

# اندازه‌گیری و شبیه‌سازی رفتار کششی آلومینیوم نانو ساختار حاوی ذرات آلومینا به روش اجزای محدود

سارا ادیبی<sup>۱</sup>، سعید ضیایی راد<sup>۲\*</sup> و فتح اله کریم زاده<sup>۱</sup>  
۱. دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان  
۲. دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه صنعتی اصفهان

(دریافت مقاله: ۱۳۹۰/۸/۱۹ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۷/۴)

Al6061-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

چکیده-

واژگان کلیدی:

---

\*: مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی: szrad@cc.iut.ac.ir

# Fabrication, Measurement and Mechanical Property Evaluation of Nanocomposite Al6061-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Using Finite Element Method

S. Adibi<sup>1</sup>, S. Ziaei-Rad<sup>2</sup> and F. Karimzadeh<sup>1</sup>

1. Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology

2. Department of Material Engineering, Isfahan University of Technology

**Abstract:** In this paper, a technique for fabrication of nanocomposite Al6061-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is presented. Next, the mechanical properties of the nanocomposite are obtained by experimental and simulation techniques. The volume of alumina is 0-3% in nanocomposite. Since the yield and hardness of nanocomposite are grain dependence, the Hall-Petch relation is used. Different unit cell methods are utilized to simulate the stress-strain diagram of the nanostructured aluminium and nanocomposite Al6061-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in simple tension test. To do the modeling, a unit load is applied on the unit cell and the stress and strain in all nodes are homogenized to derive the stress-strain curve of the whole cell. A good degree of correlation is observed between experimental and predicted data. The results also indicate that the use of unit cell and embedded unit cell for modeling nanocomposites is both simple and powerful.

**Keywords:** Nanocomposite; Alumina particles; Finite Element Method; Hall-Petch Effect; Simple Tension Test

## ۲- پژوهشها در زمینه مدل‌سازی نانو کامپوزیت‌های

### ذره‌ای

امروزه گسترش دادن مفاهیم از تغییر شکل مواد معمولی کریستالی به موادی با ابعاد نانومتری یک موضوع اساسی است. با وجود اینکه چندین مکانیزم برای این تغییر شکل پیشنهاد شده است ولی هنوز اختلاف‌های بسیاری بین جوامع تحقیقاتی وجود دارد. در اکثر بررسی‌ها رابطه هال-پیچ که توسط چوشی در سال ۱۹۸۹ ارائه شده است، استفاده می‌شود.

تحلیلها در سطح اتمی نشان می‌دهد که در ابعاد نانو همه تغییر-شکل در مرز دانه‌ها اتفاق افتاده، در حالی که در اندازه دانه‌های بزرگتر، تغییر شکل عمدتاً در درون دانه‌ها و به دلیل وجود نابجایی خواهد بود. بر این اساس میز و همکاران برای سازگاری تنش در کریستال‌های مجاور، مدل هسته و ملات را ارائه کردند [۴]. ایده اصلی این مدل این است که تغییر شکل در یک دانه، مرکب از دو قسمت است:

(۱) هسته یا درون دانه

(۲) ملات یا ناحیه مرز دانه

مدل پیشنهاد شده مبنای کاری بسیاری از مدل‌سازیهای بعدی قرار گرفته و فرمولبندی مناسبی از آن برای کل ماده ارائه شده است. در این مدل، ضخامت ناحیه مرزی برای همه اندازه

## ۱- مقدمه

به دلیل وجود دانه‌های بسیار ریز در مواد نانو کریستال و همچنین قرار گرفتن کسر بالایی از اتمها در مرز دانه، خواص این مواد در مقایسه با همین مواد در حالت درشت دانه متفاوت و در اکثر موارد برتر است. خواص مواد نانو ساختار بستگی به سه عامل مهم دارد که عبارتند از [۱]:

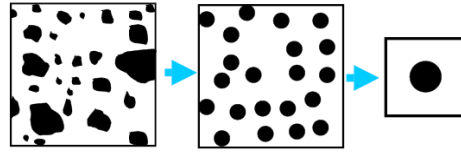
(الف) اندازه دانه‌ها یا فازهای تشکیل دهنده ماده.

(ب) ساختار یا طبیعت فصل مشترکهای موجود در آن شامل مرز دانه‌ها و فصل مشترکهای بین فازی.

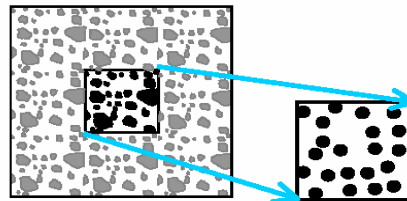
(ج) ترکیب شیمیایی ماده.

البته در برخی موارد ممکن است تنها یکی از عوامل فوق نقش غالب در تعیین خواص ماده‌ی نانو ساختار را به عهده داشته باشد [۲].

خواص مکانیکی مواد نانو ساختار به طور عمده تحت تأثیر وجود فصل مشترکهای گسترده و حضور کسر بالایی از اتمها در این مناطق است. علاوه بر این، عواملی نظیر شکل، توزیع و اندازه فازها، میزان ناخالصیها و چگالی نواقص کریستالی، بر روی رفتار مکانیکی مواد نانو ساختار مؤثرند. همچنین خلل و فرج و یا ترک در مواد نانو ساختار که عموماً در طی فرایندهای ساخت ایجاد می‌شوند، می‌توانند بسیاری از خواص مکانیکی مواد نانو ساختار را تغییر دهند [۳].



شکل ۱- شماتیکی از مدل سلول واحد با یک آخال و روند ایدئال سازی یک کامپوزیت تقویت شده ذره‌ای



شکل ۲- سلول واحد با چندین آخال

مواد، با میکروساختارهای پیچیده با مطالعات عددی یا تحلیلی بر رفتار برخی برشهای میکروساختار است. فرض اصلی این است که میکروساختار کل ماده را می‌توان به صورت تکرار برش مفروض در نظر گرفت و در نتیجه آن، برش خاص معرف میکروساختار کلی ماده است. برش تکرار شونده از ماده، با توجه به امکانات محاسباتی می‌تواند بسیار ساده و یا بسیار پیچیده باشد. در اینجا چند نمونه از انواع مختلف سلول تکرار شونده معرفی می‌شود:

◀ سلول واحد با یک آخال: می‌توان مدل ماده را آنقدر ساده کرد که آن را به صورت یک تک سلول در آورد. شکل (۱) شماتیکی از ایدئال سازی میکروساختار ماده (ایدئال سازی شکل آخالها) از حالت واقعی تا مدل سلول واحد با یک آخال را نشان می‌دهد.

◀ سلول واحد با چند آخال: یک مدل پیشرفته‌تر از مدل سلول واحد، سلول با چندین آخال است. در این مدل فرض مربوط به ساختار تکرار شونده برای گروهی از رشته‌ها یا ذرات در نظر گرفته می‌شود. شماتیکی از ایدئال سازی میکروساختار ماده به سلول واحد با چندین آخال، در شکل (۲) مشاهده می‌شود. استفاده از این مدل سبب می‌شود که توزیع واقعی تر و تصادفی تر رشته‌ها یا ذرات نسبت به قبل بررسی شود.

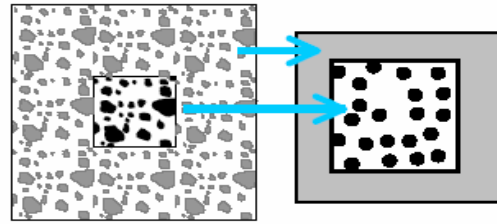
◀ سلولهای جاسازی شده: ارتباط بین برش خاص ماده که در سلول واحد می‌آید و بقیه ماده، تنها با فرض تکرار شونده بودن میکروساختار لحاظ نمی‌شود. برای مثال، میکروساختار نواحی همسایه باید همچنان روی میدان تنش و کرنش در برش مدل شده مؤثر باشند؛ که برای مدل سلول واحد معمولی در نظر گرفته نمی‌شود. یک راه در نظر گرفتن ارتباط بین برش ماده و بقیه آن، استفاده از مدل سلول جاسازی شده است. در این روش، سلول واحد از میکروساختار در یک حجمی از ماده با خواص کامپوزیت جاسازی می‌شود. شکل (۳) شماتیکی از سلول جاسازی شده را نشان می‌دهد.

دانه‌ها یک مقدار ثابت است. بنابراین با کوچک شدن اندازه دانه، نسبت حجمی ناحیه مرزی افزایش می‌یابد. هنگامی که اندازه دانه تا حد نانو کریستال کاهش می‌یابد، مرزدانه (ملات) بر جریان پلاستیک اثر می‌گذارد. دامکین [۵] دو نوع اساسی از معادلات ساختاری برای مواد مطرح کرد:

۱- مدل‌های مهندسی یا تجربی که به وسیله منطبق کردن معادلات مدل با نتایج تجربی حاصل می‌شود و در آن فرایندهای فیزیکی اثرگذار در رفتار ماده، لحاظ نمی‌شود.  
۲- معادلات فیزیکی مواد که در آنها برای استخراج معادلات ساختاری، از اطلاعات فرایندهای فیزیکی رفتار ماده استفاده می‌شود. مدل کریستال پلاستیسیته و نظریه چگالی نابجایی از این دست‌اند.

آناند در مرزدانه‌ها مدل تماس در نظر گرفته و برای آن لغزش و جدایش را فرموله کرده است [۶]. با این مدل، او توانسته است نقطه شکست قطعه را نیز مدل سازی کند. مشاهدات نشان داد که با کاهش اندازه دانه، اثر مرزدانه پررنگتر می‌شود. در مدل فوو همکاران [۷]، مرزدانه به صورت ناحیه‌ای با ضخامت محدود مدل شده است. شروع تغییر شکل پلاستیک، به دلیل تغییر جهات کریستالی در ناحیه مرزدانه است. میشناوسکی [۸] از روشهای تقریبی مدل سازی سلول واحد برای میکروساختار استفاده کرد. چارچوب این روش، مطالعه رفتار

زمینه پلیمر با ذرات تقویت کننده سیلیکا پرداختند. آنها با استفاده از شبیه سازی اجزای محدود، تأثیر نوع فصل مشترک و خواص آن، اندازه مرزدانه و دانه مربوطه را در خواص نهایی نانوکامپوزیت بررسی کردند. نتایج بیانگر نقش مهم مرزدانه و خواص آن بر روی خواص نهایی نانوکامپوزیت است [۱۱].



### ۳- ساخت نمونه ها

نانوکامپوزیتهای مورد استفاده به روش متالورژی پودر تهیه شده اند که در ادامه توضیح مختصری از نحوه ساخت آنها بیان می شود.

#### ۳-۱- تهیه پودر نانوساختار فاز زمینه

آلیاژ Al6061 متعلق به گروه آلیاژهای آلومینیم با نماد 6xxx است. سیلیسیم و منیزیم از جمله مهمترین عناصر آلیاژی در آن محسوب می شوند. مشخصه ی این آلیاژ، مقاومت عالی در برابر خوردگی، دارا بودن خاصیت جوش پذیری بسیار مطلوب و قابلیت جوشکاری با تمام شیوه های جوشکاری در مقایسه با آلیاژهای دیگر آلومینوم، عملیات گرمایی پذیری بودن و قابلیت کارپذیری بیشتر است. از جمله کاربردهای این آلیاژ می توان به ارابه ی فرود هواپیما، قایق و اجزای ماشین ابزار اشاره کرد [۱۲].

رویکرد جدید در ساخت کامپوزیتهای زمینه آلومینوم و استفاده از تقویت کننده های سرامیکی نانومتری در زمینه نانوساختار سبب افزایش ۲۰ درصدی استحکام نسبت به میکروکامپوزیتها و نیز بهبود چشمگیر شکل پذیری و مقاومت به سایش شده است [۲].

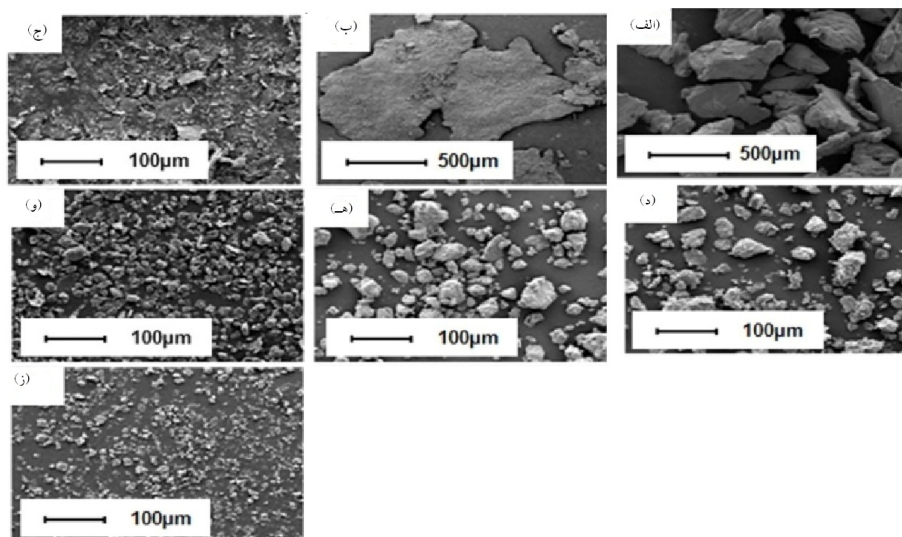
براده های آلیاژ زمینه با نسبت گلوله به پودر ۱۰ به ۱ و اتمسفر حفاظتی گاز آرگون (خلوص ۹۹/۹۹ درصد) در یک آسیاب گلوله ای سیاره ای، تحت فرایند آسیاب کاری مکانیکی و با سرعت چرخش ۵۰۰ دور بر دقیقه قرار گرفته اند. گلوله ها از جنس فولاد پرکرم-کربن و قطر هر کدام ۲۰ میلیمتر است. به منظور جلوگیری از چسبیدن ذرات پودر به جداره محفظه آسیاب و نیز گلوله ها، مقداری اسید استتاریک به عنوان عامل

شکل ۳- سلول واحد جاسازی شده

میسکویکس و همکاران روابط همسازی در میکروساختار را بیان کردند [۸]. هنگامی که یک میکروساختار مدل سازی می شود، آنچه به دست می آید رفتار جزئی ماده یعنی میکروتش و میکرو کرنشها در اجزای کوچک ماده است. ولی خواص ماکرو یعنی تنش کلی یا ماکرو تنش برای کل ماده بایستی مشخص شود. برای تبدیل خواص میکرو به ماکرو در کل ساختار مدل شده با روابط بیان شده در این مرجع میانگین گیری می شود.

کدخدایور و همکاران با استفاده از مدل های ذکر شده در بالا به بررسی رفتار مواد نانوساختار مختلف پرداختند؛ و سپس نتایج حاصله را با نتایج آزمایشگاهی مقایسه کردند. نتایج بیانگر اعتبار استفاده از مدل های فوق بود. در ادامه با استخراج معادلات ساختاری بر اساس نظریه نابه جایی برای شبیه سازی نانوساختارها (نانوکریستالها و نانوکامپوزیتها) مدل دیگری برای استخراج منحنی تنش-کرنش ماده به دست آوردند. در مدل اصلاح شده آنها اثر نرخ کرنش را نیز در معادلات خود وارد کردند [۹].

یداله پور و همکاران به مدل سازی آزمون میرایی و کشش در مواد نانوکامپوزیت ذره ای با استفاده از شبیه سازی میکروساختار پرداختند [۱۰]. آنها در مدل خود برای ماده زمینه (درون دانه) یک رابطه تجربی (مهندسی) الاستوپلاستیک در نظر گرفته که در آن اثر اندازه دانه به کمک رابطه هال-پیچ لحاظ شده است. ناحیه مرزی نیز به صورت یک ناحیه شبه متخلخل فرض شده است. مدل مورد استفاده، همخوانی مناسبی با نتایج تجربی از خود نشان داده است. بوتالاب و همکاران نیز اخیراً در تحقیقی با استفاده از مدل سازی میکرو مکانیک به بررسی سختی و تنش تسلیم در نانوکامپوزیت



شکل ۴- مورفولوژی اولیه‌ی آلیاژ Al6061 و پودرهای آسیاب‌شده‌ی Al6061 پس از زمانهای (ب) ۴ ساعت (ج) ۵ ساعت (د) ۶ ساعت (ه) ۱۰ ساعت (و) ۲۰ ساعت و (ز) ۳۰ ساعت

تشکیل می‌دهند. با ادامه آسیاب‌کاری مکانیکی و در اثر تغییر شکل پلاستیکی بیشتر، نابه‌جاییهای جدید ایجاد می‌شوند و مرزهای فرعی و سپس مرزهای اصلی به وجود می‌آیند که دانه‌های اولیه را به دانه‌های کوچکتر تقسیم می‌کند [۳].

پس از انجام آسیاب‌کاری مکانیکی آزمون پراش پرتو ایکس برای ارزیابی تغییرات ساختاری ذرات پودر در حین آسیاب‌کاری، توسط دستگاه پراش سنج فیلیپس با ولتاژ ۴۰kV و پرتوی  $Cu K\alpha$  انجام شد. اندازه دانه‌های آلومینیم و کرنش شبکه در هر مرحله از آسیاب‌کاری از طریق پهن‌شدن عرض قله‌ها و با استفاده از فرمول ویلیامسون-هال به دست آمد [۱۳]. تغییرات پارامتر شبکه آلومینیوم با به‌کارگیری روش اندازه‌گیری دقیق پارامتر شبکه و با در نظر گرفتن پنج پیک مربوط آلومینیوم مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل برای هر دو نوع پودر زمینه در جدول خلاصه شده‌است. همچنین، از میکروسکوپ الکترونی روشی مدل فیلیپس XL30 به منظور بررسی تغییرات مورفولوژی و اندازه ذرات Al2024 در زمانهای مختلف آسیاب‌کاری، استفاده شده است.

کنترل‌کننده‌ی فرایند به محتویات محفظه آسیاب اضافه شده‌است. به منظور بررسی رفتار ذرات پودر در حین آسیاب‌کاری، این فرایند در زمانهای مختلف صورت گرفته‌است. سپس پودر نانو ساختار زمینه به منظور بررسی رفتار پیرسختی و پایداری گرمایی تحت عملیات گرمایی تک‌دما در محدوده دمایی و زمانی مختلف در محفظه حفاظت‌شده توسط گاز آرگون قرار می‌گیرد. مورفولوژی ذرات پودر زمینه آلیاژ Al6061 را پس از زمانهای مختلف آسیاب‌کاری نشان می‌دهد. مطابق با شکل (۴)، در اثر تغییر شکل پلاستیکی ذرات پودر، دانه‌ها ریزتر شده و کرنش شبکه‌ی آلومینیوم افزایش می‌یابد. همان‌طور که اشاره شد در اثر اعمال تغییر شکل پلاستیکی شدید، چگالی نواقص کریستالی به ویژه نابه‌جاییها در ساختار ذرات افزایش می‌یابد. در همین حال فرایندهای بازیابی در اثر افزایش موضعی دمای ذرات پودر اتفاق می‌افتد که کاهش چگالی نواقص کریستالی و آرایش جدید آنها را به دنبال دارد. در اثر این فرایندها، نابه‌جاییها به تدریج یک ساختار سلولی را

جدول ۱- پارامترهای اندازه‌گیری شده از الگوهای پراش پرتو ایکس ذرات پودر زمینه پس از عملیات آسیاب کاری مکانیکی

پارامتر شبکه ( $A^\circ$ )	اندازه دانه (nm)	کرنش شبکه	
۴/۰۷۷	۳۵	٪ ۰/۴۳	آلیاژ Al6061

### ۲-۳- آماده سازی فاز تقویت کننده

درصدهای حجمی مختلف فاز تقویت کننده توسط دستگاه آلتراسونیک مدل پاورسونیک 405 (ساخت کشور کره) تحت عملیات آلتراسونیک قرار گرفته‌اند. آلتراسونیک، با هدف توزیع یکنواخت فاز تقویت کننده و جلوگیری از آگلومراسیون آنها در حین آسیاب کاری و تهیه قطعات انجام می‌پذیرد [۲].

### ۳-۳- آماده سازی پودر نانوکامپوزیت

هدف ساخت قطعات نانوکامپوزیت حاوی درصدهای حجمی مختلف از فاز تقویت کننده است. پارامترهای مؤثر در کیفیت قطعه نهایی (کیفیت ظاهری، چگالی نسبی، سختی و ...) مدت زمان آسیاب کاری پودرهای نانوکامپوزیتی، دما، فشار و مدت زمان انجام پرس‌اند. لذا از چند سیکل متفاوت برای تهیه قطعه نانوکامپوزیت استفاده می‌شود. سپس با مشخصه‌یابی قطعات حاصله سیکل بهینه انتخاب می‌شود.

در این سیکل‌ها فاز تقویت کننده به همراه پودر نانوساختار زمینه توسط دستگاه همزن (مدل هیدولف MR200)<sup>۱</sup> با یکدیگر به مدت زمان مشخص مخلوط می‌شوند. سپس این مجموعه به مدت زمان معین در آسیاب گلوله‌ای سیاره‌ای، آسیاب کاری می‌شود. در ادامه پودرهای نانوکامپوزیت حاصله تحت سیکل‌های مختلف تهیه قطعات بالک قرار می‌گیرند. پودرهای نانوکامپوزیتی آسیاب کاری شده توسط دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی مدل وگا/تسکن<sup>۲</sup> مرکز پژوهش متالوژی رازی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. مشخصه‌یابی آنها امکان تعیین سیکل بهینه برای ساخت

قطعات نانوکامپوزیت را می‌دهد [۲].

### ۴-۳- ساخت قطعات نانوساختار

در این مرحله پودر نانوساختار زمینه تحت فشار، دما و زمان معین با استفاده از پرس داغ تک‌محوره در یک قالب از جنس فولاد گرم‌کار X40CrMoV51 (AISI H13) به قطعات دیسکی شکل با قطر ۵ سانتیمتر و ضخامت ۱/۵ سانتیمتر تبدیل می‌شود. این قالب از سه قسمت مجزا تشکیل شده‌است که عبارت‌اند از:

بدنه قالب به شکل استوانه توخالی با قطر داخلی ۵ سانتیمتر، قطر خارجی ۱۰ سانتیمتر و ارتفاع ۱۵ سانتیمتر که مجهز به اجزای گرم‌کننده برای افزایش دماست. سنبه قالب که عمل فشردن مواد درون قالب را انجام می‌دهد.

قسمت انتهایی قالب که به صورت جداشونده و به منظور سهولت در خروج قطعه فشرده شده طراحی شده است.

از جمله پارامترهای مؤثر در فرایند پرس داغ می‌توان به دما، فشار و مدت زمان انجام پرس اشاره کرد. علاوه بر پارامترهای مذکور، مدت زمان آسیاب کاری پودرهای نانوکامپوزیتی نیز اثر قابل ملاحظه‌ای بر روی کیفیت قطعه نهایی (مانند کیفیت ظاهری، چگالی نسبی، سختی و ...) می‌گذارد؛ لذا با در نظر گرفتن این پارامترها، چند فرایند مختلف برای ساخت نانوکامپوزیتها تعریف می‌شود. این فرایندها بر روی یکی از نانوکامپوزیتها به عنوان ترکیب میانی انجام می‌شود. مشخصه‌هایی که برای یافتن شرایط ساخت بهینه قطعه بالک از آنها استفاده می‌شود عبارت‌اند از چگالی نسبی قطعات و تغییرات سختی. با انجام آزمونهای سختی‌سنجی و تعیین چگالی نسبی فرایند ساخت بهینه از میان روشهای فوق انتخاب شده و قطعه نانوساختار و نیز سایر نانوکامپوزیتها با درصدهای حجمی مختلف بر اساس آن تولید می‌شوند [۱۴]. کلیه فرایندهای انجام شده برای بهینه‌سازی ساخت نانوکامپوزیتها تهیه شده در جدول ارائه شده‌است.

جدول ۲- مشخصات سیکل بهینه مربوط به تولید نانوکامپوزیت

زمان پرس	فشار پرس	دمای پرس	زمان آسیاب کاری	
(دقیقه)	(MPa)	(°C)	(ساعت)	
۳۰	۱۲۸	۴۰۰	۱۵	Al6061- Al2O3

درصدهای حجمی مختلف از فاز تقویت کننده، با استفاده از فرورونده ویکرز تحت نیروی ۱۰ کیلوگرم مورد ارزیابی قرار گرفته است. جدول (۳) نتایج حاصل از سختی سنجی را بیان می کند.

افزایش قابل ملاحظه سختی آلیاژ در شرایط نانو ساختار به دلیل کاهش اندازه دانه ها و کرنش داخلی شبکه آلومینیوم در اثر انجام فرایند آسیاب کاری مکانیکی است. همچنین حضور فازهای سخت بین فلزی در ساختار آن در حین سرد شدن از دمای پرس داغ می تواند عامل دیگری برای افزایش سختی این آلیاژ باشد [۱۶]. در محدوده ۰-۳ درصد حجمی از نانوذرات آلومینا با توجه به مقدار تقریباً ثابت چگالی نسبی، سختی نانوکامپوزیتها افزایش می یابد. از جمله دلایل افزایش سختی می توان به توزیع یکنواخت تقویت کننده ها در زمینه اشاره کرد. اما در مقادیر بیشتر، کاهش چگالی نسبی و در نتیجه کاهش سختی را برای نانوکامپوزیتها به همراه دارد. علت این است که در درصدهای حجمی بالا، فاز تقویت کننده به صورت توده ای و درهم پیچیده در آمده و از چگالش مطلوب نانوکامپوزیت در حین پرس داغ جلوگیری می کند [۱۵].

#### ۲-۴- آزمون فشار در نرخ کرنش 1 min-1 برای یافتن منحنی الاستوپلاستیک تنش-کرنش فشاری نمونه

نمونه های آزمون فشار قطعات نانو ساختار و نانوکامپوزیتها ی حاوی درصد حجمی مختلف فاز تقویت کننده بر اساس استاندارد ASTM E9-89a تهیه و تحت آزمون فشاری تک محور قرار گرفتند. بدین منظور، نمونه های استوانه ای کوتاه از این قطعات با نسبت تقریبی طول به قطر ۲ به ۱ از دیسکهای تولید شده، ساخته شد و تحت آزمون فشار قرار گرفتند. آزمون فشار

#### ۴- روشهای ارزیابی و آزمونهای انجام شده بر روی

##### نمونه ها

به دلیل اهمیت اثر تخلخل بر روی خواص مکانیکی قطعه به ویژه سختی و سایش، در این مرحله چگالی نسبی قطعات با هدف تخمین میزان تخلخل در آنها محاسبه و تعیین می شود. به منظور تعیین چگالی نسبی قطعات تولید شده از روش ارشمیدس استفاده شده است. نتایج نشان می دهد که چگالی نسبی نمونه های نانوکامپوزیتی تقریباً برابر ۹۸ درصد است. این مقدار نسبتاً بالای چگالی نسبی می تواند ناشی از پر شدن میکرو حفره های موجود در میان ذرات پودر در اثر قرارگیری فاز تقویت کننده در آنها باشد؛ هرچند که به دلیل دوجزبی شدن سیستم، چگالی نسبی در مقایسه با نمونه بدون تقویت کننده کمتر است [۱۵].

برای شبیه سازی این فرایند علاوه بر مشخصات هندسی و کارکردی سیستم مورد مطالعه، نیاز به یک سری پارامترهای آزمایشگاهی برای ورودی نرم افزار ANSYS است. به همین دلیل آزمایشهای زیر بر روی نمونه نانو کامپوزیت Al6061- Al2O3 حاوی ۲٪ فاز تقویت کننده انجام گرفته است:

#### ۴-۱- آزمون میکروسختی

آزمون با استفاده از فرو رونده ویکرز تحت نیروی ۱۰ کیلوگرم برای یافتن سختی نمونه ها مورد نیاز برای به دست آوردن ضریب سایش بی بعد از نتایج مربوط به ضریب سایش بعددار نمونه انجام شد. سختی قطعات نانو ساختار و نانوکامپوزیتها ی حاوی

جدول ۳- نتایج حاصل از آزمون میکروسختی برای نمونه‌های مورد آزمایش

Al6061- Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>			Al6061-nc	Al6061-T6	Al6061-O	
% vol	!% vol	% vol				
۲۳۰	۲۱۰	۱۸۰	۱۵۷	۹۸	۵۷	میکروسختی (HV)

جدول ۴- نتایج حاصل از آزمون فشار برای نمونه‌های مورد آزمایش در نرخ کرنش  $1 \text{ min}^{-1}$

Al6061- Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>			Al6061-nc	Al6061-T6	Al6061-O	
% vol	% vol	% vol				
۶۴۵	۶۲۶	۶۲۰	۵۹۵	۳۱۵	۱۱۲	استحکام فشاری (MPa)
۶۲۰	۵۹۵	۵۹۰	۵۶۵	۲۵۱	۵۵	استحکام تسلیم (MPa)
۷۸/۳	۷۶	۷۵	۶۹	۶۸/۹	۶۸/۹	ضریب الاستیک (GPa)
-	۵/۷	۶/۳	۷/۵	-	-	کرنش شکست (%)

آمده است.

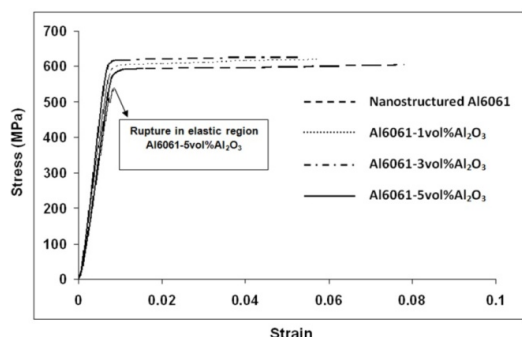
برخلاف افزایش چشمگیر استحکام نهایی و استحکام تسلیم فشاری، ایجاد ساختار نانو در آلیاژ اثر چندانی بر روی ضریب الاستیک نداشته است. این مطلب با توجه به اینکه ضریب الاستیک هر ماده توسط نیروهای اتصال اتمها تعیین می‌شود و عملیات گرمایی و یا کار سرد تأثیر کمی بر روی این ضریب دارند [۱۸]، قابل توجیه است. در پژوهشهای متعدد علمی [۱۹]، اثر ایجاد ساختار نانو بر روی ضریب الاستیک مورد بررسی قرار گرفته است که در آنها نتایج متفاوتی شامل کاهش و یا عدم تغییر ضریب الاستیک در اثر ایجاد ساختار نانو گزارش شده است. کاهش ضریب الاستیک در برخی از پژوهشها به دلیل وجود عیوب ساختاری به ویژه تخلخل در نمونه گزارش شده است. بدین ترتیب عدم کاهش ضریب الاستیک آلیاژ نانو ساختار می‌تواند نشان دهنده چگالش مطلوب این آلیاژ در حین فرایند پرس داغ باشد [۱۴].

در سه نرخ کرنش  $1 \text{ min}^{-1}$ ،  $1 \text{ min}^{-1}$  و  $10 \text{ min}^{-1}$  با استفاده از دستگاه نوع اینسترون مدل هانسفیلد H50KS<sup>۳</sup>، بر روی قطعات مذکور انجام گرفته است. آزمون فشار در دمای اتاق انجام و ورقهای تفلون نیز برای کاهش میزان اثرات اصطکاک بین فک و نمونه استفاده شدند. جدول (۴) نتایج حاصل از آزمون فشار نمونه‌های مختلف را نشان می‌دهد.

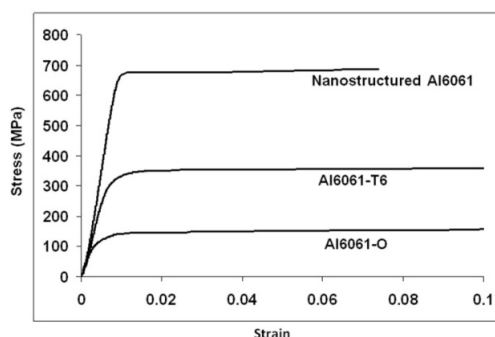
در ادامه نمودارهای مربوط به آزمون فشار نمونه‌ها در جدول (۵-الف) و (۵-ب) آورده شده است.

نتایج بیانگر این است که استحکام فشاری نهایی آلیاژ نانو ساختار، بیشتر از آلیاژهای درشت‌دانه در شرایط آنیل و پیرسازی مصنوعی است. استحکام فشاری بالای نمونه نانو ساختار به دلیل ریزش اندازه دانه‌ها در حین فرایند آسیاب کاری مکانیکی است [۱۷]. مقادیر استحکام تسلیم فشاری با استفاده از روش آفست و با در نظر گرفتن مقدار کرنش مشخص  $0.2\%$  مطابق با روش ارائه شده در مرجع [۱۸] به دست





شکل ۵- (ب) نمودار تنش بر حسب کرنش حاصل از آزمون فشار در شرایط نرخ کرنش  $0.01 \text{min}^{-1}$  برای قطعات نانوکامپوزیت Al6061-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>



شکل ۵- (الف) نمودار تنش-کرنش حاصل از آزمون فشار در شرایط نرخ کرنش  $1 \text{min}^{-1}$ ، برای قطعات Al6061-O، Al6061-T6 و Al6061 نانوساختار

- استفاده از یک مدل کامپوزیت که در آن مرزدانه برای توضیح تغییر خواص استفاده شده است.

#### ۵-۱- مدلسازی آزمون کشش

در این قسمت از ایده مدل سلول واحد برای مدلسازی ماده نانوساختار استفاده شده است. این مدل در حقیقت مربوط به خواص یک ماده نانوساختار است که با توجه به مطالب ارائه شده، به صورت مدل کامپوزیتی در نرم افزار ANSYS مدلسازی می شود. این سلول واحد شامل درون دانه و ناحیه مرزی است. همان طور که از شکل بر می آید با توجه به فرضی که برای ایجاد مدل سلول واحد بیان شده است، در مرزهای پایین و چپ شرط تقارن محوری لحاظ می شود. علاوه بر این، همه گره ها در مرز سمت راست باید جابه جایی یکسان در برای عمود بر سطح داشته باشند. اعمال شرط به سادگی در نرم افزار امکان پذیر است. این شرط که آن را شرط پریودیک بودن نیز گویند در محاسبات سلول واحد بسیار اساسی است و در حقیقت بیانگر آن است که با تکرار تعداد نامحدودی از این سلول واحد می توان کل جسم را بازسازی کرد. در صورت عدم اعمال آن سطح خارجی سلول در طول آزمون تغییر شکل یافته و در سلول پدیده گلوپی شدن (در کشش) و خمره ای شدن (در

#### ۵- روش اجزای محدود

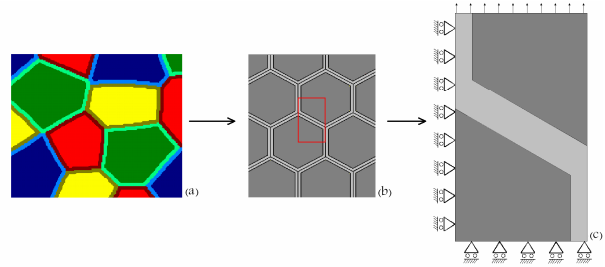
روش اجزای محدود یک روش مدلسازی پیوسته است و از این-رو مقیاس طولی ذاتی ندارد و تأثیر مقیاس طولی باید در محاسبات اجزای محدود مدل های مواد وارد شود. نبود مقیاس طولی ذاتی در مدل های اجزای محدود، از نظر محاسباتی با ارزش است زیرا اجازه می دهد شبیه سازی سیستم های کریستالی با چندین بعد متفاوت، تقریباً حجم محاسباتی یکسانی داشته باشند.

در ابعاد نانومتری، مطلب اصلی این است که آیا مدل پیوسته معتبر است یا نه؟ برای نمونه، مدل کریستال پلاستیسیته بر اساس حرکت نابه جاییها است. ولی ابعاد دانه های مجزا در یک ماده نانوکریستال ممکن است آنقدر کوچک باشند که ساختارهای نابه جایی قدیمی وجود نداشته باشند یا اینکه به روش کلاسیک رفتار نکنند.

اثر اندازه دانه در روش اجزای محدود لحاظ نمی شود. اثر اندازه باید با مدل ماده برای شبیه سازی تعریف شود. تعریف کردن اثر اندازه در شبیه سازی معمولاً به کمک یکی از دو روش زیر صورت می گیرد:

- دوباره نویسی معادلات ساختاری به طوری که اثر اندازه در آنها در نظر گرفته شود.

در معادله (۲)،  $\sigma_e$  تنش مؤثر پلاستیک فون میز است و  $\varepsilon_p^p$  کرنش مؤثر پلاستیک است. رابطه دوم نیز تنش تسلیم  $\sigma_y^{(g)}$  را با اندازه دانه ارتباط می دهد. در مطالعات مکانیک پیوسته [۱۹] برای ناحیه مرزی (مرزدانه) یک رفتار شبه متخلخل لحاظ می شود. رفتار ماده متخلخل به صورت منحنی کاملاً پلاستیک بیان می شود. تنش تسلیم این ماده در دامنه  $E/80$  تا  $E/50$  است که  $E$  ضریب الاستیک ماده متخلخل است.  $E$  هم مساوی با  $60$  تا  $75$  درصد ضریب الاستیسیته ماده معمولی است. تا اینجا مدلی بر مبنای تحلیل تغییر شکل موادی و تحلیل دینامیک مولکولی ماده تهیه شد [۱۰].



شکل ۶- مدل سلول واحد برای ماده نانو ساختار

فشار) به وجود می آید که باعث عدم پیوستگی در کل سیستم و نادرستی در محاسبات می شود [۱۰].

## ۲-۵- تعیین اندازه برای مدل

نکته مهم تحلیل در این حوزه تعیین ابعاد و اندازه مناسب می باشد. در این شیوه تغییر خواص ماده بر اثر تغییر اندازه دانه، بر مبنای تغییر نسبت حجمی مرزدانه مدل می شود. با در نظر گرفتن یک ساختار سه بعدی مکعبی برای دانه نسبت حجمی ناحیه مرزی با معادله (۱) تخمین زده می شود:

$$GBvol\% = \left(1 - \frac{(d_G - d_{GB})^3}{d_G^3}\right) \times 100\% \quad (1)$$

در این معادله  $d_G$  اندازه دانه و  $d_{GB}$  ضخامت ناحیه مرزی است. مطالعات دینامیک مولکولی اندازه ناحیه مرزی به اندازه ۷ تا ۱۰ پارامتر شبکه را پیشنهاد می دهد [۱۰]. در مدل سازی میزان نسبت حجمی بر اساس ۱۰ برابر اندازه پارامتر شبکه مورد استفاده قرار گرفته است.

## ۳-۵- اختصاص دادن خواص به مواد

به عنوان فرض اولیه برای درون دانه، معادله الاستوپلاستیکی استفاده شده است، که در آن به کمک معادله هال-پیچ (۲) اثر اندازه دانه لحاظ شده است [۱۰].

$$\begin{aligned} \sigma_e^p &= \sigma_y^{(g)} + h_g \cdot \varepsilon_p^p \\ \sigma_y^{(g)} &= \sigma_y^{\infty(g)} + k \cdot d^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (2)$$

## ۴-۵- همسان سازی در میکروساختار

با مدل سازی میکروساختار، رفتار جزیی ماده به بیان دیگر تنش و کرنش در اجزای کوچک ماده به دست می آید که به آن میکروتنش و میکروکرنش گفته می شود. برای تبدیل خواص میکرو به ماکرو، باید در کل ساختار میانگین گیری کرد. بنابراین تنش ماکروسکوپی در کل ماده با معادله (۳) بیان می شود [۱۱]:

$$T = \frac{\int \sigma dV}{V} \quad (3)$$

در صورتی که مدل سازی به روش اجزای محدود باشد، رابطه (۴) به دست می آید.

$$T = \frac{\sum \sigma V}{V} \quad (4)$$

که در آن  $n$  تعداد اجزا و  $V_n$  حجم  $n$  امین جزء و  $V$  حجم کل سیستم است. به طور مشابه کرنش ماکروسکوپی می تواند با معادله (۵) به دست آید.

$$E = \frac{\sum \varepsilon V}{V} \quad (5)$$

در محاسبات معمولاً از مقادیر مؤثر تنش و کرنش استفاده می شود که به ترتیب از معادلات زیر به دست می آیند [۱۰]:

جدول ۵- پارامترهای مورد نیاز برای مدل‌سازی اجزای محدود به

روش سلول واحد

ضخامت مرزدانه	پارامتر شبکه	اندازه دانه
پارامتر شبکه $\times 0/85$	$0/4077 \text{ nm}$	$46 \text{ nm}$

### ۶-۱- فرضیات مدل‌سازیها

همان‌طور که اشاره شد، برای مدل‌سازی سلول واحد نیاز به اندازه دانه و پارامتر شبکه است. اندازه دانه در نظر گرفته شده، اندازه دانه ماده نانو ساختار Al6061 بعد از انجام عملیات پرس داغ است. مشخصات طبق جدول از نتایج آزمایشگاهی استخراج و برای مدل‌سازی به کار می‌رود.

### ۶-۲- ابعاد مدلها

برای مدل‌سازی مدل سلول واحد با تک‌آخال، هدف مدل‌سازی یک سلول با در نظر گرفتن تقارنهای موجود است. اندازه‌های در نظر گرفته شده برای مدل‌سازی بر همین مبنا انتخاب شده است. بنابراین برای سلول واحد با تک‌آخال از مستطیلی با ابعاد  $1/5$  برابر اندازه دانه و  $\sqrt{3}/2$  برابر اندازه دانه استفاده شده است. ضخامت مرزدانه نیز همان طور که در قسمت قبل بیان شد  $0/85$  اندازه پارامتر شبکه است. بر اساس معادله (۱) و مقادیر جدول (۵)، درصد حجمی مرزدانه برای ماده آلومینیم نانو ساختار برابر با  $2/24$  درصد است.

برنامه نوشته شده برای مدل‌سازی سلول واحد با چند آخال قابل اجرا بر روی هر تعداد سلول واحد است. در مدل‌سازیهای سلول واحد با چند آخال از مدلی با تعداد  $6 \times 9$  سلول واحد استفاده شده است. در مدل‌سازی سلول واحد جاسازی شده، قسمتی از مدل مستطیلی با تعداد  $5 \times 4$  سلول واحد که یک ربع از مدل کلی است و  $3/4$  مدل، بخش همگن ماده است که خواص آن از نتایج شبیه‌سازی سلول واحد با چندین آخال به دست آمده است.

### ۶-۳- نوع اجزا

مدل‌سازیها به صورت دوبعدی و با انتخاب اجزای کرنش- صفحه‌ای صورت می‌گیرد. اجزای در نظر گرفته شده، Plane 82 است.

$$E_{eqv} = \sqrt{\frac{2}{3}} e_{ij} e_{ij} \quad (6)$$

$$e_{ij} = \varepsilon_{ij} - \left(\frac{1}{3}\right) \varepsilon_{kk}$$

$$\sigma_{eqv} = \sqrt{\frac{3}{2}} \sigma'_{ij} \sigma'_{ij} \quad (7)$$

$$\sigma'_{ij} = \sigma_{ij} - \left(\frac{1}{3}\right) \sigma_{kk}$$

در این مطالعه، عملیات همسان‌سازی در مدل‌هایی که با نرم‌افزار ANSYS ایجاد شده است صورت می‌گیرد. در مدل نرم‌افزار ANSYS پس از پایان حل در هر گام حل، اندازه تنش مؤثر و کرنش مؤثر برای همه اجزا با برنامه‌نویسی در نرم‌افزار استخراج می‌شود. سپس نتایج حاصله با نوشتن برنامه دیگر میانگین‌گیری شده و یک نقطه را روی نمودار تنش-کرنش مشخص می‌کند. با تنظیم و انجام چند گام حل منحنی تنش-کرنش ماده حاصل می‌شود.

### ۶- شبیه‌سازی آزمون کشش برای آلومینوم

#### نانوساختار

در این قسمت برای مدل‌سازی رفتار کششی ماده آلومینوم نانو ساختار یعنی زمینه نانوکامپوزیتها از سه نوع مدل، سلول واحد با تک آخال، سلول واحد با چندین آخال و سلول واحد جاسازی شده استفاده می‌شود. در نهایت با انجام شبیه‌سازیها، منحنی تنش-کرنش ماده حاصل می‌شود. سپس منحنیهای به دست آمده با نتایج موجود در گزارشات مقایسه می‌شود.

#### ۴-۶- مشخصات مواد

همان‌طور که قبلاً ذکر شد، برای ناحیه درون‌دانه خواص الاستوپلاستیک از رابطه هال-پیچ که به اندازه دانه نیز وابسته است استفاده شده است. مشخصات مربوطه برای مدل سازی آلومینیوم نانو ساختار از مرجع [۱۱] و در جدول آمده است. برای ناحیه مرز دانه نیز رفتار شبه‌آمورف یعنی رفتار الاستوپلاستیک کامل در نظر گرفته می‌شود. پارامترهای مربوط به مدلسازی ناحیه مرز دانه در جدول (۷) آمده است [۱۱].

#### ۷-۶- نوع حل

نوع حل به صورت غیرخطی است و با اعمال نیروی واحد و تنظیم پارامترهای حل برای رسیدن به دقت دلخواه، نیروی اعمالی را به مقادیر کوچکتر شکسته و در هر مرحله نیرو کمی زیادت‌تر می‌شود. مقدار اضافه‌شدن نیروی اعمالی به صورت خودکار توسط پارامترهای حل تنظیم می‌شود تا همگرایی لازم ایجاد شود.

#### ۵-۶- شبکه بندی

شکل (۷) نحوه شبکه بندی در حالت سلول واحد با تک آخال، شکل (۸) نحوه شبکه بندی در حالت سلول واحد با چندین آخال و شکل (۹) نحوه شبکه بندی در حالت سلول واحد جاسازی شده را نشان می‌دهد. نتایج حاصل برای تعداد اجزا و گره‌های لازم برای شبکه بندی پس از بررسی و تحقیق همگرا بودن شبکه بندی به دست می‌آید. جدول (۸) مشخصات شبکه بندی نهایی هر سه مدل را بیان می‌کند.

#### ۸-۶- پس پردازشگر

در هر مرحله مقادیر تنش- کرنش حاصل از حل مسئله در کل ناحیه حجم محدود مفروض، میانگین گیری می‌شوند و با توجه به آن، یک نقطه از نمودار تنش- کرنش به دست می‌آید. بدین ترتیب، پس از اتمام کلیه مراحل حل نمودار تنش- کرنش ماده به دست می‌آید.

کلیه مراحل فوق با برنامه نویسی در نرم افزار ANSYS صورت می‌گیرد. برنامه‌ها به صورت پارامتری نوشته شده است و می‌توان تأثیر هر یک از متغیرها را در خروجی برنامه مشاهده نمود. بنابراین قابلیت استفاده از آنها بسیار گسترده است. نتایج مربوط به مقادیر کرنش پلاستیک این مدل سازیها در شکل نشان داده شده است.

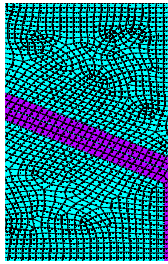
#### ۶-۶- شرایط مرزی

همان‌طور که گفته شد در مدل‌های موجود، در سمت چپ و پایین شرط مرزی تقارن محوری وجود دارد. در سمت راست مدل‌ها نیز شرط مرزی کوپل بودن همه گره‌ها اعمال می‌شود، بدین ترتیب همه گره‌ها در این قسمت باید جابه‌جایی یکسان در جهت عمود بر سطح داشته باشند تا سطح خارجی در طول آزمون، تغییر شکل نیافته باقی بماند. این شرط در محاسبات سلول واحد بسیار اساسی است، زیرا در سلول واحد پدیده گلوئی شدن (در کشش) و خمیره‌ای شدن (در فشار) وجود ندارد. در قسمت بالای مدل هم نیروی کششی واحد اعمال می‌شود. با انجام حل غیرخطی مدل، مقدار نیروی کششی در هر گام زمانی شکسته می‌شود و در هر گام زمانی مقداری از آن بر نمونه وارد می‌شود.

در این شکل تمرکز کرنش پلاستیک در مرز دانه به خوبی مشخص است و این همان موضوعی است که در تحلیل موادی تغییر شکل به آن اشاره شده است. شمای کرنش پلاستیک در مدل سلول واحد با چندین آخال مزیتش را نسبت به مدل سلول واحد با تک آخال نشان می‌دهد. در سلول واحد با تک آخال، تمرکز کرنش پلاستیک در ناحیه مرزی دیده می‌شود، اما مدل سلول واحد با چندین آخال تمرکز تنش در نقطه تقاطع سه‌گانه مشاهده می‌شود که خیلی از تحلیلهای تغییر شکل روی تأثیر آنها تأکید دارند. سلول واحد جاسازی شده در حقیقت ارتباط این جزء کوچک جدا شده با ماده اصلی را با دقت بیشتری مدل می‌کند، یعنی سلول واحد در فضایی از ماده همگن قرار می‌گیرد و بعد کل ساختار بارگذاری می‌شود.

جدول ۶- پارامترهای مدل سازی برای درون دانه

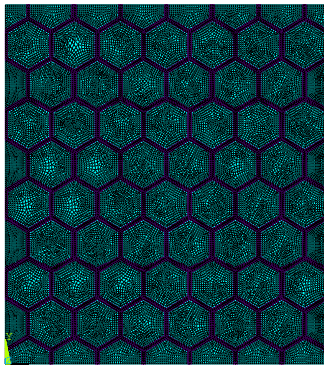
E(GPa)	/
$\nu$	/
$\sigma_y^\infty$ (MPa)	
$K$ (GPa $\sqrt{nm}$ )	/
$h_g$ (GPa)	/



شکل ۷ - شبکه بندی سلول واحد با تک آخال

جدول ۷- پارامترهای شبیه سازی برای مرز دانه

E(GPa)	/
$\nu$	/
$\sigma_y$ (MPa)	
Flow Stress	(کاملاً پلاستیک) ۷۲۷

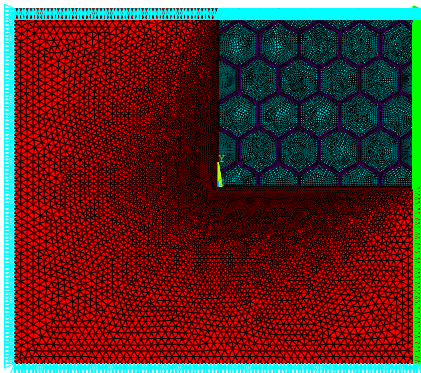


جدول ۸- مشخصات شبکه بندی مدل های سلول واحد برای

شبیه سازی نانو ساختار آلومینیوم

	تعداد المانها	تعداد گره ها
سلول واحد با تک آخال	۲۰۰۲	۶۱۹۵
سلول واحد با چندین آخال	۳۷۳۱۷	۱۰۲۳۴۴
سلول واحد جاسازی شده	۲۸۲۲۹	۶۷۶۲۲

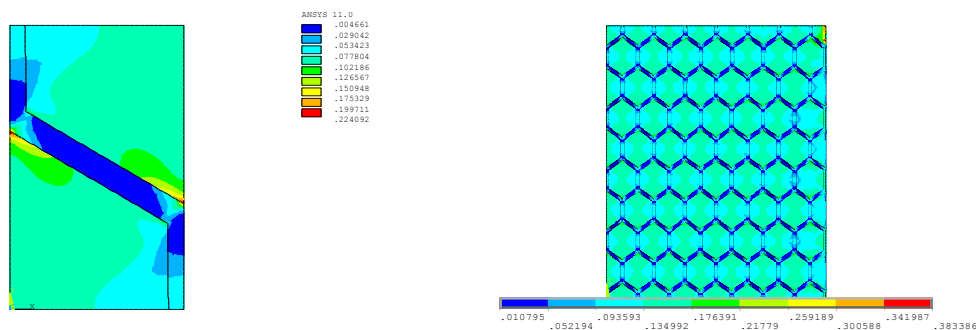
شکل ۸ شبکه بندی مدل سلول واحد با چندین آخال



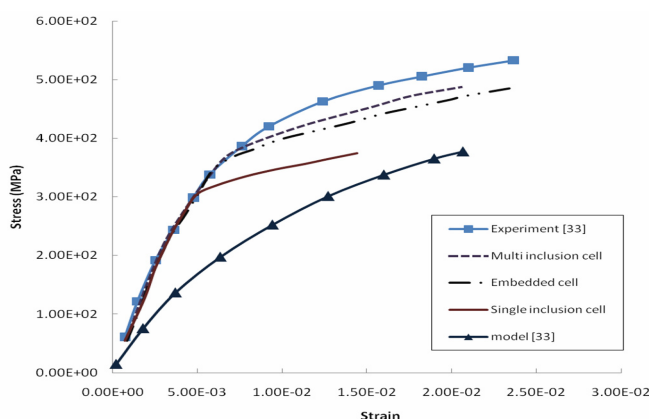
شکل ۹- شبکه بندی مدل سلول واحد جاسازی شد

در مدل سلول واحد آنچه مورد توجه قرار گرفته است نسبت حجمی ناحیه مرزی به کل ماده است. این نکته هرچند به عنوان یک تقریب کلی قابل قبول است ولی برای مدل سازی دقیق مورد پذیرش نیست. در حقیقت فلسفه اولیه مواد نانو افزایش نسبت سطح به حجم است در حالی که در مدل سلول واحد با تک آخال، باز ناحیه مرزی و درون دانه از هم جدا در نظر گرفته می شود و به نسبت هایی کنار هم قرار داده می شود. برای مدل دقیق تر می توان از مدل سلول واحد با چندین آخال استفاده کرد. همان طور که در شکل پیدا است ضخامت ناحیه مرزی ثابت (۷ تا ۱۰ برابر اندازه پارامتر شبکه) است و با کوچک شدن اندازه دانه به علت افزایش تعداد دانه ها در یک فضای معلوم درصد حجمی ناحیه مرزی زیاد می شود.

در نمودارهای تنش- کرنش آلومینیوم نانو ساختار شکل (۱۱) با مدل سازی سلول واحد با تک آخال، سلول واحد با چندین آخال و سلول واحد جاسازی شده را نشان می دهد. این نمودارها با مقادیر گزارش شده در مرجع [۱۰] مورد مقایسه قرار گرفته اند. همان طور که در شکل مشاهده می شود، نتایج



شکل ۱۰ - شمای کرنش پلاستیک مؤثر در مدل سازی سلول واحد با تک آخال و سلول واحد جاسازی شده



شکل ۱۱ - مقایسه نمودارهای تنش-کرنش آلومینیوم نانو ساختار

در مدل امکان بر همکنش بین آنها نیز به گونه ای دقیقتر محاسبه می شود و لذا پیش بینی می شود که نتایج با نتایج واقعی تطابق بهتری داشته باشند. البته این کار مستلزم صرف وقت بیشتر و حجم زیاد محاسبات بالاتری است.

## ۷- مدل سازی رفتار کششی نانوکامپوزیت ذره ای زمینه فلزی

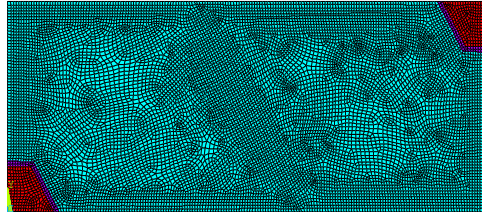
در این قسمت برای استخراج منحنی تنش-کرنش نانوکامپوزیت ذره ای از مدل سلول واحد استفاده شده است. مدل در نظر گرفته شده در این قسمت تحت بارگذاری واحد همانند قسمت قبل قرار داده می شود. در نهایت هم با همگن سازی در

مدل سازی با نرم افزار با تقریب خوبی با نتایج تجربی مطابقت دارند. نتایج نشان می دهند که استفاده از مدل سلول واحد با چندین آخال یا سلول واحد جاسازی شده تطابق بهتر نسبت به مدل سلول واحد با اطلاعات تجربی دارند. ابتدا باید متذکر شد که کلیه مدل های ارائه شده در این تحقیق مدلی پیوسته برای ماده ای است که در ساختار واقعی خود بر مبنای ساختار مولکولی بنا شده است. بنابراین تبیین کامل و دقیق رفتار این ماده با روابط ساده الاستوپلاستیک تقریباً ناممکن است و روابط پیچیده هم تنها تا حدی می توانند این رفتار را پیش بینی کنند.

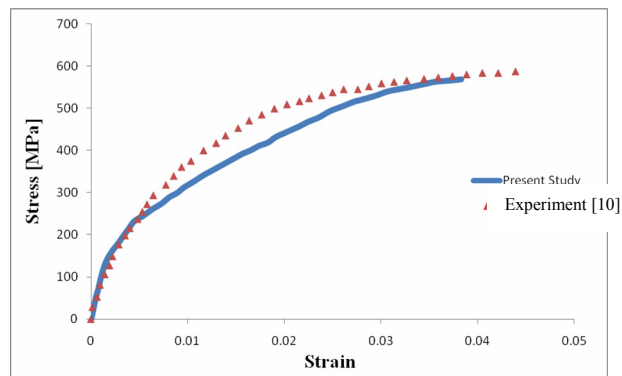
بنابراین باید انتظار داشت که مدلها بتوانند رفتار ماده را تا حدی درست بیان کنند که این مطلب از منحنیهای شکل (۱۱) نیز قابل برداشت است. با بزرگتر کردن مدل و جا دادن تعداد زیادتری سلول

جدول ۹- پارامترهای مدل‌سازی نانوکامپوزیت ذره‌ای

۴۱	(nm) اندازه دانه زمینه
۳۰	(nm) اندازه دانه آلومینا
۴/۰۷۷	(nm) پارامتر شبکه آلومینیوم
پارامتر شبکه $\times ۰/۸۵$	ضخامت لایه مرزی



شکل ۱۲- شبکه‌بندی مدل اجزای محدود ماده نانوکامپوزیت ذره‌ای



شکل ۱۳- نمودار تنش-کرنش ماده نانوکامپوزیت ذره‌ای

در نظر گرفته می‌شود و خواص آلومینا هم از جدول (۹) استخراج می‌شود. شبکه‌بندی مدل در شکل (۱۲) نشان داده شده است. مراحل حل و پس پردازشگر در دو مدل موجود هم همانند قسمت قبلی تعریف می‌شود.

نمودار تنش-کرنش مربوط به ماده نانوکامپوزیت ذره‌ای به دست آمده از روش سلول واحد در شکل (۱۳) با نمودار مرجع [۱۰] مقایسه شده است. شکل بیانگر انطباق مناسب نتایج است.

داخل حجم محدود مورد نظر، نمودارهای تنش-کرنش به دست می‌آید. نتایج مشابهی نیز برای مدل سلول جاسازی شده حاصل شد. برای مدل سلول واحد نیاز به اندازه دانه و پارامتر شبکه دو جزء موجود در نانوکامپوزیت است. طبق نتایج آزمایشگاهی انجام شده خواص اختصاص داده شده طبق جدول (۹) هستند.

نوع اجزاء نیز در این مدلها، اجزای دوبعدی صفحه‌ای از نوع کرنش صفحه‌ای‌اند. خواص ماده زمینه نیز همانند مدل قبلی

## ۸- نتیجه گیری

می تواند بسیار کارآمد باشد.

برای شبیه سازی آزمون کشش در نمونه های نانوساختار از مدل سازی سلول واحد استفاده می شود. نتایج به دست آمده بیانگر مناسب بودن این روش برای استخراج منحنی مشخصه این ماده است. با مقایسه نتایج با نتایج آزمون فشاری مشاهده می شود که استحکام نهایی و تسلیم کششی نمونه ها پایینتر از استحکام تسلیم و نهایی فشاری نمونه هاست که این مطلب بیانگر وجود تخلخل و تردبودن نمونه ها است.

در گزارش حاضر به بررسی دو موضوع نانو کامپوزیتها و روشهای مختلف مدل سازی آنها پرداخته شد. در ابتدا، مروری کوتاه بر این دو مقوله صورت گرفته و جایگاه و اهمیت بررسی روی آنها مشخص شد. در ادامه با توجه به اهمیت استفاده از یک روش مدل سازی معتبر در کنار داده های آزمایشگاهی برای بهینه سازی و تخمین عمر کاری سیستمها، انواعی از مدل های مطالعه شده تا کنون مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که استفاده از مدل سازیهای به روش سلول واحد و سلول جاسازی شده برای مدل سازی نانو کامپوزیتها در کنار ساده بودن

## واژه نامه

1. Heidolph MR2002
2. Vega\Tescan
3. Hounsfield H50KS

## مراجع

1. Mamalis, A.G., Vogtländer, L.O.G., and Markopoulos, A., "Nanotechnology and nanostructured Materials: Trends in Carbon Nanotubes," *Precision Eng.*, Vol. 28, pp. 16–30, 2004.
۲. حسینی، ن.، تولید و مشخصه یابی نانوکامپوزیت Al-Mg-Si/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>، دانشکده مواد، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۸۸.
۳. عنایتی، م. ح.، مواد نانوساختار، انتشارات دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۸۶.
4. Meyers, M.A., Mishra, A., and Benson, D.J., "Mechanical Properties of Nanocrystalline Materials," *Progress in material science*, Vol. 51, pp. 427-556, 2006.
5. Domkin, K., *A Constitutive Model for Powder-Processed Nanocrystalline Metals*, PhD Thesis, Department of Applied Physics and Mechanical Engineering, Lulea University of technology, 2007.
6. Wei, Y.J., and Anand, L., "Grain-Boundary Sliding and Separation in Polycrystalline Metals," *J. Mech Phys Sol*, Vol. 52, pp. 587-616, 2004.
7. Fu, H.H., Benson, D.J., and Meyers, M.A., "Computational Description of Nanocrystalline Deformation Based on Crystal Plasticity," *Acta Mater*, Vol. 52, pp. 4413-4425, 2004.
8. Mishnavesky, Jr., *Neumerical Experiments in the Mesomechanics of Materials*, Virtual Testing of Microstructures as a Basis for the Optimization of materials, 2005.
9. Miskiewics, M A., Matysiak, H., and Krzysztof, J., "FEM Modelling of the Properties of a Cu-Sic Composite under Cyclic Loading Conditions," *Mat. Sci.*, Vol. 25, No. 3, pp. 687-697, 2007.
10. Kadkhodapour, J., Ziaei-Rad, S., and Karimzadeh, F., "Finite-element Modeling of Rate Dependent Mechanical Properties in Nanocrystalline Materials," *Comput. Mat. Sci.*, Vol. 45, pp.1113-1124, 2009.
11. Yadollahpour, M., Kadkhodapour, J., Ziaei-Rad, S., and Karimzadeh, F., "n Experimental and Numerical Investigation on Damping Capacity of Nanocomposite," *Mat. Sci. and Eng. A*, Vol. 507, No. 1, pp. 149-154, 2009.
۱۲. اونر، س.ا.، /فتی، ع.، و عرفانیان، م.، آشنایی با متالورژی فیزیکی، ۱، مرکز نشر دانشگاهی، تهران، ۱۳۸۱.
13. Collins, P.G., Bando, H., and Zettle, A., "Nanoscale Electronic Devices on Carbon Nanotubes," *Nanotechnology*, Vol. 9, pp. 153–157, 1998.
14. Liu, W. K., Karpov, E. G. and Park, H. S., *Nano Mechanics and Materials*, John Wiley & Sons, 2006.
15. Deng, C.F., Wang, D.Z., Zhang, X.X., and Li, A.B., "Processing and Properties of Carbon Nanotubes Reinforced Aluminum Composites," *Mater. Sci. Eng. A*, Vol. 444, pp. 138–145, 2007.
16. Shewmon, P. G., *Transformations in Metals*, McGraw-Hill, New York, 1969.
17. Yijun, Liu, Xiaolin, and Chen, "Modeling Consideration in the Analysis of Carbon Nanotube-



- Based Composites,” *Nanotechnology*, Vol. 14, pp. 68-83, 2003.
18. Tsepres, K.I, Papanikos, P., Labeas, G., and Pantelakis, Sp.G, “Multi-Scale Modeling of Tensile Behavior of Carbon Nanotube-Reinforced Composites,” *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, Vol. 49, pp. 51-60, 2008.
19. Oliver, W. C., and Pharr, G. M., “An Improved Technique for Determining Hardness and Elastic Modulus using Load and Displacement Sensing Indentation Experiments,” *J. Mat.Res.*, Vol. 7, pp. 1564-1583, 1992.