μέσος όρος) οι μηχανικές ιδιότητες σε κατάσταση ανοπτήσεως είναι [5]:

- $\sigma_B = 75-90 \text{ MPa}$ ,
- $A = 31-42 \%$  και
- $HB = 20-27$ .

##### 2.1.1.2 Κατηγοριοποίηση των κραμάτων αλουμινίου

Τα κράματα του αλουμινίου χωρίζονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες: τα κράματα χύτευσης και τα κράματα διαμόρφωσης [5]. Για την ομαδοποίηση των κραμάτων διαμόρφωσης σε σχέση με τα υπόλοιπα κραματικά τους στοιχεία και τις μηχανικές τους ιδιότητες χρησιμοποιείται ένας μοναδικός τετραψήφιος αριθμός. Το πρώτο ψηφίο αυτού του αριθμού ορίζει τις κύριες κραματικές προσθήκες του υλικού πέραν του αλουμινίου, το δεύτερο ψηφίο αφορά την περιεκτικότητα των ακαθαρσιών και τα δύο τελευταία ψηφία ορίζουν τον ειδικό τύπο κράματος. Κατά αυτόν τον τρόπο ορίζονται οι εξής εννέα υποκατηγορίες [6]:

- Σειρά 1XXX: Καθαρό αλουμίνιο που παρουσιάζει έλλειψη κραματικών προσθηκών και χρησιμοποιείται κυρίως στην ηλεκτρική και χημική βιομηχανία.

- Σειρά 2XXX: Κράμα αλουμινίου-χαλκού με επιμέρους κραματικές προσθήκες κυρίως μαγνησίου που χρησιμοποιείται στην αεροναυπηγική βιομηχανία.
- Σειρά 3XXX: Κράμα αλουμινίου-μαγγανίου, που βρίσκει εφαρμογή στον κλάδο της αρχιτεκτονικής και στην παραγωγή προϊόντων.
- Σειρά 4XXX: Κράμα αλουμινίου-πυριτίου με εφαρμογές σε προϊόντα συγκόλλησης.
- Σειρά 5XXX: Κράμα αλουμινίου-μαγνησίου με βασική εφαρμογή σε θαλάσσια διαβρωτικά περιβάλλοντα.
- Σειρά 6XXX: Κράμα αλουμινίου-μαγνησίου-πυριτίου, που χρησιμοποιείται στην αυτοκινητοβιομηχανία και στην κατασκευαστική βιομηχανία.
- Σειρά 7XXX: Κράμα αλουμινίου-ψευδαργύρου με επιμέρους κραματικές προσθήκες όπως χαλκού και μαγνησίου που χρησιμοποιείται στην αεροναυπηγική και γενικότερα σε εφαρμογές και βιομηχανίες που απαιτείται υψηλή αντοχή.
- Σειρά 8XXX: Κράμα αλουμινίου-λιθίου/σιδήρου.
- Σειρά 9XXX: Κράμα μελλοντικής χρήσης.

Αντίστοιχη διάκριση υπάρχει και για τα χυτά κράματα με τη διαφορά ότι στη συγκεκριμένη περίπτωση ο μοναδικός αναγνωριστικός αριθμός τους είναι τριψηφίος. Το πρώτο ψηφίο και σε αυτή την κατηγορία ορίζει τις κύριες κραματικές προσθήκες του υλικού πέραν του αλουμινίου, το δεύτερο και τρίτο ψηφίο αφορούν το είδος του υλικού και το τελευταίο ψηφίο μετά την τελεία αφορά την κατάσταση του χυτού, όπου η τιμή 0 ανταποκρίνεται στο τελικό χυτό και η τιμή 1 σε επιδεκτικά σε θερμική κατεργασία κράματα. Οι υποομάδες της συγκεκριμένης κατηγορίας παρουσιάζονται παρακάτω [6]:

- Σειρά 1XX.X: Καθαρό αλουμίνιο που παρουσιάζει έλλειψη κραματικών προσθηκών και χρησιμοποιείται κυρίως στην κατασκευή κινητήρων.
- Σειρά 2XX.X: Κράμα αλουμινίου-χαλκού.
- Σειρά 3XX.X: Κράμα αλουμινίου-πυριτίου με επιμέρους κραματικές προσθήκες όπως χαλκού και μαγνησίου. Η σειρά 3XXX αποτελεί τη πιο διαδεδομένη στα χυτά κράματα με ποσοστό που φτάνει το 90% της συνολικής παραγωγής.
- Σειρά 4XX.X: Κράμα αλουμινίου-πυριτίου.
- Σειρά 5XX.X: Κράμα αλουμινίου-μαγνησίου.



- Σειρά 6XX.X: Δεν βρίσκει χρήση.
- Σειρά 7XX.X: Κράμα αλουμινίου-ψευδαργύρου με επιμέρους κραματικές προσθήκες όπως χαλκού και μαγνησίου.
- Σειρά 8XX.X: Κράμα αλουμινίου-κασσίτερου.
- Σειρά 9XX.X: Δεν βρίσκει χρήση.

Τα κράματα κατηγοριοποιούνται περαιτέρω σε θερμικώς επεξεργασμένα και σε μη θερμικώς επεξεργασμένα και μπορούν να είναι τόσο χυτά όσο και κράματα διαμόρφωσης. Η πρώτη κατηγορία αφορά τα κράματα τα οποία μπορούν να υποβληθούν σε θερμικές κατεργασίες με σκοπό την επίτευξη ανώτερων μηχανικών ιδιοτήτων και κυρίως την αύξηση της αντοχής μέσω κύκλων θέρμανσης και ψύξης. Σε αυτή την κατηγορία συναντώνται κράματα των σειρών 2XXX, 6XXX και 7XXX. Τα κράματα των σειρών 1XXX, 3XXX, 4XXX και 5XXX χαρακτηρίζονται τις περισσότερες φορές ως μη θερμικώς επεξεργάσιμα, καθώς η αύξηση της σκληρότητας τους επιτυγχάνεται μέσω μεταλλοτεχνικών διεργασιών [6].

### 2.1.1.3 Κράμα AA6063

Το κράμα 6063 αποτελεί μέλος της σειράς 6XXX. Συνεπώς, είναι θερμικώς επεξεργάσιμο κράμα και χρησιμοποιείται ευρέως σε αρχιτεκτονικές εφαρμογές π.χ. πλαίσια παραθύρων, πόρτες αλλά και στην αυτοκινητοβιομηχανία συχνά ως προϊόν διέλασης. Ένας από τους λόγους που προτιμάται σε τέτοιες εφαρμογές είναι το καλό φινίρισμα που παρουσιάζει στο τελικό του στάδιο και η υψηλή επιδεκτικότητα σε διάφορες κατεργασίες. Ακόμη, χαρακτηρίζεται από υψηλή ικανότητα διαμόρφωσης και καλή θερμική αγωγιμότητα, παρόλο που η αντοχή του είναι μικρότερη σε σχέση με κράματα της σειράς 2XXX ή 7XXX [7]. Τα κύρια κραματικά στοιχεία του κράματος 6063 είναι το πυρίτιο και το μαγνήσιο και παρουσιάζονται στον πίνακα 1 [8]:

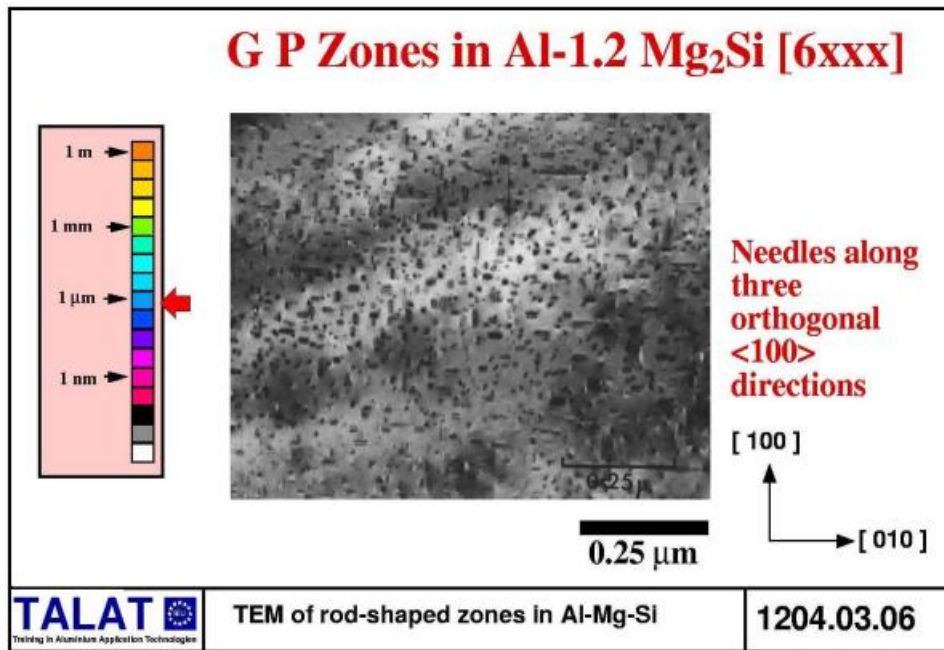
Πίνακας 1: Χημική σύσταση κράματος 6063

Στοιχείο	Si	Mg	Mn	Fe	Cu	Cr	Zn	Ti	Al
Σύσταση	0.2-0.6	0.45-0.9	<0.1	<0.35	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	Υπόλοιπο

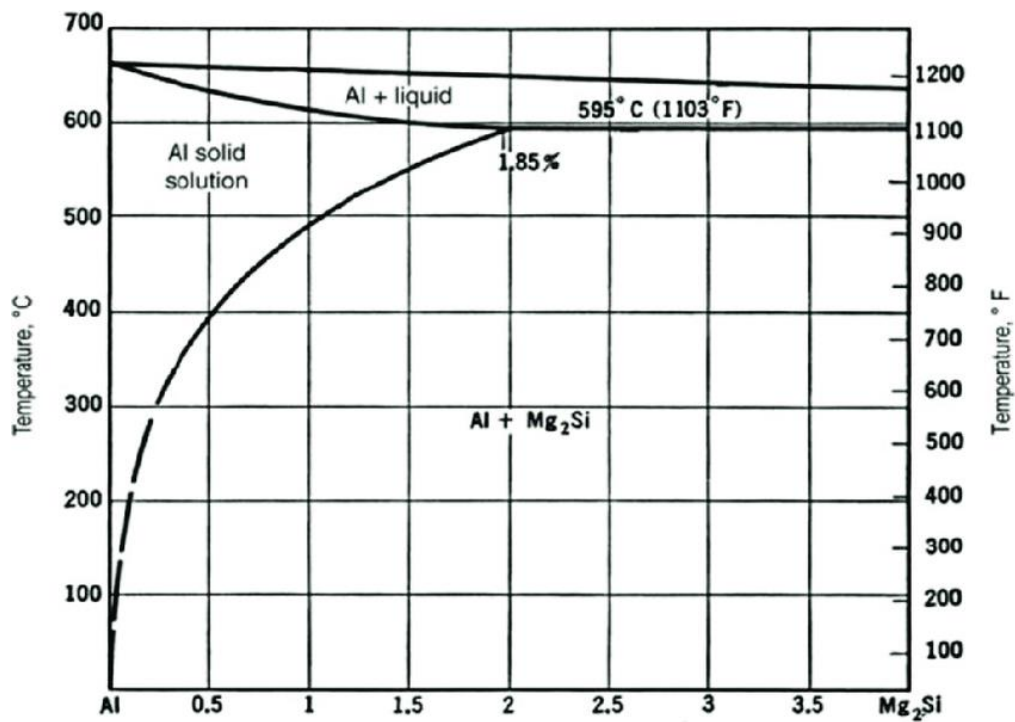
Όσον αφορά τις φάσεις και τα μικρογραφικά στοιχεία του κράματος κατά την απόψυξη σε θερμοκρασία δωματίου πραγματοποιείται ο σχηματισμός των ζώνων Guinier-Preston (GP Zones), οι οποίες παρουσιάζουν βελονοειδή μορφή στην

κατεύθυνση  $\langle 100 \rangle$  [7]. Έπειτα, ο μετασχηματισμός συνεχίζεται μέσω των ενδιάμεσων φάσεων  $\beta'$  ( $\text{Mg}_2\text{Si}$  εξαγωνικής δομής) και της σταθερής φάσης  $\beta$  που προκύπτει απευθείας από τη  $\beta'$  [7]. Στα κράματα της σειράς 6XXX η ακολουθία σχηματισμού των ενδιάμεσων μετασταθών φάσεων και κατακρημνισμάτων, προς τον τελικό σχηματισμό της  $\beta$  φάσης η οποία λαμβάνει χώρα έπειτα από βαφή υπερκορεσμένου στερεού διαλύματος (SSS) είναι [9, 10, 11]:

SSS  $\rightarrow$  ατομικά συσσωματώματα  $\text{MgSi}_2 \rightarrow$  GP-zones  $\rightarrow \beta'' \rightarrow \beta', \text{U1, U2, B}' \rightarrow \beta, \text{Si}$ . Στην παραπάνω ακολουθία όλες οι φάσεις είναι μετασταθείς εκτός της  $\beta$  (κυβικής δομής κατακρημνίσματα  $\text{Mg}_2\text{Si}$ ) και του  $\text{Si}$  [9, 10, 12]. Η  $\beta'$  είναι πλούσια σε μαγνήσιο και τα κατακρημνίσματα  $\text{U1}$  σε πυρίτιο [9]. Η  $\beta''$  αποτελείται από αλουμίνιο σε ποσοστό μεγαλύτερο του 50% με την αναλογία πυριτίου/μαγνησίου να καταγράφεται στο 1:1 [9]. Ακόμη για τη  $\beta''$  ή αλλιώς ζώνη GP 2, η οποία έχει μονοκλινής δομή και αποτελείται από κατακρημνίσματα  $\text{Mg}_5\text{Si}_6$  ισχύει ότι επιδρά στις μηχανικές ιδιότητες του υλικού [11]. Όταν τα κατακρημνίσματα της  $\beta''$  λαμβάνουν βελονοειδή μορφή συμβάλλουν στην αύξηση της μηχανικής αντοχής [11]. Στην Εικόνα 1 παρουσιάζεται η βελονοειδής μορφή των ζωνών GP και ο προσανατολισμός τους προς την κατεύθυνση  $\langle 100 \rangle$  για κράμα της σειράς 6XXX. Για τη μελέτη, τον προσδιορισμό της θερμοκρασίας της διαλυτότητας και της ομογενοποίησης των κραμάτων αλουμινίου της σειράς 6XXX χρησιμοποιείται το διάγραμμα της Εικόνας 2 [7, 13].



Εικόνα 1: Προσανατολισμός των βελονοειδών ζωνών GP προς την κατεύθυνση  $\langle 100 \rangle$  σε μικρογραφία κρμάτος της σειράς 6XXX [12].



Εικόνα 2: Ψεύδο-διμερές διάγραμμα φάσεων Al-Mg<sub>2</sub>Si [7] [14].

### 2.1.2 Κρυσταλλογραφικός Ιστός

Ο κρυσταλλογραφικός ιστός ορίζεται ως ο προτιμώμενος προσανατολισμός των κόκκων ή ως η μη τυχαία κατανομή του προσανατολισμού των κρυσταλλογραφικών αξόνων των κόκκων σε πολυκρυσταλλικά υλικά που αναπτύσσεται κατά τη διάρκεια διαφόρων σταδίων επεξεργασίας [15, 16, 17]. Ο ιστός των μεταλλικών υλικών είναι μεγάλης σημασίας, καθώς επιδρά στις μηχανικές ιδιότητες, την ανισοτροπία, την κόπωση και τη θραύση. Αρχικά, εμφανίζεται κατά τη διαδικασία της στερεοποίησης κατά τη χύτευση και έπειτα μπορεί να επηρεαστεί και να αλλάξει μορφή μέσω της παραμόρφωσης, της θερμικής επεξεργασίας και της ομογενοποίησης [16, 18]. Ο κρυσταλλογραφικός ιστός εκφράζεται μέσω του λόγου των κόκκων που έχουν έναν δεδομένο προσανατολισμό προς τον συνολικό αριθμό των κόκκων, δηλαδή μέσω των σχετικών ποσοστών ενός συγκεκριμένου προσανατολισμού κόκκων. Παράγοντες που επηρεάζουν τον ιστό που θα εμφανίσει ένα υλικό μετά τη διαμόρφωση είναι η κρυσταλλική του δομή και ο αρχικός ιστός του [19]. Παρακάτω αναλύονται τα κύρια κρυσταλλογραφικά συστατικά που εμφανίζονται στο FCC.

Υπάρχουν δύο κύριες κατηγορίες ιστού στα υλικά FCC: ο ιστός παραμόρφωσης και ο ιστός ανακρυστάλλωσης. Ο ιστός παραμόρφωσης περιλαμβάνει τα συστατικά: Brass (Bs), S και Cu ενώ ο ιστός ανακρυστάλλωσης περιλαμβάνει αντίστοιχα τα συστατικά Goss και Cube [3]. Κάθε ένας από αυτούς τους ιστούς έχει διαφορετικά συστατικά και μπορεί να επηρεάσει διαφορετικά τις μηχανικές ιδιότητες του υλικού. Η κατανόηση αυτών των ιστών και της εξέλιξής τους κατά τις κατεργασίες διαμόρφωσης π.χ. έλαση είναι σημαντική για τη βελτιστοποίηση της συμπεριφοράς του υλικού. Η απεικόνιση τους πραγματοποιείται κυρίως μέσω διαγραμμάτων πολικών συντεταγμένων (pole figures – PF), διαγραμμάτων αναστραμμένων πολικών συντεταγμένων (inverse pole figures – IPF) και χαρτών EBSD (Electron Back Scatter Diffraction) [20, 3].

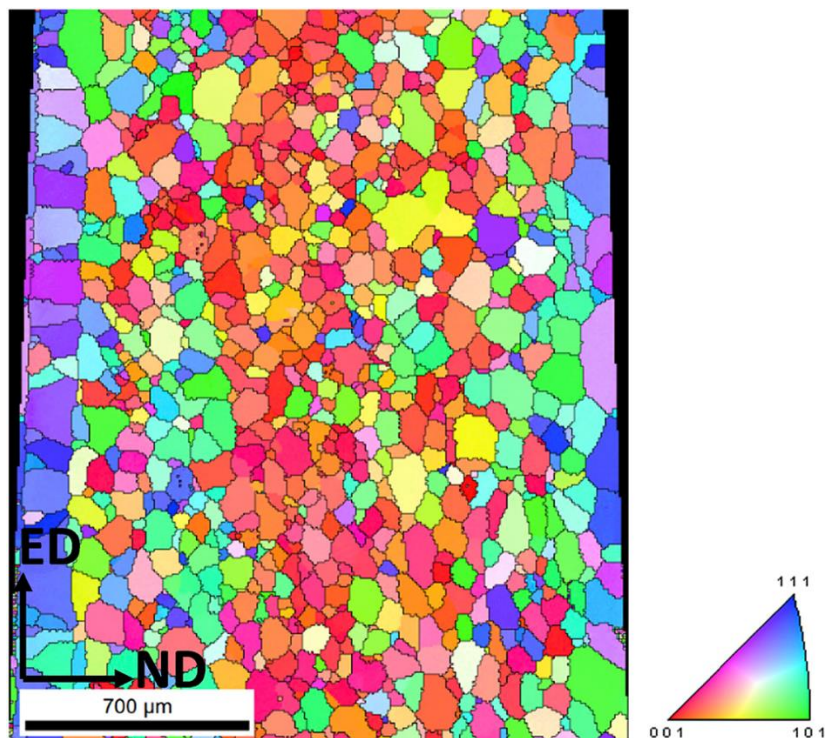
Ειδικότερα, για το Cube συστατικό αξίζει να αναφερθεί πως οι γωνίες που σχηματίζει κατά Euler είναι  $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$ , αφού η μοναδιαία κυψελίδα είναι ευθυγραμμισμένη με τη γεωμετρία του πρότυπου/δείγματος καθώς και ότι οι δείκτες της συγκεκριμένης δομής είναι  $\{hk1\} \parallel ND + (unw) \parallel RD$   $(001) \langle 100 \rangle$  [21], [22].

Τα προϊόντα διέλασης αποκτούν μοναδικό κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό κατά την κατεργασία τους, φανερά διαφοροποιημένο από αυτόν που έχει προκύψει από

την χύτευση και την ομογενοποίηση τους. Παράδειγμα τέτοιου κρυσταλλογραφικού ιστού για το κράμα 6063 φαίνεται στην εικόνα 3.

Πίνακας 2: Συστατικά κρυσταλλογραφικών ιστών στα υλικά που κρυσταλλώνονται στο FCC [23].

Συστατικά Ιστού	$\{hkl\}\langle uvw \rangle$	Γωνίες του Euler		
		$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$
<i>Brass</i>	$\{110\}\langle 112 \rangle$	$35^\circ$	$35^\circ$	$45^\circ$
<i>Goss</i>	$\{110\}\langle 001 \rangle$	$0^\circ$	$45^\circ$	$0^\circ$
<i>Cube</i>	$\{001\}\langle 100 \rangle$	$0^\circ$	$0^\circ$	$0^\circ$
<i>R-Cube</i>	$\{001\}\langle 110 \rangle$	$45^\circ$	$0^\circ$	$0^\circ$
<i>Copper</i>	$\{112\}\langle 111 \rangle$	$90^\circ$	$35^\circ$	$45^\circ$
<i>S</i>	$\{231\}\langle 346 \rangle$	$59^\circ$	$29^\circ$	$63^\circ$

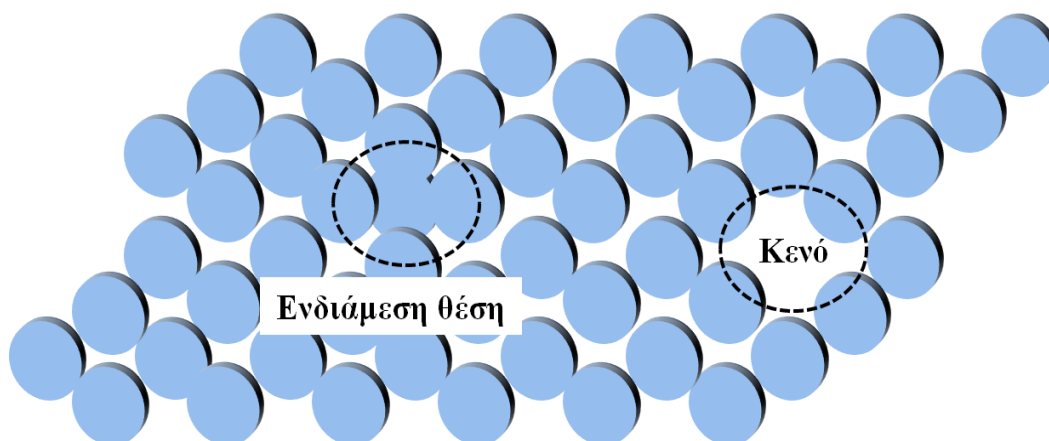


Εικόνα 3: Κρυσταλλογραφικός ιστός κράματος 6063 έπειτα από διαδικασία διέλασης [24].

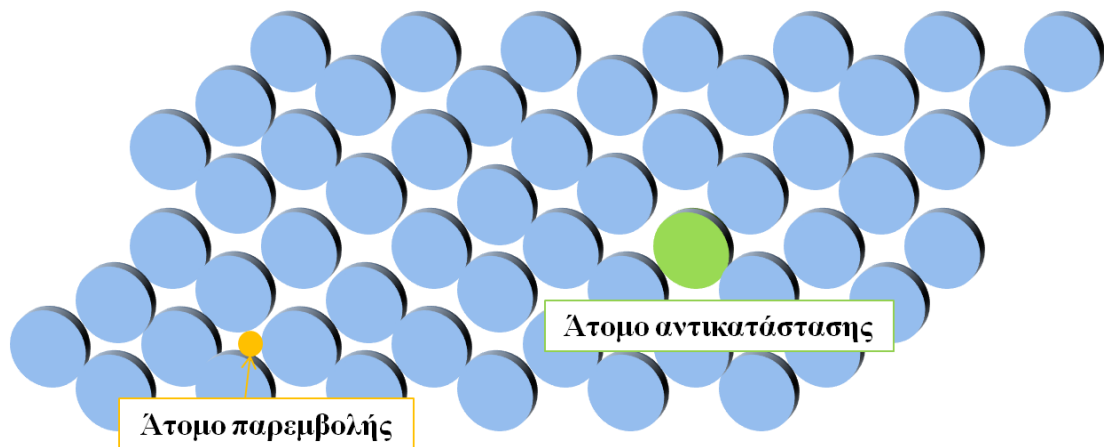
### 2.1.3 Κρυσταλλικές Ατέλειες

Η κατανόηση των κρυσταλλικών ατελειών, της μηχανικής παραμόρφωσης και κατ' επέκταση της κρυσταλλικής παραμόρφωσης είναι απαραίτητη για την απόκτηση γνώσεων σχετικά με τις ιδιότητες των υλικών και την πρόβλεψη της συμπεριφοράς τους υπό διάφορες συνθήκες. Σε κάθε στερεό κρυσταλλικό υλικό εντοπίζονται ατέλειες, οι οποίες εμφανίζονται ως ανωμαλίες του κρυσταλλικού πλέγματος [25]. Αναλόγως τη γεωμετρία αυτών των ανωμαλιών κατηγοριοποιούνται σε σημειακές ατέλειες (0D), γραμμικές ατέλειες ή μονοδιάστατες (1D), επίπεδες ατέλειες ή δυσδιάστατες (2D) και ατέλειες όγκου ή τρισδιάστατες (3D) [26].

Στις σημειακές ατέλειες συγκαταλέγονται δύο κατηγορίες: η κενή θέση (απουσία ατόμου) στο κρυσταλλικό πλέγμα και η ύπαρξη επιπλέον ατόμου στο κρυσταλλικό πλέγμα [26, 25]. Στην δεύτερη κατηγορία, εντάσσονται τα σφάλματα παρεμβολής και αντικατάστασης [26, 25]. Τα σφάλματα αντικατάστασης προκύπτουν όταν κάποιο άτομο του μετάλλου αντικαθίσταται στο κρυσταλλικό πλέγμα από ένα διαφορετικό-ξένο άτομο [27]. Αντίθετα, τα σφάλματα παρεμβολής είναι αποτέλεσμα της εισβολής ατόμων σε θέσεις παρεμβολής του κρυσταλλικού πλέγματος [27, 28]. Οι σημειακές ατέλειες δημιουργούνται μέσω πλαστικής παραμόρφωσης και παρουσιάζονται σχηματικά στις Εικόνες 4 και 5 [26].

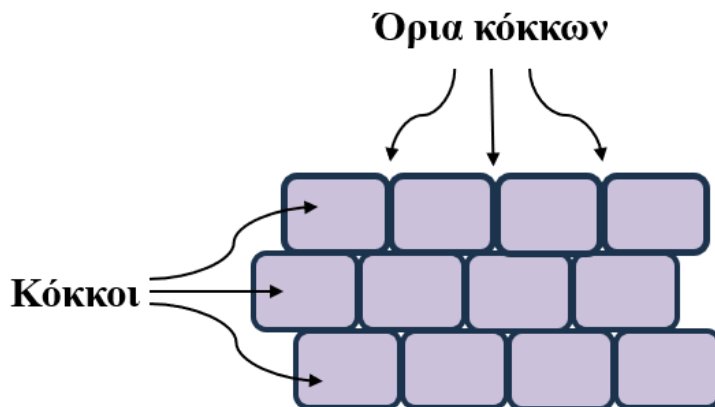


Εικόνα 4: Δισδιάστατη αναπαράσταση σημειακών ατελειών (κενής και ενδιάμεσης θέσης).



Εικόνα 5: Δισδιάστατη αναπαράσταση ατόμων παρεμβολής και αντικατάστασης.

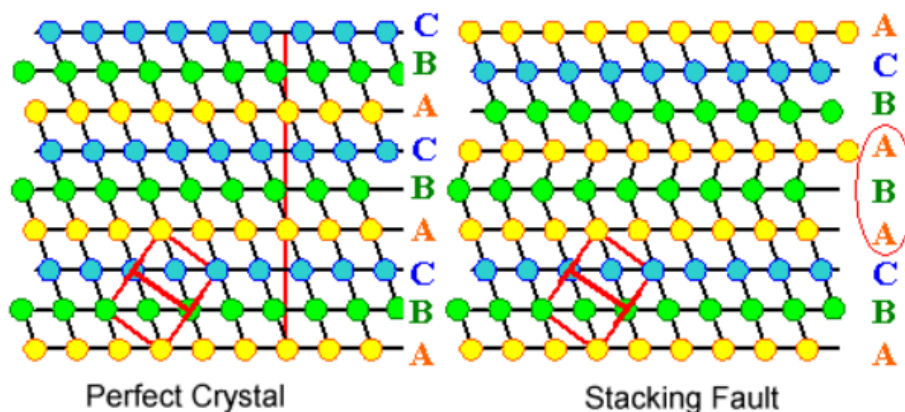
Στις επίπεδες ατέλειες εντάσσονται τα όρια των κόκκων, τα όρια των διδύμων, και τα σφάλματα στοιβαξης [26, 25]. Σημειώνεται πως τα όρια των κόκκων είναι διεπιφάνειες μεταξύ δύο διαφορετικά προσανατολισμένων κόκκων [26, 25]. Αναλόγως με τη διαφορά της γωνίας του προσανατολισμού των δύο κόκκων, διαφοροποιείται η διεπιφανειακή ενέργεια των ορίων [25]. Οι διδυμίες, καθώς και τα όρια μεταξύ αυτών προκαλούνται μηχανικά, κατά τη διάτμηση μιας περιοχής του κρυστάλλου [25].



Εικόνα 6: Δισδιάστατη αναπαράσταση των ορίων των κόκκων

Η εδροκεντρωμένη κυβική δομή (FCC) αποτελεί μία δομή υψηλής πυκνότητας, δηλαδή μια δομή στην οποία τα άτομα διατάσσονται πολύ κοντά το ένα με το άλλο με αποτέλεσμα την απόκτηση υψηλών τιμών τόσο ατομικής πυκνότητας όσο και πυκνότητας στοιβαξης [26, 29]. Τα σφάλματα στοιβαξης που παρατηρούνται στην

εδροκεντρωμένη κυβική δομή (FCC) οφείλονται στη διακοπή της κανονικής αλληλουχίας στοίβαξης των ατόμων [26, 25]. Στην Εικόνα 5 αποτυπώνεται η αλληλουχία στα επίπεδα στοίβαξης ενός FCC υλικού ως ABCABC... και το σφάλμα στοίβαξης σύμφωνα με το οποίο διακόπτεται αυτή διαδοχή των επιπέδων και γίνεται ABCABABC [25, 30]. Αυτού του είδους τα σφάλματα μπορούν να επηρεάσουν την πλαστικότητα του κρυστάλλου.



Εικόνα 7: Τέλεια και ελαττωματική ακολουθία στοίβαξης για έναν κρύσταλλο FCC [30].

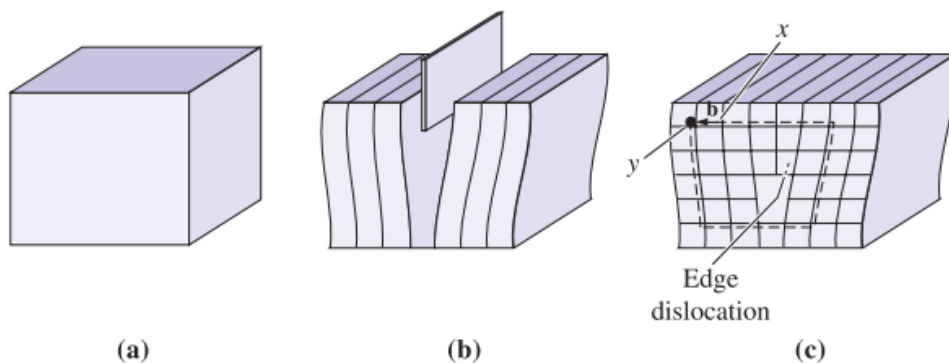
Στις κρυσταλλικές ατέλειες ανήκουν και οι ατέλειες όγκου. Εδώ, εντάσσονται τα κατακρημνίσματα, τα κενά που συναντώνται σε όρια κόκκων ή στους πυρήνες των διαταραχών και οι περιοχές με εγκλωβισμένο αέρα [26]. Οι συγκεκριμένες ατέλειες μπορούν να επηρεάσουν την αντοχή και την ολκιμότητα του υλικού.

Η κατηγορία, στην οποία δίνεται παραπάνω έμφαση στην παρούσα εργασία είναι οι γραμμικές και τριών διαστάσεων ατέλειες, δηλαδή οι διαταραχές. Πρόκειται για κρυσταλλικές ατέλειες που εμφανίζονται συνήθως κατά την στερεοποίηση ή κατά την παραμόρφωση του υλικού και όταν διαταράσσεται η κανονική διάταξη των ατόμων στα κρυσταλλικά υλικά [31]. Διακρίνονται με βάση τη γεωμετρία τους σε διαταραχές ακμής και διαταραχές κοχλία.

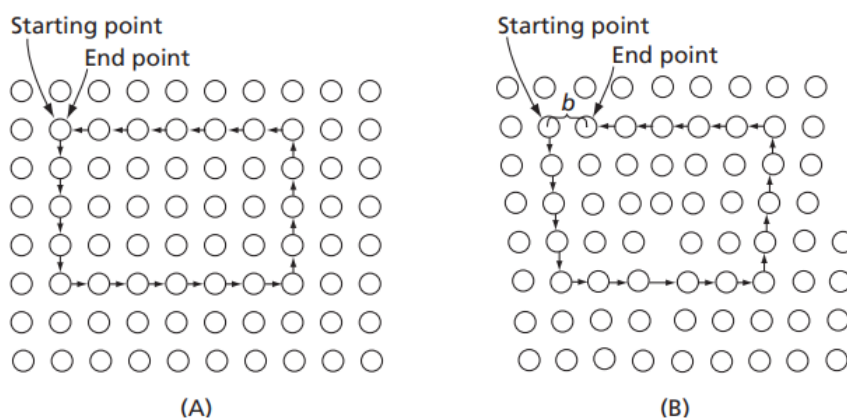
Η διαταραχή ακμής προκύπτει με την προσθήκη ενός επιπλέον ημι-επιπέδου ατόμων στο κρυσταλλικό πλέγμα, η κάτω άκρη του οποίου αντιπροσωπεύει την διαταραχή και βρίσκεται εντός του κρυστάλλου [25, 31]. Η γραμμή που σχηματίζεται και εκτείνεται κάθετα στο κάτω άκρο του επιπλέον ημι-επιπέδου ορίζεται ως γραμμή διαταραχής [25]. Κατά τον σχηματισμός ενός βρόχου που ξεκινάει από μία θέση γύρω από την διαταραχή της ακμής και διανύοντας ίσο αριθμό ατόμων σε κάθε



κατεύθυνση το σημείο τερματισμού του βρόχου είναι διαφορετικό από το σημείο εκκίνησης λόγω της ύπαρξης της διαταραχής της ακμής [31]. Το διάνυσμα Burgers ( $b$ ) ορίζεται ως το διάνυσμα που απαιτείται για να ταυτιστούν τα δύο σημεία που αναφέρθηκαν προηγουμένως και είναι πάντα κάθετο στη γραμμή της διαταραχής ακμής (Εικόνα 7) [26]. Η ύπαρξη αυτής της διαταραχής έχει ως αποτέλεσμα την τοπική παραμόρφωση του κρυσταλλικού πλέγματος κυρίως κοντά στο σημείο της διαταραχής όπου ορισμένα άτομα συμπιέζονται και άλλα απομακρύνονται αναλόγως τη θέση τους σε σχέση με τη διαταραχή (Εικόνα 8) [25, 31]. Η διαταραχή συμβολίζεται ως « $\perp$ ». Αυτό το σύμβολο ορίζει τη θέση της διαταραχής και ο μακρύς άξονας δείχνει προς το επιπλέον ημιεπίπεδο [31]. Τέλος σε ορισμένες περιπτώσεις, όταν δηλαδή η προσθήκη του επιπλέον ημιεπιπέδου πραγματοποιείται στο κάτω μέρος του κρυστάλλου, η διαταραχή συμβολίζεται με το σύμβολο « $\top$ » [25].

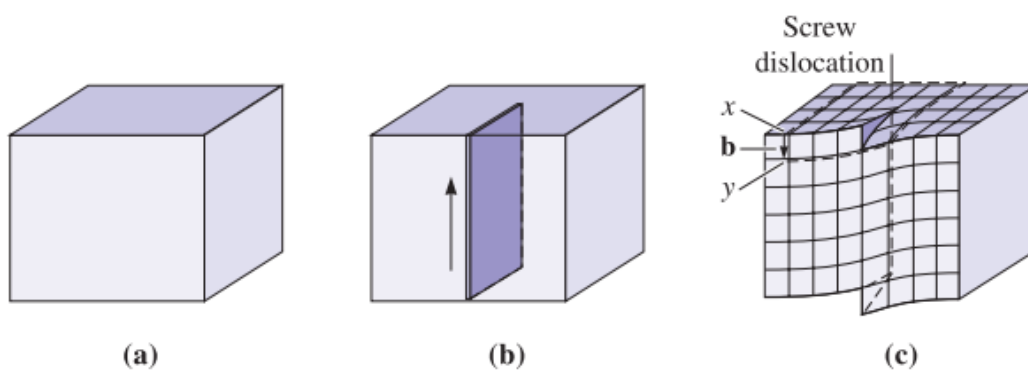


Εικόνα 8: Τρισδιάστατη απεικόνιση (a) τέλειου κρυστάλλου, (b) εισαγόμενου ημιεπιπέδου ατόμων και (c) διαταραχής ακμής στο κάτω άκρο του επιπλέον ημιεπιπέδου. Το  $b$  απεικονίζει το διάνυσμα Burgers [31].

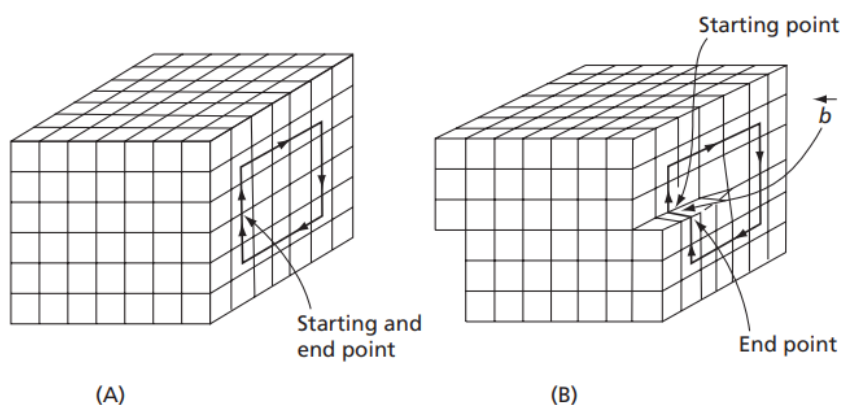


Εικόνα 9: Ο βρόχος Burgers για μια διαταραχή ακμής: (A) Τέλειος κρύσταλλος και (B) κρύσταλλος με διαταραχή [32].

Η διαταραχή κοχλία δημιουργείται κατά τη διάτμηση του πλέγματος και εμφανίζεται ως η μετατόπιση μέρος του πλέγματος κατά ένα άτομο (Εικόνα 9) [25]. Το όνομα αυτής της διαταραχής προκύπτει μέσω της παρατήρησης της κίνησής της. Πιο συγκεκριμένα, αν ξεκινήσει κανείς από ένα σημείο  $x$  του κρυσταλλικού πλέγματος και διανύσει μια διαδρομή γύρω από αυτό θα καταλήξει αμέσως κάτω από το σημείο  $x$  και αν επαναλάβει την ίδια διαδικασία θα καταλήγει πάντα κάτω από αυτό το σημείο (Εικόνα 10) [25]. Η διαταραχή κοχλία λοιπόν ακολουθεί την ελικοειδή διαδρομή που ακολουθεί και μια βίδα και συχνά συμβολίζεται ως « $\cup$ » [25]. Ακόμη, όπως και στις διαταραχές ακμής έτσι και στις διαταραχές κοχλία το διάνυσμα Burgers ( $b$ ) είναι το διάνυσμα που απαιτείται για να κλείσει ο θεωρητικός βρόχος, ενώ για τις διαταραχές κοχλία είναι πάντα κάθετο στη γραμμή της διαταραχής [26, 31].

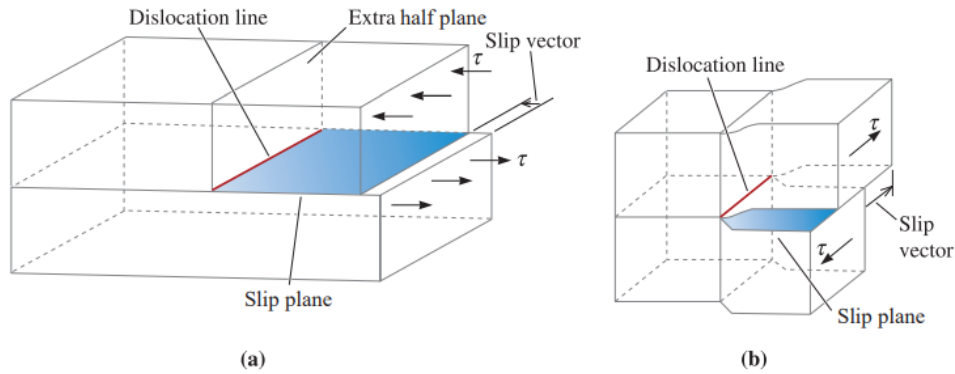


Εικόνα 10: Τρισδιάστατη απεικόνιση (a) τέλειου κρυστάλλου, (b), (c) κοπής και διάτμησης του κρυσταλλικού πλέγματος με απόσταση ενός ατόμου. Η γραμμή κατά μήκος της οποίας γίνεται η διάτμηση είναι μια διαταραχή κοχλία και το  $b$  απεικονίζει το διάνυσμα Burgers [31].

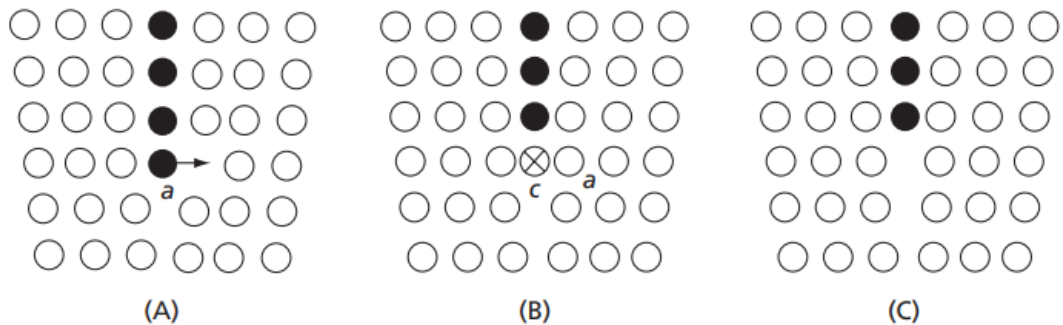


Εικόνα 11: Ο βρόχος Burgers για μια διαταραχή με προσανατολισμό κοχλία. (A) Τέλειος κρύσταλλος και (B) κρύσταλλος με διαταραχή [32].

Οι διαταραχές έχουν την ιδιότητα να μετακινούνται μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα εφόσον τους ασκηθεί φορτίο, ευκολότερα αν ασκηθεί διατμητική τάση (Εικόνα 11) [31]. Για τις διαταραχές ακμής ισχύει ότι κατά την εφαρμογή μιας διατμητικής δύναμη στο κρυσταλλικό πλέγμα παρατηρείται ότι η διαταραχή κινείται προς την ίδια κατεύθυνση με την εφαρμοζόμενη διατμητική δύναμη [31]. Η κατεύθυνση της κίνησης της διαταραχής είναι παράλληλη με το διάνυσμα Burgers και κάθετη στην ίδια την διαταραχή [31]. Για τις διαταραχές κοχλία ισχύει ότι αν υπάρχει μια συγκεκριμένη κατεύθυνση διάτμησης, τότε η διαταραχή θα κινηθεί κάθετα προς αυτή τη διεύθυνση διάτμησης [25]. Αυτή η κατεύθυνση κίνησης είναι, επίσης, κάθετη στο διάνυσμα Burgers [25]. Οι κινήσεις των διαταραχών, οι οποίες περιεγράφηκαν μπορούν να είναι αποτέλεσμα της ολίσθησης τους, κάτι που αποτελεί τον πιο συνηθισμένο τρόπο κίνησης των διαταραχών ή της αναρρίχησης αυτών («climb») [32]. Οι κινήσεις που προκύπτουν μέσω ολίσθησης συντελούν στην πλαστική παραμόρφωση του υλικού, καθώς ευνοούν τη βαθμιαία αποδυνάμωση των δεσμών των ατόμων του επιπέδου ολίσθησης [31]. Στα εδροκεντρωμένα κυβικά πλέγματα, το κύριο επίπεδο ολίσθησης είναι το οκταεδρικό επίπεδο  $\{111\}$  και η μετακίνηση των ατόμων στο επίπεδο της διαταραχής (ακμής) προκαλεί τη μετακίνηση της διαταραχής κατά μία μονάδα [32]. Η μετακίνηση αυτή αναπαρίσταται από το διάνυσμα Burgers, το οποίο για αυτόν τον τύπο είναι  $\frac{1}{2}[\bar{1}10]$  [32]. Όσον αφορά στον δεύτερο τρόπο διάδοσης των διαταραχών, δηλαδή την αναρρίχηση («climb»), αυτή πραγματοποιείται όταν μια διαταραχή κινείται κάθετα προς το επίπεδο ολίσθησης, συνήθως λόγω της διάχυσης κενών ή διαμέσων ατόμων [32]. Πιο συγκεκριμένα, κατά την αναρρίχηση της διαταραχής, κενά ή διάμεσες θέσεις στο πλέγμα διαχέονται προς ή από τον πυρήνα της διαταραχής, επιτρέποντάς της να αναρριχηθεί προς τα πάνω ή προς τα κάτω στο πλέγμα (Εικόνα 12) [32].



Εικόνα 12: Σχηματική απεικόνιση της γραμμής διαταραχής, του επιπέδου ολίσθησης και του διανύσματος ολίσθησης (Burgers) για (α) μια διαταραχή ακμής και β) μια διαταραχή κοχλία [31].



Εικόνα 13: Climb μιας διαταραχής ακμής [32].

Η κίνηση των διαταραχών έχει ορισμένες επιπτώσεις στις μηχανικές ιδιότητες των κρυσταλλικών υλικών. Η υψηλή πυκνότητα ( $\rho$ ) των διαταραχών συνδέεται με την ενίσχυση της σκληρότητας του υλικού. Ο όρος πυκνότητα των διαταραχών αναφέρεται στο συνολικό μήκος των γραμμών των διαταραχών σε μια μονάδα όγκου και ο πειραματικός προσδιορισμός τους απαιτεί τη λήψη μικρογραφιών από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διερχόμενης δέσμης [32]. Η αύξηση του αριθμού των διαταραχών οδηγεί σε αύξηση των μεταξύ τους αλληλεπιδράσεων και, άρα, στην παρεμπόδιση της κίνησης τους, αυξάνοντας κατά αυτόν τον τρόπο την αντοχή του υλικού [25]. Αντίστοιχες αλληλεπιδράσεις πραγματοποιούνται και με άλλα σφάλματα του πλέγματος πέραν των διαταραχών όπως είναι τα όρια των κόκκων ή τα σημειακά σφάλματα [32]. Το αποτέλεσμα αυτής της αλληλεπίδρασης μπορεί να είναι εμπλοκή, ακύρωση ή πολλαπλασιασμός των διαταραχών [32].

## 2.2 ΔΟΚΙΜΗ ΕΦΕΛΚΥΣΜΟΥ

Η δοκιμή εφελκυσμού αποτελεί μια από τις σημαντικότερες δοκιμές που υπόκειται ένα υλικό, καθώς βοηθάει στην πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς του κατά την επιβολή φορτίου ή άλλης μη αξονικής τάσης [33]. Από αυτή τη δοκιμή προκύπτουν οι τιμές του ορίου και του μέτρου ελαστικότητας, του ορίου θραύσης κ.α. [33]. Τα αποτελέσματα που λαμβάνονται από τη δοκιμή εφελκυσμού χαρακτηρίζονται ως τα πιο σημαντικά για το σχεδιασμό ενός υλικού και την παραγωγή του [33, 34]. Για το λόγο αυτό υπάρχουν ορισμένα πρότυπα και οδηγίες οι οποίες ακολουθούνται ανάλογα με τον τύπο του υλικού και την προοριζόμενη εφαρμογή ούτως ώστε να αποφεύγονται οι αστοχίες των υλικών [34].

### 2.2.1 Πρότυπα Δοκιμής Εφελκυσμού

Το πρώτο αμερικανικό πρότυπο δοκιμών εφελκυσμού που εκδόθηκε το 1924 αναθεωρείται και επανεκδίδεται μέχρι σήμερα με την πιο σύγχρονη ονομασία ως ASTM E8/E8M-22 [34, 35]. Το πρότυπο αυτό καλύπτει τις δοκιμές εφελκυσμού μεταλλικών υλικών σε διάφορες μορφές, συμπεριλαμβανομένων πλακών, ράβδων και συρμάτων [35]. Ισοδύναμο είναι και το διεθνές πρότυπο ISO 6892 το οποίο χωρίζεται σε δύο επιμέρους κατηγορίες [34]. Το ISO 6892-1 το οποίο παρέχει οδηγίες για τη δοκιμή εφελκυσμού μεταλλικών υλικών σε θερμοκρασία δωματίου και το ISO 6892-2 το οποίο παρέχει οδηγίες για τη δοκιμή εφελκυσμού μεταλλικών υλικών σε υψηλές θερμοκρασίες [36, 37].

### 2.2.2 Κρίσιμοι Παράγοντες

Ανεξαρτήτως όμως των προτύπων που χρησιμοποιούνται στη δοκιμή εφελκυσμού υπάρχουν ορισμένοι κρίσιμοι παράγοντες που πρέπει να ληφθούν υπόψιν για την απόκτηση σωστών αποτελεσμάτων. Οι παράγοντες αυτοί είναι:

1. Ο ρυθμός επιβολής φορτίου: Ο ρυθμός με τον οποίο παραμορφώνεται ένα υλικό κατά τη διάρκεια μιας δοκιμής εφελκυσμού μπορεί να επηρεάσει τις μηχανικές του ιδιότητες. Υψηλότεροι ρυθμοί παραμόρφωσης ( $>10^{-3}\text{s}^{-1}$ ) μπορούν να οδηγήσουν σε υψηλότερες τιμές αντοχής, ενώ χαμηλότεροι ρυθμοί παραμόρφωσης μπορούν να οδηγήσουν σε υψηλότερες τιμές ολκιμότητας και χρησιμοποιούνται κυρίως σε δοκιμές ερπυσμού [38].
2. Οι διαστάσεις του δοκιμίου: Είναι σημαντική η επεξεργασία του δοκιμίου ούτως ώστε να είναι λείο και να μην παρουσιάζει επιφανειακές ατέλειες που

μπορούν να επηρεάσουν την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων. Ακόμη, σημαντικός παράγοντας σωστής μέτρησης είναι το πάχος του δοκιμίου για την αποφυγή της τοπικής παραμόρφωσης.

3. Η ευθυγράμμιση και τα συστήματα λαβής του δοκιμίου: Η συγκεκριμένη παράμετρος μπορεί να επηρεάσει τα αποτελέσματα της δοκιμής, καθώς σε περίπτωση κακής ευθυγράμμισης δεν εφαρμόζεται ομοιόμορφη τάση στη διατομή του δείγματος ενώ μπορεί να προκληθεί και ολίσθηση κατά τη διάρκεια της δοκιμής [34].
4. Η θερμοκρασία: Λόγω της πολύπλοκης φύσης των μετάλλων και της ιδιότητας τους να παρουσιάζουν διαφορετική μηχανική συμπεριφορά σε διαφορετικές θερμοκρασίες είναι απαραίτητο η δοκιμή εφελκυσμού να γίνει στην κατάλληλη θερμοκρασία με βάση τη προβλεπόμενη εφαρμογή.

## 2.3 ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΠΛΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑ

Για να μπορέσει να κατανοήσει κανείς τον όρο της κρυσταλλικής πλαστικότητας θα πρέπει να προηγηθεί η ανάλυση των δύο όρων δηλαδή του κρυστάλλου και πλαστικής παραμόρφωσης. Ο κρύσταλλος ή κόκκος, είναι στερεό υλικό που αποτελείται από δομή μακράς τάξης, η οποία μπορεί να συναχθεί από την ύπαρξη των κορυφών Braggs σε ένα ακτινοδιάγραμμα [39]. Η πλαστική παραμόρφωση αναφέρεται σε όλα τα στερεά υλικά άρα και στα μέταλλα (κρυσταλλική δομή) που έχουν την δυνατότητα να παραμορφωθούν μόνιμα. Στα μέταλλα η πλαστική παραμόρφωση προκαλείται συνήθως από πλαστική διάτμηση, η οποία πραγματοποιείται σε συγκεκριμένα συστήματα ολίσθησης, δηλαδή σε συγκεκριμένα επίπεδα και κατευθύνσεις ολίσθησης [40]. Η παραπάνω διαδικασία επιτυγχάνεται ευκολότερα μέσω της ύπαρξης διαταραχών στα συγκεκριμένα συστήματα ολίσθησης [40].

### 2.3.1 Ιστορική Αναδρομή

Η παρατήρηση και η κατανόηση της πλαστικής παραμόρφωσης χρονολογείται πιθανότατα από την αρχαιότητα. Η μεταλλοτεχνία έχει μια ιστορία που εκτείνεται σε χιλιετίες, με ενδείξεις για εξειδικευμένες τεχνικές σιδηρουργίας και σφυρηλάτησης σε πολιτισμούς που χρονολογούνται από την εποχή του χαλκού και ακόμη νωρίτερα. Παρόλα αυτά η συστηματική επιστημονική έρευνα της πλαστικής παραμόρφωσης και της σχέσης μεταξύ της κρυσταλλικής δομής και των μηχανικών ιδιοτήτων των μετάλλων δεν αναπτύχθηκε πλήρως μέχρι τον 20<sup>ο</sup> αιώνα [41].

Στις αρχές του 20<sup>ου</sup> αιώνα αναπτύχθηκε η θεωρία των διαταραχών. Η έννοια των διαταραχών εισήχθη αρχικά από τον Vito Volterra το 1907 [42], στο πλαίσιο της θεωρίας της ελαστικότητας, ενώ το 1934 ο G. I. Taylor διατύπωσε τη θεωρία της εργοσκλήρυνσης, η οποία αποτέλεσε τη βάση της θεωρίας των διαταραχών [43]. Ο Taylor εξέτασε την πλαστική ανισοτροπία των υλικών κάνοντας ορισμένες παραδοχές, οι οποίες δεν αντιπροσωπεύουν έναν πολυκρύσταλλο [44]. Ο ίδιος καθώς και άλλοι ερευνητές της εποχής όπως ο Egon Orowan και ο Michael Polanyi απέδωσαν την πλαστική παραμόρφωση των μεταλλικών υλικών στην κίνηση των διαταραχών μέσω του κρυσταλλικού πλέγματος [26].

Με το πέρας των ετών ακολούθησε και περαιτέρω εξέλιξη της θεωρίας των διαταραχών παράλληλα με την υλικοτεχνική ανάπτυξη [45]. Έτσι, στα μέσα του 20<sup>ου</sup>

αιώνα η μέχρι τότε θεωρητική προσέγγιση στο φαινόμενο των διαταραχών απέκτησε και πειραματική υπόσταση μέσω διατάξεων όπως αυτής της Ηλεκτρονικής Μικροσκοπίας Διερχόμενης Δέσμης (TEM) και της περίθλασης ακτίνων X (XRD), οι οποίες επέτρεψαν την λεπτομερή παρατήρηση των διαταραχών [45].

Στις δεκαετίες που ακολούθησαν, δηλαδή από το 1960 έως το 1990 αναπτύχθηκαν και τέθηκαν σε πειραματική εφαρμογή τα πρώτα μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας [46]. Μέσω αυτών, μελετήθηκε η κίνηση των διαταραχών σε μικροκλίμακα, ενώ, μέσω της εξέλιξης των υπολογιστικών συστημάτων, πραγματοποιήθηκε και σχεδιασμός μοντέλων από το ατομικό επίπεδο έως το μακροσκοπικό επίπεδο (multiscale modeling) [44, 46].

Από τότε έως σήμερα η διαρκής τεχνολογική εξέλιξη έχει επιτρέψει την πραγματοποίηση πολύπλοκων πειραμάτων μέσω του υπολογιστή, όπως η προσομοίωση των κινήσεων των διαταραχών σε πολυκρυσταλλικά υλικά [46]. Ακόμη, έχουν αναπτυχθεί νέα μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας και νέες υπολογιστικές μέθοδοι [44]. Τα νέα εργαλεία που διατίθενται σε συνδυασμό με την αυξανόμενη γνώση στα ζητήματα κρυσταλλικής πλαστικότητας επιτρέπουν την προσομοίωση των κινήσεων και αλληλεπιδράσεων των διαταραχών και των επιπτώσεων τους στη συμπεριφορά των υλικών [44].

### **2.3.2 Θεωρία και Μοντέλα Κρυσταλλικής Πλαστικότητας**

#### ***2.3.2.1 Ελαστική και πλαστική παραμόρφωση μονοκρυστάλλου***

Βασισμένη στην κρυσταλλογραφία, στην εφαρμογή του εντατικού πεδίου και στις διαταραχές, η θεωρία της κρυσταλλικής πλαστικότητας αποτελεί ένα καταστατικό μοντέλο, το οποίο αποτυπώνει τη συμπεριφορά των κρυσταλλικών υλικών σε μικροκλίμακα όταν υπόκεινται σε παραμόρφωση. Παρακάτω αναλύονται οι βασικές αρχές της θεωρίας της κρυσταλλικής πλαστικότητας και οι βασικές καταστατικές εξισώσεις στις οποίες στηρίζεται.

Στα μεταλλικά υλικά τα όρια του κάθε κόκκου αποτελούν μεταβατικές περιοχές μεταξύ γειτονικών κόκκων [38]. Η μονοκρυσταλλική πλαστικότητα εξετάζει τη μηχανική απόκριση των κόκκων υπό εξωτερικά φορτία. Μια από τις παραμέτρους που επηρεάζουν την πλαστικότητα των μονοκρυστάλλων είναι ο προσανατολισμός τους, λόγω της ανισοτροπίας που επιδεικνύουν [38]. Ακόμη, σημαντικό ρόλο στην



μονοκρυσταλλική πλαστικότητα έχουν τα συστήματα ολίσθησης, δηλαδή οι διευθύνσεις και τα επίπεδα ολίσθησης, καθώς η περιστροφή ενός μονοκρυστάλλου συνδέεται με την πλαστική παραμόρφωση του, σε συγκεκριμένο σύστημα ολίσθησης [38]. Η μαθηματική αποτύπωση της έναρξης της ολίσθησης αποτυπώνεται μέσω του νόμου του Schmid. Για να μπορέσει να υπάρξει διάτμηση των κόκκων ενός υλικού σε ένα επίπεδο ολίσθησης και να πραγματοποιηθεί η ολίσθηση του επιπέδου αυτού οι δυνάμεις πρέπει να δρουν με κατάλληλο τρόπο. Ωστόσο, μια δύναμη στο επίπεδο ολίσθησης από μόνη της δεν είναι αρκετή. Εντός του επιπέδου ολίσθησης η δύναμη πρέπει επίσης να έχει φορά προς την κατεύθυνση της ολίσθησης. Εάν, για παράδειγμα, μια διατμητική δύναμη δρα σε ένα επίπεδο ολίσθησης αλλά κατευθύνεται κάθετα προς τη διεύθυνση ολίσθησης, το επίπεδο ολίσθησης δεν θα διατμηθεί. Η δύναμη σε ένα σύστημα ολίσθησης μπορεί να προσδιοριστεί από την εξωτερική δύναμη  $F_0$  ανάλογα με τον χωρικό προσανατολισμό του συστήματος ολίσθησης, ο οποίος ορίζεται από τις γωνίες  $\lambda$  και  $\psi$ , ενώ ο καθοριστικός παράγοντας για την ολίσθηση δεν είναι η δύναμη από μόνη της αλλά η δύναμη ανά μονάδα επιφάνειας, η οποία είναι γνωστή ως διατμητική τάση. Η διατμητική δύναμη ορίζεται ως:

$$F = F_0 \times \cos(\lambda)$$

*Εξίσωση 1: Εξίσωση διατμητικής δύναμης*

και η διατμητική τάση ως:

$$\tau = F / A$$

*Εξίσωση 2: Εξίσωση διατμητικής τάσης.*

Όπως υπάρχει εξάρτηση μεταξύ της διατμητικής δύναμης και της γωνίας  $\lambda$ , έτσι υπάρχει και εξάρτηση μεταξύ του επιπέδου ολίσθησης και της γωνίας  $\psi$ . Εάν το εμβαδόν της διατομής του δοκιμίου συμβολίζεται με  $A_0$ , το εμβαδόν του επιπέδου ολίσθησης προκύπτει από το συνημίτονο της γωνίας  $\psi$  μέσω του τύπου

$$A = A_0 / \cos(\psi)$$

*Εξίσωση 3: Εξίσωση εμβαδού επιπέδου ολίσθησης*

Εάν γίνει χρήση του τύπου για τη διατμητική δύναμη και το εμβαδόν του επιπέδου ολίσθησης στον ορισμό της διατμητικής τάσης λαμβάνεται η σχέση διατμητικής τάσης

$$\tau = F_0 / A_0 \times \cos(\psi) \times \cos(\lambda).$$

*Εξίσωση 4: Εξίσωση διατμητικής τάσης*

Στην εξίσωση αυτή το πηλίκο της δύναμης  $F_0$  και του εμβαδού της διατομής  $A_0$  αντιστοιχεί στην εξωτερική ορθή τάση  $\sigma_0$  και κατά αυτόν τον τρόπο μπορεί να καταγραφεί ως [47]:

$$\tau = \sigma_0 \times \cos(\psi) \times \cos(\lambda)$$

*Εξίσωση 5: Εξίσωση διατμητικής τάσης*

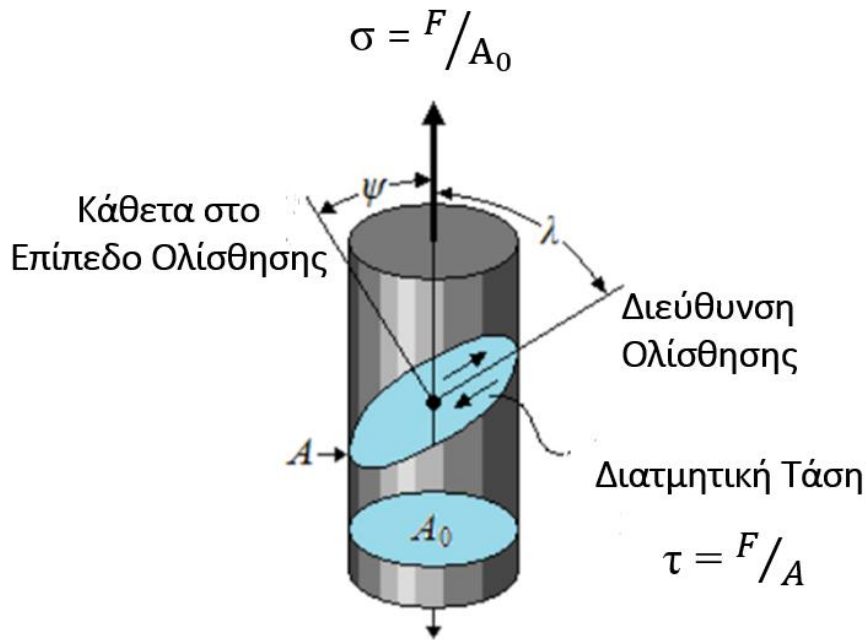
Η παραπάνω εξίσωση ονομάζεται νόμος του Schmid και μπορεί να γραφεί και ως [47]:

$$\tau = \sigma_0 \times m$$

*Εξίσωση 6: Εξίσωση διατμητικής τάσης με χρήση του παράγοντα Schmid*

όπου το  $m$  ορίζεται ως παράγοντας Schmid.

Γενικότερα, ο νόμος του Schmid περιγράφει τη διατμητική τάση που δρα σε ένα σύστημα ολίσθησης ως συνάρτηση της εξωτερικής ορθής τάσης και σύμφωνα με αυτόν το επίπεδο ολίσθησης, η διεύθυνση ολίσθησης και η κρίσιμη αναλυόμενη διατμητική τάση (CRSS) καθορίζουν ποια συστήματα ολίσθησης μπορούν να ολισθήσουν [40]. Ακόμη, παράλληλα με την αύξηση της εφελκυστικής δύναμης αυξάνεται και η αναλυόμενη διατμητική τάση μέχρι να επιτευχθεί η κρίσιμη διατμητική τάση σε ένα σύστημα, η οποία είναι υπεύθυνη για την έναρξη της πλαστικής παραμόρφωσης του κρυστάλλου μέσω του πρωταρχικού συστήματος ολίσθησης [48]. Από τον νόμο του Schmid προκύπτει ότι το πρωτεύον σύστημα ολίσθησης θα είναι αυτό με τον υψηλότερο παράγοντα Schmid [48].



Εικόνα 14: Αναπαράσταση της παραγόμενης διατμητικής τάσης σε ένα σύστημα ολίσθησης [47].

### 2.3.2.2 Ελαστική και πλαστική παραμόρφωση πολυκρυστάλλων

Η διαφορά μεταξύ των πολυκρυστάλλων και των μονοκρυστάλλων περιορίζεται στο γεγονός ότι οι πρώτοι αποτελούνται από πολλούς κόκκους με διαφορετικό κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό [40]. Γενικότερα, η πολυκρυσταλλική πλαστικότητα βασίζεται στις αρχές που αναφέρθηκαν για τη μονοκρυσταλλική πλαστικότητα με τη διαφορά ότι τώρα καταγράφοντας τη συνολική συμπεριφορά των μεμονωμένων κόκκων είναι εφικτή η μοντελοποίηση της συνολικής μηχανικής απόκρισης του υλικού [40, 44]. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στην κατανομή του προσανατολισμού των κόκκων, καθώς μπορεί να επηρεάσει τις μακροσκοπικές ιδιότητες του υλικού.

Η μαθηματική αποτύπωση της παραπάνω θεωρίας γίνεται εφικτή μέσω της χρήσης ορισμένων καταστατικών εξισώσεων. Αρχικά, εξετάζεται η κινηματική της παραμόρφωσης, η οποία ορίζεται μέσω της βαθμίδας παραμόρφωσης  $F$  και δίνεται μέσω της Εξίσωσης 7 [44]:

$$F = F_e F_p$$

Εξίσωση 7: Εξίσωση σύνδεσης των βαθμίδων παραμόρφωσης

όπου  $F_e$  η βαθμίδα ελαστικής παραμόρφωσης και  $F_p$  η βαθμίδα πλαστικής παραμόρφωσης [44]. Αυτή η εξίσωση αποτυπώνει τη σχέση μεταξύ των βαθμίδων

παραμόρφωσης και των τάσεων. Το κομμάτι που αφορά το ελαστικό μέρος της εξίσωσης αναλύεται περαιτέρω μέσω των Εξισώσεων 8 και 9 [44]:

$$P = CE_e$$

*Εξίσωση 8: Εξίσωση γενικευμένου τύπου του Hooke*

$$E_e = \frac{1}{2}(F_e^T F_e - I)$$

*Εξίσωση 9: Εξίσωση της πεπερασμένης ελαστικής παραμόρφωσης*

Το κομμάτι που αφορά τον πλαστικό όρο της εξίσωσης προκύπτει από τις Εξισώσεις 10 και 11:

$$\dot{F}_p = L_p F_p$$

*Εξίσωση 10: Νόμος ροής*

όπου  $L_p$  ο ρυθμός της πλαστικής ροής [49].

$$L_p = \dot{F}_p F_p^{-1} = \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}^{\alpha} (m^{\alpha} \otimes n^{\alpha})$$

*Εξίσωση 11: Κλίση του διανύσματος ρυθμού πλαστικής παραμόρφωσης  $L_p$*

όπου  $\dot{\gamma}$  ο ρυθμός διάτμησης,  $m^{\alpha}$  το μοναδιαίο διάνυσμα κατά μήκος του διανύσματος διάτμησης,  $n^{\alpha}$  το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στο επίπεδο ολίσθησης του συστήματος ολίσθησης και  $\alpha$  ο αριθμός των ενεργών συστημάτων ολίσθησης [44].

### 2.3.2.3 Φαινομενολογικό μοντέλο σύστασης κρυσταλλικής πλαστικότητας

Για το φαινομενολογικό μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας που εφαρμόζεται σε κρυσταλλικά υλικά με εδροκεντρωμένη κυβική δομή θεωρείται πως η έναρξη της ολίσθησης στα 12 συστήματα ολίσθησης ( $\alpha$ ), μέσω της κρίσιμης διατμητικής τάσης ( $\xi_{\alpha}$ ) σε κάθε σύστημα εξελίσσεται από μία αρχική τιμή  $\xi_0$  σε μια τιμή κορεσμού  $\xi_{\infty}$  [50]. Το γεγονός αυτό οφείλεται στην ολίσθηση όλων των συστημάτων  $\langle 011 \rangle \{111\}$  και καταγράφεται μέσω της παρακάτω εξίσωσης, όπου  $h_0$  η αρχική σκληρότητα και  $h_{\alpha\beta}$  ο συντελεστής αλληλεπίδρασης της αριθμητικής παραμέτρου  $\alpha$  [50]:

$$\dot{\xi}^\alpha = h_0 |\dot{\gamma}^\beta| \left| 1 - \xi^\beta / \xi_\infty^\beta \right|^a \text{sgn}(1 - \xi^\beta / \xi_\infty^\beta) h_{\alpha\beta}$$

*Εξίσωση 12: Εξίσωση μέσης τιμής  $\xi_\alpha$  [50]*

Έπειτα τη χρήση της παραπάνω εξίσωσης μπορεί να υπολογιστεί και ο ρυθμός διάτμησης σε ένα σύστημα ολίσθησης  $\alpha$  ως εξής:

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 |\tau^\alpha / \xi^\alpha|^n \text{sgn}(\tau^\alpha / \xi^\alpha)$$

*Εξίσωση 13: Εξίσωση μέσης τιμής  $\gamma_\alpha$  [50]*

#### **2.3.2.4 Μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας πυκνότητας διαταραχών**

Η πυκνότητα ( $\rho$ ) των διαταραχών ενός κρυσταλλικού υλικού ορίζεται όπως έχει ήδη αναφερθεί ως το μήκος της διαταραχής ανά μονάδα όγκου και υπολογίζεται από παράγοντες όπως το διάνυσμα Burgers ( $b$ ) και τη διεύθυνση της εφαπτόμενης γραμμής  $t$  [49].

Κατά τη μελέτη της κρυσταλλικής πλαστικότητας η προσέγγιση, που βασίζεται στην πυκνότητα των διαταραχών ενός υλικού παρέχει μια πιο λεπτομερή και ακριβή αναπαράσταση της πλαστικής παραμόρφωσης. Αυτό συμβαίνει, καθώς γίνεται εφικτή η εξέταση και η εξήγηση φαινομένων, όπως σκλήρυνση λόγω παραμόρφωσης, η ευαισθησία του ρυθμού παραμόρφωσης κ.α., που βασίζονται κατεξοχήν στην πυκνότητα των διαταραχών [51]. Γενικότερα, το μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας πυκνότητας διαταραχών σε αντίθεση με το φαινομενολογικό μοντέλο που αναφέρθηκε παραπάνω στηρίζεται σε φυσικές παραμέτρους και σταθερές [51]. Το γεγονός αυτό το καθιστά ικανότερο για την περιγραφή της πλαστικής παραμόρφωσης αφού παρέχονται οι φυσικές πληροφορίες που απαιτούνται για την μοντελοποίηση ενός υλικού [51].

Για την εφαρμογή αυτού του μοντέλου που βασίζεται στην πυκνότητα των διαταραχών χρησιμοποιούνται ορισμένοι καταστατικοί νόμοι. Αρχικά, μέσω της εξίσωσης του Orowan (1934) αποτυπώνεται μαθηματικά ο ρυθμός διάτμησης από την ολίσθηση των διαταραχών σε ένα επίπεδο ολίσθησης ως [52]:

$$\dot{\gamma} = b_s v_0 \exp \left[ -\frac{Q_s}{K_B T} \left\{ 1 - \left( \frac{|\tau_{eff}|}{\tau_{sol}} \right)^{p_s} \right\}^{q_s} \right] \text{sgn}(\tau)$$

*Εξίσωση 14: Εξίσωση Orowan*

όπου  $b_s$  το μήκος του διανύσματος Burgers για την ολίσθηση,  $v_0$  μια ταχύτητα αναφοράς,  $Q_s$  η ενέργεια ενεργοποίησης που απαιτείται για την ολίσθηση,  $K_B$  η σταθερά Boltzmann,  $\tau_{eff}$  η αποτελεσματική αναλυόμενη διατμητική τάση,  $\tau_{sol}$  η αντοχή του στερεού διαλύματος και  $p_s, q_s$  οι παράμετροι προσαρμογής που ελέγχουν το προφίλ αντίστασης της ολίσθησης και έχουν εύρη τιμών από 0 έως 1 και από 1 έως 2 αντίστοιχα [52]. Εν συνεχεία, καταγράφεται η εξίσωση της ταχύτητας της διαταραχής για την οποία γίνεται η παραδοχή ότι ενεργοποιείται θερμικά ως [53]:

$$v_a = v_0 \exp \left[ -\frac{Q_s}{K_B T} \left\{ 1 - \left( \frac{|\tau_{eff}|}{\tau_{sol}} \right)^{p_s} \right\}^{q_s} \right] \operatorname{sgn}(\tau)$$

*Εξίσωση 15: Εξίσωση ταχύτητας της διαταραχής*

Τέλος, σημειώνεται η εξίσωση της αντίστασης της ολίσθησης, η οποία εξαρτάται από την τοπική πυκνότητα των διαταραχών ως εξής [53]:

$$\tau^a = \tau_{solute} + G b_s^a \left( \sum_{\alpha'=1}^{N_s} \xi_{\alpha\alpha'} (\rho^{\alpha'} - \rho_{dip}^{\alpha'}) \right)^{\frac{1}{2}}$$

*Εξίσωση 16: Εξίσωση αντίστασης της ολίσθησης*

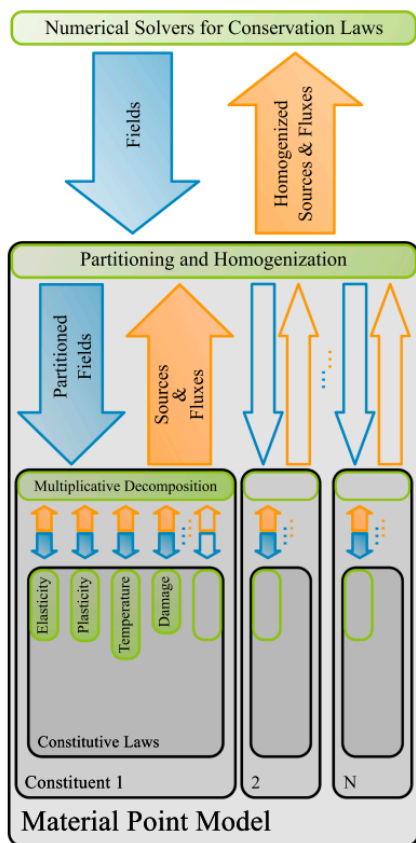
όπου  $\tau_{solute}$  μια σταθερή αντίσταση ολίσθησης που προέρχεται από το στερεό διάλυμα,  $G$  το μέτρο διάτμησης,  $b$  το μήκος του διανύσματος Burgers,  $\rho_{dip}^{\alpha'}$  η πυκνότητα των διπολικών διαταραχών και  $\xi_{\alpha\alpha'}$  η ισχύς αλληλεπίδρασης μεταξύ των διαφορετικών συστημάτων ολίσθησης  $\alpha$  και  $\alpha'$ .

### 2.3.3 Υπολογιστικές μέθοδοι κρυσταλλικής πλαστικότητας

#### 2.3.3.1 Μέθοδοι μελέτης υλικών σε διάφορες κλίμακες

Η ανάλυση, η κατανόηση και η ερμηνεία των φαινομένων κρυσταλλικής πλαστικότητας είναι απαραίτητη για την πρόβλεψη της μηχανικής απόκρισης των μεταλλικών υλικών δεδομένου της πολυπλοκότητας που τα χαρακτηρίζει. Οι υπολογιστικές μέθοδοι αποτελούν μια μεθοδολογία που ακολουθείται για την κατανόηση της περίπλοκης συμπεριφοράς των μετάλλων και με βάση την κατηγορία τους προσφέρουν ξεχωριστές και απαραίτητες πληροφορίες για την πρόβλεψη αυτής.

Ξεκινώντας, από τη Μοριακή Δυναμική (Molecular Dynamics), η οποία προσομοιώνει τις φυσικές κινήσεις των ατόμων και των μορίων, γίνεται δυνατή η κατανόηση των ατομικών μηχανισμών που θα οδηγήσουν μετέπειτα σε φαινόμενα όπως η παραμόρφωση, η πυρηνοποίηση και η κίνηση των διαταραχών. Συνεχίζοντας σε μεγαλύτερης κλίμακας υπολογιστικές μεθόδους συναντώνται οι προσομοιώσεις Discrete Dislocation Dynamics (DDD), οι οποίες εξετάζουν τις διαταραχές του κρυσταλλικού πλέγματος. Σε αυτού του είδους τις προσομοιώσεις γίνεται εφικτή η κατανόηση και η πρόβλεψη της πλαστικής συμπεριφοράς των μεταλλικών υλικών σε μικροκλίμακα. Ακόμη, οι προσομοιώσεις που αφορούν στην Μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων (FEM) μπορούν να ενσωματώσουν την πολύπλοκη, ανισότροπη συμπεριφορά των μεμονωμένων κόκκων μέσα σε ένα πολυκρυσταλλικό σώμα. Χρησιμοποιούν τους κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς κάθε κόκκου για να προβλέψουν την απόκριση του υλικού σε εφαρμοζόμενες τάσεις. Γενικότερα, οι διεργασίες παραμόρφωσης στα κρυσταλλικά υλικά πραγματοποιούνται από την ατομική έως τη μακροσκοπική κλίμακα. Για αυτό τον λόγο πολλές φορές απαιτείται ο συνδυασμός διαφόρων υπολογιστικών μεθόδων για την περιγραφή μιας διεργασίας και την εξαγωγή αποτελεσμάτων.



### 2.3.3.2 Damask

Το Damask είναι ένα υπολογιστικό πρόγραμμα που προσομοιώνει τη μηχανική συμπεριφορά των υλικών σε μικροκλίμακα, παρέχοντας και εφαρμόζοντας διαφόρων τύπων καταστατικών νόμων και αριθμητικών επιλυτών [52]. Δημιουργήθηκε με σκοπό την μοντελοποίηση υλικών που θα ακολουθούν την ιεραρχία των πολλαπλών κλιμάκων και της πολύπλοκης δομής σε κατάσταση θερμομηχανικής φόρτισης [54]. Πιο συγκεκριμένα, το ιεραρχικό μοντέλο, το οποίο ακολουθεί, συνδέει την ανισοτροπία της ατομικής κλίμακας με την περιγραφή του συνολικού πεδίου κάνοντας κατά αυτό τον τρόπο εφικτή τη μοντελοποίηση σε πολλαπλές κλίμακες [52]. Τα

Εικόνα 15: Ιεραρχική δομή ενός υλικού σημείου [52]

παραπάνω περιγράφουν το Material Point Model (MPM) σύμφωνα με το οποίο το υλικό αντιπροσωπεύεται από μια σειρά υλικών σημείων, τα οποία αποτελούνται από πολλαπλά συστατικά που με τη σειρά τους αποτελούνται από διάφορους καταστατικούς νόμους [52].

Το Damask χρησιμοποιεί δύο διαφορετικά είδη συστημάτων επίλυσης εξισώσεων (solver), το πρώτο αφορά μια φασματική μέθοδο που χρησιμοποιεί Fast Fourier Transform (FFT) και το δεύτερο βασίζεται στη Finite Element Method (FEM). Αρχικά, και οι δυο επιλύτες μπορούν να θεωρηθούν καταστατικά μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας ως CPFEM και CPFFT αντίστοιχα. Τα μοντέλα αυτά είναι υπεύθυνα για την σχέση μεταξύ συμμετρικού τανυστή τάσεων Cauchy  $\sigma$  και του τανυστή παραμόρφωσης σε επίπεδο υλικό σημείου [55]. Για το μοντέλο CPFFT οι καταστατικές του εξισώσεις επιλύονται στα υλικά σημεία τα οποία αποτελούν το σύνολο των κανονικών σημείων Fourier, ενώ για το μοντέλο CPFEM οι καταστατικές του εξισώσεις επιλύονται στα υλικά σημεία τα οποία αποτελούν τα σημεία του Gauss [55]. Είτε γίνεται χρήση του ενός είτε του άλλου σύμφωνα με τη δομή του Material Point Model (Εικόνα 15) σε μακροσκοπικό επίπεδο, το μηχανικό πρόβλημα ορίζεται μέσω οριακών συνθηκών και φορτίων, με το πεδίο παραμόρφωσης να αντιπροσωπεύεται από μια κλίση του διανύσματος μέσης παραμόρφωσης  $\bar{F}$ . Εν συνεχεία ακολουθεί το στάδιο της ομογενοποίησης στο οποίο υπάρχει μια σχέση αλληλεπίδρασης μεταξύ του τανυστή πρώτης Piola-Kirchhoff τάσης  $\bar{P}$  και της κλίσης του διανύσματος μέσης παραμόρφωσης  $\bar{F}$ , καθώς κάθε κρύσταλλος λαμβάνει τη δική του βαθμίδα παραμόρφωσης (F) και οι τάσεις στους μεμονωμένους κρυστάλλους ομογενοποιούνται για να παρέχουν μια μέση τάση  $\bar{P}$  για ολόκληρο το υλικό σημείο. Τη δομή συνεχίζει το επίπεδο κρυσταλλίτη, στο οποίο επιλύεται το ελαστικό-πλαστικό πρόβλημα μέσω της χρήσης της Εξίσωσης 17 που αφορά τανυστή δεύτερης Piola-Kirchhoff τάσης που ορίζεται ως [53]:

$$S = \mathbb{C} (F_e^t F_e - I) / 2$$

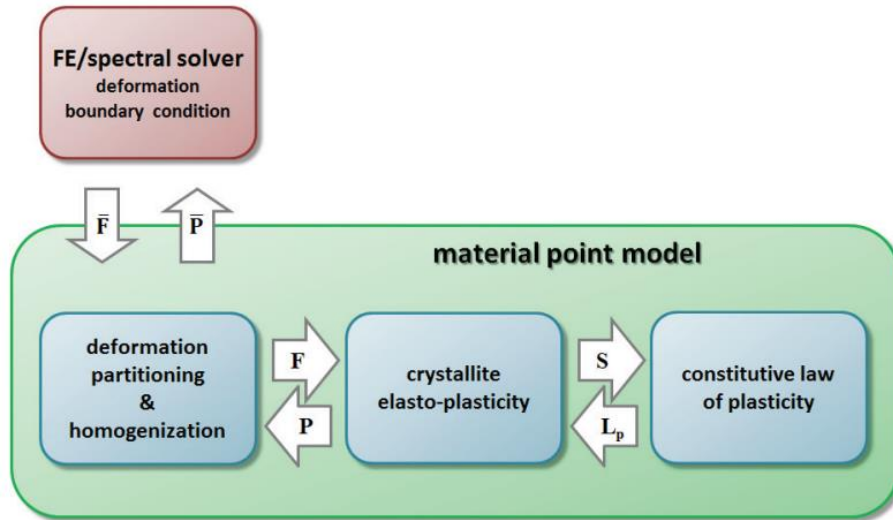
*Εξίσωση 17: Εξίσωση δεύτερης Piola-Kirchhoff τάσης*

όπου  $\mathbb{C}$  ανισοτροπική ελαστική δυσκαμψία και  $(F_e^t F_e - I) / 2$  η ελαστική τάση Green-Lagrange.

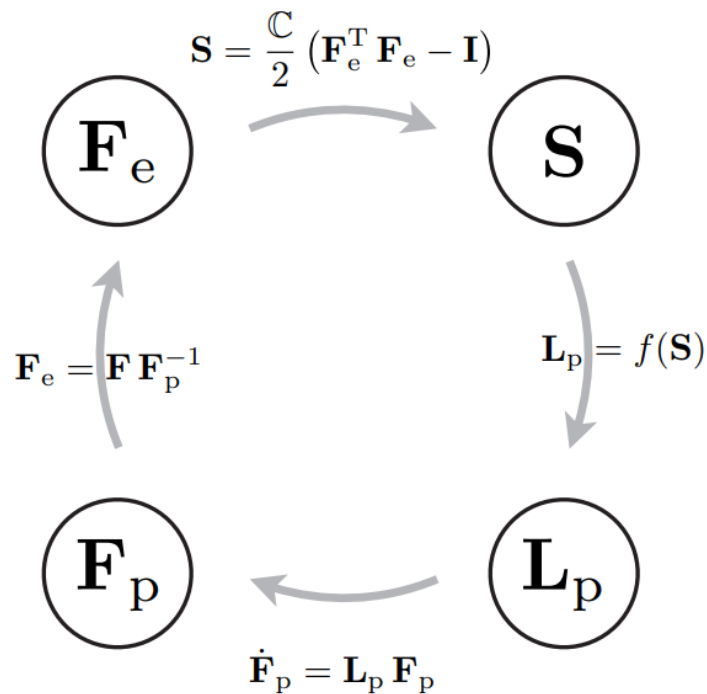
Τέλος, χρησιμοποιείται ο νόμος της πλαστικότητας για τον προσδιορισμό της κλίσης της πλαστικής ταχύτητας (Lp) ως συνάρτηση της δεύτερης τάσης Piola-Kirchhoff (S).



Η κλίση αυτή παρέχει ένα μέτρο του ρυθμού πλαστικής παραμόρφωσης του υλικού. Η αποτύπωση και η συσχέτιση των μαθηματικών νόμων που αφορούν το Material Point Model βασίζονται και στη θεωρία της κρυσταλλικής πλαστικότητας που αναφέρθηκε νωρίτερα (βλ. παράγραφο 2.3.2) και φαίνονται στην Εικόνα 16.



Εικόνα 16: Δομή του μοντέλου υλικού σημείου [56]



Εικόνα 17: Σχήμα υπολογισμού για τον προσδιορισμό του  $S$  ως συνάρτηση του  $F$  [56].

#### 2.3.3.2.1 Φασματικός Επιλύτης

Κατά τη χρήση του υπολογιστικού προγράμματος DAMASK χρησιμοποιείται φασματικός επιλύτης. Η επιλογή αυτού του επιλύτη σε σύγκριση με τον επιλύτη της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Model) δεν είναι τυχαία. Ο FFT επιλύτης παρουσιάζει πλεονέκτημα έναντι του επιλύτη FEM σε περιοδικές οριακές συνθήκες [53]. Το γεγονός αυτό ωφελεί τόσο τη δημιουργία του RVE όσο και την εφαρμογή του χωρίς τη δυσκολία που θα μπορούσε να προκληθεί λόγω των οριακών συνθηκών [53]. Ακόμη, υπερτερεί και στο υπολογιστικό κομμάτι λόγω της χρήσης συγκεκριμένων συναρτήσεων, πολωνύμων και των μετασχηματισμών Fourier που οδηγούν σε γρήγορη επίλυση [53].

### 3 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΟ ΜΕΡΟΣ

---

Στην παρούσα διπλωματική εργασία για τον προσδιορισμό της αντοχής του αλουμινίου σε εφελκυσμό χρησιμοποιήθηκε το υπολογιστικό λογισμικό DAMASK 3.0. Κάθε υπολογιστικό μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας για να είναι ακριβές συνοδεύεται από ένα σύνολο αρχείων εισόδου. Έτσι και στο DAMASK γίνεται χρήση τριών διαφορετικών αρχείων εισόδου με σκοπό την αποτύπωση της ρεαλιστικής απόκρισης του υλικού υπό διάφορες συνθήκες. Τα αρχεία εισόδου μεταφέρουν ουσιαστικά στο πρόγραμμα διακριτά είδη δεδομένων για το εκάστοτε υλικό.

#### 3.1 ΑΡΧΕΙΟ ΕΙΣΟΔΟΥ “MATERIAL.YAML”

Το συγκεκριμένο αρχείο παρουσιάζει την κατάληξη .yaml. Η YAML (YAML Ain't Markup Language) πρόκειται για μια γλώσσα σειριοποίησης εύκολη στη χρήση, η οποία χρησιμοποιείται για την αποθήκευση και τη μεταφορά δεδομένων σε διάφορες γλώσσες προγραμματισμού και εφαρμογές.

Το αρχείο “material” χρησιμοποιείται για τον καθορισμό των ιδιοτήτων των υλικών που προσομοιώνονται. Πιο συγκεκριμένα, χωρίζεται σε τρεις καταχωρίσεις ανώτατου επιπέδου οι οποίες ορίζονται ως “phase”, “homogenization” και “material”. Σε κάθε μία από αυτές αναφέρονται ορισμένα χαρακτηριστικά του υλικού.

Στην καταχώρηση “phase” (dictionary) βρίσκονται οι πληροφορίες για το είδος του πλέγματος του υλικού (lattice) και τις μηχανικές του ιδιότητες (mechanical). Σε αυτές μπορεί να γίνει αναφορά τόσο στο ελαστικό κομμάτι μέσω του νόμου του Hooke και άλλων ελαστικών σταθερών όσο και στο πλαστικό κομμάτι με την προσθήκη δεδομένων που αφορούν τα επίπεδα ολίσθησης, την πυκνότητα των διαταραχών κ.α. Πέραν των μηχανικών ιδιοτήτων (mechanical) μπορούν να χρησιμοποιηθούν και διαφορετικά μοντέλα όπως αυτό του “damage” που μελετάει την αστοχία του υλικού μετά την πλαστική περιοχή.

Στην καταχώρηση “homogenization” (dictionary) απαιτείται ο ορισμός του “N\_constituents” που καθορίζει τον αριθμό των ομογενοποιημένων συστατικών.

Στην καταχώρηση “material” (list) πραγματοποιείται αριθμός καταχωρίσεων που εξαρτάται άμεσα από τη γεωμετρία του υλικού. Αν λοιπόν το προς μελέτη υλικό είναι

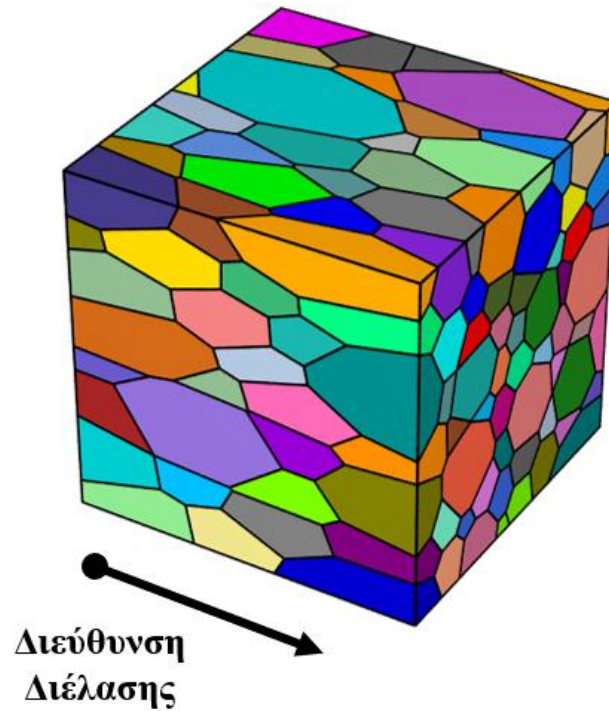
αλουμίνιο με 100 κόκκους τότε αφού ο αριθμός των καταχωρίσεων της λίστας πρέπει να είναι τουλάχιστον ένας περισσότερος από το μέγιστο αναγνωριστικό υλικού στη χρησιμοποιούμενη γεωμετρία ο συνολικός αριθμός των καταχωρήσεων θα είναι 101. Στη λίστα “material” για κάθε αριθμό καταχώρησης αναφέρεται ξεχωριστά το πεδίο “homogenization” σε συνδυασμό με έναν κατάλογο συστατικών του οποίου το μήκος αντιστοιχεί σε  $N\_constituents$ . Κάθε εγγραφή συστατικού περιέχει την προδιαγραφή της χρησιμοποιούμενης φάσης που αναφέρεται από την ετικέτα της. Έτσι, καταγράφεται το κλάσμα όγκου  $v$  και ο κρυσταλλογραφικός προσανατολισμός  $O$ .

### 3.2 ΑΡΧΕΙΟ ΕΙΣΟΔΟΥ “GEOM.VTI”

Το συγκεκριμένο αρχείο παρουσιάζει την κατάληξη .vti, η οποία αποτελεί μια δομημένη σειριακή μορφή που επιτρέπει την περιγραφή και την αναπαραγωγή σύνθετων γεωμετρικών μορφών και χρησιμοποιείται συνήθως για την αποθήκευση δεδομένων τρισδιάστατης εικόνας.

Το αρχείο “geom” περιέχει τις πληροφορίες που υπάρχουν σχετικά με τις γεωμετρίες και τα αναγνωριστικά των υλικών. Μπορεί να δημιουργηθεί είτε μέσω της χρήσης του “Voronoi Tessellation” και των εντολών που βρίσκονται στην επίσημη ιστοσελίδα του λογισμικού είτε μέσω της χρήσης άλλων λογισμικών όπως το Nper. Το αρχείο της γεωμετρίας και με τους δύο τρόπους θα περιέχει τα δεδομένα που αφορούν το μέσο μέγεθος κόκκων του υλικού, τον αριθμό των κόκκων, την ανάλυση σε pixels του RVE που αποτυπώνει οπτικά το υλικό, καθώς και κάποιες ειδικές αρχικές συνθήκες του υλικού όπως μια ρωγμή στο πλέγμα του κατά τη μελέτη της αστοχίας του υλικού.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό Nper. Μέσω του Nper δημιουργήθηκε το αρχείο γεωμετρίας το οποίο αντιστοιχεί στο κράμα αλουμινίου AA6063. Πιο συγκεκριμένα, για το RVE των προσομοιώσεων ορίστηκαν 300 κόκκοι, με μέσο μέγεθος ακμής 450 $\mu\text{m}$ , ούτως ώστε το μέσο μέγεθος κόκκου να είναι περίπου με 70 $\mu\text{m}$ . Ακόμη, καθώς το AA6063 αποτελεί προϊόν διέλασης τέθηκε ένα αντιπροσωπευτικό aspect ratio παράλληλα στον άξονα της διέλασης. Τέλος, επιλέχθηκε η βέλτιστη ανάλυση σε pixels δηλαδή 64:64:64. Παρακάτω φαίνεται η τελική μορφή του RVE αποτυπωμένη σε εικόνα.



Εικόνα 18: RVE του κράματος AA6063 μέσω του λογισμικού Naper

### 3.3 ΑΡΧΕΙΟ ΕΙΣΟΔΟΥ “LOAD.YAML”

Το αρχείο “load” είναι γραμμένο σε στυλ YAML, όπως και το αρχείο “material” και χωρίζεται σε δύο καταχωρήσεις ανωτέρου επιπέδου· τον “solver” και το “loadstep”. Ο “solver” είναι ένα λεξικό που καθορίζει για κάθε εξεταζόμενο φυσικό φαινόμενο τον επιλύτη που θα χρησιμοποιηθεί. Οι επιλύτες αυτοί βασίζονται στο πλέγμα που εφαρμόζεται κάθε φορά. Το “loadstep” είναι ένας κατάλογος λεξικών που καθορίζει τις λεπτομέρειες κάθε μεμονωμένου βήματος φόρτισης στην προσομοίωση. Κάθε βήμα φόρτισης έχει έναν αριθμό παραμέτρων που πρέπει να δηλωθούν.

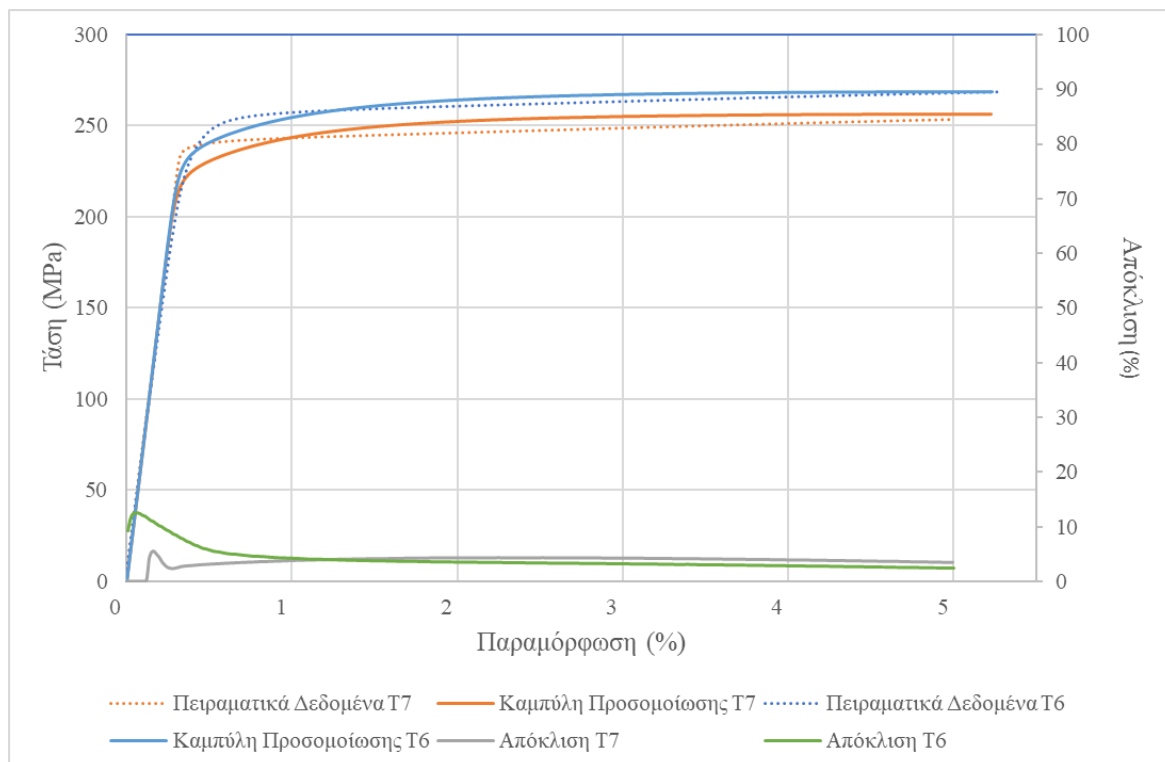
## 4 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ

---

### 4.1 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Σε αυτό το κεφάλαιο, αρχικά παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της έρευνας σχετικά με την αντοχή του κράματος αλουμινίου 6063 σε εφελκυσμό χρησιμοποιώντας μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας. Η μελέτη που διεξάχθηκε επικεντρώνεται σε δύο διαφορετικά μοντέλα πλαστικότητας του υπολογιστικού πακέτου DAMASK (Düsseldorf Advanced Materials Simulation Kit): το φαινομενολογικό μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας και το φυσικό μοντέλο. Παρακάτω συγκρίνονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης για temper T6 και T7 χρησιμοποιώντας και τα δύο μοντέλα. Ταυτόχρονα, θα εξεταστεί και η αξιοπιστία των μοντέλων μέσω αντιπαραβολής πειραματικών δεδομένων για τις ίδιες συνθήκες. Τα ευρήματα αυτά ρίχνουν φως στην αποτελεσματικότητα των διαφορετικών μοντέλων πλαστικότητας στην πρόβλεψη της συμπεριφοράς του υλικού και συμβάλλουν στην κατανόηση των μηχανικών ιδιοτήτων του αλουμινίου.

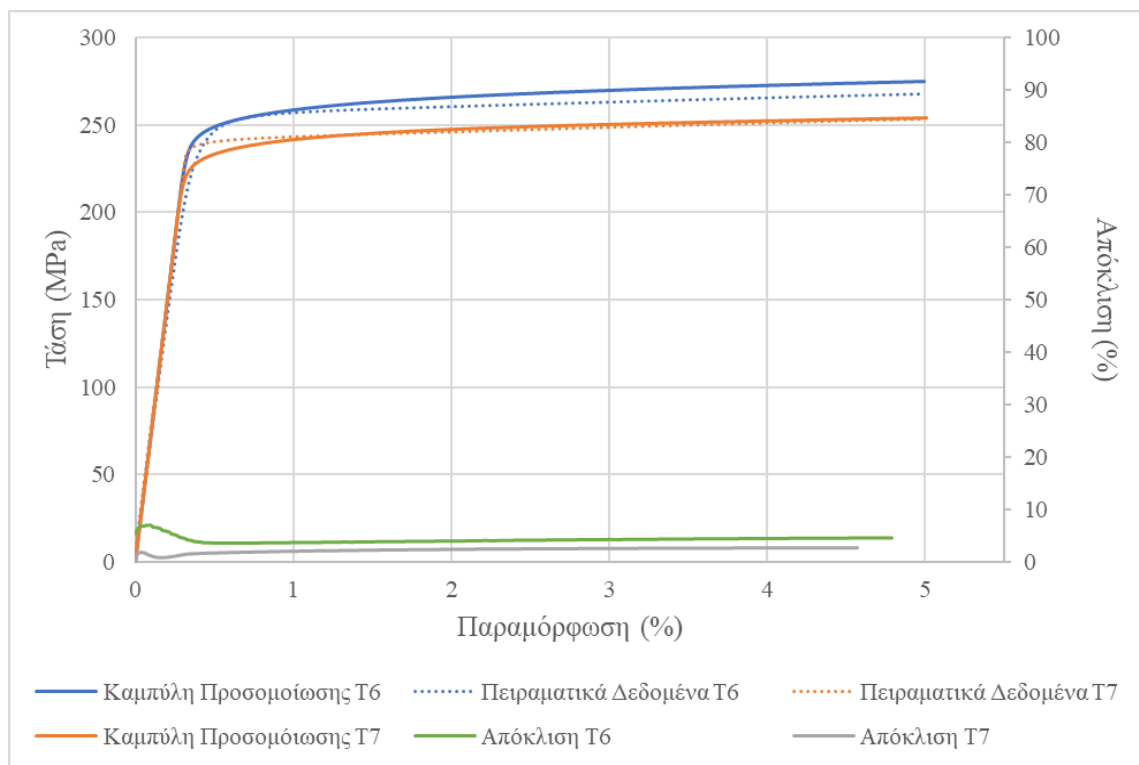
#### 4.1.1 Σύγκριση φαινομενολογικού μοντέλου κρυσταλλικής πλαστικότητας με πειραματικά δεδομένα



Διάγραμμα 1: Σύγκριση καμπύλης προσομοίωσης του φαινομενολογικού μοντέλου με πειραματικά δεδομένα για κράμα AA6063

Παρατηρώντας, την συγκριτική καμπύλη του διαγράμματος 1, γίνεται εύκολα αντιληπτό πως το φαινομενολογικό μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας παρουσιάζει πολύ καλά αποτελέσματα, καθώς η καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης που σχηματίζει για temper T6 και T7 σχεδόν ταυτίζεται με αυτή των πειραματικών δεδομένων. Το γεγονός αυτό επιβεβαιώνεται από τις καμπύλες μέτρησης του ποσοστού των αποκλίσεων για τα δύο temper που κατά βάση κυμαίνονται υπό του 10%. Καταγράφηκε πως μεγαλύτερη επίδραση στην εξέλιξη της καμπύλης είχε η μεταβολή των παραμέτρων της αντίστασης στην ολίσθηση ( $\tau_0$ ) και της ευαισθησίας του ρυθμού παραμόρφωσης ( $n$ ). Οι τιμές και τα εύρη τιμών των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν βρέθηκαν βιβλιογραφικά και καταγράφονται στο παράρτημα 1.

#### 4.1.2 Σύγκριση φυσικού μοντέλου με πειραματικά δεδομένα



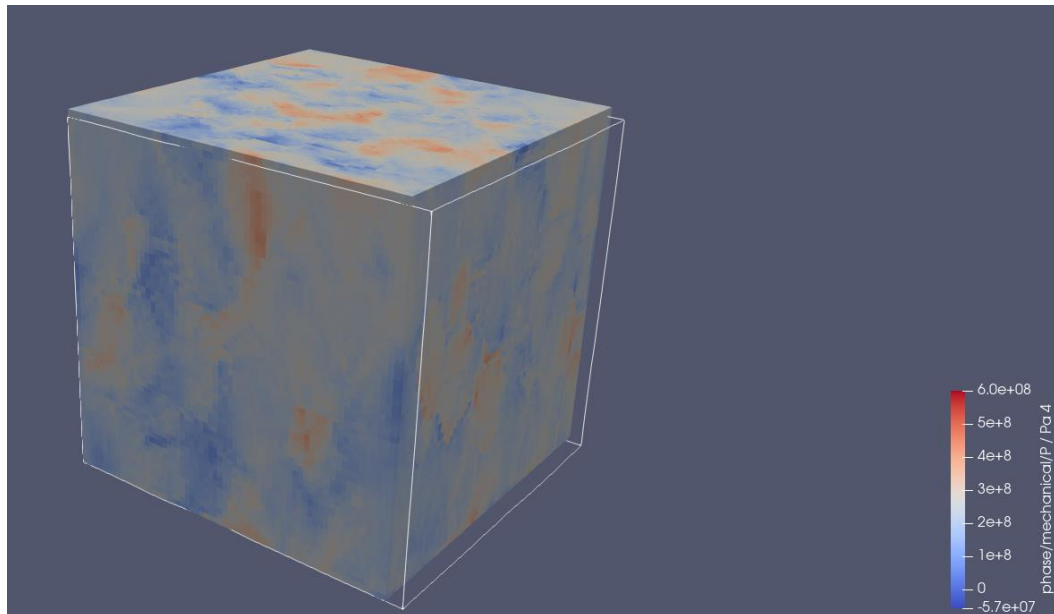
Διάγραμμα 2: Σύγκριση καμπύλης προσομοίωσης του φυσικού μοντέλου με πειραματικά δεδομένα για κράμα AA6063

Στο διάγραμμα 2 αποκαλύπτεται η σχέση των πειραματικών δεδομένων με το φυσικό μοντέλο. Και σε αυτήν την περίπτωση φαίνεται πως οι πειραματικές τιμές σχεδόν ταυτίζονται με αυτές των προσομοιώσεων. Εδώ, τα ποσοστά απόκλισης μεταξύ πειραματικών και υπολογιστικών τιμών για τα δύο temper κυμαίνονται από 0% έως 7.06%. Παρατηρείται λοιπόν χαμηλότερο ποσοστό σφάλματος από ό,τι στο φαινομενολογικό μοντέλο. Σε αυτό το μοντέλο μεγαλύτερη επίδραση στο όριο διαρροής και στη μορφή της καμπύλης είχε η ολική πυκνότητα των διαταραχών ( $\rho_0$ ), η τάση Peierls διαταραχής ακμής ( $\tau_{ed}$ ) και η τάση Peierls διαταραχής κοχλία ( $\tau_{sc}$ ). Οι τιμές και τα εύρη τιμών των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν βρέθηκαν βιβλιογραφικά και καταγράφονται στο παράρτημα 1.

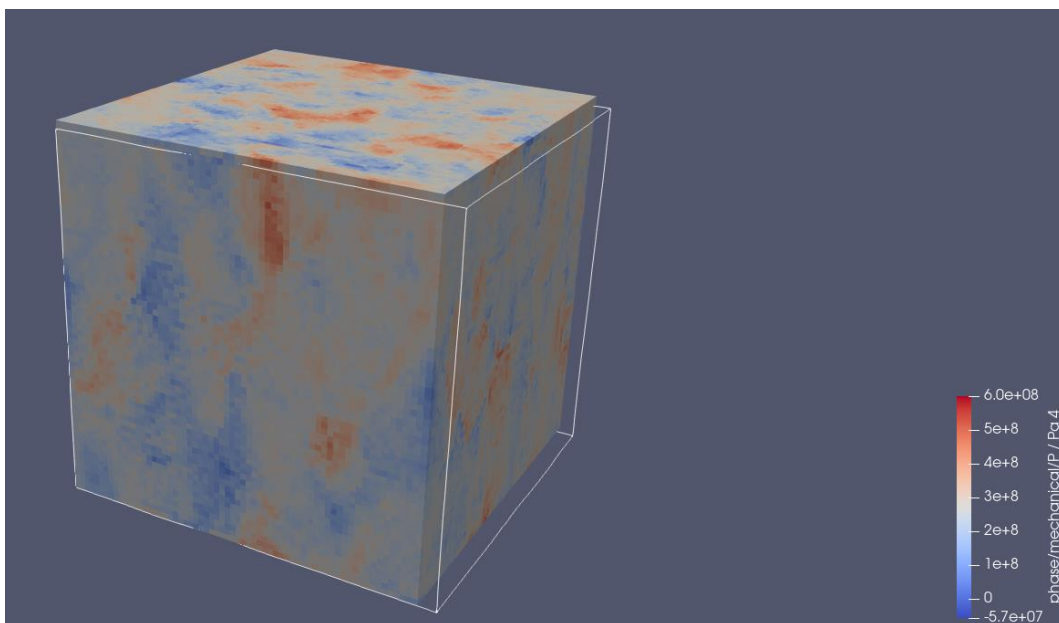


### 4.1.3 Οπτικοποίηση αποτελεσμάτων στο Paraview

Βήμα 200/200



Εικόνα 19: Κατανομή τάσεων εντός της μικροδομής του φαινομενολογικού μοντέλου μετά τον εφελκυσμό.



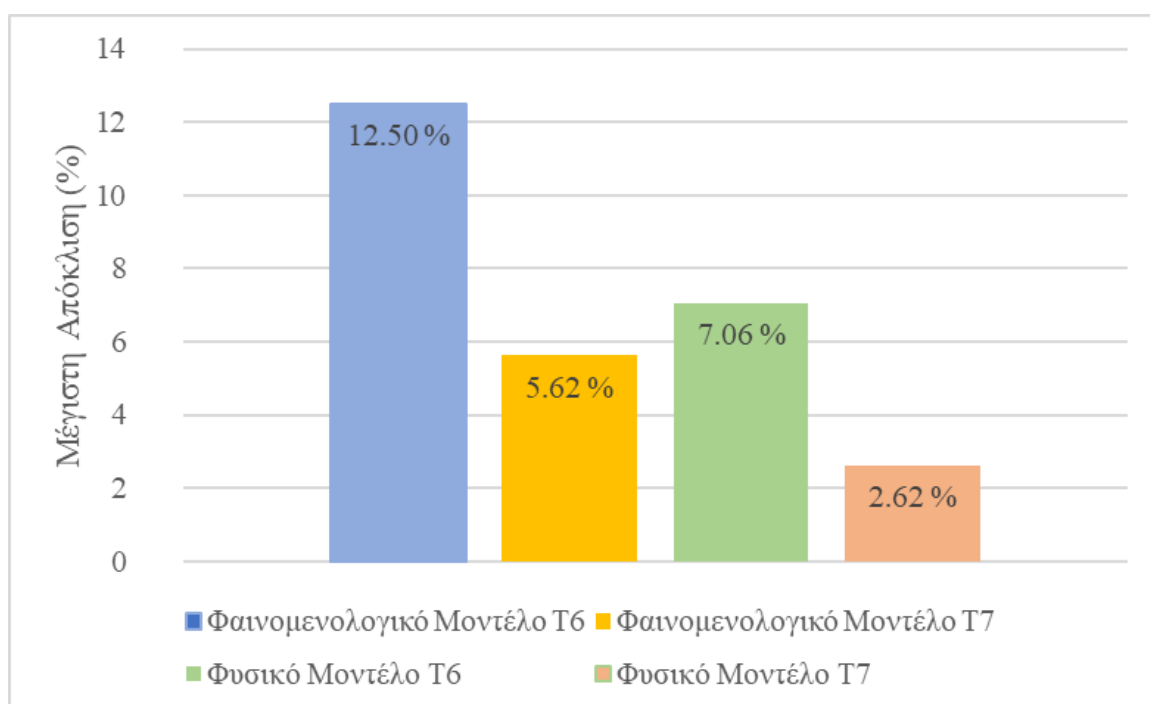
Εικόνα 20: Κατανομή τάσεων εντός της μικροδομής του φυσικού μοντέλου μετά τον εφελκυσμό.

Οι παραπάνω εικόνες αναπαριστούν το RVE της μικροδομής που δημιουργήθηκε μετά την παραμόρφωση και αντικατοπτρίζουν μέσω της χρωματικής παλέτας την κατανομή των τάσεων.

#### 4.1.3.1 Σχολιασμός αποτελεσμάτων

Αρχικά γίνεται σαφές πως επιλέχτηκε ίδιο αρχείο γεωμετρίας κατά την προσομοίωση, μέσω της οπτικοποίησης των κόκκων και της κοινής επιμήκυνσης τους κατά τον άξονα της διέλασης. Μια πρώτη παρατήρηση είναι πως τόσο τα σημεία με τις μεγαλύτερες τάσεις όσο και αυτά με τις μικρότερες αποτυπώνονται στο ίδιο σημείο της μικροδομής και για τα δύο μοντέλα. Το αποτέλεσμα αυτό είναι λογικό, καθώς μεγάλες διαφορές στην κατανομή των τάσεων θα υποδείκνυαν πως ένα από τα δύο μοντέλα δεν λειτουργεί σωστά.

Η διαφορά που παρατηρείται δεν είναι στα σημεία μέγιστης τάσης αλλά σε αυτά που συγκεντρώνουν μεσαίες προς μικρές τιμές τάσης. Πιο συγκεκριμένα, φαίνεται στο μοντέλο πυκνότητας διαταραχών να αποτυπώνονται ελαφριά μικρότερες τιμές τάσεις. Το μέγιστο σφάλμα κάθε μοντέλου σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα καταδεικνύεται στο διάγραμμα 3 και για τα δύο tempers.

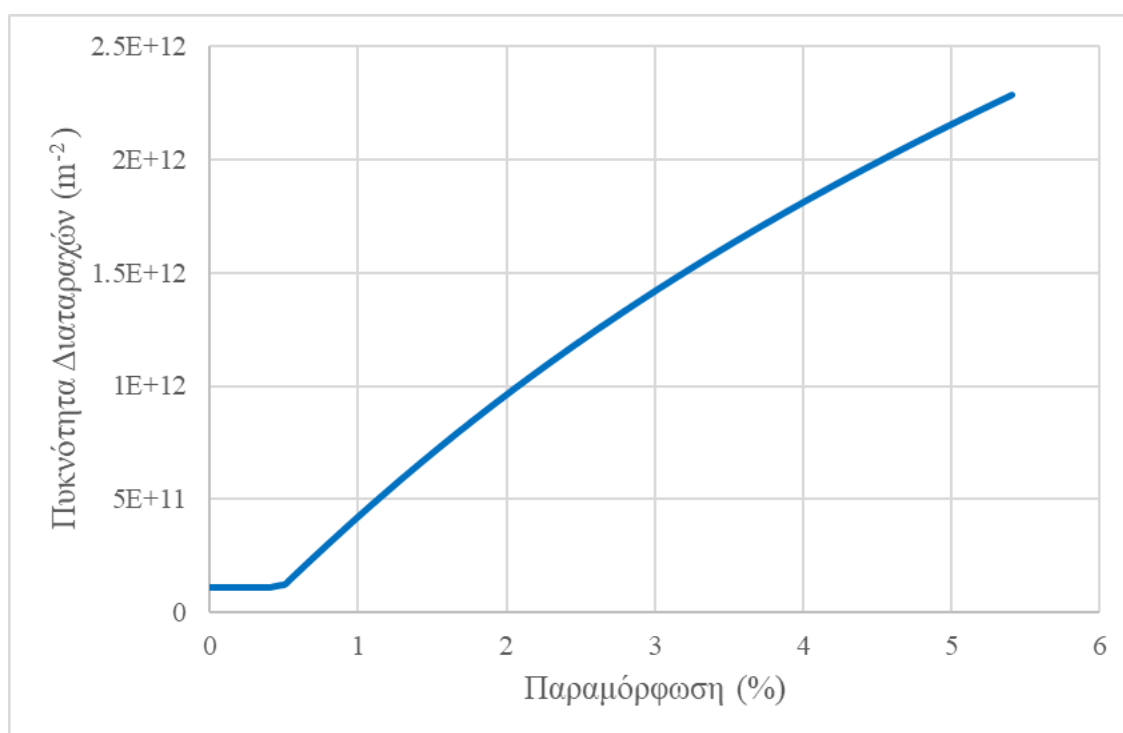


Διάγραμμα 3: Διάγραμμα μέγιστου σφάλματος μεταξύ πειραματικών δεδομένων και υπολογιστικών αποτελεσμάτων για τα διαφορετικά μοντέλα και tempers.

#### 4.1.4 Καμπύλη πυκνότητας διαταραχών

Η πυκνότητα των διαταραχών αποτελεί μια θεμελιώδη έννοια στην επιστήμη της τεχνολογίας των υλικών, καθώς επηρεάζει ιδιαίτερα τις μηχανικές τους ιδιότητες. Για τον υπολογισμό της χρησιμοποιούνται τεχνικές όπως η Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Διερχόμενης Δέσμης (TEM) και η περίθλασης ακτίνων X (XRD). Γενικότερα, για κράμα αλουμινίου AA6063 έχει υπολογιστεί πειραματικά πως η πυκνότητα των διαταραχών κυμαίνεται μεταξύ των τιμών  $10^{10}\text{m}^{-2}$ - $10^{14}\text{m}^{-2}$  [57] [58].

Χρησιμοποιώντας το φυσικό μοντέλο του Damask γίνεται δυνατή η λήψη αποτελεσμάτων που στηρίζονται σε φυσικές παραμέτρους του υλικού. Κατά αυτόν τον τρόπο λήφθηκε καμπύλη που εξετάζει την εξέλιξη πυκνότητας των διαταραχών κατά τη δοκιμή εφελκυσμού του κράματος αλουμινίου 6063.



Διάγραμμα 4: Εξέλιξη πυκνότητας των συνολικών διαταραχών κατά την παραμόρφωση

Τα αποτελέσματα της εξέλιξης των διαταραχών κατά την παραμόρφωση που αποτυπώνονται στην παραπάνω καμπύλη φανερώνουν τον πολλαπλασιασμό των διαταραχών με την αύξηση της παραμόρφωσης όπως αναμενόταν και βάση βιβλιογραφίας.

#### 4.1.5 Συζήτηση για τα αποτελέσματα

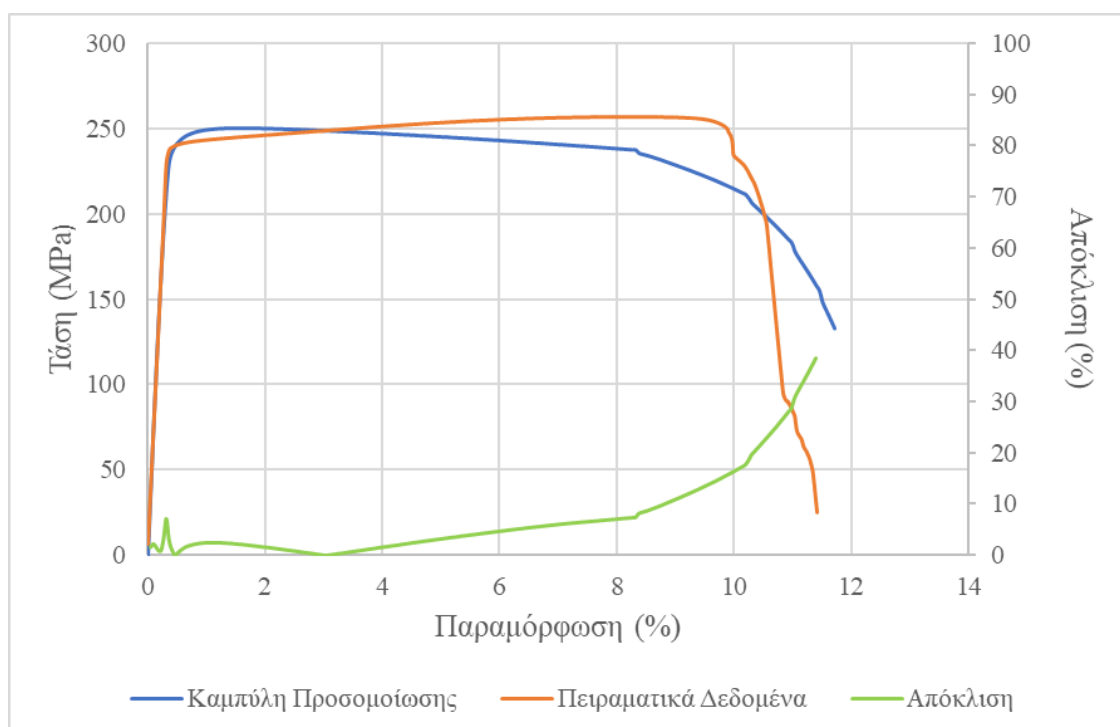
Παρατηρώντας τα αποτελέσματα, που προέκυψαν από τη χρήση των δύο μοντέλων, προκύπτει ένα ερώτημα· «Εφόσον τόσο το φαινομενολογικό μοντέλο όσο και το φυσικό μοντέλο παρουσιάζουν τόσο ρεαλιστικά αποτελέσματα όσο τα πειραματικά, ποιο από τα δύο προτιμάται;» Η απάντηση εδώ είναι, ότι εξαρτάται από το τι αποτέλεσμα επιθυμείται και για ποια χρήση.

Πιο συγκεκριμένα, όπως έχει ήδη αναφερθεί, το φυσικό μοντέλο στηρίζεται σε φυσικές παραμέτρους. Εξετάζει δηλαδή τις αλληλεπιδράσεις και την εξέλιξη των διαταραχών κατά την πλαστική παραμόρφωση. Οι εξισώσεις αυτού του μοντέλου περιγράφουν τον πολλαπλασιασμό και την ακύρωση των διαταραχών, τον σχηματισμό διπόλων, την αναρρίχηση των διαταραχών, τους ρυθμούς διάτμησης και διάφορους παράγοντες που σχετίζονται με την εξέλιξη της πυκνότητας των διαταραχών και της μικροδομής. Για αυτούς του λόγους το μοντέλο είναι αρκετά πολύπλοκο, καθώς αποτελείται από μεγάλο αριθμό μεταβλητών και εξισώσεων, που το καθιστούν υπολογιστικά κοστοβόρο. Το γεγονός αυτό επιβεβαιώνεται και από τα παραπάνω πειράματα που ενώ αποτελούνται από το ίδιο αρχείο γεωμετρίας και φορτίου ο χρόνος διεξαγωγής της προσομοίωσης για το φαινομενολογικό μοντέλο ήταν περίπου 15 λεπτά, ενώ για το φυσικό μοντέλο ήταν περίπου 3 ώρες. Ακόμη, χρειάζονται αρκετά πειραματικά δεδομένα για την ακριβή βαθμονόμηση του μοντέλου.

Το φαινομενολογικό μοντέλο από την άλλη αποτελεί μια ευρέως χρησιμοποιούμενη και σχετικά απλή προσέγγιση για τη μοντελοποίηση της μηχανικής συμπεριφοράς των υλικών. Οι μαθηματικές εξισώσεις του μοντέλου περιγράφουν την εξέλιξη της αντίστασης στην ολίσθηση τους ρυθμούς διάτμησης στα συστήματα ολίσθησης. Το γεγονός ότι δεν περιλαμβάνει μεγάλο αριθμό εσωτερικών μεταβλητών, το καθιστά πιο αποδοτικό υπολογιστικά. Παρόλα αυτά, μπορεί να παρέχει λιγότερο ακριβείς προβλέψεις για πολύπλοκες συμπεριφορές παραμόρφωσης, διότι δεν ατησπώνει όλες τις λεπτομερείς φυσικές διεργασίες που συμβαίνουν κατά την πλαστική παραμόρφωση.

## 4.2 DAMAGE MODULE

Το damage module που αξιοποιεί το DAMASK μελετάει την συμπεριφορά του υλικού κατά τη θραύση. Το DAMASK alpha v3.0 που χρησιμοποιήθηκε για της εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας έχει σαν μοναδική επιλογή τύπου θραύσης την isobrittle, που αφορά σε ισότροπη ψαθυρή θραύση, με σχέδια να αναπτυχθεί και όλκιμο μοντέλο. Όπως έχει αναφερθεί, το υλικό που μελετάται είναι το AA6063 που παρουσιάζει όλκιμη συμπεριφορά. Ωστόσο, καθώς η μεθοδολογία για την χρήση του μοντέλου αστοχίας εμπεριέχει ουσιαστικές διαφορές σε σχέση με αυτήν για την πλαστική παραμόρφωση, αποφασίστηκε η δοκιμή του μοντέλου με σκοπό την απόκτηση: τεχνογνωσίας, αποτελεσμάτων και το σχολιασμό τους. Στο διάγραμμα 4 φαίνεται η καμπύλη που προέκυψε για AA6063-T7 και η σύγκριση με πειραματικά δεδομένα.



Διάγραμμα 5: Σύγκριση καμπύλης προσομοίωσης με damage module με πειραματικά δεδομένα για κράμα AA6063

Η πειραματική καμπύλη εφελκυσμού, προέκυψε από σχετική δοκιμή του υλικού σε θερμοκρασία δωματίου και δεν αφορά σε ψαθυρή θραύσης, όπως προκύπτει και από το ποσοστό παραμόρφωσης ως 12%. Με την χρήση του μοντέλου όλκιμης αστοχίας, αναμένεται να προκύψει μια απότομη πτώση των τιμών της μηχανικής, τάσης στο ποσοστό παραμόρφωσης που πραγματοποιείται η θραύση σε αντιστοιχία τη μορφή της καμπύλης των πειραματικών δεδομένων. Όπως αναφέρθηκε, επιλέχθηκε η χρήση

και δοκιμή του συγκεκριμένου μοντέλου προκειμένου να μελετηθεί η μεθοδολογία σύμφωνα με την οποία θα μπορεί κανείς να εξετάσει το φαινόμενο της όλκιμης θραύσης όταν κυκλοφορήσει το αντίστοιχο μοντέλο.

Σύμφωνα με τα παραπάνω δεδομένα τα αποτελέσματα της καμπύλης, που προέκυψαν μέσω της προσομοίωσης, φανερώνουν μια ταύτιση του ελαστικού μέρους και της αρχικής πλαστικής παραμόρφωσης με τα πειραματικά δεδομένα και μια απόκλιση της τάξεως των 25 MPa (XX%), στο σημείο θραύσης. Λόγω της φύσης του μοντέλου, είναι αναμενόμενο να καταγραφεί μικρότερο ποσοστό παραμόρφωσης που στη συγκεκριμένη περίπτωση αντιστοιχεί και σε μικρότερη μέγιστη εφελκυστική αντοχή. Παρόλα αυτά οι αποκλίσεις μεταξύ προσομοίωσης και πειραμάτων δεν είναι πολύ μεγάλες.

Αξίζει να αναφερθεί πως η διαφοροποίηση στην μαθηματική έκφραση των δύο τύπων αστοχίας, ψαθυρής και όλκιμης, στο υπολογιστικό πακέτο που χρησιμοποιείται έγκειται στον τρόπο με τον οποίο περιγράφουν την κινητήρια δύναμη για τη διαδικασία της θραύσης. Πιο συγκεκριμένα, η ψαθυρή θραύση προκύπτει από την απελευθέρωση της αποθηκευμένης ελαστικής ενέργειας, ενώ η όλκιμη θραύση προκαλείται από τη διάδοση της πλαστικής ενέργειας. Τέλος, η σύζευξη της εξέλιξης της θραύσης με τους ενεργειακούς όρους οδηγεί σε τροποποιήσεις στη συμπεριφορά του υλικού και αποτυπώνεται μαθηματικά μέσω στου τροποποιημένου νόμου του Hooke για την ψαθυρή συμπεριφορά και τροποποίηση των νόμων πλαστικότητας για την όλκιμη συμπεριφορά.

Το μεταλλουργικό νόημα της χρήσης του ψαθυρού μοντέλου σε ένα όλκιμο υλικό, όπως το κράμα αλουμινίου που προσομοιώθηκε, πρέπει να εξεταστούν οι περιπτώσεις στις οποίες το συγκεκριμένο κράμα θα μπορέσει να παρουσιάσει ψαθυρή συμπεριφορά. Το αλουμίνιο που δεν παρουσιάζει αλλοτροπικό μετασχηματισμό όπως π.χ. ο χάλυβας, δεν εμφανίζει κάποια συγκεκριμένη θερμοκρασίας μετάβασης από όλκιμη σε ψαθυρή συμπεριφορά σε θερμοκρασίες υψηλότερες του μηδενός. Τι γίνεται όμως όταν μειώνεται σημαντικά η θερμοκρασία υπό των 0°C; Η μείωση της θερμοκρασίας συνδέεται με μείωση των κινήσεων των διαταραχών μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα, καθώς η θερμική ενέργεια που ευνοεί την κίνηση τους μέσα στο σύστημα ελαττώνεται. Επιπροσθέτως, ορισμένα συστήματα ολίσθησης σε χαμηλές θερμοκρασίες είναι λιγότερο ενεργά και βαθμιαία με την μείωση της

θερμοκρασίας θα εμποδίζουν την κίνηση των διαταραχών και άρα την πλαστική παραμόρφωση, κάνοντας με αυτόν τον τρόπο το υλικό πιο ψαθυρό. Σε αυτή την περίπτωση αναφέρονται θερμοκρασίες στις οποίες δεν γίνονται δοκιμές και αν συμβούν οι συνθήκες για την πραγματοποίησή τους θα είναι δύσκολες. Αυτό είναι και το συγκριτικό πλεονέκτημα των μεθόδων της μοντελοποίησης.

Μια ακόμη περίπτωση σύμφωνα με την οποία ένα κράμα αλουμινίου μπορεί να πλησιάσει την ψαθυρή συμπεριφορά είναι αν υποστεί Stress Corrosion Cracking, το οποίο συμβαίνει υπό την ταυτόχρονη επίδραση μιας τάσης και ενός διαβρωτικού περιβάλλοντος [59]. Η θραύση προκαλείται κατά μήκος των ορίων των κόκκων.

Συνοψίζοντας, το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση της θραύσης αποτελεί μια αρχική προσέγγιση στη μελέτη του φαινομένου, η οποία δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα συγκριτικά με τα πειραματικά δεδομένα και έχει φυσική αξία για προσομοιώσεις που γίνονται σε συνθήκες που το υλικό θα παρουσιάζει ψαθυρή συμπεριφορά, δηλαδή σε θερμοκρασία αρκετά κάτω των 0°C π.χ. στους -200°C ή κατά την εμφάνιση Stress Corrosion Cracking.

## 4.3 ΠΙΘΑΝΗ ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΣΤΟΥΣ ΣΤΟΧΟΥΣ ΒΙΩΣΙΜΗΣ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ

### 4.3.1 Γενικά

Η βιώσιμη ανάπτυξη στοχεύει στη δημιουργία ενός αρμονικού και ευημερούντος κόσμου όπου η οικονομική ανάπτυξη, η κοινωνική ισότητα και η προστασία του περιβάλλοντος συμβαδίζουν, ούτως ώστε να διασφαλίζεται η ικανοποίηση των αναγκών των σημερινών και των μελλοντικών γενεών. Ο όρος της βιώσιμης ανάπτυξης εισήχθη επίσημα από την Παγκόσμια Επιτροπή Περιβάλλοντος και Ανάπτυξης (WCED), γνωστή και ως επιτροπή Brundtland (1987) και ορίστηκε ως η «ανάπτυξη που ικανοποιεί τις σημερινές ανάγκες χωρίς να υπονομεύει τη δυνατότητα των μελλοντικών γενεών να ικανοποιήσουν τις δικές τους ανάγκες».

Στο πλαίσιο της βιώσιμης ανάπτυξης, η σύνοδος κορυφής των Ηνωμένων Εθνών «Rio+20», που διεξήχθη στη Βραζιλία το 2012, δέσμευσε τις κυβερνήσεις να δημιουργήσουν ένα σύνολο στόχων βιώσιμης ανάπτυξης (SDGs) που εντάχθηκαν στο πλαίσιο των αναπτυξιακών στόχων της χιλιετίας (MDGs) [60]. Κατά αυτόν τον τρόπο διαμορφώθηκαν 17 στόχοι βιώσιμης ανάπτυξης οι οποίοι παρουσιάζονται στην Εικόνα 17.



Εικόνα 21: Στόχοι Βιώσιμης Ανάπτυξης (SDGs)[61].



### **4.3.2 Διπλωματική εργασία και στόχοι βιώσιμης ανάπτυξης**

Η έρευνα που διεξήχθη για την εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας θα μπορούσε να επιδράσει σε ορισμένους από τους στόχους της βιώσιμης ανάπτυξης. Παρακάτω θα αναλυθεί ο αντίκτυπος της εργασίας και πως μέσω της ανάπτυξης προηγμένων υπολογιστικών τεχνικών για την κατανόηση της συμπεριφοράς των υλικών μπορούν να επηρεαστούν σημαντικά διάφοροι βασικοί ΣΒΑ.

#### **4.3.2.1 Στόχος 9: Βιομηχανία, Καινοτομία και Υποδομές**

Αξιοποιώντας τις τεράστιες δυνατότητες των μοντέλων κρυσταλλικής πλαστικότητας, αναπτύσσεται ένας νέος κλάδος στη βιομηχανία, ο οποίος δίνει τη δυνατότητα της πρόβλεψης της απόδοσή των υλικών υπό διάφορες συνθήκες και διεργασίες και της βελτιστοποίησης των βιομηχανικών διεργασιών. Στο μέλλον θα είναι εφικτή η σημαντική ελάττωση των φυσικών πειραμάτων με αποτέλεσμα τη μείωση του κόστους τόσο μέσω της επιτάχυνσης των κύκλων ανάπτυξης υλικών ή και βελτιστοποίησης διεργασιών με αποτέλεσμα την ενίσχυση των βιομηχανιών. Αυτές οι εξελίξεις, οι οποίες εμπίπτουν στον Στόχο 9, υπόσχονται να συμβάλλουν στην ανθεκτικότητα της βιομηχανίας, να καταστήσουν τις υποδομές πιο ανθεκτικές και βιώσιμες και να προωθήσουν την οικονομική ανάπτυξη. Επιπλέον, η παρούσα εργασία τροφοδοτεί την ανάπτυξη πρωτοποριακών υπολογιστικών εργαλείων και τεχνικών μοντελοποίησης. Η πρόοδος αυτή συμβάλλει άμεσα στην καλλιέργεια ενός εξειδικευμένου επιστημονικού δυναμικού ικανού να αξιοποιεί τις προηγμένες τεχνολογίες. Έτσι, υποστηρίζεται ενεργά η ανάπτυξη θέσεων εργασίας υψηλής ποιότητας, η οποία αποτελεί βασική πτυχή του στόχου 9.

#### **4.3.2.2 Στόχος 12: Υπεύθυνη Κατανάλωση και Παραγωγή**

Η μείωση του περιβαλλοντικού αποτυπώματος που συνδέεται με τις δοκιμές υλικών είναι ένα δυναμικό αποτέλεσμα της υιοθέτησης της μεθοδολογίας που προτείνεται στην εργασία. Μέσω της εφαρμογής μοντέλων κρυσταλλικής πλαστικότητας, μειώνεται η εξάρτηση από τα εργαστηριακά πειράματα. Η προσέγγιση αυτή ευθυγραμμίζεται με τον στόχο 12, προωθώντας υπεύθυνες πρακτικές κατανάλωσης και παραγωγής, καθώς μειώνονται τα απόβλητα, η κατανάλωση ενέργειας και η ανάγκη για πρώτες ύλες.

#### **4.3.2.3 Στόχος 13: Δράση για το Κλίμα**

Οι στόχοι 12 και 13 συνδέονται άμεσα με την συγκεκριμένη διπλωματική εργασία, καθώς ένας από τους κοινούς τους στόχους είναι η ελάττωση του περιβαλλοντικού αποτυπώματος. Μέσω της μοντελοποίησης μειώνεται η ανάγκη για ενεργοβόρα φυσικά πειράματα και μετριάζονται οι εκπομπές διοξειδίου του άνθρακα που συνδέονται με τις παραδοσιακές εργαστηριακές πρακτικές.

#### **4.3.2.4 Στόχος 17: Συνεργασία για τους Στόχους**

Η συνεργασία αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα κομμάτια αυτής της εργασίας. Μέσω της έρευνας επιτυγχάνεται η απόκτηση νέων γνώσεων που θα συνεισφέρουν στη βιομηχανία. Αναγνωρίζοντας την αξία των συμπράξεων μεταξύ ακαδημαϊκών ιδρυμάτων, βιομηχανικών φορέων και ερευνητικών οργανισμών δημιουργείται ένα περιβάλλον όπου η γνώση μοιράζεται, η διεπιστημονική έρευνα ευδοκimei και η πρακτική εφαρμογή των μοντέλων κρυσταλλικής πλαστικότητας, στη συγκεκριμένη περίπτωση, επιταχύνεται.

## 5 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

---

Η παρούσα διπλωματική εργασία εξέτασε, μέσω διαγραμμάτων εφελκυσμού, τη μηχανική συμπεριφορά του αλουμινίου χρησιμοποιώντας μοντέλα πλαστικότητας κρυστάλλου μέσω του λογισμικού DAMASK. Ο αρχικός σκοπός των υπολογιστικών πειραμάτων ήταν η σύγκριση των δύο διαφορετικών μοντέλων πλαστικότητας κρυστάλλου που χρησιμοποιεί το πακέτο. Τόσο το φαινομενολογικό όσο και το φυσικό μοντέλο, παρουσίασαν πολύ καλά αποτελέσματα σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα. Ακόμη, κατά την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων στο Paraview φανερώθηκε πως δεν φαίνεται να υπάρχει μεγάλη διαφοροποίηση ως προς τα δύο μοντέλα και την τοπική κατανομή των τάσεων στα RVE τους παρά μόνο ότι το φυσικό μοντέλο σημειώνει μικρότερο ποσοστό απόκλισης μεταξύ πειραματικών τιμών και προσομοίωσης.

Η βασική διαφορά των μοντέλων οφείλεται στις ξεχωριστές δυνατότητες που έχει το καθένα. Το φυσικό μοντέλο λειτουργεί σύμφωνα με τις φυσικές παραμέτρους. Δίνει πληροφορίες που στηρίζονται στη φύση της πλαστικής παραμόρφωσης και κατά αυτόν τον τρόπο εξάγει πολλά περισσότερα αποτελέσματα που κανείς μπορεί να χειριστεί. Ένα τέτοιο αποτέλεσμα είναι η εξέλιξη της ολικής πυκνότητας των διαταραχών κατά τον εφελκυσμό. Το συγκεκριμένο διάγραμμα βρίσκεται εντός των αναμενόμενων τιμών που βρέθηκαν βιβλιογραφικά.

Ένα επιπλέον αποτέλεσμα που λήφθηκε από τις προσομοιώσεις που διεξάχθηκαν αφορά την θραύση του κράματος αλουμινίου AA6063. Σε αυτήν την περίπτωση γίνονται ορισμένες παραδοχές, όπως η θερμοκρασιακή περιοχή στην οποία θα μπορούσαν να εξαχθούν τα δεδομένα αποτελέσματα ούτως ώστε να είναι μεταλλουργικά ορθή η προσομοίωση.

Μέσα από τις παραπάνω ερευνητικές διεργασίες έγινε εφικτή η προσομοίωση του επιλεγμένου κράματος και η απόκτηση αποτελεσμάτων κατά τον εφελκυσμό του. Ταυτόχρονα επισημάνθηκε και η επίδραση αυτής της εργασίας αλλά και γενικότερα της μοντελοποίησης στους στόχους της βιώσιμης ανάπτυξης.

Στο σύνολο, η παρούσα διπλωματική εργασία επιτυγχάνει την απόκτηση αποτελεσμάτων μέσω της χρήσης σύγχρονων τεχνολογιών και της επαλήθευσης τους με πειραματικά δεδομένα. Πιο συγκεκριμένα, έγινε χρήση του λογισμικού Nperg για

τη δημιουργία της μικροδομής, του λογισμικού DAMASK για την διεξαγωγή της προσομοίωσης, μοντέλων τεχνητής νοημοσύνης και της γλώσσας προγραμματισμού Python για τη γραφή σειράς εντολών με σκοπό τη διαχείριση των αποτελεσμάτων και της εφαρμογή Paraview για την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων στη μικροδομή του υλικού. Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω τεχνολογίες ως εργαλεία για την απόκτηση διαγραμμάτων εφελκυσμού σε σχέση με τις παραδοσιακές μεθόδους μειώνεται σημαντικά το κόστος το οποίο πρέπει να επωμιστούν οι βιομηχανίες και το περιβαλλοντικό αποτύπωμα των εργαστηριακών πειραμάτων. Ακόμη, γίνεται εφικτή η λήψη αποτελεσμάτων σε συνθήκες που είτε δεν είναι δυνατό να πραγματοποιηθούν πειράματα είτε δεν συμφέρει. Η παραπάνω μεθοδολογία δεν στοχεύει στην αντικατάσταση των εργαστηριακών πειραμάτων με τα υπολογιστικά, αλλά προτείνει την συνύπαρξη και των δύο προωθώντας την ανάγκη για βιώσιμη ανάπτυξη στηριζόμενοι στις νέες τεχνολογίες.

## 6 ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Πίνακας 3: Συγκεντρωτικός πίνακας τιμών των βασικών παραμέτρων από τη βιβλιογραφία για το φαινομενολογικό μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας

Σύμβολο	Περιγραφή	Μονάδα	Τιμή	Πηγή
$C_{11}$	Ελαστική σταθερά	GPa	106.43	[62]
$C_{12}$	Ελαστική σταθερά	GPa	60.35	[62]
$C_{44}$	Ελαστική σταθερά	GPa	28.21	[62]
$\dot{\gamma}_0$	Ρυθμός διάτμησης αναφοράς	$s^{-1}$	$10^{-6}-10^{-3}$	[21]
$n$	Ευαισθησίας ρυθμού παραμόρφωσης	-	10-30	[63]
$\tau_0$	Αντίσταση ολίσθησης	MPa	10-100	[63]

Πίνακας 4: Συγκεντρωτικός πίνακας τιμών των βασικών παραμέτρων από τη βιβλιογραφία για το μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας πυκνότητας διαταραχών

Σύμβολο	Περιγραφή	Μονάδα	Τιμή	Πηγή
$C_{11}$	Ελαστική σταθερά	GPa	106.43	[62]
$C_{12}$	Ελαστική σταθερά	GPa	60.35	[62]
$C_{44}$	Ελαστική σταθερά	GPa	28.21	[62]
$N$	Αριθμός συστημάτων ολίσθησης	-	12	[63]
$b$	Διάνυσμα Burgers	nm	0.286	[62]
$d_{ed}$	Ελάχιστη Απόσταση μεταξύ Διπόλων Ακμής	nm	1-10	[63]
$d_{sc}$	Ελάχιστη Απόσταση μεταξύ Διπόλων Κοχλίας	nm	1-10	[63]
$p$	Παράμετρος $p$ για την Ταχύτητα Αναρρίχησης	-	0-1	[4],[64]
$q$	Παράμετρος $p$ για την Ταχύτητα Αναρρίχησης	-	1-2	[4],[64]
$k_2$	Παράγοντας Μέσης Ελεύθερης Διαδρομής	-	20-60	[63]
$C_{anni}$	Συντελεστής για την ακύρωση των διαταραχών	-	2-25	[63]
$w_k$	Πλάτος διπλής ετεροβαθμίδας	-	10	[64]
$\rho_0$	Ολική πυκνότητα διαταραχών	$m^{-2}$	$10^{12}-10^{15}$	[63]
$\tau_{ed}$	Τάση Peierls διαταραχής ακμής	MPa	100-500	[63]
$\tau_{sc}$	Τάση Peierls διαταραχής κοχλίας	MPa	100-500	[63]

## 7 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

---

- [1] M. F. Ashby, «Chapter 4 - Material Property Charts,» σε *Materials Selection in Mechanical Design*, 2011, pp. 57-96.
- [2] S. Hirsiger, «Crystal plasticity as complementary modelling technique for improved simulations results of anisotropic sheet metal behaviour in forming processes,» *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 2020.
- [3] S. P. Hirsiger, «A virtual testing method based on crystal plasticity for macroscopic constitutive models,» ETH Library, Ζυρίχη, 2020.
- [4] F. Roters e al., «DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale,» *Computational Materials Science*, τόμ. 158, pp. 420-478, 2019.
- [5] Π. Σπύρος, *Τεχνολογία Υλικών*, Αθήνα: Ίδρυμα Ευγενίδου, 2017.
- [6] D. Joseph, *Aluminum and Aluminum Alloys*, Οχάιο: ASM International, 1993.
- [7] E. F. Ozdogru, «The Effect of Chemical Composition on EN AW 6XXX Series Aluminum Alloys,» σε *Recent Advancements in Aluminum Alloys*, InTechOpen, 2023.
- [8] S. Kang, «Welding Deformation Analysis, Using an Inherent Strain Method for Friction Stir Welded Electric Vehicle Aluminum Battery Housing, Considering Productivity,» *Applied Sciences*, Σεπτέμβριος 2019.
- [9] Håkon S. Hasting, «Composition of  $\beta''$  precipitates in Al–Mg–Si alloys by atom probe tomography and first principles calculations,» *Journal of Applied Physics*, τόμ. 106, αρ. 12, 15 Δεκέμβριος 2009.
- [10] Randi Holmestad, «Precipitation in 6xxx Aluminum Alloys,» *Proceedings of the 12th International Conference on Aluminum Alloys*, pp. 30-39, 5-9 Σεπτέμβριος 2010.

- [11] Hong Maoa, « $\beta''$  needle-shape precipitate formation in Al-Mg-Si alloy: Phase field simulation and experimental verification,» *Computational Materials Science*, τόμ. 184, 2020.
- [12] M. H. Jacobs, *Precipitation Hardening*, European Aluminium Association, 1999.
- [13] M. H. Jacobs, «Phase Diagrams,» European Aluminium Association, 1999.
- [14] F. D. Matías N. Amado, «Revision Of The Solvus Limit Of Al-Mg<sub>2</sub>Si Pseudo Binary Phase Diagram,» *Procedia Materials Science*, τόμ. 8, pp. 1079-1088, 2015.
- [15] University of Cambridge, «Crystallographic Texture (all content),» [Ηλεκτρονικό]. Available: [https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallographic\\_texture/printall.php](https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallographic_texture/printall.php). [Πρόσβαση 30 Απριλίου 2023].
- [16] Kocks, *Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties*, Cambridge University Press, 1998.
- [17] V. Klosek, «Crystallographic textures,» *The European Physical Journal Conferences*, 2017.
- [18] J. R. Hirsch, «Texture evolution during rolling of aluminium alloys,» *TMS Light Metals*, pp. 1071-1077, Ιανουάριος 2008.
- [19] J. Sarkar, «Performance of Sputtering Targets,» σε *Sputtering Materials for VLSI and Thin Film Devices*, William Andrew, 2010, pp. 171-195.
- [20] ELISA CANTERGIANI, «Influence of Strain Rate Sensitivity on Cube Texture Evolution in Aluminium Alloys,» *Metallurgical and Materials Transactions*, τόμ. A, p. 2832–2860, 12 Μάιος 2022.
- [21] ELISA CANTERGIANI, «Influence of Hot Band Annealing on Cold-Rolled Microstructure and Recrystallization in AA 6016,» *METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS*, τόμ. 54A, pp. 75-96, 2022.
- [22] Zhang, «A virtual laboratory using high resolution crystal plasticity simulations

to determine the initial yield surface for sheet metal forming operations,» *International Journal of Plasticity*, 2016.

- [23] Boudekhani-Abbas, «Texture, microstructure and mechanical properties evolution in Fe-x (x = 36 and 48 wt.%) Ni alloy after accumulative roll bonding,» IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng., 2018.
- [24] W. Muhammad, «Experimental and numerical investigation of texture evolution and the effects of intragranular backstresses in aluminum alloys subjected to large strain cyclic deformation,» *International Journal of Plasticity*, τόμ. 93, pp. 137-163, Ιούνιος 2017.
- [25] William D. Callister Jr., *Materials Science and Engineering: An Introduction*, 10η Έκδοση επιμ., Wiley, 2018.
- [26] Hull, *Introduction to Dislocations*, Οξφόρδη: Butterworth-Heinemann, 2001.
- [27] Γ. Φούρλαρης, *Σημειώσεις Μαθήματος: Μεταλλογνωσία II*.
- [28] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8η Έκδοση επιμ., Wiley, 2004.
- [29] N. Hiroshi, «Stacking Faults,» σε *Physical Metallurgy*, 5η Έκδοση επιμ., τόμ. I, Elsevier, 2015.
- [30] H. Föll, «Stacking Faults».
- [31] Donald R. Askeland, *The Science and Engineering of Materials*, 6η Έκδοση επιμ., Cengage Learning, 2019.
- [32] Reza Abbaschian, *Physical Metallurgy Principles*, 4η Έκδοση επιμ., Cengage Learning, 2009.
- [33] J. R. Davis, *Tensile Testing*, 2η Έκδοση επιμ., ASM International, 2004.
- [34] Malcolm S Loveday, «Tensile Testing of Metallic Materials: A Review.,» 2004.
- [35] A. International, «Standard Test Methods for Tension Testing of Metallic Materials,» ASTM International, 2022.



- [36] ISO, «ISO 6892-1:2019 Metallic materials — Tensile testing — Part 1: Method of test at room temperature,» 2019.
- [37] ISO, «ISO 6892-2:2018 Metallic materials — Tensile testing — Part 2: Method of test at elevated temperature,» ISO, 2018.
- [38] Marc André Meyers, *Mechanical Behavior of Materials*, 2η Έκδοση επιμ., Cambridge University Press, 2008.
- [39] R. Lifshitz, «What is a crystal?,» *Zeitschrift für Kristallographie*, αρ. 222, pp. 313-317, 2007.
- [40] Khanh Nguyen, «Computational Modeling of Dislocation Slip Mechanisms in Crystal Plasticity: A Short Review,» σε *Crystal Plasticity*, Crystals, 2021, pp. 391-423.
- [41] H. J. Greenfield, «The Origins of Metallurgy: Distinguishing Stone from Metal Cut-marks on Bones from Archaeological Sites.,» *Journal of Archaeological Science*, τόμ. 26, αρ. 7, pp. 797-808, 1999.
- [42] Roland A. Puntigam, «Volterra Distortions, Spinning Strings, and Cosmic Defects,» *Classical and Quantum Gravity*, τόμ. 14, 1997.
- [43] D. Kuhlmann-Wilsdorf, «The theory of dislocation-based crystal plasticity,» *Philosophical Magazine A*, τόμ. 79, pp. 955-1008, 1999.
- [44] F. Roters e al., «Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications,» *Acta Materialia*, τόμ. 58, αρ. 4, pp. 1152-1211, Φεβρουάριος 2010.
- [45] Peter M. Anderson, *Theory of Dislocations*, 3η Έκδοση επιμ., Cambridge University Press, 2017.
- [46] Groh, «Multiscale modeling of the plasticity in an aluminum single crystal,» *International Journal of Plasticity*, αρ. 25, pp. 1456-1473, 2009.
- [47] Engineering Archives, «Schmid's Law».

- [48] «Slip geometry: the critical resolved shear stress,» University of Cambridge, [Ηλεκτρονικό]. Available: [https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/slip/slip\\_geometry.php](https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/slip/slip_geometry.php). [Πρόσβαση 20 Απρίλιος 2023].
- [49] Athanasios Arsenlis, «On the evolution of crystallographic dislocation density in non-homogeneously deforming crystals,» *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, τόμ. 52, αρ. 6, pp. 1213-1246, Ιούνιος 2004.
- [50] Diehl, «Coupled Crystal Plasticity–Phase Field Fracture Simulation Study on Damage Evolution Around a Void: Pore Shape Versus Crystallographic Orientation,» *JOM*, τόμ. 69, αρ. 5, pp. 872-878, Μάιος 2017.
- [51] Karo Sedighiani, «Determination and analysis of the constitutive parameters of temperature-dependent dislocation-density-based crystal plasticity models,» *Mechanics of Materials*, τόμ. 164, Ιανουάριος 2022.
- [52] F. Roters e. al., «DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale,» *Computational Materials Science*, τόμ. 158, pp. 420-478, 2019.
- [53] D. Wang, «Damage and Strain Patterning Simulation of Structural Heterogeneity,» Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Fuxin, 2019.
- [54] S. K. Vemuri, «Machine-Learning assisted understanding of RVE-size dependent uncertainties and corresponding hierarchy of properties».
- [55] Liu, «Comparison of finite element and fast Fourier transform crystal plasticity solvers for texture prediction,» *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, τόμ. 18, αρ. 8, 2010.
- [56] F. R. e. al., «DAMASK: the Dusseldorf Advanced MAterial Simulation Kit for studying crystal plasticity using an FE based or a spectral numerical solver,» 2012.
- [57] E. A. Badawi, «Nuclear Technique (PAT) Challenge (XRD & HV) Techniques

for Probing Properties of Material Science (Aluminum Alloy),» *Advancements in Materials*, τόμ. II, pp. 89-99, 2018.

- [58] J. A. Muñoz, «Heat treatment effect on an AA6063 alloy,» *Materials Letters*, τόμ. 277, 2020.
- [59] Qingna Ma e. al., «Corrosion Fatigue Fracture Characteristics of FSW 7075 Aluminum Alloy Joints,» *Materials*, τόμ. 13, 2020.
- [60] «United Nation | Department of Economic and Social Affairs Sustainable Development,» [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://sustainabledevelopment.un.org/rio20/about>. [Πρόσβαση Σεπτέμβριος 2023].
- [61] «Future generation,» [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://futuregeneration.gr/17-stoxoi-gia-biwsimh-anartyksi/>. [Πρόσβαση Σεπτέμβριος 2023].
- [62] Dumoulin, «Description of plastic anisotropy in AA6063-T6 using the crystal plasticity finite element method,» *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, τόμ. 20, αρ. 5, 2012.
- [63] Sedighiani, «An efficient and robust approach to determine material parameters of crystal plasticity constitutive laws from macro-scale stress–strain curves,» *International Journal of Plasticity*, τόμ. 134, 2020.
- [64] K. Christoph, «On the role of dislocation transport in the constitutive description of crystal plasticity,» epubli GmbH, Βερολίνο, 2013.