

عنوان مقاله:

بررسی رفتار مکانیکی یک کریستال بدون نقص نیکل در دماهای متفاوت با استفاده از روش دینامیک ملکولی

محل انتشار:

هفتمین همایش انجمن هوافضای ایران (سال: 1386)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

حامد عطاریانی - گروه مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، دانشجوی کارشناسی

علیرضا ستوده - استادیار

مصطفی خسرونژاد - دانشجوی کارشناسی ارشد

خلاصه مقاله:

در این پژوهش خواص مکانیکی یک بلور کریستالی بدون نقص نیکل در مقیاس نانو با استفاده از روش دینامیک ملکولی مورد محاسبه قرار گرفته است. برای نیل به این هدف ابتدا یک بلور کریستالی با ساختار شبکه کریستالی مکعب مرکز وجوه پر و سطح مقطع مربعی در ابعاد نانو مد سازی گردید. سپس با استفاده از روش دینامیک ملکولی و اعمال الگوریتم فشار ثابت تنشهای اولیه موجود در سیستم حذف شده و رفتار نمونه تحت بارمحوری کششی، شبیه سازی شده است. در این حالت خواص مکانیکی ماده از جمله تنش و کرنش تسلیم و مدول یانگ محاسبه شده و پدیده های کیفی همچون ایجاد ناجابجای یها و گلوبی شدن ماده به خوبی پیش بینی و نمایش داده شد. سپس اثر تغییرات دما بر روی خواص مکانیکی بلور مورد بررسی قرار گرفته است. در این حالت، دمای مد سازی از ۱۰۰ تا ۵۰۰ کلوین تغییر داده شده و تغییرات ثابت الاستیک، تنش و کرنش تسلیم به ازاء دماهای متفاوت محاسبه گردیده است. در نهایت تاثیر پارامتر نسبت حجم به سطح بر زوی تنش تسلیم بلور مورد مطالعه قرار گرفته است. برای این منظور تنش تسلیم کششی چهار نانو کریستال بدون نقص نیکل با سطح مقطع های متفاوت در دمای ۳۰۰ کلوین محاسبه شده و تغییرات آن با نسبت حجم به سطح بررسی شده است.

کلمات کلیدی:

کریستال بدون نقص - دینامیک ملکولی - تست کشش - دما

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/55412>

