

<http://physicsweb.org/article/news/7/4/15>

2003/04/22

## ساختن - آبرآلیاژ با مدل‌های کامپیووتری

پژوهش‌گران‌ی در ژاپن، گروه - جدیدی از آبرآلیاژها ساخته‌اند که ویژه‌گی‌های برتری دارند. تاکااشی سایت<sup>[1]</sup> و هم‌کاران ش از آزمایش‌گاه‌های تحقیق و توسعه‌ی تیتا<sup>[2]</sup> و دانش‌گاه - نوکی، این مواد را با استفاده از یک رهیافت - محاسباتی ی جدید ساختند. از جمله‌ی ویژه‌گی‌های این آلیاژها، استحکام - فرازیاد و آبرکش‌سانی است. این آلیاژها را می‌شود در ابزارها ی بسیار دقیق و تجهیزات - پزشکی به کار برد<sup>[3]</sup>.

پیش‌رفت در روش‌های آلیاژسازی، تا حد - زیادی با سعی و خطا است. آزمایش‌ها ی گران و زمان‌بری انجام می‌شود، که فقط به پیش‌رفتها ی کوچکی در ویژه‌گی‌های مکانیکی و فیزیکی می‌انجامد. دانش‌پیشه‌ها ی مواد، در طراحی ی آلیاژها ی جدید به نمودار فارزها یی متکی‌اند که به طور - تجربی به دست آمده‌اند. اما برای تولید - ساختارها ی چند عنصری ی جدید، میلیون‌ها از این نمودارها لازم است، حتا برای ترکیب‌ها ی فلزی ی معمول.

سایت و هم‌کاران ش سه عدد - جادویی ی الکترونی را برای ساختن - دسته ی جدیدی از آلیاژها به کار بردند. این عدد‌ها عبارت‌اند از نسبت - الکترون به اتم؛ نظم - پیوندی (که نشان‌دهنده ی قدرت - میان‌گین - پیوند - بین - اتم‌ها است)؛ و سطح انرژی ی اریتال - الکترونی ی d (که نشان‌دهنده ی الکترون‌گاتیوی ی میان‌گین است).

این پژوهش‌گران آلیاژها یی بر اساس - تیتانیم ساختند، که شامل - تانتالم، زیرکنیم، وانادیم، واکسیژن هم بودند. ساختار - بلوری ی این آلیاژها، مکعبی ی مرکزی‌است. ویژه‌گی‌هایی برتر زمان ی دیده می‌شوند که هر سه ی این عدد‌ها ی جادویی مقدارها ی خاص ی داشته باشند، مثلاً 4.24 برای نسبت - الکترون به اتم. این آلیاژها، در اثر - گرما

منبسط نمی‌شوند و بسیار محکم اند؛ اما آبرکشسان و آبرپلاستیک اند، چون می‌شود آن‌ها را کشید، بی آن که تغییرشکل دهند.

این گروه توجه ش را به مدول کشسانی (نسبت تنیش اعمال شده به کرنش تولید شده) معطوف کرد، و یک ناهمسان‌گردی ی ویژه در این بلورها ی فلزی یافت. سایت به فیزیکس‌وب [4] گفت: ”این ناهمسان‌گردی یک سازوکار جدید تغییرشکل‌پلاستیک بدون تقیصه می‌سازد. به خاطر این سازوکار است که این آلیاژها می‌توانند مقدار زیادی انرژی ی کرنش ذخیره کنند، که به ویژه‌گی‌ها ی استثنایی پیشان منجر می‌شود.“

[1] Takashi Saito

[2] Toyota

[3] Science 300 464

[4] PhysicsWeb