

مروری بر سیمای تغییر شکل با دوقلویی و مناطق نقص چینش در فلزات نانو کریستالی

شبیه سازی شده با دینامیک مولکولی

آرش کردانی، عباس منتظری هدش*

گروه شناسایی و انتخاب مواد مهندسی، دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

چکیده

تفاوت در خواص مکانیکی مواد نانو کریستال از تفاوت در مکانیزم تغییر شکل این مواد ناشی می شود. از این رو، برای بهبود خواص مکانیکی می بایست ابتدا مکانیزم های تغییر شکل به خوبی شناخته شوند و سپس پارامترهایی که باعث تثبیت نوع مشخصی از مکانیزم می شود بررسی گردند. ابعاد دانه، یکی از مهم ترین عواملی است که می تواند مکانیزم تغییر شکل مواد را از برش با لغزش نابه جایی کامل، به لغزش مرزدانه ای و یا به مناطق نقص در چینش و لغزش دوقلویی تغییر دهد. از طرفی تغییر شکل پلاستیک ماده با یک مکانیزم مشخص از دیدگاه انرژی نیز قابل طرح و بررسی است. از آن جا که شبیه سازی دینامیک مولکولی دقیق ترین و کم هزینه ترین ابزار در بررسی خواص مکانیکی نانومواد به شمار می رود، اخیراً پژوهش های زیادی در زمینه تحلیل پلاستیسته مواد نانو کریستالی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی انجام شده است. بدین منظور در مقاله حاضر، مروری بر مراحل شکل گیری و گسترش مناطق نقص در چینش و دوقلویی ها به عنوان دو مکانیزم مهم تغییر شکل مواد نانو کریستالی صورت گرفته است.

واژه های کلیدی: تغییر شکل، دوقلویی، مناطق نقص چینش، فلزات نانو کریستالی، شبیه سازی دینامیک مولکولی

ایمیل نویسنده مسئول: a_montazeri@kntu.ac.ir

۲- سیمای تغییر شکل

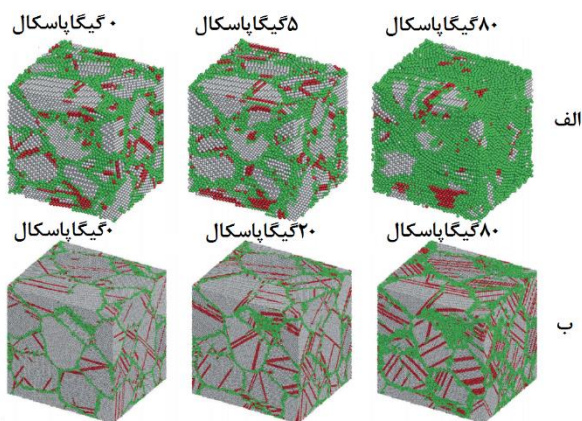
پلاستیسته مواد کریستالی معمولاً با لغزش نابه جایی ها کنترل می شود. این عیب های خطی همواره درون شبکه کریستالی حضور دارند. بر اساس رابطه ی هال-پچ مرزدانه ها مانع فعالیت نابه جایی می شوند. بنابراین تغییر شکل پلاستیک برای دانه های با ابعاد نانو با این مکانیزم دشوار خواهد بود [۴]. بر اساس مطالعات، مکانیزم های تغییر شکل در محدوده ۱۰ نانومتر تغییر می کنند. با کاهش ابعاد دانه تا زیر این مقدار، تغییر شکل پلاستیک با لغزش مرزدانه ها صورت می پذیرد، این در حالی است که با افزایش ابعاد دانه، فاکتورهایی که لغزش نابه جایی های جزئی را موجب می گردند تشدید شده و مناطق نقص در چینش و دوقلویی ها را ایجاد می کنند [۵]. مهم ترین تفاوت برش ماده با دوقلویی و برش با لغزش کامل در این است که، برش با لغزش کامل روی صفحات و جهات خاص کریستالی در ماده رخ داده و به واسطه ی آن، اتم ها چندین برابر فاصله ی بین اتمی را به صورت منفرد یا در طول یک صفحه طی می کنند. این در حالی است که در برش با دوقلویی، حرکت و تغییر جهت دست جمع اتم ها در فاصله ی معادل کسر کوچکی از فاصله ی بین اتمی رخ می دهد و این برش در حجم ماده به صورت یکنواخت توزیع می شود. لذ پله پله ای شدن سطح ماده در برش با دوقلویی مشاهده نمی شود [۶]. برای درک بهتر مکانیزم های پلاستیسته ی ماده نیاز است ابتدا شناخت دقیقی از خواستگاه شکل گیری آن ها یعنی مرزدانه ها داشته باشیم.

۱- مقدمه

برای بهبود خواص مکانیکی یک ماده، ابتدا لازم است شناخت دقیقی از ساختار دانه بندی و مکانیزم غالب تغییر شکل آن به دست آورد. سپس می توان با اعمال تغییرات در ساختار کریستالی ماده، مکانیزم تغییر شکل مورد نظر را درون ماده ایجاد کرده و بدین ترتیب استحکام ماده را افزایش داد. امروزه صنعت در مسیری حرکت می کند که هزینه های پژوهش های علمی را کاهش دهد. استفاده از شبیه سازی ها هزینه های مالی و زمانی را بسیار کاهش می دهد [۱].

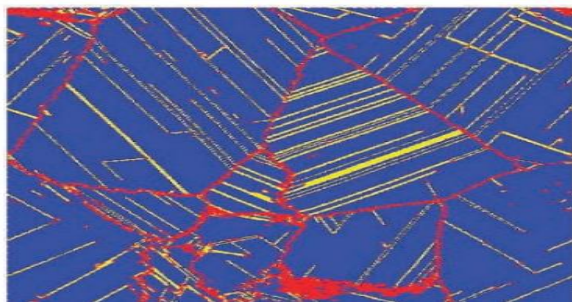
مهم ترین ابزار شبیه سازی مکانیزم های تغییر شکل در مواد نانو ساختار، شبیه سازی دینامیک مولکولی است [۲]. این روش برخلاف روش های شبیه سازی مبتنی بر مکانیک محیط پیوسته، اولاً کلیه ی اجزاء نمونه مورد بررسی را گسسته در نظر گرفته و ثانیاً برهمکنش هر جزء، با جزئی دیگر را محاسبه کرده و در خواص مکانیکی و فیزیکی کل ماده اثر می دهد. در سال های اخیر بسیاری از آزمون های مکانیکی اعم از کشش، فشار، برش، پیچش و خمش برای تحلیل رفتار تغییر شکل مواد نانو ساختار تک کریستال و پلی کریستال با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی شبیه سازی و بررسی شده است [۳]. در ادامه، پژوهش های صورت گرفته در زمینه ی تغییر شکل پلاستیک مواد نانو کریستالی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به تفصیل بررسی و تحلیل می گردد.

در نواحی وسیعی از ماده مناطق نقص چینش با ساختار HCP در درون دانه‌ها مشاهده می‌شوند [۹].



شکل ۱- فشردگی نمونه با اندازه دانه الف) ۳ نانومتر، ب) ۹/۵ نانومتر. نواحی سبز رنگ مرز دانه‌ها و نواحی قرمز رنگ نقص در چینش است [۹].

در پژوهش شویتز و همکاران، برای شبیه‌سازی کشش مس پلی‌کریستال با اندازه دانه‌ی ۴۹ نانومتر، از ۱۰۲ اتم میلیون استفاده شده است. مطابق شکل (۲) در ابعاد دانه ۴۹ نانومتر نیز، با اعمال ۱۰ درصد کرنش، لغزش ناقص ناهنجاری‌ها و شکل‌گیری مناطق نقص در چینش مکانیزم غالب تغییر شکل است. مناطق آبی درون دانه‌ها هستند. مناطق قرمز رنگ هسته‌های ناهنجاری جزئی هستند که در گام بعد به مناطق زرد رنگ نقص در چینش و دوقلویی در مرز دانه‌ها تبدیل شده و به سمت درون دانه‌ها گسترش می‌یابند. مشاهدات نشان می‌دهد تولید ناهنجاری‌های جزئی در مرز دانه‌ها نسبت به منابع فرانک-رید در داخل دانه‌ها بسیار بیشتر است. در حین تغییر شکل پلاستیک، ناهنجاری‌ها اغلب توسط مناطق نقص در چینش به دام می‌افتند. با این حال، برهمکنش آن‌ها منجر به ایجاد جنگل ناهنجاری نشده و در واقع، عدم تحرک دائمی را ایجاد نمی‌کند. تعداد کمی قفل لومر-کاترل ایجاد شده نیز خیلی سریع از بین می‌رود. لذا تغییر شکل پلاستیک در ماده همچنان جریان می‌یابد [۱۰].



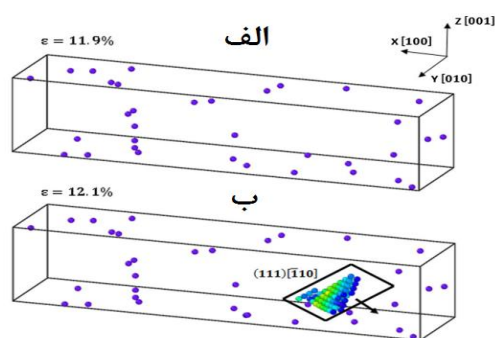
شکل ۲- ریز ساختار مس پلی‌کریستال پس از اعمال ۱۰ درصد کرنش کششی [۱۰].

شکل (۳) مربوط به شبیه‌سازی جوانه‌زنی و رشد ناهنجاری جزئی در مرز دانه است. منطقه‌ی نقص در چینش بین دو ناهنجاری جزئی در سیستم لغزش (۱۱۲) < ۱۱۱ > مشخص است. اتم-

۱- مرز دانه‌ها و مناطق نقص در چینش

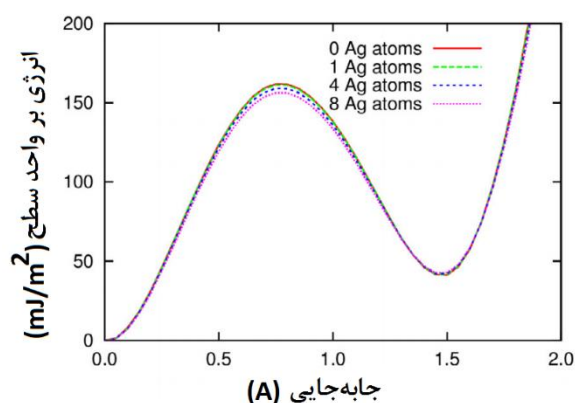
مرز دانه‌ها از آن منظر تأثیر شگرفی بر خواص فیزیکی و مکانیکی مواد کریستالی می‌گذارند که غالب دگرگونی‌های ماده از این نواحی آغاز می‌شود. مرزهای دانه در مواد پلی کریستالی، نواحی با انرژی بالا بوده، کانون تشکیل بسیاری از مکانیزم‌های تغییر شکل در مواد کریستالی هستند. اصولاً مرز دانه‌ها را به دو گروه مرز دانه‌های زاویه کم (۱۵-۱۰ درجه) و مرز دانه‌های با زاویه زیاد (بیش از ۱۵ درجه) تقسیم بندی می‌کنند. زاویه مذکور زاویه‌ی عدم انطباق دو دانه‌ی مجاور در شبکه‌ی کریستالی است [۷]. ماهیت مرز دانه‌ها به زیرهم آراییده شدن ناهنجاری‌ها در فضای بین دودانه بازمی‌گردد. انرژی مرز دانه‌های زاویه کم از مجموع انرژی ناهنجاری‌های موجود در مرز ناشی شده و این مقدار به زاویه‌ی عدم انطباق دو دانه‌ی مجاور وابسته است. در نتیجه، با افزایش چگالی ناهنجاری‌های موجود در مرز، زاویه‌ی عدم انطباق افزایش یافته و انرژی مرز دانه نیز افزایش خواهد یافت. اما این رویه در نقطه‌ای متوقف خواهد شد. دلیل این مطلب آن است که با افزایش چگالی ناهنجاری‌ها، فواصل بین آن‌ها کاهش یافته، میدان‌های تنش کششی و فشاری آن‌ها باهم برهمکنش داده و بعضاً اثر یکدیگر را خنثی می‌کنند. این پدیده از افزایش بیشتر انرژی مرز جلوگیری می‌کند [۸].

همان‌گونه که اشاره شد، در موادی با ابعاد دانه‌ی زیر ۱۰ نانومتر، پلاستیسیته با لغزش، نفوذ و چرخش مرز دانه تشدید می‌شود. بدین منظور یوان و همکاران، با استفاده از فشار هیدرواستاتیک، تأثیر شوک حاصل از فشردگی را روی مکانیزم تغییر شکل مس نانوساختار بررسی کردند. در شکل (۱) دو نمونه‌ی مس پلی کریستال با ابعاد دانه‌ی ۳ نانومتر و ۹/۵ نانومتر تحت فشار هیدرواستاتیک قرار گرفته و تغییر شکل هر نمونه مقایسه شده است. با افزایش تنش از صفر تا ۸۰ گیگاپاسکال، ماده ناپایدار شده و هر نمونه به دنبال مسیری برای کاهش سطح انرژی خود است. در نمونه‌ی الف با ابعاد دانه‌ی ۳ نانومتر، مکانیزم لغزش مرز دانه عامل اصلی تغییر شکل پلاستیک است. همان‌گونه که مشاهده می‌گردد، ضخامت مرز دانه‌ها پس از اعمال فشار ۸۰ گیگاپاسکال بسیار افزایش یافته است. در نواحی که مرز دانه‌ها قدرت لغزش نداشته است، با گرفتار شدن ناهنجاری‌های کامل در پشت مرز دانه، تفکیک آن‌ها به ناهنجاری‌های جزئی صورت پذیرفته و مناطق نقص در چینش به وجود آمده است. با این حال، وسعت این مناطق بسیار کم است. این در حالی است که مکانیزم تغییر شکل غالب برای نمونه ب با ابعاد دانه‌ی ۹/۵ نانومتر، لغزش ناهنجاری است. اما چون اکثر مرز دانه‌ها صلب هستند، لغزش ناهنجاری‌های کامل مختل شده و ماده برای کاهش انرژی ناشی از فشردگی، راهی جز تفکیک ناهنجاری کامل ندارد. به همین ترتیب،



شکل ۵-تشکیل مناطق نقص در چینش در اطراف اتم‌های نقره در زمینه‌ی مس [۱۲].

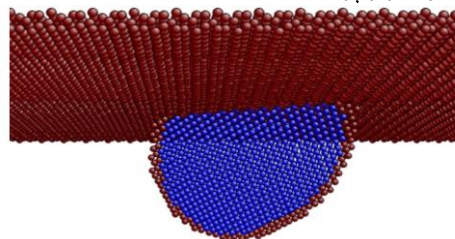
دلیل این موضوع را باید در انرژی مناطق نقص در چینش ناپایدار جستجو کرد. زیرا این انرژی سهولت شکل‌گیری نابه‌جایی‌های جزئی را تعیین می‌کنند. هنگامی‌که نمودار تغییرات انرژی مناطق نقص در چینش رسم می‌گردد، نخستین پیک بیشینه، مبین انرژی مناطق نقص چینش ناپایدار است. متعاقباً، پیک کمینه مقدار انرژی نقص چینش پایدار را تعیین می‌کند. مطابق نمودار (۱)، با حضور اتم‌های نقره در درون ساختار، انرژی مناطق نقص در چینش کاهش می‌یابد. از آن‌جا که هرچه مقدار کمینه‌ی انرژی کمتر باشد، وسعت مناطق نقص چینش بزرگ‌تر می‌شود، حضور نقره علاوه بر ایجاد مناطق ترجیحی شکل‌گیری نقص در چینش، این مناطق را وسیع‌تر نیز می‌کند [۱۲].



نمودار ۱-تغییرات انرژی نقص در چینش برحسب درصد حضور ناخالصی نقره [۱۲].

۳-۲-پتانسیل مناسب شبیه‌سازی نقص در چینش
نخستین بار مدل پتانسیل EAM توسط وتر-چن بر مبنای انرژی همدوس، ثابت شبکه‌ی تعادلی، مدول حجمی، ثابت شبکه‌ی مکعبی و انرژی تشکیل تهی‌جاها، طول و استحکام پیوند برای دینامیکی مولکولی ساختار فلزات اصلاح گردید. دومین اصلاح مهم برای این پتانسیل توسط فولیز، برای بهبود تخمینی مناسب از

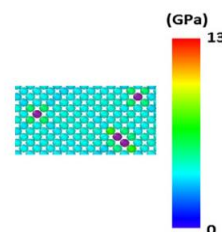
های آبی‌رنگ اتم‌های مس هستند که در شبکه‌ی هگزاگونال قرار گرفته‌اند. در مقابل، اتم‌های قهوه‌ای اتم‌های مس در ساختار مکعب وجوه مرکز پر هستند [۱۱].



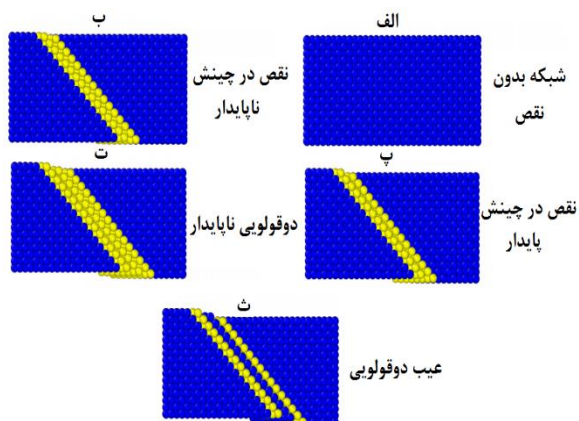
شکل ۳-جوانه‌زنی و تحرک نابه‌جایی‌های جزئی از مرز دانه‌ی مس، تشکیل مناطق نقص در چینش آبی‌رنگ در درون حلقه نابه‌جایی [۱۱].

۲-۲-مناطق نقص در چینش درون دانه‌ها

مناطق نقص در چینش می‌توانند از درون دانه‌ها هم ایجاد گردند. در پژوهش آمیگو و همکاران، اتم‌های ناخالصی نقره با درصدهای مختلف به زمینه‌ی تک کریستال مس اضافه شده و سپس این مجموعه اتمی مکعبی شکل، تحت کشش تک‌محوره قرار گرفته است. مشاهدات نشان داد، حضور نقره در ساختار مس، به دلیل عدم تطابق شعاع نقره و مس به مقدار ۱۱ درصد، میدان‌های کرنشی موضعی را فعال می‌کند. در شکل (۴) براساس توزیع تنشی فون-میزز در سطح ماده، حضور چهار اتم نقره در اطراف مس، تنش موضعی را از حدود ۴ گیگاپاسکال به ۱۳ مگاپاسکال افزایش می‌دهد. بنابراین انتظار می‌رود این نواحی برای تبدیل شدن به منابع تولید نابه‌جایی‌های جزئی درون ماده بسیار مستعد باشند [۱۲].

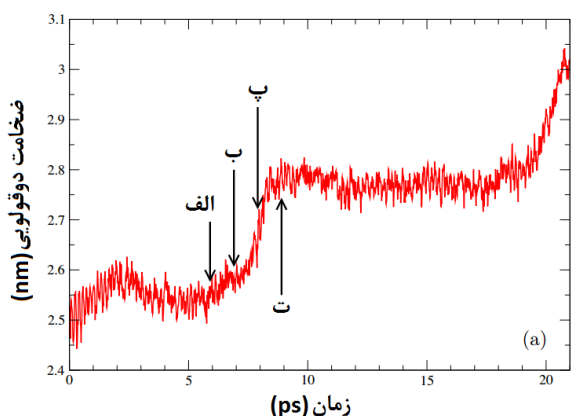


شکل ۴-اعمال میدان کرنشی اطراف اتم‌های نقره در زمینه‌ی مس [۱۲].
در شکل (۵-الف)، پیش از تسلیم، حضور اتم‌های نقره هیچ نقشی در تغییر ساختار درون ماده ندارند. در حالی‌که در شکل (۵-ب)، یک گام پس از تسلیم، اولین نابه‌جایی جزئی دقیقاً از ناحیه میدان کرنشی نقره جوانه زده و بلافاصله مناطق نقص در چینش را به وجود آورده است [۱۲].



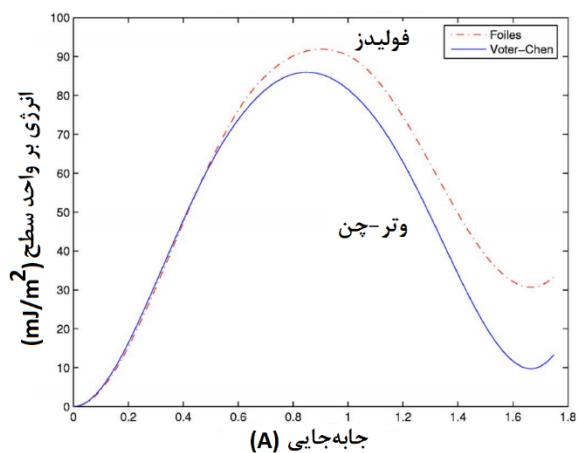
شکل ۶- مراحل تشکیل عیب دوقلویی از مناطق نقص در چینش [۱۵].

در پژوهش لوکو و همکاران، مراحل رشد دوقلو، پس از شکل‌گیری آن در منیزیم خالص تک کریستال مورد تحلیل قرار گرفته است. بر این اساس، رشد دوقلویی‌های اولیه درون ساختار، به‌واسطه‌ی اعمال تنش برشی و بانگیزه‌ی شکل‌گیری حلقه‌های دوقلویی است. این حلقه‌ها به‌سرعت گسترش جانبی پیدا می‌کنند تا سرانجام مرزهای مسطح دوقلویی را پدید آورند. این رویداد در فواصل زمانی جداگانه رخ داده و غیر پیوسته با زمان است. در واقع، این فرآیند، نوعی فعال‌سازی رشد دوقلو با تنش برشی در بازه‌های زمانی مشخص است. نمودار (۳) تغییرات ضخامت دوقلویی برحسب گام زمانی شبیه‌سازی در دمای ۳۰۰ کلون و تنش برشی ۱۱۰ مگاپاسکال برای منیزیم خالص را نشان می‌دهد. شکل (۷) نیز جابه‌جایی و مهاجرت مرزهای دوقلویی در بازه زمانی کوتاهی از الف تا ت را نشان می‌دهد. دوقلویی به‌صورت یک حلقه گسترش یافته و سرانجام مرزهای مسطحی را ایجاد می‌کند. این درست است که با افزایش زمان، تحت تنش و دمای ثابت، با افزایش مهاجرت مرز دوقلویی، ضخامت آن بیشتر می‌شود، اما نکته‌ی مهم این است که در یک بازه‌ی کوچک زمانی، به‌طور ناگهانی گسترش دوقلویی چندین برابر می‌شود. این موضوع می‌تواند با این گفته که سرعت حرکت دوقلویی چندین برابر سرعت صوت است، مطابقت خوبی داشته باشد [۱۶].



انرژی مناطق نقص چینش درونی انجام شد. تنها تفاوت این دو مدل پتانسیل به اصلاح فاکتور چگالی الکترون بازمی‌گردد. فولیز با افزایش توان چگالی الکترونی، تأثیر آن را در محاسبه‌ی انرژی برهمکنش اجزاء بیشتر کرد [۱۳].

منحنی‌های مربوط به شکل‌گیری مناطق نقص در چینش، برای هر دو مدل پتانسیل در نمودار (۲) آمده است. نتایج مشاهدات تجربی نشان می‌دهد که برای طلای نانوکریستال، مقدار انرژی نقص انباشت پایدار ۳۲ میلی ژول بر مترمربع است. معیار پتانسیل وتر-چن این مقدار را ۹ میلی ژول بر مترمربع گزارش کرده درحالی‌که فولیز با اصلاح مدل پتانسیل این مقدار را ۳۱ میلی ژول بر مترمربع پیش‌بینی کرده است [۱۳].

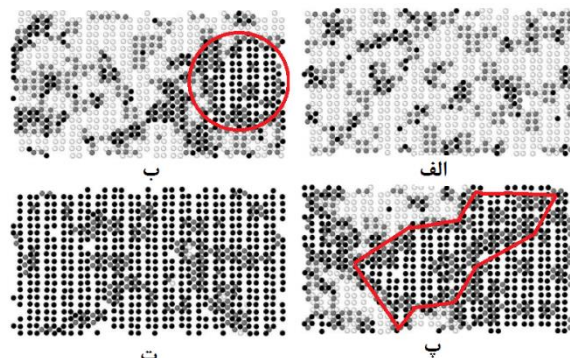


نمودار ۲- منحنی مربوط به محاسبه انرژی نقص در چینش با دو مدل پتانسیل فولیز و وتر-چن [۱۳].

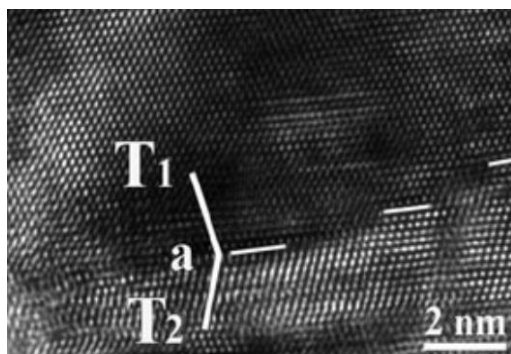
۴-۲- تغییر شکل با دوقلویی

در ادامه‌ی روند تغییر شکل مواد، این احتمال وجود دارد که مناطق نقص در چینش به تنهایی، قادر به کاهش انرژی سیستم نباشند و در حین ادامه‌ی تغییر شکل پلاستیک، به دوقلویی‌ها تبدیل گردند. از این موضوع به تغییر شکل کلی و جزئی در مواد یاد می‌شود [۱۴]. پژوهش جیانگ و همکاران به همین پدیده اختصاص دارد. در شکل (۶) تنش کششی در جهت محوری <۱۰۰> و صفحه (۱۰۰) اعمال شده است. برش در راستای صفحه‌ی (۱۱۱) و جهت <۱۱۲> شکل می‌گیرد. با افزایش کرنش، انرژی مناطق نقص چینش افزایش یافته و به حالت ناپایدار درخواهد آمد. با افزایش بیشتر کرنش، برش در صفحات هم‌خانواده‌ی (۱۱۱) و جهات هم‌خانواده‌ی <۱۱۲> بیشتر شده و نقص در چینش پایدار می‌گردد. در نتیجه‌ی کنار هم قرار گرفتن صفحات نقص در چینش، دوقلویی ناپایدار شکل می‌گیرد، لذا ماهیت عیب از سطحی به حجمی تغییر می‌کند. سرانجام در مراحل بعدی با جدایش مرزهای دوقلویی، ناحیه‌ی آینه‌ای میان آن‌ها پدید می‌آید [۱۵].

نمودار ۳- منحنی تغییر ضخامت دوقلویی بر حسب گذشت زمان حین انجام آزمون برش برای منیزیم نانوکریستال [۱۶].



شکل ۷- شبیه‌سازی مراحل رشد دوقلویی برای ساختار منیزیم نانوکریستال تحت اعمال تنش برشی [۱۶].

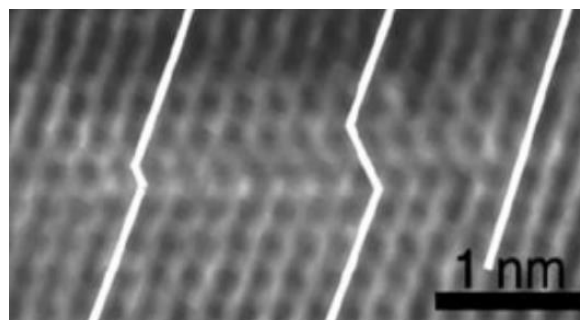


شکل ۹- تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری وضوح بالا از دوقلویی تشکیل‌شده از نابه‌جایی‌های شاکی در مرز دانه‌های نیکل. انحنای باند دوقلویی به دلیل تجمع نابه‌جایی‌های شاکی قابل تشخیص است [۱۹].

۳- نتیجه‌گیری

در این مطالعه، پژوهش‌های شبیه‌سازی و تجربی صورت گرفته در چند سال اخیر در مورد مکانیزم تغییر شکل با دوقلویی و مناطق نقص در چینش در فلزات نانوکریستالی، مرور و بررسی شد. از جمله مهم‌ترین نکات به دست آمده می‌توان به این موارد اشاره داشت؛ یکی از مهم‌ترین پارامترهای تعیین مکانیزم غالب تغییر شکل از مکانیزم‌های مبتنی بر لغزش نابه‌جایی‌ها به مکانیزم-های مبتنی بر نفوذ مرز دانه‌ها، ابعاد دانه است. با کاهش ابعاد دانه زیر ۱۰ نانومتر، چگالی مرز دانه‌ها بسیار افزایش یافته و لذا تحولات پلاستیسیته ماده با لغزش مرزها کنترل می‌گردد. این درحالی است که با افزایش ابعاد دانه، هم می‌توان شاهد فعال شدن مناطق نقص در چینش و دوقلویی درون دانه‌ها بود و هم مرزهای دانه محل تفکیک نابه‌جایی‌های کامل به نابه‌جایی‌های جزئی می‌شوند. در این شرایط وجود ناخالصی‌های درون دانه، محل ترجیحی شکل‌گیری مناطق نقص در چینش می‌شوند. در طول فرآیند پلاستیسیته، این سطح انرژی ماده است که تعیین می‌کند، از چه مسیری تغییر شکل دنبال شود؛ در صورتی که انرژی تشکیل دوقلویی از انرژی مناطق نقص در چینش پایدار، کمتر باشد، دوقلویی‌ها شکل گرفته و تا رسیدن به سطح دانه‌ها، تغییر شکل ماده را پیش می‌برند. دوقلویی‌ها هم می‌توانند از درون دانه‌ها شکل بگیرند و به سمت مرز حرکت کنند و هم از تفکیک نابه‌جایی‌های شاکی در مرز دانه تشکیل شده و به سمت سطح آزاد، دانه را برش دهند. به طور کلی، در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، انتخاب مدل پتانسیل مناسب برای مشاهده پدیده مورد نظر، مهم‌ترین گام است. برای مشاهده مناطق نقص در چینش و دوقلویی‌های جدا شده از آن‌ها، مدل اصلاح‌شده فولیز برای فلزات نانوکریستالی با نتایج تجربی همخوانی بیشتری دارد. در مجموع، اگرچه تغییر شکل با ایجاد مناطق نقص در چینش و دوقلویی ادامه می‌یابد، اما تبعات این‌گونه برش‌ها برای ماده نسبت به برش با مکانیزم لغزش کامل کمتر بوده و با کاهش ابعاد دانه تا حد نانومتر، خواص مکانیکی مواد به‌طور چشم‌گیری بهبود می‌یابد.

در تحقیقات مروری ژو و همکاران نیز، تصاویر مختلفی از نواحی مستعد شکل‌گیری دوقلویی در بین دانه‌ها و درون دانه‌ها مورد تحلیل و بررسی قرار گرفته است [۱۷]. در شکل (۸) دوقلویی‌ها به ضخامت ۲ لایه اتمی در درون دانه آلومینیوم نانوکریستالی آسیاکاری شده مشاهده می‌شوند. این دوقلویی‌ها از مناطق نقص در چینش پایدار شکل گرفته‌اند. با اضافه شدن نقص در چینش بیشتر به دوطرف دوقلو، ضخامت آن افزایش می‌یابد. با این حال، ضخامت بیش از دولا لایه اتمی برای دوقلویی گزارش نشده است. لذا این مکانیزم در صورتی نقش مهمی در تغییر شکل خواهد داشت که چگالی نابه‌جایی‌های جزئی و مناطق نقص در چینش بین‌شان در ماده بسیار زیاد باشد [۱۸].



شکل ۸- تصویر میکروسکوپ الکترونی از شکل‌گیری دوقلویی‌ها در درون دانه آلومینیوم آسیاکاری شده با آسیاب گلوله‌ای [۱۸].

شکل (۹) دوقلویی T_1 در سطح نیکل نانوکریستالی خراش خورده با استفاده از عملیات سایش را نشان می‌دهد. این دوقلویی به دلیل انتشار مداوم نابه‌جایی‌های شاکی از مرز دانه در سمت چپ تصویر به وجود آمده است. با این حال، نابه‌جایی‌های شاکی در طرف دیگر دانه زیاد نبوده و تلاقی بین این دونواحی، مرز انحنادار دوقلویی را شکل می‌دهد. لذا T_2 به علت فشار زیاد نابه‌جایی‌های شاکی، خط T_1 را امتداد نداده است [۱۹].



Versus Local Deformation. Scientific Reports (11):11050-9, 2015.

15. J, Jiang; A, Leach; K, Gall; H, Park; T, Rabczuk; A Surface Stacking Fault Energy Approach to Predicting Defect Nucleation in Surface-Dominated Nanostructures. Journal of The Mechanics and Physics of Solids (61):1915-1934, 2013.

16. A, Luque; M, Ghazisaeidi; W, Curtin; A New Mechanism for Twin Growth in Mg Alloys. Acta Materialia (81):442-456, 2014.

17. Y, Zhu; X, Liao; X, Wu; Deformation Twinning in Bulk Nanocrystalline Metals: Experimental Observations. Journal of Minerals, Metals & Materials Society (60):60-64, 2008.

18. X, Liao; F, Zhou; J, Laverbia; Deformation Twins in Nanocrystalline Al. Applied Physics Letters (83):5061-5064, 2003.

19. X, Liao; Y, Zhou; S, Deformation Twinning in Nanocrystalline Copper at Room Temperature and Low Strain. Applied Physics Letters (84):591-594, 2004.

۴-منابع

1. D, Rapaport; The Art of Molecular Dynamics Simulation. Second Edition Cambridge University Press England, 2001.
2. A, Cao; Y, Wei; Molecular Dynamics Simulation of Plastic Deformation of Nano Twinned Copper. Journal of Applied Physics (102): 083511-2, 2007.
3. S, Tsai; Molecular Modeling: Molecular Mechanics. First Edition Wile-Liss Inc United States, 2002.
4. A, Lasalmonie; J, Strudel; J, Mater; Influence of Grain Size on The Mechanical Behaviour of Some Hight Strenght Materials. Journal of Materials Science 6 (21):1837-1852, 1985.
5. R, Christopher; W, Cai; Plasticity of Metal Nanowires. Journal of Materials Chemistry (22):3277-3292, 2012.
6. X, Sheng; Ch, Peng; Li, Ju; Li, Dong; JM, Tour; Dislocation Slip or Deformation Twinning: Confining Pressure Makes a Difference. Material Science and Engineering A (387-389):840-844, 2004.
7. P, Cantwell; M, Tang; Sh, Dillon; J, Luo; G, Rohrer; Grain Boundary Complexions. Acta Materialia (62):1-48, 2014.
8. D, Hull; D, Bacon; Introduction to Dislocations. Fourth Edition Butterworth-Heinemann Oxford, 2001.
9. F, Yuan; X, Wu; Hydrostatic Pressure Effects on Deformation Mechanisms of Nanocrystalline FCC Metals. Computational Materials Science (85):8-15, 2014.
10. J, Schiotz; K, Kacobsen; A Maximum in The Strenght of Nanocrystalline Copper. Science (301):1357-1360, 2003.
11. M, Mcphie; S, Berbrnni; M, Cherkaoui; Activation Energy for Nucleation of Partial Dislocation From Grain Boundaries. Computational Materials Science (62):169-174, 2012.
12. N, Amigo; G, Gutierrez; M, Ignat; Atomistic Simulation of Single Crystal Copper Nanowires Under Tensile Stress: Influence of Silver Impurities in The Emission of Dislocations. Computational Materials Science (87): 76-82, 2014.
13. S, Harold; A, Zimmerman; Modeling Inelasticity and Failure in Gold Nanowires. Physical Review B (5):054106-8, 2005.
14. D, Tam Ho; Y, IM; K, Soon-Yong; Mechanical Failure Mode of Metal Nanowires: Global Deformation