



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده‌ی مهندسی مکانیک

مدل سازی میدان فاز استحاله‌های فازی مارتنزیتی تنش-القایی تک‌ورینته بر

مبنای نظریه‌ی الاستیسیته‌ی غیرمحلّی ارینگن

پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک- طراحی کاربردی

هومن دانش

استاد راهنما

دکتر مهدی جوانبخت

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده‌ی مهندسی مکانیک

مدل سازی میدان فاز استحاله‌های فازی مارتنزیتی تنش-القایی تک‌ورینته بر

مبنای نظریه‌ی الاستیسیته‌ی غیرمحلی ارینگن

پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک- طراحی کاربردی

هومن دانش

استاد راهنما

دکتر مهدی جوانبخت



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده‌ی مهندسی مکانیک

پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی مهندسی مکانیک – طراحی کاربردی
آقای هومن دانش
تحت عنوان

مدل‌سازی میدان فاز استحاله‌های فازی مارتنزیتی تنش-القایی تک‌ورینته بر مبنای نظریه‌ی
الاستیسیته‌ی غیرمحلی اربینگن

در تاریخ ۱۴۰۰/۰۶/۲۸ توسط کمیته‌ی تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

۱- استاد راهنمای پایان‌نامه دکتر مهدی جوانبخت

۲- استاد مشاور پایان‌نامه دکتر محمد مشایخی

۳- استاد داور دکتر مهدی سلمانی تهرانی

۴- استاد داور دکتر محمد سیلانی

سرپرست تحصیلات تکمیلی دانشکده دکتر محسن ثقفیان

باساس ازسه وجودمقدس:

آمان که ناتوان شند تا به توانایی برسیم...

مویشان سپید شد تا ما رو سپید شویم...

و عاشقانه سوختند تا که ما بخش وجود ما رو همسگر راهبان باشند...

پدرانان

مادراگان

استادانان

از استاد دانشمند و پربایه ام، جناب آقای دکتر مهدی جوانبخت که در کمال سعی و کمال با حسن خلق و فروتنی، از بیچ کلمی در این عرصه بر من دریغ ننمودند و زحمت راهبانی این رساله را بر عهده گرفتند، شکر و قدردانی می نمایم.

شکر و سپاس از استاد با کالات و شایسته، جناب آقای دکتر محمد شایعی که افزون بر مساعدت های ایشان در مشاوره می این رساله، از محضر پر فیض تدریسشان نیز بهره ها برده ام.

بجنین، شایسته است از اساتید ارجمند، جناب آقای دکتر مهدی سلانی و جناب آقای دکتر محمد سیلانی که زحمت داوری این رساله را متقبل شدند، تقدیر و شکر نمایم.

کلیه حقوق مالکیت مادی و معنوی مربوط به این پایان نامه متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان و پدیدآورندگان است. این حقوق توسط دانشگاه صنعتی اصفهان و بر اساس خط مشی مالکیت فکری این دانشگاه، ارزش گذاری و سهم بندی خواهد شد. هر گونه بهره برداری از محتوا، نتایج یا اقدام برای تجاری سازی دستاوردهای این پایان نامه تنها با مجوز کتبی دانشگاه صنعتی اصفهان امکان پذیر است.

تقدیم به

دانشجویان و دانش پژوهان جوان باخته

در سانحه می هوایی پرواز شماره می ۷۵۲ تهران - کئی یف

آنان که برای پیشرفت

مصائب هجرت را به جان خریدند

اما...

چکیده

استحاله‌ی فازی مارتنزیتی یک استحاله‌ی مرتبه‌ی اول و بدون نفوذ است که منجر به ایجاد نانو و میکروساختارهای متنوع در سرامیک‌ها و آلیاژها و همچنین رفتارهای متمایز مادی مانند شبه‌الاستیسیته و اثر حافظه‌داری می‌شود. در حین استحاله‌ی مارتنزیتی، با کاهش دما، اعمال بار مکانیکی یا تغییر انرژی سطح، آستنیت با شبکه‌ی مکعبی به مارتنزیت با شبکه‌ی با تقارن کمتر چهارگوشه تبدیل می‌گردد. در این رساله، به بررسی آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی بر استحاله‌های مارتنزیتی تنش-القایی تک‌ورینته با استفاده از روش میدان فاز در مقیاس نانو پرداخته می‌شود. نقایص کرنل‌های غیرمحلی پیشین با معرفی یک کرنل غیرمحلی جدید با نام کرنل دوفازی جبران‌شده بر طرف می‌گردد. برخلاف سایر کرنل‌های غیرمحلی متداول، برای کرنل دوفازی جبران‌شده مشکل مسائل بدووضع مشاهده نمی‌شود، شرایط بهنجار شدن و بازیابی حالت محلی ارضا و آثار مرزی به‌طور کامل جبران می‌شوند. با به‌کارگیری یک چارچوب ترمودینامیکی مناسب، سازگاری ترمودینامیکی رابطه‌ی ساختاری تنش-کرنش الاستیسیته‌ی غیرمحلی با کرنل دوفازی جبران‌شده نشان داده می‌شود. از روش اجزای محدود غیرخطی و نرم‌افزار کامسول برای حل معادلات میدان فاز-مکانیک استفاده و پیاده‌سازی عددی معادلات جفت‌شده‌ی گینزبرگ-لاندا و الاستیسیته‌ی محلی و همچنین معادلات الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی به‌خوبی صحت‌سنجی می‌شود. همگرایی عددی حلگر نیز مورد مطالعه قرار گرفته و مشخص می‌گردد که کرنل دوفازی جبران‌شده از مشکلات همگرایی کرنل‌های غیرمحلی پیشین رنج نمی‌برد. علاوه بر این، به‌منظور اطمینان از حصول پاسخ‌های مستقل از شبکه‌ی اجزای محدود، همگرایی شبکه‌ی اجزای محدود از طریق یک مسئله‌ی ابتدایی مورد بررسی قرار می‌گیرد. برتری کرنل دوفازی جبران‌شده بر کرنل‌های غیرمحلی پیشین از طریق بررسی چندین مسئله‌ی مختلف نشان داده می‌شود. به‌طور مشخص، آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر لایه‌ی جداساز آستنیت-مارتنزیت مستقیم و انحنادار، رشد مارتنزیت در نمونه‌های با شرایط اولیه و مرزی گوناگون، استحاله‌ی مارتنزیتی در حضور عیوب هندسی مانند سوراخ و ترک، و تکامل نانو ساختار مارتنزیتی در مسائل با شرط مرزی تقارن مورد بررسی قرار می‌گیرد. چندین تفاوت چشم‌گیر بین حالت‌های محلی و غیرمحلی در سینتیک و ریخت‌شناسی استحاله مشاهده می‌شود که از جمله‌ی آن‌ها می‌توان به تفاوت در سرعت لایه‌ی جداساز، نرخ رشد اولیه، ناحیه‌ی رشد اولیه، تمرکز فاز، تنش آستانه‌ی استحاله و مسیر استحاله اشاره کرد. پژوهش حاضر درک بهتر الاستیسیته‌ی غیرمحلی و به‌کارگیری آن برای مدل‌سازی استحاله‌های فازی مارتنزیتی و سایر پدیده‌های سینتیک در مقیاس نانو را ممکن می‌سازد.

کلمات کلیدی: استحاله‌ی فازی مارتنزیتی، رویکرد میدان فاز، الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی، کرنل غیرمحلی، کرنل دوفازی جبران‌شده، آثار مرزی

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
هشت	فهرست مطالب
ده	فهرست شکل‌ها
دوازده	فهرست جدول‌ها
سیزده	فهرست نمادها و نشانه‌ها
۱	فصل اول: مقدمه
۱	۱-۱ پیشگفتار
۲	۲-۱ انواع استحاله‌های فازی
۲	۳-۱ استحاله‌های فازی مارتنزیتی
۳	۴-۱ کاربردهای استحاله‌های فازی مارتنزیتی
۵	۵-۱ مدل‌سازی استحاله‌های فازی مارتنزیتی
۶	۱-۵-۱ مدل‌سازی استحاله‌های فازی مارتنزیتی در مقیاس‌های مختلف
۷	۲-۵-۱ روش‌های مدل‌سازی استحاله‌های فازی مارتنزیتی
۸	۳-۵-۱ مدل‌سازی استحاله‌های فازی مارتنزیتی با استفاده از روش میدان فاز
۱۰	۶-۱ نظریه‌های غیرمحلی
۱۱	۱-۶-۱ الاستیسیته‌ی غیرمحلی
۱۳	۲-۶-۱ زمینه‌های کاربرد نظریه‌ی الاستیسیته‌ی غیرمحلی
۱۴	۷-۱ قرارداد واحدها
۱۵	فصل دوم: روابط حاکم
۱۵	۱-۲ مقدمه
۱۶	۲-۲ معادلات میدان فاز-الاستیسیته‌ی محلی
۱۷	۳-۲ معادلات میدان فاز-الاستیسیته‌ی غیرمحلی
۱۸	۴-۲ خواص کرنل غیرمحلی
۱۹	۵-۲ انواع توابع برای کرنل غیرمحلی
۲۰	۶-۲ کرنل غیرمحلی دوفازی
۲۱	۷-۲ آثار مرزی
۲۳	۸-۲ شرط بازیابی حالت محلی
۲۳	۹-۲ کرنل دوفازی جبران‌شده
۲۵	۱۰-۲ سازگاری ترمودینامیکی کرنل دوفازی جبران‌شده

۲۹	فصل سوم: شبیه‌سازی عددی و تحلیل نتایج
۲۹	۱-۳ مقدمه
۲۹	۲-۳ پیاده‌سازی عددی
۳۱	۳-۳ اعتبارسنجی
۳۱	۱-۳-۳ اعتبارسنجی معادلات میدان فاز-الاستیسیته‌ی محلی
۳۲	۲-۳-۳ اعتبارسنجی معادلات الاستیسیته‌ی غیرمحلی
۳۳	۴-۳ بررسی رفتار الاستیک غیرمحلی انتگرالی یک نمونه‌ی مربعی تحت کشش تک‌محوره (بدون در نظر گرفتن معادلات میدان فاز)
۳۴	۵-۳ بررسی همگرایی عددی مسائل میدان فاز-الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی با کرنل‌های مختلف
۳۶	۶-۳ بررسی همگرایی شبکه‌ی اجزای محدود
۳۷	۷-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر انتشار تنش-القایی یک لایه‌ی جداساز صفحه‌ای
۳۹	۸-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر انتشار تنش-القایی یک لایه‌ی جداساز غیرصفحه‌ای
۴۴	۹-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر لایه‌ی جداساز غیرصفحه‌ای بدون اعمال تنش خارجی
۴۵	۱۰-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر رشد تنش-القایی نانوساختار مارتنزیتی
۴۸	۱۱-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر رشد تنش-القایی نانوساختار مارتنزیتی در حضور سوراخ
۵۳	۱۲-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر رشد تنش-القایی نانوساختار مارتنزیتی با شرایط اولیه و مرزی همگن
۵۵	۱۳-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر رشد تنش-القایی نانوساختار مارتنزیتی در حضور ترک
۵۸	۱۴-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر رشد تنش-القایی یک جوانه‌ی مارتنزیتی از پیش موجود
۵۹	۱۵-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر اندازه‌ی ناحیه با مارتنزیت غیرکامل در مجاورت مرز
۶۱	۱۶-۳ آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر مسائل با تقارن مرزی
۶۷	فصل چهارم: نتیجه‌گیری و پیشنهادها
۶۷	۱-۴ نتیجه‌گیری
۶۹	۲-۴ پیشنهادها
۷۰	پیوست الف: فهرست مقالات مستخرج از پایان‌نامه
۷۱	مراجع

فهرست شکل‌ها

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
۳.....	شکل ۱-۱- ورینت‌های مختلف مارتنزیت در استحاله‌ی مارتنزیتی شبکه‌ی بلوری مکعبی به چهارگوشه.....
۴.....	شکل ۱-۲- الف) تبدیل ساختار بلوری گرافیت به الماس و ب) تبدیل ساختار بلوری شش‌گوشه به مکعبی.....
۴.....	شکل ۱-۳- نمودارهای تنش- کرنش برای: الف) خاصیت شبه‌الاستیسیته و ب) اثر حافظه‌داری.....
۵.....	شکل ۱-۴- طرح‌واره‌ی تعویق رشد ترک در زیرکونیا به کمک تبدیل ساختار بلوری چهارگوشه به تک‌شیب.....
۶.....	شکل ۱-۵- مقیاس‌های مختلف بررسی و مطالعه‌ی استحاله‌های فازی مارتنزیتی.....
۹.....	شکل ۱-۶- نحوه‌ی تغییرات متغیر میدان در روش‌های میدان فاز و لایه‌ی جداساز تیز.....
۱۴.....	شکل ۱-۷- سازه‌های مختلف مقیاس نانو: الف) فولرن، ب) نانولوله و ج) نانوصفحه.....
۱۴.....	شکل ۱-۸- ساختار اتمی یک نانولوله‌ی کربنی و مدل تیر پیوسته‌ی معادل آن.....
۱۹.....	شکل ۲-۱- نمودار توابع قابل استفاده به‌عنوان کرنل غیرمحلی برای نقطه‌ی مرکزی یک فضای دوبعدی.....
۲۱.....	شکل ۲-۲- نمودار کرنل غیرمحلی (تابع خطا k^E) برای: الف) نقطه‌ی $(-5,5)$ و ب) نقطه‌ی $(-5,0)$
۲۲.....	شکل ۲-۳- نمودار کرنل غیرمحلی (تابع خطا k^E) در نقطه‌ی مرکزی یک فضای دوبعدی.....
۲۲.....	شکل ۲-۴- نمودار انتگرال کرنل غیرمحلی $\gamma(\mathbf{x})$ به‌ازای سه مقدار پارامتر غیرمحلی $\tau = 0.5, 1, 1.5$
۳۲.....	شکل ۳-۱- ابعاد و شرایط اولیه و مرزی یک نمونه‌ی مستطیلی شامل لایه‌ی جداساز آستنیت-مارتنزیت.....
۳۲.....	شکل ۳-۲- الف) روند تکاملی نانو ساختار مارتنزیتی و ب) منحنی‌های متناظر لایه‌ی جداساز.....
۳۳.....	شکل ۳-۳- الف) ابعاد و شرایط مرزی نمونه‌ی ترک‌دار تحت کشش تک‌محوره و ب) منحنی‌های تنش.....
۳۴.....	شکل ۳-۴- توزیع کرنش ϵ_x برای حالت غیرمحلی خالص و کرنل‌های اصلاح‌شده، دوفازی و دوفازی جبران.....
۳۵.....	شکل ۳-۵- نمودار تغییرات اندازه‌ی گام زمانی برحسب گام زمانی برای حالت محلی و غیرمحلی.....
۳۶.....	شکل ۳-۶- منحنی‌های لایه‌ی جداساز آستنیت-مارتنزیت پاسخ پایا در امتداد خط افقی میانی نمونه.....
۳۸.....	شکل ۳-۷- الف) منحنی‌های لایه‌ی جداساز در زمان‌های مختلف و ب) موقعیت نقطه‌ی میانی.....
۳۸.....	شکل ۳-۸- نانو ساختار مارتنزیتی در زمان $t = 2$
۳۹.....	شکل ۳-۹- روند تکاملی نانو ساختار مارتنزیتی برای حالت محلی و حالت غیرمحلی.....
۳۹.....	شکل ۳-۱۰- توزیع تنش σ_y برای حالت محلی و حالت غیرمحلی.....
۴۰.....	شکل ۳-۱۱- نمودار توزیع تنش σ_y در راستای خط افقی میانی نمونه در زمان $t = 1$
۴۱.....	شکل ۳-۱۲- الف) منحنی‌های لایه‌ی جداساز در زمان‌های مختلف و ب) موقعیت نقطه‌ی میانی.....
۴۱.....	شکل ۳-۱۳- نمودار موقعیت نقطه‌ی میانی لایه‌ی جداساز $(\eta = 0.5)$ نسبت به زمان.....
۴۲.....	شکل ۳-۱۴- الف) نانو ساختار مارتنزیتی و ب) توزیع تنش σ_y متناظر آن را در زمان $t = 1$
۴۳.....	شکل ۳-۱۵- منحنی‌های لایه‌ی جداساز در زمان‌های مختلف در راستای خط افقی $y = 0.01$

- شکل ۳-۱۶- نمودار توزیع تنش σ_y در راستای خط افقی میانی نمونه در زمان $t = 1$ ۴۳
- شکل ۳-۱۷- نانو ساختار مارتنزیتی در زمان های $t = 2, 10$ و همچنین توزیع تنش σ_y در زمان $t = 10$... ۴۴
- شکل ۳-۱۸- ابعاد و شرایط اولیه و مرزی یک نمونه مستطیلی تحت کشش تک محوره ۴۵
- شکل ۳-۱۹- روند تکاملی نانو ساختار مارتنزیتی برای حالت محلی و حالت غیر محلی ۴۶
- شکل ۳-۲۰- توزیع کار استحاله برای حالت محلی و حالت غیر محلی ۴۷
- شکل ۳-۲۱- الف) نانو ساختار مارتنزیتی و ب) توزیع کار استحاله ی متناظر با آن در مراحل ابتدایی استحاله .. ۴۸
- شکل ۳-۲۲- ابعاد و شرایط اولیه و مرزی یک نمونه مستطیلی سوراخ دار تحت کشش تک محوره ۴۹
- شکل ۳-۲۳- روند تکاملی نانو ساختار مارتنزیتی برای حالت محلی و حالت غیر محلی ۵۰
- شکل ۳-۲۴- توزیع کار استحاله برای حالت محلی و حالت غیر محلی ۵۰
- شکل ۳-۲۵- نانو ساختار مارتنزیتی و توزیع کار استحاله ی متناظر آن در مراحل ابتدایی استحاله ۵۱
- شکل ۳-۲۶- نمودار توزیع تنش σ_x در راستای خط افقی $y = 6$ در زمان $t = 0.01$ ۵۱
- شکل ۳-۲۷- نمودار انتگرال کرنل غیر محلی $\gamma(\mathbf{x})$ در راستای خط افقی $y = 6$ به ازای $\tau = 0.5, 1, 1.5$ ۵۲
- شکل ۳-۲۸- نمودار تمرکز فاز $C(\eta)$ بر حسب زمان برای حالت محلی و حالت غیر محلی ۵۳
- شکل ۳-۲۹- ابعاد و شرایط اولیه و مرزی نمونه مربعی تحت کشش تک محوره ۵۳
- شکل ۳-۳۰- روند تکاملی نانو ساختار مارتنزیتی برای حالت محلی و حالت غیر محلی ۵۴
- شکل ۳-۳۱- توزیع تنش σ_x برای حالت محلی و حالت غیر محلی ۵۵
- شکل ۳-۳۲- ابعاد و شرایط اولیه و مرزی یک نمونه مربعی ترک دار تحت کشش تک محوره ۵۶
- شکل ۳-۳۳- نمودار زمان رسیدن η به مقدار $0/1$ بر حسب اندازه ی المان ۵۶
- شکل ۳-۳۴- نانو ساختار مارتنزیتی در مراحل ابتدایی استحاله ۵۷
- شکل ۳-۳۵- نمودار توزیع تنش σ_x در راستای خط عمودی $x = 6$ در زمان $t = 0.01$ ۵۸
- شکل ۳-۳۶- ابعاد و شرایط اولیه و مرزی یک نمونه مربعی حاوی جوانه ی مارتنزیتی ۵۸
- شکل ۳-۳۷- نانو ساختار مارتنزیتی در مراحل ابتدایی استحاله ۵۹
- شکل ۳-۳۸- ابعاد و شرایط اولیه و مرزی یک نمونه مربعی تحت کشش تک محوره ۶۰
- شکل ۳-۳۹- نانو ساختار مارتنزیتی و توزیع کار استحاله ی متناظر آن در حالت پایا ۶۱
- شکل ۳-۴۰- نانو ساختار مارتنزیتی و توزیع کار استحاله ی متناظر با آن در حالت پایا ۶۱
- شکل ۳-۴۱- ابعاد و شرایط اولیه و مرزی یک نمونه مربعی حاوی جوانه ی مارتنزیتی ۶۲
- شکل ۳-۴۲- روند تکاملی نانو ساختار مارتنزیتی برای هر دو مدل کامل و یک چهارم ۶۳
- شکل ۳-۴۳- توزیع کار استحاله برای هر دو مدل کامل و یک چهارم و برای حالت محلی و حالت غیر محلی ۶۴
- شکل ۳-۴۴- نانو ساختار مارتنزیتی و توزیع کار استحاله ی متناظر با آن در شروع استحاله ۶۵

فهرست جدول‌ها

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
۳۱	جدول ۱-۳- پارامترهای مادی آلیاژ نیکل-آلومینیوم.....
۴۶	جدول ۲-۳- تنش آستانه‌ی استحاله برای حالت محلی و غیرمحلی به‌ازای مقادیر مختلف پارامتر غیرمحلی.....

فهرست نمادها و نشانه‌ها

نمادهای یونانی	نمادهای لاتین
پارامتر مشخصه‌ی فاز	η ضریب مانع انرژی در برابر استحاله
ضریب سینتیک	λ بردار عمود بر سطح
ضریب گرادیان انرژی	β بردار جابه‌جایی
انرژی آزاد هلمهولتز	ψ تانسور الاستیک
انرژی الاستیک	ψ^e مدول یانگ
انرژی بلوری	ψ^c ضریب پواسون
انرژی گرادیان	ψ^∇ کرنل غیرمحلی
تانسور تنش	σ کرنل غیرمحلی اصلاح‌شده
تانسور کرنش کل	ϵ کرنل غیرمحلی دوفازی
تانسور کرنش الاستیک	ϵ_e کرنل غیرمحلی دوفازی جبران‌شده
تانسور کرنش استحاله	ϵ_{tr} بردار مکان نقطه‌ی مرجع
تانسور کرنش استحاله‌ی مارتنزیت	ϵ_{tr}^M بردار مکان نقطه‌ی همسایه
دمای تعادل	θ_e حجم بدنه
دمای بحرانی	θ_c تابع زنگوله‌ای شکل
پارامتر غیرمحلی	τ تابع هلمهولتز
تابع دلتای دیراک	δ تابع خطا
پارامتر فاز	ξ فاصله‌ی تأثیر
انتگرال کرنل غیرمحلی	γ عملگر خطی انتگرالی
	A_0 انرژی پتانسیل داخلی
	\mathbf{n} آنژیوپاتی
	\mathbf{u} باقی‌مانده‌ی غیرمحلی
	\mathbf{D} دما
	E سرعت لایه‌ی جداساز
	ν کار استحاله
	k
	k_{mod}
	k_{TP}
	k_{CTP}
	\mathbf{x}
	\mathbf{x}'
	V
	k^B
	k^H
	k^E
	L_R
	\mathcal{R}
	U
	S
	P
	T
	ν
	W_{tr}

فصل اول

مقدمه

۱-۱ پیشگفتار

استحاله‌ی فازی^۱ یکی از پدیده‌های فیزیکی است که در زندگی روزمره قابل لمس و مشاهده می‌باشد. به‌عنوان نمونه، تبدیل آب به یخ و بالعکس، و یا تبدیل آب به بخار نمونه‌های ساده‌ای از استحاله‌های فازی با نام‌های انجماد، ذوب و تبخیر هستند. در تمامی موارد مذکور تغییر در حالت ماده مشاهده می‌شود؛ یعنی حالت‌های مختلف ماده مانند جامد، مایع و گاز به یکدیگر تبدیل می‌شوند. اما دسته‌ای از استحاله‌های فازی وجود دارد که در آن‌ها حالت ماده تغییر نمی‌کند. این استحاله‌ها که با عنوان استحاله‌های فازی چندریختی^۲ نام‌گذاری شده‌اند، در مایعات با تغییر چگالی و در جامدات با تغییر در شبکه‌ی بلوری همراه می‌باشند. در این فصل ابتدا به بررسی مفاهیم کلی در زمینه‌ی استحاله‌های فازی و مشخصاً استحاله‌های فازی مارتنزیتی^۳ که نوعی استحاله‌ی فازی چندریختی هستند، پرداخته می‌شود. سپس پژوهش‌های انجام‌شده در چارچوب مدل‌سازی استحاله‌های مارتنزیتی در مقیاس‌های مختلف و با روش‌های گوناگون مرور و روش میدان فاز^۴ به‌عنوان پرکاربردترین روش مدل‌سازی این استحاله‌ها معرفی می‌شود. در نهایت، پس از اشاره به لزوم استفاده از نظریه‌های غیرمحلی، مفاهیم و پژوهش‌های کلیدی در زمینه‌ی نظریه‌ی الاستیسیته‌ی غیرمحلی، به‌عنوان یکی از پراستفاده‌ترین این نظریه‌ها، ارائه می‌گردد.

¹ Phase Transformation

² Polymorphic Phase Transformations

³ Martensitic Phase Transformations

⁴ Phase Field Method

۲-۱ انواع استحاله‌های فازی

استحاله‌های فازی را از جنبه‌های مختلفی می‌توان تقسیم‌بندی نمود. استحاله‌های فازی را می‌توان به دو نوع استحاله‌های فازی مرتبه‌ی اول^۱ و استحاله‌های فازی مرتبه‌ی دوم^۲ تقسیم کرد. استحاله‌ی فازی مرتبه‌ی اول استحاله‌ای است که در آن تبدیل فاز با گرمای نهان^۳ همراه است. به عبارت دیگر، در حین این استحاله مقداری انرژی جذب سامانه یا از آن دفع می‌شود. از آنجایی که تبادل انرژی بین سامانه و محیط به صورت ناگهانی نبوده و در طول زمان اتفاق می‌افتد، تبدیل فاز نیز در طول زمان انجام می‌گیرد. بنابراین در این نوع استحاله‌ها در هر لحظه از تبدیل فاز، سامانه شامل چندین فاز از ماده و همچنین لایه‌های جداساز^۴ بین آن‌ها است. استحاله‌های فازی مرتبه‌ی دوم استحاله‌های پیوسته هستند؛ به این معنا که هیچ گرمای نهانی بین سامانه و محیط تبادل نمی‌شود، سامانه همگن است، تمام نقاط در آن واحد در تبدیل فاز شرکت می‌کنند و هیچ لایه‌ی جداسازی شکل نمی‌گیرد [۱].

یکی دیگر از جنبه‌های تقسیم‌بندی استحاله‌های فازی، نفوذ و یا عدم نفوذ اتم‌ها می‌باشد. استحاله‌های فازی بانفوذ^۵ استحاله‌هایی هستند که در آن‌ها فاز جدید ترکیب شیمیایی متفاوتی از فاز پایه دارد. در مقابل، استحاله‌های فازی بدون نفوذ^۶ قرار دارند که در آن‌ها نفوذ اتم‌ها صورت نمی‌گیرد و موقعیت نسبی اتم‌ها نسبت به هم پس از استحاله تغییری نمی‌کند. به عبارت دیگر، در این استحاله‌ها همسایگی یک اتم با اتم‌های مجاور خود حفظ شده و پیوندهای اتمی شکسته نمی‌شوند [۲].

۳-۱ استحاله‌های فازی مارتنزیتی

یکی از مهم‌ترین استحاله‌های فازی حالت جامد استحاله‌ی فازی مارتنزیتی می‌باشد. این استحاله یک استحاله‌ی مرتبه‌ی اول و بدون نفوذ است که موجب ایجاد نانو و میکروساختارهای مختلف با خواص مکانیکی متفاوت در آلیاژهای حافظه‌دار، فولادها و سرامیک‌ها می‌شود [۱]. چندین پدیده‌ی ترمومکانیکی بنیادی مانند شبه‌پلاستیسیته^۷، شبه‌الاستیسیته^۸ و اثر حافظه‌داری^۹ توسط این استحاله کنترل می‌شود [۳]. در میان پدیده‌های فیزیکی مختلف که از آن‌ها می‌توان برای بهبود عملکرد مواد استفاده کرد، استحاله‌ی مارتنزیتی جایگاه برجسته‌ای

¹ First Order Phase Transformations

² Second Order Phase Transformations

³ Latent Heat

⁴ Interfaces

⁵ Diffusional Phase Transformations

⁶ Diffusionless Phase Transformations

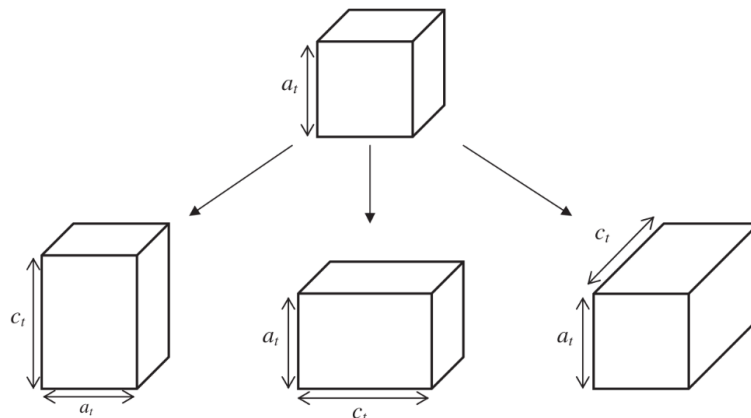
⁷ Pseudoplasticity

⁸ Pseudoelasticity

⁹ Shape Memory Effect

دارد. این استحاله نقش مهمی در عملیات گرمایی مواد، از جمله فولادهای دوفازی، فولادهای نیکل دار^۱، و همچنین در شکل دهی موادی همچون آلیاژهای آستنیتی^۲ مانند Fe-Mn-C و Fe-Ni-C ایفا می کند [۴].

در استحاله‌ی مارتنزیتی، فاز آستنیت^۳ با شبکه‌ی بلوری مکعبی^۴ که در دمای بالاتر پایدار است، به فاز مارتنزیت^۵ با شبکه‌ی بلوری با تقارن کمتر مانند چهارگوشه^۶ یا راست‌لوزی^۷ که در دمای پایین‌تر پایدار است، تبدیل می‌شود. چنین استحاله‌ای با کاهش دما، اعمال بار مکانیکی و یا تغییر در انرژی سطح صورت می‌گیرد. در این پژوهش، استحاله‌ی مارتنزیتی شبکه‌ی بلوری مکعبی به چهارگوشه مورد بررسی قرار می‌گیرد که در طی آن شبکه‌ی بلوری مکعبی می‌تواند به سه شبکه‌ی معادل چهارگوشه تبدیل شود (شکل ۱-۱). این سه شبکه‌ی چهارگوشه که متقابلاً بر هم عمودند، ورینت‌های مارتنزیتی^۸ نامیده می‌شوند [۵].



شکل ۱-۱- ورینت‌های مختلف مارتنزیت در استحاله‌ی مارتنزیتی شبکه‌ی بلوری مکعبی به چهارگوشه [۵]

۴-۱ کاربردهای استحاله‌های فازی مارتنزیتی

نمونه‌های بسیاری از کاربردهای استحاله‌های مارتنزیتی در زمینه‌های مختلف وجود دارد. یکی از شناخته‌شده‌ترین آن‌ها استحاله‌ی فازی در حین عملیات حرارتی فولادها می‌باشد که به کمک آن ریزساختار و خواص مکانیکی مورد نظر حاصل می‌شود. به‌عنوان نمونه‌ی دیگر، می‌توان به تبدیل ساختار شش‌گوشه^۹ به مکعبی در نیتريد بور^{۱۰} تحت دما و فشار بالا اشاره کرد. نیتريد بور با ساختار مکعبی سخت‌ترین ماده پس از الماس می‌باشد که برخلاف

¹ Maraging Steels

² Austenitic Alloys

³ Austenite

⁴ Cubic

⁵ Martensite

⁶ Tetragonal

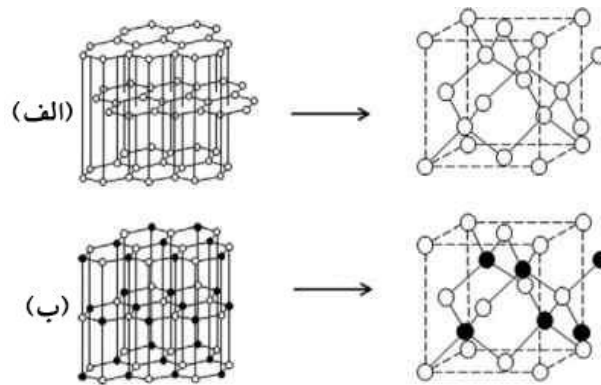
⁷ Rhombohedral

⁸ Martensitic Variants

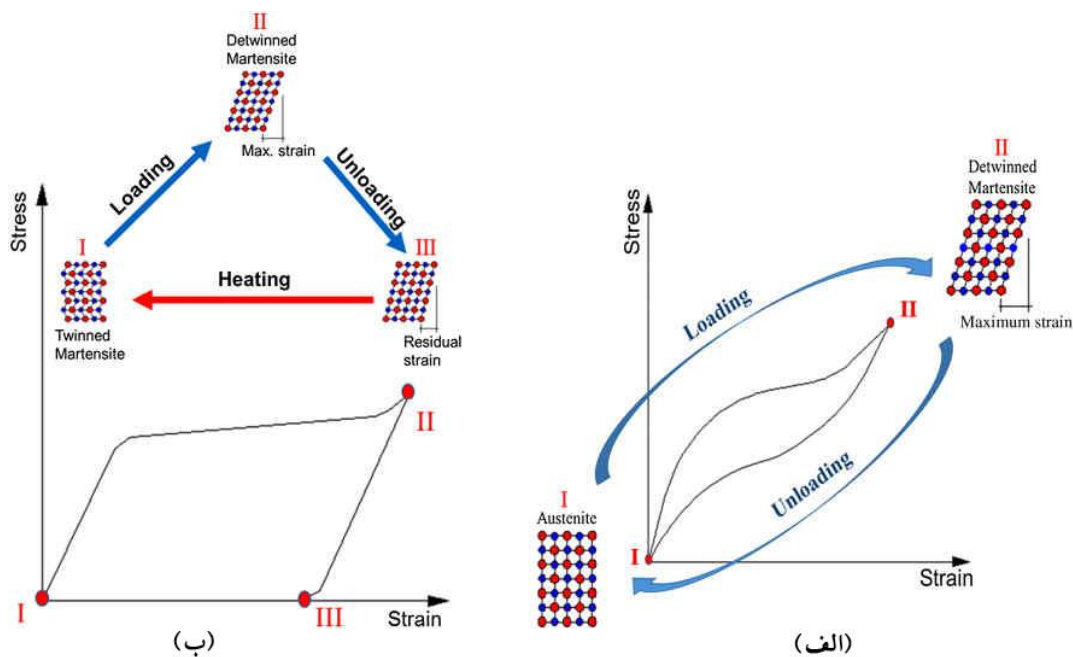
⁹ Hexagonal

¹⁰ Boron Nitride

الماس، یک ماده‌ی مصنوعی و ساخته‌ی دست بشر است [۶]. تبدیل ساختار شش گوشه به مکعبی در نیتريد بور و شباهت آن به تبدیل گرافیت به الماس در شکل ۱-۲ به روشنی قابل مشاهده است. استحاله‌ی مارتنزیتی باعث ایجاد خواص و رفتارهای مادی خارق‌العاده مانند رفتارهای شبه‌الاستیسیته، شبه‌پلاستیسیته و اثر حافظه‌داری در برخی مواد می‌گردد. برخی آلیاژها مانند نیکل-آلومینیوم و یا نیکل-تیتانیوم پس از تغییر شکل قابلیت بازیابی شکل اولیه خود را دارند که به آن‌ها آلیاژهای حافظه‌دار گفته می‌شود. آلیاژهای حافظه‌دار دارای دو فاز با ساختارهای بلوری متفاوت می‌باشند و اثر حافظه‌داری با استحاله‌ی مارتنزیتی بین این دو فاز حاصل می‌شود [۷]. شکل ۱-۳ نمودارهای تنش-کرنش را برای خاصیت شبه‌الاستیسیته و اثر حافظه‌داری نشان می‌دهد.

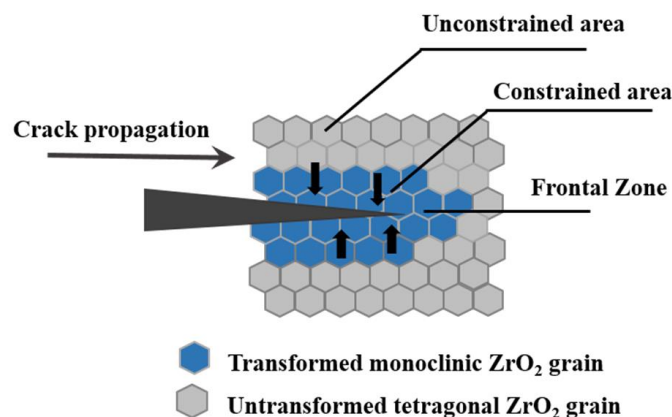


شکل ۱-۲ (الف) تبدیل ساختار بلوری گرافیت به الماس و (ب) تبدیل ساختار بلوری شش گوشه به مکعبی در نیتريد بور [۶]



شکل ۱-۳ نمودارهای تنش-کرنش برای: (الف) خاصیت شبه‌الاستیسیته و (ب) اثر حافظه‌داری [۷]

یکی از سازوکارهای تعویق رشد ترک در مواد نرم ایجاد ناحیه‌ی پلاستیک در ناحیه‌ی نوک ترک و به دنبال آن ایجاد تنش فشاری بر روی ترک و بسته شدن آن می‌باشد. اما در مواد ترد که تغییر شکل پلاستیک قابل توجهی صورت نمی‌گیرد، استفاده از این سازوکار امکان‌پذیر نیست. یکی از کاربردهای استحاله‌های مارتنزیتی افزایش چقرمگی شکست در مواد ترد مانند سرامیک‌های زیرکونیا^۱ می‌باشد. تنش زیاد در ناحیه نوک ترک می‌تواند موجب ایجاد استحاله‌ی مارتنزیتی و به دنبال آن ایجاد یک میدان تنش فشاری بر روی ترک و افزایش چقرمگی شکست شود. به‌عنوان نمونه، در سرامیک‌های زیرکونیا، فاز کم‌ثبات چهارگوشه در اثر تنش نوک ترک به فاز باثبات تک‌شیب^۲ تبدیل شده و با توجه به انبساط حجمی ۳٪ تا ۵٪ و کرنش برشی تقریبی ۷٪ باعث ایجاد میدان تنش فشاری بر روی ترک و تعویق رشد آن می‌شود [۸]. طرح‌واره‌ی از این فرآیند در شکل ۴-۱ قابل مشاهده است.



شکل ۴-۱- طرح‌واره‌ی تعویق رشد ترک در زیرکونیا به کمک تبدیل ساختار بلوری چهارگوشه به تک‌شیب [۸]

۵-۱ مدل‌سازی استحاله‌های فازی مارتنزیتی

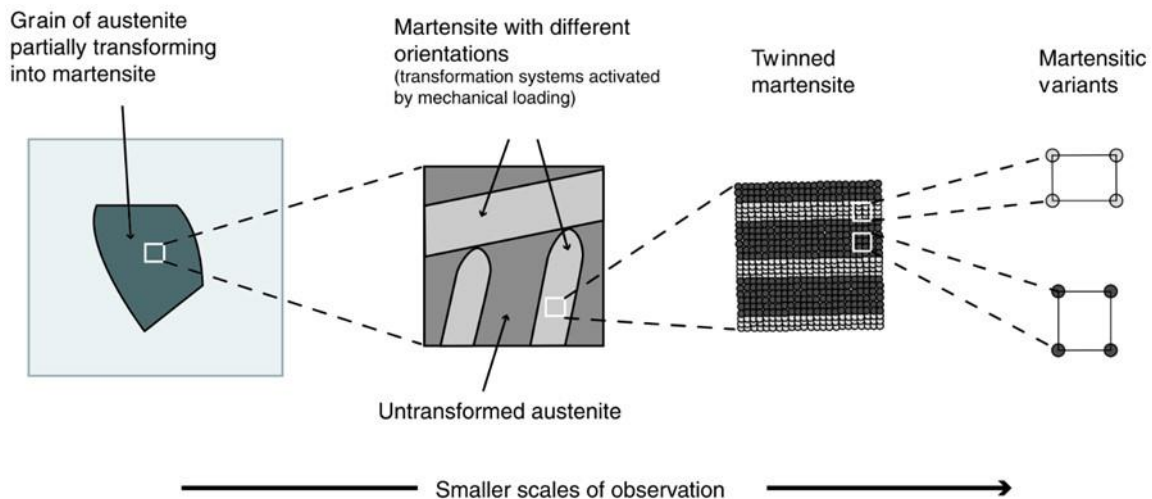
با توجه به جایگاه ویژه‌ی استحاله‌های مارتنزیتی در علم مواد، مدل‌سازی این استحاله‌ها به‌منظور مشاهده‌ی سازوکارها و رفتارهای متفاوت حین وقوع استحاله‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است. رویکردهای متفاوتی برای مدل‌سازی استحاله‌های مارتنزیتی وجود دارد. با توجه به اینکه در این استحاله تغییرات در سطح اتمی صورت گرفته و بر ریزساختار ماده و در نتیجه بر خواص میکروسکوپییک ماده تأثیر می‌گذارد، می‌توان برای مدل‌سازی این استحاله از شبیه‌سازی‌های مقیاس‌های مختلف، از مقیاس اتمی تا مقیاس ماکرو^۳، استفاده کرد. شکل ۵-۱ طرح‌واره‌ی از مدل‌سازی استحاله‌های مارتنزیتی در ابعاد مختلف از مقیاس مزو^۴ تا شبیه‌سازی‌های اتمی را نشان می‌دهد.

¹ Zirconia (ZrO_2)

² Monoclinic

³ Macroscale

⁴ Mesoscale



شکل ۱-۵-۱- مقیاس‌های مختلف بررسی و مطالعه‌ی استحاله‌های فازی مارتنزیتی [۴]

۱-۵-۱ مدل‌سازی استحاله‌های فازی مارتنزیتی در مقیاس‌های مختلف

در مقیاس ماکرو پژوهش‌های مختلفی در زمینه‌ی استحاله‌های مارتنزیتی صورت گرفته است که از جمله‌ی آن‌ها می‌توان به ارائه‌ی یک مدل ساختاری برای فولادهای با پلاستیسیته‌ی القاشده توسط استحاله^۱ (TRIP) [۹] و همچنین مدل‌سازی استحاله‌ی آستنیت-مارتنزیت در فولادهای TRIP و ضدزنگ [۱۰] اشاره کرد. یکی دیگر از پژوهش‌های صورت گرفته در مقیاس ماکرو شبیه‌سازی عددی استحاله‌های مارتنزیتی تحت تنش، توسط ون و همکاران [۱۱] می‌باشد.

در مقیاس مزو می‌توان به ارائه‌ی مدل جفت‌شده‌ی سینتیک مونت‌کارلو^۲ و روش اجزای محدود^۳ برای تحلیل استحاله‌های مارتنزیتی ترموالاستیک در آلیاژهای حافظه‌دار تحت بارگذاری و بروودت اشاره نمود [۱۲]. در پژوهشی دیگر یدو و همکاران [۱۳] به مدل‌سازی استحاله‌های مارتنزیتی همراه با پلاستیسیته در مواد مهندسی در مقیاس مزو پرداخته‌اند.

در مقیاس میکرو^۴ نیز پژوهش‌هایی در این زمینه انجام شده است. یکی از این پژوهش‌ها، شبیه‌سازی تکامل میکروساختار مارتنزیتی توسط لویتاس و همکاران [۱۴] می‌باشد. در این پژوهش مدلی برای رشد میکروساختارهای چندورینته‌ی^۵ مارتنزیتی در تک‌بلوری‌ها^۶ و چندبلوری‌ها^۷ ارائه شده که برای ابعاد بزرگ‌تر از

^۱ Transformation Induced Plasticity (TRIP)

^۲ Kinetic Monte Carlo (KMC)

^۳ Finite Element Method (FEM)

^۴ Microscale

^۵ Multivariant

^۶ Single Crystals

^۷ Polycrystals

۱۰۰ نانومتر (مقیاس میکرو) معتبر است. همچنین اصفهانی و همکاران [۱۵] به مدل سازی استحاله‌ی مارتنزیتی در حین بارگذاری چرخه‌ای تک‌بلور آلیاژ نیکل-تیتانیوم در مقیاس میکرو پرداخته‌اند. به‌عنوان یکی دیگر از پژوهش‌های صورت گرفته در این زمینه می‌توان به مدل سازی برهم‌کنش بین پلاستیسیته و استحاله‌ی مارتنزیتی در آلیاژهای حافظه‌دار در ابعاد میکرو اشاره کرد [۱۶].

در مقیاس نانو^۱ مطالعات گسترده‌ای بر روی استحاله‌های مارتنزیتی صورت گرفته است. در این باره می‌توان به شبیه‌سازی مدل میدان فاز برای استحاله‌ی مارتنزیتی در مقیاس نانو با استفاده از روش اجزای محدود توسط شه و همکاران [۱۷] اشاره کرد. در پژوهشی دیگر دار و چن [۱۸] به بررسی استحاله‌ی مارتنزیتی در مجاورت لایه‌های جداساز در آلیاژهای حافظه‌دار پرداخته‌اند. به‌عنوان نمونه‌ای دیگر، چو و همکاران [۱۹] نیز دینامیک استحاله‌های مارتنزیتی چندورینته را با استفاده از نظریه‌ی گینزبرگ-لاندا^۲ و به‌کارگیری روش اجزای محدود مورد بررسی قرار داده‌اند.

به‌دلیل وقوع تغییرات در سطوح اتمی در استحاله‌های فازی، می‌توان این استحاله‌ها را در مقیاس اتمی نیز مدل سازی نمود. از جمله مطالعات انجام‌شده در این زمینه می‌توان به بررسی مقیاس اتمی استحاله‌ی مارتنزیتی در آلیاژ حافظه‌دار نیکل-تیتانیوم نانوبلوری اشاره کرد [۲۰ و ۲۱]. کاستنر و همکاران [۲۲] نیز به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۳ تکامل میکروساختارها در استحاله‌های مارتنزیتی چرخه‌ای پرداخته‌اند. همچنین در پژوهشی دیگر [۲۳]، به مطالعه‌ی استحاله‌های مارتنزیتی با استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی و مونت کارلو^۴ پرداخته شده است. حتی مطالعاتی در زمینه‌ی مکانیک کوانتومی بر روی استحاله‌های مارتنزیتی صورت گرفته است که از جمله‌ی آن‌ها می‌توان به بررسی این استحاله‌ها در آلیاژهای مختلف با استفاده از محاسبات اصول اولیه^۵ و نظریه‌ی تابعی چگالی^۶ اشاره کرد [۲۴ و ۲۵].

۱-۵-۲ روش‌های مدل سازی استحاله‌های فازی مارتنزیتی

روش‌ها و نظریه‌های مختلفی به‌منظور تحلیل و مطالعه‌ی استحاله‌های مارتنزیتی وجود دارد. با توجه به اینکه مدل سازی در چه مقیاسی مورد نظر است از روش متناسب با آن مقیاس می‌توان استفاده کرد. از جمله‌ی این روش‌ها می‌توان به روش همگن سازی میدان متوسط^۷ برای ارائه‌ی مدل‌های ساختاری [۹]، پلاستیسیته‌ی بلوری^۸

^۱ Nanoscale

^۲ Ginzburg-Landau Theory

^۳ Molecular Dynamics

^۴ Monte Carlo

^۵ First Principle Calculations

^۶ Density Functional Theory

^۷ Mean Field Homogenization

^۸ Crystal Plasticity

[۲۶]، روش سطح تراز^۱ [۲۷]، روش لایه‌ی جداساز تیز^۲ [۲۸]، نظریه‌ی میدان فاز [۱۷]، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و مونت کارلو [۲۳] و محاسبات اصول اولیه همراه با نظریه‌ی تابعی چگالی [۲۴] در محاسبات کوانتومی اشاره کرد.

۳-۵-۱ مدل‌سازی استحاله‌های فازی مارتنزیتی با استفاده از روش میدان فاز

یکی از پرکاربردترین نظریه‌های مورد استفاده در مطالعه‌ی استحاله‌های فازی، نظریه‌ی میدان فاز می‌باشد. رویکرد میدان فاز برای استحاله‌های فازی مارتنزیتی نخستین بار توسط لاندا و گینزبرگ به ترتیب با معرفی پارامترهای مشخصه‌ی مرتبط با تقارن فازها و انرژی میان‌لایه‌ای بر مبنای گرادیان اتخاذ گردید [۵]. از همین روست که رویکرد میدان فاز به صورت گسترده با نام نظریه‌ی گینزبرگ-لاندا نیز شناخته می‌شود. از این نظریه نه تنها در مدل‌سازی استحاله‌ها، بلکه در زمینه‌های گوناگونی مانند مکانیک شکست و مدل‌سازی ترک [۲۹]، بررسی نابجایی‌ها^۳ [۳۰]، مطالعه‌ی دانه‌ها^۴ و مرز دانه‌ها^۵ [۳۱]، مدل‌سازی انجماد و پدیده‌های مرتبط با آن [۳۲]، و شبیه‌سازی جریان‌های دوفازی سیالات مخلوط نشدنی^۶ [۳۳] کاربرد دارد.

در روش میدان فاز، هر ورینت مارتنزیتی توسط یک پارامتر مشخصه^۷ که از مقدار صفر برای فاز آستنیت تا مقدار یک برای ورینت مارتنزیتی متناظر تغییر می‌کند، معرفی می‌شود. تکامل تدریجی این پارامتر مشخصه که بیانگر تکامل تدریجی مارتنزیت است، توسط معادله‌ی گینزبرگ-لاندا توصیف می‌شود. معادله‌ی گینزبرگ-لاندا در واقع نرخ تغییرات پارامتر مشخصه را به نیروهای محرکه‌ی ترمودینامیکی مرتبط می‌سازد. مؤلفه‌ای از تانسور کرنش کل و یا کرنش استحاله از گزینه‌های متداول برای پارامتر مشخصه می‌باشند. برخلاف روش لایه‌ی جداساز تیز که لایه‌ی جداسازی با ضخامت صفر بین هر دو فاز مجاور در نظر می‌گیرد، روش میدان فاز یک لایه‌ی جداساز با ضخامت محدود معرفی می‌کند که با حل معادله‌ی گینزبرگ-لاندا حاصل می‌شود. پارامتر مشخصه و تمامی خواص ترمومکانیکی به صورت پیوسته درون این لایه‌ی جداساز بین مقادیر آن‌ها در یک فاز تا مقادیر متناظر در فاز همسایه تغییر می‌کنند. شکل ۱-۶ طرح‌واره‌ای از مقایسه‌ی روش لایه‌ی جداساز تیز و روش میدان فاز و همچنین نحوه‌ی تغییرات متغیرهای میدان در این دو روش را به نمایش می‌گذارد.

¹ Level-set Method

² Sharp Interface

³ Dislocations

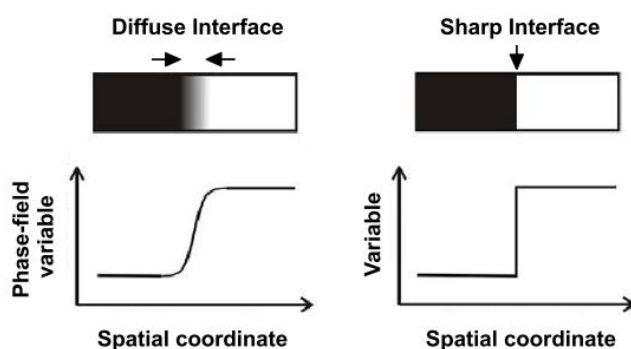
⁴ Grains

⁵ Grain Boundaries

⁶ Immiscible Fluids

⁷ Order Parameter

در استحاله‌های مارتنزیتی تنش-القایی^۱ و دما-القایی^۲، معادلات تعادل مکانیکی نیز نقش بسزایی ایفا می‌کنند و از این‌رو، با معادلات گینزبرگ-لاندا جفت شده و تحلیل می‌گردند. در روش میدان فاز، نیاز به در نظر گرفتن یک تابع پتانسیل فیزیکی است که نقاط کمینه‌ی آن مربوط به فازهای آستنیت و مارتنزیت می‌باشد. چنین تابع پتانسیلی معمولاً وابسته به دما، تنش الاستیک، پارامترهای مشخصه و گرادیان‌های آن‌ها است.



شکل ۱-۶- نحوه‌ی تغییرات متغیر میدان در روش‌های میدان فاز و لایه‌ی جداساز تیز [۳۴]

مزیت کلیدی روش میدان فاز نسبت به سایر روش‌ها عدم نیاز به فرض نمودن هندسه‌ی پیش‌فرض برای پاسخ است. افزون بر این، روش میدان فاز برای تمامی حالات میانی بین دو فاز اطلاعات فراهم می‌کند و به همین سبب، نسبت به روش ترمودینامیک که فقط حالات ابتدایی و انتهایی را در نظر می‌گیرد، اطلاعات بسیار بیشتری در اختیار می‌گذارد. رویکرد میدان فاز به‌عنوان پلی بین روش‌های اتمی مانند دینامیک مولکولی و روش‌های محیط پیوسته، نه تنها قابلیت حصول نتایج در ابعاد نانو را دارد (به‌عنوان مثال، ضخامت لایه‌ی جداساز آستنیت-مارتنزیت در حدود ۱ نانومتر می‌باشد)، بلکه از سوی دیگر، امکان تحلیل نمونه‌هایی با اندازه‌های بزرگ‌تر و زمان‌های طولانی‌تر را نسبت به تحلیل‌های اتمی فراهم می‌کند.

مطالعات گسترده‌ای بر روی استحاله‌های مارتنزیتی با استفاده از روش میدان فاز در مقیاس‌های مختلف و برای مواد مختلف صورت گرفته است. وانگ و خاچاتوریان [۳۵] از اولین کسانی بودند که از نظریه‌ی میدان فاز برای مدل‌سازی استحاله‌های مارتنزیتی استفاده کردند. آن‌ها برای حل معادلات حاکم از روش تبدیل فوریه‌ی سریع^۳ استفاده نمودند. اگرچه روش‌های طیفی سریع‌تر هستند، اما تنها توانایی تحلیل مسائل با شرایط مرزی متناوب را داشته و قادر به در نظر گرفتن آثار سطحی نیستند. به همین دلیل، برای در نظر گرفتن شرایط مرزی مختلف، روابط ساختاری پیچیده و هندسه‌های دلخواه استفاده از روش اجزای محدود بسیار منعطف‌تر است [۳].

۳۶ و ۳۷]. همچنین، از روش تفاضل محدود^۴ نیز برای حل معادلات میدان فاز استفاده شده است [۳۸].

¹ Stress-induced

² Thermal-induced

³ Fast Fourier Transformation (FFT)

⁴ Finite Difference

در زمینه‌ی مدل‌سازی استحاله‌های مارتنزیتی با روش میدان فاز می‌توان به تحقیقات گسترده‌ی لویتاس و همکارانش در سال‌های اخیر که موجب تقویت نظریه‌ی گینزبرگ-لاندا برای استحاله‌های مارتنزیتی از جنبه‌های مختلف شده است، اشاره کرد. آن‌ها انرژی پتانسیل جدیدی معرفی کردند، به گونه‌ای که استحاله‌های مارتنزیتی چندگانه و خواص ترمومکانیکی وابسته به دما را شامل گردد و همچنین خصوصیات پایه‌ای استحاله‌های فازی در مواد هوشمند و فولادها را به درستی پیش‌بینی کند؛ مانند نمودارهای تنش- کرنش با کرنش استحاله‌ی ثابت و عدم وابستگی آن به دما و همچنین مدول الاستیک غیرصفر در نقطه‌ی استحاله‌ی فازی. در این مطالعات، شرایط تعادل و پایداری برای استحاله‌های فازی دما-القایی و تنش-القایی، روابط انرژی و ضخامت لایه‌ی جداساز استخراج و روابط تحلیلی برای جوانه‌ی مارتنزیتی و نحوه‌ی رشد آن ارائه شد. همچنین پارامترهای مادی مورد نیاز برای مدل‌های ارائه‌شده با استفاده از محاسبات دینامیک مولکولی برای آلیاژ نیکل-آلومینیوم به دست آمد [۳۹-۴۱]. لویتاس و جوانبخت [۴۲] انرژی پتانسیل جدیدی برای ارائه‌ی تعریف درستی از کشش سطحی معرفی نمودند. در این پژوهش تعریف فیزیکی از انرژی سطحی متغیر و همچنین جمله‌ی گرادیان جدیدی برای تعریف انرژی لایه‌ی جداساز مارتنزیت-مارتنزیت مستقل از آستنیت-مارتنزیت ارائه شد. لویتاس و جوانبخت در پژوهشی دیگر [۴۳]، لایه‌ی سطحی خارجی را به عنوان فاصله‌ی گذر هوا-جامد تعریف و اثر آن را بر استحاله‌ی مارتنزیتی بررسی کردند.

از دیگر پژوهش‌های کلیدی در این زمینه می‌توان به بررسی استحاله‌های مارتنزیتی بر پایه‌ی کرنش‌های بزرگ [۴۴ و ۴۵]، برهم‌کنش استحاله‌های فازی مارتنزیتی با نابجایی‌ها [۴۶ و ۴۷] و نانوحفره‌ها^۱ [۴۸ و ۴۹]، بررسی اثر ناهمسانگردی الاستیک بر استحاله‌های مارتنزیتی [۵۰] و مدل‌سازی استحاله‌های مارتنزیتی با خواص الاستیک وابسته به فاز [۵۱] اشاره کرد.

۱-۶ نظر به‌های غیر محلی

در مکانیک محیط پیوسته‌ی کلاسیک^۲، یک توده‌ی ماده‌ی جامد را می‌توان به صورت مجموعه‌ای از حجم‌های بی‌نهایت کوچک در نظر گرفت که به صورت مستقل قابل توصیف هستند و تنها از طریق معادلات تعادل و با تبادل جرم، تکانه^۳، انرژی و آنتروپی با یکدیگر تعامل دارند. هرچند در واقعیت، مواد ساختارهای گسسته‌ای از اتم‌ها و مولکول‌ها هستند. برای مقیاس‌های به‌اندازه‌ی کافی بزرگ، این ساختارهای گسسته‌ی اتم‌ها و مولکول‌ها را می‌توان به صورت پیوسته در نظر گرفت و با استفاده از مکانیک محیط پیوسته‌ی کلاسیک تجزیه و تحلیل نمود. با این

¹ Nanovoids

² Classical Continuum Mechanics

³ Momentum

فصل دوم

روابط حاکم

۱-۲ مقدمه

در فصل قبل مفاهیم کلی در زمینه‌ی استحاله‌های فازي مارتنزیتی و الاستیسیته‌ی غیرمحلی، کاربردهای هر یک و همچنین پژوهش‌های انجام‌شده در این زمینه‌ها مورد بررسی قرار گرفت. افزون بر این، رویکرد میدان فاز به‌عنوان یکی از پرکاربردترین روش‌های مدل‌سازی استحاله‌های مارتنزیتی معرفی شد. در این فصل ابتدا معادلات میدان فاز-مکانیک با در نظر گرفتن الاستیسیته‌ی محلی و غیرمحلی معرفی می‌شود. سپس خواص کرنل غیرمحلی، توابع قابل استفاده به‌عنوان کرنل غیرمحلی و همچنین کرنل دوفازی^۱ مورد بررسی قرار می‌گیرد. در ادامه با ارائه‌ی توضیحات دقیق و کامل در مورد آثار مرزی و شرط بازیابی حالت محلی^۲، لزوم معرفی یک کرنل غیرمحلی جدید آشکار می‌گردد. در نهایت کرنل دوفازی جبران‌شده^۳ به‌عنوان یک کرنل غیرمحلی جدید که عاری از مشکلات کرنل‌های پیشین است، معرفی و سازگاری ترمودینامیکی آن بررسی می‌شود.

¹ Two-phase Kernel

² Locality Recovery Condition

³ Compensated Two-phase Kernel

۲-۲ معادلات میدان فاز-الاستیسیته‌ی محلی

در روش میدان فاز هر ورینت مارتنزیتی به‌وسیله‌ی یک پارامتر مشخصه (η_i) معرفی می‌شود، به‌گونه‌ای که $i = 1, 2, \dots, n$ بیانگر تعداد ورینت‌ها می‌باشد و در صورتی که n ورینت موجود باشد، مقدار آن به‌صورت $i = 1, 2, \dots, n$ تغییر می‌کند. تکامل تدریجی این ورینت‌های مارتنزیتی به‌وسیله‌ی معادلات میدان فاز یا معادلات گینزبرگ-لاندا معرفی می‌شود. این معادلات، نرخ تغییرات پارامتر مشخصه‌ی η_i را به‌صورت خطی به نیروهای محرکه‌ی ترمودینامیکی که در واقع مشتقات تابعی انرژی آزاد نسبت به پارامتر مشخصه‌ی η_i هستند، مرتبط می‌کنند. با در نظر گرفتن تنش‌ها، نانوساختارهای مارتنزیتی را می‌توان با جفت کردن معادلات گینزبرگ-لاندا و معادلات الاستیسیته تحلیل نمود. تکامل تدریجی نانوساختار برای یک ورینت مارتنزیتی به‌وسیله‌ی معادله‌ی گینزبرگ-لاندا به‌صورت رابطه‌ی (۱-۲) تعریف می‌شود [۳].

$$\frac{1}{\lambda} \frac{\partial \eta}{\partial t} = - \left. \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right|_{\varepsilon} + \beta \nabla^2 \eta \quad (1-2)$$

در رابطه‌ی (۱-۲)، λ ضریب سینتیک استحاله‌ی فازی و β ضریب گرادیان انرژی می‌باشد. ψ انرژی آزاد هلمهولتز بر واحد حجم است که مشتق آن نسبت به پارامتر مشخصه‌ی η در کرنش کل ثابت (ε) در نظر گرفته می‌شود. انرژی آزاد هلمهولتز ψ را می‌توان به‌صورت رابطه‌ی (۲-۲) نوشت.

$$\psi = \psi^e + \psi^c + \psi^\nabla \quad (2-2)$$

در رابطه‌ی (۲-۲)، ψ^e انرژی الاستیک، ψ^c انرژی بلوری و ψ^∇ انرژی گرادیان می‌باشد و هر کدام به‌صورت روابط (۳-۲) تا (۵-۲) تعریف می‌شوند.

$$\psi^e = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}_e = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{tr}) \quad (3-2)$$

$$\psi^c = A_0 (\theta_e - \theta_c) \eta^2 (1 - \eta)^2 \quad (4-2)$$

$$\psi^\nabla = \frac{\beta}{2} |\nabla \eta|^2 \quad (5-2)$$

در روابط (۳-۲) تا (۵-۲)، $\boldsymbol{\sigma}$ تانسور تنش، $\boldsymbol{\varepsilon}_e$ تانسور کرنش الاستیک، $\boldsymbol{\varepsilon}$ تانسور کرنش کل، $\boldsymbol{\varepsilon}_{tr}$ تانسور کرنش استحاله، A_0 پارامتر ماده، θ_e دمای تعادل، θ_c دمای بحرانی که در آن آستنیت پایداری خود را از دست داده و تبدیل به مارتنزیت می‌شود، و $A_0 (\theta_e - \theta_c)$ مانع در برابر تبدیل آستنیت به مارتنزیت می‌باشد. تانسور کرنش استحاله از مقدار صفر برای آستنیت تا $\boldsymbol{\varepsilon}_{tr}^M$ برای مارتنزیت تغییر کرده و به‌صورت رابطه‌ی (۶-۲) تعریف می‌شود.

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{tr} = \eta^2(3 - 2\eta)\boldsymbol{\varepsilon}_{tr}^M \quad (6-2)$$

با جایگذاری رابطه‌ی (۲-۲) در رابطه‌ی (۱-۲)، معادله‌ی گینزبرگ-لاندا به صورت رابطه‌ی (۷-۲) به دست می‌آید.

$$\frac{1}{\lambda} \frac{\partial \eta}{\partial t} = \boldsymbol{\sigma} : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{tr}}{\partial \eta} - 2A_0(\theta_e - \theta_c)(2\eta^3 - 3\eta^2 + \eta) + \beta \nabla^2 \eta \quad (7-2)$$

باید توجه نمود که در پژوهش حاضر، استحاله‌ی فازی در دمای تعادل بررسی شده و به عبارت دیگر استحاله از نوع دما-القایی نمی‌باشد. از همین روست که جمله‌ی انرژی حرارتی در رابطه‌ی (۲-۲) غایب می‌باشد. همچنین، انرژی سطح مستقل از حالت فاز بوده و شرط مرزی عایق^۱ برای ورینت مارتنزیتی به صورت رابطه‌ی (۸-۲) در نظر گرفته شده است [۵۱].

$$\beta \nabla \eta \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (8-2)$$

در رابطه‌ی (۸-۲)، \mathbf{n} بیانگر بردار عمود بر سطح است. چنین شرطی تضمین می‌کند که انرژی سطح در حین استحاله تغییر نکرده و به عبارت دیگر استحاله از نوع سطح-القایی نیز نمی‌باشد. بنابراین، استحاله‌ی مورد بررسی در پژوهش حاضر تنها از نوع تنش-القایی می‌باشد.

معادلات الاستیسیته‌ی کلاسیک محلی شامل معادلات تعادل، سینماتیک و ساختاری برای نقطه‌ی مرجع \mathbf{x} به صورت روابط (۹-۲) تا (۱۱-۲) تعریف می‌شود [۳].

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 0 \quad (9-2)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_e(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\varepsilon}_{tr}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) + (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}))^T] \quad (10-2)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon}_e(\mathbf{x}) = \mathbf{D} : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}_{tr}(\mathbf{x})) \quad (11-2)$$

در رابطه‌ی (۱۰-۲)، \mathbf{u} بردار جابه‌جایی و در رابطه‌ی (۱۱-۲)، \mathbf{D} تانسور الاستیک می‌باشد.

۳-۲ معادلات میدان فاز-الاستیسیته‌ی غیرمحلی

تنها تفاوت معادلات میدان فاز-الاستیسیته‌ی غیرمحلی و حالت محلی در تعریف رابطه‌ی ساختاری تنش-کرنش می‌باشد، در حالی که معادلات سینماتیک و تعادل بدون تغییر و مشابه الاستیسیته‌ی محلی باقی می‌مانند. در

¹ Insulation Boundary Condition

الاستیسیته‌ی غیرمحلی تنش در یک نقطه تابع میانگین وزنی کرنش در تمام نقاط بدنه است. به عبارت دیگر، در الاستیسیته‌ی غیرمحلی رابطه‌ی خطی میان تنش و کرنش در الاستیسیته‌ی محلی (رابطه‌ی (۲-۱۱)) با یک انتگرال کانولوشن به صورت رابطه‌ی (۲-۱۲) جایگزین می‌شود [۶۵ و ۶۶].

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \int_V k(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|, \tau) \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon}_e(\mathbf{x}') dV' \quad (12-2)$$

در رابطه‌ی (۲-۱۲)، $k(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|, \tau)$ یک تابع وزنی است که با نام کرنل غیرمحلی شناخته می‌شود و به اثر غیرمحلی القاشده در نقطه‌ی مرجع \mathbf{x} توسط نقطه‌ی \mathbf{x}' یک وزن اختصاص می‌دهد. تأثیر وزنی این اثر غیرمحلی با افزایش فاصله‌ی $|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|$ کاهش می‌یابد. τ نیز یک طول مشخصه وابسته به خواص میکرومکانیکی می‌باشد که پارامتر غیرمحلی^۱ نامیده می‌شود. همچنین باید توجه نمود که انتگرال کانولوشن رابطه‌ی (۲-۱۲) به کل حجم بدنه تعمیم داده شده است؛ به عبارت دیگر، $dV' = dV(\mathbf{x}')$.

۴-۲ خواص کرنل غیرمحلی

کرنل غیرمحلی خواص زیر را ارضا می‌کند [۶۰]:

۱. در کل دامنه‌ی خود نامنفی بوده و نسبت به نقطه‌ی مرجع \mathbf{x} متقارن می‌باشد.
۲. هنگامی که پارامتر غیرمحلی τ به سمت صفر میل می‌کند، کرنل غیرمحلی k تبدیل به تابع دلتای دیراک δ شده و الاستیسیته‌ی محلی بازیابی می‌شود. به عبارت دیگر،

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} k(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|, \tau) = \delta(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \quad (13-2)$$

۳. مقدار بیشینه‌ی آن در نقطه‌ی مرجع \mathbf{x} حاصل می‌شود و با فاصله گرفتن از نقطه‌ی مرجع \mathbf{x} ، مقدار آن به صورت تدریجی به سمت صفر کاهش پیدا می‌کند.

۴. شرط بهنجار شدن روی دامنه‌ی بی‌نهایت را ارضا می‌کند. به عبارت دیگر، با انتگرال گیری از کرنل غیرمحلی روی یک دامنه‌ی بی‌نهایت V_∞ باید مقدار یک حاصل شود؛ یعنی،

$$\int_{V_\infty} k(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|, \tau) dV' = 1 \quad (14-2)$$

¹ Nonlocal Parameter

فصل سوم

شبیه‌سازی عددی و تحلیل نتایج

۳-۱ مقدمه

در فصل‌های گذشته، پس از ارائه‌ی مفاهیم کلی و پیشینه‌ی پژوهش در زمینه‌ی استحاله‌های فازی مارتنزیتی، الاستیسیته‌ی غیرمحلی و روش میدان فاز در فصل اول، معادلات میدان فاز-مکانیک با در نظر گرفتن الاستیسیته‌ی محلی و غیرمحلی در فصل دوم ارائه گردید. همچنین، شرح کاملی از کرنل‌های غیرمحلی و نقایص آن‌ها مطرح و کرنل دوفازی جبران‌شده به‌عنوان یک کرنل جدید و بدون مشکلات کرنل‌های پیشین معرفی شد. در این فصل، به پیاده‌سازی و حل عددی روابط حاکم با استفاده از روش اجزای محدود پرداخته می‌شود. پس از اعتبارسنجی روش پیاده‌سازی و بررسی همگرایی عددی حلگر و همگرایی شبکه‌ی اجزای محدود، مسائل گوناگونی از استحاله‌های فازی مارتنزیتی مانند حرکت لایه‌ی جداساز آستنیت-مارتنزیت صفحه‌ای و غیرصفحه‌ای، رشد مارتنزیت در نمونه‌های با شرایط اولیه و مرزی گوناگون، استحاله‌ی مارتنزیتی در حضور عیوب هندسی مانند سوراخ و ترک، و تکامل نانوساختار مارتنزیتی در مسائل با شرط مرزی تقارن مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

۳-۲ پیاده‌سازی عددی

به‌منظور پیاده‌سازی عددی معادلات میدان فاز-مکانیک از روش اجزای محدود غیرخطی و نرم‌افزار کامسول^۱ استفاده می‌شود. معادلات میدان فاز در زیربرنامه‌ی نفوذ گذرا و معادلات الاستیسیته‌ی محلی و غیرمحلی در

^۱ Comsol

زیربرنامه‌ی مکانیک سازه‌ای پایا پیاده‌سازی می‌گردند. در نرم‌افزار کامسول، تمامی معادلات حاکم بر فیزیک‌های مختلف به صورت شکل ضعیف^۱ خود به کار برده می‌شوند، زیرا برای فرمول‌بندی و گسسته‌سازی اجزای محدود مناسب هستند. علاوه بر این، با استفاده از شکل ضعیف پاسخ‌ها به پیوستگی کمتری نیاز دارند، یا به بیان دقیق‌تر، آن‌ها فقط باید به طور مستقل روی هر المان پیوسته باشند. نکته‌ی قابل توجه این است که این شکل‌های ضعیف و همچنین متغیرهای داخلی نرم‌افزار کامسول قابل ویرایش هستند و این قابلیت امکان ایجاد تغییرات دلخواه در معادلات و تعاریف متغیرها را فراهم می‌سازد. افزون بر این، نرم‌افزار کامسول از یک عملگر داخلی بهره می‌برد که با استفاده از آن می‌توان از یک عبارت به جای انتگرال‌گیری در نقاط مرجع، بر روی نقاط مقصد انتگرال گرفت. این عملگر که تعریف انتگرال‌های کانولوشن و همچنین سایر تبدیلات انتگرالی را ممکن می‌سازد، امکان پیاده‌سازی مستقیم معادلات الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی را در نرم‌افزار کامسول فراهم می‌کند.

برای حل معادلات میدان فاز-مکانیک از حلگر مستقیم چندجبهه‌ای به شدت موازی پراکنده^۲ با گزینه‌ی تفکیک‌شده^۳ استفاده می‌شود. همچنین روش تفاضل پس‌رو با گام‌های زمانی تنظیم‌پذیر برای گسسته‌سازی زمان به کار گرفته می‌شود. این موضوع به همگرایی بهتر به خصوص در گام‌های ابتدایی حل که همگرایی به دلایل مختلف مانند گرادیان‌های بزرگ مشکل است، کمک بسزایی می‌کند.

به جز مسئله‌ی اعتبارسنجی الاستیسیته‌ی غیرمحلی (بخش ۳-۳-۲) که در آن از المان‌های خطی استفاده شده است، در تمامی مسائل المان‌های نه‌گره‌ای لاگرانژ^۴ با گسسته‌سازی مرتبه دوم برای جابه‌جایی و پارامتر مشخصه مورد استفاده می‌گیرد. همچنین، از چهار نقطه‌ی انتگرال‌گیری گوس^۵ برای محاسبه‌ی انتگرال کانولوشن رابطه‌ی ساختاری تنش-کرنش در الاستیسیته‌ی غیرمحلی استفاده می‌شود. لازم به ذکر است که هزینه‌ی محاسباتی معادلات الاستیسیته‌ی غیرمحلی با توجه به انتگرال‌گیری بر روی کل دامنه‌ی حل بسیار بالا و استفاده از المان‌های بسیار کوچک نیازمند منابع محاسباتی قدرتمند می‌باشد. از این‌رو در تمامی مسائل پیش‌رو از المان‌های با اندازه‌ی ضلع ۰/۵ و کوچک‌تر استفاده می‌شود که از لحاظ محاسباتی معقول بوده و منجر به حصول پاسخ‌های مستقل از شبکه‌ی اجزای محدود خواهد شد.

باید توجه نمود که در تمامی مسائل از فرمول‌بندی تنش‌صفحه‌ای استفاده شده است. همچنین، به جز مسئله‌ی اعتبارسنجی الاستیسیته‌ی غیرمحلی (بخش ۳-۳-۲)، پارامترهای مادی آلیاژ نیکل-آلومینیوم مطابق جدول ۱-۳ در تمامی مسائل مورد استفاده قرار گرفته است [۳۹، ۴۰ و ۹۸]. دوباره یادآوری می‌شود همان‌گونه که در بخش

¹ Weak Form

² Multifrontal Massively Parallel Sparse (MUMPS)

³ Segregated

⁴ Nine-node Lagrange Elements

⁵ Gauss Integration Point

۷-۱ اشاره شد، در تمامی بخش‌های آتی، اندازه، زمان، سرعت و تنش به ترتیب دارای واحدهای nm ، ps ، $\frac{\text{nm}}{\text{ps}}$ و GPa می‌باشند و به منظور پرهیز از تکرار، این واحدها ذکر نمی‌شوند.

جدول ۱-۳- پارامترهای مادی آلیاژ نیکل-آلومینیوم [۳۹، ۴۰ و ۹۸]

پارامتر	مقدار
λ	$2600 (\text{Pa} \cdot \text{s})^{-1}$
A_0	$4.4 \text{ MPa} \cdot \text{K}^{-1}$
θ_e	215 K
θ_c	-183 K
β	$5.18 \times 10^{-10} \text{ N}$
E	177.023 GPa
ν	0.238

۳-۳ اعتبارسنجی

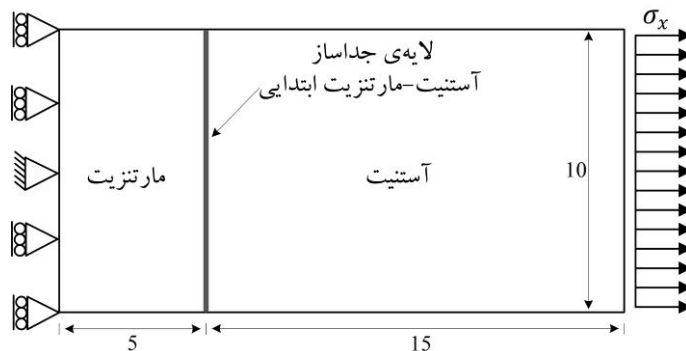
به منظور اطمینان از صحت روش پیاده‌سازی، معادلات میدان فاز و الاستیسیته‌ی غیرمحملی برای دو مسئله‌ی نمونه حل و نتایج آن‌ها با پاسخ‌های تحلیلی و عددی مقایسه خواهد شد.

۱-۳-۳ اعتبارسنجی معادلات میدان فاز-الاستیسیته‌ی محلی

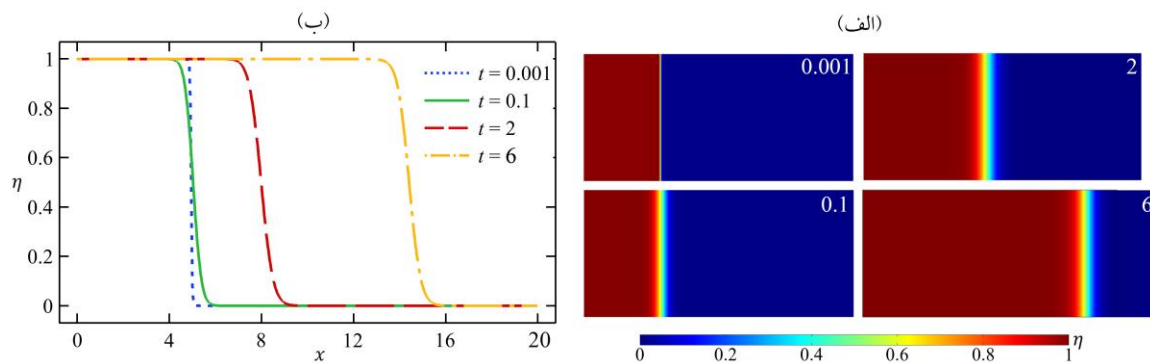
برای اعتبارسنجی معادلات میدان فاز-الاستیسیته‌ی محلی حرکت صفحه‌ای یک لایه‌ی جداساز آستنیت-مارتنزیت صفحه‌ای در نظر گرفته شده و ضخامت و سرعت آن با پاسخ تحلیلی مقایسه خواهد شد. بدین منظور مطابق شکل ۱-۳، یک نمونه‌ی مستطیلی به ابعاد 20×10 در نظر گرفته می‌شود. قسمتی از سمت چپ نمونه به ابعاد 5×10 مارتنزیت و مابقی نمونه آستنیت می‌باشد. به منظور ایجاد یک لایه‌ی جداساز صفحه‌ای متحرک، کرنش استحال به صورت $\epsilon_{tr}^M = \begin{bmatrix} 0.215 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ در نظر گرفته می‌شود. مرز سمت چپ در راستای x و نقطه‌ی میانی آن در راستاهای x و y بسته شده است. مرزهای بالا و پایین آزاد هستند و تنش کششی $\sigma_x = 1.25$ به مرز سمت راست اعمال شده است. همچنین برای فاز شرایط مرزی ایزوله برای تمامی مرزها در نظر گرفته شده است.

روند تکاملی نانو ساختار مارتنزیتی و منحنی‌های متناظر لایه‌ی جداساز در راستای خط افقی میانی نمونه در شکل ۲-۳ ارائه شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، ابتدا لایه‌ی جداساز با ضخامت نزدیک به صفر گسترش یافته و ضخامت آن افزایش می‌یابد. سپس این لایه‌ی جداساز گسترش یافته به سمت راست نمونه به صورت صفحه‌ای

حرکت می‌کند. در این حالت ضخامت لایه‌ی جداساز و سرعت انتشار آن به ترتیب برابر $\delta = 2.11$ و $\nu = 1.610$ به دست آمده است، که در تطابق بسیار خوب با پاسخ تحلیلی $\delta = 2.05$ و $\nu = 1.612$ ارائه شده در مرجع [۹۹] می‌باشد.



شکل ۳-۱- ابعاد و شرایط اولیه و مرزی یک نمونه‌ی مستطیلی شامل لایه‌ی جداساز آستنیت-مارتنزیت تحت کشش تک‌محوره

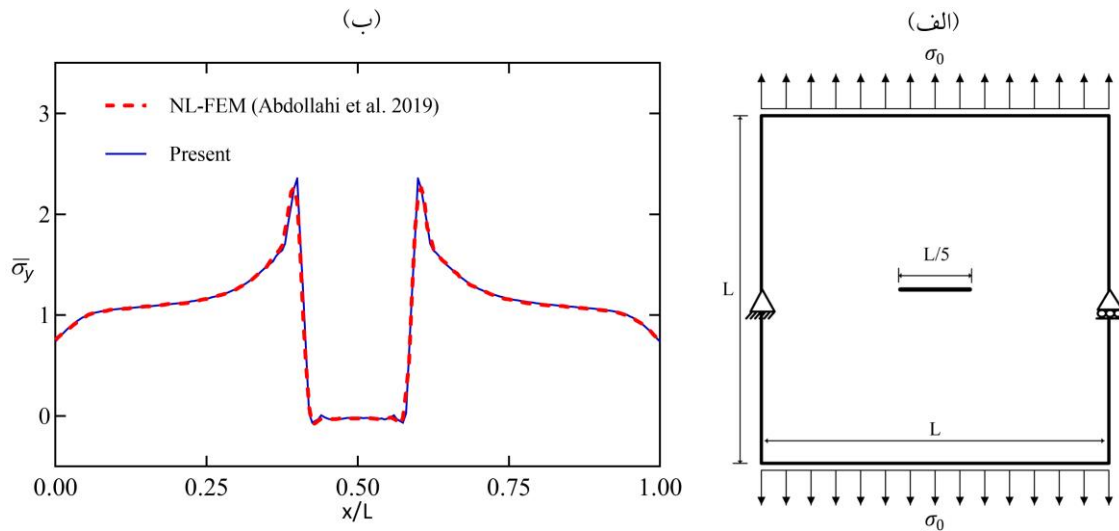


شکل ۳-۲- (الف) روند تکاملی نانو ساختار مارتنزیتی و (ب) منحنی‌های متناظر لایه‌ی جداساز در راستای خط افقی میانی نمونه

۳-۳-۲ اعتبارسنجی معادلات الاستیسیته‌ی غیرمحلّی

به منظور اعتبارسنجی معادلات الاستیسیته‌ی غیرمحلّی، مسئله‌ای مشابه با مرجع [۹۲] (شکل ۳-۳ الف)) در نظر گرفته شده و نتایج حاصل با نتایج حل اجزای محدود در مرجع مذکور مقایسه می‌گردد. بدین منظور یک نمونه‌ی مربعی شکل به طول ضلع L که در مرکز آن یک ترک افقی به طول $L/5$ قرار دارد، در نظر گرفته می‌شود. نقطه‌ی میانی مرز سمت چپ در راستاهای x و y ، و نقطه‌ی میانی مرز سمت راست تنها در راستای y بسته شده است. تنش کششی σ_0 نیز به مرزهای بالا و پایین اعمال شده است. کرنل دوفازی با مقادیر پارامتر فاز $\xi = 0.5$ و پارامتر غیرمحلّی $\tau = L/20$ مورد استفاده قرار گرفته است. برای خواص الاستیک نیز مدول یانگ $E = 210$ و ضریب پواسون $\nu = 0.2$ می‌باشند. مشابه با مرجع [۹۲] از یک شبکه‌ی اجزای محدود یکنواخت 50×50 با توابع شکل خطی استفاده شده است. نمودارهای تنش بهنجار شده در راستای y ، یعنی $\bar{\sigma}_y = \sigma_y / \sigma_0$ در راستای خط افقی میانی یا به عبارت دیگر خط افقی که از ترک عبور می‌کند، در شکل ۳-۳ (ب) برای پیاده‌سازی پژوهش حاضر و نتایج مرجع [۹۲] ارائه و با یکدیگر مقایسه شده‌اند. همان‌گونه که مشاهده

می‌شود تطابق بسیار خوب با تفاوت قابل چشم‌پوشی بین نتایج وجود داشته و می‌توان از صحت پیاده‌سازی معادلات الاستیسیته‌ی غیرمحلی اطمینان حاصل نمود.



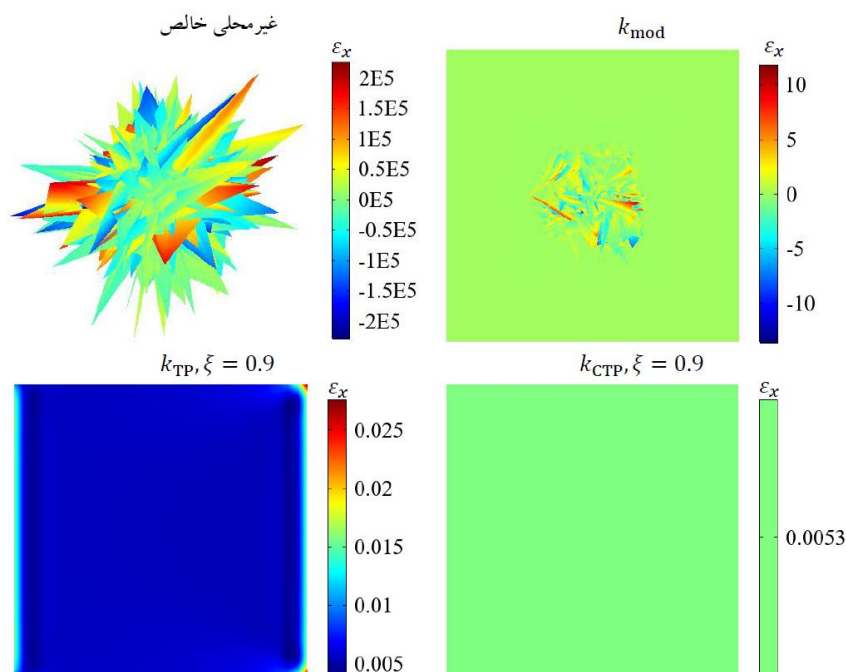
شکل ۳-۳ الف) ابعاد و شرایط مرزی نمونه‌ی ترک‌دار تحت کشش تک‌محوره و ب) منحنی‌های تنش بهنجار شده در راستای \mathcal{Y} ، در راستای خط افقی میانی حاصل از پژوهش حاضر و مرجع [۹۲] $\bar{\sigma}_y = \sigma_y / \sigma_0$

۴-۳ بررسی رفتار الاستیک غیرمحلی انتگرالی یک نمونه‌ی مربعی تحت کشش تک‌محوره (بدون در نظر گرفتن معادلات میدان فاز)

همان‌گونه که در فصل قبل اشاره شد، کرنل‌های غیرمحلی سابق یا از مشکلات مسائل بدوضع و یا از کاستی آثار مرزی رنج می‌برند. در این بخش، برتری‌های کرنل غیرمحلی معرفی شده، یعنی کرنل دوفازی جبران شده، نسبت به کرنل‌های قبلی از طریق یک مثال ساده نشان داده می‌شود. بدین منظور، یک نمونه‌ی مربعی به طول ضلع ۱۲، که ضلع سمت چپ آن در راستای \mathcal{X} و گوشه‌ی پایین سمت چپ آن در راستاهای \mathcal{X} و \mathcal{Y} بسته شده است، در نظر گرفته می‌شود. مرزهای بالا و پایین آزاد هستند و تنش کششی $\sigma_x = 1$ به مرز سمت راست اعمال شده است. معادلات الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی (بدون معادلات میدان فاز) با در نظر گرفتن حالت غیرمحلی خالص، کرنل اصلاح شده، کرنل دوفازی و کرنل دوفازی جبران شده حل می‌شوند. همچنین، پارامتر فاز $\xi = 0.9$ و پارامتر غیرمحلی $\tau = 1$ مورد استفاده قرار گرفته است.

توزیع کرنش ε_x برای هر چهار حالت مذکور در شکل ۳-۴ ارائه شده است. با توجه به شرایط مرزی و بار اعمال شده، توزیع کرنش باید مطابق با حالت محلی به صورت یکنواخت باشد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، برای حالت غیرمحلی خالص، توزیع کرنش کاملاً غیرمنطقی و از لحاظ فیزیکی بی‌معناست که بیانگر بدوضع بودن مسائل الاستیسیته‌ی غیرمحلی خالص می‌باشد. برای کرنل اصلاح شده، اگرچه توزیع کرنش در نواحی مرزی نمونه صحیح و یکنواخت می‌باشد، اما در ناحیه‌ی مرکزی نمونه توزیع کرنش کاملاً غیرفیزیکی است. دلیل این موضوع حذف جمله‌ی محلی $[1 - \gamma(\mathbf{x})]\mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon}_e(\mathbf{x})$ در رابطه‌ی (۲-۲۳) در نواحی مرکزی نمونه که $\gamma(\mathbf{x}) = 1$

است، می‌باشد؛ به‌گونه‌ای که رفتار ماده در این نواحی به‌صورت غیرمحلی خالص در آمده و مشکل بدوضع بودن مسئله پدیدار می‌شود. برای کرنل دوفازی، مشکل بدوضعی و هیچ رفتار غیرفیزیکی مشاهده نمی‌شود؛ هرچند، در مجاورت مرزهای چپ و راست، مقدار کرنش متفاوت از ناحیه‌ی مرکزی می‌باشد. به‌بیان دیگر، شرط بازیابی حالت محلی ارضا نشده و توزیع کرنش یکنواخت نیست که به‌دلیل مشکل آثار مرزی در کرنل دوفازی می‌باشد. در طرف مقابل برای کرنل دوفازی جبران‌شده، نه مشکل مسائل بدوضع و رفتارهای غیرفیزیکی و نه مشکل آثار مرزی وجود ندارد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، توزیع کرنش در سراسر نمونه و حتی در مجاورت مرزها یکسان بوده و آثار مرزی پدیدار نمی‌گردد. از این‌رو می‌توان نتیجه گرفت که کرنل دوفازی جبران‌شده را می‌توان به‌عنوان جایگزین کارآمدی برای کرنل‌های غیرمحلی پیشین، نه‌تنها برای مسائل میدان فاز-الاستیسیته‌ی غیرمحلی، بلکه برای سایر مسائل الاستیسیته‌ی غیرمحلی نیز به کار گرفت.



شکل ۳-۴- توزیع کرنش ϵ_x برای حالت غیرمحلی خالص و کرنل‌های اصلاح‌شده، دوفازی و دوفازی جبران‌شده

۳-۵- بررسی همگرایی عددی مسائل میدان فاز-الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی با کرنل‌های مختلف

به‌منظور مطالعه‌ی اثر کرنل‌های غیرمحلی مختلف بر همگرایی عددی مسائل میدان فاز-الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی، بازشدگی یک لایه‌ی جداساز صفحه‌ای بدون اعمال بار خارجی در نظر گرفته می‌شود. بدین منظور، مسئله‌ی بررسی‌شده در بخش ۳-۳-۱ با همان شرایط اولیه و مرزی مورد بررسی قرار می‌گیرد، با این تفاوت که هیچ تنش‌ی به مرز سمت راست نمونه اعمال نمی‌گردد. کرنش استحاله نیز به‌صورت $\epsilon_{tr}^M = \begin{bmatrix} 0.215 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ در نظر گرفته می‌شود. در چنین شرایطی، لایه‌ی جداساز باز شده و بدون اینکه حرکتی داشته باشد، سریعاً پاسخ پایا حاصل می‌شود. بنابراین، این مسئله از نقطه‌نظر همگرایی عددی مسئله‌ی ساده‌ای به شمار می‌آید و اگر کرنلی

فصل چهارم

نتیجه‌گیری و پیشنهادها

۱-۴ نتیجه‌گیری

در این پایان‌نامه به بررسی آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی بر استحاله‌های مارتنزیتی تنش-القایی پرداخته شد. به‌منظور چیره شدن بر مشکلات کرنل‌های غیرمحلی پیشین، کرنل غیرمحلی جدیدی با نام کرنل دوفازی جبران‌شده معرفی گردید. همچنین، سازگاری ترمودینامیکی رابطه‌ی ساختاری تنش-کرنش منتج از این کرنل غیرمحلی با استفاده از روابط ترمودینامیکی نشان داده شد. با استفاده از روش اجزای محدود غیرخطی و نرم‌افزار کامسول، معادلات میدان فاز-مکانیک با در نظر گرفتن الاستیسیته‌ی محلی و غیرمحلی تحلیل گردید. با تحلیل مسائل مختلفی از استحاله‌های فازی مارتنزیتی در نمونه‌های با شرایط اولیه و مرزی گوناگون، نتایج درخور توجهی حاصل شد که به‌صورت خلاصه مهم‌ترین آن‌ها به شرح زیر می‌باشد:

- برخلاف کرنل‌های متداول، برای کرنل دوفازی جبران‌شده مشکلات مسائل بدوضع، همگرایی عددی و آثار مرزی وجود ندارد و می‌توان این کرنل را با آسودگی خاطر نه‌تنها برای مسائل میدان فاز-الاستیسیته‌ی غیرمحلی، بلکه برای مسائل غیرمحلی در سایر زمینه‌ها به کار برد.

- برخلاف لایه‌ی جداساز صفحه‌ای که با در نظر گرفتن آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی تنها تفاوت اندکی در انحنای آن مشاهده شده و سرعت حرکت آن تغییری نمی‌کند، الاستیسیته‌ی غیرمحلی با هر دو کرنل دوفازی و دوفازی جبران‌شده باعث کاهش سرعت لایه‌ی جداساز غیرصفحه‌ای و ضخامت آن در مجاورت مرزهای آزاد می‌گردد. همچنین، الاستیسیته‌ی غیرمحلی باعث انحراف قابل توجه لایه‌ی جداساز غیرصفحه‌ای از حالت عمود در نمونه‌ی بدون اعمال تنش خارجی می‌شود. نکته‌ی قابل توجه دیگر این است که الاستیسیته‌ی غیرمحلی با هر دو کرنل دوفازی و دوفازی جبران‌شده موجب کاهش تنش‌های بیشینه‌ی کششی و فشاری اطراف لایه‌ی جداساز و همچنین مساحت ناحیه‌های متناظر با آن‌ها می‌گردد.
- کرنل دوفازی به دلیل حضور آثار مرزی باعث پیش‌بینی نادرست تنش آستانه‌ی استحاله، ناحیه‌ی شروع استحاله و به دنبال آن مسیر استحاله در یک ناحیه‌ی هم‌بند ساده می‌شود، در حالی که با جبران کردن آثار مرزی توسط کرنل دوفازی جبران‌شده، نتایجی مطابق با حالت محلی حاصل می‌شود.
- الاستیسیته‌ی غیرمحلی با هر دو کرنل دوفازی و دوفازی جبران‌شده باعث کاهش تمرکز تنش و به دنبال آن تمرکز مارتنزیت در مجاورت یک سوراخ هندسی می‌شود؛ هرچند این کاهش تمرکز برای کرنل دوفازی قابل توجه‌تر از کرنل دوفازی جبران‌شده است. این موضوع به دلیل آثار مرزی ناشی از مرزهای سوراخ در کرنل دوفازی است.
- در حالی که کرنل دوفازی موجب پدیدار شدن رفتارهای غیرفیزیکی و غیرمنطقی در برخی مسائل مانند رشد مارتنزیت در نمونه‌ی با شرایط اولیه و مرزی هم‌گن، رشد جوانه‌ی مارتنزیتی مرکزی و مارتنزیت غیرکامل در مجاورت مرز می‌شود، کرنل دوفازی جبران‌شده این مشکلات را برطرف و نتایج منطبق بر انتظارات فیزیکی ارائه می‌کند.
- الاستیسیته‌ی غیرمحلی به طرز کارآمدی موجب کاهش تمرکز تنش و متعاقباً تمرکز مارتنزیت در ناحیه‌ی نوک ترک می‌شود. همچنین این نظریه به صورت تأثیرگذاری وابستگی نرخ رشد اولیه‌ی مارتنزیت به شبکه‌ی اجزای محدود که ناشی از میدان تکین تنش در نوک ترک است را برطرف می‌کند.
- اگرچه کرنل دوفازی جبران‌شده نتایج نویدبخشی برای مسائل متقارن کاهش‌یافته ارائه می‌کند، به طور کلی استفاده از تقارن مرزی و متعاقباً مدل‌های کاهش‌یافته مانند مدل‌های نصف و یک‌چهارم در چارچوب الاستیسیته‌ی غیرمحلی امکان‌پذیر نمی‌باشد.
- اگرچه در برخی مسائل، نتایج حاصل از الاستیسیته‌ی غیرمحلی با کرنل دوفازی جبران‌شده از نظر ریخت‌شناسی و مسیر استحاله بسیار نزدیک به نتایج حالت محلی است، اما ملاحظات سینتیکی استحاله مانند نرخ رشد اولیه، سرعت لایه‌ی جداساز و تمرکز فاز تفاوت‌های قابل توجهی دارند که در پژوهش‌های آینده می‌توان به بررسی دقیق‌تر آن‌ها پرداخت.

۲-۴ پیشنهادها

پیشنهادهای زیر به عنوان ایده‌هایی برای پژوهش‌های آینده در ادامه‌ی این پژوهش ارائه می‌شود:

- بررسی آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر استحاله‌های مارتنزیتی چندورینته و همچنین مطالعه‌ی استحاله‌های دما- و سطح-القایی افزون بر استحاله‌های تنش-القایی
- مطالعه‌ی استحاله‌های فازی مارتنزیتی با در نظر گرفتن خواص ناهمسانگرد و وابسته به فاز بر مبنای الاستیسیته‌ی غیرمحلی
- بررسی آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی بر استحاله‌های مارتنزیتی با در نظر گرفتن کرنش‌های بزرگ
- مدل‌سازی میدان فاز سایر پدیده‌های فیزیکی مانند نابجایی‌ها، نانوحفره‌ها و ترک‌ها و همچنین مطالعه‌ی برهم‌کنش آن‌ها با استحاله‌ی فازی مارتنزیتی با در نظر گرفتن آثار الاستیسیته‌ی غیرمحلی
- استفاده از شکل دیفرانسیلی نظریه‌ی الاستیسیته‌ی غیرمحلی برای مطالعه‌ی میدان فاز استحاله‌های مارتنزیتی و مقایسه‌ی آن با نتایج حاصل از شکل انتگرالی این نظریه
- امکان‌سنجی حل مسائل استحاله‌های مارتنزیتی با شرط مرزی تقارن در چارچوب میدان فاز-الاستیسیته‌ی غیرمحلی انتگرالی با استفاده از روش تکرار شونده‌ی ارائه‌شده در مرجع [۱۰۰].
- استفاده از دیگر نظریه‌های غیرمحلی مانند نظریه‌های زوج تنش و گرادیان کرنش برای مدل‌سازی میدان فاز-مکانیک استحاله‌های مارتنزیتی
- استفاده از کرنل دوفازی جبران‌شده برای مطالعه‌ی رفتار مکانیکی سازه‌های مختلف مقیاس نانو مانند نانولوله‌ها و نانوصفحات و به‌طور کلی تمام پژوهش‌هایی که تاکنون با استفاده از کرنل‌های پیشین صورت گرفته است.

مراجع

- [1] Soustelle, M., *Phase transformations*, John Wiley & Sons, New Jersey, 2016.
- [2] Hillert, M., *Phase equilibria, phase diagrams and phase transformations: their thermodynamic basis*, Cambridge University Press, New York, 2008.
- [3] Mirzakhani, S. and Javanbakht, M., “Phase field-elasticity analysis of austenite–martensite phase transformation at the nanoscale: Finite element modeling”, *Computational Materials Science*, vol. 154, pp. 41–52, 2018.
- [4] Turteltaub, S. and Suiker, A.S.J., “A multiscale thermomechanical model for cubic to tetragonal martensitic phase transformations”, *International Journal of Solids and Structures*, vol. 43(14–15), pp. 4509–4545, 2006.
- [5] Mamivand, M., Zaeem, M.A., and El Kadiri, H., “A review on phase field modeling of martensitic phase transformation”, *Computational Materials Science*, vol. 77, pp. 304–311, 2013.
- [6] Monteiro, S.N., Skury, A.L.D., De Azevedo, M.G., and Bobrovnitchii, G.S., “Cubic boron nitride competing with diamond as a superhard engineering material - An overview”, *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 2(1), pp. 68–74, 2013.
- [7] Ozbulut, O.E., Daghash, S., and Sherif, M.M., “Shape Memory Alloy Cables for Structural Applications”, *Journal of Materials in Civil Engineering*, vol. 28(4), pp. 4015176, 2016.
- [8] Palmero, P., “Structural ceramic nanocomposites: A review of properties and powders’ synthesis methods”, *Nanomaterials*, vol. 5(2), pp. 656–696, 2015.
- [9] Geijselaers, H.J.M., Perdahcioğlu, E.S., and Van Den Boogaard, A.H., “A macro scale constitutive model for TRIP steel”, *6th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, ECCOMAS*, Vienna, Austria, 2012.
- [10] Geijselaers, H.J.M., Hilkhuijsen, P., Bor, T.C., Perdahcioğlu, E.S., and Van Den Boogaard, A.H., “Modelling of the austenite-martensite transformation in stainless and TRIP steels”, *AIP Conference Proceedings*, vol. 1532, pp. 175–182, 2013.
- [11] Wen, Y.H., Denis, S., and Gautier, E., “Computer simulation of martensitic transformation under stress”, *Journal De Physique. IV*, vol. 6(1), pp. 475–483, 1996.
- [12] Chen, Y. and Schuh, C.A., “A coupled kinetic Monte Carlo-finite element mesoscale model for thermoelastic martensitic phase transformations in shape memory alloys”, *Acta Materialia*, vol. 83, pp. 431–447, 2015.
- [13] Yeddu, H.K., Lookman, T., and Saxena, A., “Mesoscale modeling of the martensitic transformations coupled with plasticity in engineering materials”, *Society of Engineering Science 51st Annual Technical Meeting*, Newcastle University, 2014.
- [14] Levitas, V.I., Idesman, A.V., and Preston, D.L., “Microscale simulation of martensitic microstructure evolution”, *Physical Review Letters*, vol. 93(10), pp. 105701, 2004.
- [15] Esfahani, S.E., Ghamarian, I., Levitas, V.I., and Collins, P.C., “Microscale phase field modeling of the martensitic transformation during cyclic loading of NiTi single crystal”, *International Journal of Solids and Structures*, vol. 146, pp. 80–96, 2018.

- [16] Sakhaei, A., *Modeling of interaction between plasticity and martensitic phase transformations in shape memory alloys*, PhD thesis, Department of Mechanical Engineering, National University of Singapore, 2014.
- [17] She, H., Liu, Y., Wang, B., and Ma, D., “Finite element simulation of phase field model for nanoscale martensitic transformation”, *Computational Mechanics*, vol. 52(4), pp. 949–958, 2013.
- [18] Dar, R.D. and Chen, Y., “Nanoscale martensitic phase transition at interfaces in shape memory materials”, *Applied Physics Letters*, vol. 110(4), pp. 41906, 2017.
- [19] Cho, J.Y., Idesman, A.V., Levitas, V.I., and Park, T., “Finite element simulations of dynamics of multivariant martensitic phase transitions based on Ginzburg-Landau theory”, *International Journal of Solids and Structures*, vol. 49(14), pp. 1973–1992, 2012.
- [20] Ko, W.S., Maisel, S.B., Grabowski, B., Jeon, J.B., and Neugebauer, J., “Atomic scale processes of phase transformations in nanocrystalline NiTi shape-memory alloys”, *Acta Materialia*, vol. 123, pp. 90–101, 2017.
- [21] Ma, G.F., Qin, S.J., Shang, J.X., Wang, F.H., and Chen, Y., “Atomistic study on the phase transformation in NiTi under thermal cycling”, *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 705, pp. 218–225, 2017.
- [22] Kastner, O., Eggeler, G., Weiss, W., and Ackland, G.J., “Molecular dynamics simulation study of microstructure evolution during cyclic martensitic transformations”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 59(9), pp. 1888–1908, 2011.
- [23] Suzuki, T., Shimono, M., Ren, X., Otsuka, K., and Onodera, H., “Study of martensitic transformation by use of Monte-Carlo method and molecular dynamics”, *Materials Science and Engineering A*, vol. 438–440, pp. 95–98, 2006.
- [24] Feng, L., Feng, X., Liu, E.K., Wang, W.H., Wu, G.H., Hu, J.F., and Zhang, W.X., “Possible martensitic transformation in Heusler alloy Mn₂PdSn from first principles”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 419, pp. 543–546, 2016.
- [25] Xiao, H., Yang, C., Wang, R., Xu, L., Liu, G., and Marchenkov, V.V., “First-principles study of martensitic transformation and magnetic properties of carbon doped Ni–Mn–Sn Heusler alloys”, *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, vol. 380(41), pp. 3414–3420, 2016.
- [26] Wong, S.L., Madivala, M., Prahl, U., Roters, F., and Raabe, D., “A crystal plasticity model for twinning- and transformation-induced plasticity”, *Acta Materialia*, vol. 118, pp. 140–151, 2016.
- [27] Iwamoto, T., Cherkaoui, M., and Busso, E.P., “A numerical investigation of interface dynamics during martensitic transformation in a shape memory alloy using the level-set method”, *Key Engineering Materials*, vol. 340–341, pp. 1199–1204, 2007.
- [28] Hildebrand, F. and Miehe, C., “A Regularized Sharp Interface Model for Phase Transformation Accounting for Prescribed Sharp Interface Kinetics”, *Pamm*, vol. 10(1), pp. 673–676, 2010.

- [29] Farrahi, G.H., Javanbakht, M., and Jafarzadeh, H., “On the phase field modeling of crack growth and analytical treatment on the parameters”, *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, vol. 32, pp. 589–606, 2018.
- [30] Levitas, V.I. and Javanbakht, M., “Advanced phase-field approach to dislocation evolution”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 86(14), pp. 140101, 2012.
- [31] Mikula, J., Joshi, S.P., Tay, T.E., Ahluwalia, R., and Quek, S.S., “A phase field model of grain boundary migration and grain rotation under elasto-plastic anisotropies”, *International Journal of Solids and Structures*, vol. 178–179, pp. 1–18, 2019.
- [32] Yu, F., Wei, Y., Ji, Y., and Chen, L.Q., “Phase field modeling of solidification microstructure evolution during welding”, *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 255, pp. 285–293, 2018.
- [33] Alam, J.M., “A wavelet based numerical simulation technique for two-phase flows using the phase field method”, *Computers and Fluids*, vol. 146, pp. 143–153, 2017.
- [34] Abdollahi, A. and Arias, I., “Phase-Field Modeling of Fracture in Ferroelectric Materials”, *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol. 22, pp. 153–181, 2015.
- [35] Wang, Y. and Khachaturyan, A.G., “Three-dimensional field model and computer modeling of martensitic transformations”, *Acta Materialia*, vol. 45(2), pp. 759–773, 1997.
- [36] Javanbakht, M., Rahbar, H., and Ashourian, M., “Finite element implementation based on explicit, Galerkin and Crank–Nicolson methods to phase field theory for thermal- and surface- induced martensitic phase transformations”, *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 2019. <https://doi.org/10.1007/s00161-019-00838-3>
- [37] Basak, A. and Levitas, V.I., “Finite element procedure and simulations for a multiphase phase field approach to martensitic phase transformations at large strains and with interfacial stresses”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 343, pp. 368–406, 2019.
- [38] Yamanaka, A., Takaki, T., and Tomita, Y., “Elastoplastic phase-field simulation of self- and plastic accommodations in Cubic \rightarrow tetragonal martensitic transformation”, *Materials Science and Engineering A*, vol. 491(1–2), pp. 378–384, 2008.
- [39] Levitas, V.I. and Preston, D.L., “Three-dimensional Landau theory for multivariant stress-induced martensitic phase transformations. I. Austenite-martensite”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 66(13), pp. 134206, 2002.
- [40] Levitas, V.I. and Preston, D.L., “Three-dimensional Landau theory for multivariant stress-induced martensitic phase transformations. II. Multivariant phase transformations and stress space analysis”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 66(13), pp. 134207, 2002.
- [41] Levitas, V.I., Preston, D.L., and Lee, D.W., “Three-dimensional Landau theory for multivariant stress-induced martensitic phase transformations. III. Alternative potentials, critical nuclei, kink solutions, and dislocation theory”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 68(13), pp. 134201, 2003.

Phase Field Modeling of Single Variant Stress-induced Martensitic Phase Transformations Based on Eringen's Nonlocal Elasticity Theory

Hooman Danesh

h.danesh@me.iut.ac.ir

Date of Submission: 2021/09/19

Department of Mechanical Engineering

Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

Degree: M.Sc.

Language: Persian

Supervisor: Mahdi Javanbakht, javanbakht@iut.ac.ir

Abstract

Martensitic phase transformation (MPT) is a first-order and diffusionless transformation which leads to the formation of various micro/nanostructures in ceramics and alloys, and exceptional material behaviors such as ferroelectricity and shape memory effect. During MPT, austenite with a cubic lattice transforms to martensite with the lower-symmetry tetragonal lattice, by a reduction in temperature, mechanical loading, or variation in surface energy. In the present thesis, the effects of nonlocal integral elasticity on stress-induced single variant MPTs are investigated within the phase field approach at the nanoscale. The main drawbacks of previous kernels are overcome by introducing a new thermodynamically consistent nonlocal kernel, termed the compensated two-phase (CTP) kernel. In contrast to other widely used nonlocal kernels, for the CTP kernel, no ill-posedness is observed, the normalization and locality recovery conditions are satisfied and the boundary effects are entirely compensated. Utilizing a proper thermodynamic framework, the stress-strain relation with the CTP kernel is shown to be thermodynamically consistent. The nonlinear finite element approach and the COMSOL code are used to solve the coupled system of Ginzburg-Landau and local/nonlocal integral elasticity equations. The numerical implementation of the coupled equations of Ginzburg-Landau and local elasticity as well as the equations of nonlocal integral elasticity is well verified. The numerical convergence of the solver is also studied which indicates that the CTP kernel does not suffer from the numerical convergence issues of previous kernels. In addition a basic mesh convergence study is performed to ensure that mesh-independent solutions are resolved. The advantages of the CTP kernel over previous kernels are shown through several problems. More specifically, the effects of nonlocal integral elasticity on planar and nonplanar austenite-martensite interfaces, martensitic growth in samples with different initial and boundary conditions, MPTs in presence of geometrical defects such as a hole and a crack, and the evolution of martensitic nanostructure in problems with symmetry boundary condition are investigated. Several differences between the local and nonlocal cases are observed in the MPT kinetics and morphology, including interface velocity, initial growth rate, the region of initial growth, phase concentration, transformation threshold stress and transformation path. The current study allows for a better understanding of the nonlocal elasticity theory and its application to the modeling of MPTs and similar kinetics phenomena at the nanoscale.

Keywords: Martensitic phase transformation, Phase field approach, Nonlocal integral elasticity, Nonlocal kernel, Compensated two-phase kernel, Boundary effects



Isfahan University of Technology

Department of Mechanical Engineering

**Phase Field Modeling of Single Variant Stress-induced
Martensitic Phase Transformations Based on Eringen's
Nonlocal Elasticity Theory**

A Thesis

Submitted in partial fulfillment of the requirements
for the degree of Master of Science

By

Hooman Danesh

Evaluated and Approved by the Thesis Committee, on September, 19, 2021

1- Mahdi Javanbakht, Assoc. Prof. (Supervisor)

2- Mohammad Mashayekhi, Prof. (Advisor)

3- Mahdi Salmani Tehrani, Asst. Prof. (Examiner)

4- Mohammad Silani, Assoc. Prof. (Examiner)

Department Graduate Coordinator (Mohsen Saghafian)