

مدل‌سازی دینامیک مولکولی تأثیر لایه‌های اکسیدی و هیدروکسیدی بر خواص مکانیکی نانوالیاف فولادی با

به‌کارگیری مدل هسته-پوسته

علیرضا موسیوند^۱، امیر رضائی صامتی^{۲*}

۱. ایران، همدان، دانشگاه بوعلی سینا، دانشکده مهندسی، گروه مهندسی عمران، کارشناس ارشد

۲. ایران، همدان، دانشگاه بوعلی سینا، دانشکده مهندسی، گروه مهندسی عمران، استادیار a.rezaeisameti@basu.ac.ir

چکیده:

اکسیداسیون و هیدروکسیداسیون سطحی تأثیر بسزایی بر رفتار مکانیکی نانوالیاف فولادی دارند. این فرآیندهای شیمیایی که در اثر تماس با اکسیژن، رطوبت و محیط‌های خورنده رخ می‌دهند، ساختار اتمی سطح نانوالیاف را تغییر داده و باعث تشکیل لایه‌هایی با خواص متفاوت از فولاد اولیه می‌شوند. در این پژوهش، تأثیر این فرایندها بر خواص مکانیکی نانوالیاف فولادی تحت بارگذاری کششی و فشاری با استفاده از روش دینامیک مولکولی، پتانسیل میدان نیروی واکنشی (ReaxFF) و مدل هسته-پوسته بررسی شده است. شبیه‌سازی‌ها با نرم‌افزار LAMMPS و با به‌کارگیری روش بارگذاری شبه‌استاتیکی جزء به جزء انجام شد تا تنش‌های دینامیکی کاهش یابد. نتایج نشان می‌دهد که افزایش ضخامت لایه اکسیدی منجر به کاهش مدول یانگ، تنش تسلیم و مقاومت نهایی نانوالیاف می‌شود. به طوری که افزایش ضخامت لایه اکسیدی تا ۲۰ درصد می‌تواند مدول یانگ را تا ۴۰ درصد و تنش تسلیم را تا ۳۴ درصد کاهش دهد. فرآیند هیدروکسیداسیون به دلیل تشکیل پیوندهای ضعیف‌تر و ناپایدارتر، این پارامترها را بیشتر کاهش می‌دهد. بررسی نمودارهای تنش- کرنش نشان می‌دهد که لایه‌های اکسیدی و هیدروکسیدی منجر به تسهیل تمرکز تنش و تسریع گسیختگی مواد می‌شوند. مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی، دقت قابل قبول مدل عددی را تایید می‌کند. یافته‌های این پژوهش نشان می‌دهد که در صورت قرارگیری نانوالیاف فولادی در محیط قلیایی بتن، کاهش قابل توجهی در تنش تسلیم و مدول یانگ رخ می‌دهد که باید در کاربرد این اجزا مورد توجه قرار گیرد.

واژگان کلیدی:

نانوالیاف فولادی؛ اکسیداسیون و هیدروکسیداسیون سطحی؛ دینامیک مولکولی؛ رفتار مکانیکی؛ شبیه‌سازی عددی

بتن مسلح، ترکیبی از سیمان سخت شده و سنگدانه‌های معدنی است که با استفاده از انواع مختلف الیاف تقویت می‌شود. این ماده یکی از اصلی‌ترین مصالح ساختمانی محسوب می‌شود و به طور گسترده در پروژه‌های عمرانی نظیر جاده‌ها، سازه‌های باربر و پیاده‌روهای فرودگاه به کار می‌رود. در صنعت ساختمان امروزی، افزودنی‌ها و الیاف تقویت‌کننده نقشی کلیدی در ارتقای کیفیت و عملکرد بتن ایفا می‌کنند. این افزودنی‌ها با قابلیت استفاده در مقیاس‌های مختلف، علاوه بر بهبود خواص مکانیکی بتن، به کاهش وزن آن نیز کمک کرده و مصالح سبک‌تری در اختیار مهندسان قرار می‌دهند. تحقیقات نشان داده‌اند که افزودن ذرات نانومقیاس و الیاف فولادی، به‌ویژه الیاف نازک فولادی، به ماتریس بتن به میزان ۱ تا ۱/۵ درصد وزنی می‌تواند منجر به افزایش مقاومت کششی تا ۱۰۰ درصد، مقاومت خمشی تا ۱۵۰ تا ۲۰۰ درصد و مقاومت فشاری بین ۱۰ تا ۲۵ درصد شود [۱ و ۲]. این مواد، با توزیع یکنواخت در ماتریس بتن، امکان بهره‌برداری بهتر از بتن با مقاومت بالا را فراهم می‌آورند [۳].

به طور کلی در الیاف نازک فولادی، لایه‌های اکسید و هیدروکسید که بر اثر فرآیندهای طبیعی اکسیداسیون و هیدروکسیداسیون در محیط قلیایی بتن روی سطوح فلزی فولاد تشکیل می‌شوند، نقش بسزایی در تعیین رفتار مکانیکی این مواد دارند. در حالی که این لایه‌ها به‌عنوان پوشش محافظ در برابر خوردگی عمل می‌کنند، اثرات آن‌ها بر خواص مکانیکی مواد به‌ویژه در مقیاس‌های نانومتری نیازمند مطالعه دقیق است [۴ و ۵]. به دلیل نسبت بالای سطح به حجم در این الیاف نازک فولادی، فرآیندهای اکسیداسیون می‌توانند منجر به کاهش استحکام تسلیم و مدول یانگ شوند. پژوهش‌های انجام‌شده نشان داده‌اند که ضخامت و ترکیب شیمیایی این لایه‌ها مستقیماً بر تنش‌های اعمالی و تمرکز نابجایی‌ها تأثیر می‌گذارند؛ به طوری که افزایش ضخامت لایه اکسید می‌تواند باعث کاهش مقاومت مکانیکی و افزایش ترک‌های سطحی شود [۶ و ۷]. علاوه بر این، هیدراتاسیون در محیط‌های آبی، به‌ویژه در حضور ترکیبات فعال مانند هیدروژن پراکسید، می‌تواند لایه‌های اکسی‌هیدروکسیدی را تشکیل دهد که تغییرات ساختاری قابل توجهی در سطح ایجاد کرده و رفتار مکانیکی نانوالیاف را تحت تأثیر قرار می‌دهد. مطالعات نشان داده‌اند که ضخامت لایه اکسیدی، نوع محیط آبی و شرایط دما و میزان قلیایی بودن محیط از عوامل مهمی هستند که بر میزان این تغییرات اثرگذارند [۸ و ۹].

پژوهش‌ها نشان می‌دهند که تغییرات مکانیکی ناشی از لایه‌های اکسیدی و هیدروکسیدی به‌واسطه تغییر در مکانیسم‌های پلاستیک، نظیر لغزش صفحات^۱ و دوقلویی^۲ رخ می‌دهد. در آزمایش‌های کششی و فشاری انجام‌شده بر الیاف فولادی با لایه‌های اکسیدی نازک، مشخص شد که این لایه‌ها نقش مهمی در شروع ترک‌ها و انتشار آن‌ها دارند [۱۰ و ۱۱]. در محیط‌های آبی یا غنی از اکسیدکننده‌ها مانند پراکسید هیدروژن، هیدروکسیداسیون سریع‌تر رخ داده و لایه‌هایی متخلخل و ضعیف ایجاد می‌کند. این لایه‌ها از طریق ایجاد نواقص ساختاری در نزدیکی سطح، آغاز تغییر شکل پلاستیک را تسهیل کرده و مقاومت مکانیکی نمونه‌ها را کاهش می‌دهند [۱۰]. در مقایسه، اکسیداسیون در محیط‌های خشک با سرعت کمتری پیش می‌رود و لایه‌های اکسیدی نسبتاً یکنواخت‌تری تشکیل می‌دهد که اثرات متفاوتی بر خواص مکانیکی دارد. براین اساس فهم تأثیر اکسیداسیون و هیدروکسیداسیون بر خواص مکانیکی فولاد برای بهینه‌سازی کاربردهای صنعتی و سازه‌ای بسیار حیاتی است. در صنایع ساختمانی، این دانش می‌تواند به طراحی مواد مقاوم در برابر خوردگی و بهبود دوام سازه‌ها کمک کند. با این حال، چالش‌هایی مانند کنترل فرآیند اکسیداسیون در شرایط محیطی مختلف همچنان وجود دارد که نیازمند مطالعات بیشتر است [۱۲ و ۱۳].

^۱ Slip Planes

^۲ Twinning

نظر به چالش‌ها و محدودیت‌های ذاتی در انجام آزمایش‌های تجربی روی قطعات و سیستم‌های ریزمقیاس، روش‌های شبیه‌سازی عددی به عنوان ابزاری قدرتمند و کارآمد در تحلیل و بررسی این سیستم‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرند. این محدودیت‌ها شامل دشواری در اندازه‌گیری دقیق پارامترها، هزینه‌های بالای ساخت و آزمایش نمونه‌های مقیاس، و پیچیدگی‌های فنی در دستکاری و کنترل قطعات در این مقیاس می‌باشد. شبیه‌سازی‌های عددی امکان مطالعه جامع رفتار سیستم‌های ریزمقیاس را با دقت بالا و هزینه کمتر فراهم می‌آورند و به محققان اجازه می‌دهند تا پارامترهای متعدد و تأثیر آن‌ها بر عملکرد سیستم را به صورت سیستماتیک مورد بررسی قرار دهند. دینامیک مولکولی به‌عنوان یکی از ابزارهای محاسباتی پیشرفته، امکان تحلیل رفتار مواد در مقیاس اتمی و مولکولی را فراهم می‌کند. این روش با استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی، نیروهای میان‌اتم‌ها و مولکول‌ها را محاسبه کرده و تغییرات زمانی آن‌ها را تحت شرایط مختلف بررسی می‌کند. این روش به ویژه در حوزه نانومواد، قابلیت‌های چشمگیری در پیش‌بینی خواص مکانیکی، مقاومت تسلیم، الگوهای تغییر شکل و واکنش‌های شیمیایی از خود نشان داده است. در این راستا، دواتا^۱ [۱۴] براساس روش دینامیک مولکولی فعالیت‌های نابجایی در تغییرشکل فشاری نانوستون‌های آهن را در نرخ کرنش بالا و ارتباط بین حرکات نابجایی‌ها با تغییرشکل پلاستیک و تأثیر دما را مطالعه نمود. سیناس^۲ و جودهاری^۳ [۱۵] تأثیر جهت‌گیری بلوری بر رفتار تغییرشکل نانوسیم‌های آهن را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. وو^۴ و همکاران [۱۶] با به کارگیری روش دینامیک مولکولی تأثیر دما و نرخ سرعت بارگذاری را بر رفتار پلاستیک نانوالیاف آهن را بررسی نمودند.

به طور کلی اکسیداسیون و هیدروکسیداسیون سطحی نانوساختارهایی نظیر نانوالیاف آهن، یکی از چالش‌های مهم در حوزه مهندسی نانومواد است که می‌تواند به کاهش استحکام مکانیکی و تسریع خرابی مواد منجر شود. از این رو در این مطالعه به بررسی رفتار مکانیکی نانوالیاف فولادی تحت بارگذاری کشش و فشار با استفاده از روش دینامیک مولکولی پرداخته می‌شود. با توجه به چالش‌ها و محدودیت‌های مطالعات پیشین، هدف اصلی این پژوهش توسعه یک مدل هسته-پوسته جامع برای شبیه‌سازی نانوالیاف فولادی با لایه‌های اکسیدی و هیدروکسیدی سطحی با استفاده از روش دینامیک مولکولی و پتانسیل میدان نیروی واکنشی است. برخلاف مطالعات قبلی که عمدتاً به بررسی کیفی یا محدود تأثیر لایه‌های سطحی پرداخته‌اند، این تحقیق با ارائه روابط کمی مشخص بین ضخامت لایه اکسیدی و کاهش خواص مکانیکی، خلأ موجود در ادبیات فنی را پر می‌کند. در این راستا، تأثیر سه سطح مختلف ضخامت لایه اکسیدی (۱۳/۸، ۱۶/۷ و ۲۰ درصد) بر مدول یانگ، تنش تسلیم و مقاومت نهایی نانوالیاف تحت بارگذاری‌های کششی و فشاری به صورت پارامتریک مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. علاوه بر این، مقایسه جامعی بین تأثیرات فرآیندهای اکسیداسیون و هیدروکسیداسیون بر رفتار مکانیکی نانوالیاف ارائه می‌شود که اهمیت ویژه‌ای در پیش‌بینی رفتار این اجزا در محیط قلبیایی بتن دارد. از دیگر نوآوری‌های این پژوهش، به کارگیری روش بارگذاری شبه‌استاتیکی جزءبه‌جزء همراه با مراحل پایدارسازی است که امکان حذف تنش‌های دینامیکی ناشی از نرخ کرنش بالا در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی را فراهم می‌آورد و نتایج واقع‌گرایانه‌تری را نسبت به روش‌های متداول ارائه می‌دهد. نتایج این شبیه‌سازی‌ها با داده‌های آزمایشگاهی موجود در ادبیات فنی اعتبارسنجی شده و تطابق مناسبی را نشان می‌دهند. یافته‌های این تحقیق می‌تواند به عنوان مبنایی برای طراحی بهینه بتن مسلح با نانوالیاف فولادی و پیش‌بینی خواص مکانیکی این اجزا در شرایط محیطی مختلف مورد استفاده قرار گیرد. براین اساس در بخش دوم این مقاله به بیان نحوه ایجاد پیکربندی اولیه ساختار اتمی آهن، اکسید آهن و هیدروکسید آهن پرداخته شده و جزئیات مدل‌سازی رفتار مکانیکی

^۱ Dutta

^۲ Sainath

^۳ Choudhary

^۴ Wu

آن‌ها براساس روش دینامیک مولکولی ارائه می‌شود. در بخش سوم مقاله نیز نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی ارائه شده و به بررسی نتایج پرداخته می‌شود.

۲- جزییات مدل‌سازی براساس روش دینامیک مولکولی

همانگونه که اشاره شد، در این مقاله هدف بررسی تاثیر لایه‌های سطحی اکسید و هیدروکسید آهن بر پاسخ‌های مکانیکی نانوالیاف فولادی با به‌کارگیری روش تحلیل اتمی است. به‌طور کلی در روش دینامیک مولکولی، تعاملات بین‌اتمی بر اساس پتانسیل بین‌اتمی مدل‌سازی می‌شوند و از این رو دقت و توانایی پتانسیل بین‌اتمی تاثیر به‌سزایی در دقت مدل‌سازی خواهد داشت. براین اساس در این مطالعه برای توصیف دقیق تعاملات بین اتمی و انرژی پتانسیل در تحلیل دینامیک مولکولی از روش میدان نیروی واکنشی^۱ که ابتدا توسط ون دووین^۲ و همکارانش [۱۷] توسعه یافت، استفاده می‌شود. این روش ارتباط قوی میان انرژی پیوند و ترتیب پیوند برقرار کرده و امکان تعیین ترتیب پیوند از فاصله بین پیوندها را فراهم می‌کند. پتانسیل میدان نیروی واکنشی این امکان را فراهم می‌سازد تا فرآیندهای تشکیل و گسست پیوند به‌طور دقیق شبیه‌سازی شوند. از این رو، این پتانسیل توانایی مدل‌سازی محیط‌های پیوندی متنوع، از جمله سیستم‌های دارای پیوندهای فلزی و یونی را دارد. در پتانسیل میدان نیروی واکنشی انرژی سیستم اتمی مطابق رابطه زیر محاسبه می‌گردد:

$$E_{system} = E_1 + E_2 + E_3 + E_4 \quad (۱)$$

$$E_1 = E_{bond} + E_{Ip} + E_{Eover} + E_{Eunder} \quad (۲)$$

$$E_2 = E_{val} + E_{pen} + E_{coa} + E_{tors} \quad (۳)$$

$$E_3 = E_{H_bond} + E_{vdWaal} + E_{coulomb} + E_{conj} \quad (۴)$$

$$E_4 = E_{c2} \quad (۵)$$

در روابط فوق، جمله‌های انرژی پتانسیل سیستم بر اساس ماهیت فیزیکی آن‌ها دسته‌بندی شده‌است. به این معنا که سهم پیوندها، شامل عدد کئوردیناسیون و زوج الکترون‌های تنها در یک دسته و با نماد E_1 در رابطه (۱)، سهم زوایای پیوندی در یک دسته و با نماد E_2 در رابطه (۲)، سهم برهم‌کنش‌های غیر پیوندی در دسته‌ای جداگانه با نماد E_3 در رابطه (۳)، و سهم دو نوع خاص پیوند هم با نماد E_4 در رابطه (۴) قرار گرفته‌اند. در رابطه‌های (۲) تا (۵)، E_{bond} بیانگر انرژی پیوندی^۳، E_{Ip} انرژی زوج الکترون‌های تنها^۴، E_{Eover} انرژی بیش پیوندی^۵، E_{Eunder} انرژی کم پیوندی^۶، E_{val} انرژی زاویه پیوندی^۷، E_{pen} انرژی جبرانی برای مولکول‌های آلن -

^۱ ReaxFF

^۲ Van Duin

^۳ Energy mini

^۴ Lone pair

^۵ Over coordination

^۶ Under coordination

^۷ Bond angle

گونه^۱، E_{coa} انرژی زاویه پیوند مزدوج^۲، E_{tors} انرژی زاویه پیچش پیوندی^۳، E_{conj} انرژی زاویه پیچش پیوندی مزدوج^۴، E_{H_bond} انرژی پیوند هیدوژن^۵، $E_{vdWaals}$ انرژی برهم کنش‌های واندروالسی^۶، $E_{coulomb}$ انرژی برهم کنش‌های کولنی^۷ و در آخر، E_{c2} بیانگر اصلاح انرژی برای پیوند کربن^۸ است.

آریانپور و همکاران [۱۸] پارامترهای پتانسیل میدان نیروی واکنشی را برای اکسیدها و هیدروکسیدهای آهن ارائه دادند. آن‌ها نشان دادند که این پتانسیل امکان مدل‌سازی دقیق واکنش‌های شیمیایی، پیوندها و ترمودینامیک در سیستم‌های اکسی هیدروکسید آهن، از جمله برهم‌کنش‌های هیدروژن را فراهم می‌کند. سیجس^۹ و همکاران [۱۹] براساس پتانسیل میدان نیروی واکنشی به بررسی مکانیسم‌های اکسیداسیون آهن مایع در دماهای بالا پرداختند. کوتون^{۱۰} و همکاران [۲۰] با به‌کارگیری پتانسیل میدان نیروی واکنشی فرایند بازیافت مبتنی بر هیدروژن گرد کوره اکسیژن پایه غنی از اکسید آهن را بررسی نمودند. بارکارو^{۱۱} و مونت^{۱۲} [۲۱] برای مدل‌سازی رشد نانوذرات اکسید آهن از پتانسیل میدان نیروی واکنشی بهره بردند. صامتی و موسیوند [۲۲] با استفاده از پتانسیل میدان نیروی واکنشی تاثیر قطر بر پاسخ‌های مکانیکی نانومیله‌های آهنی را بررسی نمودند. باتوجه به توانایی و گستردگی مطالعات صورت گرفته، در این مطالعه اندرکنش بین‌اتمی براساس پتانسیل میدان نیروی واکنشی مدل‌سازی می‌شود.

در این مطالعه برای پیکربندی اولیه آهن، اکسید آهن و هیدروکسید آهن، از ساختار کریستالی به‌کار برده شده توسط وانگ^{۱۳} و همکاران [۲۳] استفاده می‌شود. چینش اتم‌ها در این ساختارهای کریستالی در شکل (۱) نشان داده شده است. در اینجا ابتدا ساختار اتمی اولیه میله نازک فولادی ایجاد می‌شود و اکسیدی براساس مدل هسته-پوسته بر سطح آن ایجاد می‌شود؛ سپس نمونه‌ها در شرایط محیطی پایدارسازی می‌گردند. در مرحله پایدارسازی نمونه‌ها، به منظور بهینه‌سازی ساختار و حذف تنش‌های داخلی و فشارهای غیرتعادلی، شبیه‌سازی تحت هنگرد هم‌دما-هم‌فشار به مدت ۱۰۰ پیکوثانیه انجام می‌گیرد. در این شرایط، دما و فشار به صورت مستقل کنترل می‌شوند و سیستم اجازه دارد تا حجم خود را برای دستیابی به فشار تعادلی تغییر دهد. استفاده از هنگرد^{۱۴} هم‌دما-هم‌فشار در این مرحله این امکان را فراهم می‌سازد تا نمونه‌ها به شرایطی نزدیک‌تر به حالت تعادل برسند، به‌طوری که تمامی تنش‌های باقی‌مانده و فشارهای داخلی در ساختار به حداقل برسند. این فرآیند به ویژه برای کاهش تغییرات ساختاری ناخواسته که می‌تواند از تنش‌های اولیه ناشی شود، حیاتی است. پس از رسیدن به تعادل در شرایط هم‌دما-هم‌فشار، سیستم تحت هنگرد دما

^۱ Penalty energy for allene-type molecules

^۲ 3-body angle conjugation

^۳ Bond torsion

^۴ 4_body torsion conjugation

^۵ Hydrogen bonds

^۶ Van der Waals

^۷ Coulomb interaction

^۸ C correction

^۹ Thijs

^{۱۰} Kovtun

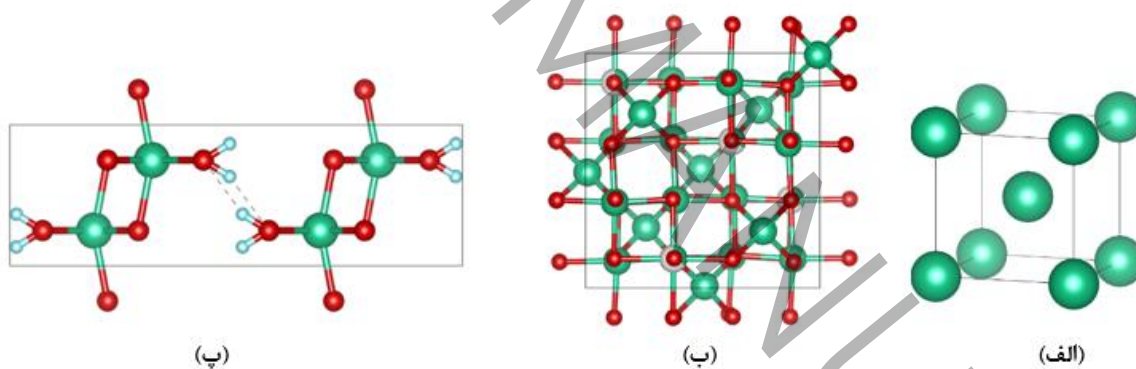
^{۱۱} Barcaro

^{۱۲} Monti

^{۱۳} Wang

^{۱۴} Ensemble

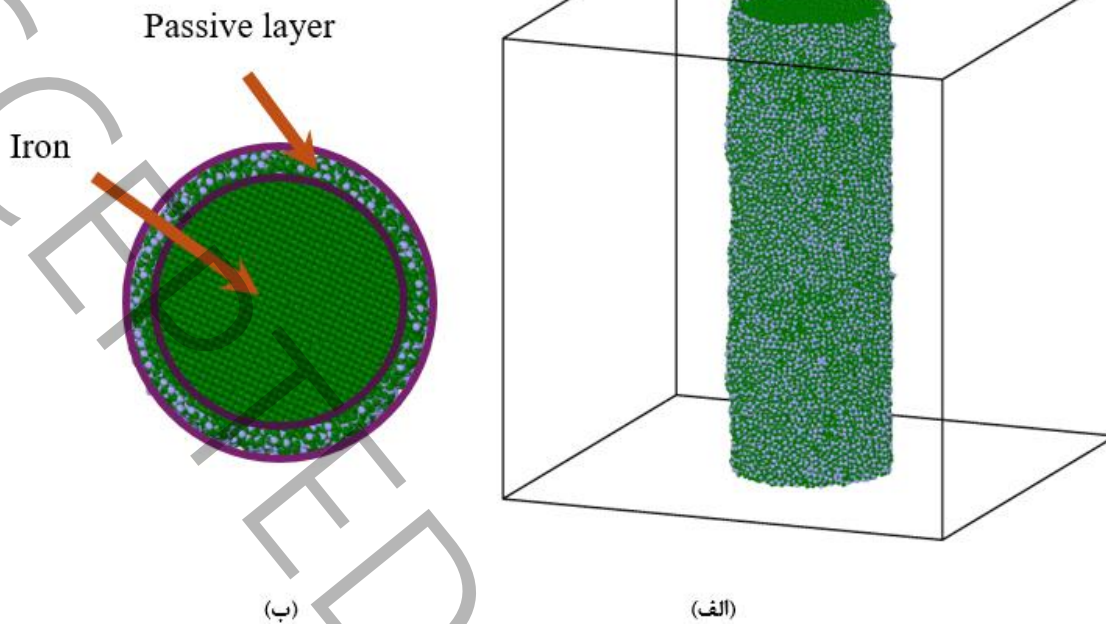
ثابت به مدت ۱۰۰ پیکوثانیه تحلیل می‌شود. استفاده از هنگرد دما ثابت پس از هنگرد هم‌دما-هم‌فشار این اجازه را می‌دهد تا تغییرات ساختاری کوچک‌تر و پویایی‌های حرارتی سیستم را بدون تغییر در حجم، به‌طور دقیق‌تری بررسی کنیم. در مجموع، این روش‌ها امکان بهینه‌سازی کامل ساختار نمونه‌ها و فراهم کردن شرایطی نزدیک به واقعیت را فراهم می‌آورند که در آن می‌توان به تحلیل دقیق‌تری از رفتار مواد تحت شرایط خاص پرداخت. در شکل (۲)، تصویری از میله نازک فولادی با لایه اکسید سطحی پس از اعمال فرایند پایدارسازی ارائه شده است. لازم به ذکر است که جهت اطمینان از همگرایی و پایداری عددی نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، نمونه‌های نانوالیاف فولادی ابتدا در شرایط هم‌دما نیز به تعادل حرارتی و انرژی رسانده شدند. در این مرحله از ترموستات نوس-هوور^۱ استفاده شده که یکی از روش‌های شناخته‌شده برای کنترل دمای ثابت در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی است. پس از تثبیت دما و انرژی، آزمون‌های کرنش‌گذاری اعمال شده‌اند. گام زمانی شبیه‌سازی بسیار کوچک ۰/۱ fs انتخاب شده است، زیرا در مطالعات مشابه برای مدل‌سازی واکنش‌های شیمیایی و دینامیک واکنش‌پذیر، استفاده از گام‌های زمانی در این مرتبه برای برآورد دقیق پدیده‌های نانسکوپی توصیه شده است. ابعاد نمونه (طول، نسبت طول به قطر و تعداد اتم‌ها) مطابق با ابعاد معمول در مطالعات پیشین [۴، ۵ و ۲۲] تعیین شده تا اثرات مربوط به اندازه سیستم به حداقل برسد. اگرچه تحلیل حساسیت پارامترها (مانند ابعاد نمونه یا نرخ کرنش) به صورت کمی انجام نشده است، اما در همه مراحل شبیه‌سازی اصول همگرایی و پایداری رعایت شده‌اند. به‌عنوان مثال، پایایی انرژی کل سیستم تحت نظر قرار گرفته و نرخ کرنش اعمالی در محدوده رنج‌های استاندارد انتخاب شده است تا نتایج شبیه‌سازی از نظر عددی پایدار و قابل اعتماد باشند.



شکل ۱. تصاویر آرایش اتمی برای ساختارهای (الف) Fe، (ب) اکسید آهن - Fe_2O_3 و (پ) هیدروکسید آهن - FeOOH . (گوی‌های سبز، قرمز و آبی به ترتیب بیانگر اتم‌های آهن، اکسیژن و هیدروژن است.)

Figure 1. Atomic arrangements for the structures (a) Fe, (b) iron oxide - Fe_2O_3 , and (c) iron hydroxide - FeOOH . (The green, red, and blue arrows respectively denote iron, oxygen, and hydrogen atoms.)

^۱ Nosé-Hoover



شکل ۲. پیکربندی اتمی میله نازک فولادی با لایه اکسید سطحی با به کارگیری ساختار کریستالی و مدل هسته-پوسته: (الف) نمای سه بعدی و (ب) مقطع میله (گوی‌های سبز و آبی به ترتیب بیانگر اتم‌های آهن و اکسیژن هستند).

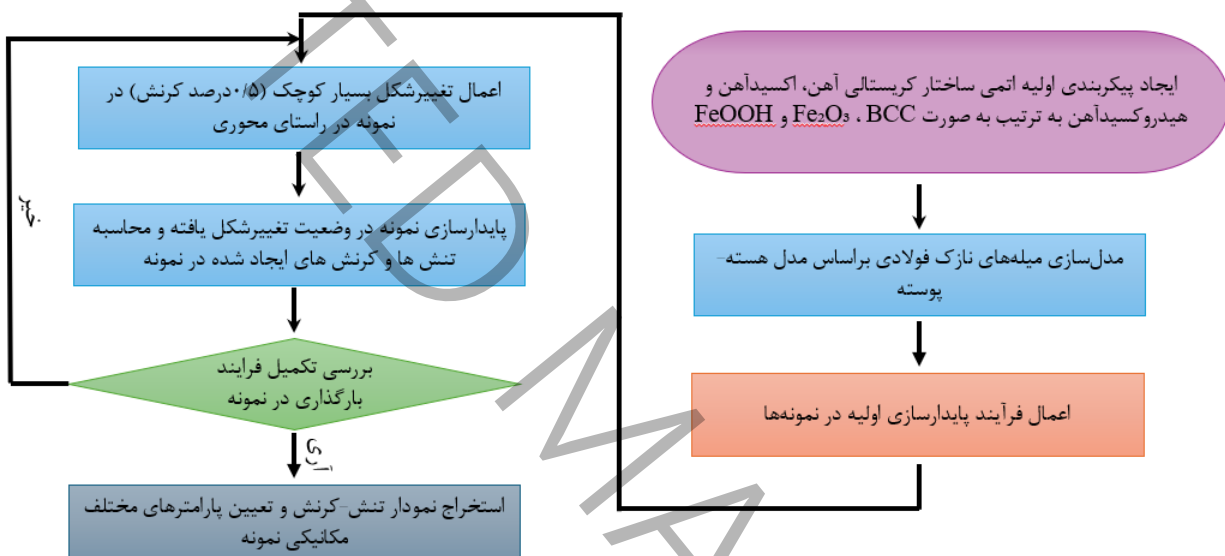
Figure 2. Atomic configuration of a steel nanofiber with a surface oxide layer using the crystal structure and core-shell model: (a) 3-D view and (b) cross-section of the bar (the green and blue arrows respectively indicate iron and oxygen atoms).

پس از از اعمال فرآیند پایدارسازی^۱، فرآیند اعمال تغییر شکل تک‌محوری به صورت شبه‌استاتیکی بر نمونه‌ها صورت می‌پذیرد. اعمال تغییر شکل تک‌محوری به صورت جزء به جزء^۲ و در چند مرحله در راستای طولی میله‌ها اعمال شده و دمای نمونه در طول فرآیند ثابت و معادل ۳۰۰ درجه کلوین (دمای محیط) نگه داشته می‌شود. در این حالت برای هر جزء از بارگذاری، ابتدا نمونه‌ها تحت تغییر شکل با نرخ کرنش ثابت قرار می‌گیرند تا تغییرات تنش و کرنش در پاسخ به بارگذاری اولیه بررسی شود. سپس مرحله پایدارسازی اجرا می‌شود تا تنش‌های دینامیکی باقی‌مانده در ساختار کاهش یابند و نمونه‌ها به حالت تعادل استاتیکی برسند. بعد از مرحله پایدارسازی، در مرحله بعدی مجدداً فرآیند تغییر شکل اعمال می‌شود و این نحوه بارگذاری چندین بار تکرار می‌گردد. در دینامیک مولکولی، به دلیل تحلیل در واحد زمانی بسیار پایین و نرخ کرنش بالا، تنش‌های دینامیکی زیادی ممکن است به دلیل سرعت زیاد تغییرات کرنش در طول فرآیند شبه‌سازی به وجود آیند. این تنش‌های دینامیکی ناشی از حرکت سریع ذرات و نوسانات غیرقابل کنترل در سیستم هستند که به‌ویژه در مقیاس نانو تأثیرات جدی بر نتایج می‌گذارند. استفاده از روش جزء به جزء اعمال تغییر شکل و تعادل به‌طور مؤثری کمک می‌کند تا این تنش‌های اضافی که به دلیل نرخ کرنش زیاد ایجاد می‌شوند، از بین بروند. در فرآیند پایدارسازی، ذرات و اتم‌ها فرصت پیدا می‌کنند تا به وضعیت‌های انرژی پایدارتر برسند و با کاهش سرعت تغییرات، ساختار به

^۱ Relaxation process

^۲ incrementally

شرایط تعادل استاتیکی نزدیک تر می شود. این فرآیند نه تنها به بهبود رفتار مواد کمک می کند بلکه امکان بررسی دقیق تر تغییرات در تنش و کرنش را در شرایط مختلف فراهم می سازد. به عبارت دیگر، این روش بارگذاری جزء به جزء باعث کاهش تأثیرات نرخ کرنش بالا می شود و رفتار مواد را تحت بارگذاری شبه استاتیکی شبیه سازی می کند [۲۴-۲۸]. این موضوع در شبیه سازی های دینامیک مولکولی که نرخ کرنش بالا می تواند نتایج غیر واقعی ایجاد کند، اهمیت ویژه ای دارد. در این جا در هر جزء از مراحل اعمال تغییر شکل، ۵/۰ درصد کرنش محوری در طول ۶ پیکوثانیه به نمونه اعمال شده و سپس نمونه به مدت ۱۲ پیکوثانیه در فرآیند پایدار سازی قرار می گیرد. جزئیات روند انجام مدل سازی میله نازک فولادی و تعیین پاسخ های مکانیکی آن در فلوجارت ارائه شده در شکل (۳) قابل مشاهده است.



شکل ۳: جزئیات روند انجام مدل سازی میله نازک فولادی و تعیین پاسخ های مکانیکی آن

Figure 3: Details of the procedure for modeling a steel nanofiber and determining its mechanical responses.

لازم به ذکر است که به دلیل اینکه ساختارهای واقعی مواد به طور معمول کاملاً بدون ایراد نیستند و همواره نقایص ساختاری مانند حفرات ریز، نابجایی ها یا ناخالصی ها در آن ها وجود دارد، برای شبیه سازی شرایط واقعی تر، حدود ۶ درصد نقص نقطه ای به ساختار اولیه اعمال می شود. این نقایص باعث می شوند تا نتایج شبیه سازی به شرایط واقعی مواد نزدیک تر شده و اثرات احتمالی این نقایص بر خواص مکانیکی و رفتار نمونه ها به طور دقیق تر بررسی شود. در این مطالعه، شبیه سازی دینامیک مولکولی با گام زمانی ۱ فمتوثانیه بوده و تحلیل عددی با نرم افزار متن باز لمپس^۱ [۲۹] و تحلیل نتایج در نرم افزار متن باز اویتو^۲ [۳۰] صورت می پذیرد.

^۱ LAMMPS

^۲ OVITO

۳. نتایج و بحث

پیش از ورود به مرحله شبیه‌سازی میله‌های نازک فولادی و ارزیابی فرآیندهای اکسیداسیون و هیدراتاسیون که تأثیرات گسترده‌ای بر خواص مکانیکی این میله‌ها دارند، ضروری بود تا درک عمیق‌تری نسبت به نمونه آهن خالص و ترکیبات وابسته به آن از جمله اکسید آهن (Fe_2O_3) و هیدروکسید آهن ($FeOOH$) به دست آید. در این راستا، مطابق با شکل (۴)، المان‌های حجمی نمونه^۱ شامل آهن، اکسید آهن (Fe_2O_3) و هیدروکسید آهن ($FeOOH$) براساس ساختار ارائه شده در قسمت قبل ارائه گردید. مشخصات ابعادی و تعداد اتم‌های مختلف موجود در ساختارهای پیکربندی اولیه المان‌های حجمی نمونه در جدول (۱) ارائه شده است. این نمونه‌ها در شرایط محیطی پایدارسازی شده و انرژی داخلی آن‌ها کمینه‌سازی می‌شود.

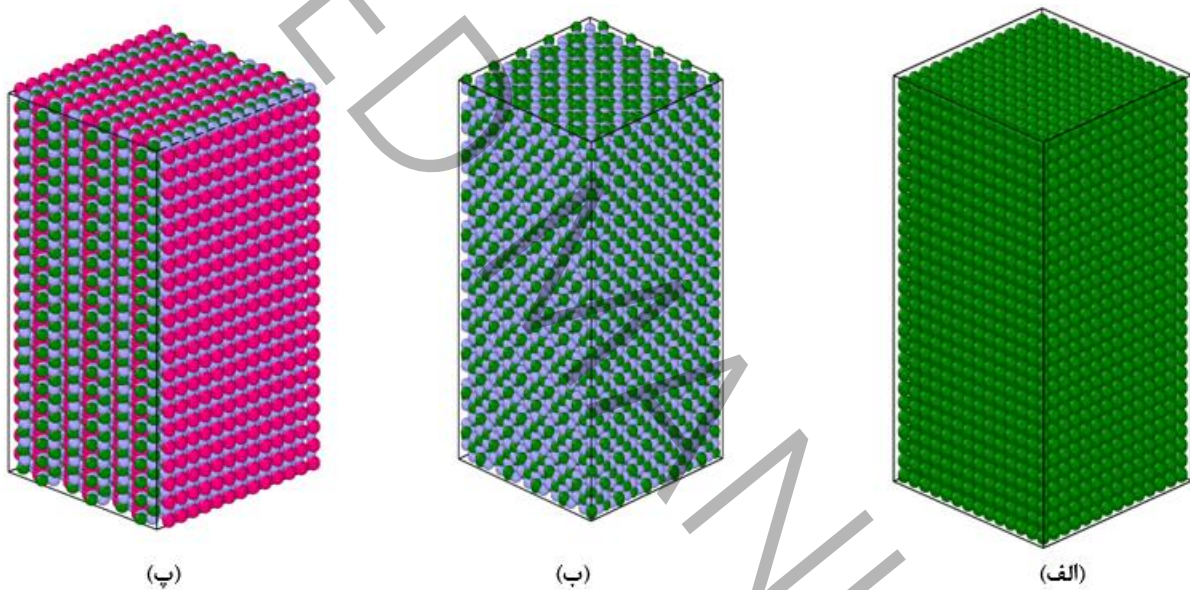
به منظور آنالیز بهتر ساختار اتمی نمونه‌ها پس از فرایند پایدارسازی، تابع توزیع شعاعی ذرات در نمونه‌های اکسید و هیدروکسید آهن مورد بررسی قرار می‌گیرد. در شکل (۵-الف)، تابع توزیع شعاعی نشان می‌دهد که پیک اصلی در فاصله ۲ آنگستروم مربوط به پیوند Fe-O است. این فاصله به طور خاص با ساختارهای اکسید آهن مانند Fe_2O_3 مرتبط است. در این ساختارها، آهن و اکسیژن پیوندهای قوی شیمیایی تشکیل می‌دهند که ناشی از تعاملات کووالانسی-یونی است. این پیوندها هرچند از نظر انرژی پیوندی قوی هستند، اما به دلیل ماهیت یونی-کووالانسی، انعطاف‌پذیری محدودی دارند و تحت بارگذاری مکانیکی، به جای تغییر شکل پلاستیک، تمایل به شکست ترد دارند. فاصله مذکور در این ساختار Fe_2O_3 به دلیل نظم بلوری شبکه قابل مشاهده است. همچنین، اگر ماده آمورف باشد، این فاصله نشان‌دهنده وجود نظم کوتاه‌برد در پیوندهای Fe-O است. کاهش تدریجی شدت پیک‌ها در فواصل بیشتر ($r > 5 \text{ \AA}$) نشان می‌دهد که نظم بلندبرد در ساختار اکسیدی محدود است و این موضوع می‌تواند یکی از دلایل کاهش خواص مکانیکی در مقایسه با آهن خالص باشد. این تحلیل تأیید می‌کند که ماده ساختار اکسیدی مشخصی دارد که در فواصل کوتاه دارای نظم قوی است، هرچند ممکن است نظم بلندبرد کاهش یافته باشد [۳۱]. پیک مربوط به جفت اتم‌های اکسیژن (O-O) در فاصله‌ای کمتر از ۲/۵ آنگستروم ظاهر می‌شود، این فاصله نشان‌دهنده توزیع منظم اتم‌های اکسیژن در ساختار ماده است. این فاصله نزدیک و شدت متوسط پیک ($g(r) \approx 4-6$) نشان‌دهنده توزیع منظم اتم‌های اکسیژن در ساختار و وجود فضای خالی بین اتم‌های اکسیژن است که می‌تواند به عنوان نقاط ضعف ساختاری عمل کرده و محل آغاز ترک‌های میکروسکوپی باشد.

^۱ Representative volume element

جدول ۱. مشخصات ابعادی و تعداد اتم‌ها در ساختارهای پیکربندی اولیه اتمی المان حجمی نمونه

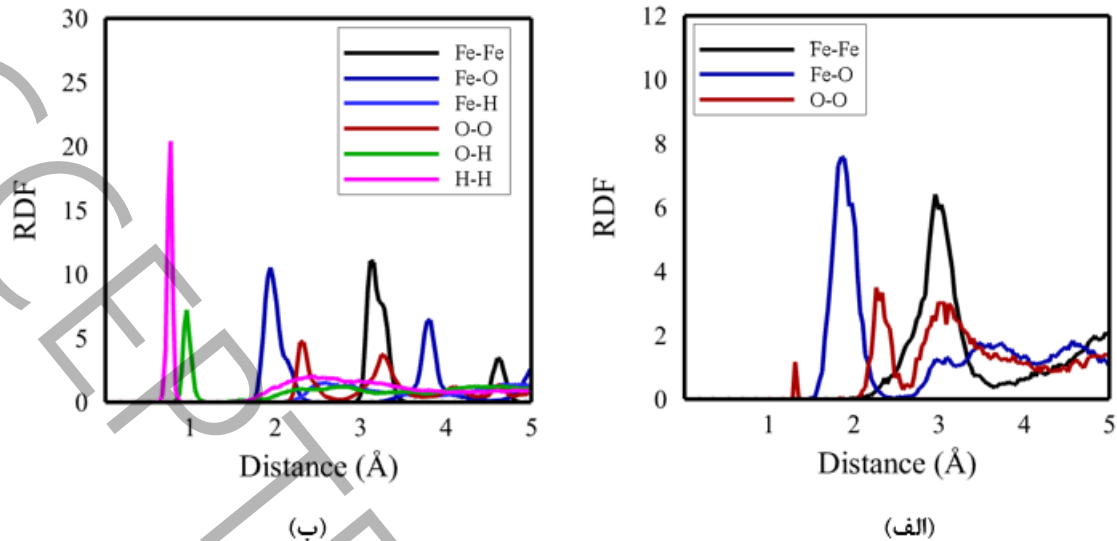
Table 1. Dimensional characteristics in the initial atomic configuration of the representative volume element

Number of H atoms	Number of O atoms	Number of Fe atoms	Size (nm)	Representative volume element (RVE)
–	–	20230	47×47×100	Pure Fe
–	13824	10211	47×47×100	Iron oxide
16028	16058	8024	51×48×98	Iron hydroxide



شکل ۴. پیکربندی اولیه اتمی المان حجمی نمونه (الف) آهن خالص با ساختار بلوری مکعبی مرکزدار (BCC)، (ب) اکسید آهن (Fe_2O_3) (پ) هیدروکسید آهن (FeOOH). (گوی‌های سبز، آبی و قرمز به ترتیب بیانگر اتم‌های آهن، اکسیژن و هیدروژن است)

Figure 4. Initial atomic configuration of the representative volume element: (a) Pure iron with a body-centered cubic (BCC) crystal structure, (b) Iron oxide (Fe_2O_3), (c) Iron hydroxide (FeOOH). (The green, blue, and red arrows respectively denote iron, oxygen, and hydrogen atoms.)

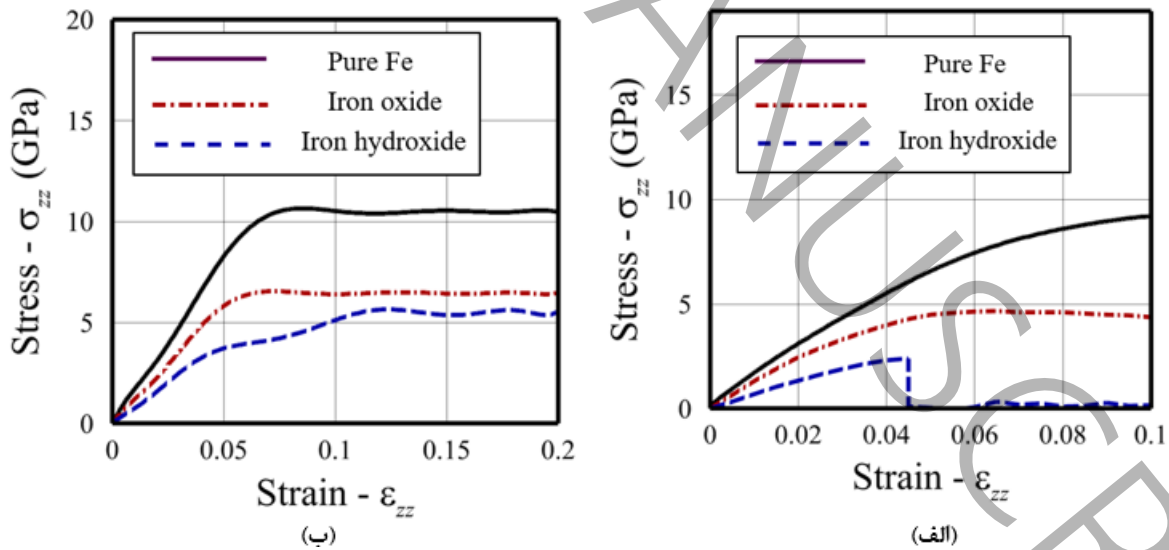


شکل ۵. نمودار تابع توزیع شعاعی مربوط به المان حجمی نمونه پایدارسازی شده برای (الف) اکسید آهن و (ب) هیدروکسید آهن در پیکربندی اولیه اتمی.

Figure 5. Radial distribution function plot for the stabilized representative volume element for (a) iron oxide and (b) iron hydroxide in the initial atomic configuration.

در شکل (۵-ب)، نمودار تابع توزیع شعاعی مربوط به اتم‌های مختلف در نمونه شامل هیدروکسید آهن ارائه شده است. براساس شکل، پیک $Fe-O$ که در فاصله خاصی از نمودار قرار دارد که نشان‌دهنده پیوند کووالانسی قوی بین اتم‌های آهن و اکسیژن در ساختار است و بیانگر شبکه بلوری منظم در لایه‌ها می‌باشد. با این حال، شدت این پیک ($g(r) \approx 6-7$) کمتر از نمونه اکسید خالص است که نشان می‌دهد وجود اتم‌های هیدروژن باعث اختلال در نظم شبکه $Fe-O$ شده و پیوندهای $Fe-O-H$ جایگزین برخی از پیوندهای $Fe-O$ شده‌اند. این تغییر ساختاری، دلیل اصلی کاهش بیشتر خواص مکانیکی در نمونه‌های هیدروکسید شده است. پیک $Fe-H$ فاصله بین اتم‌های آهن و هیدروژن را نشان می‌دهد که به تعاملات ضعیف‌تر، از جمله نیروهای بین‌مولکولی، مربوط است. انرژی این تعاملات به مراتب کمتر از پیوندهای $Fe-O$ است و همین موضوع توضیح می‌دهد که چرا هیدروکسیداسیون منجر به کاهش بیشتر در خواص مکانیکی نسبت به اکسیداسیون می‌شود. پیک $H-H$ که بالاترین مقدار را دارد، به دلیل تراکم بالای اتم‌های هیدروژن در پیوندهای هیدروژنی و نظم آنها در ساختار است. این پیک قوی نشان می‌دهد که اتم‌های هیدروژن تمایل به تشکیل خوشه‌های موضعی دارند که می‌تواند منجر به ناهمگنی در توزیع خواص مکانیکی شود. پیک $O-H$ نیز نمایانگر پیوندهای هیدروژنی قوی بین اکسیژن و هیدروژن است که این پیوندها نقش مهمی در پایداری لایه‌ها ایفا می‌کنند. با این حال، پیوندهای هیدروژنی، انرژی پیوند به مراتب ضعیف‌تر از پیوندهای کووالانسی $Fe-O$ هستند و تحت تنش‌های مکانیکی، به راحتی شکسته می‌شوند که این موضوع رفتار ترد و کاهش مقاومت نمونه‌های هیدروکسید شده را توجیه می‌کند. علاوه بر این، پیک $O-O$ و $Fe-Fe$ به ترتیب تعاملات بین اکسیژن‌ها و آهن‌ها را در ساختار لایه‌ای ماده نشان می‌دهند که این تعاملات موجب تقویت نظم کوتاه‌برد و بلندبرد در نمونه هیدروکسید آهن می‌شود. این تحلیل نشان می‌دهد که نمونه هیدروکسید آهن شامل ترکیبی از پیوندهای قوی کووالانسی و هیدروژنی و تعاملات بین‌مولکولی ضعیف‌تر است که پایداری و خواص لایه‌ای این ماده را تضمین می‌کند.

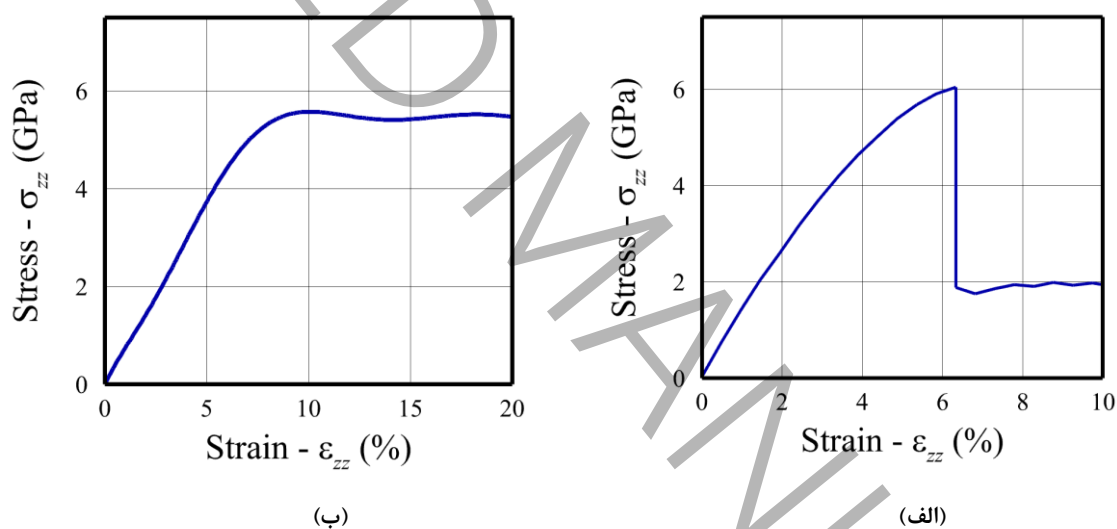
به منظور مقایسه رفتار مکانیکی نمونه‌های شامل آهن، اکسید آهن و هیدروکسید آهن، نمونه‌ها تحت آزمون کشش و فشار تک‌محوری به صورت شبه‌استاتیکی قرار گرفته و پاسخ‌های آن‌ها در قالب نمودار تنش- کرنش در شکل (۶) ارائه شده است. همان‌طور که در نمودارهای این شکل مشاهده می‌شود، رفتار تنش-کرنش در ناحیه الاستیک برای تمامی نمونه‌ها قابل تشخیص است. نمونه آهن خالص بیشترین مقاومت تسلیم را در کشش و فشار نشان می‌دهد و نمودار آن دارای شیب اولیه بیشتری است که بیانگر مدول یانگ بالاتر است. این مقادیر بالا در آهن خالص به دلیل وجود پیوندهای فلزی قوی و قابلیت حرکت آزاد الکترون‌ها در شبکه بلوری BCC است که امکان توزیع یکنواخت تنش و فعال شدن سیستم‌های لغزش متعدد را فراهم می‌کند. در مقابل، نمونه‌های اکسید آهن و هیدروکسید آهن مقاومت کمتری دارند و نمودار آن‌ها در ناحیه الاستیک زودتر به حد تسلیم می‌رسد. دلیل کاهش شیب نمودار تنش-کرنش در این مواد به این نکته برمی‌گردد که پیوندهای بین اتم‌ها در اکسید و هیدروکسید آهن، برخلاف پیوندهای فلزی قوی در آهن خالص، بیشتر شامل پیوندهای یونی و کووالانسی هستند که انعطاف‌پذیری کمتری دارند. این پیوندها تحت تنش، به جای تغییر شکل پلاستیک تدریجی، تمایل به شکست ناگهانی دارند که همین موضوع باعث رفتار ترد و کاهش استحکام می‌شود. در اکسیدها و هیدروکسیدها، وجود اتم‌های اکسیژن و هیدروژن باعث ایجاد نیروهای دافعه بین یون‌ها و کاهش استحکام پیوند می‌شود. این ساختارهای شکننده‌تر، مانع انتقال نیرو در سراسر شبکه بلوری می‌شوند و در نتیجه، ماده در برابر تغییر شکل کمتر مقاومت می‌کند. علاوه بر این، تعداد محدودتر الکترون‌های آزاد برای جابجایی در ساختارهای غیر فلزی مانند اکسید و هیدروکسید، دلیل دیگری برای کاهش مدول یانگ و شیب اولیه نمودار است. نتایج ارائه شده در شکل (۶) به وضوح به تفاوت رفتار مکانیکی آهن خالص با اکسید و هیدروکسید آهن دلالت دارند و بیانگر آن است که وجود لایه‌های اکسید و هیدروکسید آهن می‌تواند به میزان محسوسی می‌تواند رفتار مکانیکی نانومیله‌های آهن را که دارای قطر کمی هستند، تحت تاثیر قرار دهند.



شکل ۶. نمودارهای تنش-کرنش المان حجمی نمونه تحت آزمون (الف) کشش و (ب) فشار تک‌محوری

Figure 6. Stress-strain curves of the representative volume element under test: (a) uniaxial tension and (b) uniaxial compression.

پس از بررسی رفتار مکانیکی نمونه خالص آهن، اکسید آهن و هیدروکسید آهن، در این قسمت به بررسی رفتار مکانیکی میله نازک فولادی با لایه سطحی اکسید و هیدروکسید پرداخته می‌شود. براساس روش بیان شده در قسمت قبل، ساختار اولیه میله نازک فولادی با لایه سطحی ایجاد گردیده و رفتار مکانیکی آن‌ها ارزیابی می‌شود. در این راستا، در شکل (۷) نمودار تنش- کرنش میله نازک فولادی تحت آزمون کشش و فشار تک‌محوری ارائه شده است. همچنین تصاویری از تغییر شکل نمونه در طول مراحل مختلف بارگذاری در شکل (۸) ارائه شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود، رفتار میله نازک فولادی در طی تغییر شکل را می‌توان به سه ناحیه اصلی تقسیم می‌شود. در ناحیه اول، تا کرنش حدود ۳ درصد، ماده رفتار الاستیک خطی از خود نشان می‌دهد. در این محدوده، تنش و کرنش رابطه خطی دارند که نشان‌دهنده رفتار خطی ماده و بازگشت پذیری کامل ساختار به حالت اولیه پس از حذف بار است. پس از کرنش ۳ درصد و تا حدود کرنش ۷ درصد، ماده وارد ناحیه الاستیک غیرخطی می‌شود. در این ناحیه، رابطه تنش و کرنش از حالت خطی خارج می‌شود. این رفتار ناشی از تغییرات تدریجی در ساختار اتمی ماده است، جایی که لغزش‌ها و تغییرات میکروسکوپی در نواحی بحرانی ساختار آغاز می‌شود. با این حال، ماده همچنان توانایی تحمل تنش را دارد و می‌تواند بدون ورود به

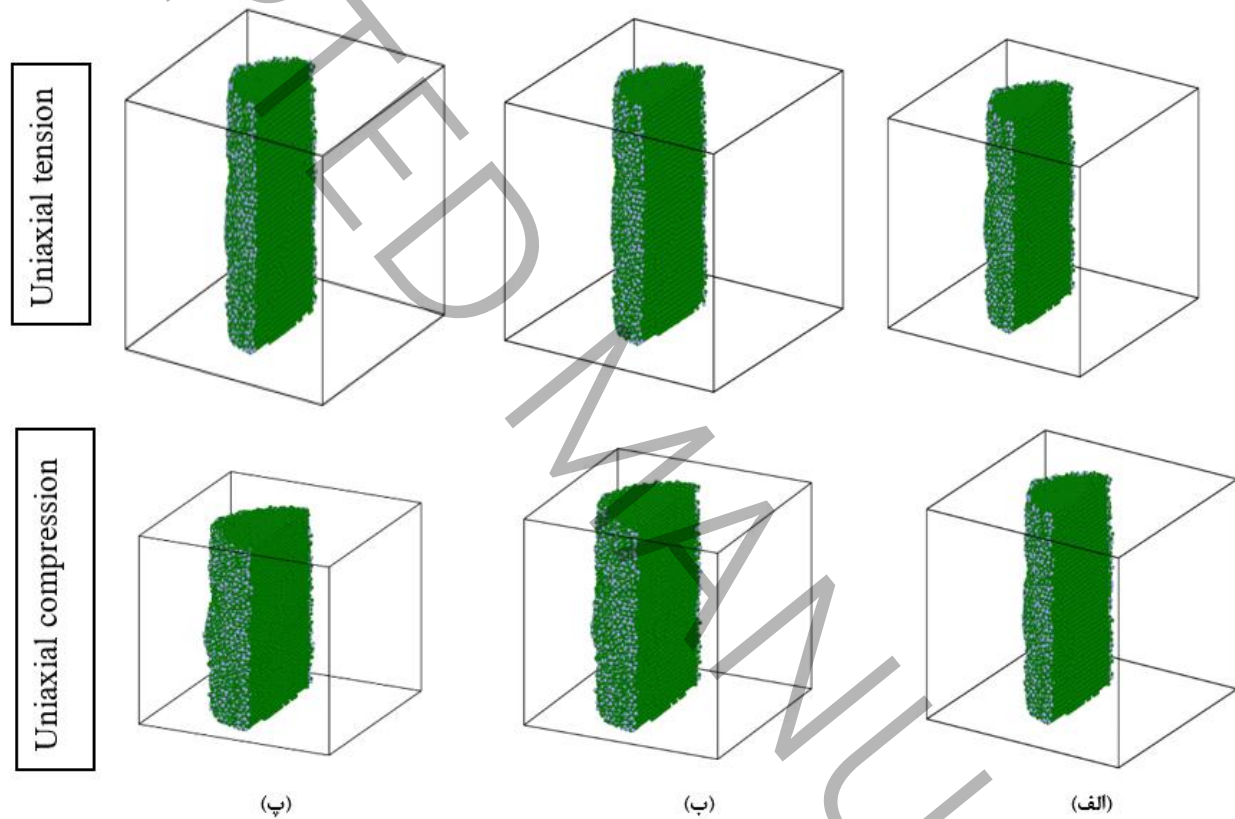


شکل ۷. نمودارهای تنش-کرنش میله نازک فولادی دارای ۱۵ درصد ضخامت لایه اکسید سطحی تحت آزمون (الف) کشش و (ب) فشار تک‌محوری

Figure 7. Stress-strain curves of a steel nanofiber with a 15 % thick surface oxide layer under test: (a) uniaxial tension and (b) uniaxial compression.

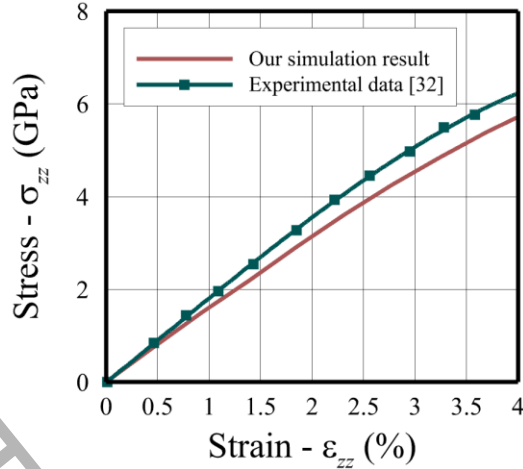
ناحیه پلاستیک به حالت اولیه بازگردد. در این ناحیه، شروع فعالیت‌های نابجایی در فصل مشترک هسته-پوسته رخ می‌دهد. تصاویر اتمی (شکل ۸-ب) نشان می‌دهد که در کرنش ۳٪، نابجایی‌های جزئی از هسته فلزی به سمت فصل مشترک حرکت می‌کنند اما به دلیل وجود لایه اکسیدی، نمی‌توانند به سطح نفوذ کنند و در فصل مشترک تجمع می‌یابند. این تجمع نابجایی‌ها منجر به ایجاد تنش‌های موضعی زیاد می‌شود که زمینه را برای شکست آماده می‌کند. همچنین، در این ناحیه شروع ترک‌های ریز در لایه اکسیدی مشاهده می‌شود. این ترک‌ها ابتدا در نقاطی با نقص‌های ساختاری (که ۶٪ نقص نقطه‌ای اعمال شده) شروع شده و به تدریج گسترش

می‌یابند. انرژی لازم برای رشد این ترک‌ها در اکسید آهن به مراتب کمتر از آهن خالص می‌باشد. پس از کرنش حدود ۷ درصد، افت ناگهانی و شدیدی در مقدار تنش مشاهده می‌شود. این افت ناشی از آغاز شکستگی موضعی و فروپاشی برخی از نواحی بحرانی ساختار است که در آن تمرکز تنش به حد بحرانی رسیده و منجر به ایجاد گسیختگی یا لغزش‌های غیرقابل بازگشت در ساختار می‌شود. تحلیل انرژی پتانسیل نشان می‌دهد که در این مرحله، انرژی کرنشی ذخیره شده در لایه اکسیدی به صورت ناگهانی آزاد می‌شود و به شکل امواج تنش به هسته فلزی منتقل می‌گردد. این آزادسازی ناگهانی انرژی، باعث فعال شدن همزمان چندین سیستم لغزش در هسته فلزی و شروع تغییر شکل پلاستیک شدید می‌شود. مقایسه با نمونه بدون لایه اکسید نشان می‌دهد که در آن نمونه،



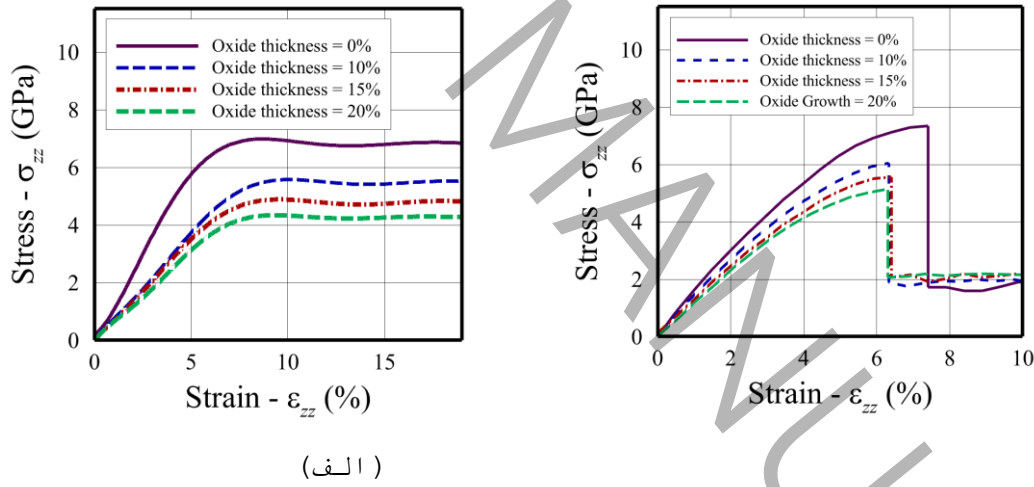
شکل ۸. تصاویری از تغییر شکل میله نازک فولادی تحت آزمون کشش و فشار تک‌محوری در کرنش‌های (الف) صفر، (ب) ۳ و (پ) ۷ درصد. (گوی سبز رنگ آهن و آبی رنگ اکسیژن بوده و برای نمایش بهتر تغییر شکل، تصاویر میله‌ها به صورت برش خورده از وسط ارائه شده است.)

Figure 8. Snapshots of the deformation of a steel nanofiber under uniaxial tension and compression at strains of (a) 0 %, (b) 3 %, and (c) 7 %.



شکل ۹. مقایسه نمودار تنش- کرنش برای نمونه شبیه‌سازی شده در این پژوهش و داده آزمایشگاهی موجود در مرجع [۳۲] تحت آزمون کشش.

Figure 9. Comparison of stress-strain curves for the simulated sample in this study and the experimental data from reference [32] under tension testing.



شکل ۱۰. نمودارهای تنش-کرنش میله‌های نازک فولادی با درصد مختلف از ضخامت لایه اکسید سطحی تحت آزمون (الف) کشش و (ب) فشار تک‌محوری.

Figure 10. Stress-strain curves of steel nanofibers with different percentages of surface oxide-layer thickness under (a) uniaxial tension and (b) uniaxial compression tests.

تغییر شکل پلاستیک به صورت تدریجی و یکنواخت رخ می‌دهد و افت تنش مشاهده نمی‌شود. این تفاوت رفتار، نشان‌دهنده نقش منفی لایه اکسیدی در ایجاد ناپایداری مکانیکی و تسریع شکست است. به منظور بررسی صحت‌سنجی نمونه‌های شبیه‌سازی شده،

نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی در این مطالعه با نتایج آزمایشگاهی ارائه‌شده در پژوهش برنر^۱ و همکاران [۳۲] در شکل (۹) مورد مقایسه قرار گرفته است. همان‌طور که در شکل مشخص است، نمونه‌های شبیه‌سازی‌شده در این تحقیق تطابق بسیار مناسبی با داده‌های مطالعه آزمایشگاهی نشان می‌دهند. این انطباق، نشان‌دهنده دقت بالای مدل‌سازی عددی و صحت روش‌های شبیه‌سازی به‌کاررفته در این پژوهش است.

جدول ۲. پارامترهای مکانیکی میله‌های نازک فولادی با درصد مختلف از ضخامت لایه اکسید تحت آزمون کشش تک‌محوری

Table 2. Mechanical properties of steel nanofiber with different percentages of oxide layers under uniaxial tensile test.

Young's modulus drop (%) compared to oxide-free samples	ultimate stress drop (%) compared to oxide-free samples	Ultimate strain (%)	Ultimate stress (GPa)	Young's modulus (GPa)	Thickness of the oxide layer
-	-	7.87	7.42	138.3	0%
5.35	19.94	6.34	5.94	130.9	13.8%
7.88	25	6.38	5.56	127.4	16.7%
16.95	30.8	6.3	5.15	114.85	20%

به‌طور کلی لایه اکسید یکی از عوامل مهم در تغییر خواص مکانیکی و استحکام نهایی مواد، به ویژه در مواد فلزی مانند فولاد است، زیرا می‌تواند باعث تردی و نقص‌های سطحی در ماده شود. به ویژه در مواد نانو مقیاس، اثرات لایه اکسید به دلیل نسبت بالای سطح به حجم بیشتر مشهود است. براین اساس ضخامت و ویژگی‌های لایه اکسید نقش مهمی در تغییر خواص مکانیکی ماده ایفا می‌کند. در شکل (۱۰) نمودارهای تنش-کرنش مربوط به میله‌های نازک فولادی با ضخامت‌های مختلف از لایه اکسیدی تحت آزمون کشش و فشار تک‌محوری ارائه شده است همانگونه که مشاهده می‌شود، میله‌ها در حضور لایه اکسیدی به‌طور قابل توجهی با کاهش تنش نهایی روبرو می‌شوند. این رفتار به دلیل خواص مکانیکی ضعیف‌تر و شکننده‌تر لایه اکسیدی نسبت به ماده اصلی فولاد است. لایه اکسیدی در هنگام اعمال بار نمی‌تواند تنش‌ها را به خوبی ماده اصلی تحمل کند و در نتیجه، باعث کاهش مقاومت کلی نمونه می‌شود. هرچه ضخامت لایه اکسیدی بیشتر باشد، سهم آن در تحمل نیروهای اعمالی افزایش می‌یابد، اما به دلیل مقاومت کمتر، شکست ساختاری زودتر رخ داده و تنش تسلیم و نهایی کاهش بیشتری پیدا می‌کند. نکته قابل توجه در نمودار کرنش-تنش این است که به دلیل بارگذاری جزء به جزء، نقاط تنها پس از هر گام فرآیند ثبت می‌شود. این موضوع باعث می‌شود که نمودار تقریباً دارای کرنش تسلیم یکسانی باشند، در حالی که اختلافات اندکی در کرنش واقعی تسلیم وجود دارد. به منظور بررسی دقیق‌تر، پارامترهای مختلف مکانیکی شامل مدول یانگ، تنش نهایی، کرنش تسلیم و میزان درصد افت تنش تسلیم و مدول یانگ نمونه‌های اکسید شده نسبت

^۱ Brenner

به نمونه‌های بدون لایه اکسید در نمونه‌های مختلف تحت بارگذاری کششی و فشاری به ترتیب در جداول (۲) و (۳) ارائه شده است. در این جداول میزان درصد افت، بیانگر مقدار تأثیر لایه اکسید بر روی نمودار تنش-کرنش نمونه‌ها است. این میزان افت به خوبی نشان‌دهنده تأثیر پوسته اکسید بر روی خواص مکانیکی نمونه‌ها و تغییرات آن‌ها در مقایسه با نمونه‌های بدون اکسید است. همانگونه که مشاهده می‌شود، به وضوح مدول یانگ، تنش نهایی، کرنش تسلیم با درصد لایه اکسید رابطه عکس داشته و به میزان محسوسی تحت تأثیر قرار می‌گیرند. دلایل فیزیکی این رفتار عبارتند از: با افزایش ضخامت لایه اکسیدی، سهم ماده ضعیف‌تر (اکسید) در تحمل بار افزایش می‌یابد؛ طول فصل مشترک هسته-پوسته و در نتیجه تعداد نقاط تمرکز تنش افزایش می‌یابد و مسیر انتقال بار از سطح به هسته فلزی طولانی‌تر می‌شود و احتمال شکست زودرس افزایش می‌یابد. همچنین، تفاوت قابل توجه بین رفتار کششی و فشاری نشان می‌دهد که لایه اکسیدی در برابر بارهای فشاری آسیب‌پذیرتر است. دلیل این موضوع آن است که بارگذاری فشاری منجر به کماتش موضع و شکست زودرس در لایه اکسیدی می‌شود، در حالی که در بارگذاری کششی، لایه اکسیدی می‌تواند تا حدودی در تحمل بار مشارکت کند. بررسی داده‌های جداول نشان می‌دهد که رابطه بین ضخامت لایه اکسیدی و کاهش خواص مکانیکی تقریباً خطی است به نحوی که هر ۱٪ افزایش در ضخامت لایه اکسیدی، به طور متوسط منجر به کاهش ۰/۸-۰/۹٪ در مدول یانگ و ۱/۵-۱/۷٪ در تنش نهایی می‌شود.

جدول ۳. پارامترهای مکانیکی میله‌های نازک فولادی با درصد مختلف از ضخامت لایه اکسید تحت آزمون فشار تک‌محوری

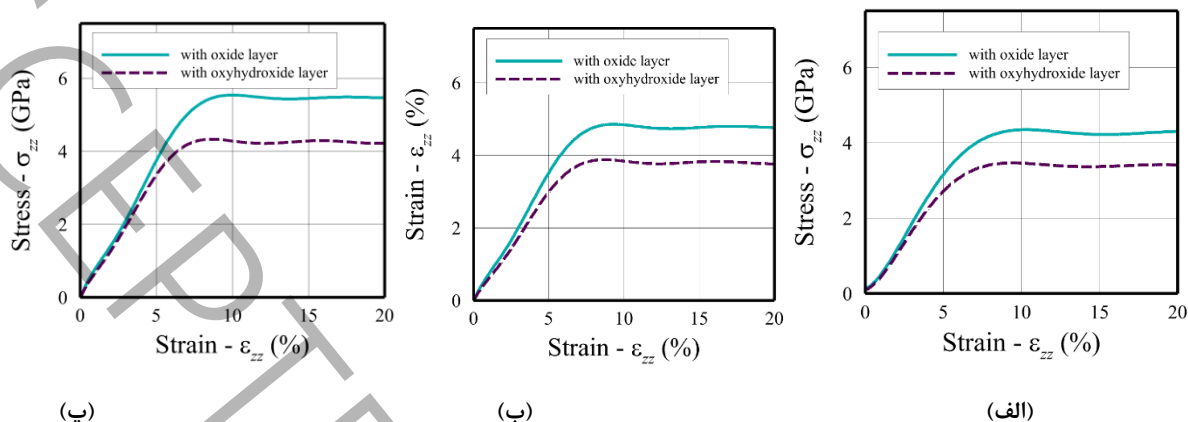
Table 3. Mechanical properties of steel nanofiber with different percentages of oxide layer under uniaxial compression test

Young's modulus drop (%) compared to oxide-free samples	Yield stress drop (%) compared to oxide-free samples	Yield strain (%)	Yield stress (GPa)	Young's modulus (GPa)	Thickness of the oxide layer
-	-	5.86	6.6	104.51	0%
30.34	17.2	7.6	5.46	72.8	13.8%
34.55	27.12	7.1	4.81	68.4	16.7%
40.96	34.5	7	4.32	61.7	20%

جدول ۴. پارامترهای مکانیکی میله‌های نازک فولادی اکسی هیدروکسید شده تحت آزمون فشار تک‌محوری

Table 4. Mechanical properties of oxy-hydroxide steel nanofiber under uniaxial compression test

Young's modulus drop (%) compared to oxide samples	Yield stress drop (%) compared to oxide samples	Yield stress (GPa)	Young's modulus (GPa)	Oxyhydroxide samples
10.16	21.9	4.26	65.4	Contains 13.8% oxide
14.61	20.83	3.8	58.4	Contains 16.7% oxide



شکل ۱۱. نمودارهای تنش- کرنش میله‌های نازک فولادی اکسی هیدروکسید شده حاوی (الف) ۱۰٪، (ب) ۱۵٪، (پ) ۲۰٪ اکسید تحت آزمون فشار تک‌محوری.

Figure 11. Stress–strain curves of oxy-hydroxidized steel nanofibers containing (a) 10%, (b) 15%, and (c) 20% oxide under uniaxial compression testing.

پس از انجام بررسی تاثیر لایه اکسید سطحی بر رفتار مکانیکی میله نازک فولادی، نمونه‌ها تحت فرآیند هیدراتاسیون قرار داده شده و تأثیر هیدراتاسیون و فرآیندهای مرتبط با آن بر خواص مکانیکی نمونه‌ها ارزیابی می‌شود. در این مرحله، پیش از بارگذاری مجدداً نمونه‌ها را پایدار نموده تا تنش‌هایی که در حین هیدراتاسیون به واسطه تغییرات حجمی و توزیع مجدد اتم‌ها به وجود آمده بودند، از بین برود و سپس، نمونه‌ها تحت آزمون فشار تک‌محوری قرار داده می‌شوند. در شکل (۱۱)، نمودارهای مقایسه‌ای تنش-کرنش برای نمونه‌های اکسید شده در درصد‌های مختلف، قبل و بعد از فرآیند هیدراتاسیون آورده شده است. در این نمودارها، تغییرات خواص مکانیکی ناشی از ایجاد لایه هیدروکسید به وضوح مشاهده می‌شود. بررسی این نمودارها نشان می‌دهد که هیدراتاسیون تأثیر قابل توجهی بر رفتار مکانیکی نمونه‌ها داشته و تغییراتی در تنش و کرنش قابل تحمل آن‌ها ایجاد کرده است. به منظور بررسی بهتر در جدول (۴) مشخصات مکانیک نمونه‌های اکسی هیدروکسید شده شامل تنش تسلیم، مدول یانگ و میزان درصد افت تنش تسلیم و مدول یانگ نسبت به نمونه اکسید شده می‌باشد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، اکسی هیدروکسید شدن نمونه‌ها باعث افت تنش می‌شود. این کاهش تنش ناشی از تشکیل پیوندهای ضعیف‌تر و ناپایدارتر در ساختار هیدروکسید است که توانایی ماده را برای تحمل بار مکانیکی کاهش می‌دهد. این کاهش اضافی مقاومت می‌تواند ناشی از عواملی همچون تغییرات ساختاری در سطح اتمی، تضعیف پیوندها، افزایش نقص‌های ساختاری و تأثیر رطوبت و مولکول‌های آب باشد. بررسی دقیق‌تر جدول (۴) نشان می‌دهد که نرخ کاهش خواص به دلیل هیدروکسیداسیون با افزایش ضخامت اولیه لایه اکسیدی کاهش می‌یابد. این روند کاهشی نشان می‌دهد که هیدروکسیداسیون عمدتاً بر لایه‌های سطحی تأثیر می‌گذارد و با افزایش ضخامت کل لایه اکسیدی، عمق نفوذ هیدروکسیداسیون محدودتر می‌شود. به عبارت دیگر، در لایه‌های ضخیم‌تر، بخش داخلی لایه اکسیدی (نزدیک به فصل مشترک با هسته فلزی) تحت تأثیر هیدروکسیداسیون قرار نمی‌گیرد و خواص اولیه خود را حفظ می‌کند. براین اساس در صورت استفاده از الیاف نازک فولادی

بایستی تاثیر لایه اکسید و هیدراکسید سطحی بر رفتار مکانیکی نمونه‌ها در نظر گرفته شود و عدم لحاظ نمودن این امر می‌تواند خطای قابل ملاحظه‌ایی را در برداشته باشد. یافته‌های این پژوهش در راستای مطالعات تجربی پیشین قرار دارد که نشان داده‌اند استفاده از الیاف فولادی و پلی پروپیلن می‌تواند عملکرد سازه‌های بتنی را به‌ویژه در شرایط محیطی سخت بهبود بخشد. با این حال، نتایج این تحقیق تأکید می‌کند که در طراحی بتن مسلح با نانوالیاف فولادی، باید تأثیر منفی فرآیندهای اکسیداسیون و هیدروکسیداسیون در محیط قلیایی بتن بر کاهش خواص مکانیکی این الیاف در نظر گرفته شود. این موضوع به‌ویژه در کاربردهای خاص نظیر تراورس‌های بتنی [۳۳] یا سازه‌های در معرض دماهای بالا [۳۴، ۳۵] که احتمال تشدید فرآیندهای خوردگی و تخریب سطحی وجود دارد، اهمیت بیشتری می‌یابد. در مطالعات آتی، تأثیر ترکیبی دما، رطوبت و pH محیط بر روی کاهش طول مدت خواص مکانیکی نانوالیاف فولادی در بتن مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، تأثیر اکسیداسیون و هیدروکسیداسیون سطحی بر خواص مکانیکی نانوالیاف فولادی تحت بارگذاری کششی و فشاری با استفاده از روش دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل نشان داد که تشکیل لایه اکسیدی در سطح نانوالیاف فولادی منجر به کاهش مدول یانگ، تنش تسلیم و استحکام نهایی نمونه‌ها می‌شود. به‌طور مشخص، در نمونه‌ای با ضخامت ۲۰ درصد لایه اکسید، مدول یانگ از مقدار اولیه ۱۳۸/۳ گیگاپاسکال به ۱۱۴/۸۵ گیگاپاسکال کاهش یافت که معادل افت ۱۶/۹۵ درصدی است. همچنین، تنش نهایی این نمونه در مقایسه با نمونه بدون اکسید، ۸/۳۰ درصد کاهش را نشان داد.

علاوه بر این، بررسی اثر هیدروکسیداسیون بر رفتار مکانیکی نمونه‌ها نشان داد که این فرآیند موجب تضعیف بیشتر خواص مکانیکی می‌شود. در نمونه‌ای با ۲۰ درصد لایه اکسید، تبدیل این لایه به هیدروکسید منجر به کاهش مدول یانگ از ۱۱۴/۸۵ گیگاپاسکال به ۵۲/۴ گیگاپاسکال شد که بیانگر افت ۱۵/۰۷ درصدی است. همچنین، تنش تسلیم این نمونه نسبت به نمونه اکسیدشده، ۲۰/۶ درصد کاهش یافت. این تغییرات نشان‌دهنده اثر نامطلوب فرآیندهای سطحی بر استحکام مکانیکی نانوالیاف فولادی، به‌ویژه در محیط‌های مرطوب و قلیایی است.

به‌طور کلی، نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که هرچه ضخامت لایه اکسیدی افزایش یابد، میزان افت استحکام مکانیکی نیز تشدید می‌شود و این اثر در حضور فرآیند هیدروکسیداسیون برجسته‌تر است. این یافته‌ها بر اهمیت کنترل شرایط سطحی نانوالیاف فولادی در محیط‌های صنعتی و سازه‌ای تأکید دارند. همچنین، مقایسه نتایج عددی با داده‌های آزمایشگاهی تطابق قابل قبولی را نشان داد که اعتبار روش مدل‌سازی استفاده‌شده را تأیید می‌کند. بر این اساس، در طراحی و کاربرد نانوالیاف فولادی، به‌ویژه در محیط‌های قلیایی مانند بتن، توجه به کنترل و بهینه‌سازی فرآیندهای اکسیداسیون و هیدروکسیداسیون ضروری است تا عملکرد مکانیکی مطلوب‌تری حاصل شود.

منابع و مراجع

1. W. Abbass, M. Iqbal Khan, M. Shehab. "Evaluation of mechanical properties of steel fiber reinforced concrete with different strengths of concrete." *Construction and Building Materials* 168 (2018): 556-569.
2. F.P. Bos, E. Bosco, T. Salet. "Ductility of 3D printed concrete reinforced with short straight steel fibers." *Virtual and Physical Prototyping* 14 (2019): 160–174.
3. L. Pham, P. Tran, J. Sanjayan. "Steel fibres reinforced 3D printed concrete: Influence of fibre sizes on mechanical performance." *Construction and Building Materials* 260 (2020): 118785.
4. A. Rezaei Sameti, A. Mousivand. "Size, temperature, and point defect effects on surface oxidation kinetics and mechanical properties of iron nanowires under quasi-static loading." *Materials Today Communications* 48 (2025): 113514.
5. A. Rezaei Sameti, A. Mousivand. "Influence of surface hydroxylation on the mechanical properties of iron nanopillars containing different thicknesses of pre-oxide layers." *Journal of Materials Chemistry and Physics* 348 (2026): 131599.
6. G. Aral, Y. Wang, S. Ogata, A. van Duin. "Effects of oxidation on tensile deformation of iron nanowires." *Journal of Applied Physics* 120 (2016): 135104.
7. N. Kumar, M. Aufan, J. Gattacceca, J. Rose, L. Olivi, D. Borschneck, P. Kvapil, M. Jublot, D. Kaifas, L. Malleret, P. Doumenq, J. Bottero. "Molecular insights of oxidation process of iron nanoparticles: spectroscopic, magnetic, and microscopic evidence." *Environmental Science & Technology* 48 (2014): 13888–13894.
8. G. Aral, M.M. Islam, Y. Wang, S. Ogata, A. van Duin. "Oxyhydroxide of metallic nanowires in molecular H₂O and H₂O₂ environments and their effects on mechanical properties." *Physical Chemistry Chemical Physics* 20 (2018): 21763.
9. H. DorMohammadi, Q. Pang, P. Murkute, L. Árnadóttir, O. Isgor. "Investigation of iron passivity in highly alkaline media using reactive-force field molecular dynamics." *Corrosion Science* 157 (2019): 31–40.
10. G. Aral. "Oxide shell layer influences on size-dependent tensile and compressive mechanical properties of iron nanowires: a ReaxFF molecular dynamics study." *Journal of Applied Physics* 126 (2019): 135109.
11. P. Landau, Q. Guo, P. Hosemann, Y. Wang, J. Greer. "Deformation of as-fabricated and helium implanted 100 nm-diameter iron nano-pillars." *Materials Science and Engineering A* 612 (2014): 316–325.
12. B. Rogne, C. Thaulow. "Strengthening mechanisms of iron micropillars." *Philosophical Magazine* 615 (2014): 133–142.
13. A.R. Khoei, B. Khajepour, A. Rezaei Sameti. "Surface oxidization effect on the mechanical behavior of aluminum nanopowders under triaxial compression test." *Applied Surface Science* 606 (2022): 154907.
14. A. Dutta. "Compressive deformation of Fe nanopillar at high strain rate: modalities of dislocation dynamics." *Acta Materialia* 125 (2016): 219–230.
15. G. Sainath, B. Choudhary. "Orientation dependent deformation behaviour of BCC iron nanowires." *Computational Materials Science* 11 (2016): 406–415.

16. Q. Wu, Y. Wang, T. Han, H. Wang, L. Han, L. Bao. "Molecular dynamics simulations of the effect of temperature and strain rate on the plastic deformation of body-centered cubic iron nanowires." *Journal of Engineering Materials and Technology* 143 (2021): 031007.
17. A. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, W. Goddard. "ReaxFF: a reactive force field for hydrocarbons." *Journal of Physical Chemistry A* 105 (2001): 9396–9409.
18. M. Aryanpour, A. van Duin, J. Kubicki. "Development of a reactive force field for iron-oxyhydroxide systems." *Journal of Physical Chemistry A* 114 (2010): 6298-6307.
19. L. Thijs, E. Kritikos, A. Giusti, M. van Ende, A. van Duin, X. Mi. "Effect of Fe–O ReaxFF on Liquid Iron Oxide Properties Derived from Reactive Molecular Dynamics." *Journal of Physical Chemistry A* 127 (2023): 10339–10355.
20. O. Kovtun, M. Levchenko, S. Höntschi, L. Lohmeier, M. Schreiner, M. Gräbner, O. Volkova. "Recycling of iron-rich basic oxygen furnace dust using hydrogen-based direct reduction." *Resources, Conservation & Recycling Advances* 23 (2024): 200225.
21. G. Barcaro, S. Monti. "Modeling generation and growth of iron oxide nanoparticles from representative precursors through ReaxFF molecular dynamics." *Nanoscale* 12 (2020): 3103-3111.
22. A. Rezaei Sameti, A. Mousivand. "The influence of diameter on the strength and ductility of BCC iron nanowire under axial loading: A reactive molecular dynamics simulation." *Physica B* 713 (2025): 417402
23. L. Wang, M. Li, Z. Li, X. Xu, M. Wang, P. Wang, X. Hu, Y. Zhang, X. Wang. "Mechanical properties and microstructure of reinforced passivation film: a reactive molecular dynamics study." *Frontiers in Materials* 7 (2020): 523126.
24. A.R. Khoei, M. Vafaei Sefti, A. Rezaei Sameti. "Reactive molecular dynamics analysis of alumina nano-powders under warm compaction process." *Advanced Powder Technology* 35 (2024): 104702.
25. A.R. Khoei, A.M. Orvati Movaffagh, A. Rezaei Sameti. "Thermo-mechanical characteristics of oxide-coated aluminum nano-powder." *International Journal of Thermal Sciences* 197 (2024): 108767.
26. A.R. Khoei, A. Rezaei Sameti, Z. Kazempour, A. Ghafouri Pourkermani. "Mechanical characteristics of die-wall friction on the compaction process of metal nano-powders." *Powder Technology* 444 (2024): 119987.
27. A. Rezaei Sameti, F. Forughian. "Effects of temperature and point defects on the mechanical behavior of Ni-Rich NiTi shape memory alloy under Quasi-Static uniaxial loading." *Applied Physics A* (2025): 131-748.
28. A.R. Khoei, P. Palahang, A. Rezaei Sameti. "Tribological properties of alkanes in confined systems; A molecular dynamics analysis of nano-powder compaction processes." *Powder Technology* 467 (2026): 121480
29. S. Plimpton. "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics." *Journal of Computational Physics* 117 (1995): 1-19.
30. A. Stukowski. "A triangulation-based method to identify dislocations in atomistic models." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 70 (2014): 314-319.

31. B. Khanh, V. Hoang, H. Zung. "Structural properties of amorphous Fe₂O₃ nanoparticles." *The European Physical Journal D* 49 (2008): 325–332.
32. S. Brenner. "Tensile strength of whiskers." *Journal of Applied Physics* 27 (1956): 1484–1491.
33. G. Pachideh, M. Gholhaki. "Using steel and polypropylene fibres to improve the performance of concrete sleepers." *Proceedings of the Institution of Civil Engineers-Structures and Buildings* 173 (2019): 690-702.
34. M. Khalily, V. Saberi, H. Saberi, V. Mansouri, A. Sadeghi, G. Pachideh. "An Experimental Study on the Effect of High Temperatures on Performance of the Plastic Lightweight Concrete Containing Steel, Polypropylene and Glass Fibers." *Journal of Structural and Construction Engineering* 8 (2022): 284-307. In Persian
35. G. Pachideh, M. Gholhaki. "An experimental study on the effects of adding steel and polypropylene fibers to concrete on its resistance after different temperatures." *Journal of Testing and Evaluation* 47 (2019): 1606-1620.