

2. félévi beszámoló

Ódor Éva (odoreva94@gmail.com)

Anyagtudomány és szilárdtestfizika program

Témavezető: Dr. Ribárik Gábor

A dolgozat témája: Feszültség-deformáció, illetve vonalprofilok modellezése 3D-s periodikus mikroszerkezetek esetén FFT alapú módszerrel

Bevezetés

Kutatási célom különböző anyagok mikroszerkezetének vizsgálata a röntgen vonalprofil analízis módszerével, valamint a mikroszerkezet és a vonalprofilok modellezése numerikus módszerekkel. A numerikus modellezés keretében egy olyan szoftver fejlesztésén dolgozunk, melynek segítségével tetszőleges diszlokációszerkezet esetén a belső deformációkból kiindulva egy FFT alapú algoritmussal meghatározzuk a feszültséget és a deformációt a periodikus tér minden pontjában, valamint lehetőségünk van az intenzitáseloszlás háromdimenziós modellezésére, azaz rocking curve ill. vonalprofilok számolására is.

Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

Ebben a félévben elsősorban a fent említett szoftver fejlesztésén és tesztelésén dolgoztam. Munkám részét képezte, hogy reális mikroszerkezeteket (diszlokáció- és ponthibaeloszlásokat) leíró bemeneteket állítsak elő a program számára, majd az algoritmust ezekre alkalmazzam. A félév során több futtatást végeztem, különböző mikroszerkezetek és különböző szerkezetű anyagok esetén vizsgáltam a diszlokációhurok-méret, a diszlokáció- ill. ponthibasűrűség, a voxelméret és felbontás hatását a kapott vonalprofilokra. Ezen eredmények értelmezése, és az esetleges numerikus hibák azonosítása és kiszűrése jelenleg is folyamatban van. Az 1. ábrán példaképp látható egy kiindulási mikroszerkezet: alumínium (111) típusú síkjain elhelyezkedő random pozíciójú diszlokációhurokok, $0.5 \mu\text{m} \times 0.5 \mu\text{m} \times 0.5 \mu\text{m}$ ($512 \times 512 \times 512$ voxel) méretű térfogatban, valamint a hozzá tartozó (200) vonalprofil és (420) rocking curve.

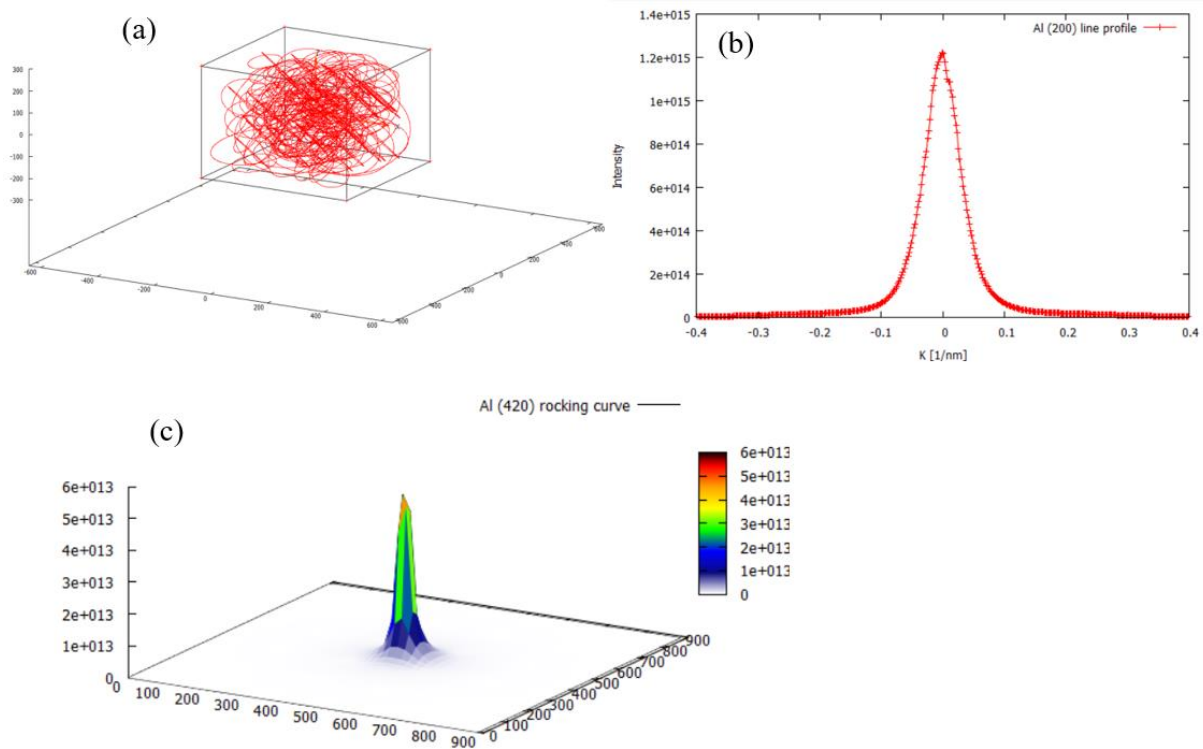
A félév során az FFT alapú módszer validálása céljából a modellezésből kapott 1D-s profilokat a vonalprofil analízis hagyományos módszereivel is kiértékeltek. Az összehasonlítások azt mutatják, hogy a módszer eredményei következetesek, és a következő megállapításokat tettük:

1) A módosított Williamson-Hall ábrák alapján a modellezett profilok kiszélesedése a kontraszt faktorokkal skálázódik, az anizotrópia állandó – Zener-konstans – növekedtével a profilok kiszélesedésének anizotrópiája nő.

2) A modellezett profilokat momentum módszerrel kiértékelve kapott diszlokációsűrűség több nagyságrenden át megfelel a beadott mikroszerkezet diszlokációsűrűségének.

Mindemellett a témához kapcsolódó irodalmi eredmények áttekintésével is foglalkoztam.

A félév során kísérleti munkám részét képezte vanádium minták hőmérsékleti stabilitásának vizsgálata, melynek részeként röntgendiffrakciós méréseket végeztem különbözőképpen hőkezelt mintákon.



1. ábra: (a) A modellezett mikroszerkezet: alumínium (111) típusú síkjain elhelyezkedő random pozíciójú diszlokációhurkok $0.5 \mu\text{m} \times 0.5 \mu\text{m} \times 0.5 \mu\text{m}$ ($512 \times 512 \times 512$ voxel) méretű térfogatban, (b) az eredményül kapott (200) vonalprofil és (c) (420) rocking curve.

Publikációk

Korábbi munkámból elkészült egy végleges kézirat, melynek beküldése folyamatban van a Nature Communications c. folyóirathoz:

Zhenbo Zhang, Éva Ódor, Diana Farkas, Bertalan Jóni, Gábor Ribárik, Géza Tichy, S. H.

Nandam, Yulia Ivanisenko, Michael Preuss, Tamás Ungár: Dislocations in grain boundaries

Ebben a félévben feladatomban volt vanádium minták hőmérsékleti stabilitásának vizsgálata röntgendiffrakciós vonalprofil analízissel. Ebből a kutatómunkából és az eredményeimből jelenleg előkészületben van egy publikáció, melynek várható címe: The Microstructure and Strength of a V-5Cr-5Ti Alloy Processed by High Pressure Torsion. A kézirat készítése jelenleg folyamatban van.

Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben

Tárgy kódja	Tárgy neve	Kredit
FIZ/1/025E	Rácshibák II. EA	6
FIZ/OKT/4	Oktatási tevékenység	4
FIZ/KUT-S2	Irányított kutatómunka	18

Konferenciák az aktuális félévben

Gábor Ribárik, Gyula Zilahi, Éva Ódor, Tamás Ungár: 3D Dislocation Structures in Experiment and Modeling

4th International Congress on 3D Materials Science (3DMS) 2018

Június 10–13, 2018, Helsingør, Dánia

Előadó: Dr. Ribárik Gábor

Werner Skrotzki, Aurimas Pukenas, Bertalan Jóni, Éva Ódor, Tamás Ungár, Anton Hohenwarter, Reihard Pippan, Easo George: Evolution of microstructure, texture and strength during severe plastic deformation of CrMnFeCoNi high-entropy alloy

2018 TMS Annual Meeting & Exhibition

Március 11-15, 2018, Phoenix, Arizona

Előadó: Prof. Dr. Werner Skrotzki

Werner Skrotzki, Aurimas Pukenas, Bertalan Jóni, Éva Ódor, Tamás Ungár, Anton Hohenwarter, Reinhard Pippan, Easo George: Microstructure, Texture and Strength Evolution during Severe Plastic Deformation of CrMnFeCoNi High-entropy Alloy

18th International Conference on the Strength of Materials (ICSMA 18)

Július 15-19, 2018, Columbus, Ohio, USA

Előadó: Prof. Dr. Werner Skrotzki

Oktatási tevékenység az aktuális félévben

Ebben a félévben klasszikus fizika laboratóriumot vezettem heti 4 órában.