

IV. 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 első három félévben elért kutatási eredmények

A doktori tanulmányaim kezdetén továbbfejlesztettem azt az új implicit sémán alapuló 2D diszkrét diszlokáció dinamikai szimulátoromat amit még a korábbi egyetemi tanulmányaim alatt kezdtem fejleszteni a szimulációs hatékonyság növelésére, mert a használható egyéb szimulátorok erősen limitáltak voltak az elérhető teljesítmény szempontjából a diszlokációk hosszútávú kölcsönhatása miatt. Ennek megoldására nem fizikai annihilációs távolságot voltak kénytelenek használni, amit el akartunk kerülni. Az általam fejlesztett szimulátorral nagyságrendekkel gyorsabban érhetőek el eredmények és nem szükséges a nem fizikai annihiláció sem, mindezt úgy, hogy az eredmények pontosabbak. Ebből született a már megjelent publikációm [1]. A szimulátort úgy készítettem el, hogy képes pontosabban figyelembevétele, továbbá alkalmas többféle terhelési protokoll alkalmazására is. A legtöbb kutatásomnak ez a szimulációs szoftver képezi az alapját.

A korábban már említett nem fizikai annihiláció hiánya lehetővé teszi a rendszer lineáris stabilitás analízisét. A módszer segítségével külső terhelés esetén még a lavina bekövetkezése előtt jelezhető, hogy lavina esemény következik és meghatározható, hogy a rendszer mely módusa aktiválódik és, hogy azok hol helyezkednek el a szimulációs cellában. Ezen felül a rendszer összes módusa meghatározható amelyből további információk vonhatóak le az egész rendszer viselkedésére, a megfigyelhető korrelációkra. Ez ügyben a kutatásaim mind a 4 félév alatt folytak. Az idei félév eredményeit röviden a következő fejezetben ismertetem. A kutatás nemzetközi együttműködésben zajlik Peter M. Derlettel (Paul Scherrer Institut, Svájc).

Az előzők mellett bekapcsolódtam Ugi Dávid doktoranduszhallgató társam projektjébe, ahol mikrooszlop összenyomási kísérletekből nyernek információt akusztikus emissziós módszer segítségével arról, hogy különböző terhelési ráták mellett az egyes lavinaesemények között milyen összefüggések vannak. Ezt a jelenséget én szimulációs megközelítéssel vizsgáltam. Implementáltam szimulátoromba a kísérleti alkalmazásnak megfelelő terhelési protokollt majd szimulációkat

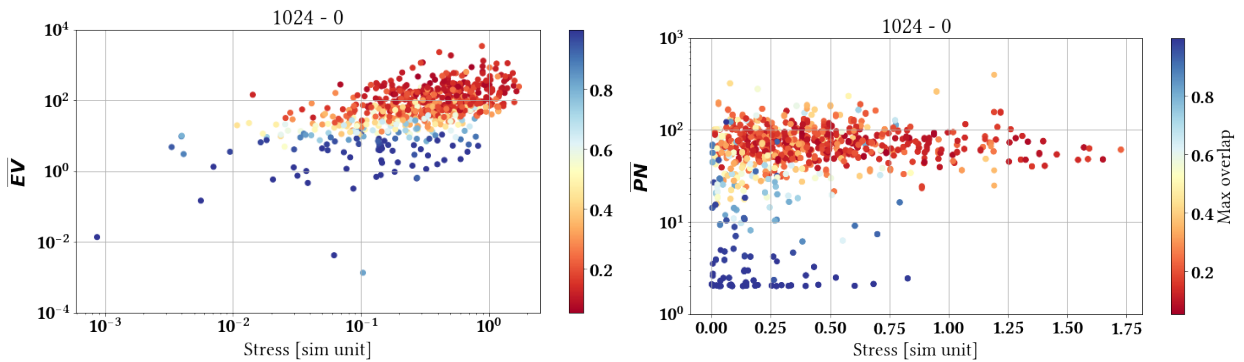
végeztem a kísérleti eredményekkel való összevetés céljára. Ezekből az eredményekből egy közös publikáció előkészítés alatt áll.

Berta Dénes kidolgozott egy *Spectral* nevű módszert határfeltételek figyelembe vételére [2]. Ennek szimulátoromba történő integrálása közös munkával megkezdődött. Pilot projekt jelleggel előzetesen beépítettem egy olyan funkciót, mely képes a szimulációs cella egyes részeit lokálisan izolálni ez által lehetővé téve a lokális folyásfeszültség vizsgálatot amíg a két módszer integrálása nem lesz sikeres.

3. Az aktuális félévben elért kutatási eredmények

A félév során alapvetően két projekten dolgoztam. Egyrészt folytattam a korábban már ismertett lineáris stabilitás analízissel foglalkozó projektet, ahol különböző rendszerméretű és szennyezési nagyságok mellett vizsgáltam a külső terhelés hatását.

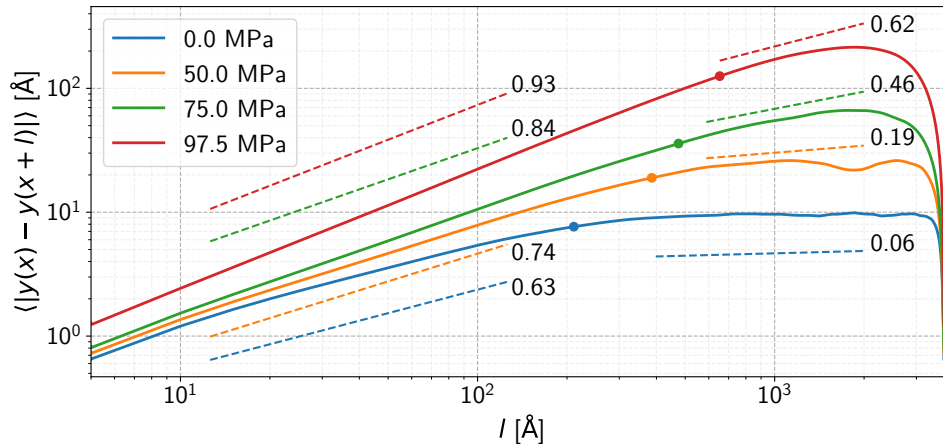
Vizsgáltam, hogy a szennyezők mennyisége milyen hatással van a külső kvázistatikus terhelés eredményeképp bekövetkező lavinák során felgyűlő deformációra, illetve, hogy a különböző rendszerméretű ezt miképp befolyásolják. Továbbá vizsgáltam azt is, hogy az aktiválódó módus milyen kapcsolatban áll az egyensúlyi rendszer saját-állapotaival. Erre bevezetésre került az úgynevezett „overlap” mutató, mely a két sajátállapot hasonlóságát fejezi ki és 0 és 1 közti értéket vehet fel. 1 jelentése az, hogy teljesen megfeleltethetőek egymásnak, még 0 esetében egyáltalán nem feleltethetőek meg az összehasonlított módusok. Az 1. ábrán egy példa látható arra, hogy milyen összefüggést vizsgáltam.



1. ábra. Az ábra azt mutatja több különböző, 1024 diszlokációt tartalmazó vakanciamentes rendszerre, hogy milyen feszültségen aktiválódik az első módus. A bal oldali ábra függőleges tengelyén az aktivált módus a terheletlen állapot módusaival számított „overlap” értékkel súlyozott átlagát mutatja a sajátértékeknek (\overline{EV}), míg a jobb oldalon ugyan ez látható, csak a sajátértékek helyett az egyes módusokat alkotó diszlokációk számának átlaga látható (\overline{PN}). A színskála azt jelzi, hogy mekkora volt a legnagyobb előforduló „overlap” érték.

Ezek mellett bekapcsolódtam egy nemzetközi együttműködésbe témavezetőm és Ryan B. Sills (Rutgers University, Egyesült Államok) vezetésével, ahol fcc ötvözet molekuladinamikai szimulációjából [3] kinyert diszlokációk fraktál tulajdonságait vizsgáltam a terhelőfeszültség és a hőmérséklet függvényében. Ebből már is publikáció születik, mely június elején kerül beküldésre. A kiértékelés során, meghatároztam a diszlokációvonalak fraktál dimenzióját a Hurst-módszerrel és

a Higuchi-módszerrel is. Ezek eredményeképp sikerült meghatároznom a korrelációs hosszát is a különböző rendszerek esetében. Ez összhangban van a statisztikus fizika sok területén megfigyelt úgynevezett „depinning” jelenségével. A Higuchi- és a Hurst- módszer összevetéséről látható az úgynevezett „roughness-plot” a 2. ábrán.



2. ábra. Az ábra az úgynevezett „roughness plot”-ot mutatja a Hurst-módszerrel kiértékelve. A görbe ábrán levő meredeksége megadja az úgynevezett Hurst-exponenst. A szaggatott vonalak illetve a szám a Higuchi-módszerből kinyert értéket mutatja összehasonlítási alapként. A négy különböző szín négy különböző külső terhelő feszültséget jelöl. A pont jelöli, hogy hol van a korrelációs hossz. A hőmérséklet a szimulációban 5 K volt.

4. Publikációk

Megjelent

- **An efficient implicit time integration method for discrete dislocation dynamics**
Gábor Péterffy, Péter Dusán Ispánovity - March 5, 2020
Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 28(3):035013
doi:10.1088/1361-651x/ab76b2

Elkészült, beküldés előtt

- **Length scales and scale-free dynamics of dislocations in dense solid solutions**
Gábor Péterffy, Ryan B. Sills, Michael E. Foster, Xiaowang W. Zhou and Péter D. Ispánovity
Materials Theory

Előkészület alatt

- Kétdimenziós diszlokációrendszerek lineáris stabilitás analízise
– A kiértékelés folyamatban.

- Lavinaesemények és azok korrelációi mikrooszlop összenyomási kísérleteknél és szimulációk során
 - Az én részem a szimulációs munka volt. Az eredmények rendelkezésre állnak.

5. Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben

- **Technology of Materials (intenzív kurzus) (FIZ/1/031E)**

6. Konferenciák a képzés alatt

- **Mafihe Exchange 2018 - Aachen, Németország, 2018 október 4-7.**
 - Péterffy Gábor, Peter M. Derlet, Ispánovity Péter Dusán: Modelling the effect of irradiation on statistical properties of plastic deformation
- **Anyagtudomány Kiválósági Program Konferencia - Visegrád, 2019 jan. 14-16.**
 - Péterffy Gábor, Ispánovity Péter Dusán: Diszlokációdinamikai szimulációk
- **Avalanche Dynamics and Precursors of Catastrophic Events - Les Houches, Franciaország, 2019 feb. 4-8.**
 - Péterffy Gábor, Ispánovity Péter Dusán: An effective implicit method for discrete dislocation dynamics simulations (poszter)
- **XXIV. Bolyai Konferencia - Budapest, 2019 ápr. 6-7.**
 - Péterffy Gábor: A besugárzás képlékeny alakváltozásra gyakorolt hatásának modellezése a mikronos mérettartományban
- **Dislocations 2019 - Haifa, Izrael, 2019 szept. 15-20.**
 - Péterffy Gábor, Ispánovity Péter Dusán: An effective implicit method for discrete dislocation dynamics simulation (poszter)
- **Anyagtudomány Kiválósági Program Konferencia - Visegrád, 2020 jan. 20-22.**
 - részvétel
- **The European Mechanics of Materials Conferences - EMMC17 - Madrid, Spanyolország, 2020 máj. 27-29.**
 - Elfogadott előadás, de a járvány miatt elmaradt: Péterffy Gábor, Peter Michael Derlet, Ispánovity Péter Dusán: Dynamical correlations and collective deformation modes in discrete dislocation simulations

7. Oktatási tevékenység a képzés alatt

- **Mechanika gyakorlat** (mechbf17ga) - heti 2×2 óra a félév felében - *2018/II. félév*
- **Tudományos modellezés számítógépes laboratórium** (dsscimodf17lm) - heti 4 óra
 - *2019/I. félév*
 - *2020/I. félév*

8. Ösztöndíjak a képzés során

- **Új Nemzeti Kiválósági Program 2019** - A ponthibák szerepe a deformációs lavinák univerzalitásában

Hivatkozások

- [1] Gábor Péterffy and Péter Dusán Ispánovity. An efficient implicit time integration method for discrete dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 28(3):035013, mar 2020.
- [2] Dénes Berta, István Groma, and Péter Dusán Ispánovity. Efficient numerical method to handle boundary conditions in 2d elastic media. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 28(3):035014, mar 2020.
- [3] Ryan B. Sills, Michael E. Foster, and Xiaowang W. Zhou. Line-length-dependent dislocation mobilities in an fcc stainless steel alloy. *International Journal of Plasticity*.