باسمه تعالی

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده مهندسی مواد

سمینار دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد گرایش شناسایی و انتخاب

با عنوان:

مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتار سوپر الاستیک آلیاژ حافظه‌دار NiTi

ارائه دهنده: **پویان کریمی**

زمان ارائه: **۲۰ شهریور ۱۴۰۳** مکان: **کلاس ۲۲ دانشکده مهندسی مواد**

اعضای کمیته داوری:

استاد راهنما: **دکتر مسعود پنجه‌پور**

اساتید داور: **دکتر محمود مرآتیان، دکتر ابوذر طاهری‌زاده**

چکیده

آلیاژهای حافظه‌دار که در صنایع مختلف کاربرد دارند و خواص سوپرالاستیک و حافظه‌داری آن‌ها بسیار مورد تحقیق قرار گرفته است. دما و کرنش استحاله مارتنزیتی عوامل اصلی تأثیرگذار بر خواص این آلیاژها هستند. از شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی برای شناخت تأثیر این عوامل بر خواص این آلیاژ استفاده می‌شود. ازین رو توسعه مدل‌های جدید و افزایش دقت آن‌ها در شبیه‌سازی مقیاس اتمی این آلیاژ اهمیت زیادی بر تحقیقات در این زمینه دارد. به تازگی پتانسیل‌های اتمی داده‌محور جدیدی معرفی شده‌اند که از شبکه عصبی استفاده می‌کنند و می‌توانند نتایج شبیه‌سازی را بهبود بخشند. با این حال، تحقیقات کمی با این پتانسیل‌ها انجام شده و تأثیر عوامل ریزساختاری بررسی نشده است. بررسی خواص استحاله مکانیکی و دمایی فاز آستنیت می‌تواند به اطمینان از اعتبار این مدل‌های نوین کمک کند.

از همین رو، در این پژوهش با دو نگاه ظرفیت سنجی و بررسی عمیق‌تر به مطالعه تأثیر حضور مرزدانه در همسایگی چیدمان ایده‌آل ساختار آستنیتی پرداخته شده‌است. قدم اول در انجام این پژوهش، ساخت نانوستون‌هایی مکعبی به عرض ۲ نانومتر و ارتفاع‌های متفاوت به شکل ۲ دانه‌ای است که در مشخصه‌یابی خواص حرارتی و مکانیکی مورد استفاده قرار گرفته‌است. به منظور مطالعه این خواص ابتدا نمونه‌های مختلف با هدف سنجش و مطابقت با تحقیقات پیشین تحت چرخه سرمایش و گرمایش قرار گرفته‌اند. پس از تطبیق دماهای مرزی استحاله‌ی حرارتی با تحقیقات پیشین و در نتیجه راستی‌آزمایی مدل مورد استفاده حاصل شد. سپس به مطالعه بارگذاری مکانیکی در جهت [۰۰۱] کریستالی در نمونه‌های دو دانه‌ای پرداخته شد. همانا نمونه‌های دو دانه‌ای مذکور با اعمال تنش به شکل عمود بر مرزدانه تحت استحاله‌ی کرنشی مارتنزیتی قرار گرفته و شرایط مرزی آن‌ها بررسی شد. به علاوه در طول تغییر دما و اعمال کرنش، چیدمان اتمی توسط روش‌های تطبیق چندوجهی معین و تابع توزیع چگالی اتمی مورد بررسی قرار گرفته‌است. نتایج به دست آمده، تغییر مسیر استحاله کرنشی و وابستگی آن به اندازه دانه هماهنگی خوبی با نتایج تجربی دارند و این تغییر در بازه اندازه دانه ۱۶ تا ۲۰ نانومتری صورت می‌پذیرد. در نتیجه، دماهای استحاله حرارتی آستنیت به مارتنزیت و بالعکس با اطمینان پذیری بالا نسبت به تحقیقات پیشین حل عددی و حجم محاسباتی به شدت کمتر به دست آمده است. در ادامه تنش و کرنش آغاز و پایان استحاله مکانیکی و مدول الاستیک فاز آستنیت به دست آمده و تأثیر مستقل حداکثر فاصله از مرز بر نمودار تنش کرنش مورد بحث قرار گرفته است. در پایان با استفاده از آنالیز تنشی نمونه‌های موجود، کرنش استحاله در مدل شبه دوبعدی با نتایج آزمایشگاهی و حل عددی پیشین مورد مقایسه قرار گرفته‌است.

نتایج برجسته این پژوهش را می‌توان به دوبخش تقسیم کرد.: ۱-استفاده از مدل نانوستون دو دانه‌ای می‌تواند با حجم محاسبات بسیار کمتر از شبیه‌سازی‌های پیشین به یافتن با دقت بالای تأثیر اندازه دانه بر دمای استحاله منجر شود. ۲- تأثیر اندازه دانه بر تغییر مکانیزم استحاله مکانیکی با موفقیت شبیه‌سازی شده و تطبیق آن با تحقیقات تجربی پیشین نشان از درستی نتایج به دست آمده دارد. ۳- دینامیک مولکولی با استفاده از پتانسیل‌های بین اتمی داده‌محور دقت و توانایی بالایی در شبیه‌سازی این مواد داشته و توسعه هرچه بیشتر این مدل‌ها به کاهش قابل توجه حجم محاسبات و افزایش دقت و تعمیم پذیری نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی منجر شود.

کلمات کلیدی: آلیاژ حافظه دار، سوپرالاستیسیته، دینامیک مولکولی؛ پتانسیل بین اتمی شبکه عصبی، اندازه دانه