

Počítačové simulace pevných látek

Radim Novák

Abstrakt

V této práci se zabývám určováním vlastností monokrystalu mědi pomocí počítačové simulace. Tato simulace byla prováděna na úrovni molekulové dynamiky pomocí softwaru LAMMPS. Tou jsem simuloval měření metodou nanoindentace a vygenerovaná data následně zpracoval. Pro vizualizaci simulace jsem používal software OVITO.

1 Úvod

V dnešní době lidé neustále vymýšlí nějaké nové a lepší produkty. Na to je ovšem často potřeba nějaký vhodný materiál. Například rámy kol by měly být co nejlehčí, ale zároveň co nejpevnější. Při vývoji takových materiálů se velmi uplatňují počítačové simulace, kterými jsme schopni vlastnosti materiálů předpovídat a tedy nemusíme zkoušet metodou pokus omyl.

V této práci se snažíme předpovědět redukovaný Youngův modul pružnosti pro měď. K tomu vytvoříme simulaci indentační metody a vyhodnotíme data.

2 Teorie

Indentace je standartní metoda zjišťování tvrdosti materiálu, nebo i například modulu pružnosti. Spočívá ve tlačení hrotu - indentátoru do materiálu a měření síly působící na hrot. V našem případě jsme simulovali nanoindentaci, tedy jsme se celou dobu pohybovali ve velmi malých škálách. K výpočtu Youngova modulu pevnosti je třeba znát tuhost. Tu lze spočítat jako:

$$S = \frac{dP}{dh} \quad (1)$$

Kde P značí sílu působící na indentátor a h značí hloubku vrypu do materiálu. Derivace je vztatá v bodě těsně poté co začneme indentátor odsunovat od krystalu. Redukovaný Youngův modul pružnosti pak spočteme takto:

$$E_r = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{S}{\sqrt{A}} \quad (2)$$

Kde A značí plochu kontaktu mezi indentátorem a materiálem.

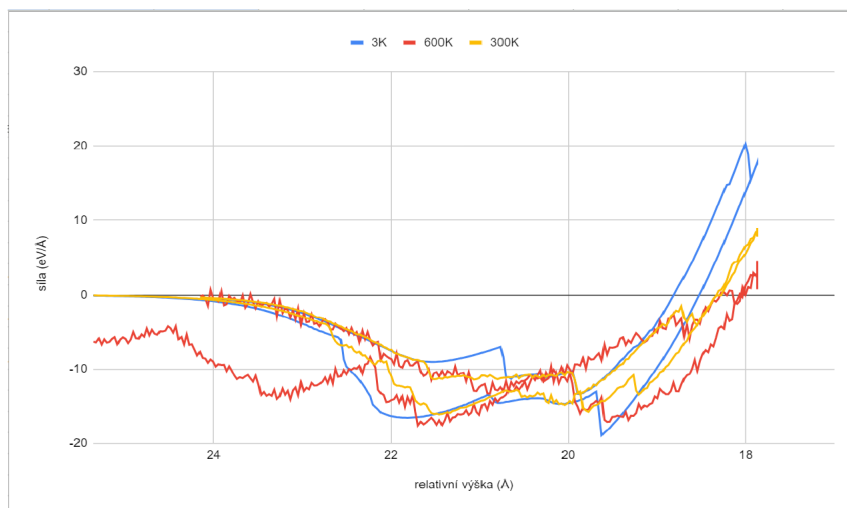
3 Simulace

Simulovali jsme pomocí softwaru Lammmps, což je zdarma dostupný software na internetu a velmi často používaný. Lammmps se užívá na simulace molekulární dynamiky s použitím klasických zákonů fyziky.

V naší simulaci jsme nejdříve vytvořili krystal mědi s krystalovou mřížkou FCC, ten jsme nechali ustálit do rovnovážného stavu. Poté jsme k němu přidali část sféry uhlíku uspořádaném v mřížce diamantu - náš indenter. Následně jsme začali posouvat indenter do krystalu a zaznamenávali jsme sílu, která působila na špičku indenteru a po chvíli jsme ho začali vytahovat.

Simulaci jsme opakovali pro různé počáteční teploty mědi. Konkrétně pro $3K$, $300K$, $600K$. Indenter jsme sunuli rychlostí přibližně $30 m/s$ nebo $1 m/s$. To protože Lammmps dělá velmi malé časové kroky, tedy čím nižší rychlost, tím náročnější a delší výpočet. Nakonec se ovšem ukázalo, že síly při vytahování se skoro nemění se změnou rychlosti z $30 m/s$ na $1 m/s$.

4 Výsledky simulace



Obrázek 1: Graf závislosti síly na Z-tové souřadnici. Horní vrstva krystalu je kolem 20 Å.

Na obrázku 1 můžeme vidět nasimulované průběhy sil působících na hrot indentoru. Spočtené hodnoty redukovaného Youngova modulu jsou v tabulce 1.

	3K	300K	600k
E_r [GPa]	236	161	152

Tabulka 1: Vypočtené hodnoty E_r

5 Diskuze výsledků

Z porovnání s výsledky ze článku [1], můžeme usoudit, že simulace proběhla dobře a dává relativně dobré výsledky. Hodnoty E_r jsou vyšší než bychom ve skutečnosti čekali. To může být tím že jsme uvažovali dokonalý krystal bez poruch. Také měď reaguje velmi dobře tedy povrch krystalu by v reálném případě byl pravděpodobně znečištěn. Čistý kov se také vyznačuje velikou přilnavostí a proto vidíme velkou zápornou sílu působící na hrot.

6 Závěr

V této práci jsme nasimulovali nanoindentaci monokrystalu mědi. Tu jsme následně vyhodnotili a porovnali s referenčními daty. Z toho se ukázalo že naše simulace byla docela přesná co se týká určení redukovaného modulu pružnosti.

7 Poděkování

Chtěl bych tímto poděkovat mému garantovi panu Janu Drahokoupilovi a panu Miroslavu Lebedovi.

8 Reference

[1] Sahputra, I.H. Temperature and indenter radius effects on mechanical properties of copper during nanoindentation: a molecular dynamic simulation study. *Eur. Phys. J. B* 94, 237 (2021). <https://doi.org/10.1140/epjb/s1005021-00253-1>