



مدلسازی اتمی رفتار حوزه پلاستیک نوک ترک در فلزات FCC

سارا اخوان^۱، مریم خداداد^۲، امید علیزاده^۳، سهیل محمدی^۴

۱،۲،۳،۴- آزمایشگاه محاسبات سریع، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه تهران

smoham@ut.ac.ir

خلاصه

گسترش ترک در ابعاد ماکرو همواره مورد توجه محققین و دانشمندان بوده است. با رشد ترک در فلزات، ناحیه مجاور نوک ترک دچار تغییر شکل هابی می شود که بررسی منشا آنها نیاز به مدلسازی در مقیاس اتمی را برای کاربردهای خیلی حساس ضروری می سازد. در این پژوهش سعی می شود، با مدلسازی ترک در ابعاد اتمی، کلیه پدیده های اتمی نظیر تولید نابجایی، ایجاد حفره، جفت شدگی، لغزش صفحات شناسایی و حوزه پلاستیک نوک ترک در ابعاد اتمی بطور کامل مشخص گردد. تاثیر موقعیت صفحات لغزش و مسیر حرکت نابجایی ها در رشد ترک نیز مطالعه می گردد. شناخت دقیق این ناحیه در تعیین مسیر دقیق گسترش ترک و توزیع دقیق تنش در مجاورت این ناحیه می تواند موثر باشد.

کلمات کلیدی: مدلسازی اتمی، ترک، حوزه پلاستیک، فلزات

۱. مقدمه

بررسی روند رشد و گسترش ترک و نحوه آغاز آن در علوم مهندسی، از دیرباز مورد توجه و مطالعه بوده است. زیرا ممکن است در نهایت منجر به گسیختگی و نابودی قطعه گردد و به همین دلیل نیاز است تا تمهیدات کافی در مقابل این پدیده در نظر گرفته شود. گریفیث^۵ و ایروین^۶ از اولین دانشمندانی بودند که بر مبنای ساختار میکرو معیارهایی برای شکست مواد ارائه نمودند [1] [2]. از جمله مسائلی که ایروین و همکارانش با آن مواجه شدند، دسته ای از ترک ها بودند که در حین بارگذاری دچار تغییر شکل های پلاستیک قابل توجه می شدند. پدیده های متعددی از جمله رفتار ترد یا شکل پذیر ترک، تشکیل ناحیه پلاستیک در اطراف نوک ترک، ایجاد و انتشار نابجایی ها^۷، وقوع پدیده هایی همچون تغییر فاز^۸ و غیره در آزمایشات مشاهده می گردند که تئوری های محیط های پیوسته، به خوبی قادر به توجه و بررسی منشاء و روند آنها نیستند و نیاز به مدلسازی در ابعاد ریز مانند ابعاد اتمی ایجاد می شود [3] [4] [5] [6]. در پلاستیسیته محلی در نواحی نوک ترک، مجموعه ای از پدیده های اتمی ایجاد می گردند، که در نهایت سبب گسترش ترک می شوند [7]. پلاستیک شدن نوک ترک موجب می شود ترک بیش از ظرفیت خود بار یا تنش تحمل کند و در نتیجه شروع به رشد نماید. به دست آوردن معیار دقیق و مناسبی از پلاستیسیته نوک ترک، نیازمند بررسی منشاء اتمی پدیده های موثر بر آن است و در نهایت از این مطالعات می توان مدل های رفتاری مناسب جهت آغاز و گسترش ترک را استخراج نمود.

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی عمران - سازه، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه تهران

^۲ دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی عمران - سازه، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه تهران

^۳ دانشجوی دکترای مهندسی عمران - سازه، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه تهران

^۴ عضو هیات علمی دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه تهران

^۵ Griffiths

^۶ Irwin

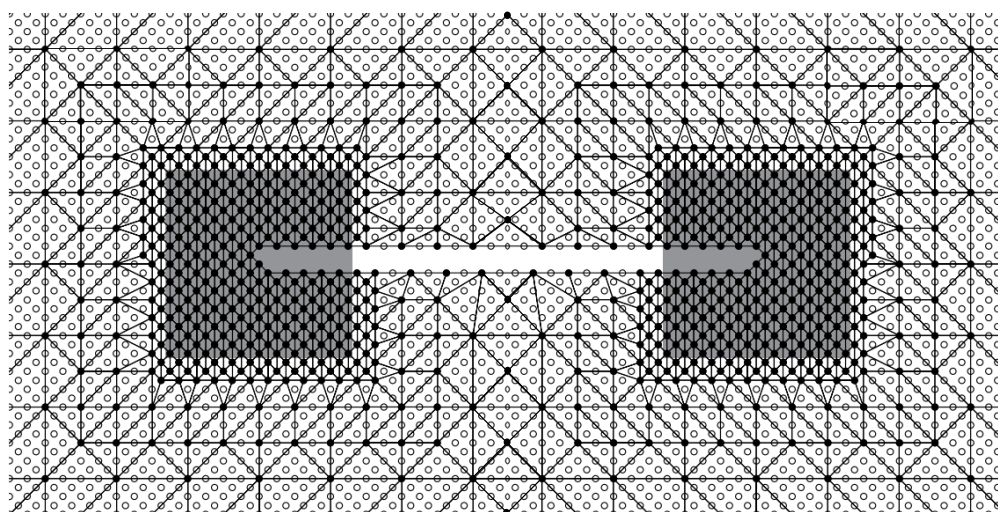
^۷ Dislocations

^۸ Phase transformation

۲. روش مدل سازی

روش های اتمی متعددی در بررسی پدیده های نوک ترک، به کار گرفته می شود از جمله این روش ها می توان روش مونت کارلو، استاتیک مولکولی^۱ و دینامیک مولکولی^۲ را نام برد. در تمامی روش های اتمی درجات آزادی فراوانی در نظر گرفته می شود که منجر به افزایش زمان و هزینه محاسباتی حل مسائل با این روش ها می گردد. در نتیجه ایده کوپل^۳ کردن روش های اتمی با روش های پیوسته^۴ مطرح گردیده است. در برخی از مسائل مانند مساله گسترش ترک، نیاز به دقت بالا منتج از بخش اتمی، حتی در بخش هایی که با روش های پیوسته مدل سازی می شوند، وجود دارد. از جمله روش های چندمقیاسی^۵ دارای چنین دقتی، می توان روش شبه پیوسته^۶ را نام برد که هدف اصلی آن حداقل سازی انرژی در کل ماده است [8].

در این روش، ناحیه نوک ترک که دارای حساسیت فراوان نسبت به تغییرات و گرادیان شدید تنش است، با کمک روش استاتیک مولکولی مدل می گردد و مینیمم سازی انرژی در آن انجام می شود. در نواحی دورتر از نوک ترک، به جای استفاده از مدل های پرهزینه اتمی، با فرض قرار گرفتن اتم ها در زیر المان های اجزا محدود، انرژی المان ها از طریق حداقل سازی انرژی اتم های قرار گرفته در زیر آنها، محاسبه می شود. هم چنین برای کاهش تعداد اتم ها و درجات آزادی در نظر گرفته شده، در المان هایی که گرادیان یا تغییرات شدید وجود ندارد، یک اتم به عنوان نماینده که بیانگر ویژگی ها و خصوصیات آن المان است، در نظر گرفته می شود. در مدل های مختلف، اتم های متفاوتی به عنوان نماینده در نظر گرفته می شوند. به عنوان مثال، می توان اتم موجود در گوشه المان را نماینده در نظر گرفت. یک راه دیگر در نظر گرفتن اتم یا تعدادی از اتم های مرکزی المان به عنوان نماینده است [9]. در این مطالعه همانگونه که در شکل ۱ مشاهده می شود، المان های نواحی نوک ترک تا ابعاد اتمی ریز شده اند. به عبارت دیگر گره های المان های موجود در نواحی نوک نماینده هیچ اتمی دیگری نیستند. به همین علت در این ناحیه، انتخاب اتم نماینده بحث و چالش برانگیز نمی باشد.



شکل ۱- مش بندی دور و نزدیک ترک در روش شبه پیوسته [10]

¹ Molecular statics

² Molecular dynamics

³ Couple

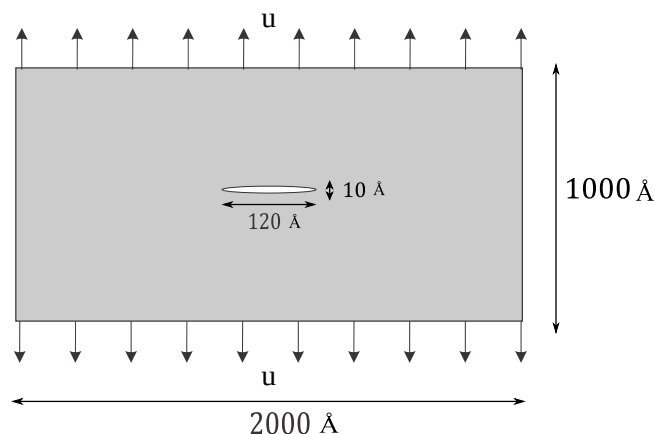
⁴ Continuum

⁵ Multiscale

⁶ QuasiContinuum Method

۳. نمونه مدل سازی شده

همانگونه که در شکل ۲ مشاهده می شود، صفحه ای از جنس مس با ابعاد 1000×2000 آنگستروم و دارای یک ترک میانی با طول اولیه 120 آنگستروم و بازشدگی اولیه 10 آنگستروم، در دمای صفر کلون مدل سازی شده است. جهت گیری محور x برابر $[110]$ و محور y برابر $[001]$ می باشد.



شکل ۲- هندسه نمونه ترک خورده

زمانیکه مقیاس مدل سازی در حد اتمی کوچک می شود، انتخاب تابع پتانسیل بین اتمی مناسب اهمیت پیدا می کند. می توان گفت مهم ترین فرض در این دسته مسایل، تابع پتانسیل اتمی است که با یکبار مشتق گیری از آن، نیرو و با دو بار مشتق گیری سختی به دست می آید. جهت محاسبه انرژی پیوند بین اتم ها، پتانسیل بین اتمی ^۱EAM مورد استفاده قرار گرفته است. این پتانسیل بین اتمی که رابطه مربوط به آن در (۱) ذکر شده است، اولین بار توسط Daw و Baskes به عنوان یک روش نیمه تجربی برای محاسبه انرژی کل مجموعه ای از اتم ها با چیدمان دلخواه و برای فلزات مطرح شد [11]. در این روش انرژی اتم ها به شدت متاثر از اتم های اطراف یا به عبارت دیگر شرایط محیطی اتم است. هم چنین تاثیر ۲ پارامتر جاذبه و چگالی الکترون ها برای هر اتم در این پتانسیل بررسی و اعمال می شود.

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (1)$$

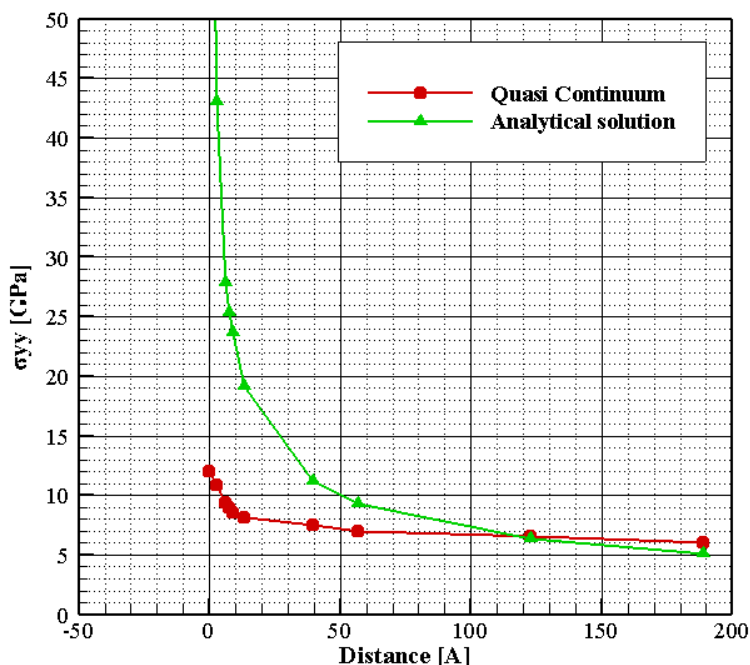
که در این رابطه F_i عبارت مربوط به انرژی جاذبه اتم i که با استفاده از چگالی الکترونی ρ محاسبه می شود. $\rho_{h,i}$ چگالی الکترونی میزبان در اتم i که با جمع چگالی الکترونی اتم های اطراف آن محاسبه می شود. ϕ_{ij} نیز نیروی دافعه (بازدارندگی) بین هسته های جفت اتم های i و j که با فاصله R از هم جدا شده اند، می باشد [11].

۴. نتایج مدل سازی

بارگذاری کششی مطابق مود اول به صفحه دارای ترک اعمال شده است. در هر گام زمانی به اندازه 0.2 آنگستروم لبه های صفحه کشیده می شود و زمان کافی برای ریلکس کردن به آن داده می شود. در این شبیه سازی نوع و نرخ بارگذاری ثابت در نظر گرفته شده است. پس از اعمال بار، اتم های موجود در ناحیه نزدیک نوک ترک تحت تنش بیشتری قرار می گیرند و در نواحی دورتر از ترک،

¹ Embedded Atom Method

مقادیر تنش ها کمتر می شوند. نمودار تنش های بدست آمده از مدل شبه پیوسته در کنار تنش های پیش بینی شده توسط روش های متعارف تحلیلی مبتنی بر محیط های پیوسته در شکل ۳ آورده شده است.



شکل ۳- نمودار تنش های روش شبه پیوسته و تنش های بدست آمده از روابط کانتینیوم

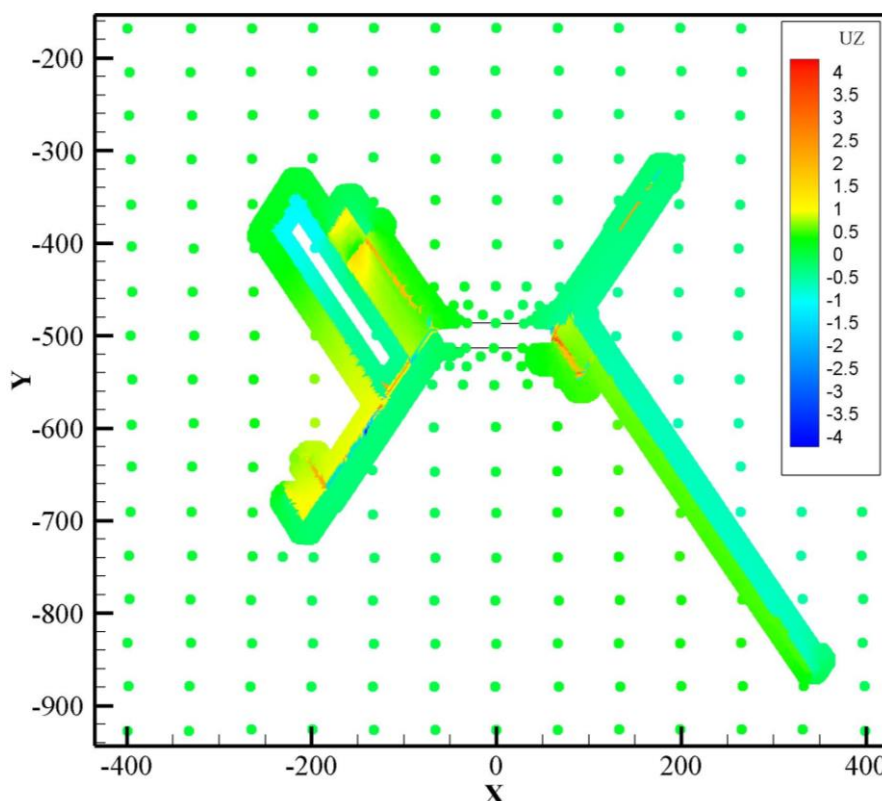
تنش های تحلیلی با رابطه (۲) قابل محاسبه می باشند [12].

$$\sigma_{yy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 + \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2} \right) \quad (2)$$

در رابطه فوق K_I ضریب تمرکز تنش تحت بارگذاری مود اول است و (r, θ) مولفه های دستگاه مختصات قطبیست که مبدا آن در نوک ترک می باشد.

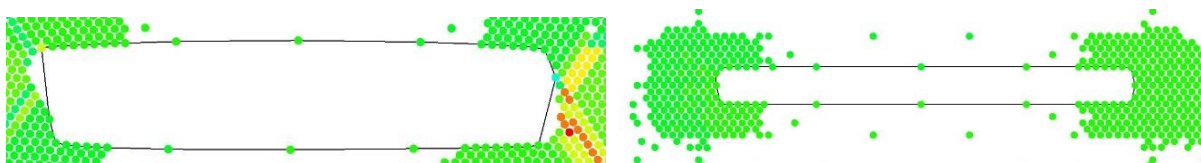
همانگونه که در نمودارهای تنش مشاهده می شود، در نواحی دور از ترک نتایج مدل سازی اتمی تطابق خوبی با نتایج تحلیلی دارد، اما در نواحی نزدیک نوک ترک روش های تحلیلی فاقد دقت و توانمندی کافی هستند و به علت وقوع پدیده سینگلاریتی تنش (در ماکرو) این روش ها نمی توانند به خوبی وقوع پلاستیسیته در نوک ترک را مدل کنند. در مقابل، روش های اتمی با دقت بالا این کار را انجام می دهند.

شکل ۴ پدیده های رخ داده در نمونه را پس از ۹۸ گام بارگذاری (نمونه ۱۹،۶ آنگستروم کشیده شده است)، نشان می دهد. پس از اعمال این مقدار جابجایی به نمونه، پدیده های اتمی متعددی در آن دیده می شود به عنوان مثال ۵ نابجایی تولید شده و گسترش می یابند.



شکل ۴- نمایی از نابجایی های رخ داده در نمونه در انتهای بارگذاری

با پیشرفت بارگذاری در مقیاس اتمی پدیده هایی رخ می دهد که در نهایت منجر به وقوع پلاستیسیته محلی در ناحیه نوک ترک و گسترش ترک در مقیاس ماکرو می شوند. با آغاز روند اعمال بار و پیش از وقوع هر پدیده ای، همانگونه که در شکل ۵ مشاهده می شود، باز شدگی نوک ترک^۱ در این نمونه شروع به افزایش می کند و این روند تا انتهای بارگذاری، ادامه می یابد.



شکل ۵- باز شدگی اولیه و نهایی نوک ترک

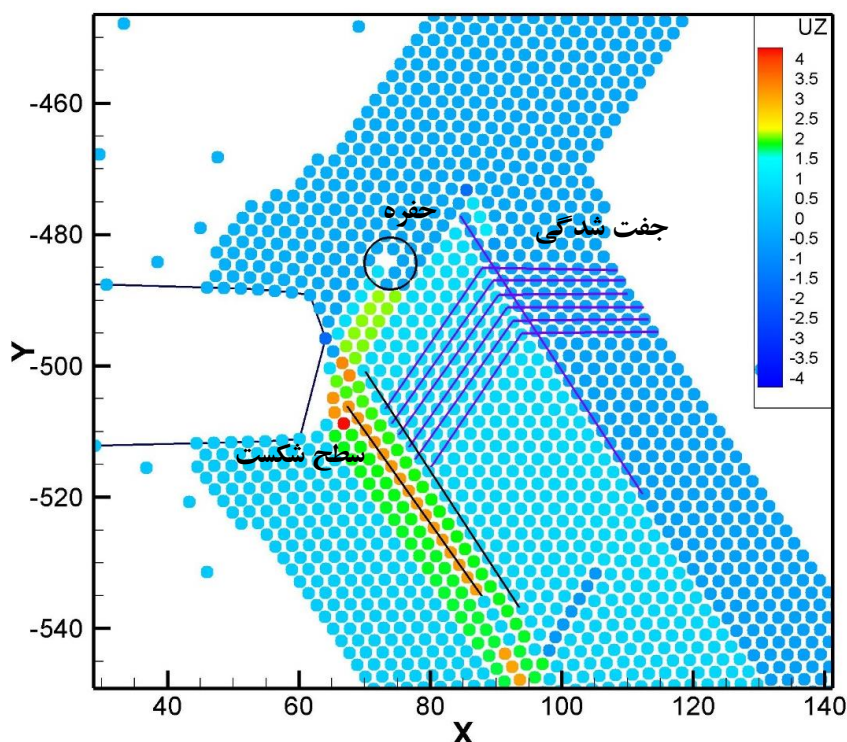
اولین پدیده ای که در این نمونه مشاهده می شود، افزایش فاصله بین اتم ها از حد نرمال و وقوع حفره^۲ یا فضای خالی در نقاط مختلف نمونه است. با ادامه یافتن بارگذاری در مراحل بعد و تحت نیروهای جاذبه و دافعه ایجاد شده، ساختار کریستالی منظم ماده بعد از آغاز و گسترش نابجایی ها^۳، تغییر در جهت گیری بخشی از اتم ها نسبت به حالت اولیه و وقوع جفت شدگی و شکل گیری سطوح شکست، به شدت نامنظم می گردد. وقوع نابجایی سبب ایجاد و اعمال تنش به اتم ها شده، ظرفیت تنشی اتم ها را پر کرده و در نهایت به

^۱ Crack tip opening displacement

^۲ void

^۳ dislocation

ایجاد پلاستیسیته و سپس گسترش ترک در مقیاس اتمی منجر شود. اگر ساختار شبکه اتمی و همسایه های هر اتم تغییر کند در نهایت سطوح شکست (صفحات جدیدی در کریستال) شکل می گیرند. اگر دو لایه اتمی که در کنار هم قرار دارند، تحت بارگذاری دارای جهت گیری های متفاوت شوند پدیده جفت شدگی رخ داده و سبب افزایش شکل پذیری می گردد. در مجموع می توان گفت اگر ماده قبل از شکست، انرژی نسبتاً زیادی جذب کرده باشد، این انرژی صرف ایجاد و گسترش پدیده هایی مانند افزایش بازشدگی نوک ترک، نابه جایی و یا جفت شدگی گردد، اصطلاحاً ماده دارای شکست شکل پذیر است. در حالت دیگر، اگر ماده بطور ناگهانی و بدون وقوع چنین پدیده هایی با شکل گیری صفحات جدید در آن دچار شکست شود، شکست آن ترد نامیده می شود. در ادامه، در شکل ۶ وقوع پدیده های ذکر شده در یک نمونه ترک شکل پذیر مشاهده می شود که ترک با جذب انرژی افزایش بازشدگی خواهد داشت ولی طول آن رشد قابل ملاحظه ای ندارد.



شکل ۶- وقوع حفره، جفت شدگی و مشاهده سطح شکست در ناحیه نزدیک نوک ترک

۵. نتیجه گیری

به دلیل اهمیت وقوع و گسترش ترک در فلزات و تاثیر غیرقابل انکار پدیده های اتمی بر روی این روند، با استناد به نتایج موجود می توان گفت مدل های اتمی در نواحی دور از ترک تطابق بسیار خوبی با روش های تحلیلی متعارف دارند. در نواحی نزدیک ترک که روش هایی شبیه اجزا محدود در محاسبه تنش و پیش بینی وقایع، ناکارآمد هستند، روش های اتمی با دقت بسیار بالا شرایط و پدیده ها را مدلسازی می کنند.

در روش های اتمی امکان بررسی و مشاهده پدیده هایی همچون ایجاد حفره، نابه جایی، جفت شدگی و غیره نیز هست که این پدیده ها در صورت وقوع، انرژی جذب کرده و سبب شکل پذیر شدن شکست ماده می شوند. در حالت دیگر ممکن است ماده به صورت ناگهانی، با جذب انرژی نسبتاً کمی و با ایجاد شدن صفحه لغزش در آن، بدون وقوع پدیده هایی از قبیل جفت شدگی و غیره،

اصطلاحاً به صورت ترد دچار شکست و گسیختگی شود. لذا می توان نتیجه گرفت وقوع پدیده هایی مانند نابه جایی و جفت شدگی سبب جذب انرژی، تشکیل محلی ناحیه پلاستیک و در نهایت وقوع شکست شکل پذیر در مواد می شود.

۶. مراجع

- [1] A. A. Griffith, "The Phenomena of Rupture and Flow in Solids," *royal society A*, pp. 163-198, 1920.
- [2] G.R.Irwin, "analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate," *journal of applied mechanics*, pp. 361-364, 1957.
- [3] Rik Bitzek, James R. Kermode, Peter Gumbasc, "Atomistic aspects of fracture," *international journal of fracture*, vol. 191, p. 13-30, 2015.
- [4] Anna Machova, Glenn E Beltz and Margherita Chang, "Atomistic simulation of stacking fault formation in bcc iron," *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 7, p. 949-974, 1999.
- [5] Denis Saraev, Ronald E. Miller, "Atomic-scale simulations of nanoindentation-induced plasticity in copper crystals with nanometer-sized nickel coatings," *Acta Materialia* , vol. 54, p. 33-45, 2006.
- [6] Y. Cheng , M.X. Shi , Y.W. Zhang, "Atomistic simulation study on key factors dominating dislocation nucleation from a crack tip in two FCC materials: Cu and Al," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 49, p. 3345-3354, 2012.
- [7] Fabrizio Cleri, Sidney Yip, Dieter Wolf, and Simon R. Phillpot, "Atomic-Scale Mechanism of Crack-Tip Plasticity: Dislocation Nucleation and Crack-Tip Shielding," *physical review letters*, vol. 79, no. 7, pp. 1309-1312, 1997.
- [8] Ronald E. Miller and E. B. Tadmor, "The Quasicontinuum Method: Overview, applications and current directions," *Journal of Computer-Aided Materials Designs*, vol. 9, pp. 203-239, 2009.
- [9] Dennis M. Kochmann, Jeffrey S. Amelang and Gabriela N. Venturini, "Summation rules for the Quasicontinuum method," in *World Congress on Computational Mechanics , European Conference on Computational Mechanics , European Conference on Computational Fluid Dynamics*, Barcelona, Spain, 2014.
- [10] Ellad B. Tadmor, Ronald E. Miller, *Modeling Materials: Continuum, Atomistic and Multiscale Techniques*, new york: Cambridge University Press, 2011.
- [11] Murray S. Daw and M. I. Baskes, "Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals," *Physical Review B*, vol. 29, 1984.
- [12] S. Mohammadi, *Extended finite element method: for fracture analysis of structures*, Blackwell publishing, 2008.