

Témata pro studenty a doktorandy od A. Machové z ÚT AV ČR
tel: 266053023, e-mail: machova@it.cas.cz

Atomární simulace fyzikálních vlastností pevných látek metodou molekulární dynamiky

Atomární simulace metodou molekulární dynamiky umožňují studovat chování defektů v pevných látkách (dislokace, dvojčata, vrstevné chyby, mikrotrhliny atd.) a též kinetiku tvorby a růstu či šíření těchto defektů na nanoskopické úrovni. Mohou přinést i nové informace, které nejsou dosažitelné experimentálně, proto je jim věnována ve světě značná pozornost. Základem metody je numerické řešení Newtonovských pohybových rovnic pro jednotlivé atomy, které mezi sebou interagují prostřednictvím nelineárních sil, odvozených z věrohodných meziatomových potenciálů.

Podrobnější nabídka jednotlivých volitelných témat pro výběr :

- 1) Studium dvojčatění a křehnutí v monokrystalech bcc Fe
- 2) Studium vlivu geometrie vzorku na mikroskopické procesy u čela trhliny, porovnání s dvou-parametrickou lomovou mechanikou
- 3) Vliv rychlosti zatěžování resp. teploty na křehce-tvárné chování krystalů
- 4) Studium procesů na čele mikrotrhlin při cyklickém zatěžování, prahová a podprahová oblast únavy materiálů
- 5) Studium šíření akustických vln a charakteru zdrojů akustické emise v krystalech s kubickou symetrií