

# Modelování materiálů II

[WMQ/wmq]

Ústav materiálových věd a inženýrství VUT v Brně

ZS, 5. ročník magisterského studia

Dotace: 2 (WMQ) + 2 (wmq) h, 14 studentů

Hodnocení: zápočet, zkouška

Vyučující / Lektor: **Ing. Roman Gröger, Ph.D.**

Ústav fyziky materiálů AV ČR, Žitkova 22, 616 62 Brno

tel. 532 290 448, e-mail: [groger@ipm.cz](mailto:groger@ipm.cz)

Počítačové modelování materiálů je nezbytným nástrojem pro pochopení vztahu mezi mikrostrukturou a fyzikálními vlastnostmi materiálů. Atomární metody založené na empirických a semiempirických potenciálech dnes představují účinné a běžně používané nástroje pro počítačové simulace chování nanostruktur, jako např. nanotrubky, epitaxní vrstvy, grafen, studia radiačního poškození nebo pohybu dislokací pod napětím. Spinové metody řešené metodou Monte Carlo a kontinuální mezoskopické modely jsou hojně využívány pro studia uspořádávání tuhých roztoků, fázové přechody v multiferoikách a jejich ovlivnění defekty krystalické mřížky. Makroskopické studie metodou konečných prvků, do kterých jsou v poslední době implementovány výsledky atomárních a mezoskopických studií, představují stěžejní nástroj pro predikci makroskopického chování reálných struktur. V tomto kurzu získají studenti základní teoretické znalosti o metodách počítačového modelování materiálů od úrovně interagujících atomů až po jejich makroskopický kontinuální popis a způsobech vizualizace získaných dat. Důraz je kladen na získání praktických zkušeností s těmito přístupy, a to jak prostřednictvím cvičení (implementace, řešení a analýza modelových problémů), tak také v samostatných pracech studentů.

## Doporučená nebo povinná literatura:

M. P. Allen, D. J. Tildesley: Computer simulation of liquids. Clarendon Press (1987).

D. Frenkel, B. Smith: Understanding molecular simulation. Academic Press (2002).

J. P. Sethna: Statistical mechanics: Entropy, order parameters, and complexity. Oxford University Press (2006).

## Způsob a kritéria hodnocení:

V úvodu semestru získá každý student zadání samostatné práce, které se bude vztahovat k některé z probíraných metod. Výstupem každého zadání bude vytvoření, popř. modifikace existujícího simulačního programu, jeho využití pro řešení daného problému a písemná zpráva shrnující formulaci problému, průběh a hlavní výsledky těchto simulací. Předmětem zkoušky bude ústní obhajoba této práce.

## Vymezení kontrolované výuky a způsob jejího provádění a formy nahrazování zameškané výuky:

Cvičení jsou povinná a neúčast na cvičeních musí být omluvena. V případě neúčasti na cvičení student vypracuje ze cvičení protokol a prokáže vyučujícímu, že danou problematiku pochopil.

## **Přednášky:**

1. Modelování vztahů mezi mikrostrukturou a fyzikálními vlastnostmi, historie a současnost.
2. Rovnovážná statistická mechanika, spinové modely a jejich řešení metodou středového pole.
3. Fázový prostor, fázová trajektorie, ergodický teorém, entropie.
4. Numerické metody minimalizace funkcí  $N$  proměnných.
5. Krystalografie a symetrie v reálném a recipročním prostoru.
6. Molekulární statika, určení atomárních sil, energií a napětí v mnohočásticových soustavách.
7. Molekulární dynamika, stabilita numerické integrace pohybových rovnic, termostaty a barostaty.
8. Pokročilejší interakční potenciály a jejich fyzikální význam.
9. Mezoskopické modely založené na metodě fázového pole.
10. Metoda fázového pole krystalu.
11. Metody určení dráhy minimální energie soustavy.
12. Metoda konečných prvků, tvarové funkce a elasticita.
13. Moderní trendy v počítačových studiích materiálů.

## **Cvičení s počítačovou podporou:**

1. Studium Fermi-Pasta-Ulam problému.
2. Monte Carlo studie 1D-3D Isingova modelu a určení fázových diagramů.
3. Určení hustoty stavů 2D Isingova modelu pomocí Wang-Landauovy metody.
4. Implementace numerických metod pro minimalizace funkcí  $N$  proměnných.
5. Konstrukce libovolné Bravaisovy mřížky a úvod do vizualizací.
6. Základní stav krystalického argonu ve 2D a 3D s využitím Lennard-Jonesova potenciálu.
7. Krystalizace inertního plynu v Lennard-Jonesově potenciálu.
8. Určení energií bodových defektů a povrchů v fcc materiálu.
9. Studium dvojčatění ve feroelastických materiálech.
10. Vývoj mikrostruktury v modelu fázového pole krystalu.
11. Určení transformační dráhy modelové soustavy metodou Nudged Elastic Band.
12. Výpočet napjatosti a deformace elastické soustavy pomocí metody konečných prvků.
13. Konzultace k samostatným pracím.