

سازوکار تبدیل فاز ساختاری تحت بارگذاری کششی با نرخ کرنش بالا در نمونه بدون نقص α -Fe: مطالعه دینامیک مولکولی

محمد نوربخش^۱، سید مهدی واعظ علایی^{۲*}، علی پورکمالی انارکی^۱ و ایوب اسماعیل پور^۳

۱. دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

۲. دانشکده فیزیک، دانشگاه تهران، تهران

۳. دانشکده فیزیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

پست الکترونیکی: smvaez@ut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۰۵/۳۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۴/۰۷/۱۲)

چکیده:

یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های فلزات، امکان تبدیل فاز و تغییر ساختار در پاسخ به نیروهای خارجی، تغییر دما و سایر عوامل محیطی است. در این مطالعه، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD)، تبدیل فاز و تغییر شکل یک نمونه بدون نقص آهن-آلفا (α -Fe) تحت بارگذاری کششی با نرخ کرنش بالا تجزیه و تحلیل شده است. نتایج نشان می‌دهد که در طول فرایند بارگذاری، تغییر شکل ریزساختاری ابتدا از ساختار مکعبی مرکزپر (bcc) به ساختار مکعبی وجوه‌پر (fcc) و سپس از ساختار fcc به ساختار شش گوش فشرده (hcp) رخ می‌دهد. همچنین مقدار تنش بحرانی به صورت $\sigma_{hcp} > \sigma_{fcc} > \sigma_{unknown} > \sigma_{bcc}$ است که نشان می‌دهد تنش بحرانی ساختار hcp از بقیه ساختارها بیشتر است. بنابراین شروع شکست و از هم گسیختن پیوندهای اتمی در نزدیکی این ساختار اتفاق می‌افتد.

واژه‌های کلیدی: تبدیل فاز، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، بارگذاری کششی، نرخ کرنش بالا

۱. مقدمه

تأثیر می‌گذارد [۱-۵]. لذا در سال‌های اخیر، محققان و پژوهشگران به‌طور گسترده پیچیدگی‌های این تبدیل‌های فازی و تغییرات ساختاری را بررسی کرده‌اند و به سازوکارهایی چون سینتیک، پاسخ‌های مکانیکی حاصل و پدیده‌های درهم‌تنیده تبدیل فاز در رفتار پلاستیک فلزات پرداخته‌اند [۶-۸]. این فرآیندها، ویژگی‌های مکانیکی و مقاومت در برابر شکست را مشخص می‌کنند و بر ویژگی‌هایی مانند سختی و شکل‌پذیری تأثیر می‌گذارند [۹-۱۱].

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به‌عنوان ابزاری قدرتمند برای بررسی تعاملات پیچیده پدیده‌های تبدیل فاز در فلزات در مقیاس‌های اتمی و مولکولی نقش ایفا می‌کند و امکان

بررسی و مشاهده اثر شرایط بارگذاری مختلف بر رفتار مکانیکی فلزات به دلیل اهمیت اساسی و کاربردهای عملی آن مدت‌ها موضوع تحقیقات بوده است. یکی از جالب‌ترین پدیده‌هایی که فلزات به نمایش می‌گذارند، تبدیل فاز و تغییرات ساختاری در پاسخ به نیروهای خارجی، نوسانات دما و سایر عوامل محیطی است که منجر به ارتباط پیچیده بین تبدیل فاز و رفتار پلاستیک است. این دگرگونی‌های فازی می‌تواند باعث تغییرات در ساختار بلوری و آرایش اتمی، ریخت‌شناسی دانه‌ها و توزیع نقص شود که در نهایت بر رفتار ماکروسکوپی ماده

۲. جزئیات محاسباتی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

۲.۱. پتانسیل برهم‌کنش بین‌اتمی استفاده شده

در این مطالعه، از پتانسیل روش اتم جاسازی‌شده^۱ برای توصیف برهم‌کنش بین اتم‌های آهن استفاده شده است. به ویژه، از پتانسیل فینیس-سنکلیر^۲ [۱۴] که توسط مندلف^۳ و همکاران [۱۵] توسعه داده شده است، بهره گرفته‌ایم. این پتانسیل در بازتولید دقیق تغییر فازهای α -Fe، از ساختار bcc به ساختارهای fcc/hcp عملکرد موفقی داشته [۱۹-۱۶] و توانایی مطالعه ویژگی‌های سطحی و نابجایی‌ها را نیز دارد [۲۱، ۲۰].

۲.۲. روش شبیه‌سازی

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از کد لمپس^۴ انجام شده است [۲۲]، که در آن الگوریتم سرعت-ورله^۵ برای حل معادلات حرکت استفاده شده است [۲۳]. گام زمانی برابر با ۱ فمتوثانیه انتخاب شده که محاسبات پایدار و دقیق را تضمین می‌کند.

۲.۳. تنظیمات اولیه

الگوی شبیه‌سازی شامل ۲۰۰،۰۰۰ اتم در یک جعبه شبیه‌سازی با ابعاد $28/6 \times 28/6 \times 2/86$ نانومتر است. ثابت شبکه α -Fe برابر $2/855$ انگستروم تنظیم شده و بارگذاری کششی در امتداد محور y انجام می‌شود. برای کاهش اثرات مرزی، شرایط مرزی دوره‌ای در هر سه جهت اعمال شده است.

۲.۴. واهلش و تنظیم اولیه

قبل از اعمال بارگذاری کششی، سامانه با استفاده از الگوریتم گرادیان مزدوج^۶ نسخه پلاک-ریبیر^۷ کمینه‌سازی شده است [۲۴]. سپس با به‌کارگیری هنگرد هم‌دما-ایزوبار^۸، در دمای ۳۰۰ کلوین و تنش اولیه نزدیک به صفر بار، تعادل دینامیکی سامانه به مدت ۵۰۰ پیکوثانیه (ps) حاصل شده است [۲۷-۲۵]. برای تثبیت حجم نمونه از دستور box/relax استفاده شده است تا

شبیه‌سازی فلزات ساده تا آلیاژهای پیچیده را امکان‌پذیر می‌سازند و بینشی عمیق نسبت به پاسخ ساختارهای اتمی به تنش مکانیکی ارائه می‌دهد. با کشف جزئیات فرآیندها در مقیاس اتمی، می‌توانیم رویکردهایی ارائه دهیم که در نهایت منجر به ایجاد مواد انعطاف‌پذیرتر و بادوام‌تر می‌شود. همچنین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ابزاری ارزشمند برای مشاهده رفتار تغییرشکل در مقیاس نانو است [۱۲ و ۱۳] و می‌تواند تحلیلی میکروسکوپی با دقتی فراهم کند که در شرایط فعلی فناوری آزمایشگاهی دستیابی به آن امکان‌پذیر نیست.

هدف این مقاله بررسی تبدیل فاز، تغییرات ساختاری و ویژگی‌های رفتار مکانیکی و عملکردی در α -Fe تحت بارگذاری کششی است. دینامیک تبدیل فاز این سامانه تحت شرایط بارگذاری کششی مورد توجه است، چرا که می‌تواند منجر به ظهور ساختارهای بلوری ویژه شود. بررسی سازوکارهای هسته‌زایی بینش مهمی در مورد شروع و انتشار انتقال فاز ارائه می‌دهد.

نتایج به‌دست‌آمده به‌طور قابل‌توجهی به درک ما از انتقال ساختار bcc به ساختار fcc و hcp در سطح اتمی کمک می‌کند و تصویر واضح‌تری از فرآیندهای اساسی درگیر ارائه می‌دهد. با این‌حال، شناسایی محدودیت‌های این مطالعه به دلیل نرخ کرنش بالا ($2 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$) و مسیر بارگذاری خاص انتخاب شده (در جهت محور y) برای شبیه‌سازی ضروری است.

در ادامه مقاله به صورت زیر تقسیم بندی شده است: در بخش دوم، مروری مختصر بر روش محاسباتی و جزئیات آن از جمله الگو، پتانسیل برهم‌کنش بین اتم‌های آهن و روش شبیه‌سازی ارائه می‌کنیم. بخش سوم به ارائه و بحث در مورد نتایج مربوط به فرآیندهای تبدیل فاز می‌پردازد و در بخش چهارم جمع‌بندی می‌شود.

۱. Embedded atom model (EAM)

۲. Finnis-sinclair

۳. Mendelev

۴. Lammmps

۵. Velocity-verlet

۶. Conjugate gradient

۷. Polak-Ribiere

۸. NPT ensemble

$$\sigma_m = \frac{1}{3}(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) \quad (1)$$

همچنین هنگامی که کرنش را در یک گام زمانی مشخص تجزیه و تحلیل می‌کنیم، فرض می‌کنیم که نمونه فقط در امتداد محور y تحت بارگذاری کششی قرار می‌گیرد. در این شرایط از معادله زیر برای محاسبه کرنش استفاده می‌کنیم:

$$\varepsilon_y = \left(\frac{L_y(N_{step}) - L_y(0)}{L_y(0)} \right) \quad (2)$$

که در آن، $L_y(0)$ طول اولیه نمونه را در امتداد محور y نشان می‌دهد. $L_y(N_{step})$ طول نمونه را در یک گام زمانی مشخص در طول شبیه‌سازی نشان می‌دهد. این معادله ما را قادر می‌سازد تا تغییر شکل تجربه‌شده توسط ماده را در امتداد محور y نسبت به طول اولیه آن اندازه‌گیری کنیم.

با ترکیب این محاسبات، منحنی‌های تنش-کرنش به دست می‌آیند. این منحنی‌ها در ارزیابی ویژگی‌های مکانیکی مواد، از جمله استحکام، شکل‌پذیری و سازوکارهای شکست احتمالی آن، ارزشمند هستند و برای توصیف رفتار آن در شرایط بارگذاری مختلف بسیار مهم هستند.

۳.۱. محدوده کشسان

همان‌طوری که در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است، در مرحله اول بارگذاری، سامانه در ناحیه کشسان (مطابق با قانون هوک) قرار دارد. در این مرحله، یک رابطه خطی بین تنش کششی و کرنش مشاهده می‌شود که برای مقادیر $\varepsilon_y < 0.33$ معتبر است. این محدوده، به ناحیه حد کشسان معروف است. در طول این محدوده، اتم‌ها در برابر بار اعمال‌شده مقاومت می‌کنند و هیچ تغییر فاز یا تغییر شکل دائمی رخ نمی‌دهد که نشان‌دهنده پاسخ کشسان ماده به بارگذاری مکانیکی است. این رفتار تنش-کرنش خطی در محدوده کشسان مشخصه توانایی ماده برای بازگشت به حالت اولیه خود پس از برداشتن بار اعمال‌شده، بدون تغییر شکل دائمی است. پیوندهای اتمی درون ماده می‌توانند به صورت کشسانی کشیده و تغییر شکل دهند، اما هیچ‌گونه تغییر شکل برگشت‌ناپذیری را متحمل نمی‌شوند.

تغییرات حجمی کنترل شود و سامانه به تعادل برسد. در طول این مرحله واهلش، با اعمال تنش اولیه نزدیک به صفر بار، تنش‌های پسماندی که ممکن است قبل از بارگذاری در نمونه وجود داشته باشد حذف شده است.

۲.۵. بارگذاری کششی

پس از واهلش، بارگذاری کششی با نرخ کرنش بالای $2 \times 10^{-9} \text{s}^{-1}$ در امتداد محور y اعمال شده است. رفتار ماده و تغییرات ساختاری آن تا زمان شکست کامل نمونه پایش شده است. نمونه در طول شبیه‌سازی با استفاده از هنگرد کانونیک^۱ [۲۸] در دمای 300 کلوین ثابت نگه داشته شده است.

۲.۶. ابزارهای تحلیل

برای تحلیل نتایج، منحنی‌های تنش-کرنش استخراج و تغییرات ساختار بلوری با استفاده از ابزار تجسم‌سازی متن باز اویتو^۲ و روش تحلیل همسایه مشترک^۳ استفاده شده است [۲۹، ۳۰]. در این تحلیل، اتم‌های fcc، bcc، hcp و اتم‌های ناشناخته^۴ به ترتیب با رنگ‌های سبز، آبی، قرمز و سفید نمایش داده شده‌اند.

۳. نتایج و بحث

بررسی پاسخ مکانیکی یک نمونه بدون نقص از $\alpha\text{-Fe}$ تک بلوری تحت بارگذاری کششی، این امکان را می‌دهد تا رفتار دینامیکی ماده را در سطح اتمی مطالعه کنیم. با تنظیم بارگذاری کنترل‌شده، تغییر شکل یکنواخت و ثابت نمونه تضمین می‌شود و تجزیه و تحلیل جامع رفتار $\alpha\text{-Fe}$ و سازوکارهای تغییر شکل را تسهیل می‌کند. در شکل ۲، منحنی تنش-کرنش این نمونه ارائه شده است.

برای به دست آوردن منحنی‌های تنش-کرنش، از تنش در جهت‌های x ، y ، z و تنش متوسط (σ_m) همراه با کرنش (ε_y) استفاده می‌کنیم. تنش متوسط با میانگین‌گیری تنش‌ها در جهت‌های x ، y ، z محاسبه می‌شود و اساساً برابر با میانگین سه مؤلفه اصلی تنش است. این محاسبه با فرمول زیر بیان می‌شود:

۱. Canonical ensemble (NVT)

۲. Open visualization tool (OVITO)

۳. Common neighbor analysis (CNA)

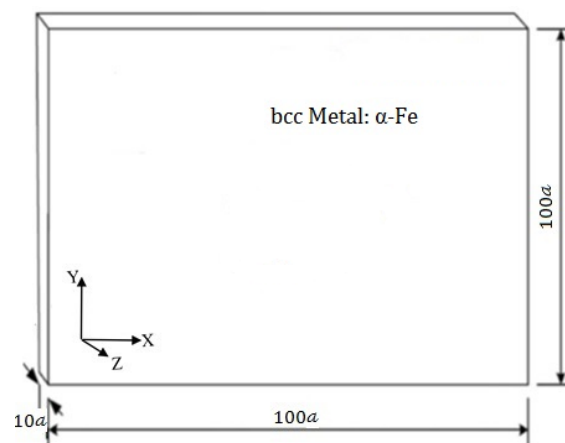
۴. Unknown atoms

در مقابل نیروی اعمالی از دست داده و پیوندهای اتمی شکسته می‌شوند و مطابق با شکل ۴. ه شکست قطعه شروع می‌شود. ادامه روند شکست قطعه در شکل های ۴. و-۴. ط ارائه شده است.

توجه به این نکته حائز اهمیت است شدت تمرکز تنش باعث شروع تبدیل فاز در آن منطقه می‌شود. این انتقال فاز، شکست قطعه در برابر تنش اعمالی را به تعویق می‌اندازد که باعث افزایش شکل‌پذیری ماده در طول بارگذاری کششی است. شکل ۴ این مراحل را از ابتدا تا شکست قطعه به صورت کامل نشان می‌دهد.

۴.۳. خلاصه مراحل تبدیل فاز و تغییر شکل

در منحنی‌های تنش-کرنش، هنگامی که تنش از مقدار حد کشسان فراتر می‌رود، ماده تحت سازوکارهای تغییر شکل مختلفی قرار می‌گیرد. اتم‌ها در ماده شروع به لغزش در امتداد صفحات بلوری خاص می‌کنند که عمدتاً توسط تنش مکانیکی تنظیم می‌شوند و برای تطبیق با تنش اعمال شده حرکت می‌کنند. همچنین در طول فرآیند بارگذاری، تولید پیوندهای فازی fcc/hcp به فرآیند تغییر شکل کمک می‌کند و منجر به تغییرات در پیکربندی شبکه بلوری می‌شود. مهم‌ترین تغییر مشاهده شده، تبدیل فاز از ساختار bcc به fcc است که با بازآرایی اتم‌های شبکه همراه است که به تغییر شکل پلاستیک در ماده کمک می‌کند. تشکیل ناحیه پلاستیکی نشان می‌دهد که در ماده تغییر شکل دائمی در حال رخ دادن است و نشان‌دهنده شروع خاصیت پلاستیکی است. بنابراین، انتقال فاز از ساختارهای bcc به fcc نقش مهمی در شروع تغییر شکل پلاستیک بازی می‌کند، که با آزاد کردن تنش سامانه، منجر به افت آن می‌شود. تغییر شکل پلاستیک نقشی حیاتی در تغییر شکل ماده ایفا می‌کند. در مقدار $\epsilon_y \approx 0.075$ ، ما به وضوح تشکیل اتم‌های کوچک fcc را مشاهده می‌کنیم که نشان‌دهنده هسته‌سازی ساختارهای جدید است. شکل ۴. ج، تبدیل فاز از ساختار bcc به fcc/unknown را نشان می‌دهد، و شکل ۴. د، در مقدار $\epsilon_y \approx 0.27$ ، یک تبدیل فاز از ساختار fcc به hcp را نشان می‌دهد که این انتقال فازها را می‌توان به صورت (bcc→fcc→hcp) بیان داد. پدیدار شدن شبکه‌های fcc/hcp، با مطالعه قبلی انجام شده توسط شاول و همکاران [۳۱] که تحت بارگذاری تراکمی با نرخ کرنش بالا (ضربه) نیز گزارش شده، مطابقت دارد.



شکل ۱. ابعاد و پیکربندی اولیه الگوی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فاز α -Fe با ساختار bcc.

۲.۳. تغییر فاز به ساختارهای fcc/unknown

در مرحله دوم بارگذاری، متناظر با محدوده $0.033 \leq \epsilon_y < 0.33$ ، با افزایش کرنش، در $\epsilon_y \approx 0.033$ (نقطه A در منحنی تنش-کرنش) لغزش اتم‌ها و تبدیل فاز از ساختار bcc به ساختار اتم‌های ناشناخته شروع می‌شود (شکل ۴. ب). با ادامه بارگذاری و گذشت زمان تعداد اتم‌های ناشناخته بیشتر می‌شوند. در مقدار $\epsilon_y \approx 0.075$ ، مرحله سوم بارگذاری شروع شده و تشدید تنش باعث بی‌نظمی هندسی اتم‌ها و خروج از ساختار bcc معمولی شده و یک پدیده قابل توجه در ماده رخ می‌دهد و هسته‌های fcc به تدریج ظاهر می‌شوند (شکل ۴. ج). همان‌طور که در منحنی‌های تنش-کرنش مشاهده می‌شود این پدیده تبدیل فاز از ساختار bcc به ساختار fcc در نقطه B اتفاق می‌افتد که با یک افت تنش همراه است و نشان‌دهنده تغییر قابل توجهی در پیکربندی بلوری نمونه است.

۳.۳. تغییر فاز به ساختار hcp و شکست نمونه

بعد از ظهور فاز fcc و افت تنش به یک مقدار معین، تنش همراه با افزایش کرنش، افزایش می‌یابد. بنابراین در مرحله چهارم بارگذاری، مربوط به محدوده $0.27 \leq \epsilon_y < 0.34$ ، متناظر با نقطه C در منحنی تنش-کرنش (شکل های ۲ و ۳) و شکل ۴. د اتم‌ها با ساختارهای hcp مشاهده می‌شوند و یک افت تنش در $\epsilon_y \approx 0.27$ مشاهده می‌شود. در نهایت، در مرحله پنجم بارگذاری در محدوده $\epsilon_y \geq 0.34$ ، متناظر با نقطه D ماده مقاومت خود را

گذار از ناحیه کشسان به پلاستیک، افزایش غیریکنواختی در تعداد ساختارهای fcc/unknown مشاهده می‌شود. برخلاف فاز bcc که با کاهش جمعیت اتمی مواجه است. باین حال، همان‌طوری که در شکل ۵ مشاهده می‌شود تا قبل از شروع شکست قطعه، تبدیل فاز و درصد ساختارهای fcc/hcp با افزایش کرنش افزایش می‌یابد.

۴. نتیجه‌گیری

در این تحقیق با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به بررسی پاسخ مکانیکی و تغییر شکل‌های ریزساختاری یک نمونه بدون نقص از α -Fe تک بلوری تحت بارگذاری کششی، پرداخته شد. یافته‌های اصلی به شرح زیر است:

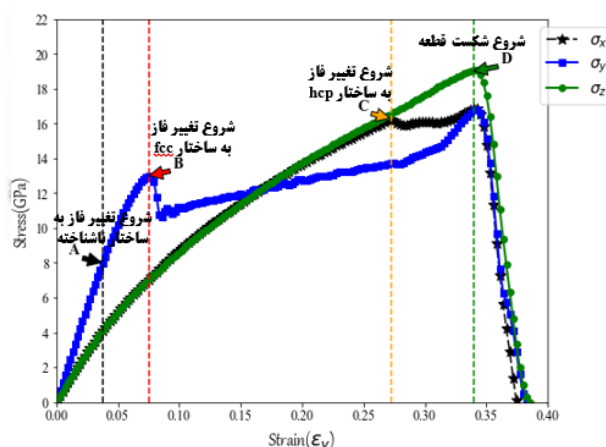
(۱) با گذشت زمان بارگذاری و افزایش کرنش، اتم‌های نمونه به‌منظور جلوگیری از شکست نمونه، تبدیل فاز از ساختار bcc به fcc و سپس از ساختار fcc به hcp را تجربه می‌کنند. به بیان دیگر، تبدیل فاز ساختاری به‌صورت $bcc \rightarrow fcc \rightarrow hcp$ در ماده در طول فرآیند بارگذاری مشاهده می‌شود.

(۲) در زمان شروع تبدیل فاز ساختاری یک افت تنش در ماده مشاهده می‌گردد که منجر به آزاد شدن تنش در سامانه می‌شود.

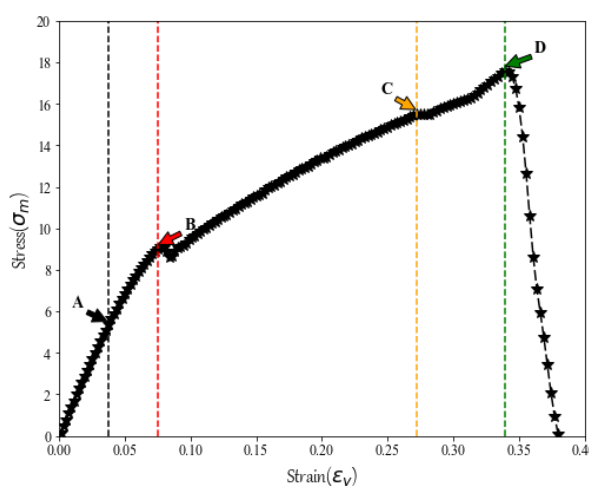
(۳) تا لحظه شروع شکست نمونه در نقطه D در منحنی تنش-کرنش، با افزایش کرنش درصد ساختارهای تغییر فاز یافته از bcc به fcc/hcp افزایش می‌یابد. در لحظه شروع شکست تعداد اتم‌ها با ساختار ناشناخته بیشتر می‌شوند.

(۴) بیشینه تنش‌ها در لحظه شروع یک تبدیل فاز ($bcc \rightarrow fcc$) یا ($fcc \rightarrow hcp$) عمدتاً در نزدیکی فاز تبدیل یافته اتفاق می‌افتد. به بیان دیگر شدت تمرکز تنش باعث شروع تبدیل فاز در آن منطقه می‌شوند.

مقدار تنش بحرانی $\sigma_{bcc} > \sigma_{unknown} > \sigma_{fcc} > \sigma_{hcp}$ برای ساختارهای مختلف، نشان می‌دهد که تنش بحرانی ساختار hcp از بقیه ساختارها بیشتر است.



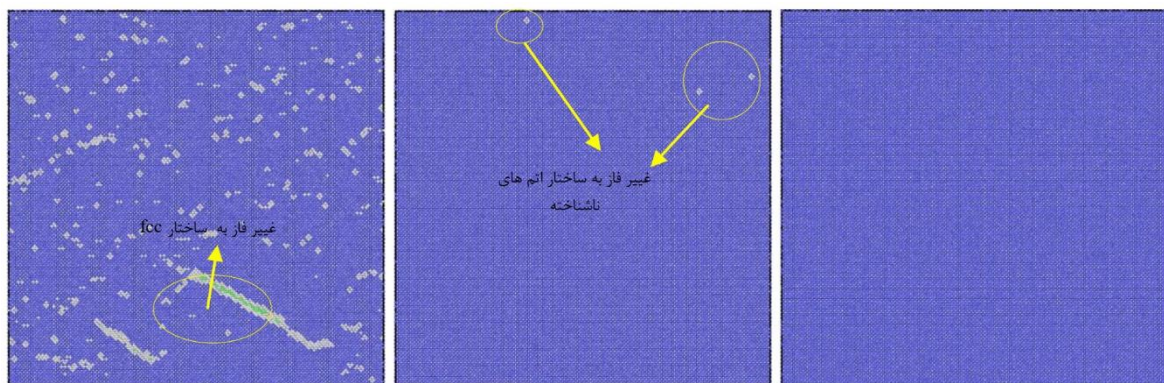
شکل ۲. نمودار تنش-کرنش: تنش در جهت‌های x، y و z و کرنش در جهت y. نقطه A شروع اتم‌های ناشناخته، نقطه B شروع فاز fcc، نقطه C شروع فاز hcp و نقطه D ایجاد حفره و شروع شکست قطعه است.



شکل ۳. نمودار تنش-کرنش: تنش متوسط و کرنش در جهت y.

تکامل ساختارهای بلوری در طول فرآیند بارگذاری، بینشی ارزشمند نسبت به سازوکارهای تغییر شکل فراهم می‌کند. با استفاده از روش تحلیل همسایه مشترک (CNA)، تعیین نوع ساختار هر اتم به‌سادگی امکان‌پذیر است. پس از برچسب‌گذاری تمام اتم‌ها، ضروری است که تعداد اتم‌های متعلق به هر ساختار مشخص شود و به‌طور معادل، کسر حجمی هر فاز در سامانه تعیین گردد.

در طول فرآیند بارگذاری، تعداد اتم‌های موجود در هر فاز به‌صورت دینامیکی تغییر می‌کند. شکل ۵، روند تغییر تعداد اتم‌ها در هر ساختار و وابستگی آن‌ها به کرنش (ϵ_y) را نشان می‌دهد. در



(ج)

(ب)

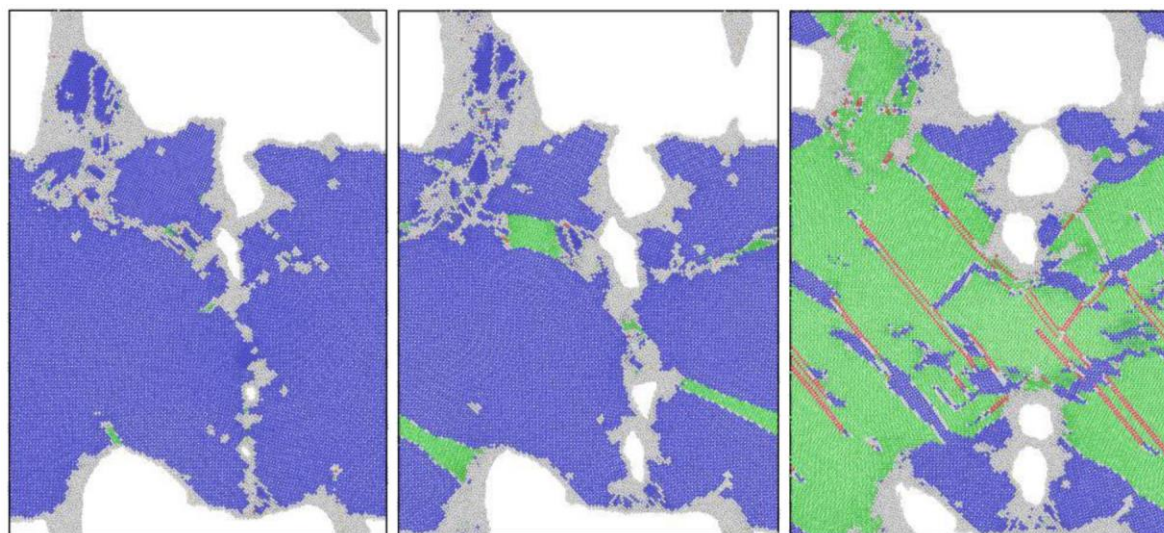
(الف)



(و)

(ه)

(د)

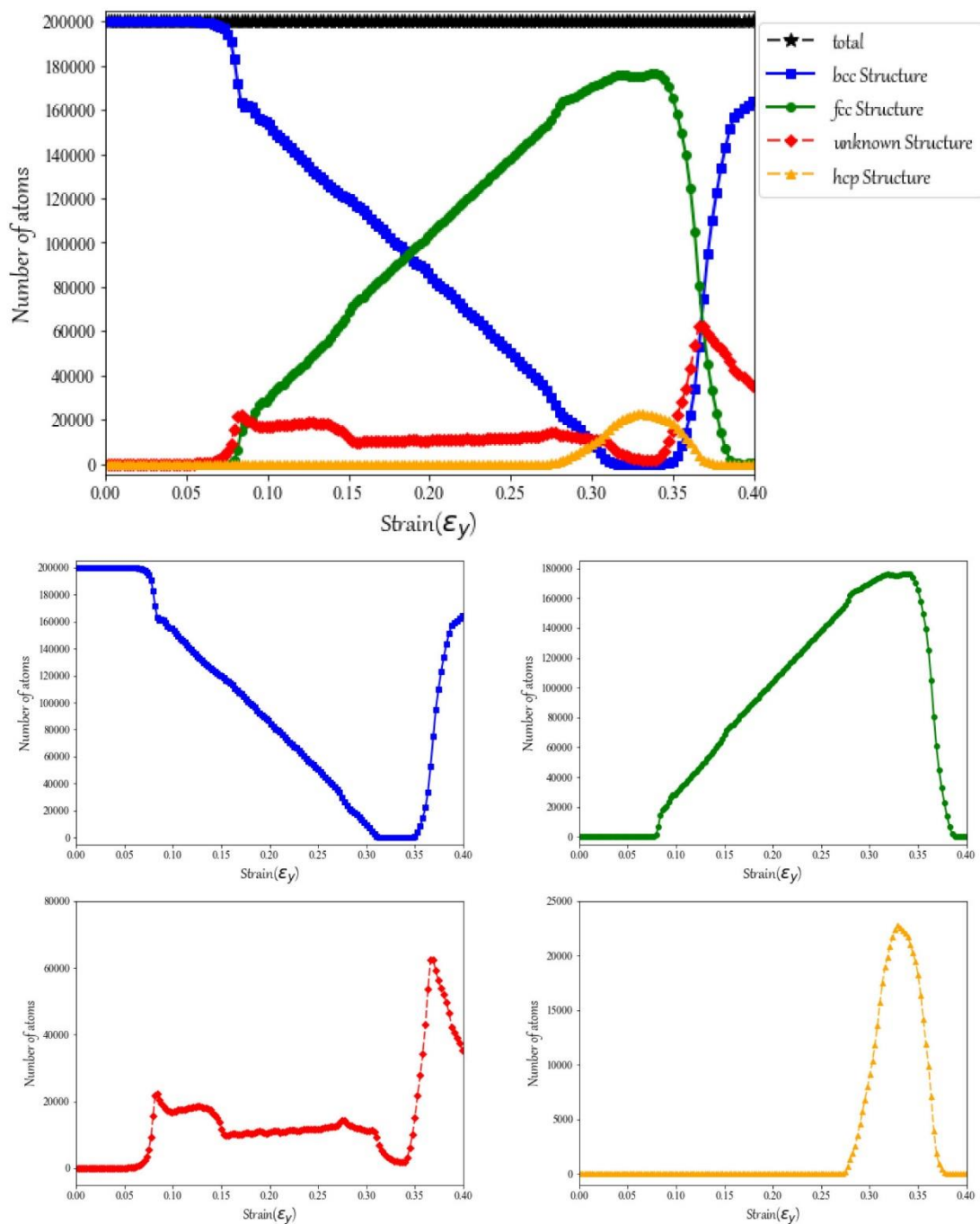


(ط)

(ح)

(ز)

شکل ۴. ساختار بلوری: الف. نمونه قبل از بارگذاری با ساختار bcc $\epsilon \approx 0$. ب. متناظر با نقطه A شروع اتم‌های ناشناخته $\epsilon \approx 0.033$. ج. نقطه B شروع فاز fcc $\epsilon \approx 0.075$. د. نقطه C شروع فاز hcp $\epsilon \approx 0.27$. ه. نقطه D ایجاد حفره و شروع شکست قطعه $\epsilon \approx 0.34$. در نمودارهای تنش-کرنش ادامه روند شکست قطعه در و. $\epsilon \approx 0.35$. ز. $\epsilon \approx 0.36$. ح. $\epsilon \approx 0.38$. ط. $\epsilon \approx 0.39$.



شکل ۵. نمودار تعداد اتم‌های ساختارهای مختلف برحسب کرنش.

۵. مراجع

1. W A Bassett and E Huang, *Science* **238** (1987) 780.
2. J C Boettger and D C Wallace, *Phys. Rev. B* **55** (1997) 2840.
3. K Yano and Y Horie, *Int. J. Plast.* **18** (2002) 1427.
4. K J Caspersen, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 115501.
5. B J Jensen, G T Gray III, and R S Hixson, *J. Appl. Phys.* **105** (2009) 103502.
6. N Gunkelmann, *et al.*, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 144111.
7. K Wang, *et al.*, *Int. J. Plast.* **59** (2014) 180.
8. K Wang, *et al.*, *Int. J. Plast.* **96** (2017) 56.

9. W F Smith and J Hashemi, “*Foundations of Materials Science and Engineering*”, McGraw-Hill (2006).
10. HKDH Bhadeshia and RWK Honeycombe, “*Steels: Microstructure and Properties*”, Butterworth-Heinemann (2006).
11. D A Porter, K E Easterling, and M Y M Sherif, “*Phase Transformations in Metals and Alloys*”, CRC Press (2009).
12. J Song and W Curtin, *Nat. Mater.* **12** (2013) 145.
13. H Y Song, L Zhang, and M X Xiao, *Phys. Lett. A* **380** (2016) 917.
14. M W Finnis and J E Sinclair, *Philos. Mag. A* **50** (1984) 45.
15. M I Mendeleev, *et al.*, *Philos. Mag.* **83** (2003) 3977.
16. S J Wang, *et al.*, *Sci. Rep.* **3** (2013) 1086.
17. K Kadau, *et al.*, *Science* **296** (2002) 1681.
18. K Kadau, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 135701.
19. J L Shao, *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **21** (2009) 245703.
20. F F Abraham, *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **99**(9) (2002) 5783.
21. Y Mishin and M J Mehl, *Phys. Rev. B* **63** (2001) 12.
22. S Plimpton, *J. Comput. Phys.* **117** (1995) 1.
23. WC Swope, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **76** (1982) 637.
24. G Yuan, Z Wei, and G Li, *J. Comput. Appl. Math* **255** (2014) 86.
25. S. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81** (1984) 511.
26. W G Hoover, *Phys. Rev. A* **31** (1985) 1695.
27. M Parrinello and A Rahman, *J. Appl. Phys.* **52** (1981) 7182.
28. N Metropolis, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 1087.
29. D Faken and H Jonsson, *Comput. Mater. Sci.* **2**(2) (1994) 279.
30. A Stukowski, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** (2010) 015012.
31. J L Shao, *et al.*, *Sci. Rep.* **8** (2018) 7650.