

NUMERICKÁ SIMULACE DISLOKAČNÍ DYNAMIKY

ING. PETR PAUŠ

Popis tématu

Dislokace jsou definovány jako poruchy nebo chyby v atomové struktuře materiálu a jejich přítomnost silně ovlivňuje mnohé z vlastností materiálů. Plastická deformace v krystalických pevných látkách se uskutečňuje skrze dislokace. Dislokace jsou čárové poruchy atomové mřížky. Pravidelné uspořádání atomů v mřížce je podél dislokační čáry porušeno. Dislokace může být reprezentována křivkou uzavřenou uvnitř krystalu nebo křivkou končící na povrchu krystalu. Při nízkých teplotách se dislokace může pohybovat pouze podél krystalografických rovin s nejvyšší hustotou atomů (skluzové roviny). Z matematického hlediska můžeme dislokaci popsat jako hladkou uzavřenou či otevřenou rovinnou křivku, která se pohybuje v čase. Jejich pohyb je vždy dvoudimenzionální, jelikož se pohybují ve skluzových rovinách. Teorie dislokací je podrobně rozebrána v dostupné literatuře, nyní je tedy třeba vytvořit vhodný matematický model.

Matematický model

Rovnice popisující pohyb dislokace v materiálu:

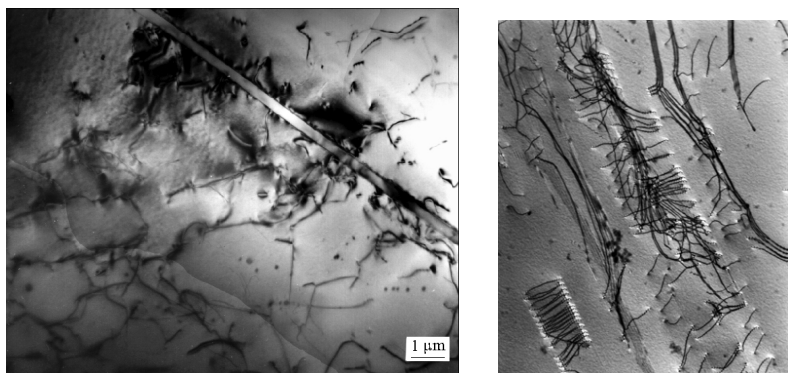
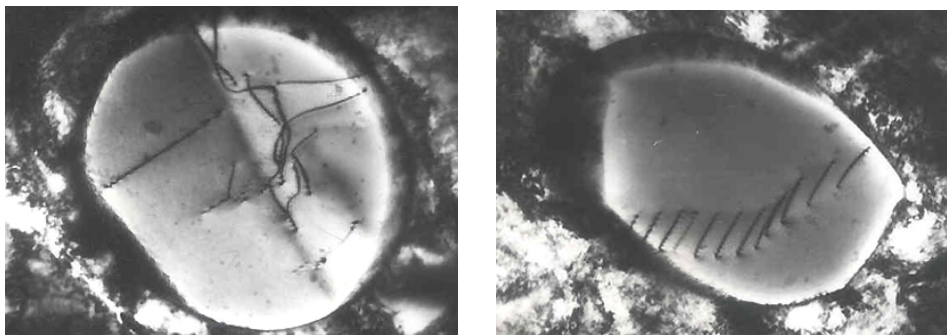
$$B\mathbf{v} = L\boldsymbol{\kappa} + \mathbf{b}\tau_{app}$$

Diferenciální rovnice:

$$B\partial_t \mathbf{X} = L \frac{\partial_{uu} \mathbf{X}}{|\partial_u \mathbf{X}|^2} + L\alpha \frac{\partial_u \mathbf{X}}{|\partial_u \mathbf{X}|} + \mathbf{b}\tau_{app} \frac{\partial_u \mathbf{X}^\perp}{|\partial_u \mathbf{X}|}$$

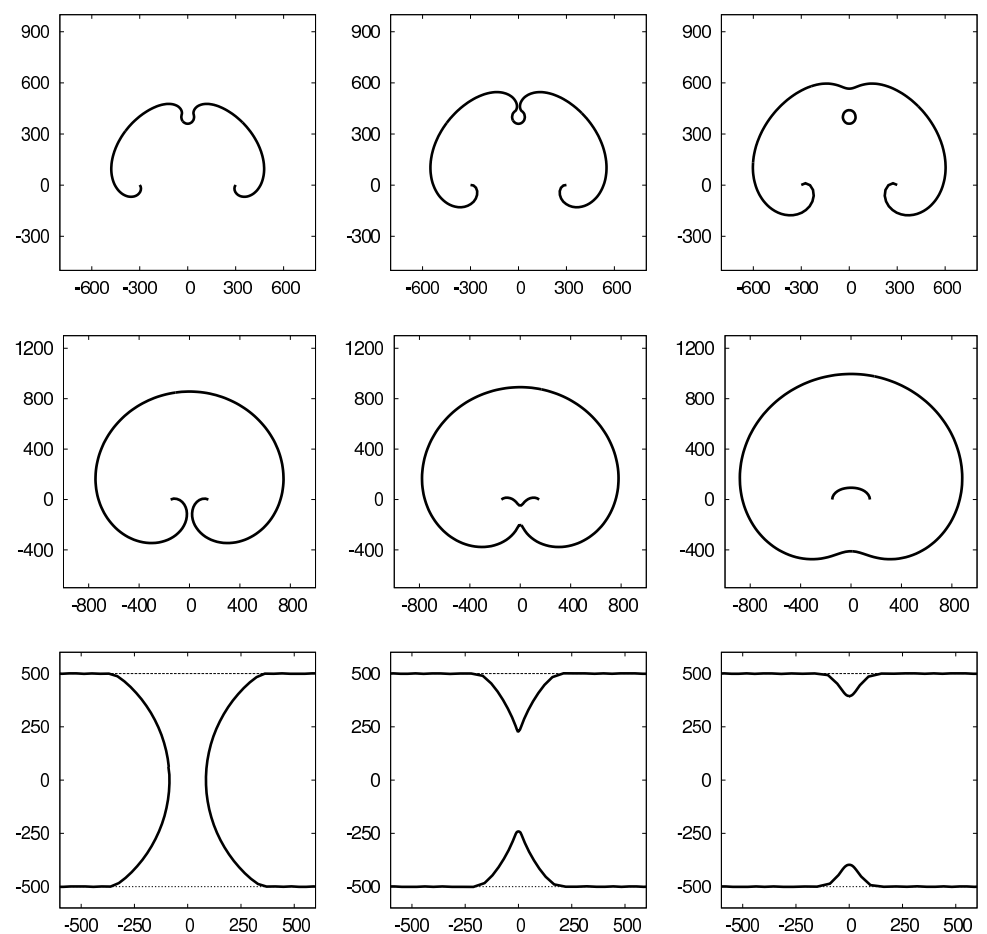
- ▶ B je součinitel odporu,
- ▶ $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ je normálová rychlost dislokace v $\mathbf{x} \in \Gamma$ v čase t ,
- ▶ $L\boldsymbol{\kappa}$ je vlastní síla vyjádřená jako aproximace čárového napětí (součin čárového napětí L a lokální křivosti $\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x}, t)$),
- ▶ τ_{app} je smykové napětí,
- ▶ $\mathbf{X}(u, t)$ je parametrizace křivky.

Dislokace v elektronovém mikroskopu



Zdroj: wikipedia.org, geol.ucsb.edu

Numerická řešení



Čím se budete zabývat

- ▶ Studium dynamiky křivek
- ▶ Sestavení matematicko-fyzikálního modelu
- ▶ Studium a implementace numerických metod
- ▶ Aplikace modelu na reálné případy v materiálu
- ▶ Propojení modelu pro jednotlivé dislokace se statistickým modelem
- ▶ Vývoj pokročilých počítačových kódů
 - ▶ paralelizace
 - ▶ výpočet na grafických kartách
- ▶ Spolupráce se zahraničím

Bc.
↓
Ing.
↓
Ph.D.

