

شبیه سازی دینامیک مولکولی نقش افزودن آهن بر ویژگی‌های ساختاری، مکانیکی و

ترمودینامیکی فلز نیکل

INC29-1302

امیر علی ولی الهی^۱، قاسم اله یاری زاده^{۱*}، عبدالحمید مینوچهر^۱

۱. گروه چرخه سوخت، دانشکده مهندسی هسته‌ای، دانشگاه شهید بهشتی، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران-ایران

چکیده:

نیکل فلزی با استحکام بالا و مقاوم در برابر خوردگی می‌باشد که در دماهای بالا نیز می‌تواند استحکام خود را به خوبی حفظ کند. آلیاژهای مختلف مبتنی بر نیکل در سال‌های اخیر به طور وسیعی توسعه پیدا کرده‌اند و در صنایع مختلف از جمله صنایع شیمیایی و پتروشیمی، صنعت هوافضا، تولید انرژی هسته‌ای و تولید نفت و گاز استفاده می‌شوند. یکی از مهم‌ترین آلیاژهای پایه نیکلی، آلیاژ دوتایی نیکل-آهن با ساختار آستنیتی می‌باشد که به عنوان یک ماده بسیار مهم در راکتورهای شکافت و همجوشی آینده در نظر گرفته شده است و بررسی و مطالعه ویژگی‌های مختلف این آلیاژ از اهمیت بالایی برخوردار است. روش شبیه سازی دینامیک مولکولی، یک روش کاملا مناسب برای بررسی ویژگی‌های مواد در شرایط مختلف و در مقیاس اتمی می‌باشد. در پژوهش پیش رو، با استفاده از این روش، ثوابت الاستیک و برخی خواص ساختاری، مکانیکی و ترمودینامیکی آلیاژ نیکل-آهن و تاثیر افزایش غلظت آهن بر خواص این آلیاژ مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات نشان می‌دهند که اگرچه افزودن آهن موجب کاهش مدول حجمی و برخی خواص مکانیکی از جمله شکل پذیری نیکل می‌گردد اما می‌تواند باعث افزایش مدول برشی، مدول یانگ، سختی و هم‌چنین برخی ویژگی‌های ترمودینامیکی مانند سرعت‌های صوتی عرضی و میانگین، دمای دیبای و کمینه هدایت حرارتی گردد.

کلیدواژه‌ها: آلیاژ نیکل-آهن، راکتورهای شکافت و همجوشی، شبیه سازی دینامیک مولکولی، ثوابت الاستیک، خواص

مکانیکی و ترمودینامیکی

Molecular dynamics simulation of the effect of iron addition on structural, mechanical and thermodynamic properties of nickel metal

Amir Alivaliollahi¹, Ghasem Alahyarizadeh^{1*}, AbdolHamid Minuchehr¹

1. Faculty of Engineering, Shahid Beheshti University, 1983969411, Tehran, Iran.

Abstract:

Nickel is a metal with high strength and resistance to corrosion, which can maintain its strength well even at high temperatures. Various nickel-based alloys have been widely developed in recent years and are used in various industries, including chemical and petrochemical industries, the aerospace industry, nuclear energy production, and oil and gas production. One of the most important nickel-based alloys is the nickel-iron binary alloy with austenitic structure, which is considered as a very important material in future fission and fusion reactors. It is of great importance to investigate and study the various characteristics of this alloy. The molecular dynamics simulation method is a very proper method for investigating the properties of materials in different conditions in atomic scales. In the upcoming research, using this method, elastic constants and some structural, mechanical, and thermodynamic properties of nickel-iron alloy and the effect of increasing iron content on this alloy have been studied. Calculations show that although the addition of iron decreases the bulk modulus and some mechanical properties such as the ductility of nickel, it can increase the shear modulus, Young's modulus, hardness, and also some thermodynamic properties such as transverse and average sound velocities, Debye temperature, and minimum thermal conductivity.

Keywords: Nickel-Iron alloy, fission & fusion reactors, molecular dynamics simulation, elastic constants, mechanical and thermodynamic properties.

۱. مقدمه

نیکل به خودی خود یک فلز با استحکام بالا و مقاوم در برابر خوردگی است که در دماهای بالا از استحکام بالاتری حتی نسبت به فولاد برخوردار است [۱]. استفاده از نیکل خالص تجاری و آلیاژهای مختلف مبتنی بر نیکل، از جمله سیستم‌های دوتایی، سه تایی و سایر سیستم‌های پیچیده در قرن بیستم به طور وسیعی توسعه یافته‌اند. از نیکل و آلیاژهای آن معمولاً در سیستم‌های مختلف صنعتی از جمله فرآوری شیمیایی و پتروشیمی، مهندسی هوافضا، سوخت‌های فسیلی، تولید انرژی هسته‌ای، تبدیل انرژی خورشیدی، تولید نفت و گاز، گرمایش صنعتی و خانگی، الکترونیک، مخابرات و غیره بطور فراوان استفاده می‌شود. در نیروگاه‌های هسته‌ای، از آلیاژهای مبتنی بر نیکل به‌عنوان موادی برای اجزای مختلف از جمله لوله‌ها، تیوب‌ها و سایر بخش‌ها استفاده می‌شود [۲]. از جمله مهم‌ترین آلیاژهای پایه نیکلی، آلیاژ دوتایی نیکل-آهن با ساختار آستینیتی می‌باشد که به عنوان یک ماده مهم برای راکتورهای شکافت و همجوشی آینده در نظر گرفته شده است [۳].

مطالعات مختلفی پیرامون خواص مختلف این نوع آلیاژ در گذشته صورت گرفته است. آلرز و همکاران طی یک مطالعه تجربی، با این فرضیه که برهمکنش اساسی بین گشتاورهای مغناطیسی در فرومغناطیس به انرژی کل کمک می‌کند، و می‌بایست سهمی مربوط به ثابت‌های الاستیک نیز وجود داشته باشد، ثابت الاستیک آلیاژ نیکل-آهن (۳۰ درصد) را در دماهای کوری مربوط به خود در میدان‌های مغناطیسی به اندازه کافی بالا اندازه‌گیری کردند و با استفاده از این نتایج، مشتقات اول و دوم انرژی مبادله شده را تخمین زدند [۴]. ویچنزو در یک کار آزمایشگاهی خواص مکانیکی به دست آمده از اندازه‌گیری‌های فرورفتگی برای رسوبات نسبتاً ضخیم (معمولاً در محدوده ۲۰-۲۵ میکرومتر) را برای ترکیبات از مقدار خالص نیکل تا آلیاژ نیکل-آهن تا ۷۵ درصد گزارش داد. نتایج ایشان نشان می‌دهد که افزایش غلظت آهن تا حدود ۱۲ درصد می‌تواند موجب افزایش مدول یانگ شود در حالی که با ادامه افزایش غلظت آهن، روند نزولی پیدا می‌کند و در غلظت حدود ۳۰ درصد، از مقدار اولیه نیکل خالص کمتر می‌شود. هم‌چنین، افزایش غلظت آهن تا ۲۰ درصد می‌تواند موجب افزایش سختی آلیاژ شود و افزودن بیشتر از ۲۰ درصد تقریباً تفاوت فاحشی در مقدار سختی ایجاد نمی‌کند [۵]. وانگ و همکاران، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به مطالعه تاثیر دما بر ایجاد نقص‌های ساختاری و تکامل یا پیشرفت آن‌ها در نیکل و آلیاژ نیکل-آهن (با درصدهای ۱۵ و ۵۰ درصد آهن) پرداختند. نتایج حاصل در شش دمای مختلف در محدوده ۰ تا ۱۵۰۰ درجه کلوین گزارش شدند. نتایج این مطالعه نشان داد که با افزایش دما تعداد نقص‌های پایدار و نسبت خوشه‌های بین‌نشینی افزایش می‌یابد در حالی که نسبت خوشه‌های تهی‌جای کاهش می‌یابند. علاوه بر این، با بررسی تاثیر دما بر توزیع اندازه خوشه‌ها مشخص شد که یک تغییر سیستماتیک در توزیع اندازه خوشه‌ها ایجاد می‌شود و در دماهای بالاتر خوشه‌های بین‌نشینی بزرگ‌تری تولید می‌شوند [۶]. براساس بررسی‌های انجام شده توسط نویسندگان، مشخص شد که مطالعات زیادی پیرامون خواص مختلف آلیاژ نیکل-آهن صورت نگرفته است و با توجه به اهمیت بالای آن، لزوم بررسی جامع خواص این آلیاژ احساس می‌شود. به همین منظور، در پژوهش پیش‌رو، با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی خواص مختلف ساختاری، مکانیکی و ترمودینامیکی آلیاژ نیکل-آهن (تا غلظت ۱۰ درصد آهن) محاسبه و اندازه‌گیری شده و با خواص فلز نیکل مقایسه می‌شود.

۲. روش کار

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی در این پژوهش با استفاده از کد لمپس^۱ [۷] صورت می‌گیرد. هم‌چنین از نرم افزار اتمسکا^۲ [۸] برای ساخت جعبه‌های شبیه‌سازی شامل اتم‌های نیکل و آهن در غلظت‌های مختلف استفاده می‌شود. یکی از مهم‌ترین مسائل در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انتخاب پتانسیل مناسب می‌باشد که پس از انجام شبیه‌سازی‌های

¹ LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator package, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA)

² Atomsk (Atom, Molecule, Material Software Kit, University of Lille, Lille, France)

اولیه، پتانسیل بین اتمی آهن-نیکل به روش اتم احاطه شده^۱ که توسط بونی و همکاران [۹] توسعه پیدا کرده است، برای انجام شبیه سازی‌های اصلی انتخاب شد. همه جعبه‌های شبیه سازی استفاده شده با ابعاد $20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$ (شامل 16000 اتم) که a معرف ثابت شبکه می‌باشد برای عنصر نیکل خالص و درصد‌های مختلف آلیاژ نیکل-آهن (۱، ۲/۵، ۵، ۷/۵ و ۱۰ درصد عنصر آهن) ساخته شدند. برای همه شبیه‌سازی‌ها از شرایط مرزی دوره‌ای در هر سه راستا استفاده شد. برای محاسبه ثوابت الاستیک در دما و فشار مورد نظر، از روش نوسانات کرنش که به طور تفصیلی توسط کلاویر و همکاران [۱۰] ارائه شده است، استفاده گردید. در این روش، پیکربندی اتمی برای فشار صفر و دمای مورد نظر (در این جا 300 درجه کلوین) اعمال گردید و هم‌چنین جعبه شبیه سازی با روش کمینه سازی انرژی مزدوج-گرادیان^۲، به منظور حذف هرگونه نیروی باقی مانده ریلکس گردید. سپس، جعبه شبیه سازی با استفاده از آنسامبل‌های NVE و لانژوین^۳ (استوکاستیک) متعادل گردید. پس از تعادل، تغییر شکل‌های کوچکی در راستای مثبت و منفی محورهای مختصات x ، y و z با مقادیر آهنگ کرنش‌های متفاوت از 0.001 تا 0.5 اعمال شد و با توجه به نتایج، آهنگ کرنش 0.1 برای محاسبه ثابت‌های الاستیک انتخاب شد. پس از هر تغییر شکل، جعبه شبیه سازی دوباره تحت آنسامبل‌های NVE و لانژوین قرار گرفت.

۳. نتایج و بحث

در جدول ۱ مقادیر به دست آمده با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی برای ثابت شبکه، ثوابت الاستیک C_{11} ، C_{12} و C_{44} و هم‌چنین مدول‌های حجمی (B)، برشی (G)، و یانگ (E) و ضریب پواسون (ν) در مقایسه با مطالعات تجربی و تئوری قبلی ارائه شده است. همان گونه که مشاهده می‌شود نتایج محاسبه شده به روش دینامیک مولکولی در این پژوهش، به ویژه در مقایسه با نتایج گزارش شده توسط ون و همکاران [۱۱] در دمای 300 درجه کلوین با دقت بسیار بالایی با نتایج تجربی قبلی در شرایط محیط همخوانی دارد.

جدول ۱ ثابت شبکه، ثوابت الاستیک (C_{ij})، مدول‌های حجمی (B)، برشی (G) و یانگ (E) و ضریب پواسون فلز نیکل خالص محاسبه شده به روش دینامیک مولکولی در مقایسه با مقادیر گزارش شده در کارهای تجربی و تئوری قبلی

منابع	شرایط	ثابت شبکه (\AA)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	مدول حجمی (GPa)	مدول برشی (GPa)	مدول یانگ (GPa)	ضریب پواسون
کار حاضر	300 کلوین	3.234	239.48	148.26	122.25	178.67	82.35	214.15	0.302
آلرز و همکاران (تجربی) [۴]	300 کلوین	-	250.18	150.10	123.5	183.6	86.21	223.63	0.297
دی کلرک و همکاران (تجربی) [۱۲]	Magnetise- 300 Unmagnetise- 300	-	246.5	147.3	124.7	180.37	86.16	222.98	0.2940
لوی و همکاران (تجربی) [۱۳]	300 کلوین	-	247.10	152.10	121.10	183.67	83.17	216.79	0.3033
ون و همکاران (تئوری) (MD) [۱۱]	0 کلوین 300 کلوین	3.52 3.535	246.58 212.06	147.24 130.45	124.97 106.05	180.35 157.66	86.32 72.31	223.34 188.17	0.2936 0.3011

¹ Fe-Ni Embedded Atom Method (EAM)

² Conjugate-gradient Energy Minimization

³ Langevin

-	-	-	۲۰۰/۰	-	۱۵۴/۰	۲۹۰/۰	۳/۴۲۲	LDA1	
-	-	-	۱۹۱/۰	-	۱۶۱/۰	۲۴۹/۰	۳/۵۲	LDA2	
-	-	-	۱۴۱/۰	-	۹۸/۰	۲۲۶/۰	۳/۶۴۳	GGA1	کوچیسکووا و همکاران (تئوری -
-	-	-	۱۳۷/۰	-	۱۰۵/۰	۲۰۳/۰	۳/۶۲۲	GGA2	[DFT & MD] (۱۴)
-	-	-	۱۸۴/۰	-	۱۶۳/۰	۲۲۸/۰	۳/۵۲	EAM	
-	-	۱۱۹/۳	۱۷۴/۰	۱۲۸/۰	۱۵۴/۰	۲۳۳/۰	۳/۵۱	۳۰۰ کلوین	سونگ و همکاران (تئوری -
									[DFT] (۱۵)

۱.۳ ثوابت الاستیک

بر اساس قانون هوک، رابطه بین تنش و کرنش برای جابجایی‌های کوچک با استفاده از معادله ۱ بیان می‌شود که در آن C_{ij} ماتریس ثوابت الاستیک می‌باشد که برای بلورهای مکعبی شکل، با توجه به تقارن‌های هندسی ماتریس ثوابت الاستیک به سه جز C_{11} ، C_{12} و C_{44} تقلیل می‌یابد. هم‌چنین σ_i و ε_j نیز به ترتیب تانسورهای تنش و کرنش می‌باشند.

$$\sigma_i = \sum C_{ij} \varepsilon_j \quad (1)$$

در برخی مواقع، مطلوب تر آن است که در قانون هوک کرنش‌ها بر اساس تنش‌ها بیان شوند که بنابراین معادله ۲ به دست می‌آید که در آن S_{ij} ثابت‌های الاستیک انطباقی را نشان می‌دهد:

$$\varepsilon_i = \sum S_{ij} \sigma_j \quad (2)$$

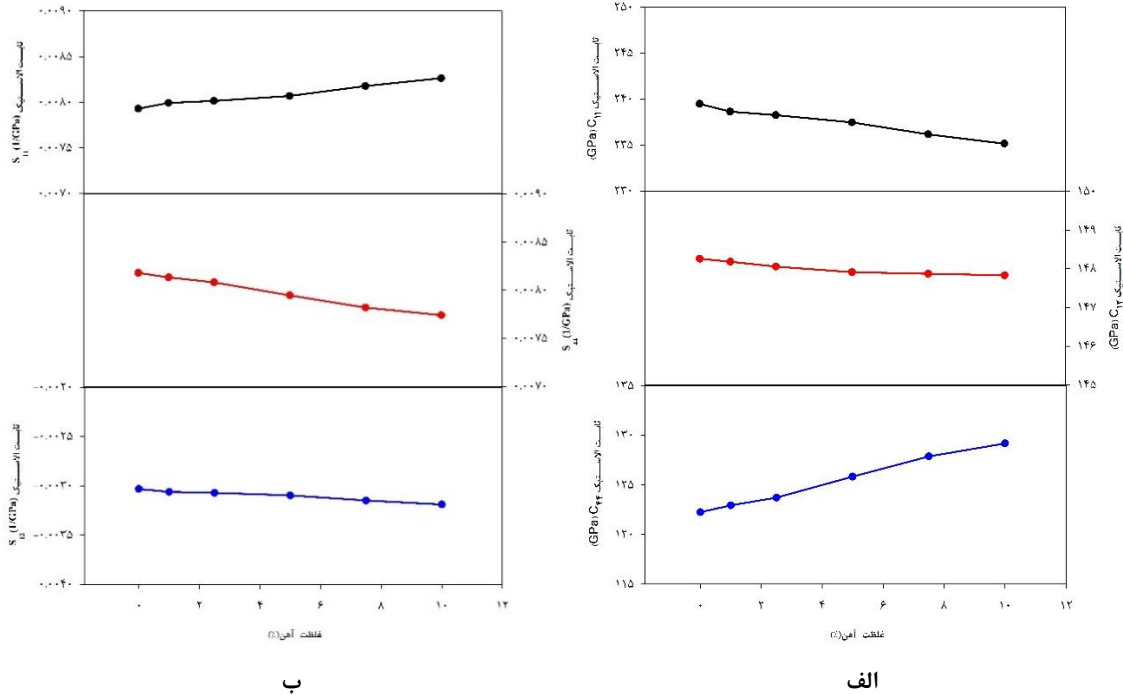
ثوابت الاستیک انطباقی را می‌توان با استفاده از معادلات ۳-۵ بر حسب ثوابت الاستیک محاسبه کرد:

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})} \quad (3)$$

$$S_{12} = \frac{-C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})} \quad (4)$$

$$S_{44} = \frac{1}{C_{44}} \quad (5)$$

در شکل ۱، ثوابت الاستیک به دست آمده به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی برای آلیاژ دوتایی نیکل-آهن با غلظت‌های مختلف ۰، ۱، ۲/۵، ۵، ۷/۵ و ۱۰ درصد آهن نشان داده شده است. همان گونه که در شکل ۱-الف مشاهده می‌شود، افزایش غلظت آهن باعث کاهش ثوابت الاستیک C_{11} و C_{12} و در عین حال افزایش ثابت الاستیک C_{44} می‌گردد و می‌توان نتیجه گرفت که افزایش غلظت آهن باعث کاهش خواص کششی نیکل می‌شود در حالی که خواص برشی آن را تقویت خواهد کرد. هم‌چنین شکل ۱-ب نتایج محاسبه شده برای ثوابت الاستیک انطباقی را نشان می‌دهد که با افزایش غلظت آهن، ثابت S_{11} روند صعودی و ثوابت S_{12} و S_{44} روند نزولی دارند.



شکل ۱ ثابت‌های الاستیک محاسبه شده (الف) ثابت الاستیک C_{11} ، C_{12} و C_{44} (ب) ثابت الاستیک S_{11} ، S_{12} و S_{44} برای ساختارهای مختلف نیکل با غلظت‌های ۰، ۱، ۲/۵، ۵، ۷/۵ و ۱۰ درصد آهن

۲.۳ خواص مکانیکی

به منظور محاسبه خواص مکانیکی آلیاژ نیکل-آهن با غلظت‌های مختلف، پس از محاسبه ثابت الاستیک هر کدام از ساختارهای بلوری و با استفاده از تقریب‌های وویت، رئوس و هیل^۱ برای ساختارهای بلوری مکعبی، می‌توان از طریق معادلات ۶ تا ۱۳، مدول‌های حجمی (B)، برشی (G) و یانگ (E)، ضرایب پواسون (ν)، پوگ (k) و فشار کوشی (C'') را محاسبه کرد:

$$B_H = B_V = B_R = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (۶)$$

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad (۷)$$

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{3(C_{11} - C_{12}) + 4C_{44}} \quad (۸)$$

$$G_H = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (۹)$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (۱۰)$$

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (۱۱)$$

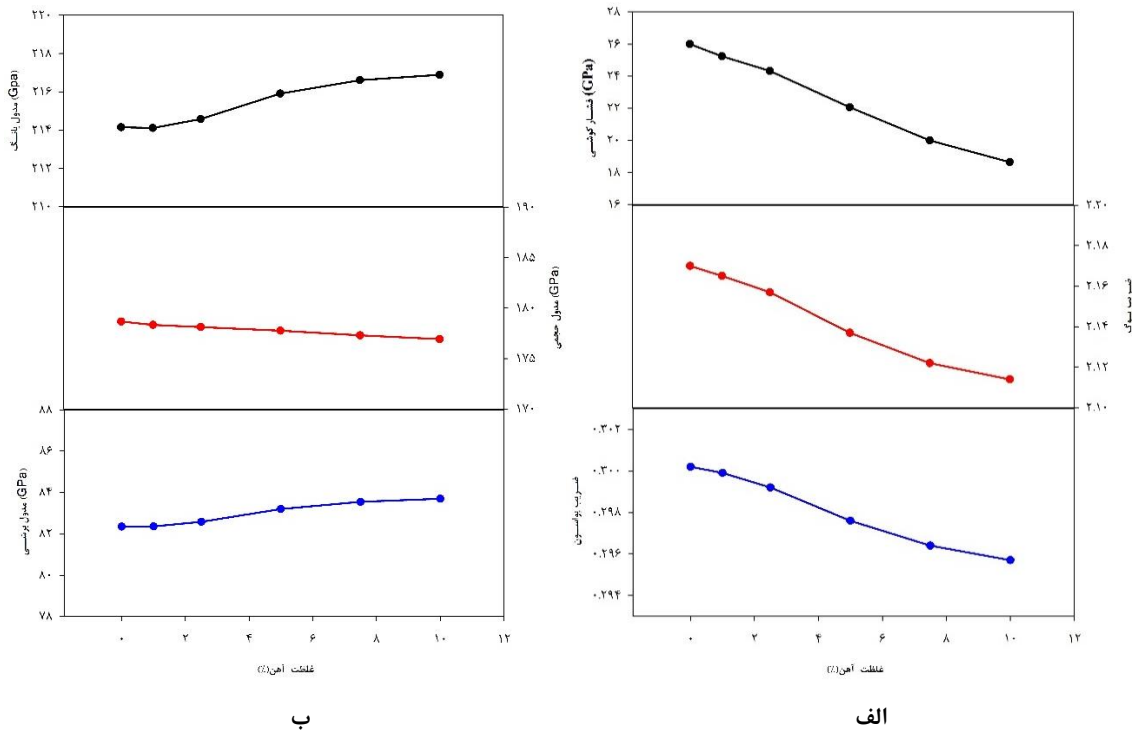
$$k = \frac{B}{G} \quad (۱۲)$$

¹ Voigt, Reuss, and Hill

$$C^* = C_{12} - C_{44}$$

(۱۳)

در شکل ۲ خواص مکانیکی محاسبه شده برای غلظت‌های مختلف آلیاژ نیکل-آهن آمده است. با توجه به شکل ۲-الف که مدول‌های حجمی، برشی و یانگ را نشان می‌دهد مشاهده می‌شود که افزایش غلظت آهن باعث کاهش مدول حجمی بلور خواهد شد که با توجه به این که مدول حجمی فلز آهن خالص کمتر از فلز نیکل می‌باشد این نتیجه کاملاً مورد انتظار می‌باشد. همچنین مدول‌های برشی و یانگ برخلاف مدول حجمی با افزایش غلظت آهن، روند صعودی دارند که این امر نشان می‌دهد اضافه کردن آهن به نیکل باعث استحکام و تقویت خواص برشی فلز نیکل می‌گردد که با نتیجه به دست آمده در بخش قبل کاملاً همخوانی دارد. با توجه به شکل ۲-ب مشاهده می‌شود ضرایب پواسون و پوگ و فشار کوشی که هر کدام به نوعی بیانگر شکل پذیری و شکنندگی یا تردی یک ماده بلوری می‌باشند با افزایش غلظت آهن روند معکوسی دارند و افزودن آهن به نیکل موجب کاهش شکل پذیری و افزایش جزیی تردی این فلز خواهد شد.



شکل ۲ خواص مکانیکی محاسبه شده برای ساختارهای مختلف نیکل با غلظت‌های ۰، ۱، ۲/۵، ۵، ۷/۵ و ۱۰ درصد آهن (الف) مدول‌های حجمی، برشی و یانگ (ب) ضرایب پواسون، ضریب پوگ و فشار کوشی

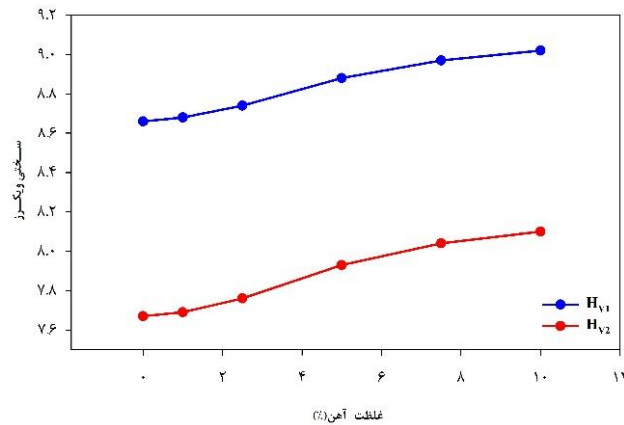
۳.۳ سختی

سختی یکی از پارامترهای مکانیکی مهم مواد است که نقشی حیاتی به ویژه در ارزیابی خواص سایش در ساختار مواد ایفا می‌کند. روش‌های مختلفی برای محاسبه سختی در روش‌های میکروسکوپی وجود دارد که یکی از متداول‌ترین آن‌ها سختی ویکرز است. دو مدل برای تعیین سختی ویکرز وجود دارد که براساس مدول حجمی و مدول برشی طبق معادلات ۱۴ و ۱۵ تعریف می‌شوند:

$$H_{V1} = 0.92(1/k)^{1.137} G^{0.708} \quad (14)$$

$$H_{V2} = 2(G/k^2)^{0.585} - 3 \quad (15)$$

سختی محاسبه شده با استفاده از دو مدل بالا برای آلیاژ نیکل-آهن در غلظت‌های مختلف آهن در شکل ۳ نشان داده شده است. نتایج به دست آمده با هر دو مدل نشان می‌دهد که افزودن آهن به نیکل موجب افزایش سختی این فلز خواهد شد و تاثیر مثبتی بر این ویژگی نیکل دارد.



شکل ۳ سختی محاسبه شده برای ساختارهای مختلف نیکل با غلظت‌های ۰، ۱، ۲/۵، ۵، ۷/۵ و ۱۰ درصد آهن

۴.۳ ویژگی‌های ترمودینامیکی

دمای دیبای و کمینه هدایت حرارتی دو ویژگی مهم ترمودینامیکی هستند که می‌توان با مطالعه آن‌ها اطلاعات مناسبی از رفتار مواد مختلف استخراج کرد. برای محاسبه این دو ویژگی، از سرعت‌های صوتی (طولی، عرضی و میانگین) استفاده می‌گردد. معادلات ۱۶-۲۱، به ترتیب سرعت‌های صوتی طولی، عرضی و میانگین، دمای دیبای و کمینه هدایت حرارتی با استفاده از دو مدل رایج کیهیل^۱ و کلارک^۲ برحسب دیگر پارامترهای ساختاری و مکانیکی ماده را نشان می‌دهند:

$$V_l = \sqrt{\frac{3B+4G}{3\rho}} \quad (16)$$

$$V_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (17)$$

$$V_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{V_t^3} + \frac{1}{V_l^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (18)$$

$$\Theta_D = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{1/3} V_m \quad (19)$$

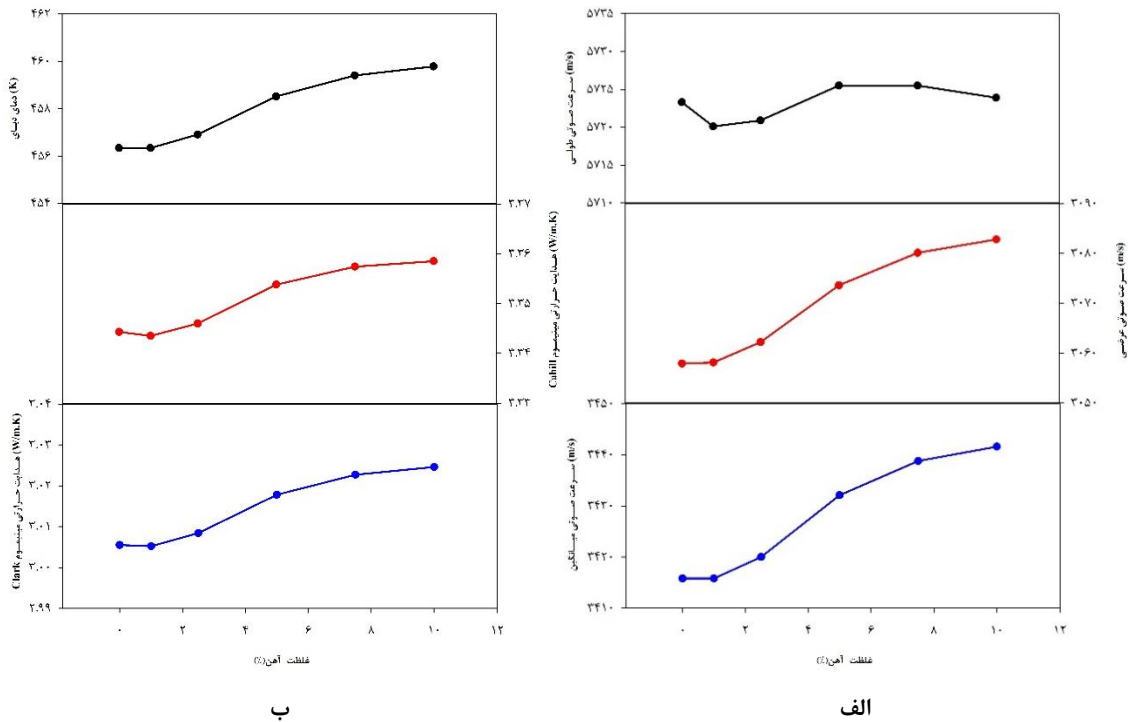
$$K_{\min}^{Cahill} = \frac{k_B}{2.48} \left(\frac{\rho n N_A}{M} \right)^{2/3} (V_l + 2V_t) \quad (20)$$

$$K_{\min}^{Clark} = 0.87 k_B \left[\frac{M}{n N_A} \right]^{-2/3} E^{1/2} \rho^{1/6} \quad (21)$$

¹ Cahill

² Clark

در شکل ۴ مقادیر محاسبه شده برای ویژگی‌های ترمودینامیکی آلیاژ نیکل-آهن نشان داده شده است. همان طور که از شکل ۴-الف مشخص است افزایش غلظت آهن تقریباً تاثیر زیادی بر سرعت صوتی طولی ندارد در حالی که سرعت‌های صوتی عرضی و میانگین با افزایش غلظت آهن افزایش می‌یابند. با توجه به شکل ۴-ب نیز مشاهده می‌شود که افزودن آهن به فلز نیکل موجب افزایش دمای دیبای و همچنین هدایت حرارتی مینیموم خواهد شد که این امر نشان می‌دهد با افزایش غلظت آهن می‌توان انتظار داشت که ویژگی‌های ترمودینامیکی نیکل تقویت خواهند شد.



شکل ۴ ویژگی‌های ترمودینامیکی محاسبه شده برای ساختارهای مختلف نیکل با غلظت‌های ۰، ۱، ۲/۵، ۵، ۷/۵ و ۱۰ درصد آهن
 الف) سرعت‌های صوتی طولی، عرضی و میانگین ب) دمای دیبای و هدایت حرارتی مینیموم Clark و Cahill

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، با استفاده از روش شبیه‌سازی مبتنی بر دینامیک ملکولی و با استفاده از نرم افزار لمپس، ثوابت الاستیک و برخی خواص ساختاری، مکانیکی و ترمودینامیکی آلیاژ نیکل-آهن و تاثیر افزایش غلظت آهن (۰، ۱، ۲/۵، ۵، ۷/۵ و ۱۰ درصد) بر خواص این آلیاژ مورد مطالعه قرار گرفت. محاسبات نشان می‌دهند که ثابت شبکه، ثوابت الاستیک C_{11} ، C_{44} و C_{12} و همچنین مدول‌های حجمی (B)، برشی (G)، و یانگ (E) و ضریب پواسون (ν) در مقایسه با مطالعات تجربی و تئوری قبلی با دقت بسیار بالایی با نتایج تجربی قبلی در شرایط محیط همخوانی دارد. نتایج بدست آمده برای غلظت‌های مختلف آهن نشان می‌دهد که افزایش غلظت آهن باعث کاهش ثوابت الاستیک C_{11} و C_{12} و در عین حال افزایش ثابت الاستیک C_{44} می‌گردد، لذا می‌توان نتیجه گرفت که افزایش غلظت آهن باعث کاهش خواص کششی نیکل می‌شود در حالی که خواص برشی آن را تقویت خواهد کرد. افزایش غلظت آهن باعث کاهش مدول حجمی بلور خواهد شد. همچنین مدول‌های برشی و یانگ برخلاف مدول حجمی با افزایش غلظت آهن، روند صعودی دارند که این امر نشان می‌دهد اضافه کردن آهن به نیکل باعث استحکام و تقویت خواص برشی فلز نیکل می‌گردد. ضرایب پواسون و پوگ و فشار کوشی که هر کدام به نوعی بیانگر شکل پذیری و شکنندگی یا تردی یک ماده بلوری می‌باشند با افزایش غلظت آهن روند معکوسی دارند و افزودن آهن به نیکل موجب کاهش شکل پذیری و افزایش جزیی تردی این فلز خواهد شد.

افزایش غلظت آهن تقریباً تاثیر زیادی بر سرعت صوتی طولی ندارد در حالی که سرعت‌های صوتی عرضی و میانگین با افزایش غلظت آهن افزایش می‌یابند، لذا با افزودن آهن به فلز نیکل، دمای دیبای و همچنین هدایت حرارتی مینیموم افزایش خواهند یافت که نشان می‌دهد با افزایش غلظت آهن می‌توان انتظار داشت که ویژگی‌های ترمودینامیکی نیکل تقویت شوند.

۵. تشکر و قدردانی

با تشکر از دانشکده مهندسی هسته‌ای دانشگاه شهید بهشتی تهران

۶. مراجع

- [1] M. Griffiths, R. Boothby, Radiation Effects in Nickel-Based Alloys, 2020.
- [2] T. Yonezawa, Nickel-Based Alloys, 2020.
- [3] D.S. Aidhy, C. Lu, K. Jin, H. Bei, Y. Zhang, L. Wang, W.J. Weber, Point defect evolution in Ni, NiFe and NiCr alloys from atomistic simulations and irradiation experiments, *Acta Mater.* 99 (2015) 69–76.
- [4] G.A. Alers, J.R. Neighbours, H. Sato, Temperature dependent magnetic contributions to the high field elastic constants of nickel and an Fe-Ni alloy, *J. Phys. Chem. Solids.* 13 (1960) 40–55.
- [5] A. Vicenzo, Structure and Mechanical Properties of Electrodeposited Nickel., 160 (2013) 570–577.
- [6] C. Wang, W. Zhang, C. Ren, P. Huai, Z. Zhu, The effect of temperature on primary defect formation in Ni-Fe alloy, *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms.* 321 (2014) 49–53.
- [7] S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular, (n.d.).
- [8] P. Hirel, AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files, *Comput. Phys. Commun.* 197 (2015) 212–219.
- [9] G. Bonny, R.C. Pasianot, L. Malerba, Fe-Ni many-body potential for metallurgical applications, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 17 (2009).
- [10] G. Clavier, N. Desbiens, E. Bourasseau, V. Lachet, N. Brusselle-Dupend, B. Rousseau, Computation of elastic constants of solids using molecular simulation: comparison of constant volume and constant pressure ensemble methods, *Mol. Simul.* 43 (2017) 1413–1422.
- [11] M. Wen, A. Barnoush, K. Yokogawa, Calculation of all cubic single-crystal elastic constants from single atomistic simulation: Hydrogen effect and elastic constants of nickel, *Comput. Phys. Commun.* 182 (2011) 1621–1625.
- [12] J. De Klerk, M.J.P. Musgrave, Internal conical refraction of transverse elastic waves in a cubic crystal, *Proc. Phys. Soc. Sect. B.* 68 (1955) 81–88.
- [13] S. LEVY, R. TRUPELL, Ultrasonic Attenuation in Magnetic Single Crystals, 279 (1953).
- [14] K. Kočíšková, P. Ballo, Atomic calculation of elastic constants for fcc metals: Ab-initio and semiempirical approach, *Kov. Mater.* 45 (2007) 81–84.
- [15] J. Song, Z. Gao, L. Zhang, W. Wu, B. He, L. Lu, Prediction on Elastic Properties of Nb-doped Ni Systems *Jia*, 4 (2557) 88-100