

# Atomistic simulation of the effect of loading direction on the deformation mechanism of nickel-based superalloy containing a twin boundary

Hamed Heydari <sup>a</sup>, Sayed Hassan Nourbakhsh <sup>a\*</sup>, Mojtaba Zolfaghari <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Department of Mechanical Engineering, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

<sup>b</sup> Department of Mechanical Engineering, Arak University, Arak, Iran

## Original Article

Use your device to scan  
and read the article online



**Citation:** Heydari H, Nourbakhsh S H, Zolfaghari M. Atomistic simulation of the effect of loading direction on the deformation mechanism of nickel-based superalloy containing a twin boundary. *Mechanics of Advanced and Smart Materials*. 2024;4(3):449-478.

 <https://10.61186/masm.4.3.449>

## KEYWORDS

Nickel-based superalloy,  
Twin boundary,  
Molecular dynamics,  
Deformation mechanism.

## ABSTRACT

One way to enhance the mechanical properties of nickel-based superalloys is through controlling the grain boundary structure, especially the twin boundary. Therefore, understanding the role of twin boundary in deformation can assist in engineering strategies aimed at improving the mechanical properties of nickel-based superalloys. In this study, a molecular dynamics model is used to simulate the tensile loading process of a nickel-based superalloy containing a twin boundary under three different loading orientations. The twin boundary is oriented parallel, inclined, and perpendicular to the loading direction. The effects of different orientations on the nucleation and slip mechanisms of dislocations are investigated. The results show that the slip of dislocations in the matrix and precipitate occurs along the {111} plane and when the twin boundary is parallel and perpendicular to the loading direction, the slip planes are inclined to the twin boundary and the dislocation slip process is limited by the twin boundary, but when the twin boundary is inclined to the direction of loading, the dislocations will gradually slip parallel to the twin boundary and cause the twinning deformation and the migration of the twin boundary. Also, crack initiation and growth at the ultimate strain occurred at points on the twin boundary and phase interface.

## Extended Abstract

### 1. Introduction

Nickel-based superalloys are primarily utilized in aerospace and industrial gas turbine engine components, such as combustion chambers and high-pressure turbines, because of their exceptional strength at elevated temperatures. These superalloys typically consist of a two-phase structure: an L12 phase with a  $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al composition and a face-centered cubic (FCC)  $\gamma$ -Ni phase [1]. Twin boundaries are a specific type of grain boundary with high symmetry and low energy. They can limit the movement of dislocations and contribute to the storage of dislocations, which in turn enhances the ductility and toughness of materials. As a result, twin boundaries play a significant role in improving the mechanical properties of materials [2-4].

Ding et al. conducted a molecular dynamics simulation to investigate how different loading orientations affect the dislocation slip mechanism in nickel with twin boundaries. Their findings demonstrate that loading orientation significantly influences the mechanical properties of the material. The material displays good plastic behavior when subjected to loading directions of 90° and 0°. As the strain increases in various loading directions,

\* Corresponding author. Tel.: +989229024861

E-mail address: [Nourbakhsh.SH@sku.ac.ir](mailto:Nourbakhsh.SH@sku.ac.ir)

DOI: <https://10.61186/masm.4.3.449>

Received: May 17, 2024; Received in revised form: June 26, 2024; Accepted: July 03, 2024.

© Author



dislocations move along the slip plane, forming a shear ring [5]. Ding et al. studied how varying grain boundary orientation angles affect the mechanical properties and plastic deformation mechanisms of nickel-based superalloys during tensile loading, using molecular dynamics simulations. They found that the plastic deformation mechanism changes as the angle increases from zero degrees to ninety degrees [6]. Experimental results indicate that the formation of precipitates in nickel-based superalloys consistently corresponds with the twin boundary [7]. Wang et al. explored the impact of twin boundaries that are perpendicular to the loading direction on the plastic deformation and fracture mechanisms of Ni<sub>3</sub>Al precipitates. They employed an atomic cracking model using molecular dynamics for their investigation. The results revealed that as the twin spacing decreased, the strength, ductility, and fracture toughness of nanotwinned Ni<sub>3</sub>Al all increased simultaneously. Twin boundaries effectively hinder the propagation of dislocations, which also serve to blunt cracks [8].

Recent limited studies on nickel-based superalloys have primarily concentrated on macroscale experimental observations. These studies can only capture the material's initial and final states, leaving the atomic evolution process and plastic deformation mechanism unexplored. Therefore, it is crucial to investigate how the twin boundary influences the plastic deformation mechanisms and properties of nickel-based superalloys at the atomic scale. In this study, a molecular dynamics model was employed to simulate the tensile loading process of a nickel-based superalloy that contains a twin boundary. The twin boundary was oriented in three different ways in relation to the loading direction: parallel, inclined, and perpendicular. We investigated how these different orientations of the twin boundary affect the deformation mechanisms, specifically the formation and slipping of dislocations.

## 2. Simulation method and model

The study investigates a nickel-based superalloy consisting of a  $\gamma$  matrix phase (Ni atoms) and a  $\gamma'$  precipitate phase (intermetallic Ni<sub>3</sub>Al) with different lattice parameters ( $a_\gamma = 3.52 \text{ \AA}$ ,  $a_{\gamma'} = 3.572 \text{ \AA}$ ). The  $\gamma'$  volume fraction is 72.9%, mimicking real Ni-based superalloys. A 3D model of the Ni/Ni<sub>3</sub>Al superalloy with a twin boundary was created using ATOMSK, where lattice mismatch ( $\delta = 1.5\%$ ) induces coherency strain at the  $\gamma/\gamma'$  interface. The model was energy-minimized before tensile simulation to relieve internal stresses. The crystal orientations were set along [11-2] (x), [-110] (y), and [111] (z), with the twin boundary symmetrically constructed on the (111) plane. Twin boundaries were rotated to align parallel, inclined, and perpendicular to the loading direction (z), figure 1. Molecular dynamics (MD) simulations were performed using LAMMPS with an embedded-atom method (EAM) potential for Ni-Al. Periodic boundary conditions were applied along x and y, while tensile deformation was imposed along z at a strain rate of  $10^9 \text{ s}^{-1}$  (300 K, NVT ensemble). The system contained 1.4–1.5 million atoms, depending on twin orientation. Dislocation evolution and plastic deformation were analyzed using OVITO, employing dislocation analysis (DXA), common neighbor analysis (CNA), and surface mesh analysis to visualize defects and cracks. The twin boundary's role in deformation mechanisms under varying loading directions was examined.

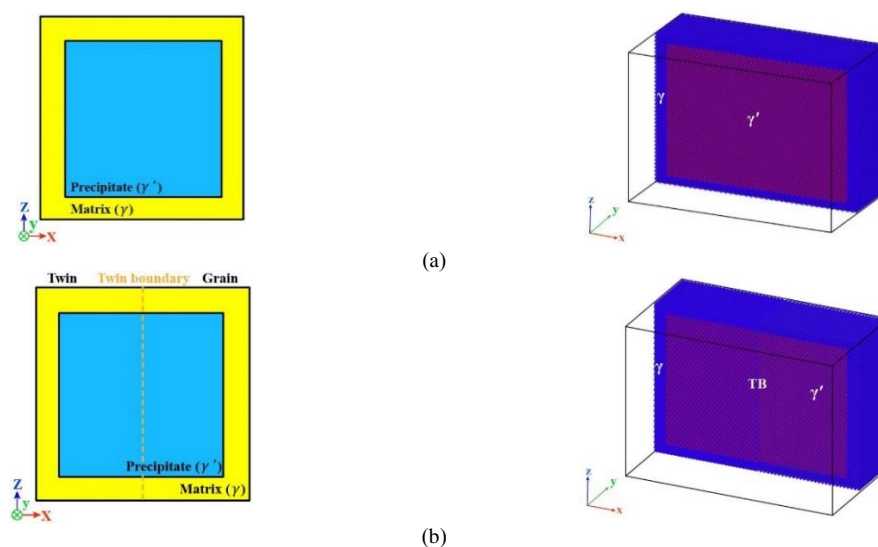


Figure 1. Geometric and atomic cross-sectional model of the nickel-based superalloy sample (a) without a twin boundary and with twin boundaries in (b) parallel

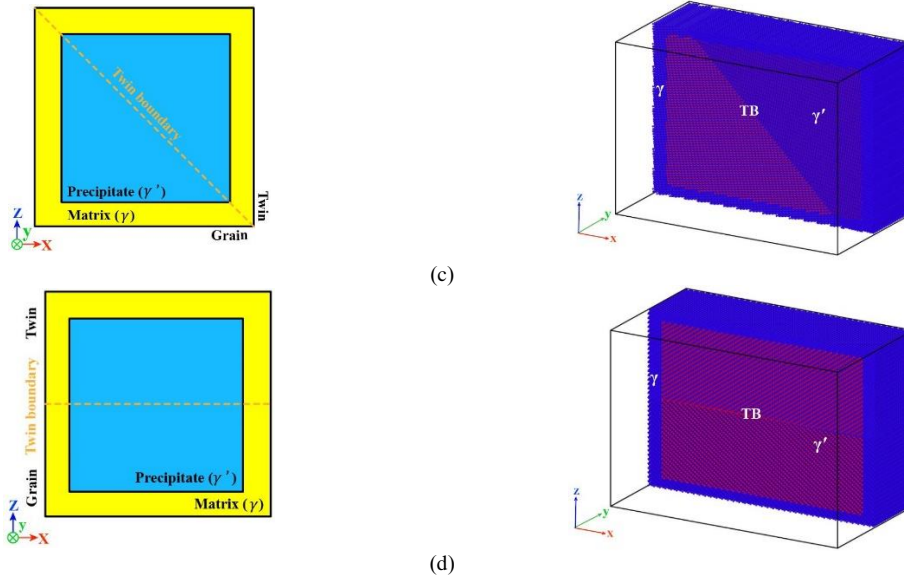


Figure 1. Geometric and atomic cross-sectional model of the nickel-based superalloy sample (c) inclined, and (d) perpendicular orientations relative to the loading direction.

Figure 1: Geometric and atomic cross-sectional model of the nickel-based superalloy sample (a) without a twin boundary and with twin boundaries in (b) parallel, (c) inclined, and (d) perpendicular orientations relative to the loading direction.

### 3. Results and Discussion

#### 3.1 Deformation mechanism of the sample without a twin boundary

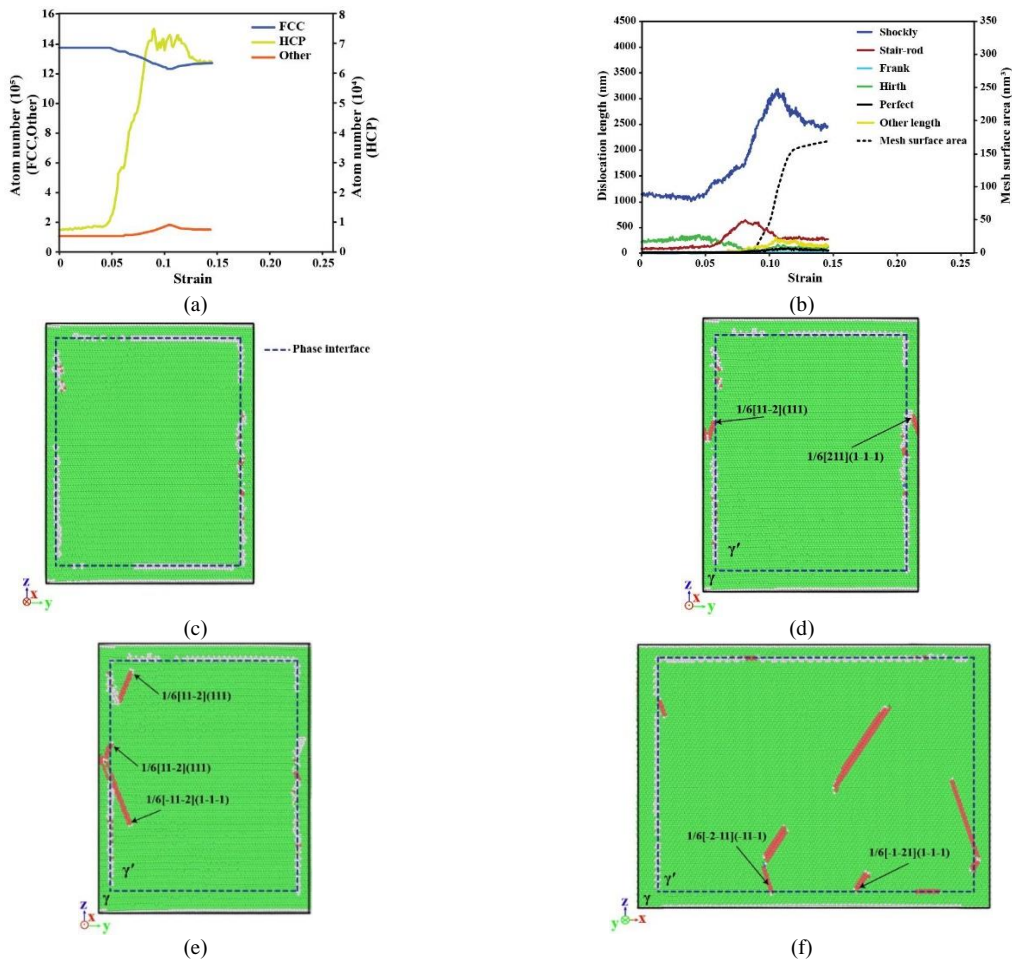


Figure 2. (a) Variation in atom count versus strain, (b) Evolution of dislocation lengths versus strain, Cross-sectional snapshots of dislocation development and deformation at: (c)  $\epsilon=0.02702$ , (d)  $\epsilon=0.04837$ , (e)  $\epsilon=0.0549$ , (f)  $\epsilon=0.061$  (FCC atoms removed for dislocation clarity),

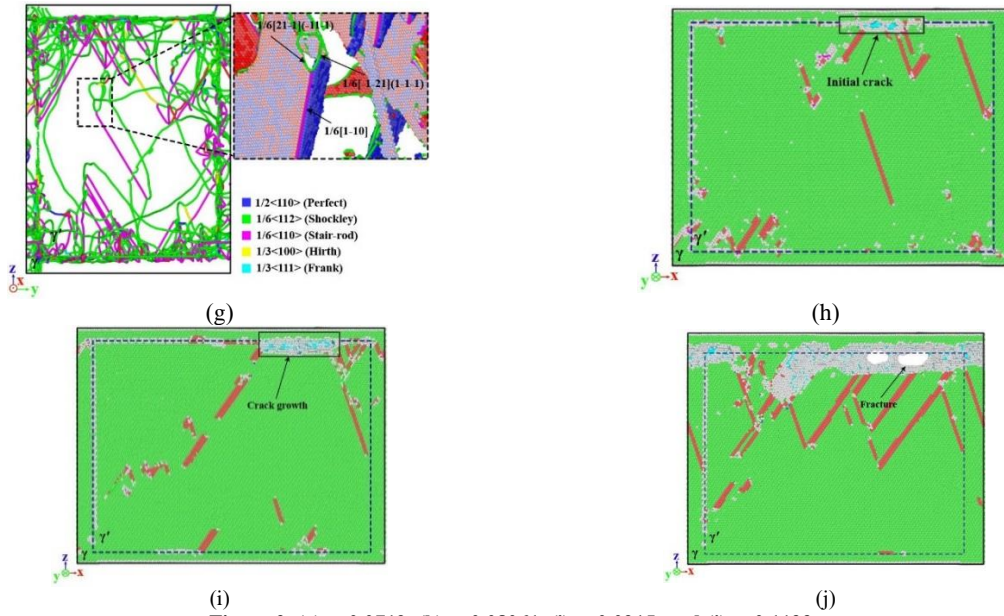


Figure 2. (g)  $\epsilon=0.0719$ , (h)  $\epsilon=0.08061$ , (i)  $\epsilon=0.0915$ , and (j)  $\epsilon=0.1133$ .

Figure 2: (a) Variation in atom count versus strain, (b) Evolution of dislocation lengths versus strain, Cross-sectional snapshots of dislocation development and deformation at: (c)  $\epsilon=0.02702$ , (d)  $\epsilon=0.04837$ , (e)  $\epsilon=0.0549$ , (f)  $\epsilon=0.061$  (FCC atoms removed for dislocation clarity), (g)  $\epsilon=0.0719$ , (h)  $\epsilon=0.08061$ , (i)  $\epsilon=0.0915$ , and (j)  $\epsilon=0.1133$ .

### 3.2. Deformation mechanism of the sample containing a twin boundary parallel to the loading axis

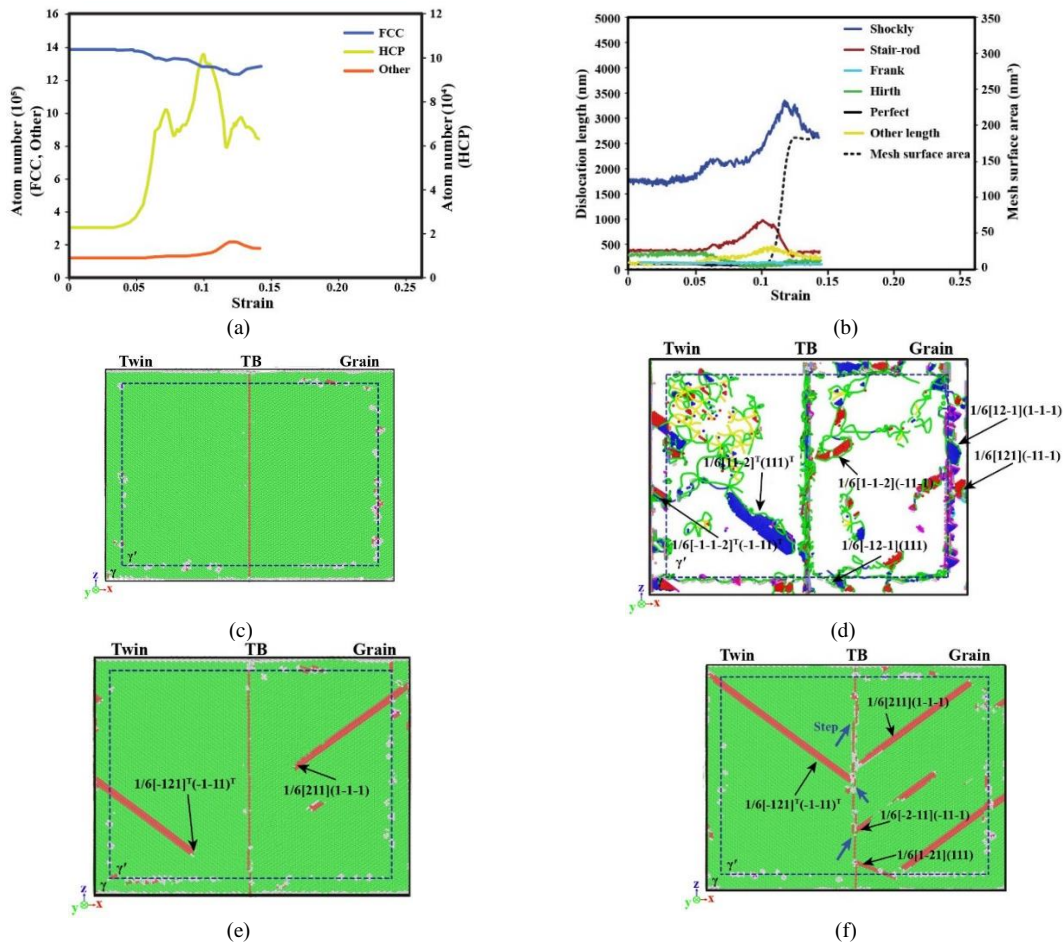


Figure 3 (a) Variation in atom count versus strain, (b) Evolution of dislocation lengths versus strain, 2D cross-sectional snapshots of dislocation development and deformation at: (b)  $\epsilon=0.027$ , (d)  $\epsilon=0.04873$  (FCC atoms removed for dislocation clarity), (e)  $\epsilon=0.058$ , (f)  $\epsilon=0.06527$

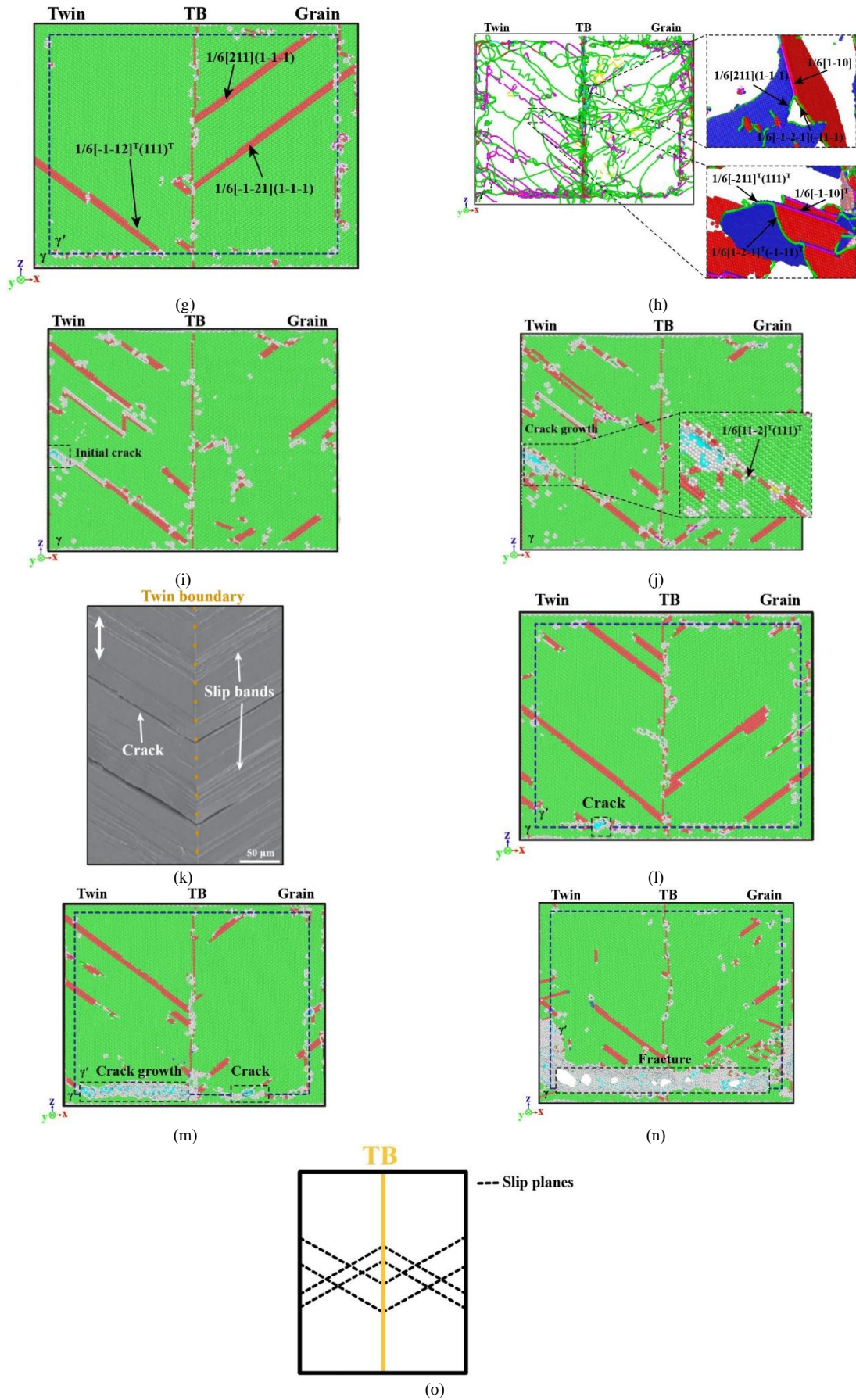


Figure 3 (g)  $\epsilon=0.0831$  (FCC atoms removed), (h)  $\epsilon=0.09138$ , (i)  $\epsilon=0.10704$ , (j)  $\epsilon=0.1113$ , (k) Dislocation slip planes and cracks in FCC material, (l)  $\epsilon=0.1083$ , (m)  $\epsilon=0.1187$ , (n)  $\epsilon=0.1283$ , (o) Geometric model of slip planes in the sample

Figure 3 (a) Variation in atom count versus strain, (b) Evolution of dislocation lengths versus strain, 2D cross-sectional snapshots of dislocation development and deformation at: (b)  $\epsilon=0.027$ , (d)  $\epsilon=0.04873$  (FCC atoms removed for dislocation clarity), (e)  $\epsilon=0.058$ , (f)  $\epsilon=0.06527$ , (g)  $\epsilon=0.0831$  (FCC atoms removed), (h)  $\epsilon=0.09138$ , (i)  $\epsilon=0.10704$ , (j)  $\epsilon=0.1113$ , (k) Dislocation slip planes and cracks in FCC material, (l)  $\epsilon=0.1083$ , (m)  $\epsilon=0.1187$ , (n)  $\epsilon=0.1283$ , (o) Geometric model of slip planes in the sample.

**3.3. Deformation mechanism of the sample containing an inclined twin boundary relative to the loading axis**

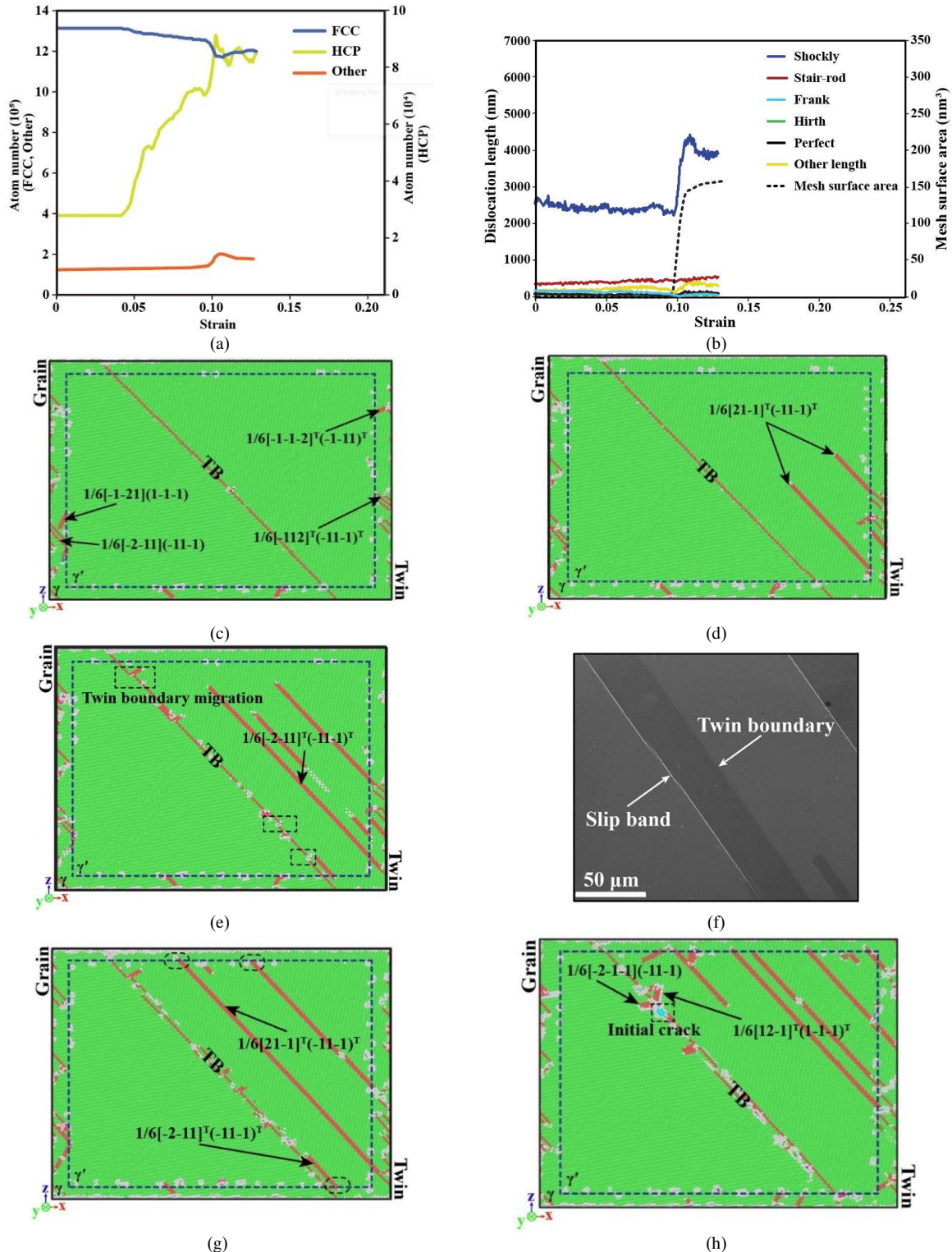


Figure 4 (a) Variation in atom count versus strain, (b) Evolution of dislocation lengths versus strain, 2D cross-sectional snapshots of dislocation development and deformation at: (c)  $\epsilon=0.04578$ , (d)  $\epsilon=0.05528$ , (e)  $\epsilon=0.06$ , (f) showing slip lines parallel to the twin boundary in nickel-based superalloy, (g)  $\epsilon=0.07127$ , (h)  $\epsilon=0.095$

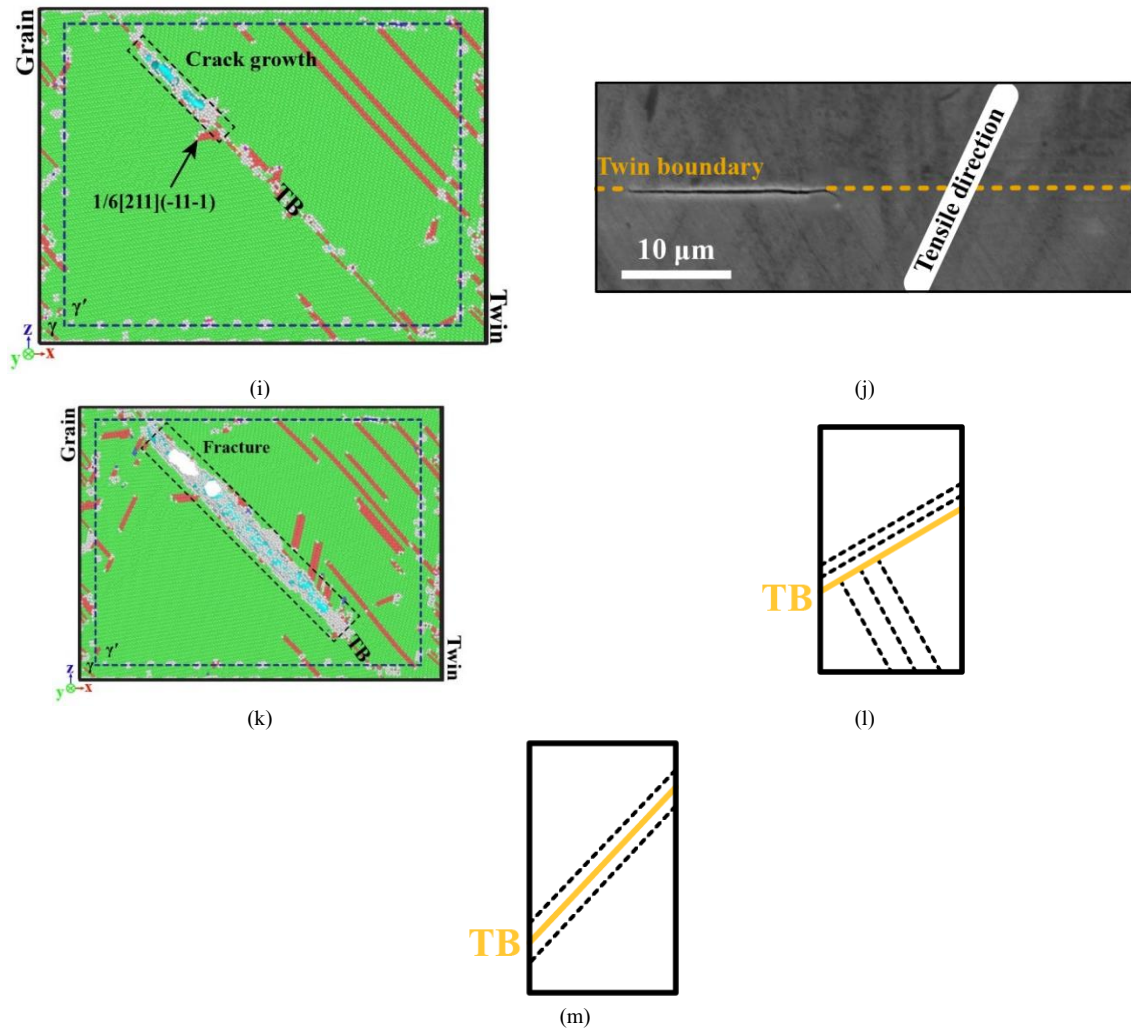


Figure 4 (i)  $\epsilon=0.1015$ , (j) illustrating crack initiation and propagation along twin boundary in nickel-based superalloy, (k)  $\epsilon=0.1080$ , (l) and (m) Geometric model of slip planes in the sample.

Figure 4: (a) Variation in atom count versus strain, (b) Evolution of dislocation lengths versus strain, 2D cross-sectional snapshots of dislocation development and deformation at: (c)  $\epsilon=0.04578$ , (d)  $\epsilon=0.05528$ , (e)  $\epsilon=0.06$ , (f) showing slip lines parallel to the twin boundary in nickel-based superalloy, (g)  $\epsilon=0.07127$ , (h)  $\epsilon=0.095$ , (i)  $\epsilon=0.1015$ , (j) illustrating crack initiation and propagation along twin boundary in nickel-based superalloy, (k)  $\epsilon=0.1080$ , (l) and (m) Geometric model of slip planes in the sample.

### 3.4. Deformation mechanism of the sample containing a twin boundary perpendicular to the loading axis

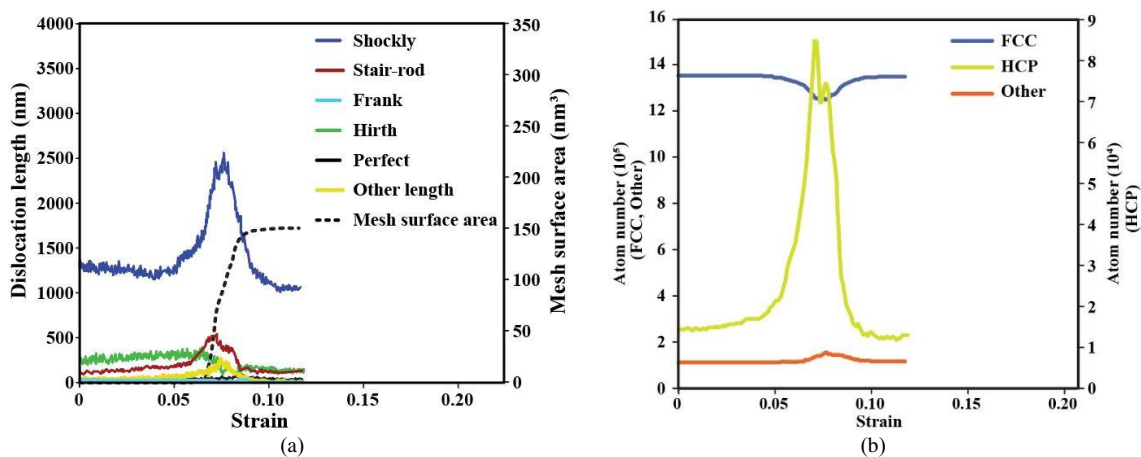


Figure 5 (a) Evolution of dislocation lengths versus strain, (b) Variation in atom count versus strain, 2D cross-sectional snapshots of dislocation development and deformation

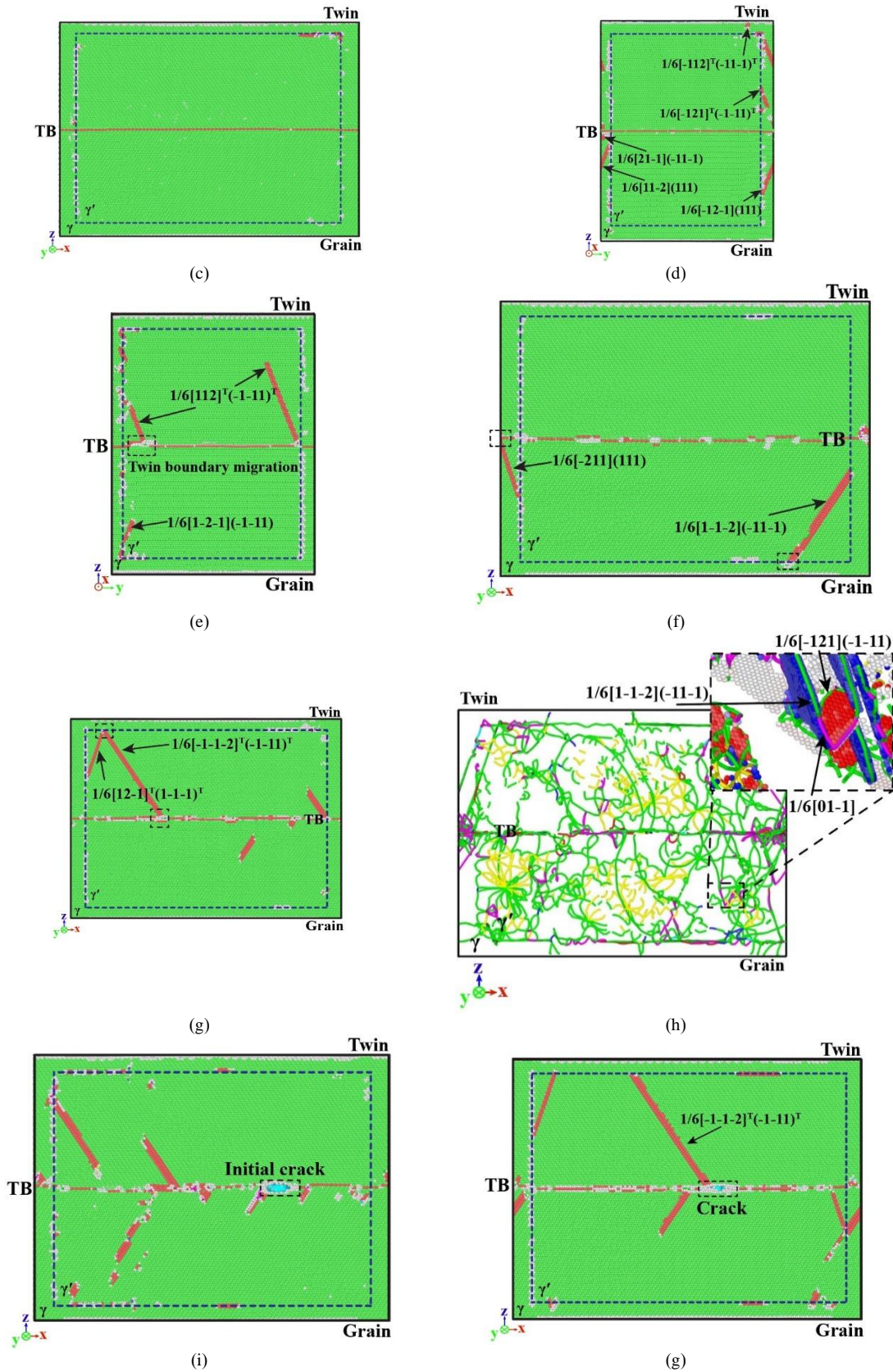
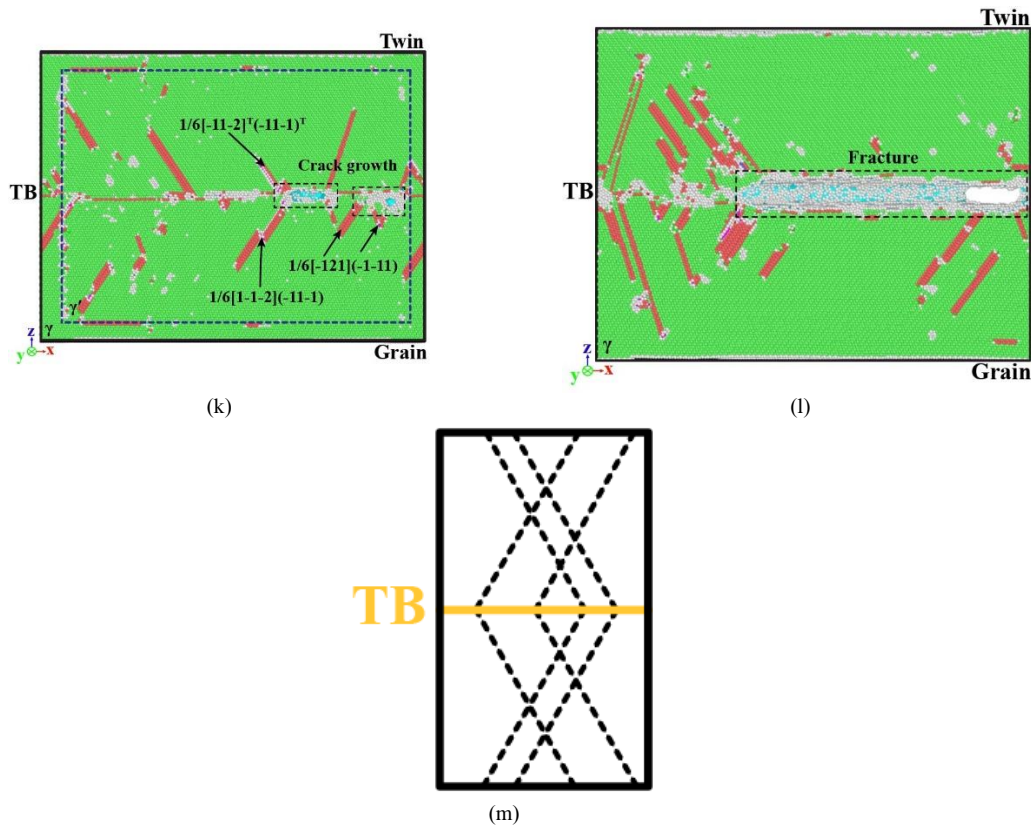


Figure 5 (c)  $\epsilon=0.02833$ , (d)  $\epsilon=0.05186$ , (e)  $\epsilon=0.05446$ , (f)  $\epsilon=0.05838$ , (g)  $\epsilon=0.059$  (with FCC atoms removed for dislocation clarity), (h)  $\epsilon=0.061$ , (i)  $\epsilon=0.06536$ , (g)  $\epsilon=0.0671$



**Figure 5** (a) Evolution of dislocation lengths versus strain, (b) Variation in atom count versus strain, 2D cross-sectional snapshots of dislocation development and deformation at: (c)  $\epsilon=0.02833$ , (d)  $\epsilon=0.05186$ , (e)  $\epsilon=0.05446$ , (f)  $\epsilon=0.05838$ , (g)  $\epsilon=0.059$  (with FCC atoms removed for dislocation clarity), (h)  $\epsilon=0.061$ , (i)  $\epsilon=0.06536$ , (g)  $\epsilon=0.0671$ , (k)  $\epsilon=0.069$ , (l)  $\epsilon=0.0862$ , (m) Geometric model of slip planes in the sample.

Figure 5: (a) Evolution of dislocation lengths versus strain, (b) Variation in atom count versus strain, 2D cross-sectional snapshots of dislocation development and deformation at: (c)  $\epsilon=0.02833$ , (d)  $\epsilon=0.05186$ , (e)  $\epsilon=0.05446$ , (f)  $\epsilon=0.05838$ , (g)  $\epsilon=0.059$  (with FCC atoms removed for dislocation clarity), (h)  $\epsilon=0.061$ , (i)  $\epsilon=0.06536$ , (g)  $\epsilon=0.0671$ , (k)  $\epsilon=0.069$ , (l)  $\epsilon=0.0862$ , (m) Geometric model of slip planes in the sample.

#### 4. Conclusion

This study employed molecular dynamics simulations to investigate the tensile deformation mechanisms of a nickel-based superalloy containing twin boundaries with three distinct orientations relative to the loading direction. Key findings reveal that dislocation slip dominates deformation in samples without twin boundaries and those with boundaries parallel/perpendicular to loading, while twinning-induced plasticity becomes the primary mechanism in samples with inclined twin boundaries. The number of active slip systems varies, with four systems activated in inclined cases versus three in others. Yield strain increases in the perpendicular twin configuration but decreases in parallel/inclined cases, while ductility improves in parallel/inclined orientations but reduces in perpendicular ones. Strengthening mechanisms differ significantly: phase interfaces and sessile dislocations operate in all cases, but twin boundaries contribute additional strengthening in parallel/perpendicular orientations. Crack propagation paths are orientation-dependent, with cracks following slip planes and phase interfaces in parallel configurations but propagating along twin boundaries in inclined/perpendicular cases. These results demonstrate how twin boundary orientation critically governs deformation behavior, mechanical properties, and failure modes in nickel-based superalloys.



## شبیه‌سازی اتمی تأثیر جهت بارگذاری بر مکانیزم تغییر شکل سوپر آلیاژ پایه نیکل حاوی مرز دوقلوبی

حامد حیدری الف، سید حسن نوربخش ب\*، مجتبی ذوالفقاری پ

الف دانشجوی دکترا، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران، [hamedheydari9922@gmail.com](mailto:hamedheydari9922@gmail.com)

ب دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران، [Nourbakhsh.SH@sku.ac.ir](mailto:Nourbakhsh.SH@sku.ac.ir)

پ دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اراک، اراک، ایران، [m-zolfaghari@araku.ac.ir](mailto:m-zolfaghari@araku.ac.ir)

چکیده	واژگان کلیدی
یکی از راه‌های افزایش خواص مکانیکی سوپرآلیاژهای پایه نیکل از طریق کنترل ساختار مرزدانه بخصوص مرز دوقلوبی حاصل می‌شود، بنابراین درک نقش مرز دوقلوبی در تغییر شکل می‌تواند به استراتژی‌های مهندسی مرز دانه با هدف افزایش خواص مکانیکی سوپرآلیاژهای پایه نیکل کمک کند. در واقع زمانی که مرز دوقلوبی در سوپر آلیاژ پایه نیکل باعث افزایش چقرمگی شده در موادی مانند بال هواپیما، ارابه فرود کاربرد دارد اما زمانی که تنش تسلیم را افزایش دهد در پرها و دیسک‌های توربین کاربرد دارد. برای این مهم در این پژوهش، یک مدل دینامیک مولکولی برای شبیه‌سازی فرآیند بارگذاری کششی سوپرآلیاژ پایه نیکل حاوی مرز دوقلوبی تحت سه جهت‌گیری مختلف نسبت به جهت بارگذاری استفاده شده است. مرز دوقلوبی نسبت به جهت بارگذاری به شکل موازی، مایل و عمود قرار داده شده است. اثرات جهت‌گیری‌های مختلف بر روی مکانیزم‌های ایجاد و لغزش نابجایی‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد مقادیر کرنش‌های تسلیم به ترتیب ۰/۰۴۷۹، ۰/۰۴۷۸، ۰/۰۴۵۳ و ۰/۰۵۰۱ برای نمونه‌های بدون مرز دوقلوبی، حاوی مرز دوقلوبی موازی، مایل و عمود به جهت بارگذاری هستند. مرز دوقلوبی عمود منجر به افزایش کرنش تسلیم شده اما مرز دوقلوبی مایل منجر به کاهش کرنش تسلیم نمونه نسبت به نمونه بدون مرز دوقلوبی شده است. همچنین کرنش‌های نهایی برای نمونه‌های بدون دوقلوبی، موازی، مایل و عمود نیز به ترتیب ۰/۰۸۰۶۱، ۰/۱۰۷۰۴، ۰/۱۰۹۵، ۰/۰۶۵۳۵ می‌باشند. که به ترتیب کرنش‌های نهایی (موازی < مایل < بدون مرز دوقلوبی < عمود) هستند. همچنین شکل‌گیری و رشد ترک در کرنش نهایی در نقاطی در مرز دوقلوبی و سطح مشترک فازی رخ داده است.	سوپر آلیاژ پایه نیکل، مرز دوقلوبی، دینامیک مولکولی، مکانیزم تغییر شکل.
	تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۲/۲۸
	تاریخ بازنگری: ۱۴۰۳/۰۴/۰۶
	تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۴/۱۳

### ۱- مقدمه

سوپرآلیاژهای پایه نیکل به دلیل استحکام ویژه در دماهای بالا بیشتر در قطعات پیش‌رانه هواپضا و توربین‌های گاز صنعتی مانند محفظه احتراق، توربین فشار بالا استفاده می‌شوند. که از ساختارهای L12 دو فازی با ترکیب  $\gamma$ -Ni<sub>3</sub>Al و ساختار FCC با فاز  $\gamma$ -Ni تشکیل شده است [۱]. سوپرآلیاژهای پایه نیکل بارهای حرارتی و مکانیکی پیچیده را برای مدت طولانی تحمل می‌کنند، که این امر مستلزم داشتن خواص مکانیکی عالی است. هم‌چنین طول عمر این سوپرآلیاژها به شدت به ویژگی‌های ریزساختاری آن‌ها وابسته و محدود است [۲]. استحکام ماده معمولاً با کاهش اندازه دانه یا اندازه نمونه افزایش می‌یابد. وقتی ماده به مقیاس

نانومتری می‌رسد، نسبت اتم‌های مرزدانه افزایش می‌یابد و برتری نانومواد فلزی باعث می‌شود که کاربردهای گسترده‌ای با ساختار مرز دانه<sup>۱</sup> داشته باشد. بنابراین، درک تأثیر مرزدانه بر ویژگی‌های نانومواد بسیار مهم است [۳]. مرز دوقلویی<sup>۲</sup> یک نوع مرز دانه است که به دلیل تقارن بالا و انرژی کم می‌تواند حرکت نابجایی‌ها را محدود کند و در ذخیره‌سازی نابجایی‌ها نقش داشته باشد و در نتیجه شکل‌پذیری<sup>۳</sup> و چقرمگی ماده را بهبود بخشد. در واقع مرز دوقلویی می‌تواند خواص مکانیکی مواد را بهبود ببخشد [۴-۶]. مرز دوقلویی می‌تواند مانند مرزدانه مانعی برای حرکت نابجایی ایجاد کند تا استحکام را افزایش دهد [۷] و همچنین می‌تواند به‌عنوان یک صفحه لغزش عمل کند تا نابجایی‌ها را در خود جای دهد و یا به آن نفوذ کنند و در نتیجه شکل‌پذیری را بهبود ببخشد [۸]. با توجه به مفهوم شبکه تطبیقی<sup>۴</sup> که به‌طور گسترده برای مشخص کردن مرزدانه‌ها استفاده می‌شود، مرزهای دوقلویی با  $\sum 3^n$  ( $n=1,2,3$ ) مشخص می‌شوند [۹].

هائو و همکاران رفتار مکانیکی نانوسیم‌های Al، Ni، Cu، Au و Ag را با یک مرز دوقلویی موازی با محور طولی آن‌ها با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان می‌دهد که کاهش فاصله مرزهای دوقلویی منجر به افزایش تنش تسلیم آن‌ها شده است. همچنین اثر استحکام‌دهی مرز دوقلویی وابسته به مورفولوژی سطحی<sup>۵</sup> است. مکانیزم‌های تغییر شکل پلاستیک این نانو سیم‌ها به‌طور قابل توجهی تحت تأثیر نسبت  $\gamma_{sf}/\gamma_{usf}$  (انرژی نقص چیدن<sup>۶</sup>  $\gamma_{sf}$ ) و انرژی نقص چیدن ناپایدار<sup>۷</sup> ( $\gamma_{usf}$ ) و فاصله بین مرز دوقلویی قرار دارند [۱۰]. استوکوفسکی و همکاران تأثیر مرزهای دوقلویی را بر رفتار تغییر شکل نانوبلورهای مس و پالادیم با استفاده از شبیه‌سازی اتمی آزمایش کشش مطالعه کردند. نتایج حاکی از آن است که مس به دلیل وجود مرزهای دوقلویی سخت شدن<sup>۸</sup> را نشان می‌دهد، اما پالادیم اثر معکوس را نشان می‌دهد [۱۱]. ژانگ و همکاران شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی مکانیزم‌های تغییر شکل پلاستیک در مس چند بلوری<sup>۹</sup> حاوی مرزهای دوقلویی در طول آزمایش کشش را انجام دادند. نتایج نشان می‌دهد که نمونه حاوی مرز دوقلویی موازی و عمود بر جهت بارگذاری دچار سخت‌شوندگی شده که ناشی از واکنش بین نابجایی‌ها و مرز دوقلویی بوده که باعث محدود شدن حرکت نابجایی‌ها می‌شود در حالی که نمونه حاوی مرز دوقلویی مایل به جهت بارگذاری نرم شده<sup>۱۰</sup> که ناشی از عدم برهم‌کنش نابجایی‌ها با مرز دوقلویی بوده و فعالیت نابجایی‌های در امتداد صفحات موازی با صفحه دوقلویی است [۱۲]. ژائو و همکاران مکانیزم‌های تغییر شکل در مس نانودوقلویی را با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان می‌دهد که مکانیزم تغییر شکل غالب به‌طور پویا از لغزش به مهاجرت مرز دوقلویی و سپس به برهم‌کنش لغزش-دوقلویی منتقل می‌شود، زیرا جهت‌گیری مرز دوقلویی از افقی به مایل و سپس به جهت عمود تغییر می‌کند [۱۳]. رضایی و همکاران تأثیر حرکت مرز دوقلویی و برهم‌کنش نابجایی-دوقلویی را بر رفتار مکانیکی در فلزات FCC حاوی مرزهای دوقلویی در جهت‌های مختلف را با استفاده از دینامیک مولکولی بررسی کردند. نتایج نشان می‌دهد که بارگذاری برشی مرزهای دوقلویی در امتداد  $\langle 112 \rangle$  منجر به حرکت انتقالی مرز دوقلویی، دوقلویی شدن<sup>۱۱</sup> یا دوقلو زدایی<sup>۱۲</sup> و سخت شدن می‌شود. از سوی دیگر، بارگذاری در امتداد  $\langle 110 \rangle$  منجر به حرکت نوسانی<sup>۱۳</sup> مرز دوقلویی بدون سخت شدن می‌شود. به‌طور خاص، تأثیر جهت‌گیری مرز دوقلویی نسبت به جهت بارگذاری از حالت عمود به صفحه دوقلویی به سمت بارگذاری ترکیبی برشی-عمود، منجر به انتقال مکانیزم تغییر شکل غالب از ایجاد-لغزش نابجایی به حرکت مرز دوقلویی شده است [۱۴].

دینگ و همکاران تأثیر جهت‌گیری‌های مختلف بارگذاری بر مکانیزم لغزش نابجایی را در نیکل حاوی مرز دوقلویی را با

<sup>1</sup> grain boundary  
<sup>2</sup> twin boundary  
<sup>3</sup> ductility  
<sup>4</sup> coincident site lattice  
<sup>5</sup> surface morphology  
<sup>6</sup> stacking fault energy  
<sup>7</sup> unstable stacking fault energy  
<sup>8</sup> hardening  
<sup>9</sup> Polycrystal  
<sup>10</sup> soft  
<sup>11</sup> twinning  
<sup>12</sup> detwinning  
<sup>13</sup> oscillatory

استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. نتایج نشان می دهد که جهت بارگذاری تأثیر زیادی بر خواص مکانیکی ماده دارد. ماده رفتار پلاستیک خوبی را در جهت های بارگذاری نود درجه و صفر درجه نشان می دهد. برای جهات مختلف بارگذاری، با افزایش کرنش، نابجایی در امتداد صفحه لغزش به شکل یک حلقه برشی<sup>۱۴</sup> می لغزد [۱۱۵]. لی و همکاران به روش تجربی مکانیزم ایجاد ترک در مس حاوی مرز دوقلویی با جهت گیری موازی، عمود و مایل به جهت بارگذاری را مورد بررسی قرار دادند. در این پژوهش مشخص شد که رفتار ایجاد ترک به شدت به جهت گیری مرز دوقلویی با جهت بارگذاری مرتبط است، و هنگامی که مرز دوقلویی موازی یا عمود بر جهت بارگذاری است، ترکها ترجیحاً در امتداد صفحات لغزش ایجاد شده اما هنگامی که مرز دوقلویی در یک زاویه مایل به جهت بارگذاری است، ترک در امتداد مرز دوقلویی ایجاد شده است [۱۱۶]. لی و همکاران خواص مکانیکی و رفتار تکامل ریزساختار سوپرآلیاژ پایه نیکل در جهت گیری کریستالی [۰۰۱]، [۰۱۱] و [۱۱۱] را توسط دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. نتایج نشان داد که جهت کریستالی [۱۱۱] بهترین خواص مکانیکی را دارد. هم چنین نابجایی لومر-کاترل

<sup>۱۵</sup> در فاز ۲' عامل مهمی است که بر استحکام آن تأثیر می گذارد. مکانیزم تغییر شکل سوپرآلیاژ پایه نیکل غالباً لغزش نابجایی است [۱۱۷]. دانگ و همکاران شبیه سازی اتمی مکانیزم های تغییر شکل سوپرآلیاژ پایه نیکل سری Ni-Al چند بلوری را بر اساس اندازه دانه، نرخ کرنش و دما انجام دادند. نتایج نشان می دهد که تغییر شکل پلاستیک سوپرآلیاژ نانوبلور Ni-Al توسط نقص چیدن و تبدیل فاز FCC به HCP کنترل می شود. هم چنین تنش جریان و مدول یانگ هر دو به شدت تحت تأثیر دما قرار گرفته اند و افزایش دما انتشار و مهاجرت مرز دانه را تسریع بخشیده است [۱۱۸]. دینگ و همکاران اثرات زاویه های مختلف جهت گیری مرز دانه را بر خواص مکانیکی و مکانیزم تغییر شکل پلاستیک سوپر آلیاژ پایه نیکل تحت بارگذاری کششی را با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. مکانیزم تغییر شکل پلاستیک با افزایش زاویه از صفر درجه به نود درجه تغییر می کند. هنگامی که زاویه صفر درجه است، مکانیزم تغییر شکل پلاستیک لایه های Ni و Ni<sub>3</sub>Al هر دو تحت سلطه نقص چیدن ناشی از نابجایی های جزئی شاکلی<sup>۱۶</sup> هستند. هنگامی که زاویه سی، شصت و هشتاد درجه است، مکانیزم تغییر شکل پلاستیک لایه های Ni و Ni<sub>3</sub>Al به ترتیب تجزیه نقص چیدن به مرزدانه دوقلویی و تکثیر نقص چیدن است. هنگامی که زاویه نود درجه است، مکانیزم تغییر شکل پلاستیک هر دو لایه Ni و Ni<sub>3</sub>Al توسط رشد ناحیه دوقلویی تحت سلطه قرار می گیرد [۱۱۹]. وانگ و همکاران اثر محل نقص حفره<sup>۱۷</sup> را در تک کریستال سوپرآلیاژ پایه نیکل با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. نتایج نشان داده که تغییر شکل پلاستیک در مدل ها توسط نابجایی های جزئی شاکلی و نابجایی نرده ای<sup>۱۸</sup> انجام شده است. هم چنین خواص مکانیکی فصل مشترک فازی<sup>۱۹</sup> Ni/Ni<sub>3</sub>Al تحت تأثیر برهم کنش بین نقص حفره و فصل مشترک فازی قرار می گیرد و بر رفتار ماده تحت تنش تأثیر می گذارد [۲۰].

گائو و همکاران اثرات مرز دوقلویی عمود بر جهت بارگذاری را بر خواص کششی و مکانیزم تغییر شکل نانوستون های آلیاژ Ni-Co با استفاده از شبیه سازی اتمی مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داده که هنگامی که تعداد مرزهای دوقلویی از دو لایه بیشتر شده، تأثیر مرز دوقلویی بر نابجایی آشکار شده و مهاجرت و واکنش مرزهای دوقلویی منجر به افزایش تعداد نابجایی ها و در نتیجه منجر به افزایش استحکام نانوستون ها شده است. هم چنین با افزایش نرخ کرنش، حالت تغییر شکل اصلی نانوستون از واکنش نابجایی و مرزهای دوقلویی به مهاجرت مرز دوقلویی تغییر کرده است [۲۱]. ژانگ و همکاران تأثیر فاصله بین مرزهای دوقلویی عمود بر جهت بارگذاری را بر رفتار تغییر شکل کششی تک بلور آلیاژ Al<sub>0.1</sub>CoCrFeNi با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داده که با کاهش فاصله بین مرزهای دوقلویی، مکانیزم تغییر شکل به تدریج از لغزش نابجایی همراه با نقص هایی مانند نقص چیدن و دوقلویی های ثانویه به حالت تغییر شکل انتقال فاز آمورف<sup>۲۰</sup> تبدیل می شود [۲۱]. فو و همکاران اثرات سطح مشترک عمود بر جهت بارگذاری را بر رفتار انتشار ترک بین لایه های آلیاژ TiAl تحت بارگذاری کششی تک محوری با روش دینامیک مولکولی را مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان می دهد که سطح مشترک از نوع مرز دوقلویی که عمود

<sup>14</sup> shear ring

<sup>15</sup> Lomer-Cottrell

<sup>16</sup> Shockley partial dislocations

<sup>17</sup> void

<sup>18</sup> Stair-rod

<sup>19</sup> Phase interface

<sup>20</sup> amorphous phase transition

بر جهت بارگذاری است به طور مؤثر استحکام کششی ماده را بهبود بخشیده است. هم‌چنین تغییر شکل دوقلویی تأثیر مثبتی بر افزایش چقرمگی شکست دارد [۲۲]. تران اثرات اندازه دانه و فاصله بین مرزهای دوقلویی بر روی خواص کششی آلیاژ نیکل-مس چند بلور را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار داد. نتایج نشان داده که مرزهای دوقلویی به طور قابل توجهی تشکیل و انتشار نقص چیدن را محدود کرده‌اند. هم‌چنین استحکام کششی با افزایش اندازه دانه و فاصله بین مرزهای دوقلویی افزایش می‌یابد که با رابطه معکوس هال-پچ<sup>۲۱</sup> مطابقت دارد [۲۳].

مرزهای دوقلویی در فلزات و آلیاژها برای کارایی مواد در جنبه‌های مختلف مفید هستند [۲۴-۲۶]. سوپرآلیاژهای چند بلوری<sup>۲۲</sup> پایه نیکل ذاتاً دارای نسبت بالایی از مرزهای دوقلویی هستند، و این به دلیل انرژی نقص چیدن پایین آن‌ها است [۲۷-۲۹]. نتایج تجربی نیز نشان می‌دهد که ایجاد رسوب در سوپرآلیاژ پایه نیکل همیشه در یک تناظر یک به یک با مرز دوقلویی می‌باشد [۲۹]. بوروویکوف و همکاران مکانیزم ایجاد و رشد دوقلویی در سوپرآلیاژهای پایه نیکل در محدوده دمایی ۶۰۰-۸۰۰ درجه سانتی‌گراد را از طریق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. نتایج این پژوهش حاکی از آن است که یک مکانیزم جدید ایجاد و رشد دوقلویی معرفی شده که از طریق نفوذ دو نابجایی لبه‌ی (110) به رسوب و سپس تبدیل مرز آنتی فاز<sup>۲۳</sup> به نقص چیدن ذاتی<sup>۲۴</sup> و در ادامه با حرکت نابجایی‌ها مرز دوقلویی ایجاد و رشد می‌کند [۳۰]. استینویل و همکاران یک معیار ترکیبی الاستیک-پلاستیک در مقیاس دانه برای شناسایی محل‌های شروع ترک خستگی در یک سوپرآلیاژ چندبلوری پایه نیکل حاوی مرز دوقلویی ارائه دادند. نتایج نشان داد مناطق نزدیک به سطح دوقلویی مکان‌های غالب برای شروع ترک هستند [۳۱]. استین و همکاران به بررسی شروع ترک، در یک سوپرآلیاژ پایه نیکل شامل مرزهای دوقلویی پرداختند، که نتایج نشان می‌دهد مرزهای دوقلویی موانعی را برای حرکت نابجایی ایجاد می‌کنند [۳۲]. ژانگ و همکاران در یک پژوهش آزمایشگاهی خصوصیات ریزساختاری، مکانیکی و شکست همراه با محاسبات تئوری تابعی چگالی<sup>۲۵</sup> را بر روی سوپرآلیاژ پایه نیکل حاوی مرز دوقلویی را مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داده که مرز دوقلویی باعث فعالیت‌های نابجایی زود هنگام و محلی‌سازی کرنش در طول بارگذاری مکانیکی می‌شود، که به‌عنوان محلی برای شروع ترک عمل می‌کند [۳۳]. وانگ و همکاران نقش مرزهای دوقلویی عمود بر جهت بارگذاری را در مکانیزم‌های تغییر شکل پلاستیک و شکست رسوب Ni<sub>3</sub>Al را از طریق یک مدل ترک اتمی با استفاده از دینامیک مولکولی بررسی کردند. نتایج نشان داد که استحکام، شکل‌پذیری و چقرمگی شکست Ni<sub>3</sub>Al نانودوقلویی به‌طور همزمان با کاهش فاصله دوقلویی‌ها افزایش می‌یابد. مرزهای دوقلویی مانع از انتشار نابجایی‌ها می‌شوند. هم‌چنین نابجایی‌ها به‌عنوان مکانیزمی برای کند کردن<sup>۲۶</sup> ترک عمل می‌کنند [۳۴].

بنابراین درک ناکافی از چگونگی تأثیر ریزساختار آلیاژ بر تغییر شکل و شکست، پیش‌بینی رفتار و طول عمر اجزا را مختل می‌کند [۳۳]. برای تولید مواد دوقلویی با خواص مکانیکی عالی، درک اثر دوقلویی بر مکانیزم تغییر شکل ضروری است. بنابراین، عمده مطالعات محدود اخیر در زمینه‌ی سوپرآلیاژهای پایه نیکل بر روی مشاهدات تجربی در مقیاس ماکرو متمرکز شده که تنها می‌توانند حالت‌های اولیه و نهایی ماده را مشاهده کرده و نمی‌توانند فرآیند تکامل اتمی و مکانیزم تغییر شکل پلاستیک را مشاهده کنند. بنابراین، درک اینکه چگونه مرز دوقلویی بر مکانیزم تغییر شکل پلاستیک و خواص سوپرآلیاژهای پایه نیکل در مقیاس اتمی تأثیر می‌گذارد، ضروری است. از طرفی رفتارهای مرز دوقلویی همیشه می‌تواند با جهت‌گیری تنش اعمال شده مرتبط باشد [۳۵]. بنابراین در این پژوهش یک مدل دینامیک مولکولی برای شبیه‌سازی فرآیند بارگذاری کششی سوپرآلیاژ پایه نیکل حاوی مرز دوقلویی تحت سه جهت‌گیری مختلف نسبت به جهت بارگذاری استفاده شده است. مرز دوقلویی نسبت به جهت بارگذاری به شکل موازی، مایل و عمود قرار داده شده، سپس اثرات جهت‌گیری‌های مختلف مرز دوقلویی نسبت به جهت بارگذاری بر روی مکانیزم‌های تغییر شکل یعنی نحوه ایجاد و لغزش نابجایی‌ها مورد بررسی قرار گرفته است.

<sup>21</sup> Hall-Petch

<sup>22</sup> Polycrystal

<sup>23</sup> antiphase boundary

<sup>24</sup> intrinsic stacking faults

<sup>25</sup> density functional theory

<sup>26</sup> blunting

## ۲- روش و مدل شبیه‌سازی

سوپرآلیاژ پایه نیکل در پژوهش حاضر شامل فاز ماتریس  $\gamma$ <sup>۲۷</sup> (متشکل از اتم‌های نیکل) و فاز رسوب  $\gamma'$ <sup>۲۸</sup> (متشکل از ترکیب بین فلزی  $\text{Ni}_3\text{Al}$ ) با پارامترهای شبکه مختلف  $a_\gamma$  و  $a_{\gamma'}$  می‌باشد. همچنین کسر حجمی  $\gamma'$  مدل ۷۲/۹ درصد بوده، که همانند ساختار واقعی سوپرآلیاژ پایه نیکل است [۳۶]. از نرم‌افزار اتمسک<sup>۲۹</sup> [۳۷] برای ساخت مدل سه‌بعدی از سوپرآلیاژ پایه نیکل  $\text{Ni}/\text{Ni}_3\text{Al}$  حاوی مرز دوقلویی، با ثابت شبکه‌های  $a_\gamma$  و  $a_{\gamma'}$  به ترتیب ۳/۵۲ و ۳/۵۷۲ انگسترم استفاده شد. ثوابت شبکه  $\gamma$  و  $\gamma'$  با هم متفاوت هستند که همین عامل باعث ایجاد شبکه نابجایی ناسازگار<sup>۳۰</sup> در فصل مشترک فازی خواهد شد. عدم انطباق شبکه<sup>۳۱</sup>  $\delta$  به‌عنوان اختلاف نرمال شده در پارامتر شبکه بین  $\gamma$  و  $\gamma'$  است، رابطه ۱ [۳۸]:

$$\delta = 2 * \frac{a_{\gamma'} - a_\gamma}{a_{\gamma'} + a_\gamma} \quad (1)$$

ناسازگاری سطح مشترک فاز  $\gamma/\gamma'$ ، ۱/۵ درصد است. تنش ناشی از اختلاف پارامترهای شبکه باید آرام‌سازی<sup>۳۲</sup> شود. روند آرام‌سازی<sup>۳۳</sup> قبل از شبیه‌سازی کششی برای به حداقل رساندن<sup>۳۴</sup> کل انرژی پتانسیل و تنش داخلی ناشی از عدم انطباق شبکه<sup>۳۵</sup> انجام شده است. جهت‌گیری‌های کریستال اولیه مدل [11-2]، [-110] و [111] به ترتیب در جهت محوری x، y و z هستند. ناحیه دوقلویی سوپرآلیاژ با جابجایی‌های پیوسته اتمی به‌صورت متقارن نسبت به صفحه (۱۱۱) ساخته شده و درعین حال ماتریس بدون تغییر نگه داشته شده است. بنابراین محور z عمود بر صفحه مرز دوقلویی قرار خواهد گرفت. مرز دوقلویی سوپرآلیاژ  $\text{Ni}/\text{Ni}_3\text{Al}$  حول محور y چرخانده شد به‌طوری که مرز دوقلویی در سه راستای موازی، مایل و عمود بر جهت بارگذاری یعنی محور z قرار می‌گیرد، شکل ۱. در شکل ۱ اتم‌های آبی و قرمز به ترتیب Ni و Al هستند. اندازه مدل‌ها در این مطالعه ۲۴۳/۸۷۳ \* ۱۹۹/۱۲۱ \* ۳۴۴/۸۸۸ انگسترم بوده که حاوی ۱۴۹۲۵۶۴ اتم برای مدل بدون دوقلویی و ۱۵۵۱۱۵۶ اتم برای مدل مرز دوقلویی در راستای موازی و ۱۴۷۴۶۹۸ اتم برای مرز دوقلویی مایل و ۱۴۹۱۵۴۰ اتم برای مرز دوقلویی در راستای عمود بر جهت بارگذاری است. شبیه‌سازی‌های فرایند آزمایش کشش حاضر توسط نرم‌افزار لمپس<sup>۳۶</sup> انجام شده است [۳۹]. میدان نیرو با پتانسیل روش اتم تعبیه شده<sup>۳۷</sup> برای سیستم نیکل-آلومینیم توصیف می‌شود [۴۰]. این پتانسیل به‌طور گسترده برای بررسی مکانیزم‌های تغییر شکل نانوساختارهای سوپرآلیاژ پایه نیکل استفاده شده است [۴۱، ۴۲]. شرایط مرزی دوره‌ای<sup>۳۸</sup> در دو جهت x و y و در جهت z به‌صورت غیرتناوبی<sup>۳۹</sup> اعمال شده و اتم‌ها در دو لایه بالا و پایین برای اعمال شرایط مرزی و بارگذاری با ضخامت ثابت هر ناحیه ۱۰ انگستروم انتخاب شده است. اتم‌ها در پیکربندی اولیه در پایین‌ترین موقعیت انرژی قرار ندارند و بر اساس اصل حداقل انرژی، نمونه‌ها ابتدا تحت یک روش کمینه‌سازی انرژی یعنی توسط الگوریتم گرادیان مزدوج<sup>۴۰</sup> قرار گرفته و قبل از بارگذاری خارجی، با استفاده از ترموستات Nose-Hoover با یک مجموعه<sup>۴۱</sup> NVT<sup>۴۲</sup> در دمای ۳۰۰ کلوین برای ۱۲۰ فمتوثانیه متعادل شدند. تغییر شکل کششی با اعمال سرعت به لایه اتمی مرزی بالا و در امتداد جهت z با نرخ کرنش ثابت  $1 * 10^9 s^{-1}$  و دمای ۳۰۰ کلوین انجام شده و توسط یک ترموستات Nose-Hoover در مجموعه NVT کنترل می‌شود. گام گامانی همه مدل‌های دینامیک مولکولی 2 fs است. کرنش سیستم از تغییر موقعیت مرز در امتداد جهت بارگذاری به‌دست آمده است. برای دیدن پیکربندی‌های نهایی اتمی از نرم‌افزار OVITO<sup>۴۳</sup> استفاده شده است. فرایند ایجاد و تکامل نابجایی در طول تغییر شکل

<sup>27</sup> matrix

<sup>28</sup> precipitate

<sup>29</sup> Atomsk

<sup>30</sup> Misfit dislocation

<sup>31</sup> lattice mismatch

<sup>32</sup> relaxed

<sup>33</sup> relaxation

<sup>34</sup> minimize

<sup>35</sup> lattice mismatch

<sup>36</sup> LAMMPS

<sup>37</sup> embedded-atom method

<sup>38</sup> periodic

<sup>39</sup> non-periodic

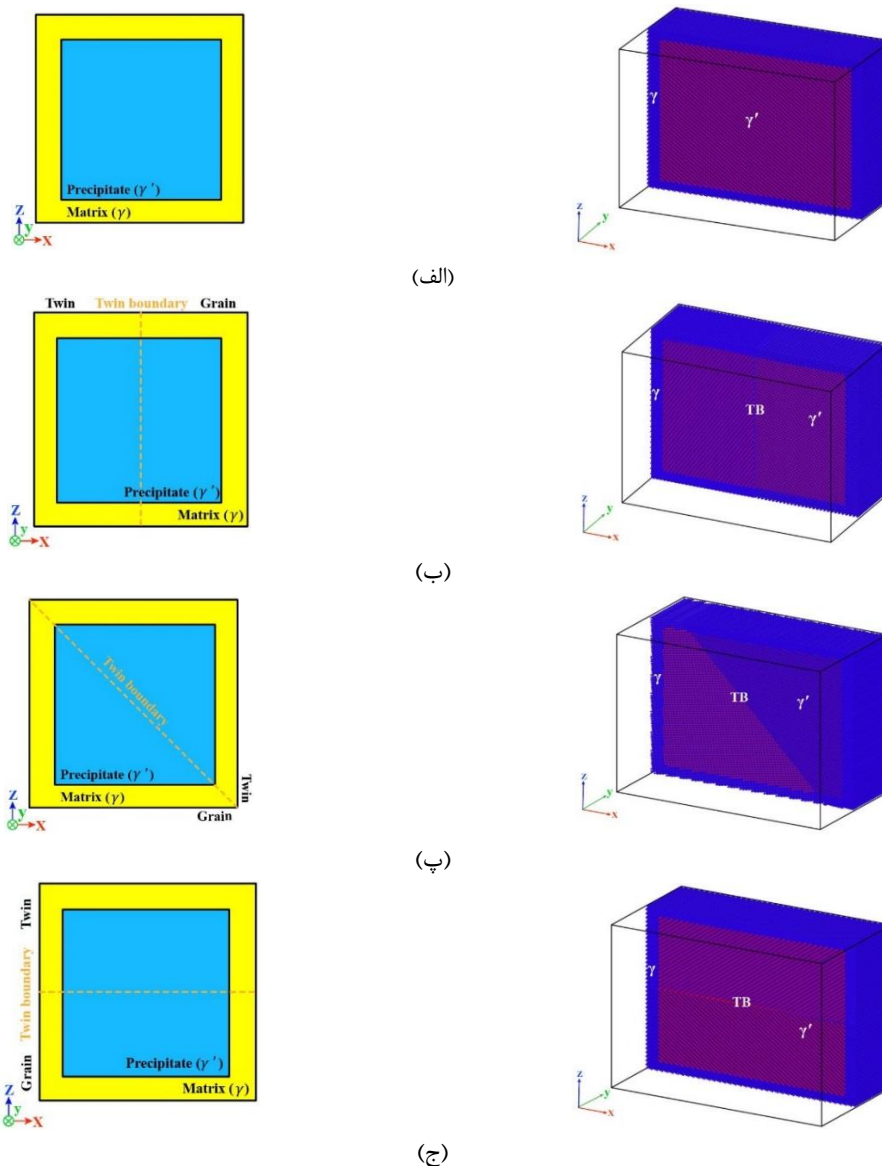
<sup>40</sup> conjugate gradient (CG) algorithm

<sup>41</sup> ensemble

<sup>42</sup> canonical

<sup>43</sup> Open Visualization Tool

پلاستیک با استفاده از الگوریتم تجزیه و تحلیل نابجایی<sup>۴۴</sup> مشخص شده است [۴۴]. هم‌چنین از نرم‌افزار OVITO برای به دست آوردن نوع و طول نابجایی‌ها استفاده می‌شود. تجزیه و تحلیل همسایه مشترک<sup>۴۵</sup> برای تجسم و تکامل نقص استفاده شده و در نهایت از آنالیز مش سطوح<sup>۴۶</sup> برای تجسم ترک‌ها یا عیوب در ساختار ماده استفاده شده است.



شکل ۱ مدل هندسی و اتمی سطح مقطع نمونه سوپرآلیاژ پایه نیکل (الف) بدون مرز دوقلویی و حاوی مرز دوقلویی به شکل (ب) موازی، (پ) مایل و (ج) عمود به جهت بارگذاری

### ۳- نتایج و بحث

#### ۳-۱- مکانیزم تغییر شکل نمونه بدون مرز دوقلویی

پس از انجام آزمایش کشش که یکی از معمول‌ترین روش‌ها برای آزمایش و ارزیابی تغییرات رفتار تغییر شکل و خواص مکانیکی مواد است، تغییر شکل برای هر یک از نمونه‌ها بررسی شده است. شکل ۲ منحنی‌های طول نابجایی- کرنش، تغییر تعداد اتم‌های فاز- کرنش و هم‌چنین تصاویر ریزساختار برای مدل بدون مرز دوقلویی را نشان داده می‌دهد. در ناحیه الاستیک، تعداد

<sup>44</sup> Dislocation analysis

<sup>45</sup> Common neighbor analysis

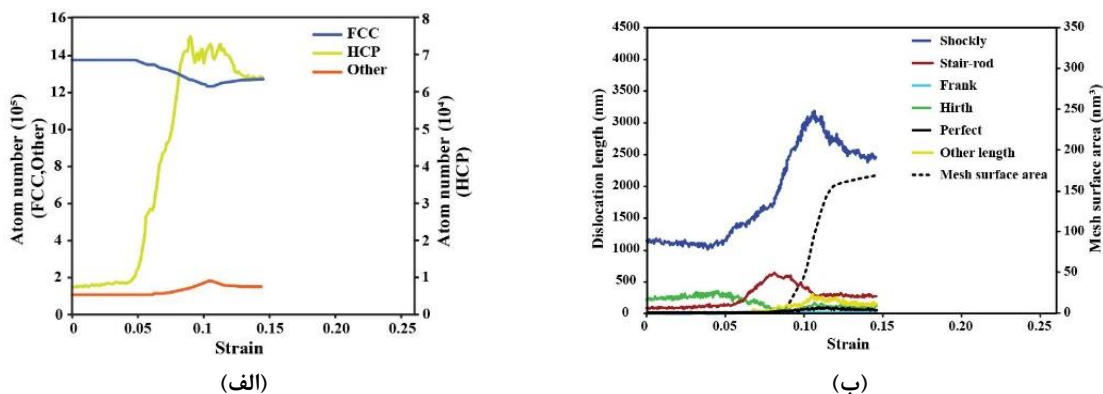
<sup>46</sup> Construct surface mesh

اتم‌های هر فاز تقریباً هیچ تغییری به دلیل پایداری ساختاری نداشته و ترکیب اتمی ساختار به خوبی حفظ می‌شود، شکل ۲ (الف) و (پ). با ادامه بارگذاری کششی، تغییر شکل مدل نیز افزایش می‌یابد. هنگامی که ماده وارد تغییر شکل پلاستیک می‌شود، یک سری تغییر شکل‌ها در ریزساختار به وجود خواهد آمد، مانند ایجاد<sup>۴۷</sup> و انتشار<sup>۴۸</sup> نابجایی<sup>۴۹</sup> ها. وقتی کرنش به ۰/۰۴۷۹۳ می‌رسد، شکل ۲ (ب)، نابجایی‌های جزئی شاکی شروع به رشد می‌کنند و در ابتدا نابجایی‌ها از قسمت جانبی سطح مشترک فاز نمونه که ناشی از تفاوت در پارامترهای شبکه بین لایه‌های Ni و Ni<sub>3</sub>Al است، ایجاد شده و در ناحیه ۷ حرکت کرده و ماتریس را برش می‌دهند [۴۵]. شکل ۲ (ت)، بنابراین ماده وارد مرحله تسلیم شده و تغییر شکل پلاستیک رخ داده است. در کرنش ۰/۰۵۴۹، نابجایی‌های جزئی شاکی از سطح مشترک فاز به داخل رسوب گسترش<sup>۵۰</sup> یافته و رسوب را برش می‌دهند، شکل ۲ (ث). با ادامه بارگذاری، لغزش نابجایی ادامه یافته که منجر به افزایش طول خط نابجایی‌ها می‌شود، شکل ۲ (ب)، درعین حال با افزایش کرنش تعداد اتم‌های فاز FCC کاهش می‌یابد و تعداد اتم‌های HCP افزایش می‌یابد، شکل ۲ (الف). فصل مشترک فاز بیشتر در ناحیه بالا و پایین رسوب به عنوان مانعی برای عبور نابجایی‌هایی که رسوب را برش می‌دهند عمل می‌کند بنابراین مانع فصل مشترک فازی به دلیل محدود کردن حرکت نابجایی‌ها، یک عامل استحکام دهنده است [۴۶، ۴۷]. شکل ۲ (ج).

در این نمونه صفحات لغزش (۱۱۱)، (۱-۱-۱) و (-۱-۱-۱) فعال هستند و این صفحات لغزش فعال برای ۷ و ۷ یکسان می‌باشند. همچنین با افزایش بارگذاری نابجایی‌های جزئی شاکی با تعداد بیشتری رسوب را برش داده و این باعث افزایش برخورد و ایجاد نابجایی نرده‌ای<sup>۵۱</sup> می‌شود [۴۸]. شکل ۲ (ب) و (ج)، به عنوان نمونه در رابطه ۲ واکنش بردار برگرد دو نابجایی جزئی شاکی برخورد کرده و نابجایی نرده‌ای ایجاد شده نشان داده شده، شکل ۲ (چ):

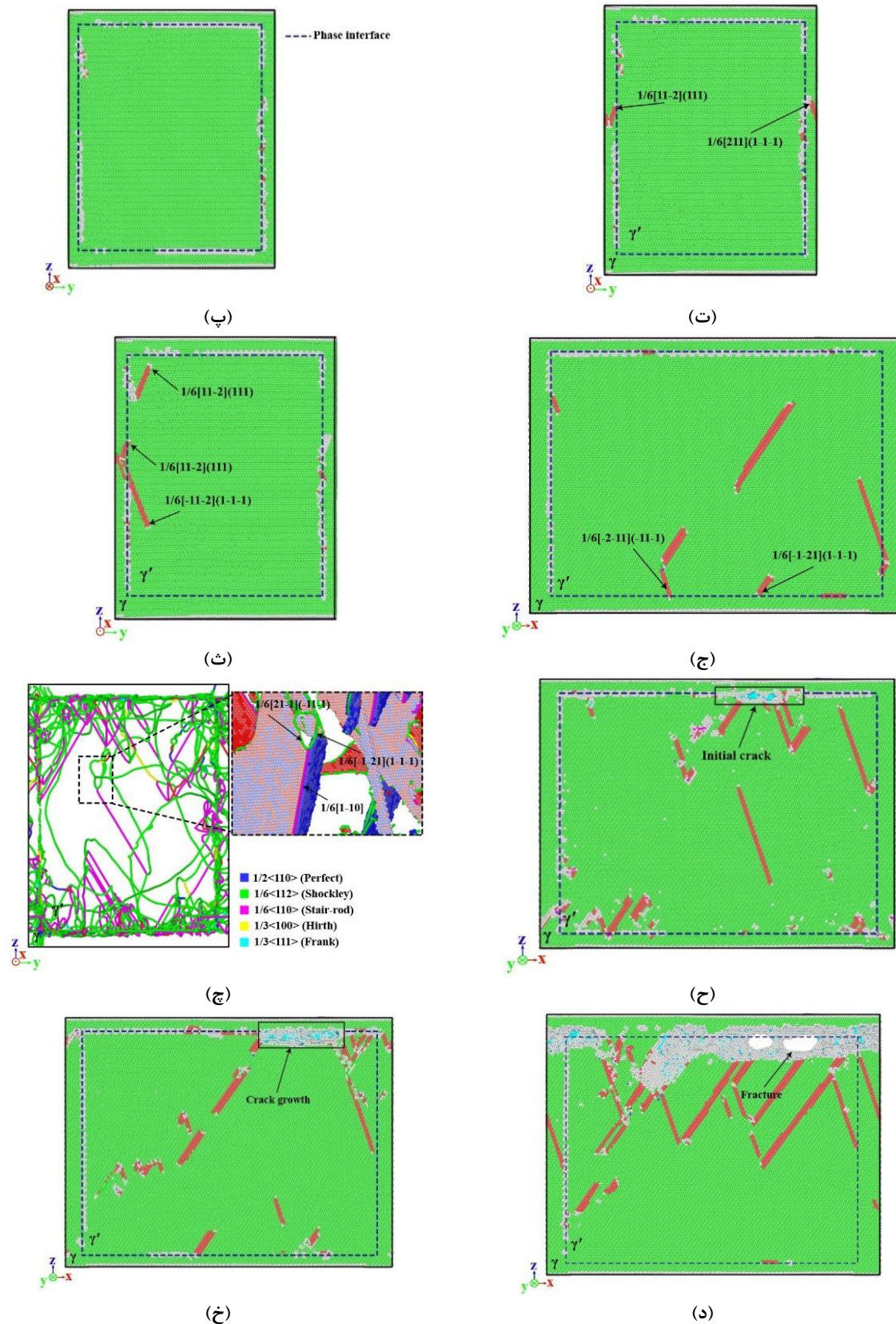
$$\frac{1}{6}[21-1]_{(-11-1)} + \frac{1}{6}[-1-21]_{(1-1-1)} \rightarrow \frac{1}{6}[1-10] \quad (۲)$$

این نابجایی‌های غیرمتحرک هم به عنوان مانع برای حرکت راحت نابجایی عمل کرده و در نتیجه عامل استحکام دهنده بعدی در این نمونه هستند [۱۷]. با ادامه بارگذاری نابجایی‌های بیشتری با سطح مشترک فازی برهم‌کنش می‌کنند و این تمرکز تنش را در سطح مشترک ایجاد می‌کند [۴۹]. این تمرکزهای تنش موضعی از استحکام موضعی ماده فراتر رفته و منجر به شکستن پیوندهای اتمی و ایجاد ترک در سطح مشترک و نزدیک آن می‌شود، شکل ۲ (ح)، همان‌طور که پارامتر mesh surface area در شروع شدن نشان‌دهنده ایجاد ترک است، شکل ۲ (ب). با افزایش کرنش به  $\epsilon = 0.095$ ، نابجایی‌ها شروع به ایجاد و حرکت در نزدیکی نوک ترک می‌کنند و باعث افزایش طول نابجایی‌ها، شکل ۲ (ب) و پلاستیسیته موضعی می‌شوند. این تغییر شکل پلاستیکی به کاهش تمرکز تنش کمک می‌کند و به ترک اجازه رشد می‌دهد، شکل ۲ (خ). ترک در مسیری با کمترین مقاومت یعنی فصل مشترک فاز گسترش می‌یابد که در نهایت باعث شکست در فصل مشترک شده است، شکل ۲ (د).



شکل ۲ (الف) تغییر تعداد اتم‌ها نسبت به کرنش (ب) تغییر طول انواع نابجایی‌ها نسبت به کرنش

<sup>47</sup> Nucleation  
<sup>48</sup> Emission  
<sup>49</sup> Dislocation  
<sup>50</sup> expand  
<sup>51</sup> stair-rod



شکل ۲ (پ) تصویر مقطع نمونه از تکامل نابجایی‌ها و تغییر شکل در  $\epsilon=0.02702$  (ت)  $\epsilon=0.04837$  (ث)  $\epsilon=0.0549$  (ج)  $\epsilon=0.061$  (چ) اتم‌های FCC برای وضوح برای تحلیل ساختار نابجایی حذف شده‌اند  $\epsilon=0.0719$  (ح)  $\epsilon=0.08061$  (خ)  $\epsilon=0.0915$  (د)  $\epsilon=0.1133$

### ۳-۲- مکانیزم تغییر شکل نمونه حاوی مرز دوقلویی موازی محور بارگذاری

شکل ۳ منحنی‌های طول نابجایی- کرنش، تغییر تعداد اتم‌های فاز- کرنش و همچنین تصاویر ریزساختار برای مدل سوپرآلیاژ پایه نیکل حاوی مرز دوقلویی موازی جهت بارگذاری را نشان می‌دهد. با افزایش کرنش تا کرنش  $0.04786$  تعداد اتم‌های هر فاز بخصوص FCC و HCP، شکل ۳ (الف) و طول نابجایی‌ها که ناشی از فصل مشترک فازی و مرز دوقلویی است ثابت بوده، شکل ۳ (ب) و (پ)، در واقع نمونه در ناحیه الاستیک قرار دارد، همچنین طول نابجایی‌ها به دلیل مرز دوقلویی نسبت به نمونه بدون مرز دوقلویی افزایش داشته است، شکل ۳ (ب). پس از کرنش  $0.04786$ ، تعداد اتم‌های HCP و نابجایی‌های جزئی شاکلی افزایش یافته که نشان‌دهنده ورود نمونه به مرحله تغییر شکل پلاستیک است، شکل ۳ (الف) و (ب)، و در ابتدا نابجایی‌ها از سطح مشترک فازی جانبی در ناحیه دانه  $5^2$  و ناحیه دوقلویی  $5^3$  شروع به ایجاد شدن می‌کنند و ماتریس را برش داده، چون لغزش و تکثیر نابجایی در فاز ماتریس آسان‌تر بوده [۵۰]، شکل ۳ (ت)، سپس در ناحیه دوقلویی رسوب را برش می‌دهند، شکل ۳ (ث). همان‌طور که در تصویر شکل ۳ (ذ) مطالعه تجربی رفرنس [۱۶] مشاهده می‌شود صفحات لغزش شبه‌سازی پژوهش حاضر همانند این پژوهش [۱۶]، مایل به مرز دوقلویی می‌باشند. با ادامه بارگذاری نابجایی‌های جزئی شاکلی بیشتری ایجاد و لغزش می‌کنند اما مرز دوقلویی به‌عنوان مانعی برای حرکت نابجایی عمل کرده و از لغزش نابجایی جلوگیری می‌کند و این مقاومت ماده را در برابر تغییر شکل افزایش می‌دهد، اما پس از برخورد نابجایی با مرز دوقلویی یکسری نابجایی جدید از مرز دوقلویی خارج می‌شود و پله  $5^4$  هایی روی مرز دوقلویی ایجاد شده و باعث مهاجرت  $5^5$  مرز دوقلویی می‌شوند، شکل ۳ (ج)، که در محدود کرنش  $0.06613$  تا  $0.07353$  لغزش این نابجایی‌های جدید باعث افزایش اتم‌های HCP شده است، شکل ۳ (الف).

با ادامه لغزش نابجایی‌ها حرکت آن‌ها توسط مرز دوقلویی و سطح مشترک فازی محدود شده بنابراین این عوامل باعث استحکام دهی ماده می‌شوند، شکل ۳ (چ). از کرنش  $0.0870$  نابجایی‌های جزئی شاکلی و به طبع اتم‌های HCP شروع به افزایش کرده، شکل ۳ (الف) و (ب)، و از سطح مشترک فازی و مرز دوقلویی بیشتر در ناحیه دوقلویی با هم برخورد کرده و نابجایی غیر متحرک نرده‌ای تشکیل می‌دهند و با افزایش کرنش این نابجایی‌ها افزایش می‌یابند، شکل ۳ (ب) و (ح). نمونه‌ای از بردار برگرز این برخوردها در رابطه ۳ و ۴ بیان شده است:

$$\frac{1}{6}[211]_{(1-1-1)} + \frac{1}{6}[-1-2-1]_{(-11-1)} \rightarrow \frac{1}{6}[1-10] \quad (3)$$

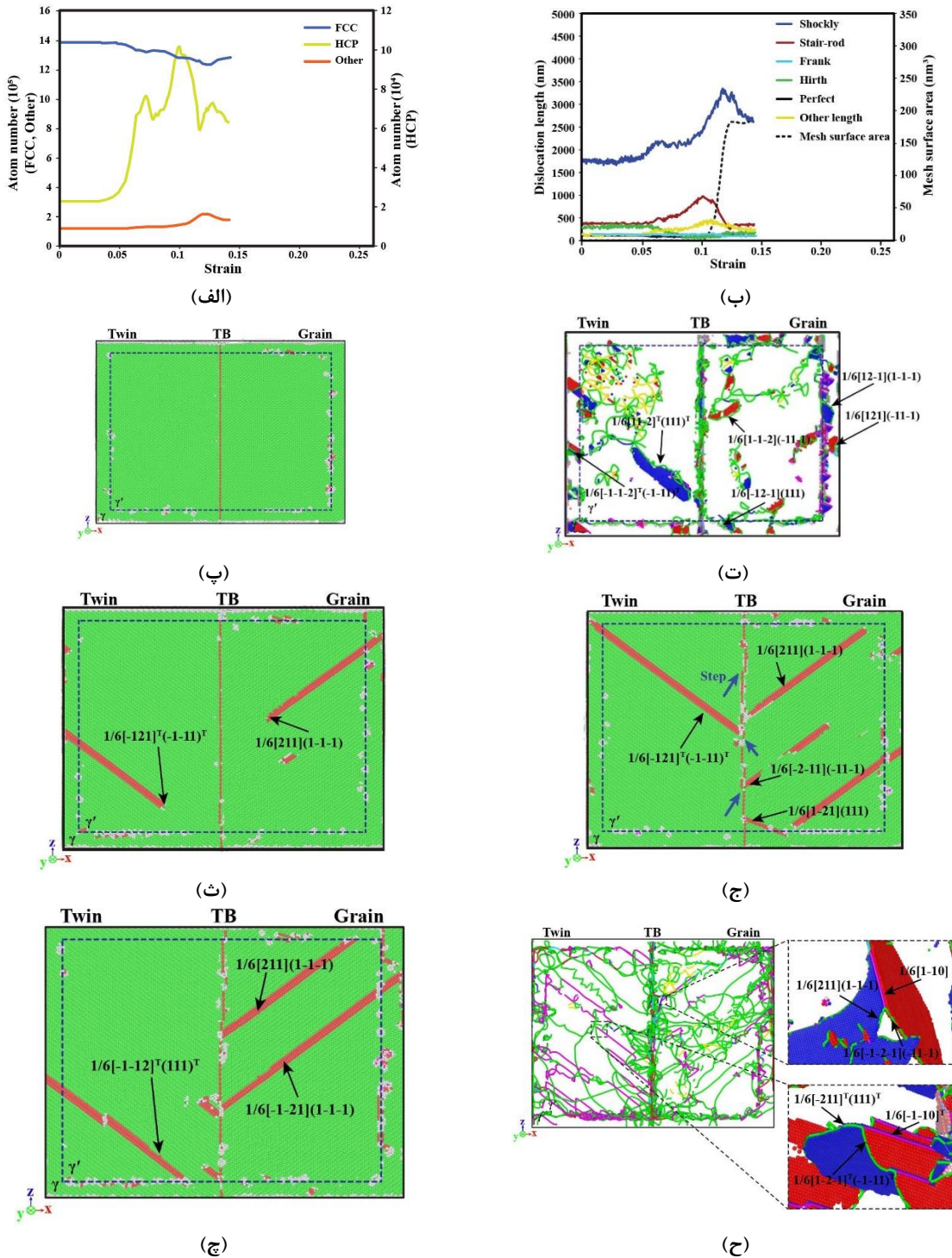
$$\frac{1}{6}[1-2-1]^T_{(-1-11)^T} + \frac{1}{6}[-211]^T_{(111)^T} \rightarrow \frac{1}{6}[-1-10]^T \quad (4)$$

نتایج شبه‌سازی نشان می‌دهد که صفحات لغزش فعال در ماتریس  $\gamma$  و رسوب  $\gamma'$  در دانه  $(-11-1)$ ،  $(1-1-1)$  و  $(111)$  هستند، اما در ناحیه دوقلویی برای ماتریس  $\gamma$  و رسوب  $\gamma'$  صفحات  $(-1-11)^T$ ،  $(1-1-1)^T$  و  $(111)^T$  هستند. با ادامه بارگذاری برخورد نابجایی‌ها زیاد شده و در قسمت ماتریس ناحیه دوقلویی در امتداد صفحات لغزش، ترک اولیه ایجاد شده و با حرکت نابجایی  $\frac{1}{6}[11-2]^T(111)^T$  رشد می‌کند، شکل ۳ (خ)، (د)، که با نتایج تجربی ایجاد و رشد ترک ماده FCC مطابقت دارد، شکل ۳ (ذ) [۱۶]. در این حال شروع پارامتر mesh surface area در کرنش  $\epsilon = 0.09138$  نشان‌دهنده ایجاد ترک است، شکل ۳ (ب).

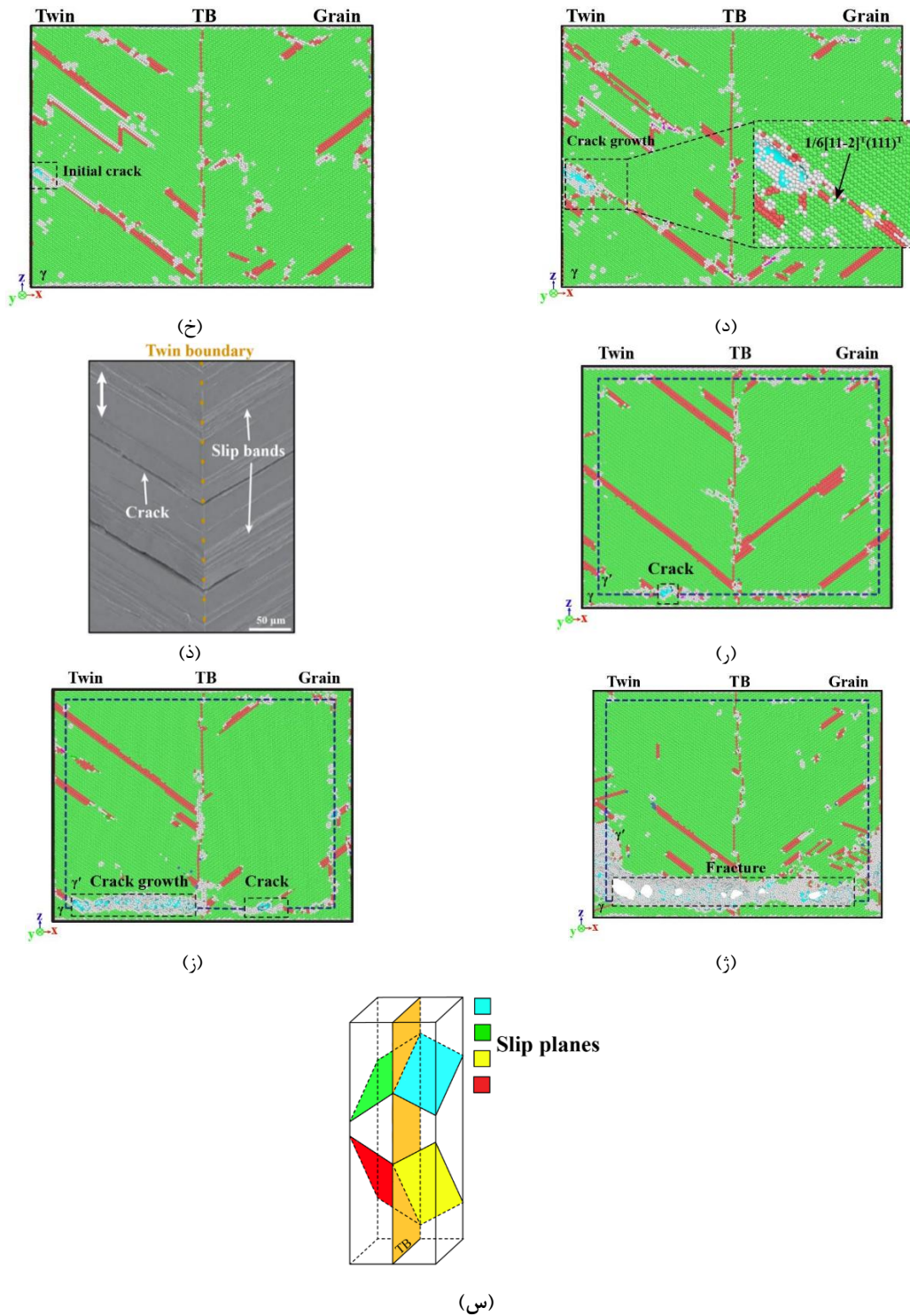
در کرنش  $0.1113$  طول نابجایی‌های جزئی شاکلی افزایش یافته، شکل ۳ (الف)، که در حین انتشار ترک در مجاورت نوک ترک ایجاد و با یکدیگر تعامل دارند و بنابراین این حرکت باعث بازآرایی اتم‌ها و کاهش تعداد اتم‌های FCC و HCP می‌شود [۵۱]، شکل ۳ (الف). در کرنش  $0.1083$  در سطح مشترک فازی ترک ایجاد شده، شکل ۳ (ر) و در امتداد سطح مشترک با حرکت نابجایی‌های  $\frac{1}{6}[1-2-1]^T(-1-11)^T$  و  $\frac{1}{6}[-211]^T(111)^T$  به سمت دانه گسترش می‌یابد اما مرز دوقلویی اجازه عبور ترک را نداده و سپس ترک در سطح مشترک فاز در دانه ایجاد و در امتداد سطح مشترک فازی گسترش می‌یابد، شکل ۳ (ز) و در نهایت شکست در سطح مشترک فازی اتفاق می‌افتد، شکل ۳ (ژ). صفحات لغزش غالب در نمونه با مرز دوقلویی موازی

<sup>52</sup> Grain  
<sup>53</sup> Twin  
<sup>54</sup> Step  
<sup>55</sup> migration

با جهت بارگذاری در دانه  $(1 - 1 - 1)$  و  $(-11 - 1)$  و در دوقلوبی  $(111)^T$  و  $(-1 - 11)^T$  که بصورت شماتیک در شکل ۳ (س) رسم شده است.



شکل ۳ (الف) تغییر تعداد اتم‌ها نسبت به کرنش (ب) تغییر طول انواع نابجایی‌ها نسبت به کرنش (پ) تصویر دوبعدی و مقطع نمونه از تکامل نابجایی‌ها و تغییر شکل در  $\epsilon=0.027$  (ت) اتم‌های FCC برای وضوح برای تحلیل ساختار نابجایی حذف شده‌اند،  $\epsilon=0.04873$  (ث)  $\epsilon=0.058$  (ج)  $\epsilon=0.06527$  (چ)  $\epsilon=0.0831$  (ح) اتم‌های FCC برای وضوح برای تحلیل ساختار نابجایی حذف شده‌اند،  $\epsilon=0.09138$  (خ)  $\epsilon=0.10704$  (د)  $\epsilon=0.1113$  (ذ) صفحات لغزش نابجایی و ترک در ماده FCC  $[1\bar{1}1]$  و  $[1\bar{1}\bar{1}]$  (ر)  $\epsilon=0.1083$  (ز)  $\epsilon=0.1187$  (ز)  $\epsilon=0.1283$  (س) مدل هندسی صفحات لغزش در نمونه



شکل ۳ (خ)  $\epsilon=0.10704$  (د)  $\epsilon=0.1113$  (ذ) صفحات لغزش نابجایی و ترک در ماده FCC [۱۶] و [۱۱] (ر)  $\epsilon=0.1083$  (ز)  $\epsilon=0.1187$  (ز)  $\epsilon=0.1283$  (س) مدل هندسی صفحات لغزش در نمونه

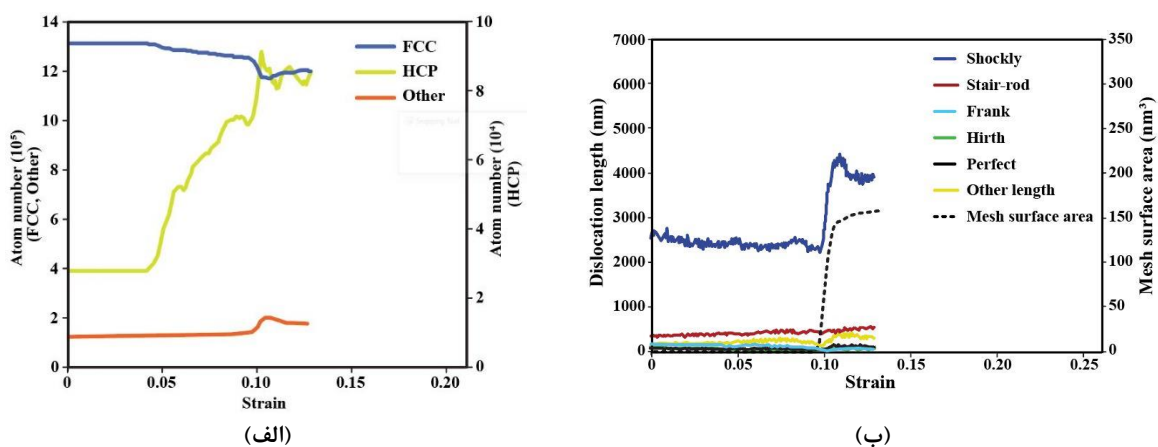
### ۳-۳- مکانیزم تغییر شکل نمونه حاوی مرز دوقلویی مایل به محور بارگذاری

شکل ۴ منحنی های طول نابجایی- کرنش، تغییر تعداد اتم های فاز - کرنش و هم چنین تصاویر ریزساختار برای مدل سوپرآلیاژ پایه نیکل حاوی مرز دوقلویی مایل به جهت بارگذاری را نشان می‌دهد. با اعمال بارگذاری تا کرنش  $0.45354$  ترکیب اتمی ساختار به خوبی حفظ شده، شکل ۴ (الف)، و طول نابجایی های اولیه که ناشی از شبکه نابجایی فصل مشترک فازی و مرز دوقلویی است به دلیل پایداری ساختاری تغییر نداشته، بنابراین نمونه در ناحیه الاستیک است، شکل ۴ (ب). با افزایش کرنش در ابتدا نابجایی ها از سطح مشترک فازی در ناحیه دانه و ناحیه دوقلویی شروع به ایجاد شدن می‌کنند و ماتریس را برش داده،

شکل ۴ (پ) و سپس در ناحیه دوقلویی نابجایی‌هایی که عمدتاً موازی مرز دوقلویی هستند رسوب را برش می‌دهند، شکل ۴ (ت)، بنابراین تغییر شکل پلاستیک با ادامه حرکت نابجایی‌ها و در پی آن افزایش اتم‌های HCP ادامه پیدا می‌کند [۵۲]، شکل ۴ (الف). در کرنش ۰/۰۶ مرز دوقلویی در پاسخ به بارگذاری اعمال شده تحت مهاجرت<sup>۵۶</sup> قرار گرفته و این مهاجرت تغییر شکل را در خود جای می‌دهد و در اثر مهاجرت مرز دوقلویی، نابجایی‌هایی از سطح مرز دوقلویی بصورت محدود ایجاد و لغزش می‌کنند، شکل ۴ (ث). با ادامه بارگذاری، طول نابجایی‌ها تا کرنش ۰/۰۸۷ تقریباً ثابت می‌ماند، شکل ۴ (ب).

لغزش نابجایی‌ها بخصوص بصورت موازی با مرز دوقلویی در ناحیه دوقلویی ادامه داشته<sup>۵۷</sup>، که با مطالعات تجربی در زمینه سوپرالیاز پایه نیکل مطابقت خوبی داشته [۵۳] و [۳۳]، برای نمونه در شکل ۴ (ج) حاصل از مطالعات تجربی، خطوط لغزش موازی با مرز دوقلویی مایل مشاهده می‌شود، تا این‌که حرکت آن‌ها توسط سطح مشترک فازی بیشتر در ناحیه بالا محدود شده، که سخت شوندگی ماده را نشان می‌دهد، شکل ۴ (چ). با توجه به شکل ۴ (ب) در این نمونه با افزایش کرنش تغییرات نابجایی نرده‌ای تقریباً ثابت باقی مانده است. هم‌چنین نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که صفحات لغزش فعال نسبت به نمونه‌های دیگر افزایش یافته و در دانه صفحات لغزش  $(-11-1)$ ،  $(111)$ ،  $(1-1-1)$  و  $(-1-11)$  و در دوقلویی صفحات لغزش  $(-1-11)^T$ ،  $(-11-1)^T$ ،  $(1-1-1)^T$  و  $(111)^T$  هستند.

وجود مرز دوقلویی به دلیل تغییر ناگهانی جهت کریستال، تمرکز تنش را در مرز ایجاد می‌کند، این تمرکز تنش به دلیل جهت‌گیری مرز دوقلویی نسبت به جهت بارگذاری منجر به ایجاد شدن ترک در مرز دوقلویی در رسوب می‌شود [۵۳]، شکل ۴ (ح). همانطور که شروع پارامتر mesh surface area در کرنش  $\varepsilon = 0.095$  نشان دهنده ایجاد ترک است، شکل ۴ (ب). با ادامه بارگذاری طول نابجایی‌های شاکلی از کرنش ۰/۰۹۵۴۶ با رشد ترک افزایش یافته، شکل ۴ (ب)، در واقع در امتداد مرز دوقلویی با حرکت نابجایی‌های  $\frac{1}{6}[211](1-1-1)$ ،  $\frac{1}{6}[121](-11-1)$ ،  $\frac{1}{6}[-1-12]^T(111)^T$  و  $\frac{1}{6}[-12-1]^T(111)^T$  ترک در امتداد مرز دوقلویی رشد می‌کند، شکل ۴ (خ)، با مشاهده تصویر حاصل از پژوهش تجربی، شکل ۴ (د)، مسیر رشد ترک پژوهش حاضر با رفرنس [۵۴] مطابقت مناسبی دارد و در نهایت شکست در امتداد مرز دوقلویی اتفاق می‌افتد، شکل ۴ (ذ) و شکل ۴ (ر) [۳۳]. در فرایند تغییر شکل، صفحات لغزش در نمونه با مرز دوقلویی مایل، در ماتریس هر چهار صفحه لغزش فعال بوده که بصورت شماتیک در شکل ۴ (ز) و (ژ) مشخص شده و اتم‌های ماتریس که از جنس FCC هستند با صفحات لغزش مس FCC مطابقت خوبی دارند، شکل ۴ (س) [۱۶]، اما صفحه لغزش موازی مرز دوقلویی بیشتر درگیر تغییر شکل بوده و اما در رسوب نیز بخصوص در رسوب ناحیه دوقلویی صفحه لغزش غالب، صفحه لغزش موازی مرز دوقلویی است که در شکل ۴ (ز) بصورت شماتیک رسم شده است.

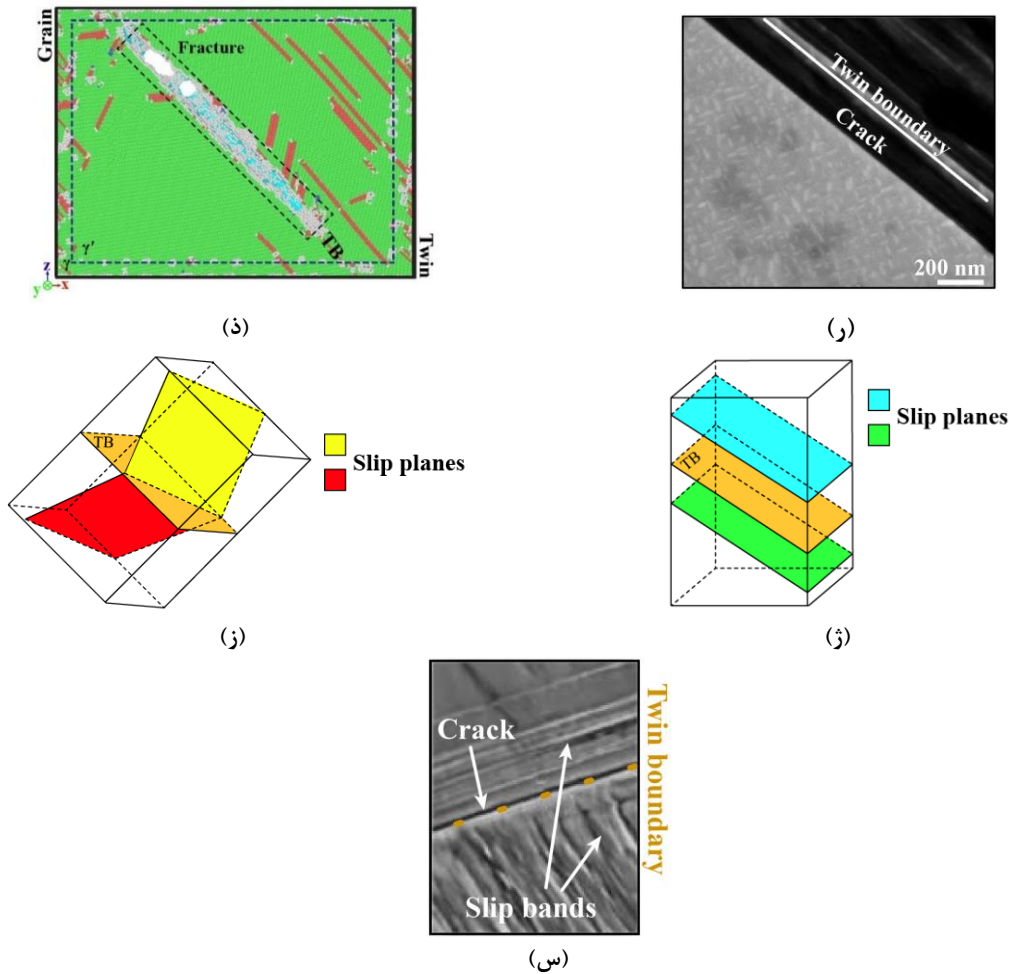


شکل ۴ (الف) تغییر تعداد اتم‌ها نسبت به کرنش (ب) تغییر طول انواع نابجایی‌ها نسبت به کرنش

<sup>56</sup> migration

<sup>57</sup> Twinning





شکل ۴ (ذ)  $\epsilon = 0.1080$  (ر) و (ز) مدل هندسی صفحات لغزش در نمونه

### ۴-۳- مکانیزم تغییر شکل نمونه حاوی مرز دوقلویی عمود بر محور بارگذاری

شکل ۵ منحنی های طول نابجایی- کرنش، تغییر تعداد اتم های فاز - کرنش و هم چنین تصاویر ریزساختار برای مدل سوپرالیاز پایه نیکل حاوی مرز دوقلویی عمود بر جهت بارگذاری را نشان می دهد. با اعمال بارگذاری تا کرنش  $0.05011$ ، طول نابجایی های اولیه که ناشی از شبکه نابجایی فصل مشترک فازی و مرز دوقلویی نمونه است نسبتاً ثابت می ماند، شکل ۵ (الف)، هم چنین تعداد اتم های فاز ثابت مانده، شکل ۵ (ب)، و نمونه آرایش اتمی اولیه خود را حفظ می کند، بنابراین نمونه در ناحیه تغییر شکل الاستیک قرار گرفته است، شکل ۵ (پ). در کرنش  $0.05011$  تسلیم رخ داده و نابجایی های جزئی افزایش می یابند، شکل ۵ (الف)، در ابتدا نابجایی ها از سطح مشترک فازی در ناحیه دانه و ناحیه دوقلویی شروع به ایجاد شدن کرده و ماتریس را برش می دهند [۵۰] و با ادامه لغزش، مرز دوقلویی مانع از حرکت برخی از این نابجایی ها شده است، شکل ۵ (ت).

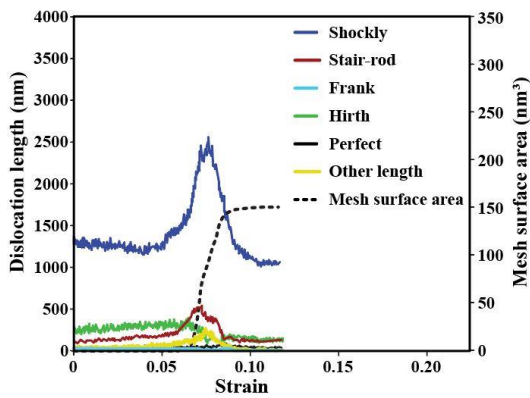
با افزایش کرنش و تغییر شکل پلاستیک، اتم های HCP به دلیل حرکت نابجایی های جزئی افزایش و اتم های FCC کاهش پیدا می کند، شکل ۵ (ب). با ادامه بارگذاری از محل تقاطع مرز دوقلویی و فاز سطح مشترک نابجایی ها شروع به ایجاد شدن و برش رسوب، ابتدا در ناحیه دانه و بعد در ناحیه دوقلویی کرده و فرایند تغییر شکل پلاستیک ادامه پیدا می کند، هم چنین برخی از نابجایی های ایجاد شده از فصل مشترک فازی پس از برش رسوب با مرز دوقلویی برخورد و جذب شده، و باعث مهاجرت مرز دوقلویی می شوند، شکل ۵ (ث). با ادامه لغزش این نابجایی ها حرکت آن ها توسط سطح مشترک فازی بیشتر در ناحیه بالا و پایین رسوب محدود شده، شکل ۵ (ج) و (چ)، هم چنین مرز دوقلویی مانع از عبور برخی از نابجایی ها شده است، شکل ۵ (ج) و (چ).

نتایج شبیه سازی نشان می دهد که صفحات لغزش فعال در ماتریس دانه صفحات لغزش  $(111)$  و  $(-11 - 1)$  و  $(1 - 1 - 1)$

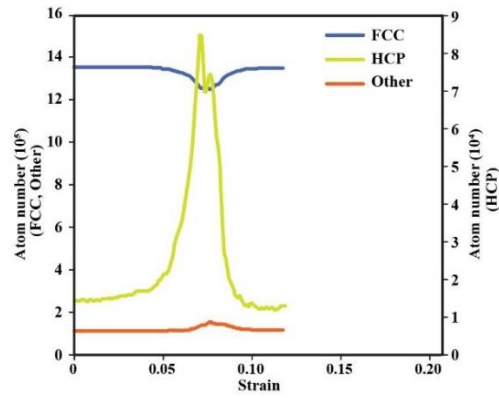
1) و در رسوب دانه صفحات لغزش  $(-11-1)$ ،  $(111)$  و  $(-1-11)$  اما در ناحیه دوقلویی صفحات لغزش  $(-1-11)^T$ ،  $(-11-1)^T$  و  $(1-1-1)^T$  هستند. با افزایش بارگذاری تا کرنش  $0.061$  نابیجایی‌های جزئی شاکلی با تعداد بیشتری رسوب را برش داده و بین نابیجایی‌های مختلف برخورد اتفاق افتاده و نابیجایی غیر متحرک نرده ای تشکیل می‌شود، [۴۸]، به عنوان نمونه رابطه ۵، شکل ۵ (ح). با افزایش کرنش نابیجایی نرده‌ای افزایش می‌یابند، شکل ۵ (الف)، این عامل نیز علاوه به مرز دوقلویی و فاز سطح مشترک، باعث استحکام دهی ماده می‌شود.

$$\frac{1}{6}[1-1-2]_{(-11-1)} + \frac{1}{6}[-121]_{(-1-11)} \rightarrow \frac{1}{6}[01-1] \quad (۵)$$

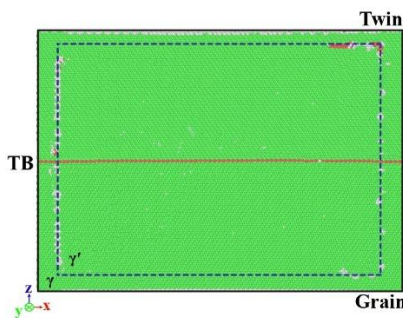
پارامتر mesh surface area در کرنش  $\varepsilon = 0.06536$  از مقدار صفر شروع به افزایش می‌کند، شکل ۵ (الف)، که در واقع با ادامه بارگذاری، نابیجایی‌ها در مرز دوقلویی حرکت کرده و موجب ایجاد تمرکز تنش و بطبع ایجاد ترک اولیه در مرز دوقلویی در ناحیه رسوب می‌شوند [۲۹]، شکل ۵ (خ)، هم‌چنین با ادامه بارگذاری تغییرشکل پلاستیک از طریق ایجاد و لغزش نابیجایی‌ها هم از سطح تقاطع مرز دوقلویی و سطح فازی و هم از سطح فازی افزایش یافته و مرز دوقلویی مانع از ادامه حرکت آن‌ها شده و باعث تمرکز تنش در مرز دوقلویی خواهد شد که در این مرحله برخورد نابیجایی با مرز دوقلویی عامل ایجاد ترک در نقاط دیگر از جمله در مرز دوقلویی در رسوب است، شکل ۵ (د) و (ذ). در کرنش  $0.069$  با رشد ترک به دلیل تغییرشکل پلاستیک در ناحیه اطراف نوک ترک طول نابیجایی‌های شاکلی افزایش یافته، شکل ۵ (الف)، و بطبع اتم‌های HCP افزایش و اتم‌های FCC کاهش داشته است، شکل ۵ (ب)، که در واقع با ادامه بارگذاری در امتداد مرز دوقلویی با حرکت نابیجایی‌های  $\frac{1}{6}[-11-2]_{(-11-1)}$ ،  $\frac{1}{6}[-121]_{(-1-11)}$  و  $\frac{1}{6}[-211]_{(111)}$ ، ترک در امتداد مرز دوقلویی در رسوب و ماتریس گسترش می‌یابد، شکل ۵ (ذ) و در نهایت شکست در امتداد مرز دوقلویی اتفاق می‌افتد، شکل ۵ (ر)، که با مطالعات تجربی مطابقت خوبی دارد [۳۳، ۵۵]. در فرایند تغییرشکل، صفحات لغزش غالب در نمونه با مرز دوقلویی عمود، در ماتریس و در رسوب بصورت شماتیک در شکل ۵ (ز) رسم شده است، این صفحات لغزش مایل به مرز دوقلویی در مطالعات تجربی فلزات FCC نیز همین جهت گیری را نسبت به مرز دوقلویی دارند [۱۱، ۱۶].



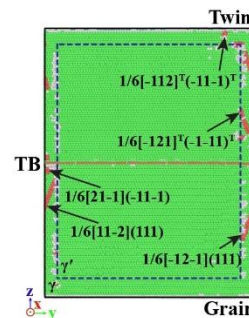
(الف)



(ب)

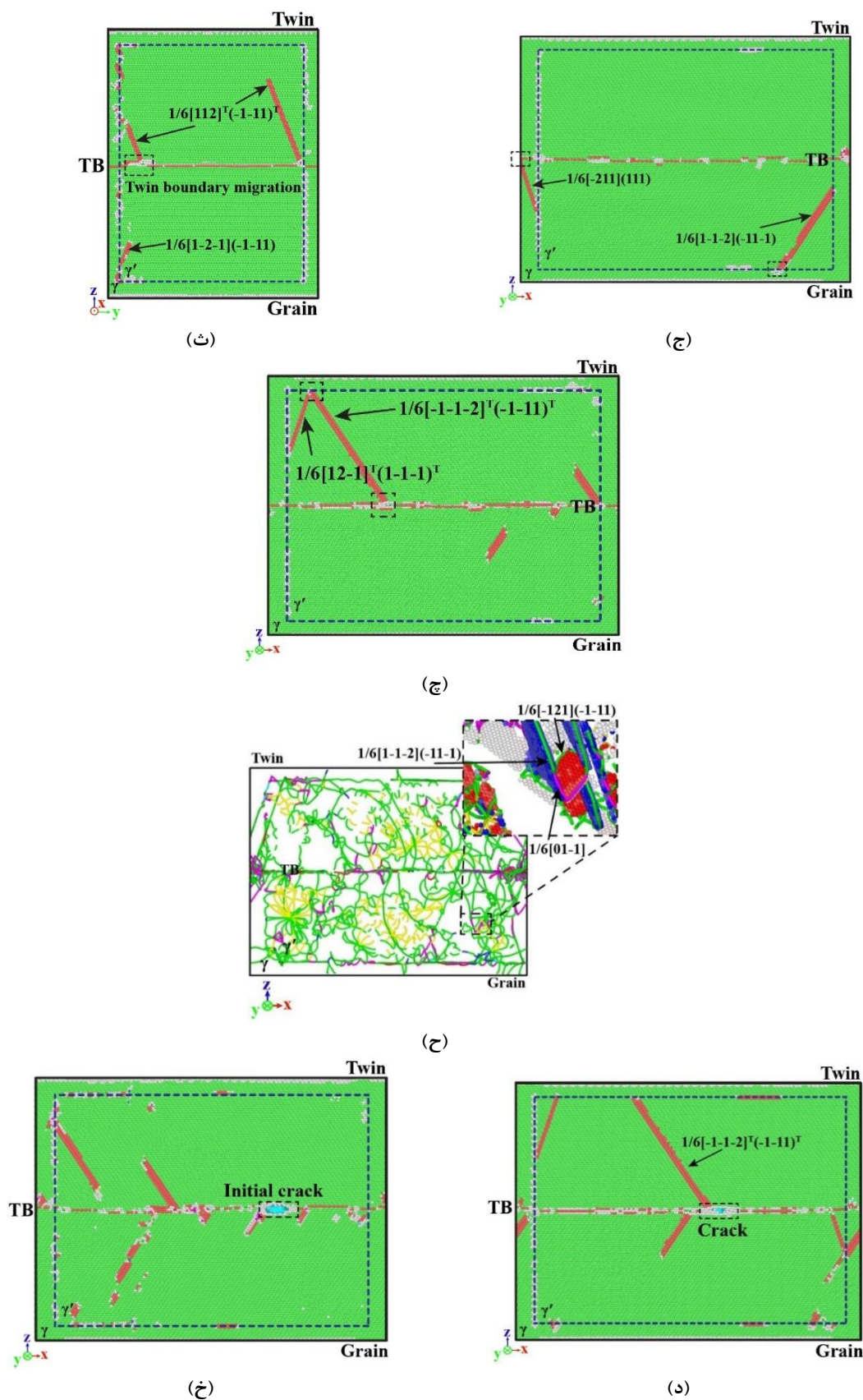


(پ)

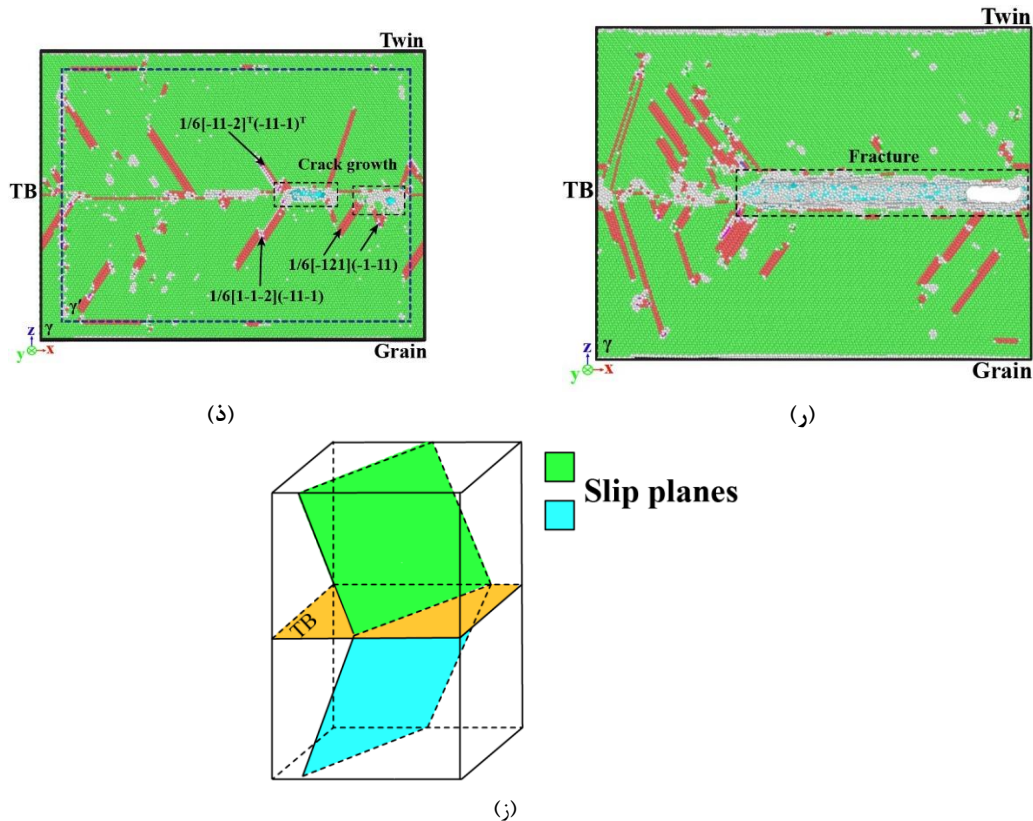


(ت)

شکل ۵ (الف) تغییر طول انواع نابیجایی‌ها نسبت به کرنش (ب) تغییر تعداد اتم‌ها نسبت به کرنش (پ) تصویر دوبعدی و مقطع نمونه از تکامل نابیجایی‌ها و تغییرشکل در  $\varepsilon=0.02833$  (ت)  $\varepsilon=0.05186$



شکل ۵ (ا)  $\epsilon=0.059$  (ب)  $\epsilon=0.05838$  (ج)  $\epsilon=0.05446$  (د)  $\epsilon=0.061$  (ه)  $\epsilon=0.06536$  (ف)  $\epsilon=0.0671$ ، برای توضیح برای تحلیل ساختار نابجایی حذف شده‌اند.



شکل ۵ (د)  $\epsilon = 0.069$  (ر)  $\epsilon = 0.0862$  (ز) مدل هندسی صفحات لغزش در نمونه

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این مطالعه، یک مدل دینامیک مولکولی برای شبیه‌سازی فرآیند بارگذاری کششی سوپرآلیاژ پایه نیکل حاوی مرز دوقلویی تحت سه جهت‌گیری مختلف نسبت به جهت بارگذاری استفاده شده است. نتایج شبیه‌سازی به این شرح است که: مکانیزم تغییرشکل نمونه بدون مرز دوقلویی و نمونه‌های حاوی مرز دوقلویی موازی و عمود بر جهت بارگذاری به شکل لغزش نابجایی بوده اما در نمونه حاوی مرز دوقلویی مایل، مکانیزم تغییرشکل دوقلویی، مکانیزم اصلی هست که به تغییرشکل پلاستیک کمک می‌کند. در نمونه حاوی مرز دوقلویی مایل چهار صفحه لغزش فعال بوده اما در نمونه‌های دیگر تنها سه صفحه لغزش در دانه و دوقلویی فعال شده اند. مجموع طول اولیه نابجایی‌ها برای نمونه‌های بدون دوقلویی، موازی، مایل و عمود به ترتیب  $1.48 \times 10^{-7}$ ،  $2.72 \times 10^{-3}$ ،  $3.45 \times 10^{-1}$  و  $1.69 \times 10^{-8}$  نانومتر بوده و همچنین توزیع نابجایی‌ها بین مدل‌ها متفاوت است که نشان دهنده تأثیر جهت‌گیری مرز دوقلویی در ایجاد و تکامل نابجایی‌ها است. مقادیر کرنش‌های تسلیم به ترتیب  $0.0479$ ،  $0.0478$ ،  $0.0453$  و  $0.0501$  برای نمونه‌های بدون مرز دوقلویی، حاوی مرز دوقلویی موازی، مایل و عمود به جهت بارگذاری هستند. که به ترتیب کرنش تسلیم (عمود < بدون مرز دوقلویی < موازی < مایل) است. همچنین کرنش‌های نهایی برای نمونه‌های بدون دوقلویی، موازی، مایل و عمود نیز به ترتیب  $0.08061$ ،  $0.10704$ ،  $0.095$ ،  $0.06536$  می‌باشند. با توجه به مقادیر این کرنش‌ها، مرزهای دوقلویی موازی و مایل به جهت بارگذاری باعث افزایش شکل‌پذیری سوپرآلیاژ تک بلور شده در حالی که مرز دوقلویی عمود، شکل‌پذیری سوپرآلیاژ را کاهش می‌دهد. ارتباط بین زاویه قرارگیری مرز دوقلویی و مکانیزم ایجاد و رشد ترک در کرنش‌های مشخص شده، بنابراین زمانی که مرز دوقلویی موازی با جهت بارگذاری است، ترک ابتدا مایل به مرز دوقلویی سپس در داخل فصل مشترک فازی ایجاد شده و در امتداد آن رشد می‌کند، اما هنگامی که مرز دوقلویی مایل و یا عمود به جهت بارگذاری است، ترک در مرز دوقلویی ایجاد و رشد می‌کند.

#### ۵- فهرست علائم

بالا نویسنده  $T$  یعنی در ناحیه دوقلویی

$[111]^T$

ثابت شبکه ماتریس

$a_T$

بالا نویس $T$ یعنی در ناحیه دوقلویی	$(111)^T$	ثابت شبکه رسوب	$a_{\gamma'}$
عدم انطباق شبکه	$\delta$	ماتریس	$\gamma$
کرنش	$\epsilon$	رسوب	$\gamma'$

### Authorship Contribution Statement

**Hamed Heydari**



**Biography:** Ph.D. Student, faculty of Mechanic Engineering, Shahrekord University, Shahrekord, Iran.

**Contribution Statement:** Methodology, Validation, Formal analysis, Software, Visualization, Writing – original draft, Resources, Investigation.

**Dr. Sayed Hassan Nourbakhsh**



**Biography:** Associate Professor, faculty of Mechanic Engineering, Shahrekord University, Shahrekord, Iran.

**Contribution Statement:** Conceptualization, Methodology, Formal analysis, Investigation, Resources, Project administration, Supervision.

**Dr. Mojtaba Zolfaghari**



**Biography:** Associate Professor, faculty of Mechanic Engineering, Arak University, Arak, Iran.

**Contribution Statement:** Conceptualization, Methodology, Formal analysis, Investigation, review & editing, Project administration, Supervision.

### ۶- مراجع

- [1] Dong H, Xu T, Ning T, Liu M, Wu D, Ma H, et al. Atomic simulations on the deformation mechanisms in nano-crystalline Ni-Al series Ni-based superalloy based on grain size, strain rate and temperature. Journal of Materials Research and Technology. 2023.
- [2] Xia Z, Gao B, Yu J, Wu S, Essa F. Molecular dynamics study of nano-cutting mechanical properties and microstructural evolution behavior of Ni/Ni3Al phase structure. Journal of Materials Research and Technology. 2022;19:2447-57.
- [3] Gao Q, Chen X, Yang P, Xue H, Ding Y, Lu X. Effects of Twin Boundary on Tensile Properties and Deformation Mechanism of Ni-Co Alloy Nanopillars. physica status solidi (b). 2022;259:2100458.
- [4] Brandon D. The structure of high-angle grain boundaries. Acta metallurgica. 196- 84-14:1479;6.
- [5] Liu T, Xia S, Li H, Zhou B, Bai Q. The highly twinned grain boundary network formation during grain boundary engineering. Materials Letters. 2014;133:97-100.

- [6] Zhao X, Lu C, Tieu AK, Zhan L, Huang M, Su L, et al. Deformation twinning and dislocation processes in nanotwinned copper by molecular dynamics simulations. *Computational Materials Science*. 2018;142:59-71.
- [7] Zhang Y-Q, Quan G-Z, Zhao J, Yu Y-Z, Xiong W. A Review on Controlling Grain Boundary Character Distribution during Twinning-Related Grain Boundary Engineering of Face-Centered Cubic Materials. *Materials*. 2023;16:4562.
- [8] Tian Y, Ren F, Chen F. Twin-boundary-spacing-dependent strength in gradient nano-grained copper. *Materials Today Communications*. 2022;33:104836.
- [9] Xia Y-C, Chen X-M, Lin Y-C, Lu X-Z. Evolution of annealing twins in a hot deformed nickel-based superalloy. *Materials*. 2021;15:7.
- [10] Hao L, Liu Q, Fang Y, Huang M, Li W, Lu Y, et al. Mechanical behavior of metallic nanowires with twin boundaries parallel to loading axis. *Computational Materials Science*. 2019;169:109087.
- [11] Stukowski A, Albe K, Farkas D. Nanotwinned fcc metals: Strengthening versus softening mechanisms. *Physical Review B*. 2010;82:224103.
- [12] ZHANG Y-q, JIANG S-y. Molecular dynamics simulation on mechanisms of plastic anisotropy in nanotwinned polycrystalline copper with {111} texture during tensile deformation. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2021;31:1381-96.
- [13] Zhao X, Lu C, Tieu AK, Pei L, Zhang L, Su L, Zhan L. Deformation mechanisms in nanotwinned copper by molecular dynamics simulation. *Materials Science and Engineering: A*. 2017;687:343-51.
- [14] Rezaei Mianroodi J, Svendsen B. Effect of twin boundary motion and dislocation-twin interaction on mechanical behavior in FCC metals. *Materials*. 2020;13:2238.
- [15] Ding J, Zhao H-n, Wang L-s, Huang X, Wang J, Song K, et al. Influence of loading directions on dislocation slip mechanism of nanotwinned Ni with void defect at the twin boundary. *Computational Materials Science*. 2018;152:1-11.
- [16] Li L, Zhang Z, Zhang P, Wang Z, Zhang Z. Controllable fatigue cracking mechanisms of copper bicrystals with a coherent twin boundary. *Nature communications*. 2014;5:3536.
- [17] Yu J, Dong C, Zhang Q, Li B, Liu R. Temperature and crystal orientation dependence of dislocation slip and twin nucleation in bilayer Ni/Ni<sub>3</sub>Al interface. *Computational Materials Science*. 2019;162:162-70.
- [18] Dong H, Xu T, Ning T, Liu M, Wu D, Ma H, et al. Atomic simulations on the deformation mechanisms in nano-crystalline Ni–Al series Ni-based superalloy based on grain size, strain rate and temperature. *Journal of Materials Research and Technology*. 2023;23:77-89.
- [19] Ding J, Zhang S-L, Tong Q, Wang L-S, Huang X, Song K, Lu S-Q. The effects of grain boundary misorientation on the mechanical properties and mechanism of plastic deformation of Ni/Ni<sub>3</sub>Al: A molecular dynamics study. *Materials*. 2020;13:5715.
- [20] Wang J, Liang J, Wen Z, Yue Z. Atomic simulation of void location effect on the void growth in nickel-based single crystal. *Computational Materials Science*. 2019;160:245-55.
- [21] Zhang L, Xin H, Zhao D, Li Z, Ma S. Effect of Twin Boundary Density on Mechanical Behavior of Al<sub>0.1</sub>CoCrFeNi High-Entropy Alloy by Molecular Dynamics Simulation. *Frontiers in Materials*. 2022;9:849051.
- [22] Fu R, Rui Z, Dong Y, Luo D, Yan C. Effects of  $\gamma/\gamma$  lamellar interfaces on interlamellar crack propagation behaviors of TiAl alloys. *Computational Materials Science*. 2021;194:110428.
- [23] Tran A-S. Influences of grain size and twin boundary on the tensile properties of nanocrystalline face-centered cubic Cu<sub>50</sub>Ni<sub>50</sub> alloy. *Molecular Simulation*. 2022;48:1256-68.

- [24] Watanabe T, Tsurekawa S. The control of brittleness and development of desirable mechanical properties in polycrystalline systems by grain boundary engineering. *Acta Materialia*. 1999;47:4171-85.
- [25] Lu K, Lu L, Suresh S. Strengthening materials by engineering coherent internal boundaries at the nanoscale. *Science*. 2009;324:349-52.
- [26] Randle V. Twinning-related grain boundary engineering. *Acta Materialia*. 2004;52:4067-81.
- [27] Bozzolo N, Souai N, Logé RE. Evolution of microstructure and twin density during thermomechanical processing in a  $\gamma$ - $\gamma'$  nickel-based superalloy. *Acta Materialia*. 2012;60:5056-66.
- [28] Sundararaman M, Mukhopadhyay P, Banerjee S. Deformation behaviour of  $\gamma$ ' strengthened inconel 718. *Acta metallurgica*. 1988;36:847-64.
- [29] Zhang Z, Yang Z, Lu S, Harte A, Morana R, Preuss M. Strain localisation and failure at twin-boundary complexions in nickel-based superalloys. *Nature communications*. 2020;11:1-11.
- [30] Borovikov VV, Mendeleev MI, Smith TM, Lawson JW. Molecular dynamics simulation of twin nucleation and growth in Ni-based superalloys. *International Journal of Plasticity*. 2023;166:103645.
- [31] Stinville J, Lenthe W, Miao J, Pollock T. A combined grain scale elastic-plastic criterion for identification of fatigue crack initiation sites in a twin containing polycrystalline nickel-base superalloy. *Acta materialia*. 2016;103:461-73.
- [32] Stein CA, Cerrone A, Ozturk T, Lee S, Kenesei P, Tucker H, et al. Fatigue crack initiation, slip localization and twin boundaries in a nickel-based superalloy. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*. 2014;18:244-52.
- [33] Zhang Z, Yang Z, Lu S, Harte A, Morana R, Preuss M. Strain localisation and failure at twin-boundary complexions in nickel-based superalloys. *Nature communications*. 2020;11:4890.
- [34] Wang Y-J, Tsuchiya K, Dai L. Size-dependent plastic deformation and failure mechanisms of nanotwinned Ni3Al: Insights from an atomistic cracking model. *Materials Science and Engineering: A*. 2016;649:449-60.
- [35] Lv X, Zhang J, Harada H. Twinning behaviors during thermomechanical fatigue cycling of a nickel-base single-crystal TMS-82 superalloy. *Journal of materials engineering and performance*. 2014;23:766-71.
- [36] Li Y-L, Wu W-P, Ruan Z-G. Molecular dynamics simulation of the evolution of interfacial dislocation network and stress distribution of a Ni-based single-crystal superalloy. *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*. 2016;29:689-96.
- [37] Hirel P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files. *Computer Physics Communications*. 2015;197:212-9.
- [38] Chen B, Wu W-P, Chen M-X, Guo Y-F. Molecular dynamics study of fatigue mechanical properties and microstructural evolution of Ni-based single crystal superalloys under cyclic loading. *Computational Materials Science*. 2020;185:109954.
- [39] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of computational physics*. 1.19-117:1;995.
- [40] Liu H, Wang X, Liang H, Zhao Z, Li L, Yue Z, Deng C. The effect of void defect on the evolution mechanisms of dislocations and mechanical properties in nickel-based superalloys by molecular dynamics simulation of real  $\gamma/\gamma'$  structures. *International Journal of Solids and Structures*. 2020;191:464-72.
- [41] Amodeo J, Begau C, Bitzek E. Atomistic simulations of compression tests on Ni3Al nanocubes. *Materials Research Letters*. 2014;2:140-5.

- [42] Khoei A, Eshlaghi GT, Shahoveisi S. Atomistic simulation of creep deformation mechanisms in nickel-based single crystal superalloys. *Materials Science and Engineering: A*. 2021;809:140977.
- [43] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2009;18:015012.
- [44] Stukowski A, Albe K. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010;18:085001.
- [45] Li N-L, Wu W-P, Nie K. Molecular dynamics study on the evolution of interfacial dislocation network and mechanical properties of Ni-based single crystal superalloys. *Physics Letters A*. 2018;382:1361-7.
- [46] Goodfellow A. Strengthening mechanisms in polycrystalline nickel-based superalloys. *Materials Science and Technology*. 2018;34:1793-808.
- [47] Wu W, Guo Y, Wang Y. Evolution of misfit dislocation network and tensile properties in Ni-based superalloys: a molecular dynamics simulation. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*. 2012;55:419-27.
- [48] Wang X, Liu J, Jin T, Sun X. Tensile behaviors and deformation mechanisms of a nickel-base single crystal superalloy at different temperatures. *Materials Science and Engineering: A*. 61-598:154;2014.
- [49] Taheri-Mousavi SM, Gao H. On stress concentration in nanotwinned metals. *arXiv preprint arXiv:210207059*. 2021.
- [50] Lasalmonie A, Strudel J. Interfacial dislocation networks around  $\gamma'$  precipitates in nickel-base alloys. *Philosophical Magazine*. 1975;32:937-49.
- [51] Bitzek E, Gumbsch P. Atomistic simulations of dislocation-crack interaction. *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*. 2008;2:1348-59.
- [52] Segal V. Plastic deformation of crystalline materials. Google Patents; 1996.
- [53] Bergsmo A, Xu Y, Poole B, Dunne FP. Twin boundary fatigue crack nucleation in a polycrystalline nickel superalloy containing non-metallic inclusions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2022;160:104785.
- [54] Seita M, Hanson JP, Gradečak S, Demkowicz MJ. The dual role of coherent twin boundaries in hydrogen embrittlement. *Nature communications*. 2015;6:6164.
- [55] Hanson JP, Bagri A, Lind J, Kenesei P, Suter RM, Gradečak S, Demkowicz MJ. Crystallographic character of grain boundaries resistant to hydrogen-assisted fracture in Ni-base alloy 725. *Nature communications*. 2018;9:3386.