

XXXVI. OTDK FiFöMa szekció

Tételes szerzői hozzájárulás

Szerző neve: Bonifert Balázs

Dolgozat címe: Egyszeres csúszásra orientált anyagok vizsgálata 3D diszkrét diszlokációdinamikai szimulációkkal

Témavezetők neve: Berta Dénes és Ispánovity Péter Dusán

A Szerző által a tudományos célkitűzésében megfogalmazott kérdések leírása, a kapott eredmények rövid összefoglalása:

A kutatásom során a szakirodalom által széleskörűen tárgyalt 2 dimenziós diszkrét diszlokációdinamikai szimulációkat (2D DDD) hasonlítottam össze egy csúszási rendszerű 3D DDD szimulációim eredményeivel. Arra kerestem a választ, hogy a 2D-ben tett közelítésekkel látott alakzatok vajon megjelennek-e 3D-ben, és a valóságot jól leírja-e a sokkal egyszerűbben kezelhető modell. Ehhez egy csúszási síkkal rendelkező anyagban a diszlokációk relaxációját szimuláltam véletlenszerű kezdőkonfigurációból.

Azt tapasztaltam, hogy azonos topológiájú konfigurációk relaxációja méretfüggetlen a megfelelő dimenziótlan egységek tekintetében. Síkmetszetek segítségével a 3D-s szimuláció kimeneteit 2 dimenzióssá tudtam alakítani. A 2D-ben látott éldiszlokáció-dipólokat megfigyeltem 3D-ben, azonban ún. falakat nem láttam. Párkorrelációk segítségével kvantitatívan is bemutattam ezeket. Korrelációs integrál segítségével becslést adtam a dipólok arányára.

A megoldáshoz használt módszerek ismertetése, amit a Szerző saját maga végzett el, vagy hozott létre:

A szimulátorprogrammal egy csúszási rendszerű anyagban egy hurok kezdőfeltételű diszlokációrendszer szimulációját végeztem. Ezeknek a szimulációknak a kimeneteit elemeztem a lent felsorolt szempontok és módszerek szerint.

A Szerző által egyénileg elvégzett részfeladatok:

- Szimulátor kimeneteiből metszeti pontok, illetve síkmetszetek készítése
- Metszeti pontokból párkorrelációs ábrák előállítása
- Metszési szögekből hisztogram készítése
- A korrelációs integrálok kiszámítása, majd becslés kidolgozása a dipólok arányára
- GND sűrűség meghatározása