

# شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انتشار ترک و تبدیل فاز در بلور نقص دار $\alpha$ -Fe

نوربخش، محمد<sup>۱</sup>؛ واعظ علائی، سید مهدی<sup>۲</sup>؛ پورکمالی انارکی، علی<sup>۱</sup>؛ اسماعیل پور، ایوب<sup>۳</sup>؛ کدخداپور، جواد<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup>دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، لویزان- خیابان شهید شعبانلو، تهران

<sup>۲</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

<sup>۳</sup>گروه فیزیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، لویزان- خیابان شهید شعبانلو، تهران

## چکیده

رشد ترک در صورت وجود نابجایی و ترک زمینه ای پدیده ای متفاوت از ترک در بلور بی نقص است. در این مقاله، رشد ترک بلور  $\alpha$ -Fe تحت بارگذاری مود I با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با پتانسیل EAM بررسی می‌شود. تغییر شکل ریزساختاری و توزیع تنش در طول رشد ترک مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد. ریزساختار نوک ترک و همچنین منحنی‌های تنش-کرنش مطالعه شدند. تمرکز تنش در طول رشد ترک بررسی شد که منجر به تبدیل از ساختار BCC به FCC در ناحیه نوک می‌شود. علاوه بر این، ترک اولیه تا حد زیادی نقطه تسلیم تنش کششی  $\alpha$ -Fe خالص را کاهش داد. کند شدن نوک ترک به دلیل انتشار جابجا شدگی ها و دررفتگی ها در طول رشد ترک رخ می‌دهد. مقدار تنش بحرانی  $\sigma_{fcc} > \sigma_{bcc} > \sigma_{unknown}$  برای ساختارهای مختلف، نشان می‌دهد که تنش بحرانی ساختار FCC از بقیه ساختارها بیشتر است.

## Molecular dynamics simulation of crack propagation and phase transformations in $\alpha$ -Fe defected crystal

Nourbakhsh, Mohammad<sup>1</sup>; Vaez Allaei, S. Mehdi<sup>2</sup>; Pourkamali anaraki, Ali<sup>1</sup>; Esmailpour, Ayoub<sup>3</sup>; Kadkhodapour, Javad<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Mechanical Engineering, Shahid Rajae Teacher Training University, Tehran

<sup>2</sup> Department of Physics, University of Tehran, Tehran

<sup>3</sup> Department of Physics, Shahid Rajae Teacher Training University, Tehran

## Abstract

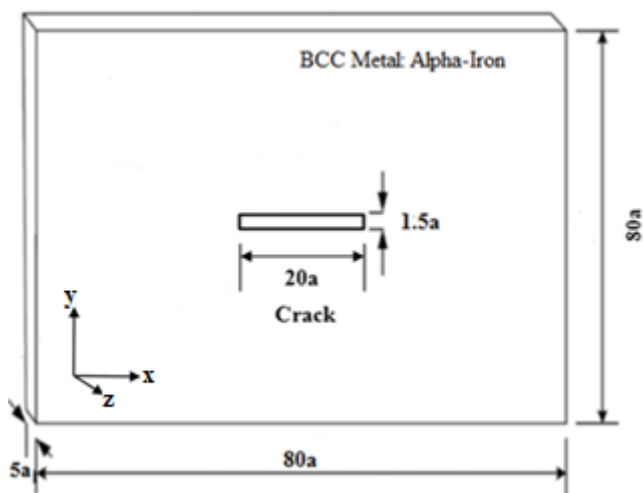
The crack growth in defected and cracked materials differs from propagation in pristine one. In this paper, crack propagation in  $\alpha$ -Fe crystal under mode I loading are investigated using molecular dynamics simulation with EAM potential. Nano-structural deformation and stress distribution during crack growth are analyzed. The nanostructure of crack tip as well as the stress-strain curves were studied. The stress concentration during crack growth are monitored which lead to the transformation from BCC to FCC structure in tip region. Moreover, initial crack greatly lowered the tension yield point of pure  $\alpha$ -Fe. Crack-tip blunting occurs due to the dislocations emission during crack growth. The magnitude of critical stress is  $\sigma_{fcc} > \sigma_{bcc} > \sigma_{unknown}$  for different structures indicating that the critical stress of fcc structure is higher than other structures.

## مقدمه

عوامل مکانیک شکست است. رفتار شکست در مقیاس اتمی به شدت به ساختار اتمی، جهت شبکه و ماهیت گسسته توزیع ماده بستگی دارد. اکثر شواهد تجربی [۱،۲] و شبیه‌سازی‌ها در زمینه فازی [۳-۵] نشان داده‌اند که ریزساختارهای داخلی تأثیر زیادی بر

مکانیک شکست مواد یکی از موضوعات مهم در زمینه مهندسی مکانیک و مواد است، گسترش و رشد ترک ها در مواد از مهمترین

سه جهت استفاده شده است. شکل ۱ هندسه مدل شبیه سازی دینامیک مولکولی را با یک ترک اولیه مرکزی نشان می دهد. تمامی شبیه سازی ها با استفاده از گام زمانی 1fs انجام شده است. قبل از اعمال بارگذاری، نمونه ابتدا به حداقل انرژی پایدار توسط الگوریتم CG می رسد و سپس در دمای ثابت اتاق (۳۰۰ کلوین) و فشار صفر بار به مدت 300ps به تعادل می رسد. اعمال فشار صفر بار برای فرآیند تنش زدایی است. پس از رسیدن به تعادل، نمونه تحت بارگذاری کششی تک محوره (بارگذاری مود I) با نرخ کرنش ثابت  $2 \times 10^9 s^{-1}$  در جهت y قرار می گیرد. سپس تا شکست کامل، مسیر رشد ترک، تبدیل فازها و دررفتگی ساختارها تحت بررسی قرار می گیرند. همچنین در حین بارگذاری از هنگرد NVT برای ثابت نگه داشتن دمای سیستم در دمای ثابت اتاق (۳۰۰ کلوین) و جلوگیری از اغتشاشات دمایی، استفاده شد. همه شبیه سازی های دینامیک مولکولی با کد لمپس، اجرا شده است. با توجه به نتایج شبیه سازی و منحنی های تنش-کرنش بدست آمده، خواص مکانیکی و ریزساختارها به تفصیل مورد بحث قرار می گیرند. ساختار کریستالی توسط بسته CNA با استفاده از ابزار Ovito مشاهده می شود، در اینجا ساختارهای fcc، bcc و unknown به ترتیب با رنگ های سبز، آبی و سفید مشخص شده اند.



شکل ۱: هندسه مدل  $\alpha$ -Fe با ساختار BCC با ترک مرکزی

تنش ( $\sigma_m$ )، از میانگین تنش در جهت های x، y و z بدست می آید:

$$\sigma_m = \frac{1}{3}(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) \quad (1)$$

و برای کرنش مهندسی در گام زمانی مشخص از رابطه زیر استفاده شده است:

رفتار شکست در مقیاس نانو دارند، با توجه به این حقایق، اهمیت درک فرآیند رشد ترک باعث ایجاد علاقه به خواص مکانیکی نزدیک نوک ترک در فلزات تک کریستالی شده است. گوو و همکاران [۶] با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی دریافتند که تنش موضعی در نوک ترک نقش مهمی را در مکانیزم تبدیل فاز در نوک ترک ایفا می کند. از آنجایی که یک ماده زمانی از کار می افتد و شکسته می شود که چگالی و تمرکز تنش از استحکام شکست مواد بیشتر شود، تحلیل شکست مستقیماً با چگالی و تمرکز تنش یا کرنش در اطراف نوک ترک مرتبط است [۷-۱۱].

با توسعه سریع علم کامپیوتر، شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) به ابزار مهمی برای مطالعه رشد ترک و کشف مکانیزم تبدیل فاز در مقیاس نانو تبدیل شد [۱۲، ۱۳].

در این مقاله، ما تغییرشکل ریزساختاری و توزیع تنش را در طول رشد ترک با استفاده از شبیه سازی MD در بلور  $\alpha$ -Fe حاوی ترک مرکزی از قبل موجود بررسی می کنیم. هدف از کار حاضر تعیین روابط بین میدان تنش و تغییرشکل ریزساختاری، در طول گسترش ترک است. ضمناً، مکانیزم های مختلف رشد ترک تحت بارگذاری مود I و خواص مکانیکی مرتبط با آن ها نیز، به دست می آید.

## مدل های اتمی و جزئیات محاسباتی

برهمکنش بین اتم ها با پتانسیل EAM توصیف می شود که یکی از پتانسیل های مورد توجه برای فلزات است. در مطالعه حاضر پتانسیل EAM توسعه یافته توسط مندلف و همکاران برای نشان دادن برهمکنش و نیروهای بین اتم های  $\alpha$ -Fe با ساختار bcc استفاده شده است که می تواند تبدیل فاز از ساختار bcc به ساختار fcc/hcp را برای  $\alpha$ -Fe به خوبی بازتولید نماید [۱۴]. پیکربندی اولیه بلوری به شکل  $80a \times 80a \times 5a$  ( $L_x \times L_y \times L_z$ ) است که شامل  $63,695$  اتم است ( $a=2.85\text{\AA}$ ). جهت y عمود بر صفحه ترک و جهت x در امتداد رشد ترک است. ترک اولیه با حذف صفحات مشخص از اتم ها در مرکز نمونه ایجاد می شود به طوری که طول و عرض اولیه ترک به ترتیب برابر با  $20a$  و  $1.5a$  است. برای جلوگیری از تاثیر سطوح آزاد نمونه، از شرایط مرزی تناوبی در هر

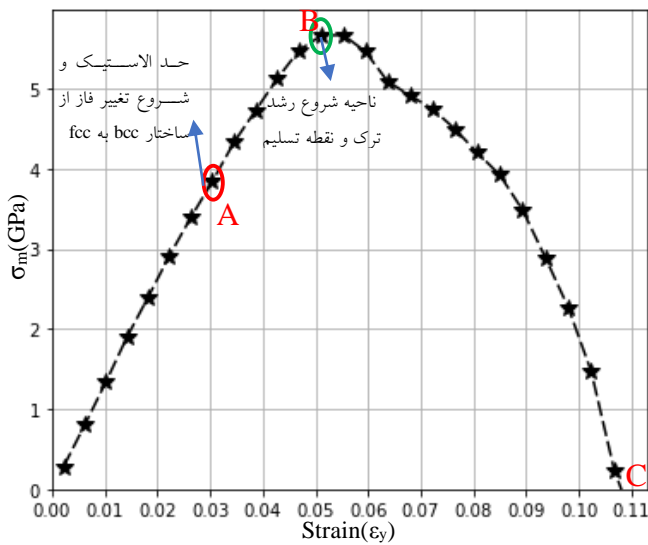
خود نشان می دهد و مقدار تنش بحرانی برای ساختارهای مختلف، برابر است با  $\sigma_{fcc} > \sigma_{bcc} > \sigma_{unknown}$ .

$$\epsilon_y = \left( \frac{L_y(N_{step}) - L_y(0)}{L_y(0)} \right) \quad (2)$$

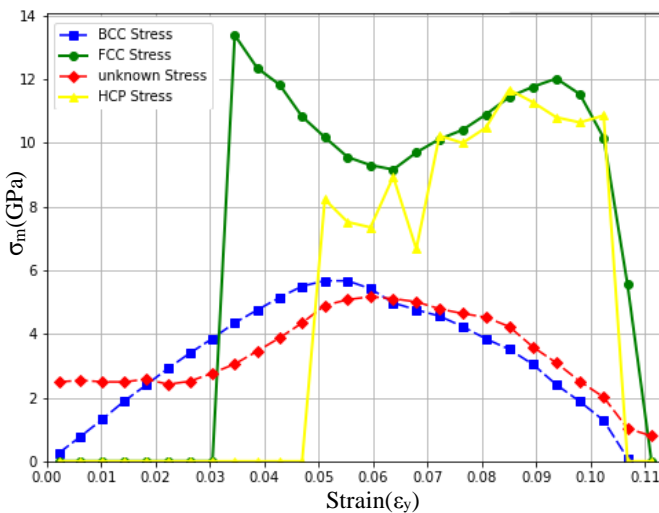
زمانی مشخص در جهت  $y$  است. بنابراین برای ترسیم منحنی تنش- کرنش از معادله های (1) و (2) استفاده شده است.

### نتایج شبیه سازی و بحث

در شکل 2، نمودار تنش-کرنش برای کل سیستم و در شکل 3 مقایسه تنش-کرنش ساختارهای مختلف ترسیم شده است. همانطوری که در شکل های 2 و 3 نشان داده شده است، در اثر بارگذاری، تنش کششی بطور خطی با کرنش افزایش می یابد تا در کرنش  $0.033$  تغییر فاز به ساختار fcc آغاز شد. به خاطر تمرکز تنش در نوک ترک، تغییر فاز از نوک ترک گسترش می یابد، این نقطه در اکثر نمودارهای تنش-کرنش به نقطه حد الاستیک و محدوده آغاز بارگذاری تا این نقطه، به منطقه الاستیک معروف است که با نقطه A در شکل 2 مشخص شده است. بنابراین شروع تغییر فاز از نقطه A آغاز می گردد و با ادامه بارگذاری، نوارهای دوقلویی در نوک ترک مطابق با شکل 6 در کرنش های مختلف برای فاز fcc به وجود می آیند و تنش کل سیستم به مقدار بیشینه خود در نقطه می رسد که با تنش تسلیم مشخص است، کرنش در این نقطه برابر با  $0.053$  است که رشد ترک از این محدوده شروع می گردد در اینجا ساختار hcp نیز ظاهر می شود، ولی به دلیل اینکه تعداد اتم های ساختار hcp بسیار ناچیزند (حداکثر 50 اتم) می توان از آن در محاسبات صرف نظر کرد. با شروع رشد ترک، تنش کاهش می یابد این بدان معنی است که آزاد شدن تجمع تنش در نوک ترک از طریق رشد ترک انجام می شود و در نهایت در کرنش  $0.108$  به طور کامل شکسته می شود (نقطه C). همچنین با توجه به شکل 3 که مقایسه تنش در ساختارهای hcp, fcc, bcc و unknown را نشان می دهد، تنش در لحظه شروع تغییر فاز از ساختار bcc به ساختار fcc بیشترین مقدار را در ساختار fcc دارد و به تدریج کاهش یافته و دوباره با شروع رشد ترک افزایش می یابد و در لحظه شکست تنش و تعداد اتم های ساختار fcc برابر صفر شده است. تنش ساختار fcc مقدار بیشتری را نسبت به ساختارهای bcc و unknown از

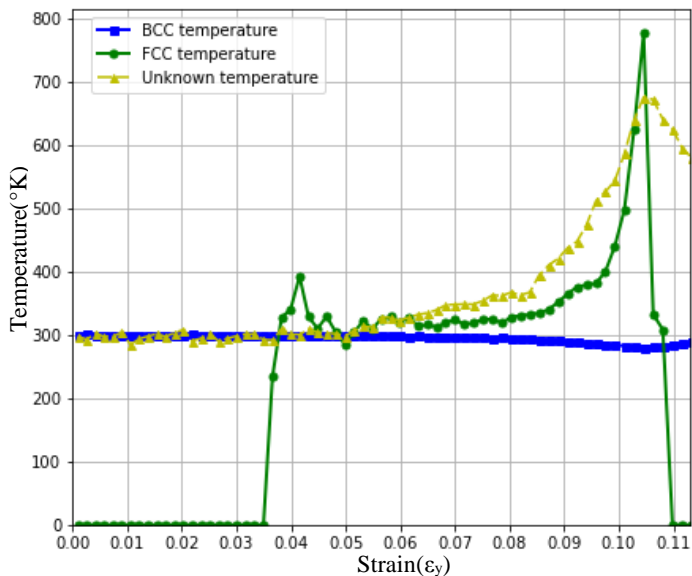


شکل 2: نمودار تنش-کرنش کل سیستم

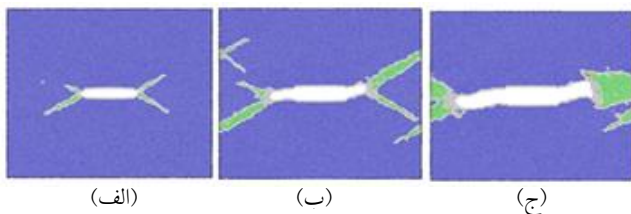


شکل 3: مقایسه نمودار تنش-کرنش ساختارهای hcp, fcc, bcc و unknown

مکانیزم تبدیل فاز به وضوح به تنش موضعی در نوک ترک و جهت گیری بلوری بستگی دارد. از دیدگاه علم مواد، مکانیزم های شکست  $\alpha$ -Fe خالص را می توان به تبدیل فاز نسبت داد. ما همچنین دریافتیم که دوقلوسازی (twinning) یک مکانیزم تغییر شکل پلاستیک است که به تغییر شکل پلاستیک در ناحیه نوک ترک کمک می کند، علاوه بر دوقلوها، ما دریافتیم که تبدیل فاز bcc به fcc در نزدیکی نوک ترک اتفاق می افتد و به مقاومت در برابر گسترش ترک کمک زیادی می کند.



شکل ۵: نمودار دما- کرنش برای ساختارهای مختلف  $\alpha$ -Fe



شکل ۶: رشد ترک در کرنش های مختلف

### نتیجه گیری

شبیه سازی های دینامیک مولکولی برای توصیف تغییر شکل های ریزساختاری مختلف و ویژگی های توزیع تنش در طول رشد ترک در  $\alpha$ -Fe با پتانسیل EAM انجام شده است. خواص مکانیکی مرتبط نیز مورد بحث قرار گرفت. یافته های اصلی به شرح زیر است:

(۱) در شبیه سازی، تمرکز تنش منجر به رشد ترک ها شد. تبدیل از ساختار bcc به fcc نیز در نوک ترک ها رخ داد. علاوه بر این، تغییر شکل ریزساختاری (کند شدن نوک ترک و نقص های انباشته) می تواند به طور موثر رشد ترک را به تعویق بیندازد.

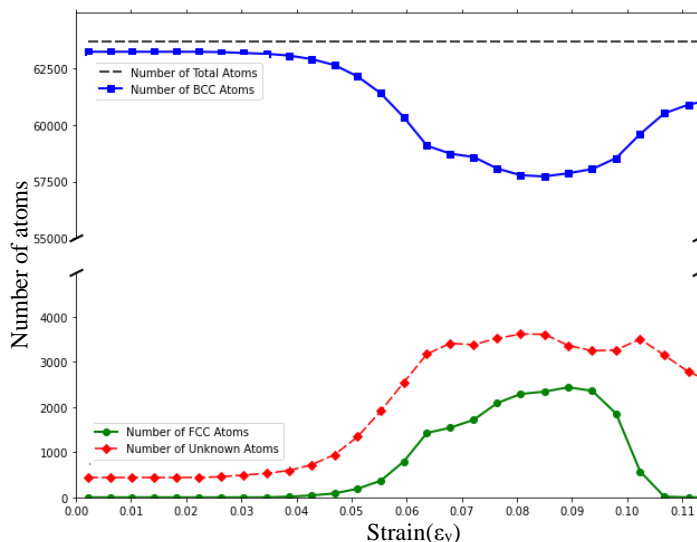
(۲) ترک اولیه تا حد زیادی نقطه تسلیم تنش کششی  $\alpha$ -Fe خالص را کاهش داد.

(۳) مقدار تنش بحرانی  $\sigma_{fcc} > \sigma_{bcc} > \sigma_{unknown}$  برای ساختارهای مختلف، نشان می دهد که تنش بحرانی ساختار fcc از بقیه ساختارها بیشتر است.

MD: Molecular Dynamics Simulation  
 BCC: Body-Centered Cubic Structure  
 FCC: Face-centered Cubic Structure

شکل ۴ نمودار تعداد اتم های ساختارهای مختلف بر حسب کرنش را نشان می دهد همان طوری که از نمودار نیز مشخص است، تعدادی از اتم های ساختار unknown از ابتدا وجود دارند و روی سطح ترک قرار دارند و با اعمال بارگذاری، ساختارهای fcc و unknown افزایش می یابند و به همان نسبت ساختار اولیه bcc کاهش می یابد.

در شکل ۵ نمودار دما بر حسب کرنش را برای ساختارهای مختلف مشاهده می کنید، همان طوری که نشان داده شده است به دلیل اینکه ساختارهای fcc و unknown در نزدیکی نوک ترک بوجود می آیند و همچنین به خاطر تمرکز تنش و متعاقب آن رشد ترک و افزایش انرژی جنبشی در نوک ترک، دمای این دو ساختار از لحظه شروع تغییر فاز (کرنش ۰/۰۳۳) بیشتر می شود و در لحظه شکست دمای ساختار fcc نزدیک به ۷۷۶ کلوین و دمای ساختار unknown ۶۷۵ کلوین می باشد که از دمای ثابت سیستم (۳۰۰ کلوین) بسیار بیشتر است و دمای ساختار bcc به دلیل دوری از نوک ترک تا ۲۸۰ کلوین کاهش می یابد. بنابراین با توجه به شبیه سازی دینامیک مولکولی انجام شده، بیشترین دما برای ساختار fcc مشاهده می گردد.



شکل ۴: نمودار تعداد اتم های ساختارهای bcc, fcc و unknown بر حسب کرنش

pure titanium under uniaxial tension”; *Molecular Simulation* (2018).

- [14] M. I. Mendeleev, S. Han, D. J. Srolovitz, G. J. Ackland, D. Y. Sun & M. Asta; “Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron”; *Journal Philosophical Magazine* **83** (2003).

HCP: Hexagonal Close-Packed Structure

EAM: Embedded-Atom Method

CNA: Common Neighbor Analysis

fs: femtosecond

ps: picosecond

مرجع ها

- [1] D.M. Dimiduk, M.D. Uchic, T.A. Parthasarathy; “Size-affected single-slip behavior of pure nickel microcrystals”; *Acta Mater.* **53**, (2005).
- [2] Z.W. Shan, R.K. Mishra, S.A.S. Asif, O.L. Warren, A.M. Minor; “Mechanical annealing and source-limited deformation in submicrometre-diameter Ni crystals”; *Nature Mater.* **7** (2008).
- [3] A. Abdollahi, I. Arias; “Phase-field simulation of anisotropic crack propagation in ferroelectric single crystals: effect of microstructure on the fracture process”; *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **19** (2011).
- [4] W.P. Wu, Z.Z. Yao; “Molecular dynamics simulation of stress distribution and microstructure evolution ahead of a growing crack in single crystal nickel”; *Theoretical and Applied Fracture Mechanics.* **62** (2012).
- [5] Y.L. Li, W.P. Wu, N.L. Li, Y. Qi; “Cohesive zone representation of crack and void growth in single crystal nickel via molecular dynamics simulation”; *Computational Materials Science.* **104** (2015).
- [6] Y.F. Guo, Y.S. Wang, D.L. Zhao, W.P. Wu; “Mechanisms of martensitic phase transformations in body-centered cubic structural metals and alloys: molecular dynamics simulations”; *Acta Mater.* **55** (2007).
- [7] K.S. Cheung, S. Yip, A; “molecular-dynamics simulation of crack-tip extension: the brittle-to ductile transition”; *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **2** (1994).
- [8] T. Kitamura, K. Yashiro, R. Ohtani; “Atomic simulation on deformation and fracture of nano-single crystal of nickel in tension”; *JSME Int. J., Ser. A* **40** (1997).
- [9] S.Y. Hu, M. Ludwig, P. Kizler, S. Schmauder; “Atomistic simulations of deformation and fracture of a-Fe”; *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **6** (1998).
- [10] C.W. Pao, S.M. Foils, E.B. Webb III, D.J. Srolovitz; “Atomistic simulations of stress and microstructure evolution during polycrystalline Ni film growth”; *Phys. Rev. B* **79** (2009).
- [11] R. Matsumoto, M. Nakagaki, A. Nakatani, H. Kitagawa; “Molecular-dynamics study on crack growth behavior relevant to crystal nucleation in amorphous metal”; *CMES: Comput. Modell. Eng. Sci.* **9** (2005).
- [12] J.L. Shao, P. Wang, F.G. Zhang, A.M. He; “Hcp/fcc nucleation in bcc iron under different anisotropic compressions at high strain rate: Molecular dynamics study”; *Sci Rep* **8** (2018).
- [13] B. Zhang, L. Zhou, Y. Sun, W. He, Y. Chen; “Molecular dynamics simulation of crack growth in