

המחלקה להנדסת תוכנה
פרויקט גמר – תשפ"ב
סימולציה של ניווד דיסלוקציות
Simulation of dislocation mobility

מאת

בינה מאיר | 315249052

טובה גרינבלט | 315320853

תאריך: 15/12/2021



תאריך:

אישור:

אישור:

מנחה אקדמי: דר' אלי אנגלברג

רכז הפרויקטים: דר' אסף שפנייר

מערכות ניהול הפרויקט:

#	מערכת	מיקום
1	מאגר קוד	https://github.com/TovaGreenblatt/Final-Project-Dislocation
2	יומן	https://calendar.google.com/calendar/u/0?cid=djNlMnVrdms4dnV0anNqZW4zNjIwZ2ozaThAZ3JvdXAuY2FsZW5kYXluZ29vZ2xlLmNvbQ

מידע נוסף (מחק את המיותר)

סוג הפרויקט	מחקרי ממרצה במכללה
פרויקט מח"ר	כן
פרויקט ממשיך	זה פרויקט חדש
פרויקט זוגי:	כן

מבוא

מבנה גבישי הוא הסידור של האטומים בגביש. המבנה הגבישי מורכב מתא יחידה, שהוא מקבץ בסיסי של אטומים בעל מבנה פנימי התלוי בחומר, וחוזר באופן מחזורי בסידור תלת ממדי המרכיב סריג. המרחקים שבין תאי היחידה בכיוונים השונים הם הוקטורים של הסריג. מבנה הגביש והסימטריה שבו קובעים תכונות חשובות של הגביש. אך לגבישים טבעיים יש פגמים ואי-סדירויות (לדוגמא דיסלוקציות). פגמים אלה קובעים עד כמה יהיו דומות התכונות החשמליות והמכניות של החומר לתכונותיו של הגביש התאורטי.

מאיץ LHC (Large Hadron Collider) הוא מאיץ החלקיקים הגדול בעולם, הממוקם במרכז המחקר CERN (המרכז הגדול בעולם לחקר חלקיקים) על גבול שווייץ-צרפת.

CLIC (Compact Linear Collider) הוא פרויקט של CERN, שבו מפתחים את מאיץ החלקיקים של הדור הבא. במאיץ החלקיקים ב-CERN מנסים להתמודד עם כך שהמתכות, מהן עשוי המאיץ, מתפרקות בשדות חשמליים גבוהים. במחקר קודם, נבנה מודל סטטיסטי, שלפיו הגורם להתפרקות הוא ניווד של דיסלוקציות בתוך המתכת.

בפרויקט זה אנו נעסוק בחקירת דיסלוקציות בגבישי נחושת (סריג: face-centered cubic) כדי לחקור את מידת המאמץ הדרושה כדי לנייד דיסלוקציות. הבנה טובה של תהליך ניווד זה יתרום למאמץ הקולקטיבי לצמצם את ההתפרקות ב-CERN, ויאפשר את המשך פיתוח הדור הבא של מאיצי החלקיקים.

דרישות ואפיון הבעיה

דרישות ואפיון הבעיה:

ברצוננו ליצור סימולציה של מתכת תחת מאמץ חשמלי, על מנת להבין את השפעת המאמץ על ניווד של דיסלוקציות.

הבעיה מבחינת הנדסת תוכנה:

בניית תכנה שמאפשרת ליצור סריג בכל גודל וכן מאפשרת ליצור דיסלוקציות שונות. יש לוודא שהסריג נבנה כראוי.

תיאור הפתרון

כתיבת קוד שיבנה גביש מושלם בגודל הרצוי, וכן דיסלוקציות שונות לפי תכונות שיתקבלו כקלט.

הקוד יהיה מבוסס על טרנספורמציה של מערכת הצירים הקרטזית התלת ממדית ובניית גביש עם דיסלוקציות במערכת הצירים החדשה.

הפיתוח יעשה בשפת פיתון ונשתמש בספריית numpy, וכן נשתמש בתכנה ovito לויזואליזציה של הגביש שנבנה.

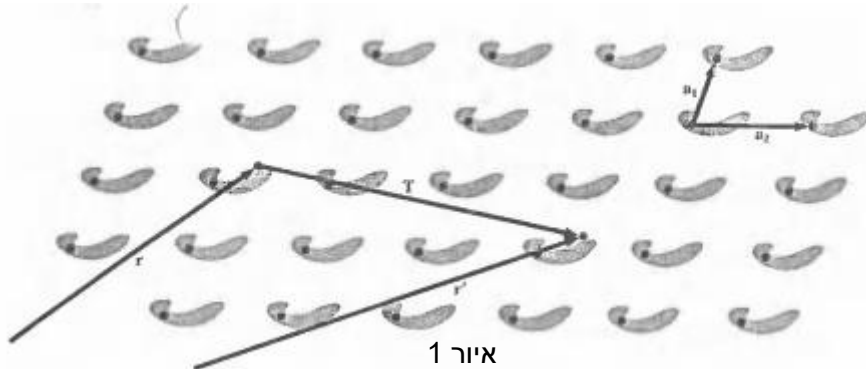
סקירת עבודות דומות בספרות והשוואה

בשנים האחרונות ישנם ניסיונות לשדרג את מאיץ החלקיקים בשוויץ על מנת להגיע לאנרגיות התנגשות של שני חלקיקי אטום – אלקטרון ופוזיטרון גבוהות יותר מבעבר, בכדי לגרום לפירוקם.

על מנת להגיע להתנגשות נכונה של חלקיקים זעירים אלו, יש צורך להאיץ אותם במהירות גדולה ביותר. מהירות זו מתקבלת על ידי הפעלת שדות חשמליים במאיץ החלקיקים. כאשר ניסו להאיץ את החלקיקים במהירות הנדרשת, נגרמה התפרקות של המתכת ממנה עשוי מאיץ החלקיקים. התפרקות זו מונעת את המשך פיתוח המאיץ. המטרה ב-CLIC היא להפחית את שיעורי ההתפרקות ל- 3×10^{-7} התפרקות לפרט למטר (bpp/m) של אורך המאיץ. בניסויים שבוצעו התגלה כי יש קשר בין כמות ההתפרקות לבין המבנה הגבישי של המתכות ועיבודן. זה מצביע על כך שניוד דיסלוקציות הוא בין הגורמים העיקריים להתפרקות [1].

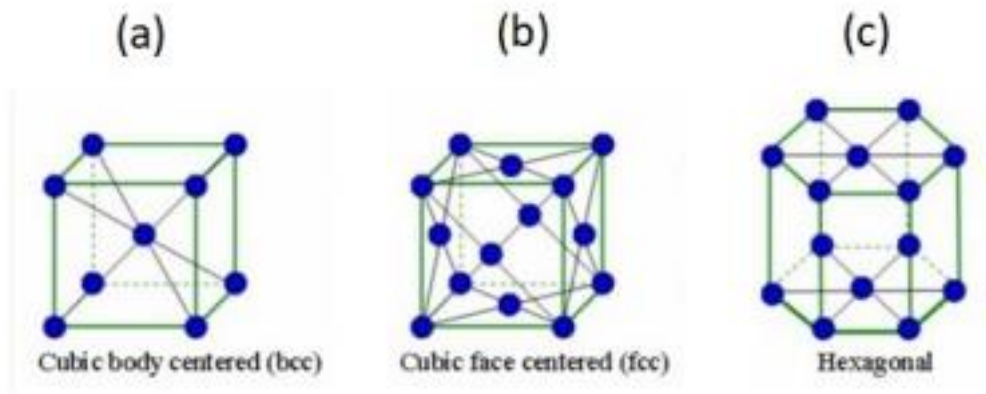
כעת נפרט על מבנה הגביש והדיסלוקציות:

אטומים בגביש מאורגנים במבנים מחזוריים, המוגדרים על ידי וקטורי ההעתק $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ שאינם בהכרח אנכים זה לזה. הגביש נראה אותו הדבר במבט מהנקודה \vec{r} או מהנקודה $\vec{r}_0 = \vec{r} + \vec{r}_0$ עבור כל u_1, u_2, u_3 מספרים שלמים. קבוצת הנקודות \vec{r}_0 נקראת נקודות הסריג. בסיס, המורכב מאטום אחד או יותר, מחובר לכל נקודה של הסריג [2].



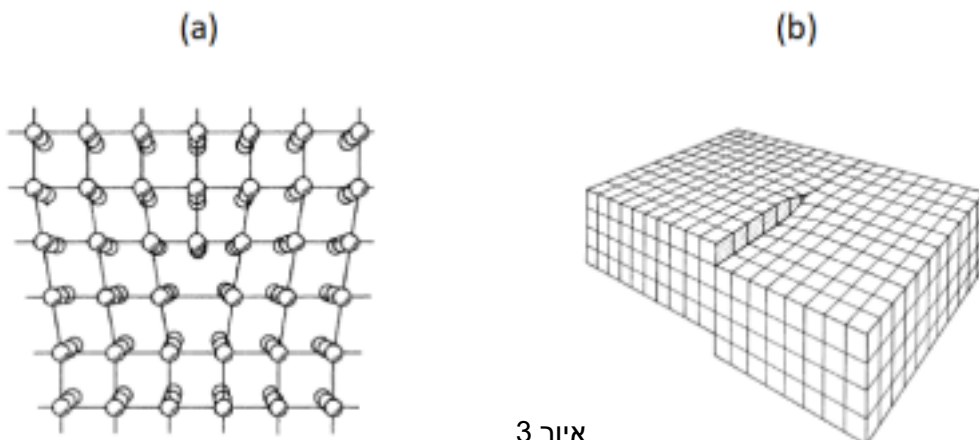
אטומי המתכות מסודרים בדרך כלל כסריג bcc (body center cubic), fcc (face center cubic) או hcp (hexagonal close packed). כפי שהשם שלהם מרמז, וקטורי ההעתק של סריגים אלו הינם באורך שווה ואנכים זה לזה. לזה $a = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3|$. נקרא קבוע הסריג. הבסיס, הכלול בכל תא של סריג bcc, מורכב משני אטומים, בנקודות (0,0,0) ו- $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$ של כל תא (איור

2(a)). וקטורי ההעתק של סריג fcc זהים לאלו של סריג bcc. הבסיס שלו, לעומת זאת, מורכב מארבעה אטומים, במיקומים $(0,0,0)$, $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$, $(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2})$, ו- $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0)$ כפי שמוצג. (איור 2(b)). בסריג hcp $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$ ויש ביניהם זווית של 120° . הוקטור \vec{a}_3 מאונך לשני הוקטורים האחרים, ואורכו הוא בערך פי $\sqrt{8/3}$ מאורכם (איור 2(c)). [2].



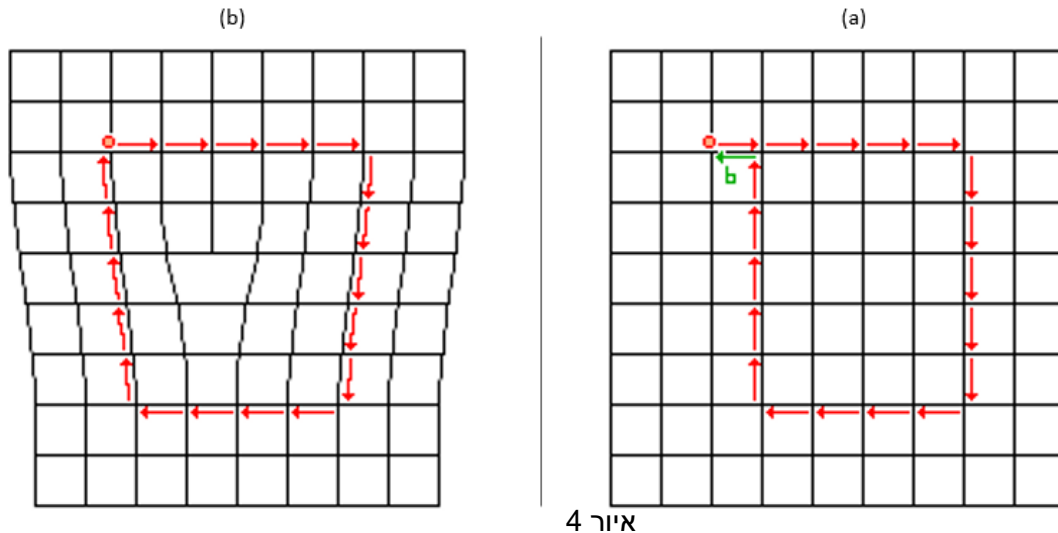
איור 2

ניתן למצוא כמה סוגים של פגמים במבנה הגבישי של מתכות. דיסלוקציות הן סוג אחד כזה, שבו חלק אחד של גביש נעקר, או מחליק, ביחס לחלק אחר. הדיסלוקציה היא הקו בו התחילה החלקה בגביש. בדיסלוקציית קצה (איור 3(a)) קו הדיסלוקציה אנך לוקטור "Burgers" המייצג את גודל וכיוון עיוות הסריג ואילו בדיסלוקציית בורג (איור 3(b)) וקטור זה מקביל לקו הדיסלוקציה [3,4].



איור 3

כדי למצוא את הוקטור Burgers, מציירים מעגל סגור עם כיוון השעון סביב קו הדיסלוקציה בגביש, כמו באיור 4(א), ואז מציירים מעגל עם כיוון השעון עם אותם קישורים מאטום לאטום בגביש מושלם, כמו באיור 4(ב). הוקטור הנדרש לסגירת המעגל בגביש המושלם הוא הוקטור Burgers \vec{b} [3,4].



מאמץ חיצוני מפעיל כוח על הדיסלוקציה שעלול לגרום לה לנוע. עם זאת, דיסלוקציות אינן נעות בחופשיות דרך הגביש המכיל אותן כאשר הן מצטלבות עם דיסלוקציות אחרות, אלא הן נצמדות ומתקבעות. דיסלוקציות מוצמדות יכולות להוביל ליצירת דיסלוקציות חדשות, או שהן יכולות להמשיך בתנועתן. ריבוי הדיסלוקציות ותנועתן מובילים להתפרקות המתכות שתוארה לעיל.

ביבליוגרפיה:

- [1] E.Z. Engelberg: Stochastic Model of Breakdown Nucleation Under Intense Electric Fields (2020)
- [2] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics. New York: Wiley, 1996.
- [3] J. Weertman and J. R. Weertman, Elementary Dislocation Theory. New York: Macmillan, 1964.
- [4] Prof. Dr. Helmut Föll, *Defects in Crystals*, https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/def_en/index.html



נספחים

תכנון הפרויקט

12/2020	סיום שלב הלימוד על גבישים ודיסלוקציות.
01/2021	הבנת התוכנה הנוכחית, אשר יוצרת דיסלוקציות בכיוון ציר איקס בלבד.
02/2021	כתיבת תוכנה אשר יוצרת דיסלוקציות בכל כיוון ועם כל בורגרז וקטור.
03/2021	הרצת סימולציות עם דיסלוקציות, ללא מאמץ.
04/2021	הרצת סימולציות שמניידות דיסלוקציות תחת מאמץ.