



1. FPU problém s kubickou nelinearitou v pohybové rovnici

(modifikace programu fpu2.m)

Ve cvičení jsme studovali vliv nelinearity na numerické řešení pohybových rovnic. Konkrétně jsme se zabývali Fermi-Pasta-Ulamovým (FPU) problémem s kvadratickou nelinearitou, tj. kdy pohybová rovnice pro výchylky 1D oscilátoru má tento tvar:

$$\ddot{u} = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + \alpha [(u_{i+1} - u_i)^2 - (u_i - u_{i-1})^2], \quad (1)$$

kde α byl jediným parametrem. Cílem tohoto zadání je modifikovat shora uvedený program pro studium FPU problému s *kubickým* nelineárním členem, tj. kdy pohybová rovnice má tento tvar:

$$\ddot{u} = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + \beta [(u_{i+1} - u_i)^3 - (u_i - u_{i-1})^3]. \quad (2)$$

Řešte tuto rovnici numericky pro $\beta > 0$ (vaše volba) a sledujte, které módy vibrace jsou vybuzeny. Jaké jsou jednotky koeficientů α a β ? Jak se mění řešení rovnice s kvadratickou a kubickou nelinearitou pro numericky stejné hodnoty α a β ?



2. Partiční funkce 2D a 3D Isingova modelu na čtvercové (kubické) mřížce (teoretické odvození)

V přednášce jsme si ukázali odvození partiční funkce 1D Isingova modelu,

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j , \quad (1)$$

na řetízku spinů se stejnou vzdáleností sousedů. Získali jsme vztah

$$Z_1 = 2 \cosh^N \beta J [1 + \tanh^N \beta J] , \quad (2)$$

kde $\beta = 1/k_B T$, N počet spinů a J koeficient výměnné interakce. Cílem tohoto zadání je odvodit partiční funkce Z_2 a Z_3 2D a 3D Isingova modelu na čtvercové (kubické) mřížce za předpokladu, že každý spin interaguje pouze se svými nejbližšími sousedy. Všechny tři partiční funkce zapište jako jeden vztah, ve kterém bude vystupovat d (dimenze problému). Do jednoho obrázku vykreslete závislosti $\ln Z_d$ ($d = 1, 2, 3$) jako funkce $\beta J (= J/k_B T)$ pro $N = 1000$. Komentujte, jak se vzájemně liší (příp. neliší) a proč.



3. Fázový diagram 2D Isingova modelu na čtvercové mřížce s vlivem pole (modifikace programu ising2pd.m)

Ve cvičení jsme si ukázali, jak lze získat závislost magnetizace 2D Isingova modelu na teplotě. Cílem tohoto zadání je zmapovat fázový diagram 2D Isingova modelu v závislosti nejen na teplotě, ale také na síle magnetického pole. Pro zopakování, celková energie (Hamiltonián) feromagnetického Isingova modelu je

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (1)$$

kde $J > 0$ a druhý člen představuje část, kterou je třeba do programu dodělat. Zde $h > 0$ představuje energii vnějšího magnetického pole. Proved'te sérii simulací pro různé hodnoty h a pomocí modifikovaného programu nahoře zjistěte odpovídající T_c (uvažujte, že T_c odpovídá průměrné magnetizaci spinu $m = (1/N) \sum_{i=1}^N s_i = 0.5$). Jeden bod už máte (pro $h = 0$). Nakreslete graf h vs. T_c , zakreslete kritickou čáru a pojmenujte fáze ve dvou získaných oblastech.



4. Isingův model s interakcemi mezi prvními a druhými sousedy

(modifikace programu `ising2.m`)

Hamiltonián Isingova modelu s interakcemi mezi axiálními druhými sousedy (tzv. ANNNI *axial next nearest neighbor interactions* model) je definován jako

$$H = -J_1 \sum_{(i,j)} (s_{i,j}s_{i+1,j} + s_{i,j}s_{i,j+1}) - J_2 \sum_{(i,j)} s_{i,j}s_{i,j+2} , \quad (1)$$

kde $s_{i,j}$ je hodnota spinu na pozici i, j čtvercové mřížky, $J_1 > 0$ a $J_2 < 0$. Opět budeme předpokládat, že každý spin může nabývat pouze hodnot ± 1 . Za teploty 0 K bude potenciální energie minimální, pokud oba členy Hamiltoniánu budou současně záporné a maximální možné v absolutní hodnotě. K tomuto dojde, pokud spiny na sousedních atomech budou mít souhlasnou orientaci (první člen) a zároveň spiny na druhých sousedech “nad sebou” budou mít opačné orientace (druhý člen). Tyto podmínky se samozřejmě vylučují, což vede ke geometrické frustraci, která se promítne do rozložení spinů na studované mřížce. Vaším úkolem je studovat rozložení spinů v tomto modelu na mříži 128×128 za teplot $T = \{0, 0.5, 1\} J_1/k_B$ pro $\kappa \equiv -J_2/J_1 = 0.6$ podobně, jako jsme to udělali ve cvičení pro standardní 2D feromagnetický Isingův model.



Akademický rok 2018/2019

Jméno a příjmení:

Datum:

5. Numerická integrace funkce jedné proměnné generováním náhodných čísel (modifikace programu `rndpi.m`)

Modifikujte tento program tak, aby byl schopen numericky integrovat jakoukoliv funkci jedné proměnné $f(x)$ mezi předem známými hodnotami x_1 a x_2 a za předpokladu, že mezi těmito body nepřesáhnou funkční hodnoty předem dané meze f_{min} a f_{max} (vaše volba). Abyste ukázali, že tento program funguje, určete hodnotu integrálu

$$I = \int_{0.5}^3 \ln x \, dx \quad (1)$$

a srovnajte ji s analytickým řešením. Načrtněte závislost hodnoty I na počtu generovaných náhodných čísel (stačí pár bodů). Kolik náhodných čísel je třeba k určení I na čtyři desetinná místa?

6. Teplotně aktivovaná reorientace spinu magnetické nanočástice (implementace v Matlabu)

Jednodoménové magnetické nanočástice se skládají z atomů se souhlasně orientovanými magnetickými momenty. Pro studium magnetického chování se taková částice považuje za jednu nedělitelnou velkou částici s orientací spinu, který může být buď \uparrow nebo \downarrow . Nechť je celková energie takové částice dána vztahem

$$E = -A \sin^2 \theta - H \theta, \quad (1)$$

kde $A > 0$, θ je orientace spinu a H je magnetické pole. Pro nulové magnetické pole ($H = 0$) má tato funkce dvě ekvivalentní minima, kde $\theta = -\pi/2$ odpovídá spinu \downarrow a $\theta = +\pi/2$ spinu \uparrow . Jediné maximum odpovídá $\theta = 0$ (tj. spinu \rightarrow). V případě nenulového magnetického pole je pro překlopení spinu ze stavu \downarrow do stavu \uparrow (a zpět) potřeba překonat energetickou bariéru, která závisí na velikosti magnetického pole H , a také na směru překlopení! Nakreslete funkci nahoře pro $H = 0$ a $H/A = 0.3$ (pro jednoduchost uvažujte $A = 1$). Jak velká je energetická bariéra pro překlopení spinu ze stavu \uparrow do \downarrow ? Jaká je energetická bariéra pro překlopení spinu opačným směrem?

Časová změna pravděpodobnosti P^\uparrow , že má částice spin \uparrow , je určena tzv. Master rovnicí (Master equation):

$$\frac{dP^\uparrow}{dt} = (1 - P^\uparrow)\nu^{\downarrow\rightarrow} - P^\uparrow\nu^{\uparrow\downarrow}, \quad (2)$$

kde $\nu^{a\rightarrow b} = \nu_0 \exp(-\Delta E^{a\rightarrow b}/k_B T)$ je frekvence, se kterou dochází k překlopení spinu ze stavu a do stavu b (ty jsou buď \uparrow nebo \downarrow), t je čas a ν_0 je maximální frekvence přeskočení. Rovnice (2) už obsahuje podmínku, že spin může být pouze ve stavu \uparrow nebo \downarrow , takže $P^\uparrow + P^\downarrow = 1$. Napište program v Matlabu, který simuluje časový vývoj P^\uparrow pomocí diskretizované rovnice (2) pro dané hodnoty H/A a absolutní teplotu T . Po diskretizaci bude $\nu_0 \Delta t$ udávat "mobilitu", jak jsme se o ní bavili v přednáškách. Studujte časový vývoj P^\uparrow pro danou počáteční podmínku $P^\uparrow = 0.5$ (tj. 50% pravděpodobnost, že spin částice je \uparrow), $H/A = \{0, \pm 0.3\}$ a dvě teploty $k_B T = \{A, 3A\}$. Jedná se o 6 výpočtů, které ukončete vždy po stejném celkovém čase t_{max} . Komentujte vaše pozorování.



7. Algoritmus pro minimalizaci funkce N proměnných metodou FIRE (modifikace rychlostního Verletova algoritmu)

V roce 2006 publikovali E. Bitzek et al. ve Physical Review Letters zajímavou metodu minimalizace funkce N proměnných, která je pro některé úlohy podstatně lepší než např. metoda konjugovaných gradientů. Vaším úkolem je přečíst si tento článek (dodám v PDF, jen 4 strany) a napsat funkci v Matlabu, která implementuje tuto metodu.

Jedná se o následující kroky:

START:

Máme dány počáteční pozice (\mathbf{x}), rychlosti (\mathbf{v}) a funkci $E(\mathbf{x})$, kterou chceme minimalizovat. Toto může být kterákoliv z funkcí, o kterých jsme se bavili (Rosenbrock, Himmelblau) nebo energie soustavy interagujících částic (viz. molekulární statika/dynamika). Uvažujeme tyto doporučené parametry metody FIRE:

$$(N_{min}, f_{inc}, f_{dec}, \alpha_{start}, f_{\alpha}) = (5, 1.1, 0.5, 0.1, 0.99) . \quad (1)$$

Začneme v čase $t = 0$ s vámi zvoleným časovým krokem Δt . Uvažujeme $\alpha = \alpha_{start}$, $F_{tol} = 0.0001$ a zvolte si maximální krok Δt_{max} .

ALGORITMUS:

F0: Určete $\mathbf{F} = -\nabla E(\mathbf{x})$, což bude vektor se stejným počtem prvků jako \mathbf{x} . Pokud je $|\mathbf{F}| < F_{tol}$, našli jsme lokální minimum a algoritmus ukončíme. Pokud ne, pokračujeme dál...

F1: Určete projekci $P = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}$

F2: Nastavte rychlosti $\mathbf{v} := (1 - \alpha\mathbf{v}) + \alpha\hat{\mathbf{F}}|\mathbf{v}|$, kde $\hat{\mathbf{F}}$ je jednotkový vektor

F3: Pokud $P > 0$ a počet kroků od iterace, kdy P bylo naposledy záporné, je větší než N_{min} , zvětšete časový krok na $\Delta t := \min(\Delta t f_{inc}, \Delta t_{max})$ a nastavte $\alpha := \alpha f_{\alpha}$

F4: Pokud $P \leq 0$, zmenšete časový krok na $\Delta t := \Delta t f_{dec}$, vynulujte rychlosti ($\mathbf{v} = \mathbf{0}$) a nastavte $\alpha = \alpha_{start}$

F5: Upravte pozice $\mathbf{x} := \mathbf{x} + \mathbf{v}\Delta t + \mathbf{F}/(2m)(\Delta t)^2$

F6: Skok zpět na F0



Ústav materiálových věd a inženýrství
Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně
MODELOVÁNÍ MATERIÁLŮ II

Akademický rok 2018/2019

Jméno a příjmení:

Datum:

8. Konstrukce simulačního bloku A12 struktury α -Mn

(modifikace programu `mkxtal.m`)

Krystalová struktura α -Mn (A12) je jedna z nejkomplicovanějších struktur elementárních prvků v periodické tabulce. Najděte na internetu tuto strukturu, určete počet atomů na jednotkovou buňku a zkonstruujte simulační blok tohoto materiálu definováním translačních a básových vektorů. Implementujte tyto parametry do programu `mkxtal.m`. Zobraďte tuto strukturu v Matlabu, AtomEye, Jmol nebo Ovito pomocí několika charakteristických pohledů.



9. Simulace heteroepitaxe argonu na substrátu s trojúhelníkovou symetrií (molekulární statika v programu LAMMPS)

Ze studia Lennard-Jonesova potenciálu víte, že základní stav argonu ve 2D odpovídá trojúhelníkové mřížce, v níž každý atom má 6 nejbližších sousedů. Vaším úkolem je studovat rozhraní mezi filmem Ar a substrátem (jiným materiálem trojúhelníkové struktury), který má ale menší mřížkový parametr. Zkonstruuje blok atomů trojúhelníkové mřížky tak, aby nejbližší vzdálenost mezi atomy byla $0.8r_{eq}$ (r_{eq} je rovnovážná vzdálenost nejbližších sousedů ve skutečném Ar – znáte z přednášek). Velikost bloku v horizontálním směru bude min. 50 jednotkových buněk. V dolní části bloku bude vertikálně cca 5 jednotkových buněk, které budou představovat substrát a tyto atomy se tedy nebudou během relaxace pohybovat (příkaz `fix` s parametrem `setforce`). Ostatní atomy v horní části bloku (cca M jednotkových buněk) představují film a tyto se budou během relaxace pohybovat. Proveďte relaxaci této konfigurace pomocí molekulární statiky pro $M = \{5, 20\}$. Uvažujte periodické okrajové podmínky v rovině rozhraní a volné povrchy v kolmém směru. Zobrazte zrelaxovanou strukturu, kde barvy na atomech odpovídají jejich energiím. Pozorujete nějaký rozdíl ve struktuře rozhraní mezi filmem a substrátem pro malá a velká M ?



10. Simulace struktury bivakance v mědi

(použití programu LAMMPS)

Cílem tohoto zadání je určit rozložení atomů v okolí bivakance v mědi pomocí simulace v programu LAMMPS za teploty 0 K s využitím EAM potenciálu uloženého v souboru `Cu_mishin1.eam.alloy`. Simulační buňka bude tvořena $4 \times 4 \times 4$ jednotkovými FCC buňkami s periodickými okrajovými podmínkami ve všech směrech a počátečním mřížkovým parametrem $a = 3.5 \text{ Å}$. Nejdříve relaxujte tuto buňku za konstantního tlaku $p = 0$, tj. umožněte změnu tvaru a velikosti boxu (příkaz `fix` s parametrem `box/relax`). Jaká je velikost rovnovážného mřížkového parametru, celková energie bloku atomů a energie jednoho atomu? Poté odstraňte dva atomy pomocí příkazu `create_atoms` – uvažujte tři případy, kde tyto atomy tvoří:

- první nejbližší sousedy
- druhé nejbližší sousedy
- třetí nejbližší sousedy

Relaxujte takto modifikovanou simulační buňku za konstantního tlaku $p = 0$ a poznamenejte si celkovou energii bloku atomů. Zobrazte takto získané struktury a komentujte jejich charakter. Pro všechny tři případy nahoře určete formační energie těchto bivakancí.



11. Simulace struktury intersticiálu v mědi

(použití programu LAMMPS)

Cílem tohoto zadání je určit rozložení atomů v okolí intersticiálního atomu v mědi pomocí simulace v programu LAMMPS za teploty 0 K s využitím EAM potenciálu uloženého v souboru `Cu_mishin1.eam.alloy`. Simulační buňka bude tvořena $4 \times 4 \times 4$ jednotkovými FCC buňkami s periodickými okrajovými podmínkami ve všech směrech a počátečním mřížkovým parametrem $a = 3.5 \text{ \AA}$. Po vytvoření této simulační buňky vložte extra atom – uvažujte tři případy, kde tento extra atom je vložen:

- mezi první nejbližší sousedy
- mezi druhé nejbližší sousedy
- mezi třetí nejbližší sousedy

pomocí příkazu `create_atoms`. Relaxujte takto modifikovanou simulační buňku za konstantního tlaku $p = 0$, tj. umožněte změnu tvaru a velikosti boxu (příkaz `fix` s parametrem `box/relax`). Zobrazte takto získané struktury a komentujte rozložení atomů a energie na atomech v okolí intersticiálního atomu. Pro všechny tři případy nahoře určete formační energie těchto intersticiálů. Která je nejmenší? Odpovídá tato energie hodnotám určeným pomocí prvotních principů, které najdete v literatuře (na internetu)?



12. Simulace struktury bivakance v molybdenu

(použití programu LAMMPS)

Cílem tohoto zadání je určit rozložení atomů v okolí bivakance v molybdenu pomocí simulace v programu LAMMPS za teploty 0 K s využitím Finnis-Sinclairova potenciálu dle Acklanda a Thetforda uloženého v souboru `Mo.AT1.fs`. Simulační buňka bude tvořena $4 \times 4 \times 4$ jednotkovými BCC buňkami s periodickými okrajovými podmínkami ve všech směrech a počátečním mřížkovým parametrem $a = 3.0 \text{ Å}$. Nejdříve relaxujte tuto buňku za konstantního tlaku $p = 0$, tj. umožněte změnu tvaru a velikosti boxu (příkaz `fix` s parametrem `box/relax`). Jaká je velikost rovnovážného mřížkového parametru, celková energie bloku atomů a energie jednoho atomu? Poté odstraňte dva atomy pomocí příkazu `create_atoms` – uvažujte tři případy, kde tyto atomy tvoří:

- první nejbližší sousedy
- druhé nejbližší sousedy
- třetí nejbližší sousedy

Relaxujte takto modifikovanou simulační buňku za konstantního tlaku $p = 0$ a poznamenejte si celkovou energii bloku atomů. Zobrazte takto získané struktury a komentujte jejich charakter. Pro všechny tři případy nahoře určete formační energie těchto bivakancí.



13. Simulace struktury intersticiálu v molybdenu

(použití programu LAMMPS)

Cílem tohoto zadání je určit rozložení atomů v okolí intersticiálního atomu v molybdenu pomocí simulace v programu LAMMPS za teploty 0 K s využitím Finnis-Sinclairova potenciálu dle Acklanda a Thetforda uloženého v souboru `Mo.AT1.fs`. Simulační buňka bude tvořena $4 \times 4 \times 4$ jednotkovými BCC buňkami s periodickými okrajovými podmínkami ve všech směrech a počátečním mřížkovým parametrem $a = 3.0 \text{ Å}$. Po vytvoření této simulační buňky vložte extra atom – uvažujte tři případy, kde tento extra atom je vložen:

- mezi první nejbližší sousedy
- mezi druhé nejbližší sousedy
- mezi třetí nejbližší sousedy

pomocí příkazu `create_atoms`. Relaxujte takto modifikovanou simulační buňku za konstantního tlaku $p = 0$, tj. umožněte změnu tvaru a velikosti boxu (příkaz `fix` s parametrem `box/relax`). Zobrazte takto získané struktury a komentujte rozložení atomů a energie na atomech v okolí intersticiálního atomu. Pro všechny tři případy nahoře určete formační energie těchto intersticiálů. Která je nejmenší? Odpovídá tato energie hodnotám určeným pomocí prvotních principů, které najdete v literatuře (na internetu)?



Ústav materiálových věd a inženýrství
Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně
MODELOVÁNÍ MATERIÁLŮ II

Akademický rok 2018/2019

Jméno a příjmení:

Datum:

14. Struktura nanočástice Cu

(molekulární dynamika v programu LAMMPS)

Cílem tohoto zadání je určit rovnovážný tvar nanočástice Cu pomocí EAM potenciálu `Cu_mishin1.eam.alloy`. Konkrétně, napište skript pro LAMMPS, ve kterém vytvoříte kulovou nanočástici Cu s poloměrem $r = 10a$, kde $a = 3.615 \text{ \AA}$ je rovnovážný mřížkový parametr. Tato částice bude obsažena v periodickém boxu tak, aby atomy na povrchu částice neinteragovaly se svými periodickými obrazy. Tuto částici simulujte pomocí molekulární dynamiky v NpT statistickém souboru za dostatečně nízké teploty T a tlaku $p = 0$ tak, aby nedošlo k sublimaci částice, ale zároveň byla umožněna difúze atomů po povrchu. Jaký tvar částice zaujímá a proč? K zodpovězení druhé otázky najdete v literatuře energie povrchů Cu, příp. Wulffovu konstrukci, a korelujte vaše počítačové simulace s teoretickými predikcemi.



15. Celulární automat simulující skluz v granulárních materiálech

(modifikace programu `glife.m`)

Vaším cílem je modifikovat tento program tak, aby simuloval skluz zrn v granulárních materiálech anebo také skluz zeminy, pohyb laviny, apod. Tento celulární automat je postaven na následujícím jednoduchém algoritmu.

START:

Definujme 2D pole $f(x, y)$ tak, že f je všude nula, pouze $f(N/2, N/2) = \infty$, kde N je sudý počet buněk ve směru x a y . Místo nekonečna samozřejmě použijeme nějaké velké pozitivní celé číslo.

ALGORITMUS:

V každé iteraci procházíme postupně všechny buňky. Pokud $f(x, y) \geq 4$ tak:

$$\begin{aligned} f(x, y) &:= f(x, y) - 4 \\ f(x \pm 1, y) &:= f(x \pm 1, y) + 1 \\ f(x, y \pm 1) &:= f(x, y \pm 1) + 1 \end{aligned} \tag{1}$$

To znamená, že čtyři zrnka z pozice (x, y) sklouzla stejnoměrně na všechny sousední pozice ve směrech x a y .

Simulujte tento automat na mřížce 64×64 po dobu nejméně 1000 iterací. Po vykreslení příkazem `pcolor` použijte také `caxis([0 5])` a `colorbar`, aby byla vidět struktura kopečku písku. Jak by se algoritmus nahoře změnil, když bychom chtěli simulovat neizotropní skluz zeminy? Realizujte jednu simulaci s těmito modifikovanými pravidly a ukažte rozdíly oproti chování modelu nahoře.



16. Celulární automat pro simulaci epitaxe

(modifikace programu `glife.m`)

Cílem tohoto zadání je sestavit jednoduchý celulární automat pro simulaci epitaxe na již existujícím substrátu. V tomto zadání se nebudeme zabývat tím, jaké jsou mřížkové parametry filmu a substrátu, pouze velmi zjednodušenou kinetikou růstu. Začneme tak, že si vytvoříme 2D mřížku 512×64 buněk s periodickými okrajovými podmínkami ve směru x , ale volnými povrchy ve směru y . Všechny buňky budou zprvu obsahovat hodnotu 0. Ve spodní části bloku vytvoříme 3 vrstvy, které budou obsahovat substrát (změníme jejich hodnotu na 1). Hodnoty buněk budou: 0-neobsazeno, 1-substrát, 2-film.

Epitaxe filmu na povrchu tohoto substrátu bude probíhat pomocí následujících pravidel:

- Náhodně vybereme buňku v prostoru nad existujícím substrátem
- - Pokud tato buňka obsahuje hodnotu 1 nebo 2 a zároveň alespoň jedna ze sousedících buněk vpravo, vlevo nebo nahoře je volná, náhodně zvolíme jednu z těchto volných buněk a označíme ji hodnotou 2.
- - Pokud tato buňka obsahuje hodnotu 1 nebo 2, ale žádná ze sousedících buněk vpravo, vlevo ani nahoře není volná, pokračujeme.
- Opakujeme tento proces, dokud se film nedotkne horní stěny simulovaného bloku.

Nezapomeňte, že ve směru x je simulace periodická. Studujte epitaxní růst filmu na povrchu substrátu. Zobrazte několik jeho fází.



17. Morseův interakční potenciál

(viz. přednáška o Lennard-Jonesově potenciálu)

Morseův interakční potenciál je jedním z párových potenciálů, kde energie interakce mezi dvěma sousedícími atomy závisí pouze na jejich vzdálenosti. Je definován takto:

$$V(r) = D \left[1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right]^2, \quad (1)$$

kde D , β a r_0 umožňují parametrizovat tento potenciál pro konkrétní materiál. Morseův potenciál pro molekulu H_2 je popsán těmito parametry: $D = 4.75$ eV, $\beta = 1.93 \text{ \AA}^{-1}$, $r_0 = 7.41$ pm. Vysvětlete význam jednotlivých parametrů. Uvažujte stejnou cut-off funkci jako jsme použili v případě Lennard-Jonesova potenciálu. Určete hodnoty parametrů A a B v této cut-off funkci za předpokladu, že tato nahradí Morseův potenciál pro vzdálenosti atomů r mezi $2.5r_0$ a $3r_0$ (pro $r \geq 3r_0$ budeme atomární interakce ignorovat). Vykreslete tento potenciál vč. cut-off funkce v Matlabu.

18. Vliv vlastního přetvoření na mikrostrukturu feroelastického materiálu (modifikace programu `twinning.m`)

Při studiu metod fázového pole jsme si ukázali, že v případě Fe+30at.%Pd dochází ke strukturnímu fázovému přechodu 1. druhu z vysokoteplotní kubické fáze do nízkoteplotní tetragonální fáze. K tomuto fázovému přechodu dochází okolo 270 K. Cílem tohoto zadání je studovat vliv tzv. vlastního přetvoření na charakter mikrostruktury u tohoto materiálu (veškeré parametry máte). Předpokládejte, že volná energie tohoto materiálu je popsána funkcí

$$F = \int d\mathbf{x} [f_{nop} + f_{op} + f_{grad}] , \quad (1)$$

kde jednotlivé komponenty tohoto integrandu jsou definovány vztahy:

$$\begin{aligned} f_{nop} &= \frac{A_1}{2} e_1^2 + \frac{A_3}{2} e_3^2 \\ f_{op} &= \frac{A_2^0(T - T_c)}{2} (e_2 - e_2^0)^2 + \frac{B}{4} (e_2 - e_2^0)^4 + \frac{C}{6} (e_2 - e_2^0)^6 \\ f_{grad} &= \frac{K_2}{2} |\nabla e_2|^2 \end{aligned} \quad (2)$$

a e_2^0 je vlastní přetvoření. Toto pole se využívá např. pokud chceme do simulace vložit deformaci způsobenou defekty, kde by ale e_2^0 bylo proměnné (dá se určit z pole napětí okolo této dislokace). Nicméně, v tomto zadání je e_2^0 pro jedoduchost uvažováno jako homogenní. Vaším úkolem je implementovat e_2^0 do programu nahoře a realizovat tři simulace na bloku 128×128 – pro $e_2^0 = \{0, \pm 0.02\}$. Všechny simulace ukončete po stejném počtu iterací. Zajímá mě hlavně prostorové rozložení parametru uspořádání e_2 . Co by mohlo fyzikálně způsobit toto homogenní pole e_2^0 v našem případě?



19. Rozhraní mezi jednofázovým a dvoufázovým materiálem

(modifikace programu `twinning.m`)

Při studiu metod fázového pole jsme si ukázali, že v případě Fe+30at.%Pd dochází ke strukturnímu fázovému přechodu 1. druhu z vysokoteplotní kubické fáze do nízkoteplotní tetragonální fáze. K tomuto fázovému přechodu dochází okolo 270 K. Cílem tohoto zadání je modifikovat program `twinning.m` tak, aby bylo možné studovat fázový přechod v Fe+30at.%Pd za přítomnosti druhého materiálu, který ale nemá žádný fázový přechod. Jinými slovy se budeme zabývat rozložením parametru uspořádání v blízkosti rozhraní mezi jednofázovým a dvoufázovým materiálem, kde toto rovinné rozhraní dělí simulovanou oblast na dvě stejně velké oblasti. Oblast s jednofázovým materiálem bude popsána stejnými elastickými konstantami, jako Fe-Pd za 300 K (žádné členy vyšších řádů, tj. $B = C = 0$). Dvoufázový materiál bude popsán parametry Fe-Pd odpovídajícími teplotě, která je vstupem do výpočtu, včetně nenulových parametrů B a C . V obou materiálech bude použit gradientový člen se stejnou velikostí koeficientu (viz. program nahoře). Po modifikaci tohoto programu, aby obsahovala možnost studovat rozhraní mezi jednofázovým a dvoufázovým materiálem, minimalizujte volnou energii za teploty 0 K, 100 K a 300 K. Pro všechny tři případy komentujte získaná rozložení parametru uspořádání a rozložení napětí.



20. Dráha minimální energie pomocí metody Nudged Elastic Band

(modifikace programu `neb.m`)

Předpokládejte, že energie dvou hypotetických částic je popsána Styblinski-Tangovou funkcí

$$E(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 (x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i) , \quad (1)$$

kde x_1 a x_2 jsou pozice těchto dvou částic. Vaším úkolem je modifikovat program `neb.m` tak, aby ho bylo možné použít s funkcí nahoře. Otestujte, že funguje správně tím, že určíte dráhu minimální energie mezi body $(-3, -3)$ a $(3, 3)$. Nejprve si tuto funkci ale vykreslete v Matlabu nebo v jakémkoliv jiném programu (stačí pro x_1 a x_2 mezi ± 5).



Ústav materiálových věd a inženýrství
Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně
MODELOVÁNÍ MATERIÁLŮ II

Akademický rok 2018/2019

Jméno a příjmení:

Datum:

21. Relaxace hexagonální (wurtzite) struktury kovalentního GaN

(počítačová simulace v LAMMPSu)

Cílem tohoto zadání je sestavit skript pro LAMMPS, který určí celkovou energii a rovnovážné mřížkové parametry B4 (wurtzitové) struktury GaN. Jedná se o hexagonální strukturu se 4 atomy na jednotkovou buňku (2 atomy Ga, 2 atomy N). Popis této struktury najdete na: <https://homepage.univie.ac.at/michael.leitner/lattice/struk/b4.html>. K této simulaci použijte Tersoff-Brennerův potenciál GaN. `tersoff`. Relaxujte celý tvar buňky, jak jsme si ukázali pomocí příkazu `fix` s parametrem `box/relax` a `aniso` za nulového tlaku a určete energii na jeden pár atomů Ga-N a rovnovážné mřížkové parametry a a c . Zobrazte tuto strukturu v AtomEye nebo Ovito v několika pohledech a popište atomární typy. Jaké je vrstvení atomárních rovin $\{0001\}$?



Ústav materiálových věd a inženýrství
Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně
MODELOVÁNÍ MATERIÁLŮ II

Akademický rok 2018/2019

Jméno a příjmení:

Datum:

22. Zatěžování izotropního materiálu s trhlinou v módu I

(modifikace programu `fem2.m`)

Uvažujte 2D izotropní materiál (podmínka rovinné deformace) s trhlinou vycházející z povrchu kolmo na směr vnějšího normálového zatížení. Proved'te diskretizaci studované oblasti pomocí čtyřúhelníkových izoparametrických prvků (QUAD4). Při diskretizaci je nutné zjemnit dělení v okolí kořene trhliny. Na spodní stěně bude materiál vetknut bez možnosti posuvu v jakémkoliv směru. Na horní stěně aplikujte tahové vnější zatížení (směrem vzhůru) v několika krocích a sledujte, jak se materiál deformuje. Pro konfigurace získané pro dvě rozdílná vnější napětí určete rozložení von Misesova napětí a identifikujte nebezpečné místo.



Ústav materiálových věd a inženýrství
Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně
MODELOVÁNÍ MATERIÁLŮ II

Akademický rok 2018/2019

Jméno a příjmení:

Datum:

23. Zatěžování isotropního rámu tlakem na horní stěnu

(modifikace programu `fem2.m`)

Uvažujte rám ve tvaru obráceného U s ostrými rohy, který je zatížen na své horní stěně rozloženým spojitým tlakem libovolné velikosti směřujícím dolů. Proveďte diskretizaci studované oblasti pomocí čtyřúhelníkových izoparametrických prvků (QUAD4). Na spodní stěně bude materiál:

- vetknut bez možnosti posuvu v jakémkoliv směru
- podepřen proti posunutí ve vertikálním směru s možností posuvu v horizontálním směru

Na horní stěně aplikujte tlakové zatížení a sledujte, jak se materiál deformuje v obou těchto případech. Pro stejná aplikovaná napětí srovnajte pro dvě uložení rámu (viz. nahoře): deformaci rámu, velikost maximálního von Misesova napětí a určete nebezpečné místo.



24. Extrémy a stabilita parametrů uspořádání pro fázový přechod 1. druhu (viz. přednáška o metodách fázového pole)

Fázové přechody lze velmi dobře studovat metodami fázového pole. Hlavními kroky jsou: (i) identifikace parametru uspořádání, a (ii) formulace volné energie jako funkcionálu tohoto parametru uspořádání, přičemž volná energie musí být invariantní vzhledem ke všem operacím symetrie fáze s vyšší symetrií. Označme tento parametr uspořádání jako $\eta(\mathbf{x})$, což je skalární funkce, která závisí na pozici \mathbf{x} na mříži diskretizující studovaný prostor. V případě fázového přechodu 1. druhu má lokální část funkcionálu volné energie tvar

$$F[\eta] = \int d\mathbf{x} \left(\frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} \eta^4 + \frac{\gamma}{6} \eta^6 \right), \quad (1)$$

kde $\alpha = \alpha_0(T - T_c)$ a $\alpha_0 > 0$, $\beta < 0$, $\gamma > 0$. Odvoďte vztahy pro extrémy volné energie, tj. extrémy jejího integrandu $f(\eta)$, a určete pro jaké ΔT se jedná o minimum a maximum. Vysvětlete tvar závislosti $f(\eta)$, kterou jsme si ukázali pro fázový přechod 1. druhu v přednášce. V čem se tato závislost liší od té pro fázový přechod 2. druhu (tj. když $\beta > 0$ a $\gamma = 0$)?



Ústav materiálových věd a inženýrství
Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně
MODELOVÁNÍ MATERIÁLŮ II

Akademický rok 2018/2019

Jméno a příjmení:

Datum:

25. Fázový diagram Swift-Hohenbergova modelu

(modifikace programu `sh.m`)

Cílem této práce je určit fázový diagram Swift-Hohenbergova modelu pro různé hodnoty parametrů q_0 a α za předpokladu, že $\epsilon = 0.1$. Konkrétně, realizujte sérii simulací pomocí programu nahoře pro různé hodnoty q_0 a α a pro každou kombinaci určete numericky rovnovážné pole $\psi(\mathbf{x})$. Identifikujte pozice kritických čar (křivek?) které oddělují domény odlišných fází. Pro každou doménu zobrazte a pojmenujte charakteristickou fázi.



Akademický rok 2018/2019

Jméno a příjmení:

Datum:

26. Mapování fázového diagramu PFC modelu

(použití programu `pfc.m`)

Ve fázovém modelu krystalu (PFC = phase field crystal) je zachován integrál parametru uspořádání (ψ) přes studovaný prostor, kde ψ lze jednoduše převést na hustotu hmoty (ρ). Tento model závisí na parametrech ϵ , q_0 a ψ_0 , jejichž význam jsme si vysvětlili v přednášce. Vaším úkolem je zmapovat fázový diagram tohoto modelu změnou parametrů ϵ a ψ_0 , přičemž q_0 a všechny ostatní parametry nechte nastavené na hodnoty, které jsme použili ve cvičení. Výsledkem vašeho snažení bude diagram ϵ vs. ψ_0 , ve kterém identifikujete (zhruba) pozice kritických křivek. Ke každé oblasti přidělíte obrázek a pojmenujete získanou mikrostrukturu.

27. Simulace uspořádávání hranových dislokací ve 2D izotropním materiálu (nový program v Matlabu)

Cílem tohoto zadání je napsat v Matlabu jednoduchý program pro studium uspořádávání hranových dislokací v izotropním materiálu, přičemž všechny dislokace se pohybují po paralelních skluzových rovinách rovnoběžných s osou x . Mějme dán počet dislokací N^+ s Burgersovými vektory ve směru $+x$ a N^- dislokací s Burgersovými vektory ve směru $-x$. Pro jednoduchost uvažujme, že $b = 1$ a $\mu = 1$ (modul pružnosti ve smyku) v odpovídajících jednotkách. Na začátku zvolíme pozice všech dislokací náhodně, ale tak, aby vzdálenosti skluzových rovin ve směru y byly 1. Pro každou dislokaci pak určíme Peach-Koehlerovu sílu, která na ni působí díky ostatním dislokacím, za předpokladu, že máme periodické okrajové podmínky v x i y směrech (pro výpočet sil stačí uvažovat nejbližší periodické buňky v obou směrech). Pozice každé dislokace pak bude upravena podle:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \gamma \Delta t F_x(t), \quad (1)$$

kde F_x je x -tá komponenta Peach-Koehlerovy síly působící na dislokaci a t je simulační čas, který běží od nuly. Studujte uspořádávání dislokací pro dvě rozdílné počáteční podmínky:

- $N^+ = N$ a $N^- = 0$, tj. máme pouze kladné dislokace
- $N^+ = N^- = N$, tj. máme stejný počet kladných a záporných dislokací

V obou případech zobrazte počáteční pozice dislokací (pozitivní a negativní dislokace odlište barevně nebo rozdílnými symboly) a jejich pozice po nějakém větším počtu iterací (v závislosti na zvoleném počtu dislokací). Komentujte, co pozorujete a proč, podle toho, co víte ze 4. ročníku. Pro jednoduchost zanedbejte anihilace dislokací.



28. Simulace uspořádávání šroubových dislokací ve 2D izotropním materiálu (nový program v Matlabu)

Cílem tohoto zadání je napsat v Matlabu jednoduchý program pro studium uspořádávání šroubových dislokací v izotropním materiálu, přičemž všechny dislokace se pohybují po paralelních skluzových rovinách rovnoběžných s osou x . Mějme dán počet dislokací N^+ s Burgersovými vektory ve směru $+z$ a N^- dislokací s Burgersovými vektory ve směru $-z$. Pro jednoduchost uvažujme, že $b = 1$ a $\mu = 1$ (modul pružnosti ve smyku) v odpovídajících jednotkách. Na začátku zvolíme pozice všech dislokací náhodně, ale tak, aby vzdálenosti skluzových rovin ve směru y byly 1. Pro každou dislokaci pak určíme Peach-Koehlerovu sílu, která na ni působí díky ostatním dislokacím, za předpokladu, že máme periodické okrajové podmínky v x i y směrech (pro výpočet sil stačí uvažovat nejbližší periodické buňky v obou směrech). Pozice každé dislokace pak bude upravena podle:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \gamma \Delta t F_x(t), \quad (1)$$

kde F_x je x -tá komponenta Peach-Koehlerovy síly působící na dislokaci a t je simulační čas, který běží od nuly. Studujte uspořádávání dislokací pro dvě rozdílné počáteční podmínky:

- $N^+ = N$ a $N^- = 0$, tj. máme pouze kladné dislokace
- $N^+ = N^- = N$, tj. máme stejný počet kladných a záporných dislokací

V obou případech zobrazte počáteční pozice dislokací (pozitivní a negativní dislokace odlište barevně nebo rozdílnými symboly) a jejich pozice po nějakém větším počtu iterací (v závislosti na zvoleném počtu dislokací). Komentujte, co pozorujete a proč, podle toho, co víte ze 4. ročníku. Pro jednoduchost zanedbejte anihilace dislokací.



29. Studium synchronizace vázaných oscilátorů v Kuramotově modelu (nový program v Matlabu)

Kuramotův model je jedním z nejjednodušších modelů, které umožňují studovat spontánní synchronizaci v nelineárních systémech. Uvažujte N oscilátorů, jejichž pozice jsou dány úhly θ_i ($i = 1, \dots, N$) na jednotkové kružnici. Časový vývoj $\theta_i(t)$ je popsán rovnicí

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i), \quad (1)$$

kde ω_i je vlastní úhlová frekvence oscilátoru i a K je interakční koeficient. Vaším úkolem je napsat program v Matlabu, který umožní studovat, jak se pozice všech oscilátorů (θ_i) mění v čase pro libovolné N , K , ω_i a počáteční pozice θ_i .

Tento program využijte ke studiu chování systému $N = 10$ oscilátorů během 500 iterací s $\Delta t = 0.05$. V čase $t = 0$ uvažujeme, že pozice oscilátorů (θ_i) jsou určeny náhodně pomocí funkce `rand` v rozsahu 0 až 2π , a že jejich vlastní úhlové frekvence (ω_i) jsou také dány náhodně v rozsahu 0 až 0.5 rad/s. Vypočtete numericky pozice všech oscilátorů mezi $t \in \langle 0, 500\Delta t \rangle$ pro $K = 0$, $K = 0.3$ a $K = 0.5$ a zobrazte je graficky. Pro vizualizace můžete použít funkci `plot`, ale lepší je `polar` (viz. manuál Matlabu). Jak se oscilátory chovají s rostoucím počtem iterací? Vysvětlete také význam parametru K na chování systému. Pusťte si program několikrát pro stejné K .