



مطالعه دینامیک نانوحفره با در نظر گرفتن مدول یانگ و انرژی تشکیل حفره وابسته به دما با استفاده از روش میدان فاز در نیکل

محمدصادق قائدی^۱، مهدی جوانبخت^{۲*}

^۱ گروه مهندسی مکانیک، پردیس دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران.
^۲ دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران.

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۸/۰۱/۳۱
بازنگری: ۱۳۹۸/۰۶/۱۷
پذیرش: ۱۳۹۸/۰۶/۳۱
ارائه آنلاین: ۱۳۹۸/۰۷/۰۶

کلمات کلیدی:

نانوحفره
میدان فاز
معادلات کوپل کان - هیلپارد و الاستیسیته
روش اجزای محدود.

خلاصه: در این مقاله، روش میدان فازی به منظور مطالعه رشد و از بین رفتن نانوحفره‌ها تحت دما و بار مکانیکی مورد استفاده قرار گرفته است. بدین منظور، معادلات سینتیک کان - هیلپارد یا نفوذ و معادلات الاستیسیته ایستایی بر پایه کرنش‌های کوچک با یکدیگر کوپل گردیده و با استفاده از روش اجزای محدود غیرخطی در فضای کارترین دو بعدی حل شده‌اند. این کوپلینگ از طریق حضور انرژی کرنشی در تابع انرژی آزاد کان - هیلپارد و وابستگی کرنش کل به کرنش غیرالاستیک حفره صورت می‌پذیرد. نکته جدید و قابل توجه در مدل‌سازی فیزیکی حاضر، لحاظ نمودن وابستگی هم‌زمان خواص الاستیک و انرژی تشکیل حفره به دما است و بر این اساس شبیه‌سازی‌هایی بر روی تغییرات نانو ساختار حفره شامل صفحه مشترک گاز- جامد خطی، رشد یا از بین رفتن نانوحفره دایره‌ای در دماهای مختلف، رشد یا از بین رفتن نانوحفره دایره‌ای تحت فشار دو محوره و تغییرات نانو ساختار با توزیع تصادفی غلظت حفره مورد مطالعه قرار گرفته است. از نتایج مهم می‌توان به رشد سریع‌تر حفره و مقادیر بالاتر غلظت بدست آمده در دماهای پایین‌تر اشاره نمود. همچنین، میدان توزیع تنش با رشد و از بین رفتن حفره‌ها به خصوص در ناحیه صفحه مشترک گاز- جامد به شدت تغییر می‌یابد و مقدار تنش کل نیز با افزایش غلظت و اندازه حفره تغییر می‌کند.

۱- مقدمه

حالت پایدار نرخ جوانه‌زنی را در تئوری کلاسیک جوانه‌زنی برای عیوب حفره‌ای بدست آوردند. راسل [۶] معادلات نرخ جوانه‌زنی که بستگی به فشار داخلی، انرژی کرنشی و حجم اتم دارد را توسعه داد. او همچنین نشان داد که فشار خارجی تاثیر کمی بر جوانه‌زنی حفره دارد. با استفاده از معادلات نرخ واکنش، مایر و براون [۷] مدلی برای جوانه‌زنی نانوحفره با در نظر گرفتن مهاجرت اتم‌های گاز توسعه دادند. ایمادا [۸] ساختار جوانه‌زنی حفره را به صورت تجزیه اسپینودال در نظر گرفت و شعاع حفره را بر اساس پایداری استاتیکی مشخص نمود. کریشان [۹] ناپایداری اسپینودال غلظت حفره، انتشار عیوب حفره‌ای و برهم‌کنش الاستیک را برای حفره‌ها در نظر گرفت. سمنوف و وو [۱۰] مدل تصادفی برای جوانه‌زنی و رشد حفره تحت تابش بر مبنای تئوری نرخ واکنش را ارائه کردند. نظریه نرخ واکنش وابسته به زمان برای مشاهده تغییرات عیوب حفره‌ای همگن مورد استفاده قرار گرفت [۱۱]. دون و مارتین [۱۲] مدلی را بر اساس نظریه نرخ واکنش برای توصیف تاثیر تابش بر تولید و نابودی حفره در مواد کریستالی پیشنهاد کردند.

حفره‌ها به عنوان یکی از مهم‌ترین عیوب ساختاری، نقش ویژه‌ای در تعیین سینتیک، ترمودینامیک و ساختار مواد ایفا می‌نمایند. حفره‌ها با انجام دسته‌ای از عملیات‌های مکانیکی و شیمیایی به مرور زمان در مواد پدیدار می‌شوند. با توجه به پیدایش و رشد و از بین رفتن حفره‌ها در ابعاد نانو و نیز تعامل پیچیده آن‌ها با یکدیگر و نیز تعامل آن‌ها با دیگر عیوب نظیر اتم‌های جانشین، نابجایی‌ها و غیره در ابعاد نانو، مطالعه تحولات حفره در این ابعاد از اهمیت بسزایی برخوردار است. به ویژه آنکه نانوحفره‌ها در مراحل گوناگون پیدایش و رشد و از بین رفتن می‌توانند به عنوان مکانیزم ایجاد تمرکز تنش و یا آزادسازی تنش در کنار دیگر عیوب نقش بسزایی ایفاکنند [۱]. نانوحفره برای نخستین بار در سال ۱۹۷۰ در نیکل کشف شد [۲]. نانوحفره‌ها بر پایداری و خواص مکانیکی مواد بسیار تاثیرگذار هستند [۳ و ۴]. مدل‌های زیادی بر اساس نظریه نرخ واکنش برای مطالعه جوانه‌زنی و رشد حفره طراحی شدند [۱۲-۱۵]. کاتس و ویدرزیک [۵]

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: javanbakht@cc.iut.ac.ir



در مقایسه با مدل‌های مذکور، نظریه میدان فاز به صورت گسترده‌ای برای توصیف تغییرات نانو و میکرو ساختار مورد استفاده قرار گرفته است. یکی از مزایای عمده روش میدان فاز تعیین و محاسبه سیر تکاملی نانو ساختارها بدون نیاز به حدس و پیش بینی اتفاقات احتمالی و دنبال کردن صفحات مشترک فازی چندگانه است. این روش به عنوان پلی بین روش‌های اتمی مانند دینامیک مولکولی و روش‌های محیط پیوسته، نه تنها قابلیت به دست آوردن نتایج در ابعاد نانو را دارد بلکه از سوی دیگر امکان در نظر گرفتن اندازه نمونه‌ها و زمان‌های حل بسیار بزرگتر نسبت به تحلیل‌های اتمی را می‌دهد. هم چنین، در مقایسه با ترمودینامیک کلاسیک، اطلاعات مربوط به تمامی حالات ابتدا، انتها و میانی را در بر می‌گیرد. از این جهت روش میدان فاز ابزار قدرتمندی برای حل مسائل پیچیده مانند انجماد [۱۳]، جوانه‌زنی و انتشار ترک [۱۴]، تفجوشی [۱۵]، رشد مرزدهانه‌ها [۱۶]، تغییرات نابعایی [۱۷] و بازه‌ی گسترده‌ای از مسائل استحاله فازی می‌باشد [۲۰-۱۸]. معادله معروف کان-هیلیارد برای مدل‌سازی فرآیند جدایش فازها در آلیاژهای دوتایی توسط کان و هیلیارد ارائه گردید و سپس این معادله به شاخه‌های دیگری از علوم فیزیک، شیمی، بیولوژی و سایر زمینه‌های مهندسی از جمله تجزیه اسپینودال، کوپلیم‌دسته‌ای، جریان سیال چندفازی، ریزساختار با الاستیک ناهمسان، مدل‌سازی رشد تومور و بهینه‌سازی توپولوژی گسترش یافت. معادله کان-هیلیارد معادله‌ی غیرخطی دیفرانسیلی با مشتقات جزئی از مرتبه چهارم است که اخیراً برای مدل‌سازی تغییرات حباب و حفره نیز مورد استفاده قرار گرفته است. یو و لو [۲۱] مدل میدان فازی برای دینامیک نانو حفره و نانوحباب ارائه کردند که انرژی آن شامل قسمت‌های الاستیک، محلی و گرادیان می‌باشد. آن‌ها از معادله کان-هیلیارد برای مدل‌سازی انتشار حفره و حباب استفاده نموده‌اند. هو و هنجار [۲۲] مدل میدان فازی فقط براساس معادلات کان-هیلیارد بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش الاستیک با همراهی اتم‌های درون شبکه‌ای برای مطالعه تغییرات حفره‌های گروهی در فلز و حرکت اتم‌های درون شبکه‌ای ارائه کردند. در این مدل حرکت یک بعدی اتم‌های درون شبکه، انتشار جای‌خالی، تولید و برهم‌کنش اتم‌های درون شبکه‌ای با حفره‌ها در نظر گرفته شده است و معادلات به دست آمده با روش فوریه حل شده است. آن‌ها متوجه شدند زمانی شبکه‌ای از حفره ایجاد می‌شود که تحرک اتم بین‌نشین،

چهار برابر بزرگتر از تحرک حفره باشد. آن‌ها همچنین مدلی بر مبنای معادله کان-هیلیارد بدون در نظر گرفتن اتم‌های درون شبکه‌ای و برهم‌کنش الاستیک برای مطالعه حرکت حفره در میدان گرادیان دمایی ساخته ارائه نمودند [۲۳]. مدل‌سازی آن‌ها نشان داد حفره با وجود گرادیان دمایی به سمت بالا حرکت می‌کند و سرعت حرکت به صورت معکوس با اندازه حفره متناسب است. روکام و همکاران [۲۴] مدل میدان فازی برای تشکیل حفره در فلزات برای شرایط تعادل دمایی ارائه کردند. همچنین، رفتار جوانه‌زنی و رشد حفره را تحت شرایط فوق اشباع غلظت جای‌خالی در ماتریس همراه با نرخ تولد اتفاقی حفره‌ها با استفاده از روش میدان فاز دوبعدی با استفاده از معادلات کوپل کان-هیلیارد و آلن-کان برای فلز تک کریستالی پیش‌بینی کردند. میل و همکاران [۲۷-۲۵] در ابتدا معادلات مرسوم میدان فاز برای توصیف سینتیک با در نظر گرفتن تاثیر تحریک بر عیوب ارائه کردند و سپس نتایج تغییرات همگن و ناهمگن حفره و حباب گاز از قبیل تولد و رشد حباب، نوسانات چگالی داخلی حباب و تشکیل شبکه حفره‌ها را مورد بحث قرار دادند. مدل میدان فازی برای مطالعه مهاجرت حفره‌ها با در نظر گرفتن گرادیان دمایی برای تولید حفره تحت تشعشع، نابودی حفره و انتشار حفره مورد استفاده قرار گرفت [۲۸]. ژیانو و همکاران [۲۹] و سمنوف و وو [۳۰ و ۳۱]، مدلی بر پایه معادله کان-هیلیارد برای اتصال تغییرات حفره در ترمودینامیک کلاسیک و روش میدان فاز بنا نهادند. انرژی آزادی که برای تغییرات حفره وجود دارد با حضور نوسانات اتفاقی در سیستم با انرژی آزاد موجود در معادلات کان-هیلیارد یکسان فرض می‌شود. آن‌ها در مطالعه خود اشاره کردند که علت مانع ترمودینامیکی در برابر رشد حفره وجود سطح مشترک جامد-گاز می‌باشد و در چهارچوبی متعارف از انرژی گرادیان نوع گینزبرگ برای معرفی انرژی سطحی استفاده شده است. آن‌ها همچنین تاثیر شعاع حفره را بر ضریب انرژی گرادیان بررسی کرده و معادلات موجود را با استفاده از تفاضل محدود حل کرده‌اند. لی و همکاران [۳۲] مدل میدان فازی بر اساس کوپل معادلات کان-هیلیارد و آلن-کان برای تغییرات حباب ارائه نمودند. پتانسیل انرژی به صورت تقریبی با استفاده از توابع سهموی جایگزین شد و پارامترهای مدل از شبیه‌سازی اتمی بدست آمد. اندازه هسته بحرانی حباب‌های گاز یافت شد و ارتباط خطی بین عدد چگالی حباب گاز و قطر حباب برآورد گردید. وانس و میل [۳۳] مدل میدان

تنش کل برای نمونه‌ای با یک حفره ارائه گردیده است. در بخش ۳-۳ تاثیرات تغییرات دما و ثابت الاستیک بر رشد و نابودی حفره با حضور تنش فشاری مورد بررسی قرار گرفته و تغییر سرعت رشد حفره در دماهای مختلف با حضور تنش فشاری بررسی شده است. در بخش ۴-۳ تاثیرات تغییرات دما و ثابت الاستیک بر رشد و نابودی حفره‌ها با توزیع اولیه تصادفی آن‌ها مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- سیستم معادلات

در مدل میدان فاز، برای توصیف تغییرات ریزساختار از متغیرهای پیوسته پایستار (معادله کان-هیلارد) و یا غیرپایستار (معادله آلن-کان) استفاده می‌گردد که با عنوان پارامتر مشخصه ϕ که وابسته به مکان و زمان می‌باشد شناخته می‌شوند. در هر فاز یک مقدار مشخص به ϕ نسبت داده می‌شود و برای ناحیه مشترک بین دوفاز مقدار ϕ به صورت پیوسته بین مقادیر آن در دوفاز در تماس تغییر می‌کند. انرژی آزاد سیستم می‌تواند به صورت تابعی از پارامترهای مشخصه توصیف شود و تحولات سیستم توسط کاهش انرژی آزاد مشخص می‌گردد. روش میدان فاز در مقابل روش صفحه مشترک تیز مطرح شده است. برخلاف روش صفحه تیز مشترک که در آن برای صفحه مشترک بین دوفاز مجاور ضخامتی در نظر گرفته نمی‌شود (ضخامت صفر)، در روش میدان فاز صفحه مشترک اندازه معینی دارد که بر اساس رقابت انرژی‌های مختلفی نظیر سطح و الاستیک تعیین می‌گردد. هم‌چنین، به لحاظ محاسباتی در مقایسه با روش صفحه تیز که نیاز به تعیین هندسه پیش فرض برای جواب و هم‌چنین ارضای شرط پیوستگی در طول حرکت صفحه مشترک به صورت عددی است، در روش میدان فاز با تعریف انرژی گرادیان و ایجاد صفحه مشترک با ضخامت معین نیازی به دنبال کردن صفحه نبوده و در ضمن هندسه از کمینه‌سازی انرژی در طول زمان حاصل می‌گردد. به لحاظ ترمودینامیکی، برتری روش میدان فاز در این است که دربرگیرنده اطلاعات مربوط به تمامی حالات میانی پایدار و ناپایدار بین دو حالت ترمودینامیکی اولیه و نهایی است. در این روش، انرژی به صورتی تعریف می‌گردد که کمینه‌ها متعلق به فازها یا حالات مطلوب بوده و بدین صورت تمامی روابط تعادل و پایداری فازی یا ساختاری مشخص می‌گردد.

انرژی آزاد مجموع سیستم عبارت است از:

$$\psi(c, \nabla c, T, \mathcal{E}) = \int_V [\psi^e + \tilde{\psi} + \hat{\psi} + \psi^\nabla] dV \quad (1)$$

فازی برای مهاجرت حفره‌ها در پیل‌های سوختی اکسید تحت گرادیان دمایی ارائه کردند. مدل ارائه شده بر پایه معادله کان-هیلارد به همراه ترم پیشگویی برای حرکت بخار می‌باشد. نتایج نشان داد که مدل آن‌ها نه تنها مهاجرت حفره‌ها را پیش بینی می‌کند بلکه تغییرات در ظاهر حفره را نیز در زمان حرکت پیش بینی می‌نماید.

در این مقاله، به منظور مطالعه رشد و از بین رفتن نانوحفره‌ها، معادلات سینتیک کان - هیلارد یا نفوذ و معادلات الاستیسیته ایستایی با یکدیگر کوپل گردیده و با استفاده از روش اجزای محدود غیرخطی در دو بعد حل شده‌اند. کوپل بودن این دو دسته از معادلات ناشی از حضور انرژی کرنشی در تابع انرژی آزاد مورد استفاده در معادله کان-هیلارد و نیز وابستگی کرنش کل به کرنش غیرالاستیک حفره می‌باشد. با توجه به وابستگی همزمان خواص الاستیک و نیز مانع انرژی برای تشکیل حفره به دما و اهمیت آن‌ها بر نانوحفره‌ها، هدف عمده این مقاله بررسی چگونگی اثر دما بر رفتار رشد و از بین رفتن نانوحفره‌ها و تغییرات نانو ساختار حاصله در شرایط دمایی گوناگون و تحت بارگذاری مکانیکی می‌باشد. در این مطالعه برای نخستین بار، وابستگی مدول یانگ و نیز مانع انرژی برای تشکیل حفره به دما در شبیه‌سازی پدیده رشد و یا از بین رفتن نانوحفره در نظر گرفته شده است. از این رو شبیه‌سازی‌هایی شامل تغییرات نانو ساختار شامل صفحه مشترک گاز - جامد خطی، رشد یا از بین رفتن نانوحفره دایره‌ای در دماهای مختلف، رشد یا از بین رفتن نانوحفره دایره‌ای تحت فشار دو محوره و تغییرات نانو ساختار با توزیع تصادفی غلظت حفره مورد مطالعه قرار گرفته است. در قسمت ۲ سیستم معادلات میدان فاز برای مدل‌سازی دینامیک حفره به صورت کامل بیان گردیده است. در قسمت ۳ سیستم کوپل معادلات کان-هیلارد و الاستیسیته (بر پایه کرنش‌های کوچک) با استفاده از روش اجزای محدود غیرخطی و کد کامسول حل شده و فرآیند شبیه‌سازی با روش تحلیلی و نمونه‌های آزمایشگاهی صحت سنجی شده‌اند. در ادامه مثال‌هایی از مساله دینامیک نانوحفره‌ها ارائه گردیده است بدین صورت که در بخش ۳-۱ صفحه مشترک جامد-گاز مستقیم تحت دما مورد بررسی قرار گرفته و تغییرات نانو ساختار حفره و تنش آن در دماهای مختلف مطالعه گردیده است. در بخش ۳-۲ تاثیرات تغییرات دما و ثابت الاستیک بر رشد و نابودی حفره در نمونه‌ای با شرایط مرزی متناوب مورد بررسی قرار گرفته و تغییرات نانو ساختار و میدان

صورت رابطه‌های (۷) و (۸) بیان می‌گردند:

$$\psi^e = \frac{1}{2} \sigma_e (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^0) \quad (7)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (8)$$

که \mathbf{u} بردار جابجایی و $\boldsymbol{\varepsilon}^0$ تنش غیرالاستیک بین سطح حفره و ماتریس را نشان می‌دهد و به صورت $\varepsilon_{ij}^0 = 2\varepsilon_0 \delta_{ij} (1-c)c$ تعریف می‌گردد. ضریب ثابت ε_0 منفی نشان دهنده نیرو به سمت مرکز حفره بوده و ε_0 مثبت، نشان دهنده فشار بر سطح حباب می‌باشد و از این رو متمایزکننده حفره از حباب می‌باشد. مقدار آن نیز بسته به نوع ماده و شرایط حاکم از مقادیر بسیار کم تا چند درصد متغیر می‌باشد. بنابراین تانسور تنش الاستیک به صورت رابطه (۹) قابل بازنویسی است:

$$\sigma_e = C^0 (1-c) (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^0) \quad (9)$$

که C^0 تانسور الاستیک جسم جامد می‌باشد. نکته قابل ذکر در مورد معادله میدان فازی کان-هیلیارد در رابطه با شرایط مرزی آن می‌باشد که در این مقاله، شرط مرزی ایزوله یا $\nabla c \cdot \mathbf{n} = 0$ در نظر گرفته شده است که \mathbf{n} بردار نرمال بر مرز نمونه می‌باشد و این شرط به این معنی است که سیستم عاری از هرگونه شار خارجی تغییردهنده غلظت حفره است.

۳- شبیه‌سازی‌های عددی

سیستم کوپل معادلات کان-هیلیارد و الاستیسیته (بر پایه کرنش‌های کوچک) با استفاده از روش اجزای محدود غیرخطی و کد کامسول حل گردیده است. معادلات کان-هیلیارد با استفاده از ماژول میدان فاز^۱ و معادلات الاستیسیته با استفاده از ماژول سازه تعادلی^۲ حل شده‌اند. برای شبکه بندی از المان‌های مثلثی استفاده گردیده است. اندازه شبکه بندی به اندازه کافی ریز و بیشینه آن برابر 0.2 نانومتر استفاده شده است تا نتایج حل مستقل از شبکه بندی باشد. همچنین، برای جلوگیری از واگرایی حل از شبکه بندی تطبیق پذیر

که در اینجا c میزان غلظت حفره، $\boldsymbol{\varepsilon}$ تانسور کرنش کل و T دمای مطلق است. همچنین، ψ^e انرژی الاستیک بر واحد حجم، $\tilde{\psi}$ انرژی آزاد شیمیایی بر واحد حجم که برای توصیف تعادل بین فاز حفره و ماتریس استفاده می‌شود، $\hat{\psi}$ انرژی آزاد مخلوط شدن بر واحد حجم و ψ^∇ انرژی گرادیان صفحه مشترک جامد-گاز بر واحد حجم است که به صورت زیر بیان می‌گردند [۲۱ و ۳۴]:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi} &= g_v c + g_a (1-c) \\ \hat{\psi} &= E_v^f c (1-c) + k_B T [c \ln c + (1-c) \ln (1-c)] \\ \psi^\nabla &= \kappa (\nabla c)^2 \end{aligned} \quad (2)$$

g_v انرژی شیمیایی حفره و g_a انرژی شیمیایی اتم ماتریس بر واحد حجم می‌باشد. همچنین، E_v^f انرژی تشکیل حفره، k_B ثابت بولتزمن و κ ثابت انرژی گرادیان برای صفحه مشترک گاز-جامد است. تغییرات میدان غلظت حفره با استفاده از روابط بقای انرژی و مطابق رابطه (۳) توصیف می‌گردد:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} \quad (3)$$

که در اینجا t زمان و \mathbf{J} چگالی جریان حفره است که به صورت رابطه (۴) بیان می‌گردد:

$$\mathbf{J} = -M \mathbf{P} \quad (4)$$

M ضریب پویایی و P نیروی محرکه ترمودینامیکی است که به صورت گرادیان مشتق وردشی تابع انرژی نسبت به غلظت حفره c تعریف می‌گردد [۲۱ و ۳۴]:

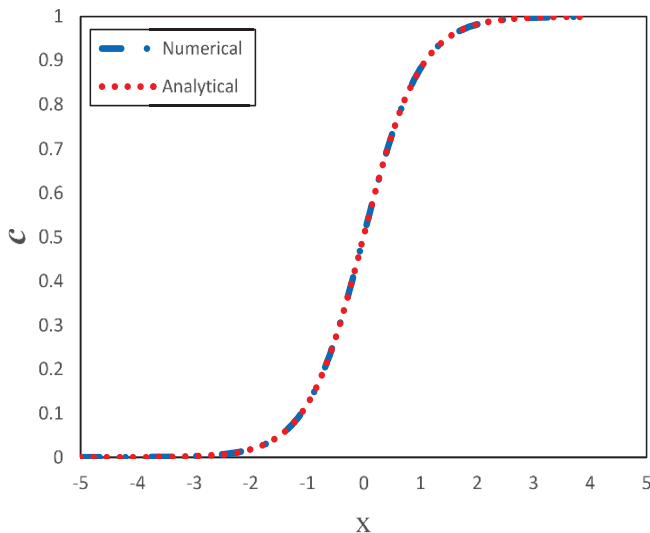
$$P = \nabla \cdot \left(\frac{\partial (\psi^e + \tilde{\psi} + \hat{\psi})}{\partial c} - 2\kappa \nabla^2 c \right) \quad (5)$$

با ترکیب رابطه‌های (۳) تا (۵) رابطه کان-هیلیارد تشکیل می‌شود:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M \nabla \cdot \left(\frac{\partial (\psi^e + \tilde{\psi} + \hat{\psi})}{\partial c} - 2\kappa \nabla^2 c \right) \right] \quad (6)$$

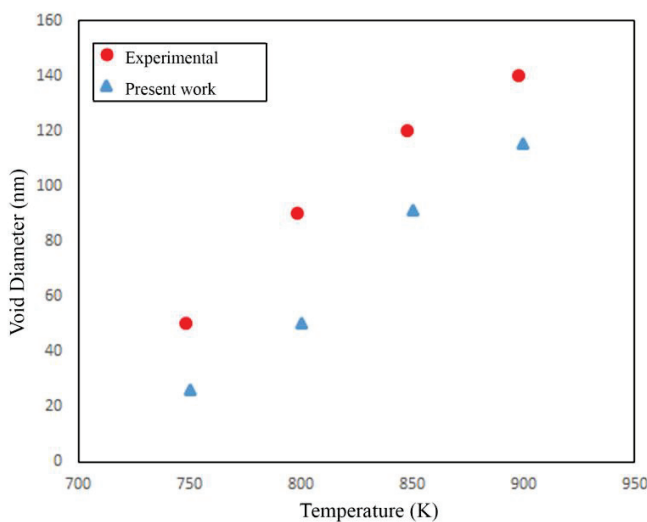
انرژی الاستیک بر واحد حجم و تانسور کرنش کل به ترتیب به

1 Phase Field
2 Stationary Structural



شکل ۱- مقایسه پروفایل حفره تعادلی بدست آمده از شبیه‌سازی با پروفایل حل تحلیلی [۳۷]

Fig. 1. Comparison of concentration profile of stationary void between Numerical and analytical solution.



شکل ۲. مقایسه روند تغییرات اندازه حفره با تغییرات دما در فلز نیکل بدست آمده از شبیه‌سازی و نتایج آزمایشگاهی [۳۸]

Fig. 2. Comparison of void evolution with temperature change in nickel between simulation and experimental data.

۳-۱ صفحه مشترک جامد- گاز مستقیم تحت تاثیر دما

نمونه مربعی با ابعاد $10 \times 10 \text{ nm}^2$ در نظر گرفته شده است که تمامی مرزهای آن آزاد بوده و فقط گوشه پایین سمت راست آن در جهات x و y و گوشه بالای سمت راست آن در جهت x برای جلوگیری از حرکت جسم صلب ثابت شده است. شرایط مرزی مساله کان- هیلارد نیز برای همه اضلاع ایزوله در نظر گرفته شده است. برای شرایط اولیه، قسمت مستطیلی از نمونه با ابعاد $10 \times 10 \text{ nm}^2$

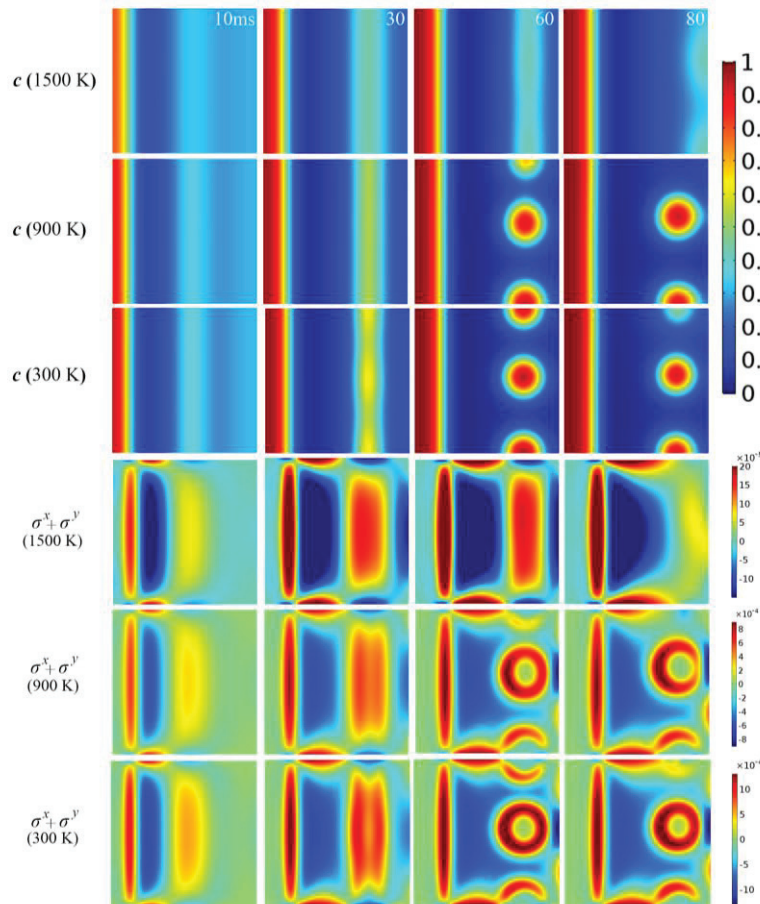
در نرم افزار استفاده می‌شود. برای همگرایی بهتر به خصوص در اوایل حل و نیز کاهش زمان حل در مراحل بعدی حل، از روش ضمنی با گام زمانی متغیر استفاده می‌گردد بدین گونه که با توجه به تعداد تکرار مورد نیاز برای حل یک گام زمانی و نحوه همگرایی، گام زمانی بعدی بتواند کوچکتر و یا بزرگتر انتخاب شود. در این پژوهش حلگر مجزا مورد استفاده قرار گرفته که ارائه کننده حل تدریجی سیستم معادلات است. نتیجه آن استخراج متغیر غلظت حفره از معادله کان- هیلارد در هر گام زمانی می‌باشد. سپس متغیر غلظت حفره وارد معادلات الاستیسیته شده و متغیرهای جابجایی و در نتیجه تنش و کرنش استخراج می‌گردند. در نهایت تنش در معادلات کان- هیلارد وارد شده و متغیر غلظت حفره استخراج می‌گردد و به همین ترتیب برای گام زمانی بعد حل تکرار می‌شود. در این مطالعه برای نخستین بار، وابستگی مدول یانگ و نیز مانع انرژی برای تشکیل حفره به دما در شبیه‌سازی پدیده رشد و یا نابودی نانوحفره در نظر گرفته شده است. ماده استفاده شده در مدل‌سازی دینامیک حفره نیکل و خواص آن به صورت جدول ۱ است [۳۵ و ۳۶]:

جدول ۱- خواص نانو نیکل

Table 1. Material property of nano-nickel

$E(T)$	E_v^f	κ	M
$-0.004T + 8.4$	$-6.6 \times 10^{-8}T^2 - 3.3 \times 10^{-5}T + 14$	0.25	0.3

همچنین تنش، ابعاد، زمان و انرژی به ترتیب با e.V/nm^3 ، 100 nm و 1 ms نرمالایز شده‌اند. به منظور صحت سنجی نتایج، پروفایل حفره تعادلی حاصل از نتایج شبیه‌سازی با پروفایل حل تحلیلی مربوطه [۳۷] در شکل ۱ مقایسه گردیده که تطابق بسیار خوبی را نشان می‌دهد. همچنین، نتایج شبیه‌سازی حاضر با نتایج آزمایشگاهی موجود برای چند دما [۳۸] مقایسه و تاثیرات دما بر اندازه حفره مقایسه گردیده و در شکل ۲ ارائه شده است. همانطور که در شکل ۲ دیده می‌شود نتایج شبیه‌سازی و آزمایشگاهی هر دو روند یکسانی برای تغییر اندازه حفره بر حسب دما ارائه می‌نمایند. به لحاظ کمی نیز علیرغم عدم امکان در نظر گرفتن همه عوامل واقعی در شبیه‌سازی و نیز دوبرعی بودن آن‌ها، تطابق قابل قبولی به لحاظ کمی بین شبیه‌سازی و آزمایش دیده می‌شود.



شکل ۳. تغییرات نانوساختار حفره و میدان تنش کل در دماهای ۳۰۰ و ۹۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین

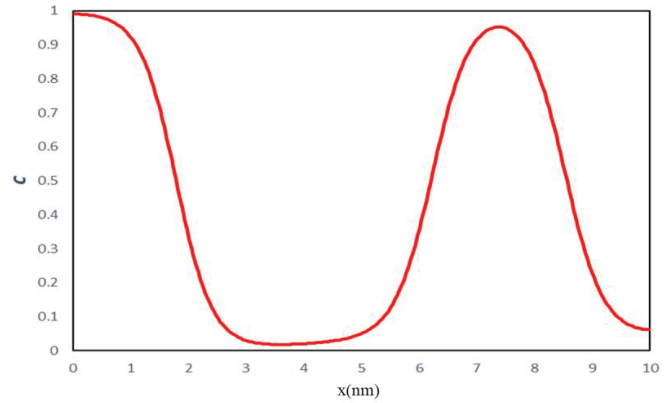
Fig. 3. Void evolution in nanostructure and stress distribution in 1500, 900 and 300K

مقدار غلظت حفره به مقدار ماکزیمم متمایل می‌شود. برای دمای K در ۳۰۰ در مقایسه با K ۹۰۰، زمان ایجاد حفره‌های دایروی کمتر است و این به معنی سریعتر بودن تشکیل حفره در دمای پایین‌تر است. همچنین، مقدار حفره‌های ایجاد شده نیز بیشتر است. بررسی میدان توزیع تنش $\sigma^x + \sigma^y$ برای هر سه دما نشان از تمرکز تنش بالا در محل صفحه مشترک جامد - گاز در ابتدای حل بوده که در ادامه و با ایجاد صفحات گاز - جامد دیگر توزیع تنش به شدت تغییر می‌نماید و ناهمگن می‌گردد به طوری که برای دمای K ۱۵۰۰ با ایجاد صفحه مشترک گاز - جامد، تمرکز تنش در این ناحیه بالا رفته و با محو شدن آن تنش کاهش می‌یابد. همچنین برای دماهای پایین‌تر به دلیل ایجاد حفره‌های دایروی تمرکز تنش در ناحیه صفحه مشترک گاز - جامد توزیع دایروی ایجاد نموده است. نکته قابل ذکر برهم‌کنش میدان‌های تنش صفحه مشترک مستقیم و حفره‌های دایروی در دمای پایین است که بیانگر نقش اندازه نمونه در برهم‌کنش حفره‌ها و تعیین میدان تنش نهایی نمونه است. همچنین، بر مبنای پروفایل

با غلظت حفره (c) برابر ۰/۸ و غلظت باقیمانده نمونه برابر ۰/۲ در نظر گرفته شده است. کرنش غیرالاستیک حفره % ۰/۱- در نظر گرفته شده است. تحول نانوساختار حفره و تنش کلی نمونه برای سه دمای متفاوت ۳۰۰، ۹۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین در شکل ۳ ارائه شده است. همانطور که مشاهده می‌شود تحت هر سه دما و در ناحیه صفحه مشترک مستقیم جامد - گاز، غلظت حفره از ۰/۸ و ۰/۲ به دو مقدار ماکزیمم ۱ و مینیمم صفر میل می‌نماید. همچنین در دماهای پایین‌تر، صفحه مشترک جامد - گاز ناقصی در قسمت راست نمونه شروع به رشد کردن می‌نماید که برای K ۱۵۰۰ به غلظت ماکزیمم ۰/۵ رسیده و حفره‌ی مستقیم غیرتعادلی به سمت راست حرکت نموده و در انتها با رسیدن به مرز سمت راست کوچک‌تر شده و از بین می‌رود. در حالی که در دو دمای پایین‌تر ۳۰۰ و ۹۰۰ کلوین، صفحه مشترک ایجاد شده به مقادیر بالاتری از غلظت می‌رسد (۰/۸) و در ادامه صفحه مشترک گاز - جامد مستقیم با ایجاد ناهماهنگی در توزیع غلظت به چندین حفره دایروی کوچکتر تبدیل می‌گردد و

مرزی متناوب مکانیکی بر مرزهای آن اعمال شده است. برای شرایط اولیه جوانه حفره‌ی دایروی با شعاع ۱ نانومتر و با غلظت ۰/۴ در مرکز نمونه در نظر گرفته شده است. غلظت باقیمانده نمونه ۰/۱۵ و مقدار کرنش غیرالاستیک حفره ۰/۱- در نظر گرفته شده است. چگونگی تحول نانساختار برای سه دمای متفاوت ۳۰۰، ۹۰۰ و ۱۵۰۰ کلوین در نظر گرفته می‌شود. شکل ۵ میزان تاثیرات دما و در نتیجه تغییر ثابت الاستیک و مانع انرژی تشکیل حفره را بر رشد و نابودی حفره در زمان‌های مختلف نشان می‌دهد. همانگونه که در شکل ۵ قابل ملاحظه است، حفره به تدریج در دما ۱۵۰۰ K از بین می‌رود در حالی که در دماهای ۹۰۰ و ۳۰۰ کلوین رشد می‌کند. همچنین سرعت افزایش غلظت در دمای ۳۰۰ K بیش از ۹۰۰ K می‌باشد. رشد حفره اولیه به دلیل جذب جای خالی از ناحیه جامدی است که به طور مستقیم در مجاورت حفره قرار دارد و منجر به تجمع جای خالی می‌گردد.

بخاطر حجمی بودن کرنش غیرالاستیک متناظر حفره، دنبال کردن توزیع جمع مولفه‌های عمودی تنش ($\sigma^x + \sigma^y$) هنگام تغییرات معقول می‌باشد. تغییرات پروفایل تنش کل ($\sigma^x + \sigma^y$) در زمان ms ۲۵ در شکل ۶ برای دماهای ۱۵۰۰، ۹۰۰ و ۳۰۰ کلوین رسم شده است. تنش کل با افزایش غلظت و اندازه حفره تغییر می‌کند. برای دمای ۳۰۰ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می‌کند تا به بیشترین مقدار خود یعنی $0.005 \times 100 \text{ e.V/nm}^3$ در بیشترین مقدار غلظت ۰/۹۷ برسد. همانگونه که در شکل ۵ قابل ملاحظه است در دمای ۱۵۰۰ K با افزایش زمان، غلظت حفره کاهش و نهایتاً حفره از بین می‌رود. در نتیجه ناحیه مشترک جامد-گاز عملاً



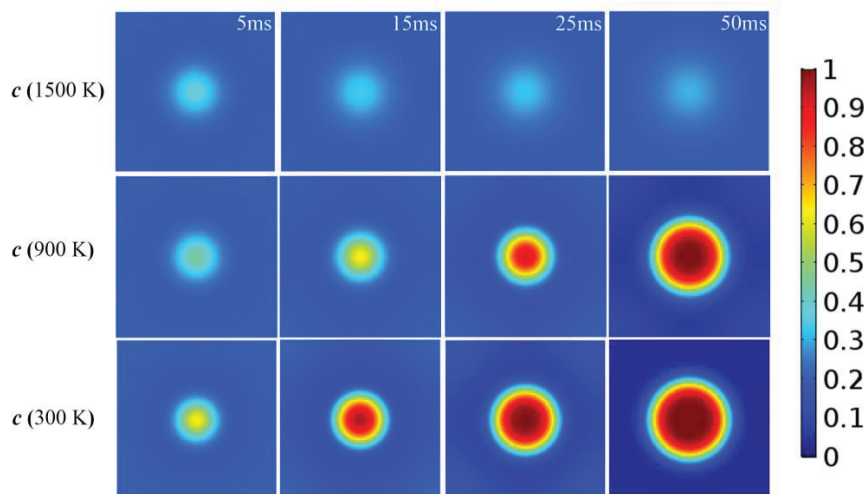
شکل ۴. پروفایل غلظت حفره در راستای مرز پایینی برای نمونه ۳-۱ در زمان ۵۰ ms

Fig. 4. Void concentration profile for sample 3-1 at 50ms

غلظت حفره که در راستای مرز پایینی نمونه و در زمان ۵۰ رسم شده است (شکل ۴) ضخامت صفحه مشترک جامد - گاز مستقیم برابر با ۳/۴ نانومتر و ضخامت صفحه مشترک جامد - گاز حفره‌های دایروی برابر با ۲/۷ نانومتر اندازه‌گیری شده است که بیانگر کوچکتر بودن ضخامت صفحه مشترک دایروی نسبت به مستقیم می‌باشد که بدلیل وجود انحنای بالای حفره‌ی دایروی و در نتیجه افزایش تمرکز تنش می‌باشد. نکته دیگر عمود بودن صفحه مشترک جامد - گاز، چه مستقیم و چه حفره‌ای بر دیواره نمونه می‌باشد که از ارضای شرط مرزی ایزوله بر نمونه حکایت دارد.

۲-۳ تاثیرات تغییرات دما و ثابت الاستیک بر رشد و نابودی حفره

نمونه مربعی با ابعاد $10 \times 10 \text{ nm}^2$ در نظر گرفته شده و شرایط



شکل ۵. نمایش تاثیر دما در رشد و نابودی حفره

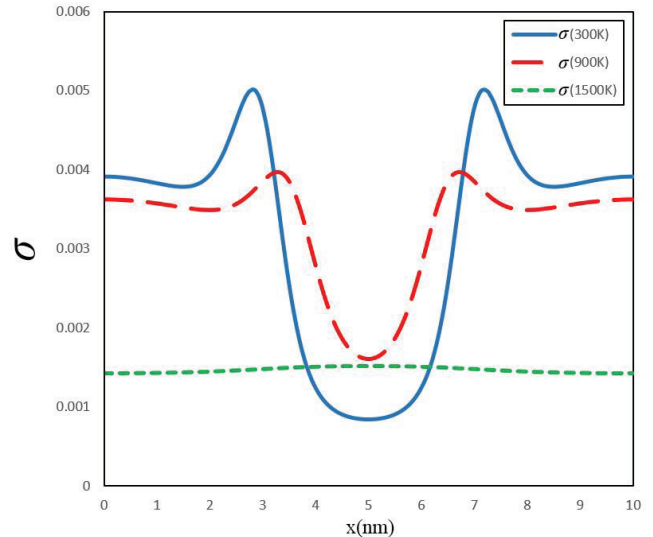
Fig. 5. Effect of temperature on void annihilation and growth.

دمای پایین تر، بالاتر بودن تنش مربوطه مورد انتظار است.

۳-۳ تاثیرات تغییرات دما و ثابت الاستیک بر رشد حفره

دایروی تحت تنش فشاری دومحوره

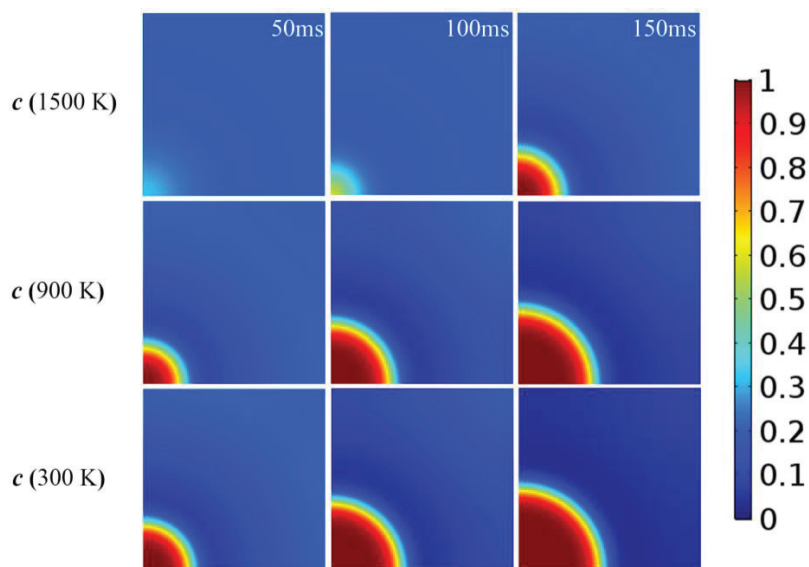
نمونه مربعی با ابعاد $40 \times 40 \text{ nm}^2$ تحت تنش فشاری دو محوره برابر با ۱ مگاپاسکال قرار گرفته است. برای شرط اولیه مساله کان - هیلیرد، حفره ناقصی به شعاع ۲ نانومتر و با مقدار غلظت $0/3$ در وسط نمونه قرار گرفته است. به منظور حذف شرط مرزی مکانیکی نقطه ثابت و در نتیجه حذف تمرکز تنش مربوطه در نمونه و نیز کاهش حجم محاسبات مدل یک چهارم مساله با بهره گیری از اعمال شرط تقارن صفحه‌ای برای یک چهارم نمونه (با ابعاد nm^2 10×10) بر مرزهای چپ و پایین آن مورد حل قرار می‌گیرد. شکل ۷ تحول نانو ساختار حفره برای دماهای ۳۰۰، ۹۰۰، ۱۵۰۰ کلوین در زمان‌های مختلف را نمایش می‌دهد. همانطور که مشخص است، شکل ۷ رشد حفره برای همه دماها یکسان و دایروی می‌باشد ولی سرعت رشد حفره برای دماهای پایین بیشتر می‌باشد. سرعت حرکت صفحه مشترک گاز - جامد، که بر مبنای حرکت نقطه متناظر با غلظت $0/5$ تعیین می‌گردد برای سه دمای بالا در شکل ۸ رسم شده است. نتایج بیانگر افزایش سرعت با کاهش دما است. در عین حال کاهش دما موجب کاهش ضخامت صفحه مشترک شده است.



شکل ۶. نمایش تغییرات میدان تنش کل با تغییرات دما و ثابت الاستیک در زمان ۲۵ ms

Fig. 6. Presentation of total stress field variation with temperature and elastic modulus change in 25ms

تشکیل نشده و تمرکز تنش مرتبط با این ناحیه پدیدار نمی‌گردد؛ لذا با نزدیک شدن به مرکز حفره تغییرات زیادی در نمودار تنش ملاحظه نمی‌گردد (شکل ۶). در مقابل، در دماهای ۳۰۰ K و ۹۰۰ K به علت بالا بودن غلظت حفره، صفحه مشترک جامد-گاز کامل می‌گردد و در نتیجه تمرکز تنش مربوطه ناشی از کرنش غیرالاستیک حفره پدیدار می‌گردد. با گذر از محدوده صفحه مشترک و ورود به ناحیه گاز با افت شدید خواص الاستیک و کرنش غیرالاستیک حفره تنش کل به صفر نزدیک می‌گردد. (شکل ۶). با توجه به سرعت رشد بالاتر حفره در



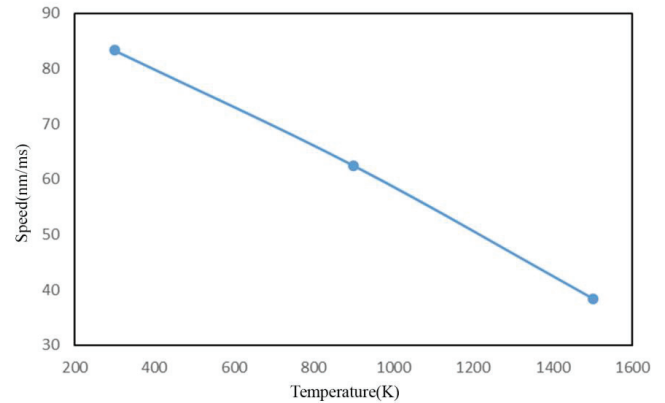
شکل ۷. تاثیرات تغییرات دما و ثابت الاستیک بر رشد حفره با حضور تنش فشاری دومحوره

Fig. 7. Effect of temperature and elastic modulus change on void growth under biaxial compression.

یکی است و این بیانگر مستقل بودن مینیمم‌های تابع انرژی در این بازه از دما، بدون بار مکانیکی و برای چنین بازه ابعادی نمونه‌ها است. به خصوص دو دمای 300 K و 900 K که به جواب بسیار نزدیکی رسیده‌اند. با توجه به اهمیت اندازه در ابعاد نانو و شرایط مرزی بر نتایج حل، مطالعه بر نمونه‌ها با اندازه‌های بالاتر می‌تواند محدوده‌های متفاوت دما و تنش را که منجر به نانو ساختارهای متفاوتی شود بدست دهد. با توجه به اهمیت تنش در کنار دما به عنوان نیروی محرکه ایجاد نانوحفره‌ها تعیین نانو ساختار و وابستگی تنش به ثوابت الاستیک، لحاظ نمودن وابستگی ثوابت الاستیک به دما برای محاسبه درست میدان تنش بسیار مهم می‌باشد که در این مقاله انجام پذیرفته است.

۴- جمع‌بندی

در این مقاله، به منظور مطالعه رشد و از بین رفتن نانوحفره‌ها تحت دما و بار مکانیکی، معادلات سینتیک کان - هیلارد یا نفوذ و معادلات الاستیسیته ایستایی با یکدیگر کوپل گردیده و با استفاده از روش اجزای محدود غیرخطی در دو بعد حل شده‌اند. با توجه به وابستگی هم زمان خواص الاستیک و نیز انرژی تشکیل حفره به دما و اهمیت آن‌ها بر نانوحفره‌ها، در این مقاله رفتار رشد و از بین رفتن نانوحفره‌ها و تغییرات نانو ساختار حاصله در شرایط دمایی گوناگون و تحت بارگذاری مکانیکی مورد تحلیل قرار گرفته است. از این رو شبیه‌سازی‌هایی شامل تغییرات نانو ساختار شامل صفحه مشترک گاز - جامد خطی، رشد یا از بین رفتن نانوحفره دایره‌ای در دماهای مختلف، رشد یا از بین رفتن نانوحفره دایره‌ای تحت فشار دو محوره و تغییرات نانو ساختار با توزیع تصادفی غلظت حفره مورد مطالعه

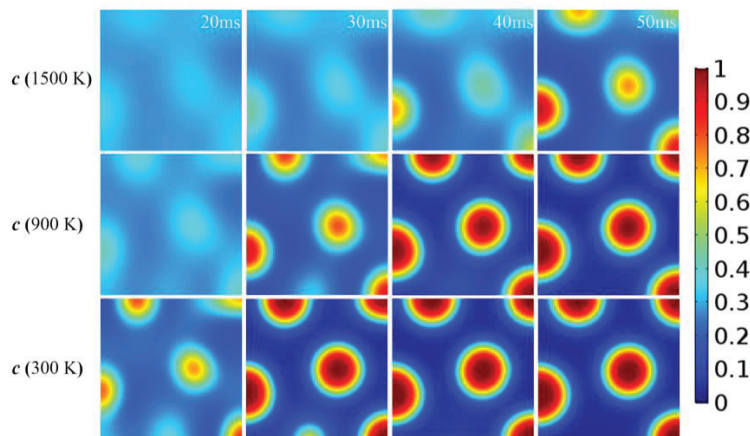


شکل ۸: تغییر سرعت رشد حفره بر حسب دمای نمونه با حضور تنش فشاری دوماحوره

Fig. 8. Void growth velocity change under biaxial compression

۳-۴- تغییرات غلظت حفره تحت تاثیر دما و ثابت الاستیک: شرایط اولیه تصادفی

نمونه مربعی با ابعاد $2\text{ mm} \times 0.1 \times 0.1$ در نظر گرفته شده است که برای مساله مکانیک آن، شرط مرزی متقارن بر مرزهای پایین و چپ اعمال گردیده و دو مرز دیگر آزاد هستند. شرایط مرزی مساله کان - هیلارد نیز ایزوله می‌باشد. به منظور نزدیک نمودن شرایط شبیه‌سازی به واقعیت فیزیکی، شرایط اولیه حفره‌ها به صورت توزیع اولیه تصادفی غلظت حفره با مقدار میانگین 0.3 و نوسانات 0.4 در نظر گرفته شده است. تحول نانو ساختار حفره برای دماهای 300 ، 900 ، و 1500 کلوین در شکل ۹ رسم شده است. همانطور که دیده می‌شود، رشد حفره‌ها با کم شدن دما با سرعت بیشتری انجام می‌شود. نکته قابل توجه در این است که علیرغم تصادفی بودن شرایط اولیه حفره‌ها، مکان‌های رشد حفره‌ها در زمان‌های بالاتر برای هر سه دما تقریباً



شکل ۹: تغییرات نانو ساختار حفره با شرط اولیه تصادفی

Fig. 9. Void nanostructure change with randomly initial condition.

فهرست علائم

علائم انگلیسی

k_B	ثابت بولتزمن، J/K
E	مدول الاستیسیته، N/m ²
T	دمای مطلق، K
E_v	انرژی تشکیل حفره، e.V
t	زمان، s

علائم یونانی

ρ	چگالی، kg/m ³
\square^e	انرژی الاستیک
$\tilde{\psi}$	انرژی آزاد شیمیایی
$\hat{\psi}$	انرژی آزاد مخلوط شدن
ψ^v	انرژی گرادیان جامد-گاز
ϵ^{el}	کرنش الاستیک
ϵ^0	کرنش غیرالاستیک
σ_e	تنش الاستیک، N/m ²
σ^x	مولفه x تنش کل، N/m ²
σ^y	مولفه y تنش کل، N/m ²

مراجع

- [1] T. Davis, D. Healy, A. Bubeck, R. Walker, Stress concentrations around voids in three dimensions: The roots of failure, *Journal of Structural Geology*, 102 (2017) 193-207.
- [2] D. Norris, Voids in nickel irradiated with electrons after previous argon ion bombardment, *Nature*, 227(5260) (1970) 830.
- [3] D. Norris, Voids in irradiated metals (Part I), *Radiation Effects*, 14(1-2) (1972) 1-37.
- [4] D. Norris, Voids in irradiated metals (Part II), *Radiation Effects*, 15(1-2) (1972) 1-22.
- [5] J.L. Katz, H. Wiedersich, Nucleation of voids in materials supersaturated with vacancies and interstitials, *The Journal of Chemical Physics*, 55(3) (1971) 1414-1425.
- [6] K. Russell, Thermodynamics of gas-containing voids in metals, *Acta Metallurgica*, 20(7) (1972) 899-907.
- [7] R. Mayer, L. Brown, Nucleation and growth of voids by radiation: II. Differential equations,

قرار گرفته است. در نمونه‌های بدون اعمال بار مکانیکی، در دماهای بالاتر حفره از بین می‌رود ولی در دماهای پایین‌تر، رشد حفره چه دایروی و چه صفحه مشترک گاز - جامد مستقیم، سریع‌تر می‌باشد و مقادیر غلظت بدست آمده نیز بالاتر می‌باشد. بررسی میدان توزیع تنش برای دماهای مختلف نیز حاکی از تمرکز تنش بالا در محل صفحه مشترک جامد - گاز بوده که با توجه به رشد و یا از بین رفتن حفره‌ها، مکان‌های تمرکز تنش تغییر نموده و در نتیجه میدان تنش نانوساختار حفره در طول زمان به شدت تغییر می‌نماید و ناهمگن می‌گردد. توزیع تنش کل در ناحیه صفحه مشترک نیز به صورت سهمی بدست آمده است. همچنین، تنش کل با افزایش غلظت و اندازه حفره تغییر می‌کند که با توجه به سرعت رشد بالاتر حفره در دمای پایین‌تر، بالاتر بودن تنش مربوطه مورد انتظار است. در نمونه با اعمال بار مکانیکی فشاری دومیحوره نیز شکل کلی رشد حفره برای همه دماها یکسان می‌باشد و سرعت رشد حفره برای دماهای پایین بیشتر می‌باشد. نتایج بیانگر افزایش سرعت رشد با کاهش دما است. در عین حال کاهش دما موجب کاهش ضخامت صفحه مشترک شده است. در نمونه با توزیع اولیه تصادفی غلظت حفره نیز رشد حفره‌ها با کم شدن دما با سرعت بیشتری انجام می‌شود و لذا این افزایش سرعت مستقل از نوع شرایط اولیه نانو حفره‌ها است. نکته قابل توجه در این است که علیرغم تصادفی بودن شرایط اولیه حفره‌ها، مکان‌های رشد حفره‌ها در زمان‌های بالاتر برای دماهای مورد مطالعه تقریباً یکی است و این بیانگر مستقل بودن مینیمم‌های تابع انرژی در این بازه از دما، بدون بار مکانیکی و برای چنین بازه ابعادی نمونه‌ها است. با توجه به اهمیت تنش در کنار دما به عنوان نیروی محرکه ایجاد نانو حفره‌ها تعیین نانوساختار و وابستگی تنش به ثوابت الاستیک، لحاظ نمودن وابستگی ثوابت که در این مقاله انجام پذیرفته است برای محاسبه درست میدان تنش بسیار مهم می‌باشد. همچنین، وابستگی مانع انرژی برای تشکیل حفره به دما در این مقاله لحاظ گردیده که امکان تعیین محدوده دمایی فیزیکی رشد و یا از بین رفتن نانو حفره را بدست می‌دهد. مدل ارائه شده برای بررسی محدوده دما و تنش رشد و یا از بین رفتن نانو حفره‌ها با هندسه‌های گوناگون و شرایط مرزی مختلف در آینده مورد استفاده قرار می‌گیرد.

- [19] M. Javanbakht, V.I. Levitas, Interaction between phase transformations and dislocations at the nanoscale. Part 2: Phase field simulation examples, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 82 (2015) 164-185.
- [20] M. Javanbakht, V. Levitas, Phase Field Method to the Interaction of Phase Transformations and Dislocations at Nanoscale, *AUT Journal of Mechanical Engineering*, 1(2) (2017) 243-246.
- [21] H.-C. Yu, W. Lu, Dynamics of the self-assembly of nanovoids and nanobubbles in solids, *Acta Materialia*, 53(6) (2005) 1799-1807.
- [22] S. Hu, C.H. Henager Jr, Phase-field modeling of void lattice formation under irradiation, *Journal of Nuclear Materials*, 394(2-3) (2009) 155-159.
- [23] S.Y. Hu, C. Henager Jr, Phase-field simulation of void migration in a temperature gradient, *Acta materialia*, 58(9) (2010) 3230-3237.
- [24] S. Rokkam, A. El-Azab, P. Millett, D. Wolf, Phase field modeling of void nucleation and growth in irradiated metals, *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 17(6) (2009) 064002.
- [25] P.C. Millett, A. El-Azab, S. Rokkam, M. Tonks, D. Wolf, Phase-field simulation of irradiated metals: Part I: Void kinetics, *Computational materials science*, 50(3) (2011) 949-959.
- [26] P.C. Millett, A. El-Azab, D. Wolf, Phase-field simulation of irradiated metals: Part II: Gas bubble kinetics, *Computational Materials Science*, 50(3) (2011) 960-970.
- [27] P.C. Millett, M. Tonks, Application of phase-field modeling to irradiation effects in materials, *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 15(3) (2011) 125-133.
- [28] Y. Li, S. Hu, X. Sun, F. Gao, C.H. Henager Jr, M. Khaleel, Phase-field modeling of void migration and growth kinetics in materials under irradiation and temperature field, *Journal of Nuclear Materials*, 407(2) (2010) 119-125.
- [29] Z. Xiao, A. Semenov, C. Woo, S. Shi, Single void dynamics in phase field modeling, *Journal of Nuclear Materials*, 95(1-2) (1980) 58-63.
- [8] M. Imada, Void Lattice formation—spinodal decomposition of vacancies, *Journal of the Physical Society of Japan*, 45(5) (1978) 1443-1448.
- [9] K. Krishan, Void ordering in metals during irradiation, *Philosophical Magazine A*, 45(3) (1982) 401-417.
- [10] A. Semenov, C. Woo, Void lattice formation as a nonequilibrium phase transition, *Physical Review B*, 74(2) (2006) 024108.
- [11] A. Brailsford, L. Mansur, Time dependent rate theory for diffusional defect processes, *Acta Metallurgica*, 33(8) (1985) 1425-1437.
- [12] N. Doan, G. Martin, Elimination of irradiation point defects in crystalline solids: sink strengths, *Physical Review B*, 67(13) (2003) 134107.
- [13] W.J. Boettinger, J.A. Warren, C. Beckermann, A. Karma, Phase-field simulation of solidification, *Annual review of materials research*, 32(1) (2002) 163-194.
- [14] H. Henry, H. Levine, Dynamic instabilities of fracture under biaxial strain using a phase field model, *Physical review letters*, 93(10) (2004) 105504.
- [15] Y.U. Wang, Computer modeling and simulation of solid-state sintering: A phase field approach, *Acta materialia*, 54(4) (2006) 953-961.
- [16] N. Moelans, B. Blanpain, P. Wollants, Quantitative analysis of grain boundary properties in a generalized phase field model for grain growth in anisotropic systems, *Physical Review B*, 78(2) (2008) 024113.
- [17] V.I. Levitas, M. Javanbakht, Advanced phase-field approach to dislocation evolution, *Physical Review B*, 86(14) (2012) 140101.
- [18] V.I. Levitas, M. Javanbakht, Interaction between phase transformations and dislocations at the nanoscale. Part 1. General phase field approach, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 82 (2015) 287-319.

- superlattice self-organization under irradiation, *Scientific reports*, 8(1) (2018) 6629.
- [35] W. Wang, C.-l. Yi, K.-q. Fan, Molecular dynamics study on temperature and strain rate dependences of mechanical tensile properties of ultrathin nickel nanowires, *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, 23(3353) (2013) 3361.
- [36] Y. Gong, B. Grabowski, A. Glensk, F. Körmann, J. Neugebauer, R.C. Reed, Temperature dependence of the Gibbs energy of vacancy formation of fcc Ni, *Physical Review B*, 97(21) (2018) 214106.
- [37] D. Schwen, L.K. Aagesen, J.W. Peterson, M.R. Tonks, Rapid multiphase-field model development using a modular free energy based approach with automatic differentiation in MOOSE/MARMOT, *Computational Materials Science*, 132 (2017) 36-45.
- [38] M. Shaikh, K. Ehrlich, Swelling in nickel-carbon and nickel-silicon alloys, *Pakistan Inst. of Nuclear Science and Technology*, 1990.
- of nuclear materials, 439(1-3) (2013) 25-32.
- [30] A. Semenov, C. Woo, Interfacial energy in phase-field emulation of void nucleation and growth, *Journal of nuclear materials*, 411(1-3) (2011) 144-149.
- [31] A. Semenov, C. Woo, Phase-field modeling of void formation and growth under irradiation, *Acta Materialia*, 60(17) (2012) 6112-6119.
- [32] Y. Li, S. Hu, R. Montgomery, F. Gao, X. Sun, Phase-field simulations of intragranular fission gas bubble evolution in UO₂ under post-irradiation thermal annealing, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 303 (2013) 62-67.
- [33] I.W. Vance, P.C. Millett, Phase-field simulations of pore migration and morphology change in thermal gradients, *Journal of Nuclear Materials*, 490 (2017) 299-304.
- [34] Y. Gao, Y. Zhang, D. Schwen, C. Jiang, C. Sun, J. Gan, X.-M. Bai, Theoretical prediction and atomic kinetic Monte Carlo simulations of void