

Amirkabir Journal of Mechanical Engineering

Amirkabir J. Mech. Eng., 52(12) (2021) 869-872 DOI: 10.22060/mej.2019.16169.6293



Nanovoid dynamics based on temperature dependent Young modulus and void formation energy in Nickel: a phase field study

M. S. Ghaedi¹, M. Javanbakht^{2*}

¹ Mechanical Engineering Group, Pardis College, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran. ² Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran.

ABSTRACT: In the present work, a phase field method is used to study the growth/annihilation of nanovoids under thermal and mechanical loadings. To do so, the coupled system of the Cahn-Hilliard and elasticity equations is solved using the nonlinear finite element method in 2 dimensional. This coupling is due to the presence of elastic energy in the Cahn-Hilliard free energy and the dependence of total strain on the void misfit strain. The novel point in the present physical model is including the temperature dependence of elastic properties and void formation energy. Then, examples of nanovoid structure evolution are presented consisting of planar gas-solid interface formation and evolution, growth/annihilation of circular nanovoids at different temperatures, growth/annihilation of nanovoids under biaxial compression and at different temperatures and nanovoid structure evolution with initially, randomly distributed void pattern. The obtained results show a faster growth with larger amounts of void concentration at lower temperatures. Also, the stress field significantly varies during nanovoid size and the

Review History:

Received: 20 Apr. 2019 Revised: 8 Sep. 2019 Accepted: 22 Sep. 2019 Available Online: 28 Sep. 2019

Keywords: Nanovoid Phase field Finite element method.

1. Introduction

concentration.

Voids appear in materials by natural activities, and aging in working environments. When voids are behave as defects, they are regarded as having a bad result on material properties. In the most highly engineered dense materials, defects such as voids will make trouble for the design of real structures. Nanovoid were discovered in nickel in 1970 [1]. Several models were built based on the rate theory to simulate void evolution [2,3]. While rate theory is an important method for forecast the average behavior of the material, cannot prepare information on the micro/nanostructure property evolution. The computational cost of rate theory high, and therefore is primarily done in 1 Dimensional (1D) for sizes up to 100 nm.

Phase Field Approach (PFA) has been extensively used to simulate evolution of nano/microstructure [4,5]. The essential advantage of the PFA is to obtain the microstructure without need to track interfaces. The PFA, as an intermediate between continuum thermodynamic and the atomistic approaches, resolves issue at the nanoscale and also allows one to consider case and time much larger than in atomistic modeling. It also consist of much more information than traditional thermodynamic approaches since the Phase Field (PF) potential is determined for all intermediate states between phases and at interfaces.

In this paper PFA is used to study the evolution of nanovoids under thermal and mechanical loadings. To do

*Corresponding author's email: javanbakht@cc.iut.ac.ir

so, the coupled system of the Cahn-Hilliard and elasticity equations is solved using the nonlinear finite element method in 2D. This coupling is due to the presence of elastic energy in the Cahn-Hilliard free energy and the dependence of total strain on the void misfit strain. The novel point in the present physical model including the temperature dependence of elastic properties and void formation energy, the obtained results show a faster growth with larger amounts of void concentration at lower temperatures. Also, the stress field significantly varies during nanovoids evolution especially inside the solid-gas interface and its value depends on the nanovoid size and the concentration.

2. Coupled Mechanic and Phase Field Equation

The total free energy of the system is:

$$\psi(c, \nabla c, T, \varepsilon) = \int_{V} [\psi^{e} + \tilde{\psi} + \hat{\psi} + \psi^{\nabla}] dV$$
(1)

 ψ^e is the elastic energy and $\tilde{\psi}$ is the chemical free energy employed to describe the equilibrium between the matrix and

nanovoids, $\hat{\psi}$ is the free energy of mixing and ψ^{∇} shows the solid-gas gradient energy as [6,7]:

$$\psi = g_v c + g_a (1-c)$$

$$\hat{\psi} = E_v^f c(1-c) + k_B T [c \ln c + (1-c) \ln (1-c)]$$

$$\psi^{\nabla} = \kappa (\nabla c)^2$$
(2)

Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Amirkabir University Press. The content of this article is subject to the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-NC 4.0) License. For more information, please visit https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode.

where κ is the constant of gradient energy for the void matrix interface, gv is the chemical energy of vacancy and ga the chemical energy of matrix atom per unit volume. kB is the

Boltzmann's constant, *T* is the absolute temperature and E_v^f is vacancy formation energy.

The Cahn-Hilliard equation can be written as:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \left[M \nabla \left(\frac{\partial (\psi^e + \tilde{\psi} + \hat{\psi})}{\partial c} - 2\kappa \nabla^2 c \right) \right]$$
(3)

The elastic energy can be expressed as

$$\psi^{e} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_{e} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{0}) \tag{4}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u} + (\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u})^T \right]$$
(5)

where $\boldsymbol{\varepsilon}$ is total strain, u is the displacement vector and $\boldsymbol{\varepsilon}^{0}$ describes the misfit strain between nanovoid surface and matrix with form of $\varepsilon_{ij}^{0} = 2\varepsilon_{0}\delta_{ij}(1-c)c$. A positive $\boldsymbol{\varepsilon}_{0}$ describes pressure operating on a bubble surface and a negative describes a force toward the center of a nanovoid. Thus, the elastic stress from Eq. (4) can be written as:

$$\boldsymbol{\sigma}_{e} = \boldsymbol{C}^{0}(1-c)(\boldsymbol{\varepsilon}-\boldsymbol{\varepsilon}^{0}) \tag{6}$$

where C^0 is the elastic tensor of solid.

3. Result

The finite element method and the COMSOL code are used to solve the coupled mechanics and Cahn-Hilliard equations. An adoptive remeshing is used to prevent mesh divergence. The mesh size is chosen fine enough and equal to 0.1 so that the solution is mesh-independent. The following material property have been used (Table 1) for nanovoid dynamics modeling in Nickel [8];

Table 1. Nano nickel property

	•	· ·	
E(T)	E_{v}^{f}	к	М
-0.004T + 8.4	$-6.6 \times 10^{-8} T^2 - 3.3 \times 10^{-5} T + 14$	0.25	0.3

In order to validate, concentration profile of present work in stationary situation compared with the analytical solution [9] in Fig. 1 which show good agreement.

A square sample with the size of 10×10 nm² and periodic boundary conditions is considered. For the initial conditions, a circular void with the radius of 1 nm and the value of c = 0.4is located at the center of the square and the rest of the sample is c = 0.15. The misfit strain for the void is $\varepsilon_0 = -0.1\%$. The evolution of void in three different temperature are represented in Fig. 2. Fig. 2 represent amount effect of temperature and



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



Fig. 2. Effect of temperature on void evolution.

consequently change in elastic modulus and energy barrier in growth/annihilation of void in different time. As can be seen, void shrinkage in 1500 K but grow at 900 K and 300 K with different velocity.

4. Conclusions

In the present work, a phase field method is used to research the evolution of void under thermal and mechanical loadings. For this goal, the coupled system of the Cahn-Hilliard and elasticity equations is solved using the finite element method. This coupling is due to the presence of elastic energy in the Cahn-Hilliard free energy and the dependence of total strain on the void misfit strain. Results show a faster growth with larger amounts of void concentration at lower temperatures. Also, the stress field significantly varies during void evolution inside the solid-gas interface and its value depends on the void size and the concentration.

References

- D. Norris, Voids in nickel irradiated with electrons after previous argon ion bombardment, Nature, 227(5260) (1970) 830.
- [2] K. Russell, Thermodynamics of gas-containing voids in metals, Acta Metallurgica, 20(7) (1972) 899-907.

- [3] A. Semenov, C. Woo, Void lattice formation as a nonequilibrium phase transition, Physical Review B, 74(2) (2006) 024108.
- [4] H. Henry, H. Levine, Dynamic instabilities of fracture under biaxial strain using a phase field model, Physical review letters, 93(10) (2004) 105504.
- [5] V.I. Levitas, M. Javanbakht, Advanced phase-field approach to dislocation evolution, Physical Review B, 86(14) (2012) 140101.
- [6] H.-C. Yu, W. Lu, Dynamics of the self-assembly of nanovoids and nanobubbles in solids, Acta Materialia, 53(6) (2005) 1799-1807.
- [7] 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 superlattice self-organization under irradiation, Scientific reports, 8(1) (2018) 6629.
- [8] 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.
- [9] 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.

This page intentionally left blank

نشريه مهندسي مكانيك اميركبير



نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر، دوره ۵۲، شماره ۱۲، سال ۱۳۹۹، صفحات ۳۵۲۱ تا ۳۵۳۲ DOI: 10.22060/mej.2019.16169.6293

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'، مهدی جوانبخت'*

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

خلاصه: در این مقاله، روش میدان فازی به منظور مطالعه رشد و از بین رفتن نانوحفرهها تحت دما و بارمکانیکی مورد ^ا استفاده قرار گرفته است. بدین منظور، معادلات سینتیک کان – هیلیارد یا نفوذ و معادلات الاستیسیته ایستایی بر پایه کرنشهای کوچک با یکدیگر کوپل گردیده و با استفاده از روش اجزای محدود غیرخطی در فضای کارتزین دو بعدی حل ب شدهاند. این کوپلینگ از طریق حضور انرژی کرنشی در تابع انرژی آزاد کان – هیلیارد و وابستگی کرنش کل به کرنش غیرالاستیک حفره صورت میپذیرد. نکته جدید و قابل توجه در مدل سازی فیزیکی حاضر، لحاظ نمودن وابستگی هم زمان خواص الاستیک و انرژی تشکیل حفره به دما است و بر این اساس شبیه سازی هایی بر روی تغییرات نانوساختار حفره نامام 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 نانوساختار با توزیع تصادفی غلظت حفره مورد مطالعه قرار گرفته است. از نتایج مهم می توان به رشد سریعتر حفره و مقادیر بالاتر غلظت بدست آمده در دماهای مختلف، رشد یا از بین رفتن میدان توزیع تنش با رشد و از بین رفتن حفرهها به خصوص در ناحیه صدی مانی کار منور مطالعه قرار گرفته است. میدان توزیع تنش با رشد و از بین رفتن حفرهها به خصوص در ناحیه صفحه مشترک گاز– جامد به شدت تغییر می یابد و مقدار تنش کل نیز با افزایش غلظت و اندازه حفره هاید می هم تو مشتری گاز– جامد به شدت تغییر می یابد

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 – هیلیارد و الاستیسیته روش اجزای محدود.

۱- مقدمه

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 ابعادنانو، 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 نانوحفره برای نخستین بار در سال ۱۹۷۰ در نیکل کشف شد [۲]. [۳ و ۴]. مدلهای زیادی بر اساس نظریه نرخ واکنش برای مطالعه جوانهزنی و رشد حفره طراحی شدند [۲–۵]. کاتس و ویدرزیخ [۵]

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.

(Creative Commons License) حقوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) (Creative Commons License) حقوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) (Creative Commons License) (Creative Commons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode دیدن فرمائید.

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

چهار برابر بزرگتر از تحرک حفره باشد. آنها همچنین مدلی برمبنای معادله کان- هیلیارد بدون در نظر گرفتن اتمهای درون شبکهای و برهم کنش الاستیک برای مطالعه حرکت حفره در میدان گرادیان دمایی ساخته ارائه نمودند [۲۳]. مدل سازی آن ها 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 کویل کان - هیلیارد و آلن - کان برای فلز تک کریستالی پیشبینی کردند. میلت و همکاران [۲۷-۲۵] در ابتدا معادلات مرسوم میدان فاز برای توصیف سینتیک با درنظر گرفتن تاثیر تحریک بر عيوب ارائه كردند و سپس نتايج تغييرات 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 توليد حفره تحت تشعشع، نابودي حفره و انتشار حفره مورد استفاده قرار گرفت [۲۸]. ژیائو 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 می شود. 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 كوپل معادلات كان - هيليارد و آلن-كان براى تغييرات 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 میلت [۳۳] مدل میدان

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 سیرتکاملی نانوساختارها بدون نیاز به حدس و پیش بینی اتفاقات احتمالي و دنبال كردن صفحات مشترك فازي 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 می گیرد. از این جهت روش میدان فاز ابزار قدرتمندی برای برای حل مسائل پیچیده مانند انجماد [1۳]، جوانهزنی و انتشار ترک [۱۴]، تفجوشی [۱۵]، رشد مرزدانهها [۱۶]، تغییرات نابجایی [۱۷] و بازهی گستردهای از مسائل استحاله فازى مىباشد [٢٠-١٨]. معادله معروف كان- هيليارد براى 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، کوپلیمر دستهای، جریان سیال چندفازی، ریزساختار با الاستیک ناهمسان، مدلسازی رشد تومور و بهینهسازی توپولوژی گسترش یافت. معادله کان- هیلیارد معادله ی غیرخطی دیفرانسیلی با مشتقات جزیی از مرتبه چهار است که اخیرا 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 هناجر [۲۲] مدل میدان فازی فقط براساس معادلات کان- هیلیارد بدون در نظر گرفتن برهم کنش 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 برهم کنش 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 می شود که تحرک اتم بیننشین،

فازی برای مهاجرت حفرهها درپیلهای سوختی اکسید تحت گرادیان دمایی ارائه کردند. مدل ارائه شده بر پایه معادله کان- هیلیارد 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 سينتيك كان - هيليارد يا نفوذ و معادلات الاستيسيته 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- هیلیارد و نیز وابستگی کرنش کل به کرنش غیرالاستیک حفره مىباشد. با توجه به وابستگى همزمان خواص الاستيک و نيز 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 نانوساختار 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. ازاین رو شبیهسازیهایی شامل تغییرات نانوساختار 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 نانوساختار 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-هیلیارد 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 ۲–۱ صفحه مشترک جامد-گاز مستقیم تحت دما مورد بررسی قرار گرفته و تغییرات نانوساختار 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 نانوساختار و 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 ۳-۴ تاثیرات تغییرات دما و ثابت الاستیک بر رشد و نابودی حفره ها با توزیع اولیه تصادفی آنها مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- سیستم معادلات

در مدل میدان فاز، برای توصیف تغییرات ریزساختار از متغیرهای پيوسته پايستار (معادله كان- هيليارد) و يا غيرپايستار (معادله آلن-کان) استفاده می گردد که با عنوان پارامتر مشخصه ϕ که وابسته به مکان و زمان می باشد شناخته می شوند. در هر فاز یک مقدار مشخص به ϕ نسبت داده می شود و برای ناحیه مشترک بین دوفاز مقدار ϕ به صورت پیوسته بین مقادیر آن در دوفاز در تماس تغییر می کند. انرژی آزاد سیستم میتواند به صورت تابعی از پارامترهای مشخصه توصیف شود و تحولات سیستم توسط کاهش انرژی آزاد مشخص می گردد. 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 درنظر گرفته نمی شود (ضخامت صفر)، در روش میدان فاز صفحه مشترک اندازه معینی دارد که بر اساس رقابت انرژیهای مختلفی نظیر سطح و الاستیک تعیین می گردد. 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 می گردد. 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 می گردد که كمينهها متعلق به فازها يا حالات مطلوب بوده و بدين صورت تمامى روابط تعادل و پایداری فازی یا ساختاری مشخص می گردد. انرژی آزاد مجموع سیستم عبارت است از: $\psi(c, \nabla c, T, \boldsymbol{\varepsilon}) = \int [\psi^e + \tilde{\psi} + \hat{\psi} + \psi^{\nabla}] dV$ ())

T که در اینجا c میزان غلظت حفره، \mathfrak{F} تانسور کرنش کل و 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 می گردند [۲۱ و ۲۴]:

$$\begin{split} \tilde{\psi} &= g_{\nu}c + g_{a}(1-c) \\ \hat{\psi} &= E_{\nu}^{f}c(1-c) + k_{B}T \big[c\ln c + (1-c)\ln(1-c) \big] \end{split} \tag{7}$$

$$\psi^{\nabla} &= \kappa (\nabla c)^{2}$$

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

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot J \tag{(7)}$$

که در اینجا t زمان و J چگالی جریان حفره است که به صورت رابطه (۴) بیان می گردد:

$$J = -MP \tag{(f)}$$

M ضریب پویایی و P نیروی محرکه ترمودینامیکی است که به صورت گرادیان مشتق وردشی تابع انرژی نسبت به غلظت حفره c تعریف می گردد [۲۱ و ۲۴]:

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

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

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \left[M \nabla \left(\frac{\partial (\psi^e + \tilde{\psi} + \psi)}{\partial c} - 2\kappa \nabla^2 c \right) \right]$$
(8)

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

صورت رابطههای (۲) و (۸) بیان می گردند:

$$\psi^{e} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_{e}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{0}) \tag{Y}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \Big[\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u} + (\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u})^T \Big] \tag{A}$$

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

$$\boldsymbol{\sigma}_{e} = \boldsymbol{C}^{0}(1-c)(\boldsymbol{\varepsilon}-\boldsymbol{\varepsilon}^{0}) \tag{9}$$

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 $\tau = \nabla c \cdot n = 0$ در نظر گرفته شده است که n بردار نرمال بر مرز نمونه میباشد و این شرط به این معنی است که سیستم عاری از هرگونه شارخارجی 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 با ۲/۰ نانومتر استفاده شده است تا نتایج حل مستقل از شبکه بندی تطبیقپذیر همچنین، برای جلوگیری از واگرایی حل از شبکه بندی تطبیقپذیر

¹ Phase Field

² Stationary Structural



[۳۷] تحلیلی [۳۷] Fig. 1. Comparison of concentration profile of stationary void





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



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

نمونه مربعی با ابعاد $nm^2 \cdot 1 \cdot nm^2$ 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- هیلیارد نیز برای همه اضلاع ایزوله در نظر گرفته شده است. برای شرایط اولیه، قسمت مستطیلی از نمونه با ابعاد $1 \cdot nm^2$ در نرم افزار استفاده می شود. 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 می گردد 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. نتيجه آن استخراج متغير غلظت حفره از معادله كان- هيليارد در هرگام زمانی می باشد. سیس متغیر غلظت حفره وارد معادلات الاستیسیته شده و متغیرهای جابجایی و در نتیجه تنش و کرنش استخراج می گردند. درنهایت تنش در معادلات کان- هیلیارد وارد شده و متغیر غلظت حفره استخراج می گردد و به همین ترتیب برای گام زمانی بعد حل تکرار می شود. 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 مدل سازی 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	K	М
-0.004T + 8.4	$-6.6 \times 10^{-8} T^2 - 3.3 \times 10^{-5} T + 14$	۰/۲۵	۰/٣

e.V/nm³ و ۱ sm نرمالایز شدهاند. به منظور صحت سنجی نتایج، ۱ nm،۱۰۰ و ms نرمالایز شدهاند. به منظور صحت سنجی نتایج، پروفایل حفره تعادلی حاصل از نتایج شبیه سازی با پروفایل حل تحلیلی مربوطه [۳۷] در شکل ۱ مقایسه گردیده که تطابق بسیار خوبی را نشان می دهد. هم چنین، نتایج شبیه سازی 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 می شود نتایج شبیه سازی و آزمایشگاهی هر دو روند یکسانی برای تغییر اندازه حفره بر حسب دما ارائه می نمایند. به لحاظ کمی نیز علیرغم عدم امکان در نظر گرفتن همه عوامل واقعی در شبیه سازی و نیز دوبعدی بودن آن ها، تطابق قابل قبولی به لحاظ کمی بین شبیه سازی و آزمایش دیده می شود.

¹ Segregated



شکل ۳. تغییرات نانوساختار حفره و میدان تنش کل در دماهای ۱۵۰۰، ۹۰۰ و ۳۰۰ کلوین Fig. 3. Void evolution in nanostructure and stress distribution in 1500, 900 and 300K

K مقدار غلظت حفره به مقدار ماکمزیمم متمایل میشود. برای دمای K مقدار غلظت حفره به مقدار ماکمزیمم متمایل میشود. برای دمای پایین است. و این به معنی سریعتر بودن تشکیل حفره در دمای پایین است. همچنین، مقدار حفرههای ایجاد شده نیز بیشتر است. بررسی میدان توزیع تنش $v_{\sigma} + x_{\sigma}$ 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 بهشدت تغییر مینماید و ناهمگن میگردد به طوری که برای دمای K با ایجاد صفحه شدن آن تنش کاهش مییابد. همچنین برای دماهای پایین تر به دلیل شدن آن تنش کاهش مییابد. همچنین برای دماهای پایین تر به دلیل ایجاد حفرههای دایروی تمرکز تنش در این ناحیه بالا رفته و با محو جامد توزیع دایروی ایجاد نموده است. نکته قابل ذکر برهمکنش میدانهای تنش صفحه مشترک مستقیم و حفرههای دایروی در میدانهای تنش صفحه مشترک مستقیم و حفرههای دایروی در و تعین میدان تنش نهایی نمونه است. همچنین، برمبنای پروفایل با غلظت حفره (۵) برابر ۸/۸ و غلظت باقیمانده نمونه برابر ۲/۲ در نظر گرفته شده است. کرنش غیرالاستیک حفره ٪ /۱۰ - 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 ۸/۱ و ۲/۲ 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 ۲۵۰۰ به غلظت ماکزیمم شروع به رشد کردن مینماید که برای ۲۵۰۰ به منظت ماکزیمم بین میرود. در حالی که در دو دمای پایینتر ۳۰۰ و ۹۰۰ کلوین، صفحه مشترک ایجاد شده به مقادیر بالاتری از غلظت میرسد (۸/۱) و در ادامه صفحه مشترک گاز جامد مستقیم با ایجاد ناهماهنگی و در ادامه صفحه مشترک گاز جامد مستقیم با ایجاد ناهماهنگی



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

مرزی متناوب مکانیکی بر مرزهای آن اعمال شده است. برای شرایط اولیه جوانه حفرهی دایروی با شعاع ۱ نانومتر و با غلظت 1/۰ در مرکز نمونه در نظر گرفته شده است. غلظت باقیمانده نمونه 1/۰ و مقدار کرنش غیرالاستیک حفره 1/۰ - در نظر گرفته شده است. چگونگی تحول نانوساختار 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 ۲۰۰ از بین میرود در حالی که در دماهای ۹۰۰ و ۳۰۰ کلوین رشد میکند. همچنین سرعت افزایش غلظت در دمای K میش از ۲۰۰ 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 جایخالی میگردد.

بخاطر حجمی بودن کرنش غیرالاستیک متناظر حفره، دنبال بخاطر حجمی بودن کرنش غیرالاستیک متناظر حفره، دنبال کردن توزیع جمع مولفه های عمودی تنش ($^{v} + \sigma^{v}$) هنگام تغییرات معقول میباشد. تغییرات پروفایل تنش کل ($^{v} + \sigma^{v}$) در زمان ms معقول میباشد. تغییرات پروفایل تنش کل ($^{v} - \sigma^{x} + \sigma^{v}$) در زمان ms محمد شکل ۶ برای دماهای ۱۵۰۰، ۹۰۰ و ۳۰۰ کلوین رسم شده است. تنش کل با افزایش غلظت و اندازه حفره تغییر می کند. برای دمای ۳۰۰ کلوین ، می کند. برای دمای ۳۰۰ کلوین ، می کند. برای دمای ۳۰۰ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند می کند می محمد می کند. می محمد می کند و. ۷/۳۳ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند محمد محمد محمد می کند. برای دمای ۳۰۰ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند است. تنش کل به مورت سهمی افزایش پیدا می کند برای دمای دمای ۳۰۰ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند برای دمای ۳۰۰ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند برای دمای ۳۰۰ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند برای دمای دمای ۳۰۰ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند برای دمای درای در بی تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند برای درمای ۳۰۰ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند برای درمای ۳۰۰ کلوین، تنش کل به صورت سهمی افزایش پیدا می کند بی ترین نمای ۲۰۰ در بیشترین در بی ترین معدار خود یعنی ۳۰۰ در بی زمان، غلظت حفره کاهش و است در دمای K این می درد. در نتیجه ناحیه مشتر ک جامد گاز عملا نهایتا حفره از بین می درد. در نتیجه ناحیه مشتر ک جامد گاز عملا



شکل ۵. نمایش تاثیر دما در رشد و نابودی حفره Fig. 5. Effect of temperature on void annihilation and growth.

نمونه مربعی با ابعاد ۱۰ nm² در نظر گرفته شده و شرایط



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 نمی گردد؛ لذا با نزدیک شدن به مرکز حفره تغییرات زیادی در نمودار تنش ملاحظه نمی گردد (شکل ۶). در مقابل، در دماهای ۲۰۰K و ۲۰۰K به علت بالا بودن غلظت حفره، صفحه مشترک جامد-گاز کامل می گردد و در نتیجه تمرکز تنش مربوطه ناشی از کرنش غیرالاستیک حفره پدیدار می گردد. 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 می گردد. (شکل ۶). با توجه به سرعت رشد بالاتر حفره در

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 ابعاد۴۰ nm² تحت تنش فشاری دو محوره برابر با ۱ مگایاسکال قرار گرفته است. برای شرط اولیه مساله کان - هیلیارد، حفره ناقصی به شعاع ۲ نانومتر و با مقدار غلظت ۰/۳ 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 nm² ۱۰×۱۰) بر مرزهای چپ و پایین آن مورد حل قرار می گیرد. شکل ۷ تحول نانوساختار حفره برای دماهای ۱۵۰۰، ۹۰۰ و ۳۰۰ 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 می باشد. سرعت حرکت صفحه مشترک گاز – جامد، که بر مبنای حرکت نقطه متناظر با غلظت ۵/۰ تعیین می گردد برای سه دمای بالا در شکل ۸ رسم شده است. نتایج بیانگر افزایش سرعت با کاهش دما است. در عین حال کاهش دما موجب كاهش ضخامت صفحه مشترك شده است.



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.



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 ۲mn ۱×۱۰ 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– هیلیارد نیز ایزوله میباشد. به منظور نزدیک نمودن شرایط شبیهسازی به واقعیت فیزیکی، شرایط اولیه حفرهها به صورت توزیع شبیهسازی به واقعیت فیزیکی، شرایط اولیه حفرهها به صورت توزیع آولیه تصادفی غلظت حفره با مقدار میانگین ۲/۳ و نوسانات ۲/۴ در نظر گرفته شده است. تحول نانوساختار حفره برای دماهای ۲۵۰۱، ۹۰۰ و ۲۰۰ 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 تقریبا

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 ۲۰۰K و ۲۰۰ 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 نانوساختارهای متفاوتی شود بدست دهد. با توجه به اهمیت تنش در کنار دما به عنوان نیروی محرکه ایجاد نانوحفرهها تعیین نانوساختار 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 بارمکانیکی، معادلات سینتیک کان – هیلیارد 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 نانوساختار حاصله در شرایط دمایی گوناگون و تحت بارگذاری مکانیکی مورد تحلیل قرار گرفته است. ازاین رو شبیهسازیهایی شامل تغییرات نانوساختار 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 نانوساختار با توزیع تصادفی غلظت حفره مورد مطالعه



شكل ٩. تغييرات نانوساختار حفره با شرط اوليه تصادفي Fig. 9. Void nanostructure change with randomly initial condition.

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 می باشد. 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 بهشدت تغییر می نماید و ناهمگن می گردد. 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 دومحوره 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 توزيع اوليه تصادفي غلظت حفره نيز رشد حفرهها با کم شدن دما با سرعت بیشتری انجام می شود و لذا این افزایش سرعت مستقل از نوع شرایط اولیه نانوحفرهها است. نکته قابل توجه در این است که علیرغم تصادفی بودن شرایط اولیه حفرهها، مکانهای رشد حفرهها در زمانهای بالاتر برای دماهای مورد مطالعه تقریبا یکی است و این بیانگر مستقل بودن مینیمههای 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 نانوحفرهها تعيين نانوساختار و وابستكي تنش به ثوابت الاستيك، لحاظ نمودن وابستگی ثوابت که در این مقاله انجام پذیرفته است برای محاسبه درست ميدان تنش بسيار مهم مى باشد. همچنين، وابستگى مانع انرژی برای تشکیل حفره به دما در این مقاله لحاظ گردیده که امکان تعیین محدوده دمایی فیزیکی رشد و یا از بین رفتن نانوحفره را بدست میدهد. مدل ارائه شده برای بررسی محدوده دما و تنش رشد و یا از بین فتن نانو حفرهها با هندسههای گوناگون و شرایط مرزی مختلف در آینده مورد استفاده قرار می گیرد.

فهرست علائم

علائم انگلیسی

- J/K ثابت بولتزمن، k_B
- N/m² مدول الاستيسيته، E
 - T دمای مطلق، K
- e.V انرژی تشکیل حفره، *Ev*f
 - *t* زمان، s

علائم يونانى

- kg/m^3 چگالی، ho
- e انرژی الاستیک ۷ انرژی آزاد شیمیایی ۷
- پ
 پ
 ښ
 ۱۰ انرژی آزاد مخلوط شدن
- پ نیروی تر کردیان جامد-گاز $\psi^
 abla$
 - پ روی و یا . **ج**^{el} کرنش الاستیک
 - **ع** كرنش غيرالاستيك
- N/m² ،تنش الاستيک ${\pmb \sigma}_e$
- N/m^2 مولفه x تنش کل، σ^x
- $\mathrm{N/m^2}$ مولفه y مولفه σ^y

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,

- [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, Phasefield 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

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 nickelcarbon 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