

مکانیزم 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

چکیده:

متن یکی از مهم‌ترین خواص 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 مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که در طول فرآیند بارگذاری، تغییر شکل ریزساختاری ابتدا از ساختار اولیه body-centered cubic (bcc) به face-centered cubic (fcc) و سپس از ساختار fcc به hexagonal close-packed (hcp) اتفاق می‌افتد. 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

و تغییرات ساختاری را بررسی کرده‌اند و به مکانیزم‌هایی چون سینتیک، پاسخ‌های مکانیکی حاصل و پدیده‌های درهم‌تنیده تبدیل فاز در رفتار پلاستیک فلزات پرداخته‌اند [۶-۸]. این فرآیندها، خواص مکانیکی و مقاومت در برابر شکست را مشخص می‌کنند و بر خواصی مانند سختی و شکل‌پذیری تأثیر می‌گذارند [۹-۱۱].

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به عنوان ابزاری قدرتمند برای بررسی تعاملات پیچیده پدیده‌های تبدیل فاز در فلزات در مقیاس‌های اتمی و مولکولی نقش ایفا می‌کند و امکان 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 استراتژی‌هایی ارائه دهیم که در نهایت

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 تأثیر می‌گذارد [۵-۱]. لذا در سال‌های اخیر، محققان و پژوهشگران به‌طور گسترده پیچیدگی‌های این تبدیل‌های فازی

توصیف برهمکنش بین اتم‌های آهن استفاده شده است. به طور خاص، این پتانسیل از نوع فینیس-سینکلیر^۲ [۱۴] که توسط مندلف و همکاران^۳ [۱۵] توسعه داده شده است، بهره گرفته ایم. این پتانسیل در بازتولید دقیق تغییر فازهای α -Fe، از ساختار bcc به ساختارهای fcc/hcp عملکرد موفقی داشته [۱۹-۱۶] و توانایی مطالعه خواص سطحی و نابجایی‌ها را نیز دارد [۲۰ و ۲۱].

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 (fs) انتخاب شده که محاسبات پایدار و دقیق را تضمین میکند.

۳.۲. تنظیمات اولیه

مدل 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 با ۲/۸۵۵ 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.

۴.۲. واهلش و تنظیم اولیه

قبل از اعمال بارگذاری کششی، سیستم با استفاده از الگوریتم گرادیان مزدوج^۶ نسخه پلاک-ریبر^۷ کمینه سازی شده است [۲۴]. سپس با به کارگیری هنگرد همدم-ایزوبار^۸، در دمای ۳۰۰ کلین و تنش اولیه نزدیک به صفر بار تعادل دینامیکی سیستم به مدت ۵۰۰ پیکوثانیه (ps) حاصل شده است [۲۷-۲۵]. برای تثبیت حجم نمونه از دستور box/relax استفاده شده است تا تغییرات حجمی کنترل شود و سیستم به تعادل برسد. در طول این مرحله واهلش، با اعمال تنش اولیه نزدیک به صفر

منجر به ایجاد مواد انعطاف پذیرتر و بادوام تر می‌شود. همچنین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ابزاری ارزشمند برای مشاهده رفتار تغییر شکل در مقیاس نانو است [۱۲ و ۱۳] و می‌تواند تحلیل و دقت میکروسکوپی را ارائه دهد که با آزمایش در سطح فناوری فعلی نمی‌توان به آن دست یافت.

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 سیستم تحت شرایط بارگذاری کششی مورد توجه است، چرا که می‌تواند منجر به ظهور ساختارهای بلوری خاص شود. بررسی مکانیزم‌های هسته‌زایی بینش مهمی در مورد شروع و انتشار انتقال فاز ارائه می‌دهد.

نتایج به دست آمده به طور قابل توجهی به درک ما از انتقال ساختار bcc به ساختار fcc و hcp در سطح اتمی کمک می‌کند و تصویر واضح تری از فرآیندهای اساسی درگیر ارائه می‌دهد. با این حال، شناسایی محدودیت‌های این مطالعه به دلیل نرخ کرنش بالا ($2 \times 10^9 s^{-1}$) 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 مدل، 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 سپس در بخش چهارم خلاصه می‌شوند.

۲. جزئیات محاسباتی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

۱. پتانسیل برهم‌کنش بین اتمی استفاده شده

در این مطالعه، از پتانسیل روش اتم جاسازی شده (EAM)^۱ برای

¹ Embedded atom model

² Finnis-Sinclair

³ Mendelev et al

⁴ LAMMPS

⁵ Velocity-Verlet

⁶ femtosecond

⁷ conjugate gradient

⁸ Polak-Ribiere

⁹ NPT Ensemble

¹⁰ picosecond

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 $2 \times 10^9 s^{-1}$ 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 ۳۰۰ کلون ثابت نگه داشته شده است.

۲.۶. ابزارهای تحلیل

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

۳. نتایج و بحث

بررسی پاسخ مکانیکی یک نمونه بدون نقص از α -Fe تک بلوری تحت بارگذاری کششی، که به ما امکان می‌دهد رفتار دینامیکی ماده را در سطح اتمی مطالعه کنیم. با تنظیم بارگذاری کنترل‌شده، تغییر شکل یکنواخت و ثابت نمونه را تضمین می‌شود و تجزیه و تحلیل جامع رفتار α -Fe و مکانیزم‌های 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 و z محاسبه می‌شود و اساساً مقدار متوسط سه تنش نرمال را می‌یابد. این محاسبه با فرمول زیر بیان می‌شود:

$$\sigma_m = \frac{1}{3}(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) \quad (۱)$$

همچنین هنگامی که کرنش را در یک گام زمانی مشخص آنالیز می‌کنیم، در نظر می‌گیریم که نمونه فقط در امتداد محور y تحت

بارگذاری کششی قرار می‌گیرد. در این شرایط از معادله زیر برای محاسبه کرنش مهندسی استفاده می‌کنیم:

$$\epsilon_y = \left(\frac{L_y(N_{step}) - L_y(0)}{L_y(0)} \right) \quad (۲)$$

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 می‌آید. این منحنی‌ها در ارزیابی خواص مکانیکی مواد، از جمله استحکام، شکل‌پذیری و مکانیزم‌های 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، سیستم در یک رژیم الاستیک (مطابق با قانون هوک) قرار دارد. در این مرحله، یک رابطه خطی بین تنش کششی و کرنش مشاهده می‌شود که برای مقادیر $\epsilon_y < 0.033$ 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 به‌صورت کشسانی کشیده و تغییر شکل دهند، اما هیچ‌گونه تغییر شکل برگشت‌ناپذیری را متحمل نمی‌شوند.

¹ NVT Ensemble

² Open Visualization Tool

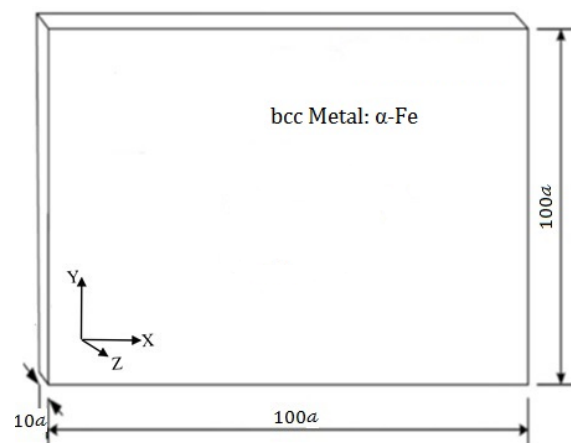
³ common neighbor analysis

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 ۴(و-ط) ارائه شده است.

توجه به این نکته حائز اهمیت می‌باشد شدت تمرکز تنش باعث شروع تبدیل فاز در آن منطقه می‌شوند. 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

بنابراین در منحنی های تنش-کرنش، هنگامی که تنش از مقدار حد کشسان فراتر می‌رود، ماده تحت مکانیزم‌های تغییر شکل مختلفی قرار می‌گیرد. اتم‌ها در ماده شروع به لغزش در امتداد صفحات بلوری خاص می‌کنند که عمده‌تاً 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 سیستم، 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)، مشاهدات انجام شده یک تبدیل فاز از ساختار bcc به fcc/unknown 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 $(bcc \rightarrow fcc \rightarrow hcp)$ نشان داد. ظهور شبکه‌های fcc/hcp، با مطالعه قبلی انجام شده توسط شاو و همکاران^۱ [۳۱]، تحت بارگذاری تراکمی با نرخ کرنش بالا (ضربه) نیز گزارش شده، مطابقت دارد.



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

۳.۲. تغییر فاز به ساختارهای fcc/unknown

در مرحله دوم بارگذاری، متناظر با محدوده $0.033 \leq \epsilon_y < 0.075$ ، 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 می‌شود. 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 (شکل‌های 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 در

گذار از ناحیه الاستیک به پلاستیک، افزایش غیریکنواختی در تعداد ساختارهای fcc/unknown مشاهده می‌شود. برخلاف فاز bcc که با کاهش جمعیت اتمی مواجه است.

باین حال، همان طوری 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:

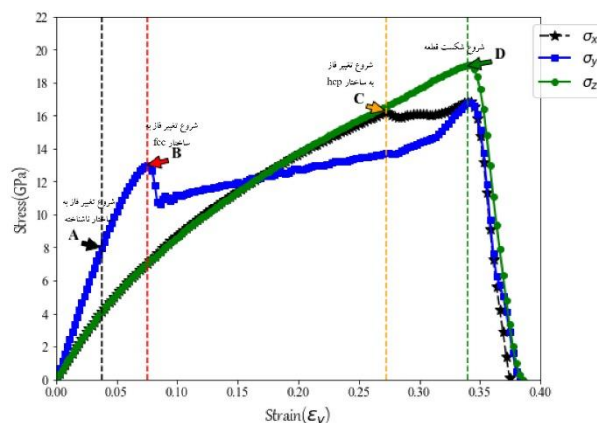
(۱) با گذشت زمان بارگذاری و افزایش کرنش، اتم‌های نمونه به‌منظور جلوگیری از شکست نمونه، تبدیل فاز از ساختار bcc به fcc و سپس از ساختار fcc به hcp را تجربه می‌کنند به بیان دیگر، تبدیل فاز ساختاری به صورت $bcc \rightarrow fcc \rightarrow hcp$ در ماده در طول فرآیند بارگذاری مشاهده می‌شود.

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

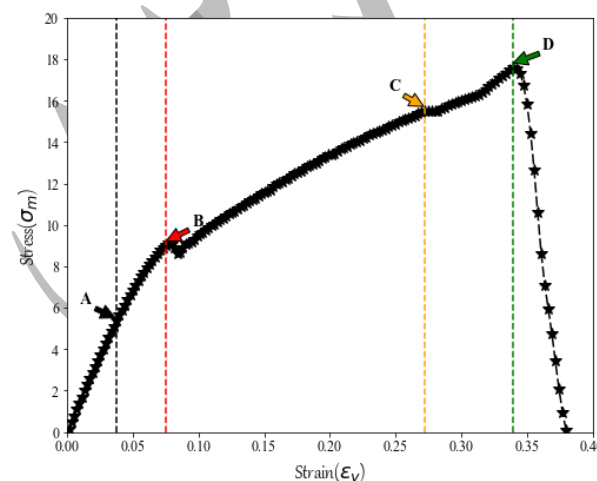
(۳) تا لحظه شروع شکست نمونه در نقطه D در منحنی تنش-کرنش، با افزایش کرنش درصد ساختارهای تغییر فاز یافته از bcc به fcc/hcp افزایش می‌یابد. در لحظه شروع شکست تعداد اتم‌ها با ساختار ناشناخته بیشتر می‌شوند.

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



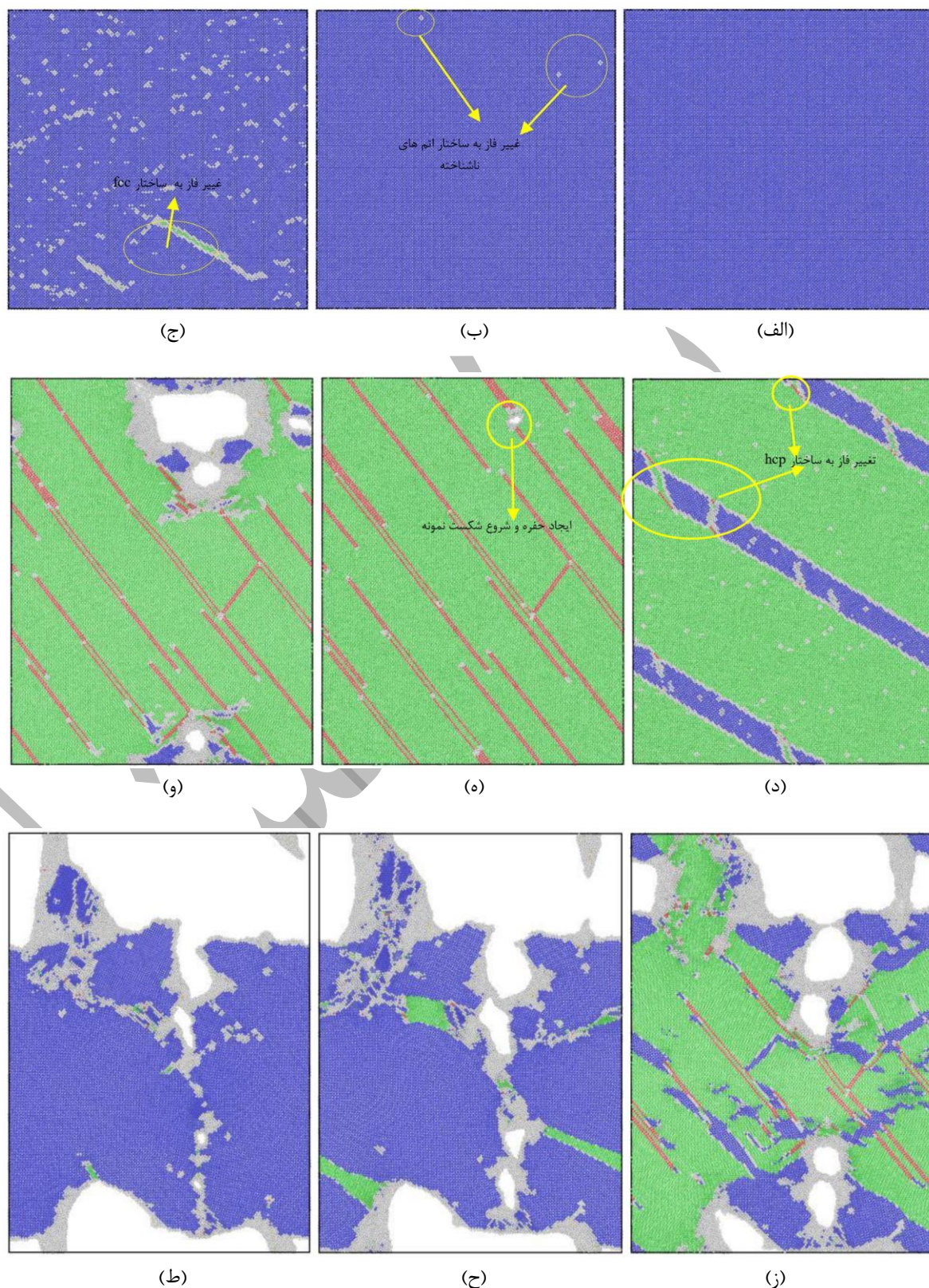
شکل ۲. نمودار تنش-کرنش: تنش در جهت‌های x، y و z و کرنش در جهت y (نقطه A شروع اتم‌های ناشناخته، نقطه B شروع فاز fcc، نقطه C شروع فاز hcp و نقطه D ایجاد حفره و شروع شکست قطعه)



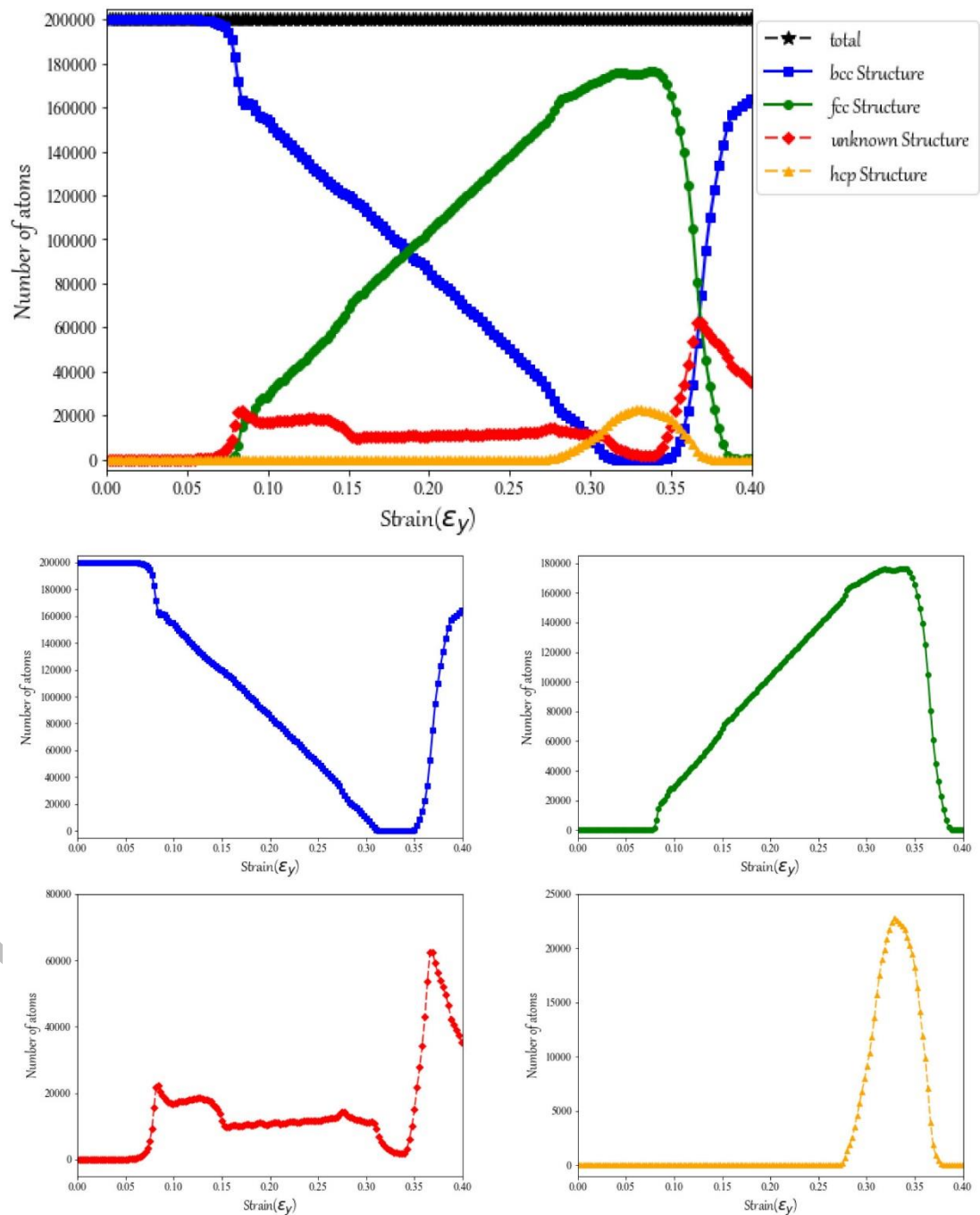
شکل ۳. نمودار تنش-کرنش: تنش متوسط و کرنش در جهت y

تکامل ساختارهای بلوری در طول فرآیند بارگذاری، بینشی ارزشمند نسبت به مکانیزم‌های تغییر شکل فراهم می‌کند. با استفاده از تکنیک 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 سیستم 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



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 نمودار تنش- کرنش (و) ادامه روند شکست قطعه در ' $\epsilon \approx 0.35$ '، (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. WA Bassett and E Huang, Science 238 (1987) 780.
2. JC Boettger and DC Wallace, Physical Review B 55 (1997) 2840.
3. K Yano and Y Horie, International Journal of Plasticity 18 (2002) 1427.
4. KJ Caspersen, et al., Physical Review Letters 93 (2004) 115501.
5. BJ Jensen, GT Gray III, and RS Hixson, Journal of Applied Physics 105 (2009) 103502.
6. N Gunkelmann, et al., Physical Review B 86 (2012) 144111.
7. K Wang, et al., International Journal of Plasticity 59 (2014) 180.
8. K Wang, et al., International Journal of Plasticity 96 (2017) 56.

9. WF Smith and J Hashemi, Foundations of Materials Science and Engineering (4th ed) McGraw-Hill (2006).
10. HKDH Bhadeshia and RWK Honeycombe, Steels: Microstructure and Properties (3rd ed.) Butterworth-Heinemann (2006).
11. DA Porter, KE Easterling, and MYM Sherif, Phase Transformations in Metals and Alloys (3rd ed.) CRC Press (2009).
12. J Song and W Curtin, Nature Materials 12 (2013) 145.
13. HY Song, L Zhang, and MX Xiao, Physics Letters A 380 (2016) 917.
14. MW Finnis and JE Sinclair, Philosophical Magazine A 50 (1984) 45.
15. MI Mendeleev, et al., Asta M. Philosophical Magazine 83 (2003) 3977.
16. SJ Wang et al., Scientific Reports 3 (2013) 1086.
17. K Kadau, et al., Science 296 (2002) 1681.
18. K Kadau et al., Physical Review Letters 98 (2007) 135701.
19. JL Shao, et al., Journal of Physics: Condensed Matter 21 (2009) 245703.
20. FF Abraham et al., Proc Natl Acad Sci USA 99(9) (2002) 5783.
21. Y Mishin and MJ Mehl, Physical Review B 63(22) (2001) 12.
22. S Plimpton, Journal of Computational Physics 117 (1995) 1.
23. WC Swope, et al., The Journal of Chemical Physics 76 (1982) 637.
24. G Yuan, Z Wei, and G Li, Journal of Computational and Applied Mathematics 255 (2014) 86.
25. Nose S. The Journal of Chemical Physics. 1984; 81, 511-519.
26. WG Hoover, Physical Review A 31 (1985) 1695.
27. M Parrinello and A Rahman, Journal of Applied physics 52 (1981) 7182.
28. N Metropolis, et al., Journal Chemical Physics 21 (1953) 1087.
29. D Faken and H Jonsson, Computational Materials Science 2(2) (1994) 279.
30. A Stukowski, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 18 (2010) 015012.
31. JL Shao, et al., scientific reports 8 (2018) 7650.