

III. félévi beszámoló

Péterffy Gábor (peterffy95@gmail.com)
Anyagtudomány és Szilárdtestfizika program
Témavezető: Ispánovity Péter Dusán

Dolgozat témája: Dinamikai korrelációk diszlokációrendszerekben

1. Bevezetés

Mint előző beszámolóim során is ismertettem mikronos és szubmikronos méretű kristályos anyagok deformációs tulajdonságai alapvetően eltérnek a tömbi anyagoknál megszokott viselkedéstől. A kutató munkám ebben a félévben is ezzel a problémakörrel volt kapcsolatos.

2. Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

A félév során 3 projekten dolgoztam melyek rövid ismertetése alább található:

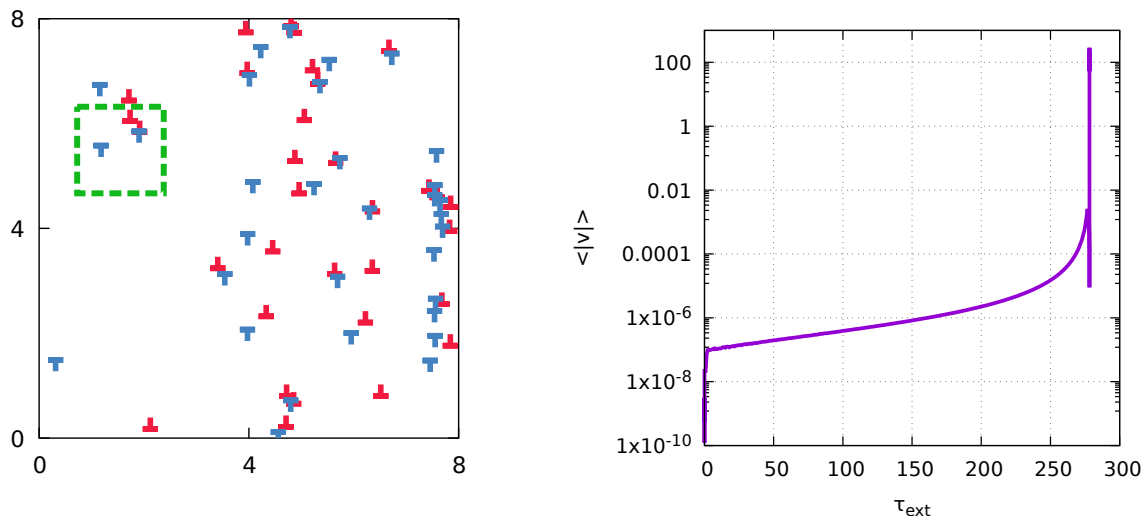
2.1. Spectral módszer SDDDST-be integrálása

Berta Dénes és társai megalkottak egy olyan módszert melynek segítségével hatékonyan lehet határ-feltételeket figyelembe venni diszlokáció dinamikai szimulációk során [1]. A módszerre alapozva Berta Dénes kifejlesztette a Spektrál nevű függvénykönyvtárat, melyet én integráltam az általam fejlesztett, 2D diszkrét diszlokáció dinamikai szimulátorba (SDDDST). Ez lehetővé teszi a lokális folyásfeszültségek vizsgálatát. A két módszer társítása még nem tökéletes, ezen a következő félévben is dolgozni fogunk.

Az előzőekben megemlített lokális folyásfeszültség vizsgálathoz készítettem egy másik eszközt is, mely szintén az SDDDST szimulátor egy módosulata, és lehetővé teszi egyes diszlokációk rögzítését a periodikus cellákban, ezáltal lehetővé téve egy egyszerűbb lokális folyásfeszültség vizsgálatot. Egy példa látható ezzel kapcsolatban az 1. ábrán.

2.2. 2D diszlokációrendszerek szimulációja

A korábbi beszámolóimban említett okokból, illetve az ÚNKP pályázatomhoz kapcsolódóan nagy mennyiségű szimulációra van szükségem, melyekben a diszlokációk egyensúlyi állapotban helyezkednek el kezdetben, majd pedig egy lassú kváziszztatikus terhelésű nyírás eredményeképp elmozdulnak és így a rendszerek plasztikus deformációt szenvednek. Ilyen adatsorokra tiszta, azaz vakanciamentes, illetve vakanciákkal szennyezett esetben is szükségem van ezért változtattam a vakanciák illetve a diszlokációk számát is szimulációim során. Véletlen konfigurációkat hoztam létre



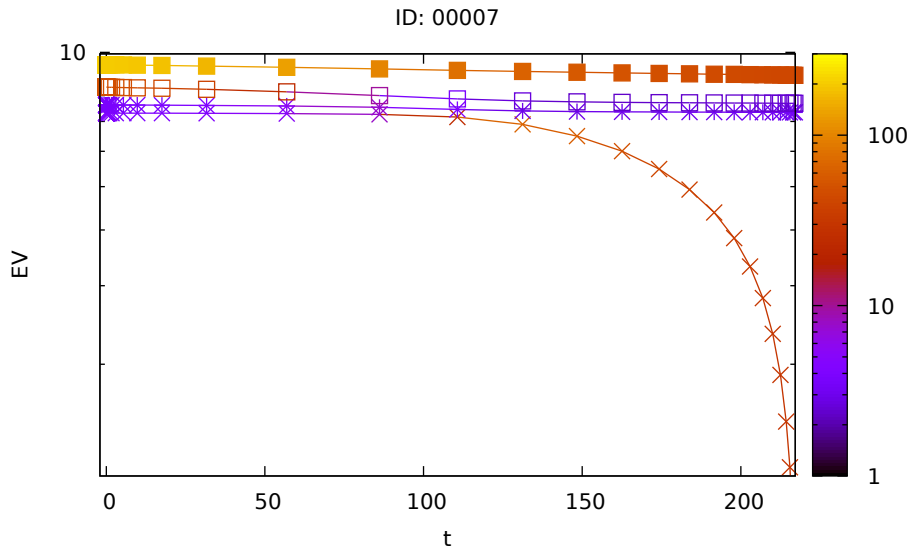
1. ábra. A baloldali ábrán az látszik, hogy miképp kerül véletlenszerűen kiválasztásra egy tartomány a szimulációs cellából (zöld szaggatott határvonalú négyzet) melynek a lokális folyásfeszültségét kívánom vizsgálni. A jobboldali ábra pedig azt mutatja meg, hogy a lassan kvázisztatikusan növelt külső nyírófeszültség függvényében (τ_{ext}) miképpen változik a kiválasztott tartományon belüli diszlokációk átlagsebessége ($\langle |v| \rangle$)

melyeket először relaxáltattam az SDDDST-vel az egyensúlyi állapotba, majd pedig megterheltem azonos, lassú, kvázisztatikus protokollal.

2.3. Kétdimenziós diszlokációrendszerek lineáris stabilitás analízise

Az előző pontban említett szimulációk közül a tiszta eseteket vizsgáltam a korábbi félévben készített kiértékelő szoftveremmel, illetve azt ki is egészítettem. A fő probléma amire koncentráltam, hogy lavina aktiválódáskor mely sajátmódus aktiválódik és, hogy az aktiválódó diszlokációk miként helyezkednek el a szimulációs cellában. A sajátértékek, az aktivált diszlokációk számának és a sajátvektorokból számolható módusok közti átfedés kiértékelésével próbáltam meghatározni, hogy melyik kezdeti állapotban megtalálható módus aktiválódott. A sajátérték spektrum alsó tartománya látható egy konkrét esetben a 2. ábrán.

Az derült ki, hogy az esetek egy részében ez viszonylag egyértelmű, de vannak olyan esetek is amikor a jelenleg alkalmazott technikával ez lényegében nem megtehető. Ez tapasztalataim alapján tipikusan akkor fordul elő, amikor a módus aktiválódáshoz közel végzem el ezt a vizsgálatot. Ez jellemzően akkor történt így amikor a sajátérték spektrum hirtelen alakult át. A probléma itt az, hogy a közelítés amit alkalmazunk ahhoz, hogy a lineáris stabilitás analízist alkalmazhassuk ad megkötéseket. Jelenleg azt vizsgálom, hogy ezt tiszteletben tartva miképp tudom a jelenséget egyértelműsíteni, magyarázni. Amint ebben sikerül eredményt elérni, fogok tudni tovább haladni a kiértékeléssel.



2. ábra. Az ábrán a 00007 azonosítójú rendszer megterheléséhez tartozó sajátérték (EV) spektrum alsó tartománya látható a szimuláció idejének (t) függvényében. A lavinát okozó diszlokációk ahhoz a módushoz tartoznak, melynek a sajátértéke hirtelen lecsökken majd negatívvá válik. Az ábrán az eltolási invarianciához tartozó módus nem látható (vakancia mentes eset). A színskála azt jelöli, hogy az adott módushoz hány diszlokáció tartozik.

3. Publikációk

Az előző félévi beszámolóban említett három előkészítés alatt álló publikációból benyújtásra került a szimulációs módszerünkről szóló cikk „An efficient implicit time integration method for discrete dislocation dynamics” címmel az IOP Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering folyóiratába. A refereek kedvezően fogadták azonban néhány változtatást javasoltak. Ezek megtörténtek és jelenleg várjuk visszajelzésüket.

A további két publikáció továbbra is előkészítés alatt áll. A lavinaeseményekről, illetve azok korrelációról szóló cikk esetében továbbra is mérési adatok hiányoznak melyek miatt jelenleg a folyamat elakadt. A 2D diszlokáció-rendszerek lineáris stabilitás analízissel való vizsgálatával foglalkozó cikk esetében viszont olyan kérdések merültek fel, melyekre még, a korábbiakban ismertettek szerint, nem sikerült megfelelő választ nyújtani, ezért további munka szükséges.

4. Tanulmányi tevékenység

A félév során 1 kurzust végeztem el:

- Tömbi nanoszerkezetű anyagok (FIZ/1/040E)

5. Konferencia részvételek

- Dislocations 2019
 - Haifa, Izrael, 2019 szeptember 15. - szeptember 20.
 - Péterffy Gábor, Ispanovity Péter Dusan: An effective implicit method for discrete dislocation dynamics simulation, poszter
 - prezentáló: Péterffy Gábor
- Anyagtudomány Kiválósági Program Konferencia
 - Visegrád, 2020 január 20. - január 22.

6. Oktatási tevékenység

A félév során önálló oktatási tevékenységet nem végeztem, írásbeli számonkérések javításában viszont részt vettem.

7. Díjak

A félévben ÚNKP díjban részesültem, a pályázatom címe „A ponthibák szerepe a deformációs lavinák univerzalitásában”.

Hivatkozások

- [1] Denes Berta, Istvan Groma, and Peter Dusan Ispanovity. Efficient numerical method to handle boundary conditions in 2d elastic media, 2019.