

# VLIV TVARU BUDÍCÍHO PULZU NA ŠÍŘENÍ NAPĚŤOVÝCH VLN V KRYSTALU BCC ŽELEZA

V. Pelikán, P. Hora, A. Machová, O. Červená  
Ústav termomechaniky AV ČR, v.v.i.

Příspěvek vznikl na základě podpory projektu GA ČR č. 101/07/0789  
a záměru ÚT AV ČR, v.v.i., AV0Z20760514.

Všechny výpočty byly prováděny na klastrech METACentra za podpory  
výzkumného záměru MSM6383917201.

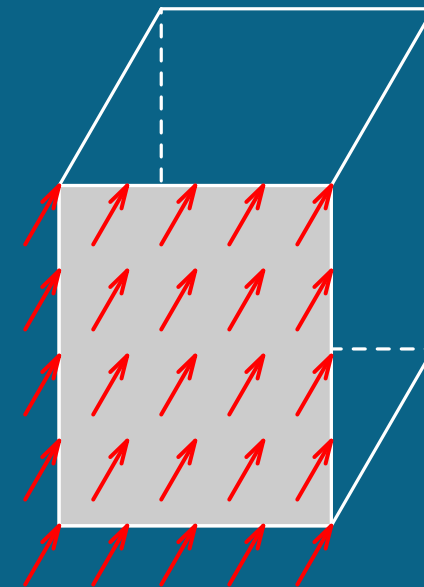
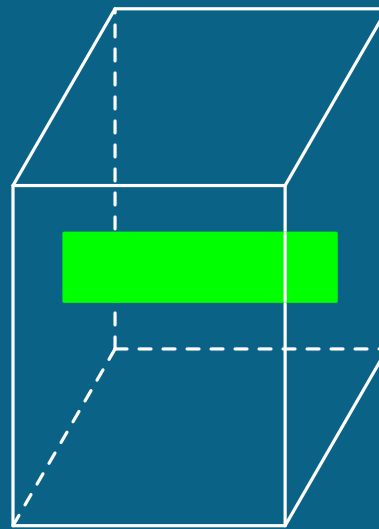
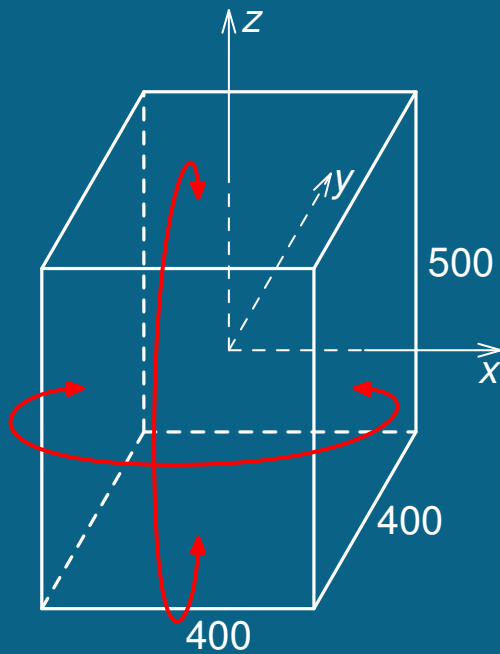
## Úvod

Po důkladném otestování celého našeho nově vyvinutého MD-simulačního systému (viz naše příspěvky z předchozích let) přistoupili jsme k dalším experimentům.



Za objekty zkoumání jsme zvolili nekonečnou železnou desku s nekonečným systémem nekonečně dlouhých rovnoběžných nano-trhlin Griffithova typu. Tuto desku jsme nechali nejprve dokonale povrchově zrelaxovat (vychladnout) na teplotu velice blízkou absolutní nule a poté jsme ji na čelní stěně budili pulzem.

Cílem této prezentace je ilustrace některých z takto dosažených výsledků.

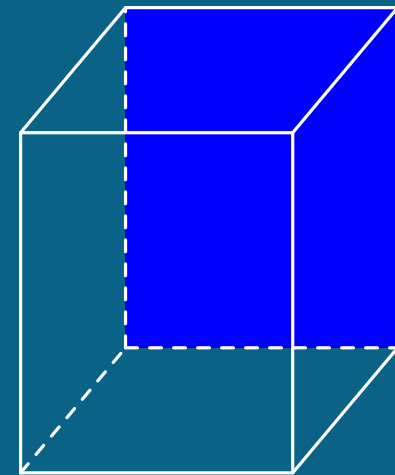
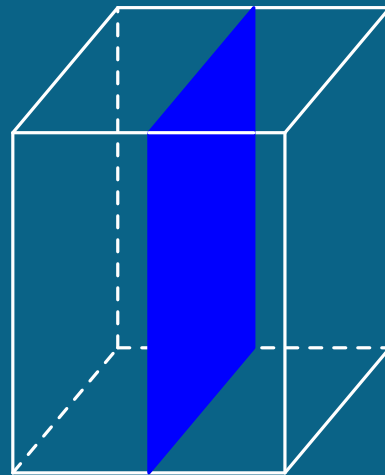
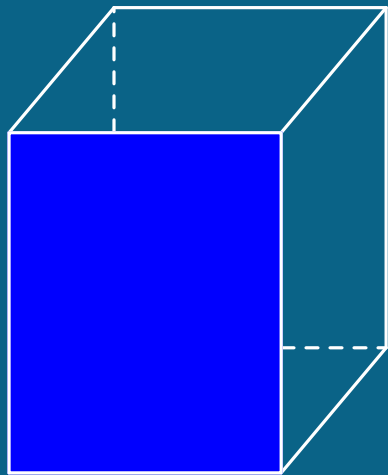
## Geometrie použitých vzorků, umístění trhliny, typ zatížení



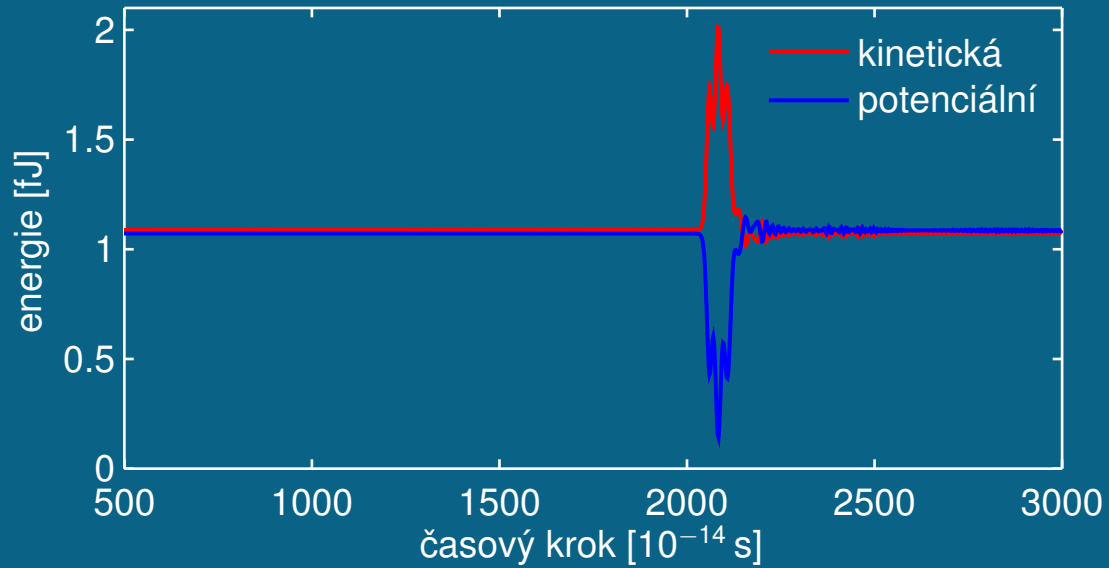
## Tvar, šířka a amplituda budícího pulzu

Tvar budícího pulzu	Šířka pulzu [fs]	Aplikované zatížení		
		úroveň 1 0,675 GPa	úroveň 2 2,700 GPa	úroveň 3 10,800 GPa
	200	✓	✓	✓ ①
	400		✓	✓* ②
	800		✓ ③	
	1 600		✓* ④	
	400			✓
	800			✓
	1600		✓	✓* ⑤

## Umístění vybraných atomů pro výstupní soubory



## Vliv přítomnosti trhliny na energii celého systému.



bez trhliny

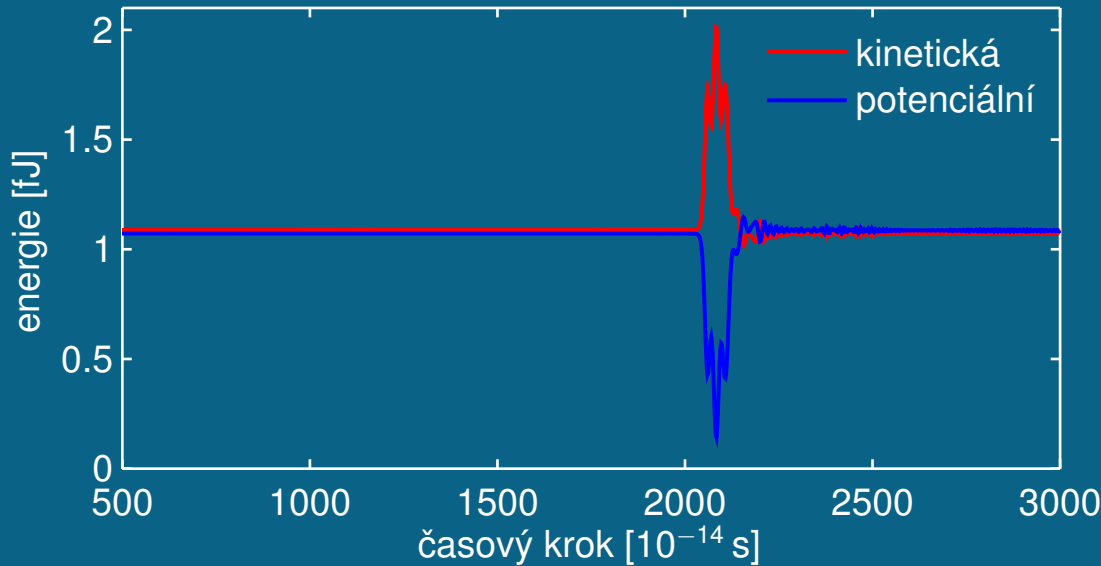


800 fs

2,7 GPa

(test ③)

# Vliv přítomnosti trhliny na energii celého systému.



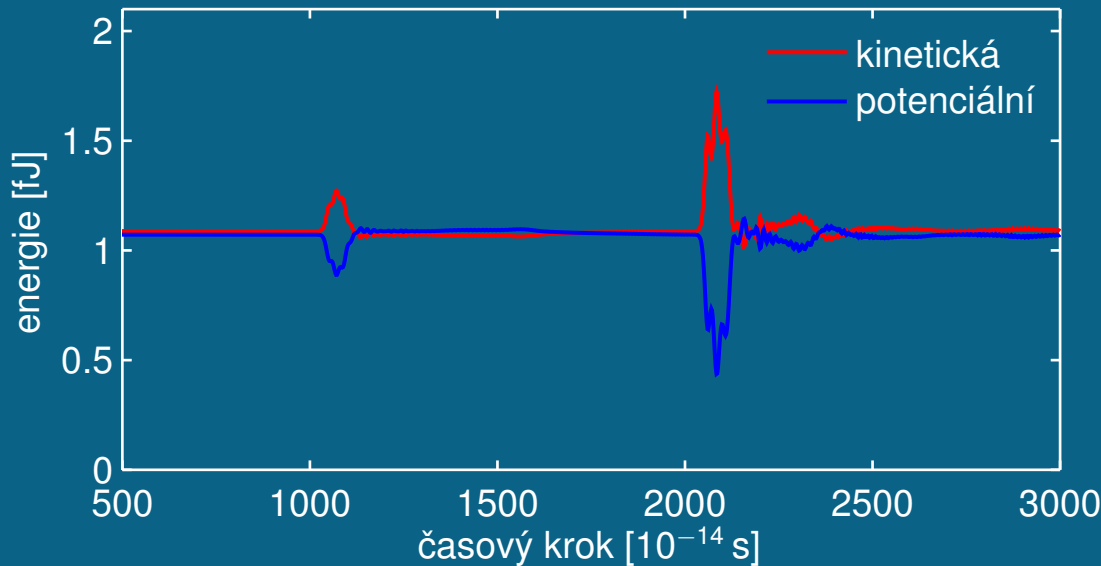
bez trhliny



800 fs

2,7 GPa

(test ③)



s trhlinou

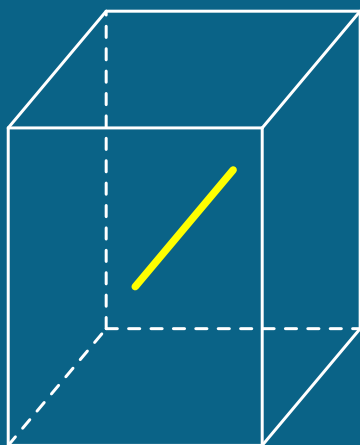


800 fs

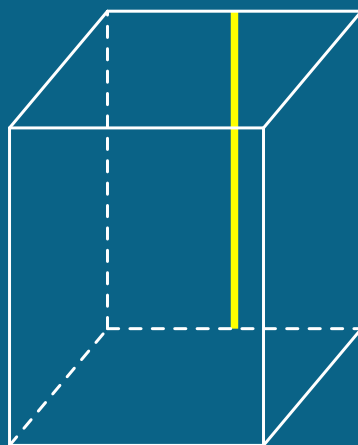
2,7 GPa

(test ③)

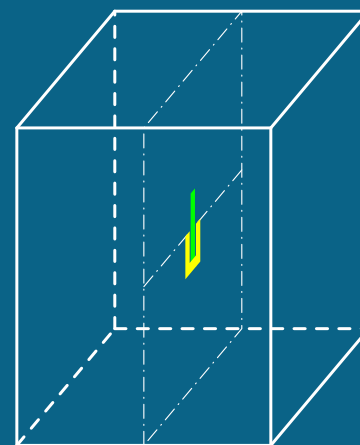
## Umístění vybraných atomů



„osa y“



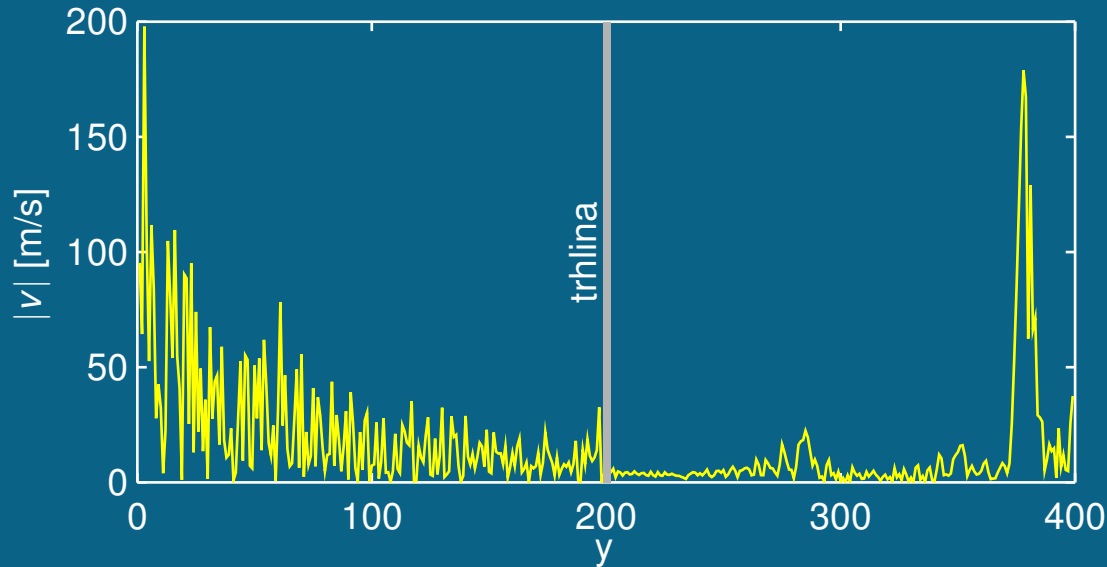
„osa z“



„okolí trhliny“



## Vliv šířky budícího pulzu na šíření napěťové vlny deskou.



s trhlinou

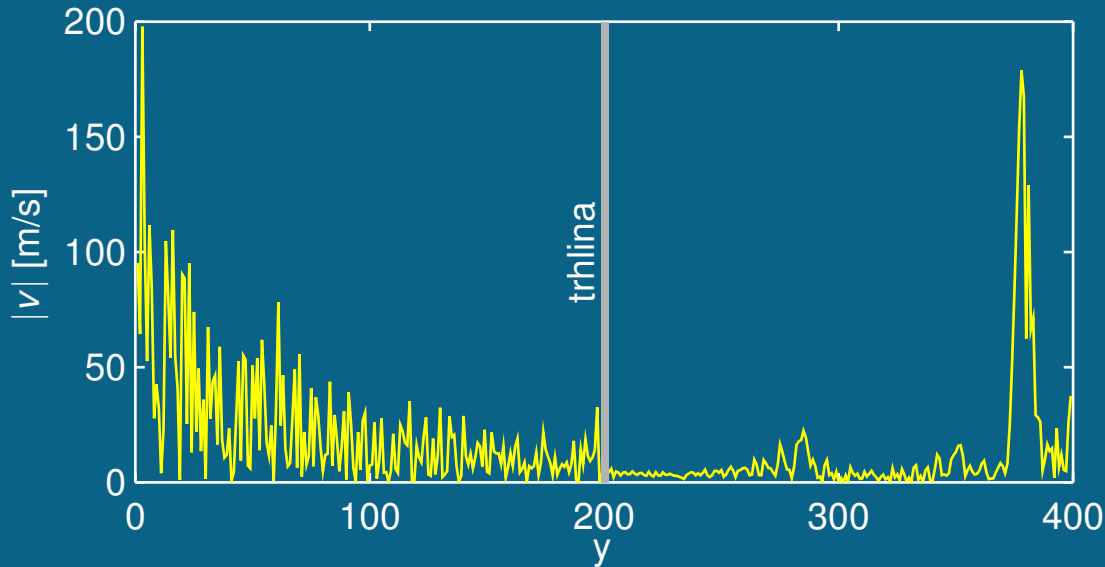


200 fs

10,8 GPa

(test ①)

# Vliv šířky budícího pulzu na šíření napěťové vlny deskou.



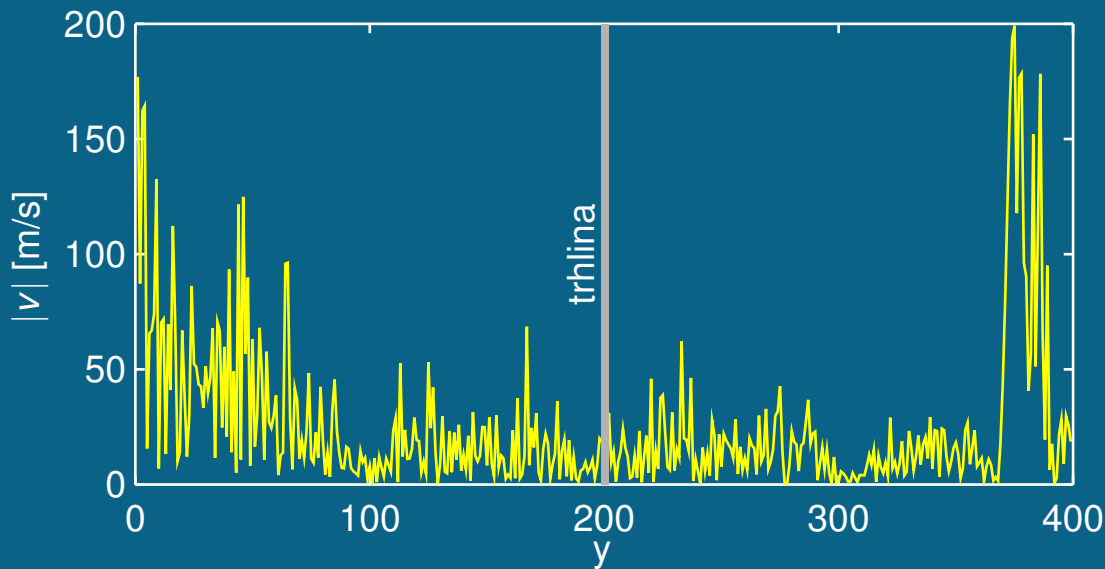
s trhlinou



200 fs

10,8 GPa

(test ①)



s trhlinou

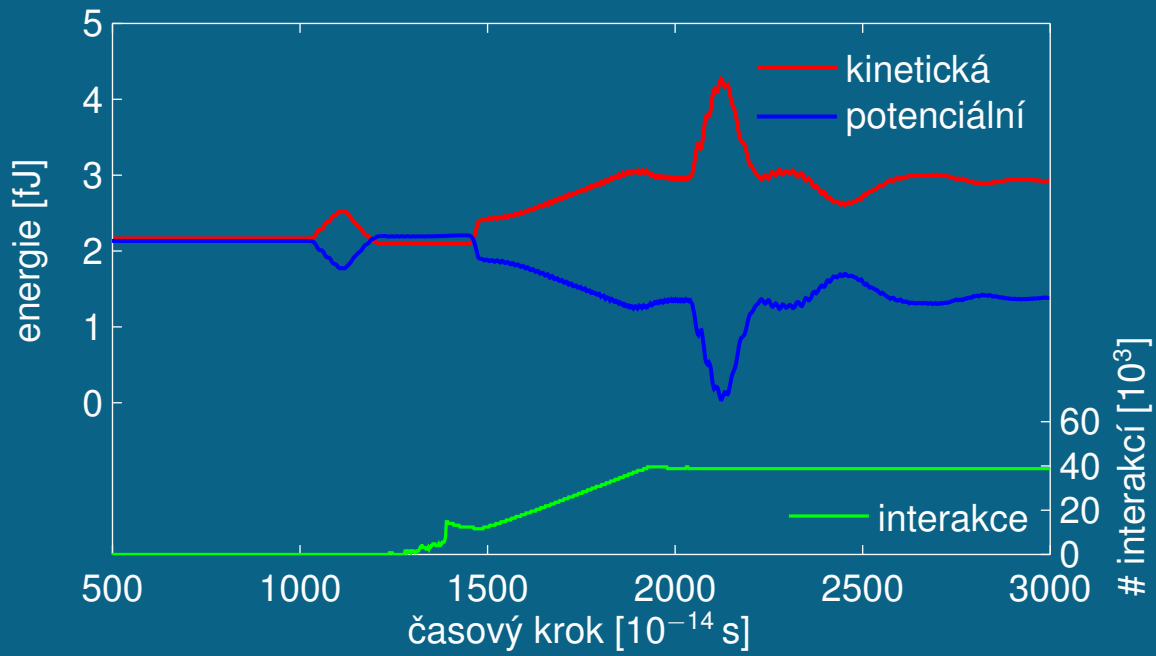


400 fs

10,8 GPa

(test ②)

### Test ④



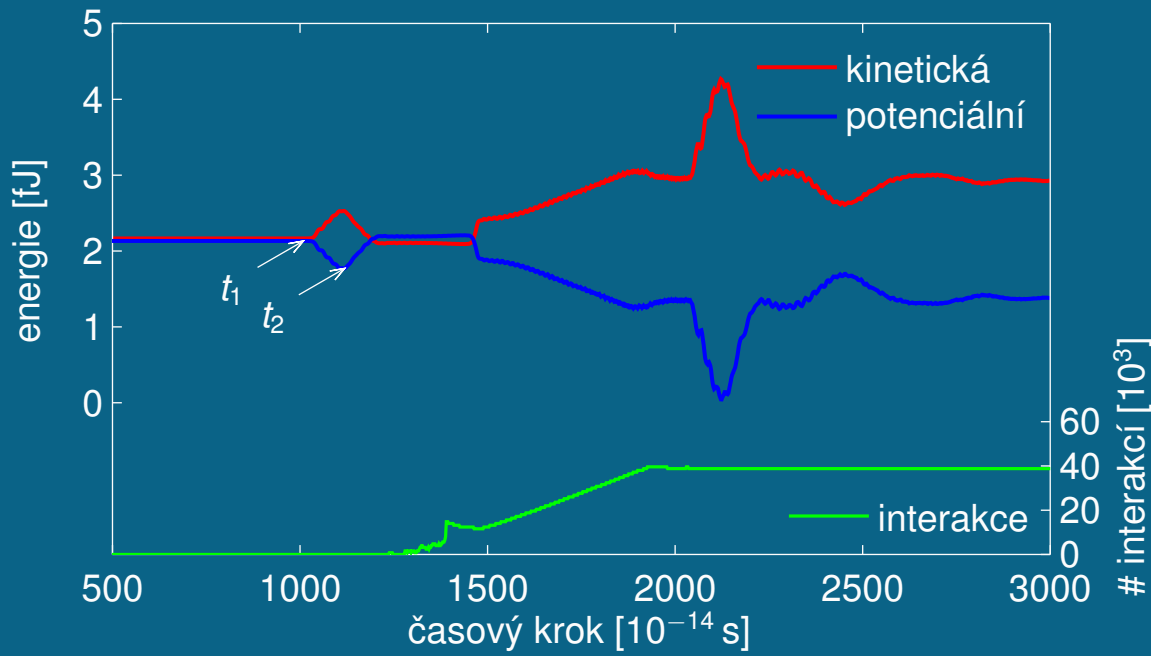
s trhlinou



1600 fs

2,7 GPa

### Test ④

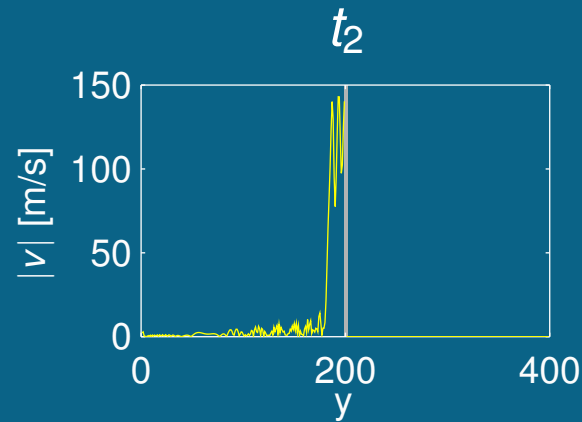
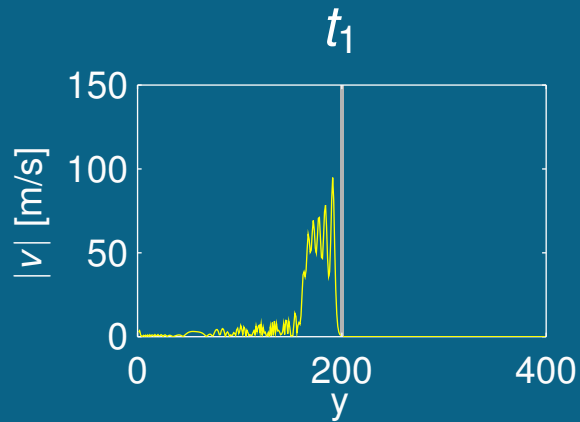


s trhlinou

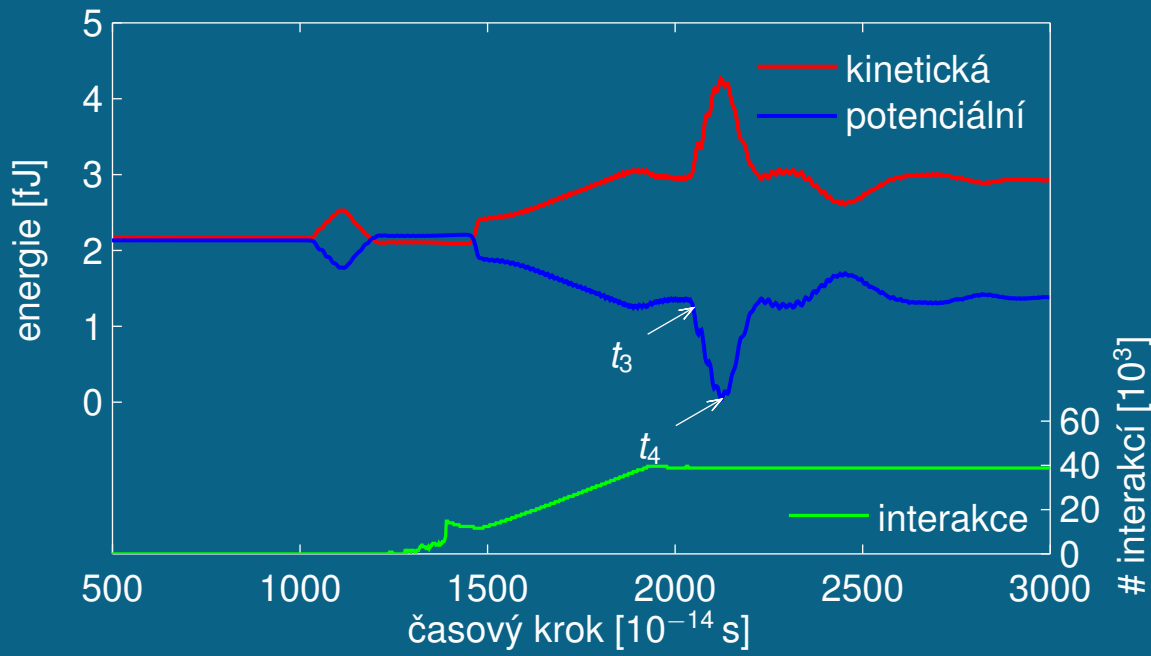


1600 fs

2,7 GPa



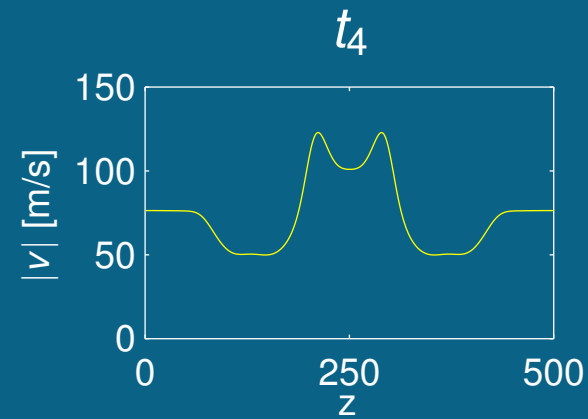
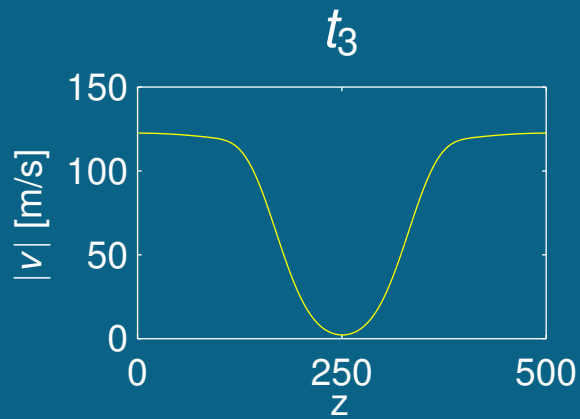
### Test ④



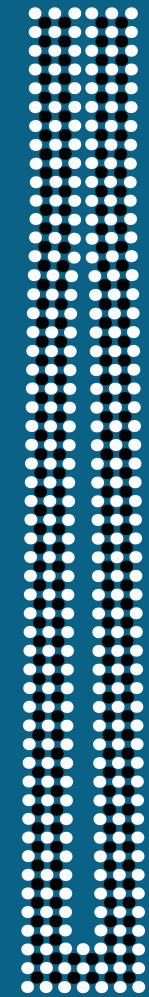
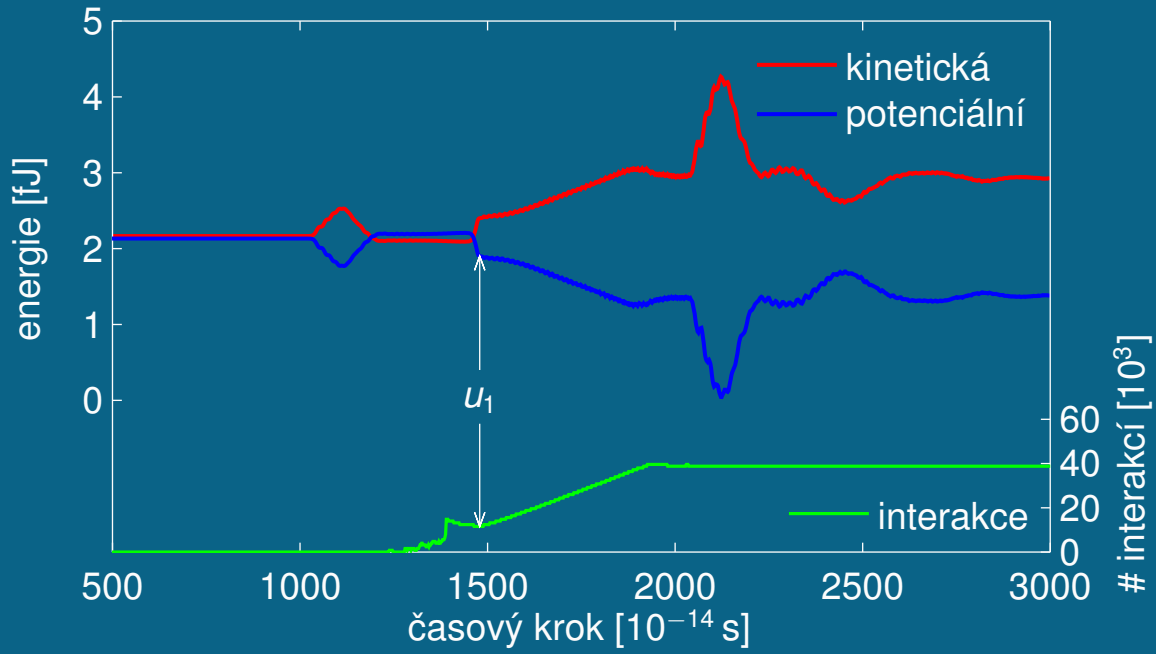
s trhlinou

1600 fs

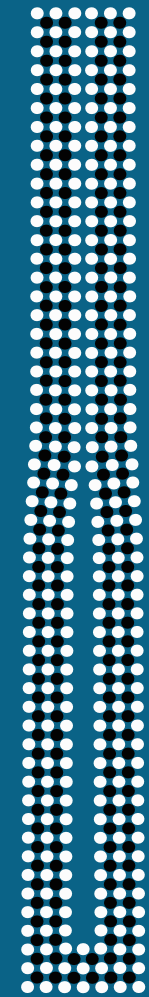
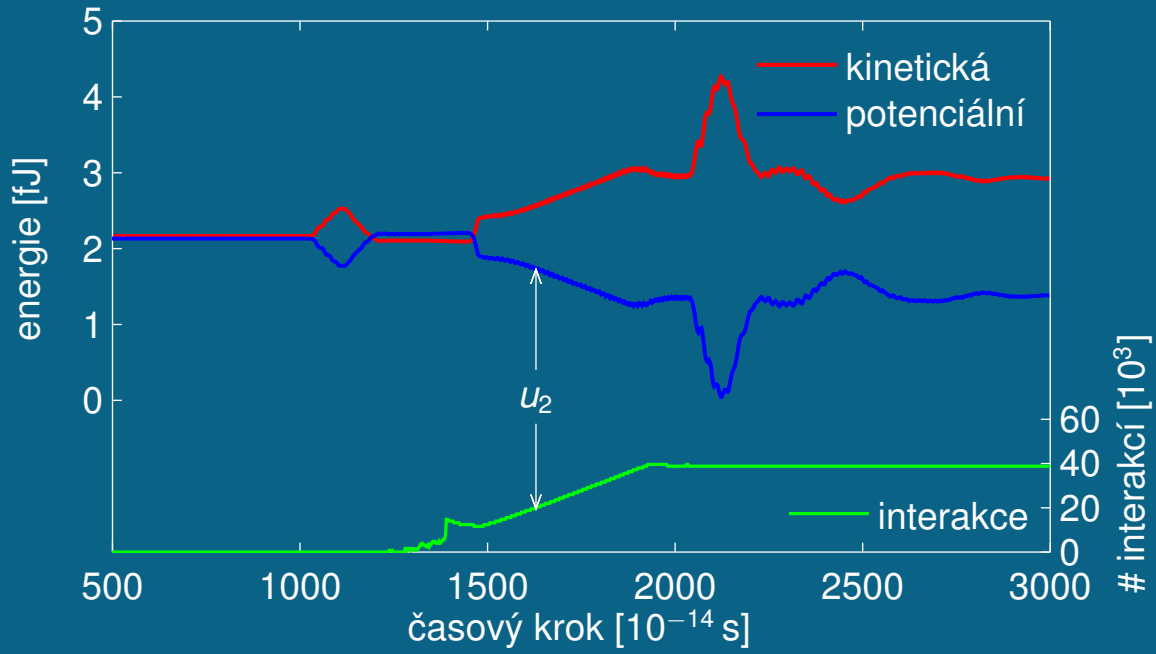
2,7 GPa



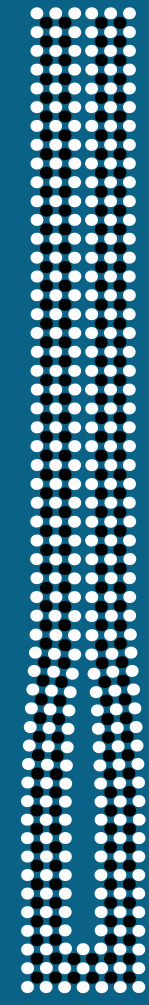
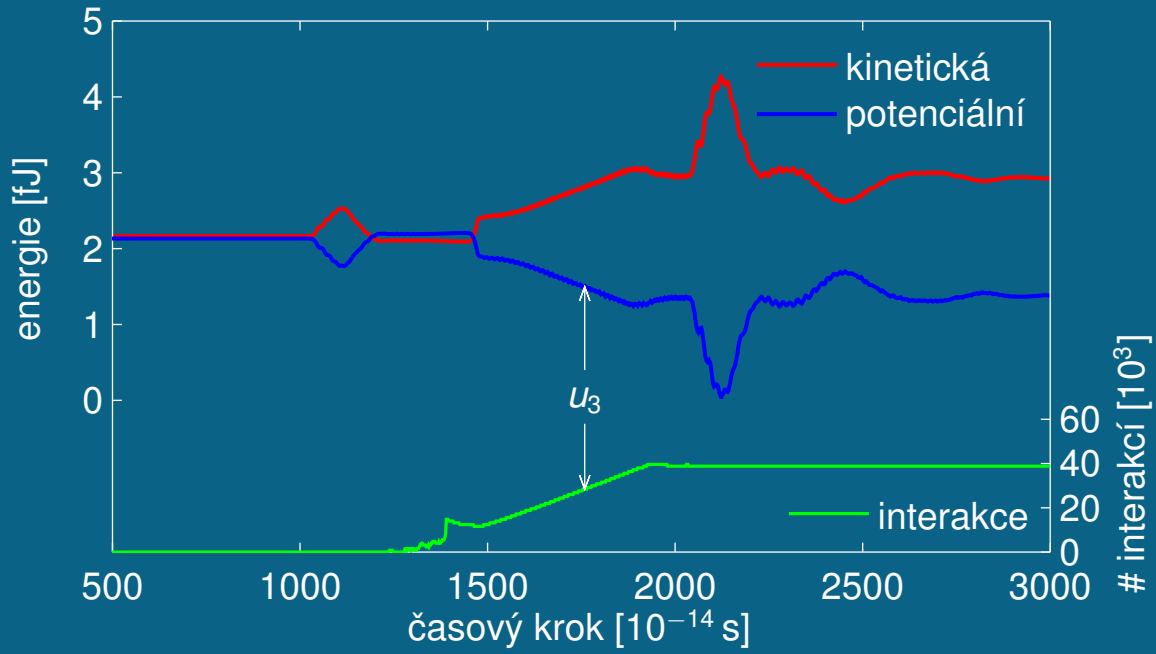
### Test ④



# Test ④

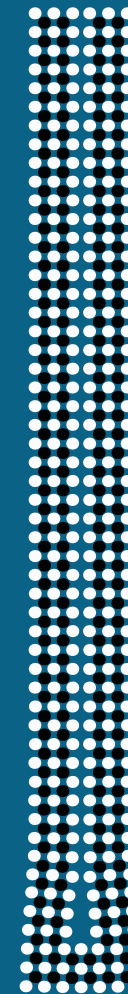
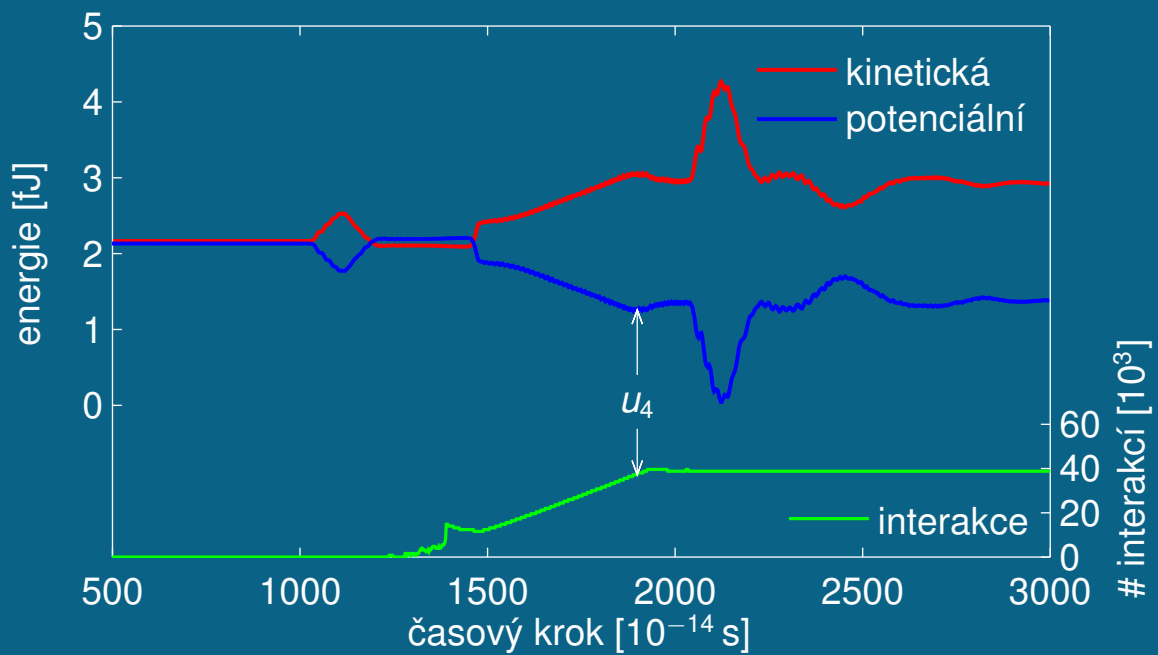


# Test ④

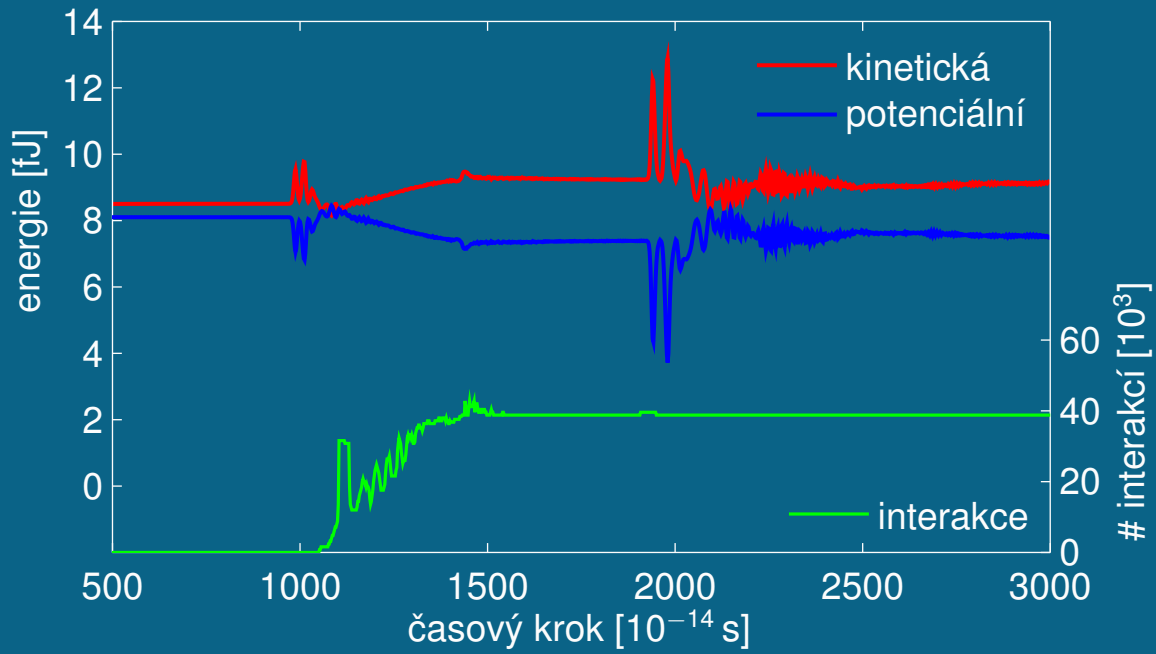




### Test ④



## Test ②



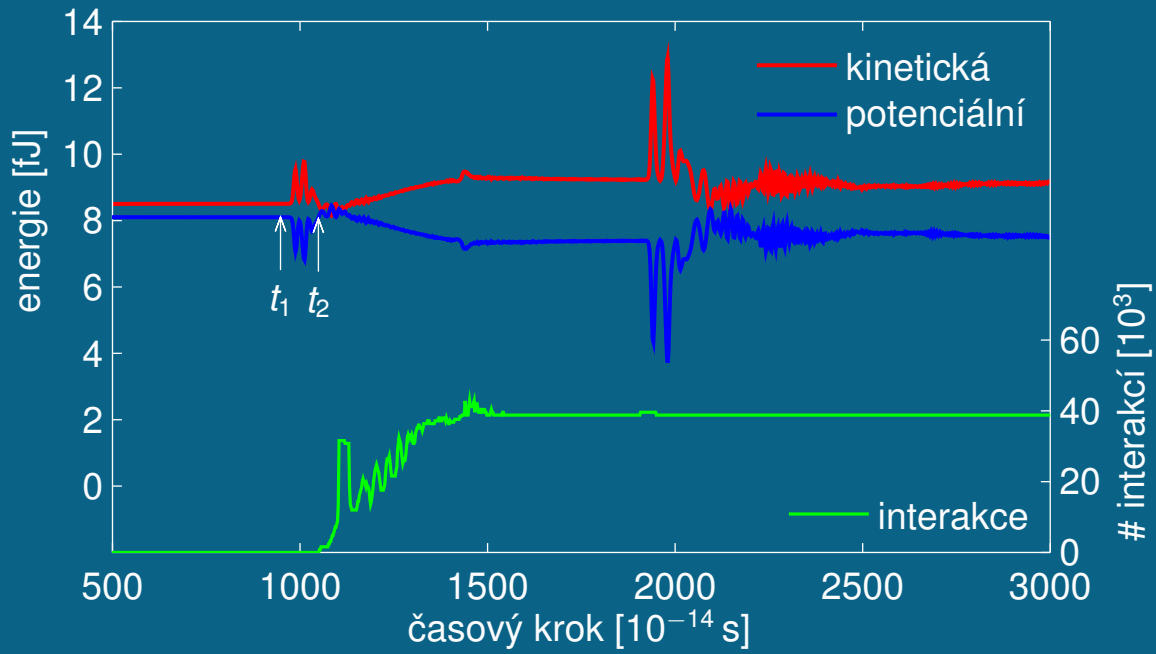
s trhlinou



400 fs

10,8 GPa

## Test ②

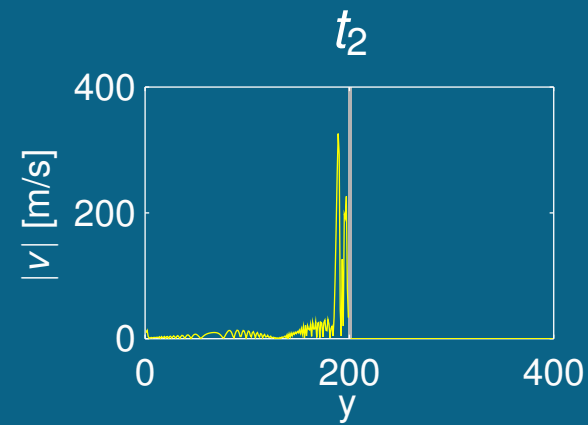
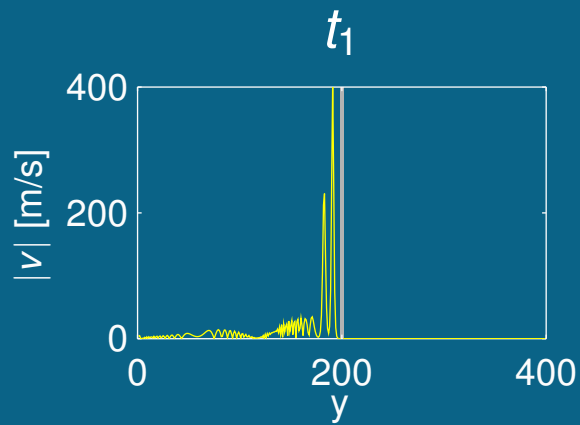


s trhlinou

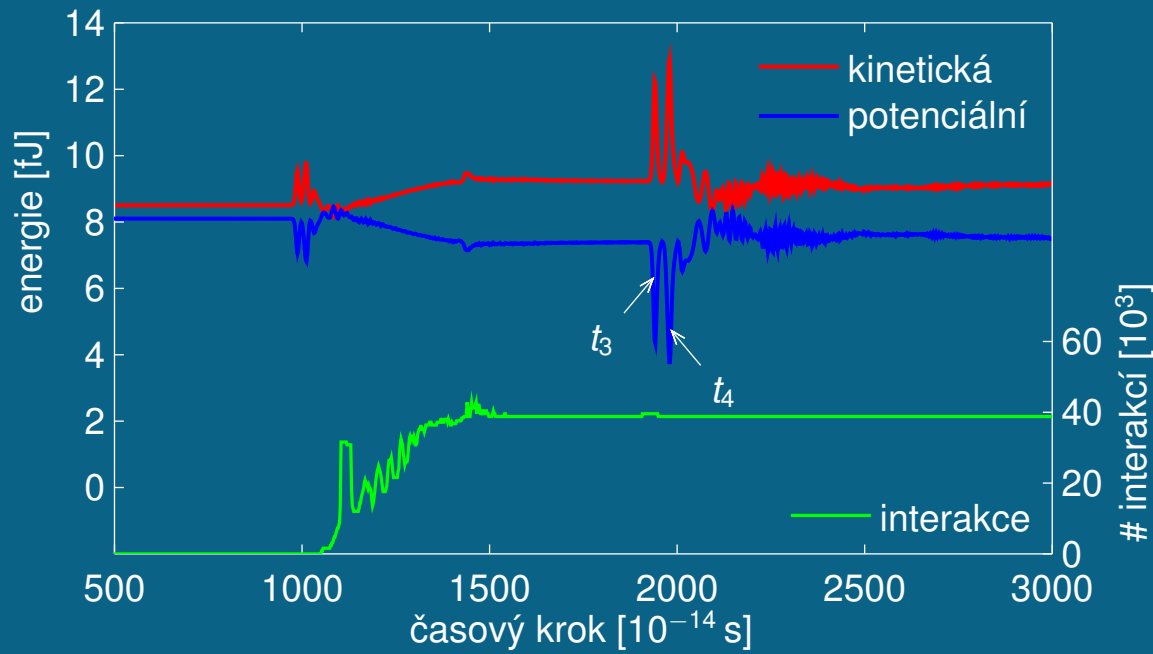


400 fs

10,8 GPa



## Test ②

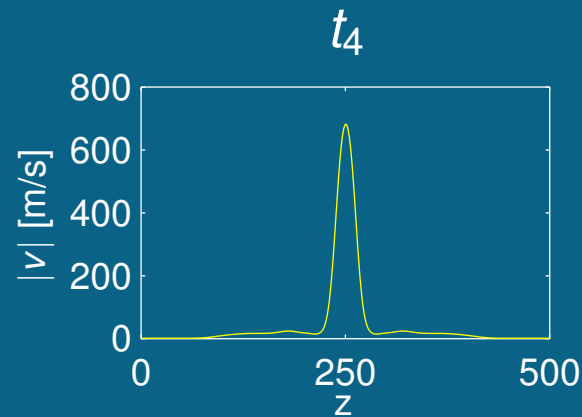
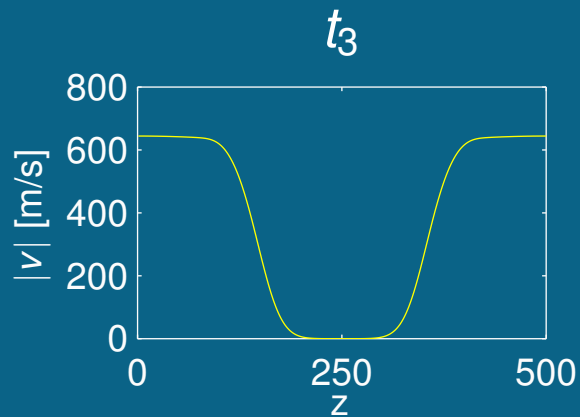


s trhlinou

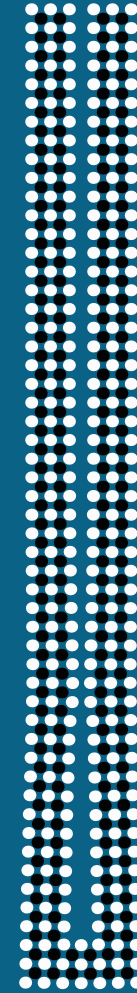
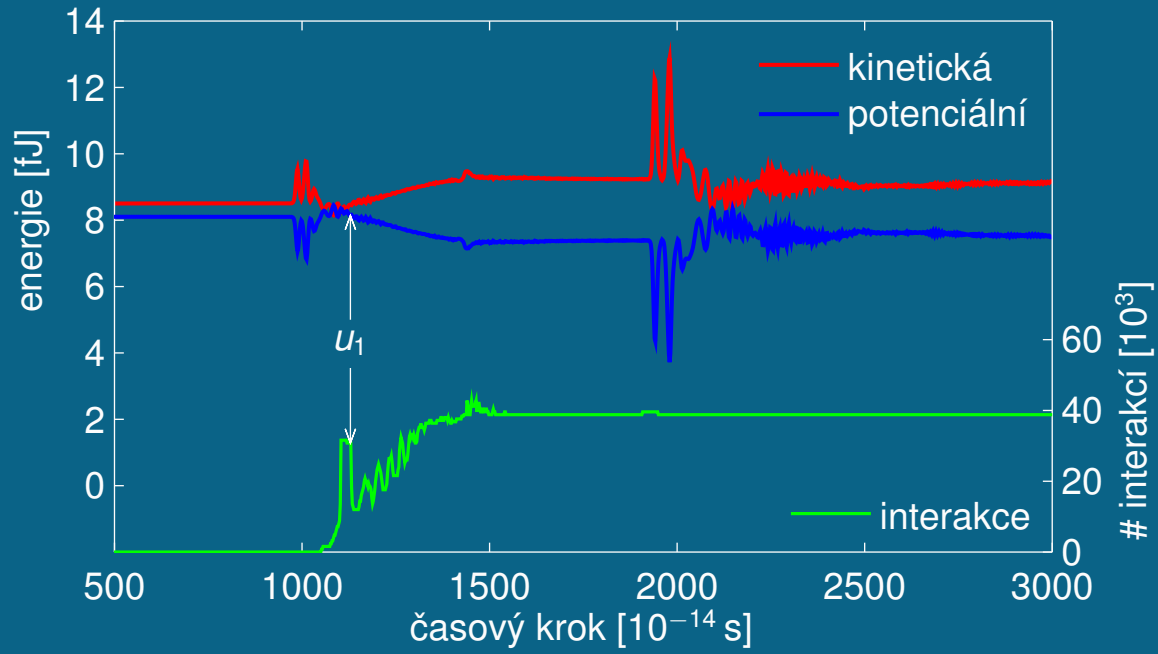


400 fs

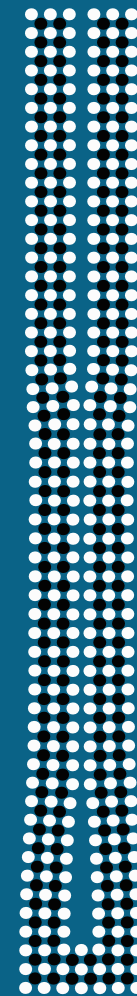
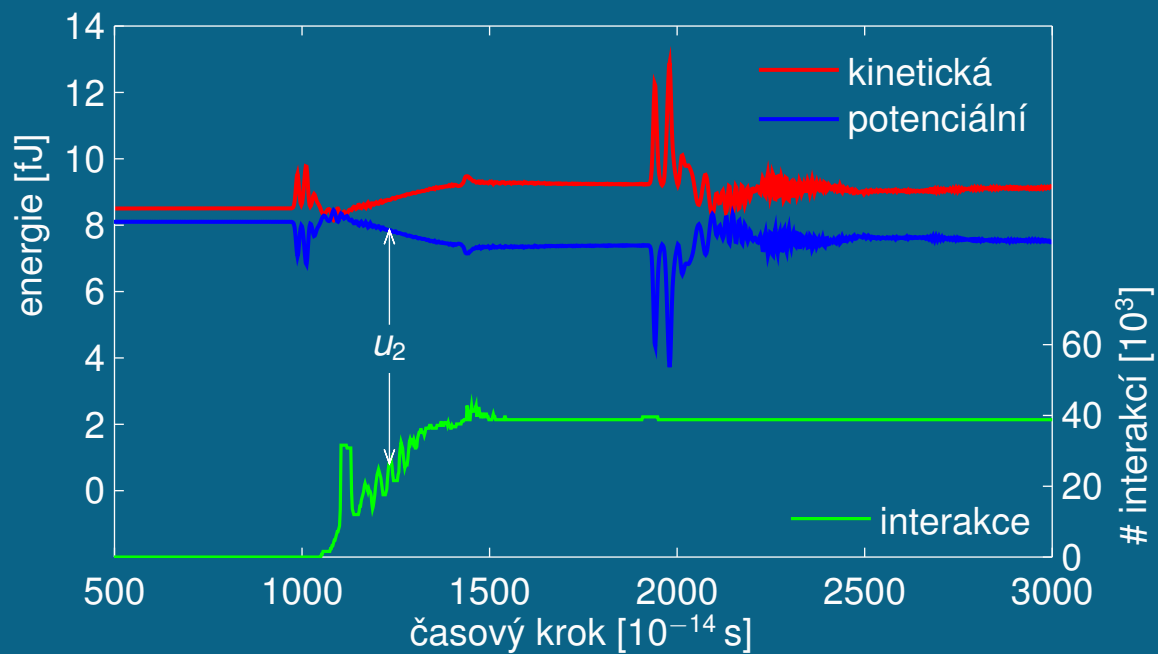
10,8 GPa



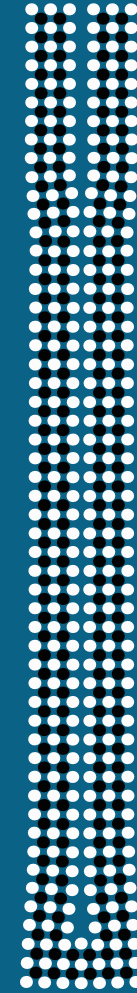
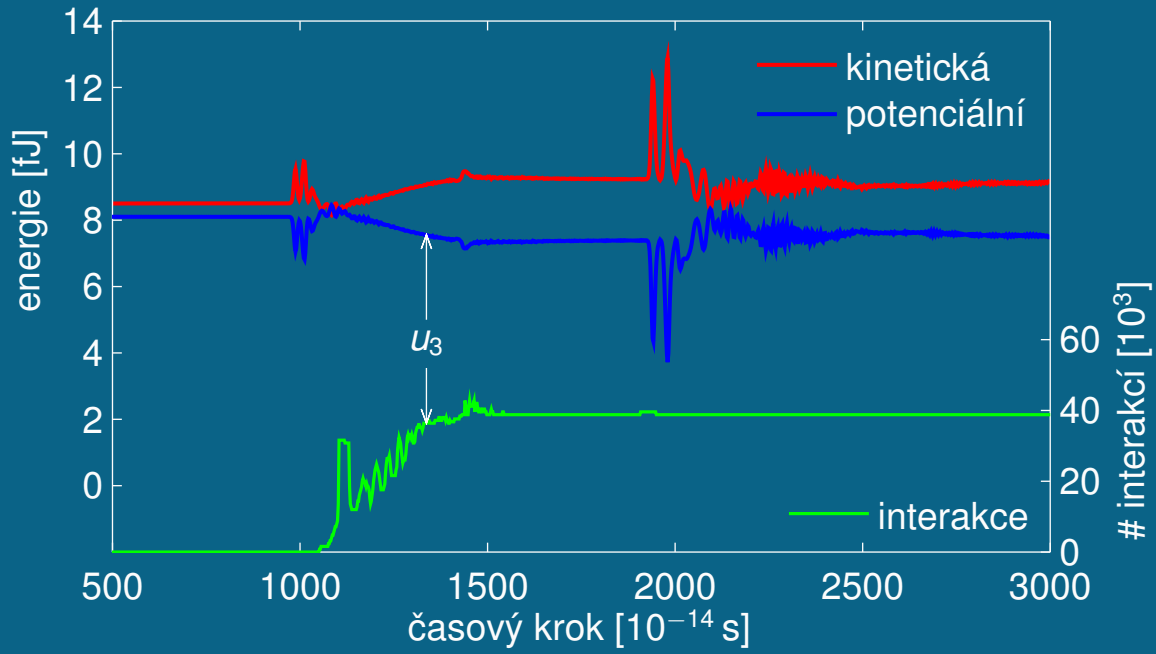
## Test ②



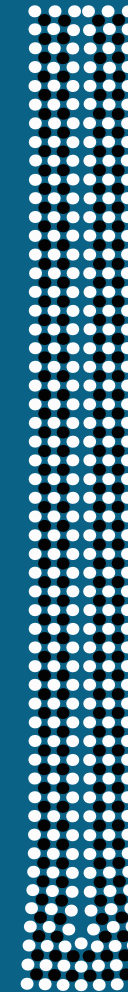
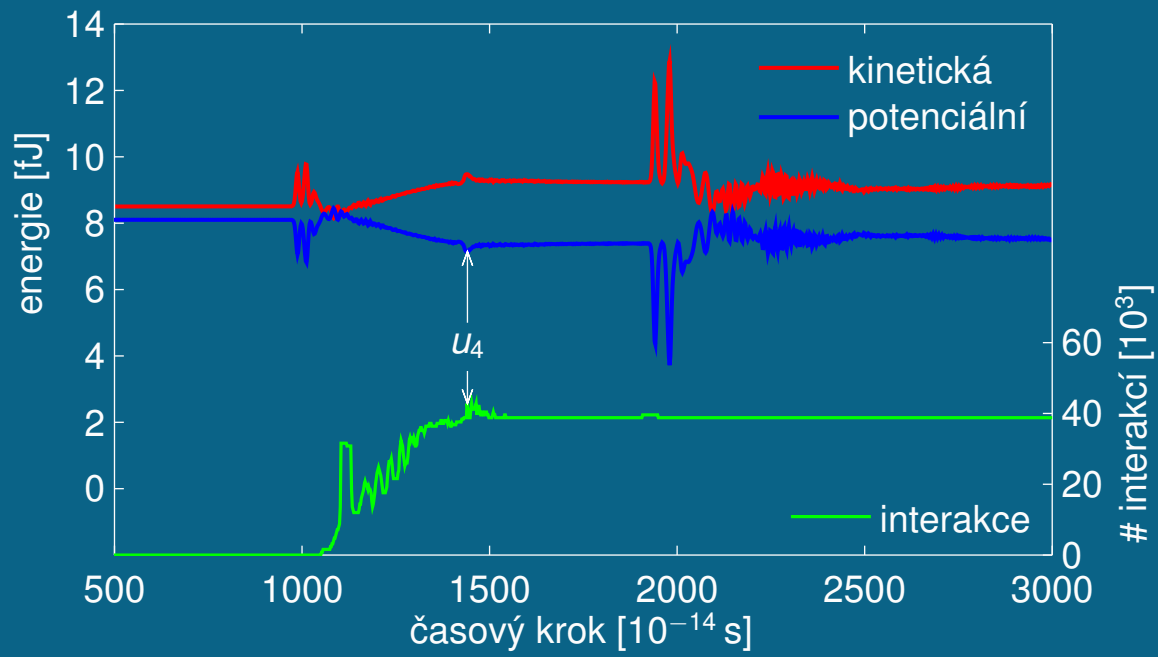
## Test ②



## Test ②

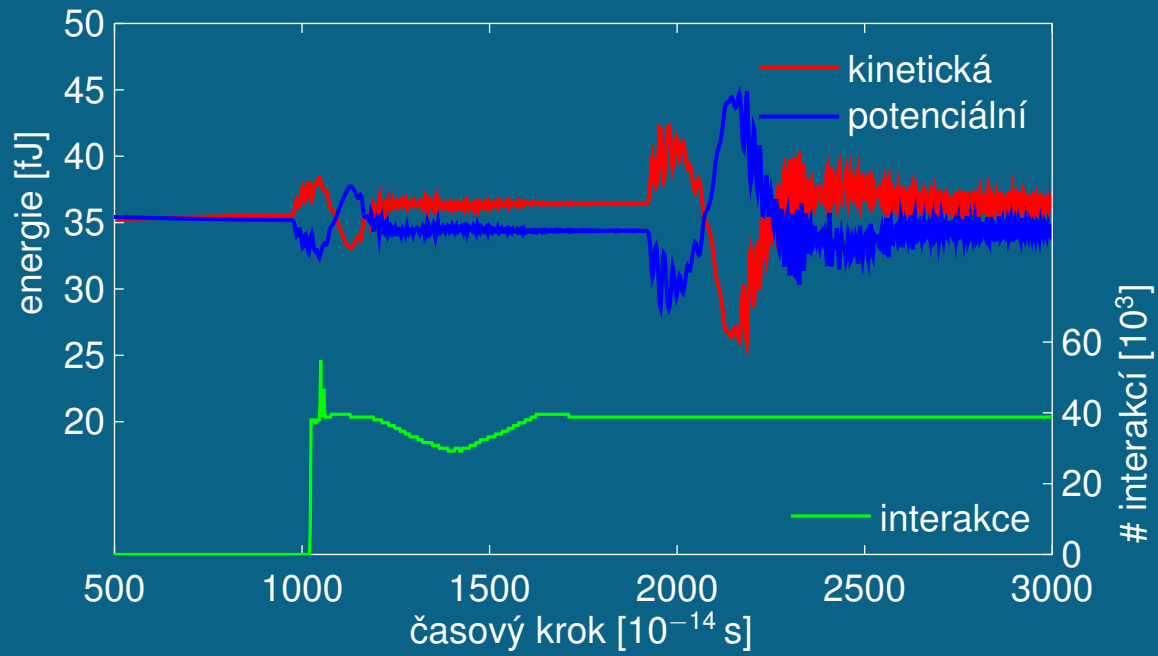


## Test ②





### Test ⑤

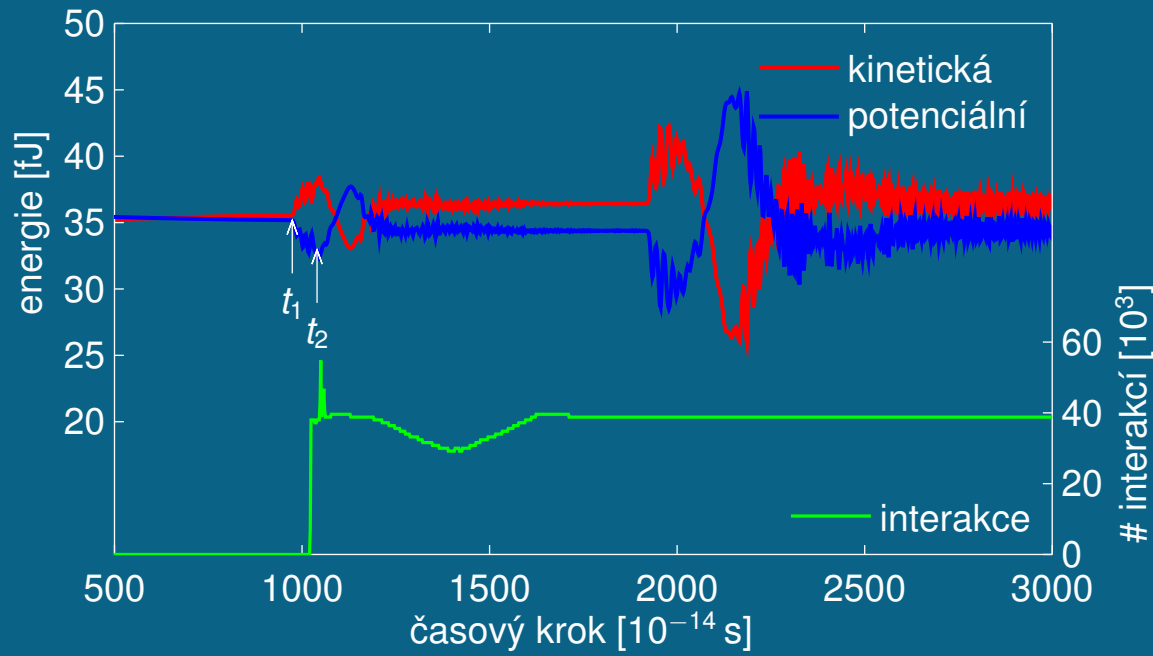


s trhlinou

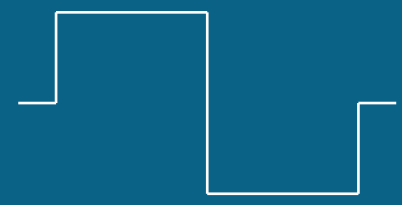


1600 fs  
10,8 GPa

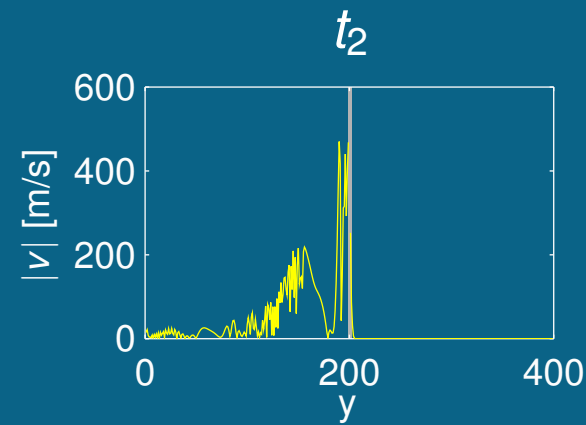
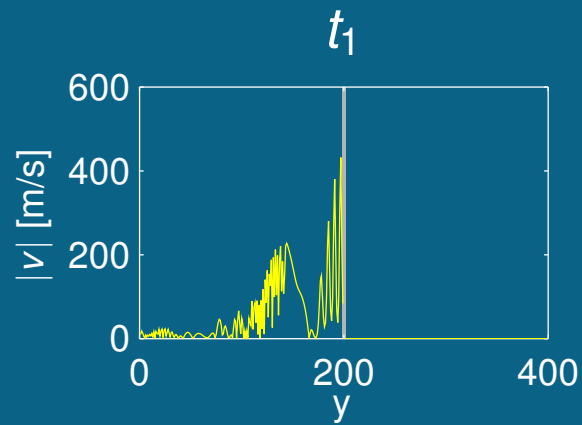
# Test ⑤



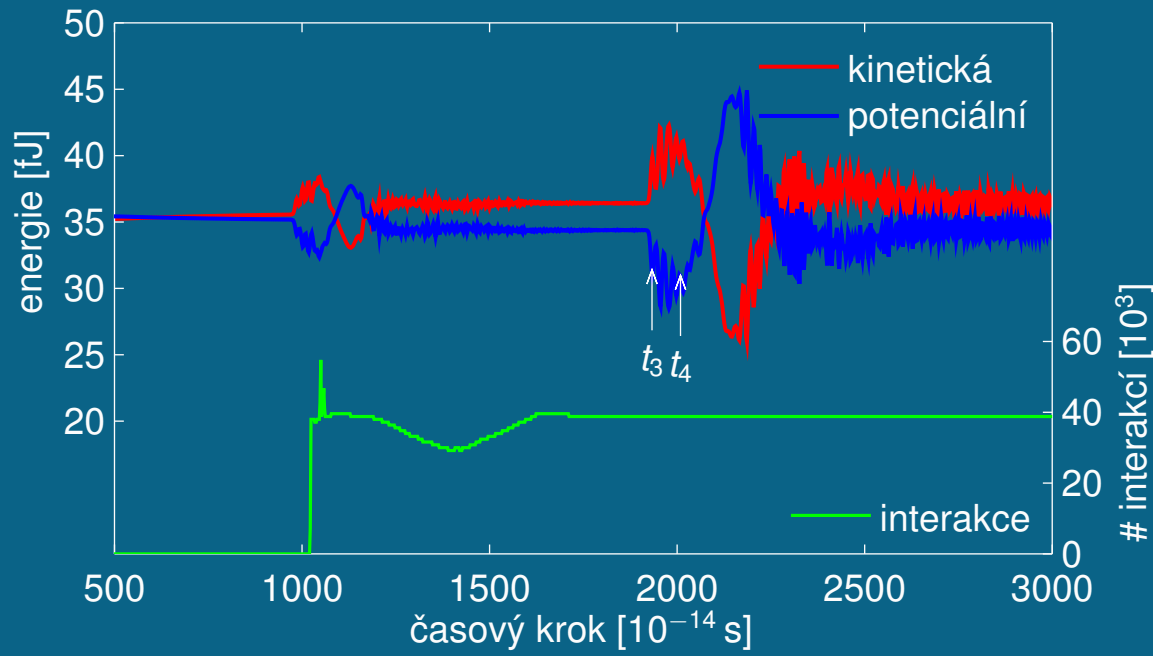
s trhlinou



1600 fs  
10,8 GPa



### Test ⑤

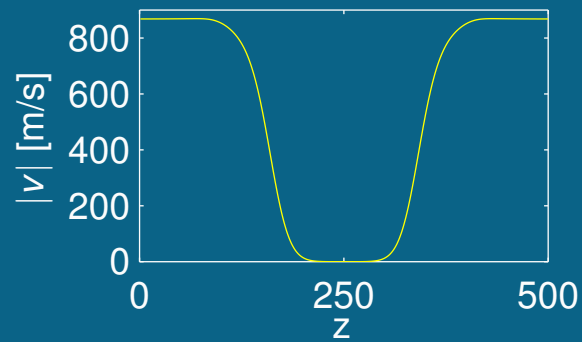


s trhlinou

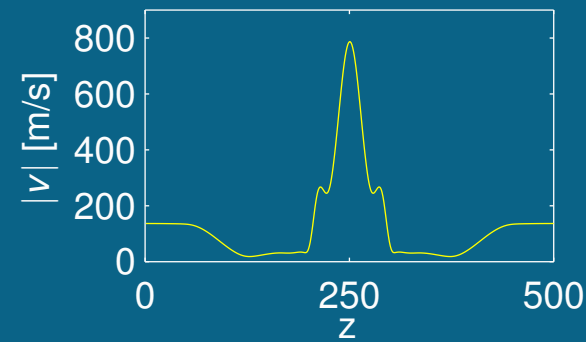


1600 fs  
10,8 GPa

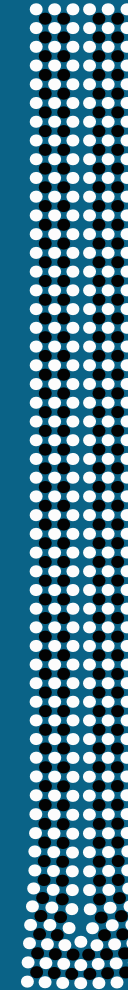
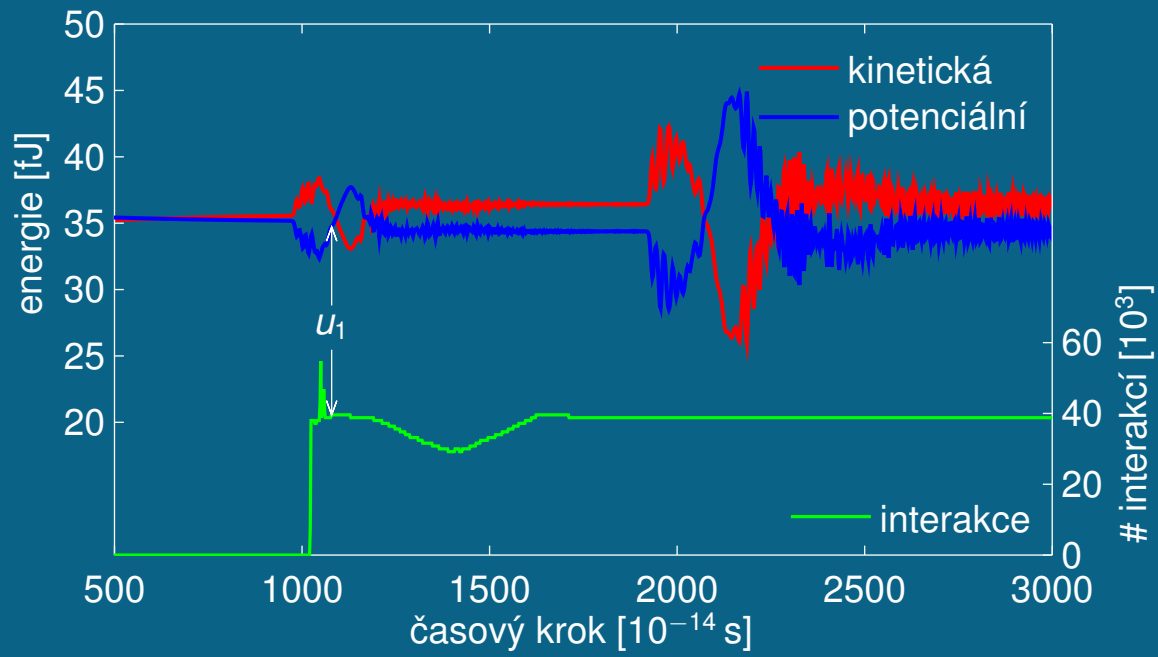
$t_3$



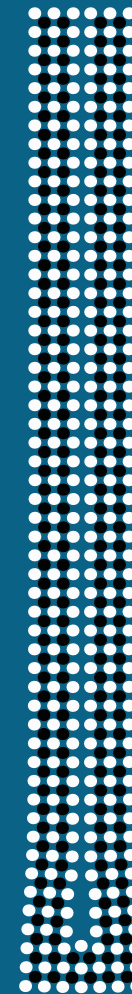
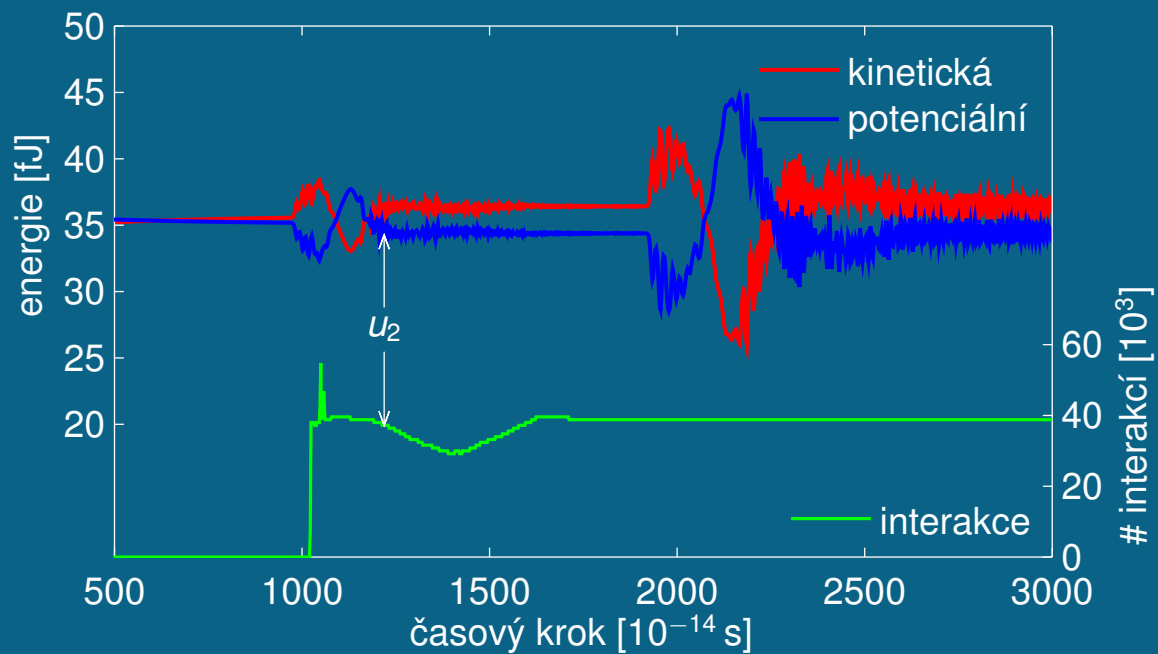
$t_4$



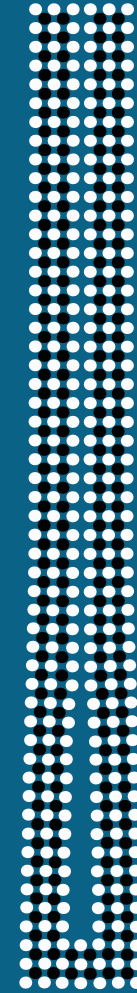
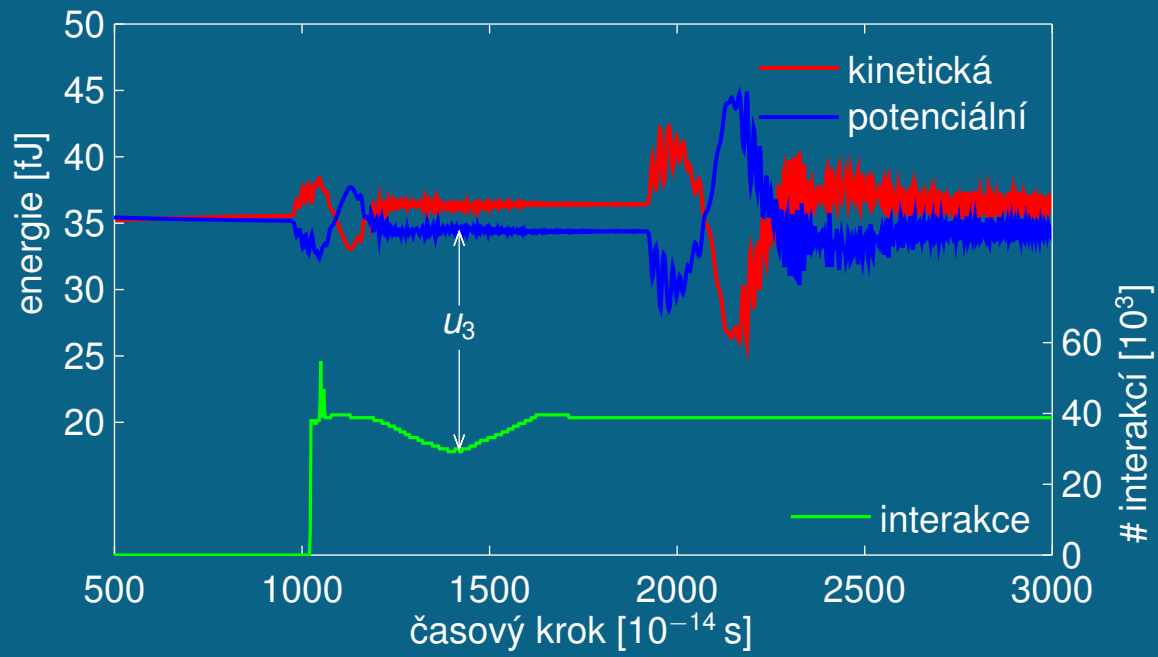
## Test ⑤



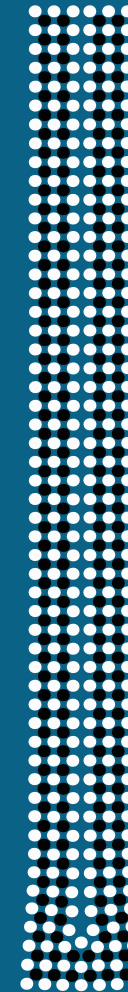
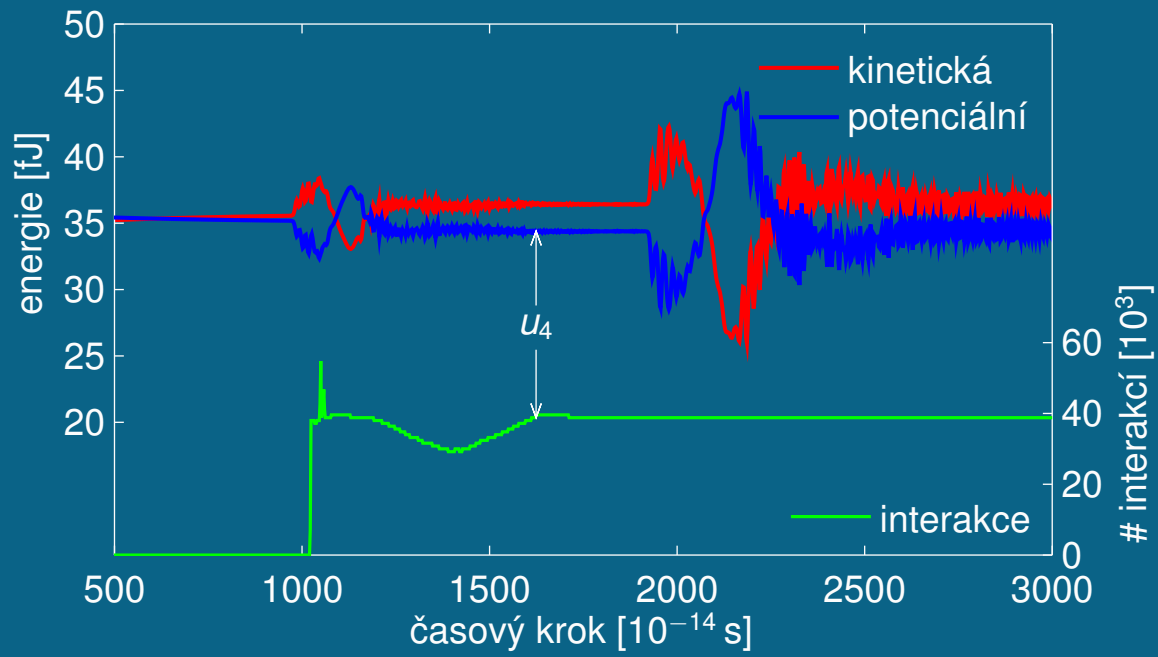
## Test ⑤



## Test ⑤



## Test ⑤



## Závěr

Cílem našeho příspěvku bylo prezentovat rozsáhlé simulační výpočty založené na metodách molekulární dynamiky, jejichž použití se neobejde bez masivního nasazení paralelních programovacích technik.

Zároveň jsme chtěli ukázat složitost šíření napěťových vln krystalem železa s vloženou trhlinou v závislosti na tvaru, šířce a amplitudě budícího pulzu. Variabilita chování jednotlivých atomů v okolí trhliny a případného následného vzniku lokálních atomárních interakcí napříč trhlinou je dle našeho názoru poměrně překvapivá.

Domníváme se, že náš výzkum by mohl v konečném důsledku přinést užitečné a nové nano-informace pro nedestruktivní testování.

Pokud je nám známo, námi prezentované výsledky nebyly dosud pro takto rozsáhlé simulace nikde publikovány.



# OBSAH

Úvod

Geometrie použitých vzorků, umístění trhliny, typ zatížení

Tvar, šířka a amplituda budícího pulzu

Umístění vybraných atomů pro výstupní soubory

Vliv přítomnosti trhliny na energii celého systému

Umístění vybraných atomů

Vliv šířky budícího pulzu na šíření napěťové vlny deskou

Test ④

Test ②

Test ⑤

Závěr