

รายงานการวิจัยฉบับสมบูรณ์

การศึกษากระบวนการวิศวกรรมขอบเกรนของโลหะผสมคาร์บอน AISI 1010 ด้วย
กระบวนการ Thermomechanical processing

The study of thermomechanical processing for grain boundary engineering in
AISI 1010 steels

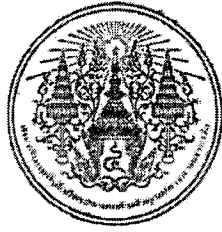
ผศ.ดร. ปัญญา ขันธุ์สุวรรณ

ได้รับทุนสนับสนุนงานวิจัยจากเงินงบประมาณรายได้ ประจำปีงบประมาณ 2554

คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รายงานการวิจัยฉบับสมบูรณ์

การศึกษากระบวนการวิศวกรรมขอบเกรนของโลหะผสมคาร์บอน AISI 1010 ด้วย
กระบวนการ Thermomechanical processing

The study of thermomechanical processing for grain boundary engineering in
AISI 1010 steels

ผศ.ดร. ปัญญา ขันธุ์สุวรรณ

ได้รับทุนสนับสนุนงานวิจัยจากเงินงบประมาณรายได้ ประจำปีงบประมาณ 2554

คณะวิศวกรรมศาสตร์

12833228

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ชื่อโครงการ (ภาษาไทย) การศึกษากระบวนการวิศวกรรมขอบเกรนของโลหะผสมคาร์บอน AISI 1010
ด้วยกระบวนการ Thermomechanical processing.....

แหล่งเงิน ทุนงบประมาณรายได้.....

ประจำปีงบประมาณ..... 2554..... จำนวนเงินที่ได้รับการสนับสนุน..... 64,900..... บาท

ระยะเวลาทำการวิจัย..... 1..... ปี ตั้งแต่ 1.ก.ย. 2554 ถึง 31.ต.ค. 2555.....

ชื่อ-สกุล หัวหน้าโครงการ และผู้ร่วมโครงการวิจัย พร้อมระบุ หน่วยงานต้นสังกัด

ชื่อ-สกุล (ภาษาไทย) นาย ปัญญา ชันธุ์สุวรรณ

ชื่อ-สกุล (ภาษาอังกฤษ) Mr. Panya Kansuwan

สาขาวิชา วิศวกรรมเครื่องกล

คณะ วิศวกรรมศาสตร์

E-mail panya.ka@kmitl.ac.th

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาระเบียบวิธีทางความร้อนทางกล ในการวิเคราะห์กลไกการเพิ่มสัดส่วนขอบเกรนชนิดพิเศษแบบ low-sigma Coincident Site Lattice Boundary (CSLB) ในเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI 1010 ในฐานะตัวแทนวัสดุที่มีโครงสร้างผลึกแบบ BCC ซึ่งส่วนใหญ่เป็นวัสดุโครงสร้างวิศวกรรม การเพิ่มสัดส่วนขอบเกรนชนิดพิเศษด้วยกลไก Annealing twinning enhancement ในวัสดุโครงสร้างผลึกแบบ FCC นั้นประสบความสำเร็จ แต่ถูกจำกัดในวัสดุโครงสร้างผลึกแบบ BCC กลไกการหมุนของขอบเกรนและเกรนจึงเป็นกลไกที่เหลือเพื่อสัดส่วนขอบเกรนชนิดพิเศษในวัสดุดังกล่าว การกระตุ้นขึ้นงานด้วยความร้อนที่ อุณหภูมิ 400 500 และ 600°C เป็นเวลา 168 และ 504 ชม. กับขึ้นงานที่มีพลังงานสะสมยี่ดหุ่่นหลังการเปลี่ยนแปลงรูปร่างอย่างถาวรที่ 6% สัดส่วนขอบเกรนชนิดพิเศษแบบ low-sigma CSLBs ถูกประเมินด้วยเทคนิค Electron back-scatter diffraction กับรูปแบบ Kikuchi bands ด้วยเงื่อนไขของ Brandon นั้นพบว่า สัดส่วนขอบเกรนชนิดพิเศษแบบ low-sigma CSLBs สูงสุดที่ 22.5% หลังการอบขึ้นงานที่ผ่านการเปลี่ยนแปลงรูปร่างอย่างถาวรที่ 6% ที่ 600°C เป็นเวลา 504 ชม.

คำสำคัญ: วิศวกรรมขอบเกรน AISI1010 อบอ่อนแบบละเอียด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้ I

Research Title: The study of thermomechanical processing for grain boundary engineering in AISI 1010 Steels.....

Researcher: Panya Kansuwan.....

Faculty: Faculty of Engineering **Department:** Mechanical engineering department.....

ABSTRACT

The overall objective of this research program is to increase a fraction of low-sigma Coincident Site Lattice boundary (CSLB) in BCC materials and low carbon steel, AISI1010, was used as their representatives. Indeed, a series of annealing and straining was successfully applied for FCC materials. High fraction of annealing twinning was introduced during grain growth or recrystallization. However, the annealing twinning enhancement process is unique for FCC and major controlling mechanism in each material is different. For BCC materials, plane rotation or grain rotation becomes active. Long time exposure to low temperature range of small strained AISI1010 at 6% and 10% tensile elongation was conducted to activate the mechanism. Annealing temperature was at 400°C, 500°C and 600°C in a period time of 168 h and 504 h. After heat treatment, Kikuchi patterns were collected and interpreted by Electron back-scatter diffraction techniques. Software embedded in SEM can evaluate sigma-value of GBs using Brandon's criterion. Primary achievement is given 6 % of strain on specimen followed by with heat treatment at 600°C for 504 h. The maximum %CSL attained is 22.5%.

Keywords : Grain boundary engineering, BCC, Fine tuning

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

กิตติกรรมประกาศ

การวิจัยครั้งนี้ได้รับทุนสนับสนุนการวิจัยจากสถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง จากแหล่งทุนงบประมาณรายได้ คณะวิศวกรรมศาสตร์ ประจำปีงบประมาณ พ.ศ. 2554

ขอขอบคุณ คุณอรอุมา สันตวิธี ศูนย์เทคโนโลยีโลหะและวัสดุแห่งชาติ สำนักงานพัฒนาวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีแห่งชาติ

ผศ.ดร. ปัญญา ขันธุ์สุวรรณ



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้ **III**

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	I
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	II
กิตติกรรมประกาศ.....	III
สารบัญ.....	IV
สารบัญตาราง.....	VI
สารบัญภาพ.....	VII
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย.....	4
1.3 ขอบเขตของการวิจัย.....	5
1.4 วิธีดำเนินการวิจัย.....	5
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	5
บทที่ 2 ทฤษฎีและหลักการที่เกี่ยวข้องกับวิศวกรรมขอบเกรน	6
2.1 การเกิด โครงสร้างของเกรน.....	7
2.2 โครงสร้างเรขาคณิตของขอบเกรน.....	8
2.3 ประเภทของขอบเกรน.....	13
2.4 Coincidence site lattice boundary (CSLB).....	15
2.5 กระบวนการในวิศวกรรมขอบเกรน.....	19
2.6 กระบวนการอบอ่อน.....	21
2.7 การรีด.....	32
บทที่ 3 โมเดลการไดนามิกส์	36
3.1 บทนำ.....	36
3.2 โมเดลการไดนามิกส์.....	36
3.3 ทฤษฎีพื้นฐานในการคำนวณค่าพลังงาน.....	37
3.4 Periodic boundary conditions (PBC).....	39
3.5 Time integration algorithm.....	39
3.6 Predictor-corrector algorithm.....	41

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
บทที่ 4 วิธีดำเนินการวิจัย	42
4.1 โครงสร้างจุลภาคของเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ.....	42
4.2 การวัดและการวิเคราะห์ชนิดขอบเกรน Coincident Site Lattice.....	43
4.3 ทฤษฎีพื้นฐานในการคำนวณค่าพลังงาน.....	37
4.4 วิธีการวิเคราะห์ด้วยสเตอริโอกราฟิกโปรเจกชัน (Stereographic projection).....	46
4.5 วิธีการวิศวกรรมขอบเกรนต่อเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI1010.....	48
4.6 การทดลองทางคอมพิวเตอร์ (Computer simulation).....	50
บทที่ 5 ผลการวิจัย	53
5.1 ข้อมูลพื้นฐานของเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ ชนิด AISI 1010.....	53
5.2 โครงสร้างจุลภาค (Microstructure) ของแต่ละชิ้นงาน.....	54
5.3 ผลกระทบของระดับความเครียดดวาร์ต่อ %CSL.....	60
5.4 ผลกระทบของอุณหภูมิการอบต่อสัดส่วนขอบเกรนแบบ Low-Sigma CSLB (%CSL).....	61
5.5 ผลกระทบของเวลาการอบต่อสัดส่วน %CSL.....	63
5.6 ผลการศึกษาพลังงานขอบเกรน.....	63
บทที่ 6 สรุปผลการวิจัย	69
6.1 สรุปผลการวิจัยของวิศวกรรมขอบเกรนแบบ Fine Tuning ต่อ เหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI1010 ด้วยวิธีการทดลอง.....	69
6.2 สรุปผลการวิจัยพฤติกรรมการหมุนระนาบขอบเกรนเชิงพลศาสตร์ด้วยแบบจำลองเชิงตัวเลข MD.....	70
6.3 ผลกระทบของระดับความเครียดดวาร์ต่อ %CSL.....	60
บรรณานุกรม	71
ประวัตินักวิจัย	74

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
2.1 ตัวอย่างค่า Σ ในแต่ละแกนมุมต่างๆจากสมการ 2.8.....	14
2.2 เมตริกซ์สมมาตร 24 เมตริกซ์ของผลึกแบบลูกบาศก์.....	16
2.3 อุณหภูมิของเกิดตกผลึกใหม่ของโลหะชนิดต่างๆ.....	26
2.4 ปัจจัยต่างๆ ที่มีผลต่อกระบวนการตกผลึกใหม่.....	26
2.5 ความสัมพันธ์ระหว่างช่วงอุณหภูมิกับกลไกการควบคุมการโตของเกรน.....	29
2.6 ช่วงอุณหภูมิกับปัจจัยต่างๆของการโตของเกรนสำหรับนิกเกิลเชิงการค้า.....	32
2.7 แสดงความสัมพันธ์ค่าตัวแปรต่างๆในการรีด ที่หาได้จากสูตรทางทฤษฎี.....	35
4.1 แสดงกระบวนการ Fine tuning ในวิศวกรรมขอบเกรนต่อแต่ละชั้นงาน.....	48
5.1 ส่วนประกอบทางเคมีของเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI 1010.....	52
5.2 คุณสมบัติทางกายภาพของเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI 1010.....	52



สารบัญภาพ

ภาพที่	หน้า
1.1 แสดงปริมาณวัสดุที่ใช้ในโรงไฟฟ้านิวเคลียร์ แบบ PWR ขนาด 1000 MW	1
2.1 แสดงขั้นตอนระหว่างเกิดการเกิดการแข็งตัวของ โลหะเหลวได้โลหะหลายผลึก โดยที่รูปร่างที่เหลี่ยมนขนาด เล็กแต่ละอันแทนหน่วยเซลล์	7
2.2 แสดงระนาบขอบเกรนที่ซ้อนทับกัน และการบิดทำมุมเพื่อนิยาม โครงสร้างขอบเกรนแบบ Interface-plane แสดงปริมาณวัสดุที่ใช้ในโรงไฟฟ้านิวเคลียร์ แบบ PWR ขนาด 1000 MW	10
2.3 แสดงการนิยามโครงสร้างขอบเกรนแบบ Misorientation ที่ได้จากการหมุนเกรนที่ 2 รอบแกน UVW เป็นมุม θ และกำหนดระนาบขอบเกรนด้วย N_1	10
2.4 แสดงแผนภูมิของเวกเตอร์แกนหมุน และความหมายของมุม p_1, p_2 และ θ	11
2.5 ความสัมพันธ์ระหว่าง x_0-y_0 กับ x_n-y_n ด้วยเมตริกซ์การหมุน	12
2.6 แสดงลักษณะขอบเกรนที่แกนผลึกทำมุมต่ำ (Low angle GBs) และมุมสูง (High angle GBs)	15
2.7 การจัดเรียงของขอบเกรนตามแบบจำลองของ $\Sigma 5$	16
2.8 แสดงเงื่อนไขค่าเบี่ยงเบนจากมุม CSL ต่างๆ ตามเลขยกกำลัง n	17
2.9 องค์ประกอบของความสัมพันธ์ระหว่างเวกเตอร์ตั้งฉากระนาบกับมุมสำคัญต่างๆ	18
2.10 การเคลื่อนตัวของเส้นคิสโลเคชันที่เคลื่อนที่เข้าหากันในการหักล้างกันของคิสโลเคชัน	22
2.11 การจัดเรียงตัวกันของคิสโลเคชันแบบขอบระหว่างกระบวนการโพสิโกไนเซชัน (ก) คิสโลเคชันจำนวนมากบนระนาบการเลื่อน (ข) คิสโลเคชันมีการจัดเรียงตัวใหม่หลังจากกระบวนการโพสิโกไนเซชัน	23
2.12 การเกิดเกรนย่อยในช่วงการคืนตัว	24
2.13 การจัดเรียงตัวของคิสโลเคชันแบบขอบในแนวตั้ง โดยตัวอักษร T แสดงถึงความเครียดจากแรงดึง และตัวอักษร C แสดงถึงความเครียดจากแรงอัด	24
2.14 แบบจำลองการโตแบบ Cellular growth	28
2.15 แบบจำลองการโตของเกรนแบบ Geometrical coalescence	28
2.16 (ก) Thermal grove (ข) เมื่อขอบเกรนมีการเคลื่อนที่	30
2.17 การเกิดขอบทวินระนาบ (120) ของ โครงสร้างผลึกแบบคิวบิก โดยวงกลมสีเทาแสดงถึงตำแหน่ง ของอะตอมเดิม ส่วนวงกลมสีดำแสดงถึงตำแหน่งของอะตอมที่มีการเปลี่ยนแปลง	31
2.18 (a) ขบวนการรีดแบน (b) แรงเสียดทานที่เกิดขึ้นบริเวณผิวชิ้นงาน (c) แรงและแรงบิดที่ใช้ในการรีด	33
2.19 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง ความเครียดจริง และ ความเค้นจริง	35

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
3.1 แสดงกราฟความสัมพันธ์ระหว่าง Potential energy กับระยะห่างระหว่างอะตอม.....	37
4.1 แสดงเส้นทดสอบแบบเส้นตรง 4 เส้น และแบบวงกลม 3 วง.....	41
4.2 แผนภาพรูปแบบคิอูซิกของนิกเกิลที่ค่าความต่างศักย์ 20kV.....	42
4.3 รูปแบบคิอูซิกวิเคราะห์ด้วยวิธี Triangular method.....	43
4.4 การฉายภาพแบบสเตอริโอกราฟฟิค.....	45
4.5 ตาข่ายของสเตอริโอกราฟฟิค โปรเจกชัน.....	45
4.6 แสดงผลการวิเคราะห์ตามวิธีสเตอริโอกราฟฟิค โปรเจกชัน (ก) แบบแผนภาพด้วยโพล 100 (ข) แบบแผนภาพโพลย้อนกลับของระบบผลึกแบบคิวบิก.....	47
4.7 แสดงชนิดของระบบขอบเกรน a) Symmetric grain boundary b) Asymmetric grain boundary.....	50
4.8 แสดงชนิดของระบบขอบเกรน Zigzag a) Atomic arrangement b) Plane rotation at different angle.....	50
5.1 แสดง Fe-Fe ₃ C phase diagram.....	53
5.2 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงาน As-received ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	53
5.3 แสดงภาพจากกล้องจุลทรรศน์แบบส่องกราดคราดภายใต้ฟังก์ชันการวัดมุมต่างของแกนผลึก แบบ EBSD.....	54
5.4 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานความเครียดถาวร 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 400°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	54
5.5 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานความเครียดถาวร 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 400°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	55
5.6 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานความเครียดถาวร 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 400°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	55
5.7 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานความเครียดถาวร 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 400°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	55
5.8 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานความเครียดถาวร 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 500°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	56
5.9 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 500°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	56

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
5.10 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 500°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	56
5.11 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 500°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	57
5.12 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 600°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	57
5.13 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 600°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	57
5.14 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 600°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	58
5.15 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 600°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า.....	58
5.16 ผลการวัด %CSZ ของแต่ละชิ้นงาน หลังการอบอ่อนที่ 400, 500, และ 600°C เป็นเวลา ก) 168 ชั่วโมง และ ข) 504 ชั่วโมง.....	58
5.17 ผลการวัดขนาดเกรนเฉลี่ยของแต่ละชิ้นงาน หลังการอบอ่อนที่ 400, 500, และ 600°C เป็นเวลา ก) 168 ชั่วโมง และ ข) 504 ชั่วโมง.....	59
5.18 ผลการวัดความแข็งของแต่ละชิ้นงาน หลังการอบอ่อนที่ 400, 500, และ 600°C เป็นเวลา ก) 168 ชั่วโมง และ ข) 504 ชั่วโมง.....	59
5.19 แสดงผลกระทบของอุณหภูมิการอบบนชิ้นงานทดสอบต่อ %CSL เมื่ออบชิ้นงาน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C เป็นเวลาเท่ากันที่ ก) 168 ชั่วโมง ข) 504 ชั่วโมง.....	61
5.20 แสดงผลกระทบของเวลาการอบต่อสัดส่วน %CSL หลังการอบอ่อน ที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C กับชิ้นงานที่ได้รับความเครียดดวาร์ที่ (ก) 6% และ (ข) 10%.....	62
5.21 แสดงกราฟความสัมพันธ์ระหว่าง ค่าของพลังงานขอบเกรนแบบ (ก) <i>Symmetrical</i> และ (ข) <i>Asymmetrical</i> หลังจากระบบถูกผ่อนคลายที่อุณหภูมิทางความร้อนกับมุมการหมุนต่างๆของเกรนบน.....	63
5.22 แสดงโครงสร้างการจัดเรียงตัวของอนุภาคบริเวณขอบเกรน $\Sigma 5$ แบบ <i>symmetrical</i> ที่มุมการบิด a) 36.87° b) 53.13° และแบบ <i>Asymmetrical</i> c) 18.43° d) 26.57° e) 33.69° และ f) 36.87°.....	64
5.23 แสดงการกระจายตัวของระดับพลังงานศักย์ของอนุภาคในระบบอิสระ ที่มุมบิด 36.87° a) <i>Symmetrical</i> และ b) <i>Asymmetrical</i> GBs.....	64

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
5.24 ระดับพลังงานศักย์เฉลี่ยของแต่ละมุมเอียงของระนาบขอบเกรน ที่เวลาการจำลองของระบบอิสระ ต่างๆกัน.....	65
5.25 แสดงการพัฒนาการจัดเรียงของระบบอนุภาคขณะลดระดับพลังงาน เมื่อมุมเริ่มต้นของระนาบขอบ เกรนที่ a) 10° b) 20° และ c) 35° ที่เวลาจำลองต่างๆกัน.....	67
5.26 แสดงการกระจายตัวของระดับพลังงานศักย์ของอนุภาคในระบบขอบเกรนแบบซิกแซก ชนิด <i>SYM</i> $\Sigma 5$ (310) ภายหลังการลดระดับพลังงานของระบบด้วย a) Conjugate gradient minimization algorithm b) MD 1000 total time steps c) MD 6000 total time steps.....	67

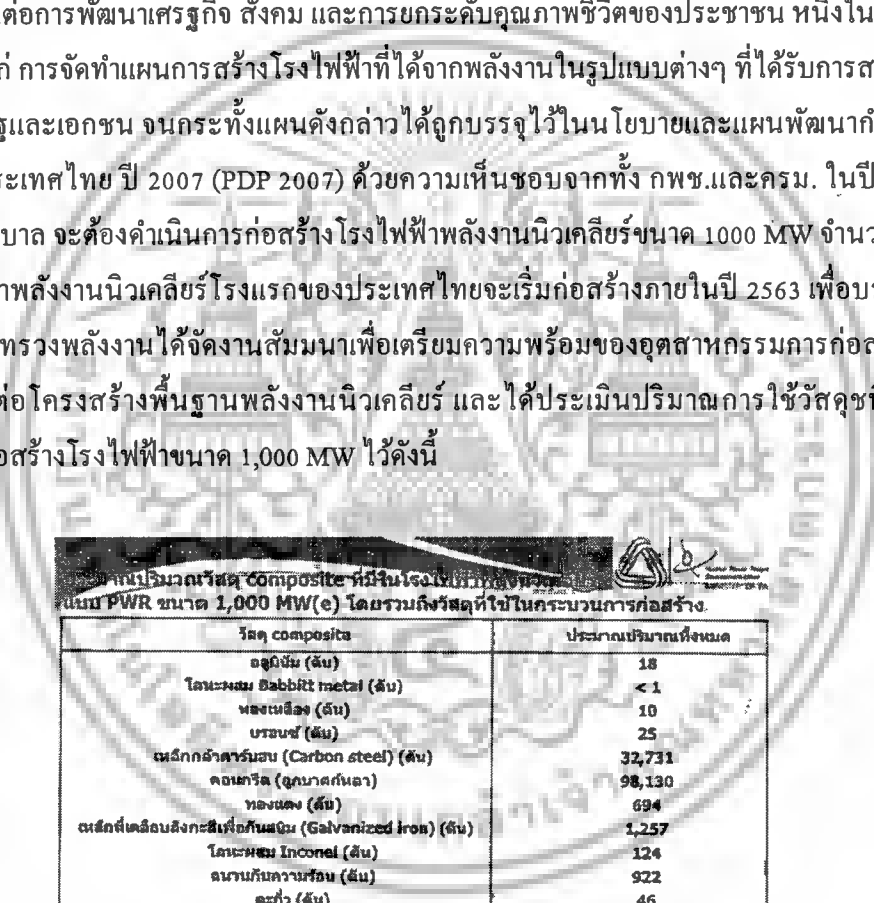


บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

เนื่องจากในปัจจุบัน ประเทศไทยมีความจำเป็นอย่างยิ่ง ที่จะต้องเสริมสร้างความมั่นคงทางด้านพลังงานให้สอดคล้องกับความต้องการพลังงานในภาคอุตสาหกรรมการผลิต อุตสาหกรรมการเกษตร อุตสาหกรรมการแปรรูป อุตสาหกรรมการขนส่ง และความต้องการในครัวเรือนหรือสำนักงาน อันเป็นปัจจัยพื้นฐานต่อการพัฒนาเศรษฐกิจ สังคม และการยกระดับคุณภาพชีวิตของประชาชน หนึ่งในแนวทางดังกล่าว ได้แก่ การจัดทำแผนการสร้างโรงไฟฟ้าที่ได้จากพลังงานในรูปแบบต่างๆ ที่ได้รับการสนับสนุนจากทั้งภาครัฐและเอกชน จนกระทั่งแผนดังกล่าวได้ถูกบรรจุไว้ในนโยบายและแผนพัฒนาพลังงานผลิตไฟฟ้าของประเทศไทย ปี 2007 (PDP 2007) ด้วยความเห็นชอบจากทั้ง กพข.และกรม. ในปี 2550 ที่กำหนดให้รัฐบาล จะต้องดำเนินการก่อสร้างโรงไฟฟ้าพลังงานนิวเคลียร์ขนาด 1000 MW จำนวน 4 โรง และโรงไฟฟ้าพลังงานนิวเคลียร์ โรงแรกของประเทศไทยจะเริ่มก่อสร้างภายในปี 2563 เพื่อบรรลุแผนดังกล่าว กระทรวงพลังงานได้จัดงานสัมมนาเพื่อเตรียมความพร้อมของอุตสาหกรรมก่อสร้างของประเทศไทยต่อโครงสร้างพื้นฐานพลังงานนิวเคลียร์ และได้ประเมินปริมาณการใช้วัสดุชนิดต่างๆ สำหรับการก่อสร้างโรงไฟฟ้าขนาด 1,000 MW ไว้ดังนี้



วัสดุ composita	ประมาณปริมาณทั้งหมด
อลูมิเนียม (ตัน)	18
โลหะผสม Rabbit metal (ตัน)	< 1
ทองเหลือง (ตัน)	10
บรอนซ์ (ตัน)	25
เหล็กกล้าคาร์บอน (Carbon steel) (ตัน)	32,731
คอนกรีต (ลูกบาศก์เมตร)	98,130
ทองแดง (ตัน)	694
เหล็กเคลือบสังกะสีเพื่อกันสนิม (Galvanized iron) (ตัน)	1,257
โลหะผสม Inconel (ตัน)	124
ฉนวนกันความร้อน (ตัน)	922
ตะกั่ว (ตัน)	46
นิกเกิล (ตัน)	1
อิฐ (แกลลอน)	17,500
สัง (ตัน)	< 1
เหล็กกล้าไร้สนิม (Stainless steel) (ตัน)	2,080
ไม้ (board foot)	4.8x10 ⁶

ภาพที่ 1.1 แสดงปริมาณวัสดุที่ใช้ในโรงไฟฟ้านิวเคลียร์ แบบ PWR ขนาด 1000 MW [1]

จะเห็นได้ว่า ปริมาณการใช้ Carbon Steel และ Stainless Steel มีถึง 32,761 และ 2,080 ตัน ตามลำดับ แม้ว่าการพัฒนาพลังงานนิวเคลียร์ตลอด 50 ปีจนกระทั่งปัจจุบัน เศรษฐกิจปริมาณได้รับการพัฒนาจนเป็นแบบ Generation IV ปริมาณวัสดุพื้นฐานที่ใช้ในการก่อสร้างโรงไฟฟ้าในอนาคต ก็ไม่

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

น่าจะแตกต่างจากที่แสดงไว้ ด้วยเหตุผลจากปริมาณการใช้งานของ Carbon Steels และ Stainless Steels ที่มากมายมหาศาล การพัฒนาวัสดุดังกล่าวจึงมีความสำคัญอย่างยิ่งต่ออายุการใช้งานของโรงไฟฟ้า งานวิจัยนี้จึงมุ่งเน้นกระบวนการวิศวกรรมขอบเกรนของ Carbon Steels AISI 1010 ที่มีโครงสร้างผลึกแบบ BCC และโครงสร้างจุลภาคที่ไม่สลับซับซ้อน ด้วยวิธี Thermomechanical Treatment เพื่อนำผลที่ได้ไปสู่การพัฒนากระบวนการดังกล่าวต่อ Ferritic Carbon Steel ชนิดอื่นๆ เช่น 0.5Mo Carbon Steels, 2.25Cr-1Mo Carbon Steels หรือ 2.25Cr-1Mo Carbon Steels ให้มีขอบเกรนชนิดพิเศษ ที่สามารถลดอัตราการคืบของวัสดุดังกล่าวที่อุณหภูมิสูงได้ ส่งผลให้ยืดอายุการใช้งานในส่วนต่างๆของโรงไฟฟ้านั้นเอง และยังประโยชน์ต่อการศึกษา วิจัย ในการพัฒนาวัสดุพื้นฐานราคาถูก สำหรับประยุกต์ใช้วัสดุดังกล่าวในโรงไฟฟ้าพลังงานนิวเคลียร์ ที่จะช่วยสนับสนุนอุตสาหกรรมพื้นฐานของประเทศไทย ในการเตรียมความพร้อมขององค์ความรู้เพื่อการก่อสร้างโรงไฟฟ้าพลังงานนิวเคลียร์ในอนาคตอีกด้วย

องค์ความรู้ในสาขาวิชาวัสดุศาสตร์และวัสดุวิศวกรรมนั้นมีวัตถุประสงค์หลักอย่างหนึ่งเพื่อการปรับปรุงคุณสมบัติวัสดุ ไม่ว่าจะเป็นคุณสมบัติทางกล ทางไฟฟ้า หรือทางเคมี ด้วยวิธีการปรับเปลี่ยนโครงสร้างของวัสดุทั้งในระดับอะตอม ดังศาสตร์ทางด้านนาโนเทคโนโลยี ในลักษณะ Bottom up จนกระทั่งขยายใหญ่ขึ้นถึงในระดับที่เรียกว่าระดับจุลภาค ดังที่นักโลหะวิทยาได้ศึกษากระบวนการทำ Heat Treatment ของ Ferrous และ Non-Ferrous Alloys เกิดเป็นโครงสร้างจุลภาคโลหะผสมมากมายหลายเกรน เช่น โครงสร้างจุลภาคของ Low Carbon Steels ที่มีทั้ง Ferritic-Pearlite, Ferritic-Bainite, Austenitic-Martensitic Carbon Steels และ Gray Iron, Ductile Iron, และ White Iron ที่เป็นโครงสร้างจุลภาค Cast Iron เป็นต้น [2]

ขนาดของเกรนก็เช่นเดียวกันที่เป็นลักษณะโครงสร้างจุลภาคที่เกิดขึ้น หลังจากกระบวนการ Grain Refinement ซึ่งประกอบด้วยขั้นตอน Cold work, Recovery, Recrystallization และ Grain Growth ตามลำดับ จนได้เกรนใหม่ที่มีลักษณะ Strain Free มีขนาดโตขึ้นตามเวลาและอุณหภูมิที่ใช้อ่อน ที่เริ่มจากการก่อตัวของเกรนใหม่ และแกนผลึกแบบ Random เติบโตขึ้นมาชนกัน เกิดเป็นขอบเกรน หรือ Grain Boundaries (GBs) ในโลหะที่ขนาดของเกรนมีขนาดเล็ก เมื่อปริมาตรวัสดุที่เท่ากัน จะมีสัดส่วนพื้นที่ขอบเกรนที่สูง ทำให้มีพื้นที่ผิวภายในเนื้อวัสดุเข้าขัดขวางการเคลื่อนที่ของ Dislocation ได้มาก นั้นหมายถึงความสามารถในการต้านทาน Plastic Deformation ที่สูงขึ้นด้วย ดังสมการความสัมพันธ์ของ Hall-Petch ระหว่างขนาดของเกรนกับ Yield Strength แต่เมื่อมีการประยุกต์ใช้งานวัสดุดังกล่าวในสภาวะที่อุณหภูมิสูง หรือมีการกัดกร่อนที่รุนแรง ผลกระทบของการมีสัดส่วนพื้นที่ขอบเกรนที่มาก กลับให้ผลในทางตรงกันข้าม เนื่องจากขอบเกรนเป็นบริเวณที่อ่อนแอมีโครงสร้างเปิด เกิดเป็นจุดเริ่มต้นของความเสียหายในวัสดุ ความสนใจในเรื่องลักษณะขอบเกรนเริ่มมีมากขึ้นในการประยุกต์ใช้งานวัสดุ Polycrystalline ภายใต้สภาวะแวดล้อมที่รุนแรง เช่น ชิ้นงานต่างๆใน Fossil-fired power generating plants, Aircraft power plants, Chemical processing plants, Petroleum processing plants และ Nuclear power plants จนกระทั่ง Prof. Tadao Watanabe ของ Tohoku University ในประเทศญี่ปุ่นได้เสนอ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้ 2

แนวคิดที่ว่าด้วยวิศวกรรมขอบเกรนในทศวรรษที่ 80 [3, 4] ในการเพิ่มสัดส่วนขอบเกรนพิเศษต่อขอบเกรนทั่วไป (High Angle Grain Boundaries, HAGBs) โดยอาศัยคุณสมบัติที่พิเศษของขอบเกรนดังกล่าวเพื่อปรับปรุงคุณสมบัติวัสดุให้มีอายุการใช้งานที่ยาวนานในสภาวะอุณหภูมิสูง หรือการสึกกร่อนสูง ซึ่งจะเห็นได้ว่าการประยุกต์กระบวนการวิศวกรรมขอบเกรน (Grain Boundary Engineering) มีความเหมาะสมอย่างยิ่งกับเหล็กผสมที่ใช้ในโรงไฟฟ้าพลังงานนิวเคลียร์ ที่นอกจากจะเพิ่มอายุการใช้งานของวัสดุแล้ว ช่วงเวลาการดูแลรักษาที่ยาวนานขึ้น ค่าดำเนินการของโรงไฟฟ้ายิ่งลดลง หรือแม้กระทั่งการแทนที่โลหะผสมเหล็กอุณหภูมิสูงและมีราคาแพง ด้วยโลหะเหล็กที่ผ่านกระบวนการวิศวกรรมขอบเกรนแล้วอีกชนิดหนึ่งที่มีราคาถูกกว่า

จากผลการศึกษา High Angle Grain Boundaries (HAGBs) ในปัจจุบันพบว่า ทิศทางของระนาบขอบเกรนกลายเป็นปัจจัยหลักที่มีผลต่อคุณสมบัติของขอบเกรน แทนที่จะเป็นมุมที่แตกต่างกันระหว่างเกรน (Misorientation of neighboring grains) [5-8] ขอบเกรนชนิดพิเศษถูกกำหนดโดย Free Volume เกรนที่มี Free Volume ต่ำ จะมีพลังงานขอบเกรนที่ต่ำและเป็นขอบเกรนชนิดพิเศษ ซึ่งเกิดกับระนาบขอบเกรนมีดัชนีระนาบต่ำ เมื่อเทียบกับแกนของเกรนที่ประกอบกันเป็นขอบเกรน [9, 10] ซึ่งเป็นผลสรุปที่แตกต่างจากการศึกษาในอดีต ที่ขอบเกรนแบบพิเศษมักถูกกำหนดแบบจำลอง Coincidence Site Lattice Boundaries (CSLBs) ที่มีการซ้อนทับกันของ Lattice ของเกรนที่มีค่าแกนผลึกของเกรนไม่ตรงกัน โดยให้ส่วนกลับของความหนาแน่นของ Lattice ที่ซ้อนทับกันอยู่จะประกอบขึ้นเป็นตัวเลข n หลังสัญลักษณ์ Σ ในการบอกชนิดต่างๆของขอบเกรน

อย่างไรก็ตามแบบจำลอง CSLBs ก็ประสบความสำเร็จในการปรับปรุงคุณสมบัติการคืบของ Ni base alloys (Alloy 600) ที่ใช้ในระบบท่อของ Nuclear Steam Generators [11] และการยืดอายุการใช้งานของเบตเตอร์ตะกั่ว [12] จนได้มีการจดสิทธิบัตรในกรรมวิธีวิศวกรรมขอบเกรน การศึกษาพบว่าขอบเกรนชนิดพิเศษนี้เป็นชนิด Low- Σ CSLBs ได้แก่ $\Sigma 3$, $\Sigma 9$, $\Sigma 27$ เป็นส่วนใหญ่ [13] ที่สัดส่วนของขอบเกรนชนิดดังกล่าวสามารถเพิ่มขึ้นด้วยวิธี Annealing Twin-induced Thermomechanical Treatment ทั้งแบบ Iterative Recrystallization, One-step Recrystallization, Iterative Strain Annealing, และ One-Step Strain Annealing [14] ซึ่งเป็นกระบวนการวิศวกรรมขอบเกรน ที่อาศัย Annealing twins เป็นต้นกำเนิดในการเพิ่มสัดส่วน Low- Σ CSLBs ซึ่งวิธีการนี้เหมาะสมสำหรับสำหรับโลหะ FCC ที่มีพลังงาน Stacking fault ต่ำ เช่น ทองแดง นิกเกิล ตะกั่ว และ Austenitic Steel และเมื่อสัดส่วนขอบเกรนแบบพิเศษนี้เพิ่มขึ้นตามกรรมวิธีข้างต้นที่เหมาะสมของแต่ละวัสดุ จะพบว่าขอบเกรนดังกล่าวสามารถเพิ่มประสิทธิภาพการใช้งานของโลหะผสมนิกเกิลที่อุณหภูมิสูง [15, 16] และสามารถลดอัตราการกัดกร่อนของ Stainless Steels ได้ [17]

เมื่อความต้องการคุณสมบัติวัสดุที่มีโครงสร้างผลึกแบบ BCC ที่ดีขึ้น แต่ไม่สามารถเพิ่มสัดส่วนขอบเกรนชนิดพิเศษได้โดยอาศัย Annealing twin ได้เท่าที่ควรใน Ferritic-Martensitic Alloy 91 ที่มีโครงสร้างผลึกแบบ BCC อย่างไรก็ตามก็เป็นที่น่าสังเกตว่า HAGBs อื่นๆอาจจะจัดเป็นขอบเกรนชนิดพิเศษได้ ถ้าเอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ใช้ parameter แบบ 5 ตัวแปรในการกำหนดชนิดของขอบเกรน [18, 19] ความท้าทายของงานวิจัยนี้จึงเป็นการพัฒนากระบวนการวิศวกรรมขอบเกรนของ Low Carbon Steel (AISI 1010) ที่มีโครงสร้างผลึกแบบ BCC ที่ไม่ซับซ้อนด้วยขบวนการ Thermomechanical Treatment ในแบบต่างๆ ผสมผสานกับแนวคิดใหม่ที่กำลังอยู่ในความสนใจขณะนี้ นั่นคือวิศวกรรมระนาบขอบเกรนแบบ Fine tuning [20-22] ด้วยวิธีการอบอุ่นที่อุณหภูมิต่ำ แต่มี Thermal Energy เพียงพอที่จะกระตุ้นการหมุนระนาบขอบเกรนให้เข้าใกล้ทิศทางที่มี Grain Boundary Energy ที่ต่ำกว่า และคุณสมบัติเฉพาะของ Ferritic Steel ที่เป็น Allotrope ที่โครงสร้างผลึกของเหล็กมีสองแบบคือ เป็นแบบ FCC ที่อุณหภูมิสูง ซึ่งคุณสมบัติดังกล่าวอาจมีส่วนสนับสนุนกระบวนการ Twin-induced Grain Boundary Engineering ที่อุณหภูมิสูงได้

แม้ว่ากระบวนการ Thermomechanical Treatment ในงานวิจัยนี้จะศึกษาเกี่ยวกับ AISI 1010 ที่มีโครงสร้างผลึกแบบ BCC แต่ผลการศึกษาก็สามารถเป็นองค์ความรู้เพื่อการพัฒนากระบวนการดังกล่าวกับ Ferritic Steel อื่นที่มีโครงสร้างผลึกแบบ BCC มากขึ้น โดยเฉพาะอย่างยิ่งการพัฒนาวัสดุที่ใช้ในอุณหภูมิสูงที่เป็น Ferritic Steels เนื่องจาก Ferritic Steel มีคุณสมบัติการคืบที่ต่ำกว่า Austenitic Steels แต่มีค่าสัมประสิทธิ์การขยายตัวที่ต่ำกว่า ค่าความนำความร้อนที่สูงกว่า ความมีเสถียรภาพของโครงสร้างที่อุณหภูมิสูงที่ดีกว่า และยังมีราคาที่ถูกกว่าอีกด้วย ทำให้นักวิจัยมีแนวโน้มที่จะใช้ Ferritic Steels แทนที่ Austenitic Steels ในอนาคต [23] แต่ต้องสามารถปรับปรุงมีคุณสมบัติการคืบของ Ferritic Steels ให้เทียบเท่า Austenitic Steels เสียก่อน ซึ่งคำตอบของการพัฒนาวัสดุดังกล่าวให้ดีขึ้นก็คือ วิศวกรรมขอบเกรน และวิศวกรรมระนาบขอบเกรนนั่นเอง นอกจากนี้แล้วงานวิจัยนี้ยังตอบรับการพัฒนาวัสดุสำหรับการใช้งานในโรงไฟฟ้าพลังงานนิวเคลียร์ ที่จำเป็นต้องพัฒนาความมั่นคงทางด้านพลังงานของประเทศไทยในอนาคต อีกด้วย

1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย

1.2.1 เพื่อศึกษากระบวนการ Thermomechanical Treatment ที่เหมาะสมในการเพิ่มสัดส่วน Low- Σ CSLBs ของ Low Carbon Steels (AISI 1010)

1.2.2 เพื่อกำหนดช่วงเวลาในการทำ Fine tuning ที่เพื่อเพิ่มสัดส่วนขอบเกรนชนิดพิเศษ

1.2.3 เพื่อศึกษามุมองศาโดยอาศัยแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์ด้วยเทคนิคโมเลกูลาร์ไดนามิกส์ที่ทำให้ขอบเกรนเกิดความเสถียรที่สุด

1.3 ขอบเขตของการวิจัย

1.3.1 ออกแบบกระบวนการทางความร้อน Thermomechanical Treatment ของ Low Carbon Steel เพื่อเพิ่มสัดส่วนขอบเกรนแบบ CSL ชนิด Low Σ (<29)

1.3.2 ตรวจสอบ เปรียบเทียบ และอธิบายผลดังกล่าว จากการศึกษาโครงสร้างจุลภาคด้วยวิธี LOM และ SEM

1.3.3 ใช้แบบจำลองทางคอมพิวเตอร์ด้วยเทคนิคโมเลกูลาร์ไดนามิกส์ในการศึกษากลไกของการหมุนของเกรนและขอบเกรนในการลดระดับพลังงานของระบบ

1.4 วิธีการดำเนินการวิจัย

1.4.1 ค้นคว้ารวบรวมข้อมูลที่เป็นประโยชน์ต่องานวิจัยเพิ่มเติม ศึกษารายละเอียดจุดเด่นจุดด้อยของงานวิจัยที่ได้วิจัยไว้แล้ว เพื่อเป็นแนวทางในการออกแบบงานวิจัยที่มีประสิทธิภาพตรงกับวัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้ พร้อมทั้งซ่อมแซมเครื่องรีดโลหะ และเตาอบโลหะ

1.4.2 ดำเนินกระบวนการ High Straining และอบที่อุณหภูมิสูงเพื่อวิเคราะห์ Recrystallization และมีขนาดเกรนที่ต้องการ ในการทำ Initial condition ของ Samples

1.4.3 ดำเนินการวัดสัดส่วน Low- Σ CSLBs โดยใช้เทคนิค EBSD ฟังก์ชันในกล้อง SEM

1.4.4 ดำเนินการแปลผันค่าแบบ Low Straining ตามด้วยการอบอ่อนจนได้ขนาดเกรนที่ใกล้เคียงกับ Initial Samples

1.4.5 ดำเนินการวัดสัดส่วน Low- Σ CSLBs โดยใช้ EBSD ฟังก์ชันในกล้อง SEM

1.4.6 ดำเนินการ ใช้แบบจำลองทางคอมพิวเตอร์ด้วยเทคนิคโมเลกูลาร์ไดนามิกส์ในการศึกษา กลไกของการหมุนของเกรนและขอบเกรนในการลดระดับพลังงานของระบบ

1.4.7 สรุป และเขียนเรียบเรียงข้อมูลที่เป็นประโยชน์จากการศึกษาวิจัย เพื่อให้ได้บทความที่มีคุณภาพพร้อมตีพิมพ์ในวารสารระดับนานาชาติ และทำรายงานฉบับสมบูรณ์ของโครงการวิจัย

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1.5.1 เพื่อตีพิมพ์และเผยแพร่บทความทางวิชาการ ในวารสารนานาชาติ หรือในประชุมวิชาการนานาชาติ

1.5.2 เพื่อการพัฒนากระบวนการดังกล่าวในเชิงอุตสาหกรรมในกระบวนการผลิตท่อไอน้ำ ให้มีอายุการใช้งานที่ยาวนานขึ้นที่อุณหภูมิสูง โดยเฉพาะอย่างยิ่งการผลิตท่อไอน้ำในโรงไฟฟ้านิวเคลียร์ของประเทศไทย ในแง่ขององค์ความรู้ในวัสดุเพื่อ โรงไฟฟ้านิวเคลียร์

1.5.3 เพื่อเตรียมความพร้อมที่นอกเหนือจากอุตสาหกรรมพื้นฐาน และยังประโยชน์ต่อ การศึกษาและวิจัย สำหรับการประยุกต์การใช้งานของโลหะผสมดังกล่าวในโรงไฟฟ้านิวเคลียร์ของ ประเทศไทยในแง่ขององค์ความรู้ในวัสดุเพื่อ โรงไฟฟ้านิวเคลียร์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 2

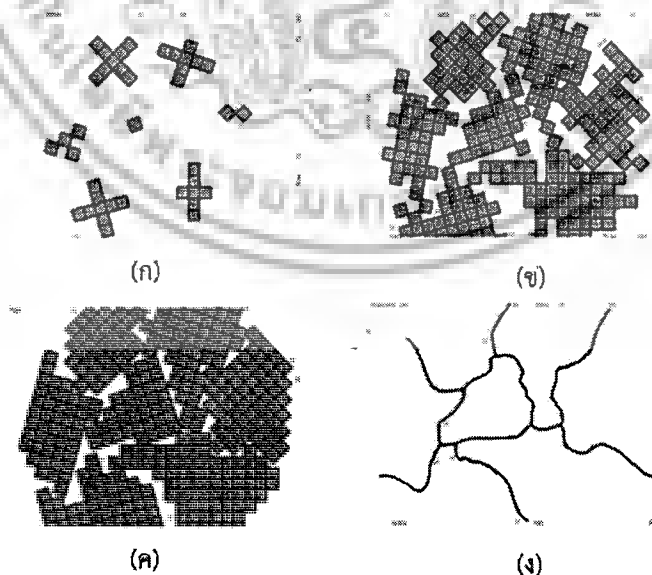
ทฤษฎีและหลักการที่เกี่ยวข้องกับวิศวกรรมขอบเกรน

ในการศึกษาคุณสมบัติทางกายภาพและทางเคมีของวัสดุ เราต้องเข้าใจถึงกลไกและกระบวนการตอบสนองของวัสดุต่อปัจจัยควบคุมภายนอกที่ใช้ในการศึกษาคุณสมบัติต่างๆ เช่น เมื่อต้องการศึกษาคุณสมบัติทางกลของวัสดุ เราก็มักจำเป็นต้องการศึกษาพฤติกรรมการตอบสนองของวัสดุต่อปัจจัยควบคุมภายนอกทางกล นั่นก็คือแรงกระทำชนิดต่างๆของแรง โดยมีปัจจัยพื้นฐานของตัววัสดุเองก็เป็นปัจจัยที่สำคัญที่สามารถปรับเปลี่ยนพฤติกรรมการตอบสนองของวัสดุต่อแรงนั้นได้ ปัจจัยพื้นฐานเหล่านี้ของตัววัสดุ ได้แก่ โครงสร้างตั้งแต่ระดับอะตอมจนถึงโครงสร้างระดับมหภาค ระดับโครงสร้างเหล่านี้ ในทางวัสดุวิศวกรรมแล้ว ทำให้เราสามารถแยกประเภทวัสดุของแข็งได้ 3 กลุ่มหลักด้วยกัน ได้แก่ โลหะ พอลิเมอร์ และเซรามิกส์ ซึ่งมีโครงสร้างวาเลนส์อิเล็กตรอนเป็นตัวกำหนดพันธะระหว่างอะตอม ไม่ว่าจะเป็นพันธะโลหะ ได้แก่ โลหะทั่วไป หรือพันธะไอออนิกและโคเวเลนต์สำหรับวัสดุพวกพอลิเมอร์และเซรามิกส์ อย่างไรก็ตามโลหะในธรรมชาติไม่ได้เกิดเป็นผลึกเดี่ยว แต่เกิดจากหลายๆ ผลึกมาเชื่อมต่อกันตามแนวขอบเกรน มีขนาดเกรนแตกต่างกันไป ซึ่งแม้แต่โครงสร้างระดับนี้ ก็ยังเป็นปัจจัยที่มีผลต่อคุณสมบัติทางกลของวัสดุอีกด้วย ตามปฏิสัมพันธ์ระหว่างขอบเกรนกับดิสโลเคชัน ที่ความเค้นจุดคราก (Yield strength) ของวัสดุจะสูงขึ้น เมื่อขนาดเกรนเล็กลง เนื่องจากเกรนมีทิศทางต่างกันจะเกิดเป็นบริเวณแคบๆ ที่เรียกว่า ขอบเกรน ที่เป็นตัวขัดขวางการเคลื่อนที่ของดิสโลเคชัน ดังนั้นชิ้นงานที่มีเกรนขนาดเล็กก็จะแข็งแรงกว่านั่นเอง

การศึกษาผลกระทบของโครงสร้างจุลภาคต่อคุณสมบัติของวัสดุจึงมีความสำคัญไม่น้อย สำหรับโครงสร้างจุลภาคพื้นฐานของโลหะหลายผลึก ได้แก่ โครงสร้างเกรน ไม่ว่าจะเป็นขนาดเกรน การกระจายตัวของเกรน ทิศทางการจัดเรียงตัวของเกรนหรือแม้แต่โครงสร้างและชนิดขอบเกรน ซึ่งส่วนหลังนี้เกี่ยวข้องกับวิศวกรรมขอบเกรนที่ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างขอบเกรนกับคุณสมบัติทางกล เช่น การคืบ การกัดกร่อนตามขอบเกรนหรือการล้า เป็นต้น ซึ่งพบว่าโครงสร้างขอบเกรนบางประเภทมีคุณสมบัติพิเศษสามารถทนต่อสภาวะใช้งานได้ดีขึ้น ขอบเกรนชนิดดังกล่าวนี้ เรียกว่า ขอบเกรน แบบ low- Σ Coincident Site Lattice Boundaries (CSLBs) ดังนั้น บทนี้จึงจะกล่าวถึงทฤษฎีและหลักการโดยทั่วไปพื้นฐานทางโครงสร้างขอบเกรนรวมทั้งเครื่องมือที่ใช้ในการวิเคราะห์ในงานวิจัย

2.1 การเกิดโครงสร้างของเกรน

โครงสร้างเกรนในโลหะสามารถอธิบายได้จากกระบวนการแข็งตัวของโลหะเหลว ดังแสดงในภาพที่ 2.1 ที่ช่วงแรกของการลดอุณหภูมิมาที่จุดเยือกแข็งของโลหะ อะตอมของโลหะที่อยู่กระจายจะเริ่มเคลื่อนตัวจับเป็นกลุ่มของอะตอมด้วยพันธะโลหะแบบหลวมๆ ขนาดเล็กที่มีทั้ง เอ็มบริโอ (Embryo) และ นิวเคลียส (Nucleus) ซึ่งเอ็มบริโอจะไม่เสถียร และจะละลายกลับไปเป็นของเหลวเพื่อลดระดับพลังงาน หรือเติบโตขึ้นโดยความน่าจะเป็นเกิดเป็นเอ็มบริโอที่เสถียรซึ่งมีขนาดเท่ากับขนาดวิกฤต เรียกเอ็มบริโอกลุ่มนี้ว่า “นิวเคลียส (Nucleus)” โดยนิวเคลียสแต่ละนิวเคลียสจะมีทิศทางการจัดเรียงตัวของผลึกแบบไม่แน่นอน (ภาพที่ 2.1ก) กระบวนการแข็งตัวของโลหะเหลวในช่วงแรกนี้ เรียกว่า “นิวคลีเอชัน (Nucleation)” หลังจากนั้นนิวเคลียสที่เกิดขึ้นจะเริ่มโตขึ้นเป็นผลึกหรือเกรนเพื่อลดพลังงานอิสระของระบบ (ภาพที่ 2.1ข) อะตอมภายในเกรนจะมีการจัดเรียงตัวกันอย่างเป็นระเบียบแต่ทิศทางการจัดเรียงตัวนั้นก็แตกต่างกันไป การแข็งตัวของโลหะทั่วไปจะเกิดขึ้นอย่างสมบูรณ์ เมื่อเกรนจะเริ่มชนกันจนกระทั่งไม่มีของเหลวเหลืออยู่ ซึ่งบริเวณพื้นที่ว่างสี่เหลี่ยมตรงบริเวณรอยต่อระหว่างเกรนเรียกว่า “ขอบเกรน (Grain boundary)” ซึ่งเป็นบริเวณที่มีพื้นที่ว่าง เรียกว่า “พื้นที่อิสระเชิงปริมาตร (Free volume)” (ภาพที่ 2.1ค) โดยโลหะที่ประกอบด้วยเกรนจำนวนมากนี้จะถูกเรียกว่า “วัสดุหลายผลึก (Polycrystalline material)” ซึ่งแต่ละผลึกที่อยู่ภายในนั้นเรียกว่า “เกรน (Grain)” และบริเวณรอยต่อของแต่ละเกรนเรียกว่า “ขอบเกรน (Grain boundary)” ซึ่งโครงสร้างชิ้นงานเมื่อผ่านการเตรียมพื้นผิวแล้วกัดด้วยสารเคมี ภายใต้กล้องจุลทรรศน์จะแสดงให้เห็นโครงสร้างบนระนาบ ดังภาพที่ 2.1ง ซึ่งเส้นสีดำที่ได้คือขอบเกรนที่ล้อมรอบบริเวณเกรนภายใน



ภาพที่ 2.1 แสดงขั้นตอนระหว่างการเกิดการแข็งตัวของโลหะเหลวได้โลหะหลายผลึก โดยที่รูปสี่เหลี่ยมขนาดเล็กแต่ละอันแทนหน่วยเซลล์ [2]

ด้วยความหนาของขอบเกรนแค่ 2 ช่วงความยาวพันธะ คิดเป็นสัดส่วนเชิงปริมาตร 0.3% ต่อ ปริมาตรวัสดุวิศวกรรมที่มีขนาดเกรนเฉลี่ยที่ 1 μm แต่ขอบเกรนกลับเป็นบริเวณที่ควบคุมพฤติกรรมวัสดุ หลากหลายอย่างของวัสดุ ได้แก่

- 1) พฤติกรรมที่ถูกควบคุมโดยการเคลื่อนที่ของขอบเกรน เช่น การตกผลึกใหม่ การเติบโต ของเกรน การคืบ
- 2) พฤติกรรมที่ถูกควบคุมโดยการแพร่ของอะตอมภายในขอบเกรน เช่น Solute segregation or corrosion
- 3) พฤติกรรมทางกล เช่น ความแข็งแรง และความทนทาน
- 4) พฤติกรรมทางปฏิกิริยาทางเคมี เช่น การเปลี่ยนแปลงเฟส การตกตะกอนของแข็ง

ลักษณะทางกายภาพ 2 ประการหลักที่กำหนดคุณสมบัติขอบเกรน ได้แก่ ปริมาตรอิสระส่วนเกิน และสนามความเครียดอีลาสติกทั้งระยะใกล้และไกล ขอบเกรนที่มีค่าทั้งสองเบี่ยงเบนจากค่าเฉลี่ยของ ขอบเกรนแบบสุ่มอย่างมีนัยสำคัญ กล่าวคือปริมาตรอิสระส่วนเกินต่ำ จะถูกจัดให้เป็นขอบเกรนชนิด พิเศษ มีคุณสมบัติพิเศษในการใช้งานเฉพาะด้านดังได้กล่าวไว้ข้างต้น การเพิ่มสัดส่วนของขอบเกรน ดังกล่าวจึงได้รับการพัฒนาให้ถึงขีดจำกัด ไปพร้อมๆกับการศึกษาหาความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้าง ขอบเกรนกับคุณสมบัตินั้น เพื่อเพิ่มความเข้าใจและประยุกต์ใช้ได้อย่างเหมาะสม ซึ่งโครงสร้างขอบเกรน ในที่นี้จะถูกนิยามด้วยตำแหน่งของอะตอมภายใน การจะวิเคราะห์โครงสร้างระดับนี้ต้องใช้เครื่องมือ พิเศษซึ่งยากที่จะเข้าถึงสำหรับนักวิทยาศาสตร์ทั่วไป การวิเคราะห์โครงสร้างขอบเกรนเชิงวิศวกรรมจึง นิยมใช้ความสัมพันธ์เชิงเรขาคณิตของมุมที่เกิดขึ้นระหว่างแกนผลึกของเกรนที่อยู่ติดกัน ด้วยด้วยเทคนิค Electron back scattering diffraction (EBSD) ที่ในปัจจุบันสามารถติดตั้งภายในกล้องจุลทรรศน์ อิเล็กตรอนได้ทั่วไป พร้อมกับ Software ในการวิเคราะห์ผล ตามแบบจำลอง Coincident Site Lattice ที่ จะกล่าวในหัวข้อถัดไป

2.2 โครงสร้างเรขาคณิตขอบเกรน (Grain boundary geometry) [55]

ก่อนอื่นมาดูประวัติความเป็นมาของแบบจำลองขอบเกรนกันก่อน ดังได้ทราบมาแล้วว่าขอบ เกรนเป็นบริเวณรอยต่อของเกรนสองเกรนที่มีทิศทางของผลึกแตกต่างกัน การศึกษาขั้นเริ่มแรกในทาง วิทยาศาสตร์ ได้แก่ การสร้างแบบจำลอง แบบจำลองโครงสร้างขอบเกรนในยุคแรกนั้น Rosenhain and Humphrey ในปี 1913 จัดขอบเกรนให้เป็นพื้นที่ผิวระหว่างเกรนมีโครงสร้างแบบไม่เป็นผลึก ซึ่งประสบ ปัญหาที่ไม่สามารถใช้แบบจำลองนี้ในการอธิบายพฤติกรรมของขอบเกรนบางอย่างได้ แบบจำลอง โครงสร้างขอบเกรนจึงได้รับการพัฒนาต่อในรูปแบบ Translational lattice (Hargreaves and Hill 1929) และ Island model (Mott, 1950) ที่ขอบเกรนประกอบไปด้วย บริเวณพื้นที่ที่เป็นแผ่นผลึกและไม่ใช้ผลึก แต่ก็ไม่เป็นที่ยอมรับ จนกระทั่งทฤษฎีโครงสร้างดิสโลเคชันได้ถูกนำเสนอ แบบจำลองของ Low angle GBs ของ Read and Shockley ในปี 1950 โดยใช้โครงสร้างดิสโลเคชันจึงเป็นที่ยอมรับ และเป็นจุดให้ เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า 8

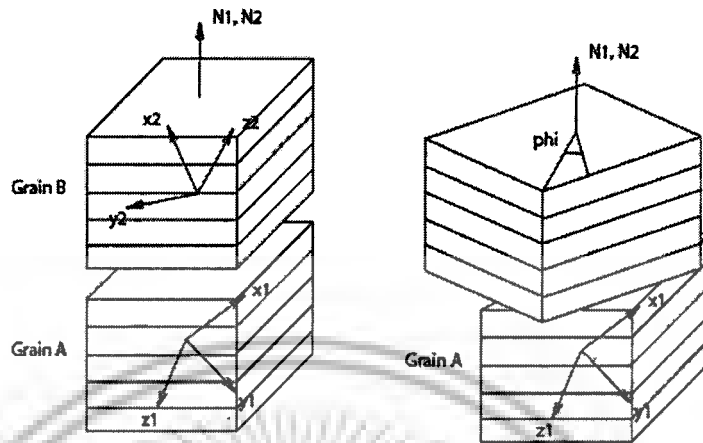
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ต้องพิจารณาถึงโครงสร้างผลึกของแต่ละเกรน ในการพิจารณาโครงสร้างขอบเกรนโดย Kronberg and Wilson ในปี 1949 และใน 1966 Brandon ได้เสนอแบบจำลองโครงสร้างเกรนแบบ Periodic บนพื้นฐานของโครงสร้างผลึกที่ขอบเกรน ซึ่งแบบจำลองนี้สามารถอธิบายปรากฏการณ์พิเศษของขอบเกรนบางชนิดในเชิงกายภาพได้ เราเรียกแบบจำลองนี้ว่า Coincidence Site lattice (CSL) ที่เหมาะสมกับโครงสร้างผลึก cubic ซึ่งได้รับการพัฒนาเป็นแบบจำลอง O-Lattice และ Near-CSL สำหรับผลึกที่ไม่ใช่ cubic ต่อมา

การกำหนดลักษณะขอบเกรน บางครั้งมีการสับสนเกี่ยวกับความหมายของคำ 2 คำในการนิยามโครงสร้างของขอบเกรนได้แก่ โครงสร้างขอบเกรน (Grain boundary structure) และโครงสร้างเรขาคณิตขอบเกรน (Grain boundary geometry) โดยที่โครงสร้างขอบเกรนนี้นิยามตำแหน่งของอะตอมที่บริเวณขอบเกรน ส่วนโครงสร้างเรขาคณิตขอบเกรนนี้นั้นเกี่ยวข้องกับความสัมพันธ์ระหว่างแกนของผลึกตามผลึกวิทยา (Crystallography) ของขอบเกรน เช่น ทิศทางของผลึกขอบเกรนระหว่างเกรนที่อยู่ติดกัน เป็นต้น ซึ่งสามารถนิยามด้วย 8 ดีกรีอิสระ (Degree of freedom) เพื่อกำหนดโครงสร้างเรขาคณิตของขอบเกรน อย่างไรก็ตามในทางสากลแล้ว 2 คำนี้สามารถแยกแยะได้จากบริบท และเรามักใช้โครงสร้างขอบเกรนในความหมายของเรขาคณิตขอบเกรนเป็นหลัก ใน 8 DOF นั้น 5 DOF ใช้กำหนดโครงสร้างแบบมหภาค ด้วยวิธีอินเตอร์เฟสเพนหรือวิธีมิลส โอเรียนเทชั่น เรียกตัวแปรกลุ่มนี้ว่า "Macroscopic degree of freedom" และ 3 ตัวแปรที่เหลือเกี่ยวข้องกับเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของระนาบขอบเกรน ในแนวระนาบขอบเกรน (2 DOF) และตั้งฉากระนาบขอบเกรน (1 DOF) เรียกตัวแปรกลุ่มนี้ว่า "Microscopic degree of freedom" ซึ่งวิธีทางวัดในตัวแปรกลุ่มนี้ค่อนข้างซับซ้อน ดังนั้นโดยทั่วไปแล้ว การศึกษาโครงสร้างเรขาคณิตขอบเกรนในทางการทดลองนิยมใช้ 5 ตัวแปรจากกลุ่ม Macroscopic degree of freedom เนื่องจากเราสามารถหาตัวแปร 3 ตัวจากการวัดโดยตรงด้วยเทคนิค EBSD ซึ่งเป็นฟังก์ชันพื้นฐานของ SEM ขณะที่อีก 2 ตัวแปรเกี่ยวข้องกับเวกเตอร์ตั้งฉากกับระนาบขอบเกรนซึ่งหาได้จากเทคนิค two-surface trace ที่เป็นการวิเคราะห์หามุมเอียงของขอบเกรนด้วย X-ray โดยอาศัยความสัมพันธ์ระหว่างมุมที่เปลี่ยนแปลงของเกรนข้างเคียงเนื่องจากการเอียงของชิ้นงาน ทั้งนี้จากที่กล่าวมาข้างต้นสัญลักษณ์ (Notation) ของ 5 ตัวแปรกลุ่ม Macroscopic degree of freedom สามารถอธิบายได้ 2 แบบ ได้แก่

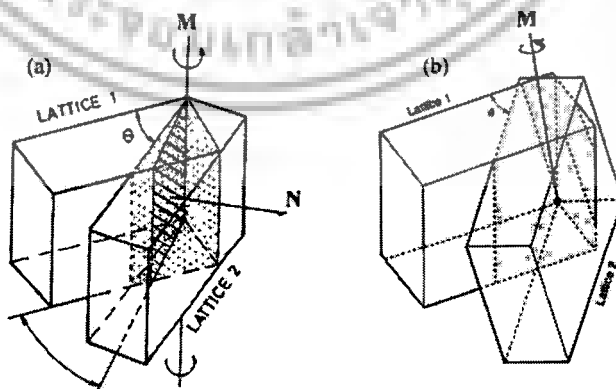
2.2.1 Interface-plane scheme เป็นวิธีที่กล่าวถึงความสัมพันธ์ระหว่างหน้าสัมผัสของเกรนแต่ละเกรนกับมุมการบิด กำหนดด้วยเวกเตอร์ \vec{N}_1 (2 DOF), \vec{N}_2 (2 DOF) และ ϕ (1 DOF) ได้ 5 DOF โดยที่ \vec{N}_1 และ \vec{N}_2 ประกอบด้วย 2 DOF เนื่องจากเป็น Direction cosine ทำให้ 2 DOF ก็เพียงพอในการกำหนดทิศทางของเวกเตอร์ในระบบ Cartesian (Right-handed) $\vec{N}_1(x_1, y_1, z_1)$ และ $\vec{N}_2(x_2, y_2, z_2)$ นี้เป็น Unit vector ตั้งฉากระนาบขอบเกรน เทียบกับแกนผลึกอ้างอิงของเกรน 1 และ เกรน 2 ตามลำดับ ส่วนอีก 1 DOF นั้น ได้แก่ Twisting angle, ϕ จะใช้เมื่อเราหมุน \vec{N}_2 เข้าซ้อนทับ \vec{N}_1 จะได้ระนาบขอบ

เกรนที่ซ้อนทับขนานพอดี เราจึงสามารถบิดเกรน 2 เป็นมุม ϕ รอบแกน N_1 เราจึงนิยามขอบเกรนได้ ตามต้องการ ดังแสดงในภาพที่ 2.2



ภาพที่ 2.2 แสดงระนาบขอบเกรนที่ซ้อนทับขนานกัน และการบิดทำมุมเพื่อนิยามโครงสร้างขอบเกรน แบบ Interface-plane

2.2.2 Misorientation scheme เป็นอีกวิธีหนึ่งในการกำหนดโครงสร้างเรขาคณิตขอบเกรน ซึ่ง เทียบเท่ากับ Interface-plane scheme แต่ 5 DOF ที่ได้มาจากการหมุนเกรนที่ 2 รอบแกน UVW เป็นมุม θ จากระบบเดิมที่เกรนที่ 1 และเกรนที่ 2 ซ้อนทับกันอย่างสมบูรณ์ หลังจากการหมุนแล้ว ระบบจะมี Lattice ที่ซ้อนทับกันเพียงบาง Lattice ซึ่งจะซ้อนทับกัน 3 มิติ เรียก Supperlattice นี้ว่า Coincidence site lattices (CSL) ขอบเกรนจึงเป็นระนาบใดก็ได้ ซึ่งอีก 2 DOF ที่จะกำหนดระนาบขอบเกรนก็คือ N_1 ที่ตั้งฉากระนาบขอบเกรนนั่นเอง ซึ่งในขั้นตอนสุดท้ายก็คือการเอา Lattice ของเกรน 1 ออกจากบริเวณ ของเกรนที่ 2 และเอา Lattice ของเกรน 2 ออกจากบริเวณของเกรนที่ 1 เราก็สามารถนิยามโครงสร้าง ขอบเกรนได้ตามต้องการ ดังแสดงในภาพที่ 2.3



ภาพที่ 2.3 แสดงการนิยามโครงสร้างขอบเกรนแบบ Misorientation ที่ได้จากการหมุนเกรนที่ 2 รอบแกน UVW เป็นมุม θ และกำหนดระนาบขอบเกรนด้วย N_1

สำหรับความสัมพันธ์ทางคณิตศาสตร์ของตัวแปรกลุ่ม Macroscopic degree of freedom เมื่ออธิบายด้วยวิธีมิตโอเรียนเทชั่น ความสัมพันธ์ระหว่างเวกเตอร์ตั้งฉากระนาบขอบเกรน \vec{N}_1 กับเวกเตอร์ตั้งฉากระนาบขอบเกรน \vec{N}_2 ดังสมการ

$$\vec{N}_2 = M_{21} \vec{N}_1 \quad (2.1)$$

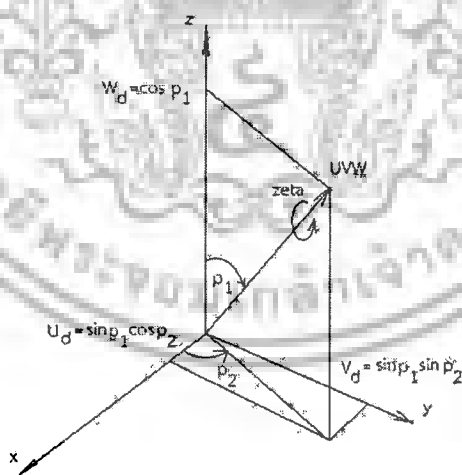
เมื่อ M_{21} คือเมตริกซ์มิตโอเรียนเทชั่น (Misorientation matrix) ที่เมื่อคูณกับ \vec{N}_1 แล้ว จะเป็นตัวกระทำที่หมุนเวกเตอร์ \vec{N}_1 รอบแกน UVW เป็นมุม θ (ตามกฎมือขวา) ทำให้ \vec{N}_1 ซ้อนทับ \vec{N}_2 พอดี โดยที่แกนหมุน UVW สามารถเขียนได้ในรูปแบบความสัมพันธ์ของโคซายน์ทิศทาง (Direction cosines) กับดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices) ดังสมการ

$$\begin{Bmatrix} U_d \\ V_d \\ W_d \end{Bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{U^2 + V^2 + W^2}} \begin{Bmatrix} U \\ V \\ W \end{Bmatrix} \quad (2.2)$$

โดยที่ U_d, V_d, W_d เป็นเวกเตอร์แกนหมุนในเทอมของโคซายน์ทิศทาง ขณะที่ UVM เป็นเวกเตอร์แกนหมุนในเทอมของดัชนีมิลเลอร์ นอกจากนี้เรายังสามารถเขียน U_d, V_d, W_d ในรูปแบบความสัมพันธ์ของระบบพิกัดเชิงขั้ว (ภาพที่ 2.4) ดังสมการ

$$\begin{Bmatrix} U_d \\ V_d \\ W_d \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sin p_1 \cos p_2 \\ \sin p_1 \sin p_2 \\ \cos p_1 \end{Bmatrix} \quad (2.3)$$

โดยที่ $U_d^2 + V_d^2 + W_d^2 = 1$ และ p_1, p_2 เป็นมุมระบบพิกัดเชิงขั้ว



ภาพที่ 2.4 แสดงแผนภูมิของเวกเตอร์แกนหมุน และความหมายของมุม p_1, p_2 และ θ

เราสามารถเข้าใจเมตริกซ์มิตโอเรียนเทชั่นที่กล่าวมาข้างต้น จากเมตริกซ์การหมุนแกนพิกัด 2 พิกัด โดยที่มีจุดกำเนิดเป็นจุดหมุน รอบเวกเตอร์การหมุนหนึ่งๆ เมตริกซ์นี้เรียกว่า “เมตริกซ์การหมุน (Rotation matrix)”

$$G_{old \rightarrow new} = G_{no} = [g_{ij}] = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

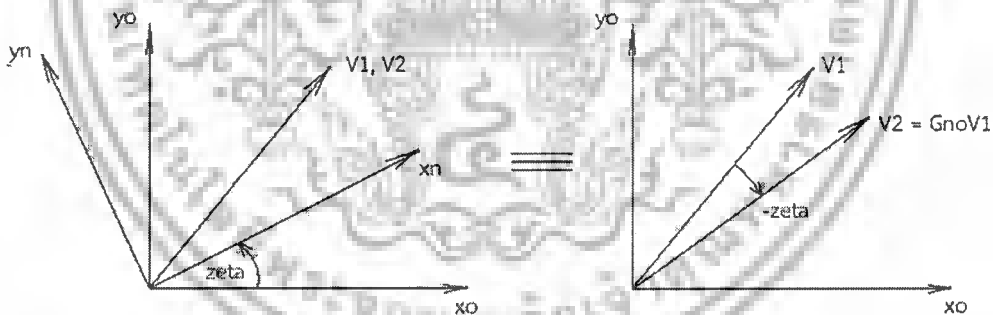
ซึ่งสามารถจัดรูปแบบฟังก์ชันโคไซน์ดังนี้

$$G_{old \rightarrow new} = G_{no} = \begin{bmatrix} \hat{x}_n \cdot \hat{x}_o & \hat{x}_n \cdot \hat{y}_o & \hat{x}_n \cdot \hat{z}_o \\ \hat{y}_n \cdot \hat{x}_o & \hat{y}_n \cdot \hat{y}_o & \hat{y}_n \cdot \hat{z}_o \\ \hat{z}_n \cdot \hat{x}_o & \hat{z}_n \cdot \hat{y}_o & \hat{z}_n \cdot \hat{z}_o \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\hat{x}_n, \hat{x}_o) & \cos(\hat{x}_n, \hat{y}_o) & \cos(\hat{x}_n, \hat{z}_o) \\ \cos(\hat{y}_n, \hat{x}_o) & \cos(\hat{y}_n, \hat{y}_o) & \cos(\hat{y}_n, \hat{z}_o) \\ \cos(\hat{z}_n, \hat{x}_o) & \cos(\hat{z}_n, \hat{y}_o) & \cos(\hat{z}_n, \hat{z}_o) \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

หรือ

$$G_{old \rightarrow new} = G_{no} = \begin{Bmatrix} \hat{x}_{n/o} \\ \hat{y}_{n/o} \\ \hat{z}_{n/o} \end{Bmatrix} = [\hat{x}_{o/n} \quad \hat{y}_{o/n} \quad \hat{z}_{o/n}] \quad (2.6)$$

ตัวอย่างการคำนวณหาความสัมพันธ์ระหว่างพิกัด x_o-y_o กับ x_n-y_n ด้วยเมตริกซ์การหมุนแสดงดังภาพที่ 2.5



ภาพที่ 2.5 ความสัมพันธ์ระหว่าง x_o-y_o กับ x_n-y_n ด้วยเมตริกซ์การหมุน

ได้ Rotation Matrix

$$G_{old \rightarrow new} = G_{no} = \begin{bmatrix} \cos(\hat{x}_n, \hat{x}_o) & \cos(\hat{x}_n, \hat{y}_o) \\ \cos(\hat{y}_n, \hat{x}_o) & \cos(\hat{y}_n, \hat{y}_o) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

และจากความสัมพันธ์ระหว่างเมตริกซ์มิสโอเรียลเทชันกับเมตริกซ์การหมุน

$$M = G^{-1} = G^{Transpose} \quad (2.6)$$

$$M_{21} = G_{g1 \rightarrow g2}^{-1}(\theta) = G_{g2g1}^1(\theta) \quad (2.7)$$

$$M_{21} = G_{g_1 \rightarrow g_2}(-\theta) = G_{g_2 g_1}(-\theta) = \begin{Bmatrix} \hat{x}_{g_2/g_1} \\ \hat{y}_{g_2/g_1} \\ \hat{z}_{g_2/g_1} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{x}_{g_1/g_2} & \hat{y}_{g_1/g_2} & \hat{z}_{g_1/g_2} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

ซึ่งจากตัวอย่างข้างต้น ได้เมตริกซ์มิต โอเรียลเทชั่น ในรูปแบบเมตริก 2x2 ดังนี้

$$M_{21} = G_{g_1 \rightarrow g_2}^{-1}(\theta) = G_{g_2 g_1}^{-1} = \begin{bmatrix} \cos(\hat{x}_{g_2}, \hat{x}_{g_1}) & \cos(\hat{x}_{g_2}, \hat{y}_{g_1}) \\ \cos(\hat{y}_{g_2}, \hat{x}_{g_1}) & \cos(\hat{y}_{g_2}, \hat{y}_{g_1}) \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

สำหรับเมตริกซ์มิต โอเรียลเทชั่น ในรูปแบบเมตริก 3x3 มีความสัมพันธ์ดังสมการ

$$M_{21} = \begin{bmatrix} u^2(1-\cos\theta) + \cos\theta & uv(1-\cos\theta) - w\sin\theta & uw(1-\cos\theta) + v\sin\theta \\ uv(1-\cos\theta) + w\sin\theta & v^2(1-\cos\theta) + \cos\theta & vw(1-\cos\theta) - u\sin\theta \\ uw(1-\cos\theta) - v\sin\theta & vw(1-\cos\theta) + u\sin\theta & w^2(1-\cos\theta) + \cos\theta \end{bmatrix}$$

ดังนั้นถ้า \vec{N}_1 มุมรอบแกน UVW ด้วย $\theta = 34.7^\circ$ และ $\vec{N}_1 = \{.924, .267, .259\}$

$\vec{N}_2 = \{.767, .628, .131\}$ ดังนั้นความสัมพันธ์ระหว่างแกน 1 และแกน 2 มีดังนี้

$$\vec{N}_2 = M_{21} \vec{N}_1 \rightarrow \begin{Bmatrix} .957 \\ .277 \\ .020 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} .927 & .011 & .375 \\ .160 & .892 & -.422 \\ -.340 & .451 & .825 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} .924 \\ .267 \\ .259 \end{Bmatrix}$$

2.3 ประเภทของขอบเกรน [2, 24]

เมื่อพิจารณาประเภทของขอบเกรนตามแกนและมุมการจัดเรียงตัวของผลึกแล้ว เราสามารถแบ่งขอบเกรนได้เป็น 2 กลุ่มใหญ่ ดังภาพที่ 2.6

1) ขอบเกรนมุมต่ำ (Low angle grain boundary, LAGB) เป็นขอบเกรนที่อยู่ระหว่างผลึกที่มีมุมของทิศทางการเรียงตัวของผลึกทำมุมระหว่างกันไม่เกิน 15°

2) ขอบเกรนมุมสูง (High angle grain boundary, HAGB) เป็นขอบเกรนที่อยู่ระหว่างผลึกที่มีมุมของทิศทางการเรียงตัวของผลึกทำมุมระหว่างกันมากกว่า 15°

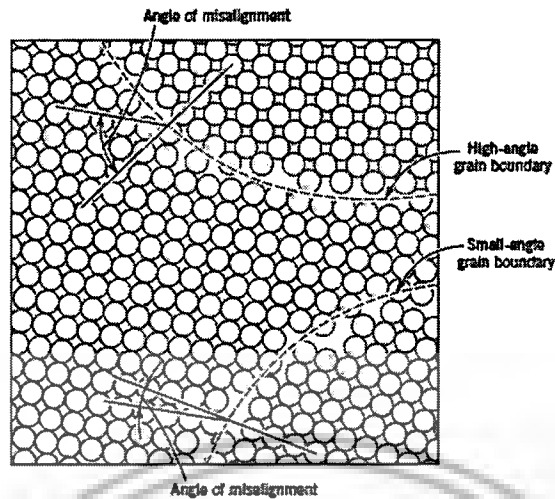
อย่างไรก็ตามในกลุ่มของ HAGBs มีขอบเกรนพิเศษบางชนิดที่มีการจัดเรียงตัว อยู่ระหว่างผลึกที่ทำมุมกันเป็นพิเศษเฉพาะ คู่การซ้อนทับกันของตำแหน่งอะตอม (Coincidence point) หรือ ซูเปอร์แลตทิซ (Super lattice) ซึ่งเราเรียกขอบเกรนประเภทนี้ว่า “Coincidence site lattice boundaries (CSLBs)” ที่ใช้สัญลักษณ์ Σ ในการแทนขอบเกรนชนิด CSL ดังกล่าว แม้ว่าไม่ใช่ทุก CSLBs ที่มีพลังงานอิสระ เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

(Free energy) ต่ำ และถูกจัดให้เป็นขอบเกรนชนิดพิเศษ แต่เฉพาะ Low- Σ CSLBs ที่ส่งผลให้ขอบเกรนชนิดนี้มีค่าพลังงานต่ำและมีเสถียรภาพสูง ซึ่ง “ขอบเกรนพิเศษ (Special Grain boundaries)” กลุ่มนี้ Σ จะมีค่าอยู่ระหว่าง 3 กับ 29 [25]

ตารางที่ 2.1 ตัวอย่างค่า Σ ในแต่ละแกนมุมต่างๆจากสมการ 2.8

UVW	Σ	θ
100	5	36.9
	13a	22.6
	17a	28.1
	25a	16.3
	29b	43.6
110	3	70.5
	9	38.9
	11	50.5
	17b	86.6
	19a	26.5
111	27b	31.6
	3	60
	7	38.2
	13b	27.8
	19b	46.6
210	21a	21.8
	31a	17.9
	3	131.8
	5	180
	7	73.4
	9	96.4
	15	48.2
	21b	58.4
23	163	
27a	35.4	
29a	112.3	

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาพที่ 2.6 แสดงลักษณะขอบเกรนที่แกนผลึกทำมุมต่ำ (Low angle GBs) และมุมสูง (High angle GBs) [2]

2.4 Coincidence site lattice boundary (CSLB)

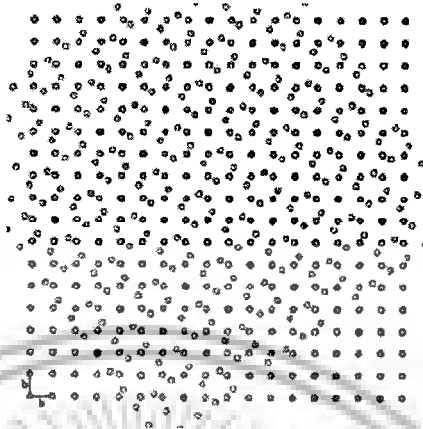
ชนิดของ CSLBs ในเชิงปฏิบัติ นั้น กำหนดได้จากมุมบิด (1 ตัวแปรอิสระ) และแกนการหมุน (2 ตัวแปรอิสระ) ที่กำหนดสามารถวัดค่าได้ด้วยเทคนิค EBSD โดยที่ UVW เป็นทิศทางของแกนการหมุนของเกรนใดเกรนหนึ่งเทียบกับแกนอ้างอิง เมื่อทั้ง 2 เกรนซ้อนกันอย่างสมบูรณ์ แล้วจึงหมุนรอบแกน UVW นั้นด้วยมุม θ ดังนั้น แบบจำลอง CSL จึงถูกกำหนดด้วย 3 ตัวแปรอิสระ θ, UVW ซึ่งที่ค่าเฉพาะ ส่วนกลับของสัดส่วนของปริมาตรใน 1 หน่วยเซลล์ที่ GBs ต่อ ปริมาตรใน 1 หน่วยเซลล์ของ CSL จะเป็นเลขจำนวนเต็ม หลังสัญลักษณ์ Σ เช่น $\Sigma 5$ แสดงถึงอะตอมบนระนาบขอบเกรนจะซ้อนทับตำแหน่งกัน 1 อะตอมทุก 5 อะตอม ดังแสดงในภาพที่ 2.7 ที่หากเราลากเส้นจากตำแหน่งของอะตอมที่มีการซ้อนทับกันสู่อีกตำแหน่งซ้อนทับหนึ่งเป็นยูนิตเซลล์จะประกอบด้วย 5 อะตอม ของผลึกทั้งสอง สำหรับการคำนวณทางคณิตศาสตร์ของขอบเกรนชนิด CSL สำหรับโครงสร้างลูกบาศก์ ได้แก่ FCC และแบบ BCC มีความสัมพันธ์ดังสมการ [26]

$$\Sigma = x^2 + Ny^2 \quad (2.9)$$

เมื่อ $N = U^2 + V^2 + W^2$ และ x, y เป็นจำนวนเต็ม มีค่ามากกว่า 0 และมีมุมระหว่างเกรนเป็นไปตามสมการ

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = N^{1/2} \frac{y}{x} \rightarrow \theta = 2 \arctan\left(N^{1/2} \frac{y}{x}\right) \quad (2.10)$$

หากค่า Σ ที่คำนวณได้เป็นเลขจำนวนคู่ ให้หารด้วย 2 จนกว่าจะได้เป็นเลขคี่



ภาพที่ 2.7 การจัดเรียงของขอบเกรนตามแบบจำลองของ Σ_5

อย่างไรก็ตามสมการของแบบจำลองพื้นฐานนี้ยังไม่ได้คำนึงถึงระบบสมมาตรของผลึกต่างๆ ซึ่งมีถึง 24 ระบบ (ตารางที่ 2.1) ด้วยกัน สำหรับผลึกแบบลูกบาศก์ ที่มีอยู่ด้วยเมตริกซ์สมมาตรแล้ว จะได้ขอบเกรนที่เท่าเทียมกัน ถึง 24 ขอบเกรน

ตารางที่ 2.2 เมตริกซ์สมมาตร 24 เมตริกซ์ของผลึกแบบลูกบาศก์

1	0	0	$\bar{1}$	0	0	0	0	$\bar{1}$	$\bar{1}$	0	0	0	0	1	$\bar{1}$	0	0
0	1	0	0	$\bar{1}$	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	$\bar{1}$
0	0	1	0	0	$\bar{1}$	1	0	0	0	0	$\bar{1}$	$\bar{1}$	0	0	0	1	0
1	0	0	$\bar{1}$	0	0	0	$\bar{1}$	0	$\bar{1}$	0	0	0	1	0	0	0	1
0	$\bar{1}$	0	0	0	1	1	0	0	0	$\bar{1}$	0	$\bar{1}$	0	0	1	0	0
0	0	1	0	$\bar{1}$	0	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	1	0
0	1	0	0	1	0	0	$\bar{1}$	0	0	1	0	0	0	$\bar{1}$	0	0	1
0	0	1	1	0	0	0	0	1	0	0	$\bar{1}$	1	0	0	$\bar{1}$	0	0
1	0	0	0	0	$\bar{1}$	$\bar{1}$	0	0	$\bar{1}$	0	0	0	$\bar{1}$	0	0	$\bar{1}$	0
0	$\bar{1}$	0	0	1	0	$\bar{1}$	0	0	0	0	1	0	$\bar{1}$	0	$\bar{1}$	0	0
0	0	$\bar{1}$	1	0	0	0	0	1	0	$\bar{1}$	0	$\bar{1}$	0	0	0	0	$\bar{1}$
1	0	0	0	0	$\bar{1}$	0	1	0	1	0	0	0	0	$\bar{1}$	0	$\bar{1}$	0

ดังนั้น จาก Orientation matrix ที่ประกอบด้วย Notation

Matrix	θ° / UVW	N_1	N_2	φ°
.667	-.564	.487		
.667	.744	-.051	50.1/123	$1\bar{5}\bar{1} \ 1\bar{1}\bar{1}$ 32.3
-.333	.359	.872		

เมื่อใช้ Symmetrical matrix แล้ว เราสามารถสร้างระบบขอบเกรนเพิ่มขึ้นอีก 23 ระบบด้วยกัน ดังนั้นเพื่อสะดวกในการเรียนผลประกอบของค่ามุมและแกนต่างๆ เราจึงใช้ค่าของมุมองศาในน้อยสุดในระบบ เรียกมุมนี้ว่า θ_D (Disorientation angle) ผ่านสมการที่เรียกว่า "Rotation quaternion"

$$A^2 + B^2 + C^2 + D^2 = \Sigma \quad (2.11)$$

ได้ Disorientation θ_D / UVW จาก หนึ่งในความสัมพันธ์ดังนี้

$$\theta \text{ และ } U, V, W = 2 \cos^{-1}(A/\Sigma^{-1/2}) \text{ และ } B, C, D \quad (2.12)$$

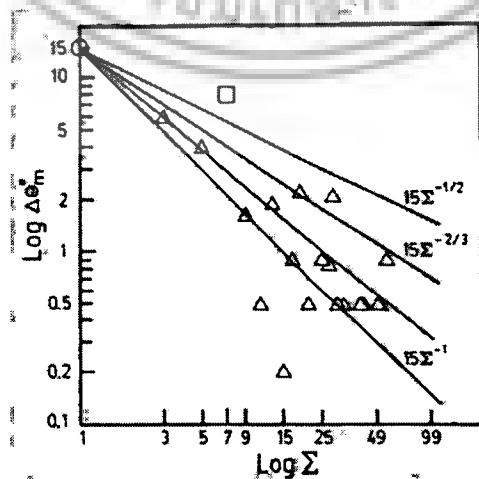
$$\theta \text{ และ } U, V, W = 2 \cos^{-1}(A+B)/(2\Sigma)^{-1/2} \text{ และ } (A-B), (C+D), (C-D) \quad (2.13)$$

$$\theta \text{ และ } U, V, W = 2 \cos^{-1}(A+B+C+D)/2\Sigma^{1/2} \text{ และ } (A+B-C-D), (A-B+C-D), (A-B-C+D) \quad (2.14)$$

ในความเป็นจริงมุมของการจัดเรียงตัวของ CSL ไม่ได้มีค่าเฉพาะจากการคำนวณ แต่สามารถเทียบกันได้จากค่าการคำนวณตามสมการ 2.15

$$\theta_m = 15\Sigma^n \quad (2.15)$$

เมื่อ θ_m คือมุมมากที่สุดที่สามารถเทียบกันได้จากมุมการจัดเรียงตัวของขอบเกรนชนิด CSL ส่วนค่า n เป็นค่าคงที่ ปัจจุบันมีนักวิจัยเสนอกฎเกณฑ์ต่างๆ เกี่ยวกับความสัมพันธ์ระหว่างค่า v_m และค่า n แต่กฎเกณฑ์ที่นิยมกันสำหรับค่า v_m ได้แก่ Brandon criterion [27] โดยมีค่า $n = -1/2$ ซึ่งเมื่อเทียบกับค่ากฎเกณฑ์ของนักวิจัยอื่นแสดงในภาพที่ 2.8 จะเห็นได้ว่าค่าความชันของเส้นสมการตามเกณฑ์ของเบรนดอนมีค่าความชันน้อยกว่าเส้นสมการของกฎเกณฑ์ที่เสน่อื่น ๆ



ภาพที่ 2.8 แสดงเส้นแนวโน้มค่าเทียบกันได้จากมุม CSL ต่างๆ ตามเลขยกกำลัง n [27]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

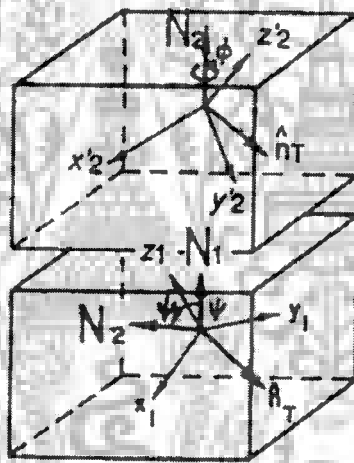
จากหัวข้อที่ผ่านมากล่าวถึงแบบจำลองของขอบเกรนชนิด CSL ที่อธิบายเพียง 3 ดีกรีอิสระจากแบบจำลองทางโครงสร้างเรขาคณิตเท่านั้น ส่วนอีก 2 ดีกรีอิสระที่เหลือสามารถอธิบายได้ในเชิงความสัมพันธ์ของเวกเตอร์ตั้งฉากกับระนาบขอบเกรน เราจะสามารถกล่าวถึงกับขอบเกรนเอียง (Tilt boundary) และขอบเกรนบิด (Twist boundary) ซึ่งสามารถหาจากสมการความสัมพันธ์ระหว่างเวกเตอร์ตั้งฉากกับระนาบขอบเกรนของเกรน 2 เกรนดังภาพที่ 2.9 ดังนี้

$$\text{Pure twist; } \psi = 0, \quad UVW = N_1 \text{ และ } \theta = \varphi$$

$$\text{Pure tilt; } \varphi = 0, \quad UVW = n_T \text{ และ } \theta = \psi$$

โดยที่ n_T เป็นเวกเตอร์ที่เกิดจากการผลคูณเชิงเวกเตอร์ $n_T = \frac{N_1 \times N_2}{|N_1 \times N_2|}$ และ ψ เป็นมุมที่เกิดขึ้นระหว่าง

เวกเตอร์ N_1 และ N_2 โดยที่ $\sin \psi = \frac{|N_1 \times N_2|}{|N_1||N_2|}$ และ φ เป็นมุมการบิด



ภาพที่ 2.9 องค์ประกอบของความสัมพันธ์ระหว่างเวกเตอร์ตั้งฉากระนาบกับมุมสำคัญต่างๆ

2.5 กระบวนการในวิศวกรรมขอบเกรน

แท้จริงแล้วกระบวนการวิศวกรรมขอบเกรนเป็นกระบวนการความร้อนเชิงกล (Thermomechanical processing) ที่มีวัตถุประสงค์เพื่อเพิ่มสัดส่วนขอบเกรนชนิดพิเศษแบบ Low- Σ CSL โดยใช้ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานทางความร้อนกับพลังงานภายในของวัสดุกับอุณหภูมิกับเวลา ในการอบ บางครั้งอาจมีความเกี่ยวข้องกับการเปลี่ยนแปลงรูปร่างอย่างถาวร (Plastic deformation) ในกระบวนการด้วย กระบวนการวิศวกรรมขอบเกรนเหล่านี้ ได้แก่ การอบอ่อน กระบวนการความร้อนเชิงกล การเพิ่มความแข็งโดยวิธีการตกตะกอนของแข็ง (Precipitation hardening) เป็นต้น ซึ่งในปัจจุบัน “วิศวกรรมขอบเกรน (Grainboundary engineering)” ที่ได้รับความนิยมเป็นการประยุกต์ใช้พลังงานสะสมแบบอัสตติกจากการขึ้นรูปเย็น (Cold work) หรือการดึง (Tension) ร่วมกับการอบอ่อน ทำให้

สัดส่วนของขอบเกรนชนิดพิเศษที่เพิ่มขึ้น ปรับปรุงวัสดุให้สามารถทนสภาวะต่อการกัดกร่อนตามขอบเกรน สามารถลดอัตราการเกิดการคืบในวัสดุได้ นั้นประกอบด้วยกัน 4 ประเภท [28, 29] คือ

2.5.1 One-step recrystallization เป็นกระบวนการที่อบในเตาด้วยระยะเวลา ให้เกิดการตกผลึกใหม่ของวัสดุหลังจากวัสดุได้ผ่านการให้ความเครียดตั้งแต่ระดับปานกลางขึ้นไป การตกผลึกใหม่นี้ส่งผลให้สัดส่วนของขอบเกรนชนิด $\Sigma 3$ หรือขอบทวินเพิ่มขึ้นจาก Annealing twin [30, 31] เช่น ในนิกเกิลหล่อ (99.9%Ni) เมื่อผ่านการรีดเย็นให้มีขนาดความหนาลดลง 60% ตามด้วยการอบที่อุณหภูมิ 950-1150 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 1-15 นาที ซึ่งพบว่าสามารถเพิ่มจำนวนสัดส่วนของขอบเกรนชนิด CSL จากเดิม 13.1% เป็น 66.2% ได้

2.5.2 Iterative recrystallization เป็นกระบวนการทำ One-step recrystallization ซ้ำ นั่นคือทำการตกผลึกใหม่มากกว่า 1 ครั้งขึ้นไป เช่น ในทองแดงที่ผ่านการรีดเย็นที่มีความหนาลดลง 30% แล้วอบที่อุณหภูมิ 375 องศาเซลเซียสเป็นเวลา 10 นาที ทำซ้ำกัน 3 ครั้ง ทำให้ขอบเกรนชนิด $\Sigma 3$ เพิ่มขึ้นเป็น 58% [32]

2.5.3 One-step strain annealing เป็นกระบวนการที่ให้ความเครียดน้อยกว่าพลังงานความเครียดสะสมที่ทำให้เกิดการตกผลึกใหม่กับวัสดุ แต่พลังงานความเครียดที่ให้กับวัสดุนั้นก็เพียงพอต่อการเกิดการจัดเรียงตัวใหม่ของขอบเกรนเมื่อได้รับพลังงานกระตุ้นทางความร้อน (Thermal activation energy) จากการอบ ซึ่งวิธีการนี้ขนาดของเกรนโดยส่วนใหญ่ก็มีขนาดเกรนที่ใหญ่กว่า Iterative recrystallization [29] เช่น ในนิกเกิลเกรด 200 ที่ผ่านการรีดเย็นให้ความหนาลดลง 5% แล้วอบที่อุณหภูมิ 900 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 5 นาที ในบรรยากาศอาร์กอน เป็นผลทำให้เพิ่มสัดส่วนของขอบเกรนชนิด CSL จาก 34.9 เป็น 65% [33]

2.5.4 Iterative strain annealing เป็นกระบวนการทำ One-step strain annealing ซ้ำ โดยไม่เกิดการตกผลึกใหม่ในกระบวนการ เช่น ในนิกเกิลอัลลอยด์ 600 (Ni-16Cr-9Fe) ผ่านการให้ความเครียด 2-5% ตามด้วยการอบที่ 890-940 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 1-20 ชั่วโมง เป็นผลทำให้เพิ่มจำนวน $\Sigma 3$ และ $\Sigma 9$ จากเดิม 6% และ 5% เป็น 12% และ 10% ตามลำดับ [34]

ซึ่งจะเห็นได้ว่ากระบวนการวิศวกรรมขอบเกรนด้วยกระบวนการทางความร้อนเชิงกลที่ประสบความสำเร็จนั้นขึ้นอยู่กับปัจจัยควบคุมต่างๆ ไม่ว่าจะเป็นปัจจัยจากกระบวนการเชิงกล (Mechanical process) กระบวนการอบอ่อน (Annealing process) หรือแต่แม้สมบัติทางเคมีของวัสดุ โดยตัวแปรสำคัญของกระบวนการเชิงกลนั้น ได้แก่ ประเภทของการให้ความเครียด ปริมาณความเครียดที่ให้กับวัสดุและอัตราการเปลี่ยนแปลงความเครียดต่อเวลา โดยปัจจัยทั้งหมดนี้ส่งผลต่อลักษณะการจัดเรียงตัวและความหนาแน่นของดิสโลเคชันรวมไปถึงพลังงานความเครียดสะสมที่เกิดขึ้นในวัสดุ ซึ่งปัจจัยเหล่านี้จะเป็นปัจจัยหนึ่งที่กำหนดกลไกต่างๆ ในช่วงกระบวนการอบอ่อน เช่น การศึกษาผลกระทบของอัตราการเปลี่ยนแปลงความเครียดต่อเวลาในกระบวนการอบอ่อนแบบเนยลิ่งของ Thompson และคณะ [35] ที่ศึกษากระบวนการทางความร้อนเชิงกลในนิกเกิล (99.5%) แบบสเตนแอนเนียลิ่งโดยนำชิ้นงานไปชุบขึ้นรูปให้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า

ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ความหนาแน่นลดลง 6 % ด้วยอัตราเร็วที่แตกต่างกัน พบว่าอัตราการเปลี่ยนแปลงความเครียดต่อเวลาแบบซ้ำ ๆ ในวัสดุจะก่อให้เกิดขอบทวินแบบ Non-coherent (ขอบทวินที่มีค่า 0.2) ด้วยกลไกการหมุนของเกรน (Grain rotation) ทำให้พลังงานของระบบลดต่ำลง นอกจากนี้แล้วการให้อัตราการเปลี่ยนแปลงความเครียดต่อเวลาแบบซ้ำ ๆ ยังส่งผลทำให้เกิดขอบเกรนมุมต่ำ เนื่องจากกระบวนการโพสิโกไนเซชันของดิสโลเคชันที่กระจายตัวอย่างสม่ำเสมอภายในวัสดุ ในช่วงการอบอ่อน เมื่ออัตราการเกิดความเครียดต่อเวลาสูงขึ้นจะทำให้เพิ่มจำนวนของดิสโลเคชันอย่างรวดเร็วและเกิดเป็นดิสโลเคชันที่คดขวาง (Dislocation entanglement) กระจายตัวกลายเป็นดิสโลเคชันแบบวิวิพันธ์ (Heterogeneous) ตรงบริเวณขอบเกรน เมื่อได้รับพลังงานความร้อนที่เพียงพอระบบจะลดพลังงานเฉพาะที่ (Local energy) ด้วยกลไกของการหมุนของระนาบขอบเกรน (Grain boundary plane rotation) เกิดเป็นขอบทวินชนิด Non-coherent [36] ขณะที่การศึกษาปริมาณของความเครียดที่เพิ่มขึ้นเป็นการศึกษากระบวนการวิวัฒนาการของขอบเกรนแบบปริศตาลโซ่ชั้นดั่งงานวิจัยของ Palumbo และคณะ [37, 38] ที่พบว่ากระบวนการแอนนีลิ่งทวินเป็นกลไกหลักเพื่อลดพื้นที่โดยรวมของขอบเกรนทำให้ขอบเกรนชนิด $\Sigma 3n$ หรือขอบทวินแบบ Coherent ในช่วงการตกผลึกใหม่และช่วงการโตของเกรน

ส่วนการศึกษากิจกรรมขององค์ประกอบทางเคมีของวัสดุต่อวิวัฒนาการของขอบเกรนพบว่าเกิดการลดลงของสัดส่วนทวินจากการอบคืนตัวหรือขอบเกรนชนิด $\Sigma 3$ ขณะการโตของเกรนในนิกเกิลบริสุทธิ์ (99.999%Ni) ในทางกลับกันสัดส่วนของทวินจากการอบคืนตัวเพิ่มขึ้นสำหรับนิกเกิล (99.5%) [39] ซึ่งปัจจัยควบคุมต่างๆ ที่กล่าวมาข้างต้นเกี่ยวข้องกับกระบวนการทางความร้อนของโลหะที่เรียกว่าการอบอ่อน ที่ประกอบด้วยขั้นตอนการให้พลังงานสะสมแก่วัสดุด้วยวิธีทางความร้อนพร้อมที่จะลดระดับพลังงานของระบบทั้งแบบโดยรวมและแบบเฉพาะที่ เมื่อพลังงานความร้อนที่ให้แก่ระบบเพียงพอจะกระตุ้นกระบวนการทางกลไกไม่ว่าจะเป็นช่วงระยะเวลาให้ความร้อนในระบบ ช่วงการคงที่อุณหภูมิต้องการหรือช่วงการทำให้เย็นตัวลง ดังนั้นกระบวนการอบอ่อนจึงเป็นกระบวนการหลักของกระบวนการวิวัฒนาการของเกรนที่กลไกต่างๆของการเกิดขอบเกรนชนิดพิเศษเกิดขึ้นในช่วงนี้ซึ่งส่วนของรายละเอียดและหลักการจะอธิบายในหัวข้อถัดไป

2.6 กระบวนการอบอ่อน [40, 41]

การอบอ่อนมักกล่าวถึงกระบวนการนำวัสดุไปอบที่อุณหภูมิหนึ่ง ๆ ตามเวลาที่ต้องการแล้วทำให้เย็นตัวลง ที่ประกอบด้วย 3 ขั้นตอน ได้แก่ 1. การเพิ่มความร้อนให้กับวัสดุ (Heating) จนถึงอุณหภูมิที่มีพลังงานกระตุ้นทางความร้อนตามต้องการ 2. การทิ้งไว้ที่อุณหภูมินั้นเป็นระยะเวลาหนึ่ง (Soaking) เพื่อให้โครงสร้างของวัสดุเปลี่ยนแปลงสู่สถานะที่มีพลังงานต่ำกว่า 3. การทำให้เย็นตัวลง (Cooling) เพื่อคงไว้ซึ่งโครงสร้างของวัสดุที่มีคุณสมบัติตามที่ต้องการซึ่งจะเห็นได้ว่าเวลาและอุณหภูมิเป็นปัจจัยที่สำคัญ นอกจากนี้ยังมีปัจจัยอื่นๆ เช่น ขนาดและรูปร่างของวัสดุ โดยส่งผลเรื่องอัตราการได้รับความร้อน

และอัตราการเย็นตัวจากบริเวณพื้นผิวของวัสดุที่เร็วกว่าบริเวณเนื้อในทำให้วัสดุมีโครงสร้างจุลภาคที่แตกต่างกันระหว่างบริเวณพื้นผิวกับเนื้อใน

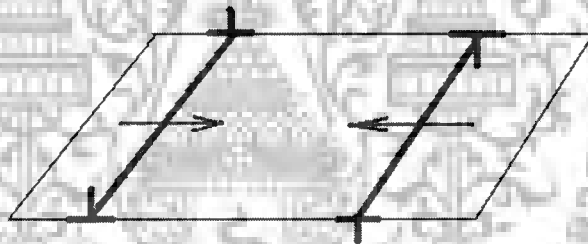
ในกระบวนการวิศวกรรมขอบเกรน ชิ้นงานจะอยู่ในสถานะเมตาสเตเบิลนั้น ไม่ได้ตามทฤษฎีทางอุณหพลศาสตร์ระหว่างการอบอ่อน หลังกระบวนการแข็งกลด้วยการให้ความเครียดแก่ชิ้นงานจากการขึ้นรูปเย็น เพื่อเพิ่มความหนาแน่นดิสโลเคชันที่บริเวณขอบเกรน และสะสมพลังงานเชิงกลที่เรียกว่า “พลังงานความเครียดแบบอีลาสติก (Elastic strain energy)” พร้อมทั้งจะมีการคลายตัว เมื่อมีพลังงานกระตุ้นทางความร้อนเพียงพอต่อการหมุนตัวของเกรน การเรียงตัวใหม่ของอะตอมบริเวณขอบเกรนหรือการหมุนตัวของระนาบขอบเกรนในช่วงการคืนตัว เป็นผลทำให้ความหนาแน่นดิสโลเคชันลดลงพร้อมกับการก่อตัวเป็นขอบเกรนชนิดพิเศษแบบ Non-coherent เมื่ออุณหภูมิในช่วงการคืนตัวสูงขึ้นจนพลังงานกระตุ้นจากความร้อนเพียงพอ เกรนที่ยังมีพลังงานความเครียดสะสมที่สูงอยู่จะเกิดการแตกผลึกขึ้นได้เกรนที่เกิดใหม่มีลักษณะขนาดเท่ากันในทุกทิศทาง (Equiaxed grain) ที่ปราศจากความเครียดขึ้นใหม่ เกรนขนาดเล็กที่ปรากฏขึ้นใหม่นี้จะปรากฏตามบริเวณขอบเกรนและตามแนวระนาบการเคลื่อนตัวซึ่งเป็นบริเวณที่มีการเปลี่ยนรูปค่อนข้างมาก ในทางวิศวกรรมขอบเกรนการแตกผลึกใหม่จะเกิดขอบเกรนพิเศษเนื่องจาก Annealing twin ซึ่งสามารถเกิดได้ทั้งแบบ Coherent และ Non-coherent หลังจากเกิดการแตกผลึกใหม่อย่างสมบูรณ์แล้ว หากยังคงสภาพการอบไว้เช่นนั้น เกรนที่ปราศจากความเครียดจะเกิดการสร้างปฏิสัมพันธ์กับเกรนข้างเคียงโดยเกรนที่มีความเสถียรน้อยกว่าจะถูกเกรนที่มีความเสถียรมากกว่ากลืนกินทำให้ขนาดของเกรนใหญ่ขึ้น การโตของเกรนจะทำให้เกิดขอบเกรนชนิดพิเศษโดยเฉพาะการโตของเกรนที่มีขอบทวินจะสามารถเกิดขอบเกรนชนิด $\Sigma 3n$ ร่วมด้วย เช่น งานวิจัยของ Randle และคณะ [42] ที่ศึกษาทั่วโลกเกิดขอบเกรนชนิด $\Sigma 3n$ ในช่วงการโตของเกรน พบว่าจะเกิดปฏิสัมพันธ์ของขอบเกรนชนิด $\Sigma 3n$ ที่บริเวณ Triple junction จากที่กล่าวมาข้างต้นจะเห็นว่าวัสดุจะเกิดการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างเพื่อให้เกิดขอบเกรนพิเศษในช่วงการอบอ่อน โดยกลไกสำคัญในช่วงกระบวนการนี้ประกอบด้วย 3 กลไก ได้แก่ การคืนตัว (Recovery) การแตกผลึกใหม่ (Recrystallization) และตามมาด้วยการโตของเกรน (Grain growth)

2.6.1 การคืนตัว (Recovery)

การคืนตัวเป็นกระบวนการลดพลังงานความเครียดสะสมภายในวัสดุหลังจากกระบวนการให้ความเครียดด้วยกรรมวิธีทางกล ในระหว่างการอบคืนตัวพลังงานความเครียดสะสมจะถูกปลดปล่อยโดยการเคลื่อนตัวของดิสโลเคชันไม่ว่าจะเป็นการจัดเรียงตัวของดิสโลเคชันจนได้โครงสร้างที่มีความเครียดต่ำลงหรือการลดความหนาแน่นดิสโลเคชัน เนื่องจากการหักล้างกันระหว่างดิสโลเคชัน เมื่อมาทำปฏิสัมพันธ์กันทั้งสองกลไกเป็นแรงผลักดันทำให้พลังงานในระบบลดลง เราสามารถจำแนกการคืนตัวได้เป็น 2 ช่วงอุณหภูมิตามกลไกการเคลื่อนตัวของดิสโลเคชันในการลดระดับพลังงานของระบบ ได้แก่ ในช่วงการอบที่อุณหภูมิสูง ความสามารถการเคลื่อนตัวของดิสโลเคชัน (Mobility of Dislocation) ก็จะสูงขึ้นตามไปด้วย ทำให้เส้นดิสโลเคชัน (Dislocation lines) ชนิดต่างๆ เกิดการเคลื่อนตัวไม่ว่าจะเป็นการ

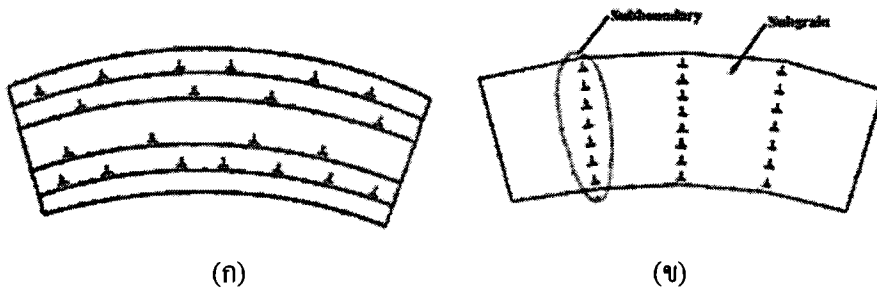
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เคลื่อนตัวแบบ Easy Glide , Climb และ Cross slip เพื่อลดความหนาแน่นของดิสโลเคชันโดยการเคลื่อนที่เข้าหากันของเส้นดิสโลเคชันที่มีแรงดึงดูดระหว่างกันของเส้นดิสโลเคชันที่มีเครื่องหมายตรงกันข้ามกัน สำหรับการเคลื่อนที่ของเส้นดิสโลเคชันที่อยู่บนระนาบเดียวกันจะเกิดการเคลื่อนตัวแบบ Easy Glide แต่ถ้าเส้นดิสโลเคชันอยู่ต่างระนาบกันจะเป็นการเคลื่อนตัวแบบ Cross slip และ Climb เกิดการรวมกันของเส้นดิสโลเคชันขึ้นและหักล้างกันไปส่งผลให้พลังงานโดยรวมลดลง กลไกนี้เรียกว่า “การหักล้างกันของดิสโลเคชัน (Annihilation of dislocation)” (ดังภาพที่ 2.10) ซึ่งเป็นกลไกที่เกิดง่ายที่สุดในการลดความหนาแน่นดิสโลเคชัน กระบวนการดังกล่าวจะถูกเร่งปฏิกิริยาให้เร็วขึ้นเมื่ออุณหภูมิภายในระบบเพิ่มขึ้น เนื่องจากอัตราการแพร่ของอะตอมสูงขึ้น ถ้าได้รับพลังงานกระตุ้นที่เหมาะสม อาจก่อให้เกิดขอบเกรนพิเศษได้ อย่างไรก็ตามก็ขึ้นอยู่กับปริมาณและอัตราการเปลี่ยนแปลงต่อเวลาของดิสโลเคชัน ซึ่งเมื่อมีความหนาแน่นของดิสโลเคชันมากพอ ขอบเกรนพิเศษที่เกิดขึ้นในช่วงนี้จะหายไปตามกลไกการเกิดผลึกใหม่ ดังนั้นในช่วงนี้จึงมีความสำคัญต่อวิศวกรรมขอบเกรนสำหรับวัสดุเช่น การเกิดขอบเกรนพิเศษเนื่องจากการหมุนของเกรน จะเกิดขึ้นเพื่อการลดพลังงานของระบบให้มีพลังงานต่ำสุดโดยเฉพาะพลังงานระดับมหภาค [35] เป็นต้น



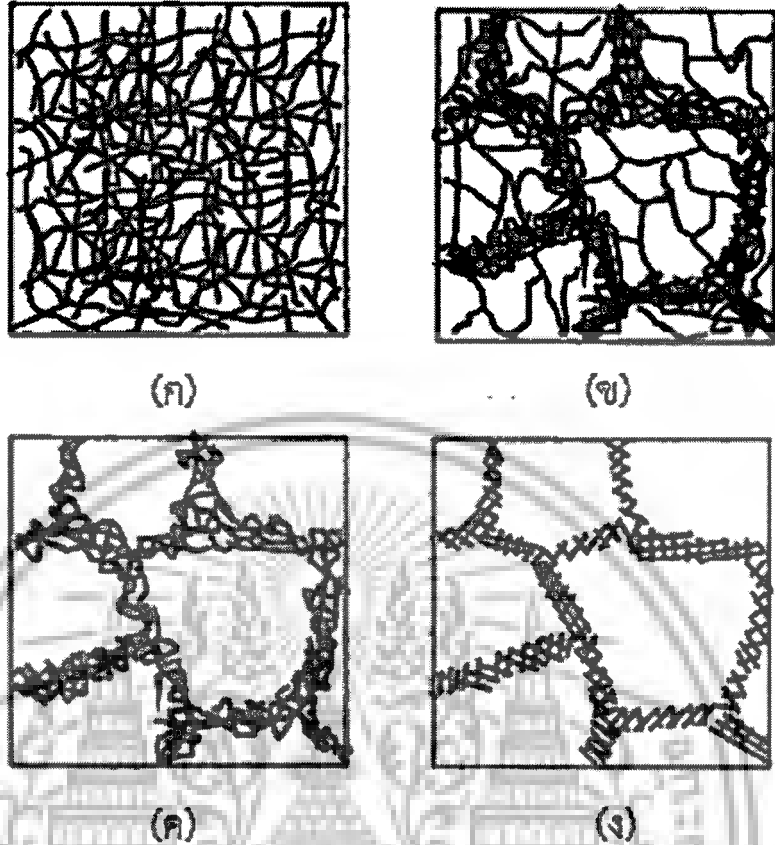
ภาพที่ 2.10 การเคลื่อนตัวของเส้นดิสโลเคชันที่เคลื่อนที่เข้าหากันในการหักล้างกันของดิสโลเคชัน [40]

การลดพลังงานโดยรวมของระบบนอกจากกลไกการหักล้างกันของดิสโลเคชันแล้ว อีกกลไกหนึ่งที่สำคัญ คือ กระบวนการโพลีโกไนเซชัน (Polygonization) ซึ่งเป็นกระบวนการที่มีจัดเรียงตัวกันใหม่ของเส้นดิสโลเคชันจนได้โครงสร้างที่มีพลังงานความเครียดที่ต่ำลง ดังแสดงในภาพที่ 2.11 สำหรับกระบวนการโพลีโกไนเซชันนั้น เส้นแนวดิสโลเคชันจะเรียงตัวซ้อนกันเป็นขอบเขตย่อย (Subboundary) ตั้งฉากกับระนาบการเลื่อน (Slip plane) (ภาพที่ 2.11 ข) โดยอาศัยการเคลื่อนของดิสโลเคชันแบบ climb ระหว่างขอบเขตย่อยจนเป็นบริเวณที่ปราศจากดิสโลเคชัน เมื่อทั้ง 2 ส่วนรวมกันจะเกิดเป็นโครงสร้างย่อยภายในเกรนที่เรียกว่า “เกรนย่อย (Subgrain)”

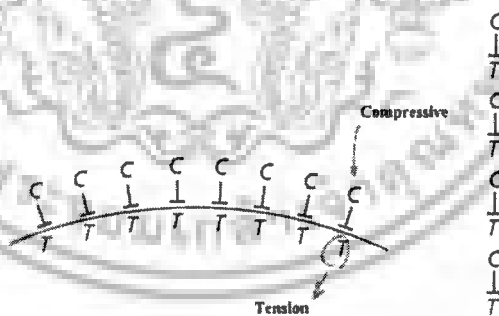


ภาพที่ 2.11 การจัดเรียงตัวกันของดิสโลเคชันแบบขอบระหว่างกระบวนการโพลิโกไนเซชัน
 (ก) ดิสโลเคชันจำนวนมากบนระนาบการเลื่อน (ข) ดิสโลเคชันมีการจัดเรียงตัวใหม่หลังจาก
 กระบวนการโพลิโกไนเซชัน [40]

การเกิดเกรนย่อยในช่วงการคืนตัวนั้นสามารถอธิบายได้ จากภาพที่ 2.12 เริ่มจากภายในวัสดุ มีดิสโลเคชันจำนวนมากเรียงตัวกันอย่างไม่เป็นระเบียบ (ภาพที่ 2.12 ก) จากนั้นเมื่อระบบได้รับพลังงาน ความร้อนที่เพียงพอเส้นดิสโลเคชันจะมีการเคลื่อนที่จัดเรียงตัวลักษณะเป็นเซลล์โครงสร้าง (Cell structure) ซึ่งเกิดจากการพันกันของดิสโลเคชัน (Dislocation entanglement) (ภาพที่ 2.12 ข) และเปลี่ยนไปสู่โครงข่ายของดิสโลเคชัน (Dislocation network) (ภาพที่ 2.12 ค) เกิดเป็นขอบเกรนย่อยขึ้น ดังที่แสดงในภาพที่ 2.12 ง ในกระบวนการโพลิโกไนเซชันนอกจากสามารถเกิดเกรนย่อยแล้ว ยังสามารถก่อให้เกิดขอบเกรนมุมต่ำเนื่องจากการจัดเรียงตัวใหม่ของดิสโลเคชันที่เกิดขึ้นซ้อนกันในแนวตั้งจะเกิดการหักล้างกัน ดังภาพที่ 2.13 ซึ่งเห็นได้ชัดว่าความเครียดในแนวอัดกับความเครียดในแนวตั้งจะหักล้างกันไปทำให้พลังงานความเครียดของระบบลดลง ทำให้เกิดขอบเกรนแบบมุมต่ำโดยในช่วงโพลิโกไนเซชันที่มากเกินไปอาจทำให้เกิดขอบเกรนชนิด $\Sigma 1$ ซึ่งมีโครงสร้างคล้ายกับขอบเกรนมุมต่ำแทนที่จะเกิด $\Sigma 3$ ในช่วงอุณหภูมิต่ำแต่ในช่วงอุณหภูมิที่สูงกว่า กลไกหลักในกระบวนการคืนตัว คือ การคืนตัวแบบพลศาสตร์ (Dynamics recovery) ที่พลังงานจะสามารถลดลงได้โดยการกลับเข้าสู่ภาวะสมดุลของจำนวนตำหนิแบบช่องว่าง (Vacancy) เป็นส่วนใหญ่ เนื่องจากตำหนิประเภทนี้มีความสามารถในการเคลื่อนตัวได้สูงแม้ว่าอุณหภูมิลดต่ำลง ในขณะนี้ถ้าดิสโลเคชันที่เกิดขึ้นมีลักษณะแบบวิวิพันธ์ที่บริเวณขอบเกรน เมื่อได้รับพลังงานความร้อนที่เพียงพอในระยะเวลาสั้น แต่อุณหภูมิในระบบต่ำกว่าจะเกิดการหมุนตัวของระนาบของขอบเกรนร่วมกับการหมุนของ Local lattice เพื่อลดพลังงานในระบบ โดยที่จะทำให้เกรนข้างเคียงกันมีพลังงานอิสระต่ำที่บริเวณขอบเกรนเป็นขอบเกรนชนิดพิเศษ วิศวกรรมขอบเกรนชนิดนี้ เรียกว่า “Fine tuning” [36]



ภาพที่ 2.12 การเกิดเกรนย่อยในช่วงการคืนตัว [41]



ภาพที่ 2.13 การจัดเรียงตัวของดิสโลเคชันแบบขอบในแนวตั้ง โดยตัวอักษร T แสดงถึงความเครียดจากแรงดึง และตัวอักษร C แสดงถึงความเครียดจากแรงอัด [40]

2.6.2 การเกิดผลึกใหม่ (Recrystallization)

แม้ว่าจะเกิดการคืนตัวขึ้นอย่างสมบูรณ์แล้ว บางครั้งวัสดุก็ยังคงมีพลังงานความเครียดหลงเหลืออยู่ เมื่อเวลาในการอบนานขึ้นจะเกิดการตกผลึกใหม่ขึ้นเพื่อลดพลังงานความเครียดส่วนเกินนี้ ปรากฏการณ์นี้ ผลึกเกรนใหม่จะมีความหนาแน่นดิสโลเคชันต่ำ (Dislocation-free grain) กระบวนการนี้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

เรียกว่า “การเกิดผลึกใหม่” มีลักษณะคล้ายคลึงกับกระบวนการเปลี่ยนแปลงเฟส (Phase transformation) ประกอบด้วยขั้นตอนนิวคลีเอชันและกระบวนการโต โดยที่การเกิดผลึกใหม่เริ่มจากกลุ่มอะตอมเล็กๆ เรียกว่า เอ็มบริโอ (Embryo) จำนวนมากมาย หากมีขนาดใหญ่กว่าหรือเท่ากับขนาดวิกฤติ เราจะเรียกอะตอมกลุ่มนี้ว่า นิวคลีอัส ซึ่งจะเติบโตกลายเป็นผลึกใหม่โดยสมบูรณ์ ขนาดเกรนที่สามารถตกผลึกใหม่นั้นเริ่มจากบริเวณที่มีลักษณะสำคัญ 2 ประการ คือ 1. มีขนาดใหญ่กว่าหรือเท่ากับขนาดวิกฤติ 2. เป็นบริเวณที่มีพลังงานความเครียดมากพอและถูกห้อมล้อมด้วยขอบเกรนมุมสูง บริเวณนี้เรียกว่า “Preformed nuclei” ซึ่งจะเติบโตแล้วกลืนกินบริเวณที่มีความหนาแน่นของดิสโลเคชันสูงจนเกิดเป็นเกรนใหม่ที่มีระดับพลังงานของระบบลดลง โดยมีโครงสร้างเกรนความเครียดต่ำ ความแตกต่างของพลังงานความเครียดก่อนและหลังการตกผลึกใหม่จากการลดลงของความหนาแน่นดิสโลเคชันจึงเป็นแรงผลักดัน (Driving force) ของการตกผลึกใหม่

จากผลทดลองการตกผลึกใหม่ มีข้อสรุปตรงกันว่ากลไกการตกผลึกใหม่ประกอบด้วยกระบวนการทางจลศาสตร์ (Kinetics process) มากกว่าหนึ่งแบบ เนื่องจากพลังงานกระตุ้น (Activation energy) ซึ่งจากการทดลองจะมีค่าไม่คงที่เปลี่ยนแปลงไปตามเวลาระหว่างกระบวนการ ทำให้การกำหนดกลไกของกระบวนการตกผลึกใหม่ทำได้ลำบาก ดังนั้นเราจึงนิยมใช้อุณหภูมิการตกผลึกใหม่ (Recrystallization temperature, T_{rex}) เป็นตัวกำหนดกระบวนการตกผลึกโดยรวม โดยที่ T_{rex} คืออุณหภูมิที่โลหะตกผลึกใหม่อย่างสมบูรณ์ภายใน 1 ชั่วโมง ซึ่งมีรูปสมการทั่วไป คือ [69]

$$T_{rex} = \alpha T_m \quad (2.16)$$

โดยที่ T_m คืออุณหภูมิหลอมเหลวของวัสดุ (K) และค่า α คือค่าสัมประสิทธิ์ที่ขึ้นอยู่กับความบริสุทธิ์ของโลหะ ซึ่ง $\alpha = 0.1-0.2$ สำหรับโลหะบริสุทธิ์, $\alpha = 0.3-0.4$ สำหรับโลหะบริสุทธิ์ทางการค้า, $\alpha = 0.5-0.6$ สำหรับโลหะผสม ซึ่งบางครั้งค่า α อาจสูงถึง 0.8 เช่น เหล็กกล้าผสมสูง (High metal alloys) บางชนิด สำหรับอุณหภูมิของการตกผลึกใหม่ของโลหะชนิดต่างๆ ได้แสดงไว้ตามตารางที่ 2.2 นอกจากความบริสุทธิ์ของโลหะแล้ว ปัจจัยอื่นๆ เช่น ปริมาณการขึ้นรูปเย็น กระบวนการแปรรูปถาวร และอัตราการให้ความเครียดก็ส่งผลต่อกระบวนการตกผลึกใหม่ ได้แก่ เวลา กลไกของการตกผลึกใหม่ อุณหภูมิ หรือแม้แต่ขนาดเกรนหลังตกผลึกใหม่ ซึ่งสามารถสรุปไว้ดังตารางที่ 2.3

ตารางที่ 2.3 อุณหภูมิของเกิดตกผลึกใหม่ของโลหะชนิดต่างๆ

ชนิดของโลหะ	อุณหภูมิของการตกผลึกใหม่ (องศาเซลเซียส)	ปริมาณการ ขึ้นรูปเย็น
เหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ [43]	538	-
เหล็กกล้าชนิด AISI 1010 [44]	600	-
ทองแดง	450 – 500	-
ทองเหลือง	400 – 500	-
อลูมิเนียม	250 – 350	-
นิกเกิลบริสุทธิ์เชิงการค้า [45]	600	-
นิกเกิล (99.995% Ni) [46]	350 – 400	.90 - .98
นิกเกิล(99.99% Ni) [43]	371	-
นิกเกิลเกรด 270 (99.98% Ni) [47]	290 – 400 เป็นเวลา 30 นาที	0.10 – 0.94
นิกเกิลแบบอิเล็กโทรไลติก (99.866% Ni) [47]	450 เป็นเวลา 30 นาที	0.82
นิกเกิลเกรด 706(Ni41.5-Fe40- Cr16) [48]	950 – 985	0.15

ตารางที่ 2.4 ปัจจัยต่างๆ ที่มีผลต่อกระบวนการตกผลึกใหม่ [40]

ปัจจัย	ปริมาณ	ผลต่อกระบวนการตกผลึกใหม่
ความบริสุทธิ์ทางเคมี	สูง	อุณหภูมิในการตกผลึกใหม่ต่ำ
อุณหภูมิในการอบ	สูง	เกิดการตกผลึกใหม่เร็วขึ้น
ปริมาณการขึ้นรูปเย็น	สูง	ขนาดเกรนหลังการตกผลึกใหม่มีขนาดเล็ก
อัตราการเพิ่มอุณหภูมิ	สูง	ขนาดเกรนหลังการตกผลึกใหม่มีขนาดเล็ก
ขนาดเกรนตั้งต้น	เล็ก	ขนาดเกรนหลังการตกผลึกใหม่มีขนาดเล็ก

สำหรับการหาค่าอุณหภูมิของการตกผลึกใหม่ส่วนใหญ่ได้จากการวัดการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างของวัสดุที่ผ่านการขึ้นรูปเย็นหลังการอบที่อุณหภูมิหรือเวลาต่างๆกันด้วยวิธีการตรวจสอบทางโลหะวิทยา หรือตัวแปรตามอื่นๆที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างของวัสดุ เช่น การทดลองวัดค่าความแข็ง (Hardness) กับเวลาในการอบที่อุณหภูมิหนึ่งหรือกับอุณหภูมิที่ระยะเวลาหนึ่ง เป็นต้น ความสัมพันธ์ระหว่างเวลากับอุณหภูมิในการอบมักสอดคล้องกับสมการกฎของอาร์เรเนียน (Arrhenius type law) ดังนี้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้ 26

$$\frac{1}{\tau} = Ae^{-Q_r/RT} \quad (2.17)$$

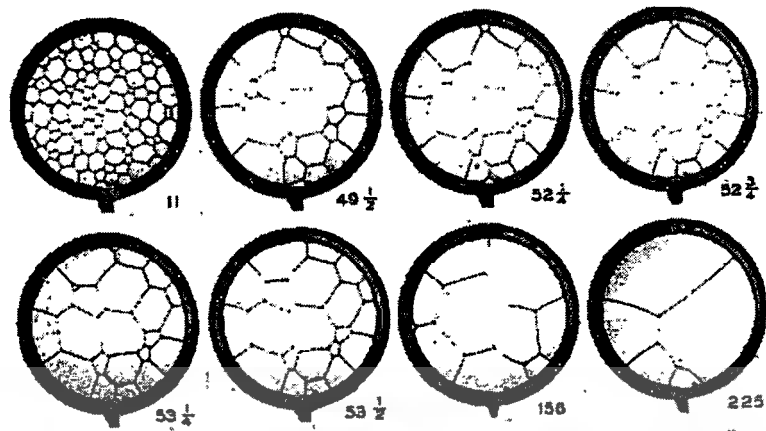
โดยที่ τ เป็นเวลาในการเกิดการตกผลึกใหม่, R คือค่าคงที่สากลของแก๊ส (universal gas constant) = 8.37 J/mol-K, T คืออุณหภูมิ (K) และ Q_r คือ พลังงานกระตุ้นสำหรับการตกผลึกใหม่ ในการทดลองหาค่าพลังงานกระตุ้น แม้ว่าจะเป็นวัสดุชนิดเดียวกันก็อาจมีค่า Q_r แตกต่างกันไป ขึ้นอยู่กับชนิดของส่วนผสมทางเคมีและปริมาณการขึ้นรูปเย็น เช่น งานวิจัยของ Wensch และ Walker [49] พบว่านิกเกิลบริสุทธิ์เชิงการค้า (99.3% Ni) ที่ผ่านการรีดเย็น 20%, 40%, และ 60% มีค่า Q_r เท่ากับ 75.8, 73.3, 69.5 kcal/mol ซึ่งจะเห็นได้ว่าค่า Q_r ลดลงเมื่อปริมาณการขึ้นรูปเย็นเพิ่มขึ้น ในขณะที่เดียวกัน Houston และ Farrel [47] ได้ค่า Q_r เท่ากับ 40 kcal/mol

2.6.3 การโตของเกรน (Grain growth)

หลังจากเกิดการตกผลึก ขุดเกรนใหม่ที่ปราศจากความเครียดสะสมจะโตขึ้นเรื่อยๆ ด้วยแรงผลักดันจากการลดพลังงานพื้นผิวรวม (Total surface energy) ของขอบเกรน เราเรียกกระบวนการที่เกิดขึ้นนี้ว่า “การโตของเกรน” ตามทฤษฎีแบบจำลองที่ยอมรับกันโดยทั่วไปเกี่ยวกับกลไกการโตของเกรนคือแบบจำลองการขยายตัวของฟองสบู่ที่เปรียบเสมือนเกรน เมื่อพิจารณาฟองสบู่ทรงกลมแต่ละฟองตามลักษณะเกรนแบบ 2 มิติ เราสามารถหาความสัมพันธ์ระหว่างแรงตึงผิวของฟองสบู่ด้านนอกและด้านในกับความแตกต่างของความดันอากาศของภายนอกกับภายในด้วยสมการสมดุลแรง

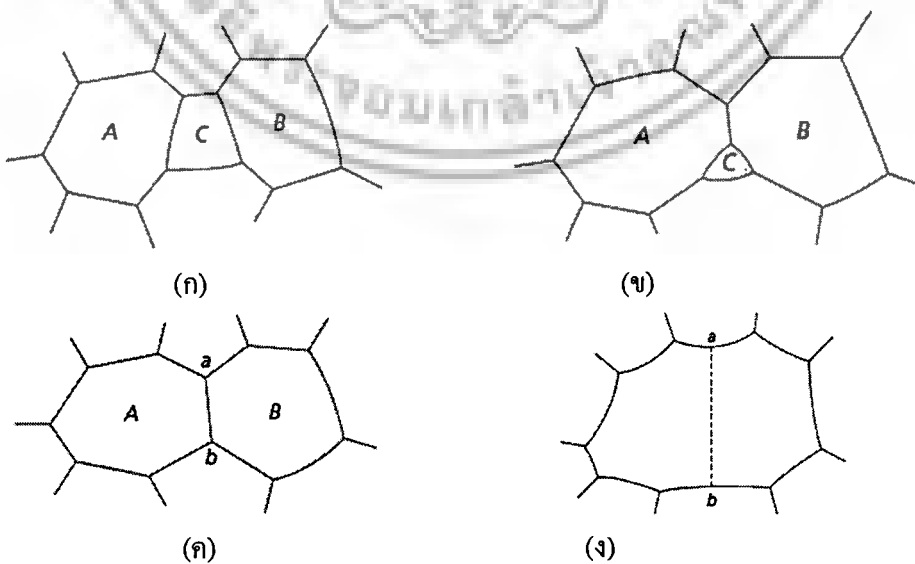
$$\Delta p = \frac{4\gamma}{R} = \frac{8\gamma}{D} \quad (2.18)$$

เมื่อ Δp คือความแตกต่างระหว่างความดันอากาศของภายนอกกับภายใน, γ คือสัมประสิทธิ์ของแรงตึงผิว, R คือรัศมีของฟองสบู่และ D คือเส้นผ่านศูนย์กลางของฟองสบู่ ซึ่งจะเห็นได้ว่ารัศมีของฟองยังมีค่าน้อย ความแตกต่างของความดันก็ยังมีค่าสูงขึ้น อากาศจะแพร่ออกเร็วและฟองสบู่จะหดตัวเข้าหาจุดศูนย์กลางของความโค้ง ในแบบจำลองที่ประกอบด้วยฟองสบู่จำนวนมากติดกันเป็นนมและด้าน จะได้รูปร่างของฟองสบู่แบบ 6 เหลี่ยมตามลักษณะทางเรขาคณิตประกอบด้วยระนาบ 3 ระนาบบรรจบร่วมกันจาก 3 เกรน เรียกจุดสามแยกนี้ว่า Triple point โดยที่แต่ละด้านทำมุมกัน 120 องศา เนื่องจากสมดุลแรงตึงผิวแต่ละด้านของฟองสบู่มีค่าเท่ากัน ตามแบบจำลองการเติบโต “Cellular growth” (ภาพที่ 2.15) ฟองสบู่ที่มีด้านน้อยกว่า 6 ด้านนั้นจะมีจุดศูนย์กลางของความโค้งอยู่ด้านในส่งผลให้ความดันภายในมากกว่าทำให้ฟองสบู่เกิดการหดตัวลงและฟองสบู่รอบข้างที่ใช้ขอบเกรนร่วมกันจะมีจุดศูนย์กลางของความโค้งอยู่ด้านนอก ซึ่งมักเป็นฟองสบู่ที่มีด้านมากกว่า 6 ด้านส่งผลให้ฟองสบู่เติบโตขึ้นได้ง่าย ขณะรับมวลอากาศเข้ามา ส่วนฟองสบู่ที่มีด้านมากกว่า 6 ด้านจะมีจุดศูนย์กลางของความโค้งอยู่ด้านนอกซึ่งมีความเสถียรสามารถเติบโตได้ง่ายกว่า



ภาพที่ 2.14 แบบจำลองการโตแบบ Cellular growth [40]

ภาพที่ 2.14 นี้ได้แสดงปฏิสัมพันธ์ระหว่างเกรนที่มีการเปลี่ยนแปลงเกิดขึ้นตลอดเวลา เช่น การหายไปของฟองสบู่แบบ 3 เหลี่ยมที่ส่งผลให้ด้านของฟองสบู่ 3 ด้านหายไปทีละฟอง ส่วนฟองสบู่ที่มีจำนวนของด้านที่น้อยลงจะส่งผลทำให้ฟองสบู่รอบข้างมีความเสถียรน้อยลง กล่าวได้ว่าฟองสบู่ที่มีด้านมากกว่า 6 ด้านจะโตขึ้นโดยการหายไปของฟองรอบข้างและด้านของฟองเองก็จะลดลงจนได้ฟองสบู่ที่มีจำนวนด้าน 6 ด้าน ขณะที่ฟองใดมีด้านน้อยกว่า 6 ด้านก็จะหดตัวลงจนหายไปที่สุดในที่สุด อย่างไรก็ตามการโตของเกรนด้วยการแพร่ก็เป็นกลไกหนึ่ง แต่ยังมีอีกกลไกหนึ่งที่สำคัญคือ Geometrical coalescence ดังแสดงในภาพที่ 2.15 โดยที่เกรน A เกรน B ที่มีลักษณะด้านมากกว่า 6 ด้านซึ่งมีความเสถียรมากกว่าเกรน C ที่มีลักษณะด้านน้อยกว่า 6 ด้าน (ภาพที่ 2.15ก) ดังนั้นเกรน A และ B จะมีการเคลื่อนที่โตขึ้นกลืนเกรน C ให้มีขนาดเล็กลง (ภาพที่ 2.15ข) จนกระทั่งเกรน A และเกรน B โตขึ้นจนพบกันเกิดแนวแบ่งระหว่างเกรนคือ เส้น ab ทำให้เกรน C หายไป (ภาพที่ 2.15ค) จากนั้นเกรน A และ B จะยังโตขึ้นรวมกันกลายเป็นเกรนเดียวกัน (ภาพที่ 2.15 ง)



ภาพที่ 2.15 แบบจำลองการโตของเกรนแบบ Geometrical coalescence [50]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.6.3.1 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการโตของเกรน (Grain Growth Model)

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการโตของเกรนได้จากแบบจำลองของฟองสบู่ ตามสมการ 2.19

$$\frac{dD}{dt} = k'c \quad (2.19)$$

โดยที่ D เป็นเส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยของเกรนที่มีอัตราการเปลี่ยนแปลงขนาดต่อเวลาแปรผันตรงกับส่วนโค้ง (Radius curvature) ของเกรนหรือแปรผกผันกับ D ได้ผลเฉลยเป็นสมการพาราโบลา ดังนี้

$$\frac{dD}{dt} = k'c = \frac{k}{D} \rightarrow D^2 - D_0^2 = kt \quad (2.20)$$

เมื่อ t คือ เวลา, D_0 คือเส้นผ่านศูนย์กลางเฉลี่ยของเกรนที่เวลาเริ่มต้น และ k คือค่าคงที่ ซึ่งจะเห็นได้ว่าขนาดของเกรนจะแปรผันตามรากที่สองของเวลา โดยในทางอุดมคติ ถ้า D_0 มีค่าน้อยมาก ทำให้การทดลองการศึกษาการโตของเกรนของโลหะบริสุทธิ์โดยมากมักใช้สมการ $D = kt^{0.5}$ แทนสมการ 2.20 อย่างไรก็ตามเนื่องจากสมการพาราโบลาอยู่ภายใต้เงื่อนไขและสมมติฐานจำนวนมากทำให้สมการดังกล่าวไม่สามารถทำนายพฤติกรรมกระบวนการโตในโลหะส่วนใหญ่ได้ เพราะอิทธิพลของสารมลทิน (Impurity), สิ่งเจือปน (Inclusion), ความเครียดแบบคงรูป (Plastic strain) และขอบทวินต่อ Grain boundary migration ดังนั้นแบบจำลองทางคณิตศาสตร์จึงมีการปรับเปลี่ยนให้สอดคล้องกับการทดลองการโตของเกรนแบบ Isothermal ของโลหะส่วนใหญ่ดังสมการนี้

$$D - D_0 = kt^n \quad (2.21)$$

โดยที่ค่า k เป็นตัวแปรกำหนดกลไก Thermal activated mechanism เมื่อแทนค่า k ในสมการ 2.21 เราจะได้รูปแบบสมการใหม่ที่ใช้ในการทดลองดังนี้

$$D - D_0 = (k_0 e^{-Q/RT} t)^n \quad (2.22)$$

เมื่อ Q คือพลังงานกระตุ้น, n คือค่ายกกำลัง และ R คือค่าคงที่ของแก๊ส จากการศึกษาวิจัยของ V.Randle และคณะ [39] พบว่า ค่า n และ Q จะมีค่าแตกต่างกันไปในแต่ละช่วงอุณหภูมิ โดยที่ค่า n จะเข้าใกล้ค่า 0.5 เมื่ออุณหภูมิในการอบสูงขึ้น ส่วนค่า Q จะแตกต่างกันไปตามกลไกการโตของเกรนในแต่ละช่วงอุณหภูมิ ซึ่งสามารถแบ่งช่วงอุณหภูมิออกเป็น 4 ช่วง ดังตารางที่ 2.5

ตารางที่ 2.5 ความสัมพันธ์ระหว่างช่วงอุณหภูมิกับกลไกการควบคุมการโตของเกรน [49]

ช่วงอุณหภูมิ	กลไกการควบคุมการโตของเกรน
ช่วงอุณหภูมิต่ำ	การแพร่ในตัวเอง (Volume self diffusion)
ช่วงอุณหภูมิที่ 2	anomalous grain growth ที่ไม่เสถียร
ช่วงอุณหภูมิที่ 3	การแพร่ในตัวเอง (Volume self diffusion)
ช่วงอุณหภูมิสูงสุด $Temp \rightarrow T_m$	การแพร่ของขอบเกรน (Grain boundary diffusion)

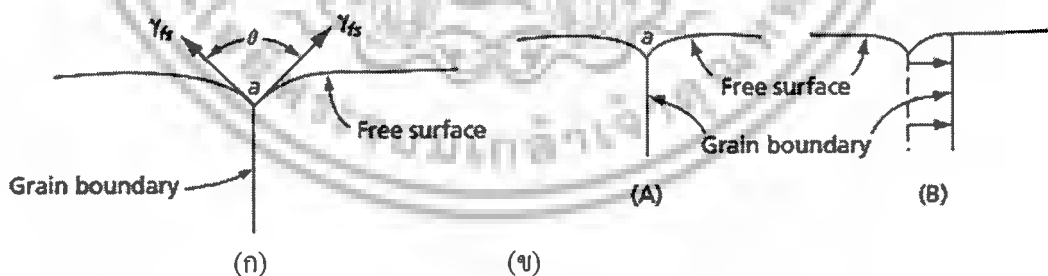
2.6.3.2 ผลกระทบของปัจจัยต่างๆที่มีผลต่อการโตของเกรน

1) สารละลายของแข็งและสิ่งเจือปน

สารละลายของแข็งภายในโลหะนั้นเป็นหนึ่งในปัจจัยที่มีผลต่อกระบวนการโตของเกรน โดยมีอิทธิพลส่งผลถึงความสามารถในการเคลื่อนตัวของขอบเกรนลดลง เนื่องจากการเคลื่อนที่ของขอบเกรนจำเป็นต้องพาสารละลายของแข็งที่การกระจายตัวรอบขอบเกรนไปด้วย ขณะที่สิ่งเจือปนก็จะเหนี่ยวรั้งขอบเกรนไว้ เนื่องจากแรงดึงดูดระหว่างขอบเกรนกับผิวสิ่งเจือปน ผลของปัจจัยจะคล้ายคลึงกันคือทำให้ค่า n ที่ได้มีค่าต่ำกว่า 0.5 และค่า n จะมีค่าสูงขึ้นเข้าใกล้ค่าทางทฤษฎี ($n=0.5$) เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น

2) พื้นผิวอิสระ (Free surface)

ผลกระทบของพื้นผิวอิสระเกี่ยวข้องกับการเคลื่อนที่ของขอบเกรน ณ บริเวณที่ขอบเกรนบรรจบกับพื้นผิวอิสระมีรูปร่างตามภาพตัดขวางเป็นร่องแบบ Thermal groove เข้าไปในพื้นผิวด้านตัดขวาง เนื่องจากสภาวะสมดุลของแรงดึงผิวของพื้นผิวอิสระกับขอบเกรนทำให้อะตอมแพร่ออกจากจุด Triple point นี้ โดยใช้เส้นทางของพื้นผิวทั้ง 3 ที่มีสัมประสิทธิ์การแพร่ของอะตอมสูงกว่าค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของอะตอมภายในโลหะ ดังภาพที่ 2.17ก ในกระบวนการโตของเกรน ขนาดเกรนจะเพิ่มขึ้นได้โดยการเคลื่อนที่ของขอบเกรนออกด้านข้างตั้งฉากกับพื้นผิวเพื่อรักษาสมดุลของแรง 3 แรง ดังภาพที่ 2.17 ข กลไกดังกล่าวจำเป็นต้องถูกหน่วงด้วย Thermal groove ที่ถูกควบคุมโดยกระบวนการแพร่ของอะตอม จนเกรนมีขนาดใกล้เคียงกับชิ้นงานหรือความหนาของชิ้นงาน ส่วนอัตราการโตของเกรนจะเริ่มช้าลงจนกระทั่งขนาดเกรนมีขนาดคงที่ อันเป็นผลมาจากสมดุลทางอุณหภูมิจศาสตร์และจลนศาสตร์ของพลังงานและการแพร่ของอะตอมบนพื้นผิวอิสระและขอบเกรน ซึ่งเป็นผลมาจากผลของพื้นผิวอิสระ



ภาพที่ 2.16 (ก) Thermal groove (ข) เมื่อขอบเกรนมีการเคลื่อนที่ [40]

2.6.3.3 ทวินจากการอบคืนตัว

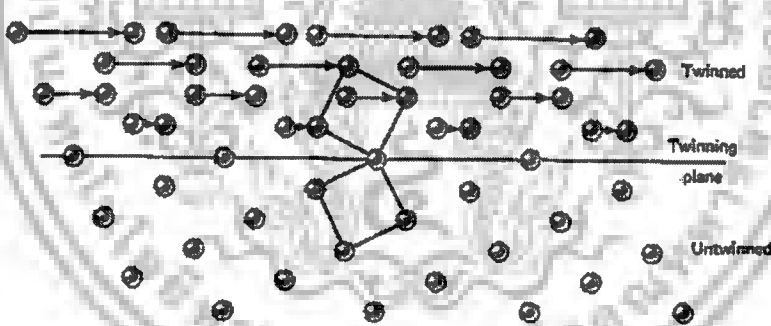
ขอบทวินจัดเป็นขอบเกรนพิเศษซึ่งแบ่งผลึกที่สมมาตรกัน ทำให้ด้านทั้งสองของทวินมีลักษณะเหมือนกัน ภาพที่ 2.17 แสดงบริเวณที่อยู่ระหว่างผลึกทั้งสองที่สมมาตรกันเรียกว่า ทวิน ทวินอาจเกิดจากการเลื่อนของอะตอมจากแรงเฉือนที่เรียกว่า “ทวินจากแรงทางกล (Mechanical twin)” นอกจากนี้ทวินอาจเกิดขึ้นได้จากการอบคืนตัวตามด้วยการแปรรูปซึ่งเรียกว่า “ทวินจากการอบคืนตัว (Annealing twin)” เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

twins)“ ทวินจะเกิดขึ้นในระนาบและทิศทางเฉพาะขึ้นอยู่กับ โครงสร้างผลึก ทวินจากแรงทางกลมักพบใน วัสดุแบบ BCC และ HCP สำหรับทวินจากการอบคืนตัวมักพบในวัสดุที่มีโครงสร้างแบบ FCC ซึ่งมี stacking fault energy อยู่ในช่วงต่ำถึงปานกลาง โดยทั่วไปกลไกการเกิดทวินจากการคืนตัว แบ่งออกได้ 3 แบบ [37] คือ

1) กลไกการเกิดทวินจากการคืนตัวแบบ Growth accident เป็นการเกิดขอบทวินแบบ Growth accident จะเกิดขอบทวินแบบ Coherent ตรงบริเวณขอบเกรนที่เกิดจากความผิดพลาดของสแตกกิ้ง (Stacking error) ภายใต้สภาวะและเงื่อนไขที่เหมาะสม ระหว่างการโตของเกรน

2) กลไกการเกิดทวินจากการคืนตัวแบบ Grain encounter เป็นการเกิดขอบทวินแบบ จากขอบเกรนสองเกรน มีการเคลื่อนที่ต่อเนื่องมาบรรจบกัน เมื่อเกรนมาพบกันแล้วเกรนทั้งสองทำมุมกันที่จะเกิดเป็นทวินจะเกิดก่อตัวเป็นขอบทวินแบบ Coherent ขึ้น โดยส่วนใหญ่กลไกนี้จะเกิดในช่วงการโตของเกรน

3) กลไกการเกิดทวินจากการคืนตัวแบบ Stacking fault packet เป็นกลไกการเกิดขอบทวินแบบ Stacking fault packet จะเกิดขึ้นช่วงหลังการตกผลึกใหม่ โดยสแตกกิ้งพอลซึ่งเป็นตำหนิแบบ รอยต่อจะเกิดการเรียงตัวของชุดสแตกกิ้งพอลที่สภาวะที่เหมาะสมจะก่อให้เกิดขอบทวินขึ้น แล้วทวินจะ โตขึ้นเมื่อขอบเกรนมีการเคลื่อนที่



ภาพที่ 2.17 การเกิดขอบทวินระนาบ (120) ของโครงสร้างผลึกแบบคิวบิก โดยวงกลมสีดำแสดงถึง ตำแหน่งของอะตอมเดิม ส่วนวงกลมสีดําแสดงถึงตำแหน่งของอะตอมที่มีการเปลี่ยนแปลง [41]

อย่างไรก็ตามกลไกการศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างการเกิดทวินจากการอบคืนตัวกับ การโตของเกรนของวัสดุในทางวิศวกรรมขอบเกรนยังเป็นที่ถกเถียงกันในปัจจุบัน จากการศึกษาของ D.Horton และคณะ [39] เกี่ยวกับความสัมพันธ์ระหว่างทวินจากการอบคืนตัวกับการโตของเกรนในวัสดุ ที่เป็นนิกเกิลบริสุทธิ์ (99.999%Ni) พบว่าการโตของเกรนหลังจากการตกผลึกใหม่ ส่งผลให้สัดส่วนของ ทวินจากการอบคืนตัวลดลง ในทางกลับกันการโตของเกรนทำให้สัดส่วนของทวินจากการอบคืนตัว เพิ่มขึ้นในนิกเกิล (99.5%) ขณะที่ V.Randle และคณะ [19] ศึกษาการโตของเกรนสำหรับนิกเกิลเชิง การค้าที่อุณหภูมิต่างๆ เป็นเวลา 6 ชั่วโมง จากการทดลองพบว่า 3 ช่วงอุณหภูมิที่คล้ายช่วงอุณหภูมิของ

กลไกการเติบโตของเกรนแสดงในตารางที่ 2.6 แสดงให้เห็นว่าช่วงอุณหภูมิ 850-900 องศาเซลเซียส เป็นช่วงที่มีการเปลี่ยนแปลงทั้งสัดส่วนของทวินจากการอบคืนตัว และค่า nQ ที่ได้จากการสมการการเติบโตของเกรน ซึ่งเกิดจากกลไกแบบผสมผสานระหว่างการแพร่ในตัวกับ Anomalous grain growth ที่ไม่เสถียร ดังนั้น V. Randle และคณะสรุปว่าแอนนิลลิ่งทวินมีกลไกที่เป็นอิสระจากการโตของเกรนและทวินซึ่งเป็นตัวกระตุ้นให้กลไกการโตของเกรนเร็วขึ้น

ตารางที่ 2.6 ช่วงอุณหภูมิกับปัจจัยต่างๆของการโตของเกรนสำหรับนิกเกิลเชิงการค้า [19]

	ช่วงอุณหภูมิต่ำกว่า 850°C	ช่วงอุณหภูมิ 850-900°C	อุณหภูมิสูงกว่า 900°C เล็กน้อย
ค่า nQ	เปลี่ยนแปลงสม่ำเสมอ	เปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็ว	เปลี่ยนแปลงสม่ำเสมอ
สัดส่วนของแอนนิลลิ่งทวิน	เปลี่ยนแปลงสม่ำเสมอ	เปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็ว	เปลี่ยนแปลงสม่ำเสมอ
อัตราการโตของเกรน	เปลี่ยนแปลงสม่ำเสมอ	เปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็ว	เปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็ว

2.7 การรีด (Rolling)

การรีดเหล็กเป็นกระบวนการขึ้นรูปโลหะ (Metal forming) ชนิดหนึ่ง ที่อาศัยการเปลี่ยนแปลงรูปร่างอย่างถาวร (Plastic deformation) ด้วยแรงกระทำจากภายนอกที่ Flow stress ของวัสดุ โดยทั่วไป Flow stress ที่ใช้ในการเปลี่ยนแปลงรูปร่างวัสดุจะมีค่าลดลงตามอุณหภูมิที่ใช้ในการขึ้นรูปที่สูงขึ้น ดังนั้นหากขึ้นรูปที่อุณหภูมิสูง แรงที่ใช้ก็จะลดน้อยลงด้วย เนื่องจาก ระหว่างขึ้นรูปที่อุณหภูมิสูงกว่า อุณหภูมิการตกผลึกใหม่ วัสดุจะตกผลึกใหม่ระหว่างการขึ้นรูป ซึ่งทำให้วัสดุอ่อนเหนียวไปด้วย ในขณะที่การขึ้นรูปที่อุณหภูมิต่ำ ปรากฏการณ์ Work hardening จะสะสมในวัสดุ ทำให้วัสดุมีความแข็งแรงเพิ่มขึ้นและเปราะ อย่างไรก็ตามการขึ้นรูปที่อุณหภูมิต่ำนั้น พื้นผิวชิ้นงานจะราบเรียบเป็นเงากว่า จากผลของอุณหภูมิที่ใช้ในการขึ้นรูปต่อวัสดุดังกล่าว ทำให้เราสามารถแบ่งกระบวนการขึ้นรูปออกเป็น 2 ประเภท ได้แก่ กระบวนการขึ้นรูปร้อน (Hot forming) และกระบวนการขึ้นรูปเย็น (Cold forming) โดยจุดแบ่งระหว่างกระบวนการขึ้นรูปร้อนและกระบวนการขึ้นรูปเย็นก็คือ อุณหภูมิที่เกิดการผลึกใหม่ (Recrystallization temperature) สำหรับเหล็กกล้า การขึ้นรูปเย็นจะอยู่ที่อุณหภูมิต่ำกว่า 800°C และการขึ้นรูปร้อนจะอยู่ในช่วง 800 ถึง 1150°C แต่ในอุตสาหกรรม การแบ่งระหว่างการขึ้นรูปร้อนและการขึ้นรูปเย็นจะใช้เกณฑ์ว่า ในกระบวนการขึ้นรูปนั้นมีการให้พลังงานความร้อนเข้าไปเกี่ยวข้องหรือไม่ และในอุตสาหกรรมยานยนต์แล้ว โลหะแผ่นที่มีความหนาต่ำกว่า 2 มม. แล้วมักขึ้นรูปด้วยวิธีรีดเย็น

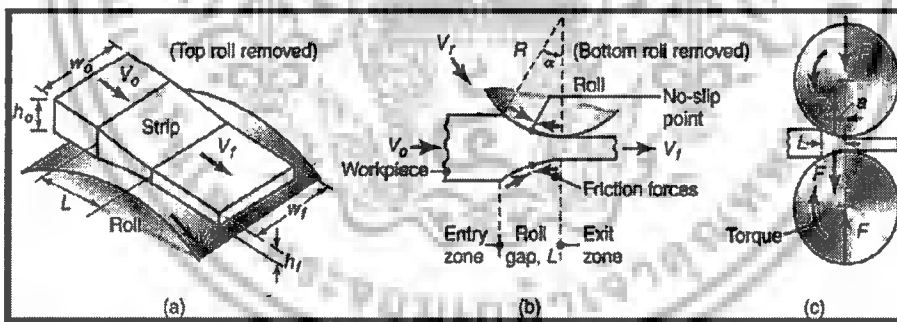
กระบวนการรีดเหล็กเป็นกระบวนการขึ้นรูปแบบต่อเนื่อง โดยจะใช้แรงกด และการหมุนของลูกรีด ทำให้เหล็กแปรรูปแบบต่อเนื่อง การแปรรูปด้วยการรีดมักจะเป็นการลดขนาดของผลิตภัณฑ์กึ่งเสร็จ (Semi-finish product) หลักการพื้นฐานของการรีดคือการนำผลิตภัณฑ์กึ่งเสร็จที่มีความหนา มาผ่านช่องว่างระหว่างลูกรีดทั้งสองตัว (Roll gap) เพื่อให้ความหนาของผลิตภัณฑ์กึ่งเสร็จลดลง แกนของลูกรีดทั้งสองจะตั้งฉากกับแนวความยาวของผลิตภัณฑ์กึ่งเสร็จ ลูกรีดตัวบนจะหมุนในทิศทางทวนเข็มนาฬิกา

และลูกรีดตัวล่างจะหมุนในทิศทางตามเข็มนาฬิกา พารามิเตอร์(Parameters) ที่สำคัญในการรีด ได้แก่ ความหนาที่ลดลง (Thickness reduction), แรงรีด (Roll force), แรงบิด (Torque), ช่องว่างลูกรีด (Roll gap), ผิวสัมผัส (Contact arc) และความต้านทานการแปรสภาพ (Deformation resistance)

ขั้นตอนการรีดจะเริ่มจากการที่สวนปลายด้านหนึ่งของชิ้นงานจะสัมผัสกับลูกรีดทั้งสอง การหมุนของลูกรีดทั้งสอง และแรงเสียดทานระหว่างผิวลูกรีดกับผิวของชิ้นงานจะทำหน้าที่ดึงชิ้นงานเข้าสู่ช่องว่างระหว่างลูกรีด เนื่องจากวัสดุจะเริ่มถูกแปรรูปจากจุดที่ลูกรีดเริ่มสัมผัสไปจนกระทั่งถึงจุดที่ชิ้นงานออกมา เราเรียกระยะนี้ว่า ผิวสัมผัส เนื่องจากเหล็กเป็นวัสดุที่ไม่สามารถถูกบีบอัด (non-compressible) ดังนั้นจึงสามารถใช้ กฎความต่อเนื่อง (Continuity law) ได้กับการแปรรูปของเหล็ก ในช่วงผิวสัมผัส คือ ปริมาตรของเหล็กที่เข้า เท่ากับ ปริมาตรของเหล็กที่ออกมา ดังสมการ

$$b_o h_o v_o = b_f h_f v_f \quad (2.23)$$

เมื่อ v_o, v_f คือ ความเร็วของเหล็กที่ป้อนเข้าและออกจากเครื่องรีด ความเร็วของชิ้นงานในการรีดแบน (ภาพที่ 2.18) นั้น ชิ้นงานเหล็กที่มีความหนา h_o จะถูกนำเข้าไปยังช่องว่างระหว่างลูกรีด (Roll Gap) เพื่อลดความหนาจนเหลือ h_f โดยใช้มอเตอร์เป็นตัวกำเนิดพลังงานให้แก่ลูกรีด ซึ่งความเร็วของชิ้นงานจะมีค่าเพิ่มขึ้นเรื่อยๆ ในขณะรีด จากความเร็วเริ่มต้นที่ v_o ขณะชิ้นงานถูกกลิ้ง และชิ้นงานจะมีความเร็วเพิ่มขึ้นจนมีค่าเท่ากับความเร็วลูกกลิ้งที่ v_f ซึ่งชิ้นงานจะคงความเร็วไว้เท่านี้ ดังนั้น เราอาจกล่าวได้ว่า ความเร็วชิ้นงานระหว่างรีด อยู่ระหว่าง v_o กับ v_f



ภาพที่ 2.18 (a) ขบวนการรีดแบน (b) แรงเสียดทานที่เกิดขึ้นบริเวณผิวชิ้นงาน (c) แรงและแรงบิดที่ใช้ในการรีด

2.7.1 สูตรที่เกี่ยวข้องในการการรีดเย็น

แรงที่ใช้ในการรีด สามารถคำนวณได้จากสมการดังนี้

$$F = LwY'_{avg} \left(1 - \frac{\mu L}{2h_{avg}} \right) \quad (2.24)$$

โดยที่ F คือ แรงที่กระทำต่อลูกรีด, w คือ ความกว้างของแผ่นโลหะที่จะนำมารีด(m), μ คือ ค่าสัมประสิทธิ์แรงเสียดทาน, L คือ ความยาวส่วนโค้งของลูกกลิ้งที่สัมผัสกับชิ้นงาน (m) มีค่าเอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไมออนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

$L = \sqrt{R\Delta h}$, Δh คือ ผลต่างของความหนาของแผ่นโลหะก่อนรีดและหลังรีด, R คือ รัศมีของลูกรีด, h_{avg} คือ ค่าเฉลี่ยของความหนาเริ่มและหลังจากการรีด มีค่าเท่ากับ $\frac{h_o + h_f}{2}$ และ

$$Y'_{avg} = \frac{2}{\sqrt{3}} Y_{avg} \text{ และ } Y_{avg} = \frac{K\varepsilon^n}{n+1} \quad (2.25)$$

โดยที่ n คือ เลขชี้กำลังของการเพิ่มความแข็งแรงจากความเครียด, K คือ ค่าคงที่ และ ε คือ ค่าความเครียดซึ่งหาได้จาก $\varepsilon = \ln \frac{l}{l_o} = n \frac{h_o}{h_f}$ ส่วนกำลังของการรีดนั้นสามารถหาได้จากสมการ

$$P = \frac{2\pi FLN}{60,000} \quad (2.26)$$

โดยที่ P คือ กำลังที่ใช้ในการรีด (kW), N คือ ความเร็วรอบของเครื่องรีด (rpm)

ในการรีดนั้น รัศมีของลูกรีดที่เหมาะสมต่อการรีดนั้นมีความสำคัญมาก สำหรับการรีดชิ้นงานที่มีความหนาหนึ่งกับวัสดุแต่ละชนิด จะส่งผลทำให้ต้องใช้แรงและกำลังในการรีดต่างกัน ซึ่งเราสามารถหาได้จากสมการ

$$h_o - h_f = \mu^2 R \quad (2.27)$$

โดยที่ h_o คือ ความหนาของชิ้นงานเริ่มต้น (m), h_f คือ ความหนาของชิ้นงานหลังจากการรีด (m), μ คือ สัมประสิทธิ์แรงเสียดทานของลูกรีดและชิ้นงาน, R คือ รัศมีลูกรีด (m)

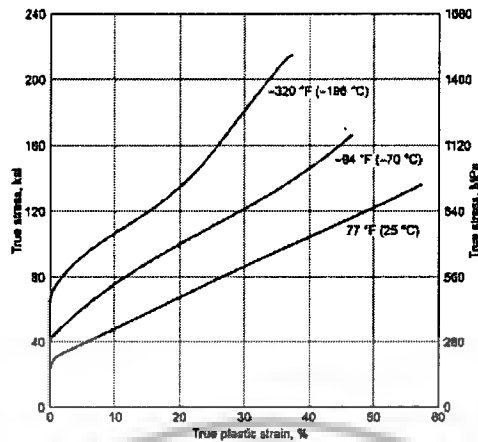
จากสมการข้างจะพบว่า ความหนาของชิ้นงานที่เปลี่ยนไปจะส่งผลต่อค่ารัศมีและสัมประสิทธิ์แรงเสียดทานของลูกรีด กล่าวคือ การรีดที่ต้องการลดความหนาของชิ้นงานที่มาก ย่อมต้องใช้รัศมีของลูกรีดและแรงเสียดทานที่มากขึ้น

ตัวอย่างการคำนวณการรีด

กำหนดให้ชิ้นงานสแตนเลสสตีล กว้าง 11 มม. หนา 8 มม. ลูกกลิ้งมีรัศมี 57 มม. ความเร็วรอบ 12 รอบต่อนาที จงหาแรงและกำลัง ที่ต้องใช้ในการรีดเพื่อให้ชิ้นงานมีความหนาลดลง 5%, 10%, 20%, 30%, 40%, 50%, 60% เมื่อค่าสัมประสิทธิ์แรงเสียดทานเท่ากับ 0.5

วิธีทำ จากความสัมพันธ์ระหว่าง ความเค้น-ความเครียดจริง ในภาพที่ 2.19

เราสามารถหา K, n จากสูตร $\sigma_T = K\varepsilon^n$ ได้ $\log \sigma_T = \log K + n \log \varepsilon_T$



ภาพที่ 2.19 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง ความเครียดจริง และความเค้นจริง

ได้ค่า $K = 1152$ และ $n = 0.515$ เมื่อแทนค่า K และ n ในสูตรข้างต้นได้ตารางที่ 2.7 ดังนี้

ตารางที่ 2.7 แสดงความสัมพันธ์ค่าตัวแปรต่างๆในการรีด ที่หาได้จากสูตรทางทฤษฎี

Thickness Reduction(cm)	h_{avg} (m)	True Strain	Y_{avg} (Mpa)	Y'_{avg} (MPa)	L (m)	Force (kN)	Power (kW)
0.04	0.0078	0.0513	164.72	190.20	0.0048	10.30	0.06213
0.08	0.0076	0.1054	238.67	275.59	0.0067	21.03	0.17706
0.16	0.0072	0.2231	351.17	405.50	0.0095	44.61	0.53255
0.24	0.0068	0.3567	447.17	516.35	0.0117	71.03	1.04433
0.32	0.0064	0.5108	538.01	621.24	0.0135	100.04	1.69713
0.4	0.006	0.6931	629.58	726.98	0.0151	132.9	2.52181
0.48	0.0056	0.9163	726.92	839.37	0.0165	170.3	3.53108

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 3

โมเลกูลาร์ไดนามิกส์

3.1 บทนำ

ในปัจจุบันนี้ การทดลองทางคอมพิวเตอร์ได้รับความสนใจอย่างกว้างขวาง นอกเหนือจากวิธีการทดลองในทางทฤษฎีที่ปฏิบัติมาในอดีต ภายใต้ระบบการวัด และการแสดงผลที่สามารถอธิบายได้ จากแบบจำลองของระบบที่สร้างขึ้นมาจะอยู่ในรูปแบบของสมการทางคณิตศาสตร์ ซึ่งเมื่อได้รับการยอมรับจึงพัฒนามาเป็นทฤษฎี แบบจำลองถือเป็นวิธีอธิบายระบบวิธีหนึ่งที่ยากที่สุด ตามสมมติฐานในแต่ละกรณี และแบบจำลองทางฟิสิกส์ที่เราคุ้นเคย ได้แก่ แบบจำลองโครงสร้างอะตอมโมเลกุล เพื่อการศึกษาแรงดึงดูดระหว่างอะตอม จนกระทั่งได้โครงสร้างผลึก ซึ่งแต่ละแบบจำลองก็เหมาะสมกับการศึกษาเพื่อความเข้าใจในแต่ละระดับของเวลาและขนาด ทั้งในทางฟิสิกส์ และเคมี เมื่อแบบจำลองมีความซับซ้อนขึ้น การวิเคราะห์ข้อมูลจึงจำเป็นต้องใช้เครื่องมือในการคำนวณ นั่นคือ คอมพิวเตอร์ เช่น การศึกษาการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างขอบเกรน และมุมมองที่ขอบเกรน จากผลกระทบของอุณหภูมิ เป็นต้น ด้วยโปรแกรมภาษาต่างๆ ในกาคำนวณจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ด้วยวิธีนี้เราจึงสามารถศึกษาขอบเกรนที่ซับซ้อน และใกล้เคียงกับความเป็นจริง ดังนั้นการทดลองทางคอมพิวเตอร์จึงมีความสำคัญระหว่างการศึกษาทฤษฎีกับการทดลอง และยังสามารถเปรียบเทียบได้โดยตรงกับผลการทดลองอีกด้วย ผลแบบนี้ทำให้คอมพิวเตอร์เป็นเครื่องมือที่มีประสิทธิภาพในระดับจุลภาค แม้ว่าแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์จะเป็นไปไม่ได้ในความเป็นจริงแต่มีผล ทำให้เรามีความเข้าใจมากขึ้น และสามารถสร้างสรรคจินตนาการเพื่อพัฒนาต่อไปในอนาคต

3.2 โมเลกูลาร์ไดนามิกส์ (molecular dynamics)

เราสามารถเรียก โมเลกูลาร์ไดนามิกส์ อย่างย่อเป็นภาษาอังกฤษว่า “MD” คือ เทคนิคการจำลองทางคอมพิวเตอร์โดยให้อะตอมมีการเปลี่ยนแปลงตามกาลเวลา ตามกฎของนิวตัน

$$\sum F_i = m_i a_i \quad (3.1)$$

โดย i แทนค่าอะตอมแต่ละตัวในระบบจนถึง N อะตอม, M แทนค่ามวล, $a_i = \frac{d^2 r_i}{dt^2}$, F คือค่าของแรงที่กระทำต่อแต่ละอะตอม โมเลกูลาร์ไดนามิกส์ เป็นเทคนิคที่กำหนดค่าเริ่มต้นของตำแหน่งและความเร็ว หลังจากนั้นจะปล่อยให้มีการเปลี่ยนแปลงตามช่วงเวลา และเราสามารถหาค่าพลังงาน ได้ระหว่างที่ระบบพัฒนา ไปพร้อมๆกับการเคลื่อนที่ของอะตอม การชนกัน การหมุนรอบ (ในกรณีที่ระบบเป็นของไหล) มีการสั่นเป็นคลื่นของอะตอมข้างๆ และบางที่อาจเกิดการระเหยจากระบบ ถ้ามีพื้นผิวอิสระในการจำลอง

ในการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ เรามักกำหนดสถานะของระบบด้วย 6 ตัวแปรอิสระ (3 ตำแหน่ง 3 โมเมนตัม) ซึ่งมีเส้นทางเฉพาะเจาะจง ต่างจากวิธี Monte carlo ที่มีการกำหนดค่าการกระจายเป็นฟังก์ชัน เช่น ค่าความหนาแน่นของระดับค่าพลังงานคงที่ E

$$\delta(H(\Gamma) - E) \tag{3.2}$$

เมื่อ $H(\Gamma)$ คือ Hamiltonian และ Γ ได้แก่ เซตของตำแหน่งและ โมเมนตัม δ คือ Dirac Delta function, E คือค่าพลังงาน

3.3 ทฤษฎีพื้นฐานในการคำนวณค่าพลังงาน

ส่วนประกอบหลักของแบบจำลองทางฟิสิกส์ในการศึกษาโมเลกุลาร์ไดนามิกส์ คือ รูปแบบของ Potential energy, $V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ ซึ่งมักเป็นฟังก์ชันของระยะห่างระหว่างนิวเคลียส สำหรับการจัดเรียงตัวของอะตอมในรูปแบบหนึ่งๆ และแรงที่ได้รับมาจาก Gradients ของ Potential energy นั้นตามสมการ

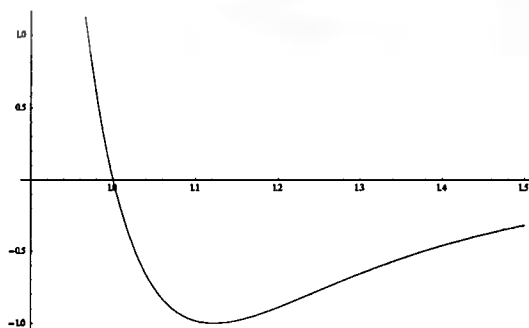
$$\vec{F}_i = -\nabla_{\vec{r}_i} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \tag{3.3}$$

และสมการนี้เป็นไปตามกฎการอนุรักษ์พลังงานรวม $E = K + V$ เมื่อ K คือ Instantaneous Kinetic energy ซึ่งรูปแบบของ Potential energy ที่ง่ายที่สุด เรียกว่า Pairwise interactions:

$$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_i \sum_{j>i} \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \tag{3.4}$$

เงื่อนไข $j > i$ เพื่อให้การคำนวณพลังงานจากคู่อะตอมเพียงครั้งเดียว ซึ่ง Pairwise potential ได้รับความนิยมลดลง เนื่องจากไม่สามารถอธิบายปรากฏการณ์หลายปรากฏการณ์ สำหรับโลหะ และ Semiconductor จึงทำให้ Many-body potential ได้รับการพัฒนาขึ้น เช่น Born-Oppenheimer approximation เป็นต้น อย่างไรก็ตาม สำหรับการศึกษามันก็มักเริ่มจาก Pairwise potential ก่อนเสมอ ซึ่งรูปแบบที่ง่ายที่สุด คือ 12-6 Lennard-Jones potential นั้นเอง (สมการ 3.5) ให้ค่า Minimum potential energy ($-\epsilon$) ที่ $r = 1.122\sigma$ และมี Potential energy ค่าศูนย์ ที่ $r = \sigma$ ดังภาพที่ 3.1

$$Q_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \tag{3.5}$$



ภาพที่ 3.1 แสดงกราฟความสัมพันธ์ระหว่าง Potential energy กับระยะห่างระหว่างอะตอม

เทอม $\left(\frac{1}{r}\right)^{12}$ ควบคุมพฤติกรรมระยะสั้นที่อะตอมจะผลักออกจากกัน เมื่ออะตอม 2 อะตอมเคลื่อนที่เข้าใกล้นิวเคลียสของกันและกัน และค่า Potential energy จะมีค่าสูงขึ้นอย่างรวดเร็ว ดูเข้าสู่ค่าอนันต์ ซึ่งสอดคล้องกับ Pauli principle ขณะเกิดการซ้อนทับกันของ Electron cloud ส่วนเลขยกกำลัง 12 นั้นถูกเลือก เนื่องจากความสะดวกในการคำนวณ ขณะที่ $\left(\frac{1}{r}\right)^6$ ควบคุมพฤติกรรมระยะไกลที่อะตอมจะดึงดูดเข้าหากัน จาก Dipole-Dipole interaction เกิดเป็น Secondary bonding เกิดแรงดึงดูดแบบอ่อนแอเรียกว่า Van der Waals ได้เลขยกกำลัง 6 นั้นเอง โดยที่เราสามารถเลือกค่า σ และ ϵ ได้ตามชนิดของวัสดุ อย่างไรก็ตาม LJ Model เหมาะกับการศึกษาก๊าซเฉื่อย เช่น Ar Kr ที่มีแรงดึงดูดระหว่างกันแบบ Van der Waals และไม่เหมาะสมสำหรับพันธะบางพันธะ เช่น พันธะโควาเลนต์ หรือพันธะที่ดึงดูดกันจากกลุ่มก้อนอิเล็กตรอนของพันธะโลหะ

ข้อเสียอีกอย่างหนึ่งของ LJ Model คือ ช่วงของปฏิสัมพันธ์ระหว่างอะตอมที่ไม่สิ้นสุด ทำให้การคำนวณสิ้นเปลืองมาก ทำให้จำนวนของการคำนวณแปรผันตรงกับ r^2 การกำหนด Cut off radius (R_c) จึงทำให้การคำนวณการคำนวณลดลงอย่างมาก ที่เราไม่ต้องคำนวณค่า Potential energy เมื่อระยะห่างระหว่างอะตอมเกินกว่า R_c แต่ Potential energy ที่ค่า R_c จะมีการกระโดดของ Potential energy ซึ่งทำให้พลังงานของระบบไม่อนุรักษ์ LJ Model จึงถูกเลื่อนขึ้นดังสมการเพื่อทำให้ไม่มีการกระโดดของค่าพลังงานขึ้น และส่วนใหญ่ค่า R_c อยู่ในช่วง $2.5\sigma - 3.2\sigma$

$$V(r) = \begin{cases} \phi_{LJ}(r) - \phi_{LJ}(R_c) & \text{if } r \leq R_c \\ 0 & \text{if } r > R_c \end{cases} \quad (3.6)$$

3.4 Periodic boundary conditions (PBC)

ในการสร้างแบบจำลองสำหรับวัสดุก้อนนั้น เป็นไปไม่ได้เลยที่เราจะสามารถสร้างระบบให้มีจำนวนอะตอมให้ใกล้เคียงกับระบบจริงที่มีจำนวนอะตอมมหาศาล เราเพียงสามารถสร้างได้เพียงส่วนหนึ่งเท่านั้น ดังนั้นการที่เราจะสามารถจำลองพฤติกรรมของวัสดุก้อนและกำจัดผลกระทบจากพื้นผิวได้นั้น จำเป็นต้องใช้เงื่อนไขค่าขอบเขตแบบคาบ (PBC) ให้กับระบบ ภายใต้ PBC อนุภาคจะอยู่ภายในระบบเสมอ ซึ่งเราสามารถจินตนาการได้ว่าระบบนี้ถูกจำลองบนแบบคาบ ทำให้ขนาดของระบบไม่มีที่สิ้นสุด หรือถ้าจะกล่าวอีกนัยหนึ่งว่า หาก particle อยู่ที่ตำแหน่ง \vec{r} ในระบบแล้ว Particle นั้นยังคงอยู่ที่ตำแหน่งอื่นๆด้วย

$$\vec{r} + l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}, \text{ when } (l, m, n = -\infty, \infty) \quad (3.7)$$

เมื่อ l, m, n คือ เลขจำนวนเต็ม และ $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ คือเวกเตอร์ที่แสดงขนาดของระบบ ดังนั้นอนุภาคต่างๆในระบบหนึ่งก็เสมือนมีอนุภาคตัวเดียวกันในระบบอื่นด้วย ที่อยู่ติดๆกันไปไม่สิ้นสุด อย่างไรก็ตาม ขนาดของระบบก็ควรที่จะมีขนาดเพียงพอที่ไม่มีปฏิสัมพันธ์จากอนุภาค i ต่อตัวอนุภาคเสมือน j_1 และ j_2 ซึ่งเงื่อนไขดังกล่าวทำให้ขนาดของแบบจำลองมีขนาดมากกว่า $2R_c$ ในแต่ละด้าน ซึ่งแน่นอนว่าการใช้ PBC นั้น จะใช้ในด้านที่เราไม่ได้คำนึงถึงผลกระทบจากพื้นผิวนั้นเอง

3.5 Time integration algorithm

หลังจากเราได้ออกแบบระบบที่ประกอบด้วย Potential energy function ที่เหมาะสม ขนาด และ เงื่อนไขค่าขอบเขตแล้ว การจำลองทางคอมพิวเตอร์คือการศึกษาระบบที่เปลี่ยนแปลงของระบบที่พัฒนาตาม เวลา ภายใต้สมการที่เรียกว่า Governing equation ซึ่งในการคำนวณทางโมเลกุลาร์ไดนามิกส์ สมการนี้คือ

$$\sum F_i = m_i a_i$$

การแก้สมการนี้เกี่ยวข้องกับ System of Differential equation ของสมการการเคลื่อนที่ของ อนุภาคที่มีปฏิสัมพันธ์โดยแรงที่กระทำระหว่างกัน ซึ่งอัลกอริทึมในการแก้สมการทางตัวเลข ได้แก่ Finite difference methods โดยให้ระบบพัฒนาไปตามขั้นตอนของเวลา Δt ด้วยการ Integrate จะได้ ตำแหน่ง และ Trajectory ของอนุภาคที่ $t + \Delta t$ ซึ่งการอินทิเกรตทางตัวเลขระหว่างวิวัฒนาการของระบบ กับเวลาเป็นเพียงการประมาณเท่านั้น ค่าความผิดพลาดจากอัลกอริทึมที่ใช้ในการทำ time integration ความสามารถแบ่งได้ ดังนี้

Truncation errors – ค่าผิดพลาดจากการตัดทอนที่มีกำลังสูงออกในอนุกรมเทเลอร์ ในการประมาณค่าด้วยวิธี Finite different method

Round-off errors – ค่าผิดพลาดจากการปัดเศษ ซึ่งเกี่ยวกับการดำเนินงานขงขั้นตอนวิธี เช่นจำนวนตัวเลขที่ใช้ในการจำลองทางคอมพิวเตอร์

ข้อผิดพลาดทั้งสองแบบสามารถลดลงได้ ด้วยการลดค่า Δt ที่ค่า Δt สูง Truncation errors จะมีค่า มากกว่า Round-off errors และ Truncation errors จะลดลงอย่างรวดเร็วตาม Δt^4 ใน Verlet algorithm ขณะที่ Round-off errors จะลดลงตาม Δt ซึ่งในปัจจุบัน ด้วยคอมพิวเตอร์ 64-bit กับ โปรแกรม Fortran ค่า ผิดพลาดนี้ค่อนข้างต่ำกับตัวเลขแบบ Double precision

Time integration algorithm ในการคำนวณวิวัฒนาการด้วยระเบียบวิธี Molecular Dinamies ที่ได้รับการ นิยมมีอยู่ 2 วิธีด้วยกัน ได้แก่ Verlet algorithm และ Predictor-corrector algorithm ดังนี้

3.5.1 The Verlet algorithm

Verlet algorithm [51] เป็นอัลกอริทึมที่ใช้อย่างแพร่หลาย ด้วยการกระจายอนุกรม Taylor กำลัง 3 แบบ Forward และ Backward ของฟังก์ชันตำแหน่ง $\vec{r}(t)$

$$\begin{aligned} \vec{r}(t + \Delta t) &= \vec{r}(t) + \frac{d\vec{r}(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} \Delta t^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3\vec{r}(t)}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \\ \vec{r}(t - \Delta t) &= \vec{r}(t) - \frac{d\vec{r}(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} \Delta t^2 - \frac{1}{6} \frac{d^3\vec{r}(t)}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \end{aligned} \quad (3.8)$$

เมื่อนำ 2 สมการนี้มาบวกกันจะได้

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (3.9)$$

โดยที่ $\vec{v}(t) = \frac{d\vec{r}(t)}{dt}$ และ $\vec{a}(t) = \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2}$ สมการ (3.6) เป็นรูปแบบพื้นฐานของ Verlet

algorithm และเราสามารถหา $\vec{a}(t)$ จากสมการ

$$\vec{a}(t) = \frac{-1}{m} \nabla V(\vec{r}(t)) \quad (3.10)$$

แม้ว่า $\vec{v}(t)$ จะไม่จำเป็นต่อการวิวัฒนาการของระบบ แต่ความเร็วก็สำคัญในการคำนวณ Kinetic energy เพื่อทดสอบ Conservation of energy (K + V) ความเร็วนี้สามารถหาได้จากสมการ

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (3.11)$$

ซึ่งมีค่าความผิดพลาด Δt^2 แทนที่จะเป็น Δt^4 เช่นเดียวกับ $\vec{r}(t)$ ซึ่งอัลกอริทึมที่สามารถแก้ปัญหานี้ ได้แก่ Leap-frog algorithm [52] และ velocity Verlet algorithm ดังนี้

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + (1/2)\vec{a}(t)\Delta t^2 \quad (3.12)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t/2) = \vec{v}(t) + (1/2)\vec{a}(t)\Delta t \quad (3.13)$$

$$\vec{a}(t + \Delta t) = -(1/m)\nabla V(\vec{r}(t + \Delta t)) \quad (3.14)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t + \Delta t/2) + (1/2)\vec{a}(t + \Delta t)\Delta t \quad (3.15)$$

3.6 Predictor-corrector algorithm [53]

Predictor-corrector algorithm เป็นอีกวิธีที่ใช้ทั่วไปในการแก้สมการการเคลื่อนที่ใน MD ประกอบด้วย 3 ขั้นตอนหลัก ได้แก่

1. Predictor: ทำนายค่าต่างๆของระบบ ได้แก่ ตำแหน่ง ความเร็ว ความเร่ง และอนุพันธ์ลำดับต่างๆ ที่เวลา $t + \Delta t$ จากอนุกรม Taylor
2. Force evaluation: คำนวณค่าแรงที่เกิดขึ้นจากค่า Predicted value แล้วนำค่าแรงนั้นมาหาความเร่ง ความ Error signal จากค่าความแตกต่างของความเร่งที่ได้ในขั้นตอนแรกกับขั้นตอนที่สอง
3. Corrector: นำค่า Error signal มาคำนวณ Corrector ในการทำให้ได้ค่าที่เหมาะสมในการทำนายและได้ความเสถียรของระบบ

บทที่ 4

วิธีดำเนินการวิจัย

4.1 การหาขนาดของเกรน (Grain size measurements) [54]

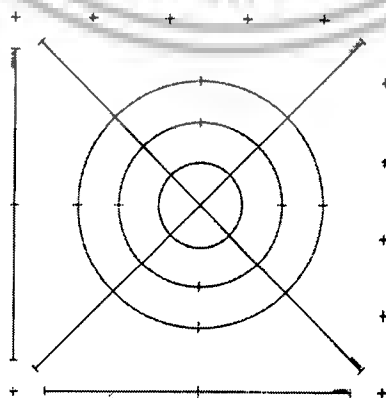
ขนาดเฉลี่ยของเกรนเป็นหนึ่งในปริมาณที่สำคัญของวัสดุในการศึกษาคุณสมบัติของโลหะ เนื่องจากขนาดเกรนสามารถกำหนดเปลี่ยนแปลงกลไกต่างๆที่ควบคุมวัสดุนั้นได้ เช่น คุณสมบัติทางกล ทางเคมี หรือแม้แต่ทางไฟฟ้า ดังนั้นนอกเหนือจากคุณสมบัติทางกลของโลหะ ที่ได้จากการทดสอบหาความเค้นจุดคราก ความต้านแรงดึง ความแข็ง แล้ว ขนาดเกรนจึงเป็นหนึ่งในปริมาณที่ต้องการเพื่อกำหนดทิศทางของคุณสมบัติที่เราต้องการจากโครงสร้างจุลภาค ในงานวิจัยนี้ เราใช้วิธีการวัดขนาดเกรนตามมาตรฐานการทดสอบวัสดุแห่งอเมริกา (American Society for Testing and Materials) แบบวิธีการลากเส้นตัดผ่าน (Intercept method) ซึ่งมีหลักการเบื้องต้นดังนี้

เริ่มจากการลากเส้นมีความยาวทั้งหมด 500 มิลลิเมตร แล้ววางลงบนภาพถ่ายโครงสร้างจุลภาคที่กำลังขยายหนึ่ง แล้วนับจำนวนเกรนที่เส้นเหล่านั้นตัดผ่าน ซึ่งเส้นทดสอบนั้น มีทั้งแบบเส้นตรง 4 เส้นวางในแนวตั้งภาพที่ 4.1 หรือแบบวงกลม 3 วงซ้อนกัน ที่เส้นผ่านศูนย์กลาง 79.58, 53.05 และ 26.53 มิลลิเมตร ตามลำดับ โดยทุกๆเกรนที่ถูกเส้นตัดผ่านมีค่าเท่ากับ 1 ในขณะที่เส้นตัดผ่านจุดที่เป็นรอยต่อระหว่าง 3 เกรนให้มีค่า 1.5 จากนั้นจึงนำค่าไปแทนในสมการ (3.23) เพื่อหาค่าจำนวนขอบเกรนที่ถูกตัดผ่านต่อความยาวของเส้นทดสอบ และขนาดเกรนเฉลี่ย

$$P_L = \frac{P_i}{L/M} \quad (4.1)$$

$$G = (6.643856 \log_{10} P_L) - 3.288 \quad (4.2)$$

โดยที่ P_i คือ จำนวนขอบเกรนที่ถูกตัดผ่านด้วยเส้นทดสอบ, P_L คือ จำนวนขอบเกรนที่ถูกตัดผ่านต่อความยาวของเส้นทดสอบ, L คือ ความยาวของเส้นทดสอบ (มิลลิเมตร) M คือ ขนาดกำลังขยาย และ G คือ ขนาดเกรนเฉลี่ย



ภาพที่ 4.1 แสดงเส้นทดสอบแบบเส้นตรง 4 เส้น และแบบวงกลม 3 วง [54]

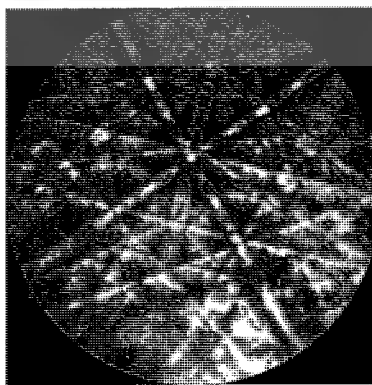
4.2 การวัดและการวิเคราะห์ชนิดของขอบเกรน Coincident Site Lattice [55, 84]

ปัจจุบันมีเทคนิคการวิเคราะห์ทิศทางการจัดเรียงตัวของผลึกอยู่หลายวิธี ไม่ว่าจะเป็นเทคนิคที่ใช้ X-ray diffraction หรือ Reflectometry อย่างไรก็ตามเทคนิคที่ได้รับความนิยมมาก คือ เทคนิคอิเล็กตรอนแบคสแกตเตอร์ดิฟแฟรกชัน (Electron Backscatter diffraction, EBSD) เนื่องจากเทคนิคดังกล่าวสามารถวิเคราะห์ได้โดยตรงจากอุปกรณ์ และ Software ที่เป็นฟังก์ชันพื้นฐานของกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนมาตรฐาน และใช้ตัวอย่างที่มีขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างในทางโลหะวิทยาอยู่แล้ว ดังนั้นในปัจจุบันการวิเคราะห์การจัดเรียงตัวของผลึกจึงสามารถทำควบคู่ไปกับโครงสร้างจุลภาคของชิ้นงานได้เลย อาทิเช่น การวิเคราะห์ชนิดของเฟส ลักษณะการกระจายตัวของทิศทางผลึกบนพื้นผิว โครงสร้างผลึกของวัสดุขนาดเกรนและประเภทของขอบเกรน เป็นต้น ซึ่งเทคนิคอื่นค่อนข้างทำได้ยากในทางปฏิบัติ

เทคนิคอิเล็กตรอนแบคสแกตเตอร์ดิฟแฟรกชันเกี่ยวข้องกับอิเล็กตรอนที่ตกกระทบกับผิวชิ้นงานแล้วทำให้อิเล็กตรอนเกิดการกระเจิงกลับ (Backscattered electron) ซึ่งมีสมการแสดงทิศทางของการเลี้ยวเบนเป็นไปตามเงื่อนไขของกฎของแบรกก์ (Bragg law) ดังนี้

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (4.3)$$

โดยที่ λ คือความยาวคลื่นของอิเล็กตรอน θ คือ มุมตกกระทบระหว่างลำอิเล็กตรอนกับระนาบผลึก d คือระยะระหว่างระนาบผลึก และ n คือลำดับของการเลี้ยวเบน เมื่อพิจารณาจากสมการ 4.3 สามารถสรุปปรากฏการณ์เลี้ยวเบนของอิเล็กตรอนตามกฎของแบรกก์ได้ว่าถ้ากำหนดให้ d และ λ เป็นค่าคงที่แล้ว การเลี้ยวเบนจะเกิดขึ้นได้ที่มุมตกกระทบค่าเฉพาะเพียงบางค่าในแต่ละลำดับของการเลี้ยวเบนเท่านั้น ซึ่งการเลี้ยวเบนของอิเล็กตรอนแบบกระเจิงกลับในกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนจะเกิดการเลี้ยวเบนมายังฉากเรืองแสงของตัวรับสัญญาณ เกิดเป็นเส้นแถบสีขาวและสีดำจนเป็นแผนภาพที่มีรูปแบบเฉพาะ เมื่อตั้งค่ามุมของชิ้นงานกับตัวรับภาพที่เหมาะสม (ประมาณ 70°) ได้รูปแบบเป็นแถบๆ ซึ่งถูกค้นพบโดยนักวิทยาศาสตร์ชาวญี่ปุ่นที่มีชื่อว่า ดร.เซอิชิ คิคุชิ (Seishi Kikuchi) รูปแบบเฉพาะของการเลี้ยวเบนนี้จึงถูกเรียกว่า “รูปแบบคิคุชิ (Kikuchi pattern)” และเส้นแถบสีต่างๆ เรียกว่า “เส้นแถบคิคุชิ (Kikuchi line)” ดังภาพที่ 4.2

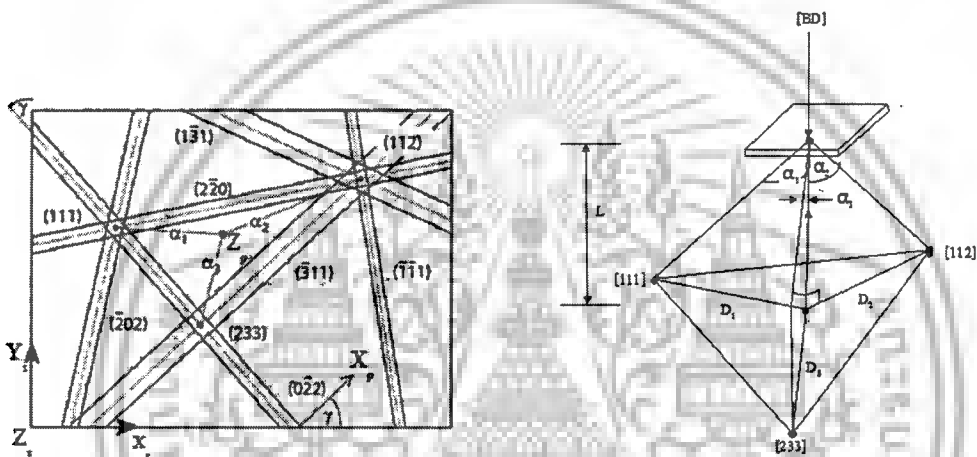


ภาพที่ 4.2 แผนภาพรูปแบบคิคุชิของนิกเกิลที่ค่าความต่างศักย์ 20kV [55]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ในงานวิจัยนี้ได้นำเทคนิคอิเล็กตรอนแบคสแกดเตอร์ดิฟแฟรคชันมาวิเคราะห์เพื่อหาจำนวน สัดส่วนของขอบเกรนชนิด CSL โดยข้อมูลเริ่มต้นสำคัญที่ใช้ในการวิเคราะห์จากรูปแบบคิคุชิคือเมตริกซ์ ทิศทางของผลึก (Orientation matrix, G) ของแต่ละเกรน ซึ่งสามารถคำนวณข้อมูลได้จากรูปแบบคิคุชิ ด้วยวิธี Triangular method ดังตัวอย่างภาพที่ 4.3 ด้วยสมการความสัมพันธ์

$$G = \begin{pmatrix} X_p & X_p \times Z_p & Z_p \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$



ภาพที่ 4.3 รูปแบบคิคุชิวิเคราะห์ด้วยวิธี Triangular method [55]

โดยที่ γ คือมุมระหว่างเวกเตอร์ตั้งฉากเส้นแถบคิคุชิบนฉากเรืองแสงอ้างอิง (X_p) กับแกนแนวอ้างอิงของชิ้นงานตามแกน Y (Y_s), Z_p คือทิศทางลำอิเล็กตรอนที่ฉายลงบนฉากเรืองแสง สามารถหาได้จากสมการ 4.5 – 4.6 ดังนี้

$$\begin{pmatrix} Z_{pz} \\ Z_{py} \\ Z_{pz} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{(q_{ix})^2 + (q_{iy})^2 + (q_{iz})^2} \cos \alpha_i}{\begin{pmatrix} q_{ix} \\ q_{iy} \\ q_{iz} \end{pmatrix}} \quad (4.5)$$

$$\alpha_i = \tan^{-1} \left(\frac{D_i}{L} \right) \quad (4.6)$$

โดยที่ α_i คือมุมระหว่าง Z_p กับบริเวณจุดตัดกันของเส้นแถบคิคุชิ, q_i คือ Crystallographic indices, D_i คือระยะห่างระหว่างทิศทางของลำอิเล็กตรอนถึงบริเวณจุดตัดกันของเส้นแถบคิคุชิ, L คือความยาวของกล้องมีค่าเท่ากับระยะทางระหว่างชิ้นงานกับฉากเรืองแสง ดังนั้นในการแก้สมการ 4.5 ต้องทราบค่ามุม เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3 มุมเพื่อแก้สมการ 3 ตัวแปร จากนั้นเมื่อทราบเมตริกซ์ทิศทางของผลึกในแต่ละเกรน เราสามารถวิเคราะห์ประเภทของขอบเกรนจากข้อมูลเทคนิค EBSD ว่าเป็นขอบเกรนชนิด CSL โดยการเปรียบเทียบมุมเมตริกซ์ความแตกต่าง (θ_D) ที่มีค่าน้อยที่สุดกับมุมมากที่สุดที่สามารถเบี่ยงเบนของแต่ละประเภทขอบเกรนชนิด CSL (สมการ 2.15) ซึ่งมุมของเมตริกซ์ความแตกต่างคำนวณมาจากสมการเมตริกซ์มิสโอเรียลเทร้นที่ได้จากข้อมูลทาง EBSD (M_{EXP}) กับเมตริกซ์มิสโอเรียลเทร้นจากสมการ 2.8 (M_{CSL}) ได้ความสัมพันธ์ดังนี้

$$M_D = M_{EXP} M_{CSL}^{-1} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

$$\theta_D = \cos^{-1} \left(\frac{a_{11} + a_{22} + a_{33} - 1}{2} \right) \quad (4.8)$$

โดยที่ $M_{EXP} = T_i(G_i^{-1}G_2)$ เมื่อ T_i คือเมตริกซ์สมมาตรของผลึก เช่น สมมาตรผลึกแบบคิวบิก มีทั้งหมด 24 เมตริกซ์, G_1, G_2 คือเมตริกซ์ทิศทางของผลึกของเกรน 1 และเกรน 2 (คำนวณจากสมการ 2.25-2.27) ตัวอย่างการเปรียบเทียบข้อมูลขอบเกรนที่ได้จากเทคนิค EBSD กับขอบเกรนชนิด เช่น มุมเมตริกซ์ความแตกต่างที่มีค่าน้อยที่สุดจากสมการ 2.29-2.30 มีค่า $\theta_D = 4.5^\circ$ เมื่อเทียบกับมุมเบี่ยงเบนของขอบเกรนชนิด Σ_3 จากกฎของแบรนดอน (ถ้าค่า $\frac{\theta_D}{\theta_m} \leq 1$ แสดงว่าเป็นขอบเกรนชนิด CSL) นั่นคือ

$$\frac{\theta_D}{\theta_m} = \frac{4.5^\circ}{8.66^\circ} = 0.52 \leq 1 - \text{แสดงว่าเป็นขอบเกรนชนิด}$$

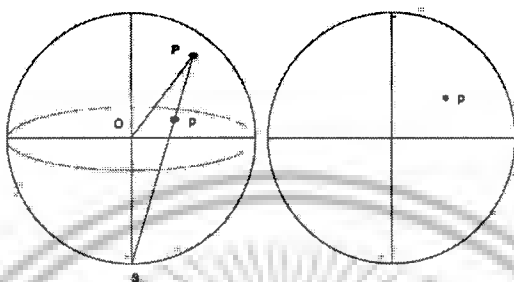
สำหรับจำนวนสัดส่วนของขอบเกรนชนิด CSL (f_L) แบบ Length fraction สามารถหาได้จากสมการความสัมพันธ์ดังนี้

$$f_L = \text{ความยาวของขอบเกรนชนิด CSL} / \text{ความยาวของขอบเกรนทั้งหมด} \quad (4.9)$$

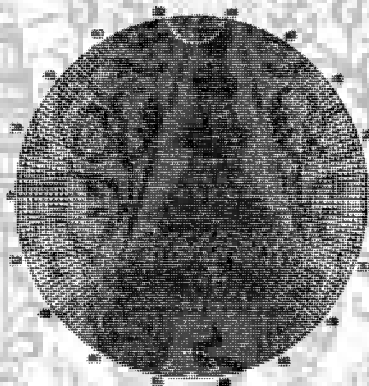
4.3 วิธีการวิเคราะห์ด้วยสเตริโอกราฟฟิกโปรเจกชัน (Stereographic projection)

การวิเคราะห์ทางโครงสร้างผลึกวิทยาเกี่ยวกับทิศทางการจัดเรียงตัวของผลึกในวัสดุ มีเทคนิคหนึ่งที่เป็นที่นิยมในการแสดงข้อมูลความสัมพันธ์ระหว่างระนาบกับทิศทางของผลึกแบบ 2 มิติ เรียกเทคนิคนี้ว่า “สเตริโอกราฟฟิกโปรเจกชัน (Stereographic projection)” หลักการเบื้องต้นของเทคนิคนี้เป็นการเปรียบเทียบเสมือนกับการวางแผ่นระนาบ 2 มิติไว้บนทรงกลมอ้างอิง (Reference spherical) แล้วฉายภาพของผลึกขึ้นไปยังพื้นผิวของทรงกลมจากนั้นลากเส้นผ่านแผ่นระนาบลงสู่ขั้วใต้ของทรงกลมเกิดเป็นจุดบนแผ่นระนาบ ดังภาพที่ 4.3 โดยการวิเคราะห์ข้อมูลของสเตริโอกราฟฟิกโปรเจกชันมีเครื่องมือสำคัญ

ที่ใช้ในการวิเคราะห์คือ “ตาข่าย (Net)” (ภาพที่ 4.4) ซึ่งใช้ในการวัดมุมระหว่างระนาบของผลึกกับแกนแนวอ้างอิงเพื่อนำค่าของข้อมูลไปใช้ในการคำนวณความสัมพันธ์ระหว่างทิศทางการจัดเรียงตัวของผลึกกับแกนแนวอ้างอิงต่างๆ ทั้งนี้การแสดงผลการวิเคราะห์ตามวิธีสเตอริโอกราฟิกโปรเจกชันแบ่งออกเป็น 2 แบบ ได้แก่



ภาพที่ 4.4 การฉายภาพแบบสเตอริโอกราฟิก [55]



ภาพที่ 4.5 ตาข่ายของสเตอริโอกราฟิกโปรเจกชัน [84]

4.3.1 แผนภาพโพล (Pole figure) เป็นแผนภาพแสดงการฉายภาพโดยยึดระนาบหนึ่งของผลึกที่สนใจไว้เป็นระนาบหลักในการฉายภาพ สำหรับระนาบหลักที่สนใจเรียกว่า “โพล (Pole)” หลักการเบื้องต้นการแสดงผลบนแผ่นระนาบด้วยวิธีนี้คือการนำผลึกมาวางไว้ที่จุดศูนย์กลางของทรงกลมอ้างอิง จากนั้นฉายภาพจากระนาบผลึกที่สนใจโดยการลากเส้นตรงขนานกับเวกเตอร์ตั้งฉากของระนาบผลึกขึ้นไปกระทบกับพื้นผิวทรงกลมอ้างอิง แล้วลากเส้นย้อนผ่านแผ่นระนาบลงไปยังขั้วใต้ของทรงกลมเกิดเป็นจุดบนแผ่นระนาบ เช่น ผลึกที่มีทิศทางการจัดเรียงตัวแสดงผลตามโพล 100 เกิดจุดบนแผ่นระนาบ ดังแสดงในภาพที่ 4.5ก โดยการแสดงผลด้วยวิธีนี้บ่งบอกถึงทิศทางการเรียงตัวของผลึกเทียบกับแกนแนวอ้างอิงได้แก่ แกนแนวทิศปกติ (Normal direction, ND) แกนแนวทิศการรีด (Rolling direction, RD) และแกนทิศตามขวาง (Transverse direction, TD) สามารถหาความสัมพันธ์ระหว่างทิศทางของผลึกกับแกนแนวอ้างอิงได้จากสมการความสัมพันธ์ดังนี้

$$\begin{pmatrix} \sin \alpha \cos \beta \\ \sin \alpha \sin \beta \\ \cos \alpha \end{pmatrix} = \frac{1}{C} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

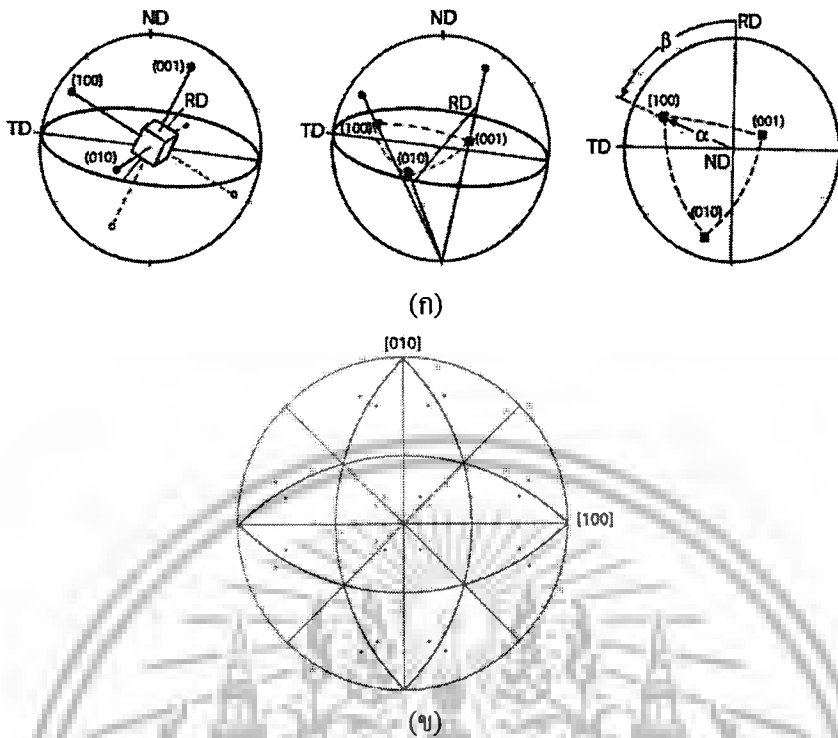
XYZ คือโพล $C = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}$, α คือมุมระหว่าง ND กับจุดบนแผ่นระนาบ, β คือมุมระหว่างแกน RD กับจุดบนแผ่นระนาบ, g_{ij} คือเมตริกซ์ทิศทางของผลึก

4.3.2 แผนภาพโพลย้อนกลับ (Inverse pole figure) เป็นแผนภาพแสดงการฉายภาพโดยยึดแกนแนวทิศทางที่สนใจเป็นทิศทางในการฉายภาพ ซึ่งการแสดงผลด้วยวิธีนี้บ่งบอกถึงระนาบผลึกบนพื้นผิววัสดุที่มีเวกเตอร์ตั้งฉาก (Normal vector) ของระนาบผลึกขนานกับแกนแนวทิศทางที่สนใจ หลักการเบื้องต้นการแสดงผลบนแผ่นระนาบด้วยวิธีนี้คือการนำระนาบผลึกที่มีเวกเตอร์ตั้งฉากขนานกับแนวทิศทางที่สนใจนำไปวางในทรงกลมอ้างอิง จากนั้นลากเส้นตรงขนานแนวเวกเตอร์ตั้งฉากกับระนาบขึ้นไปกระทบกับพื้นผิวทรงกลมอ้างอิง ซึ่งหลักการคล้ายกับแผนภาพโพล ส่วนจุดบนแผ่นระนาบที่ได้มีจำนวนเท่ากับจำนวนระนาบสมมาตรของระบบโครงสร้างผลึก เช่น ระบบผลึกแบบคิวบิกมีจำนวนระนาบสมมาตร 24 ระนาบจะเกิดจำนวนจุดบนแผ่นระนาบ 24 จุด ดังที่แสดงในภาพที่ 4.5x สำหรับสมการแสดงความสัมพันธ์ระหว่างทิศทางของผลึกเทียบกับแกนแนวทิศทางที่สนใจมีสมการดังนี้

$$\begin{pmatrix} \sin \gamma \cos \delta \\ \sin \gamma \sin \delta \\ \cos \delta \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} X_s \\ Y_s \\ Z_s \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

$$\begin{pmatrix} \sin \gamma \cos \delta \\ \sin \gamma \sin \delta \\ \cos \delta \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{u}{N_1} & \frac{q}{N_2} & \frac{h}{N_3} \\ \frac{v}{N_1} & \frac{r}{N_2} & \frac{k}{N_3} \\ \frac{w}{N_1} & \frac{s}{N_2} & \frac{l}{N_3} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} X_s \\ Y_s \\ Z_s \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

เมื่อ $X_s Y_s Z_s$ คือแกนแนวทิศทางที่สนใจ, γ และ δ คือมุมระหว่างแนวแกนทิศทางที่สนใจ, uvw คือทิศทางของผลึกที่มีทิศทางขนานกับแกนแนว RD, hkl คือระนาบของผลึกที่มีเวกเตอร์ตั้งฉากขนานกับแกนแนว ND, $qrs = uvw \times hkl$, N_i คือจำนวนที่หารตัวเลขให้เป็นจำนวนเต็มที่น้อยที่สุด



ภาพที่ 4.6 แสดงผลการวิเคราะห์ตามวิธีสเตริโอกราฟิก โปรเจกชัน (ก) แบบแผนภาพด้วยโพล 100 (ข) แบบแผนภาพโพลย้อนกลับของระบบผลึกแบบคิวบิก [55]

4.4 วิธีการวิศวกรรมขอบเกรนต่อเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI1010

เหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI1010 ที่ได้รับนั้น ถูกตรวจสอบส่วนประกอบทางเคมีด้วยวิธีการ X-ray spectrography และ โครงสร้างจุลภาคด้วยวิธีการทาง โลหะวิทยา หลังกระบวนการขัดชิ้นงานด้วยกระดาษทราย จนกระทั่งผงเพชรขนาด 3 micron ในขั้นตอนสุดท้าย และกัดกรดด้วย H_2NO_3 3% ในแอลกอฮอล์ เพื่อแสดงโครงสร้างจุลภาคของขอบเกรน ได้ขนาดเกรนเฉลี่ยของชิ้นงานตั้งต้นที่ $27.7 \mu m$ ด้วยวิธี Linear intercept procedure ก่อนที่ที่ได้รับการทำวิศวกรรมขอบเกรนด้วย Small Strained – Annealing process ดังตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 แสดงกระบวนการ Fine tuning ในวิศวกรรมขอบเกรนต่อแต่ละชิ้นงาน

Sample #	Plastic strain (% elongation)	Annealing condition
As received	None	None
1	6%	400°C / 168 h
2	6%	400°C / 504 h
3	10%	400°C / 168 h
4	10%	400°C / 504 h
5	6%	500°C / 168 h
6	6%	500°C / 504 h
7	10%	500°C / 168 h
8	10%	500°C / 504 h
9	6%	600°C / 168 h
10	6%	600°C / 504 h
11	10%	600°C / 168 h
12	10%	600°C / 504 h

ในการเปลี่ยนแปลงรูปร่างอย่างถาวร ชิ้นงานตามขนาด Specimen 3 ASTM E8M {, 2008 #29} ได้ถูกเตรียมขึ้น เพื่อสะสม Elastic strain energy ด้วยวิธีการดึงที่ความเครียดถาวร 6% และ 10% ตามสมการ

$$\% \text{Elongation} = \frac{l_f - l_o}{l_o} \times 100\% \quad (4.13)$$

หลังจากกระบวนการ Small Strained – Annealing Process โครงสร้างจุลภาคจะถูกตรวจสอบอีกครั้ง เพื่อตรวจสอบแนวโน้มนៃของขนาดเกรนเฉลี่ยที่เปลี่ยนแปลงสอดคล้องกับทฤษฎี ภายในผลกระทบบจาก Annealing process ต่อชิ้นงานเหล่านั้น ก่อนวิเคราะห์ชนิดของขอบเกรนจากมุมต่างของการตกกระทบกับการสะท้อนของลำอิเล็กตรอน (Electron Back Scatter Diffraction) บนระนาบผลึกของแต่ละคู่เกรนบนพื้นผิวที่ถูกเตรียมมาเฉพาะ หากมุมต่างนี้เป็นไปตาม Brandon’s criteria ขอบเกรนระหว่างคู่นี้ถูกจัดเป็นขอบเกรนชนิดพิเศษ อย่างไรก็ตามการหาสัดส่วนของความยาวขอบเกรนชนิดพิเศษนี้กับความยาวขอบเกรนทั้งหมดนั้น (%CSL) คำนวณได้จาก Software ที่ติดตั้งมากับกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องกราด

4.5 การทดลองทางคอมพิวเตอร์ (Computer simulation)

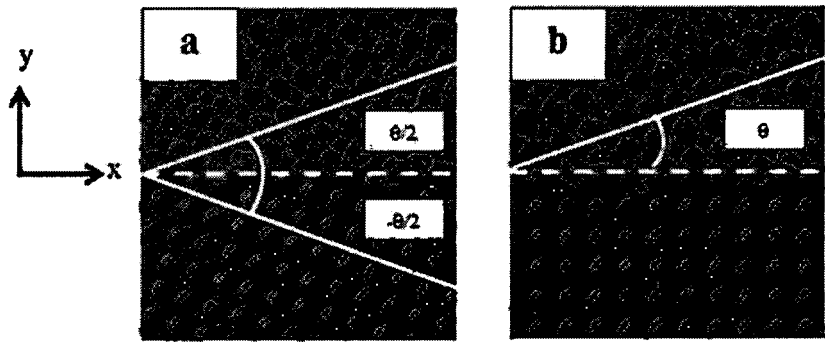
4.5.1 การกำหนดขอบเขตและชนิดของระบบ

ในการศึกษาการจำลองพฤติกรรมของระบบในคอมพิวเตอร์นั้น เราจำเป็นต้องเริ่มต้นจากการสร้างระบบที่เราต้องการศึกษา ซึ่งประกอบด้วยขนาดของระบบ และชุดตำแหน่งและความเร็วของแต่ละอนุภาคในระบบ ซึ่งวิธีโดยทั่วไปสำหรับ Condense matter นั้นคือชุดตำแหน่งของอะตอมตามชนิดของผลึกที่ปกติแล้วมีความเสถียร ที่ $T = 0$ ด้วยความเร็วเริ่มต้นเท่ากับ 0 หรือเราจะกระจายค่าความเร็วแบบ Maxwellian ก็ได้ ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับสถานะสมดุลในระบบที่เราต้องการจำลอง ในบางกรณีเราอาจต้องทำให้ตำแหน่งเบี่ยงเบนจากสถานะสมดุลด้วย ไม่เช่นนั้นแล้วอะตอมแต่ละอะตอมจะเทียบเท่ากันหมด และระบบก็จะสมมาตร ทำให้ระบบไม่สามารถพัฒนาตามเวลาได้

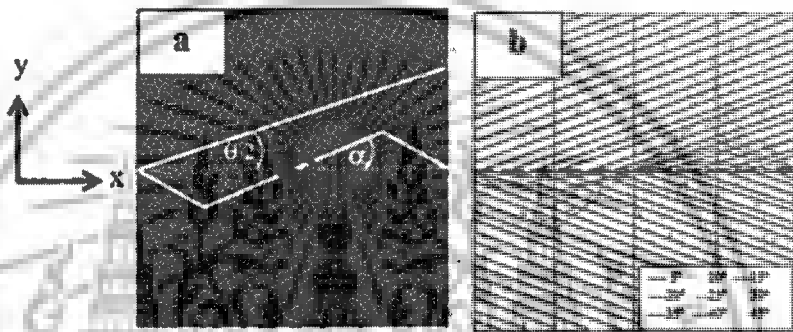
ในงานวิจัยนี้ ระบบของขอบเกรนแบบสองผลึกที่ได้จากการวางอนุภาคตามตำแหน่งผลึกแบบ FCC ได้ถูกสร้างขึ้น ตามด้วยการหมุนของเกรนบน ($y \geq 0$) และ/หรือเกรนล่าง ($y < 0$) รอบแกน Z จนเกิดมุมระหว่างกัน ขอบเกรนที่ได้จะเป็นขอบเกรนบนระนาบ X-Z ที่ $Y = 0$ จนกระทั่งได้ขอบเกรนสามชนิดที่ต้องการ ได้แก่ Symmetric (SYM) (ภาพที่ 4.6a), Asymmetric (ASYM) (ภาพที่ 4.6b) และแบบ Zigzag (ภาพที่ 4.7) ซึ่ง SYM GB ได้จากการหมุนเกรนบนเป็นมุม $\theta/2$ และเกรนล่างเป็นมุมเท่ากับ แต่ในทิศทางตรงกันข้าม (ภาพที่ 4.6a) ระบบขอบเกรนแต่ละระบบจะได้รับการเพิ่มมุมการหมุนประมาณทุกๆ 2° เพื่อให้ได้ค่า Σ ที่ใกล้เคียงกับมุมนั้นตามสมการ

$$\Sigma = m^2 + n^2 \rightarrow \theta = 2 \arctan\left(\frac{n}{m}\right) \quad (4.14)$$

โดยที่ m และ n คือเลขจำนวนเต็ม คำนี้อาจทำให้เราสามารถกำหนดขนาดของระบบในการใช้ PBD เพื่อการศึกษาแนวโน้มของพลังงานขอบเกรนกับมุมที่ต่างกัน ส่วน Asymmetric GB นั้นได้จากการหมุนเกรนบนแบบทวนเข็มนาฬิกาเป็นมุม θ ซึ่งในกรณีนี้ เราไม่สามารถใช้ PBC ได้กับระบบขอบเกรนที่ได้จากการหมุนเกรนเกือบทุกมุม θ ดังนั้นเพื่อลดอิทธิพลจากพื้นผิวด้านข้าง (แกน X) ดังนั้นระบบจึงถูกขนาบข้างด้วย 2 ชุดของอะตอมด้วยความกว้างหนึ่ง โดยที่อะตอมชุดแรกที่ชิดกับระบบสามารถปรับตำแหน่งเพื่อเข้าสู่จุดสมดุลได้ ขณะที่อีกชุดหนึ่งถูกตรึงตำแหน่งของอะตอมไว้ ความกว้างของอะตอมชุดแรกนั้นจะขยายออกจนได้ระดับพลังงานคู่เข้าค่าหนึ่ง จึงถือว่าสิ้นสุด การหมุนของเกรนนั้น ย่อมทำให้เกิดกันซ้อนทับกัน หากมีระยะใกล้กว่าค่าที่เรากำหนด เราจะดำเนินการลบอะตอมนั้นออก ซึ่งเราได้ปรับระยะนี้จนได้ระดับพลังงานอีกทางหนึ่ง



ภาพที่ 4.7 แสดงชนิดของระบบขอบเกรน a) Symmetric grain boundary b) Asymmetric grain boundary



ภาพที่ 4.8 แสดงชนิดของระบบขอบเกรน Zigzag Atomic arrangement b) Plane rotation at different angle

สำหรับขอบเกรนแบบ Zigzag นั้น เราเลือกที่จะหมุนระนาบเกรนแบบ $\Sigma 5$ (310) รอบแกน [001] ที่จุดศูนย์กลางของระบบ ทุกๆ 5° จาก 5° ถึง 45° เพื่อให้ได้เงื่อนไขขอบเขตของระบบเป็น PBC สัดส่วนตามแนวนอนจึงถูกแบ่งเป็น 4 ส่วน แต่ละส่วนกว้าง 5 Lattice unit ดังภาพที่ 4.7b

4.5.2 Measurement of physical quantity in MD

การคำนวณปริมาณทางกายภาพของระบบ จากการจำลองแบบ MD นั้น ได้จากค่าเฉลี่ยของคุณสมบัติทางกายภาพนั้นกับเวลาของการจำลองที่เราต้องการศึกษา N_T

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_T} \sum_{t=1}^{N_T} A(t) \quad (4.15)$$

โดยที่ ณ เวลาหนึ่งๆ คุณสมบัตินั้นได้มาจากฟังก์ชันของ ตำแหน่งและความเร็วของทุกๆอนุภาค $A(t) = f(\vec{r}_1(t), \dots, \vec{r}_N(t), \vec{v}_1(t), \dots, \vec{v}_N(t))$ ซึ่งวิธีนี้ เรียกว่า Time Average methods ซึ่งเป็นวิธีการคำนวณที่สะดวกและรวดเร็ว นอกจากนี้เรายังสามารถคำนวณได้อีกแบบ กล่าวคือ System Average โดยเริ่มจากการสร้างระบบเริ่มต้นแบบ หลายๆแบบ แล้วดำเนินการจำลองระบบ เมื่อต้องการหาปริมาณทางกายภาพนั้น เราก็เอาค่านั้น เฉลี่ยด้วยจำนวนของระบบเป็นต้น และปริมาณทางฟิสิกส์ที่คำนวณเป็นส่วนใหญ่ ได้แก่

4.5.2.1 พลังงานศักย์ (Potential energy) และพลังงานจลน์ (Kinetic energy)

ค่าเฉลี่ยพลังงานศักย์, V มีความสำคัญมากในการตรวจสอบกฎการอนุรักษ์พลังงานของระบบ จากค่าเฉลี่ยพลังงานที่เวลาใดเวลาหนึ่ง จาก

$$V(t) = \sum_i \sum_{j>i} \phi(|\vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(t)|) \quad (4.16)$$

โดยที่เราเลือก Lennard-Jones potential $\phi_i = 4\epsilon \sum_{i \neq j} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$ คือหลักการ Shifted ของพลังงาน

ศูนย์ที่ Cut off radiue, $R_c = 3$ นั่นคือ $V(r) = \begin{cases} \phi_L(r) - \phi_L(R_c) & \text{if } r \leq R_c \\ 0 & \text{if } r > R_c \end{cases}$ ซึ่งการคำนวณได้

ระยะห่างระหว่างอนุภาคภายใต้ภาวะสมดุลของแรงที่ 1.54638 ที่อุณหภูมิศูนย์ จากแรงระหว่างอนุภาค

$$\vec{F}_i = -\nabla V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (4.17)$$

และหาก 4ϵ และ σ เป็นหน่วยอ้างอิงแล้ว ค่าของพลังงานจะไม่มีหน่วย

พลังงานจลน์ นั้นสามารถหาได้จากสมการ

$$K(t) = \frac{1}{2} \sum_i m(\vec{v}_i(t))^2 \quad (4.18)$$

ซึ่งค่าความเร็วเป็นหนึ่งในค่าพื้นฐานในการคำนวณอยู่แล้ว ดังนั้นค่าพลังงานรวมจึงมีค่า $E = K + V$ ซึ่งเป็นตัวตรวจสอบกฎอนุรักษ์พลังงานของระบบได้

ค่าพลังงานจลน์ของระบบ สามารถบ่งบอกถึงอุณหภูมิได้ จากหลักการของ Equipartition

$$K(t) = \frac{3}{2} Nk_B T \quad (4.19)$$

4.5.2.2 GB energy, ϕ_{gb}

ในระบบที่ประกอบด้วยขอบเกรน ระยะห่างระหว่างอนุภาคในบริเวณจะสูงขึ้น ทำให้พลังงานของระบบสูงขึ้นตามไปด้วย โดยที่พลังงานขอบเกรนสามารถคำนวณได้จากสมการ

$$\phi_{gb} = \sum_{i \in V} (\phi_i - \phi_o) / S_{gb} \quad (4.20)$$

โดยที่ ϕ_o คือพลังงานศักย์ของอะตอมในระบบสมบูรณ์ และ S_{gb} คือพื้นที่ของขอบเกรน ดังนั้น จะเห็นได้ว่า $\phi_i - \phi_o \neq 0$ สำหรับอนุภาคที่อยู่บริเวณขอบเกรน (V-Domain) เท่านั้น

บทที่ 5 ผลการวิจัย

ผลการวิจัยวิศวกรรมขอบเกรนต่อเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI1010 โดยกระบวนการ Thermo-mechanical process นั้นจำเป็นต้องควบคุมปัจจัยทางโครงสร้างจุลภาคของชิ้นงานด้วย เนื่องจากเป็นปัจจัยที่ผลต่อสัดส่วนการเกิดขอบเกรนพิเศษ ดังนั้นข้อมูลเริ่มแรกของปัจจัยเหล่านี้ต้องการวิเคราะห์ก่อน ซึ่งได้ผลดังนี้

5.1 ข้อมูลพื้นฐานของเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ ชนิด AISI 1010

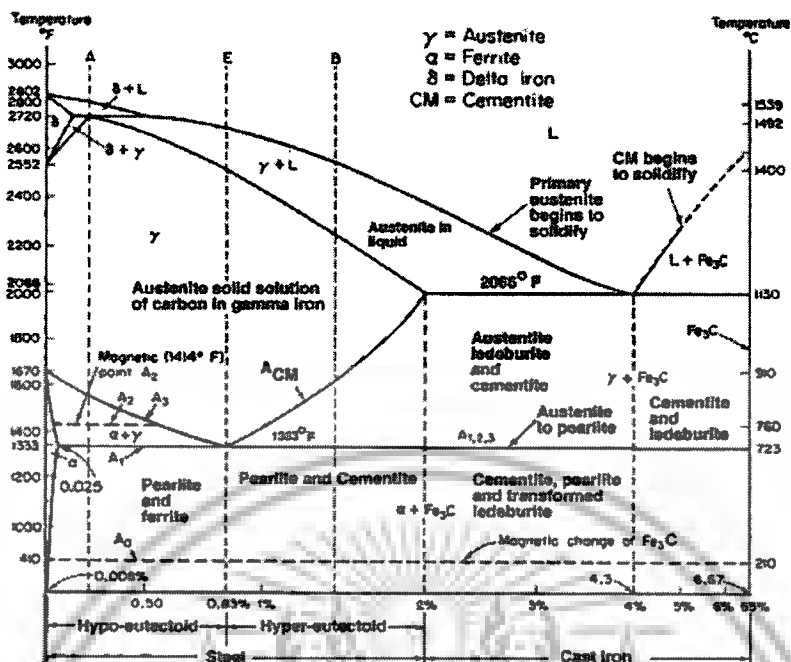
AISI 1010 หรือ เหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ คือ เหล็กที่มีปริมาณคาร์บอนต่ำกว่า 0.25% มีโครงสร้างผลึกแบบ Body Center Cubic (BCC) มีความแข็งแรงต่ำและความเหนียวสูงจึงขึ้นรูปได้ง่าย แต่ไม่สามารถชุบแข็งได้ เนื่องจากมีปริมาณคาร์บอนผสมอยู่น้อยนั่นเอง ส่วนประกอบทางเคมีของ AISI1010 ได้แสดงไว้ในตารางที่ 5.1 ส่วนคุณสมบัติทางกล ดังตารางที่ 5.2 ซึ่งจากส่วนผสมทางเคมี AISI1010 เป็นเฟส Ferrite ที่อุณหภูมิห้องตาม Fe-Fe₃C phase diagram (ภาพที่ 5.1)

ตารางที่ 5.1 ส่วนประกอบทางเคมีของเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI 1010

	C	Fe	Mn	Si	Cu	P	S
มาตรฐาน	0.08-0.13	99.18-9.62	0.3-0.6	0.07-0.6	-	0.03	0.05
ใบรับรองผลิตภัณฑ์	0.12	Balanced	0.43	0.18	-	0.11	0.1
ผลการวิเคราะห์	0.16	98.71	0.43	0.33	0.16	<=0.0022	<=0.0058

ตารางที่ 5.2 คุณสมบัติทางกายภาพของเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI 1010

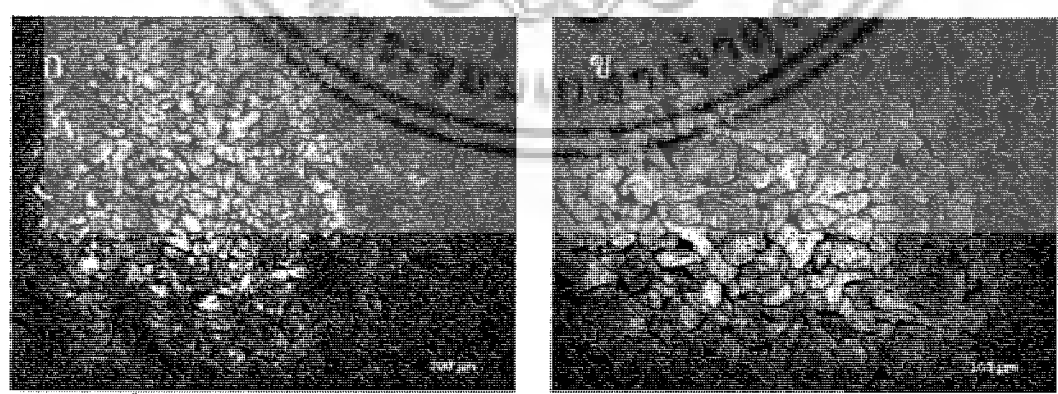
Density (x 1000 kg/m ³)	7.70 – 8.03
Tensile strength	365 MPa
Yield strength	305 MPa
Elastic modulus	190-210 GPa
Elongation (%)	20
Reduction Area (%)	40
Hardness, Vickers	60-120 HV
Recrystallization Temp. (°C)	538



ภาพที่ 5.1 แสดง Fe-Fe₃C phase diagram

5.2 โครงสร้างจุลภาค (Microstructure) ของแต่ละชิ้นงาน

ภาพที่ 5.2 แสดงภาพโครงสร้างจุลภาคจากกล้องจุลทรรศน์แบบแสดงของเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI 1010 (Ferrite) ของวัสดุตั้งต้น (As-revieved) ที่ยังไม่ผ่านกระบวนการทางความร้อนใดๆ พบว่าวัสดุมีขนาดเกรนเฉลี่ย 27.7 μm ค่าความแข็ง 109 HV-30 Kg และ สัดส่วนขอบเกรนชนิดพิเศษ (Σ3-29) 10.17% CSL โดยที่ภาพที่ 5.3 แสดงโครงสร้างเกรนของวัสดุตั้งต้นนั้นด้วยกล้องจุลทรรศน์แบบส่องกราดภายใต้ฟังก์ชันการวัดมุมต่างของแกนผลึกแบบ EBSD

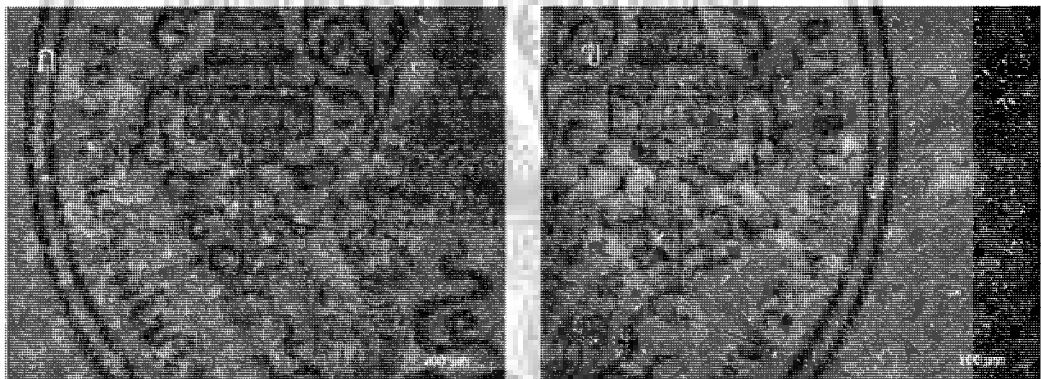


ภาพที่ 5.2 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงาน As-received ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า

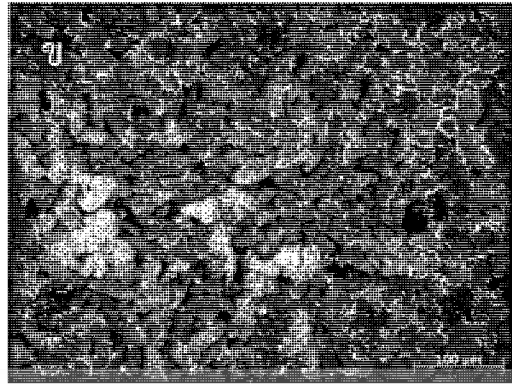
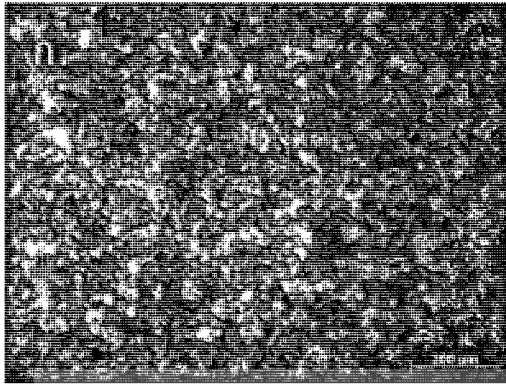


ภาพที่ 5.3 แสดงภาพจากกล้องจุลทรรศน์แบบส่องกราดภายใต้ฟังก์ชันการวัดมุมต่างของแกนผลึกแบบ EBSD

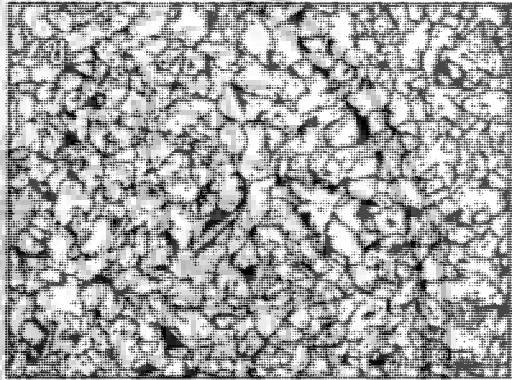
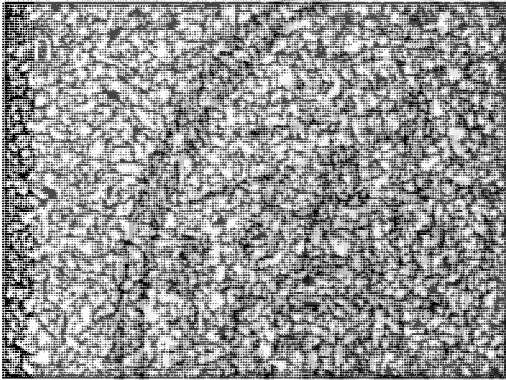
ภาพที่ 5.4-5.15 แสดงโครงสร้างเกรนของวัสดุที่กำลังขยาย 10x และ 20x ของแต่ละชิ้นงานหลังกระบวนการวิสกรรมขอบเกรน (ตารางที่ 4.1) โดยที่ภาพที่ 5.16 แสดงผลการวัด %CSL ภาพที่ 5.17 แสดงผลการวัดขนาดเกรนเฉลี่ย และ ภาพที่ 5.18 แสดงผลการวัดความแข็ง (Vicker Hardness)



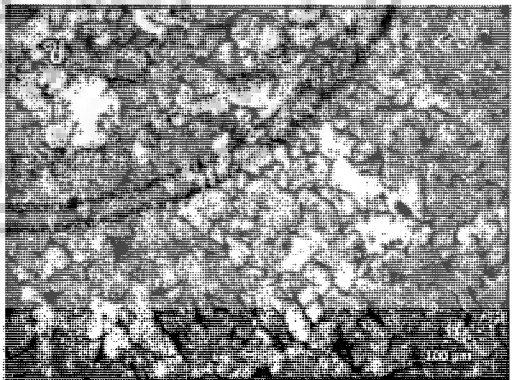
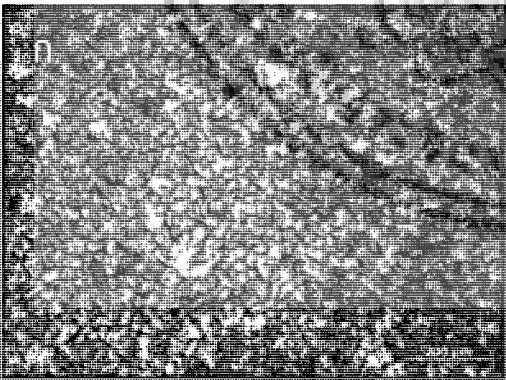
ภาพที่ 5.4 โครงสร้างจุดภาคชิ้นงานความเครียดถาวร 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 400°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า



ภาพที่ 5.5 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานความเคียดถาวร 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 400°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า

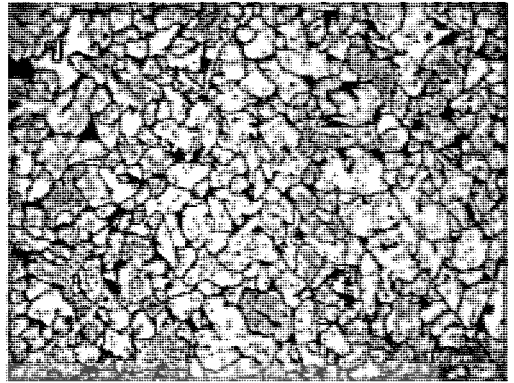
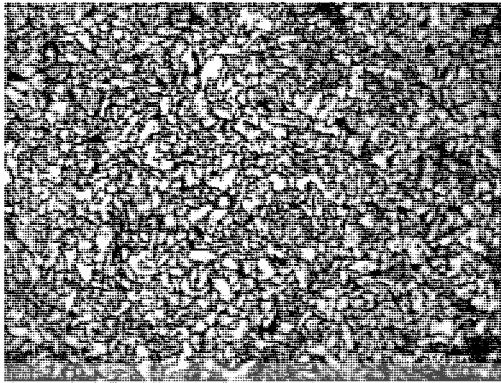


ภาพที่ 5.6 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานความเคียดถาวร 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 400°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า

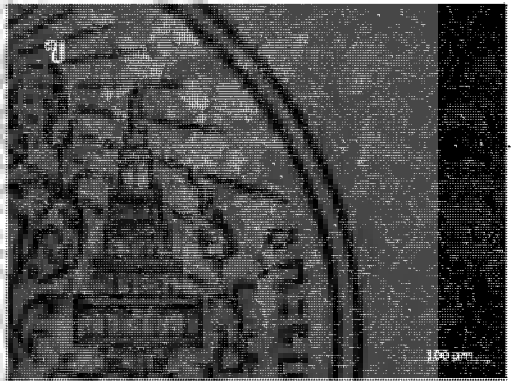


ภาพที่ 5.7 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานความเคียดถาวร 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 400°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า

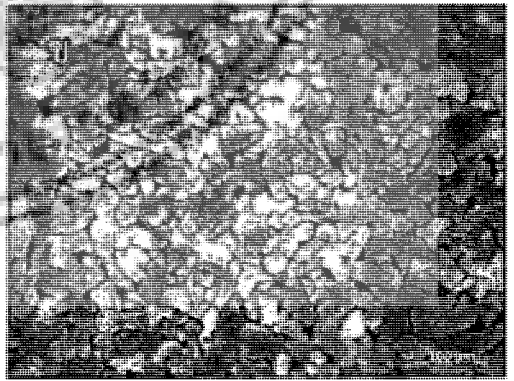
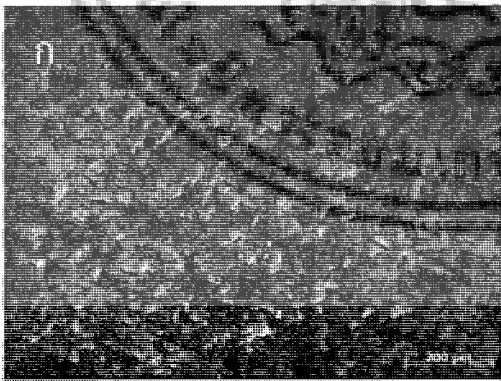
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



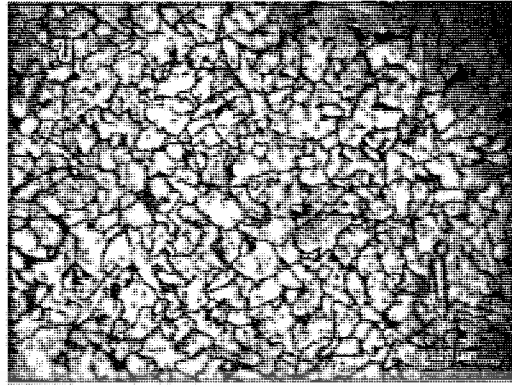
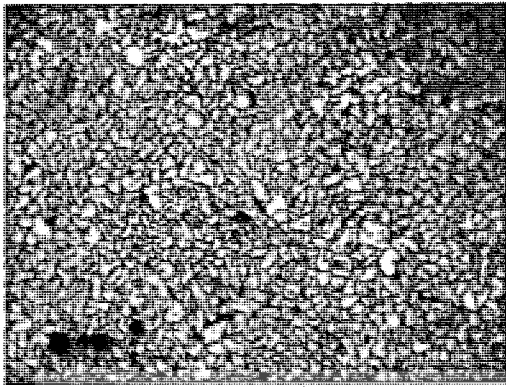
ภาพที่ 5.8 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานความเครียด 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 500°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า



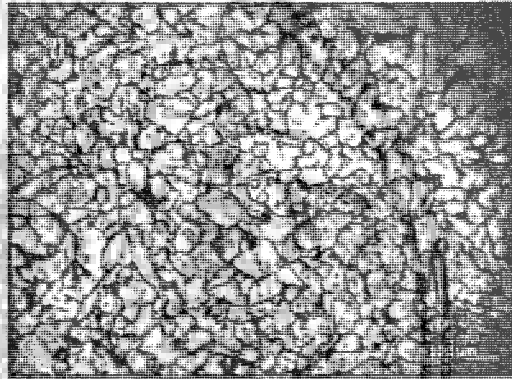
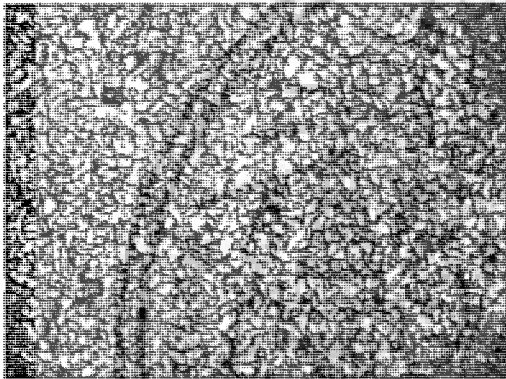
ภาพที่ 5.9 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 500°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า



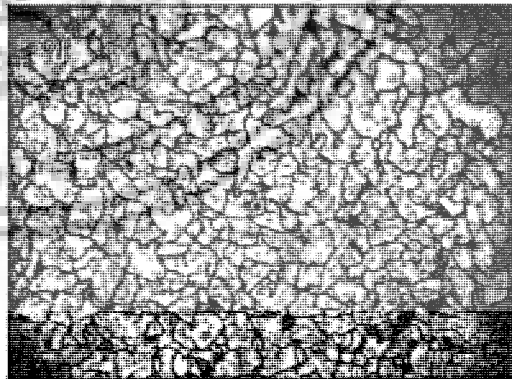
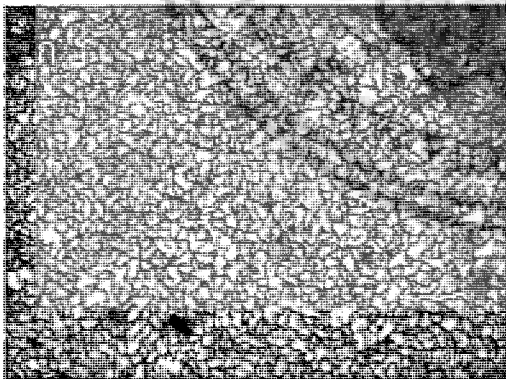
ภาพที่ 5.10 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 500°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า



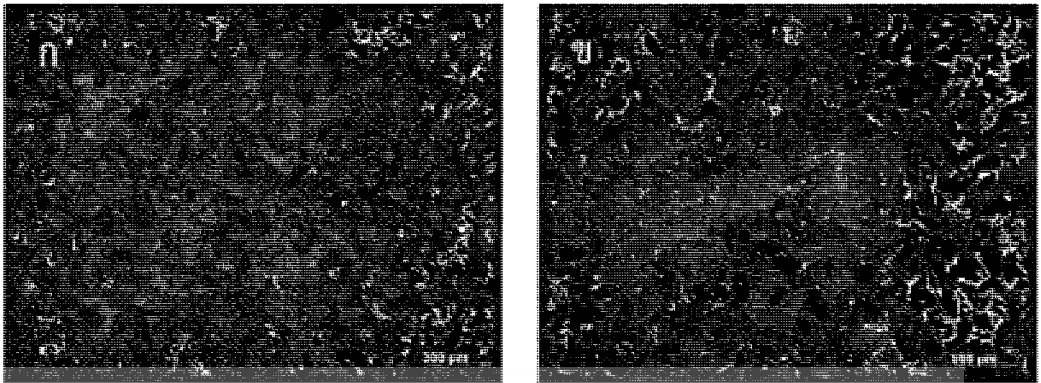
ภาพที่ 5.11 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเคียด 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 500°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า



ภาพที่ 5.12 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเคียด 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 600°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า



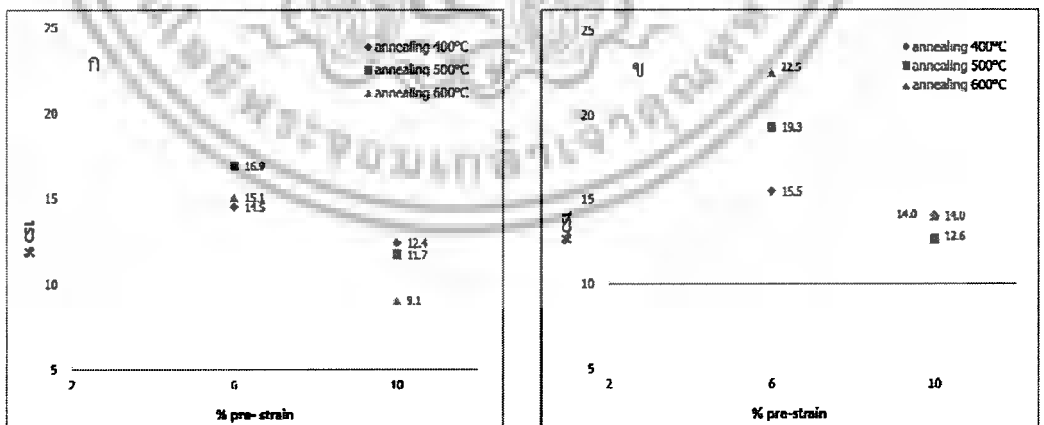
ภาพที่ 5.13 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเคียด 6% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 600°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า



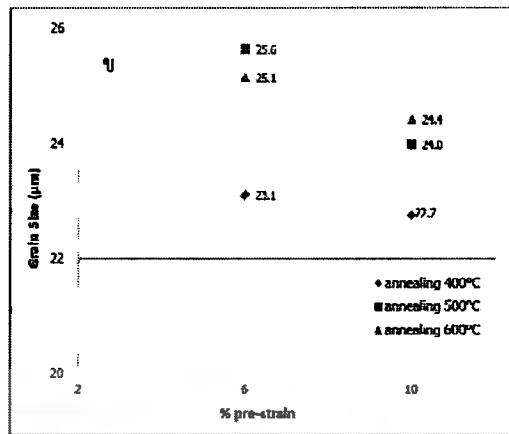
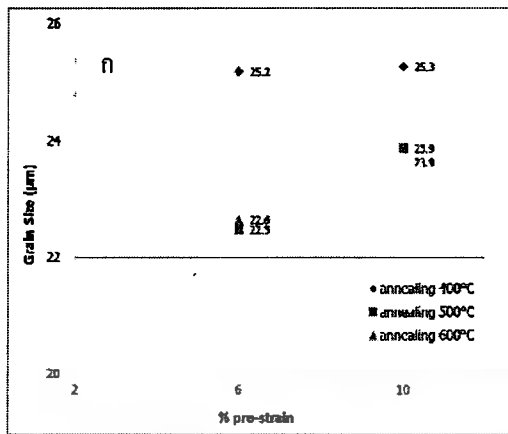
ภาพที่ 5.14 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 600°C เป็นเวลา 168 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า



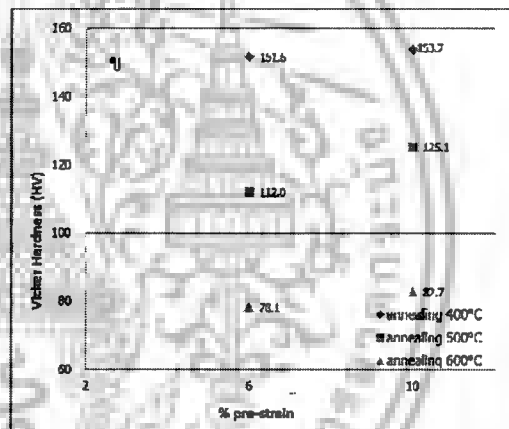
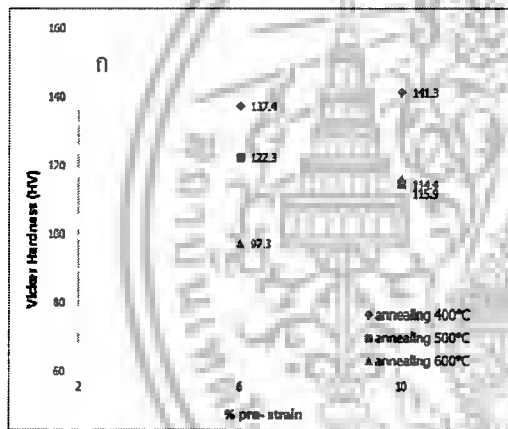
ภาพที่ 5.15 โครงสร้างจุลภาคชิ้นงานที่ได้รับความเครียด 10% ตามด้วยการอบอ่อนที่ 600°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง ที่กำลังขยาย ก) 10 เท่า และ ข) 20 เท่า



ภาพที่ 5.16 ผลการวัด %CSL ของแต่ละชิ้นงาน หลังการอบอ่อนที่ 400, 500, และ 600°C เป็นเวลา ก) 168 ชั่วโมง และ ข) 504 ชั่วโมง



ภาพที่ 5.17 ผลการวัดขนาดเกรนเฉลี่ยของแต่ละชิ้นงาน หลังการอบอ่อนที่ 400, 500, และ 600°C เป็นเวลา ก) 168 ชั่วโมง และ ข) 504 ชั่วโมง



ภาพที่ 5.18 ผลการวัดความแข็งของแต่ละชิ้นงาน หลังการอบอ่อนที่ 400, 500, และ 600°C เป็นเวลา ก) 168 ชั่วโมง และ ข) 504 ชั่วโมง

5.3 ผลกระทบของระดับความเครียดตอ %CSL

เพื่อตรวจสอบผลกระทบของระดับความเครียดตอ %CSL ชิ้นงานทดสอบโครงสร้างผลึก BCC จึงถูกดึงให้มีความเครียดตอต่างๆกันที่ 6% และ 10% เพื่อสะสมพลังงานความเครียดยึดหยุ่น ก่อนกระตุ้นกลไกวิศวกรรมขอบเกรนด้วยความร้อนขณะอบชิ้นงานที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C และผลการเปรียบเทียบความสัมพันธ์ระหว่าง %CSL กับระดับความเครียดดึงที่ต่างกันนั้น ได้แสดงไว้ดังภาพที่ 5.16 ที่ %CSL ลดลง เมื่อใช้ความเครียดตอสะสมสูงขึ้น โดยที่ชิ้นงานที่ได้รับความเครียดสะสม 6 % Elongation/600°C/ 504 ชั่วโมง นั้นมี %CSL มากสุดที่ 22.53%

จากผลการทดสอบความแข็ง (ภาพที่ 5.17) นั้น แสดงให้เห็นว่า ชิ้นงานมีค่าความแข็งสูงตามระดับระดับความเครียดตอที่ได้รับ ด้วยสาเหตุมาจาก Strain Hardening แม้ว่าความแตกต่างของระดับ

ความเครียดจะต่ำก็ตาม อย่างไรก็ตาม ผลของค่าความแข็งที่สูงกว่าบอกเป็นนัยของโครงสร้างคิสโตเคชั่นที่พัวพันกันบริเวณส่วนกลางของเกรน จนเป็นผลถึงเซลล์ (Subgrain) ซึ่งมักเกิดขึ้นที่ระดับความเครียดที่สูงกว่า โครงสร้างคิสโตเคชั่นที่สะสมที่ขอบเกรน อย่างไรก็ตามการพิสูจน์โครงสร้างว่าเป็นแบบใดจำเป็นต้องใช้เทคนิคกล้องจุลทรรศน์แบบส่องผ่านซึ่งนอกเหนือจากงานวิจัยนี้ที่สามารถทำได้ แต่ผลของวิศวกรรมขอบเกรนต่อชิ้นงานระดับความเครียดต่ำที่ 6% เมื่ออบที่อุณหภูมิสูงเป็นเวลานานนั้น ให้ %CSL สูงกว่าชิ้นงานที่ระดับความเครียดปานกลางที่ 10% นั้นบ่งชี้ให้เห็นถึงโครงสร้างคิสโตเคชั่นที่ระดับความเครียดต่ำ มีอิทธิพลสูงกว่าโครงสร้างคิสโตเคชั่นที่ระดับความเครียดปานกลาง และโดยส่วนมากแล้วโครงสร้างคิสโตเคชั่นสะสมที่ขอบเกรนจะเกิดที่ระดับความเครียดต่ำกว่า

กลไกของวิศวกรรมขอบเกรน ขณะอบที่อุณหภูมิสูงนั้น พลังงานความร้อนจะกระตุ้นการจัดเรียงตัวใหม่ของอะตอม ซึ่งเกิดขึ้นได้ง่ายกว่าที่บริเวณขอบเกรนมากกว่าบริเวณอื่น เพื่อลดระดับพลังงานความเครียดอีลาสติกของชิ้นงาน โดยเฉพาะอย่างยิ่ง เมื่อคิสโตเคชั่นสะสมบริเวณขอบเกรนเป็นที่มาของพลังงานความเครียดอีลาสติก การจัดเรียงตัวใหม่ของอะตอมภายในจากพลังงานความร้อนจากการอบที่อุณหภูมิสูงเป็นเวลานาน เพื่อลดระดับพลังงานของระบบนั้น นำไปสู่วิศวกรรมขอบเกรนของโลหะ BCC ด้วยกลไก (1) การหมุนของระนาบขอบเกรน หรือ (2) การหมุนผลึก โดยที่กลไกแรกมักเกิดภายในชิ้นงาน ขณะที่กลไกที่ (2) ถูกจำกัดภายในชิ้นงาน แต่เกิดได้ง่ายกว่าที่ผิวชิ้นงาน ดังนั้นการหาเงื่อนไขของวิศวกรรมขอบเกรนที่เหมาะสม ไม่ว่าจะป็น ระดับของความเครียดการอบที่ให้กับชิ้นงานหรืออุณหภูมิการอบชิ้นงาน จึงมักใช้วิธีแบบลองผิดลองถูก อย่างไรก็ตาม หลักการทั่วไปของวิศวกรรมขอบเกรน ประกอบด้วย 2 ขั้นตอนหลัก ได้แก่ การให้ระดับความเครียดสะสมระดับต่ำ เป็นพลังงานสะสมภายในชิ้นงาน ซึ่งจะถูกลดปล่อยด้วยการจัดเรียงตัวใหม่ของอะตอมภายในชิ้นงานที่อุณหภูมิสูง

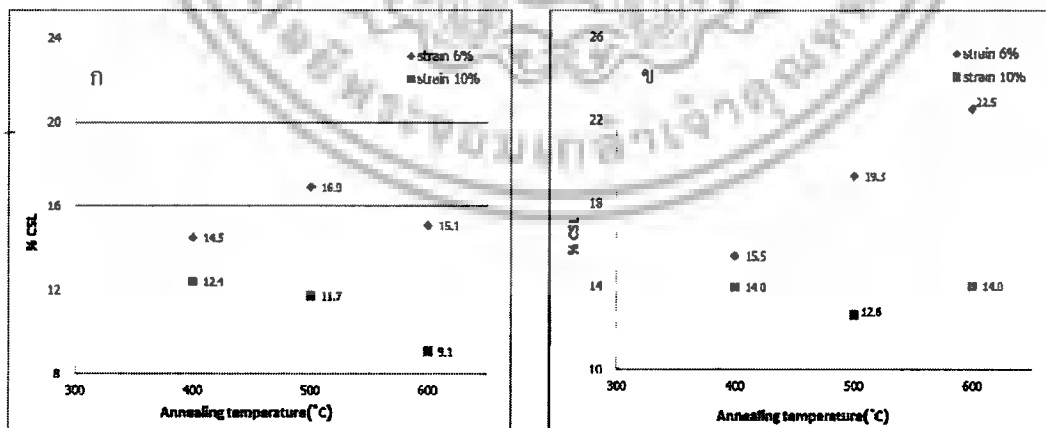
สภาวะที่เหมาะสมจึงเป็นค่าที่ทั้งระดับความเครียดการอบและอุณหภูมิการอบ ที่ต้องไม่ไปกระตุ้นให้เกิดการตกผลึกใหม่และการเติบโตของเกรนที่มากเกินไป อย่างไรก็ตามการเคลื่อนที่ของขอบเกรนก็จำเป็นในการลดระดับพลังงานของขอบเกรน ทำให้ขนาดเกรนควรที่จะเพิ่มขึ้นเพียงเล็กน้อย (ภาพที่ 5.17) ซึ่งระบบจะลดระดับพลังงานลงสู่ค่าสมดุลที่จุดๆหนึ่ง ที่สัดส่วนของ %CSL ลู่เข้า ซึ่งจุดๆนี้อาจกำหนดได้โดยค่าความแข็งของชิ้นงาน (ภาพที่ 5.17) ซึ่งเป็นจุดที่พลังงานสะสมจากความเครียดการอบนั้นได้ถูกใช้ทั้งหมด

5.4 ผลกระทบของอุณหภูมิการอบต่อสัดส่วนขอบเกรนแบบ Low-Sigma CSLB (%CSL)

ชิ้นงานทดสอบภายใต้วิศวกรรมขอบเกรนแบบ Fine tuning process ประกอบด้วยขบวนการให้ความเครียดการอบระดับต่ำแก่แต่ละชิ้นงาน ได้แก่ 6% หรือ 10% ตามด้วยการอบทางความร้อนที่อุณหภูมิค่อนข้างต่ำ เช่น 400, 500 และ 600°C เพื่อเร่งการจัดเรียงตัวใหม่ของอะตอมบริเวณขอบเกรนแบบเฉพาะที่ เพียงพอสำหรับการเคลื่อนที่ของขอบเกรน ที่ระยะเวลาที่ไม่ส่งผลต่อการเปลี่ยนแปลงขนาดเกรนเฉลี่ย ภาพที่ 5.19 แสดงแนวโน้มของการเปลี่ยนแปลง %CSL ต่อวิศวกรรมขอบเกรนแบบ Fine เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

tuning พบว่าชิ้นงานที่ได้รับความเค้นถาวรต่ำที่ 6% มีค่า %CSL สูงขึ้นตามอุณหภูมิของการอบ จาก 15.5 % ที่ 400°C เป็น 22.5% ที่ 600°C เมื่ออบเป็นระยะเวลาเท่ากันที่ 504 ชั่วโมง ขณะที่ชิ้นงานที่ได้รับความเค้นถาวรต่ำที่ 10% กลับแสดงแนวโน้มในทิศทางตรงกันข้าม นั่นคือ%CSL มีค่าลดลงสวนทางกับอุณหภูมิ การอบ ลดลง จาก %CSL ที่ 12.4 % ที่ 400°C เป็น 9.1% ที่ 600°C เมื่ออบเป็นระยะเวลาเท่ากันที่ 168 ชั่วโมง ผลดังกล่าวแสดงว่า พลังงานความร้อนเพียงอย่างเดียวไม่เพียงพอต่อการเพิ่มสัดส่วนเขตเกรน พิเศษและจำเป็นต้องใช้พลังงานความเครียดร่วมด้วย ทั้งพลังงานทางความร้อนและระดับความเค้นถาวร มีอิทธิพลต่อการเปลี่ยนแปลงสัดส่วน %CSL ของชิ้นงาน ในกระบวนการ Recovery แทนการตกผลึก ใหม่ ซึ่งในกรณีของระดับความเครียดถาวรต่ำนั้น อุณหภูมิการอบที่ 500 °C หรือมากกว่าในการเพิ่ม สัดส่วน %CSL

ทั้งนี้กระบวนการทางความร้อนของโลหะเป็นกระบวนการที่เกี่ยวข้องกับการประยุกต์ใช้ ความสัมพันธ์ระหว่าง Applied thermal energy กับ Internal energy ของวัสดุในรูปแบบของอุณหภูมิกับ เวลาในการอบ โดยการอบชิ้นงานที่อุณหภูมิหนึ่ง สูงพอที่จะปล่อยให้กลไกการเคลื่อนที่ของอะตอม ทำงาน นำไปสู่การจัดเรียงตัวใหม่ของโครงสร้าง จากสถานะที่มี Free energy สูง เป็นสถานะที่มี Free energy ต่ำ ความแตกต่างของระดับพลังงานก่อนและหลังการอบอ่อนนี้เป็น Driving force ของระบบ ให้ %CSL สูงขึ้น แต่เนื่องจากเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำมีอุณหภูมิการตกผลึกใหม่ประมาณ 525°C ดังนั้น อุณหภูมิการอบที่สูงกว่านี้ จะทำให้มีการตกผลึกใหม่เป็นผลึกเล็ก ๆ ที่ก่อตัวขึ้น ซึ่งการก่อตัวของ นิวเคลียสนี้ อาจจะก่อตัวขึ้นหลาย ๆ จุดพร้อม ๆ กัน ตามด้วยการโตของผลึกจากการรวมตัวของอะตอม รอบข้าง เพื่อกำจัดคิสโลเคชั่นที่ระดับพลังงานสูง นั้นลดจำนวนลง ได้ผลึกระดับพลังงานต่ำที่มีความ หนาแน่นของคิสโลเคชั่นต่ำปราศจาก dislocation ลดลงอย่างมาก

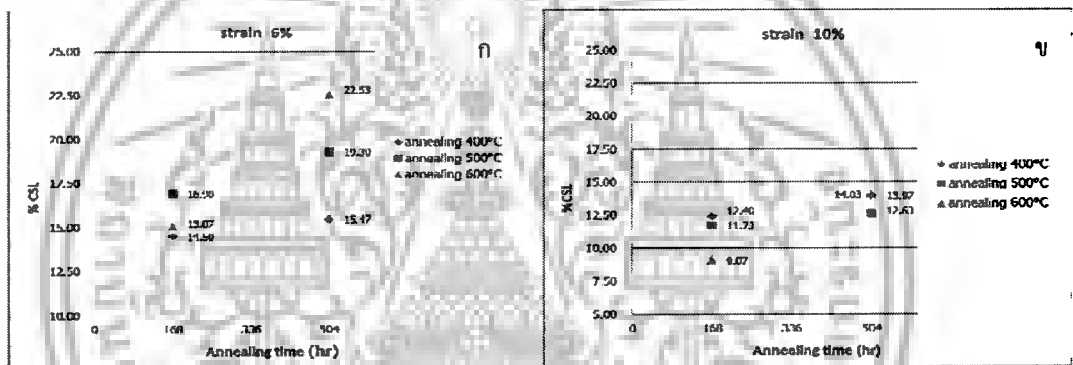


ภาพที่ 5.19 แสดงผลกระทบของอุณหภูมิการอบบนชิ้นงานทดสอบต่อ%CSLเมื่ออบชิ้นงานที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C เป็นเวลาเท่ากันที่ ก) 168 ชั่วโมง ข) 504 ชั่วโมง

5.5 ผลกระทบของเวลาการอบต่อสัดส่วน %CSL

ผลการทดลองพบว่าสัดส่วน %CSL เพิ่มขึ้น ตามเวลาของการอบอ่อน ดังภาพที่ 5.20 ที่แสดงผลการเปรียบเทียบดังกล่าว ชิ้นงานที่ได้รับความเครียดถาวร 10% มีสัดส่วน %CSL เพิ่มขึ้นเล็กน้อย เมื่อเพิ่มเวลาการอบอ่อนจาก 168 ชั่วโมง เป็น 504 ชั่วโมง ซึ่งน่าจะเป็นผลจากโครงข่ายคิสโลเคชั่น ที่เคลื่อนที่ไปที่ขอบเกรนและตรึงการเคลื่อนที่ ทำให้ขนาดเกรนไม่เปลี่ยนแปลง (ภาพที่ 5.17) ขณะที่อัตราการเพิ่ม %CSL สูงขึ้นตามอุณหภูมิการอบและเวลานั้น เพื่อลดระดับพลังงานสะสมอีลาสติกด้วยการจัดเรียงตัวใหม่แบบเฉพาะที่ ซึ่งได้แก่บริเวณกำแพงคิสโลเคชั่น

ขณะที่ชิ้นงานที่ได้รับความเครียดถาวร 6% สามารถเพิ่มสัดส่วน %CSL จาก 15.1% เป็น 22.5%CSL ด้วยเวลาการอบที่นานขึ้น โดยไม่พบการเติบโตของเกรนและการเปลี่ยนแปลงค่าความแข็งอย่างเด่นชัด ซึ่งแสดงได้ว่าพลังงานความร้อนส่วนใหญ่ใช้ในการลดความหนาแน่นของคิสโลเคชั่น



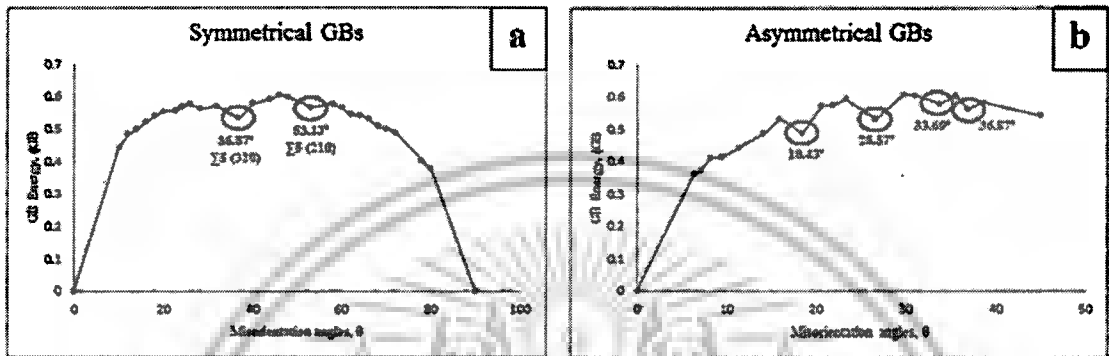
ภาพที่ 5.20 แสดงผลกระทบของเวลาการอบต่อสัดส่วน %CSL หลังการอบอ่อนที่อุณหภูมิ 400, 500 และ 600°C กับชิ้นงานที่ได้รับความเครียดถาวรที่ (ก) 6% และ (ข) 10%

5.6 ผลการศึกษาพลังงานขอบเกรน

5.6.1 ผลการศึกษาพลังงานขอบเกรนหลัง Conjugate gradient relaxation

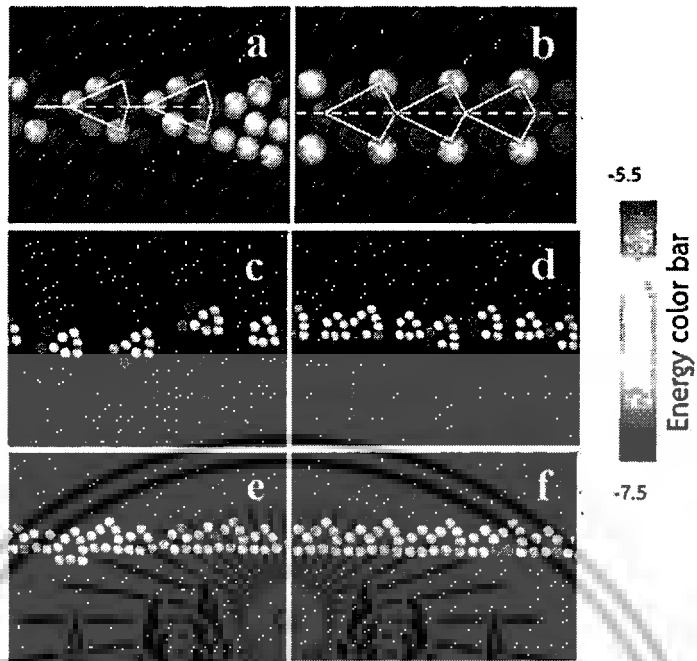
ดังที่กล่าวไว้แล้วข้างต้น โครงสร้างและค่าพลังงานขอบเกรนสามารถกำหนดได้จากตัวแปรอิสระ 8 ตัว นั่นคือ 5 ตัวแปรอิสระมหภาค และ 3 ตัวแปรอิสระจุลภาค แต่ในการทดลองทางเชิงตัวเลขนี้ มุมการหมุน θ ของเกรนบนเป็นตัวแปรอิสระเดียวที่เราศึกษา ส่วนอีก 4 ตัวแปรอิสระแบบมหภาคนั้นถูกกำหนดโดยการหมุนรอบแกน [001] ตามนิยามขอบเกรน Symmetry และ Asymmetry และเพื่อให้ได้ค่าพลังงานระดับพลังงานเนื่องจากขอบเกรนต่ำสุดนั้น 3 ตัวแปรอิสระแบบจุลภาคก็ต้องการวิเคราะห้จากการปรับเปลี่ยนระยะห่างระหว่างเกรนในแนวแกน x, y, และ z นอกจากนี้ จำนวนอนุภาคภายในระบบก็มีความสำคัญต่อระดับพลังงานด้วยเช่นกัน ระยะการซ้อนทับระหว่างอนุภาค ถูกเรียกว่า Threshold distance หากอนุภาคอยู่ห่างจากกันต่ำกว่าค่านี้ อนุภาคใดอนุภาคหนึ่งจะถูกตัดทิ้งไป ก่อนที่จะทำการจำลองระบบให้ได้ระดับพลังงานต่ำสุดด้วยวิธี Conjugate gradient algorithm ที่ปริมาตรคงที่

ภาพที่ 5.21 แสดงกราฟความสัมพันธ์ระหว่าง ค่าของพลังงานระบบของขอบเกรนแบบ Symmetry และ Asymmetry หลังจากระบบถูกผ่อนคลายด้วยความร้อนกับมุมการหมุนต่างๆของเกรนบน ซึ่งแสดงมุมเฉพาะหลายมุม ที่มีค่าระดับพลังงานต่ำกว่ามุมข้างเคียง โดยที่ระบบขอบเกรนที่มีมุมการ หมุนจากมุมเหล่านี้ ถูกจัดให้เป็นขอบเกรนชนิดพิเศษ เช่น สำหรับขอบเกรน Symmetry $\Sigma 5$ (310) 36.87° และ $\Sigma 5$ (210) 53.13° และขอบเกรนแบบ Asymmetry ที่มีมุมการหมุนที่ 18.43° , 26.57° , 33.69° และ 36.87°

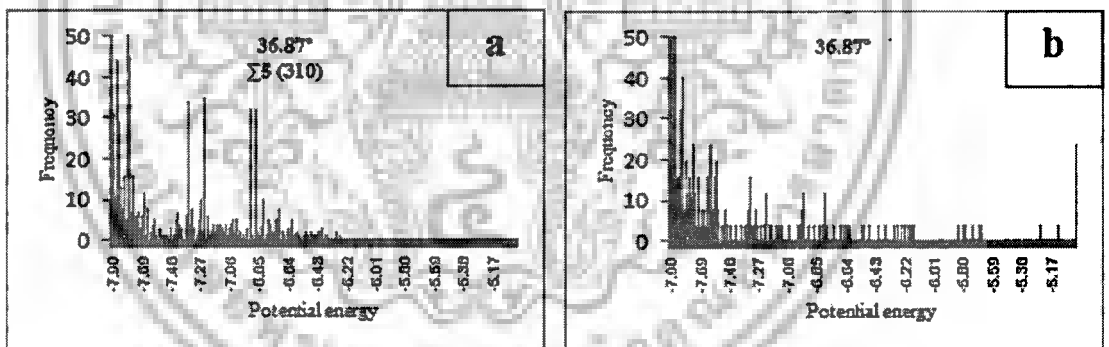


ภาพที่ 5.21 แสดงกราฟความสัมพันธ์ระหว่าง ค่าของพลังงานขอบเกรนแบบ (ก) Symmetrical และ (ข) Asymmetrical หลังจากระบบถูกผ่อนคลายที่อุณหภูมิทางความร้อนกับมุมการหมุนต่างๆของเกรนบน

หลังจากอนุภาคได้รับการผ่อนคลายทางความร้อน พลังงานรวมของระบบจะเข้าสู่ค่าต่ำสุด ได้รูปแบบการจัดเรียงตัวของอนุภาคเฉพาะที่บริเวณขอบเกรน ดังภาพที่ 5.22 โดยที่แต่ละอนุภาคมีค่า พลังงานศักย์ต่างกัน และในที่นี้เราสามารถแยกระดับพลังงานด้วยวิธีรหัสสี เราสามารถสังเกตการ จัดเรียงตัวของอนุภาคแบบเป็นคาบสลับกันระหว่าง โครงสร้างแบบเป็นระเบียบกับแบบไม่เป็นระเบียบที่ ค่ามุมแตกต่างระหว่างเกรนต่ำ ซึ่งสอดคล้องกับโครงสร้างขอบเกรนมุมต่ำ ตามแบบจำลองขอบเกรนด้วย การเรียงตัวในแนวเส้นตรงของคิสโลเคชั่น ขณะที่เราให้มุมระหว่างเกรนเกรนมีค่าสูงขึ้น ข้อบกพร่องจะ พบมากขึ้นจนกระทั่งเริ่มเชื่อมต่อเข้าด้วยกันเป็นระนาบ 2 มิติ และแน่นอนผลของโครงสร้างเหล่านี้ย่อม บ่งชี้ถึงคุณสมบัติของขอบเกรนในแง่ต่างๆ ไม่ว่าจะเป็น ระดับพลังงานขอบเกรน ความสามารถในการ เคลื่อนที่ของขอบเกรน และการแพร่ภายในขอบเกรน เป็นต้น แต่ในที่นี้ เราจะมุ่งความสนใจไปที่ ลักษณะการกระจายตัวของระดับพลังงานศักย์กับสัดส่วนอนุภาคของระบบขอบเกรน Symmetry และ Asymmetry ภายหลังจากได้รับการผ่อนคลายทางความร้อนแล้ว ดังภาพที่ 5.23 ลักษณะการกระจายตัวของ ระดับพลังงานศักย์จะถูกใช้เป็นตัวแทนในการบ่งชี้โครงสร้างขอบเกรน สำหรับระบบที่มีความซับซ้อน แทนการพิจารณาจากการจัดระเบียบโดยตรงของอนุภาค



ภาพที่ 5.22 แสดง โครงสร้างการจัดเรียงตัวของอนุภาคบริเวณขอบเกรน $\Sigma 5$ แบบ symmetrical ที่มุมการบิด a) 36.87° b) 53.13° และแบบ Asymmetrical c) 18.43° d) 26.57° e) 33.69° และ f) 36.87°



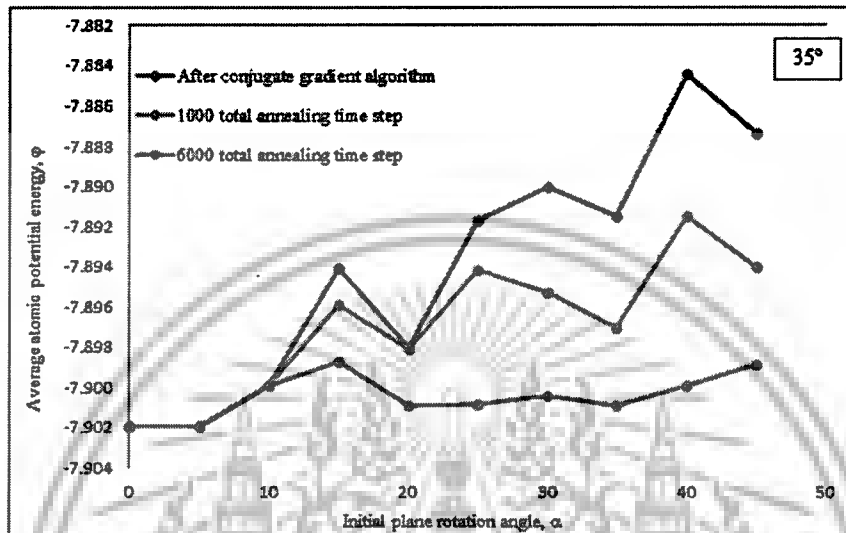
ภาพที่ 5.23 แสดงการกระจายตัวของระดับพลังงานศักย์ของอนุภาคในระบบอิสระ ที่มุมบิด 36.87°

a) Symmetrical และ b) Asymmetrical GBs

5.6.2 พฤติกรรมพลศาสตร์ขอบเกรนเนื่องจากการหมุนระนาบขอบเกรน

ในการศึกษาพฤติกรรมพลศาสตร์ขอบเกรนเนื่องจากการหมุนระนาบขอบเกรนนั้น เราเลือกขอบเกรนชนิด $\Sigma 5$ (310) 36.87° โดยที่ระบบตั้งต้นจะเป็นระบบที่มีระดับพลังงานต่ำสุดในหัวข้อที่แล้ว แต่มีปัจจัยเพิ่มเติมเนื่องจากมุมเอียงระนาบขอบเกรน α (ภาพที่ 4.7) ด้วยระยะ Threshold ที่เหมาะสม เราสามารถสร้างแบบจำลองขอบเกรน Zigzag ที่มีจำนวนอนุภาคเท่ากัน แต่มีมุมเอียงของระนาบต่างๆกัน ด้วยแต่ละมุมจะเพิ่มขึ้นทุกๆ 5° ก่อนที่จะให้ระบบนั้นผ่อนคลายทางความร้อน ที่อุณหภูมิจำลองเท่ากับ 1 ที่เวลาต่างๆกัน (1000 และ 6000 time steps) ก่อนลดอุณหภูมิอย่างช้าๆจนได้เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

อุณหภูมิต่ำ ที่การเรียงตัวของอนุภาคขอบเกรนเข้าสู่สภาวะสมดุลได้ค่าพลังงานศักย์ของแต่ละอนุภาค โดยที่ภาพที่ 5.24 แสดงค่าพลังงานศักย์ของระบบที่ 1000 และ 6000 time steps ของระบบที่มีมุมการหมุนระนาบขอบเกรนต่างๆ



ภาพที่ 5.24 ระดับพลังงานศักย์เฉลี่ยของแต่ละมุมเอียงของระนาบขอบเกรน ที่เวลาการจำลองของระบบอิสระต่างๆกัน

ภาพที่ 5.24 แสดงระดับพลังงานศักย์เฉลี่ยของแต่ละมุมเอียงของระนาบขอบเกรน ที่เวลาการจำลอง ด้วยวิธี Conjugate Gradient, 1000 และ 6000 time steps ซึ่งจะเห็นได้ว่า หลังจากการอบอ่อนระบบที่มีมุมหมุนระนาบต่ำ 5° ระนาบขอบเกรนจะหมุนกลับเป็นระนาบนอน 0° ขณะที่ที่มุมการหมุนระนาบ $\alpha \geq 10^\circ$ ระบบเริ่มต้นได้วิวัฒนาการไปสู่การจัดเรียงอนุภาค เพื่อลดระดับพลังงานระบบ

ในเบื้องต้นระบบขอบเกรนแบบ Zigzag ที่อุณหภูมิต่ำ สามารถลดระดับพลังงานระบบด้วย Conjugate gradient algorithm โดยที่อนุภาคภายในสามารถผ่อนคลาย เคลื่อนที่ที่เป็นอิสระได้ แต่ในระยะสั้นเท่านั้น ระดับพลังงานที่ลดลงจากการปรับโครงสร้างแบบนี้จึงไม่มากนัก เนื่องจากเป็นระดับพลังงานเฉพาะที่เท่านั้น และโครงสร้างที่ได้ก็มีลักษณะเป็นช่วง ที่มีโครงสร้างแบบ SYM หรือ ASYM (ภาพที่ 5.25a1, b1, c1) อย่างไรก็ตาม ระบบเหล่านี้ก็ยังคงมีพื้นที่ขอบเกรนที่สูง จึงมีส่วนของขอบเกรนที่มีระดับพลังงานสูงเฉพาะที่สูงอยู่ พร้อมทั้งจะปลดปล่อยและขับเคลื่อนการจัดระเบียบใหม่ของโครงสร้างขอบเกรนสู่โครงสร้างที่มีระดับพลังงานลดลงได้ เมื่อมีพลังงานความร้อนที่ให้ระบบเพียงพอ ดังภาพที่ 5.25b2, c2 ที่อนุภาคมีความสามารถในการเคลื่อนที่สูงขึ้นในการปรับโครงสร้าง ได้ลักษณะเส้นขอบเกรนแบบ Sine-Curve ที่บางช่วงก็เป็นโครงสร้างแบบเป็นระเบียบ และบางช่วงก็มีโครงสร้างแบบไม่เป็นระเบียบ ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับค่ามุมหมุน α ซึ่งเป็นผลจากการแข่งขันระหว่างระดับพลังงานที่ลดลงเนื่อง

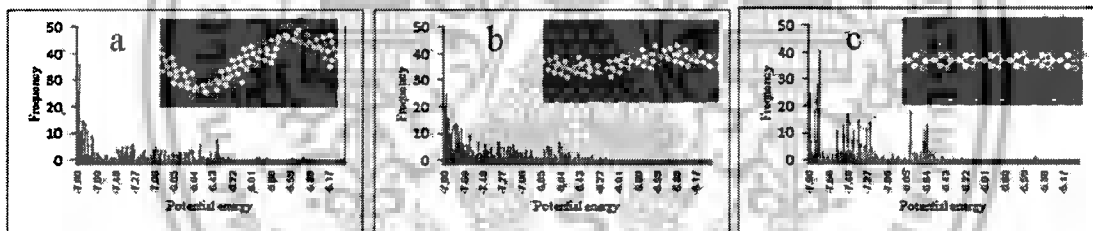
โครงสร้างที่เป็นระเบียบ แต่เอียงและยาว กับ โครงสร้างที่ไม่เป็นระเบียบ ที่สั้นแต่มีโครงสร้างไม่เป็นระเบียบ

การหมุนระนาบขอบเกรนที่มุม 20° เกิดขึ้นอัตราที่ช้า โดยที่ระหว่างการหมุนระนาบนั้น เราสามารถสังเกตได้ว่า โครงสร้างที่ได้จะผสมผสานระหว่างแบบ SYM และ ASYM ซึ่งมีระดับพลังงานต่ำแบบเฉพาะที่ ที่เราสามารถเห็นความสอดคล้องกันของการจัดเรียงตัวของอนุภาคและการกระจายตัวของระดับพลังงาน เมื่อเราเปรียบเทียบภาพที่ 5.22f กับ 5.25b2 และ c2 และ 5.23b กับ 5.26b ตามลำดับ และเมื่อมีระดับของพลังงานความร้อนเพียงพอ ระบบก็จะสามารถข้ามภาพระดับพลังงานต่ำเฉพาะที่ไปได้ เพื่อลดความยาวของขอบเกรน นอกเหนือจากโครงสร้างที่มีพลังงานต่ำแบบ SYM อยู่แล้ว อย่างไรก็ตาม ค่าระดับพลังงานต่ำสุด ดังระบบแรกที่ 0° นั้น ไม่สามารถทำได้ เนื่องจากความไม่ยืดหยุ่นของอนุภาคหรือช่องว่างที่เกิน ตามขอบเกรนนั้น ดิระดับพลังงานต่ำเฉพาะที่ ได้ขอบเกรนแบบ SYM ชนิดอื่นที่มีระดับพลังงานสูงกว่า $\Sigma 5$ (310) ที่อาจมีการแทรกแซงของส่วนที่เป็น Amorphous section ทั้งนี้แบบจำลองที่เรียกว่า Island model ที่กำหนดว่าขอบเกรนประกอบด้วยส่วนที่เป็นผลึกและไม่ใช่ผลึกจึงเหมาะสมที่จะใช้ในการอธิบาย โครงสร้างในช่วงระหว่าง 1000 ถึง 6000 time steps

ในการจำลองพฤติกรรมขอบเกรนในงานวิจัยนี้นั้น มีข้อจำกัดในการตัดหรือเพิ่มจำนวนอะตอม และสำหรับระบบจริงๆแล้ว อะตอมสามารถที่จะเคลื่อนที่เข้า-ออกขอบเกรนได้อย่างง่ายดายด้วยพื้นที่เปิดกว้างของขอบเกรน นอกเหนือจากข้อบกพร่องแบบจุดที่เราไม่ได้พิจารณาในงานวิจัยนี้ ดังนั้นนี่อาจเป็นเหตุผลที่เราไม่พบขอบเกรนแบบทวินในโครงสร้างผลึก FCC หรืออีกนัยหนึ่ง กล่าวคือ ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของขอบเกรนที่มีค่าสูงนั้น สามารถให้เป็นทางเลือกในการปรับเปลี่ยนโครงสร้างได้โดยง่าย เราจึงไม่ได้พบเจอขอบเกรนที่มีลักษณะคล้ายแบบจำลอง Island นั้นเอง และในที่สุดก็ไม่ได้รับการยอมรับ อย่างไรก็ตาม ภาพที่ 5.25a3, b3, c3 ก็แสดงให้เห็นอย่างชัดเจนได้ว่า มีการแทรกแซงของส่วนที่เป็น Amorphous segment ตามขอบเกรน ชนิด $\Sigma 5$ (310) เมื่อเราเปรียบเทียบลักษณะการกระจายตัวของระดับพลังงาน ภาพที่ 5.23a กับ 5.26c

Initial plane rotation angle, α	Total annealing time step		
	After conjugate gradient algorithm	1000	6000
10°	a1	a2	a3
20°	b1	b2	b3
35°	c1	c2	c3

ภาพที่ 5.25 แสดงการพัฒนาการจัดเรียงของระบบอนุภาคขณะลดระดับพลังงาน เมื่อมุมเริ่มต้นของระนาบขอบเกรนที่ a) 10° b) 20° และ c) 35° ที่เวลาจำลองต่างๆกัน



ภาพที่ 5.26 แสดงการกระจายตัวของระดับพลังงานศักดิ์ของอนุภาคในระบบขอบเกรนแบบซิกแซก ชนิด SYM $\Sigma 5$ (310) ภายหลังจากลดระดับพลังงานของระบบด้วย a) Conjugate gradient minimization algorithm b) MD 1000 total time steps c) MD 6000 total time steps

บทที่ 6

สรุปผลการวิจัย

6.1 สรุปผลการวิจัยของวิศวกรรมขอบเกรนแบบ Fine Tuning ต่อ เหล็กกล้าคาร์บอนต่ำ AISI1010 ด้วยวิธีการทดลอง

6.1.1 วิศวกรรมขอบเกรน แบบ Fine tuning ที่อบชิ้นงานที่มีระดับความเครียดถาวรสะสมต่ำ เป็นเวลานาน สามารถเพิ่มสัดส่วนขอบเกรนพิเศษด้วยกลไกการหมุนของระนาบขอบเกรน มากกว่าการหมุนของเกรน เนื่องจากที่ความเครียดถาวรสะสมต่ำ ดิสโลเคชันจะสะสมที่ขอบเกรนมากกว่าจะสร้างเป็นผนังเขต ทำให้เกิดกลไกการหมุนระนาบขอบเกรน จากการเคลื่อนที่ของขอบเกรนได้ดีกว่า ซึ่งจากการทดลอง %CSL สามารถเพิ่มได้สูงสุดที่ 22.53% กับชิ้นงานที่ได้รับความเครียดถาวรสะสมต่ำ 6% หลังการอบที่ 600°C เป็นเวลา 504 ชั่วโมง

6.1.2 จากผลการทดลอง สัดส่วน %CSLB ที่เพิ่มขึ้นเป็นผลเนื่องมาจากการเคลื่อนที่ของขอบเกรนในการจัดเรียงอะตอมที่ขอบเกรน โดยมีดิสโลเคชันที่ขอบเกรนให้การสนับสนุน ระดับพลังงานความเครียดสะสมในฐานะความหนาแน่นของดิสโลเคชันจึงเป็นสิ่งสำคัญต่อการก่อเกิด CSLBs โดยเฉพาะอย่างยิ่ง ในระดับความเครียดคั้งที่ไม่นำไปสู่การตกผลึกใหม่ แต่เพียงพอให้เกิดการก่อตัวของโครงสร้างดิสโลเคชันที่สนับสนุนวิศวกรรมขอบเกรน

6.1.3 การอบชิ้นงานเป็นกระบวนการให้ความร้อน เพื่อกระตุ้นการเคลื่อนที่ของตำแหน่ง dislocations เข้าและออกจากขอบเขตขอบเกรนของโครงสร้างขั้วเกรน ระหว่างกระบวนการ fine turning processing ก่อให้เกิดความเครียดยืดหยุ่นที่ยังคงมีพลังงานหลงเหลือจากการเปลี่ยนรูปร่างอีลาสติก ซึ่งเป็นแรงขับเคลื่อนหลักของการเคลื่อนย้ายผ่านขอบเขตเกรนมาจากพลังงานความร้อน แต่ผลกระทบต่อการเพิ่มขึ้นของสัดส่วน %CSL อาจไม่มากนัก แต่จะเร่งการตกผลึกใหม่ที่ 525 °C เริ่มจากการก่อเกิดผลึกเล็ก ๆ ที่เรียกว่านิวเคลียส หลาย ๆ จุดพร้อม ๆ กันและค่อยๆ โตขึ้นเรื่อย ๆ จากอะตอมรอบข้าง จนสามารถลดจำนวนดิสโลเคชันลงได้ การก่อผลึกใหม่ของเหล็กกล้าคาร์บอนต่ำทำให้ความเหนียวสูงขึ้น ความแข็งแรงต่ำ ซึ่งไม่เหมาะกับวิศวกรรมขอบเกรนแบบ Fine tuning

6.2 สรุปผลการวิจัยพฤติกรรมกรรมการหมุนระนาบขอบเกรนเชิงพลศาสตร์ด้วยแบบจำลองเชิงตัวเลข MD

6.2.1 กลไกการหมุนของระนาบขอบเกรนเพื่อลดระดับพลังงานของระบบลงได้ จากแรงขับเคลื่อนในการลดพื้นที่ขอบเกรน ซึ่งสามารถเกิดขึ้นได้ ถ้ามีแหล่งพลังงานทางความร้อนเพียงพอ

6.2.2 ขอบเกรนในลักษณะเส้นโค้งนั้น จะประกอบด้วยส่วนที่เป็นผลึก และไม่ใช้ผลึก ซึ่งเป็นการผสมผสานของ SYM, ASYM, และ Amorphous

6.2.3 การลดระดับพลังงานด้วยกลไกของการหมุนระนาบนั้นสามารถเกิดได้ เมื่อชิ้นงานได้รับพลังงานทางความร้อนเพียงพอ ได้โครงสร้างทวินระหว่างกระบวนการ ขอบเกรนทวินมีลักษณะเป็นเส้นตรงได้ระยะระหว่างจุดสิ้นสุด ทำให้ได้ระบบที่พลังงานต่ำ นอกเหนือจากโครงสร้างขอบเกรนแบบเป็นระเบียบที่มีระดับพลังงานต่ำอยู่แล้ว การหมุนของขอบเกรนที่ลดระดับพลังงานของระบบให้ต่ำไปกว่าเดิมอีก ดังนั้นกระบวนการหมุนระนาบขอบเกรนจึงน่าจะเป็นไปได้ในการทำ Fine tuning ให้กับ AISI1010 (BCC) เพื่อลดระดับพลังงานของระบบ แต่เนื่องจากความยาวของขอบเกรนที่สั้นลงเท่านั้น เพราะว่า BCC ไม่มีโครงสร้างทวิน



บรรณานุกรม

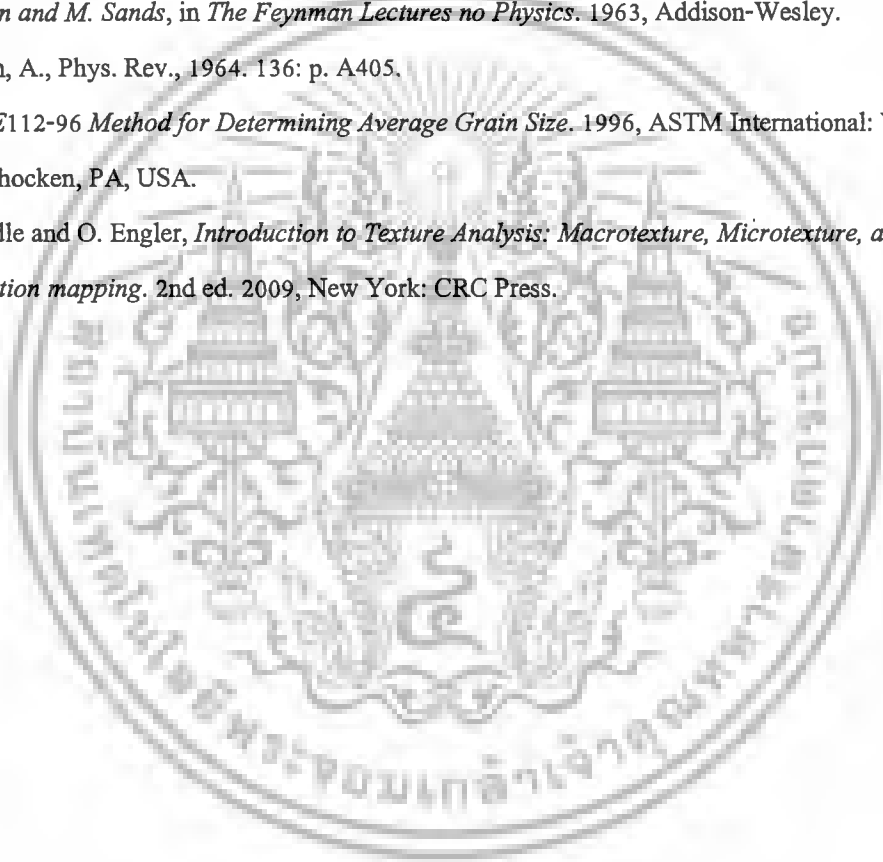
- [1] สภาอุตสาหกรรมแห่งประเทศไทย, ศ.แ. การสัมมนาสำรวจข้อมูลอุตสาหกรรม และมาตรฐานอุตสาหกรรมเพื่อเตรียมโครงสร้างพื้นฐานพลังงานนิวเคลียร์ ภายใต้ “โครงการศึกษาและจัดทำแผนงานด้าน โครงสร้างอุตสาหกรรม และมาตรฐานอุตสาหกรรมและการพาณิชย์” (โรงไฟฟ้าพลังงานนิวเคลียร์). 2553. ห้องแกรนด์ บอลรูม 1 ชั้น 3 โรงแรม ดิเอมเมอร์ลด์ กรุงเทพฯ.
- [2] William D. Callister and David G. Rethwisch, *Materials Science and Engineering*. 7 ed. 2011: John Wiley & Sons, Inc.
- [3] Watanabe, T., *Approach to grain boundary design for strong and ductile polycrystals*. Res. *Mechanica.*, 1984. 11: p. 47.
- [4] M. Kumar and C. Schuh, *Preface to the viewpoint set on grain boundary engineering*. *Scripta Materialia*, 2006. 54: p. 961.
- [5] David M. Saylor, Adam Morawiec, and G.S. Rohrer, *The relative free energies of grain boundaries in magnesia as a function of five macroscopic parameters*. *Acta Materialia*, 2003. 51: p. 3675-3686.
- [6] H. Miyamoto, K. Ikeuchi, and T. Mimaki, *The role of grain boundary plane orientation on intergranular corrosion of symmetric and asymmetric [110] tilt grain boundaries in directionally solidified pure copper*. *Scripta Materialia*, 2004. 50: p. 1417-1421.
- [7] Yaron Amouyal, Eugen Rabkin, and Y. Mishin, *Correlation between grain boundary energy and geometry in Ni-rich NiAl*. *Acta Materialia*, 2005. 53: p. 3795-3805.
- [8] P. Wynblatt and M. Takashima, *Correlation of Grain boundary character with wetting behavior*. *Interface Science*, 2001. 9: p. 265-273.
- [9] D. Wolf and S.R. Philpot, *The role of densest lattice planes in the stability of crystalline interfaces: A computer simulation study*. *Materials Science and Engineering A*, 1989. A107: p. 3-14.
- [10] David L. Olmsted, Stephen M. Foiled, and E.A. Holm, *Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic materials: I. Grain boundary energy*. *Acta Materialia*, 2009. 57: p. 3694-3703.
- [11] P. Lin, et al., *Influence of grain boundary character distribution on sensitization and intergranular corrosion of alloy 600*. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 1995. 33: p. 1387-1392.
- [12] E.M. Lehockey, et al., *On improving the corrosion and growth resistance of positive Pb-acid battery grids by grain boundary engineering*. *J. Power Sources*, 1999. 78: p. 79-83.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- [13] V. Randle, *Grain boundary engineering: an overview after 25 years*. Materials Science and Technology, 2010. 26: p. 253-261.
- [14] V. Randle, *Mechanism of twinning-induced grain boundary engineering in Low Stacking-Fault energy materials*. Acta Mater., 1999. 47: p. 4187-4196.
- [15] V. Thaveeprungsriporn and G.S. Was, *The Role of Coincidence-Site-Lattice Boundaries in Creep of Ni-16Cr-9Fe at 360dC*. Metall. Mater. Trans. A, 1997. 28A: p. 2101-2111.
- [16] G.S. Was, J.K. Sung, and T.M. Angelu, *Effects of grain boundary chemistry on the intergranular cracking behavior of Ni-16Cr-9Fe in high-temperature water*. Metall. Trans. A, 1992. 23A: p. 3343-3359.
- [17] B.W. Bennett and H.W. Pickering, *Effect of Grain boundary structure in sensitization and corrosion of stainless steel*. Metall. Trans. A, 1987. 18A: p. 1117-1124.
- [18] Randle, V., *Crystallographic characterization of planes in the scanning electron microscope*. Materials Characterization, 1995. 34(1): p. 29-34.
- [19] Randle, V., *The role of the grain boundary plane in cubic polycrystals*. Acta Mater., 1997. 46(5): p. 1459-1480.
- [20] G.O. Williams, et al., *The role of misorientation and phosphorus content on grain growth and intergranular fracture in iron-carbon-phosphorus alloys*. J. Microsc., 2004. 213: p. 321-327.
- [21] V. Randle, P. Davies, and B. Hulm, Philos Mag., 1999. A79: p. 305.
- [22] C.B. Thomson and V. Randle, *"Fine tuning" at S3⁺ boundaries in nickel*. Acta Mater., 1997. 45(12): p. 4909-4916.
- [23] *Heat-resistant materials*. ASM.
- [24] Randle, V., *The measurement of grain boundary geometry*. 1993, London: IOP Publishing Ltd.
- [25] Randle, V., *The coincidence site lattice and the 'sigma enigma'*. Materials Characterization, 2001. 47(5): p. 411-416.
- [26] Ranganathan, S., *On the geometry of coincidence-site lattice*. Acta Cryst., 1996. 21: p. 197-199.
- [27] D. G. Brandon, *The structure of high-angle grain boundary*. Acta Metall., 1966. 14: p. 1479-1484.
- [28] P. Sinsrok, *Effect of recrystallization and grain growth in the formation of annealing twin in the 304 stainless steel*, in *Nuclear Technology*. 1999, Chulalongkorn University: Bangkok.
- [29] Qiangyong Li, J. R. Cahoon, and N. L. Richards, *Effects of thermo-mechanical processing parameters on the special boundary configurations of commercially pure nickel*. Materials Science and Engineering A, 2009. 527: p. 263-271.

- [30] Lin, P., *Experimental assessment of the contribution of annealing twin to CSL distribution in FCC*. Scripta mater., 1997. 36(10): p. 1145-1149.
- [31] Lehockey, E.M., *On the creep behavior of grain boundary engineered nickel*. Mater. Sci. Eng. A, 1997. 237(2): p. 168-172.
- [32] Schwartz, A.J., *The potential engineering of grain boundaries through thermomechanical processing*. JOM, 1998. 50(2): p. 50-55.
- [33] B.M. Guyot and N.L. Richards, *A study on the effect of cold rolling and annealing on special grain boundary fractions in commercial-purity nickel*. Materials Science and Engineering A, 2005. 395: p. 87-97.
- [34] G.S. Was, V. Thaveprungsriporn, and D.C. Crawford, *Grain Boundary Misorientation Effects on Creep and Cracking in Ni-Based Alloys*. JOM, 1998(Febuary): p. 44-49.
- [35] Randle, V., *The effect of strain annealing on grain boundary distribution and hardening in superpure nickel*. Textures and Microstructures, 1996. 28(1): p. 71-79.
- [36] Thomson, C.B., *Fine tuning at S3 boundaries in nickel*. Acta Mater., 1997. 45(12): p. 4909-4916.
- [37] M.A. Meyers and L.E. Murr, *A model for the formation of annealing twins in FCC metals and alloys*. Acta Metall., 1978. 26: p. 951.
- [38] R.L. Fullman and J.C. Fisher, *Formation of annealing twins during grain growth*. J. Appl. Phys., 1951. 22: p. 1350-1355.
- [39] D. Horton, C. Thomson, and V. Randle, *Aspects of twinning and grain growth in high purity and commercially pure nickel*. Mater. Sci. Eng. A, 1995. 203: p. 408-414.
- [40] Reza Abbaschian, Lara Abbaschian, and Robert E. Reed-Hill, *Physical Metallurgy Principles*. 2010: Cengage Learning.
- [41] Richard W. Hertzberg, *Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials*. 1996: John Wiley & Sons.
- [42] Randle, V., *The influence of annealing twinning on microstructure evolution*. Journal of Materials Science, 2005. 40(4): p. 853-859.
- [43] Anil Kumar Sinha, *Ferrous Physical Metallurgy*. 1989: Butterworths.
- [44] Harry Chandler, *Heat Treater's Guide: Practices and Procedures for Irons and Steels*. 1995: ASM.
- [45] www.prism.gatech.edu/~gh19/61510/chemrev.html.
- [46] H. Chang and I Baker, *Characterization of Rolled and Recrystallized High-Purity Nickel using EBSP*. Microsc Microanal, 2005. 11(Suppl 2): p. 2022 - 2023.

- [47] J. T. Houston and K. Farrell, *Recrystallization of Nickel-270*. *Metallography*, 1969. 2: p. 239.
- [48] Kate Felde. *Recrystallization and Grain Growth in Nickel Alloy 706 Forgings*.
- [49] V. Randle, P.R. Rios, and Y. Hu, *Grain Growth and twinning in nickel*. *Scripta Materialia*, 2008. 58: p. 130 - 133.
- [50] Reza Abbaschian, L.A., and Robert E. Reed-Hill, *Physical Metallurgy Principles*. 2010: Cengage Learning.
- [51] Verlet, L., *Phys. Rev.*, 1967. 159: p. 98.
- [52] *Interestingly, one can find a description of the leap-frog algorithm in R.P. Feynman, R.B. Leighton and M. Sands, in The Feynman Lectures on Physics*. 1963, Addison-Wesley.
- [53] Rahman, A., *Phys. Rev.*, 1964. 136: p. A405.
- [54] *ASTM E112-96 Method for Determining Average Grain Size*. 1996, ASTM International: West Conshohocken, PA, USA.
- [55] V. Randle and O. Engler, *Introduction to Texture Analysis: Macrotecture, Microtexture, and Orientation mapping*. 2nd ed. 2009, New York: CRC Press.



ข้อมูลประวัติคณะผู้วิจัย

ประวัติส่วนตัว

ชื่อ-สกุล..... ปัญญา จันทร์สุวรรณ.....

เพศ ชาย หญิง วันเดือนปีเกิด..... 2 พ.ค. 2517..... อายุ..... 41..... ปี

สถานภาพ โสด สมรส

ตำแหน่งปัจจุบัน อาจารย์

ประวัติการศึกษา

ชื่อย่อปริญญา	สาขา	สถาบันที่จบ	ปีที่จบ
ป.ตรี	วิศวกรรมเครื่องกล	จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย	2540
M.E.	Materials Sci. and Eng.	Lehigh University	2547
Ph.D.	Materials Sci. and Eng.	Lehigh University	2550

ทุนการศึกษาและทุนวิจัยที่เคยได้รับ

ปี พ.ศ.	ทุนการศึกษาและทุนวิจัย	สถาบันที่ให้
2553	ทุนโครงการสนับสนุนนักวิจัยใหม่ (วท)	สวทช
2555	ทุนพัฒนานักวิจัยใหม่	สจล
2558	ทุนโครงการส่งเสริมการวิจัยในระดับอุดมศึกษา	สกอ

ผลงานวิจัย

ผลงานวิจัยที่ตีพิมพ์เผยแพร่ (ระดับชาติและนานาชาติ)

[7] N. Kiatkangvanklai, W. Wongwiryapan, K. Laohhasurayotin, and P. Kansuwan "Microstructural Effects of Pre-aged Stainless Steels on Carbon Nanotube Growth." KMITL Science and Engineering Journal Vol.16, No.1 (2016).

[6] อัญชลี บุญเลิศ, อรุณา สันตวิธ, กรรณชัย กล้ายศิริ และ ปัญญา จันทร์สุวรรณ, กระบวนการอบอ่อนหลังความเครียดต่ำ-หนึ่งขั้น สำหรับการเพิ่มสัดส่วนขอบเกรนแบบ low- α CSLB ในเหล็กกล้าไร้สนิม 316L. วิศวกรรมลาดกระบัง ปีที่ 33 ฉบับที่ 1. มีนาคม 2559, หน้า 1-6. [5] สิทธิโชค ชำนาญอาสา, วัลลภา วงศ์วิริยะพันธ์, ปัญญา จันทร์สุวรรณ, การสังเคราะห์โครงสร้างนาโนคาร์บอนบนนิกเกิลจากแอลกอฮอล์ด้วยการอบการตกสะสมไอเคมี. วิศวกรรมลาดกระบัง ปีที่ 29 ฉบับที่ 4. ธันวาคม 2555 หน้า 61-66.

[4] Vikram V. Dabhade, Panya Kansuwan, and Wojciech Z. Misiolek "Consolidation of Aluminum powder during Extrusion", Int. J. Powder metallurgy, Vol.44, Iss.4 (2008) 27-36.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- [3] P. Kansuwan, T. Delph, and J. M. Rickman, "Biased diffusive transport and solute trapping near a crack", *Physical Review B*, 75:024106, 2007.
- [2] P. Kansuwan and J. M. Rickman, "Role of segregating impurities in Grain-boundary diffusion", *J. Chem. Phys.*, 126:094707, 2007.
- [1] M. Galanty, P. Kazanowski, P. Kansuwan, W. Z. Misiolek., "Consolidation of metal powders during the extrusion process", *Journal of Materials Processing Technology*, 125-126 (2002), pp. 491-496.

การเสนอผลงานวิชาการ

- [12] Ariyachi Mitnarai, Onuma Santawitee, Panya Kansuwan, "Grain boundary engineering for BCC crystal structure materials." Paper presented at The 6th TSME International conference on Mechanical Engineering, Regent Cha-Am beach Phetchaburi Thailand, 16-18 December 2015.
- [11] Sithichok Chamnan-Arsa, Onuma Santawitee, Anchalee Manonukul, Winadda Wongwiriyan, Panya Kansuwan, "The effect of CSL Grain boundary on the carbon nanostructure synthesis using Nickel substrate." Paper presented at The 8th international conference on Materials Science and Technology, Swissotel Le Concorde, Bangkok, Thailand, 15-16 December 2014.
- [10] Sithichok Chamnan-Arsa, Onuma Santawitee, Panya Kansuwan, "Grain boundary engineering of Nickel by iterative recrystallization." Paper presented at The 4th TSME International Conference on Mechanical Engineering, Pattaya, Chonburi, Thailand, 16-18 October, 2013.
- [9] Sithichok Chamnan-Arsa, Winadda Wongwiriyan, Panya Kansuwan, "The influence of substrate grain size on carbon nanotube growth." Paper presented at International Conference on Materials Processing Technology 2013, Bangkok, Thailand, 27-28 June 2013.
- [8] J. Prapai, et al. Preparation of Cu-based dry clutch by sintering. in The 8th International Conference on Automotive Engineering. 2012. Bangkok, Thailand.
- [7] J. Prapai, et al. Tribological properties of PM Cu-based dry friction clutch. in The 7th International Conference on Materials Science and Technology. 2012.
- [6] Sithichok Chamnan-Arsa, Winadda Wongwiriyan, and Panya Kansuwan, "Carbon nanotubes growth directly on nickel substrate using alcohol" The 2nd TSME International Conference on Mechanical Engineering, AMM07, Oct. 19-21, 2011, Krabi, Thailand.
- [5] Tanapat Wongwattanakornchai, Anchalee Manonukul, Panya Kansuwan, and Knio Takahashi, "Effect of the Purity of Nitrogen and Present of Sacrificial Magnesium on the Sinterability of Sintered

Aluminum Alloy (Al-Si-Cu-Mg)”, International Conference on Materials Processing Technology 2011, pp. 186-190, June 2-3, 2011, Phuket, Thailand

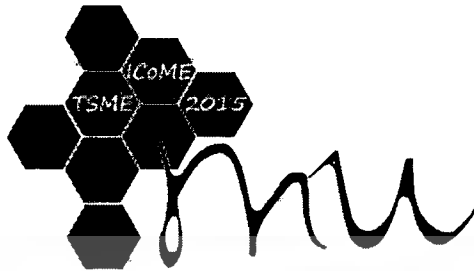
[4] Panya Kansuwan and Suttapat Kwankaomeng, “Performance and Emission of a Small Engine Operated with LPG and E20 Fuels”, TSME International Conference on Mechanical Engineering 2010, AEC004, October 20-22, 2010, Ubon Ratchatheni, Thailand.

[3] Panya Kansuwan and Wojciech Z. Misiolok, “Investigation of Pre-compacted Al Powder Billet Extrusion”, The 5th Thailand Materials Science and Technology Conference, pp.154-157, September 16-19, 2008, Thailand.

[2] กาทหลง บัวนาค ปัญญา ขันธุ์สุวรรณ และ จินดา เจริญพรพาณิชย์ “ผลกระทบของน้ำมันเบนซินผสมเอทานอลร้อยละ 20 ต่อชิ้นส่วนรถจักรยานยนต์”, การประชุมวิชาการเครือข่ายวิศวกรรมเครื่องกลแห่งประเทศไทยครั้งที่ 22, หน้า 121-127. 15-17 ตุลาคม 2551. มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ ศูนย์รังสิต.

[1] ประทาน ศรีชัย ปัญญา ขันธุ์สุวรรณ และ จินดา เจริญพรพาณิชย์ “ผลกระทบของน้ำมันเบนซินผสมเอทานอลร้อยละ 20 ต่อชิ้นส่วนรถยนต์”, การประชุมวิชาการเครือข่ายวิศวกรรมเครื่องกลแห่งประเทศไทยครั้งที่ 22 หน้า 128-133. 15-17 ตุลาคม 2551. มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ ศูนย์รังสิต.





**The 6th TSME International Conference
on Mechanical Engineering
Mahidol University**

**TSME-ICoME2015 Harmonized Engineering Technologies
16 – 18 December 2015
Regent Cha-Am Beach Resort Phetchaburi Thailand**

**Hosted by: Department of Mechanical Engineering,
Mahidol University
Cooperated by: Thai Society of Mechanical Engineering (TSME)**

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

AMM017

Grain boundary engineering for BCC crystal structure materials

Ariyachai Mitnarai¹, Onuma Santawitee², and Panya Kansuwan^{1*}

¹ Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineer, King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Bangkok, 10520, Thailand

² National Metal and Materials Technology Center, Klong Luang, Pathumthani, 12120, Thailand

* Corresponding Author: kkpanya@kmitl.ac.th

Abstract

The overall objective of this research program is to increase a fraction of low-sigma Coincident Site Lattice boundary (CSLB) in BCC materials and low carbon steel, AISI1010, was used as their representatives. Indeed, a series of annealing and straining was successfully applied for FCC materials. High fraction of annealing twinning was introduced during grain growth or recrystallization. However, the annealing twinning enhancement process is unique for FCC and major controlling mechanism in each material is different. For BCC materials, plane rotation or grain rotation becomes active. Long time exposure to low temperature range of small strained AISI1010 at 6% and 10% tensile elongation was conducted to activate the mechanism. Annealing temperature was at 400°C, 500°C and 600°C in a period time of 168 h and 504 h. After heat treatment, Kikuchi patterns were collected and interpreted by Electron back-scatter diffraction techniques. Software embedded in SEM can evaluate sigma-value of GBs using Brandon's criterion. Primary achievement is given 6 % of strain on specimen followed by with heat treatment at 600°C for 504 h. The maximum %CSL attained is 22.5%.

Keywords: Grain boundary engineering, BCC, Fine tuning

1. Introduction

A grain boundary (GB) is an interface plane existing between two grains, or crystallites, with disorientation of individual major axes [1]. GBs, though typically classified as 2D defects in a minor fraction within polycrystalline materials, tend to control many materials behaviors involving electronics and thermal conductivity, corrosion, mechanics and even magnetics. Such the influences of GBs are fundamentally advent from their open structure which provides fast atomic diffusion paths along GBs over those inside grains. To improve physical and mechanical properties of materials, certain diffusion mechanism must be abstained. It happens that not all GB behaves indistinctively. A special one with less free volume expresses favor character to enhance materials properties. These special boundaries are usually thought to be low- Σ value according to coincidence sites lattice (CSL) model [2, 3]. The amount of excess free volume is reflects by Σ -value which is the fraction of GB unit cell to a unit cell of a perfect crystal. Successful increment of the special GBs, measured in length fraction of the special GBs, have been introduced firstly to FCC materials in nickel [4-6], austenitic stainless steels [7-10] by thermo-mechanical process, later coined Grain boundary engineering [11]. This usually involves 2 major stages of accumulating stored elastic strain energy during plastic deformation and releasing the energy by atomic rearrangement yielding GB motion upon relaxation mechanism at an elevated temperature. Favorable routes fall into two classes i.e. 1) single or multiple strain-annealing and 2) single or multiple strain-recrystallization. Finally, the usefulness of the GBE is substantiated when subsequent studies have identifies superior behaviors

of GBEed materials in creep strength and rupture lifetime [12-16], intergranular corrosion cracking [9, 17, 18], ductility [19], as well as sensitization [20, 21].

However, little attempt on BCC materials have been conducted. A profound theoretical obstacle is that twin-induced mechanism is prohibited in the materials. However, plain steel usages in structural market place are enormous enough to tempt searching for specific GBE process to improve mechanical improvement worthwhile. As a result, only mechanism left to induce special boundary formation is fine tuning method which is operative by GB plane rotation and grain rotation. And this becomes the main objective in this research as an attempt to raise the fraction of special GBs in BCC materials. A simplest representative of the steels is chosen to be AISI1010 due to less complicated alloying elements. The results obtained would be certainly applied to other grades of structural carbon steels for longer lasting service time of BCC steels such as ferritic stainless steels and general high alloyed steels.

2. Experimental

As received low carbon steel AISI1010 (Cr-0.0802 Ni-0.0279 Mn-0.4332 C-0.1092) was prepared dimensionally to tensile specimens according to ASTM E8. The specimens were firstly strained to 6 and 10% elongation to introduce stored elastic strain energy resulted from dislocation density increment. After that, a series of annealing process was applied with tabulated details of process time and temperature in Table 1. All thermal treatments were conducted under ambient pressure in air.

ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

AMM017

These specimens were then cut into pieces with 10 mm thick for microstructure characterization by standard metallurgical polishing and etching. In addition to visual inspection using a Light Optical Microscopy, grain size and hardness measurement was also performed to ensure the consistency of used annealing condition.

Nevertheless, for grain boundary characterization, special surface preparation was performed using vibratory polishing. An electron back-scattering diffraction (EBSD) is the orientation measurement technique to capture Bragg diffracted back-scattered electrons from the specimen surface. Software within SEM can interpret the patterns automatically by Brandon's criterion into grain orientation and misorientation, the needed information to evaluate sigma-value of GBs.

was at 20.2 % with average Vicker hardness number at 108.9 HV. Fig.2 outlines the special boundaries of the as-received material.

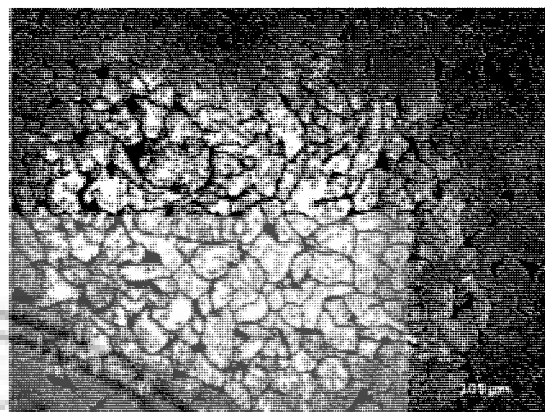


Fig.1 Optical micrograph of as-received at 20x magnification.



Fig.2 EBSD image showing random boundaries for as-received AISI1010 steel.

Table. 1 Details of fine tuning process employed

Sample	Strain (% elongation)	Annealing
As received	None	None
1	6%	400°C / 168 h
2	6%	400°C / 504 h
3	10%	400°C / 168 h
4	10%	400°C / 504 h
5	6%	500°C / 168 h
6	6%	500°C / 504 h
7	10%	500°C / 168 h
8	10%	500°C / 504 h
9	6%	600°C / 168 h
10	6%	600°C / 504 h
11	10%	600°C / 168 h
12	10%	600°C / 504 h

3. Results and discussion

An optical micrograph of the as-received material is shown in Fig.1. Its microstructure consisted of grains in average size of 27.7 μm using the linear intercept method. Measurement of special grain boundary fraction of low-Σ CSL boundaries (Σ3-29)

3.1 Effect of strain level on fraction of coincidence site lattice boundary

To investigate the effect of strain level on BCC material, the as-received material was strained to 6% and 10% tensile elongation and then annealing. A comparison of %CSL-strain relationships of the samples deformed for different strain values after annealed at 400, 500 and 600°C respectively is presented in Fig.3. Fig.3 shows that %CSL decreases with pre-straining values for all annealing time and temperature.

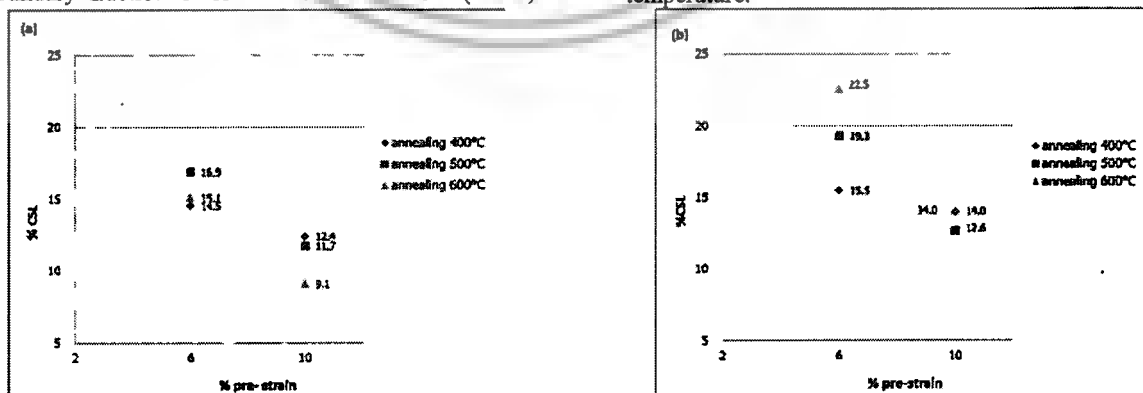


Fig.3 Effect of strain level on %CSL at 400, 500 and 600°C (a) for 168 h annealing time (b) for 504 h annealing time

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

AMM017

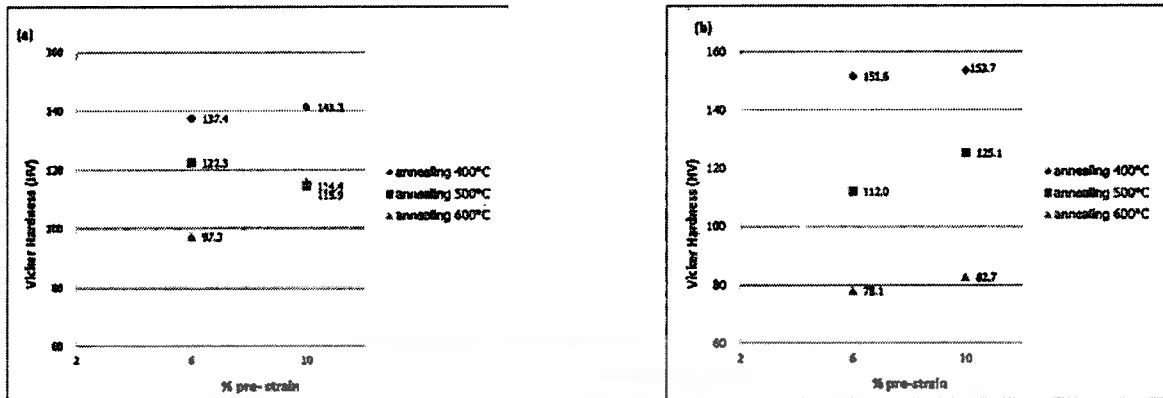


Fig.4 Vicker Hardness of processes samples at 400, 500 and 600°C
(a) for 168 h annealing time (b) for 504 h annealing time

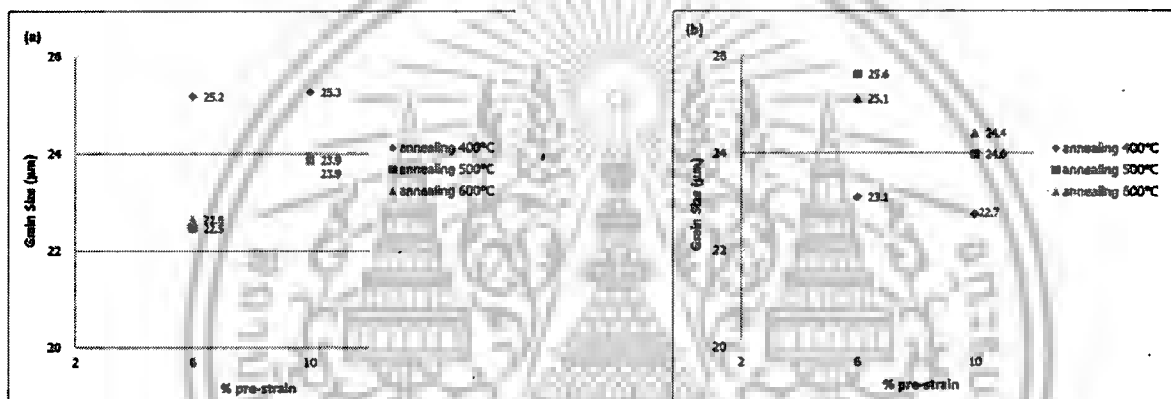


Fig.5 Average grain size of processed samples
(a) for 168 h annealing time (b) for 504 h annealing time

It is recognized in Fig.4 that the higher hardness values in 10% pre-straining samples at experimental annealing time and temperature occur due to typical strain hardening process even though their differences in values comparing to 6% straining samples are relatively small. However, the concern in this context becomes desirable in our case. Large straining usually produces dislocation entanglement which later forms substructure within grains. At low straining process, on the contrary, dislocations aggregate densely in the vicinity of grain boundaries. This structure associates with the openness characters of grain boundaries from which dislocations are absorbed or generated. "Which one does dominate" is still a controversial issue. Nevertheless, when higher fraction of $\Sigma 3-29$ boundary resulted in Fig.3 at low straining followed by long-time annealing while the same phenomenon was hardly seen at intermediate strain, the dislocation distribution at the GB which is distinct at the low level strain should come into our mind, i.e. the local dislocation density has played an-active role.

Upon annealing, given thermal bath activated local atomic rearrangement along grain boundary to reduce accumulated elastic strain energy. This leads to possible GBE mechanisms within BCC materials, i.e. grain boundary plane rotation or grain rotation. The former dominates inside the samples while grain

rotation is limited within bulk materials but more pronounced on surfaces. In searching for optimized parameters such as annealing time and temperature; trial and error seems to be best suited through experiments but general rules of thumbs exist. Small straining has to be introduced first to store some strain energy which later relieved by atomic rearrangement at GBs. The important issue is the extent of pre-straining and annealing temperature. The combination must not activate recrystallization or excessive grain growth. Small GB migration is permitted for structural adjustment of the GB to a lower GB energy state. This condition is satisfied where small grain growth occurs as shown in fig.5. Depending on annealing temperature and time, the fraction of low energy GB increase to a saturate point according to an equilibrium state of the system. The position could be deduced by hardness measurement (Fig.4). When limited grain growth, the lowest hardness value assumes that stored elastic strain energy have been used up to drive GB structure readjustment. This lowest hardness value at 78 HV was attained after annealing the sample at 600°C for 504 h (Fig.4b).

เอกสารนี้เป็นเอกสารสงวนลิขสิทธิ์ของงานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่นอญตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า

ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

AMM017

3.2 Effect of annealing temperature on fraction of coincidence site lattice boundary

The specimens were subjected to fine tuning process including sequential small 6% and 10% straining followed by annealing. A relatively low annealing temperature was chosen in order to induce local grain boundary equilibration type mechanisms rather than grain growth. A comparison of %CSL-annealing temperature relationships of the samples deformed for various annealing temperature at 400°, 500° and 600°C respectively is shown in Fig.6 which

indicates larger %CSL for low straining case. With 6% straining after 504 h, %CSL rises with annealing temperature from 15.5% at 400°C to 22.5% at 600°C. But for 10% straining, %CSL reduces from 12.4% at 400°C to 9.1% at 600°C after 168 h. Therefore, thermal energy alone is insufficient to achieve large fraction of special boundaries and a contribution from strain energy is required. Pronounced recovery instead of primary recrystallization, annealing temperature up to 500°C and more, was required to obtain a large fraction of CSL GBs.

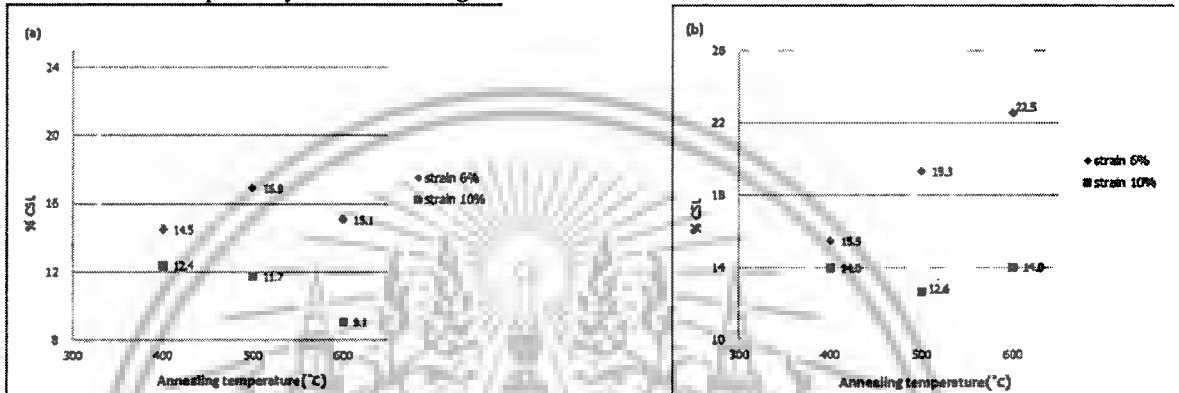


Fig.6 Effect of annealing temperature on %CSL at 400°, 500° and 600°C (a) after 168 h annealing time (b) after 504h annealing time

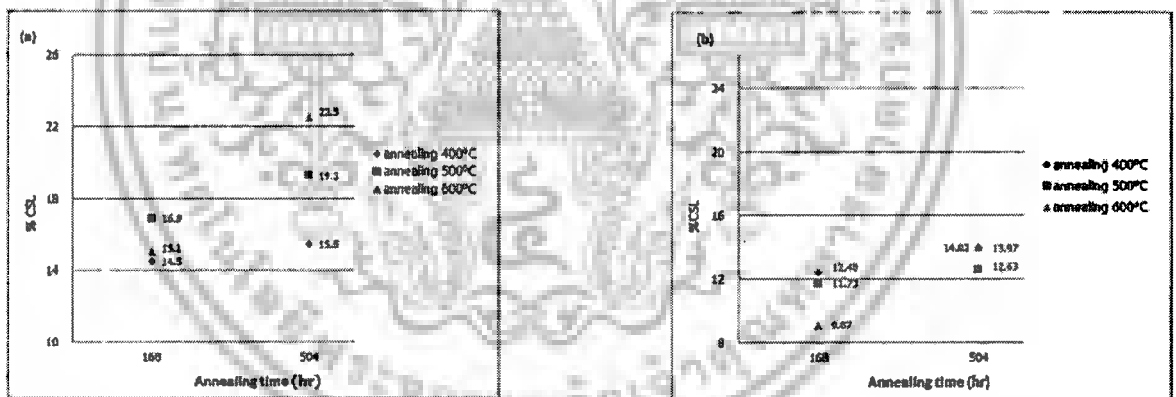


Fig.7 Effect of annealing time on %CSL at 400°, 500° and 600°C (a) with 6% pre-strain (b) with 10% pre-strain

3.3 Effect of annealing time on fraction of coincidence site lattice boundary

Upon annealing the specimens, the %CSL boundaries increase with extended annealing time. The comparison of %CSL-annealing time relationships of the samples deformed for various annealing time at 168 h and 504 h is shown in Fig.7. At 10% pre-straining, %CSL value slightly increases with annealing time from 168 h to 504 h. Their data show smaller standard deviations than the data of 6% pre-strained samples of which their tendency is stronger at higher annealing temperature. Longer annealing time was required for successful increment of %CSL in 6% pre-strained sample from 15.1 to 22.5. Without significant grain growth, small hardness reduction of

the sample should be noted. It is believed that dislocation density become less dense after annealing.

In the case of 10% pre-straining, both annealing time and temperature shown less influence on the %CSL fraction. The data is interpreted as entangled dislocation network formed commence to move inward grains. GBs becomes immobile as a consequence which result in limited grain growth (Fig.5). The change in Σ3-29 with increasing annealing time can be rationalized as an overall reduction of accumulated strains in the microstructure, which are associated with local lattice rotations.

4. Conclusions

1. Low temperature annealing treatments in low carbon steel AISI1010 with fine turning long

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านใด ๆ

ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

AMM017

annealing time exposure after low % pre-strain has produced improvements to the grain boundary population in terms of increasing %CSL by local plane reorientation rather than grain rotations. This indicates that the previously small strained samples produces dislocations which later are consumed by grain boundary migration which induce GB rotation to a special structural ones during annealed. Primary achievement is given 6 % pre-strain on specimen followed by heat treatment at 600°C for 504 h. The maximum %CSL attained is 22.5%.

2. Straining metallic samples permits generated dislocations to form polygonized subgrain structure. During fine turning, residual elastic strain energy resulting from plastic deformation dissipates. The major driving force for grain boundary migration is a thermal energy, but its effect on the increase of coincidence site lattices boundary is confined. Strain energy is also important to the formation of CSL boundaries. The recrystallization of low carbon steel is about 525°C. These new small grains and then nucleate at the cell boundaries, they will eliminate most of the dislocation. Dramatically reduce in number of dislocation. The recrystallized low carbon steel has low strength and hardness but high ductility.

3. The annealing time reduces grain size by minimizing the opportunity for grain growth. The long annealing periods were conducted to occur recrystallization or microstructure network conversion through grain boundary migration or re-orientation. Increasing the initial strain also reduces final grain size by providing a greater number of nucleation sites for new grains. This helps to prevent grain growth and keeps the recrystallized grain size small. By combination of strain annealing, %CSL increases. Thermal energy and time is effective in improving the fraction of special boundaries.

5. Acknowledgement

The authors are grateful to National Metal and Materials Technology Center (MTEC) for CSL measurement facility. Also financial supports from research funding program within the faculty of engineering, King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang is thankful.

6. References

- [1] Inderjeet Kaur, Yuri Mishin, and W. Gust, Fundamentals of Grain and Interphase Boundary Diffusion. 1995, Chichester: John Wiley & Sons Ltd.
- [2] E. R. Qian, Y. T. Chou, and E. A. Kamenetzky, J. Less Comm. Met., 1987. 134: p. 179.
- [3] A. P. Sutton and V. Vitek, Phil. Trans. Roy. Soc. Lond., 1983. A309: p. 1.
- [4] G.S. Was, J.K. Sung, and T.M. Angeliiu, Effects of grain boundary chemistry on the intergranular cracking

- behavior of Ni-16Cr-9Fe in high-temperature water. Metallurgical Transaction A, 1992. 23A: p. 3343-3359.
- [5] D. Horton, C. Thomson, and V. Randle, Aspects of twinning and grain growth in high purity and commercially pure nickel. Mater. Sci. Eng. A, 1995. 203: p. 408-414.
- [6] C. B. Thomson and V. Randle, A study of twinning in Nickel. Scripta Materialia, 1996. 35: p. 385-390.
- [7] R. J. Romero and L.E. Murr, Torque-related lamellar carbide growth associated with annealing twins in 304 stainless steel. Acta metall. mater., 1995. 43: p. 461-469.
- [8] V. Thaveprungsriporn, P. Sinsrok, and D. Thong-Aram, Effect of iterative strain annealing on grain boundary network of 304 stainless steel. Scripta mater., 2001. 44: p. 67-71.
- [9] M. Michiuchi, et al., Twin-induced grain boundary engineering for 316 austenitic stainless steel. Acta Materialia, 2006. 54: p. 5179-5184.
- [10] X. Fang, et al., Twin-induced grain boundary engineering in 304 stainless steel. Mater. Sci. Eng. A, 2008. 487: p. 7-13.
- [11] T. Watanabe, Approach to grain boundary design for strong and ductile polycrystals. Res. Mechanica., 1984. 11: p. 47.
- [12] E. M. Lehockey, et al., On improving the corrosion and growth resistance of positive Pb-acid battery grids by grain boundary engineering. Journal of Power Source, 1999. 78: p. 79-83.
- [13] Bogdan Alexandreanu and Gary S. Was, The role of stress in the efficacy of coincident site lattice boundaries in improving creep and stress corrosion cracking. Scripta Materialia, 2006. 54: p. 1047-1052.
- [14] S. Spigarelli, et al., Analysis of the creep strength of a low-carbon AISI 304 steel with low-sigma grain boundary. Materials Science and Engineering A, 2003. 352: p. 93-99.
- [15] Gary S. Was, Visit Thaveprungsriporn, and Douglas C. Crawford, Grain Boundary Misorientation Effects on Creep and Cracking in Ni-Based Alloys. JOM, 1998(February): p. 44-49.
- [16] Visit Thaveprungsriporn and Gary S. Was, The Role of Coincidence-Site-Lattice Boundaries in Creep of Ni-16Cr-9Fe at 360dC. Metallurgical and Materials Transaction A, 1997. 28A: p. 2101-2111.
- [17] M. Shimada, et al., Optimization of grain boundary character distribution for intergranular corrosion resistant 304 stainless steel by twin-induced grain boundary engineering. Acta Materialia, 2002. 50: p. 2331-2341.
- [18] G. S. Was, J. K. Sung, and T.M. Angeliiu, Effects of grain boundary chemistry on the intergranular cracking behavior of Ni-16Cr-9Fe in high-temperature water. Metallurgical Transaction A, 1992. 23A: p. 3343-3359.
- [19] V. Randle and H. Davies, Evolution of microstructure and properties in alpha-brass after iterative processing. Metall. Mater. Trans. A, 2002. 33(6): p. 1853.

เอกสารนี้เป็นเอกสารสงวนลิขสิทธิ์สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาค้นคว้าวิจัยโดยไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ทางการค้า

ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

AMM017

[20] B. W. Bennett and H.W. Pickering, Effect of Grain boundary structure in sensitization and corrosion of stainless steel. Metallurgical Transaction A, 1987. 18A: p. 1117-1124.

[21] Hiroyuki Kokawa, Masayuki Shimada, and Yutaka S. Sato, Grain-boundary structure and precipitation in sensitized austenitic stainless steel. JOM, 2000: p. 34-37.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้