



## بررسی رفتار مکانیکی یک کریستال بدون نقص نیکل در دماهای متفاوت با استفاده از روش دینامیک ملکولی

حامد عطاریانی<sup>۱</sup>، علیرضا ستوده<sup>۲</sup>، مصطفی خسرونژاد<sup>۳</sup>

گروه مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد

### چکیده

در این پژوهش خواص مکانیکی یک بلور کریستالی بدون نقص نیکل در مقیاس نانو با استفاده از روش دینامیک ملکولی مورد محاسبه قرار گرفته است. برای نیل به این هدف ابتدا یک بلور کریستالی با ساختار شبکه کریستالی مکعب مرکز وجوه پر و سطح مقطع مربعی در ابعاد نانو مدل‌سازی گردید. سپس با استفاده از روش دینامیک ملکولی و اعمال الگوریتم فشار ثابت تنش‌های اولیه موجود در سیستم حذف شده و رفتار نمونه تحت بارمحوری کششی، شبیه‌سازی شده است. در این حالت خواص مکانیکی ماده از جمله تنش و کرنش تسلیم و مدول یانگ محاسبه شده و پدیده‌های کیفی همچون ایجاد ناجابجایی‌ها و گلوپی شدن ماده به خوبی پیش‌بینی و نمایش داده شده‌اند. سپس اثر تغییرات دما بر روی خواص مکانیکی بلور مورد بررسی قرار گرفته است. در این حالت، دمای مدل‌سازی از ۱۰۰ تا ۵۰۰ کلوین تغییر داده شده و تغییرات ثابت الاستیک، تنش و کرنش تسلیم به ازاء دماهای متفاوت محاسبه گردیده است. در نهایت تاثیر پارامتر نسبت حجم به سطح بر زوی تنش تسلیم بلور مورد مطالعه قرار گرفته است. برای این منظور تنش تسلیم کششی چهار نانو کریستال بدون نقص نیکل با سطح مقطع‌های متفاوت در دمای ۳۰۰ کلوین محاسبه شده و تغییرات آن با نسبت حجم به سطح بررسی شده است.

**واژه‌های کلیدی:** کریستال بدون نقص - دینامیک ملکولی - تست کشش - دما.

### مقدمه

یکی از نیازهای ابتدایی برای طراحی اجزاء مکانیکی، دانستن خواص مکانیکی قطعات در شرایط مختلف محیطی و بارگذاری است. از این رو پیش‌بینی و مدل‌سازی رفتار مکانیکی مواد، یکی از پرکاربردترین زمینه‌های پژوهشی می‌باشد. از طرفی پیشرفت تکنولوژی در دهه اخیر سبب امکان ساخت ماشین‌های مکانیکی-الکترونیکی و مکانیکی-الکترونیکی-پتیک در ابعاد نانومتر شده است که برای طراحی قسمتهای مکانیکی این گونه سیستمها دانستن خصوصیات مکانیکی همچون ضریب کشسانی، تنش تسلیم و کرنش نهایی مواد در ابعاد نانو مورد نیاز است. برای نیل به این هدف روشهای آزمایشگاهی متعددی وجود دارد که مستلزم تجهیزات بسیار پیچیده و گران قیمتی می‌باشند. اما امروزه با پیشرفت روشهای مدل‌سازی کامپیوتری می‌توان خواص مکانیکی و مکانیزمهای تغییر شکل انواع مواد را با کمترین هزینه مدل‌سازی نمود که در این میان روشهایی همچون دینامیک ملکولی امکان انجام این آزمایشها را بر روی مواد دلخواه در شرایط مورد نظر و با کمترین هزینه ممکن فراهم می‌کنند. در این پژوهش با استفاده از روش دینامیک ملکولی تست کشش برای یک نمونه نانو کریستال بدون نقص نیکل مدل‌سازی شده و خواص مکانیکی آن استخراج شده است. همچنین تاثیر پارامترهایی همچون دما و نسبت حجم به سطح بر روی رفتار مکانیکی بلور مورد بررسی قرار گرفته است.

### روش دینامیک ملکولی

دینامیک ملکولی یک روش مدل‌سازی کامپیوتری مواد در مقیاس نانو است که در آن به کمک انتگرالگیری از رابطه قانون دوم نیوتن و توابع پتانسیل بین اتمی و ملکولی تعریف شده، می‌توان موقعیت و مشتق‌های زمانی آن را در هر لحظه از زمان برای تمامی اتمها محاسبه نمود.

در این روش نیرو با مشتق‌گیری از تابع پتانسیل بین ملکولی محاسبه می‌شود که تابع پتانسیل بین ملکولی  $U(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N)$  از خواص ماده بوده و با استفاده از روش‌های مکانیک کوانتومی محاسبه می‌گردد. بر این اساس نیروی وارده بر اتم  $i$  با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

<sup>۱</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد، ۰۹۱۵۳۰۴۵۱۰۹، [hattariani@yahoo.com](mailto:hattariani@yahoo.com)

<sup>۲</sup> استادیار

<sup>۳</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد



که  $T_0, T$  به ترتیب دمای مدلسازی و دمای مطلوب می‌باشند  $C_{step}$  ثابت دمایی است (ثابت دمایی در این مدلسازی برابر ۴۰۰ در نظر گرفته شده است). در شروع شبیه سازی یک بلور کریستالی بدون نقص نیکل با سطح مقطع مربعی و با شبکه مکعب مرکز وجوه پر ساخته شده است که محورهای  $Z, Y, X$  آن به ترتیب در جهات کریستالی  $[100], [010]$  و  $[001]$  قرار گرفته است. با اعمال شرط مرزی پر یودیک در جهت  $X$ ، سطوح آزاد در این جهت حذف می‌شوند اما دو جهت دیگر دارای شرط مرزی آزاد می‌باشند.

بلور کریستالی اولیه دارای ابعاد  $40 \times 8/5 \times 8/5$  سلول واحد است که ثابت شبکه در کریستال نیکل برابر با  $3/524$  انگستروم است. ساختار اولیه این مدل با سطح مقطع مربعی در شکل ۱ نمایش داده شده است.

در این حالت ماده هنوز دارای مقداری تنش اولیه است. وجود سطوح آزاد در ماده سبب ایجاد این تنش اولیه می‌گردد. در سطوح آزاد، اتمها بخاطر از دست دادن مقداری از اتمهای همسایه خود تحت نیروهای متفاوتی نسبت به اتمهای موجود در حجم قرار می‌گیرند و به همین علت سبب ایجاد تنش اولیه در جسم می‌شوند. برای صفر کردن تنش اولیه از الگوریتم فشار ثابت استفاده می‌گردد [۳] و ماده به مدت  $420$  ps در دمای  $300$  کلوین تحت این الگوریتم قرار می‌گیرد تا تنشهای اولیه در آن صفر گردد. تغییر تنش به ازاء گامهای زمانی در شکل ۲ نشان داده شده است.

همان طور که در این شکل دیده می‌شود، تنش اولیه بصورت نوسانی به سمت صفر میل می‌کند. در الگوریتم فشار ثابت اتمها تغییر جهت می‌دهند تا انرژی خود را کمینه سازند و به موقعیت تعادل برسند. در مرحله بعدی سمت چپ نانوسیم را مقید نموده و سمت راست را به اندازه  $3 \times 10^{-4}$  سلول واحد حرکت می‌دهیم، سپس به مدت  $35$  fs به ماده اجازه می‌دهیم تا به تعادل برسد. بر این اساس سرعتی معادل  $0.86\%$  به سمت راست نانوسیم اعمال می‌گردد. این فرآیند تا شکست نانوسیم ادامه پیدا خواهد کرد. نمای شماتیک شرایط مرزی مختلف موجود در این شبیه سازی در شکل ۳ آورده شده است. در قسمت انتگرال گیری از قانون دوم نیوتن، مقادیر گام انتگرال گیری برابر با  $\Delta t = 3.5 \times 10^{-15}$  s انتخاب شده است.

### آزمون کشش

نمودار تنش- کرنش برای یک بلور کریستالی با طول  $40$  سلول واحد و دمای  $300$  کلوین در شکل ۴ نمایش داده شده است. نمودار تنش- کرنش در مقیاس نانو دارای هیچ شباهتی با نمودار تنش- کرنش در محیط ماکرو نیست. چون در محیط ماکرو رفتار توده‌ای ماده (وجود انواع ناجایجایی‌ها، نقص‌ها و...) بر رفتار اتمی ماده غلبه دارد.

$$\vec{f}_i = -\frac{dU}{dr_i} = -\nabla \vec{r}_i U = -\left( \frac{\partial}{\partial x_i^1} + \frac{\partial}{\partial x_i^2} + \frac{\partial}{\partial x_i^3} \right) U \quad (1)$$

حال با در دست بودن نیروی وارده بر هر اتم ( $f_i$ ) و جایگذاری در قانون دوم نیوتن (رابطه ۲) و حل عددی آن، می‌توان در هر لحظه موقعیت اتمها ( $r_i$ ) را محاسبه نمود.

$$f_i = m \ddot{r}_i \quad \ddot{r}_i = \frac{d^2 x}{dt^2} \quad (2)$$

بنابراین اولین گام در هر تحلیل دینامیک ملکولی، انتخاب یک تابع پتانسیل مناسب است. برای مدل سازی فلزات بیشتر از پتانسیل اتم آویخته استفاده می‌گردد. فرمول بندی این تابع پتانسیل بین ملکولی بصورت زیر است.

$$E_i = F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij}(r_{ij}) \quad (3)$$

در رابطه بالا  $\rho_i$  چگالی ابر الکترونی،  $F_i$  انرژی جاسازی شده و  $U_{ij}$  انرژی پتانسیل جفت اتمی می‌باشد. در این پژوهش از مدل ارایه شده توسط جانسون [۱] برای تابع پتانسیل اتم آویخته استفاده شده است.

### روش شبیه سازی

در پژوهش حاضر از کد دینامیک ملکولی XMD برای تحلیل استفاده شده است. در این کد موقعیت، سرعت و نیروهای بین اتمی در هر گام زمانی با استفاده از حل عددی قانون دوم نیوتن و با استفاده از الگوریتم پیش بین-مصحح محاسبه می‌گردند. برای محاسبه تنش در این پژوهش از رابطه زوبارف [۲] استفاده گردیده است. این رابطه برای تابع انرژی پتانسیل اتم آویخته به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{1}{\Omega_0} (-mv_i^\alpha v_i^\beta + \sum_{j \neq i} (\frac{1}{2} \frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial F_i}{\partial \rho_i} \frac{\partial \rho_j}{\partial r_{ij}}) \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta}{r_{ij}}) \quad (4)$$

در رابطه فوق  $\sigma_{\alpha\beta}^i$  تنش محلی در اتم  $i$ ،  $\Omega_0$  حجم یک اتم،  $U$  تابع پتانسیل دوتایی،  $F(\rho)$  تابع جاسازی شده،  $\rho_i$  چگالی الکترونی اتم  $i$  در محل اتم  $i$ ،  $v_i$  سرعت اتم  $i$  و  $r_{ij}$  و  $\dot{r}_{ij}$  امین مولفه بردار مکان ( $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ ) می‌باشد.

همچنین در این شبیه‌سازی در هر گام زمانی دمای نمونه ثابت نگاه داشته می‌شود (فرض می‌شود که اعمال نیرو به صورت همدا صورت گرفته و زمان کافی برای مبادله حرارت با محیط وجود دارد). برای نیل به این هدف، سرعت ملکولها در هر گام زمانی با استفاده از ترموستات زیر، مقیاس می‌شوند. فرمول این ترموستات بصورت زیر است.

$$v_i^{new} = v_i^{old} \times \sqrt{\left( \frac{T}{T_0} \right)^{C_{step}}} \quad (5)$$

>۱۱۱< بر روی هم می‌باشد که این صفحات، صفحه لغزش فعال در کریستالهای با ساختار مکعب مرکز وجوه پر است. در نهایت پدیده گلوبی شدن در شکل ۷ نمایش داده شده است.

### اثرات دما

یکی دیگر از پارامترهای موثر بر خواص مکانیکی مواد در محیط ماکرو و نانو، دمای مدل‌سازی است. به طور کلی انرژی پتانسیل یک جفت اتم بر حسب فاصله جدایش آنها ( $r$ ) بیان می‌شود.

$$U = \frac{-A}{r^n} + \frac{B}{r^m} \quad (6)$$

که  $A$  و  $B$  به ترتیب ثوابت تناسب برای نیروهای جاذبه و دافعه هستند و  $m$ ،  $n$  توانهایی هستند که تغییرات  $U$  را برحسب  $r$  نشان می‌دهند. روابط نیروی جاذبه و دافعه موجود میان دواتم با مشتق گیری از تابع پتانسیل نسبت به مکان به صورت زیر بدست می‌آید.

$$F = \frac{-\partial U}{\partial r} = \frac{-nA}{r^{n+1}} + \frac{mB}{r^{m+1}} \quad (7)$$

با در نظر گرفتن  $n+1=N$ ،  $nA=a$ ،  $mB=b$  و  $m+1=M$  خواهیم داشت:

$$F = \frac{-a}{r^N} + \frac{b}{r^M} \quad (8)$$

در این روابط مقدار  $r$  برای انرژی پتانسیل کمینه برابر با فاصله تعادلی  $\rho$  بین دو اتم است (در  $\rho$  نیروی برآیند صفر است) و یک جابجایی در هرسو، نیروهای برگشت دهنده را فعال کرده تا ماده به موقعیت تعادل خود برگردد. اگرچه این روابط رفتار یک جفت اتم را توضیح می‌دهند اما برای یک شبکه کریستالی نیز صادق هستند. حال به آسانی می‌توان نشان داد که مدول یانگ متناسب با شیب منحنی نیرو برحسب جابه‌جایی ( $\frac{\partial F}{\partial r}$ ) در نقطه تعادل است یا به

عبارت دیگر دارای رابطه عکس با فاصله تعادلی است

حال در دمای صفر مطلق جایی که جنب وجوش حرارتی متوقف می‌شود فاصله بین اتمی دارای مقدار  $\rho$  است. هنگامی که انرژی حرارتی به اتمها افزوده می‌شود، اتمها پیرامون موقعیت تعادلی خود ( $\rho$ ) نوسان می‌کنند. آشکار است که با افزایش درجه حرارت فاصله میانگین تعادلی، افزایش می‌یابد. حال هرچه دمای مدلسازی بیشتر می‌گردد، فاصله میانگین نیز افزایش پیدا کرده و در نتیجه مدول یانگ کاهش پیدا می‌کند.

برای بررسی اثرات دما بر روی خواص مکانیکی ماده، دمای مدلسازی از ۱۰۰ تا ۵۰۰ کلوین تغییر داده شده است و تغییرات ثابت الاستیک، تنش و کرنش تسلیم به ازاء دماهای متفاوت در شکل ۸ مشاهده می‌گردد. همانطور که در شکل (۸-الف) دیده می‌شود با افزایش دما، ثابت الاستیک تقریباً بصورت خطی کاهش پیدا می‌کند که این پدیده مطابق با رابطه‌ای که بین دمای مدل‌سازی و ثابت الاستیک بیان شد، می‌باشد. از طرفی همانطور که در اشکال (۸-ب) و (۸-ج) مشاهده می‌گردد با افزایش دما، تنش و کرنش تسلیم کاهش می‌یابند. این پدیده را می‌توان این گونه توجیه کرد که

همانطور که در شکل ۴ دیده می‌شود، ابتدا تنش در محدوده الاستیک تا مقدار  $8/56$  GPa در کرنش  $0/095$  افزایش پیدا می‌کند. سپس تنش ناگهان به مقدار  $2/2$  GPa افت کرده و ماده وارد ناحیه پلاستیک می‌گردد. ناحیه پلاستیک نمودار تنش-کرنش حالت اره‌ای شکل دارد که علت این امر ایجاد، حرکت و برخورد ناجابجاییها در داخل ماده است. در صورت ادامه شبیه سازی نمونه دچار شکست کامل شده و تنش صفر خواهد شد. بطور کلی لغزش صفحات اتمی بر روی هم سبب وارد شدن ماده از حالت الاستیک به حالت پلاستیک می‌گردد و این پدیده تا شکست نهایی ماده ادامه پیدا می‌کند.

ناحیه ابتدایی نمودار تا تنش ماکزیمم  $8/56$  GPa ناحیه الاستیک می‌باشد چون در این ناحیه هیچ گونه ناجابجایی و تغییر شکل پلاستیک در ماده دیده نمی‌شود، از طرفی با برداشتن بار از روی ماده منحنی تنش-کرنش باربرداری کاملاً بر روی منحنی تنش-کرنش بارگذاری قرار گرفته و هیچ تغییر شکل دائمی در ماده بوجود نخواهد آمد. پس در این حالت، تنش تسلیم همان تنش ماکزیمم بلور می‌باشد. با در نظر گرفتن تقریب خطی برای ناحیه الاستیک، ثابت الاستیک برابر با  $81/6$  GPa بدست می‌آید که کمتر از مقدار گزارش شده توسط رینو و برانیکو [۴] ( $90$  GPa) و نزدیک به مقدار گزارش شده توسط ونا و همکاران [۵] ( $80/6$  GPa) است. همچنین رفتار این نمونه تحت کشش با رفتار ارائه شده برای شبیه سازی تست کشش در مراجع [۵،۴] کاملاً مطابقت می‌نماید.

### مکانیزم تغییر شکل

برای بررسی مکانیزمهای تغییر شکل و پلاستیسیته در تست کشش یک بلور کریستالی نیکل، تست کشش یک بلور کریستالی با ابعاد  $15 \times 5/5 \times 5/5$  شبیه سازی شده است. نمودار تنش-کرنش این ماده در شکل ۵ نمایش داده شده است و نقاط (۱) تا (۵) روی آن مشخص گردیده است. شکل تغییر شکل یافته متناظر با این نقاط در شکل ۶ نشان داده شده است. نقطه (۱) نشان دهنده نقطه ناپایداری یا همان نقطه تسلیم است. در این قسمت هیچ ناجابجایی در سیستم دیده نمی‌شود و ماده هنوز در ناحیه الاستیک قرار دارد. با افزایش کرنش، تنش ناگهان کاهش یافته و مقداری ناجابجایی در ماده بوجود می‌آید (نقطه (۲)). این ناجابجاییها با پیکانهایی در شکل ۶ نشان داده شده اند. با حرکت از نقطه (۳) به سمت (۴)، تنش اعمالی به سیستم به علت برخورد ناجابجاییها و مقاومت در مقابل حرکت آنها، افزایش پیدا می‌کند. در این مرحله چگالی ناجابجاییها در سیستم ثابت است تا در نقطه (۴) انرژی لازم برای ایجاد ناجابجاییهای جدید فراهم آید و تنش کاهش یابد. در نقطه (۵) چگالی ناجابجاییها کاهش پیدا کرده و تنش افت می‌کند. علت این امر در حرکت ناجابجاییها به سمت سطح و حذف آنها از ماده می‌باشد. با حذف ناجابجاییها، چگالی آنها در سیستم کاهش پیدا کرده و تنش افزایش پیدا می‌کند تا انرژی لازم برای ایجاد و هسته‌زایی ناجابجاییهای جدید فراهم آید. همان طور که بر روی شکل ۶ دیده می‌شود تغییر شکل پلاستیک ماده ناشی از لغزش صفحات اتمی

افزایش دما سبب می‌شود تا پدیده ایجاد ناجابجایی‌ها در ماده سریعتر اتفاق افتاده و ماده سریعتر وارد ناحیه پلاستیک گردد.

### اثرات اندازه

همانطور که قبلاً نیز به آن اشاره شد، در محیط ماکرو رفتار توده‌ای ماده، عامل اصلی در تغییر خواص ماده است. همچنین در این محیط نسبت حجم به سطح بسیار بالا بوده و تنشهای سطحی اثر بسیار ناچیزی بر تغییر خواص مکانیکی ماده دارند. اما در مقیاس نانو نسبت حجم به سطح کوچک بوده و اثر تنشهای سطحی به هیچ وجه قابل صرف نظر کردن نخواهد بود. این امر سبب می‌شود تا در این مقیاس یک ماده با اندازه سطح مقطع متفاوت رفتار متفاوتی از خود نشان دهد و بنابراین می‌توان با تغییر اندازه سطح مقطع، مقاومت‌های مکانیکی متفاوتی را از یک ماده مشخص بدست آورد. از این رو اثر پارامتر نسبت حجم به سطح بر روی تنش تسلیم از جمله پارامترهایی است که در مقیاس نانو بسیار مورد توجه می‌باشد. به این دلیل چهار بلور کریستالی با سطح مقطع‌های متفاوت در دمای ۳۰۰ کلونین شبیه سازی شده و نمودار تغییرات تنش تسلیم به نسبت حجم به سطح آنها در شکل ۹ رسم شده است.

همانطور که در این نمودار می‌توان مشاهده کرد با افزایش نسبت حجم به سطح مقدار تنش تسلیم کاهش پیدا می‌کند که علت آن کاهش اثرات تنش سطحی ناشی از سطوح آزاد بر روی خواص مکانیکی ماده است. سطوح آزاد موجود در بلور کریستالی سبب ایجاد تنش کششی در سطح و تنش فشاری در حجم ماده می‌گردند. با کاهش نسبت حجم به سطح، مقدار تنش کششی سطحی و تنش فشاری حجمی افزایش می‌یابد. از این رو در بارگذاری محوری کششی احتیاج به اعمال نیروی بیشتری برای غلبه بر این تنشهای فشاری حجمی می‌باشد.

### نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش دینامیک ملکولی تست کشش یک بلور بدون نقص نیکل در مقیاس نانو مدل سازی گردید. نمودار تنش بر حسب کرنش محاسبه و مقادیر مدول یانگ و تنش تسلیم برای یک نمونه محاسبه شد که با مقادیر بدست آمده از کارهای قبلی مطابقت خوبی داشت. همچنین مکانیزم تغییر شکل ماده مورد بررسی قرار گرفت و پدیده‌هایی کیفی همچون ایجاد ناجابجایی‌ها و گلوپی شدن ماده به خوبی پیش بینی و نمایش داده شدند.

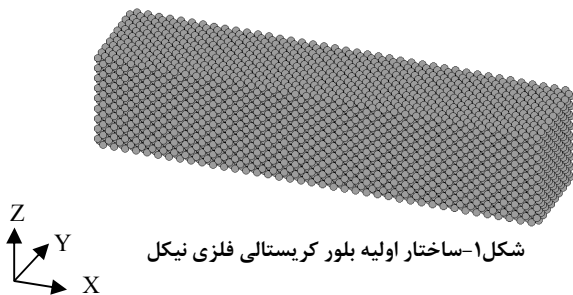
سپس اثرات دما بر روی خواص مکانیکی مورد بررسی قرار گرفت. بر اساس نتایج بدست آمده با افزایش دما مقادیر تنش، کرنش ماکزیمم و ثابت الاستیک کاهش پیدا می‌کنند. برای توجیه این پدیده به آسانی می‌توان نشان داد که مدول یانگ متناسب با شیب منحنی نیرو بر حسب جابه‌جایی ( $\frac{\partial F}{\partial r}$ ) در نقطه تعادل است که این مقدار دارای رابطه معکوس با فاصله تعادلی می‌باشد. از این

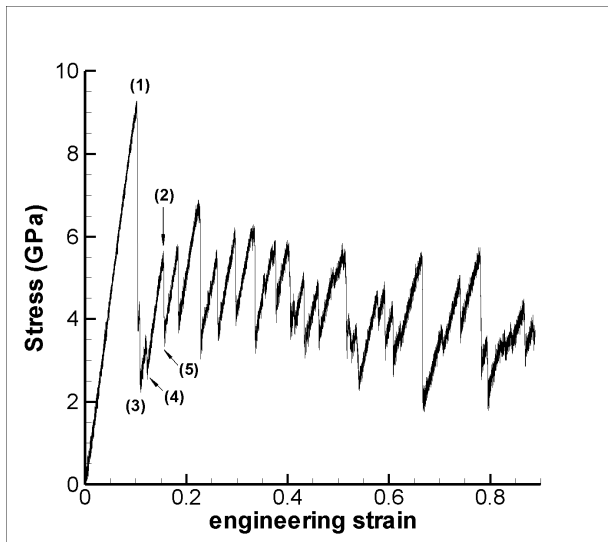
رو هرچه دمای مدل‌سازی بیشتر می‌گردد، فاصله تعادلی میانگین نیز افزایش پیدا کرده و در نتیجه مدول یانگ کاهش پیدا می‌کند. همچنین با افزایش دما، پدیده هسته‌زایی ناجابجایی‌ها در ماده سریعتر اتفاق افتاده و ماده سریعتر وارد ناحیه پلاستیک می‌شود. در نهایت تاثیر پارامتر نسبت حجم به سطح بر روی تنش ماکزیمم مورد مطالعه قرار گرفت و همانطور که انتظار می‌رفت با افزایش نسبت حجم به سطح، مقدار تنش ماکزیمم کاهش پیدا می‌کرد. تنش‌های سطحی ایجاد شده در سطوح آزاد جسم سبب ایجاد چنین پدیده‌ای هستند.

### مراجع

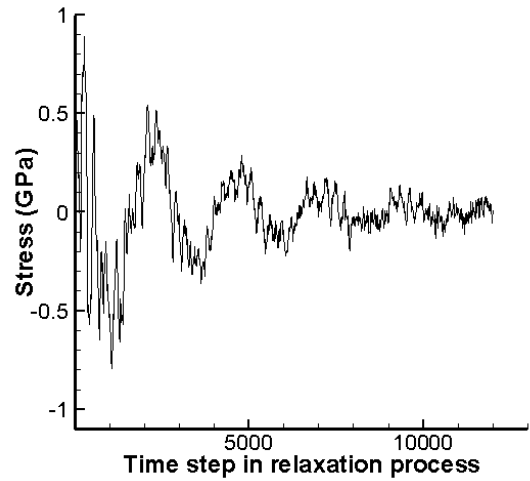
- [1]. D. J. Oh, R. A. Johnson, Simple embedded atom method model for fcc and hcp metals, *Materials Research Society*, v. 3, 1986, pp. 471-478
- [2]. D.N. Zubarev, *Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*, 2nd ed, Moscow press, Moscow, 1971.
- [3]. H.C. Andersen, Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature, *Journal of Chemical Physics*, vol. 72, 1980, 2384-2393.
- [4]. Yu-Hua Wena, Zi-Zhong Zhua, Gui-Fang Shaob, Ru-Zeng Zhuc, The uniaxial tensile deformation of Ni nanowire: atomic-scale computer simulations, *Physica E*, vol. 27, 2005, pp. 113-120
- [5]. P.S. Branicio, J.P. Rino, Large deformation and amorphization of Ni nanowires under uniaxial strain: A molecular dynamics study, *Phys. Rev. B*, v.62, 2000, pp. 16950-16955.

### شکل‌ها و نمودارها

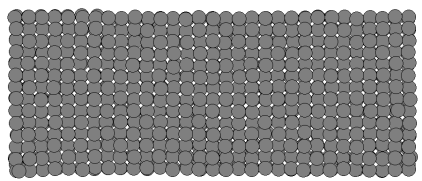




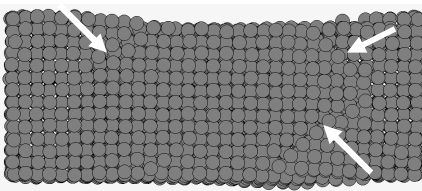
شکل ۵- نمودار تنش- کرنش بلور کریستالی با طول ۱۵ سلول واحد در دمای ۳۰۰ کلوین



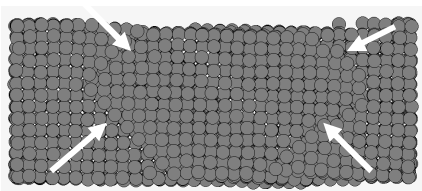
شکل ۲- نمودار تغییرات تنش بر اساس گامهای زمانی در الگوریتم فشار ثابت



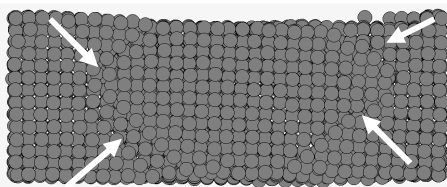
(۱)



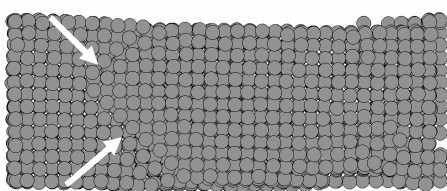
(۲)



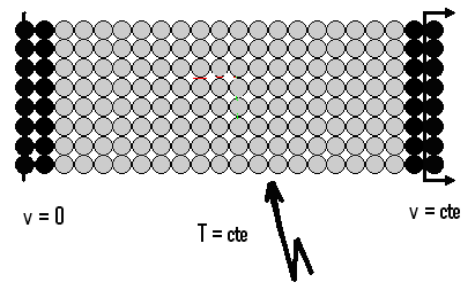
(۳)



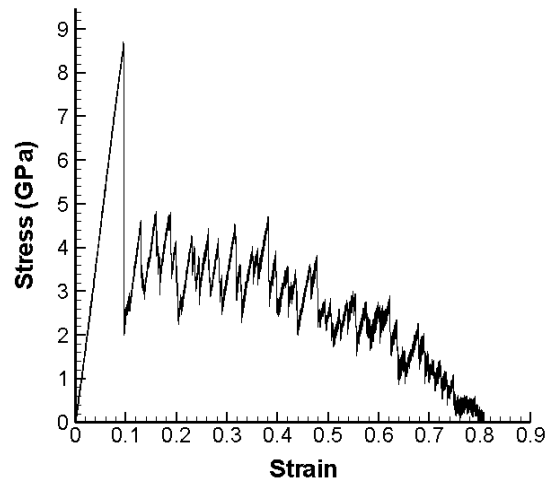
(۴)



(۵)



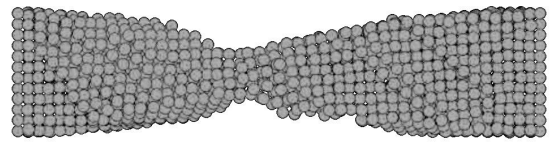
شکل ۳- شرایط انجام مدل سازی



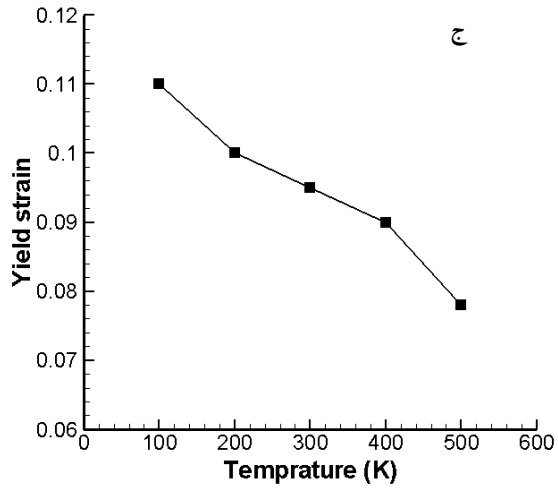
شکل ۴- نمودار تنش- کرنش بلور کریستالی با طول ۴۰ سلول واحد در دمای ۳۰۰ کلوین و نرخ کرنش  $0.186 \text{ ps}^{-1}$

شکل ۶- تغییر شکل بلور کریستالی متناظر با نقاط مشخص شده بر روی

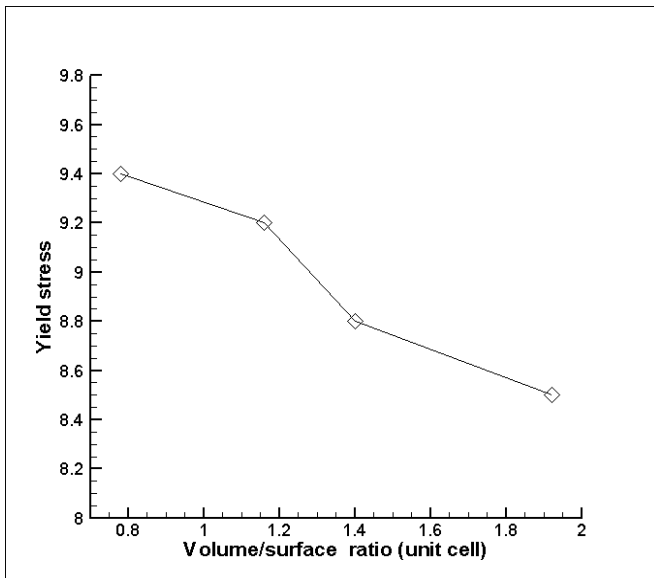
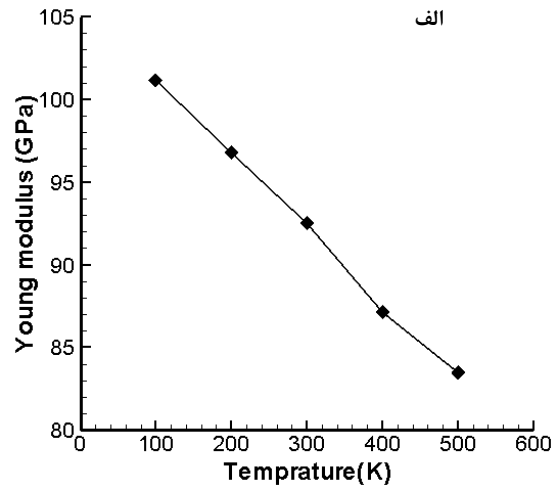
شکل ۵



شکل ۷- پدیده گلوبی شدن در آزمون کشش



شکل ۸- تغییر خواص مکانیکی با دما (الف) نمودار تغییرات ثابت الاستیک بر اساس دما. (ب) نمودار تغییرات تنش تسلیم بر اساس دما. (ج) نمودار تغییرات کرنش تسلیم بر اساس دما



شکل ۹- نمودار تغییرات تنش ماکزیمم بر حسب نسبت حجم به سطح

