

## Féléves beszámoló, 2017/18 I. félév (1. félév)

**Ódor Éva**

Fizika Doktori Iskola, Anyagtudomány és szilárdtestfizika program

Témavezetők: Dr. Ribárik Gábor, Dr. Ungár Tamás

### *Bevezetés*

Témavezetőim kutatócsoportjának több évtizedes távlatban fő tevékenysége a röntgen vonalprofil analízis, mely igen hatékony módszerek bizonyult különböző szerkezeti anyagok, fémek, ötvözetek, geológiai ásványok mikroszerkezetének jellemzésére. A felsorolt anyagok mindegyike esetén kulcsfontosságú az előállítási mód és annak konkrét paraméterei, valamint a mikroszerkezet és egyéb tulajdonságok közötti kapcsolat megértése. A kutatócsoport munkájához csatlakozva a BSc ill. MSc szakdolgozati munkám során jelentős tapasztalatot szereztem a röntgendiffrakciós vonalprofil mérésekben és az ún. Convolutional Multiple Whole Profile (CMWP) kiértékelési módszerben. A CMWP módszer a diszlokációk okozta vonalszélesedést az ún. Wilkens-moddal írja le, mely a valóságos diszlokációeloszlások legfontosabb elemeit tartalmazó, ámde egy leegyszerűsített analitikus modell. Ez a modell a gyakorlatban jó közelítéssel megadja a diszlokációsűrűséget és a diszlokációk elrendeződését jellemző paramétereket, a diszlokációk valós térbeli eloszlása azonban a modellhez képest jóval bonyolultabb lehet. Emiatt a kutatócsoport érdeklődése az utóbbi időben reális háromdimenziós mikroszerkezetek modellezésére irányult.

A Zr kis neutronbefogási hatáskeresztmetszete mellett jelentős mechanikai szilárdsággal, korrózió- és sugárállósággal rendelkezik, emiatt a Zr és ötvözetei a nukleáris energiatermelés pótolhatatlan és kulcsfontosságú szerkezeti anyagai. Széleskörű felhasználásuknak köszönhetően a tudományos érdeklődés is igen kiterjedt ezen anyagok viselkedése és tulajdonságai iránt. Különböző besugárzott Zr ötvözeteken végzett diffrakciós kísérletek során megfigyelték, hogy a besugárzás hatására a diffrakciós csúcsok aszimmetrikussá válnak, a csúcsok oldalán vállak alakulnak ki. Ezt a jelenséget okozhatja a besugárzás hatására az anyagban kialakuló diszlokációhurok szórása, mely hurok transzmissziós elektronmikroszkópos felvételeken is jól megfigyelhetők.

A fent ismertetett kutatásokba illeszkedve jelenlegi célunk a Zr mikroszerkezetének vizsgálata egyrészt kísérleti módszerekkel, másrészt a mikroszerkezet és a vonalprofilok modellezése numerikus módszerekkel. A numerikus modellezés eredményének valós mérési eredményekkel való összehasonlítása számos új információval szolgálhat a Zr mikroszerkezetének viselkedéséről.

### *Az aktuális félévben végzett kutatások ismertetése*

A félév során megismerkedtem különböző, elsősorban gyors Fourier-transzformáció (FFT) alapuló numerikus modellezési módszerek alapjaival, valamint bővítettem tudásom és fejlesztettem képességeim a modern C++ nyelven való programozás terén. Ezen ismeretek felhasználásával egy olyan szoftver fejlesztésében vettem részt, melynek segítségével háromdimenziós periodikus mikroszerkezeteket tudunk modellezni. A szoftver segítségével tetszőleges méretű és Burgers-vektorú, tetszőleges csúszosíkokon elhelyezkedő diszlokációhurokakat helyezünk el a térfogatban. Ezt követően a különböző modellezett hibaszerkezetek esetén a belső deformációkból kiindulva egy FFT alapú algoritmussal meghatározzuk a feszültséget és a deformációt a periodikus tér minden pontjában. Ennek

eredményeként lehetővé válik vonalprofilok modellezése is, ami a továbbiakban tervezett munkám része.

A numerikus modellezés mellett kísérleti munkát is végeztem. Ennek során különböző Zr mintákon végeztem röntgendiffrakciós méréseket, melyek alapján vonalprofil analízis segítségével meghatároztam az egyes minták mikroszerkezeti paramétereit. A későbbi terveim része besugárzott Zr röntgendiffrakciós vizsgálata, és a kísérleti eredmények modellezett vonalprofilokkal való közvetlen összehasonlítása, valamint a besugárzás hatására kialakuló diszlokációhurkok vonalprofilokban megjelenő hatásának vizsgálata. Ezekhez a későbbi vizsgálatokhoz az eddig elvégzett, nem besugárzott Zr mintákon történt mérési eredmények hasznos összehasonlítási alapot adnak, hiszen megmutatják az anyag kiindulási állapotát, és később a besugárzás hatására történő mikroszerkezeti változások azonosíthatók lesznek.

### *Publikációk*

Korábbi, a mesterképzés alatt végzett kutatómunkámból jelenleg készül egy publikáció, e félév során elkészült egy előzetes kézirat, melyet a közeljövőben a társszerzőkkel közösen véglegesítünk:

Zhenbo Zhang, S. H. Nandam, Éva Ódor, Gábor Ribárik, Diana Farkas, Géza Tichy, Bertalan Jóni, Yulia Ivanisenko, Tamás Ungár: Dislocations in nanocrystalline solids

### *Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben*

A félév során elvégzett ELTE-s kurzusok:

Tárgy kódja	Tárgy neve	Kredit
FIZ/1/014E	Analitikai elektronmikroszkópia EA	6
FIZ/1/038E	Diffrakciós módszerek az anyagtudományban I.	6
FIZ/1/040E	Tömbi nanoszerkezetű anyagok	6

Részt vettem továbbá a „Modern light sources and their applications” c. iskolán, mely 2017. december 7-9. között került megrendezésre Szegeden, az ELI-ALPS kutatóközpontban.

### *Konferenciák az aktuális félévben*

Korábbi kutatómunkámból született poszter 2017. szeptemberében került bemutatásra az „EUROMAT 2017” konferencián:

Prof. Dr. Werner Skrotzki, Aurimas Pukenas, Bertalan Jóni, Eva Odor, Prof. Dr. Tamas Ungar, Dr. Anton Hohenwarter, Prof. Dr. Reinhard Pippan, Prof. Dr. Easo George: Microstructure and texture evolution during severe plastic deformation of CrMnFeCoNi high-entropy alloy

European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes

17-22 September 2017, Thessaloniki, Greece

Előadó: Prof. Dr. Werner Skrotzki