

I. félévi beszámoló

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

Dolgozat témája: Dinamikai korrelációk diszlokációrendszerekben

1. Bevezetés

Az utóbbi néhány év kísérleti és szimulációs vizsgálatai eredményeképpen kiderült, hogy a mikronos és szubmikronos méretű kristályos anyagok deformációs tulajdonságai alapvetően eltérnek a tömbi anyagoknál megszokott viselkedéstől. Ebben a mérettartományban a plasztikus deformációt nagy tér- és időbeli fluktuációk (diszlokációlavinák) jellemzik. Ezen fluktuációk hatására a fém egykristályok hagyományosan sima feszültség- deformáció görbéjén véletlen lépcsők jelennek meg. Ezáltal a plaszticitás sztochasztikus jellege mérhető mennyiségekben, mint pl. a folyásfeszültség is tükröződik. Ezen felül ebben a mérettartományban erős méreteffektus figyelhető meg, azaz a kisebb minták átlagos értelemben egyre keményebbé válnak. A tervezett kutatási projekt fő célja ezen folyamatok részletekbe menő vizsgálata.

Mára teljesen elfogadottá vált a szakterületen az a feltételezés, hogy a külső feszültség hatására megnövekedő fluktuációk a rendszer önszerveződő kritikus viselkedésének megnyilvánulása. Ebben a képből a megfolyás jelensége egy másodrendű fázisátalakulásként jelenik meg. Mint kritikus rendszereknél általában, itt is rendkívüli jelentőséggel bír a megfelelő kritikus exponensek pontos meghatározása, más szóval a maradandó alakváltozás univerzalitási osztályának feltérképezése. Ezek a mennyiségek a plasztikus deformáció legalapvetőbb tulajdonságaival kapcsolatosak, ezért megismerésük technológiai szempontból is rendkívül fontos.

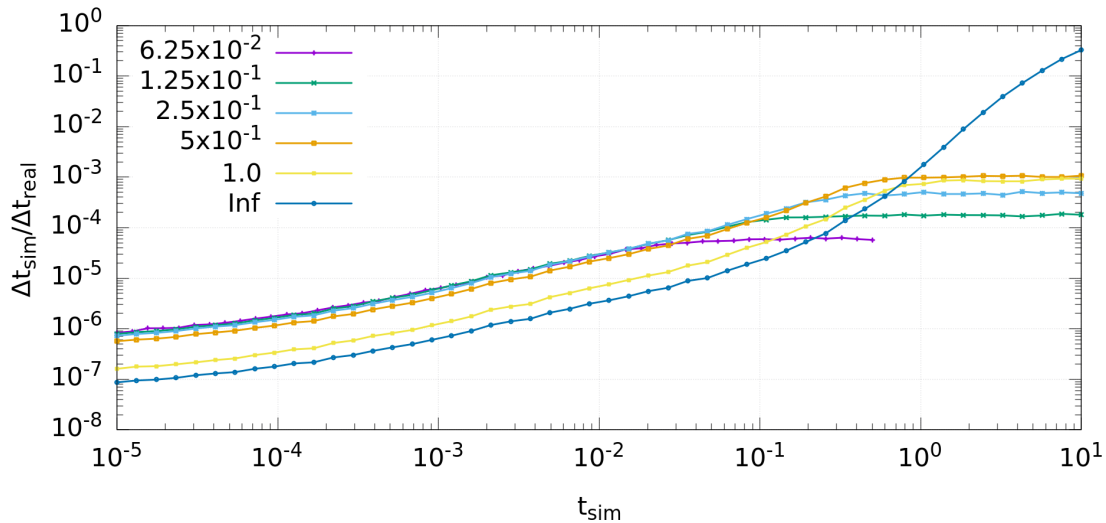
További fontos kérdés, hogy mi történik nem tiszta diszlokációrendszerekben, ahol jelen vannak pont hibák is (mint például vakanciák vagy pedig oldott atomok). Az utóbbi néhány évben ezt a területet is aktívan kutatták illetve kutatják annak gyakorlati jelentősége miatt mint például nukleáris reaktorok anyagának besugárzás hatására történő tulajdonságainak a megváltozása.

2. Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

A félév során alapvetően a korábbi tanulmányaim során készített implicit numerikus sémán alapuló hatékony két dimenziós diszkrét diszlokáció dinamikai szimulátorral dolgoztam, melyen kisebb módosításokat végeztem a különböző részvételem mellett zajló projektek által támasztott követelményeknek megfelelően, továbbá annak eredményeit dolgoztam fel. A félév során három projekten dolgoztam ezek rövid ismertetése alább található:

2.1. A szimulációs módszer profilozása

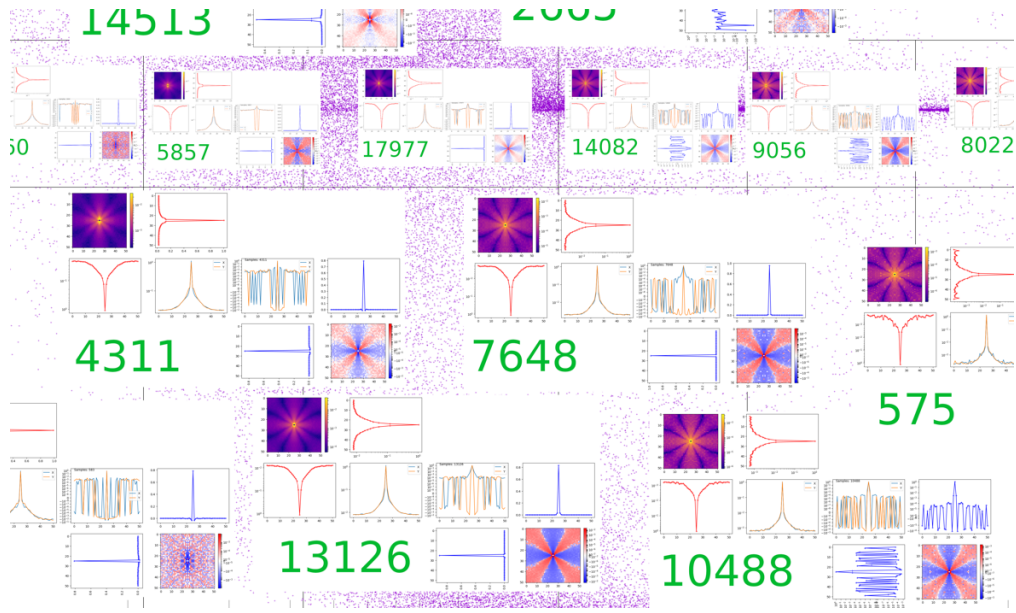
Mivel a kifejlesztett szimulátor elvi működése még nem került publikációra ezért a félév során elvégeztem a módszer optimalizációját illetve profilozását, hogy a módszer, illetve annak kiváló teljesítménye publikálhatóvá váljon. Az adatok kiértékelése közben több kérdés is felmerült melyet sikerült megválaszolni. A módszer lényege, hogy egy speciális levágófüggvény alkalmazásával elérhető, hogy a kialakuló, szimulációs előrehaladást, explicit módszerek esetében, akadályozó dipólusokat impliciten kezelje. Ezt egy r_c paraméter segítségével lehet hangolni. Különböző paraméter értékek esetén a szimulációs hatékonyság az 1. ábrán látszik. $r_c = 0$ lenne a tradicionális explicit módszer.



1. ábra. Az ábra azt mutatja, hogy a szimulációs idő (t_{sim}) függvényében hogyan változik az egységsimulációval eltöltött időre jutó szimulációs időben való előrehaladás ($\Delta t_{sim}/\Delta t_{real}$) különböző r_c értékek esetén.

2.2. Kétdimenziós diszlokációrendszerek lineáris stabilitás analízise

Ez a kutatás nemzetközi együttműködésben zajlik Peter M. Derlettel a svájci Paul Scherrer Institut kutatójával. A projekt során tiszta és szennyezett diszlokációrendszerek tulajdonságait térképezzük fel nyugalmi állapotban illetve, hogy miként változnak ezek a tulajdonságok külső terhelőfeszültség hatására illetve mi történik olyankor amikor lavina következik be. A módszer alkalmazásához szükséges szimulációkat én futtattam a korábban említett saját szimulátorommal. A rendszereket leíró dinamikai mátrixot, illetve annak sajátértékeit és sajátvektorait is előállítani képes kiértékelő programot is én készítettem. A félév során korrelációs térképeket készítettem különböző „participation number” -saját érték régiókra korábbi szimulációim alapján. Egy ilyen térképből látható egy kivágott részlet a 2. ábrán a szemléltetés kedvéért.



2. ábra. Egy korrelációs térkép részlete mely a „participation number” - saját érték eloszláson alapul. Ahogy az az ábrán látszik különböző tartományok kerültek meghatározásra ahol kiértékelésre kerültek különböző korrelációk illetve azok egyes vetületeiből számolt mennyiségek.

2.3. Különböző sebességű terhelés esetén kapott lavinaesemények tulajdonságai illetve korrelációi

A félév során bekapcsolódtam egy projektbe ahol mikropillár deformációval nyertek kísérleti eredményeket akusztikus jelek formájában különböző terhelési sebességek mellett. Ezt kellett modelleznem a szimulátorom segítségével melybe egy új, a valódi rugós terheléshez hasonló terhelési protokolt kellett beépítenem. Az eszközzel nyert szimulációk folyamatos kiértékelés alatt állnak jelenleg is. A következő félévben ez is folytatódik.

3. Publikációk

Három publikáció áll előkészület alatt ahol én is társzerző vagyok. Mindegyik projekt esetében egy. Ezek készütségi szintje sorrendben:

- A szimulációs módszer illetve annak hatékonysága: utolsó simítások, beküldés előtt
- Kétdimenziós diszlokációrendszerek lineáris stabilitás analízise: az eredmények körülbelül háromnegyede rendelkezésre áll, hogy a publikáció elkészülhessen
- Különböző terhelések mellett kapott lavinaesemények illetve azok korrelációi: az eredmények nagy része rendelkezésre áll a publikáció elkészültéhez

4. Tanulmányi tevékenység

A félév során 4 kurzust végeztem el:

- Diffrakciós módszerek az anyagtudományban I. (FIZ/1/038E)
- Analytical Electron Microscopy (FIZ/1/014E A)
- Rácshibák I. EA (FIZ/1/024)
- Fejezetek a modern égi mechanikából (spdynastef18em)

5. Konferencia részvételek

- Mafihe Exchange 2018
 - Aachen, 2018 október 4. - október 7.
 - Péterffy Gábor, Peter M. Derlet, Ispánovity Péter Dusán: Modelling the effect of irradiation on statistical properties of plastic deformation, előadó: Péterffy Gábor
- Anyagtudomány Kiválósági Program Konferencia
 - Visegrád, 2019 január 14. - január 16.
 - Péterffy Gábor, Ispánovity Péter Dusán: Diszlokációdinamikai szimulációk, előadó: Ispánovity Péter Dusán

6. Oktatási tevékenység

A félév során a heti 2 x 2 órás Mechanika gyakorlatot (mechbf17ga) tartottam a félév egyik felében ahol 35 hallgatóm volt.