



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Μεταλλειολόγων – Μεταλλουργών Μηχανικών

Τομέας Μεταλλουργίας και Τεχνολογίας Υλικών

Προσδιορισμός της πυκνότητας διαταραχών σε κράματα αλουμινίου
μέσω Υπολογιστικών Μεθόδων

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Άρης Λουμπάνι

Επιβλέπων Καθηγητής: Αν. Καθηγητής Dr. – Ing. Σπυρίδων Παπαεθυμίου



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Μεταλλειολόγων – Μεταλλουργών Μηχανικών

Τομέας Μεταλλουργίας και Τεχνολογίας Υλικών

Προσδιορισμός της πυκνότητας διαταραχών σε κράματα αλουμινίου
μέσω Υπολογιστικών Μεθόδων

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Άρης Λουμπάνι

Επιβλέπων: Αν. Καθηγητής Dr. Ing. Σπυρίδων Παπαευθυμίου

Εγκρίθηκε από την τριμελή επιτροπή στις 26/10/2023

Σπυρίδων Παπαευθυμίου, Αναπληρωτής Καθηγητής, (Υπογραφή)

Δημήτριος Πάνιας, Καθηγητής, (Υπογραφή)

Ανθιμος Ξενίδης, Καθηγητής, (Υπογραφή)

Copyright © Άρης Λουμπάνι, 2023

Με επιφύλαξη κάθε δικαιώματος. All rights reserved.

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

Πίνακας Περιεχομένων	1
1 Εισαγωγή	8
2 Θεωρία	11
2.1 Μοριακή Δυναμική	11
2.1.1 Εφαρμογή Μοριακής Δυναμικής σε Μηχανικά προβλήματα.....	15
2.1.2 Επιλογή Δυναμικού	17
2.2 Crystal Plasticity	19
2.3 Dislocation Dynamics.....	20
2.4 Αλουμίνιο	21
2.4.1 Γενικά για το αλουμίνιο	21
2.4.2 Κράματα Αλουμινίου – Κατηγοριοποίηση.....	23
2.4.3 Κράμα 6063.....	26
2.4.3.1 Μηχανικές Ιδιότητες και Μικροδομή	27
2.5 Διαταραχές.....	29
2.5.1 Διαταραχές στα FCC μέταλλα	34
2.5.2 Προέλευση και δημιουργία διαταραχών	35
2.5.2.1 Διαταραχές που παράγονται κατά τη στερεοποίηση.....	36
2.5.2.2 Διαταραχές που παράγονται κατά τη πλαστική παραμόρφωση	37
3 Πειραματικό Μέρος	39
3.1 Λογισμικά πακέτα.....	39
3.1.1 LAMMPS	39
3.1.2 OVITO.....	40
3.1.3 ATOMSK.....	41

3.2	Δημιουργία Μικροδομής	42
3.3	Ανάπτυξη του Input Script για το LAMMPS	44
4	Παρουσίαση αποτελεσμάτων	48
4.1	Οπτική αναπαράσταση διαταραχών	48
5	Σχολιασμός αποτελεσμάτων – σύγκριση με πειραματικά	55
5.1	Σύγκριση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων	55
	55
5.2	Σύγκριση των αποτελεσμάτων προσομοίωσης με πειραματικά	56
6	Επίλογος – Συμπεράσματα	59
7	Βιβλιογραφία	61

Πίνακας Εικόνων

Εικόνα 1: Σχεδιάγραμμα μιας Finite Element προσομοίωσης.....	9
Εικόνα 2: Ταξινόμηση μεγέθους των διαφορών ειδών Υπολογιστικής Προσομοίωσης [5]	10
Εικόνα 3: Σχεδιάγραμμα της διαδικασίας εκτέλεσης πειραμάτων Μοριακής Δυναμικής [6].....	11
Εικόνα 4: Σχηματική αναπαράσταση του Displacement Control Method [10].....	16
Εικόνα 5: Παράδειγμα χρήσης μοντέλου Crystal Plasticity για την προσομοίωση κόκκου κατά την έλαση	19
Εικόνα 6: Δομή ενός κρυστάλλου Αλουμινίου	22
Εικόνα 7: Επίδραση θερμοκρασίας στην εφελκυστική αντοχή του 6063	28
Εικόνα 8: Επίδραση θερμοκρασίας στην σκληρότητα του 6063	28
Εικόνα 9: Αναπαράσταση μιας διαταραχής ακμής	30
Εικόνα 10: Αναπαράσταση διαταραχής κοχλία.....	31
Εικόνα 11: Αναπαράσταση Burgers Vector.....	32
Εικόνα 12: Διαταραχή Shockley	35
Εικόνα 13: Διαταραχή Frank-Read [25]	37
Εικόνα 14: Μηχανισμός εγκάρσιας ολίσθησης	38
Εικόνα 15: Μορφολογία μικροδομής δημιουργημένης μέσω ATOMSK.....	43
Εικόνα 16: Οπτικοποίηση της πειραματικής μικροδομής 100.000 ατόμων	49
Εικόνα 17: Οπτικοποίηση γραμμών διαταραχών (πρώτη όψη).....	50
Εικόνα 18: Οπτικοποίηση γραμμών διαταραχών (δεύτερη όψη)	51
Εικόνα 19: Οπτικοποίηση γραμμών διαταραχών (τρίτη όψη).....	51
Εικόνα 20: Οπτικοποίηση διαταραχών σε συνθήκε NVE (πρώτη όψη)	53
Εικόνα 21: Οπτικοποίηση διαταραχών σε συνθήκε NVE (δεύτερη όψη).....	53
Εικόνα 22: Σύγκριση γραμμών διαταραχών σε NPT (πάνω) και NVE (κάτω) συνθήκες.....	55
Εικόνα 23: Σύγκριση μέσω γραφικής παράστασης των τιμών πυκνότητας διαταραχών.....	58

Λίστα Πινάκων

Πίνακας 1: Ιδιότητες Αλουμινίου	22
Πίνακας 2: Χημική σύσταση Κράματος 6063.....	26

Πίνακας 3: Ανάλυση διαταραχών κατά την προσομοίωση σε NPT συνθήκες.....	52
Πίνακας 4: Ανάλυση διαταραχών κατά την προσομοίωση σε NVE συνθήκες.....	54
Πίνακας 5: Σύγκριση τιμών πυκνότητας διαταραχών (Πειραματικά - Υπολογιστικά αποτελέσματα)	57

Ευχαριστίες

Θα ήθελα αρχικά να ευχαριστήσω τον Αναπληρωτή Καθηγητή Dr. – Ing. Σπύρο Παπαευθυμίου για την ανάθεση του θέματος αυτής της διπλωματικής εργασίας καθώς και για την εμπιστοσύνη και καθοδήγησή του. Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω τον Υ.Δ. Βασίλη Λουκαδάκη για την καθοδήγηση του καθ' όλο αυτό το διάστημα και για την συνεργασία του. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω των Υ.Δ. Κωνσταντίνο Μπέτση για τις συμβουλές του. Ευχαριστώ επίσης τα υπόλοιπα μέλη της τριμελούς επιτροπής, τον Καθηγητή Ανθιμο Ξενίδη και τον Καθηγητή Δημήτριο Πάνια. Οφείλω να ευχαριστήσω τους συμφοιτητές και τις συμφοιτήτριές μου που ήταν συνοδοιπόροι μου στο ακαδημαϊκό αυτό ταξίδι. Τέλος, ιδιαίτερες ευχαριστίες θα ήθελα να αποδώσω στους γονείς μου και τις αδερφές μου, οι οποίοι ήταν δίπλα μου και με στήριζαν σε κάθε μου βήμα και αποτέλεσαν ανεκτίμητη βοήθεια.

Περίληψη

Στην παρούσα Διπλωματική Εργασία, προσεγγίστηκε το ζήτημα του προσδιορισμού της πυκνότητας διαταραχών στα κράματα αλουμινίου, μέσω Υπολογιστικών Μεθόδων. Πιο συγκεκριμένα, η προσπάθεια αφορούσε την μελέτη της πυκνότητας διαταραχών (ρ) στο κράμα αλουμινίου 6063 κατά την εφαρμογή μονοαξονικής τάσης. Αρχικά, γίνεται μια εισαγωγή, όπου γίνεται ανάλυση βασικών εννοιών της Υπολογιστικής Προσομοίωσης και των ειδών που υπάγονται σε αυτή. Στην συνέχεια, πραγματοποιείται ανάλυση των αρχών της Μοριακής Δυναμικής, των μαθηματικών εξισώσεων στις οποίες βασίζεται και γίνεται εισαγωγή στην έννοια του Ατομικού Δυναμικού. Έπειτα, γίνεται μια σύντομη αναφορά στα κράματα του αλουμινίου και στην μικροδομή και τις μηχανικές ιδιότητες του κράματος 6063. Το θεωρητικό μέρος ολοκληρώνεται με μια ανασκόπηση των βασικών αρχών που διέπουν τη θεωρία διαταραχών. Εν συνεχεία, στο πειραματικό μέρος, πραγματοποιείται αρχικά αναφορά στα λογισμικά πακέτα τα οποία χρησιμοποιήθηκαν κατά την εκπόνηση της εργασίας, Εν συνεχεία, παρουσιάζεται η μέθοδος η οποία ακολουθήθηκε για τη δημιουργία της μικροδομής καθώς και την ανάπτυξη του αρχείου εισόδου το οποίο αποτελεί το κύριο δομικό υλικό της προσομοίωσης. Στην επόμενη ενότητα, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, μεταξύ αυτών βρίσκονται ο υπολογισμός της πυκνότητας διαταραχών και η οπτική αναπαράσταση των γραμμών διαταραχών και εν συνεχεία σχολιάζονται και συγκρίνονται με αντίστοιχα πειραματικά. Τέλος, γίνεται μια σύνοψη των αποτελεσμάτων τα οποία προέκυψαν από την συγκεκριμένη εργασία.

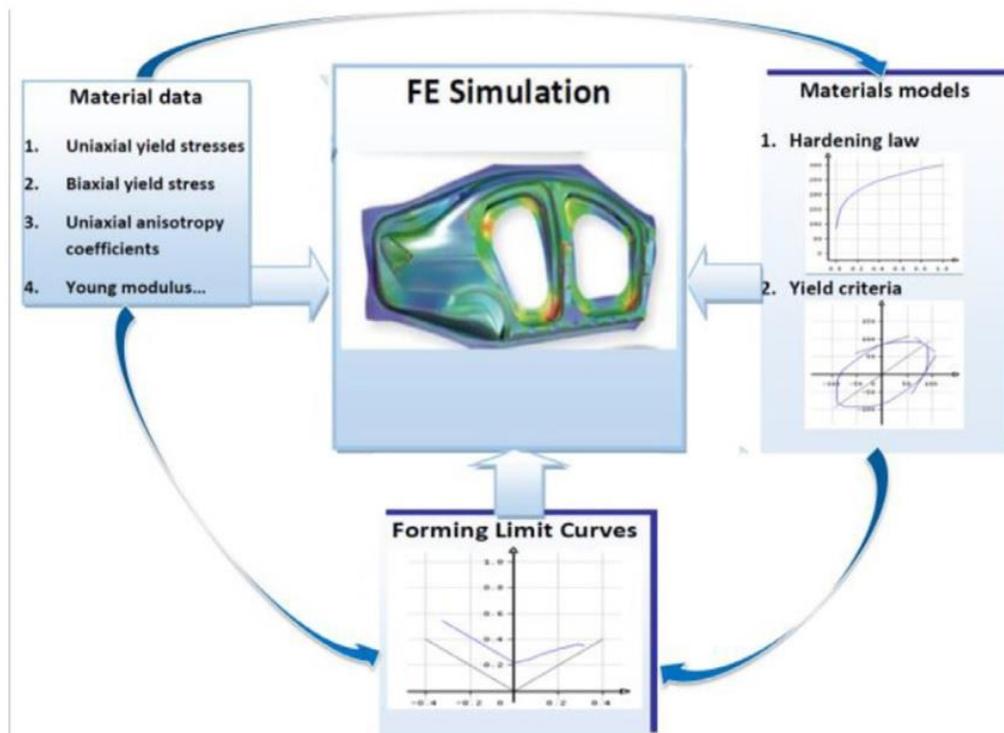
Abstract

In this Diploma Thesis, the issue of determining the density of dislocations in aluminum alloys was approached through Computational Methods. More specifically, the effort was centered around simulating the microstructure of a 6000 series aluminum alloy, the 6063 alloy to be more exact, and determining the dislocation density in this alloy during the uniaxial stress. First, a theoretical introduction is made, where basic concepts of Computational Simulation and the various types of simulations are introduced. Then, a more thorough analysis of the principles of Molecular Dynamics, the mathematical equations on which they are based and an introduction to the concept of Atomic Potential is made. Next, a brief reference is made to aluminium alloys and the microstructure and mechanical properties of the 6063 alloy. Furthermore, a review of the basic principles underlying dislocation theory is also carried out. Subsequently, the experimental part first refers to the various software packages used during this work. Then, the method which was used in order to create the microstructure as well as the development of the input file which is the main building block of the simulation. On the next section, the results of the simulation are presented, which include the calculation of the dislocation density and the visualization of the dislocations lines for the alloy at hand all of which are then compared to experimental data from scientific publications. Lastly, a summary of the simulation results is presented.

1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Με τον όρο προσομοίωση, γίνεται αναφορά στη χρήση ενός υπολογιστικού μοντέλου με σκοπό να αποκτήσουμε περισσότερες πληροφορίες, όσον αφορά τη συμπεριφορά ενός πολύπλοκου συστήματος (π.χ. βιολογικά, κοινωνικά ή μηχανικά συστήματα) μέσω της πρόβλεψης των επιπτώσεων των παραμέτρων του μοντέλου, αλλά και στην αξιολόγηση σχεδίων χωρίς να αυτά να χρειαστεί να αναπτυχθούν στον πραγματικό κόσμο (π.χ. αρχιτεκτονικά σχέδια, σχέδια έλασης κ.α.) [7]. Ένα μοντέλο προσομοίωσης αναφέρεται στους αλγόριθμους, τις μαθηματικές εκφράσεις και εξισώσεις που ενσωματώνουν τη συμπεριφορά και την απόδοση ενός συστήματος σε σενάρια του πραγματικού κόσμου [8].

Η ανάπτυξη ενός νέου υλικού ή η μελέτη ενός ήδη υπάρχοντος προκειμένου να το βελτιωθεί, είναι αρκετά χρονοβόρες και υψηλού κόστους διαδικασίες. Για το λόγο αυτό, τα τελευταία χρόνια παρατηρείται μια αύξηση στις προσπάθειες εφαρμογής των υπολογιστικών μεθόδων και μοντέλων μηχανικής εκμάθησης, στον τομέα της τεχνολογίας υλικών και μεταλλικών υλικών πιο συγκεκριμένα. Το να επιτευχθεί λοιπόν η ανάπτυξη τρόπων πρόβλεψης, π.χ. της συμπεριφοράς ενός μεταλλικού υλικού σε συγκεκριμένα περιβάλλοντα, χωρίς να χρειάζεται να το εκθέσουμε σε αυτά στη πραγματική ζωή, θα είναι μια σημαντική εξέλιξη. Στην παρακάτω εικόνα (Εικόνα 1) φαίνεται η απεικόνιση μια προσομοίωσης των μηχανικών ιδιοτήτων μιας πόρτας αυτοκινήτου, μέσω της μεθόδου FEM.

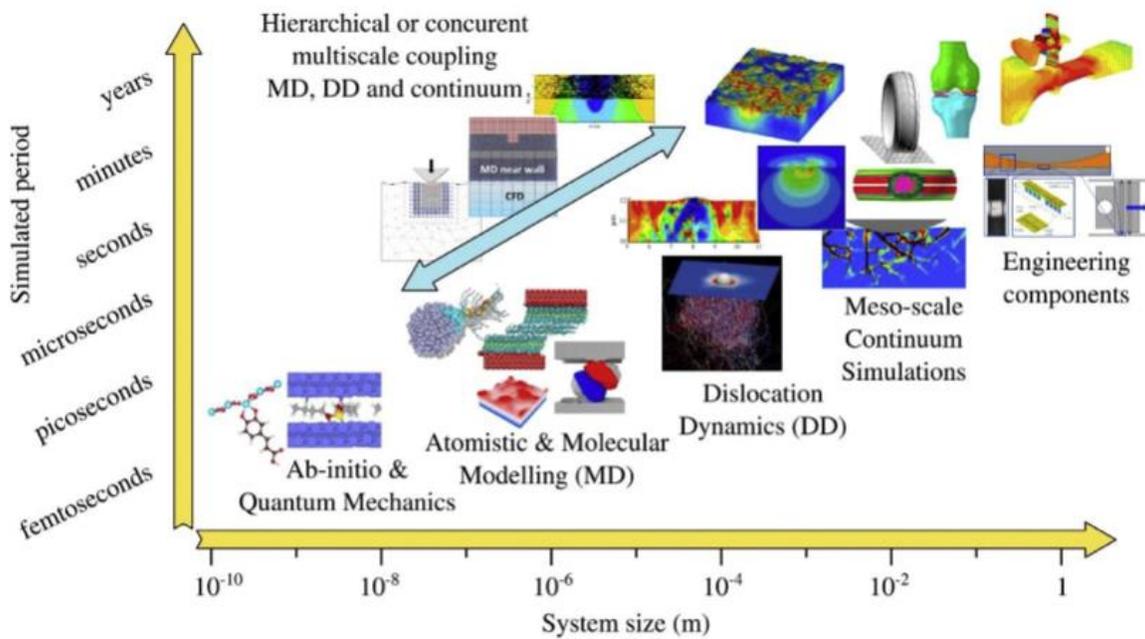


Εικόνα 1: Σχεδιάγραμμα μιας Finite Element προσομοίωσης

Οι περισσότερες από τις αριθμητικές προσομοιώσεις διαμόρφωσης, βασίζονται πλέον στη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Analysis - FEM). Το FEM χρησιμοποιείται κυρίως στη μακροσκοπική (macroscale) ανάλυση ενός πλαστικά παραμορφωμένου υλικού. Η πρώτη εφαρμογή του FEM, αφορούσε τη δομική ανάλυση ελαφρών σωμάτων όπως για παράδειγμα τα αεροσκάφη [3]. Η μέθοδος FEM, έπειτα επεκτάθηκε στη μη γραμμική ανάλυση στη δεκαετία του 1960, και η ανάλυση της πλαστικής παραμόρφωσης χαμηλών τάσεων σε υλικά έγινε επίσης δυνατή κατά αυτή τη περίοδο [9]. Η ανάλυση με χρήση πεπερασμένων στοιχείων, μεγάλης κλίμακας, με τη χρήση Lagrangian εξισώσεων, ξεκίνησε να εφαρμόζεται τη δεκαετία του 70, όπου είδαμε να χρησιμοποιείται για πρώτη φορά η μέθοδος FEM και για μεθόδους διαμόρφωσης [9].

Η ανάπτυξη του αλγορίθμου του πλέγματος, δηλαδή αλγορίθμου ο οποίος κατέστη δυνατό τον έλεγχο στη πυκνότητα και τη γεωμετρία του πλέγματος, επέτρεψε τη χρήση του αλγορίθμου

μοντελοποίησης της διαμόρφωσης των μετάλλων, σε μεγάλες πλαστικές παραμορφώσεις. Η σύνδεση του FEM με μεθόδους σχεδιασμού CAD (Computer Aided Design) σήμαινε τη χρήση πλέον του FEM ως εργαλείο κατά τον σχεδιασμό της εκάστοτε μεθόδου μορφοποίησης [3]. Όμως όπως αναφέρθηκε νωρίτερα, το FEM είναι μια macroscale μέθοδος. Στη Μεταλλουργία και Τεχνολογία Υλικών, όπου τα περισσότερα φαινόμενα συμβαίνουν στη μικρο και νάνο κλίμακα, υπήρξε η ανάγκη για την ανάπτυξη και άλλων μεθόδων προσομοίωσης. Παράλληλα με την ανάπτυξη του FEM, υπήρξε ανάπτυξη μεθόδων της μέσο και μικρο κλίμακας, όπως οι μέθοδοι Cellular Automata (CA), μεθόδους μοριακής δυναμικής (MD) και Crystal Plasticity (CP) μεθόδους [9]. Στην παρακάτω εικόνα, έχουμε μια διαγραμματική απεικόνιση των μεθόδων προσομοίωσης, σε σχέση με την κλίμακα μελέτης.

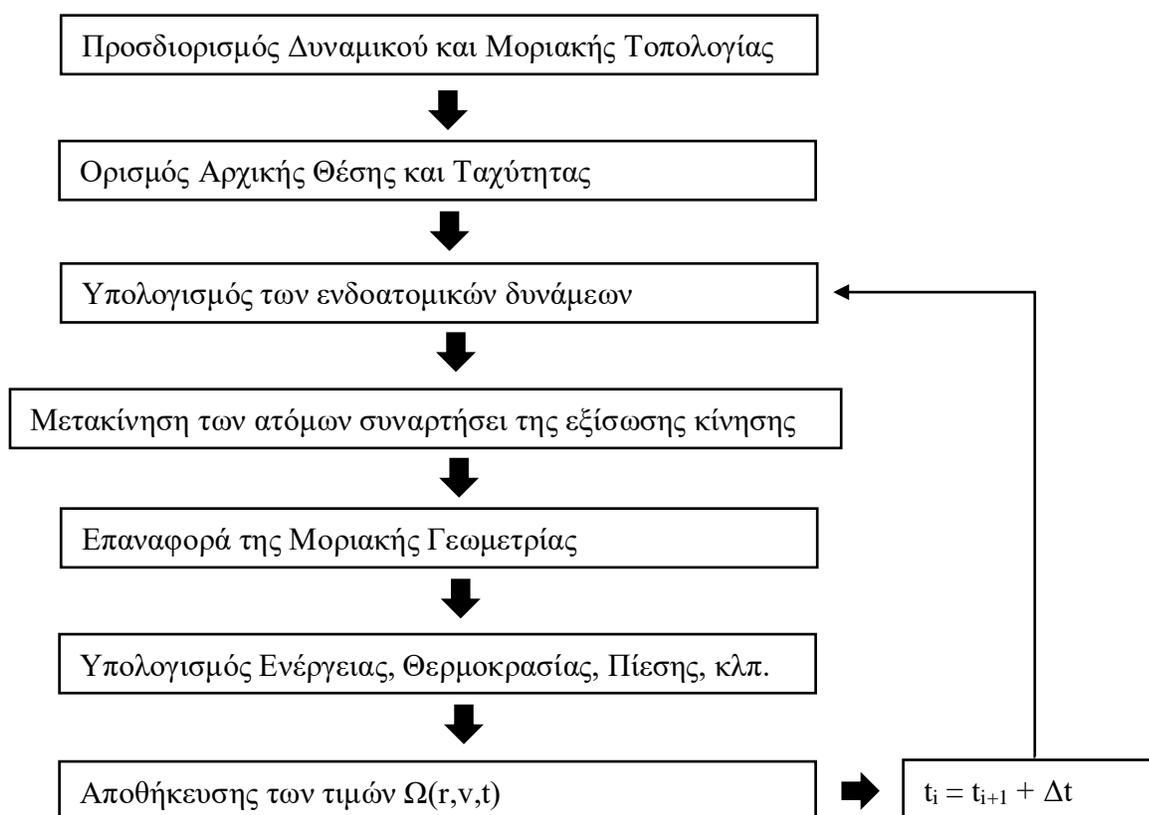


Εικόνα 2: Ταξινόμηση μεγέθους των διαφόρων ειδών Υπολογιστικής Προσομοίωσης [5]

2 ΘΕΩΡΙΑ

2.1 ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ

Η κλασική προσομοίωση μοριακής δυναμικής (MD) είναι μια προσέγγιση για τη μοντελοποίηση των θερμοδυναμικών, μηχανικών και χημικών συμπεριφορών στερεών και ρευστών με αυστηρό τρόπο σε επίπεδο ακρίβειας που καθορίζεται από ένα διατομικό δυναμικό (πεδίο δυνάμεων) το οποίο ορίζει τη δυναμική ενέργεια του συστήματος ως συνάρτηση των θέσεων των ατόμων και προαιρετικά άλλων ιδιοτήτων [1]. Ένας λόγος για την αυξανόμενη δημοτικότητα των προσομοιώσεων MD είναι ότι είναι υπολογιστικά κατάλληλες για να επωφεληθούν από τη δραματική αύξηση της ταχύτητας των υπολογιστικών μονάδων η οποία έχει παρατηρηθεί τα τελευταία χρόνια, τόσο στις CPU όσο και τις GPU [1].



Εικόνα 3: Σχεδιάγραμμα της διαδικασίας εκτέλεσης πειραμάτων Μοριακής Δυναμικής [6]

Για τις εφαρμογές της επιστήμης των υλικών, ένας δεύτερος λόγος για την ευρέα εφαρμογή της ΜΔ είναι ότι η διαθεσιμότητα ταχύτερων υπολογιστικών μονάδων, έχει ωθήσει την ανάπτυξη πιο σύνθετων και εντατικών σε υπολογισμούς δυνατοτήτων, οι οποίες με τη σειρά τους επέτρεψαν την ακριβέστερη προγνωστική μοντελοποίηση των ιδιοτήτων των υλικών. Ειδικότερα, αυτό περιλαμβάνει την ανάπτυξη πολλών δυναμικών, όπως τα δυναμικά τάξης δεσμού ή τα αντιδραστικά δυναμικά, με υπολογιστικό κόστος έως και μερικές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο από τα απλούστερα, κατά ζεύγη προσθετικά δυναμικά [2]. Τα τελευταία χρόνια, συμπεριλαμβάνονται σε αυτά και τα λεγόμενα δυναμικά μηχανικής μάθησης (ML), τα οποία αντικαθιστούν εξισώσεις που βασίζονται στη φυσική και προσαρμόζονται σε ένα σχετικά μικρό σύνολο πειραματικών δεδομένων ή κβαντικών υπολογισμών, με γενικές εξισώσεις που περιγράφουν μόνο τη γεωμετρία μιας γειτονιάς ατόμων και με τη πάροδο του χρόνου εκπαιδεύονται σε όλο και μεγαλύτερους όγκους δεδομένων [2].

Η μέθοδος προσομοίωσης ΜΔ εφαρμόζει την κλασική Νευτώνεια μηχανική ώστε να περιγράψει την κίνηση των ατόμων και να ληφθούν σαν αποτέλεσμα οι δυναμικές ιδιότητες του υπό μελέτη συστήματος. Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό της προσομοίωσης ΜΔ είναι ότι η ο υπολογισμός των ατομικών κινήσεων βασίζεται σε μια σταθερή φυσική βάση και είναι εξαιρετικά ακριβής. Ως εκ τούτου, η προσομοίωση ΜΔ μπορεί να παρέχει ταυτόχρονα τις στατιστικές και δυναμικές ιδιότητες ενός συστήματος και είναι εφαρμόσιμη σε ένα ευρύ φάσμα υλικών. Λόγω της ταχείας ανάπτυξης της μεθόδου προσομοίωσης ΜΔ, διάφοροι τύποι πεδίων δυνάμεων έχουν διατυπωθεί συστηματικά για διάφορα μοριακά συστήματα, όπως βιομόρια, πολυμερή, και ημιαγωγούς [10].

Σε μια προσομοίωση ΜΔ, το σύστημα υπακούει στους κλασικούς νόμους του Νεύτωνα για τη κίνηση. Ας θεωρηθεί ένα μοριακό σύστημα που περιέχει N σωματίδια με τα διανύσματα θέσης και ορμής τους να συμβολίζονται με $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ και $\mathbf{P}_i = (P_{i,x}, P_{i,y}, P_{i,z})$, αντίστοιχα. Η χαμιλτονιανή H του συστήματος γράφεται ως εξής:

$$H(R^N, P^N) = \sum_i^N \sum_a \frac{p_{i,a}^2}{2m_i} + U(R^N) \quad (1)$$

Το πεδίο δυνάμεων που δρα στο σύστημα είναι συντηρητικό, το οποίο σημαίνει ότι η δύναμη που ασκείται σε κάθε σωματίδιο του συστήματος μπορεί να ληφθεί με βάση την παράγωγο της δυναμικής ενέργειας του συστήματος ως προς τη θέση του σωματιδίου. Η ενέργεια του συστήματος μπορεί να μειωθεί μετακινώντας κάθε σωματίδιο σε αναλογία με την απόκριση της δύναμης που ασκείται σε αυτό [10]. Η δύναμη μπορεί να υπολογιστεί από τον παρακάτω τύπο:

$$F_i(R^N) = - \frac{\partial U(R^N)}{\partial r_i} \quad (2)$$

Με αυτόν τον τρόπο, μπορεί πλέον να εκφραστεί και η κίνηση του σωματιδίου, σύμφωνα με το 2^ο Νόμο του Νεύτωνα:

$$m_i \ddot{r}_i = F_i(R^N) \quad (3)$$

Όπου με $r_i(t)$ συμβολίζουμε τη δεύτερη παράγωγο του r_i , σε σχέση με τον χρόνο.

Με δεδομένες τις αρχικές θέσεις R^N και τις ορμές P^N των σωματιδίων, η ολοκλήρωση των εκφράσεων της παραπάνω εξίσωσης ως προς το χρόνο παράγει τις τροχιές των σωματιδίων. Κατά συνέπεια, η προσομοίωση ΜΔ είναι μια ντετερμινιστική μέθοδος, σύμφωνα με την οποία με προκαθορισμένες αρχικές συνθήκες, η επακόλουθη χρονική εξέλιξη καθορίζεται κατ' αρχήν. Η επίλυση του παραπάνω προβλήματος αρχικών τιμών επιδεικνύεται εξετάζοντας την περίπτωση ενός απλού μονοδιάστατου (1D) αρμονικού ταλαντωτή. Για έναν τέτοιο ταλαντωτή, η κλασική Χαμιλτονιανή H γράφεται ως εξής:

$$H = \frac{p(t)^2}{2m} + \frac{1}{2} k_s x(t)^2 \quad (4)$$

Στις προσομοιώσεις ΜΔ, η λύσης της εξίσωσης 1 είναι δυσκολότερο να ληφθεί σε σχέση με τη λύση της εξίσωσης 4, καθώς η κίνηση του κάθε ατόμου επηρεάζεται από την αλληλεπίδραση αυτού με όλα τα υπόλοιπα άτομα του συστήματος [10].

Τα βήματα τα οποία ακολουθούνται για την σωστή εκτέλεση μια προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής είναι τα εξής:

- **1^ο Βήμα:** Ορισμός των αρχικών συνθηκών, όπως τις αρχικές θέσεις των ατόμων, των ταχυτήτων, οριακών συνθηκών, καθώς και των εξισώσεων υπολογισμού των δυναμικών.
- **2^ο Βήμα:** Μέσω της λύσης της εξίσωσης δυναμικού, υπολογίζουμε τις δυνάμεις οι οποίες ασκούνται στο κάθε άτομο και στη συνέχεια μέσω της εξίσωσης της κίνησης, λύνουμε για ορισμένο χρόνο Δt για το κάθε άτομο.
- **3^ο Βήμα:** Οι νέες θέσεις και ταχύτητες των ατόμων καταγράφονται.
- **4^ο Βήμα:** Από τα δεδομένα του προηγούμενου βήματος, υπολογίζονται τα υπόλοιπα φυσικά μεγέθη.

Τα βήματα 3-5 επαναλαμβάνονται έως ότου φτάσουμε το όριο χρόνου το οποίο έχουμε ορίσει για το πείραμά μας, ή αν κάποιες άλλες συνθήκες επιτευχθούν.

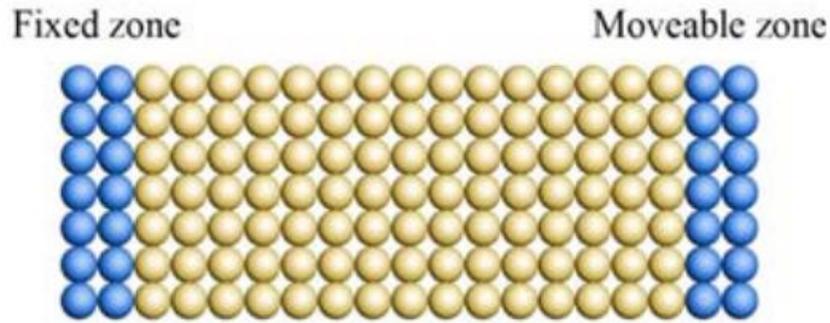
Το γεγονός ότι η προσομοίωση MD μοντελοποιεί τα υλικά σε ατομικό επίπεδο καθορίζει τις χωρικές και χρονικές κλίμακες της. Ας θεωρήσουμε έναν κρύσταλλο με απλή κυβική δομή πλέγματος και σταθερά πλέγματος 1 nm. Ένα κυβικό νανοσωματίδιο ενός τέτοιου κρυστάλλου με μήκος πλευράς 1 μm περιλαμβάνει περίπου 10^9 άτομα. Η μοντελοποίηση ενός συστήματος που περιέχει έναν τόσο τεράστιο αριθμό ατόμων εξακολουθεί να υπερβαίνει τις δυνατότητες της προσομοίωσης ΜΔ λόγω των υψηλών απαιτήσεων υπολογιστικών πόρων και αποθήκευσης δεδομένων. Για να επιτευχθεί καλύτερη ανάλυση του μοντελοποιημένου συστήματος και να μειωθούν τα στατιστικά σφάλματα, το χρονικό βήμα προσομοίωσης πρέπει να διατηρείται όσο το δυνατόν μικρότερο. Το χρονικό βήμα μιας προσομοίωσης ΜΔ ορίζεται συνήθως στο ένα δέκατο της μικρότερης περιόδου δόνησης των ατόμων στο σύστημα. Η συχνότητα δόνησης ενός ατόμου σε δεσμό είναι αντιστρόφως ανάλογη της ατομικής του μάζας. Η περίοδος δόνησης του ελαφρύτερου ατόμου (H) είναι της τάξης των 10 fs όταν ενώνεται με άλλα στοιχεία. Ως εκ τούτου, κατά την προσομοίωση ενός συστήματος που περιέχει άτομα H απαιτείται συνήθως χρονικό βήμα

1 fs. Για χρόνο προσομοίωσης 1 ns, ένα χρονικό βήμα 1 fs αντιστοιχεί σε 10 βήματα προσομοίωσης [10].

2.1.1 Εφαρμογή Μοριακής Δυναμικής σε Μηχανικά προβλήματα

Οι προσομοιώσεις ΜΔ υιοθετούνται για την κατανόηση των μηχανικών φαινομένων που συμβαίνουν σε μακροσκοπικά υλικά, αλλά είναι εστιασμένες σε μικρές περιοχές τάξεως μεγέθους νανοκλίμακας ή συμβαίνουν σε χρονική κλίμακα που δεν μπορεί να παρατηρηθεί με πειραματικό εξοπλισμό. Για παράδειγμα, οι μηχανικές συμπεριφορές των διεπιφανειών και των διαφόρων τύπων μικροατελειών, όπως οι ρωγμές και οι διαταραχές, μπορούν να αποτυπωθούν κατάλληλα με τη διεξαγωγή προσομοιώσεων ΜΔ [10]. Οι μηχανικές ιδιότητες ενός υλικού χαρακτηρίζονται συνήθως από ιδιότητες όπως το μέτρο ελαστικότητας, το μέτρο διάτμησης, το όριο διαρροής και η αντοχή, η τελική παραμόρφωση, η αντοχή σε θραύση, ο λόγος Poisson και η σκληρότητα, μεταξύ άλλων. Στα πειράματα, αυτές οι παράμετροι μπορούν να μετρηθούν μέσω διαφόρων δοκιμών, όπως η δοκιμή εφελκυσμού, η δοκιμή διάτμησης και η δοκιμή indentation. Στις προσομοιώσεις ΜΔ, αυτές οι δοκιμές μπορούν να μοντελοποιηθούν για να παρέχουν ακριβή πρόβλεψη των μηχανικών ιδιοτήτων των υλικών [10].

Τα μοντέλα Μοριακής Δυναμικής, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη μελέτη δοκιμών εφελκυσμού [10]. Για τη μοντελοποίηση μια τέτοιας δοκιμής χρησιμοποιούνται συνήθως δύο μέθοδοι: Στη πρώτη μέθοδο, ορίζουμε αρχικά δύο οριακές «ζώνες» εκ των οποίων η μια είναι σταθερή ενώ η άλλη κινείται στον άξονα του εφελκυσμού. Η ταχύτητα της κινούμενης ζώνης καθορίζει τον ρυθμό παραμόρφωσης. Αυτή η προσέγγιση ονομάζεται μέθοδος ελέγχου μετατόπισης (displacement control method). Γενικά, η κινούμενη οριακή ζώνη μπορεί να μετατοπιστεί με δύο τρόπους: τον δυναμικό τρόπο και τον αυξητικό τρόπο [10]. Οι δύο αυτές μέθοδοι συνήθως παρουσιάζουν ίδιες τιμές και αποτελέσματα όσον αφορά το μέτρο ελαστικότητας και τη μέγιστη παραμόρφωση στα μεταλλικά υλικά [10]. Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου φαίνεται παρακάτω [10]:



Εικόνα 4: Σχηματική αναπαράσταση του Displacement Control Method [10]

Στη δεύτερη προσέγγιση, το πλαίσιο προσομοίωσης επεκτείνεται με σταθερό ρυθμό με αναδιαμόρφωση των συντεταγμένων των ατόμων κατά μήκος της διεύθυνσης του εφελκυσμού, μέσω της παρακάτω σχέσης:

$$x_i = x_i^0 [1 + \varepsilon_x (t - t_0)] \quad (5)$$

Όπου το x_i^0 δείχνει τη συντεταγμένη x ενός ατόμου i σε χρόνο t_0 ενώ το x_i τη συντεταγμένη x του ίδιου ατόμου σε χρόνο t . Ακόμη, το ε_x είναι η τάση η οποία εφαρμόζεται στον άξονα εφελκυσμού (εδώ θεωρείται ως άξονας εφελκυσμού ο x). Μια σημαντική παράμετρος η οποία πρέπει να υπολογιστεί και στις δύο προσεγγίσεις, είναι η ατομική τάση [10].

2.1.2 Επιλογή Δυναμικού

Η εκτέλεση προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής, βασίζεται στην επίλυση των εξισώσεων των δυναμικών τα οποία αναπτύσσονται μεταξύ των ατόμων. Στη παρούσα εργασία, γίνεται χρήση του ενδοατομικού δυναμικού Modified Embedded Atom Method (MEAM). Το MEAM, αναπτύχθηκε ως τροποποίηση της υπάρχοντος μεθόδου EAM (Embedded Atom Method) λόγω της ανάγκης υπολογισμού των γωνιακών αλληλεπιδράσεων των ατόμων (κάτι το οποίο δε λάμβανε υπόψη η μέθοδος EAM) [31]. Η μέθοδος EAM είναι ένα ημιεμπειρικό πολυατομικό δυναμικό (many-atom) το οποίο χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της συνολικής ενέργειας ενός μεταλλικού συστήματος. Είναι ιδιαίτερα χρήσιμη για συστήματα με μεγάλες μοναδιαίες κυψέλες [32]. Με τη χρήση του EAM, η κοινότητα της επιστήμης των υλικών έχει διερευνήσει πολλά προβλήματα ενδιαφέροντος: σημειακές ατέλειες, τήξη, κράματα, όρια κόκκων, διαταραχές, διαχωρισμός, θραύση, επιφανειακή δομή και επιταξιακή ανάπτυξη [32]. Η βάση της EAM είναι η διαπίστωση ότι η ενέργεια συνοχής ενός μεταλλικού συστήματος μπορεί να εκφραστεί σε όρους ενεργειών ενσωμάτωσης. Οι Daw και Baskes [33,34] έκαναν αυτή τη σημαντική γενίκευση προτείνοντας να θεωρηθεί η ενέργεια συνοχής ενός μεταλλικού στερεού ως αποτελούμενη από τις ενέργεια ενσωμάτωσης συν τις ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις.

Η MEAM (τροποποιημένη EAM) ενσωματώνει τη γωνιακή εξάρτηση της πυκνότητας των ηλεκτρονίων στην ήδη υπάρχουσα μέθοδο EAM. Ατομικές προσομοιώσεις ευρέος φάσματος στοιχείων και κραμάτων έχουν πραγματοποιηθεί με τη χρήση δυναμικού MEAM. Το μοντέλο MEAM χρησιμοποιήθηκε αρχικά για το πυρίτιο, το γερμάνιο και τα κράματά τους [35]. Στα συστήματα MEAM, η ενέργεια του κάθε ατόμου υπολογίζεται με τη παρακάτω εξίσωση [35]:

$$E_i = F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (6)$$

Όπου F είναι η συνάρτηση ενσωμάτωσης (embedding function), ρ_i η ηλεκτρονιακή πυκνότητα γύρω από το άτομο i , ενώ ϕ_{ij} το δυναμικό ζεύγους μεταξύ ατόμων i και j τα οποία απέχουν απόσταση r_{ij} . Η ενέργεια ενσωμάτωσης $F_i(\rho_i)$ αντιπροσωπεύει την απαιτούμενη ενέργεια για την

εισαγωγή του ατόμου i σε μια θέση όπου η πυκνότητα ηλεκτρονίων είναι ρ_i [35]. Η συνολική ενέργεια του συστήματος ατόμων δίνεται από τη σχέση:

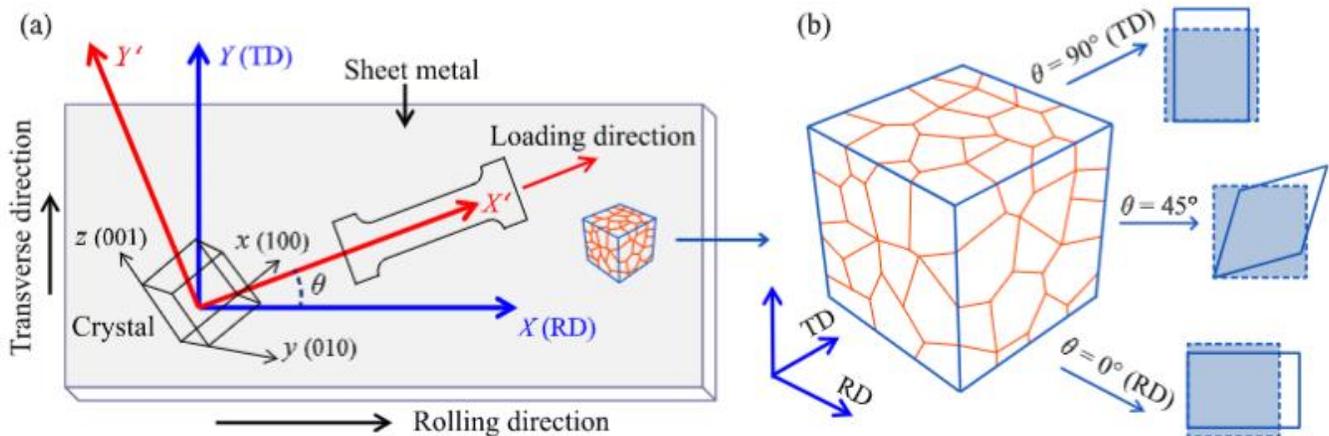
$$E = \sum_i E_i \quad (7)$$

Αρκετές έρευνες έχουν επικεντρωθεί στον κατάλληλο προσδιορισμό των δυναμικών EAM και MEAM, σε διάφορα συστήματα, αλλά και όσα αφορούν συγκεκριμένα το αλουμίνιο, όπως οι Mahata et. al. [40], J M Winey et. al. [41], Jelinek et. al. [35].

2.2 CRYSTAL PLASTICITY

Το Crystal Plasticity, είναι μια θεωρία που χρησιμοποιείται για να περιγράψει την παραμόρφωση των κρυστάλλων από εξωτερικά φορτία. Είναι ένας τύπος υπολογιστικού μοντέλου που χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη της συμπεριφοράς των υλικών υπό διαφορετικές συνθήκες φόρτισης. Το μοντέλο λαμβάνει υπόψη τον τρόπο με τον οποίο είναι διατεταγμένα τα άτομα μέσα σε έναν κρύσταλλο καθώς και το πώς κινούνται και αλληλεπιδρούν μεταξύ τους όταν ο κρύσταλλος υποβάλλεται σε μονοαξονική ή πολυαξονική φόρτιση. Ο στόχος του Crystal Plasticity (CP) Modeling είναι η κατανόηση της σχέσης μεταξύ της μικροδομής ενός υλικού και της μακροσκοπικής του συμπεριφοράς, όπως η αντοχή, η ολκιμότητα και άλλες μηχανικές ιδιότητες [11].

Μια τυπική προσέγγιση CP περιλαμβάνει την αξιοποίηση των κινηματικών και των δομικών νόμων για τον προσδιορισμό της μηχανικής συμπεριφοράς πολυκρυσταλλικών υλικών. Οι νόμοι μπορεί να είναι φαινομενολογικοί ή βασισμένοι σε μικροδομές. Το τελευταίο επιτρέπει την ενσωμάτωση διαφορετικών μηχανισμών παραμόρφωσης που είναι υπεύθυνοι για την πλαστική παραμόρφωση του υλικού. Για την επίλυση των εξισώσεων ισορροπίας, γίνεται χρήση διαφόρων αριθμητικών επιλυτών. Για τη μοντελοποίηση της ανομοιογένειας στα συστήματα πολυκρυσταλλικών και πολυφασικών υλικών, χρησιμοποιούνται τεχνικές ομογενοποίησης στην CP για τη ροή πληροφοριών από μονοκρυσταλλική σε πολυκρυσταλλική κλίμακα [11].



Εικόνα 5: Παράδειγμα χρήσης μοντέλου Crystal Plasticity για την προσομοίωση κόκκου κατά την έλαση

2.3 DISLOCATION DYNAMICS

Η ιδέα πίσω από την προσέγγιση DD είναι ότι επειδή η πλαστική παραμόρφωση κυριαρχείται από την κίνηση και την αλληλεπίδραση των διαταραχών, αρκεί μόνο να εξεταστούν οι ίδιες οι διαταραχές και όχι οι θέσεις όλων των ατόμων, προκειμένου να κατανοηθεί η πλαστική συμπεριφορά ενός υλικού. Μια τέτοια προσέγγιση επιτρέπει προσομοιώσεις με κλίμακες μήκους 10 μm και χρόνου 1 ms. Η μέθοδος DD απαιτεί την εισαγωγή πολλαπλών φυσικών μεγεθών προκειμένου να περιγράψει τις διάφορες συμπεριφορές των διαταραχών, πράγμα που σημαίνει ότι πολλές πληροφορίες πρέπει να παρέχονται είτε από φυσικά πειράματα είτε από πιο θεμελιώδη μοντέλα. Σε αντίθεση με άλλα μοντέλα πλαστικότητας που θεωρούν την πυκνότητα των διαταραχών ως προς ένα ομογενοποιημένο πεδίο, στη μέθοδο DD οι διαταραχές αντιμετωπίζονται ρητά, έτσι ώστε οι μεμονωμένες αλληλεπιδράσεις μεταξύ των διαταραχών να μπορούν να αποτυπωθούν σωστά. [16]

Η εξέλιξη των διαταραχών στις προσομοιώσεις DD επιλύεται με την πάροδο του χρόνου μέσω της ολοκλήρωσης της εξίσωσης της κίνησης των διαταραχών σε κάθε χρονικό βήμα, η οποία στην απλούστερη μορφή της μπορεί να εκφραστεί ως $f^i = B \cdot v$, για κάθε σημείο της διαταραχής. Εδώ, B είναι η αντίστροφος του συντελεστή αντίστασης της διαταραχής (που υπολογίζεται από προσομοιώσεις MD ή πειραματικά), v είναι το διάνυσμα της ταχύτητας της διαταραχής σε οποιοδήποτε σημείο της και f^i είναι η συνολική δύναμη που ασκείται στο ίδιο σημείο. [17]

2.4 ΑΛΟΥΜΙΝΙΟ

2.4.1 Γενικά για το αλουμίνιο

Το αλουμίνιο είναι το πιο καταναλισκόμενο μη σιδηρούχο μέταλλο στον κόσμο, με την τρέχουσα ετήσια κατανάλωση να ανέρχεται σε περίπου 64 εκατομμύρια τόνους για το 2022 [18]. Η διαδικασία της πρωτογενούς παραγωγής αλουμινίου μπορεί να χωριστεί σε τρία ανεξάρτητα στάδια, τα οποία, κατά κανόνα, πραγματοποιούνται σε διαφορετικές εγκαταστάσεις. Αυτά είναι τα εξής [19]:

- Η εξόρυξη των απαραίτητων πρώτων υλών (βωξίτης και διάφορα άλλα μεταλλεύματα).
- Η επεξεργασία του μεταλλεύματος και η παρασκευή του οξειδίου του αλουμινίου (αλούμινα).
- Η παραγωγή πρωτογενούς αλουμινίου από αλούμινα.

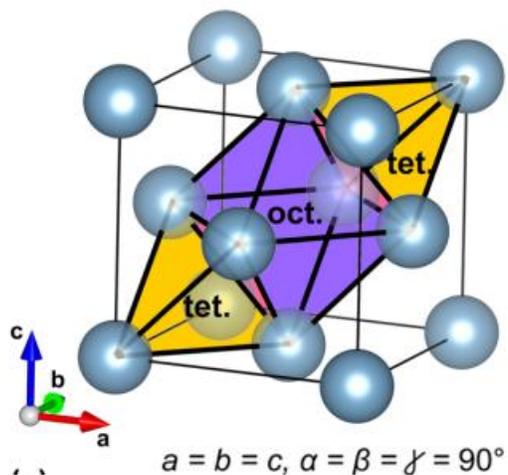
Στον σύγχρονο κόσμο, το αλουμίνιο είναι ένα μέταλλο που χρησιμοποιείται ευρέως. Αποτελεί μια προσιτή και ελκυστική επιλογή για πολλές εφαρμογές λόγω της επιφανειακής εμφάνισης, του μικρού ειδικού βάρους, της δυνατότητας κατεργασίας, των εξαιρετικών φυσικών και μηχανικών ιδιοτήτων και της αντοχής του στη διάβρωση. Η πυκνότητά του (2,7 g/cm) είναι περίπου το ένα τρίτο της πυκνότητας του χαλκού ή του ορείχαλκου (8,53 g/cm) και του χάλυβα (7,83 g/cm). Το αλουμίνιο έχει εξαιρετες μηχανικές ιδιότητες, οι οποίες αλλάζουν δραστικά με τη προσθήκη κραματικών στοιχείων [20].

Μια σημαντική ιδιότητα του αλουμινίου, είναι η αντίσταση του στην σταδιακή ανάπτυξη οξειδωσης στην επιφάνεια του, φαινόμενο το οποίο προκαλεί προβλήματα σε περισσότερα σιδηρούχα κράματα. Το αλουμίνιο, αναπτύσσει μια λεπτή στρώση αλούμινας (Al_2O_3) κατά την έκθεση του σε περιβάλλον οξυγόνου, το οποίο εμποδίζει την εξάπλωση της οξειδωσης. Το φαινόμενο αυτό, εκμεταλλεύτηκε με την ανάπτυξη της τεχνολογίας της ανοδίωσης, δηλαδή της ελεγχόμενης ανάπτυξης στρώματος αλούμινας, επιθυμητού χρώματος. Για το λόγο αυτό, το αλουμίνιο έχει βρει εκτεταμένες αρχιτεκτονικές εφαρμογές [20].

Παρακάτω παρουσιάζεται ένας πίνακας με ορισμένες φυσικές και χημικές ιδιότητες του αλουμινίου καθώς και μια σχηματική αναπαράσταση της κρυσταλλικής δομής του καθαρού αλουμινίου.

Αλουμίνιο	Μετρήσεις	Μονάδες
Ατομικός Αριθμός	13	-
Ατομικό Βάρος	26.98	g/mol
Σημείο Τήξης	660.2	°C
Σημείο Βρασμού	2480	°C
Πυκνότητα	2.6898	g/cm ³
Κρυσταλλική Δομή	FCC	-
Σκληρότητα (Vickers)	16 – 350	MPa
Αντοχή σε Εφελκυσμό	90	MPa
Μέτρο Ελαστικότητας	68.3	GPa
Ηλεκτρική Αντίσταση στους 20 °C	2.69	Ω·cm

Πίνακας 1: Ιδιότητες Αλουμινίου



Εικόνα 6: Δομή ενός κρυστάλλου Αλουμινίου

2.4.2 Κράματα Αλουμινίου – Κατηγοριοποίηση

Το αλουμίνιο, όπως όλα τα καθαρά μέταλλα, έχει χαμηλή αντοχή και δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί εύκολα σε εφαρμογές όπου η αντοχή σε παραμόρφωση και θραύση είναι απαραίτητη. Ως εκ τούτου, στο αλουμίνιο προστίθενται και άλλα στοιχεία, κυρίως για τη βελτίωση της αντοχής. Οι τυπικές αντοχές εφελκυσμού κυμαίνονται από 45 MPa (6,5 ksi) έως σχεδόν 700 MPa (100 ksi) για τα προϊόντα διέλασης 7055-T77. Η χαμηλή πυκνότητα σε συνδυασμό με την αντοχή έχουν καταστήσει τα κράματα αλουμινίου ελκυστικά σε εφαρμογές όπου η ειδική αντοχή (αναλογία αντοχής προς πυκνότητα) αποτελεί σημαντικό κριτήριο σχεδιασμού. Για δομική χρήση, επιλέγεται συνήθως το ισχυρότερο κράμα που πληροί τις ελάχιστες απαιτήσεις για άλλες ιδιότητες, όπως αντοχή στη διάβρωση, ολκιμότητα, ανθεκτικότητα κ.λπ. Ως εκ τούτου, η σύνθεση επιλέγεται με αρχικό κριτήριο την αντοχή [21].

Οι ιδιότητες των κραμάτων αλουμινίου εξαρτώνται από μια πολύπλοκη αλληλεπίδραση της χημικής σύνθεσης και των μικροδομικών χαρακτηριστικών που αναπτύσσονται κατά τη στερεοποίηση, τις θερμικές κατεργασίες και (για τα σφυρηλατημένα προϊόντα) την επεξεργασία παραμόρφωσης [21].

Σύγχρονα κράματα αλουμινίου λόγω της υψηλής τους αναλογίας αντοχής προς βάρος, χαμηλό κόστος και υψηλή αντίσταση στη φθορά, έχουν χρησιμοποιηθεί ευρέως σε πολλά δομικά στοιχεία, τόσο στην αεροδιαστημική όσο και στην αυτοκινητοβιομηχανία [8]. Για την ονομασία των κραμάτων αλουμινίου, χρησιμοποιείται στη βιομηχανία η μέθοδος των τεσσάρων ψηφίων της μορφής xxxx. Η σειρά κραμάτων 1xxx, αναφέρεται σε κράματα με κατ' ελάχιστο ποσοστό αλουμινίου 99%. Το δεύτερο ψηφίο υποδηλώνει τροποποιήσεις στα επίπεδα των ακαθαρσιών ενώ τα δύο τελευταία ψηφία, υποδηλώνουν το ποσοστό περιεκτικότητας σε αλουμίνιο, πέραν του 99%. Τα κράματα των σειρών 2000 έως 9000, υποδηλώνουν με το πρώτο τους ψηφίο τη κύρια κραματική προσθήκη (πέρα από το αλουμίνιο). Έτσι προκύπτει:

- Σειρά 2000: Χαλκός
- Σειρά 3000: Μαγγάνιο
- Σειρά 4000: Πυρίτιο
- Σειρά 5000: Μαγνήσιο

- Σειρά 6000: Μαγνήσιο και Πυρίτιο
- Σειρά 7000: Ψευδάργυρος
- Σειρά 8000: Άλλα στοιχεία
- Σειρά 9000: Δεν έχει ακόμη συμπληρωθεί

Τα κράματα αλουμινίου, χωρίζονται στα χυτά κράματα και τα κράματα διαμόρφωσης, ανάλογα με τον τρόπο παραγωγής τους.

Χυτά κράματα Αλουμινίου

Αλουμινίου - Χαλκού: Λόγω της υψηλής ηλεκτρικής αγωγιμότητας τόσο του αλουμινίου όσο και του χαλκού, τα κράματα αυτά βρήκαν εφαρμογή σε ηλεκτρικούς κινητήρες. Ακόμη, κράματα υψηλής περιεκτικότητας σε χαλκό, βρήκαν εφαρμογή σε μηχανές εσωτερικής καύσης, καθώς και στην αεροναυπηγική.

Αλουμινίου - Μαγνησίου: Τα κράματα αυτά χαρακτηρίζονται από εξαιρετική αντιδιαβρωτική συμπεριφορά, πολύ καλή κατεργασιμότητα και αισθητικά καλή εμφάνιση.

Αλουμινίου – Πυριτίου: Αυτά χωρίζονται σε ευτηκτικά-υποευτηκτικά και υπερευτηκτικά. Τα υποευτηκτικά κράματα αλουμινίου πυριτίου, αποτελούν ίσως τα σημαντικότερα εμπορικά κράματα, λόγω της εξαιρετικής ευχυτότητάς τους, της πολύ καλής ολκιμότητας, υψηλής αντοχής σε διάβρωση καθώς και συγκολλησιμότητας. Κραματικές προσθήκες όπως Cu και Mg, έχει παρατηρηθεί πως αυξάνουν την αντοχή του κράματος. Τα υπερευτηκτικά κράματα Al-Si, δεν έχουν βρει μεγάλη εφαρμογή, καθώς η μεγάλη προσθήκη πυριτίου οδηγεί σε παρουσία εξαιρετικά σκληρών διασπορών πρωτογενούς πυριτίου. Κλασικές εφαρμογές τους είναι έμβολα μηχανών εσωτερικής καύσης και άλλες εφαρμογές υψηλών θερμοκρασιών.

Κράματα Διαμόρφωσης

Τα κράματα διαμόρφωσης μπορούν να χωριστούν σε δύο κατηγορίες. Στα επιδεκτικά και τα μη επιδεκτικά σε θερμικές κατεργασίες. Στη πρώτη κατηγορία, εντάσσονται τα κράματα του καθαρού αλουμινίου, καθώς και άλλα κράματα στα οποία η σκλήρωση γίνεται μέσω στερεού διαλύματος ή ενδοτράχυνσης. Τα κράματα της 2^{ης} κατηγορίας, περιέχουν τουλάχιστον ένα από τα κραματικά στοιχεία: Χαλκό, Μαγνήσιο, Πυρίτιο ή Ψευδάργυρο, τα οποία έχουν υψηλή διαλυτότητα στο αλουμίνιο σε υψηλές θερμοκρασίες.

Τα κράματα διαμόρφωσης βρίσκουν εφαρμογή σε αλουμινοφύλλα (τα οποία είναι συνήθως κράματα μη επιδεκτικά σε θερμική κατεργασία), τα προϊόντα Alclad, προϊόντα της αυτοκινητοβιομηχανίας και αεροσκαφών. Τα κράματα αλουμινίου χρησιμοποιούνται στην αυτοκινητοβιομηχανία είτε για διακόσμηση, είτε σε προφυλακτήρες ή σε διάφορα μέρη του αμαξώματος. Από την άλλη, στην αεροναυπηγική βρήκαν εφαρμογή λόγω της ανάγκης για χαμηλού βάρους ατράκτους. Συγκεκριμένα τα κράματα αλουμινίου-μαγνησίου-λιθίου αποτελούν κράματα υψηλής αντοχής, με χαμηλή πυκνότητα και υψηλό όριο ελαστικότητας.

2.4.3 Κράμα 6063

Το υπό ανάλυση κράμα της συγκεκριμένης Διπλωματικής Εργασίας, είναι το κράμα AA6063. Πρόκειται για ένα κράμα της σειράς 6xxx, δηλαδή κράματα Al-Si-Mg. Η χημική σύσταση του κράματος φαίνεται αναλυτικά στον παρακάτω πίνακα [12].

Χημικό Στοιχείο	Περιεκτικότητα (% κ.β.)
Μαγγάνιο (Mn)	0.00 – 0.10
Σίδηρος (Fe)	0.00 – 0.35
Μαγνήσιο (Mg)	0.45 – 0.90
Πυρίτιο (Si)	0.20 – 0.60
Ψευδάργυρος (Zn)	0.00 – 0.10
Τιτάνιο (Ti)	0.00 – 0.10
Χρόμιο (Cr)	0.00 – 0.10
Χαλκός (Cu)	0.00 – 0.10
Αλουμίνιο (Al)	97.5 – 99.35

Πίνακας 2: Χημική σύσταση Κράματος 6063

Τα κράματα αλουμινίου (σειρά 6000) χρησιμοποιούνται ευρέως για απαιτητικές δομικές εφαρμογές λόγω του μικρού τους βάρους με καλές μηχανικές ιδιότητες [13]. Αποτελούν το μεγαλύτερο ποσοστό (90%) των προϊόντων διέλασης αλουμινίου που χρησιμοποιούνται στις δυτικές χώρες και η παγκόσμια κατανάλωσή τους ήταν περίπου 23% της συνολικής παραγωγής προϊόντων αλουμινίου, σύμφωνα με μια έρευνα του 1990 [14]. Μια τεχνητή επεξεργασία γήρανσης (T6) είναι μια παγκοσμίως αποδεκτή διαδικασία για να για την ενίσχυση αυτής της σειράς κραμάτων.

Τα τριμερή κράματα αλουμινίου Al-Mg-Si της σειράς 6000 είναι κράματα μέσης αντοχής που σκληραίνουν μέσω κατακρήμνισης. Περιεκτικότητες Mg και Si άνω του 1.4% οδήγησαν σε βελτιωμένη απόκριση σκλήρυνσης μέσω γήρανσης και υψηλότερη αντοχή στα κράματα αλουμινίου 6063 από διέλαση. Η αντοχή αυτών των κραμάτων ποικίλλει ανάλογα με την

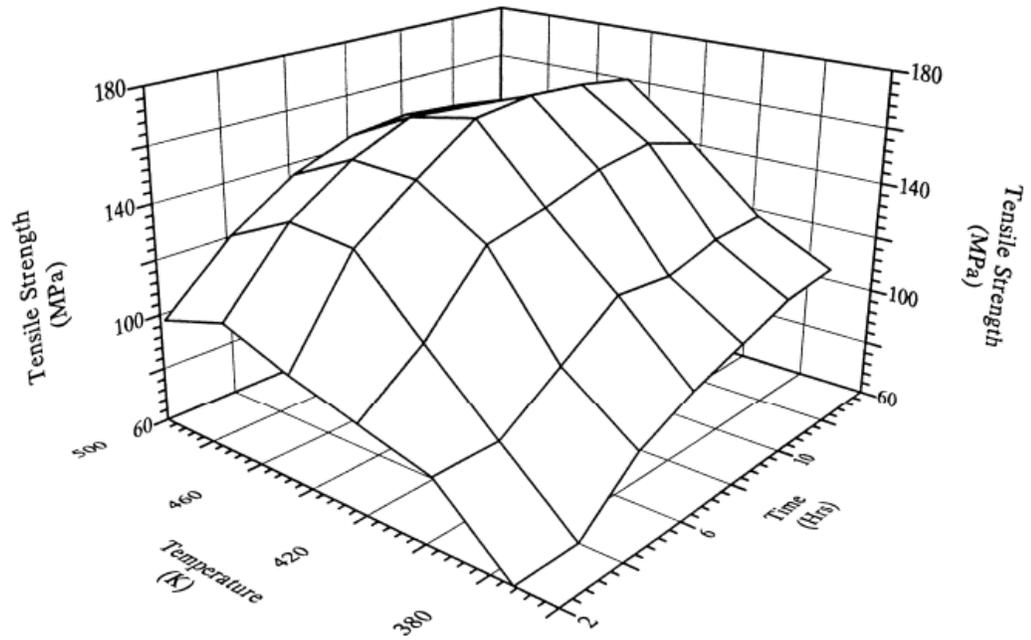
περιεκτικότητα σε Mg και Si σε κατάσταση μέγιστης σκλήρυνσης T6. Οι ελκυστικές μηχανικές ιδιότητες (χαμηλή πυκνότητα, υψηλή αντοχή και ολκιμότητα), εξαιρετική αντοχή στη διάβρωση, καλύτερη διαμορφωσιμότητα, συγκολλησιμότητα και κατεργασιμότητα καθιστούν αυτά τα κράματα μια ευνοϊκή επιλογή για την αυτοκινητοβιομηχανία, την αεροδιαστημική, και άλλες βιομηχανικές εφαρμογές- ωστόσο, πάσχουν από χαμηλή θερμική σταθερότητα καθώς και κακή αντοχή στη φθορά [15]. Τα κράματα 6063, βρίσκουν εφαρμογή στην αυτοκινητοβιομηχανία, ως δομικά υλικά με σκοπό την ελάττωση του βάρους [42].

2.4.3.1 Μηχανικές Ιδιότητες και Μικροδομή

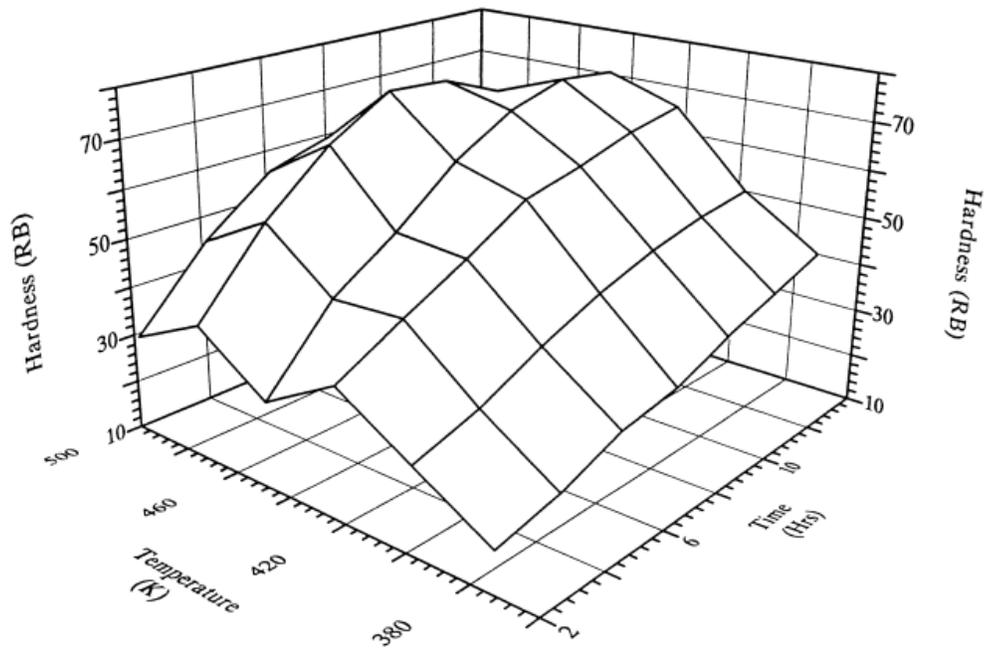
Η σειρά αλουμινίου 6xxx, και ιδιαιτέρως το αλουμίνιο 6063, είναι από τα κυριότερα κράματα τα οποία υπάγονται στη διαδικασία της διέλασης [46]. Τα κράματα της σειράς 6000 είναι κράματα αλουμινίου τα οποία αποκτούν τις μηχανικές τους ιδιότητες από τη θερμική κατεργασία και συνήθως όχι από μηχανική παραμόρφωση. Το στοιχείο "κλειδιά" αυτών των κραμάτων είναι το μαγνήσιο (Mg) και το πυρίτιο (Si) (όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως) τα οποία σχηματίζουν τη φάση Mg_2Si . Τα κατακρημνίσματα αυτά εμφανίζονται σε διάφορες μορφές οι οποίες κατηγοριοποιούνται ως εξής:

- β'' (beta double prime) Mg_2Si , ο μικρότερος τύπος κατακρημνισμάτων Mg_2Si που έχει σχήμα ράβδου και συμβάλλει περισσότερο στις μηχανικές ιδιότητες όταν είναι πυκνά διασκορπισμένο.
- β' (beta prime) Mg_2Si , μια μεγαλύτερη εκδοχή ραβδοειδούς κατακρημνίσματος που αναπτύσσεται από την κατηγορία β'' . Τα β' κατακρημνίσματα έχουν αμελητέα συμβολή στις μηχανικές ιδιότητες.
- β (beta) Mg_2Si , το μεγαλύτερο σε μέγεθος κατακρημνίσμα Mg_2Si , το οποίο που έχει σχήμα κύβου.

Οι Siddiqui et. al. [47] δημοσίευσαν μια έρευνα στην οποία μελέτησαν την επίδραση της θερμοκρασίας και του χρόνου έκθεσης στις μηχανικές ιδιότητες κράματος 6063 κατά τη θερμική κατεργασία. Στα παρακάτω τρισδιάστατα γραφήματα φαίνονται οπτικά οι επιδράσεις αυτές.



Εικόνα 7: Επίδραση θερμοκρασίας στην εφελκυστική αντοχή του 6063



Εικόνα 8: Επίδραση θερμοκρασίας στην σκληρότητα του 6063

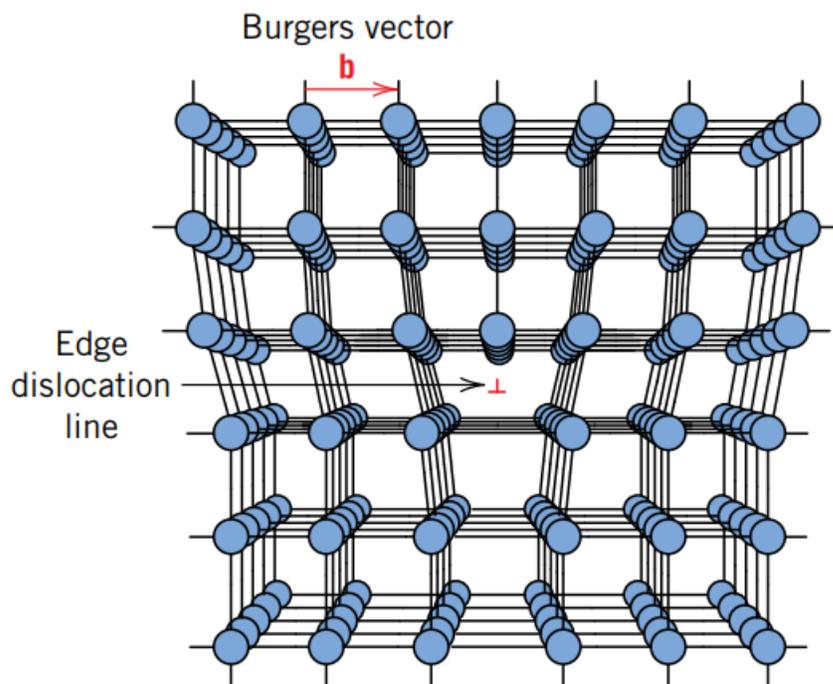
2.5 ΔΙΑΤΑΡΑΧΕΣ

Πρώιμες μελέτες υλικών οδήγησαν στον υπολογισμό των θεωρητικών αντοχών των τέλειων κρυστάλλων, οι οποίες ήταν πολλές φορές μεγαλύτερες από τις πραγματικά μετρούμενες. Κατά τη διάρκεια της δεκαετίας του 1930 διατυπώθηκε μια αρχική θεωρία ότι αυτή η ασυμφωνία στις μηχανικές αντοχές θα μπορούσε να εξηγηθεί από ένα τύπο γραμμικής κρυσταλλικής ατέλειας η οποία ονομάστηκε διαταραχή [22]. Η επιβεβαίωση της συγκεκριμένης θεωρίας ήρθε αρκετά χρόνια αργότερα, όταν κατά τη δεκαετία του 1950 παρατηρήθηκαν οι πρώτες διαταραχές μέσω ηλεκτρονικού μικροσκοπίου [22]. Έκτοτε, αναπτύχθηκε η θεωρία των διαταραχών που εξηγεί πολλά από τα φυσικά και μηχανικά φαινόμενα στα μέταλλα. Ως διαταραχή, ορίζεται μια γραμμική ή μονοδιάστατη ατέλεια γύρω από την οποία ορισμένα από τα άτομα του κρυσταλλογραφικού πλέγματος έχουν λανθασμένη ευθυγράμμιση [22].

Τα δύο βασικά είδη διαταραχών είναι οι διαταραχές ακμής (edge dislocations) και οι διαταραχές κοχλία (screw dislocations).

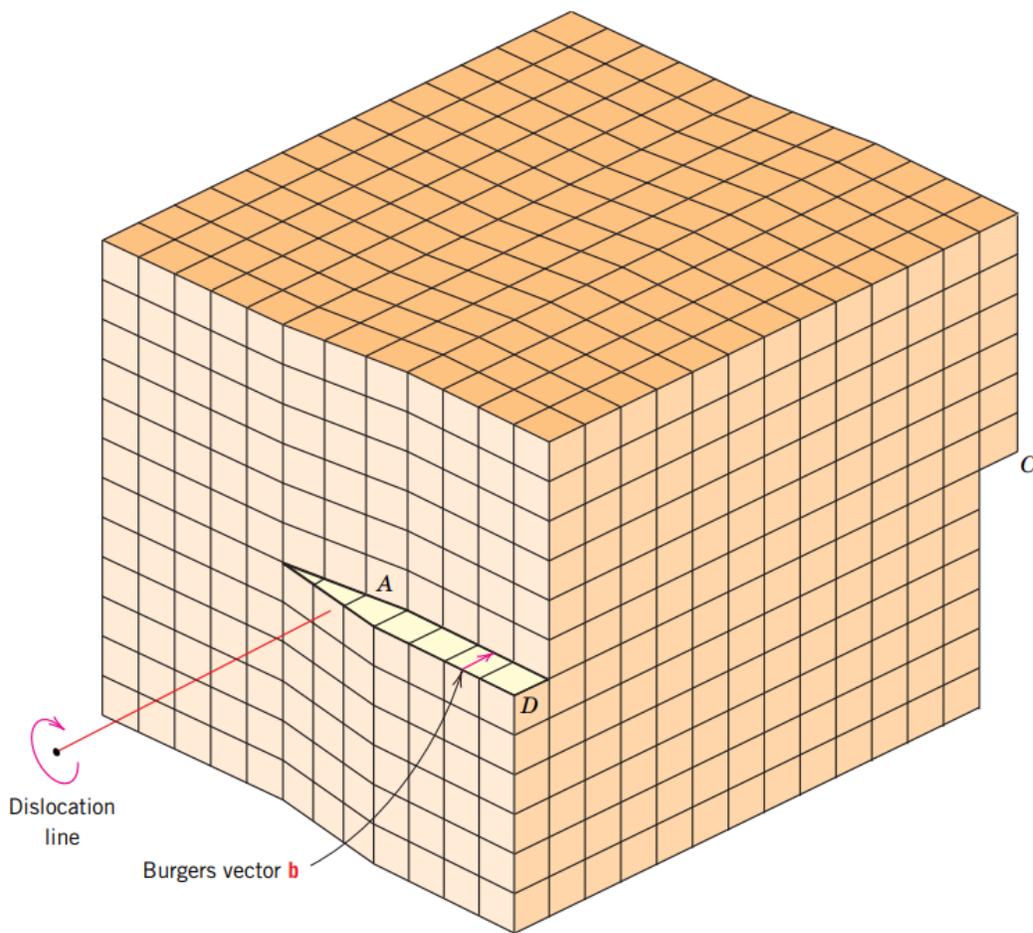
- **Διαταραχές ακμής:** Για να εξηγηθεί η διαταραχή ακμής, ας φανταστούμε ένα τρισδιάστατο τέλειο κρύσταλλο ενός υλικού. Η διαταραχή ακμής, εξηγείται ως η εισαγωγή «μισού» επιπέδου ατόμων, ανάμεσα στα ήδη υπάρχοντα άτομα και την ήδη υπάρχουσα δομή τους [22], [23]. Αυτό μπορεί να δημιουργηθεί είτε μέσω της επιβολής κάποιας μορφής τάσης η οποία θα αναγκάσει τα άτομα ενός επιπέδου να μετακινηθούν αριστερά ή δεξιά, δημιουργώντας με αυτόν τον τρόπο το νέο επίπεδο είτε μέσω της δημιουργίας μια τομής εν μέσω ενός επιπέδου και πλήρωση αυτού μέσω της εισαγωγής ενός νέου [23]. Στην περιοχή γύρω από τη γραμμή της διαταραχής υπάρχει κάποια τοπική παραμόρφωση του πλέγματος. Τα άτομα πάνω από τη γραμμή της διαταραχής συμπιέζονται μεταξύ τους και τα άτομα κάτω από αυτήν απομακρύνονται. Αυτό αντικατοπτρίζεται στην ελαφρά καμπυλότητα για τα κατακόρυφα επίπεδα των ατόμων καθώς κάμπτονται γύρω από αυτό το επιπλέον ημιεπίπεδο. Το μέγεθος αυτής της παραμόρφωσης μειώνεται με την απόσταση από τη γραμμή εξάρθρωση, δηλαδή σε θέσεις που απέχουν πολύ από αυτή, το κρυσταλλικό

πλέγμα είναι σχεδόν τέλειο [22]. Παρακάτω παρατίθεται μια γραφική απεικόνιση της διαταραχής ακμής. Με το σύμβολο \perp συμβολίζεται η θέση του νέου ημιεπιπέδου.



Εικόνα 9: Αναπαράσταση μιας διαταραχής ακμής

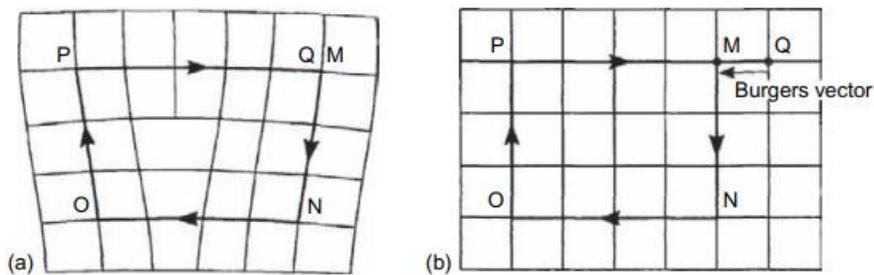
- Διαταραχές κοχλία:** Οι διαταραχές αυτές είναι αρκετά δυσκολότερο να οπτικοποιηθούν. Η διαταραχές κοχλία διαφέρουν από εκείνες της ακμής στο γεγονός πως η μετατόπιση b (ή Burgers Vector, η οποία θα αναλυθεί παρακάτω) είναι παράλληλη προς τη γραμμή της διαταραχής, σε αντίθεση με τις διαταραχές ακμής όπου είναι κάθετη [23]. Η άνω εμπρόσθια περιοχή του κρυστάλλου μετατοπίζεται κατά μία ατομική απόσταση προς τα δεξιά σε σχέση με το κάτω τμήμα. Η διαταραχή κοχλία πήρε το όνομά της από τη σπειροειδή ή ελικοειδή διαδρομή την οποία διαγράφει γύρω από τη γραμμή διαταραχής από τα ατομικά επίπεδα των ατόμων (η οποία προσομοιάζει αυτή ενός κοχλία)[22]. Στη παρακάτω εικόνα μπορεί κανείς να δει μια γραφική αναπαράσταση της διαταραχής κοχλία:



Εικόνα 10: Αναπαράσταση διαταραχής κοχλία

Στη πραγματικότητα, σπάνια σε ένα υλικό εμφανίζεται είτε η μια είτε η άλλη μορφή διαταραχής. Αντιθέτως έχουμε την εμφάνιση μικτών διαταραχών, δηλαδή διαταραχών που εμφανίζουν στοιχεία τόσο ακμής όσο και κοχλία [22].

Σε προηγούμενη παράγραφο έχει αναφορά σε μια μετατόπιση b ή Burgers Vector. Το διάνυσμα Burgers, που πήρε το όνομά του από τον Ολλανδό φυσικό Jan Burgers, είναι ένα διάνυσμα, συχνά συμβολιζόμενο ως b , που αντιπροσωπεύει το μέγεθος και την κατεύθυνση της παραμόρφωσης του πλέγματος που προκύπτει από μια διαταραχή σε ένα κρυσταλλικό πλέγμα [22]. Ο πιο χρήσιμος ορισμός των διαταραχών δίνεται με βάση το κύκλωμα Burgers. Ένα κύκλωμα Burgers σε έναν κρύσταλλο που περιέχει διαταραχές είναι μια "διαδρομή" από άτομο σε άτομο που σχηματίζει κλειστό βρόγχο. Μια τέτοια διαδρομή απεικονίζεται στο σχήμα x , δηλαδή η διαδρομή MNO PQ. Αν η ίδια ακολουθία ατόμου-προς-άτομο γίνει σε έναν κρύσταλλο χωρίς διαταραχές, Σχήμα 1.19(β), και το κύκλωμα δεν κλείσει, αυτό σημαίνει πως ο αρχικός κρύσταλλος περιέχει μια ή περισσότερες διαταραχές. Το διάνυσμα που απαιτείται για την ολοκλήρωση του κυκλώματος ονομάζεται διάνυσμα Burgers [24]. Ουσιαστικά, το διάνυσμα Burgers είναι το διάνυσμα το οποίο «περισσεύει» ή απαιτείται για να συμπληρωθεί ένας πλήρης κύκλος και στο συγκεκριμένο παράδειγμα είναι το MQ.



Εικόνα 11: Αναπαράσταση Burgers Vector

Οι διαταραχές έχουν δύο (κυρίως) μεγέθη τα οποία τις χαρακτηρίζουν: Τη ταχύτητα διάδοσής τους καθώς και τη πυκνότητα διαταραχών.

Η ταχύτητα δίνεται από τον παρακάτω τύπο:

$$u = v_D l g \cdot B_\alpha \cdot e^{-\frac{U_\alpha}{k \cdot T}} \cdot 2 \sinh \cdot \frac{F \cdot I_\alpha \cdot b}{k \cdot T} \quad (8)$$

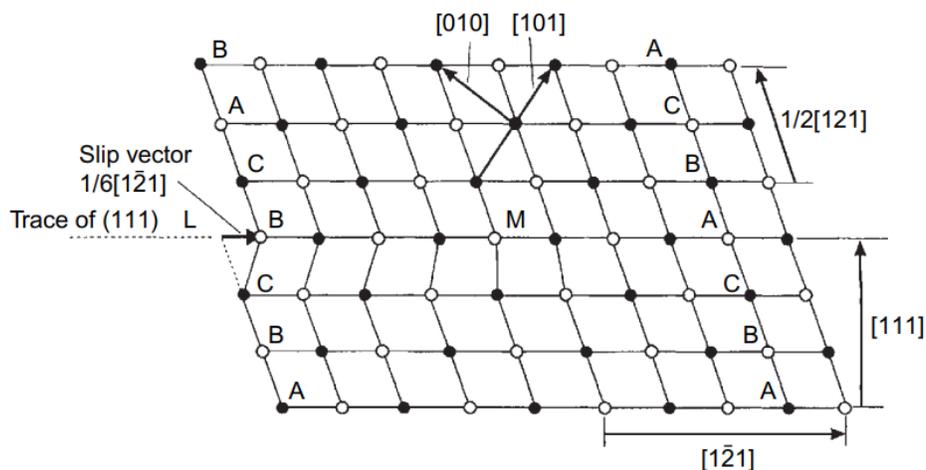
Όπου v_D είναι ο όρος συχνότητας, U_α η ενέργεια ενεργοποίησης, I_α το ενεργοποιημένο μήκος διαταραχής που εμπλέκεται στο θερμικό κύκλο και I_g η απόσταση που διένυσε η διαταραχή μεταξύ των θερμικών ενεργοποιήσεων, k η σταθερά Boltzmann και T η θερμοκρασία ανόπτησης [28].

Η πυκνότητα διαταραχών ρ ορίζεται ως το συνολικό μήκος της γραμμής των διαταραχών ανά μονάδα όγκου του κρυστάλλου, που συνήθως αναφέρεται σε μονάδες της τάξεως του cm^{-2} ή m^{-2} . Έτσι, για έναν όγκο V που περιέχει μήκος γραμμής l , τότε το $\rho=l/V$. Όλοι οι κρύσταλλοι, εκτός από ορισμένα νανοσύρματα, περιέχουν εξαρθρώσεις και στους καλά ανοπτημένους κρυστάλλους οι διαταραχές είναι διατεταγμένες με γενικά ασαφή τρόπο [24].

2.5.1 Διαταραχές στα FCC μέταλλα

Πολλά κοινά μέταλλα, όπως ο χαλκός, το ασήμι, ο χρυσός, το αλουμίνιο, το νικέλιο και τα κράματά τους, έχουν κυβική κρυσταλλική δομή FCC [24]. Τα συντομότερα διανύσματα πλέγματος, και επομένως τα πιο πιθανά διανύσματα Burgers για τις διαταραχές στην κυβική δομή FCC, είναι του τύπου $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ ή $\langle 001 \rangle$. Δεδομένου ότι η ενέργεια μιας διαταραχής είναι ανάλογη του τετραγώνου του μεγέθους του διανύσματος Burgers (b^2), η ενέργεια των $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ διαταραχών σε ένα ισότροπο στερεό θα είναι η μισή από εκείνη της $\langle 001 \rangle$, δηλαδή $2a^2/4$ σε αντίθεση με την a^2 . Έτσι, οι διαταραχές $\langle 001 \rangle$ ευνοούνται ενεργειακά πολύ λιγότερο και, σε στην πραγματικότητα, παρατηρούνται πολύ σπάνια. Δεδομένου ότι το $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ είναι ένα διάνυσμα μετάθεσης για το πλέγμα, η ολίσθηση μιας διαταραχής με αυτό το διάνυσμα Burgers αφήνει πίσω της ένα τέλειο κρύσταλλο και η διαταραχή αυτή ονομάζεται *τέλεια*.

Από την περιγραφή της κίνησης των διαταραχών, μπορεί να συναχθεί ότι η κίνηση μιας διαταραχής της οποίας το διάνυσμα Burgers δεν είναι διάνυσμα πλέγματος, αφήνει πίσω της έναν ατελή κρύσταλλο που περιέχει ένα σφάλμα στοίβαξης. Έτσι, όταν ένα σφάλμα στοίβαξης καταλήγει μέσα σε έναν κρύσταλλο, το όριο στο επίπεδο του σφάλματος, το οποίο χωρίζει τη διαταραγμένη περιοχή από την τέλεια, αποκαλείται μερική διαταραχή. Δύο από τις σημαντικότερες μερικές διαταραχές, που αναγνωρίζονται στα μέταλλα FCC, είναι η Shockley, και η Frank [24]. Στη παρακάτω εικόνα έχουμε μια σχηματική αναπαράσταση μιας διαταραχής τύπου Shockley.



Εικόνα 12: Διαταραχή Shockley

Το διάνυσμα Burgers μιας μερικής διαταραχής περιγράφεται με τον ίδιο τρόπο όπως αυτό μιας τέλειας, εκτός από το ότι το κύκλωμα Burgers πρέπει να ξεκινά και να καταλήγει στην επιφάνεια του σφάλματος στοιβαξης- εάν το κύκλωμα ξεκινούσε από οποιοδήποτε άλλο σημείο, θα ήταν απαραίτητο να διασχίσει το επίπεδο του σφάλματος και η ένα προς ένα αντιστοιχία των κυκλωμάτων στα τέλεια και ατελή πλέγματα δεν θα διατηρούνταν [24].

2.5.2 Προέλευση και δημιουργία διαταραχών

Σε αντίθεση με τις εγγενείς σημειακές ατέλειες, η θερμοδυναμικά σταθερή πυκνότητα των διαταραχών σε έναν κρύσταλλο χωρίς τάσεις είναι μηδέν. Παρ' όλα αυτά, εκτός από τα νανοσύρματα, καθώς και μεμονωμένα παραδείγματα σε μεγαλύτερους, προσεκτικά προετοιμασμένους κρυστάλλους υλικών όπως το πυρίτιο, οι διαταραχές εμφανίζονται σε όλους τους κρυστάλλους. Η πυκνότητα των διαταραχών σε καλά ανοπτημένους κρυστάλλους (δηλ. κρυστάλλους που έχουν θερμανθεί για μεγάλο χρονικό διάστημα κοντά στο σημείο τήξης τους για να μειωθεί η πυκνότητα των διαταραχών σε μια χαμηλή τιμή) είναι συνήθως περίπου $10^4/\text{mm}^2$ ή $10^{10}/\text{m}^2$ [24]. Όταν οι ανοπτημένοι κρύσταλλοι παραμορφώνονται, παρατηρείται ταχύς πολλαπλασιασμός των διαταραχών και προοδευτική αύξηση της πυκνότητάς τους με την αύξηση της παραμόρφωσης. Μετά από μεγάλα ποσοστά πλαστικής παραμόρφωσης η πυκνότητα των διαταραχών είναι τυπικά στην περιοχή 10^{14} έως $10^{15} \cdot \text{m}^{-2}$. Στα πρώτα στάδια της παραμόρφωσης

η κίνηση των διαταραχών τείνει να περιορίζεται σε μια μόνο ομάδα παράλληλων επιπέδων ολίσθησης. Αργότερα, η ολίσθηση εμφανίζεται και σε άλλα συστήματα και οι διαταραχές που κινούνται σε διαφορετικά συστήματα αλληλεπιδρούν. Ο ταχύς πολλαπλασιασμός οδηγεί σε εργοσκλήρυνση [24].

Θα χωρίσουμε τη δημιουργία των διαταραχών σε δύο κατηγορίες: στις διαταραχές που δημιουργούνται κατά την ανάπτυξη των κόκκων (δηλαδή κατά τη διεργασία της χύτευσης) και διαταραχές οι οποίες δημιουργούνται σε σημεία συσσώρευσης τάσεων.

2.5.2.1 Διαταραχές που παράγονται κατά τη στερεοποίηση

Είναι πολύ δύσκολο να αναπτυχθούν κρύσταλλοι με χαμηλή πυκνότητα διαταραχών, επειδή οι διαταραχές εισάγονται εύκολα κατά την ανάπτυξη των κόκκων. Υπάρχουν δύο κύριες πηγές διαταραχών σε φρεσκοαναπτυγμένους κρυστάλλους. Πρώτον, οι διαταραχές μπορεί να προϋπάρχουν στους μητρικούς κόκκους ή σε άλλες επιφάνειες που χρησιμοποιούνται ως εναρκτήριες θέσεις της ανάπτυξης του κρυστάλλου. Τυχόν διαταραχές σε έναν μητρικό κόκκο που τέμνουν την επιφάνεια του κόκκου πάνω στην οποία πραγματοποιείται η νέα ανάπτυξη, θα επεκταθούν στον αναπτυσσόμενο κόκκο. Δεύτερον, η "τυχαία" γένεση διαταραχών μπορεί να συμβεί κατά τη διαδικασία ανάπτυξης. Οι κύριοι μηχανισμοί που έχουν προταθεί είναι οι εξής: (α) ετερογενής πυρηνοποίηση διαταραχών λόγω εσωτερικών τάσεων που δημιουργούνται από σωματίδια προσμίξεων, θερμική συστολή κ.λπ. (β) πρόσκρουση διαφορετικών τμημάτων της αναπτυσσόμενης διεπιφάνειας κ.α. [24].

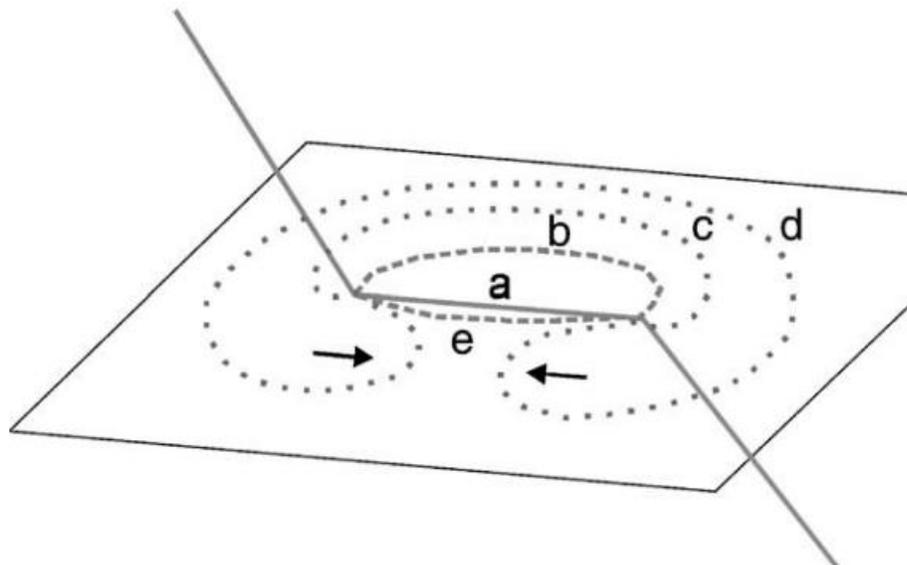
Στη πρώτη περίπτωση, παράγονται υψηλές τοπικές εσωτερικές τάσεις, όταν γειτονικά τμήματα του κρυστάλλου αναγκάζονται να αλλάξουν τους ειδικούς όγκους τους. Αυτό μπορεί να συμβεί από γειτονικές περιοχές που διαστέλλονται ή συστέλλονται κατά

διαφορετικά ποσά (λόγω διαφορών π.χ. στη σύσταση). Όταν η τάση φτάσει σε μια κρίσιμη τιμή, περίπου $G/30$ (οπού με G συμβολίζουμε το shear modulus), δημιουργούνται θέσεις γένεσης διαταραχών. Εάν αυτό συμβεί σε υψηλή θερμοκρασία, οι διαταραχές που δημιουργούνται θα αναδιαταχθούν με τη διαδικασία της "αναρρίχησης" (climb). Ο σχηματισμός διαταραχών με πρόσκρουση συμβαίνει κατά τη διάρκεια της συνένωσης δύο γειτονικών δενδριτών στην αναπτυσσόμενη διεπιφάνεια. Έτσι, οι δενδρίτες μπορεί να είναι εσφαλμένα ευθυγραμμισμένοι ή

να έχουν βήματα ανάπτυξης στις επιφάνειές τους, τέτοια ώστε η τέλεια ταύτιση να είναι αδύνατη και να έχουμε το σχηματισμό διαταραχών στις διεπιφάνειες. Οι διαταραχές μπορούν επίσης να σχηματιστούν στη διεπιφάνεια μεταξύ κρυστάλλων με τον ίδιο προσανατολισμό αλλά διαφορετική παράμετρο πλέγματος [24].

2.5.2.2 Διαταραχές που παράγονται κατά τη πλαστική παραμόρφωση

Για να ληφθεί υπόψη η μεγάλη πλαστική παραμόρφωση που μπορεί να υπάρξει στους κρυστάλλους, είναι απαραίτητο να υπάρχει αναγεννητικός πολλαπλασιασμός των διαταραχών. Οι σημαντικότεροι μηχανισμοί είναι δύο. Ο ένας είναι οι πηγές τύπου Frank-Read και ο άλλος είναι η πολλαπλή εγκάρσια ολίσθηση [24]. Δεδομένου ότι η ομοιογενής πυρηνοποίηση των διαταραχών απαιτεί τάσεις περίπου του ενός δεκάτου του μέτρου διάτμησης, η δημιουργία διαταραχών κατά την πλαστική παραμόρφωση λαμβάνει χώρα σε χαμηλές τάσεις με τη μορφή της επιμήκυνσης του μήκους των υφιστάμενων διαταραχών. Ο πιο γνωστός μηχανισμός της είναι ο Frank-Read [25]. Στη παρακάτω εικόνα έχουμε μια σχηματική αναπαράσταση της δημιουργίας μιας διαταραχής μέσω της πηγής Frank-Read [25].

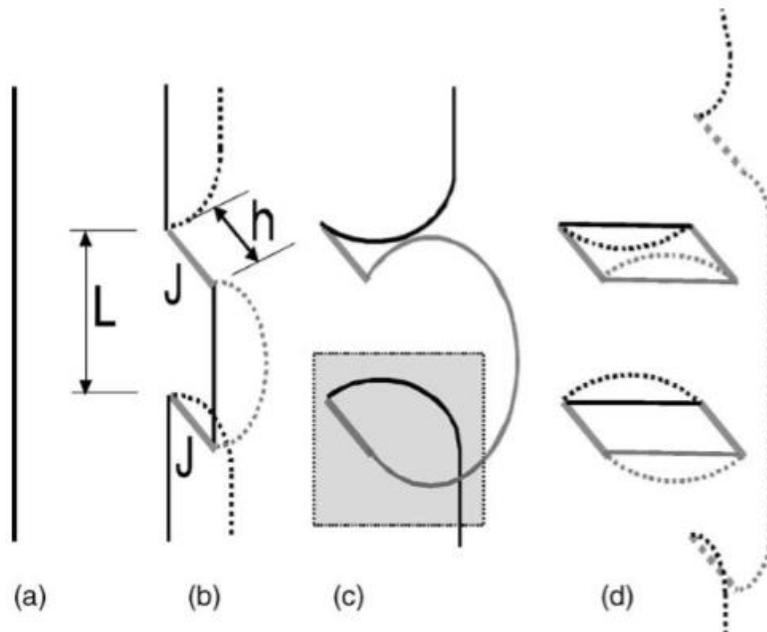


Εικόνα 13: Διαταραχή Frank-Read [25]

Ο δεύτερος μηχανισμός είναι ο μηχανισμός διπλής εγκάρσιας ολίσθησης, που προτάθηκε από τους Koehler και Orowan [26] και παρατηρήθηκε πειραματικά για πρώτη φορά έμμεσα από τους Johnston και Gilman [27]. Μια διαταραχή κοχλία κινείται στο επίπεδο ολίσθησης. Η εγκάρσια ολίσθηση ενός τμήματος μήκους L έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία δύο υπερεκβολών J που δρουν ως παράγοντες στερέωσης. Το τμήμα στη συνέχεια πολλαπλασιάζεται με παρόμοιο τρόπο με την πηγή Frank-Read. Οι δύο πηγές μπορούν να δράσουν μόνο αν το μήκος του τμήματος L είναι μεγαλύτερο από μια κρίσιμη τιμή, η οποία δίνεται από τη παρακάτω σχέση:

$$L_c = \frac{\mu b}{\tau} \quad (9)$$

όπου μ είναι το μέτρο διάτμησης, b η απόλυτη τιμή του διανύσματος Burgers και τ είναι η τοπική συνιστώσα της δρούσας τάσης. Χρησιμοποιώντας χαρακτηριστικές τιμές, το L_c κυμαίνεται μεταξύ περίπου 100-200 nm [25]. Μια σχηματική αναπαράσταση του μηχανισμού εγκάρσιας ολίσθησης μπορεί να φανεί παρακάτω [25]:



Εικόνα 14: Μηχανισμός εγκάρσιας ολίσθησης

3 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΟ ΜΕΡΟΣ

3.1 ΛΟΓΙΣΜΙΚΑ ΠΑΚΕΤΑ

3.1.1 LAMMPS

Το κύριο λογισμικό πακέτο το οποίο χρησιμοποιήθηκε κατά την εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής, είναι το LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Όπως υποδηλώνει και το όνομά του, το LAMMPS είναι «πακέτο» κώδικα, το οποίο χρησιμοποιείται για προσομοιώσεις σε ατομικό και μοριακό επίπεδο.

Η ανάπτυξη του LAMMPS ξεκίνησε στα μέσα της δεκαετίας του 1990 μεταξύ δύο εργαστηρίων του Υπουργείου Ενέργειας των ΗΠΑ (Sandia National Laboratories και Lawrence Livermore National Laboratory) και τριών εταιρειών (Cray, DuPont και Bristol-Myers Squibb) [29]. Το LAMMPS είναι ένας κώδικας κλασικής μοριακής δυναμικής (MD) που μοντελοποιεί σύνολα σωματιδίων σε υγρή, στερεή ή αέρια κατάσταση. Μπορεί να μοντελοποιήσει ατομικά, πολυμερή, βιολογικά, στερεάς κατάστασης (μέταλλα, κεραμικά, οξείδια), κοκκώδη, χονδρόκοκκα ή μακροσκοπικά συστήματα χρησιμοποιώντας μια ποικιλία διατομικών δυναμικών (πεδία δυνάμεων) και οριακών συνθηκών. Μπορεί να μοντελοποιήσει δισδιάστατα ή τρισδιάστατα συστήματα λίγων (μερικών εκατοντάδων) έως δισεκατομμυρίων σωματιδίων [30]. Με τη γενικότερη έννοια, το LAMMPS ενσωματώνει τις εξισώσεις κίνησης του Νεύτωνα για ένα σύνολο αλληλεπιδρώντων σωματιδίων. Ένα μεμονωμένο σωματίδιο μπορεί να είναι ένα άτομο, ένα μόριο ή ένα ηλεκτρόνιο, ή μια μεσοσκοπική ή μακροσκοπική μάζα υλικού. Τα μοντέλα αλληλεπίδρασης που περιλαμβάνει το LAMMPS είναι ως επί το πλείστον μικρής εμβέλειας όμως περιλαμβάνονται επίσης και ορισμένα μοντέλα μεγάλης εμβέλειας. Το LAMMPS χρησιμοποιεί γειτονικές λίστες (neighbor lists) για να παρακολουθεί τα κοντινά σωματίδια. Οι λίστες είναι βελτιστοποιημένες για συστήματα με σωματίδια που απωθούνται σε μικρές αποστάσεις, έτσι ώστε η τοπική πυκνότητα των σωματιδίων να μην γίνεται ποτέ πολύ μεγάλη [30].

3.1.2 OVITO

Το Open Visualization Tool (OVITO) είναι ένα λογισμικό τρισδιάστατης απεικόνισης σχεδιασμένο για τη μετα-επεξεργασία ατομικών δεδομένων που λαμβάνονται από πειράματα μοριακής δυναμικής ή προσομοιώσεις Monte Carlo [36]. Το λογισμικό είναι γραμμένο σε αντικειμενοστραφή C++, ελεγχόμενη μέσω Python scripts [36]. Ιδιαίτερη έμφαση έγινε στη λειτουργία DXA (Dislocation eXtraction Analysis) του OVITO. Η λειτουργία αυτή εντοπίζει όλες τις διαταραχές σε έναν κρύσταλλο, προσδιορίζει τα διανύσματα Burgers τους και εξάγει μια γραμμική αναπαράσταση των διαταραχών. Ο τροποποιητής υλοποιεί τον λεγόμενο Αλγόριθμο Εξαγωγής Διαταραχών (Dislocation Extraction Algorithm/DXA), μια υπολογιστική μέθοδο που αναπτύχθηκε από τον συγγραφέα του OVITO [37]. Η DXA ανάλυση εμφανίζει το συνολικό μήκος των διαταραχών, καθώς και το συνολικό μήκος για το κάθε είδος διαταραχής, δηλαδή διαταραχές Shockley, Stair-rod, Hirth, Frank και τέλειες διαταραχές.

DXA (Dislocation eXtraction Analysis)

Οι κρυσταλλικές διεπιφάνειες παίζουν σημαντικό ρόλο στον καθορισμό των ιδιοτήτων των κρυσταλλικών υλικών. Παραδείγματος χάριν, τα όρια κόκκων (Grain Boundaries ή GBs) μπορούν να λειτουργήσουν ως πηγές ή εμπόδια γέννησης ή μεταφοράς διαταραχών. Η απορρόφηση και μετάδοση των διαταραχών στα GBs είναι σημαντικά φαινόμενα που μπορούν να μελετηθούν μέσω μοριακής δυναμικής (MD) και άλλων ατομιστικών μεθόδων προσομοίωσης. Οι συμβατικές μέθοδοι αναγνώρισης δομής για ατομιστικά σύνολα δεδομένων επιτρέπουν το φιλτράρισμα των μη διαταραγμένων κρυσταλλικών δομών για την αποκάλυψη ατελειών για σκοπούς οπτικοποίησης [56]. Ωστόσο, οι υπάρχουσες μέθοδοι δεν παρέχουν κάποιον τρόπο για τη διάκριση των διαταραχών από τις ατέλειες οι οποίες δεν οφείλονται σε διαταραχές, ή για τον προσδιορισμό των διανυσμάτων Burgers.

3.1.3 ATOMSK

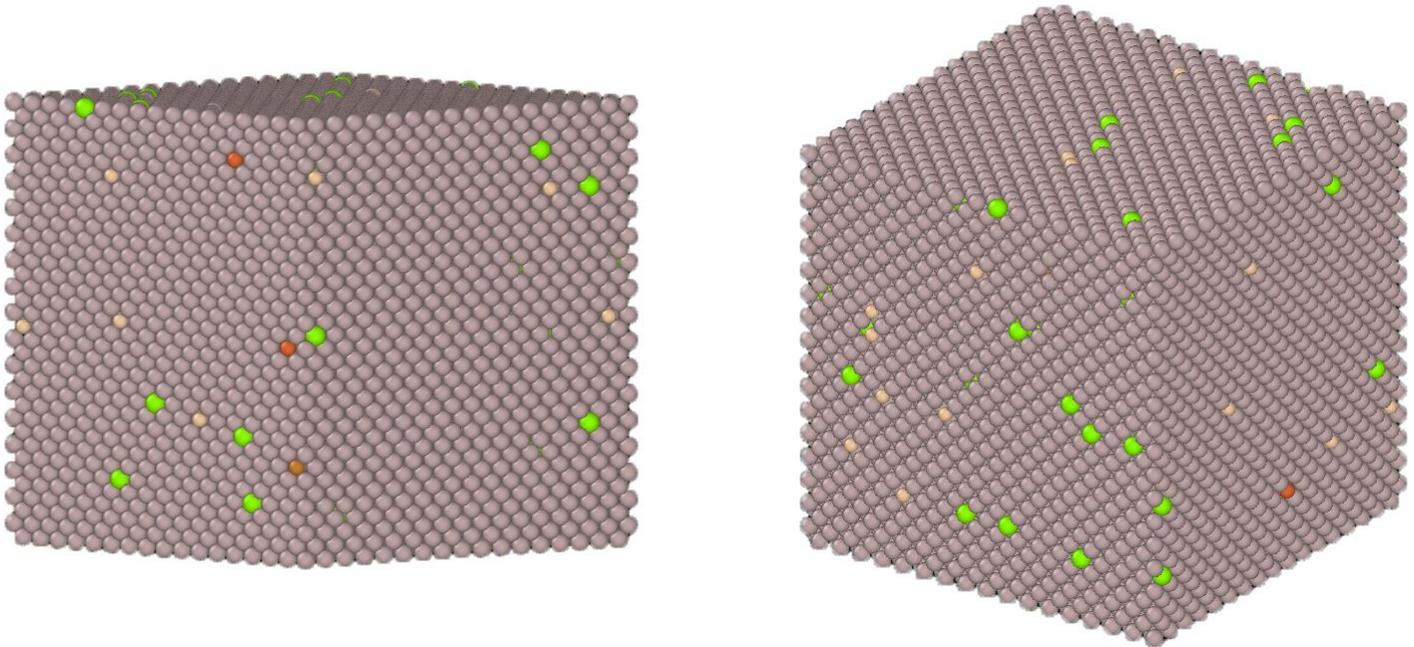
Το ATOMSK, είναι το λογισμικό πακέτο το οποίο χρησιμοποιήθηκε για την ανάπτυξη της μικροδομής, πιο συγκεκριμένα της διάταξης των ατόμων στο χώρο. Ο σκοπός του Atomsk είναι να παρέχει ένα ενιαίο και Ανοιχτού Κώδικα εργαλείο γραμμής εντολών για το χειρισμό ατομικών συστημάτων και την παραγωγή αρχείων ατομικών δεδομένων για τους σκοπούς των υπολογισμών *ab initio*, των κλασικών ατομικών προσομοιώσεων, με έμφαση στη φυσική των υλικών και τις ατέλειες. Η υλοποίηση έχει ως στόχο να είναι όσο το δυνατόν πιο γενική, για οποιουσδήποτε τύπους πλεγμάτων ή χημικών συστάσεων. Το Atomsk μπορεί να λειτουργήσει με μεταλλικά, ομοιοπολικά ή ιοντικά συστήματα. Αν και το πρόγραμμα αυτό μπορεί να μην εξαλείψει πλήρως τις ανάγκες ανάπτυξης *scripts* για πολύ συγκεκριμένες εφαρμογές, το Atomsk μπορεί να είναι χρήσιμο για την εκτέλεση των πιο απλών και συνηθισμένων εργασιών, όμως μπορεί και να κατασκευάσει πολύπλοκες δομές όπως διαταραχές σε ισότροπα ή ανισότροπα μέσα, σχεδιασμό πολυκρυστάλλων ή μελέτη φερροηλεκτρικών υλικών [38].

3.2 ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΜΙΚΡΟΔΟΜΗΣ

Πρώτο βήμα για την εκτέλεση ενός πειράματος Μοριακής Δυναμικής, είναι η ανάπτυξη της μικροδομής. Προκειμένου να εκτελεστεί το πείραμα, θα πρέπει ο αλγόριθμος να «διαβάσει» τις αρχικές θέσεις των ατόμων και να τα αντιστοιχίσει σε δεδομένες συντεταγμένες, δύο ή τριών διαστάσεων, αναλόγως το είδος του πειράματος το οποίο επιθυμούμε να εκτελέσουμε.

Υπάρχουν πολλοί τρόποι για να δημιουργήσουμε μια αρχική διάταξη των ατόμων, το LAMMPS παρέχει τη δυνατότητα να το πραγματοποιήσει κανείς αυτό μέσω του δικού του κώδικα, με ορισμένες εντολές. Αυτή η μέθοδος συνήθως χρησιμοποιείται για απλούστερα συστήματα. Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, το υπό μελέτη κράμα είναι το AA6063. Βιβλιογραφικά, (όπως παρατέθηκε και στον πίνακα της ενότητας 2.2.3), γνωρίζουμε πως το συγκεκριμένο κράμα αποτελείται από Al, Si και Mg, όμως, συναντώνται μικρές ποσότητες Fe και Cu (τα οποία εμφανίζονται ως ακαθαρσίες κυρίως κατά τη διαδικασία της χύτευσης [39]). Συνεπώς θα πρέπει να δημιουργηθεί ένα σύστημα Al-Si-Mg-Cu-Fe. Για την κατασκευή του παραπάνω συστήματος έγινε χρήση του πακέτου ATOMSK, του οποίου οι αρχές λειτουργίας αναφέρθηκαν σε προηγούμενη ενότητα. Με βοήθεια του Excel, μετατράπηκαν οι κατά βάρος (w/w) περιεκτικότητες σε ατομικές περιεκτικότητες. Με αυτόν τον τρόπο δημιουργήθηκε μια πρώτη αρχική δομή, μιας κυψελίδας 19652 ατόμων με δομή FCC. Η κυψελίδα οπτικοποιήθηκε με τη βοήθεια του OVITO (2.4.2).

Τα διαφορετικά χρώματα στα άτομα, υποδηλώνουν το διαφορετικό είδος ατόμου (π.χ. Al, Mg, Si) και είναι μια τεχνική αυτόματου color coding, την οποία πραγματοποιεί το OVITO, για ευκολότερη κατανόηση.



Εικόνα 15: Μορφολογία μικροδομής δημιουργημένης μέσω ATOMSK

Η μέθοδος αυτή, η ανάπτυξη δηλαδή μονοκρυστάλλων ακόμη και πολυκρυστάλλων με το λογισμικό πακέτο ATOMSK, έχει χρησιμοποιηθεί σε πολυάριθμες μελέτες Μοριακής Δυναμικής και συγκεκριμένα μεταλλικών συστημάτων, όπως οι Ivanov et. al [43] οι οποίοι μελέτησαν την πυκνότητα διαταραχών κατά την ανόπτηση του Τιτανίου, οι Zhang et. al. [44] οι οποίοι μελέτησαν τον διαφορισμό στα όρια κόκκων ναοκρυσταλλικών υλικών και οι Jinfei et. al. [45] οι οποίοι μελέτησαν τη συμπεριφορά των διαταραχών στα αρχικά στάδια της πλαστικής παραμόρφωσης ενός κράματος μεσαίας εντροπίας (Medium Entropy Alloy) CoCrNi.

3.3 ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΤΟΥ INPUT SCRIPT ΓΙΑ ΤΟ LAMMPS

Το συγκεκριμένο βήμα, αποτέλεσε το σημαντικότερο και πιο χρονοβόρο στάδιο κατά την εκπόνηση αυτής της μελέτης. Ένα αρχείο εισόδου LAMMPS είναι ένα αρχείο κειμένου που περιέχει μια σειρά εντολών και ρυθμίσεων που χρησιμοποιούνται για να διαμορφωθεί και να εκτελεσθεί μια προσομοίωση ΜΔ. Οι βασικοί πυλώνες ενός input αρχείου παρατίθενται παρακάτω:

1. Οριακές Συνθήκες και Πλαίσιο Προσομοίωσης (Simulation Box):

Συνήθως αποτελεί την πρώτη εντολή στο input αρχείο, και βοηθά στον ορισμό των διαστάσεων του πλαισίου προσομοίωσης, το σχήμα (π.χ., κυβικό, ορθογώνιο, τρικλινικό) και τις περιοδικές συνθήκες ορίου. Αυτό ορίζει τα χωρικά όρια της προσομοίωσης μας.

Παραδείγματα εντολών (python):

units <μονάδες>

dimension <διάσταση>

boundary <xlo xhi> <ylo yhi> <zlo zhi>

2. Είδος και Πληροφορίες Ατόμων:

Με τη χρήση ορισμένων εντολών, επιτρέπεται ο ορισμός του στυλ των ατόμων, που καθορίζει πώς αναπαρίστανται τα άτομα στην προσομοίωση (π.χ., ατομικό, μοριακό). Ακόμη μπορεί να ορισθεί ο αριθμός των ατόμων, τους τύπους τους και τις αρχικές τους θέσεις και τις ταχύτητες. Η διαδικασία αυτή μπορεί να πραγματοποιηθεί με τις προ υπάρχουσες εντολές του LAMMPS, όμως σε περιπτώσεις πιο σύνθετων μικροδομών (όπως και στη δική μας περίπτωση) συνηθίζεται η ανάπτυξη της μικροδομής μέσω Third Party λογισμικών.

Παραδείγματα εντολών (python):

atom_style <στυλ>

read_data <αρχείο_δεδομένων>

3. Δυναμικό Πεδίο και Ατομικά Δυναμικά:

Με τις εντολές αυτές ορίζονται τα δυναμικά και καθορίζεται η ενεργειακή συνάρτηση που επηρεάζει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων ή μορίων. Το LAMMPS υποστηρίζει πολλαπλά είδη ατομικών ή μοριακών δυναμικών.

Παραδείγματα εντολών (python):

pair_style <στυλ_δυνάμεων>

pair_coeff <συντελεστές>

4. Θερμοστάτες και Βαροστάτες:

Αν απαιτείται, καθορίζονται θερμοστάτες και βαροστάτες για τον έλεγχο της θερμοκρασίας και της πίεσης κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης.

Παραδείγματα εντολών (python):

fix <αναγνωριστικό_επιδιόρθωσης> all nvt temp <θερμοκρασία> <χρόνος_απόσβεσης>

5. Διάρκεια Εκτέλεσης και Εντολές Εξόδου:

Είναι σημαντικό να καθορισθεί ο συνολικός αριθμός των βημάτων προσομοίωσης καθώς και το πόσο «συχνά» επιθυμούμε ο κώδικάς μας να εξάγει δεδομένα, όπως συντεταγμένες, ενέργειες και άλλες ιδιότητες.

Παραδείγματα εντολών (python):

run <αριθμός_βημάτων>

thermo <συχνότητα>

thermo_style <στυλ>

6. Ανάλυση και Μετεπεξεργασία:

Μπορούμε να συμπεριλάβουμε οποιεσδήποτε πρόσθετες εντολές για ανάλυση δεδομένων ή προσαρμοσμένους υπολογισμούς μετά την προσομοίωση.

Παραδείγματα εντολών (python):

compute <αναγνωριστικό_υπολογισμού> all property/atom <στυλ_υπολογισμού>

variable <όνομα_μεταβλητής> equal <έκφραση>

7. Προσαρμοσμένα Σενάρια και Μακροεντολές:

Μπορείτε να δημιουργήσετε προσαρμοσμένα σενάρια και μακροεντολές για να διευκολύνετε τη διαχείριση του αρχείου εισόδου και την επαναχρησιμοποίησή του.

Παραδείγματα εντολών (python):

makefile

include <προσαρμοσμένο_σενάριο>

8. Προσθήκη Σχολίων:

Προσθέστε σχόλια χρησιμοποιώντας το σύμβολο # για να τεκμηριώσετε το αρχείο εισόδου για μελλοντική αναφορά.

Παραδείγματα εντολών (rhythm):

Αυτό είναι ένα σχόλιο που περιγράφει τον σκοπό αυτής της εντολής

Προκειμένου να τρέξει σωστά η προσομοίωσή μας και να γνωρίζουμε πως λαμβάνουμε αξιόπιστα αποτελέσματα, οφείλουμε εκτός της ανάπτυξης σωστής μικροδομής, να έχουμε ορίσει και σωστά δυναμικά. Η προσθήκη περισσότερων του ενός ατόμου, καθιστά τον ορισμό σωστών δυναμικών μια αρκετά δύσκολη διαδικασία, η οποία αποτελεί από μόνη της ένα ερευνητικό έργο. Για τη παρούσα δουλειά, χρησιμοποιήθηκε ένα αρχείο δυναμικού, το οποίο αναπτύχθηκε από τους Jelínek et. al. [48], το οποίο εκφράζει τα ατομικά δυναμικά του συστήματος Al-Mg-Si-Fe-Cu. Η ανάπτυξη του δυναμικού βασίστηκε στις αρχές της MEAM, η οποία αναλύθηκε στην παράγραφο 2.1.2.2.

Ακόμη μια παράμετρος η οποία έπρεπε να ληφθεί υπόψη είναι η διάρκεια του χρονικού βήματος (timestep duration) καθώς και το σύνολο των χρονικών βημάτων (number of timesteps). Μέσω μια διαδικασίας trial and error, καθώς και από αναζήτηση στην παγκόσμια βιβλιογραφία, ορίστηκε timestep χρόνου $t = 1$ fs (femtosecond ή 10^{-15} second). Ο καθορισμός του αριθμού των timesteps, είναι μια παράμετρος η οποία δεν έχει κάποιον κανόνα κατά τον ορισμό της. Ιδανικά, για να λάβουμε τα πιο αξιόπιστα αποτελέσματα, θα πρέπει ο αριθμός αυτός να είναι όσο το δυνατόν μεγαλύτερος (της τάξης του 10^9), όμως ο αριθμός αυτός προϋποθέτει τεράστια υπολογιστική ισχύ και χρόνο. Στη συγκεκριμένη εργασία, έγινε δοκιμή στα 20.000 timesteps.

4 ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

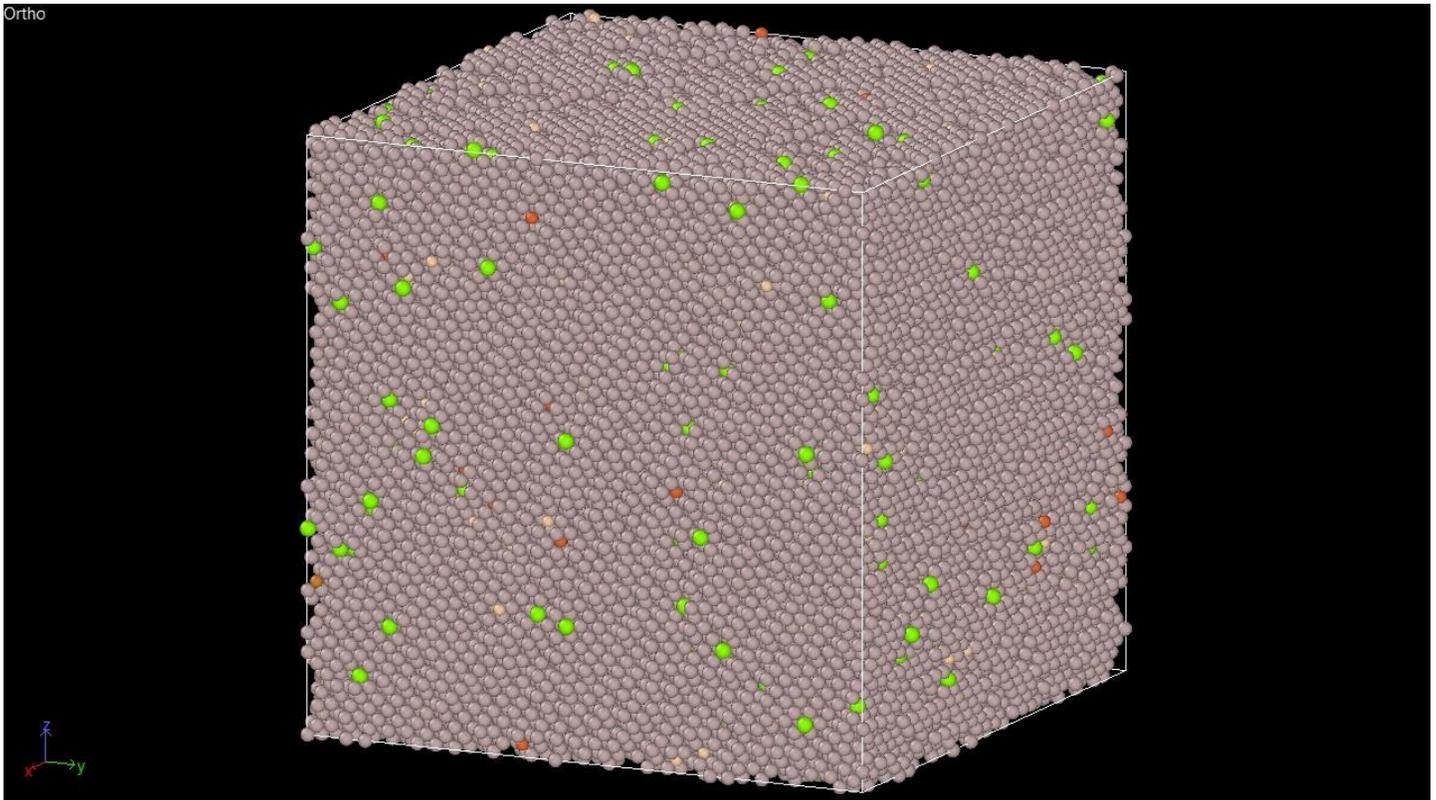
Στην ενότητα αυτή θα γίνει παρουσίαση των αποτελεσμάτων τα οποία λήφθηκαν από την εκτέλεση της προσομοίωσης, ο υπολογισμός της πυκνότητας διαταραχών στην δοκιμή η οποία έγινε προσπάθεια να προσομοιωθεί, η οπτική αναπαράσταση των διαταραχών καθώς και ο υπολογισμός μιας καμπύλης Τάσης-Παραμόρφωσης (Stress-Strain).

4.1 ΟΠΤΙΚΗ ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΗ ΔΙΑΤΑΡΑΧΩΝ

Για την οπτικοποίηση, όπως αναφέρθηκε και νωρίτερα, έγινε χρήση του λογισμικού OVITO. Για την οπτικοποίηση καθώς και τη μέτρηση της πυκνότητας των διαταραχών, χρησιμοποιήθηκε πιο συγκεκριμένα ο αλγόριθμος DXA.

Για την εκτέλεση των πειραμάτων, χρησιμοποιήθηκαν δύο διαφορετικά στατιστικά σύνολα, NPT και NVE. Το ισοθερμικό-ισοβαρικό σύνολο (σύνολο σταθερής θερμοκρασίας και σταθερής πίεσης) είναι ένα στατιστικό μηχανικό σύνολο που διατηρεί σταθερή θερμοκρασία T και σταθερή πίεση P . Ονομάζεται επίσης σύνολο NPT, όπου ο αριθμός των ατόμων N , διατηρείται επίσης σταθερός [49]. Στη στατιστική μηχανική, το μικροκανονικό σύνολο είναι ένα στατιστικό σύνολο που αναπαριστά τις πιθανές καταστάσεις ενός μηχανικού συστήματος του οποίου η συνολική ενέργεια είναι επακριβώς καθορισμένη. Το σύστημα θεωρείται απομονωμένο με την έννοια ότι δεν μπορεί να ανταλλάξει ενέργεια ή σωματίδια με το περιβάλλον του, έτσι ώστε (σύμφωνα με τη διατήρηση της ενέργειας) η ενέργεια του συστήματος να μη μεταβάλλεται με το χρόνο [50]. Η χρήση αυτού του συνόλου έγινε προκειμένου τα αποτελέσματά μας να βρίσκονται σε παραλληλία με αντίστοιχα πειράματα της παγκόσμιας βιβλιογραφίας, καθώς στην πλειοψηφία αυτών γίνεται χρήση NPT συνθηκών [57]. Ακόμη, για λόγους σύγκρισης και ερευνητικού ενδιαφέροντος, εκτελέστηκαν και σε NVE συνθήκες, παρόλο που ενδεχομένως να μην είναι θερμοδυναμικά κατάλληλες. Ο λόγος είναι διότι κατά την εφαρμογή της τάσης, το μεταλλικό μας σύστημα ανταλλάσσει ενέργεια με το περιβάλλον, εφόσον θεωρείται πως το υλικό μας βρίσκεται ακόμη στην ελαστική περιοχή.

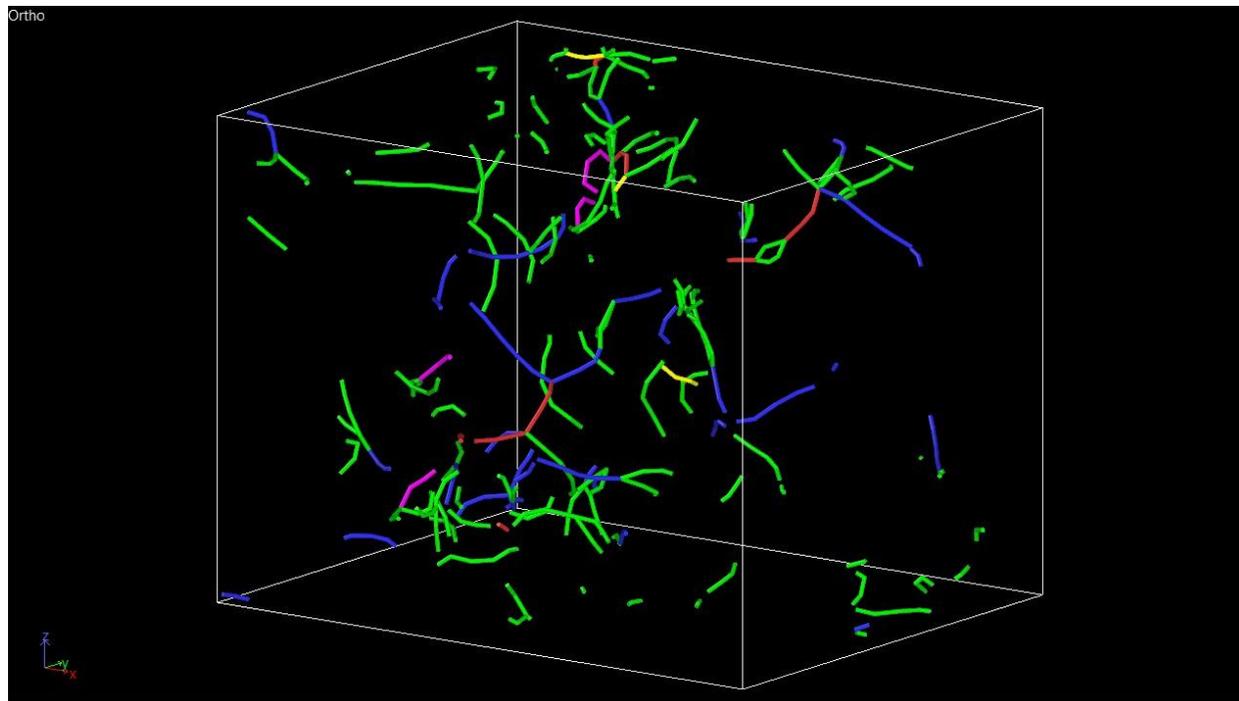
Αρχικά, ας παραστήσουμε την διάταξη του συστήματος των ≈ 100.000 ατόμων. Θεωρήθηκε πως τα άτομα βρίσκονται κρυσταλλωμένα στο FCC σύστημα, χωρίς προ υπάρχουσες διαταραχές (συνεπώς έχουμε μια τέλεια διάταξη στο χώρο). Ακόμη, θεωρήθηκε πως όλα τα άτομα των κραμματικών στοιχείων (Mg, Si, Fe, Cu) είναι άτομα αντικατάστασης, δηλαδή έχουν αντικαταστήσει τυχαία άτομα Al, σε κάποια από τις κορυφές του κρυστάλλου FCC. Η δομή είναι η εξής:



Εικόνα 16: Οπτικοποίηση της πειραματικής μικροδομής 100.000 ατόμων

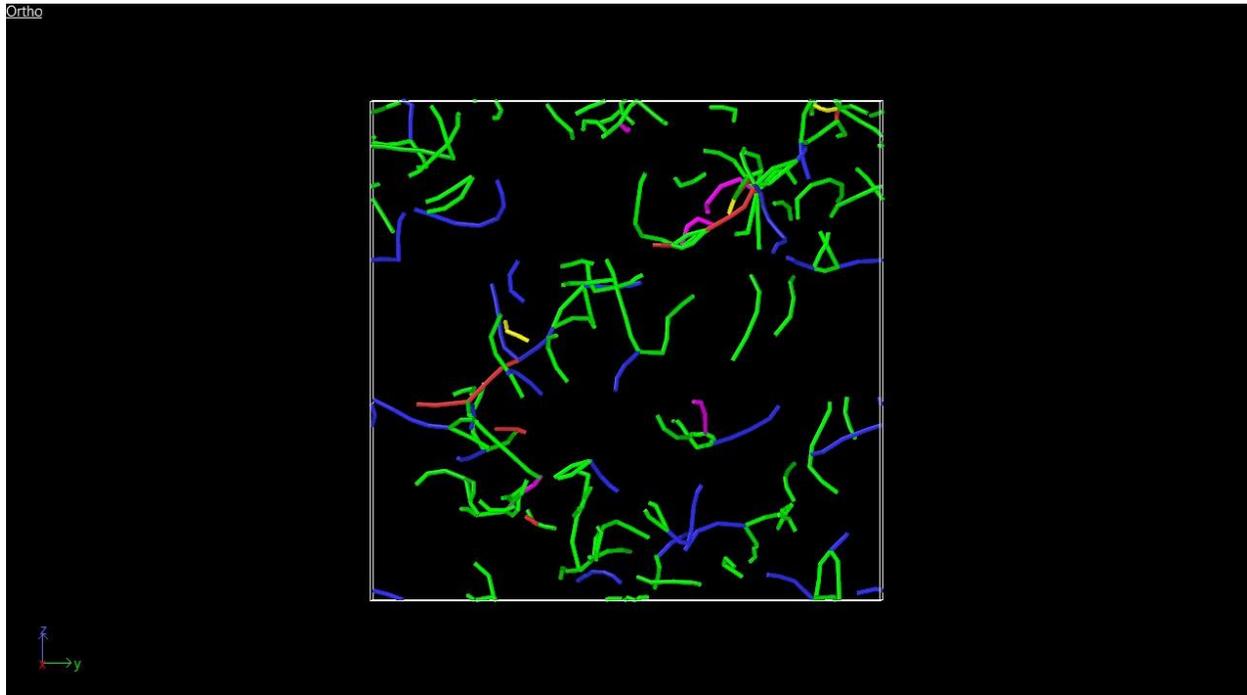
Τα διαφορετικά χρώματα υποδηλώνουν και διαφορετικό είδος ατόμου. Η αναλογία των ατόμων και ο αριθμός αυτών δεν είναι τυχαία, καθώς έγινε προσπάθεια όσο το δυνατόν καλύτερης προσομοίωσης πραγματικών συνθηκών, οπότε τηρήθηκαν οι αναλογίες του Πίνακα 2.

Το πείραμα εκτελέστηκε για 20.000 timesteps, με timestep 1 fs. Συνεπώς τα αποτελέσματα τα οποία θα παρουσιασθούν θα είναι για χρόνο 20.000 fs ή 20 ps. Παρακάτω παρατηρείται η οπτικοποίηση των γραμμών διαταραχών από τρεις διαφορετικές οπτικές.

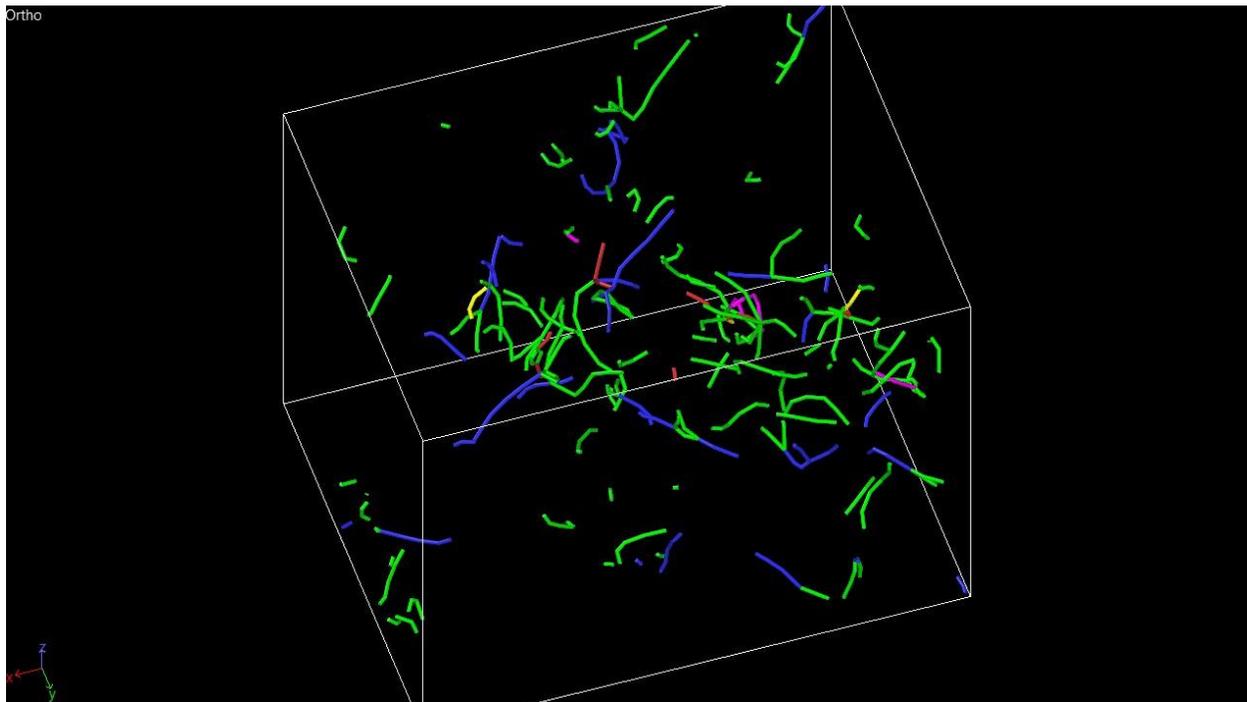


Εικόνα 17: Οπτικοποίηση γραμμών διαταραχών (πρώτη όψη)

Αυτό το οποίο παρατηρείται είναι πως υπάρχει δημιουργία γραμμών διαταραχών από καθορισμένα σημεία της μικροδομής, και πιθανολογείται πως αυτά τα σημεία «έναρξης» των διαταραχών είναι σημεία όπου υπάρχει έντονο κραμματικό στοιχείο, πιθανόν Μαγνησίου, καθώς εκτός του ότι το Μαγνήσιο βρίσκεται σε αρκετά μεγάλη περιεκτικότητα συγκριτικά με τα υπόλοιπα κραμματικά στοιχεία, έχει και μεγαλύτερο ατομικό φορτίο από το Αλουμίνιο.



Εικόνα 18: Οπτικοποίηση γραμμών διαταραχών (δεύτερη όψη)



Εικόνα 19: Οπτικοποίηση γραμμών διαταραχών (τρίτη όψη)

Παρατηρείται η ύπαρξη περισσότερων του ενός χρωμάτων. Αυτό οφείλεται στο γεγονός πως το OVITO, πραγματοποιεί color coding στις διαταραχές, ανάλογα με το είδος τους. Παρακάτω παρατίθεται ένας πίνακας, ο οποίος μας δείχνει το είδος της διαταραχής, το αντίστοιχο χρώμα της στην οπτικοποίηση καθώς και το συνολικό μήκος το οποίο καταλαμβάνουν αυτού του είδους οι διαταραχές.

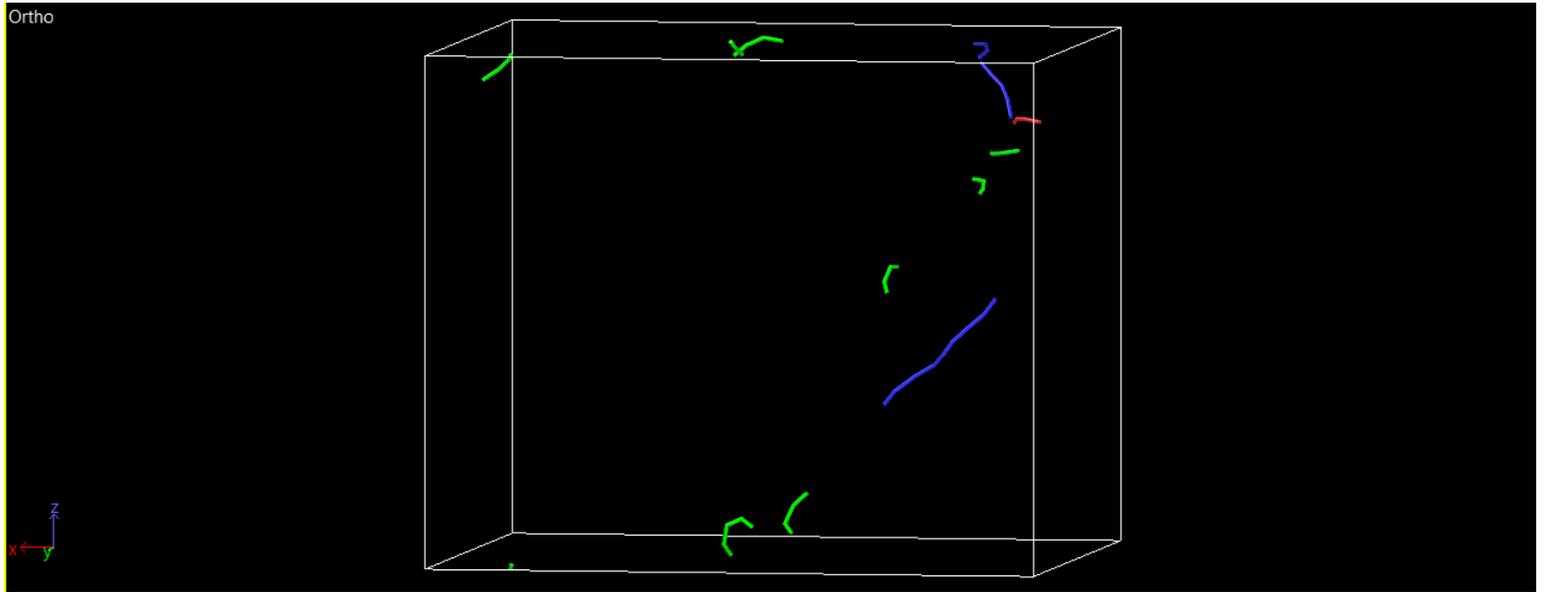
	Dislocation type	Segs	Length
	1/2<110> (Perfect)	28	429.655
	1/6<112> (Shockley)	105	1331.39
	1/6<110> (Stair-rod)	5	59.7459
	1/3<100> (Hirth)	3	22.5802
	1/3<111> (Frank)	0	0

Πίνακας 3: Ανάλυση διαταραχών κατά την προσομοίωση σε NPT συνθήκες

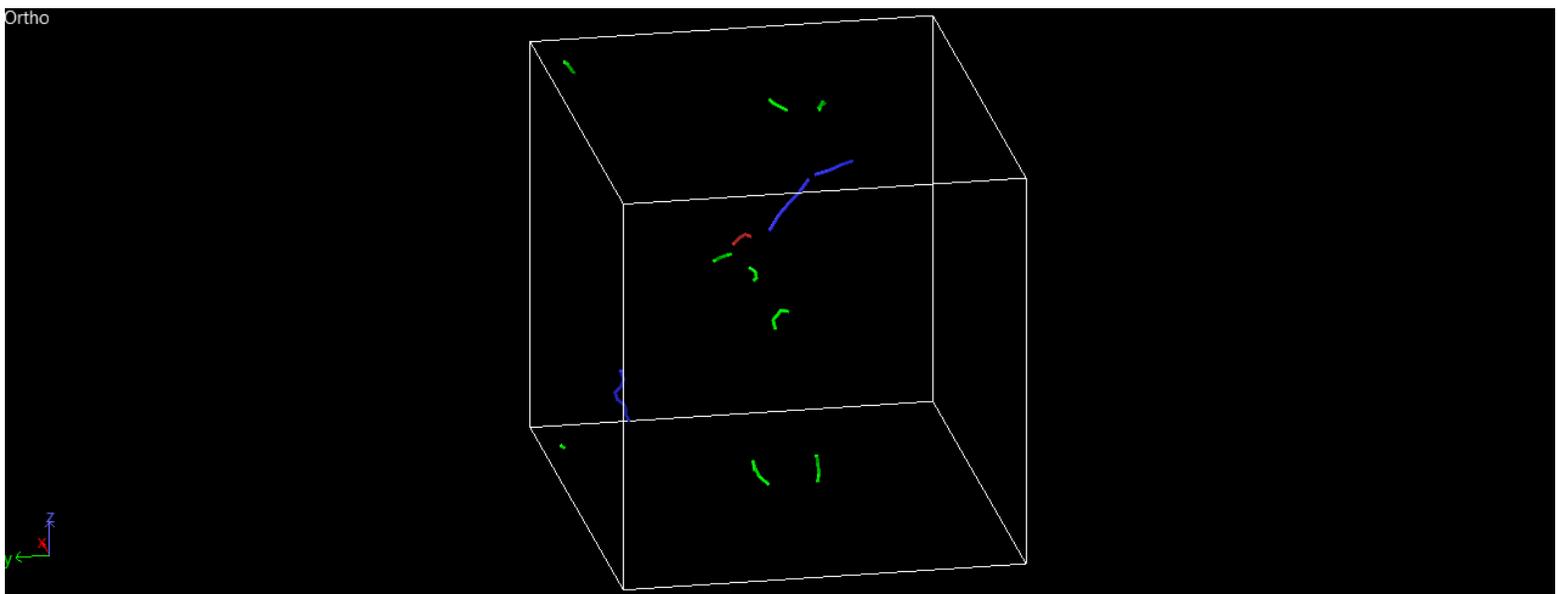
Η δοκιμή η οποία έγινε προσπάθεια να προσομοιωθεί, ήταν μια μονοαξονική δοκιμή θλίψης. Αυτό πραγματοποιήθηκε, εφαρμόζοντας μέσω του κώδικα του LAMMPS έναν σταθερό ρυθμό παραμόρφωσης (strain rate) της τάξης του 10. Ο λόγος για τον οποίο επιλέχτηκε μια τόσο μεγάλη τιμή στο ρυθμό παραμόρφωσης, είναι λόγω του εξαιρετικά μικρού χρόνου πειράματος (της τάξεως του picosecond).

Ο τρόπος με τον οποίον πραγματοποιήθηκε ο υπολογισμός της πυκνότητας διαταραχών, είναι διαιρώντας το συνολικό μήκος της γραμμής διαταραχών με τον συνολικό όγκο του πλαισίου προσομοίωσης. Αυτά είναι δύο δεδομένα τα οποία μας παρέχει το OVITO. Ο τρόπος προσέγγισης αυτός βρίσκεται σε συμφωνία με τη παγκόσμια βιβλιογραφία, όπου ερευνητές χρησιμοποίησαν την ίδια μέθοδο για τον υπολογισμό της πυκνότητας των διαταραχών [58] [59]. Συνεπώς, υπολογίστηκε μια πυκνότητα διαταραχών της τάξης του $11 \cdot 10^{16}$ ή $\approx 10^{17}$.

Στη συνέχεια, εκτελέστηκε το ίδιο πείραμα, σε συνθήκες NVE.



Εικόνα 20: Οπτικοποίηση διαταραχών σε συνθήκε NVE (πρώτη όψη)



Εικόνα 21: Οπτικοποίηση διαταραχών σε συνθήκε NVE (δεύτερη όψη)

Στον παρακάτω πίνακα φαίνονται οι μετρήσεις τις οποίες μας παρείχε η DXA ανάλυση του ΟΝΙΤΟ:

	Dislocation type	Segs	Length
	Other	1	9.84826
	1/2<110> (Perfect)	3	72.8728
	1/6<112> (Shockley)	7	86.0352
	1/6<110> (Stair-rod)	0	0
	1/3<100> (Hirth)	0	0

Πίνακας 4: Ανάλυση διαταραχών κατά την προσομοίωση σε NVE συνθήκες

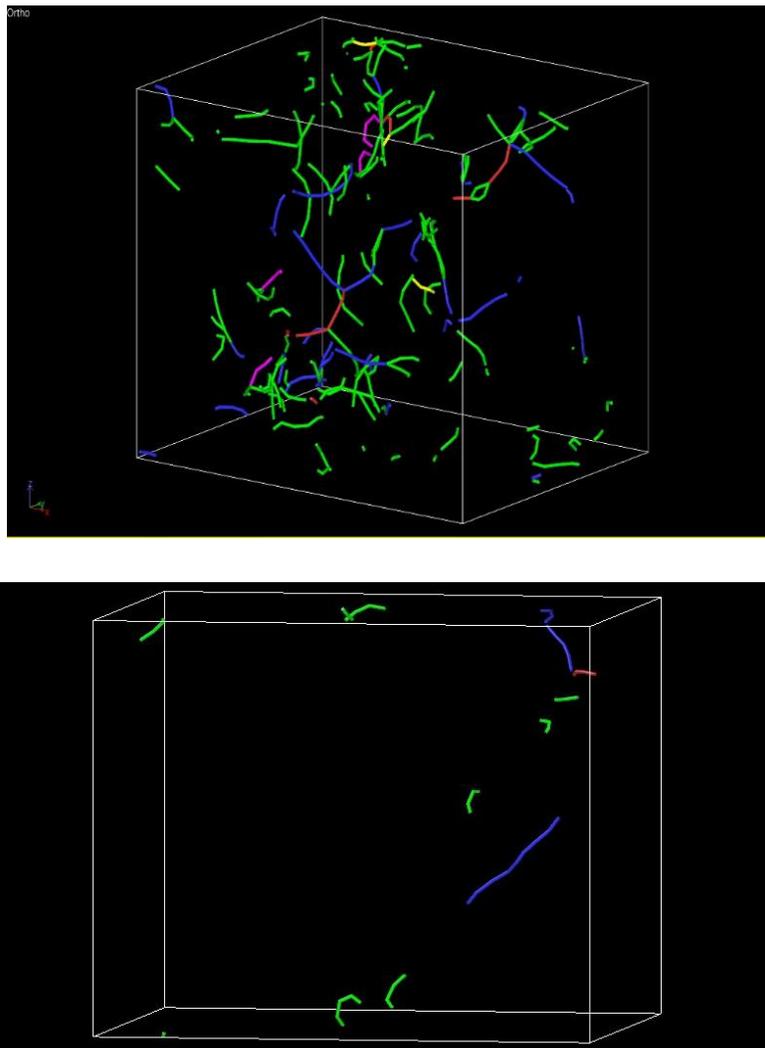
Παρατηρούμε τη ως επί το πλείστον ύπαρξη διαταραχών τύπου Shockley, όπως συνέβη και στην περίπτωση των NPT συνθηκών, καθώς και την ύπαρξη διαταραχών τις οποίες ο αλγόριθμος αδυνατεί να κατηγοριοποιήσει στη παρούσα του έκδοση.

Ακολουθώντας την ίδια μεθοδολογία με πριν, υπολογίζεται η πυκνότητα διαταραχών σε NVE συνθήκες, η οποία επέρχεται σε περίπου $8 \cdot 10^{15}$.

5 ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ – ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΕ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ

5.1 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΤΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ

Αρχικά, θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των αποτελεσμάτων από την προσομοίωση μεταξύ τους, δηλαδή σύγκριση των αποτελεσμάτων τα οποία λήφθηκαν από τα διαφορετικά ensembles, NPT και NVE. Ύστερα θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων με αντίστοιχα της βιβλιογραφίας, από πειραματικά δεδομένα.



Εικόνα 22: Σύγκριση γραμμών διαταραχών σε NPT (πάνω) και NVE (κάτω) συνθήκες

Αυτό το οποίο παρατηρείται αρχικά, είναι πως υπάρχει εμφανής διαφορά στα αποτελέσματα μεταξύ των δύο διαφορετικών συστημάτων. Κατ' αρχάς, κοιτώντας τις εικόνες 21 και 23, είναι εύκολο οπτικά να κατανοηθεί πως υπάρχουν διαφορές στις γραμμές διαταραχών, καθώς στην περίπτωση του NPT ensemble, παρατηρείται μεγαλύτερος αριθμός γραμμών, ο οποίος συνεπάγεται και μεγαλύτερη πυκνότητα διαταραχών. Η παρατήρηση αυτή επιβεβαιώνεται και από διεξοδικότερη ανάλυση, καθώς παρατηρώντας τους πίνακες 3 και 4 βλέπουμε διαφορά στο συνολικό μήκος της γραμμής διαταραχών. Ακόμη, μετά τον υπολογισμό της πυκνότητας διαταραχών, παρατηρείται μια διαφορά σχεδόν ισοδύναμη με δύο τάξεις μεγέθους στη συνολική πυκνότητα διαταραχών στον υπό μελέτη όγκο υλικού. Για να υπάρχει μια καλύτερη εικόνα της αποτελεσματικότητας της μεθόδου, είναι δόκιμο η σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με αντίστοιχα πειραματικά. Η σύγκριση αυτή πραγματοποιείται παρακάτω.

5.2 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΜΕ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ

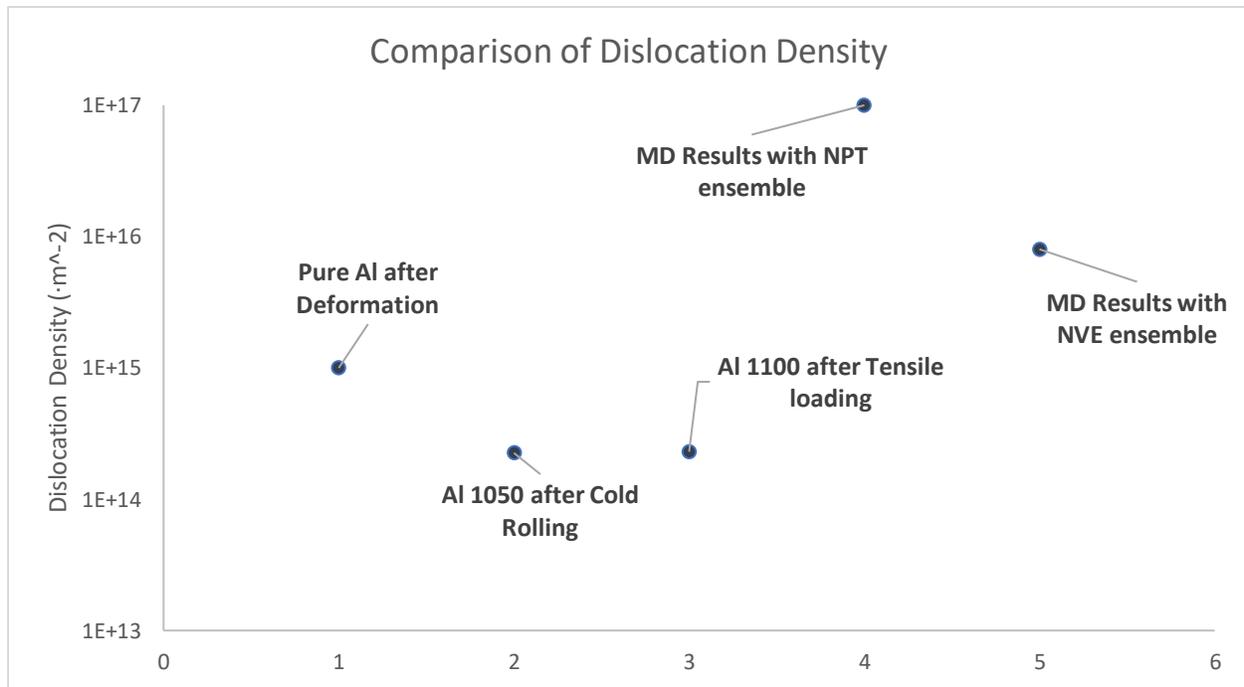
Παρακάτω, έχει κατασκευαστεί ένας πίνακας από δεδομένα τα οποία αντλήθηκαν από τη βιβλιογραφία, όσον αφορά τη πυκνότητα διαταραχών του Αλουμινίου και των κραμάτων Αλουμινίου. Τα δεδομένα δεν αφορούν μόνο πειράματα τα οποία πραγματοποιήθηκαν σε κράμα αλουμινίου 6063 (το υπό μελέτη κράμα της παρούσας εργασίας) αλλά και άλλα κράματα αλουμινίου. Στη βιβλιογραφία δεν βρέθηκαν αρκετές δημοσιεύσεις για το συγκεκριμένο κράμα, και εφόσον ο σκοπός αυτής της σύγκρισης είναι η εκτίμηση της ικανότητας του μοντέλου να μπορέσει να προσομοιάσει τις πραγματικές συνθήκες, αρκεί η σύγκριση και με άλλα κράματα, καθώς πραγματοποιείται μια προσεγγιστική μελέτη.

<i>Άρθρο/Μέθοδος</i>	<i>Miyajima et. al</i> <i>[51]</i>	<i>Sidor et. al</i> <i>al [52]</i>	<i>Adachi et. al</i> <i>[53]</i>	<i>Προσομοίωση</i> <i>MD (NPT)</i>	<i>Προσομοίωση</i> <i>MD (NVE)</i>
Υπό Μελέτη Κράμα	Καθαρό Αλουμίνιο έπειτα από Πλαστική Παραμόρφωση	Αλουμίνιο 1050 έπειτα από ψυχρή έλαση	Αλουμίνιο 1100 υπό εφελκυστική τάση	Πειραματική δομή Αλουμινίου 6063	Πειραματική δομή Αλουμινίου 6063
Πυκνότητα ρ ($\cdot m^{-2}$)	10^{15}	$1.02 - 2.25 \cdot 10^{14}$	$0.2 - 2.3 \cdot 10^{14}$	10^{17}	$8 \cdot 10^{15}$

Πίνακας 5: Σύγκριση τιμών πυκνότητας διαταραχών (Πειραματικά - Υπολογιστικά αποτελέσματα)

Παρατηρείται πως από τα δεδομένα τα οποία αντλήθηκαν από τις άνωθεν δημοσιεύσεις, η πυκνότητα διαταραχών (η οποία υπολογίστηκε με πειραματικές μεθόδους) κυμαίνεται σε μια τάξη μεγέθους $10^{14} - 10^{15} \cdot m^{-2}$. Από την άλλη, τα δεδομένα τα οποία αντλήθηκαν από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, κυμαίνονται μεταξύ $10^{15} - 10^{17} \cdot m^{-2}$.

Αυτό το οποίο παρατηρείται αρχικά, είναι πως η πυκνότητα η οποία υπολογίστηκε μέσω της προσομοίωσης, αγγίζει τα ανώτερα όρια των πειραματικών αποτελεσμάτων. Παρόλα αυτά, ιδίως στην περίπτωση των NVE συνθηκών πειράματος, η προσέγγιση είναι ικανοποιητική και προσεγγίζει σε ικανοποιητικό βαθμό τα αποτελέσματα τα οποία παρατηρήθηκαν μέσω πειράματος. Δεν μπορεί ωστόσο να παραβλεφθεί η διαφορά η οποία παρατηρείται στις τιμές. Στο παρακάτω γραφικό, έγινε προσπάθεια διαγραμματική απεικόνισης των τιμών της πυκνότητα διαταραχών της βιβλιογραφίας καθώς και των προσομοιώσεων.



Εικόνα 23: Σύγκριση μέσω γραφικής παράστασης των τιμών πυκνότητας διαταραχών

Υπάρχουν αρκετοί λόγοι στους οποίους θα μπορούσε να οφείλεται αυτή η διαφορά η οποία παρατηρείται στις τιμές. Αρχικά, όπως έχει αναφερθεί και νωρίτερα, η προσέγγιση της παρούσας εργασίας, αφορούσε τον προσδιορισμό της πυκνότητας διαταραχών στο κράμα αλουμινίου 6063, μέσω προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής. Η κλίμακα στην οποία δηλαδή έγινε η μελέτη, ή ο υπό μελέτη όγκος υλικού, βρίσκεται στην κλίμακα των Angstrom-Νανομέτρων. Είναι κατανοητό λοιπόν πως κατά την αναγωγή των αποτελεσμάτων σε μεγαλύτερης τάξεως κλίμακες, είναι πιθανόν να προκύψουν διαφορές. Ακόμη, κατά την ανάπτυξη της μικροδομής, έγιναν αρκετές παραδοχές όσον αφορά τη διάταξη των ατόμων στο χώρο, την ύπαρξη ή μη προ υπαρχόντων ατελειών, καθώς και των οριακών συνθηκών. Ακόμη, θεωρήθηκε πως στη μικροδομή μας δεν υπάρχει ανάπτυξη της φάσης Mg₂Si, η οποία είναι αρκετά κοινή στα κράματα της σειράς 6000.

6 ΕΠΙΛΟΓΟΣ – ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Η παρούσα εργασία, αποτέλεσε μια εισαγωγική προσπάθεια χρήσης μοντέλου Μοριακής Δυναμικής, για την μελέτη και τον υπολογισμό της πυκνότητας διαταραχών στο κράμα αλουμινίου 6063.

Όπως παρατηρήθηκε, υπήρξαν κάποιες διαφορές σε σχέση με τις πειραματικές μετρήσεις, καθώς η πυκνότητα διαταραχών η οποία λήφθηκε από τη προσομοίωση, τείνει να υπερβαίνει τις πραγματικές τιμές. Όπως αναλύθηκε και στην παράγραφο 5.1, υπάρχουν αρκετοί λόγοι στους οποίους θα μπορούσε να αποδοθεί αυτή η διαφορά. Οι πιο σημαντικοί από τους οποίους είναι :

- Η παραδοχές κατά την ανάπτυξη της μικροδομής. Συγκεκριμένα η θεώρηση του συστήματος ως μονοφασικό
- Η θεώρηση ότι η αρχική μικροδομή ήταν άνευ ατελειών.
- Η μελέτη ενός μικρού συστήματος (ως προς τον αριθμό ατόμων)
- Η χρήση μεγάλου ρυθμού παραμόρφωσης (10 /s)

Συνεπώς, προς την υπέρβαση αυτών των περιορισμών και την εξαγωγή αποτελεσμάτων πιο κοντά στις πειραματικές τιμές θα χρειαστεί αντίστοιχα:

- Να προσδιοριστεί με μεγαλύτερη ακρίβεια η θέση ισορροπίας (equilibrium) του συστήματος.
- Η εισαγωγή των ατελειών που προϋπάρχουν στο υλικό. Αυτό μπορεί να γίνει με την χρήση αντίστοιχης μεθοδολογίας για μελέτη της στερεοποίησης του υλικού.
- Η αύξηση του αριθμού των ατόμων που βρίσκονται στο υπό μελέτη σύστημα και του χρόνου επιβολής του φορτίου.
- Η συνδυαστική αύξηση του χρόνου επιβολής φορτίου με την μείωση του ρυθμού της επιβαλλόμενης παραμόρφωσης.

Είναι σημαντικό να ξανά γίνει αναφορά στην διαφορά στις τιμές μεταξύ των δύο ensembles (NPT-NVE) καθώς μπορεί να ληφθεί ένα σημαντικό συμπέρασμα όσον αφορά τη σημαντικότητα του ορισμού σωστών συνθηκών πειράματος. Παρόλο που τα αποτελέσματα από το NVE ensemble έδωσαν τιμές πυκνότητας διαταραχών οι οποίες βρίσκονται πιο κοντά στα πειραματικά αποτελέσματα, όπως αναφέρθηκε οι συνθήκες αυτές δεν προσομοιώνουν κατάλληλα τις πραγματικές. Κοιτώντας λοιπόν κανείς μόνο τα αποτελέσματα και αγνοώντας τις κατάλληλες συνθήκες, θα μπορούσε να οδηγηθεί εσφαλμένα στο συμπέρασμα πως οι NVE συνθήκες είναι πιο αξιόπιστες.

Η μελέτη των διαταραχών μέσω φυσικών πειραμάτων, όπως στις μελέτες που αναφέρθηκαν παραπάνω στην παρούσα εργασία μπορεί να πραγματοποιηθεί με ένα πλήθος μεθόδων όπως για παράδειγμα με τη χρήση TEM. Ωστόσο, πέραν του αυξημένου κόστους που συνοδεύει αυτές τις δοκιμές, υπάρχουν περιορισμοί στην εφαρμογή κάθε μεθόδου. Ακόμη, η σύγκριση με τα πειραματικά αποτελέσματα, θεωρεί δεδομένο πως τα αποτελέσματα των πειραματικών αποτελεσμάτων είναι καθολικώς σωστά, κάτι το οποίο η επιστημονική προσέγγιση μας έχει αποδείξει πως ενδεχομένως να μην ισχύει. Η μέθοδος χρήσης TEM (η οποία είναι κατά κύριο λόγο η μέθοδος η οποία χρησιμοποιείται στον πειραματικό προσδιορισμό της πυκνότητας διαταραχών) ενδεχομένως να κρύβει δικά της σφάλματα και παραδοχές. Επιπλέον, η χρήση μοριακής δυναμικής για την μελέτη των μεταλλικών συστημάτων διευκολύνει την εξαγωγή δεδομένων για χρήση σε άλλα υπολογιστικά πειράματα, επικουρώντας έτσι στην διασύνδεση των διαφορετικών κλιμάκων μελέτης της ύλης. Τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας, αποτελούν ένα έναυσμα για την περαιτέρω αξιοποίηση των δυνατοτήτων της Μοριακής Δυναμικής στο πλαίσιο μιας ευρύτερης προσπάθειας Διασυνδεδεμένης Υπολογιστικής Μηχανικής (ICME).

7 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Aidan P. Thompson, H. Metin Aktulga, Richard Berger, Dan S. Bolintineanu, W. Michael Brown, Paul S. Crozier, Pieter J. in 't Veld, Axel Kohlmeyer, Stan G. Moore, Trung Dac Nguyen, Ray Shan, Mark J. Stevens, Julien Tranchida, Christian Trott, Steven J. Plimpton, LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, *Computer Physics Communications*, Volume 271, 2022, 108171, ISSN 0010-4655, <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>.
- [2] Plimpton, S.J., Thompson, A.P. Computational aspects of many-body potentials. *MRS Bulletin* 37, 513–521 (2012). <https://doi.org/10.1557/mrs.2012.96>
- [3] Σημειώσεις Μαθήματος Βιομηχανικών Κραμάτων
- [4] Blaza Stojanovic, Milan Bukvic, Igor Epler, *Application of Aluminum and Aluminum Alloys in Engineering*, *Applied Engineering Letters: Journal of Engineering and Applied Sciences*. - Vol. 3, No. 2 (2018), p. 52–62
- [5] S. Goel, M. Knaggs, G. Goel, X.W. Zhou, H.M. Upadhyaya, V.K. Thakur, V. Kumar, G. Bizarri, A. Tiwari, A. Murphy, A. Stukowski, A. Matthews, Horizons of modern molecular dynamics simulation in digitalized solid freeform fabrication with advanced materials, *Materials Today Chemistry*, Volume 18, 2020, 100356, ISSN 2468-5194, <https://doi.org/10.1016/j.mtchem.2020.100356>.
- [6] Grigera, J.Raul. (2002). Molecular Dynamics Simulation for Ligand-Receptor Studies. *Carbohydrates Interactions in Aqueous Solutions*. *Current pharmaceutical design*. 8. 1579-604. 10.2174/1381612023394322.
- [7] Bandini, Stefania & Manzoni, Sara & Vizzari, Giuseppe. (2009). Agent Based Modeling and Simulation: An Informatics Perspective. *Journal of Artificial Societies and Social Simulation*. 12.
- [8] Sameera Abar, Georgios K. Theodoropoulos, Pierre Lemarinier, Gregory M.P. O'Hare, Agent Based Modelling and Simulation tools: A review of the state-of-art software. *Computer Science Review*, Volume 24, 2017, Pages 13-33.

- [9] J. Yanagimoto, D. Banabic, M. Banu, L. Madej, Simulation of metal forming – Visualization of invisible phenomena in the digital era. *CIRP Annals, Volume 71, Issue 2, 2022, Pages 599-622*
- [10] Kun Zhou, Bo Liu, Chapters 1,2,5 Molecular Dynamics Simulation, Elsevier, 2022, Pages 1-181, ISBN 9780128164198, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-816419-8.00010-6>.
- [11] Singh, L., Vohra, S., & Sharma, M. (2020). A Brief Overview of Crystal Plasticity Approach for Computational Materials Modeling. *Lecture Notes in Mechanical Engineering*, 61–69.
- [12] Thyssenkrupp Website Link: <https://www.thyssenkrupp-materials.co.uk/aluminium-6063.html>
- [13] Sushanta Kumar Panigrahi, R. Jayaganthan, Vivek Pancholi, Effect of plastic deformation conditions on microstructural characteristics and mechanical properties of Al 6063 alloy, *Materials & Design, Volume 30, Issue 6, 2009, Pages 1894-1901, ISSN 0261-3069, https://doi.org/10.1016/j.matdes.2008.09.022*.
- [14] M Cai, D.P Field, G.W Lorimer, A systematic comparison of static and dynamic ageing of two Al–Mg–Si alloys, *Materials Science and Engineering: A, Volume 373, Issues 1–2, 2004, Pages 65-71, ISSN 0921-5093, https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.12.035*.
- [15] Sharma, Sumit & Patel, Parth & Chandra, Mukesh & Rajak, Anil & Sharma, Chaitanya. (2022). Resistance Spot Welding of Aluminum 6063 Alloy for Aerospace Application: Improvement of Microstructural and Mechanical Properties. *Journal of The Institution of Engineers (India): Series D*. 103. 10.1007/s40033-021-00324-8.
- [16] Sills, Ryan B., William P. Kuykendall, Amin Aghaei and Wei Cai. “Fundamentals of Dislocation Dynamics Simulations.” (2016).
- [17] Steven Lavenstein, Jaafar A. El-Awady, Micro-scale fatigue mechanisms in metals: Insights gained from small-scale experiments and discrete dislocation dynamics simulations, *Current Opinion in Solid State and Materials Science, Volume 23, Issue 5, 2019, 100765, ISSN 1359-0286, https://doi.org/10.1016/j.cossms.2019.07.004*.

- [18] International Aluminium Website Link: <https://international-aluminium.org/>
- [19] Encyclopedia of Aluminum
- [20] Γ.Κ.Τριανταφυλλίδης, Μεταλλογνωσία, Εκδόσεις Τζιόλα, Θεσσαλονίκη, 2016
- [21] Totten, G.E., & MacKenzie, D.S. (Eds.). (2003). Handbook of Aluminum: Vol. 1: Physical Metallurgy and Processes (1st ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9780203912591>
- [22] Callister William D and David G Rethwisch. 2014. Materials Science and Engineering : An Introduction. 9th ed. Hoboken NJ: Wiley.
- [23] Γρηγόρης Ν. Χαϊδεμενόπουλος, Φυσική Μεταλλουργία, Εκδόσεις Τζιόλα, Αθήνα, 2022
- [24] Intro to dislocations
- [25] U Messerschmidt, M Bartsch, Generation of dislocations during plastic deformation, Materials Chemistry and Physics, Volume 81, Issues 2–3, 2003, Pages 518-523, ISSN 0254-0584, [https://doi.org/10.1016/S0254-0584\(03\)00064-6](https://doi.org/10.1016/S0254-0584(03)00064-6).
- [26] E. Orowan, in: Dislocations in Metals, American Institute of Mining and Metallurgy Engineering, New York, 1954, p. 103.
- [27] W.G. Johnston and J.J. Gilman, J. Appl. Phys., 31 (1960), p. 632
<https://pubs.aip.org/aip/jap/article/31/4/632/162541/Dislocation-Multiplication-in-Lithium-Fluoride>
- [28] J. A. Saeter, B. Forbord, H. E. Vatne, και E. Nes, ‘Modelling recovery and recrystallization, applied to back-annealing of aluminium sheets alloys’, Allum. Alloys, τ. 1, σσ. 113–126.
- [29] Aidan P. Thompson, H. Metin Aktulga, Richard Berger, Dan S. Bolintineanu, W. Michael Brown, Paul S. Crozier, Pieter J. in 't Veld, Axel Kohlmeyer, Stan G. Moore, Trung Dac Nguyen, Ray Shan, Mark J. Stevens, Julien Tranchida, Christian Trott, Steven J. Plimpton, LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, Computer Physics Communications, Volume 271, 2022, 108171, ISSN 0010-4655, <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>.
- [30] Ιστοσελίδα LAMMPS Link: [LAMMPS Molecular Dynamics Simulator](#)

- [31] M.I. Baskes, Determination of modified embedded atom method parameters for nickel
- [32] The embedded-atom method: a review of theory and applications
- [33] M.S. Daw and M.I. Baskes, Phys. Rev. Letters 50 (1983) 1285.
- [34] M.S. Daw and M.I. Baskes, Phys. Rev. B 29 (1984) 6443
- [35] MEAM potentials for Al, Si, Mg, Cu, and Fe alloys
- [36] A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010), 015012
- [37] Ιστοσελίδα OVITO Link: <https://www.ovito.org/>
- [38] "Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files" Pierre Hirel, Comput. Phys. Comm. 197 (2015) 212-219
- [39] Kanokwan Uttarasak, Wanchai Chongchitnan, Kenji Matsuda, Torranin Chairuangri, Julathep Kajornchaiyakul, Chaiyasit Banjongprasert, Evolution of Fe-containing intermetallic phases and abnormal grain growth in 6063 aluminum alloy during homogenization, Results in Physics, Volume 15, 2019, 102535, ISSN 2211-3797, <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2019.102535>.
- [40] Modified embedded-atom method interatomic potentials for Al-Cu, Al-Fe and Al-Ni binary alloys: From room temperature to melting point
- [41] A thermodynamic approach to determine accurate potentials for molecular dynamics simulations: thermoelastic response of aluminum
- [42] Honglong Zhao, Qin Pan, Qingdong Qin, Yujiao Wu, Xiangdong Su, Effect of the processing parameters of friction stir processing on the microstructure and mechanical properties of 6063 aluminum alloy, Materials Science and Engineering: A, Volume 751, 2019, Pages 70-79, ISSN 0921-5093, <https://doi.org/10.1016/j.msea.2019.02.064>.
- [43] : I. Ivanov, J.J.G. Moreno, K. Emurlaev et al., Anomalous growth of dislocation density in titanium during recovery, Materials Today Communications (2023), doi: <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106298>.

- [44] Zuoyong Zhang, Chuang Deng, Hydrostatic pressure-induced transition in grain boundary segregation tendency in nanocrystalline metals, *Scripta Materialia*, Volume 234, 2023, 115576, ISSN 1359-6462, <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2023.115576>.
- [45] Zhang Jinfei, Yan Jiaohui, Liu Chang, Yao Zitong, Huang Jiabin, Yu Haoyang, Xie Hongxian, Yin Fuxing, Fang Wei, Dislocation behavior in initial stage of plastic deformation for CoCrNi medium entropy alloy, *Journal of Alloys and Compounds*, Volume 943, 2023, 169057, ISSN 0925-8388, <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.169057>.
- [46] ASM Handbook Volume 2. Introduction to Aluminum and Aluminum Alloys
- [47] Rafiq A Siddiqui, Hussein A Abdullah, Khamis R Al-Belushi, Influence of aging parameters on the mechanical properties of 6063 aluminium alloy, *Journal of Materials Processing Technology*, Volume 102, Issues 1–3, 2000, Pages 234-240, ISSN 0924-0136, [https://doi.org/10.1016/S0924-0136\(99\)00476-8](https://doi.org/10.1016/S0924-0136(99)00476-8).
- [48] B. Jelinek, S. Groh, M.F. Horstemeyer, J. Houze, S.G. Kim, G.J. Wagner, A. Moitra, and M.I. Baskes (2012), "Modified embedded atom method potential for Al, Si, Mg, Cu, and Fe alloys", *Physical Review B*, 85(24), 245102. DOI: 10.1103/physrevb.85.245102.
- [49] Phil Attard; On the density of volume states in the isobaric ensemble. *J. Chem. Phys.* 8 December 1995; 103 (22): 9884–9885. <https://doi.org/10.1063/1.469956>
- [50] Balescu, Radu (1975), *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, ISBN 978-0-471-04600-4
- [51] Y. Miyajima, M. Mitsuhashi, S. Hata, H. Nakashima and N. Tsuji, *Mat. Sci. Eng. A* 528 (2010) p.776.
- [52] Sidor, Jurij J., Purnima Chakravarty, János Gy. Bátorfi, Péter Nagy, Qingge Xie, and Jenő Gubicza. 2021. "Assessment of Dislocation Density by Various Techniques in Cold Rolled 1050 Aluminum Alloy" *Metals* 11, no. 10: 1571. <https://doi.org/10.3390/met11101571>
- [53] Hiroki Adachi, Yoji Miyajima, Masugu Sato, Nobuhiro Tsuji, Evaluation of Dislocation Density for 1100 Aluminum with Different Grain Size during Tensile Deformation by Using In-Situ X-ray Diffraction Technique, *MATERIALS TRANSACTIONS*, 2015, Volume 56, Issue 5, Pages 671-678, Released on J-STAGE April 25, 2015, Advance online publication April 10,

2015, Online ISSN 1347-5320, Print ISSN 1345-9678, <https://doi.org/10.2320/matertrans.L-M2015803>

[54] P. Hansson, A. Ahadi, S. Melin, Molecular dynamic modelling of the combined influence from strain rate and temperature at tensile loading of nanosized single crystal Cu beams, *Materials Today Communications*, Volume 31, 2022, 103277, ISSN 2352-4928, <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.103277>.

[55] Stukowski, Alexander & Bulatov, Vasily & Arsenlis, Athanasios. (2012). Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 20. 085007. 10.1088/0965-0393/20/8/085007.

[56] Zhi Hui Sun, Jie Zhang, Gao Xin Xin, Lu Xie, Li Chun Yang, Qing Peng, Tensile mechanical properties of CoCrFeNiTiAl high entropy alloy via molecular dynamics simulations, *Intermetallics*, Volume 142, 2022, 107444, ISSN 0966-9795, <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2021.107444>.

[57] A.V. Lunev, S.V. Starikov, T.N. Aliev, V.I. Tseplyaev, Understanding thermally-activated glide of $1/2\langle 110 \rangle \{110\}$ screw dislocations in UO₂ – A molecular dynamics analysis, *International Journal of Plasticity*, Volume 110, 2018, Pages 294-305, ISSN 0749-6419, <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2018.07.003>.

[58] Md. Shahrier Hasan, Rachell Lee, Wenwu Xu, Deformation nanomechanics and dislocation quantification at the atomic scale in nanocrystalline magnesium, *Journal of Magnesium and Alloys*, Volume 8, Issue 4, 2020, Pages 1296-1303, ISSN 2213-9567, <https://doi.org/10.1016/j.jma.2020.08.014>.

