

## بررسی اشاعه ترک در نانوبلور آهن- نیتروژن به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

رقیه محمدزاده<sup>۱</sup>، نیر رزم آرا<sup>۲\*</sup>

<sup>۱</sup>دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، مهندسی مواد، تبریز، ایران.

<sup>۲</sup>دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، مهندسی مکانیک، تبریز، ایران.

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۹۶/۲/۲۴، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۶/۱۲/۱۲، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۶/۱۲/۱۹

**چکیده** در سال‌های اخیر فولادهای نیتروژن‌دار به دلیل داشتن خواص خوبی از استحکام و انعطاف‌پذیری مورد توجه محققان و متخصصان صنعتی قرار گرفته است. شناسایی خواص مکانیکی فولادهای نیتروژن‌دار به منظور استفاده از این آلیاژها با قابلیت اطمینان بالا در تجهیزات مختلف از اهمیت بالایی برخوردار است. در این میان توانایی مقاومت ماده در برابر اشاعه ترک، از پارامترهای مهم به شمار می‌رود. هدف از این پژوهش، شبیه‌سازی اشاعه ترک در نانوبلور آلیاژی آهن- نیتروژن می‌باشد. امروزه علوم نانو و شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای در مقیاس مولکولی، به یکی از پرطرفدارترین موضوع‌های مورد مطالعه در دنیا مبدل شده است. یکی از روش‌های عددی در ابعاد نانومتری، روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است که معین‌ترین روش حل سیستم‌های مولکولی از بین روش‌های موجود است. در تحقیق حاضر، سیستم بلوری آهن- نیتروژن با اعمال تابع پتانسیل تصحیح‌شده اتم محاط شده (MEAM) و پارامترهای مربوط به آلیاژ آهن- نیتروژن شبیه‌سازی می‌شود. ریزساختار و هم‌چنین مسیر رشد ترک در نانوبلور مورد مطالعه، تحت بارگذاری کششی با مقدار سرعت  $0.8 \text{ \AA} / \text{ps}$  در دمای  $300\text{K}$  مورد بررسی و تحلیل قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش کرنش و در نتیجه ایجاد تنش در نمونه‌ها، تغییر شکل پلاستیک از نوک ترک به دلیل ایجاد تمرکز تنش در آن شروع می‌گردد. با افزایش بیشتر تنش حفره‌هایی در ساختار جوانه زده و به سمت ناحیه پیشروی رشد ترک اولیه اشاعه پیدا می‌کند. سرعت رشد ترک با افزایش طول ترک افزایش می‌یابد مقادیر تنش در هر سه جهت بلوری ابتدا دارای رفتار غیرخطی و سپس رفتار خطی می‌باشند که ناشی از تغییر جهت رشد ترک در طول زمان شبیه‌سازی می‌باشد.

**کلمات کلیدی:** شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، اشاعه ترک، نانوبلور، آهن- نیتروژن.

## Crack Propagation in nanocrystalline Iron-Nitrogen Via Molecular Dynamics Simulation

Roghayeh Mohammadzadeh<sup>1</sup>, Naiyer Razmara<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Azərbayjan Şahid Madani University, Department of Material Engineering, Tabriz, Iran.

<sup>2</sup>Azərbayjan Şahid Madani University, Department of Mechanical Engineering, Tabriz, Iran.

**Abstract** Recently, nitrogen alloyed steels have attracted the attention of researchers and industrial specialists due to their combination of strength and elongation. The identification of mechanical properties of nitrogen alloyed steels is very important for using these alloys with high reliability in various applications. Meanwhile, the resistance of material to crack propagation is one of the important parameters. Nowadays, nanoscience and computer simulations at nanoscale are noticed as the most studied subjects in the world. Molecular Dynamics Simulation (MDS) is one of the numerical methods at nanoscale which is the most deterministic method among available methods for the solution of molecular systems. The aim of this study is to simulate the crack propagation in Iron-Nitrogen nanocrystalline. In this regard, Iron-Nitrogen nanocrystalline is modeled by applying Modified Embedded Atom Method (MEAM) interatomic potential using the related parameters for Iron-Nitrogen alloy. The microstructure of crack growth in nanocrystalline with dimension  $100 \text{ \AA} \times 40 \text{ \AA} \times 3 \text{ \AA}$  are investigated under tensile loading with velocity magnitude of  $0.8 \text{ \AA} / \text{ps}$  at temperature of  $300\text{K}$ . The results show that crack velocity increases with the increase in crack length. The increase in the peak of radial distribution function curve during different time steps is as a result of change in the positions of particles during crack propagation. Also, the results indicates that the magnitudes of stress at three crystal directions has firstly nonlinear behavior and then changes to linear one which is due to the change of direction of crack growth during simulation time steps. Also, the track-growth direction and the track opening are investigated under simulation conditions.

**Keywords:** Molecular Dynamics Simulation, Crack Propagation, Nanocrystalline, Iron-Nitrogen.

## ۱- مقدمه

بسیاری به سرعت اعمال بار دارد به طوری که با افزایش سرعت اعمال بار پدیده چندشاخه شدن ترک اتفاق می افتد و ماده رفتار تردتری از خود نشان می دهد. وانگ و همکارانش در پی تحقیقات خود در این حوزه دریافتند که ترک های کم عمق و زاویه دار سطحی تحت شرایط خاصی از زاویه نوک ترک اولیه و نوع بارگذاری تنش به ترک های خطرناک عرضی تبدیل می شوند [۶]. کابو [۷] با استفاده از مدل اجزاء محدود و تحلیل تنش و کرنش، تغییر شکل حاصل از خستگی را در نزدیکی عیوب بررسی نموده است. نتایج نشان می دهد که تنش های اضافی زیان آور بوده و باعث ایجاد تغییر شکل بزرگ در اطراف عیب می شود. همچنین برتا و همکارانش [۸] نشان دادند که ترک در ابتدا موازی با سطح فلزات شروع به رشد می کند اما بعد از مدتی جهت رشد ترک تغییر پیدا کرده و در جهت عمق نمونه پیشروی می نماید.

امروزه یکی از مهم ترین مسائل در استفاده از قطعات و ابزارهای صنعتی، افزایش عمر مؤثر و کارایی هر چه بیشتر آنها می باشد. به علت زمان بر بودن فرآیند خستگی فلزات، تحقیقات اندکی درباره انتشار ترک خستگی در مورد آلیاژ دوتایی آهن-نیتروژن با استفاده از روش های تجربی انجام شده است. همزمان با پیشرفت نانوفناوری، لزوم توسعه بررسی های فیزیکی و مکانیکی در اندازه اتمی امری بدیهی است. فارکاس و همکاران [۹] با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی<sup>۱</sup>، رشد ترک خستگی را در نانوبلور نیکل با اندازه ده نانومتری شبیه سازی کرده و نشان دادند که سرعت رشد ترک به مقدار شدت تنش بستگی دارد. تانگ و همکاران [۱۰] با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی رفتار رشد ترک خستگی تکبلور منیزیم را بررسی نموده و نشان دادند که سرعت رشد ترک خستگی در جهات مختلف با افزایش دما کاهش می یابد.

دشپانده و همکاران [۱۱] ساختار نایجایی های اطراف نوک ترک را در شرایط بارگذاری یکنواخت و سیکلی با استفاده از دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. اینو و همکاران [۱۲] فرآیند شکست پلی کریستال آهن در مقیاس نانو را تحت بارگذاری سیکلی به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی انجام دادند.

قطعات فلزی از راه های مختلفی دچار از کارافتادگی می شوند. شکست بر اثر خستگی ممکن است شدیدتر و اثرات بیشتری داشته باشد. با پیشرفت سریع فناوری و صنعت، دیگر استفاده از فلزات بدون پوشش سخت و مقاوم در برابر ساییدگی و خوردگی، جهت ساخت ابزارآلات صنعتی مورد استفاده نیست زیرا به دلیل دوام نسبی کم، استفاده از آنها منطقی و اقتصادی نیست [۱]. نیتروژن دهی یک عملیات اصلاح سطح است که به طور گسترده جهت بهبود استحکام خستگی، مقاومت خوردگی و مقاومت سایشی قطعات صنعتی استفاده می شود [۲]. نیتروژن دهی گازی یکی از روش های سخت کردن سطحی می باشد که در این روش نیتروژن به سطح یک آلیاژ آهنی نفوذ داده می شود. این فرآیند بدین صورت انجام می گیرد که فلز در دمای مناسب در تماس با گاز نیتروژن قرار می گیرد [۳]. با قراردادن آلیاژهای آهنی در کوره های نیتروژن دهی، یک لایه ترد و شکننده غنی از نیتروژن، موسوم به لایه نیتريد سفید در سطح قطعه نیتروژن داده شده تشکیل می شود. این لایه متشکل از اتم های نیتروژن و آهن به صورت ترکیبات بین فلزی آهن- نیتروژن است.

پیش بینی دقیق رشد ترک در قطعات صنعتی می تواند هزینه های نگهداری را کاهش دهد. مطالعات تجربی و عددی فراوانی در این زمینه انجام شده اند. اکبردوست و همکارانش [۴] طی یک تحقیق عددی مسیر گسترش ترک در قطعات شیاردار نوک گرد تحت بارگذاری مرکب کششی- برشی را مورد بررسی قرار داده اند. برای این منظور از دو روش المان محدود توسعه یافته و روشی موسوم به روش گام به گام استفاده شده است. نتایج نشان می دهد که هر دو روش قادر به تخمین مناسب مسیر گسترش ترک در قطعات گرافیتی هستند. همچنین روش گام به گام که متکی بر مفاهیم معیار بیشینه تنش محیطی است می تواند تخمین دقیق تری از زاویه شروع شکست نسبت به روش المان محدود توسعه یافته ارائه کند. کاظمی و شکوری [۵] مدل رشد ترک مورب را در یک ورق تحت کشش با سرعت های مختلف به روش تئوری پری دینامیک مورد مطالعه قرار داده اند. نتایج حاصل نشان می دهند که نحوه رشد ترک علاوه بر زاویه ترک اولیه، وابستگی

<sup>1</sup> Molecular Dynamics Simulation (MDS)

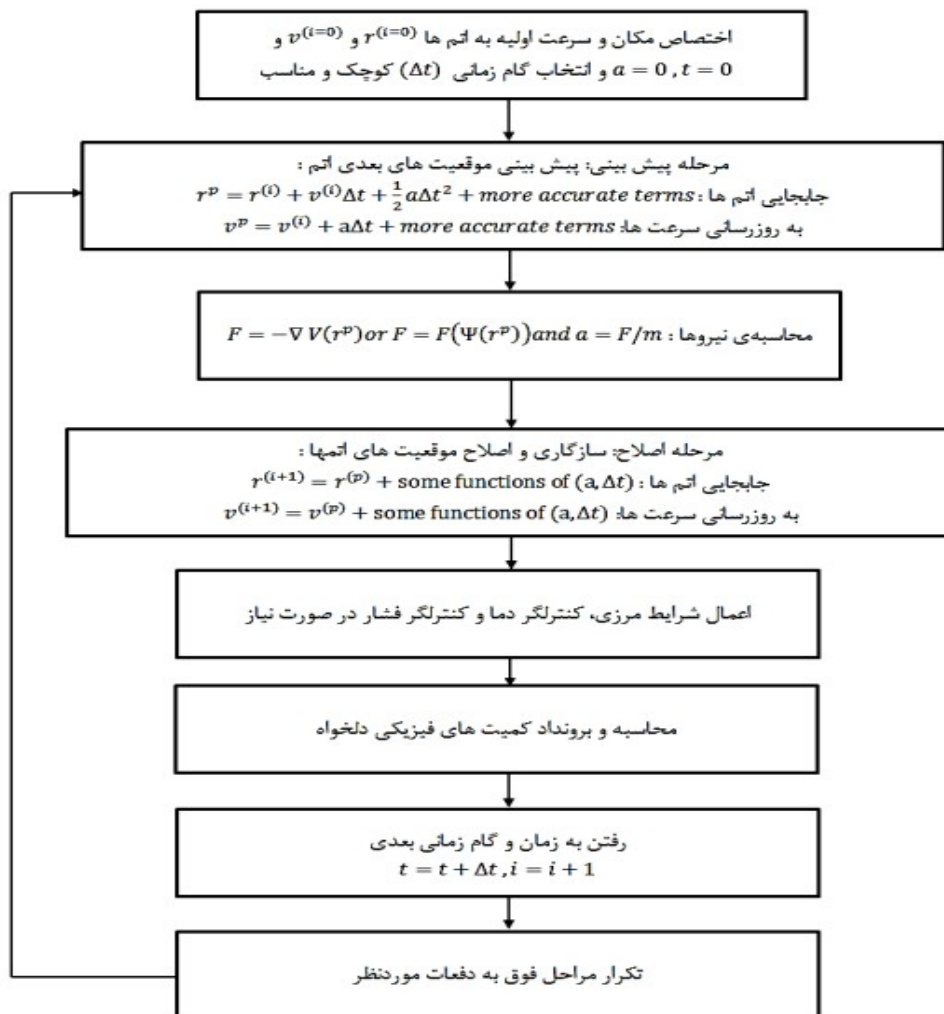
بازرسی است.

در تمام مطالعاتی که در این مقاله به آنها اشاره شد، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی برای فلزات خالص انجام گرفته است و کار تحقیقاتی در زمینه شبیه‌سازی اتمی رشد ترک در آلیاژهای دوتایی آهن-نیتروژن وجود ندارد. هدف از این کار پژوهشی آنالیز فرآیند رشد ترک و تعیین مسیر رشد ترک در آلیاژ آهن-نیتروژن در ابعاد نانو با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است. این دو عامل، پارامترهای مهم در تعیین مدت زمان شکست قطعات و فواصل زمانی

## ۲- روش تحقیق

### ۲-۱ روش دینامیک مولکولی

روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از دقیق‌ترین روش‌های شبیه‌سازی در مقیاس نانو می‌باشد که برای شبیه‌سازی سیستم‌های پیچیده چندذره‌ای به کار می‌رود.



شکل ۱. طرح‌واره الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی.

ذرات با استفاده از حل معادلات هامیلتون تحت شرایط مرزی مناسب به دست می‌آید. با تحلیل مسیر ذرات در فضای فاز و استفاده از مکانیک آماری که در واقع واسطه‌ای بین کمیت‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی است می‌توان اطلاعاتی در مورد خواص مختلف سیستم از جمله انرژی، خواص ساختاری، دینامیکی، مکانیکی و غیره به دست آورد. این روش از نظر فیزیکی، روشی مبتنی بر قانون دوم نیوتن است که با

با توجه به محدودیت‌ها و دشواری‌های موجود در اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی در مقیاس نانو، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی قادر به توصیف جزئیات پدیده‌های مختلف است و می‌توان با استفاده از نتایج گرافیکی کدهای دینامیک مولکولی دید مناسبی از پدیده‌ها در مقیاس مولکولی به دست آورد که به فهم دقیق خواص منجر می‌شود. در این روش مسیر

کنش‌های بین دو مولکول بیشترین سهم را در یک سیستم مولکولی دارد. بدین علت در اغلب شبیه‌سازی‌ها برای جلوگیری از پیچیدگی‌های محاسباتی انرژی پتانسیل بین‌مولکولی را به صورت برهم‌کنش‌های بین یک جفت اتم یا مولکول به صورت مجزا در نظر می‌گیرند. به عبارت دیگر:

$$\Phi(r^N) = \sum_i \Phi_1(r_i) + \sum_{i > j} \Phi_2(r_i, r_j) \quad \text{معادله (۲)}$$

این تابع، انرژی پتانسیل برهم‌کنش بین‌مولکولی را مدل می‌کند و تنها به فاصله بین دو ذره وابسته است. به دلیل عدم وجود نیروی میراکننده، نیروهای بین‌مولکولی پایستار هستند و نیروی وارد بر مولکول  $i$  توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$F_i = -\nabla_i \Phi = -\frac{\partial \Phi}{\partial r_i} \quad \text{معادله (۳)}$$

این تابع یا توابع پتانسیل باید برهم‌کنش بین ذرات کل سیستم را محاسبه کنند. بدین دلیل از یک یا چندین تابع پتانسیل بهره برده می‌شود. همچنین باید برهم‌کنش بین مولکول‌ها و محیط اطراف تشریح شود. در گذشته توابع پتانسیل اغلب توسط برهم‌کنش‌های جفتی نمایش داده می‌شدند، اما امروزه برای شبیه‌سازی سیستم‌ها و مولکول‌های پیچیده‌تر از برهم‌کنش‌های کامل‌تر استفاده می‌شود. علی‌رغم پیشرفت‌های اخیر در زمینه فیزیک نظری و تجربی هنوز در بسیاری موارد پتانسیل برهم‌کنش ذرات ناشناخته باقی‌مانده است. در این‌گونه موارد یک پتانسیل پیشنهادی برای سیستم در نظر گرفته شده و در فرآیند شبیه‌سازی اعمال می‌گردند. سرانجام با مقایسه نتایج شبیه‌سازی با حداقل یکی از مشاهدات تجربی وابسته به سیستم، می‌توان پتانسیل پیشنهاد شده برای سیستم را تصحیح کرد. در واقع همین امر سبب شده که روش دینامیک مولکولی به صورت ابزاری کارآمد برای محک زدن تئوری‌های چند ذره‌ای و آزمودن پتانسیل‌های مختلف به کار رود. در پژوهش حاضر سیستم آلیاژی آهن-نیتروژن در ابعاد نانومتری با اعمال پتانسیل تصحیح‌شده اتم محاط شده [۱] شبیه‌سازی می‌شود. این شبیه‌سازی توسط کد منبع باز لمپس [۱۴] به زبان ++C در محیط لینوکس انجام گرفته و تحلیل ریزساختار سیستم توسط نرم‌افزارهای جانبی صورت گرفته است.

انتگرال‌گیری از این معادله، مسیر حرکت ذرات به دست می‌آید. در واقع این روش برای شبیه‌سازی رفتار ترمودینامیکی سیستم‌ها با استفاده از نیرو، سرعت و مکان ذرات است. در بین این عوامل، مهم‌ترین عامل نیرو می‌باشد. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کلاسیک، نیرو از یک پتانسیل به دست می‌آید. پتانسیل، تابعی از مکان مولکول‌ها یا هسته آن‌ها است و به موقعیت الکترون‌ها و ذرات زیراتمی (پروتون و نوترون) در مولکول‌ها وابسته نیست. در حقیقت روش دینامیک مولکولی تصویری از حرکت ذرات یا مولکول‌ها را بنا می‌نهد که در این تصویر، حرکت مستقیم مولکول‌ها و برخورد آن‌ها با دیواره و یکدیگر و ... لحاظ می‌شوند. در این روش چنانچه مجموعه‌ای از شرایط اولیه به همراه معادله برهم‌کنش بین ذرات در دسترس باشد، رفتار بعدی سیستم مولکولی قابل پیش‌بینی خواهد بود. طرح‌واره‌ای از الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در شکل ۱ نشان داده شده است.

## ۲-۲ مدل اتمی و شرایط شبیه‌سازی

پیش از شروع هر شبیه‌سازی باید در مورد انتخاب مدل انرژی برای توصیف برهم‌کنش‌های بین‌اتمی سیستم تصمیم بگیریم. از آنجاکه شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به‌طور معمول برای تعداد زیادی ذره و در تکرارهای زیاد برای رسیدن به حالت تعادل انجام می‌شود، همیشه از مدل‌های تجربی برای این منظور استفاده می‌کنیم. برهم‌کنش‌های بین‌مولکولی با استفاده از یک تابع پتانسیل بیان می‌شود. انتخاب مدل در شبیه‌سازی به معنای انتخاب تابع پتانسیل است. به عبارت دیگر تابع پتانسیل، ورودی اصلی هر شبیه‌سازی رایانه‌ای است. این تابع پتانسیل به دلیل برهم‌کنش‌های بین‌مولکولی در دامنه شبیه‌سازی تعریف شده و برای یک سیستم مولکولی که از تعداد  $N$  مولکول یا ذره تشکیل شده است، به صورت رابطه زیر بیان می‌شود [۱۳].

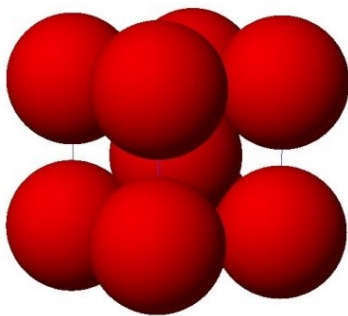
$$\Phi(r) = \sum_i \Phi(r_i) + \sum_{i > j} \Phi(r_i, r_j) + \sum_{i > j > k} \Phi(r_i, r_j, r_k) + \dots \quad \text{معادله (۱)}$$

که در آن  $r$  بردار مکان مرکز اتم‌ها را نشان می‌دهد.  $\Phi_1$  بیان‌کننده اثر یک میدان خارجی مانند دیواره،  $\Phi_2$  برهم‌کنش‌های جفت مولکول و  $\Phi_3$  برهم‌کنش‌های میان سه مولکول یا ذره است. در میان برهم‌کنش‌های ذکر شده، برهم

<sup>1</sup> Modified embedded-atom method (MEAM)

سیستم آلیاژی آهن- نیتروژن متناسب با مقادیر انتخاب شده در جدول ۲ بیان شده است.

سیستم شبیه‌سازی، یک جعبه سه‌بعدی با طول اضلاع  $8.61\text{\AA} \times 114.8\text{\AA} \times 287.4\text{\AA}$  می‌باشد که حاوی ۲۵۴۲۳ تعداد اتم کل با ۲۴۴۲۳ اتم آهن و ۱۰۰۰ اتم نیتروژن می‌باشد. آهن با ساختار BCC و پارامتر شبکه ۰٫۲۸۵ نانومتر بوده و اتم‌های نیتروژن به‌طور تصادفی در داخل آن پخش شده‌اند. ساختار آهن و آلیاژ Fe-N به صورت BCC به ترتیب در شکل ۲ و ۳ نشان داده شده است.



شکل ۲. سلول واحد آهن با شبکه مکعبی مرکزدار.



شکل ۳. سلول واحد آهن- نیتروژن.

شرایط مرزی در جهت x و y آزاد بوده و در جهت z سیستم تناوبی می‌باشد. شکل ۴ ساختار اتمی و توزیع ذرات نیتروژن در ساختار آهن را نشان می‌دهد. مدل اتمی سیستم به پنج ناحیه تقسیم‌بندی شده است. گروه اتمی بالایی (سیاه‌رنگ) حاوی ۹۳۲ اتم، گروه اتمی پائینی (سیاه‌رنگ) حاوی ۹۳۷ اتم،

پتانسیل تصحیح‌شده اتم محاط شده برای اولین بار توسط بسکس [۱۵] ارائه شده است. این پتانسیل اولین رابطه نیمه‌تجربی برای مدل‌سازی طیف وسیعی از عناصر و آلیاژها می‌باشد که از یک فرمولاسیون منفرد برای عناصر گوناگون با ساختارهای بلوری متفاوت استفاده می‌کند. این پتانسیل حالت توسعه‌یافته از پتانسیل اتم محاط شده<sup>۱</sup> می‌باشد که در آن سهم نیروهای زاویه‌ای نیز در فرمولاسیون ریاضی لحاظ شده است. انرژی برهم‌کنش بین‌اتمی کل سیستم برای آلیاژ آهن- نیتروژن با استفاده مدل پتانسیل تصحیح‌شده اتم محاط شده مطابق با فرمول زیر توسط لی و همکاران [۱۶] مدل شده است.

$$E = \sum_i \left[ F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) \right] \quad (۴)$$

که در آن  $F_i(\bar{\rho}_i)$  تابع محاط<sup>۲</sup> بوده و  $\bar{\rho}_i$  چگالی الکترونی در مکان اتم i و  $\phi_{ij}(r_{ij})$  پتانسیل جفتی<sup>۳</sup> بین اتم‌های i و j با فاصله بین‌اینی  $r_{ij}$  می‌باشد.

پارامترهای مرتبط با پتانسیل تصحیح‌شده اتم محاط شده 2NN-MEAM مربوط به آلیاژ آهن- نیتروژن در مدل موردنظر وارد شده است. این پارامترها برای آهن خالص و نیتروژن خالص در جدول ۱ فهرست شده‌اند.

جدول ۱. پارامترهای پتانسیل 2NN-MEAM برای آهن خالص و نیتروژن خالص [۱۶].

N	Fe	نام عنصر
4.88	4.29	$E_c (eV)$
5.96	5.07	$\alpha$
1.80	0.56	$A$
2.75	4.15	$\beta^{(0)}$
4.00	1.00	$\beta^{(1)}$
4.00	1.00	$\beta^{(2)}$
4.00	1.00	$\beta^{(3)}$
1.00	1.00	$t^{(0)}$
0.05	2.60	$t^{(1)}$
1.00	1.80	$t^{(2)}$
0.00	-7.20	$t^{(3)}$
2.00	0.36	$C_{\min}$
2.80	2.80	$C_{\max}$
1.00	1.00	$\rho_0$

پارامترهای مرتبط به پتانسیل 2NN-MEAM برای

<sup>1</sup> Embedded-atom method (EAM)

<sup>2</sup> Embedding function

<sup>3</sup> Pair potential

انرژی شبیه‌سازی شده است. در مرحله دوم بارگذاری، مقدار سرعت  $0.8 \text{ \AA/ps}$  در جهت  $y$  اعمال شده است. با بررسی سرعت‌های مختلف می‌توان دریافت که در سرعت بارگذاری مذکور، فرآیند رشد ترک در آلیاژ مدنظر در مدت زمان‌های کم شبیه‌سازی، قابل مشاهده و ارزیابی می‌باشد. گام زمانی شبیه‌سازی  $0.0001$  فمتوثانیه بوده و تعداد تکرار کل شبیه‌سازی  $1000000$  می‌باشد.

گروه اتمی بالایی در سمت چپ (قرمز رنگ) حاوی  $2627$  اتم، گروه اتمی پائینی در سمت چپ (آبی رنگ) حاوی  $2627$  اتم و گروه اتمی اصلی متحرک در سمت راست (بنفش رنگ) حاوی  $23554$  اتم می‌باشند. صفحه ترک در جهت  $x$  قرار گرفته و جهت  $z$  ضخامت صفحه می‌باشد. فرآیند بارگذاری در دو مرحله مدل شده است: در مرحله اول بارگذاری، سیستم به تعداد  $10000$  گام زمانی برای رسیدن به آسایش و کمینه‌سازی

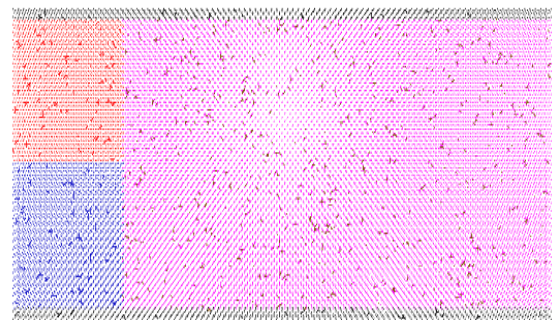
جدول ۲. پارامترهای پتانسیل 2NN-MEAM برای آلیاژ آهن - نیتروژن [۱۶].

مقادیر انتخاب شده	پارامتر
$0.5E_c^{Fe} + 0.5E_c^N + 0.7$	$E_c$
2.09	$r_e$
2.195	B
$0.5d^{Fe} + 0.5d^N$	d
0.16	$C_{\min}(Fe-N-Fe)$
0.16	$C_{\min}(N-Fe-N)$
0.16	$C_{\min}(Fe-Fe-N)$
$[0.5(C_{\min}^{Fe})^{1/2} + 0.5(C_{\min}^N)^{1/2}]^2$	$C_{\min}(Fe-N-N)$
1.44	$C_{\max}(Fe-N-Fe)$
2.80	$C_{\max}(N-Fe-N)$
2.80	$C_{\max}(Fe-Fe-N)$
2.80	$C_{\max}(Fe-N-N)$
$\rho_0^N / \rho_0^{Fe} = 18$	$\rho_0$

دمای سیستم با اعمال ترموستات مقیاس‌بندی سرعت در  $300$  کلوین ثابت شده است.

### ۳- نتایج و بحث

شکل ۵ ریزساختار رشد ترک را در حین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوبلور آهن- نیتروژن در دمای  $300$  کلوین در زمان‌های مختلف نشان می‌دهد. هم‌چنان که از شکل ۵ دیده می‌شود، در اثر اعمال بارگذاری کششی به نمونه ترک‌دار اولیه، به علت تغییر هندسه شکل در نوک ترک تمرکز تنش به وجود می‌آید. مشاهده می‌شود که در مراحل اولیه رشد ترک یعنی زمان  $2.5$  پیکوثانیه، تنش‌های کششی در نوک ترک متمرکز

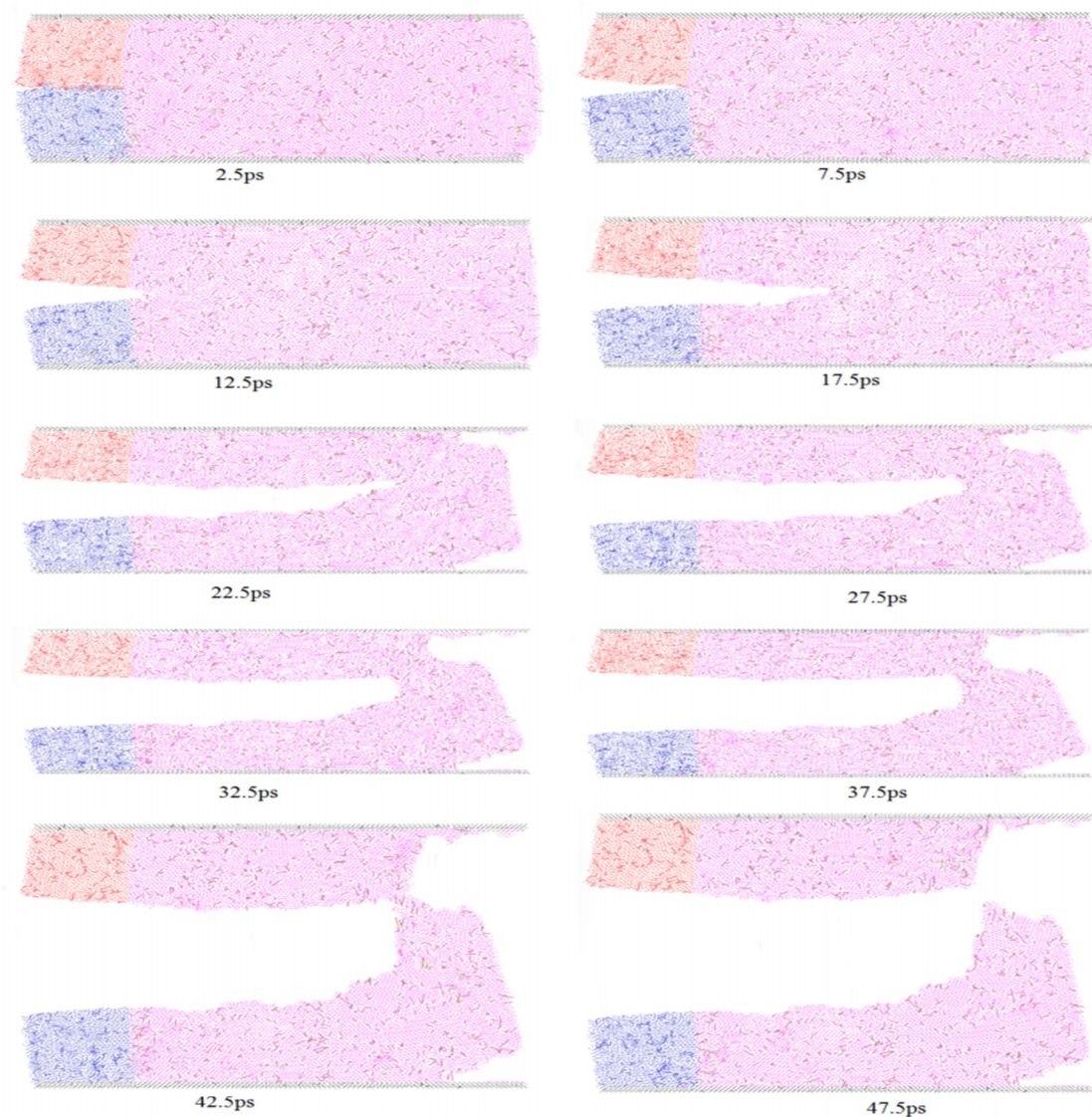


شکل ۴. ساختار اتمی اولیه آلیاژ آهن- نیتروژن.

ترک اولیه در نقطه وسط سمت چپ شبکه اتمی قرار گرفته است. بارگذاری تغییر شکل در جهت  $y$  عمود بر صفحه ترک اعمال شده است. بارگذاری نرخ کرنش ثابت طوری انجام می‌شود که سرعت به صورت خطی با مختصات  $y$  تغییر می‌یابد.

شبیه‌سازی شده، حفره‌ای جوانه زده می‌شود. در اثر اعمال تنش کششی بیشتر به نمونه، مشاهده می‌شود (زمان‌های ۲۷/۵، ۳۲/۵ و ۳۷/۵ پیکوثانیه) که اندازه این حفره زیاد شده و به سمت ناحیه پیشروی رشد ترک اولیه اشاعه پیدا می‌کند. در نهایت با اتصال این حفره به ترک اولیه اشاعه یافته (زمان ۴۲/۵ پیکوثانیه)، سرعت رشد ترک بیشتر شده و بعد از رسیدن حفره و ترک اشاعه یافته به یک نقطه گلویی، دو سطح ماده از هم جدا می‌گردد.

می‌شوند و بعد از جوانه‌زنی اولیه ترک، پیشروی ترک آغاز می‌شود. با افزایش طول ترک اولیه (زمان‌های شبیه‌سازی ۷/۵، ۱۲/۵ و ۱۷/۵ پیکوثانیه) سرعت رشد ترک در بارگذاری افزایش می‌یابد و به علت افزایش بیشتر تمرکز تنش در نوک ترک، انهدام نمونه با سرعت بیشتری رخ می‌دهد. با افزایش بیشتر زمان شبیه‌سازی یا به عبارتی با ادامه بارگذاری نمونه (زمان ۲۲/۵ پیکوثانیه)، در ناحیه‌ی دیگری از نمونه



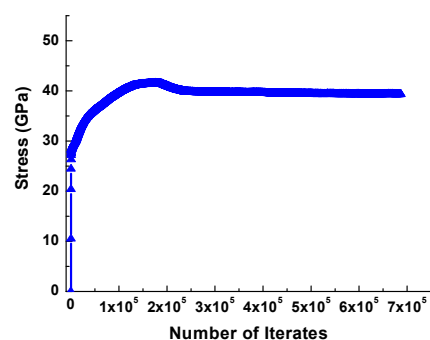
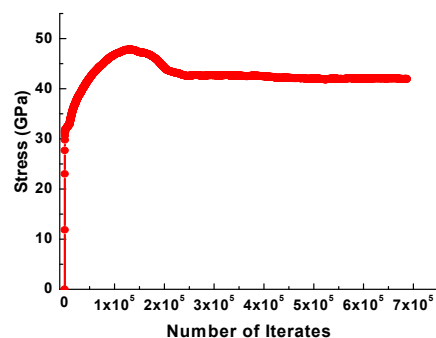
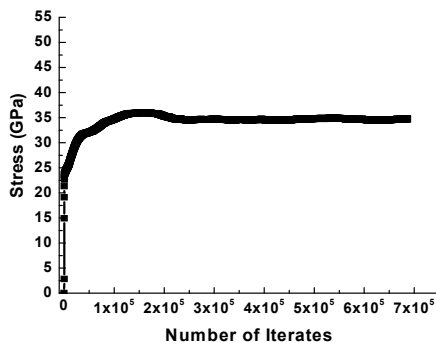
شکل ۵. ریزساختار رشد ترک در نانوبلور آهن- نیتروژن.

بلور را می‌تواند نشان دهد. تابع توزیع شعاعی<sup>۱</sup> سیستم شبیه‌سازی شده در گام‌های زمانی مختلف ۱۰۰۰۰۰، ۲۵۰۰۰۰ و ۵۰۰۰۰۰ در شکل ۶ نشان داده شده است. شکل ۶ نشان

یکی از کمیت‌های مهم برای تعیین ساختار سیستم، تابع توزیع شعاعی است که ساختار موضعی و نظم اتم‌ها را نسبت به یکدیگر مشخص می‌کند و به دما و چگالی سیستم وابسته است. در حقیقت، تابع توزیع شعاعی ساختار داخلی

<sup>۱</sup> Radial distribution function(RDF)

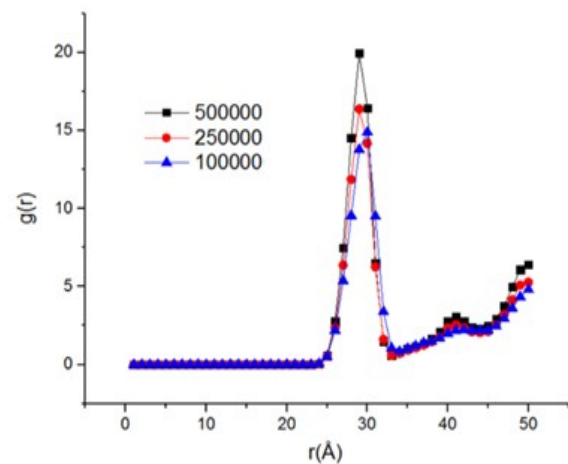
(ج) نشان داده شده است. نتایج حاصل نشان می‌دهد که طول نمونه در جهت x ابتدا افزایش یافته و به یک مقدار ماکزیمم می‌رسد و سپس با ادامه بارگذاری کاهش یافته و در نهایت به یک مقدار ثابت می‌رسد. دلیل افزایش اولیه طول نمونه در جهت x را می‌توان به رشد اولیه ترک در جهت عمود بر تنش کششی مطابق بررسی‌های ریزساختاری انجام‌شده در شکل ۵ نسبت داد (زمان‌های شبیه‌سازی ۲٫۵، ۷٫۵ و ۱۲٫۵ پیکوثانیه).



شکل ۷. فشار سیستم در طول فرآیند ترک در (الف) جهت x (ب) جهت y (ج) جهت z

با توجه به شکل ۵، با افزایش بیشتر زمان شبیه‌سازی (اشاعه ترک در زمان‌های بالاتر از ۱۲٫۵ پیکوثانیه) مسیر رشد ترک تغییر پیدا کرده و ترک اولیه روی صفحات با تنش برشی بیشتر (صفحات با زاویه ۴۵ درجه) پیشرفت می‌کند (عمیق‌تر می‌گردد) بنابراین به نظر می‌رسد که تغییر در مسیر رشد ترک

می‌دهد که در هر سه گام زمانی موردنظر در تابع توزیع شعاعی اتم‌ها سه ماکزیمم وجود دارد که به ترتیب در فاصله‌های ۳۰، ۴۲ و ۵۰ آنگستروم قرار دارند. هم‌چنین مشاهده می‌شود که ارتفاع هر سه پیک با افزایش زمان شبیه‌سازی افزایش می‌یابند. دلیل تغییر شدت پیک‌ها را می‌توان به تغییر در موقعیت اتم‌ها در اثر پیشروی ترک نسبت داد [۱۷]. لیو و همکاران [۱۷] نیز در شبیه‌سازی سیکل‌های خستگی نانوبلور آهن فریتی مشاهده نموده‌اند که با افزایش طول ترک در حین خستگی، شدت پیک‌های منحنی تابع توزیع شعاعی با افزایش زمان تغییر می‌یابد.



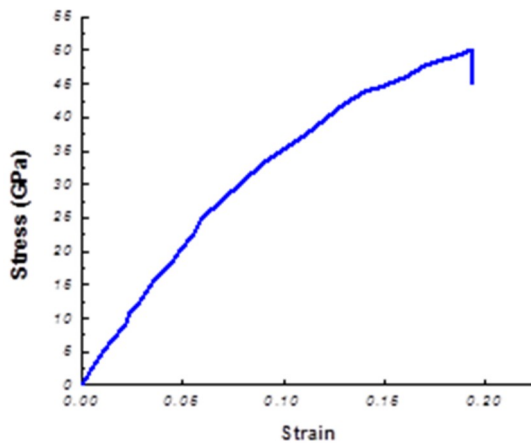
شکل ۶. تابع توزیع شعاعی در تکرارهای مختلف.

به منظور درک بیشتر پیشروی ترک در اثر اعمال بارگذاری، مقادیر میدان‌های تنش در سیستم شبیه‌سازی‌شده حاوی ترک مورد بررسی قرار گرفت. منحنی تنش نسبت به زمان شبیه‌سازی در شکل ۷ در سه جهت مختلف x، y و z نشان داده شده است. هم‌چنان که شکل ۷ نشان می‌دهد مقادیر تنش در هر سه جهت بلوری ابتدا دارای رفتار غیرخطی و سپس رفتار خطی می‌باشند که به دلیل تغییر جهت رشد ترک با افزایش زمان شبیه‌سازی می‌باشد. هم‌چنین دیده می‌شود که شیب منحنی‌های تنش با گذشت زمان کاهش یافته تا به یک مقدار ماکزیمم برسد. این مقدار ماکزیمم برابر با استحکام شکست نانوبلور آهن- نیتروژن در اثر اعمال بارگذاری کششی است که مطابق داده‌های تنش محاسبه‌شده به ترتیب برابر با ۳۶، ۴۷٫۸ و ۴۱٫۶ گیگاپاسکال در جهت‌های x، y و z است.

تغییر ابعاد سیستم شبیه‌سازی‌شده با اعمال بارگذاری در جهت‌های x، y و z به ترتیب در شکل‌های ۸ (الف)، (ب) و



در شکل ۹ منحنی تنش- کرنش حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای نمونه نانوبلور ترک‌دار مورد مطالعه نشان داده شده است. مشاهده می‌شود با افزایش کرنش، تنش نمونه افزایش یافته تا به یک نقطه تنش نهایی برسد. بعد از این نقطه ماکزیمم، فرآیندهای تغییر شکل پلاستیک شامل جوانه‌زنی و به هم پیوستن حفره‌ها در بلور صورت می‌گیرد.

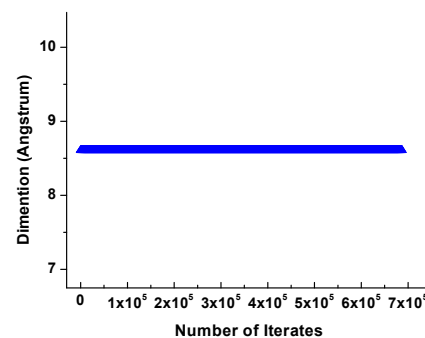
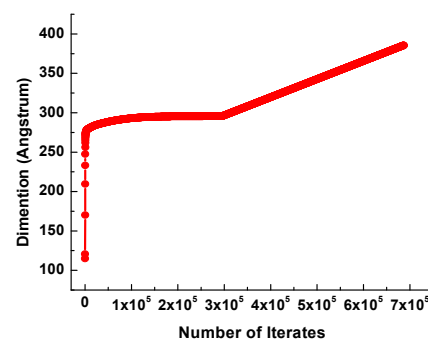
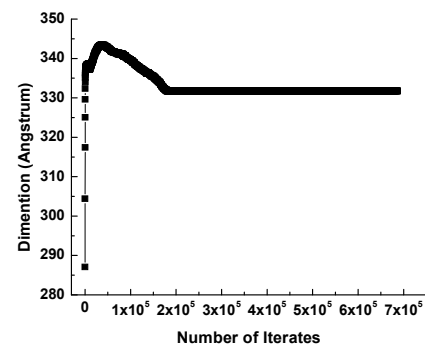


شکل ۹. منحنی تنش - کرنش نانوبلور ترک‌دار.

#### ۴ - نتیجه گیری

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یک ابزار بسیار مؤثر در تحلیل شکست می‌باشد که با استفاده از آن می‌توان رفتار مکانیکی در سطح اتمی را مدل‌سازی و تحلیل کرد. در مقاله حاضر، اشاعه ترک در آلیاژ آهن- نیتروژن در مقیاس نانو به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه و تحلیل قرار گرفته است. نتایج کار حاضر برای پیکربندی اتمی خاص و در دمای ۳۰۰ کلوین برای آلیاژ آهن- نیتروژن با ساختار BCC به دست آمده است. با تغییر جهت‌گیری کریستال و شرایط شبیه‌سازی، توسعه ریزساختار و فرآیند شکست متفاوت خواهد بود. علاوه بر این، پتانسیل اتمی پارامتر بسیار تأثیرگذار بر ریزساختار سیستم می‌باشد. بدین منظور برای اولین بار از پتانسیل برهم‌کنش MEAM و پارامترهای مربوط به آن برای مدل‌سازی فیزیکی این سیستم آلیاژی استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهند که ریزساختار رشد ترک در طول اشاعه ترک دچار تغییر شده و با افزایش طول ترک سرعت رشد ترک افزایش می‌یابد. همچنین نتایج ارزیابی نمودارهای تنش و جابجایی نشانگر تغییرات در سه جهت مختصاتی می‌باشد که

اولیه منجر به ایجاد نقطه ماکزیمم در منحنی تغییرات طول نمونه در جهت x گردیده است.



شکل ۸. تغییر ابعاد سیستم شبیه‌سازی شده در طول فرآیند ترک در

(الف) جهت x (ب) جهت y (ج) جهت z

هم‌چنین ملاحظه می‌شود که بُعد نمونه در جهت y با افزایش تنش زیادتر گشته و با ادامه بارگذاری تغییرات بُعد نمونه در جهت y با شیب تندی افزایش می‌یابد. درحالی‌که نتایج شبیه‌سازی گویای آن است که ابعاد نمونه در جهت z تغییرات زیادی از خود نشان نمی‌دهد. تغییرات بُعد نمونه در جهت y در حقیقت بازشدگی دهانه ترک را در حین بارگذاری نشان می‌دهد. مطابق شکل‌های ۵ و ۸، تغییر شکل پلاستیک گسترده در نوک ترک سبب می‌شود که سطوح ترک به‌طور مجزا در نوک ترک حرکت کنند بدون این‌که طول ترک در جهت x افزایش زیادی از خود نشان دهد.

ناشی از ریزساختار رشد ترک در طول شبیه‌سازی می‌باشد.

### مراجع

1. Boyer, H.E., Case Hardening of Steel, ASM International, (1987).
2. Pye, D., Practical Nitriding and Ferritic Nitrocarburizing, ASM International, (2003).
3. Davis, J., Surface Hardening of Steels, (2002), ASM International.
4. Akbaridoost, J., Mohajerani, S., Torabi, A., Investigation of fracture trajectory in blunt V-notched specimens under mixed, *Modares Mechanical Engineering*, 16 (3) (2016) 161-172.
5. Kazemi, S.R., Shakouri, M., Effects of the speed of applying loads on the growth of inclined crack in plates, *Modares Mechanical Engineering*, 17 (1) (2017) 403-412.
6. Wong, S., Bold, P., Brown, M., A branch criterion for shallow angled rolling contact fatigue cracks in rails, *Wear*, 191 (1996) 45-53.
7. Kabo, E., Material defects in rolling contact fatigue-influence of overloads and defect clusters, *International Journal of Fatigue*, 24 (2002) 887-894.
8. Beretta, S., Boniardi, M., Carboni, M., Desimon, H., Mode II fatigue failures at rail butt-welds, *Engineering Failure Analysis*, 12 (2004) 157-165.
9. Farkas, D., Willemann, M., Hyde, B., Atomistic mechanisms of fatigue in nanocrystalline metals, *Physical Review Letters*, 94 (2005) 165.
10. Tang, T., Kim, S., Horstemeyer, M.F., Fatigue Crack Grows in Magnesium Single Crystals under Cyclic Loading: Molecular Dynamics Simulation, *Computational Materials Science*, 48 (2010) 426-439.
11. Deshpande, V.S., Needleman, A., Vander Giesseen, E., A Discrete Dislocation Analysis of Near-threshold Fatigue Crack Growth, *Acta Material*, 49 (2001) 3189.
12. Inoue, H., Akahoshi, Y., Harada, S., Molecular Dynamics Simulation on Fracture Mechanisms of Nano-Scale Polycrystal Under Static and Cyclic Loading, *Journal of Materials Science Research*, 1 (1995) 95-99.
13. Allen, M., Tildesley, D., Computer Simulations of Liquids, Oxford: University Press, (1997).
14. Plimpton, S., Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *Journal of Computational Physics*, 117 (1) (1995) 1-19.
15. Baskes, M.I., Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities, *Physical Review B*, 46 (1992) 2727.
16. Lee, B., Lee, T., Kim, S., A modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe-N system: A comparative study with the Fe-C system, *Acta Materialia*, 54 (17) (2006) 4597-4607.
17. Liu, T., Liu, M., Atomistic Simulation of Fatigue Crack Growth in  $\alpha$ -Fe under High Temperature, *Applied Mechanics and Materials*, 750 (2015) 226-235.