

Molecular dynamic simulation of effects of nickel, chromium and structural parameters on stress-strain characteristics of Fe-Ni-Cr Alloys in different temperature

Aliakbar Hasanzadeh, Ghasem Alahyarizadeh*

Faculty of Engineering, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran

Received: 04.03.2019 Final revised: 22.10.2020 Accepted: 19.01.2021

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16570](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16570)

Abstract

Austenitic stainless steel is widely used in the manufacture of reactor pressure vessels due to its mechanical properties and excellent resistance to corrosion in the water and vapor streams. Iron, nickel, and chromium are the main constituents of austenitic alloys. In this research, the role of nickel and chromium, as well as structural parameters on the stress-strain behavior of binary iron-nickel, iron-chromium, and ternary Fe-Ni-Cr alloys at different temperatures, were investigated by using molecular dynamics with two NVT and NPT ensembles. The simulation results show that the use of NVT ensemble leads to results with an error below 10% of the experimental data. Stress-strain curves of Fe-Cr, Fe-Ni, and Fe-Ni-Cr with different amounts of Ni and Cr indicate that increasing the amount of nickel and chromium will reduce Young's modulus. These results also show that Yield stress reduces by increasing Cr, while increases by increasing Ni. The effect of the size of the simulation box, the strain ratio and temperature on stress-strain behavior, Young's modulus, and Yield stress were also studied.

Keywords: Molecular dynamics, Fe-Ni-Cr austenitic alloys, Stress-strain curves, Young's modulus, Yield stress

* Corresponding Author: g_alahyarizadeh@yahoo.com



شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تأثیر نیکل، کروم و پارامترهای ساختاری بر مشخصات تنش-کرنش آلیاژ آهن-نیکل-کروم در دماهای مختلف

علی‌اکبر حسن‌زاده، قاسم اله یاری زاده*

دانشکده مهندسی، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

دریافت: 1397/12/13 ویرایش نهائی: 1399/08/01 پذیرش: 1399/10/30

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16570](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16570)

چکیده

فولاد ضدزنگ آستنیتی به‌خاطر خواص مکانیکی و مقاومت عالی در مقابل خوردگی در حضور آب و بخار آب، به‌طور گسترده‌ای در ساخت مخزن راکتورهای هسته‌ای تحت فشار استفاده می‌شوند. عناصر غالب در آلیاژهای آستنیتی، آهن، نیکل و کروم می‌باشند. در این پژوهش، نقش نیکل و کروم و همچنین پارامترهای ساختاری آلیاژ بر رفتار تنش-کرنش آلیاژهای دوتایی آهن-نیکل، آهن-کروم و سه‌تایی آهن-نیکل-کروم در دماهای مختلف با استفاده از دینامیک مولکولی و با دو هنگرد دما- فشار ثابت و دما-حجم ثابت مورد بررسی قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که استفاده از هنگرد دما-حجم ثابت منجر به نتایجی با خطای زیر 10 درصد نسبت به داده‌های تجربی می‌شود. منحنی‌های تنش-کرنش آلیاژهای دوتایی آهن-کروم، آهن-نیکل و سه‌تایی آهن-نیکل-کروم با مقادیر مختلف نیکل و کروم دلالت بر این دارد که افزایش مقدار نیکل و کروم باعث کاهش مدول یانگ می‌شود. این نتایج همچنین نشان می‌دهند که با افزایش مقدار کروم مقدار تنش تسلیم ماده کاهش پیدا می‌کند درحالی‌که با افزایش مقدار نیکل مقدار تنش تسلیم افزایش می‌یابد. شبیه‌سازی‌های اثر اندازه جعبه شبیه‌سازی، آهنگ کرنش و افزایش دما بر رفتار تنش-کرنش، مدول یانگ و تنش تسلیم نیز مورد مطالعه قرار گرفت.

کلیدواژگان: دینامیک مولکولی، آلیاژهای آستنیتی آهن، نیکل و کروم، منحنی‌های تنش-کرنش، مدول یانگ، تنش تسلیم

مقدمه

قسمت‌های مختلفی مثل سر بالا و سر پایین، ورودی‌ها و خروجی‌های آب و پوسته تشکیل شده است که به یکدیگر جوش داده می‌شوند. در فرایند جوشکاری معمولاً از آلیاژهایی که در ساخت خود مخزن تحت فشار به کار می‌برند، استفاده می‌شود [5-1] با توجه به شرایط کاری مخزن راکتورهای تحت فشار، از این جزء به‌عنوان یکی از اجزای بحرانی در نیروگاه‌های هسته‌ای یاد می‌کنند. بهینه‌سازی خواص مختلف مواد سازنده مخازن تحت فشار اعم از خواص مکانیکی، حرارتی و تابشی بخشی از فرایند طراحی مخزن به

یکی از اجزای اصلی و مهم در تمامی راکتورها به‌خصوص راکتورهای هسته‌ای، مخزن تحت فشار است. مخزن یک راکتور، بزرگ‌ترین قطعه طراحی شده برای نگهداری مجتمع‌های سوخت، خنک‌کننده‌ها و اتصالات نگه‌دارنده جریان خنک‌کننده است. با توجه به شرایط کاری یک راکتور هسته‌ای این مخزن از نوع فولادی، استوانه‌ای به‌همراه واکنش‌های حرارتی، دما و فشار بالا است. مهم‌ترین عامل برای ساخت مخزن در چنین شرایطی، انتخاب ماده مناسب است. این مخزن از

* نویسنده مسئول: g_alahyarizadeh@yahoo.com



مخازن تحت فشار اروپایی از یک پوشش فلزی در ساخت مخزن بهره گرفته شد ولی طی شرایط کاری ترک‌هایی در این پوشش به وجود آمد. مطالعات انجام شده نشان داد که عامل ایجاد این ترک‌ها عنصر کروم است. در این مخازن از جوش‌های فولادی شامل آلیاژهای منگنز-مولیبدن و نیکل-منگنز-مولیبدن در جوش‌های به کار برده شده در ساخت مخازن تحت فشار استفاده شد [6].

آقای تاناکا⁷ مطالعات گسترده‌ای در ارتباط با خصوصیات و فرایند تولید تجهیزات یک نیروگاه هسته‌ای از دهه 50 میلادی تا نسل جدید نیروگاه‌های 1600 مگاواتی داشته است. برای ساخت مخازن تحت فشار نیروگاه‌های هسته‌ای آلیاژهای SA533 Grade B و SA508 Class 2 به عنوان ماده استاندارد مورد استفاده در جهان معرفی شدند. برای جلوگیری از مشکل ترک خوردگی نیز از آلیاژ SA508 Class 2 و آلیاژ SA508 Class 3 استفاده شد که قابلیت جوش کاری بسیار مناسبی داشتند. برای از بین بردن اثرات مخربی همچون سختی، شکل پذیری و پیری حرارتی نیز می‌بایست میزان عناصری مانند فسفر، گوگرد، مس، آرسنیک، قلع، سرب، اکسیژن و هیدروژن از آلیاژ فولاد مورد نظر کاهش داده شوند. عناصر اصلی موجود در آلیاژ مانند کربن، نیکل، کروم، مولیبدنوم، سیلیسیم و منگنز و عناصر ناخالصی مانند فسفر، گوگرد و مس در نقاط جدایی شبکه ماده رسوب می‌کنند، که این امر باعث افزایش سختی پذیری (کاهش انعطاف پذیری) و بالا بردن احتمال وقوع شکست‌های مختلف می‌شود [7].

شمار می‌رود. این خواص به صورت گسترده‌ای تحت تأثیر عناصری مانند مس، نیکل، منگنز و فسفر قرار دارند که در سنگ معدن و هنگام تولید فولاد وجود دارند. مس همچنین هنگام جوش کاری به مواد آلیاژی این مخازن اضافه می‌شود. نیکل و منگنز از عناصر مهم در آلیاژهای فولاد هستند که خواص کششی و سختی پذیری کافی را تأمین می‌کنند. فولادهای امروزی با خالص سازی به حد قابل قبولی از مس و فسفر رسیده‌اند. جدول 1 فولادهای اولیه‌ای که در ساخت مخازن تحت فشار بکار گرفته شده‌اند را نشان می‌دهد.

جدول 1. فولادهای اولیه‌ای استفاده شده در ساخت مخازن تحت فشار

کد پایه آلیاژ فولادی	نوع مخزن تحت فشار	عناصر مؤثر در فولاد
A212B	تمامی مخازن تحت فشار ¹	C-Si
SA302B	تمامی مخازن تحت فشار	Mn-Mo
SA3028	تمامی مخازن تحت فشار	Mn-Mo-Ni
SA533B-1	مخزن راکتور تحت فشار ² ، مخزن فشارنده ³	Mn-Mo-Ni
SA533B-1 (low cu, p)	کمبرند ایمنی ⁴	Mn-Mo-Ni
SA533A	مبدل بخار ⁵	Mn-Mo

ساختار همه این فولادها از نوع فریتی کم آلیاژ است. حرف A نشان دهنده مشخصات استاندارد ASTM⁶ و حرف S نشان دهنده ماده قابل قبول کدهای ASTM در ساخت اجزای نیروگاه‌های هسته‌ای است. یکی از آلیاژهایی که به طور گسترده در ساخت مخازن تحت فشار استفاده می‌شد SA302 Grade B است. عناصر منگنز و مولیبدن، ماده اصلی ساخت این آلیاژ فولادی می‌باشند. بعد از سال‌های 1960 از فولادهای آستنیتی برای ساخت مخازن تحت فشار استفاده شد. در

⁵ Steam generator

⁶ American Society for Testing and Materials

⁷ Y. Tanaka

¹ All Pressure Vessels

² Reactor Pressure Vessel

³ Pressurizer

⁴ Beltline

تحت فشار راکتور هسته‌ای به کار می‌روند. ماده مشترک این فولادها نیکل، منگنز و مولیبدن است. این نوع از فولادها مقاومت خوبی در دمای 350 درجه سانتی‌گراد تحت فشار 300 الی 500 مگا پاسکال دارند [10]. فولاد ضدزنگ آستنیتی⁴ خواص مکانیکی و مقاومت خوردگی خوبی در حضور آب و بخار آب داغ دارد [10]. پس از مشاهده عیب‌های به وجود آمده در ساختار فریتی و بینیتی مواد مورد استفاده در ساخت مخزن راکتورهای هسته‌ای تحت فشار، ساختار آستنیتی آلیاژهای فولادی بیشتر مورد توجه قرار گرفت. فولادهای ضدزنگ آستنیتی از معروف‌ترین نوع فولاد ضدزنگ به شمار می‌روند. این فولادها قابلیت جوشکاری و فرم پذیری بالایی دارند و معمولاً بیش از 6 درصد وزنی نیکل و 16 درصد وزنی کروم دارند [11]. فولادهای ضدزنگ آستنیتی در شرایط کاری دمای بالا، نسبت به تغییر طول، اکسید شدن و خوردگی مقاومت بالایی از خود نشان می‌دهند. به همین علت از آنها در ساخت لوله‌ها، مخازن حاوی مواد خورنده و مبدل‌ها استفاده می‌شود. شبکه ساختاری فولاد آستنیتی به صورت مکعبی وجوه مرکز پر است⁵. برای مقاومت بهتر در برابر خوردگی در ساختار فولادی این آلیاژ تقریباً 10 الی 14 درصد وزنی نیکل و 18 الی 20 درصد وزنی کروم وجود دارد [12]. از ویژگی‌های دیگر فولاد ضدزنگ آستنیتی می‌توان به قابلیت ماشین‌کاری آسان، انعطاف‌پذیری بالا و ضریب رسانش گرمایی پایین⁶ اشاره کرد. فولاد ضدزنگ آستنیتی از مجموعه آلیاژهای مختلفی با نام‌های سری 100، 200، 300 و 400 تشکیل شده است. فولاد ضدزنگ آستنیتی سری 300 به صورت گسترده در ساخت تجهیزات هسته‌ای به کار می‌رود. این فولاد حاوی حداقل 0,04 درصد وزنی و حداکثر

آقای بروموسکی¹ با بررسی درصد عناصر و خواص مکانیکی راکتورهای ساخت روسیه نشان داد که وجود نیکل با مقدار بیشتر از 1/5 درصد جرمی همراه با منگنز بیشتر از 0,8 درصد جرمی باعث افزایش شکنندگی در ناحیه جوش‌ها می‌شود. ناخالصی‌های موجود در فولاد مخازن تحت فشار راکتورهای VVER² روسی نظیر مس، گوگرد و فسفر طی سال‌های 1960 تا 2000 به زیر 0,1 درصد کاهش پیدا کردند [8]. آقای بروموسکی همچنین با بررسی تخصصی پدیده شکست در مخازن تحت فشار راکتورهای روسی به این نتیجه رسید که اکثر تغییرات ساختاری در مواد مخزن راکتور از ساختار بینیتی³ شروع می‌شود. از تغییرات خواص مکانیکی فولاد مخزن تحت فشار می‌توان به سخت شدن ساختار بینیتی ریزساختارها، ایجاد خلأ و خالی شدن فضای بین اتم‌ها و عدم انعطاف‌پذیری اشاره کرد. تجمع اتم‌ها، ایجاد رسوب و سخت شدن به علت حضور عناصری همچون مس، فسفر، نیکل و منگنز است [9].

مطالعات انجام شده بر پایگاه داده‌های نظارت بر فولاد مخازن تحت فشار راکتورهای هسته‌ای کشورهای آمریکا، فرانسه و ژاپن نشان دادند که این فولادها از نوع کم آلیاژ هستند و اکثراً ساختار بینیتی دارند. ساختار بینیتی این آلیاژها دچار آسیب‌های ساختاری، تغییر شکل، شکل‌گیری رسوب غنی از مس و جدایی در مرزخانه‌ها می‌شود. مخازن تحت فشار راکتورهای آب سبک غربی در قسمت کمربند ایمنی از مواد مختلفی استفاده می‌کنند. همچنین فولاد SA508 Class 2 و SA508 Class 3 در آمریکا، 22NiMoCr37 (معادل SA508 Class 2) و 20MnMoNi55 (معادل SA508 Class 3) در آلمان و 16MND5 (معادل SA 508 Class 3) در فرانسه برای ساخت مخازن

⁴ Austenitic stainless steels

⁵ Face-centered cubic

⁶ Low thermal conductivity

¹ M. Brumovsky

² Water-Water Energetic Reactor

³ Bainite structure

1997 با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، این پتانسیل برای بررسی ساختار هسته و دینامیک جابجایی فولاد آستنیتی در حضور و بدون حضور نیتروژن به کار گرفته شد [17]. آقای باکاو¹⁰ و همکاران با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی در سال 2013 به بررسی نقص های به وجود آمده در آلیاژ آستنیتی آهن-نیکل (10)-کروم (20) پرداختند [18]. ایشان در سال 2014 با شبیه سازی برهم کنش اتمی به بررسی همین آلیاژ در اثر برهم کنش میان جابجایی در لبه¹¹ در دمای 300 الی 900 درجه کلوین پرداختند [19]. همچنین در ادامه در سال 2015 برهم کنش میان جابجایی حرکتی¹² و حلقه های جابجایی کامل¹³ را با استفاده از دینامیک مولکولی شبیه سازی کردند [20]. آقای ترنتیو¹⁴ و باکاو در سال 2013 با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی برهم کنش میان حلقه های فرانک¹⁵ با ابعاد 2 تا 5 نانومتر و جابجایی پیچشی آلیاژ آهن-نیکل (10)-کروم (20) را مورد مطالعه قرار دادند. این کار با استفاده از پتانسیل بین اتمی آهن-نیکل-کروم که برای فولاد آستنیتی 304 و 316 طراحی شده بود اجرا شد. فاز مرکز وجوه پر برای این پتانسیل بسیار پایدار است [21]. آقای تانگ¹⁶ و همکاران در سال 2016 پتانسیل بین اتمی آهن-نیکل-کروم-نیتروژن را با استفاده از روش اتم جفت شده اصلاح شده¹⁷ گسترش دادند. پارامترهای پتانسیل برای حالت های دوتایی کروم-نیتروژن، نیکل-نیتروژن، آهن-نیکل و نیکل-کروم بر اساس ثابت شبکه، خواص الاستیک و معادلات گرما محاسبه شدند. پارامترهای پتانسیل برای حالت سه تایی نیز متناظر با

0,1 درصد وزنی کربن می باشند. از معروف ترین پایه های آلیاژی گروه 300 می توان به پایه های صنعتی 304 حاوی 8 درصد وزنی نیکل و 18 درصد وزنی کروم و پایه 316 حاوی 14 درصد وزنی نیکل و 16 الی 18 درصد وزنی کروم اشاره کرد [13]. در حال حاضر فولادهای ضد زنگ آستنیتی به صورت وسیعی در ساخت راکتورهای آب تحت فشار و راکتورهای آب جوشان¹ مورد استفاده قرار می گیرند. از این فولادها همچنین برای ساخت راکتورهای با فناوری پیشرفته نظیر راکتورهای زاینده سریع² استفاده می شود. به دلیل محیط خاص راکتور هسته ای، استانداردهای صنعتی فولاد ضد زنگ ارتقا پیدا کرده است. این استانداردها با پایه های صنعتی 304، 316، 321 و 347 معرفی می شوند [14].

آقایان گروجسک³ و ژو⁴ در سال 1993 برای تحلیل اندرکنش های بین اتمی⁵ با استفاده از روش اتم جفت شده⁶ نیروهای بین اتمی یا همان پتانسیل بین اتمی را ارائه کردند. این پتانسیل برای فولاد آستنیتی آهن-نیکل-کروم-نیتروژن⁷ و با استفاده از داده های آزمایشگاهی شامل ضرایب الاستیک، ضرایب حرارتی و انرژی بستگی ساختارهای مرکز پر⁸ و مراکز وجوه پر⁹ ساخته شده است. این پتانسیل برای نمایش انتقال فاز در ساختار و مرزدهانه ها توسط شبیه سازی کامپیوتری نیاز به مطالعات بیشتری دارد [15]. این گروه در ادامه در سال 1995 پتانسیل آهن-نیکل-کروم-نیتروژن را بدون حضور نیتروژن و با حضور نیتروژن برای بررسی خواص جابجایی ارتقا دادند [16]. همچنین در سال

¹⁰ A. Bakaev

¹¹ Mobile Edge Dislocations

¹² Mobile Dislocations

¹³ Perfect Dislocation Loops

¹⁴ D. Terentyev

¹⁵ Frank Loops

¹⁶ Ke Tong

¹⁷ Modified embedded-atom method (MEAM)

¹ Boiling water reactors

² Fast breeder reactors

³ M. Gruzicic

⁴ X.W. Zhou

⁵ Atomic interactions

⁶ Embedded Atom Method (EAM)

⁷ Fe-Ni-Cr-N

⁸ Body Centered Cubic (BCC)

⁹ Face Centered Cubic (FCC)

تنش-کرنش این آلیاژها در دماها و تحت آهنگ‌های کرنش مختلف می‌باشد. لذا در این پژوهش، نقش نیکل و کروم و همچنین پارامترهای ساختاری آلیاژ بر رفتار تنش-کرنش مورد بررسی قرار گرفته است.

روش‌شناسی

شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای برای حل برخی از مسائل مکانیک آماری نقش مهمی را ایفا می‌کنند. روش‌های شبیه‌سازی از لحاظ کم‌هزینه بودن، کنترل‌پذیر بودن و برخی مزایای دیگر نسبت به روش‌های آزمایشگاهی ترجیح داده می‌شوند. امروزه با پیشرفت فناوری رایانه‌ها، به شبیه‌سازی‌هایی که در آن‌ها محاسبه خواص مواد با استفاده از ساختار ذرات تشکیل‌دهنده آن‌ها انجام می‌گیرد توجه ویژه‌ای می‌شود. با استفاده از شبیه‌سازی می‌توان یک موج کوبشی، یک پلاسمای با دمای بالا و یا یک راکتور هسته‌ای را شبیه‌سازی، اجرا و داده‌های آن را استخراج کرد. شبیه‌سازی در مقیاس مولکولی شامل سه مرحله اصلی الف) ساختن مدل ب) محاسبه مسیرهای مولکولی ج) تجزیه و تحلیل مسیرها و محاسبه خواص مکانیکی و ترمودینامیکی است. در شبیه‌سازی به‌روش دینامیک مولکولی، رفتار دینامیکی واقعی سیستم محاسبه شده و با میانگین زمانی، خواص سیستم اندازه‌گیری می‌شوند. موقعیت تمامی اتم‌ها با استفاده از حل معادلات حرکت نیوتون به‌صورت تکراری محاسبه می‌شود. در دینامیک مولکولی با استفاده از حالت سیستم در زمان فعلی می‌توان حالت سیستم در لحظه بعدی را پیش‌بینی کرد، از این‌رو این روش جزء روش‌های تعینی¹ می‌باشد [25]. اصولاً برای حل مسائل دینامیکی از روش‌های تعینی استفاده می‌شود که دارای سرعت همگرایی بالا هستند. در این روش محاسبات به‌نحوی صورت می‌گیرد که نیازی به تشکیل ماتریس سختی نمی‌باشد. در این روش وضعیت

حالت‌های دوتایی محاسبه شدند. در پایان محاسبات انجام‌شده به سیستم چهارتایی آهن-نیکل-کروم-نیتروژن اعمال شد و با استفاده از آن، فولاد ضدزنگ آستنیتی 316 حاوی مقادیر مختلفی از نیتروژن مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج حاصل از پتانسیل دقت خوبی با مشاهده‌های تجربی را نشان می‌داد [22]. بونی و همکاران در سال 2011 برای بررسی خواص مکانیکی آلیاژ آهن-نیکل-کروم، پتانسیلی را ارائه کردند که در آن از ویژگی‌های فولاد ضد زنگ 316L برای همخوانی بیشتر روابط ریاضی با داده‌های تجربی استفاده شده است. این پتانسیل در دمای 0 الی 900 کلون دقت بالایی از خود نشان داد [23]. ایشان در ادامه برای بررسی خواص پرتوها بر ویژگی‌های این آلیاژ در سال 2013 پتانسیل دیگری را ارائه کردند [24]. مبنای انجام این پژوهش فولاد ضد زنگ آستنیتی 316 است که بیشترین استفاده در ساخت مخزن راکتورهای هسته‌ای را دارد.

به‌دلیل هزینه بالای ساخت و انجام آزمایش‌های متعدد بر روی چنین مواد پیشرفته با جنس خاص فولاد خالص‌سازی شده، از علم دینامیک مولکولی که ابزاری قدرتمند برای تعیین و پیش‌بینی خواص مکانیکی و حرارتی آلیاژهای فلزی تحت دماها و فشارهای مختلف هستند، استفاده می‌شود. اجرای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی موجب صرفه‌جویی در زمان و هزینه در قبال آزمایش‌های تجربی می‌شود. برای ساخت راکتورهای هسته‌ای در کشورهای مختلف از فولادهای ضدزنگ خاصی استفاده می‌شود که تفاوت آن‌ها در ترکیب درصد عناصر تشکیل‌دهنده موجود در آن است. عناصر غالب در آلیاژهای مورد استفاده برای ساخت راکتورهای این نسل، آهن، نیکل و کروم می‌باشند. یکی از مباحث مهم قابل بحث در این حوزه، بررسی رفتار

¹ Explicit method

جاری مسئله در زمان t مشخص است و مسئله برای زمان $t+dt$ حل می شود.

یکی از بسترهای شبیه سازی با قابلیت حل موازی معادلات برای سیستم های مولکولی یا اتمی در مقیاس بزرگ (تعداد اتم های بالا) تحت عنوان لمپس¹ معرفی می شود. با استفاده از این کد محاسباتی و با اختصاص دادن میدان های نیروی مختلف (بر هر سیستم نیروی متناسب با آن سیستم)، می توان سیستم های مختلفی نظیر سیستم های اتمی، مولکولی، انواع پروتئین ها و سلول های زیستی را شبیه سازی کرد. از ویژگی های مهم این نرم افزار قابلیت آن در شبیه سازی سیستم هایی با تعداد بالای اتم است. نرم افزار محاسباتی لمپس طبق مبانی نظریه های دینامیک مولکولی که اولین بار در دهه های 50 و 60 میلادی از آن استفاده شد، عمل می کند [26,27].

پتانسیل بین اتمی

پتانسیل بین اتمی در واقع بیان کننده نیروهای بین اتم های یک ماده است. با استفاده از پتانسیل های بین اتمی می توان یک سیستم شامل صدها میلیون ذره را به وسیله دینامیک مولکولی کلاسیک مدل سازی کرد. این پتانسیل ها با استفاده از پارامترها و روابط ریاضی موجود بین اتم ها نوشته شده و تئوری ها را همانند نتایج آزمایشگاهی برای به دست آوردن مقدار دقیق آن ها مورد بررسی قرار می دهند. در حقیقت انعطاف پذیری، دقت و کارایی محاسبات هر پتانسیل بین اتمی منجر به بالا رفتن دقت نتایج محاسبات حاصل از شبیه سازی می شود.

روش اتم جفت شده² یکی از روش هایی است که برای توصیف برهم کنش های بین اتمی طراحی شده و به طور

گسترده ای برای بررسی رفتار فولادها و آلیاژهای فولادی به کار می رود. پتانسیل های اتم جفت شده به وسیله معادله¹ توصیف می شوند. همان طور که در این معادله دیده می شود، علاوه بر برهم کنش های دوتایی (V) این نوع پتانسیل شامل انرژی جفت شده (F) نیز می باشد که وابسته به چگالی الکترونی (ρ) است.

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ j \neq i}}^N V_{t_i t_j} (r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F_{t_i} (\rho_i) \quad 1$$

در این معادله N تعداد کل اتم های سیستم، r_{ij} فاصله بین اتم های i و j و t_i عنصر مورد نظر را نشان می دهد که در اینجا آهن، نیکل و کروم می باشند. چگالی الکترونی پیرامون اتم i که در همسایگی آن قرار دارد نیز از معادله² محاسبه می شود:

$$\rho_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \phi_{t_j} (r_{ij}) \quad 2$$

که در آن Φ تابع چگالی الکترونی عنصر مورد نظر است، بنابراین برای آلیاژ سه تایی FeNiCr به دوازده تابع برای توصیف پتانسیل نیاز است که عبارت اند از V_{CrCr} ، V_{NiNi} ، V_{FeFe} ، F_{Cr} ، F_{Ni} ، F_{Fe} ، Φ_{Cr} ، Φ_{Ni} ، Φ_{Fe} ، V_{NiCr} و V_{FeCr} ، V_{FeNi} در این پتانسیل، تابع چگالی الکترونی Φ با استفاده از تابع عملگر توماس-فرمی³ محاسبه می شود.

$$\phi(r) = S \frac{\exp(-\beta r)}{r} \frac{x^4}{1+x^4} \quad 3$$

² Embedded-Atom Method (EAM)

³ Thomas-Fermi

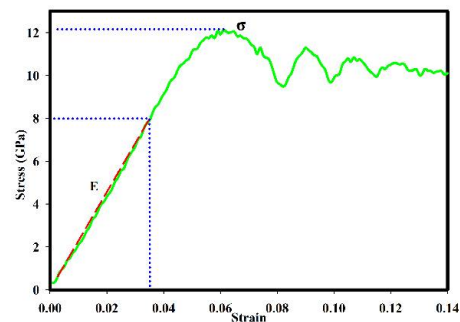
¹ LAMMPS: Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

این پژوهش از پتانسیل بونی برای شبیه‌سازی استفاده شده است [23]. این پتانسیل برای بررسی اثر دما از 0-900 درجه کلون بر ساختار فولاد آستنیتی 316 با ساختار مرکز وجوه پر ساخته شده است. قبل از شبیه‌سازی پارامترهای آلیاژ سه تای آهن-نیکل-کروم مورد نظر، ابتدا دقت پتانسیل با شبیه‌سازی عناصر خالص آهن، نیکل، و کروم مورد بررسی قرار گرفته است. جعبه شبیه‌سازی با ابعاد $20 \times 10 \times 10$ برابر ثابت شبکه برای هر کدام از عناصر آهن، نیکل و کروم در نظر گرفته شد. در گام اول پس از تولید ساختار، جعبه شبیه‌سازی ساخته شده، با استفاده از دستور cg و minimize در دمای محیط، با خطای انرژی و نیرو (15^{-}) برای حداکثر محاسبات 10000 گام زمانی و با تکرار داخلی هر محاسبه 5000 گام به تعادل انرژی و نیرویی رسانده می‌شود. با استفاده از این دستور آلیاژ در حالت تعادل پایدار ساختار خود به تعادل می‌رسد. در گام دوم با استفاده از هنگرد دما-فشار ثابت ساختارهای مورد نظر در گام زمانی 0,001 پیکوثانیه در فشار و دمای محیط با استفاده 40000 گام زمانی به تعادل دمایی و فشار می‌رسند. در گام سوم با استفاده از دستور تغییر شکل 1 و مقدار کرنش 0,01 آنگستروم بر پیکوثانیه با استفاده از هنگرد دما-حجم ثابت در دمای محیط به سیستم اعمال می‌شود. در هر گام زمانی مقدار تنش در ماده برحسب کرنش اعمال شده به دست می‌آید که با رسم نمودار آن می‌توان خواص مد نظر را محاسبه کرد.

شکل 2 منحنی‌های تنش-کرنش عناصر خالص آهن، نیکل و کروم محاسبه شده با دو هنگرد دما-فشار ثابت و دما-حجم ثابت را نشان می‌دهد. مقدار مدول یانگ و تنش تسلیم تخمین زده شده با هر یک از دو هنگرد دما-حجم ثابت و دما-فشار ثابت برای هر یک از عناصر در جدول 2 گزارش شده است. همان‌طور که در

در معادله بالا S ضریب عادی‌سازی، $x = (r - r_{cut})/h$ ، $\beta \cdot h$ پارامترهای جفت‌سازی و r_{cut} طول شعاع قطع می‌باشد. این پتانسیل طوری طراحی شده است که در آن ساختار ماده از لحاظ انرژی و شبکه به شکل مرکز وجوه پر است. در سال‌های 2011 و 2013 بونی و همکاران با استفاده از این روابط ریاضی و داده‌های تجربی حاصل از بررسی آلیاژ فولاد ضد زنگ آستنیتی 316 مورد استفاده در ساخت مخزن راکتورهای هسته‌ای، پتانسیل بهینه برای مطالعه خواص مکانیکی این آلیاژ را ارائه کردند، که در این پژوهش از این پتانسیل بین اتمی استفاده شده است [23,24].

شکل 1 نحوه محاسبه مدول یانگ و تنش تسلیم با استفاده از منحنی تنش-کرنش را نشان می‌دهد. شیب منحنی تنش-کرنش مقدار مدول یانگ (E) و محل تقعر منحنی مقدار تنش تسلیم ماده را نشان می‌دهد.



شکل 1. نحوه محاسبه مدول یانگ و تنش تسلیم بر اساس منحنی تنش-کرنش ماده.

بحث و نتیجه‌گیری

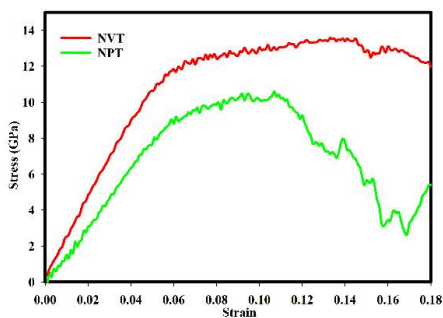
انتخاب پتانسیل بین اتمی مناسب مهم‌ترین عامل تعیین کننده صحت و دقت نتایج شبیه‌سازی است. در

(ج)

شکل 2. منحنی تنش-کرنش. الف: آهن، ب: نیکل و ج: کروم خالص با استفاده از هنگردهای دما-حجم ثابت و دما-فشار ثابت

جدول 2. مقایسه مقادیر محاسبه شده مدول یانگ و تنش تسلیم آهن، نیکل و کروم خالص با مقدار تجربی در دمای محیط با استفاده از دو هنگرد دما-حجم ثابت و دما-فشار ثابت

تجربی	NPT		NVT		عنصر
	σ	E	σ	E	
228,3 [28,29]	11	196	12	230,4	آهن
.30-32] 223,4 [23	25,5	162,4	25	209,4	نیکل
[23,30] 221,7	21,6	156,9	21,4	233,8	کروم

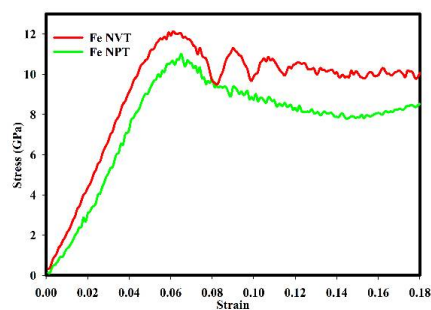


شکل 3. منحنی تنش-کرنش آلیاژ سه تایی آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم با استفاده از دو هنگرد دما-حجم ثابت و دما-فشار ثابت.

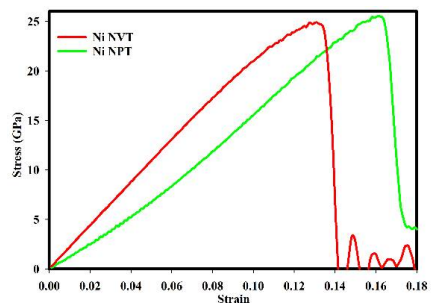
جدول 3. مقایسه مقادیر محاسبه شده مدول یانگ آلیاژ آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم با مقدار تجربی در دمای محیط با استفاده از دو هنگرد دما-حجم ثابت و دما-فشار ثابت.

تجربی	NPT	NVT	نوع آلیاژ
[33] 200	162,6	215,4	آهن - 10 نیکل - 20 کروم

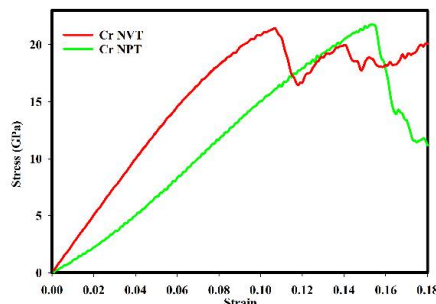
جدول 2 نشان داده شده است، استفاده از هنگرد دما-حجم ثابت منجر به نتایجی با خطای کمتر 10 درصد نسبت به داده‌های تجربی می‌شود که نشان از اعتمادپذیری بودن نتایج شبیه‌سازی با این پتانسیل را دارد. شکل 3 منحنی تنش-کرنش آلیاژ سه تایی آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم را نشان می‌دهد. جدول 3 نیز نشان می‌دهد که با استفاده از هنگرد دما-حجم ثابت خطای کمتر از 10 درصد نسبت به داده‌های تجربی حاصل می‌شود.



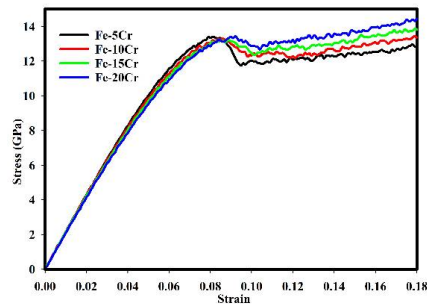
(الف)



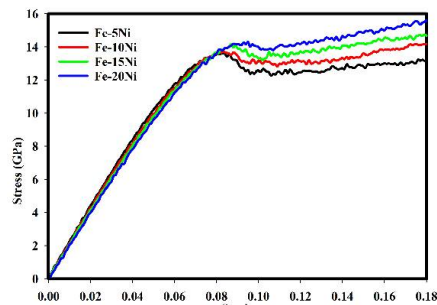
(ب)



پارگی، دفرمه شدن و تغییر شکل نامعین در اثر این افزودن، افزایش پیدا می‌کند.



(الف)



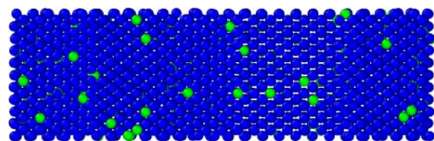
(ب)

شکل 4. منحنی تنش-کرنش آلیاژ دوتایی الف: آهن-کروم و ب: آهن-نیکل برای 5، 10، 15 و 20 درصد وزنی کروم و نیکل.

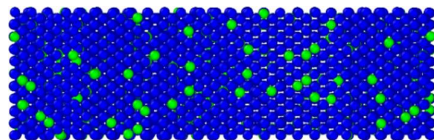
جدول 4. اثر افزایش کروم بر مدول یانگ و تنش تسلیم آلیاژ دوتایی آهن-کروم در دمای محیط.

آهن-کروم	مدول یانگ	تنش تسلیم
5	202,6	13,4
10	197,2	13,2
15	193,1	13,1
20	191,2	13

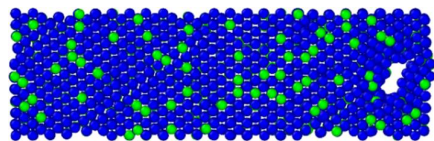
برای نمایش بهتر تأثیر درصد وزنی عناصر نیکل و کروم بر خواص مکانیکی آلیاژ فولاد آستنیتی، ابتدا این اثر برای آلیاژهای دوتایی آهن-کروم و آهن-نیکل و سپس برای آلیاژ سه‌تایی آهن-نیکل-کروم مورد بررسی قرار گرفت. شبیه‌سازی‌های انجام شده برای آلیاژهای دوتایی آهن-کروم و آهن-نیکل به ترتیب با استفاده از پتانسیل‌های بین اتمی دوتایی آهن-کروم [34] و آهن-نیکل [35] انجام شد و مقادیر مدول یانگ و تنش تسلیم با در نظر گرفتن جعبه شبیه‌سازی با ابعاد $25 \times 10 \times 10$ محاسبه شد. منحنی‌های تنش-کرنش آلیاژهای دوتایی آهن-کروم و آهن-نیکل با مقادیر کروم و نیکل 5، 10، 15 و 20 درصد وزنی در شکل 4 نشان داده شده است. مقادیر استخراج شده مدول یانگ و تنش تسلیم از این شکل‌ها در جدول‌های 4 و 5 خلاصه شده است. نتایج شبیه‌سازی دلالت بر این دارد که افزایش مقدار نیکل و کروم باعث کاهش مدول یانگ می‌شود. همچنین همان‌طور که در شکل 5 نشان داده شده است، با افزایش مقدار کروم مقدار تنش تسلیم ماده کاهش پیدا می‌کند در حالی که با افزایش مقدار نیکل مقدار تنش تسلیم افزایش می‌یابد [36,37]. آهن و کروم در فاز مرکز پر و نیکل در فاز مرکز وجوه پر پایدار هستند. با افزودن کروم به آهن، ساختار آلیاژ مرکز پر باقی می‌ماند در حالی که با افزودن نیکل به آهن ساختار آلیاژ در حالت مرکز وجوه پر پایدار می‌گردد که می‌تواند عامل افزایش تنش تسلیم آلیاژ باشد. علاوه بر این افزودن نیکل به آهن و کروم به آهن باعث نرم‌تر شدن ساختار آلیاژ و کاهش مدول یانگ می‌گردد [37,38]. شکل 6 و 7 رفتار هر دو آلیاژ آهن-کروم و آهن-نیکل برای مقادیر کروم و نیکل 5، 10، 15 و 20 درصد وزنی را در کرنش یکسان $\epsilon = 0,365$ نشان می‌دهند. افزودن کروم و نیکل در آهن باعث نرم‌تر شدن ساختار کریستالی و کاهش مقاومت ماده هنگام اعمال کرنش می‌گردد و تمایل آلیاژ به سمت



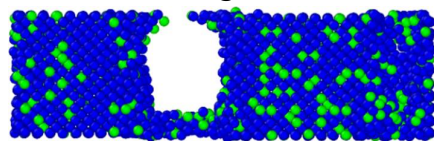
(الف)



(ب)

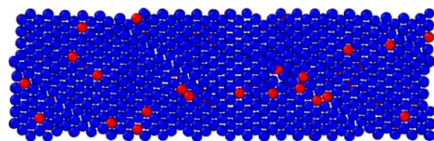


(ج)

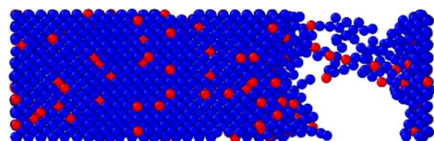


(د)

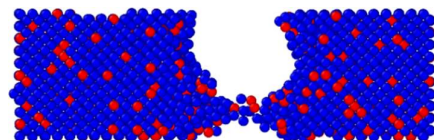
شکل 6. اثر افزودن الف: 5، ب: 10، ج: 15 و د: 20 درصد وزنی کروم به آهن در کرنش یکسان $\epsilon=0,365$.



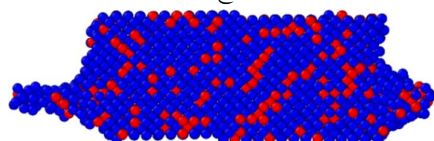
(الف)



(ب)



(ج)

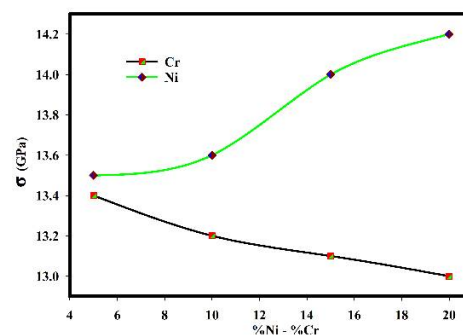


(د)

شکل 7. اثر افزودن الف: 5، ب: 10، ج: 15 و د: 20 درصد وزنی نیکل به آهن در کرنش یکسان $\epsilon=0,365$.

جدول 5. اثر افزایش نیکل بر مدول یانگ و تنش تسلیم آلیاژ دوتایی آهن-نیکل در دمای محیط.

تنش تسلیم	مدول یانگ	آهن-نیکل
13,5	203,2	5
13,6	199,2	10
14	195,8	15
14,2	193,4	20



شکل 5. اثر افزایش نیکل و کروم بر مقدار تنش تسلیم آلیاژهای دوتایی آهن-کروم و آهن-نیکل.

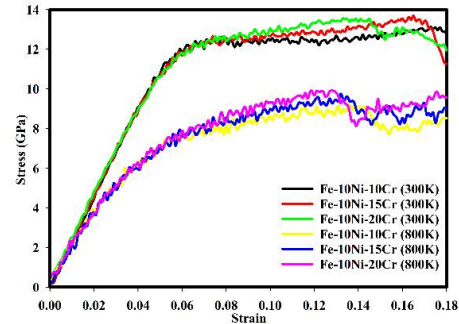
شکل 8 و 9 نمودار تنش-کرنش آلیاژ سه تایی آهن-نیکل-کروم با افزایش کروم و نیکل در دو دمای 300 و 800 درجه کلوین را نشان می دهند. مقادیر استخراج شده مدول یانگ و تنش تسلیم از این شکل ها در جدول های 6 و 7 خلاصه شده است. همان طور از جدول 6 و 7 قابل استنباط است افزایش کروم در مقدار ثابتی از نیکل و همچنین افزایش نیکل در مقدار ثابتی از کروم باعث کاهش مدول یانگ می شود. رفتار مکانیکی ماده برای افزایش درصد های نیکل و کروم همانند آلیاژهای دوتایی است.

جدول 7. اثر افزایش نیکل بر مدول یانگ و تنش تسلیم آلیاژ سه‌تایی آهن-نیکل-کروم در مقدار ثابت 20 درصد وزنی کروم در دماهای 300 و 900 کلوین.

900 کلوین		300 کلوین		درصد نیکل
σ	E	σ	E	
8,6	122,6	13,2	218,1	5
9	128,3	13,5	215,4	10
9,3	136,6	14,1	219,2	15

اندازه جعبه شبیه‌سازی، آهنگ کرنش و دما کاری، از پارامتر بسیار مهم ساختاری در بررسی رفتار مولکولی خواص مکانیکی مواد به شمار می‌آیند. برای بررسی اثر اندازه جعبه شبیه‌سازی بر رفتار مکانیکی آلیاژ سه‌تایی آهن-نیکل-کروم، جعبه‌های شبیه‌سازی با سه اندازه مختلف در نظر گرفته شدند. ساختار اول دارای ابعاد $20 \times 10 \times 10$ ، ساختار دوم دارای ابعاد $10 \times 10 \times 10$ و ساختار سوم دارای ابعاد $15 \times 6 \times 6$ می‌باشد.

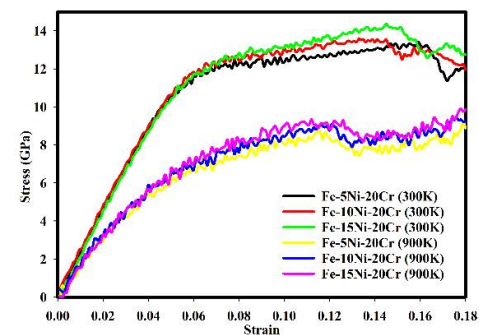
شکل 10 الف و ب منحنی‌های تنش-کرنش آلیاژ سه‌تایی آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم با جعبه‌های شبیه‌سازی مختلف به ترتیب الف: با هنگرد دما- فشار ثابت و ب: با هنگرد دما- حجم ثابت را نشان می‌دهند. مقدار مدول یانگ و تنش تسلیم برای هر کدام از ساختارها در جدول 8 گزارش شده است. همان‌طور که در جدول 8 نشان داده شده است، انتخاب هر یک ساختارها با ابعاد مختلف ضمن رسیدن به نتایج تقریباً یکسان منجر به خطای کمتر 10 درصد نسبت به داده‌های تجربی می‌شود.



شکل 8. اثر افزایش کروم در مقدار ثابتی از نیکل بر منحنی تنش-کرنش آلیاژ سه‌تایی آهن-نیکل-کروم در دماهای 300 و 800 کلوین.

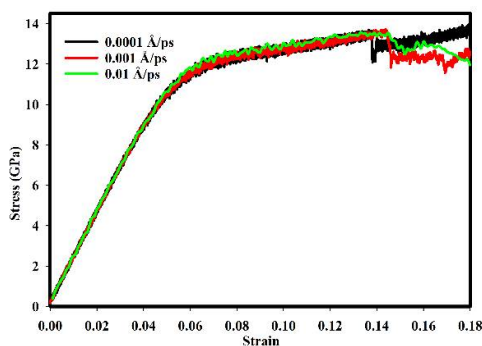
جدول 6. اثر افزایش کروم بر مدول یانگ و تنش تسلیم آلیاژ سه‌تایی آهن-نیکل-کروم در مقدار ثابت 10 درصد وزنی نیکل در دماهای 300 و 800 کلوین.

800 کلوین		300 کلوین		درصد کروم
σ	E	σ	E	
9,1	140,2	13	226,6	10
9,6	139,7	13,4	223,3	15
10	138,6	13,5	215,4	20



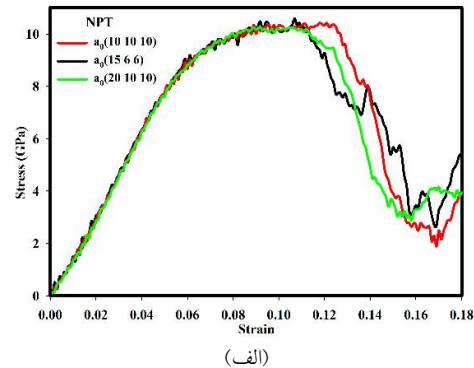
شکل 9. اثر افزایش نیکل در مقدار ثابتی از کروم بر منحنی تنش-کرنش آلیاژ سه‌تایی آهن-نیکل-کروم در دماهای 300 و 900 کلوین.

می دهد که افزایش آهنگ کرنش تأثیر قابل ملاحظه ای بر مدول یانگ ندارد. جدول 9 مقادیر مدول یانگ و تنش تسلیم برای کرنش های مختلف را نشان می دهد. مدول یانگ از جمله خواص مکانیکی وابسته به نوع ماده است و طبق معادله $E = \frac{\sigma}{\epsilon}$ محاسبه می شود که در آن σ نشان دهنده تنش ایجاد شده در ماده تحت تأثیر کرنش ϵ اعمالی می باشد. از این رو هرچه کرنش سیستم افزایش پیدا کند، تنش حاصله نیز افزایش می یابد و در نهایت مدول یانگ ثابت باقی خواهد ماند. افزایش کرنش ممکن است باعث کاهش یا افزایش تنش تسلیم در آلیاژ شود که مستقیماً به نوع و درصد وزنی عناصر تشکیل دهنده آلیاژ وابسته است. از آنجائی که نوع و درصد وزنی عناصر تشکیل دهنده ثابت می باشد و کرنش اعمال شده نیز یکسان می باشد، انتظار می رود تغییر آنچنانی در مدول یانگ و تنش تسلیم احساس نشود، که شکل 11 گویای این مسئله می باشد، و تغییرات اندک مشاهده در جدول 9 می تواند خطای محاسبات که کمتر از 3 درصد می باشد، در نظر گرفته شود.

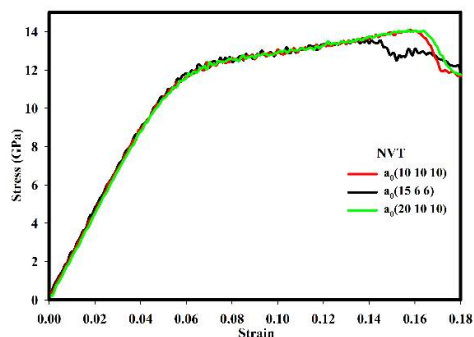


شکل 11. منحنی تنش-کرنش آلیاژ سه تایی آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم تحت کرنش های متفاوت.

جدول 9. اثر افزایش کرنش بر مدول یانگ و تنش تسلیم آلیاژ سه تایی آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم.



(الف)



(ب)

شکل 10. منحنی های تنش-کرنش آلیاژ سه تایی آهن-نیکل-کروم با جعبه های شبیه سازی مختلف با هنگرد الف: دما- فشار ثابت و ب: دما-حجم ثابت.

جدول 8. اثر اندازه جعبه شبیه سازی و مقایسه مقدار تجربی مدول یانگ آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم در دمای محیط با استفاده از دو هنگرد دما-حجم ثابت و دما-فشار ثابت.

تجربی	NPT		NVT		اثر جعبه
	σ	E	σ	E	
212 [23,33]	10,1	160,6	14	216,8	ساختار 1
	10,3	159,9	14	215,6	ساختار 2
	10,4	161,9	13,5	213,9	ساختار 3

شکل 11 آهنگ افزایش کرنش بر رفتار تنش-کرنش آلیاژ سه تایی آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم را نشان می دهد. نتایج نشان

جدول 10. اثر دما بر مدول یانگ و تنش تسلیم آلیاژ آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم.

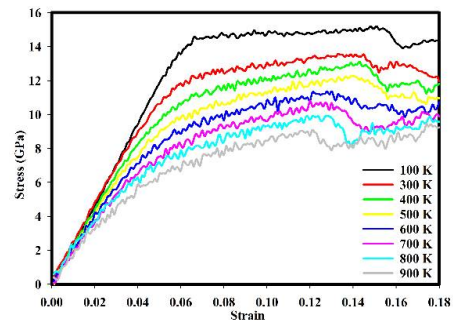
دما	E	σ
100	238,7	15
300	215,4	13,5
400	202,4	13
500	188	12,1
600	169,4	11,3
700	163,7	10,6
800	138,6	10
900	128,3	9

نتیجه گیری

یکی از اجزای اصلی و مهم در تمامی راکتورها بخصوص راکتورهای هسته‌ای، مخزن تحت فشار است. بخاطر شرایط حرارتی، مکانیکی و تابشی خاص راکتورهای هسته‌ای و همچنین نیاز به موادی با مقاومت عالی در مقابل خوردگی در حضور آب و بخار آب، از فولاد ضدزنگ آستنیتی در ساخت این مخازن استفاده می‌شود. عناصر غالب در آلیاژهای آستنیتی، آهن، نیکل و کروم می‌باشند. بررسی تجربی و تئوری ویژگی‌های مکانیکی و منحنی‌های تنش-کرنش این آلیاژها به‌طور وسیعی مورد توجه می‌باشد. امروزه روش‌های شبیه‌سازی از لحاظ کم‌هزینه بودن، کنترل‌پذیر بودن و برخی مزایای دیگر نسبت به روش‌های آزمایشگاهی ترجیح داده می‌شوند. در این پژوهش، نقش نیکل و کروم و همچنین پارامترهای ساختاری آلیاژ بر رفتار تنش-کرنش آلیاژهای دوتایی آهن-نیکل، آهن-کروم و سه‌تایی آهن-نیکل-کروم در دماهای مختلف با استفاده از دینامیک مولکولی و با دو هنگرد دما- فشار ثابت و

آهنگ کرنش	مدول یانگ	تنش تسلیم
0,0001	209,8	13,6
0,001	210,9	14
0,01	213,9	13,5

شکل 12 منحنی تنش-کرنش آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم را در دماهای مختلف نشان می‌دهد. با افزایش دما مقدار مدول یانگ و تنش تسلیم به اندازه زیادی کاهش پیدا می‌کنند. مقادیر مدول یانگ و تنش تسلیم در جدول 10 برای دماهای مختلف آورده شده است. با افزایش دما اندازه ثابت شبکه و طول جعبه شبیه‌سازی افزایش پیدا کرده و ماده از حالت کریستالی سخت به حالت کریستالی نرم در می‌آید که این عامل باعث مقاومت آلیاژ در برابر تنش‌های وارد شده به ساختار و همچنین تضعیف خواص مکانیکی از جمله مدول یانگ و تنش تسلیم می‌گردد [32,39].



شکل 12: منحنی تنش-کرنش آلیاژ سه‌تایی آهن-نیکل-کروم با 10 درصد وزنی نیکل و 20 درصد وزنی کروم در دماهای 100 الی 900 کلونین.

مرجع ها

[1] W. Hoeffner, *Materials for nuclear plants : from safe design to residual life assessments*, Springer, (2013).

<https://www.springer.com/gp/book/9781447129141>

[2] G.S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, (2007).

<https://www.springer.com/gp/book/9783540494720>

[3] S.J. Zinkle, J.T. Busby, Structural materials for fission & fusion energy, *Mater. Today*. **12** (2009) 12–19.

[https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(09\)70294-9](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(09)70294-9)

[4] International Atomic Energy Agency, *Assessment and management of ageing of major nuclear power plant components important to safety : PWR pressure vessels*, International Atomic Energy Agency, (2007).

<https://www.iaea.org/publications/7735/assessment-and-management-of-ageing-of-major-nuclear-power-plant-components-important-to-safety-pwr-pressure-vessels>

[5] International Atomic Energy Agency, *Integrity of reactor pressure vessels in nuclear power plants : assessment of irradiation embrittlement effects in reactor pressure vessel steels*, International Atomic Energy Agency, (2009).

<https://www.iaea.org/publications/7915/integrity-of-reactor-pressure-vessels-in-nuclear-power-plants-assessment-of-irradiation-embrittlement-effects-in-reactor-pressure-vessel-steels>

[6] W.L. Server, R.K. Nanstad, Reactor pressure vessel (RPV) design and fabrication: the case of the USA, in: *Irradiat. Embrittlement React. Press. Vessel. Nucl. Power Plants*, Elsevier, (2015) 3–25.

<https://doi.org/10.1533/9780857096470.1.3>

[7] Y. Tanaka, Reactor pressure vessel (RPV) components: processing and properties, in: *Irradiat. Embrittlement React. Press. Vessel. Nucl. Power Plants*, Elsevier, (2015) 26–43.

<https://doi.org/10.1533/9780857096470.1.26>

[8] M. Brumovsky, WWER-type reactor pressure vessel (RPV) materials and fabrication, in: *Irradiat. Embrittlement React. Press. Vessel. Nucl. Power Plants*, Elsevier, (2015) 44–54.

دما-حجم ثابت مورد بررسی قرار گرفت. نتایج شبیه سازی حاکی از آن است که استفاده از هنگرد دما حجم ثابت منجر به نتایجی با خطای زیر 10 درصد نسبت به داده های تجربی می شود. منحنی های تنش- کرنش آلیاژهای دوتایی آهن-کروم، آهن-نیکل و سه-تایی آهن-نیکل-کروم با مقادیر مختلف نیکل و کروم دلالت بر این دارد که افزایش مقدار نیکل و کروم باعث کاهش مدول یانگ می شود. این نتایج همچنین نشان می دهند که با افزایش مقدار کروم مقدار تنش تسلیم ماده کاهش پیدا می کند درحالی که با افزایش مقدار نیکل مقدار تنش تسلیم افزایش می یابد. آهن و کروم در فاز مرکز پر و نیکل در فاز مرکز وجوه پر پایدار هستند. با افزودن کروم به آهن، ساختار آلیاژ مرکز پر باقی می ماند در حالی که با افزودن نیکل به آهن ساختار آلیاژ در حالت مرکز وجوه پر پایدار می گردد که می تواند عامل افزایش تنش تسلیم آلیاژ باشد. علاوه بر این افزودن نیکل به آهن و کروم به آهن باعث نرم تر شدن ساختار آلیاژ و کاهش مدول یانگ می گردد شبیه سازی های اثر اندازه جعبه شبیه سازی، آهنگ کرنش و افزایش دما بر رفتار تنش-کرنش، مدول یانگ و تنش تسلیم نیز مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان می دهند که مقدار مدول یانگ و تنش تسلیم برای هر کدام از ساختارهای بررسی شده با ابعاد مختلف ضمن رسیدن به نتایج تقریباً یکسان منجر به خطای کمتر از 10 درصد نسبت به داده های تجربی می شود. نتایج همچنین نشان می دهد که افزایش آهنگ کرنش تأثیر قابل ملاحظه ای بر مدول یانگ نداشته اما موجب تغییر تنش تسلیم می شود. شبیه سازی ها دلالت بر این دارد که با افزایش دما مقدار مدول یانگ و تنش تسلیم به اندازه زیادی کاهش پیدا می کنند.

<https://doi.org/10.1023/A:1018528117413>.

[18] A. V. Bakaev, D.A. Terent'ev, E.E. Zhurkin, P.Y. Grigor'ev, Molecular dynamics simulation of the interaction of dislocations with radiation-induced defects in Fe-Ni-Cr austenitic alloys, *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* **7** (2013) 211–217.

<https://doi.org/10.1134/S1027451013020067>

[19] A. V. Bakaev, D.A. Terentyev, P.Y. Grigorev, E.E. Zhurkin, Atomistic simulation of the interaction between mobile edge dislocations and radiation-induced defects in Fe-Ni-Cr austenitic alloys, *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* **8** (2014) 220–228.

<https://doi.org/10.1134/S1027451014020062>.

[20] A. V. Bakaev, D.A. Terentyev, P.Y. Grigor'ev, E.E. Zhurkin, Interaction between mobile dislocations and perfect dislocation loops in Fe-Ni-Cr austenitic alloy systems, *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* **9** (2015) 290–299.

<https://doi.org/10.1134/S1027451015020056>.

[21] B.A. Terentyev D, Interaction of a screw dislocation with Frank loops in Fe–10Ni–20Cr alloy, *Journal of Nuclear Materials* **442** (2013) 208–217.

<https://doi.org/10.1016/J.JNUCMAT.2013.08.044>.

[22] K. Tong, F. Ye, M. Gao, M.K. Lei, C. Zhang, Interatomic potential for Fe–Cr–Ni–N system based on the second nearest-neighbor modified embedded-atom method, *Molecular Simulation* **42** (2016) 1256–1262.

<https://doi.org/10.1080/08927022.2016.1181263>

[23] G. Bonny, D. Terentyev, R.C. Pasianot, S. Poncé, A. Bakaev, Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **19** (2011).

<https://doi.org/10.1088/0965-0393/19/8/085008>.

[24] G. Bonny, N. Castin, D. Terentyev, Interatomic potential for studying ageing under irradiation in stainless steels: the FeNiCr model alloy, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **21** (2013).

<https://doi.org/10.1088/0965-0393/21/8/085004>.

<https://doi.org/10.1533/9780857096470.1.44>.

[9] M. Brumovsky, Embrittlement of reactor pressure vessels (RPVs) in WWER-type reactors, in: *Irradiat. Embrittlement React. Press. Vessel. Nucl. Power Plants*, Elsevier, (2015) 107–131.

<https://doi.org/10.1533/9780857096470.2.107>.

[10] M. Tomimatsu, T. Hirota, T. Hardin, P. Todeschini, Embrittlement of reactor pressure vessels (RPVs) in pressurized water reactors (PWRs), in: *Irradiat. Embrittlement React. Press. Vessel. Nucl. Power Plants*, Elsevier, (2015) 57–106.

<https://doi.org/10.1533/9780857096470.2.57>.

[11] M.F. McGuire, *Stainless steels for design engineers*, ASM International, (2008).

https://www.asminternational.org/search/-/journal_content/56/10192/05231G/PUBLICATIION

[12] P. Marshall, *Austenitic stainless steels: microstructure and mechanical properties*, Elsevier Applied Science, (1984).

<https://www.springer.com/gp/book/9780853342779>

[13] M. Kaladhar, K.V. Subbaiah, C.H.S. Rao, Machining of austenitic stainless steels - a review, *International Journal of Machining and Machinability of Materials* **12** (2012) 178.

<https://doi.org/10.1504/IJMMM.2012.048564>.

[14] P.J. Maziasz, J.T. Busby, Properties of Austenitic Steels for Nuclear Reactor Applications, *Journal of Nuclear Materials* (2012) 267–283.

<https://doi.org/10.1016/B978-0-08-056033-5.00019-7>.

[15] Z.X. Grujicic M, Analysis of Fe-Ni-Cr-N austenite using the Embedded-Atom Method, *Calphad* **17** (1993) 383–413.

[https://doi.org/10.1016/0364-5916\(93\)90024-6](https://doi.org/10.1016/0364-5916(93)90024-6).

[16] Z.X. Grujicic M, Atomistic simulation of thermally activated glide of dislocations in Fe-Ni-Cr-N austenite, *Materials Science and Engineering A* **190** (1995) 87–98.

[https://doi.org/10.1016/0921-5093\(94\)09618-7](https://doi.org/10.1016/0921-5093(94)09618-7).

[17] M. GRUJICIC, Atomistic simulation of dislocation core structure and dynamics in Fe-Ni-Cr-N austenite, *Journal of Materials Science* **32** (1997) 1749–1757.

- [34] G. Bonny, R.C. Pasianot, D. Terentyev, L. Malerba, Iron chromium potential to model high-chromium ferritic alloys, *Philosophical Magazine* **91** (2011) 1724–1746.
<https://doi.org/10.1080/14786435.2010.545780>
- [35] G. Bonny, R.C. Pasianot, L. Malerba, Fe–Ni many-body potential for metallurgical applications, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **17** (2009).
<https://doi.org/10.1088/0965-0393/17/2/025010>
- [36] K.C. Ryoo D, Kang N, Effect of Ni content on the tensile properties and strain-induced martensite transformation for 304 stainless steel, *Materials Science and Engineering A* **528** (2011) 2277–2281.
<https://doi.org/10.1016/J.MSEA.2010.12.022>.
- [37] J. Byggmästar, F. Granberg, A. Kuronen, K. Nordlund, K.O.E. Henriksson, Tensile testing of Fe and FeCr nanowires using molecular dynamics simulations, *Journal of Applied Physics* **117** (2015).
<https://doi.org/10.1063/1.4905314>
- [38] S.G. Mao W, Campbell A, Heinz D, Phase relations of Fe–Ni alloys at high pressure and temperature, *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **155** (2006) 146–151.
<https://doi.org/10.1016/J.PEPI.2005.11.002>
- [39] W.G. Nöhring, W.A. Curtin, Thermodynamic properties of average-atom interatomic potentials for alloys, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **24** (2016).
<https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/4/045017>
- [25] S. Jalili, *Computer simulations (Molecular Dynamics & Monte Carlo) second edition*, K. N. Toosi University of technology (2011).
<https://press.kntu.ac.ir>
- [26] B.J. Alder, T.E. Wainwright, Studies in Molecular Dynamics. I. General Method, *Journal of Chemical Physics* **31** (1959) 459–466.
<https://doi.org/10.1063/1.1730376>.
- [27] A. Rahman, Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon, *Phys. Rev.* **136** (1964) A405–A411.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.A405>.
- [28] J.J. Adams, D.S. Agosta, R.G. Leisure, H. Ledbetter, Elastic constants of monocrystal iron from 3 to 500 K, *Journal of Applied Physics* **100** (2006) 113530.
<https://doi.org/10.1063/1.2365714>
- [29] N.T. Hai, Elastic modulus of F.C.C. and B.C.C crystals investigated by a statistical moment method at low temperature range, *International Atomic Energy Agency (IAEA)*, **36** (2004).
[https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=country:%22International%20Atomic%20Energy%20Agency%20\(IAEA\)%22](https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=country:%22International%20Atomic%20Energy%20Agency%20(IAEA)%22)
- [30] D. Su, Y.-L. He, J.-Q. Liu, X.-G. Lu, Establishment of the Elastic Property Database of Fe-base Alloys, in: *Proceeding The First International Conference on Information Sciences, Machinery, Materials and Energy* (2015).
<https://doi.org/10.2991/icismme-15.2015.377>
- [31] S.M. Rassoulinejad-Mousavi, Y. Mao, Y. Zhang, Evaluation of copper, aluminum, and nickel interatomic potentials on predicting the elastic properties, *Journal of Applied Physics* **119** (2016).
<https://doi.org/10.1063/1.4953676>
- [32] F. Luo, X. Chen, L. Cai, Q.W.-J.A.M. Sci, U. 2011, Thermoelastic properties of nickel from molecular dynamic simulations, *Journal of Atomic and Molecular Sciences* **2** (2011) 10–19.
<https://doi.org/10.4208/jams.310810.200910a>
- [33] A. Teklu, H. Ledbetter, S. Kim, L.A. Boatner, M. McGuire, V. Keppens, Single-crystal elastic constants of Fe-15Ni-15Cr alloy, *Metallurgical and Materials Transactions A* **35** (2004) 3149–3154.
<https://doi.org/10.1007/s11661-004-0059-y>