عرفان مداح^۱، محمد جواد رضایی^۲و محمد صدیقی^{۳.*} ۱. دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران ۲. دانشجوی دکتری، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران ۳. استاد، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

چکیده- سیمهای آلومینیومی، با توجه به کاربرد فراوانشان در صنایع گوناگون، به خصوص در صنعت انتقال برق، از اهمیت بسزایی برخوردار بودهاند. یکی از موثر ترین روش ها برای بررسی ریز ساختار، استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته است. در این پژوهش، تحولات ریز ساختاری یک سیم آلومینیومی سری 1000 (گرید ۱۳۵۰) با قطر ۴ میلیمتر تحت بارگذاری پیچشی با استفاده از حل گر طیفی (تبدیل فوریه سریع) نرمافزار داماسک مورد بررسی قرار می گیرد. به این منظور، حل کریستال پلاستیسیته طیفی (CPFFT) بر روی یک نماینده المان حجمی (RVE) با تعداد ۱۰۰ دانه انجام می شود. بافت اولیه می گیرد. به این منظور، حل کریستال پلاستیسیته طیفی (CPFFT) بر روی یک نماینده المان حجمی (RVE) با تعداد ۱۰۰ دانه انجام می شود. بافت اولیه غیر تصادفی به صورت اعداد چهاروجهی به نماینده المان حجمی اختصاص داده شده و سپس به کمک حل طیفی کریستال پلاستیسیته، اعداد چهاروجهی تغییر شکل یافته در اثر تغییر شکل برش استخراج می گردند. با استفاده از بسته نرمافزاری MTEX موجود در MATLAB، این اعداد به اشکال قطبی (PF) اشکال قطبی معکوس (IPF) و تابع توزیع جهت گیری (ODF) دانه ها تبدیل شده و ترسیم گردید. صحت سنجی نتایج TFT به کمک مقایسه نتایج تجربی آزمایش پراکنش الکترون بر گشتی (EBSD) با نتایج شبیهسازی انجام شده است. مقایسه نتایج نمونه π رادیان داد که جزءهای CPFFT دیده می قرد. *B* و *ه* در نتایج شکل قطبی مشاهده می شوند اما جزء محسوسی از نتایج تابع توزیع جهت در هر دو نمونه آزمونهای مشان داد که جزءهای CPFF

واژههای کلیدی: کریستال پلاستیسیته؛ بافت؛ تحولات ریزساختاری؛ روش عددی طیفی

Microstructure and Texture Investigation of Commercial Pure Aluminium Subjected to Torsion Deformation by Using Crystal Plasticity Simulation

E. Maddah¹, M.J. Rezaei², M. Sedighi^{3,*}

1. MSc Student, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran 2. Ph.D. Student, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

3. Prof., Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

Abstract: Aluminum wires, due to their extensive use in various industries, particularly in the electrical power transmission industry, have been of significant importance. One of the most effective methods for investigating microstructure is the utilization of crystal plasticity theory. In this study, the microstructural changes of a 1000 aluminum wire (grade 1350) with a diameter of 4 mm under torsional loading are examined using a spectral solver (Fast Fourier Transform) in DAMASK software. For this purpose, Crystal Plasticity Fast Fourier Transform (CPFFT) is applied to a Representative Volume Element (RVE) containing 100 grains. The initial non-random texture is assigned to the Representative Volume Element (RVE) as quaternion numbers, and then, using crystal plasticity spectral solver, the deformed quaternion numbers due to shear deformation are extracted. Using the MTEX

* : مسئول مكاتبات، پست الكترونيكي: sedighi@iust.ac.ir

toolbox available in Matlab, these numbers are transformed into pole figures (PF), inverse pole figures (IPF), and orientation distribution functions (ODF) of grains were converted and plotted. The accuracy of CPFFT results is validated against experimental results from Electron Backscatter Diffraction (EBSD) tests. Comparison of the results for a π -radian rotation sample shows that components A, \overline{A} , A_1^* , A_2^* , B, and \overline{B} are created from the pole figure results. However, no substantial component is seen in orientation distribution functions in both EBSD and CPFFT test samples.

Keywords: Crystal plasticity, Texture, Microstructural evolution, Numerical spectral solver.

فهرست علائم

علائم يونانى	A عنصر ایدهآل در تغییرشکل برشی ساده مواد FCC
γ کرنش برشی	a ضریب سخت شوندگی
Ý نرخ کرنش بر روی صفحه دلخواه	A ₂ عنصر ایدهآل در تغییرشکل برشی ساده مواد FCC
γ۵ نرخ برش مرجع	B عنصر ایدهآل در تغییرشکل برشی ساده مواد FCC
τ مولفه تنش برشی در صفحه دلخواه α	B عنصر ایدهآل در تغییرشکل برشی ساده مواد FCC
ξ مقاومت در برابر لغزش در صفحه دلخواه α	_{ij} ثابت الاستیک
کرنش حدی \mathcal{E}_f	E مدول الاستيسيته
v ضريب پواسون	ضريب سختشوندگی h_0
تنش تسليم σ_y	ماتریس برهم کنش لغزش- لغزش h^{lphaeta}
تنش حد نهایی σ_u	N تعداد دوران اعمال شده
<i>θ</i> مقدار زاویه دوران میله پس از اعمال بار پیچشی	N _s تعداد کل سیستمهای لغزش
بالانويس،ها	n ضريب حساسيت نرخ کرنش
α صفحه لغزش دلخواه	L طول سيم
β صفحه لغزش دلخواه	R شعاع سیم

مقدمه

سیمهای آلومینیومی خالص تجاری به دلیل رسانایی الکتریکی مرزدانهها میباشد [۲]. این م خوب، وزن کم و مقاومت بالا در برابر خوردگی، در قطرهای معرفی شد. تاکنون روشهای گوناگون کاربرد گستردهای در صنایع مختلفی نظیر صنعت انتقال توان الکتریکی دارند [۱]. به همین دلیل بهبود استحکام مکانیکی بهصورت ویژهای جهت تو این سیمها، ضمن تحت تاثیر قرار ندادن خواص الکتریکی خوب آنها، مورد توجه صنعت گران و محققان قرار گرفته است تا بتوان آز آنها در میدان وسیعی از کاربردها استفاده کرد [۲]. یکی از محبوبین تبدیل ساختار به روشهای رایج برای دستیابی به خواص مکانیکی مطلوب آلیاژهای آلومینیوم خالص تجاری، مانند افزایش استحکام این

سیمها، کاهش اندازه دانهها ضمن افزایش چگالی نابجاییها در مرزدانهها میباشد [۲]. این موضوع نخستین بار توسط هال – پچ معرفی شد. تاکنون روشهای مختلفی جهت تولید مواد ریزدانه معرفی گردیده که در این میان، فرایند تغییرشکل پلاستیک شدید بهصورت ویژهای جهت تولید مواد فوق ریزدانه^۱ مورد توجه فراوان محققین این حوزه قرار گرفته است [۳]. انجام فرآیندهای حرارتی و روشهای مرسوم استحکام دهی به وسیله کارسختی و همچنین تبدیل ساختار به دانههای ریز به وسیله فرآیندهای پیوسته شکل دهی فلزات، همچون کشش بر روی سیمهای آلومینیومی خالص، دارای محدودیت است [۴]. فرآیندهایی که با

تخصص های زیادی می باشد [۶]. بسته نرمافزاری داماسک (DAMASK)^{*} ابزاری برای این منظور است [۶]. ساختار این بسته نرمافزاری به شیوه سلسلهمراتبی طراحی شده است تا رفتار مادي را براي حل مسائل مقدار مرزي الاستوپلاستيک در حوزه-هايي همچون آسيب، اثرات حرارتي و برخي اثرات ترمودینامیکی، از مقیاس تککریستال تا قطعات، در فرآیندهای توليد پيچيده، مدل كند [۶]. اين نرمافزار قادر به مزدوج نمودن معادلات تعادل مکانیکی فرآیند با قوانین و مدل.های گوناگون كريستال پلاستيسيته بوده كه هر يك از اين معادلات به دست آمده را می تواند با ابزارهای عددی اجزا محدود و روش طیفی بر پايه تبديل فوريه سريع حل كند [۶]. تغييرشكل پيچشي ساده به طور موفقیتآمیزی برای اعمال کرنش های پلاستیک بزرگ به مواد فلزي مختلفي مورد استفاده قرار گرفته است [٧-٩]. صديقي و همکاران [۴]، اثر تغییرشکل حاصل از بار پیچشی را بر خواص كششي سيمهاي ألومينيومي خالص تجاري مورد ارزيابي قرار دادند. آنها سیمهای آلومینیومی با قطر یکسان را با گامهای طولی مختلف تحت تغییرشکل پیچشی قرار دادند تا اثر تغییرات ریزساختاری حاصل در اثر تغییرشکل پیچشی را مطالعه کنند. نتایج نشان دادند که میزان ریز شدن دانهها با مقدار تغییرشکل پلاستیکی برشی ناشی از تغییرشکل پیچشی ارتباط مستقیم دارد. کاروسو و آمبروگیو [۱۰]، آثار استحکامبخشی (استحکام تسلیم و نهایی، پلاستیسیته، چقرمگی)، رسانایی الکتریکی و تغییرات ریزساختاری آلومینیوم خالص تجاری ۱۳۷۰ (با خلوص ۹۹.۷٪ آلومینوم) را هنگامی که فرآیندهای مرسوم کشش سیم با روش تغییرشکل پلاستیک شدید کشش در کانالهای همسان زاویهای (ECAD) ترکیب می شوند، مورد بررسی قرار دادند. نشان داده شده است که سیمهای تولید شده طی فرآیند به کار گرفته شده کشش-ECAD-کشش در این پژوهش، بهبود مشهودی را نسبت به سیمهایی که به روش مرسوم کشش سیم تولید میشوند، از خود ارائه دادهاند. به این صورت که با داشتن ساختاری با دانه-های ریزتر، استحکام مکانیکی این سیمها افزایش داشته و همچنین رسانایی الکتریکی آنها نیز تحت تاثیر قرار نگرفته است.

شکلدهی استفاده میکنند که در آن کرنش های بسیار بالا به قطعهکار اعمال می شود به طوری که تغییرات قابل توجهی در ابعاد کلی آن ایجاد نشده و به جای آن، باعث ایجاد دانههای بسیار ریز میشود [۵]. روش های تجربی برای مطالعه رفتار تغییرشکل در پلیکریستالها همواره چالش برانگیز بوده و بیشتر اوقات باعث غیر قابل استفاده شدن نمونه مورد بررسی میشوند. از طرف دیگر، ساختار ناهمگون دانهها، جهتهای کریستالی گوناگون هریک از دانهها در میان تعداد زیادی از دانههای تشکیل دهنده یک قطعه، نواحی ناپیوستگی در مرزدانهها و تأثیراتی که هر دانه بر دانههای مجاور خودش میگذارد، موارد مهمی هستند که به پیچیدگی تحلیل تغییرشکل در پلی کریستالها میافزایند. به همین دلیل، روشهای شبیهسازی عددی به دلیل غیرمخرب بودنشان، توجه محققان را به خود جلب کردهاند. در میان این روشها، شبیهسازیهای کریستال پلاستیسیته اجزا محدود (CPFEM) و روش محاسباتی با استفاده از حلگر طیفی، از پرکاربردترین ابزارهایی هستند که به طور گسترده توسط پژوهشگران برای بررسی تغییرشکل پلیکریستالها به کار گرفته شدهاند. یک نکته قابل توجه در مورد روشهای شبیهسازی عددی، رسیدن به یک حد بهینه میان سرعت محاسبات و وضوح بالاتر میباشد. روش CPFEM این ضعف را در الگوریتم محاسباتی خود دارد: هزینه محاسباتي در وضوحهاي نسبتا بالا به طور قابل توجهي بالا است. در حالی که روش حل طیفی در فضای فوریه عمل کرده و به نسبت روش FEM به دلیل استفاده مکرر از تبدیل فوریه سریع (FFT) به عنوان بخشى از الگوريتم حل تكرارشونده، مي تواند در وضوحهای بالا بدون هزینه محاسباتی سنگین مدیریت شود. مدلهای پیوسته که تحولات ریزساختاری را استخراج می-

کنند بر دو مولفه اساسی استوار هستند: ۱) متغیرهای کمی وضعیت که ویژگیهای اساسی وضعیت ماده را در بر می گیرند و ۲) معادلاتی که تحولات رخ داده را تحت بارگذاری توصیف می کنند [۶]. توسعه یک بسته نرمافزاری که قادر به ادغام این جوانب مختلف برای به دست آوردن یک دیدگاه کامل از تحولات ریزساختاری اتفاق افتاده باشد، نیازمند به کارگیری

بدون محدودیت به یک قانون ساختاری پلاستیسیته خاص و با در نظر گرفتن اجرای آن برای یک مدل قابل تعمیم برای انواع مواد مختلف، ارائه کردند. آنها در این مقاله، دو رویکرد حل كريستال پلاستيسيته به روش تبديل فوريه سريع (CPFFT)^v و CPFEM را در حل مسائل کریستال پلاستیسیته مورد مقایسه قرار دادند. نشان داده شد که روش CPFFT نسبت به روش CPFEM وابستگی بسیار کمتری به تعداد مش داشته و نتایج حاصل از رویکرد CPFFT با سرعت و وضوح بسیار بیشتری از نتایج CPFEM استخراج محاسبه می شوند. مکانیزمهای گوناگونی همچون جریان پلاستیک ناهمسانگرد، شروع آسیب و انتشار ترک، پاسخ کلی مکانیکی مواد سازهای را بیان میکنند. بنابراین، درک چگونگی اثر گذاشتن هر یک از این مکانیزمها بر روی یکدیگر، امری ضروری در طراحی آلیاژهای ارتقا یافته میباشد. در همین زمینه، دیهل و همکاران [۱۴]، با استفاده از بسته نرم-افزاری داماسک، چگونگی مزدوج کردن رویکرد کریستال پلاستیسیته با روشهای میدان فازی شکست، برای درک بهتر ارتباط پیچیده میان جهت گیری کریستالی و هندسه یک حفره، را مورد بررسی قرار دادند. در یک پژوهش دیگر، هائوالا و همکاران [۱۵]، اثر اندازه دانه را بر جریان تنش در چند ماده با ساختار كريستال FCC (مس، آلومينيوم، نقره و نيكل)، با استفاده از همگنسازی محاسباتی یک نماینده المان حجمی (RVE) برای یک ریزساختار، با رویکرد FFT و ترکیب آن با یک مدل کریستال پلاستیسیته بر مبنای گرادیان کرنش، مورد بررسی قرار دادند. مطالعات انجام شده نشان میدهند که چگونه ترکیب FFT با مدل کریستال پلاستیسیته بر مبنای گرادیان کرنش میتواند اثر مرزدانهها بر رفتار مکانیکی را، ضمن استفاده از RVE واقع گرایانه برای ریزساختار مورد نظر، بررسی کند.

در این مقاله، یک سیم آلومینیومی خالص تجاری تحت بار پیچشی به میزان π رادیان قرار گرفته است. این فرآیند با سرعت دورانی ۵ RPM ۵ توسط دستگاه آزمایش پیچش سنتام انجام شده که به جهت افزایش استحکام مکانیکی سیم آلومینیومی با ایجاد تغییرشکل پلاستیک شدید در آن صورت می گیرد. تصاویر مربوط

از دیگر دستاوردهای مهم این پژوهش می توان به کاهش اندازه-های دانهها اشاره کرد که انجام فرآیندهای حرارتی را که نیازمند صرف مقدار زیادی زمان و انرژی هستند، بینیاز میکند. شیخ و همکاران [۱۱]، در پژوهش خود به توصيف و مدلسازي بافت-های کریستالی در یکی از روشهای تغییرشکل پلاستیک شدید به نام تکنیک اکستروژن برش ساده (SSE)^۶ پرداختند. در مدل های CPFEM آن ها، سه مجموعه پلی کریستال به عنوان حجمهای نماینده در منطقه مرکزی یک نمونه، تحت تغییرشکل قرار می گیرند که تاریخچه تغییر شکل های حقیقی مشاهده شده در SSE را مدل میکنند. مشاهده شده است که مدلهای CPFEM توسعه داده شده در این پژوهش نه تنها تعاملات پیچیده میان هر کدام از کریستالهای تشکیل دهنده مجموعه کریستالی را ثبت میکنند، بلکه شرایط مرزی درونی فرآیند SSE را نیز به تصویر میکشند. رضایی و همکاران [۱۲]، در پژوهشی، شبیه-سازی اجزا محدود چند مقیاسی کریستال پلاستیسیته برای مواد پلیکریستال را در یک چارچوب محاسباتی سلسله مراتبی انجام داده و به تجزیه و تحلیل ساختار در مقیاس ماکرو/میکرو پرداختند. یافته های این تحقیق نشان داد که بافت پس از پیچش آلومينيوم خالص به طور كامل به لغزش نابجايىها نسبت داده می شود و توسط کریستال پلاستیسیته قابل پیش بینی می باشد. همچنین، نشان داده شده است که شبیهسازی چندمقیاسی كريستال پلاستيسيته مي تواند تأثير كرنش ناهمگن بر بافت تغييرشكل يافته را پيشبيني كند. يک پيشرفت مهم براي پيشبيني پاسخ مکانیکی مواد ساختاری میتواند با استفاده از یک اصلاح دقیقتر در ریزساختار ایجاد شده، صورت بگیرد. به این منظور، رسيدن به بالاترين حد ممكن در وضوح فضايي مدل، مي تواند مفيد واقع شود. به منظور استخراج جزئيات پيچيده ريزساختاري، روش های طیفی به عنوان یک جایگزین کارآمد برای روش مرسوم اجزا محدود در سالیان گذشته معرفی و قابلیتهای آنها برای مورد مواد پلیکریستالی نشان داده شده است. آیزنلوهر و همکاران [۱۳]، در پژوهش خودشان، توسعه فرمولاسيون طيفي موجود برای پلی کریستال ها را، در شرایط کرنش های محدود،

به بافت تجربی شامل تابع توزیع جهت، شکل قطبی و شکل قطبی معکوس این آزمایش با انجام آزمایش پراکنش الکترون برگشتی (EBSD)^۹ بدست میآیند. همچنین شبیهسازیهای عددی جهت پیشبینی این رفتار با استفاده از حل گر طیفی داماسک انجام میشود. هدف از شبیهسازی عددی انجام شده در این مقاله با استفاده از حل گر طیفی داماسک، به دست آوردن تحولات ریزساختاری از جمله بافت ایجاد شده در نمونه آلومینیومی تحت بارگذاری پیچشی است. در این بررسی، بافت حاصل از آزمایش تجربی و شبیهسازی عددی انجام شده برای نمونه آلومینیومی مورد مقایسه قرار گرفتهاند.

در سالیان اخیر روش CPFFT برای حل مسائل کریستال پلاستیسیته، به عنوان یک جایگزین برای روش مرسوم CPFEM معرفی شده است [۱۳]. علاوه بر این، با استفاده از نرم افزار داماسک، شرایط انعطاف پذیری برای ترکیب کردن چندین قانون ساختاری کریستال پلاستیسیته با طرحهای همگنسازی محاسباتی CPFFT فراهم میشود. توان بالای این نرم افزار، به نصوص در زمینه شبیهسازی با رویکرد حل طیفی، باعث شده است که مسیرهای تحقیقاتی بسیار گسترده و نوآورانهای به روی محققان باز شده باشد تا بتوانند، شبیهسازیهای عددی سنگین تر و با وضوح نتایج بیشتری را، در زمینههایی که روش CPFEM در تحلیلشان ضعف داشت، انجام دهند. بنابراین در این مقاله، با استفاده از رویکرد TPFT، شبیهسازی تغییرشکل پیچشی ساده در سیم آلومینیومی سری 1000 (گرید ۱۳۵۰) تحت بارگذاری

مواد و روش تحقیق

در شبیه سازی کریستال پلاستیسیته، مدل سخت شوندگی پدیدار شناختی توانی^{۱۰}، در ساده ترین شکل خودش برای بررسی سخت شوندگی موادی مورد استفاده می گیرد که تحت شرایط بارگذاری با کرنش شبه استاتیک و در وضعیت محیطی همدما باشند [۱۶]. برش بر روی هر سیستم لغزش دلخواه α به شکل نرخ آن به صورت زیر تعریف می شود [۱۷]:

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_{0}^{\alpha} \left| \frac{\tau^{\alpha}}{\xi^{\alpha}} \right|^{n} \operatorname{sgn} \left(\tau^{\alpha} \right)$$
⁽¹⁾

در این رابطه، ${}^{\alpha}_{0}$ نرخ برش مرجع، n ضریب حساسیت نرخ کرنش و ${}^{\alpha}$ بیانگر مولفه تنش برشی میباشد. همچنین، ${}^{\alpha}_{5}$ پارامتر مقاومت در برابر لغزش نامیده شده و از رابطه (۲) محاسبه می گردد [۱۷]:

$$\begin{split} \dot{\xi}^{\alpha} &= h_0 \sum_{\beta=1}^{N_{\rm s}} \left| \dot{\gamma}^{\beta} \right| \left| 1 - \frac{\xi^{\beta}}{\xi_{\infty}^{\beta}} \right|^{\rm a} \mathrm{sgn} \left(1 - \frac{\xi^{\beta}}{\xi_{\infty}^{\beta}} \right) h^{\alpha\beta} \end{split} \tag{(Y)}$$

در این رابطه، N_s کل تعداد سیستمهای لغزش بوده که برای ساختار کریستالی FCC آلومینیوم این مقدار برابر ۱۲ = N_s می– باشد. همچنین n_s م $\int_{0}^{\alpha} e^{-\beta n} d d d$ مرایب مادی هستند. از طرفی h_0 و a از طریق روی هم انداختن نمودارهای تجربی و مدل– سازی عددی بدست می آیند. $\beta^{3} d d d$ مریب کارسختی ماده می باشد و $\beta^{\alpha \beta}$ ماتریس برهم کنش لغزش–لغزش (slip – slip) بین سیستمهای لغزش α و β است که سخت شوندگی کریستال را توصیف می کند.

با توجه به آزمون EBSD که روی مقطع عرضی سیم آلومینیومی در مرحله پیش از اعمال بار صورت گرفت، مشخص شد که توزیع بافت سیم آلومینیومی مورد آزمایش در این مقاله به صورت غیرتصادفی و یا جهتدار بوده است. بدین صورت که در آن، جهت [۱۰۰] کریستالی آن با جهت X یا همان نورد (RD)^{۱۱} نمونه هم جهت بوده است. نرمافزار داماسک از الگوریتم حل FFT در تحلیل مسائل خود استفاده می کند. این قابلیت یک روش محاسباتی موثر برای حل معادلات حاکم بر شبیهسازی گوناگون، شامل رفتار الاستیسیته و پلاستیسیته مواد، هستند فراهم می کند. حل گر FFT عموما به علت توانایی بالای آن در تحلیل شرایط مرزی متناوب، که در شبیهسازیهای کریستال پلاستیسیته بسیار فراوان هستند، انتخاب می شود. طبیعت تکرارشونده شبکه-





بتواند به طور مناسبی این ذات تناوبی را مدیریت کند ضروری کرده است و به همین جهت رویکرد FFT به یک گزینه ایده آل در این زمینه تبدیل شده است. برای شبیهسازی با حل گر FFT نرمافزار داماسک، ابتدا یک RVE مجازی متناوب با تعداد ۱۰۰ دانه، با وضوح ۱۶ × ۱۶ × ۱۶ و به حجم × ⁵-10× ¹⁰⁻⁵ داده داده تشکیل و بافت جهتدار نمونه به آن اختصاص داده $10^{-5}\,m^3$ شده است. شرایط مرزی متناوب در نظر گرفته شده و بارگذاری به نحوى بر روى نماينده المان حجمي اعمال مي گردد كه كشش تکمحوره در راستای محور X و برش برروی صفحه XY را ایجاد نماید. شرایط مرزی ترکیبی مربوط به بار کششی ذکر شده به صورت معادله (۳) تعریف شده است:

$$\dot{\bar{F}}_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix} \times 10^{-3} \cdot s^{-1} \tag{(Y)}$$

همچنین تنش پیولا-کیرشهف متناسب با این بار به صورت معادله (۴) می باشد:

$$\bar{P}_{ij} = \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & 0 & * \\ * & * & 0 \end{bmatrix} Pa$$
(*)

که در معادلات (۳) و (۴)، $ar{F}_{ij}$ گرادیان تغییرشکل و $ar{P}_{ij}$ تانسور تنش پیولا-کیرشهف اول هستند و علامتهای * نشاندهنده مولفه های تکمیل کننده شرایط بارگذاری می باشند. همانند آزمایش کشش تجربی انجام شده در این مقاله، شرایط مرزی مشابهی با اعمال نرخ کرنش کششی ^۱-۳s^{-۱} به نماینده المان حجمی، برای شبیهسازی عددی ایجاد شده است. همچنین، برای شبيهسازى آزمايش پيچش نيمدور سيم آلومينيومي، شرايط مرزى



فک دستگاه تست پیچش

اعمالی برروی RVE با تعریف نرخ گرادیان تغییرشکل برشی به صورت معادله (۵) صورت گرفته است:

$$\dot{\bar{F}}_{ij} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & * & 0 \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix} \times 10^{-3} . s^{-1}$$
 (Δ)

در شکل ۱، تصویری از هندسه تعریف شده در گام اولیه (پیش از اعمال بار) نمایش داده شده است. برای توصیف تصویری المانهای طراحی شده با استفاده از نرمافزار داماسک، از نرمافزار پاراويو^{۱۲} استفاده می شود.

در این پژوهش، یک نمونه سیم آلومینیومی خالص تجاری به قطر ۴ میلیمتر و طول موثر ۳۰ میلیمتر به دو سر فک دستگاه آزمایش پیچش سنتام بسته میشود. این آزمایش پیچش مطابق استاندارد ASTM: A938 – 07 بر روی سطح مقطع عرضی سیم انجام شده است. در شکل ۲، تصویری شماتیکی از نحوه اعمال بار پیچشی بر روی نمونه آزمایش شده، جهت بدست آوردن نتايج تجربي آزمايش پيچش، ارائه شده است.

جهت بدست آوردن رفتار و استخراج خواص مکانیکی سیم آلومینیومی، یک آزمایش کشش نیز بر روی همان سیم انجام شده است که نمودار تنش – کرنش مربوط به آن در شکل ۳ ملاحظه می شود. آزمایش کشش تکمحوره بر روی نمونه در دمای اتاق با استفاده از دستگاه آزمایش کشش سنتام و با نرخ کرنش ⁻ s⁻¹ ASTM: صورت گرفته است. این آزمایش مطابق استاندارد :ASTM E8/E8M-15a بر روى سطح مقطع عرضي سيم انجام شده است. همچنین، طول موثر نیز با طول اولیه سیم برابر بوده است. جدول



شکل ۳- نتایج مربوط به تست کشش تکمحوره سیم آلومینیومی

حداقل آلومينيوم	حداکثر سيليسيوم	حداکثر آهن	حداکثر مس	حداکثر منگنز	حداکثر منیزیم	حداکثر روی	حداکثر تيتانيم	ساير
۹۹.۵	۰/۲۵	•/¥	•/• \	•/• \	•/•۵	• / • V	•/•۵	۰/۰۳
		تجاری [۱۲]	ومینیومی خالص	کانیکی سیم آلو	، ۲- خواص مک	جدول		

جدول ۱- حدود ترکیبات شیمیایی آلومینیوم خالص [۱۲]

جدول ۲- خواص مکانیکی سیم آلومینیومی خالص تجاری [۱۲]					
ν	E (GPa)	$(MPa)\sigma_y$	(MPa) σ_u	\mathcal{E}_{f}	
۰ /۳۳	۶٩	٩٧	19.4	74%	

تسکان میرا ^{۱۳}۳، با یک تشخیص دهنده معروف به هیکاری^{۱۵} انجام شده است. آنالیز دادههای بدست آمده با استفاده از بسته نرمافزاری او آی ام^{۱۹} صورت گرفته است. فرآیند آمادهسازی سیم آلومینیومی برای آزمایش EBSD به صورت سمبادهزنی مقطع عرضی سیم و سپس پولیشزنی این مقطع صورت بوده است. اسکنها در یک وضوح تک و در مناطق اسکن از پیش تعریف شده، با استفاده از ولتاژ موثر ۲۸ کیلوولت بر روی نمونهای که با زاویه ۷۰ درجه کج شده است، انجام شدند. اندازه گیریها برای نمونه بدون تغییرشکل در یک منطقه بزرگ و برای نمونه تغییرشکل یافته در یک منطقه بزرگ و برای نمونه بزرگ، منطقه انتخاب شده ۳۰۰۰ در ۲۰۰۰ میکرومتر با اندازه گام ۲ میکرومتر و در اسکن کوچک، این منطقه ۳۰۰ در ۶۰۰

۱ و ۲، به ترتیب نشان دهنده ترکیبات شیمیایی و خواص
 مکانیکی پایه استخراج شده از آزمایش تنش تک محوره می باشند
 [۱۲]. همچنین نمودار تنش – کرنش مربوط به آزمایش پیچش
 سیم آلومینیومی نیز در شکل ۴ مشاهده می شود.

در انتهای فرآیند اعمال بار در این آزمایش، سیم آلومینیومی پس از طی کردن نیم دور دوران (معادل π رادیان)، دچار تغییرشکل پلاستیک میشود. برای سیم آلومینیومی استفاده شده در این آزمایش، تصاویر مربوط به تابع توزیع جهت، شکل قطبی و شکل قطبی معکوس در حالت اولیه سیم و بعد از اعمال بار پیچشی به دست آمدهاند. برای این منظور از آزمایش های EBSD بر روی سیم آلومینیومی مورد بررسی در این تحقیق استفاده شده است. جمعآوری دادههای این آزمایش با استفاده از روش میکروسکوپ الکترون روبشی (SEM)^{۳۲} مجهز به میکروسکوپ



شکل ۴- نتایج مربوط به آزمایش پیچش سیم آلومینیومی



شکل ۵- تصویر بدست آمده از آزمون EBSD پیش از تغییر شکل پیچشی در سیم

آزمایش EBSD، الگوهای ثبت شده از بازگشت الکترونها ذخیره شده و سپس توسط نرمافزار OIM اطلاعات ریزساختاری، از جمله شکل قطبی (PF)^{۱۷}، شکل قطبی معکوس (IPF)^{۱۸} و تابع توزیع جهت (ODF)^{۱۹} استخراج شدهاند.

نتايج و بحث

شکل ۵، شکل استخراج شده از آزمون EBSD متعلق به نمونه قبل از تغییر شکل اندازهگیری در یک مستطیل محاط شده از مرکز تا نزدیک سطح خارجی است. از این آزمون، میانگین قطر

دانه ها μm ۵۵ محاسبه شده است. سپس شکل قطبی حاصل از این آزمون برای صفحه کریستالی (۱۱۱)، مطابق شکل ۶–الف بدست آمده است. همچنین در شکل ۶–ب، شکل قطبی محاسبه شده از حل عددی نیز، برای فاصله ۱/۵ میلیمتری از مرکز سیم، ارائه شده است. در هر دو شکل مشاهده می شود که جهت [۱۰۰] کریستالی با جهت RD نمونه هم جهت می باشد.

ویژگیهای مادی مرتبط با رفتار الاستیک و پلاستیک از طریق آزمونهای تجربی و شبیهسازی با استفاده از روش سعی و خطا به دست آمدهاند. این ویژگیها سپس به ماده مورد بررسی



شکل ۶- شکل قطبی (۱۱۱) بدست آمده از الف) نمونه تجربی و ب) حل عددی، برای وضعیت اولیه نمونه



اختصاص داده شدهاند. در شکل ۷ و ۸ مقایسه میان نمودار خواص مادی تجربی و خواص مادی استفاده شده برای شبیه-سازی نمایش داده شده است. بنابراین، با توجه به نزدیکی قابل توجه نمودارهای شبیهسازی و تجربی، میتوان خواص مادی استفاده شده در شبیهسازی عددی با حل گر طیفی نرمافزار داماسک را گزارش نمود. تطابق بالای این نتایج بیانگر امکان استفاده از ابزارهای شبیهسازی کریستال پلاستیسیته برای درک رفتار ماده در مقیاس میکرو و تعمیم آن تا مقیاس های ماکرو می-باشد.

جدول ۳، نشان دهنده مقادیر ثوابت الاستیک ماده است که از تنظیم نمودارهای آزمایش کشش تجربی و حل عددی برروی هم بدست آمده است. همچنین جدول ۴ و جدول ۵، نشاندهنده مقادیر مدل ساختاری سختشوندگی Phenopowerlaw ماده آلومینیومی استفاده شده در این مقاله میباشند.

بر خلاف روش های شبیه سازی اجزا محدود، برای حلگر طیفی داماسک به صورت مستقیم امکان اعمال بار پیچشی بر روی نماینده المان حجمی داماسک وجود ندارد. از طرفی، پیچش نوع خاصی از بارهای برشی است. بنابراین، میزان کرنش برشی



شکل ۸- مقایسه نتایج تجربی و شبیهسازی بار برشی برای π رادیان دوران، جهت بدست آوردن خواص مادی نمونه

مقدار	واحد	ثوابت الاستيك
$1 \circ \mathcal{F} / \Lambda$	GPa	C11
8°/41	GPa	C12
٢٨/٣۴	GPa	C44

جدول ۳- خواص الاستيک

جدول ۴- ضرایب پلاستیسیته مدل ساختاری Phenopowerlaw برای شبیه سازی بار کششی

مقدار	واحد	تعريف	متغير
•/••\	s ⁻¹	نرخ برش مرجع	Ϋ́ο
<i>9</i> °	MPa	مقاومت لغزشي	$ au_0$
)) •	MPa	تنش اشباع	$ au_{sat}$
600	MPa	ضريب سختشوندگي	ho
۲/۲۵	-	ضريب سختشوندگي	a
۲۰	-	ضريب حساسيت نرخ كرنش	n

جدول ۵- ضرایب پلاستیسیته مدل ساختاری Phenopowerlaw بدست آمده برای مدلسازی بار پیچشی

مقدار	واحد	تعريف	متغير	
• / • • \	s ⁻¹	نرخ برش مرجع	Ϋ́ο	
74	MPa	مقاومت لغزشي	$ au_0$	
V۵	MPa	تنش اشباع	$ au_{sat}$	
۲۰	MPa	ضريب سختشوندگي	h_0	
۲/۲۵	-	ضريب سختشوندگي	а	
۲۰	-	ضريب حساسيت نرخ كرنش	n	



شکل ۹- شماتیک بارگذاری بر روی سیم آلومینیومی

حاصل از تغییرشکل پیچشی بر روی یک مقطع دایروی را می-توان از طریق رابطه (۶) محاسبه کرد [۴].

$$\gamma = \frac{2\pi RN}{L} \tag{($)}$$

در این رابطه R نشاندهنده فاصله از مرکز سیم، N تعداد دوران اعمال شده و طول سیم تغییر شکل یافته است. همچنین، کرنش برشی پلاستیک حاصل را نیز می توان از طریق رابطه (۷) محاسبه کرد [۴]:

$$\varepsilon = \frac{(\gamma)}{\sqrt{(3)}} \tag{V}$$

بنابراین، با توجه به شکل شماتیک بارگذاری صورت گرفته که در شکل ۹ نمایش داده شده است، حداکثر کرنش برشی اتفاق افتاده بر روی سیم آلومینیومی به طول mm ۳۰ = L و شعاع mm از نیم دور تغییر شکل پیچشی برابر است با ۲۰۹۰ (ست با ۲۰۹۹ در این پژوهش، مکعب المان نماینده مورد بررسی در *۲سمی در ۲سمی در این پژو*هش، مکعب المان نماینده مورد بررسی در فاصله ۱/۵ میلی متری از مرکز سیم انتخاب شده است. علت انتخاب این ناحیه از سیم به دلیل ترکهایی بوده است که در اثر اعمال بار پیچشی بر روی سطح خارجی سیم اتفاق می افتادند و با وجود این ترکها، آزمون EBSD نمی توانست نتایج مناسبی را بررسی تغییرات ریزساختاری دورترین ناحیه از مرکز سیم بوده است. زیرا توزیع بار پیچشی از مرکز تا سطح نمونه به صورت غیریکنواخت است و در نواحی نزدیک به لبه بیشترین مقدار را



شکل ۱۰- نماینده المان حجمی بعد از تغییر شکل حاصل از بار برشی ساده در صفحه XY

دارد. به همین علت، فاصله ۱/۵ میلیمتری ذکر شده انتخاب گردید تا بتوان هر دو نیاز فوق را برآورده نمود. با استفاده از رابطه (۲)، کرنش برشی در این فاصله از مرکز مقطع دایروی سیم برابر با ۱۵۷/۰ = ۲ میباشد. تصویر مربوط نماینده المان حجمی، پس از این مقدار کرنش در شکل ۱۰ نمایش داده شده است.

اطلاعات مربوط به جهتگیری کریستالی دانههای نماینده المان حجمی از ابتدا تا انتهای فرآیند شبیهسازی با داماسک به صورت اعداد چهاروجهی در یک فایل متنی آماده می شوند. برای تفسیر جهت گیری های کریستالی و تحولات بافت در نتایج شبیه-سازی با داماسک این فایل های متنی را می توان در افزونه MTEX نرمافزار MATLAB بارگذاری کرد. با استفاده از کدهای موجود در این افزونه، این اعداد به PF، ODF و IPF تبدیل می شوند تا بتوان با ارائه یک توصیف تصویری از جهتگیریها، در مورد جهت گیری کریستالی دانه های نماینده المان حجمی در ابتدا و انتهای فرآیند شبیهسازی اظهار نظر کرده و تغییرات اتفاق افتاده را ملاحظه کرد. در انتهای فرآیند اعمال بار پیچشی آزمایش تجربی و بار برشی شبیهسازی، برای ناحیهای در فاصله ۱/۵ میلیمتری از مرکز سیم آلومینیومی، شکل قطبی نمونه تجربی به صورت شکل ۱۱-الف و شکل قطبی حل عددی به صورت شکل ۱۱-ب مشاهده شده است. همچنین، در شکل ۱۱-ج، جزءهای^۲ ایده آل در پلی کریستال های FCC که تحت تغییر شکل بر شی ساده قرار گرفتهاند نشان داده شده است [۱۹].



شکل ۱۱– الف) شکل قطبی نمونه در صفحه کریستالی (۱۱۱)، پس از نیم دور تغییرشکل پیچشی، ب) شکل قطبی شبیهسازی شده پس از اعمال کرنش برشی معادل ۱۵۷/۰ و ج) شکل قطبی صفحه (۱۱۱) نمایش دهنده جزءهای ایدهآل مرتبط با تغییرشکل برشی ساده در مواد با ساختار کریستالی FCC [۱۹]



شکل ۱۲- تابع توزیع جهت در ° $arphi_2 = 45$ و ° $arphi_2 = 45$: الف) اندازه گیری شده از آزمایش EBSD پس از اعمال نیم دور تغییر شکل پیچشی به سیم آلومینیومی، ب) مدلسازی عددی پس از اعمال کرنش برشی معادل ۱۵۷/۰ و ج) موقعیت جزءهای ایده آل برای تغییر شکل برشی ساده در مواد با ساختار کریستالی FCC [۱۸]

پس از اعمال نیم دور تغییر شکل پیچشی به سیم آلومینیومی، به همراه ODF بدست آمده از شبیهسازی عددی، در فاصلهای به اندازه ۱/۵ میلیمتر از مرکز سیم، به ترتیب در شکل ۱۲-الف و با توجه به شکل ۱۱–الف و شکل ۱۱–ب، نتایج تجربی و حل عددی شکل قطبی، جزءهای A، Ā، A، A، B و ā را نشان دادهاند. همچنین، نتایج ODF به دست آمده از آزمایش EBSD



آزمایش EBSD پس از نیم دور تغییرشکل پیچشی و ب) حل عددی پس از اعمال کرنش برشی معادل ۱۵۷٬۰

شکل ۱۲-ب ارائه شدهاند. ضمنا، برای بررسی جزءهای ایدهآل ایجاد شده در تابع توزیع جهت، برای تغییرشکل برشی ساده، در زوایای 0 = φ₂ و °45 = φ₂، از شکل ۱۲-ج استفاده می شود [۱۸]. اما از مقایسه نتایج تابع توزیع جهت به دست آمده در نتایج تجربی و حل عددی با جزءهای ایدهآل، تشکیل جزء محسوسی در هیچ یک از نتایج مشاهده نمی شود.

شکل قطبی معکوس به دست آمده از آزمایش EBSD پس از اعمال نیم دور تغییرشکل پیچشی به سیم آلومینیومی، به همراه شکل قطبی معکوس بدست آمده توسط شبیهسازی عددی، در فاصلهای به اندازه ۱/۵ میلیمتر از مرکز سیم، به ترتیب در شکل ۱۳-الف و شکل ۱۳-ب نمایش داده شدهاند. با توجه به شکل ۱۳، که جهت گیری های کریستالی را توسط شکل قطبی معکوس در راستای نورد (RD) نشان میدهند، مشاهده می شود که هم نتایج تجربی و هم نتایج شبیهسازی شدت بیشتر حضور جهت کریستالی [۰۰۰] را پس از اعمال تغییر شکل برشی نشان میدهند.

نتيجه گيري

در این مقاله به بررسی شبیهسازی کریستال پلاستیسیته در فرآیند

پیچش خالص بر روی سیم آلومینیومی خالص تجاری، با استفاده از رویکرد حل عددی CPFFT پرداخته است. شبیهسازی عددی انجام شده با استفاده از حل گر طیفی (تبدیل فوریه سریع) بسته نرمافزاری داماسک صورت گرفته است. بدین ترتیب، نتایج زیر بدست آمدهاند:

- از آزمایش EBSD روی نمونه آلومینیومی در مرحله پیش
 از اعمال بار، مشخص شد که جهت گیری الیاف [۱۰۰]
 موازی با محور X نمونه بوده است. این جهت گیری به صورت یک بافت جهت دار به RVE ساخته شده با ۱۰۰
 دانه اعمال شده است.
- به منظور استخراج ضرایب الاستیسیته و مدل سخت-شوندگی Phenopowerlaw سیم آلومینیومی، شبیهسازی – های آزمایش کشش تکمحوره و برش بر روی نماینده المان حجمی با استفاده از حل گر طیفی داماسک، جهت کالیبره کردن این ضرایب، انجام شد.
- شکل قطبی به دست آمده در شبیهسازی و نتایج تجربی حضور جزء *A، Ā، A* م *B و B را ن*شان دادند اما تشکیل جزء مشهودی در نتایج تابع توزیع جهت آزمایش تجربی و شبیهسازی عددی ملاحظه نمی شود.

قدرداني

این تحقیق حمایت خاصی از موسسات عمومی، صنعتی و غیر انتفاعی دریافت نکر ده است.

- در بررسی شکل قطبی معکوس، تراکم حضور بیشتر جهت کریستالی [۰۰۱]، در راستای ثابت نورد (RD) نمونه نسبت به سایر جهتها، هم در نتایج تجربی و هم در نتایج مدلسازی مشاهده شد.

 - 11- rolling direction 12-Paraview
 - 13- Scanning Electron Microscope
 - 14- Tescan Mira3
 - 15- Hikari
 - 16- OIM

۵.

- 17- pole figure
- 18- inverse pole figure
- 19- orientation distribution function
- 20- component

and Tsuji, N., "Mechanical Properties of Bulk Ultrafine Grained Aluminum Fabricated by Torsion Deformation at Various Temperatures and Strain Rates", Materials Transactions, Vol. 55, No. 1, pp. 106-113, 2014.

- Wang, C., Li, F., Li, J., Dong, J., and Xue, F., 8. "Microstructure Evolution, Hardening and Thermal Behavior of Commercially Pure Copper Subjected to Torsion Deformation", Materials Science and Engineering: A, Vol. 598, pp. 7-14, 2014.
- 9. Li, J., Li, F., Zahid Hussain, M., Wang, C., and Wang, L., "Micro-structural Evolution Subjected to Combined Tension-Torsion Deformation for Pure Copper", Materials Science and Engineering: A, Vol. 610, pp. 181-187, 2014.
- 10. Caruso, S., and Ambrogio, G., "Novel Drawing System Approach to Manufacture Performant Commercially Pure Aluminium Fine Wires", Int J Adv Manuf Technol, Vol. 118, No. 3-4, pp. 1101-1109, 2022.
- Sheikh, H., Ebrahimi, R., and Bagherpour, E., 11. "Crystal plasticity Finite Element Modeling of Crystallographic Textures in Simple Shear Extrusion (SSE) Process", Materials & Design, Vol. 109, pp. 289-299, 2016.
- Rezaei, M. J., Sedighi, M., and Pourbashiri, M., 12. "Developing a New Method to Represent the Low and High Angle Grain Boundaries by Using Multi-Scale Modeling of Crystal Plasticity", Journal of Alloys and Compounds, Vol. 939, p. 168844, 2023.

- 1- ultrafine grained
- 2- crystal plasticity finite element method
- 3- fast fourier transformation
- 4- Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit
- 5- equal channel angular drawing
- 6- simple shear extrusion
- 7- crystal plasticity fast fourier transformation
- 8- represetentative volume element
- 9- electron backscattered diffraction
- 10- phenomenological power law
- 1. Kiessling, F., Nefzger, P., Nolasco, J. F., and Kaintzyk, U., Overhead Power Lines: Planning, Design, Construction, vol. 759, Springer, 2003.
- 2. Pourbashiri, M., Poletti, M. C., Sedighi, M., and Sommitsch, C., "Strengthening Mechanisms of Al Wires Processed by Equal Channel Angular Torsion Drawing", Materials Science and Technology, Vol, ?, No. ?, pp. ?, 2019.
- Valiev, R. Z., "Developing SPD Methods For 3. Processing Bulk Nanostructured Materials with Enhanced Properties", Metals and Materials International, Vol. 7, No. 5, pp. 413-420, 2001.
- 4. Sedighi, M., Vaezi, A., and Pourbashiri, M., "Influence of Different Torsion Pitch on Microstructural Evolution and Strengthening Mechanism of Al Wires", Archives of Metallurgy and Materials, Vol, ?, No. ?, pp. ?, 2018.

ابراهیمی, محمود و صفرزاده، امین و علیپور، سعید، ۱۳۹۵، فرایندهای

نانوساختار، سومین کنفرانس نوآوری های اخیر در مهندسی صنایع و

مهندسی مکانیک، تهران، https://civilica.com/doc/594568

- Roters, F. et al., "DAMASK-The Düsseldorf 6. Advanced Material Simulation Kit for Modeling Multi-Physics Crystal Plasticity, Thermal, and Damage Phenomena from The Single Crystal Up to The Component Scale", Computational Materials Science, Vol. 158, pp. 420-478, 2019.
- 7. Khamsuk S., Park N., Gao, S., Terada, D., Adachi, H.,

مراجع

واژەنامە

- Eisenlohr, P., Diehl, M., Lebensohn, R. A., and Roters, F., "A spectral Method Solution to Crystal Elasto-Viscoplasticity at Finite Strains", *International Journal of Plasticity*, Vol. 46, pp. 37– 53, 2013.
- Diehl, M., Wicke, M., Shanthraj, P., Roters, F., Brueckner-Foit, A., and Raabe, D., "Coupled Crystal Plasticity–Phase Field Fracture Simulation Study on Damage Evolution Around a Void: Pore Shape Versus Crystallographic Orientation", *JOM*, Vol. 69, No. 5, pp. 872–878, 2017.
- Haouala, S., Lucarini, S., Lorca, J. L., and Segurado, J., "Simulation of the Hall-Petch Effect in FCC Polycrystals by Means of Strain Gradient Crystal Plasticity and FFT Homogenization", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 134, p. 103755, 2020.
- 16. Khan, A. S., Liu, J., Yoon, J. W., and Nambori, R., "Strain Rate Effect of High Purity Aluminum Single

Crystals: Experiments and Simulations", *International Journal of Plasticity*, Vol. 67, pp. 39–52, 2015.

- Fu, W., Li, Y., Hu, S., Sushko, P., and Mathaudhu, S., "Effect of loading Path on Grain Misorientation and Geometrically Necessary Dislocation Density in Polycrystalline Aluminum Under Reciprocating Shear", *Computational Materials Science*, Vol. 205, p. 111221, 2022.
- Beyerlein, I. J., and Tóth, L. S., "Texture evolution in Equal-Channel Angular Extrusion", *Progress in Materials Science*, Vol. 54, No. 4, pp. 427–510, 2009.
- Li, S., Beyerlein, I. J., and Bourke, M. A. M., "Texture Formation During Equal Channel Angular Extrusion of Fcc and Bcc Materials: Comparison with Simple Shear", *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 394, No. 1, pp. 66–77, 2005.