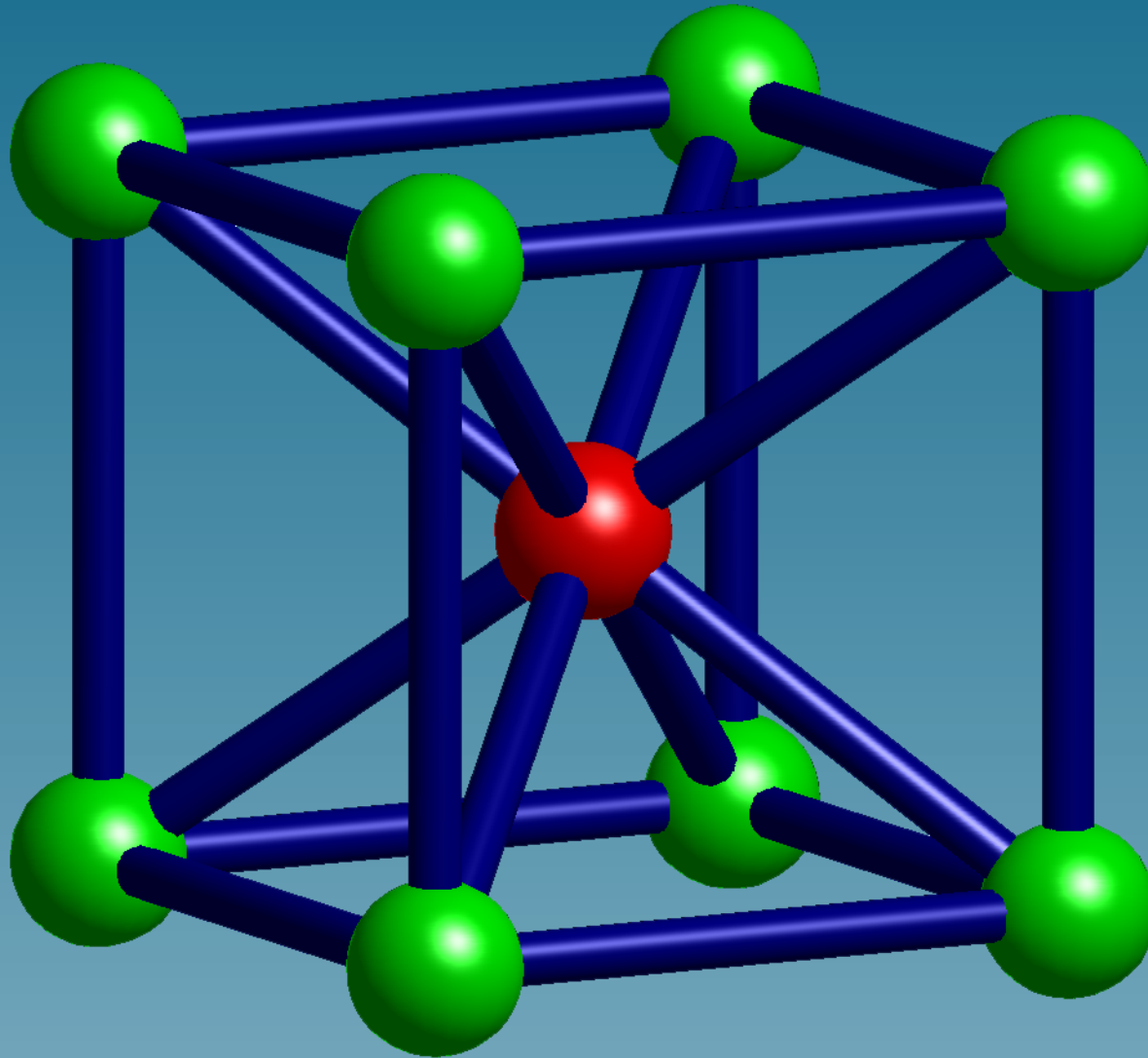


SIMULACE NA ROZSÁHLÝCH MODELECH V ÚLOHÁCH MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKY

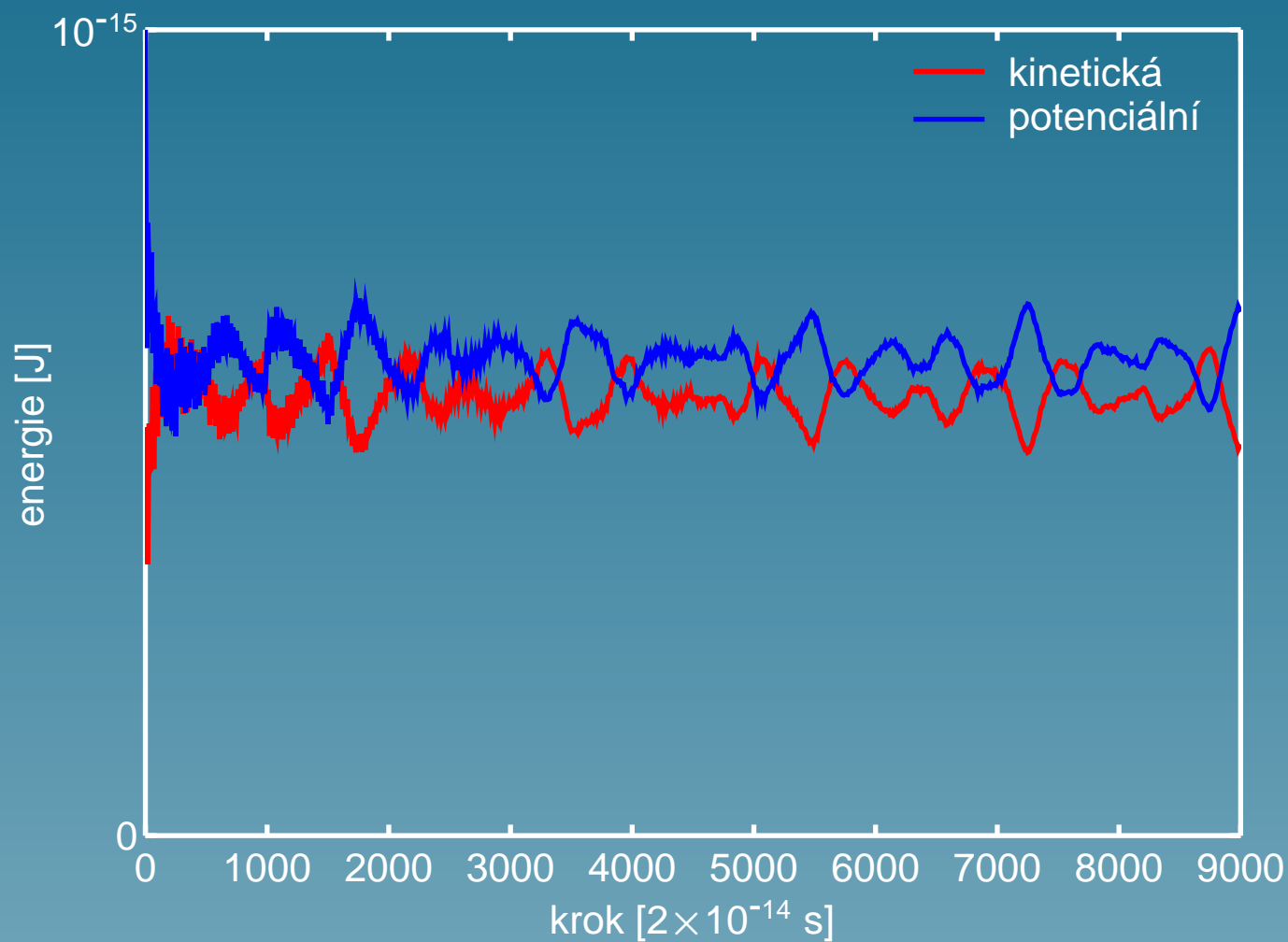
V. Pelikán, P. Hora, A. Machová
Ústav termomechaniky AV ČR

Příspěvek vznikl na základě podpory grantu GA AV ČR A2076201 „Simulace křehce-tvárného chování mikrotrhlin metodou molekulární dynamiky v 2D a 3D úlohách“ a dále záměru Ústavu termomechaniky AV ČR č. AV0Z2076919.

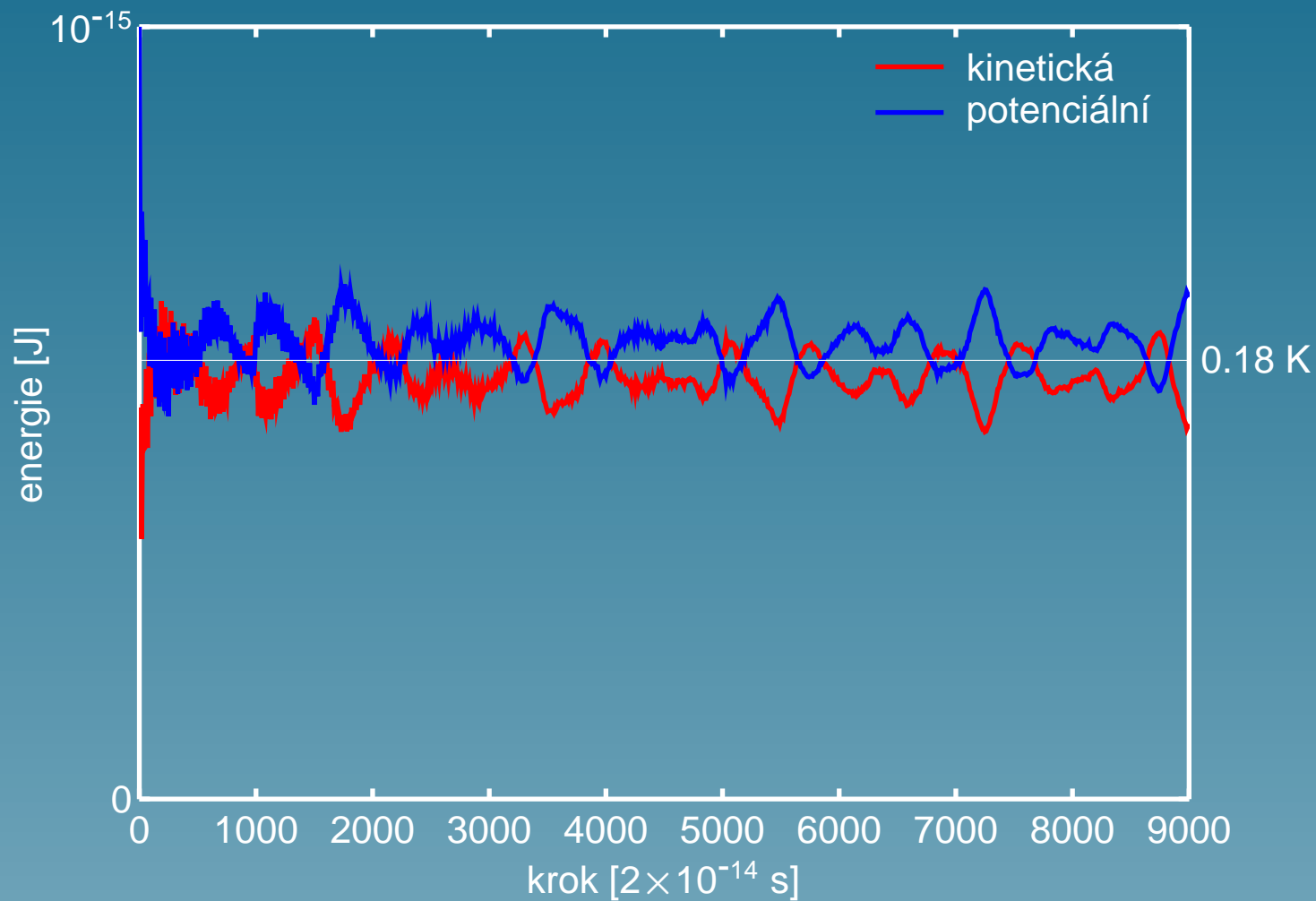
Úvod



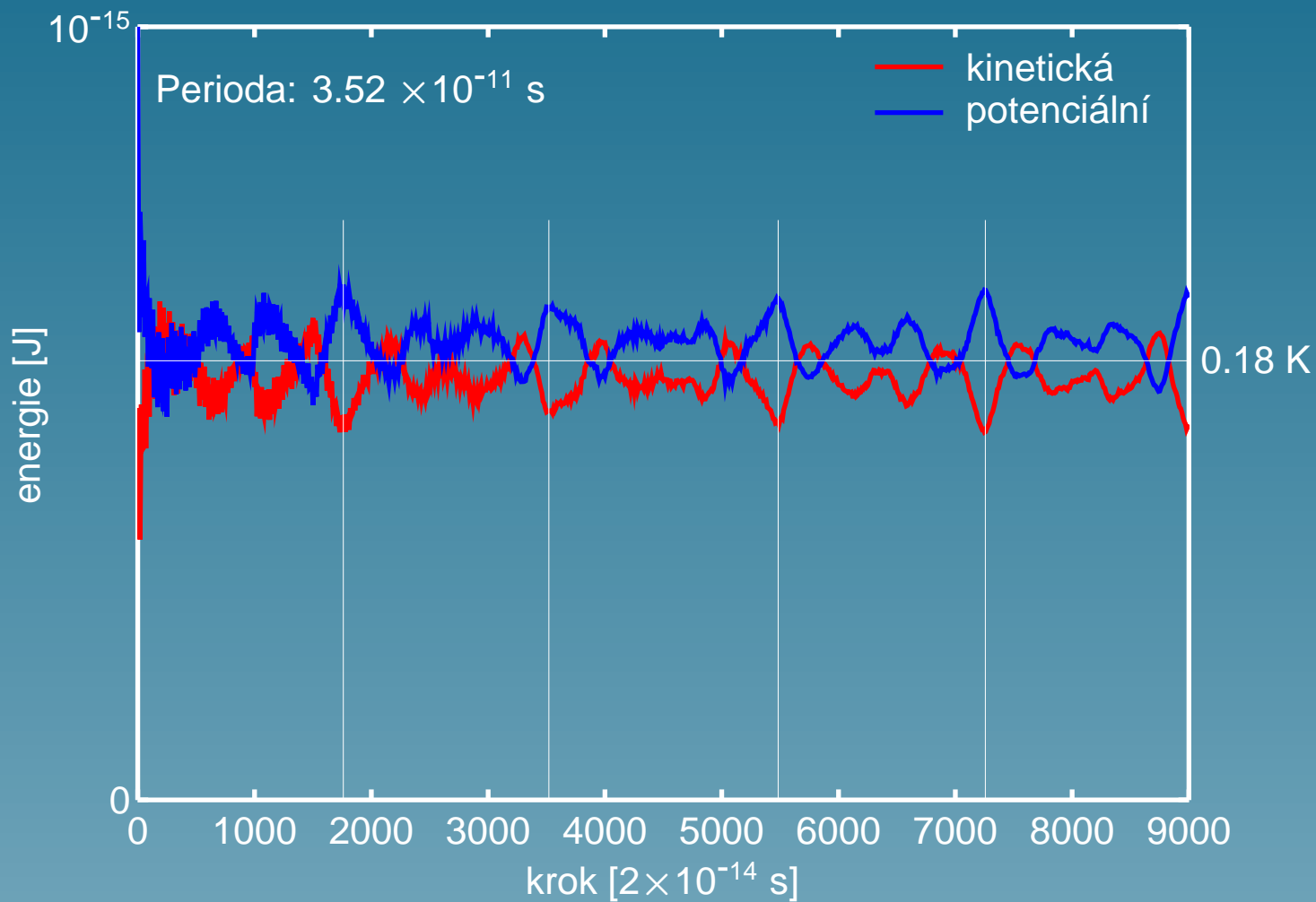
Povrchová relaxace nulovým tlumením



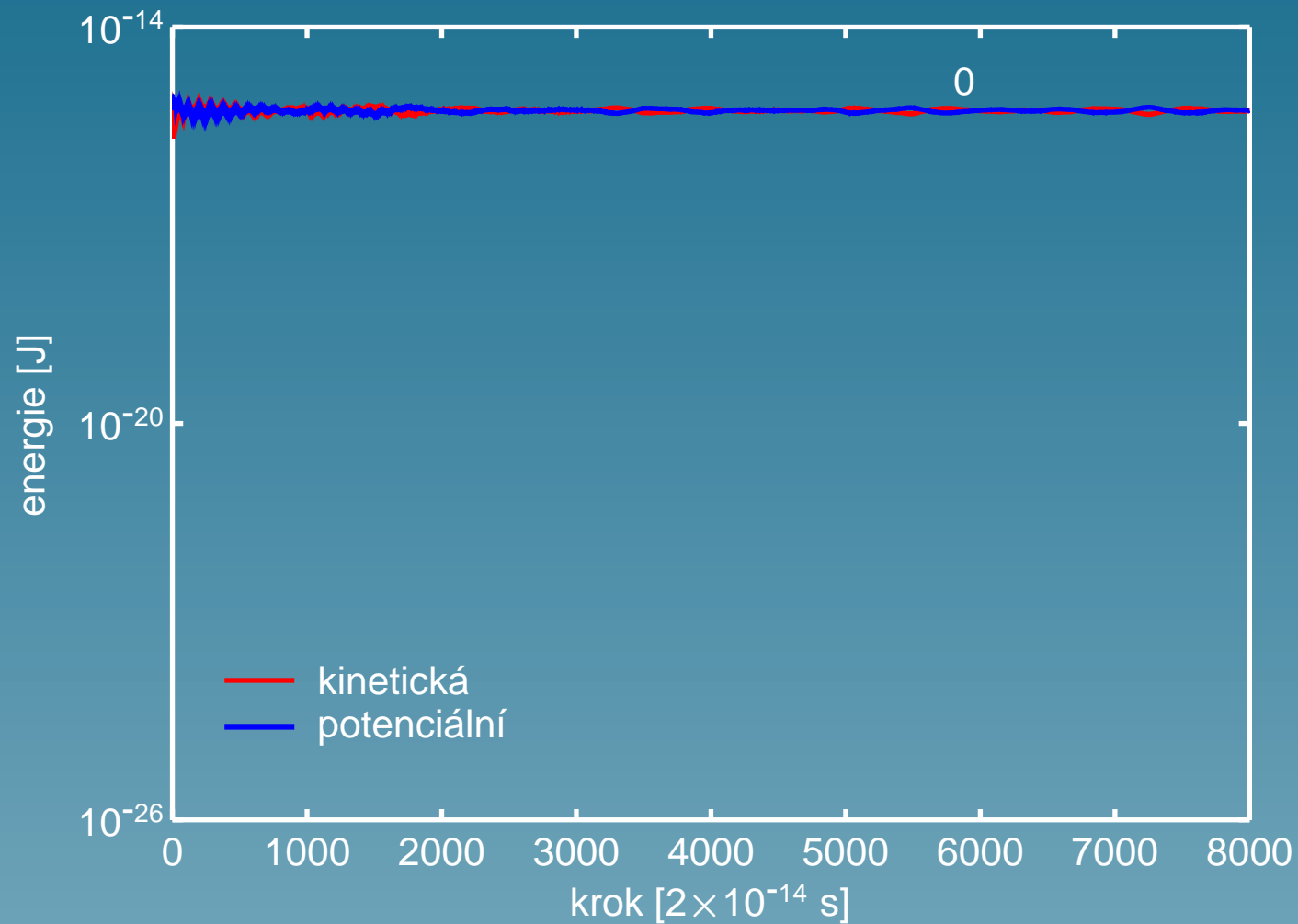
Povrchová relaxace nulovým tlumením



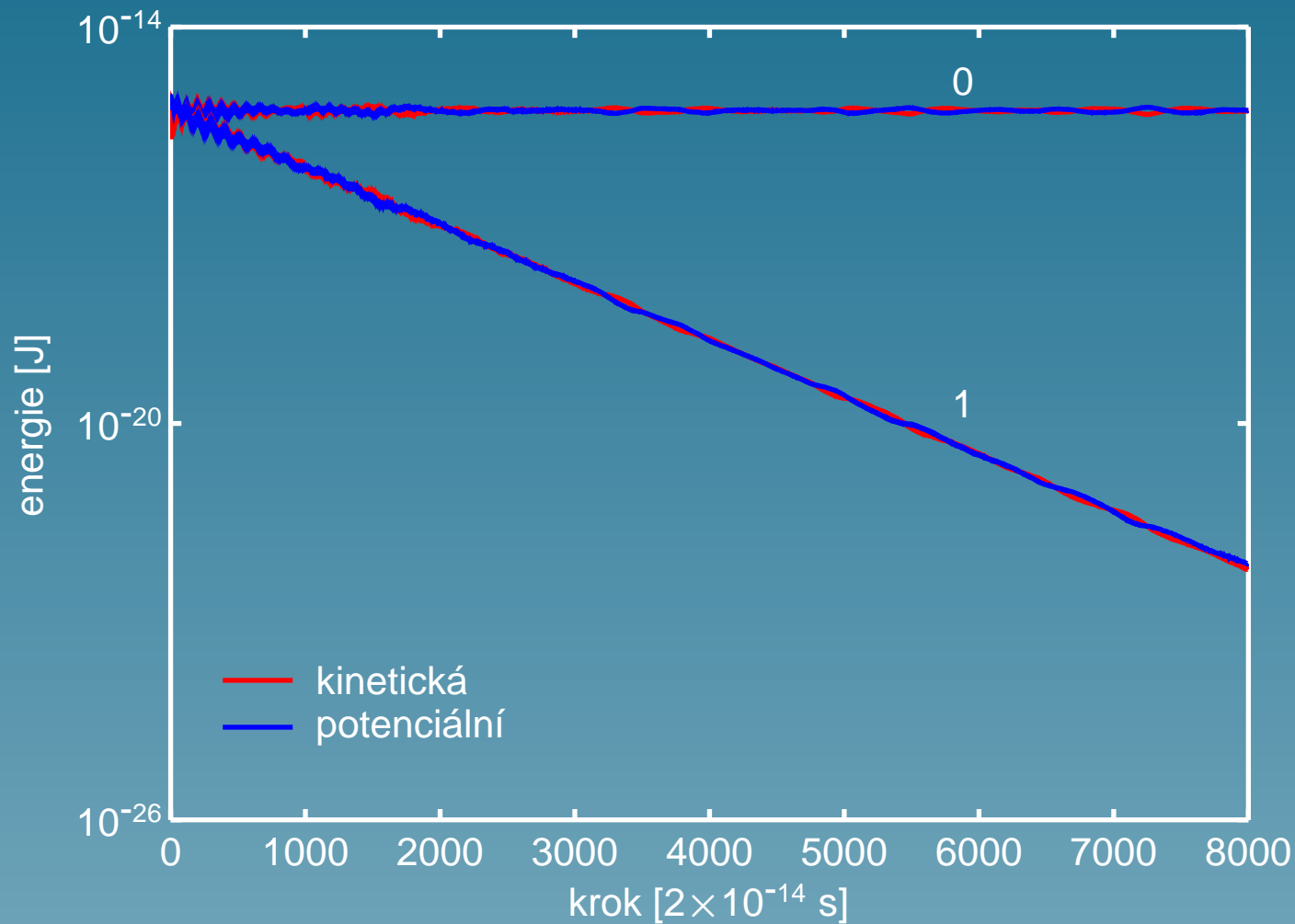
Povrchová relaxace nulovým tlumením



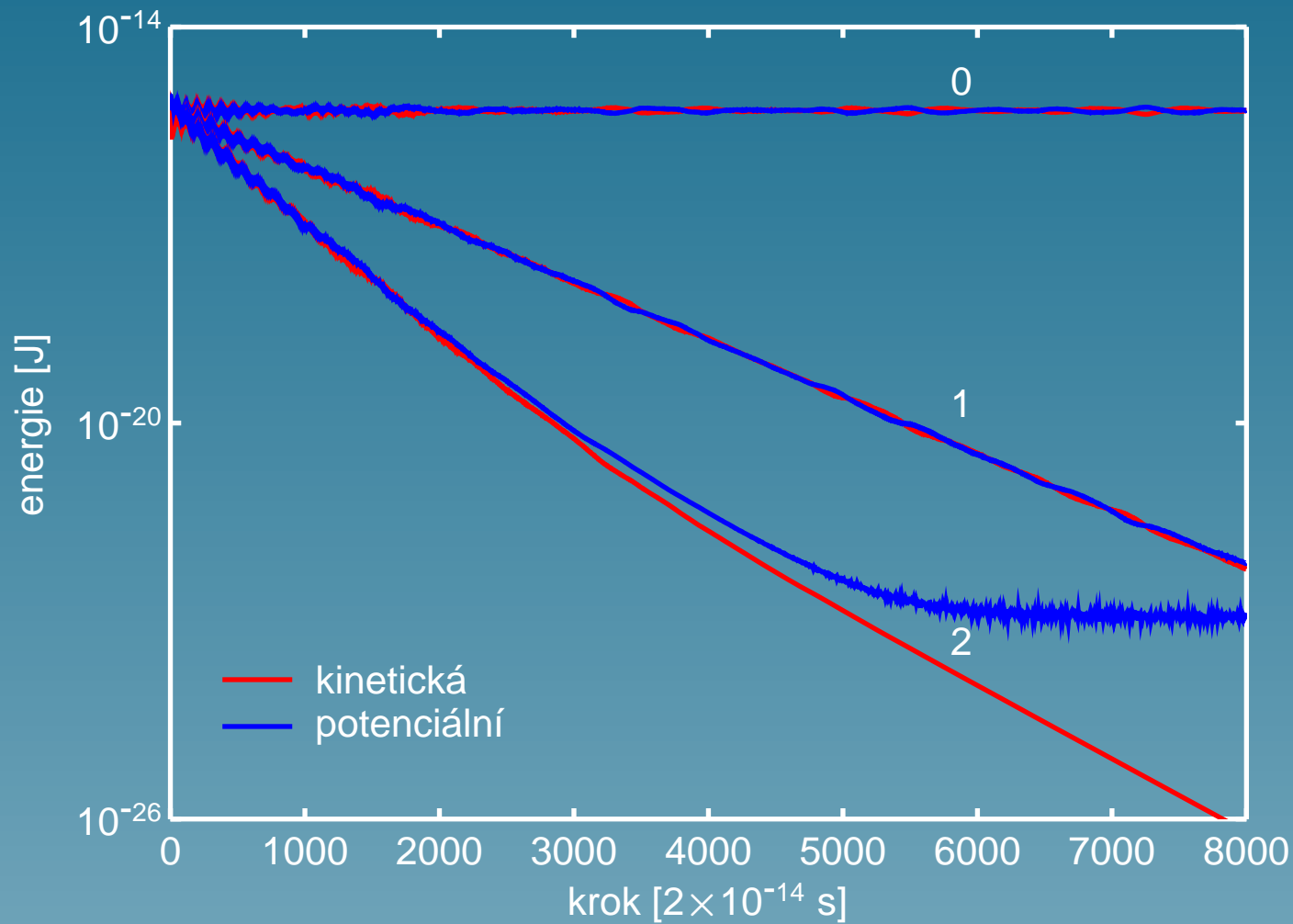
Povrchová relaxace s tlumením $0 - 2 \times 10^{11}/s$



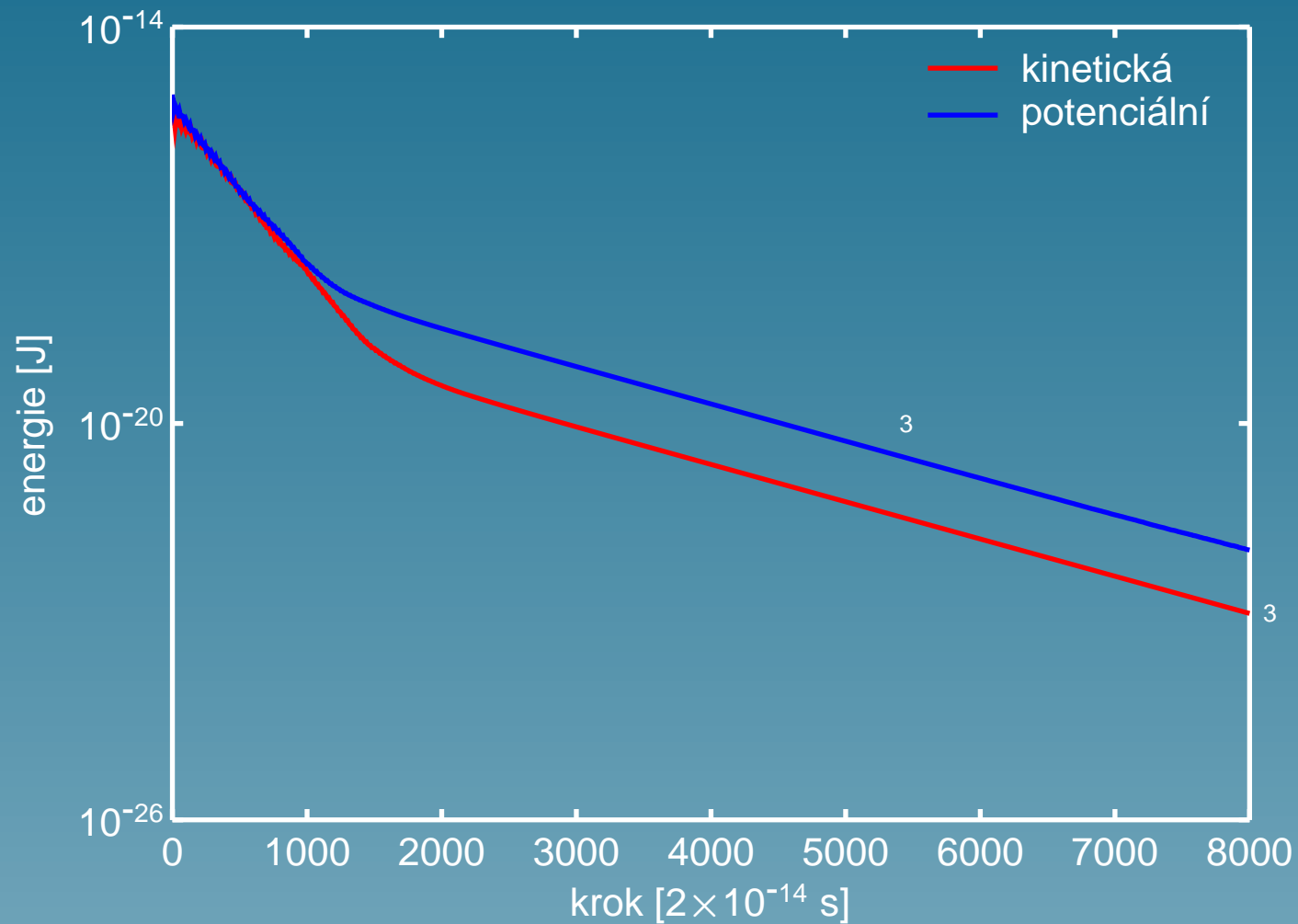
Povrchová relaxace s tlumením $0 - 2 \times 10^{11}/s$



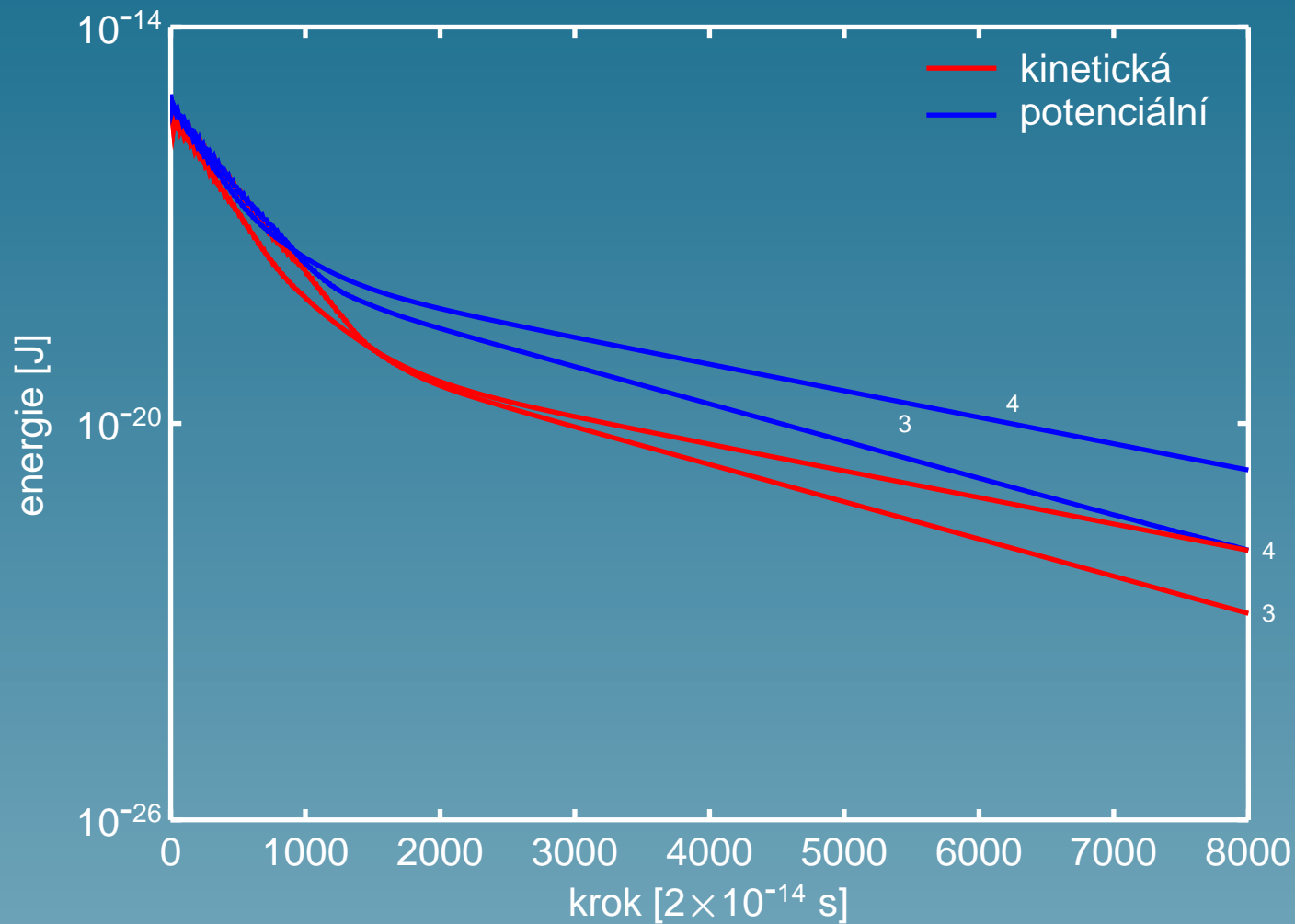
Povrchová relaxace s tlumením $0 - 2 \times 10^{11}/s$



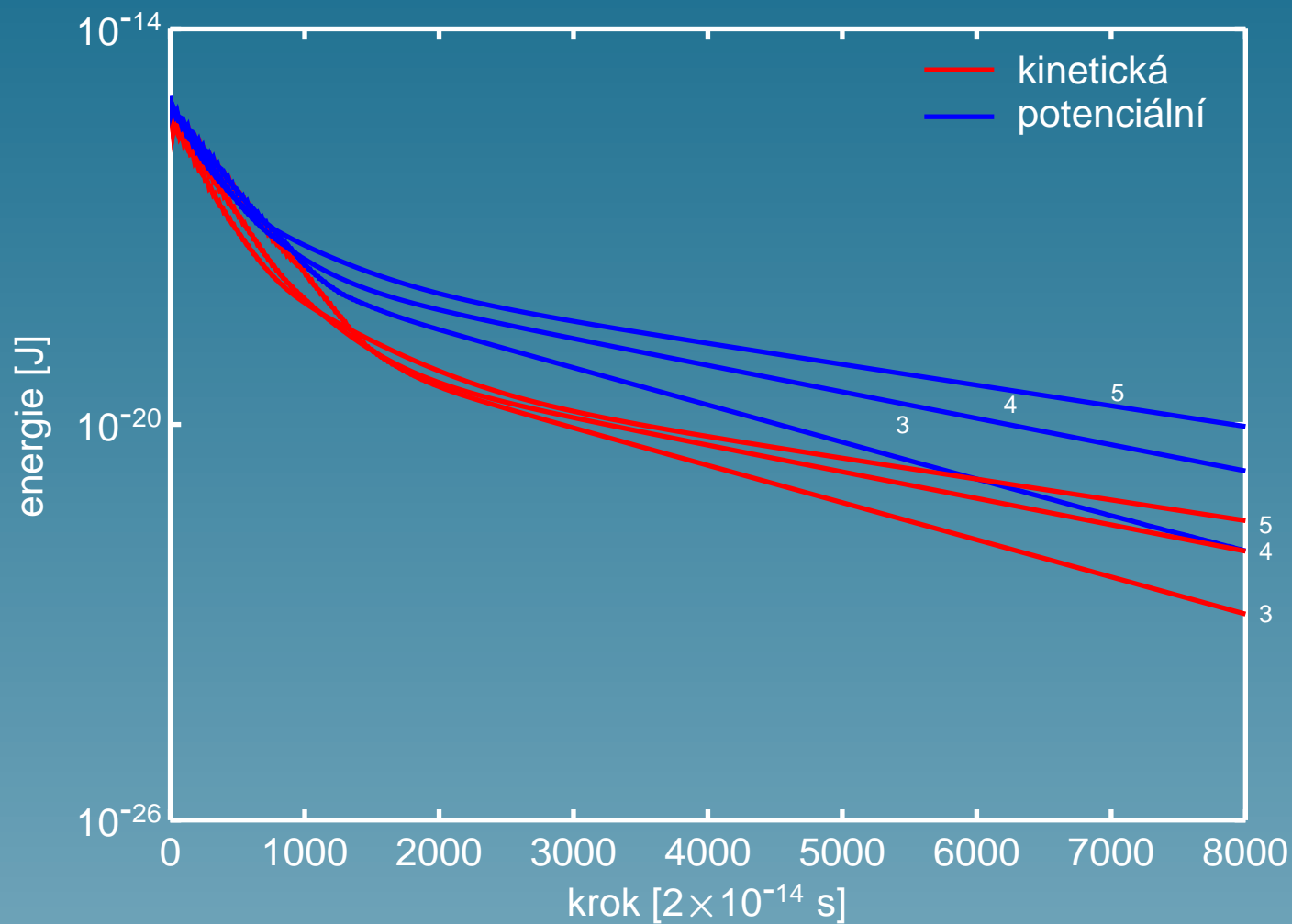
Povrchová relaxace s tlumením $3 - 6 \times 10^{11}/s$



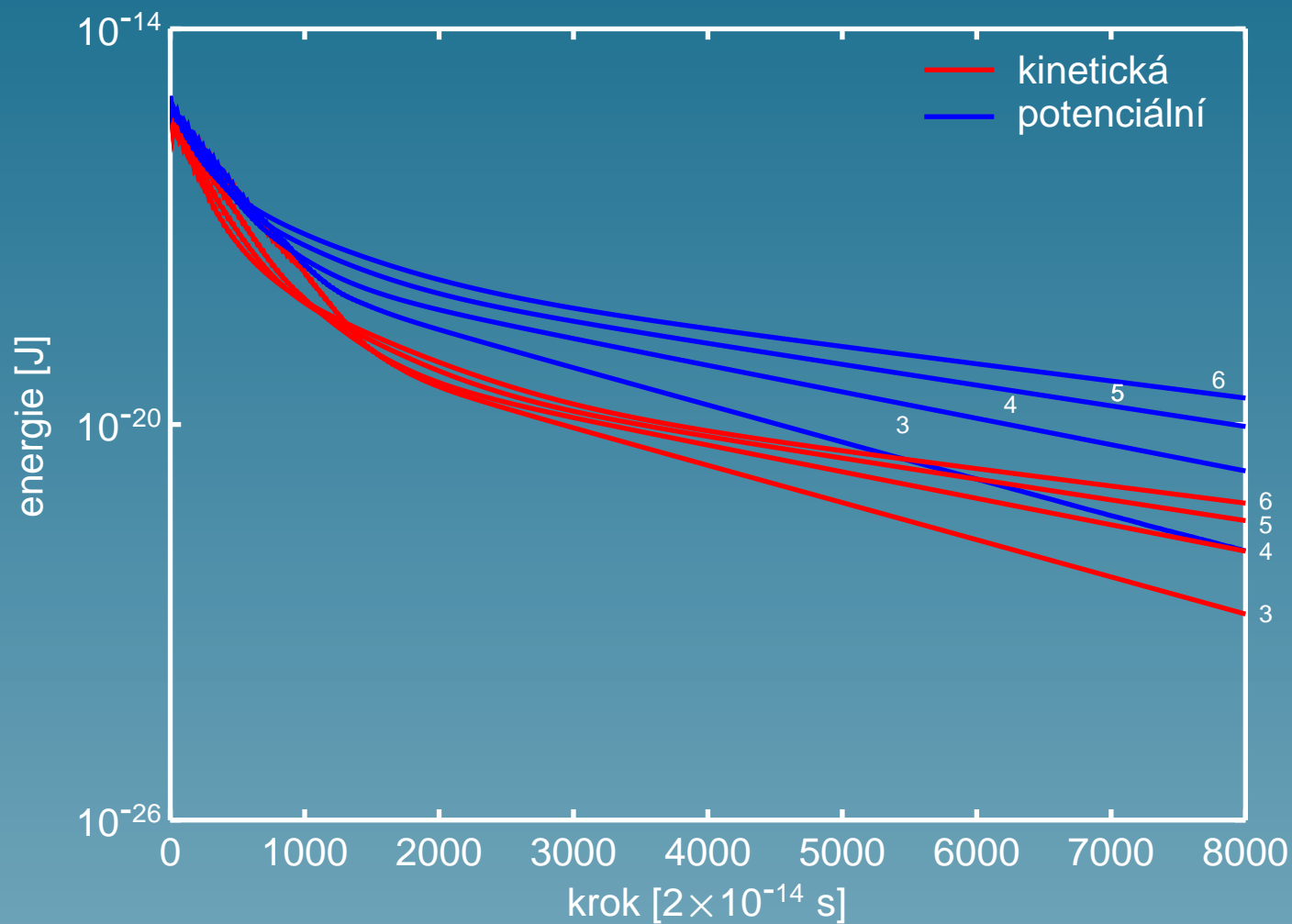
Povrchová relaxace s tlumením $3 - 6 \times 10^{11}/s$



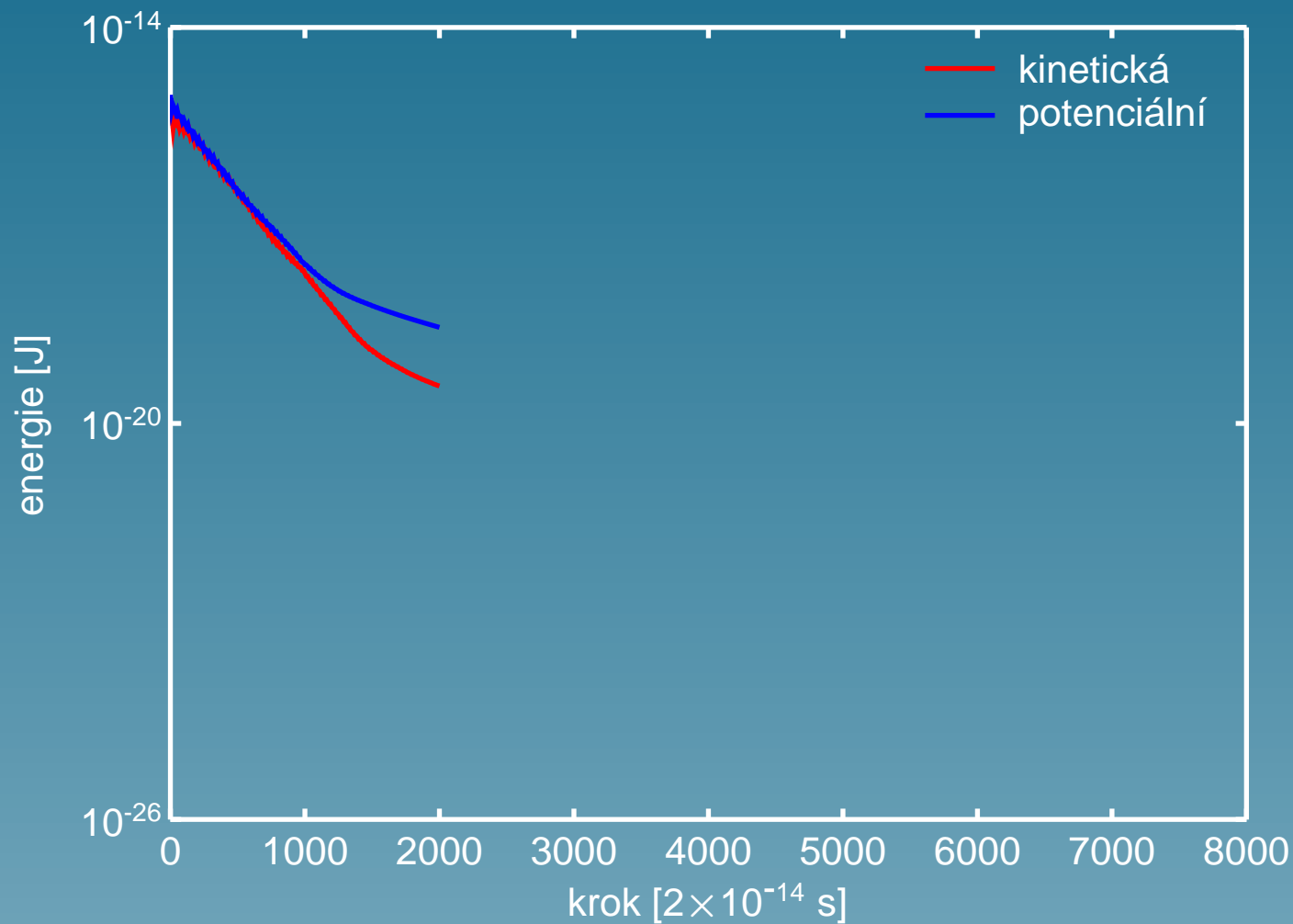
Povrchová relaxace s tlumením $3 - 6 \times 10^{11}/s$



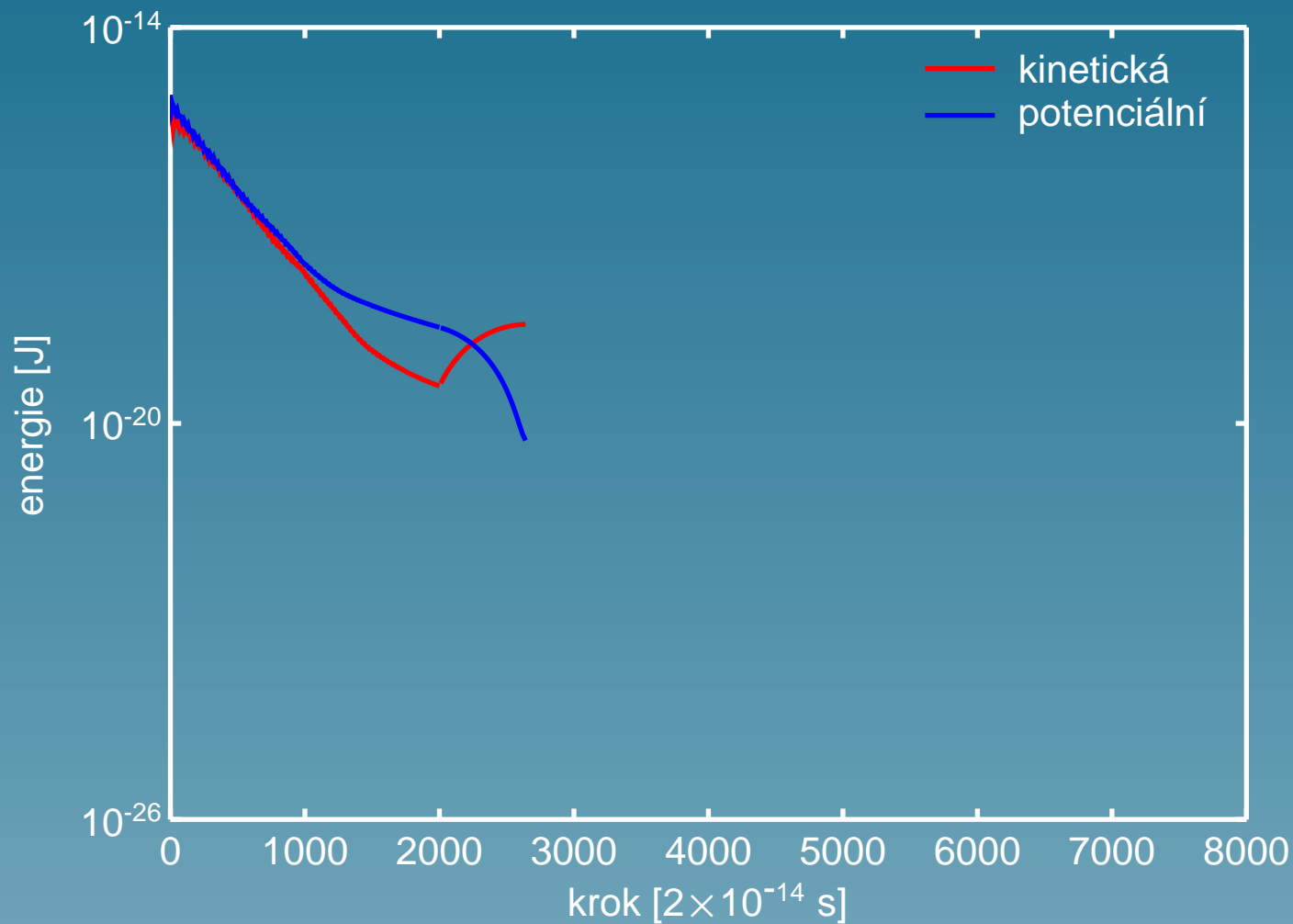
Povrchová relaxace s tlumením $3 - 6 \times 10^{11}/s$



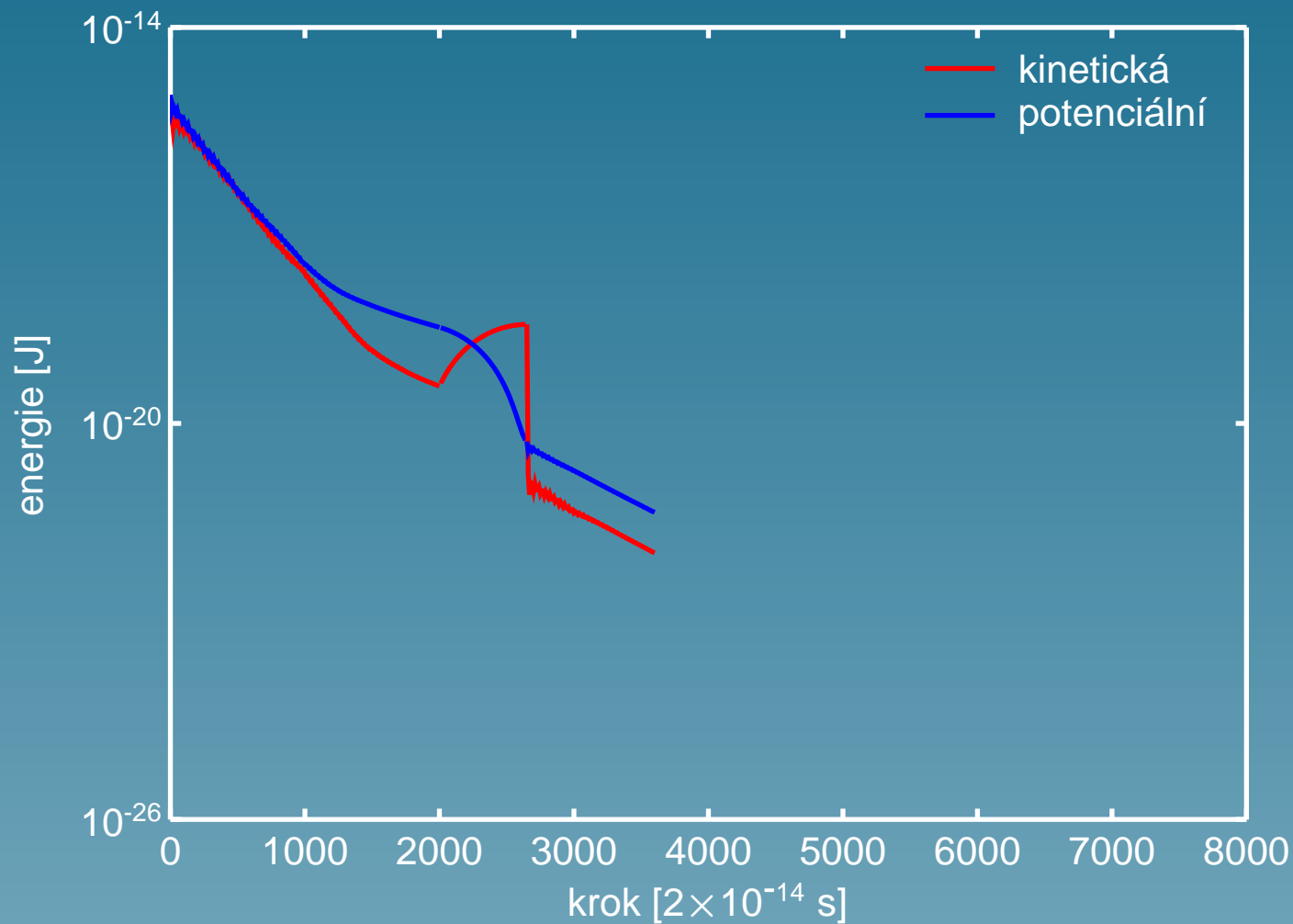
Povrchová relaxace metodou „Zastavené kyvadlo“



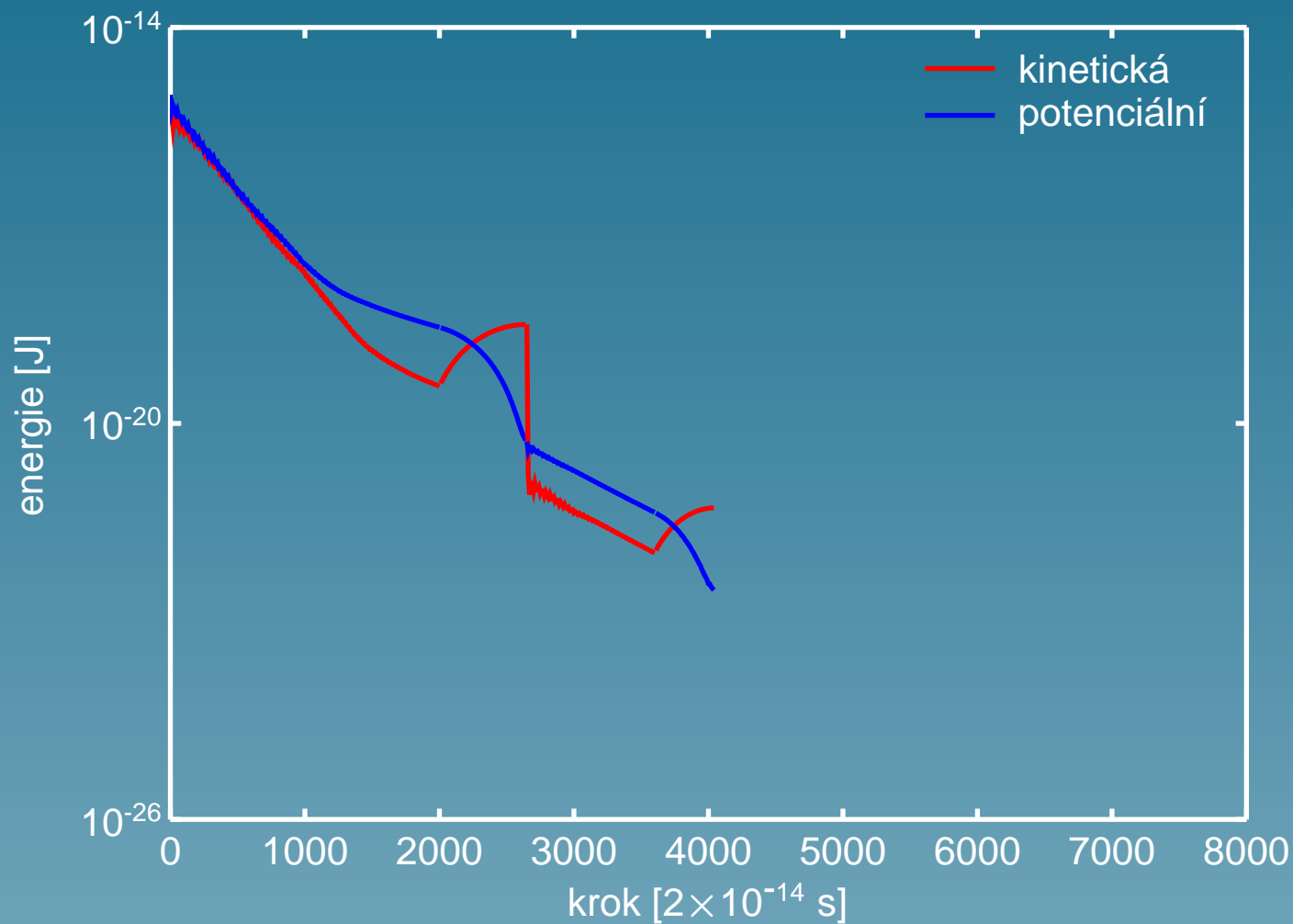
Povrchová relaxace metodou „Zastavené kyvadlo“



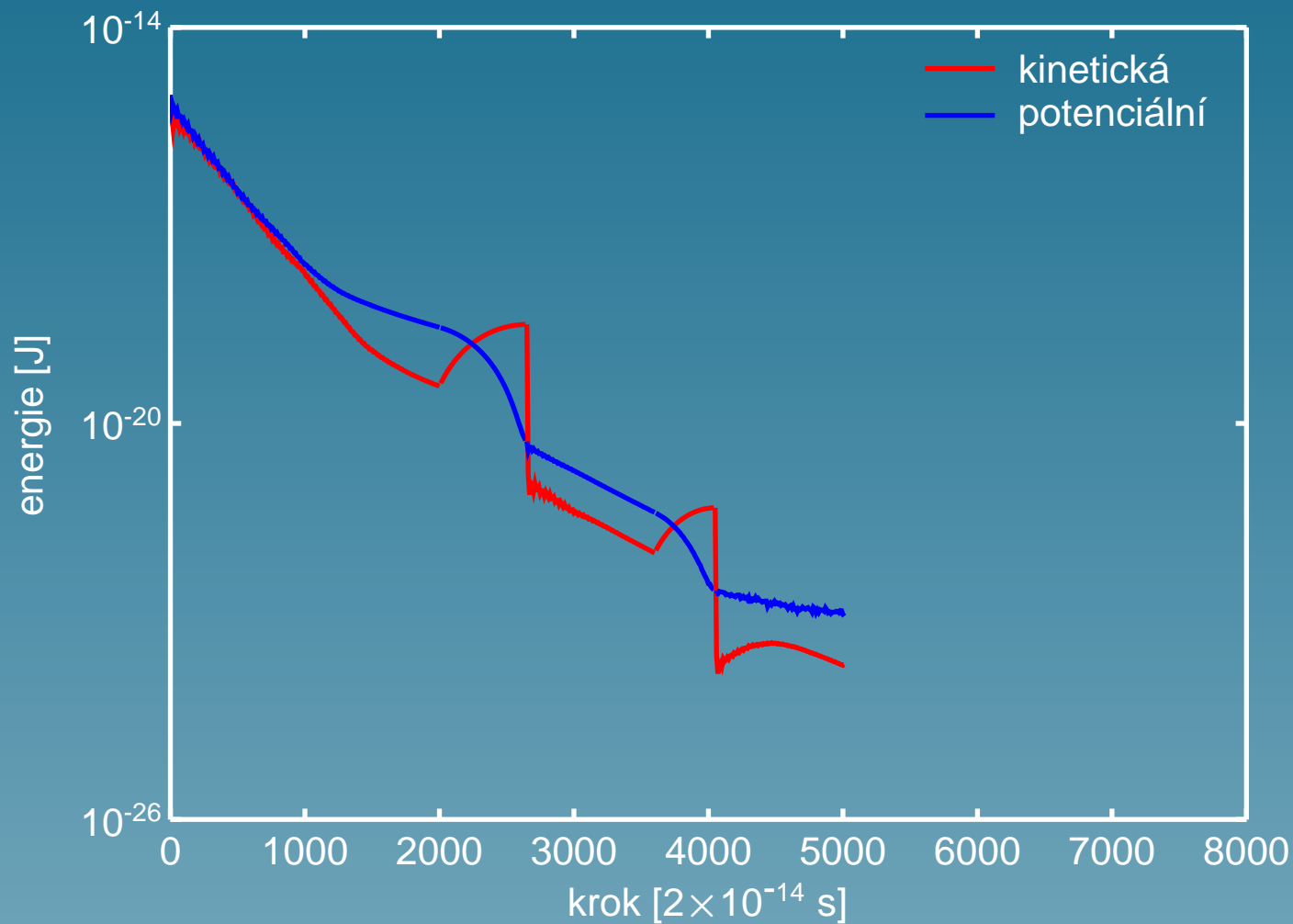
Povrchová relaxace metodou „Zastavené kyvadlo“



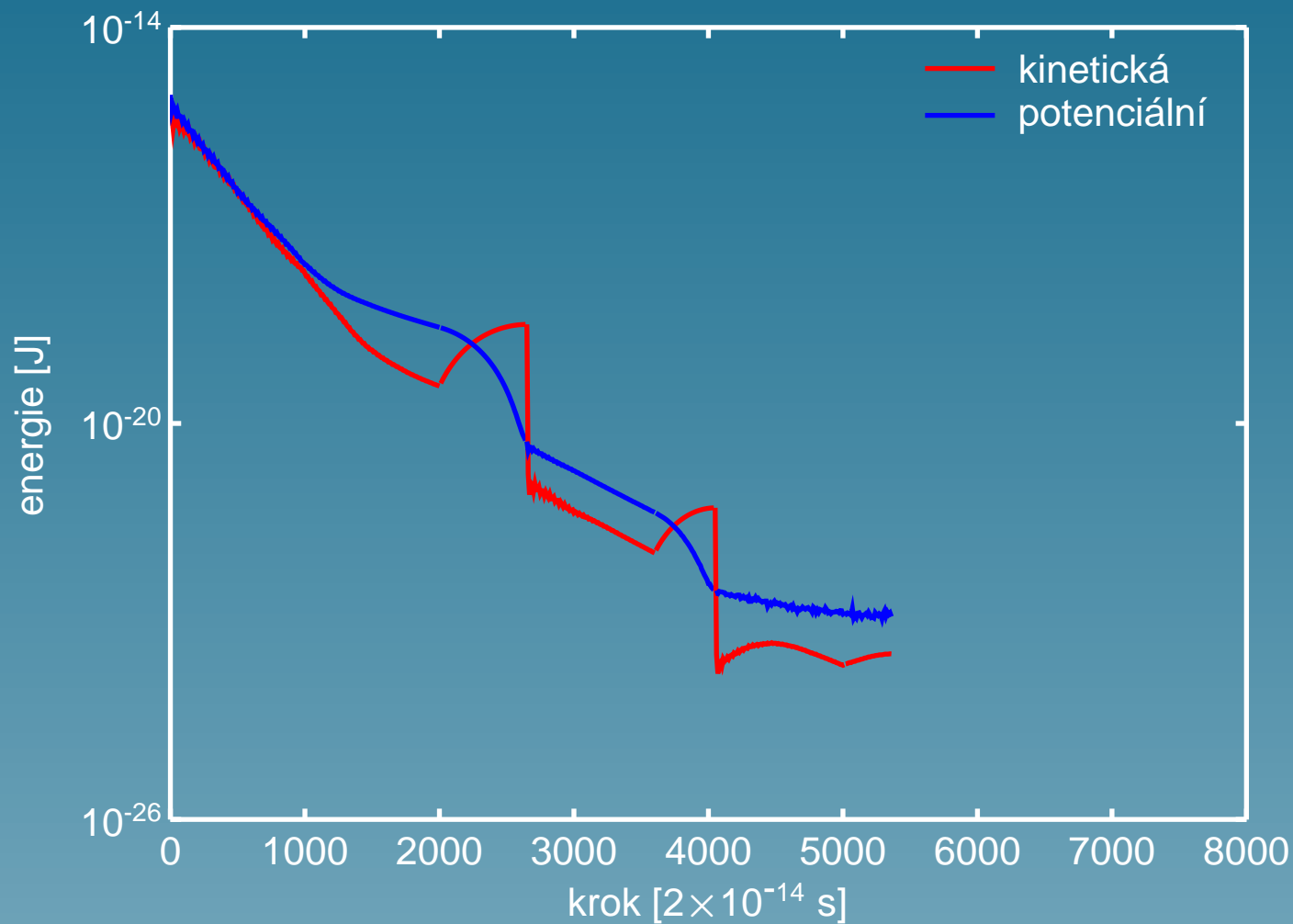
Povrchová relaxace metodou „Zastavené kyvadlo“



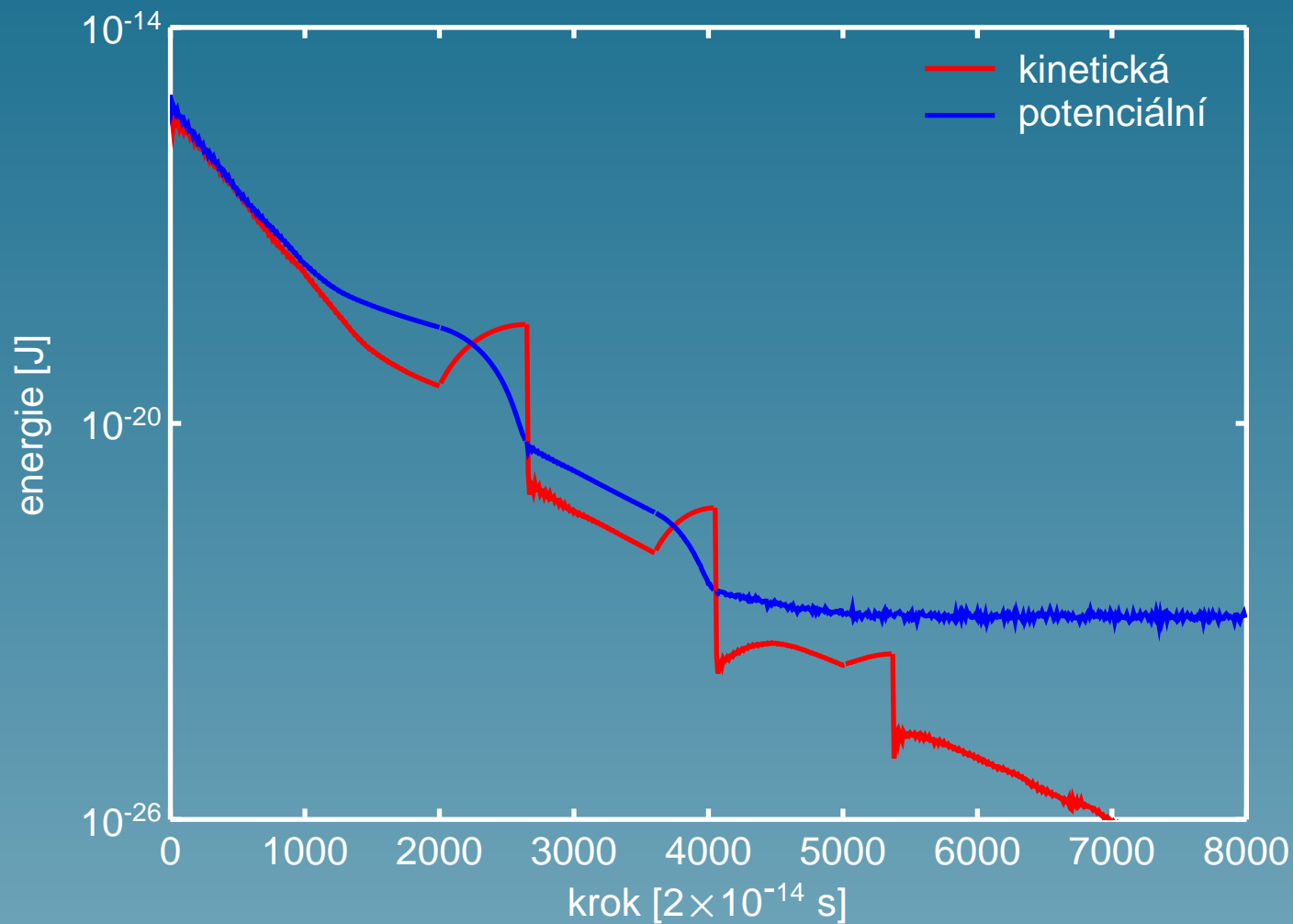
Povrchová relaxace metodou „Zastavené kyvadlo“



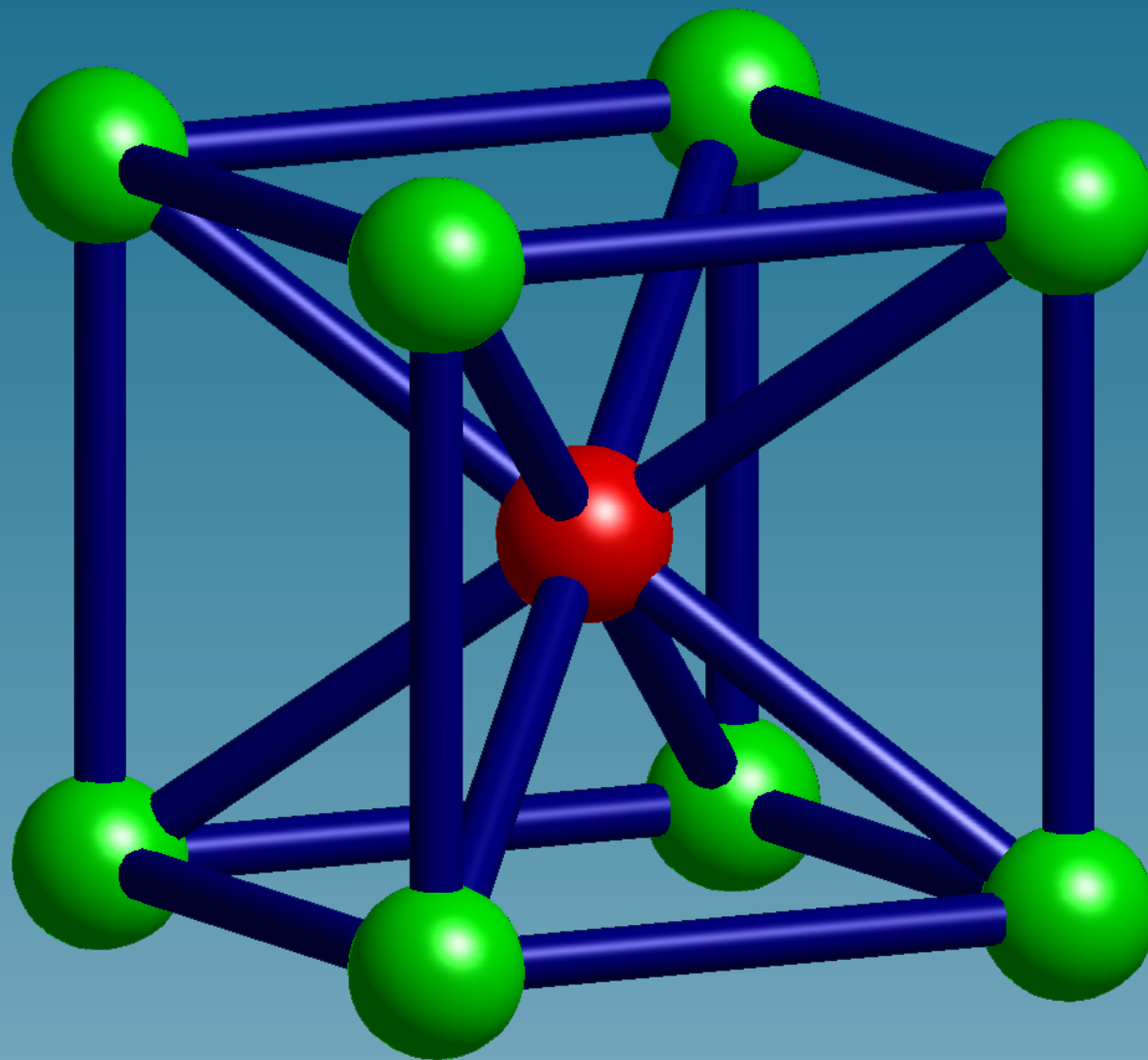
Povrchová relaxace metodou „Zastavené kyvadlo“



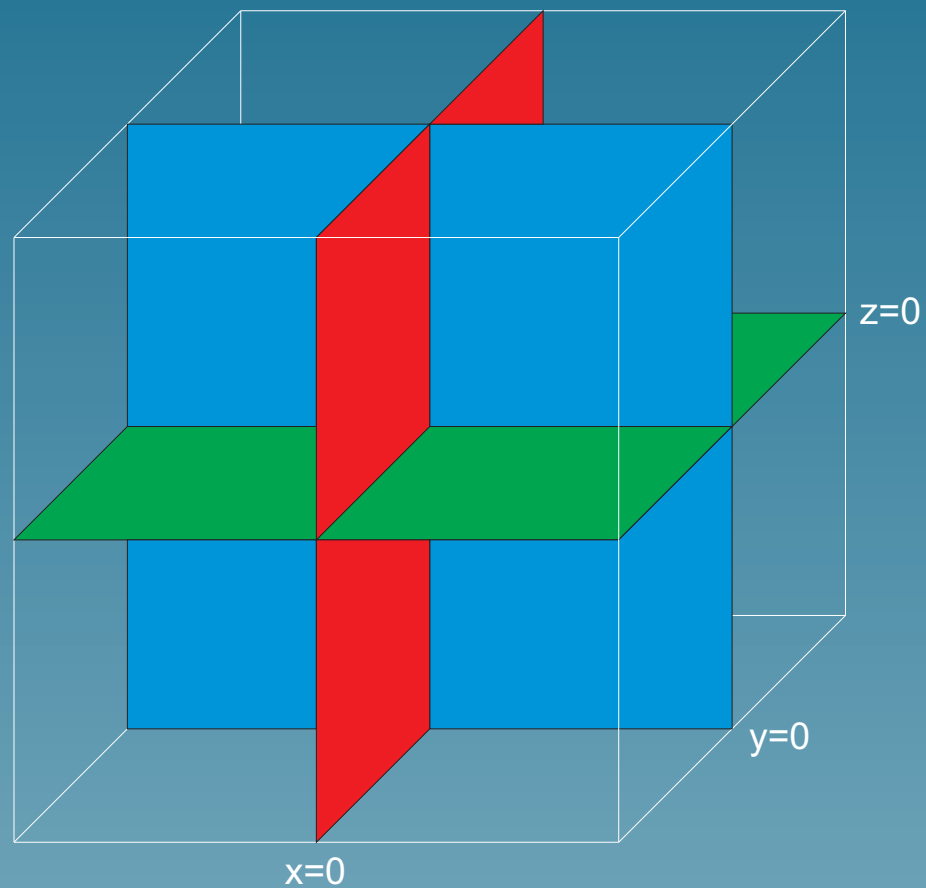
Povrchová relaxace metodou „Zastavené kyvadlo“



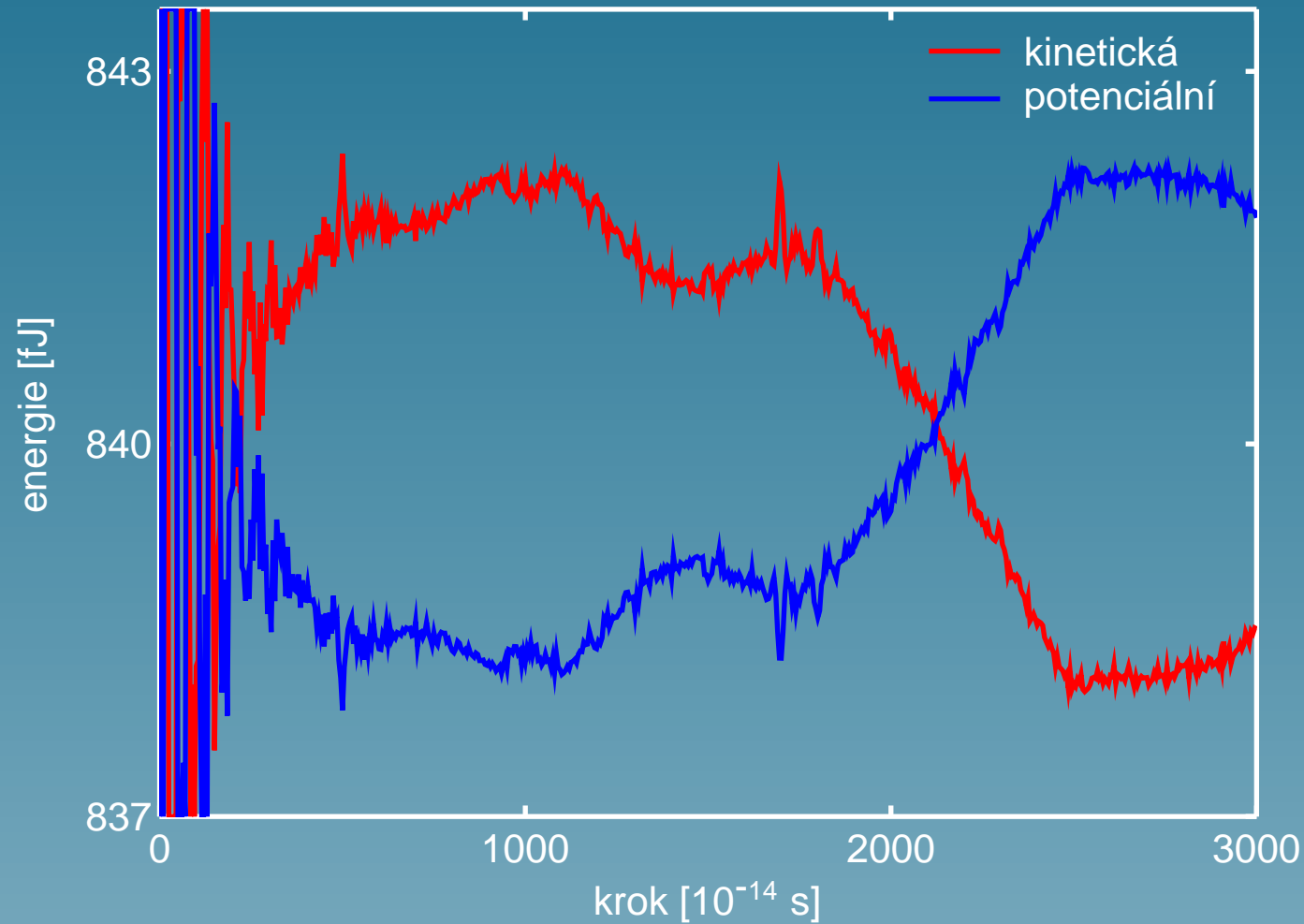
BCC krystal železa



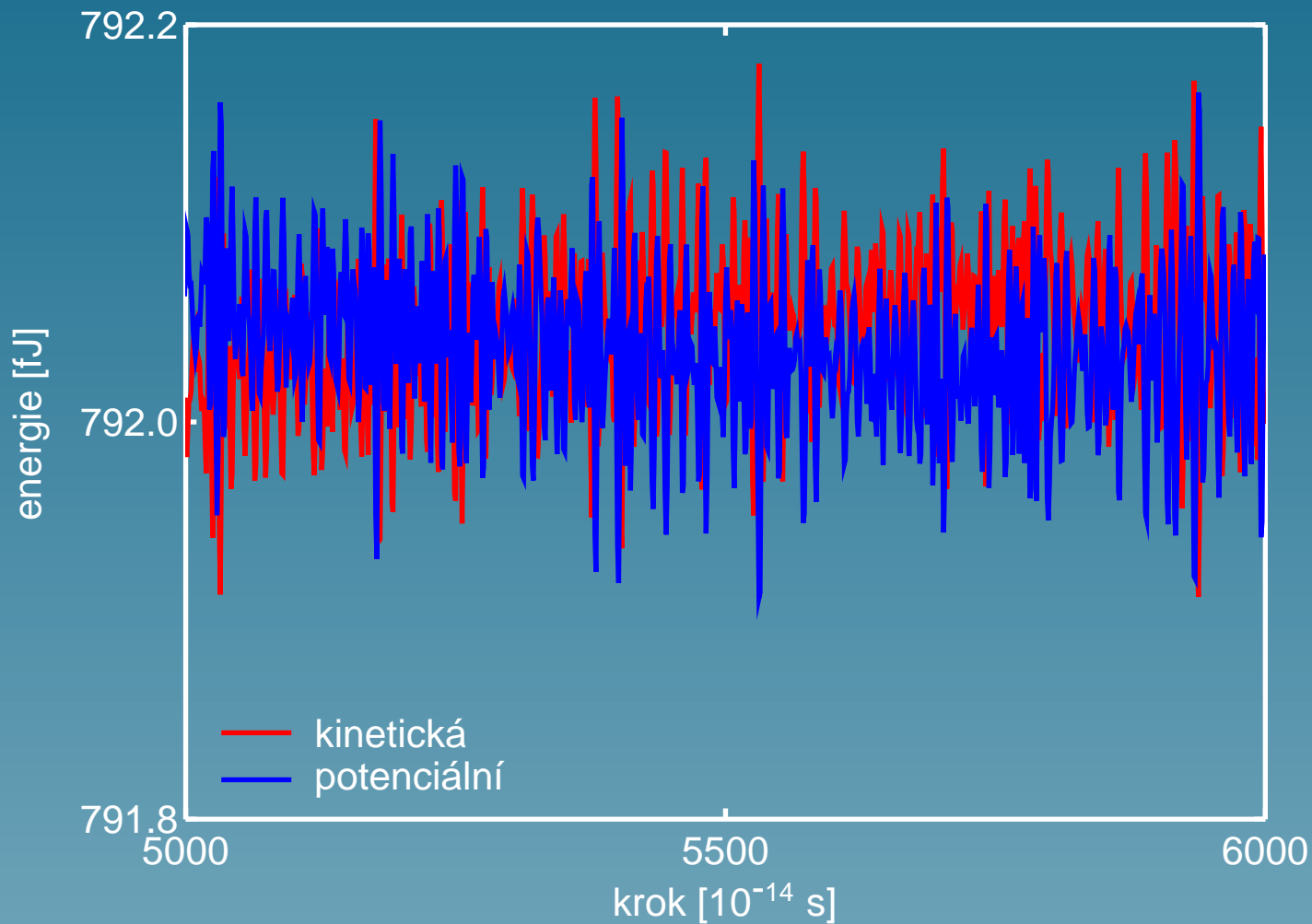
Osová fixace



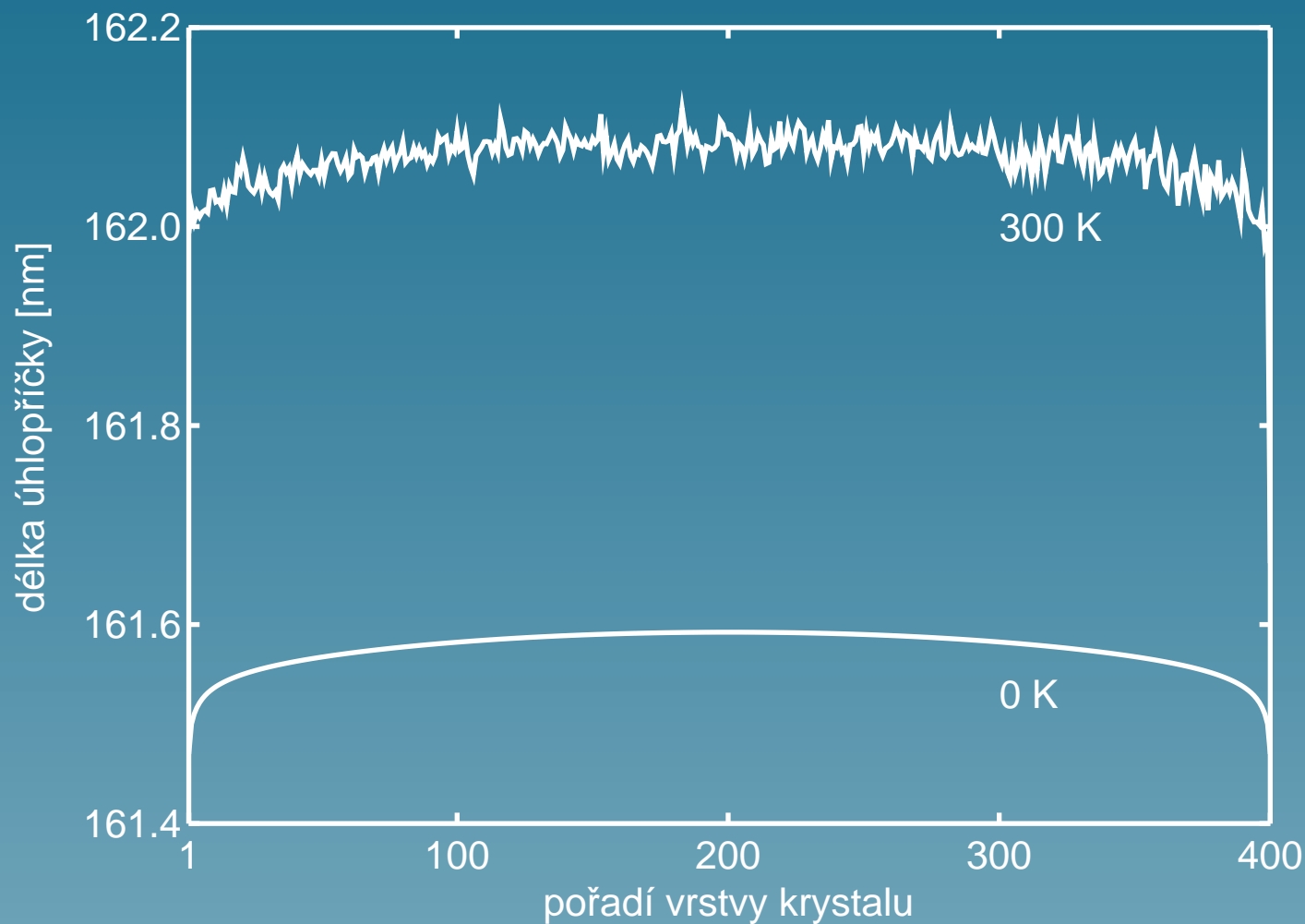
Kinetická a potenciální energie při skokovém zahřátí na 600 K



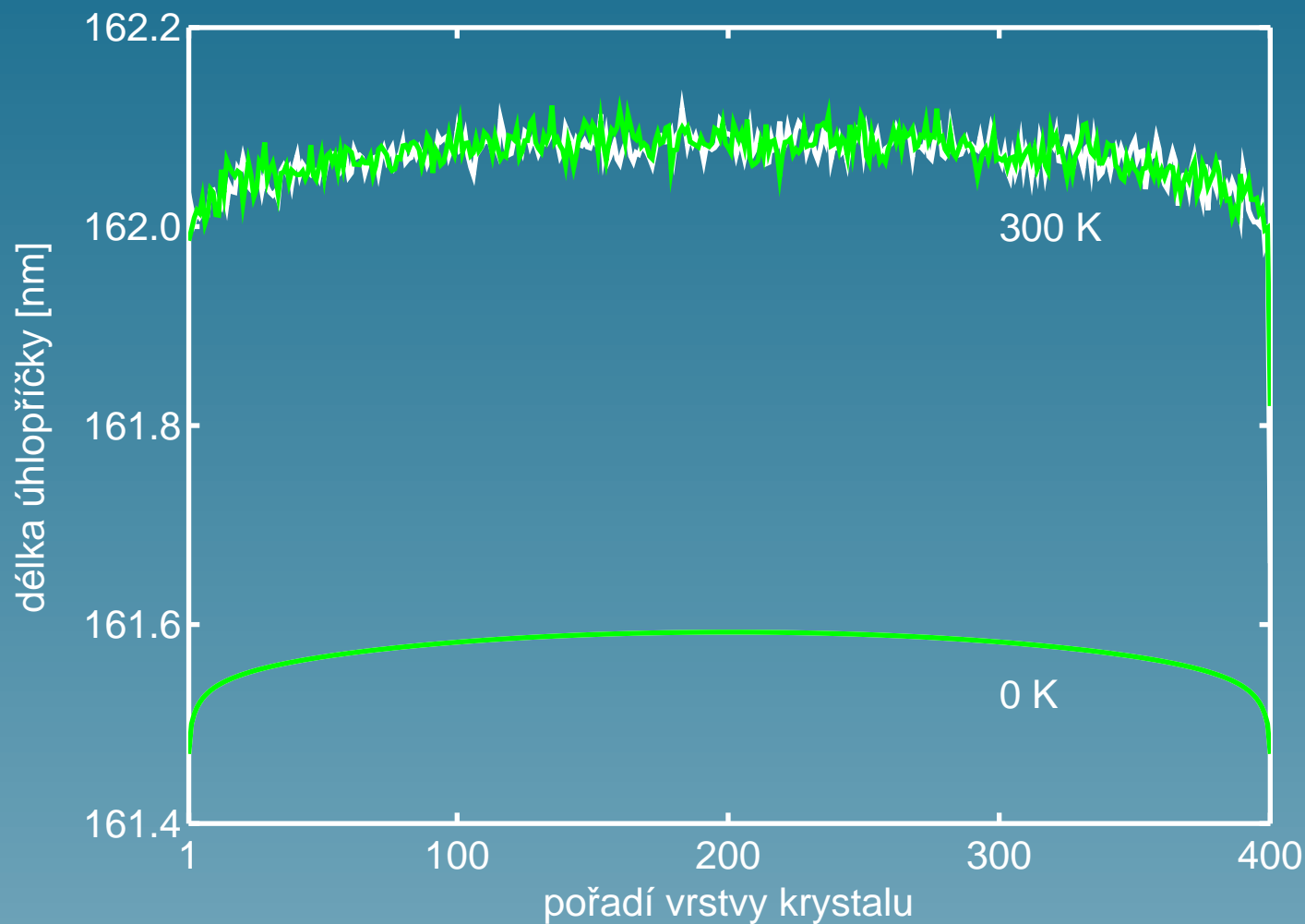
Kinetická a potenciální energie při stabilizaci na 300 K



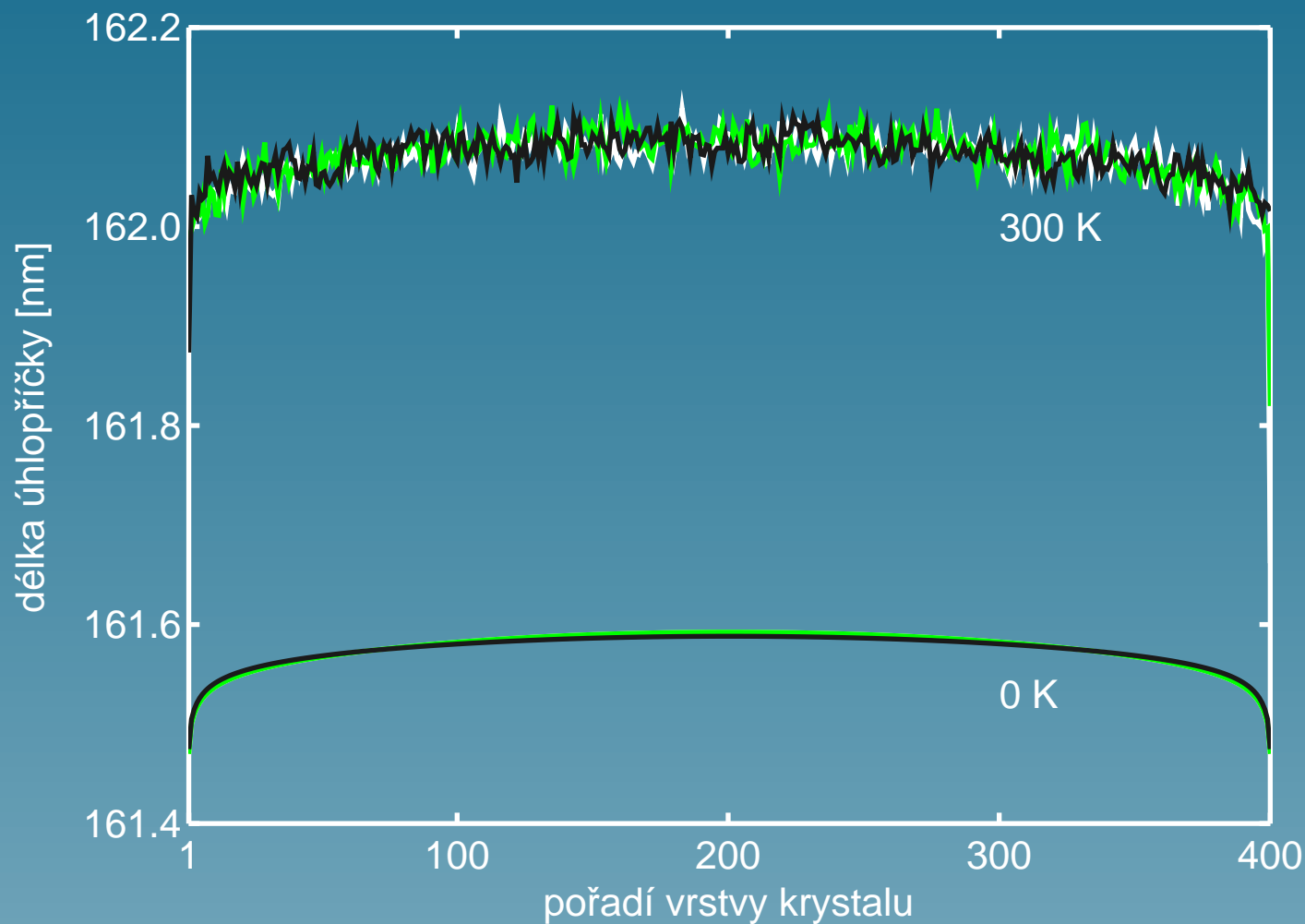
Délky úhlopříček krystalu při teplotách 0 a 300 K



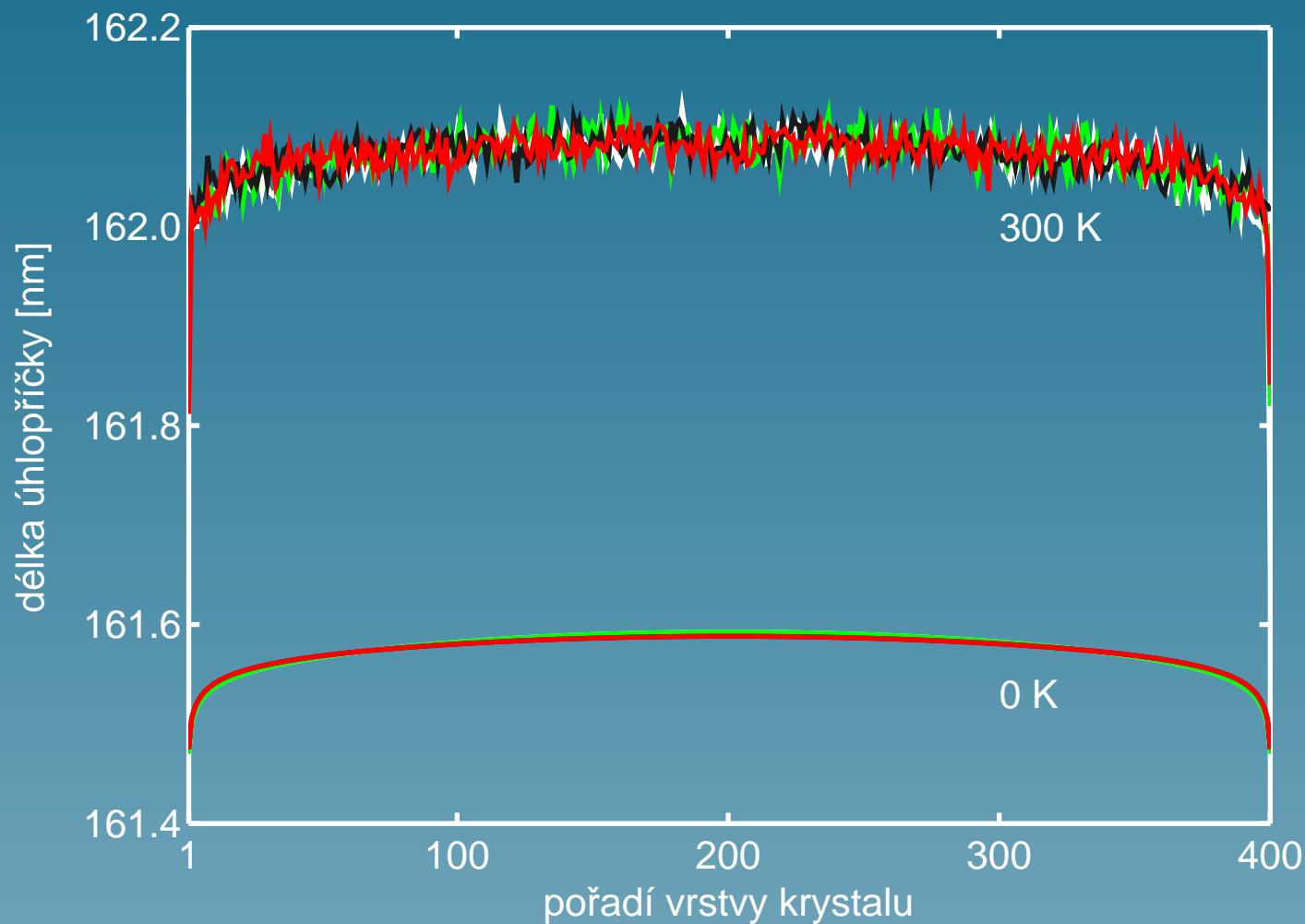
Délky úhlopříček krystalu při teplotách 0 a 300 K



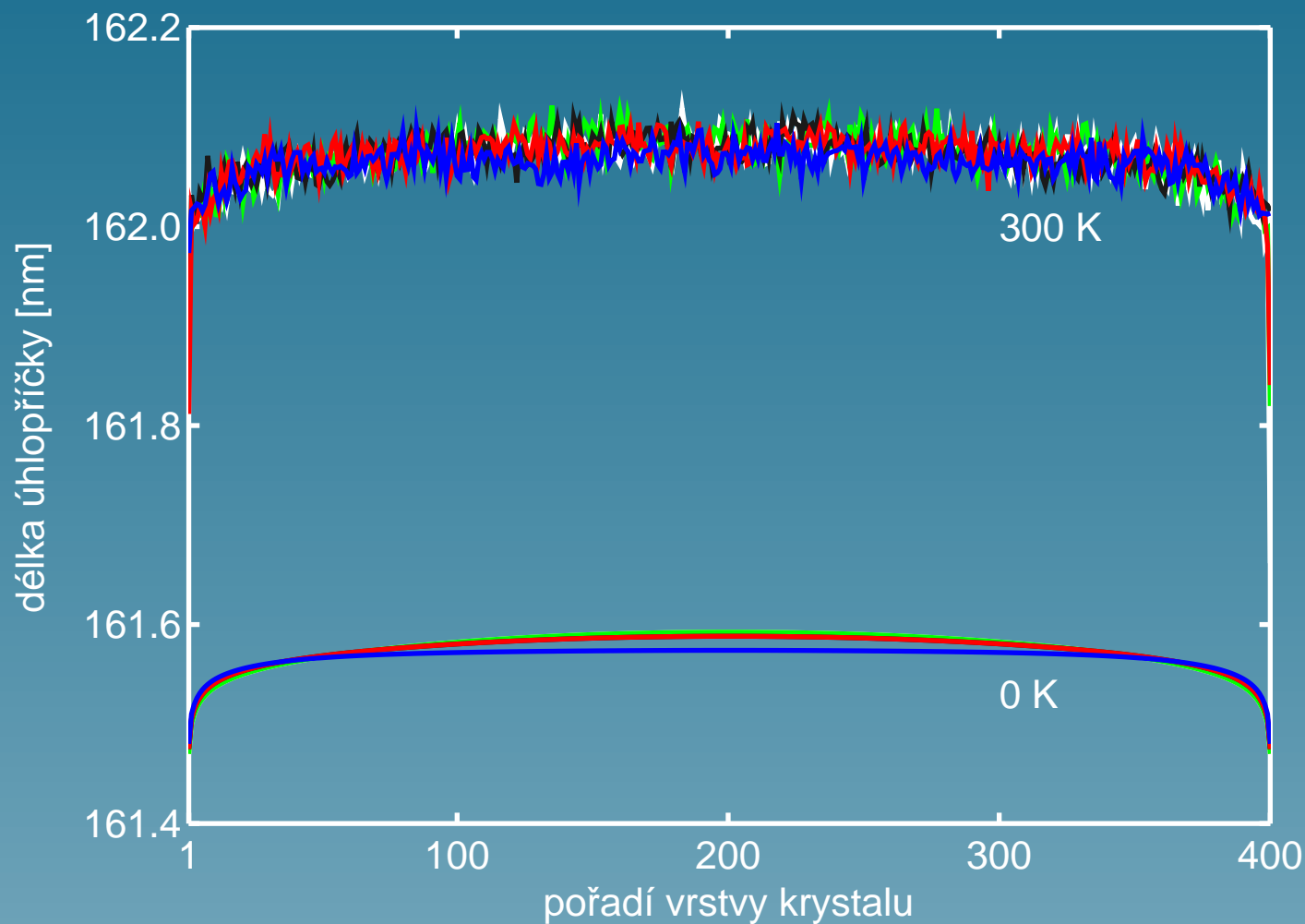
Délky úhlopříček krystalu při teplotách 0 a 300 K



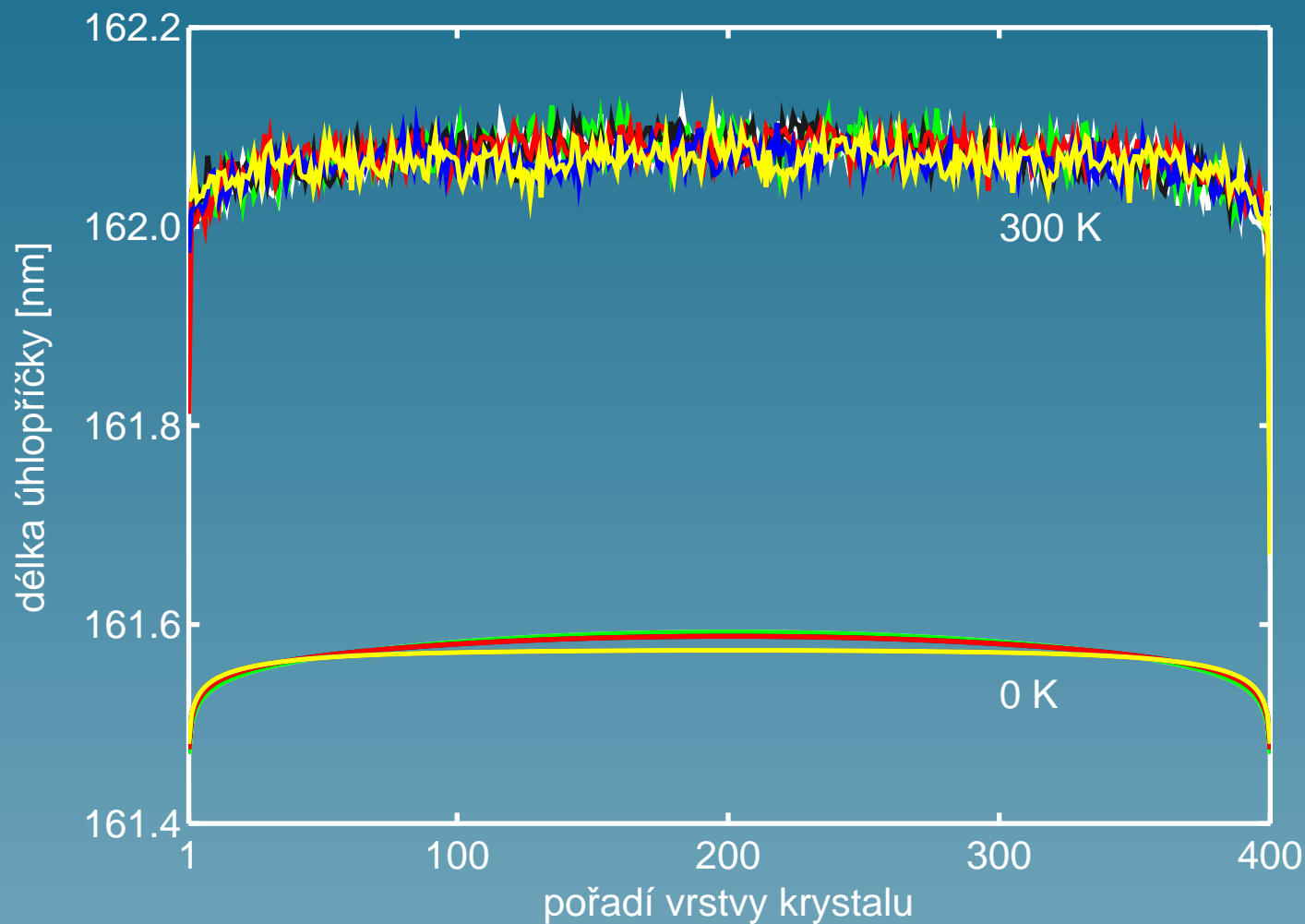
Délky úhlopříček krystalu při teplotách 0 a 300 K



Délky úhlopříček krystalu při teplotách 0 a 300 K



Délky úhlopříček krystalu při teplotách 0 a 300 K



OBSAH

Úvod

Povrchová relaxace nulovým tlumením

Povrchová relaxace s tlumením $0 - 2 \times 10^{11}/s$

Povrchová relaxace s tlumením $3 - 6 \times 10^{11}/s$

Povrchová relaxace metodou „Zastavené kyvadlo“

BCC krystal železa

Osová fixace

Kinetická a potenciální energie
při skokovém zahřátí na 600 K

Kinetická a potenciální energie při stabilizaci na 300 K

Délky úhlopříček krystalu při teplotách 0 a 300 K