המחלקה להנדסת תוכנה

פרויקט גמר – תשפ״ב

סימולציה של ניוד דיסלוקציות

Simulation of dislocation mobility

מאת

בינה מאיר | 315249052

טובה גרינבלט | 315320853

מנחה אקדמי: דר׳ אלי אנגלברג **אישור:** **תאריך:** **08/05/2022**

רכז הפרויקטים: דר׳ אסף שפנייר **אישור:** **תאריך:**

מערכות ניהול הפרויקט:

#	מערכת	מיקום
1	מאגר קוד	https://github.com/TovaGreenblatt/Final-Project-Dislocation.git
2	יומן	https://calendar.google.com/calendar/u/0?cid=djNlMnVrdms4dnV0anNqZW4zNjIwZ2ozaThAZ3JvdXAuY2FsZW5kYXIuZ29vZ2xlLmNvbQ
3	קישור לסרטון דוח אלפא	https://drive.google.com/file/d/1XbhH5DZrm2j9RajfRutm7tcFHN_gORHK/view?usp=sharing

מידע נוסף (מחק את המיותר)

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

תוכן עניינים

מילון מונחים 1
נאום המעלית 2
מבוא 2
תיאור הבעיה 3
סקירת עבודות דומות 3
תיאור הפתרון 6
פירוט השלב הראשון : 6
מה עשינו עד כה 10
נספחים 11
1. מבנה גביש fcc 11
2. דיאגרמות משנה 12
3. תוכנית בדיקות 13
4. טבלת סיכונים 14
5. ביבליוגרפיה 15

מילון מונחים

- CERN – CERN הוא המרכז הגדול בעולם לחקר חלקיקים. מרכז המחקר ממוקם על גבול שווייץ-צרפת, ממערב לעיר ז'נבה. CERN מפעיל מכלול של מאיצי חלקיקים.
- מאיץ החלקיקים LHC – מאיץ חלקיקים הוא מתקן המגביר את מהירותם של חלקיקים על ידי העברתם בשדות חשמליים ומגנטיים. הגברת המהירות שקולה למתן אנרגיה קינטית גבוהה לחלקיקים, המאפשרת ביצוע ניסויים פיזיקליים מגוונים.
מאיץ החלקיקים הגדול ביותר בעולם כיום, LHC (ראשי תיבות של Large Hadron Collider), שייך למרכז CERN. במנהרה מעגלית שאורכה 27 ק"מ, בעומק של כמאה מטר מתחת לפני האדמה החוקרים מאיצים שתי אלומות של פרוטונים זו כלפי זו. מגנטים חזקים מאלצים את החלקיקים לנוע במסלול המעגלי עד שהם מתנגשים אלה באלה במהירות אדירה הקרובה מאוד למהירות האור. בהתנגשות משתחררת אנרגיה עצומה ולשבריר שנייה נוצרים שם חלקיקים יסודיים, בדומה לתהליכים שהתרחשו מיד אחרי המפץ הגדול. גלאים מיוחדים משמשים לזיהוי החלקיקים ולמדידת תכונותיהם
- דיסלוקציות - דיסלוקציות הן דפקטים מבניים אשר קיימים בכל המתכות, וקובעים רבים מתכונותיהן.
- מבנה גביש fcc – גביש הוא תצורת החומר במצב צריבה מוצק.
מבנה הגביש הוא הסידור של האטומים בגביש. המבנה הגבישי מורכב מתא יחידה, שהוא מקבץ בסיסי של אטומים בעל מבנה פנימי התלוי ביסוד שלהם, וחוזר באופן מחזורי בסידור תלת ממדי המרכיב סריג.
(face center cubic) fcc הוא מבנה קובייתי בו קיים אטום בכל פינת קובייה ובמרכז כל פאה. את מבנה זה מוקבל לתאר בשני אופנים, ראו נספח 1.
- וקטור ה Burgers – וקטור ה Burgers הוא וקטור המגדיר את ההבדל שנוצר בסריג לפני השפעת הדיסלוקציה ואחריה. גודלו הוא המרחק המינימלי בין שתי נקודות סריג (במבנה fcc גודל זה הוא $\frac{lattice\ constant}{\sqrt{2}}$). וכיוונו מגדיר את סוג הדיסלוקציה (דיסלוקציית קצה או דיסלוקציית בורג).
- Ovito – Ovito היא תוכנת הדמיה וניתוח נתונים מדעיים עבור דגמי סימולציה מולקולריים ואחרים המבוססים על חלקיקים, המשמשים בדרך כלל בדיסציפלינות של חומרים חישוביים, פיזיקה או כימיה.
- Lammps (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) – Lammps היא תוכנה שניתן לקבל בה הדמיה ויזואלית לרשימה של אטומים, ולשינויים המתרחשים בהם לאורך זמן.

נאום המעלית

בשנים האחרונות ישנם ניסיונות לשדרג את מאיץ החלקיקים CERN בשוויץ על מנת להגיע לאנרגיות התנגשות של שני חלקיקי אטום, אלקטרון ופוזיטרון, גבוהות יותר מבעבר, בכדי לגרום לפירוקם. במהלך ההאצה התגלתה בעיה של התפרקות המתכות מהן בנוי המאיץ בשל השדות החשמליים הגבוהים. במחקר קודם ד"ר אלי אנגלברג, מנחה הפרוייקט, בנה מודל סטטיסטי, שלפיו הגורם להתפרקויות הוא ניוד של דיסלוקציות בתוך המתכת. דיסלוקציות הן דפקטים מבניים אשר קיימים בכל המתכות, וקובעים רבים מתכונותיהן. בפרויקט זה אנו בונות סימולציה של מתכת שנתונה למאמץ, על מנת לבדוק את מידת המאמץ הדרושה כדי לנייד דיסלוקציות. הבנה טובה של תהליך ניוד זה יתרום למאמץ הקולקטיבי לצמצם את ההתפרקויות ב CERN, ויאפשר את המשך פיתוח הדור הבא של מאיצי החלקיקים.

מבוא

האטום הוא החלקיק הקטן ביותר של יסוד כימי שבו נשמרות תכונות היסוד. האטום מורכב מחלקיקים קטנים יותר שאינם באים לידי ביטוי בתורה הכימית. בעבר חשבו המדענים שהאטום הוא חלקיק יסודי שלא ניתן לחלק אותו לחלקיקים קטנים יותר, אך מאוחר יותר התגלה שהאטום מורכב מחלקיקים קטנים יותר: גרעין שבו פרוטונים ונויטרונים (שגם הם מורכבים מחלקיקים נוספים), ומסביבו ענן של אלקטרונים.

פירוק האטום הוא ענף מרכזי בחקר הטבע ובפיזיקה. המדענים מפרקים גם רכיבים זעירים יותר של האטום לרכיבים בסיסיים יותר על מנת להגיע להישגים הן במדע וטכנולוגיה והן באישוש תיאוריות שונות כמו המפץ הגדול. אחת הדרכים לפרק את חלקיקי האטום היא על ידי האצתם במאיצי חלקיקים המגבירים את מהירותם של חלקיקים על ידי העברתם בשדות חשמליים ומגנטיים.

מאיץ LHC הוא מאיץ החלקיקים הגדול בעולם, הממוקם ב CERN. הניסויים הנערכים באמצעות מאיץ זה נועדו לענות על שאלות העומדות בבסיס הפיזיקה. מטרתם העיקרית היא להשלים את תמונת חלקיקי היסוד ולחפש אישושים לתאוריות שנועדו להרחיב את המודל הסטנדרטי של החלקיקים היסודיים.

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

בפרויקט זה אנו בונות סימולציה לניוד דיסלוקציות כדי שתעזור בחקירת דיסלוקציות בגבישי נחושת (סריג fcc, face centered cubic) בכדי לחקור את מידת המאמץ הדרושה כדי לנייד דיסלוקציות. הבנה טובה של תהליך ניוד זה תתרום למאמץ הקולקטיבי לצמצם את ההתפרקויות בCERN, ותאפשר את המשך פיתוח הדור הבא של מאיצי החלקיקים.

תיאור הבעיה

בפרויקט CLIC המתכות מהן עשוי מאיץ החלקיקים מתפרקות בשדות חשמליים גבוהים. הבנה טובה של תהליך ניוד דיסלוקציות יכולה לתרום למאמץ הקולקטיבי לצמצום התפרקויות אלו ועתידה לאפשר את המשך פיתוח הדור הבא של מאיצי החלקיקים. לצורך הבנה זו אנו נבנה סימולציה לניוד דיסלוקציות.

על מנת לבנות סימולציה להמחשת הגביש והדיסלוקציות שבתוכו, אנו צריכות להסתמך על מידע בתחום, להשתמש בנוסחאות הקיימות בספרות המקצועית ולהתאים אותן לתוכנה שלנו.

ביישום הסימולציה אנו נתקלות במספר אתגרים.

ניתן להסתכל על סריגי fcc כעל מבנה קובייתי שהוא המבנה האינטואיטיבי. ניתן גם להסתכל על הסריג כעל שכבות של אטומים. הסתכלות במבנה השכבות עוזרת בפישוט נוסחאות מורכבות בנושא בו אנו עוסקות, המעבר ביניהם יתבצע על ידי טרנספורמציות לינאריות. ראו נספח

בפרויקט זה נבנה את הסריג על פי מערכת צירים המתאימה למבנה השכבות, ונתאים את הנוסחאות שנכתבו במערכת הצירים במבנה הקובייתי למערכת שלנו ע״י טרנספורמציה לינארית.

בנוסף, הרבה מהמשוואות אותן אנו צריכות פותחו עם הנחות שרירותיות. לדוגמא, מניחים שהדיסלוקציה היא בכיוון אחד מהצירים, למרות שדיסלוקציה יכולה להיות בכל כיוון. אנו נצטרך להבין מה ההנחות של כל נוסחה, ולראות כיצד ניתן להתאים אותה למה שקורה בטבע, וכך נוכל להשתמש בה כדי לפתח את הסימולציה.

אתגר נוסף הוא שאנו עובדות עם כמה תוכנות, לכן צריך לדאוג לכך שהפלט של תוכנה אחת תתאים לקלט של התוכנה הבאה.

יתרה על כך, המורכבות של בניית הגביש והדיסלוקציות עלולה לגרום לזמן ריצה ארוך של התוכנה. ע״מ שהתוכנה תהיה שימושית, יש דרישה לזמן ריצה סביר, ויש צורך לדאוג לכך בעת פיתוח התוכנה.

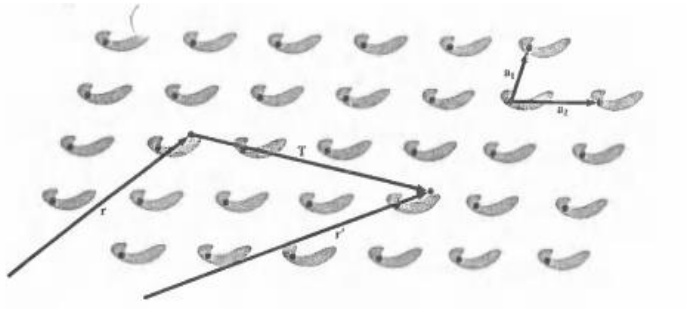
סקירת עבודות דומות

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 בCLIC היא להפחית את שיעורי ההתפרקויות ל3×10^{-7} התפרקויות לפולס למטר (bpp/m) של אורך המאיץ. בניסויים שבוצעו התגלה כי יש קשר בין כמות ההתפרקויות לבין המבנה הגבישי של המתכות ועיבודן. זה מצביע על כך שניוד דיסלוקציות הוא בין הגורמים העיקריים להתפרקות [1].

כעת נפרט על מבנה הגביש והדיסלוקציות:

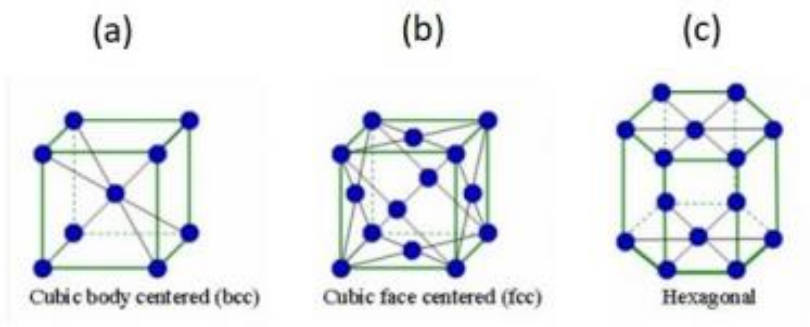
אטומים בגביש מאורגנים במבנים מחזוריים, המוגדרים על ידי וקטורי ההעתק $\overrightarrow{a_1}$, $\overrightarrow{a_2}$ ו$\overrightarrow{a_3}$ שאינם בהכרח אנכים זה לזה. הגביש נראה אותו הדבר במבט מהנקודה $\vec{r}$ או מהנקודה $\overrightarrow{r_0} = \vec{r} + u_1\overrightarrow{a_1} + u_2\overrightarrow{a_2} + u_3\overrightarrow{a_3}$ עבור כל u_1, u_2 וu_3 מספרים שלמים. קבוצת הנקודות $\overrightarrow{r_0}$ נקראת נקודות הסריג. בסיס, המורכב מאטום אחד או יותר, מחובר לכל נקודה של הסריג [2].



איור 1

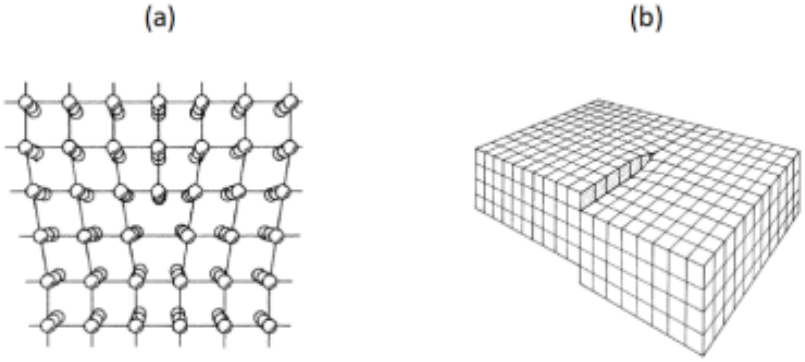
אטומי המתכות מסודרים בדרך כלל כסריג bcc (body center cubic), fcc (face center cubic) או hcp (hexagonal close packed). כפי שהשם שלהם מרמז, וקטורי ההעתק של סריגים אלו הינם באורך שווה ואנכים זה לזה. $a = |\overrightarrow{a_1}| = |\overrightarrow{a_2}| = |\overrightarrow{a_3}|$ נקרא קבוע הסריג. הבסיס, הכלול 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 (ראו איור 2(a)). וקטורי ההעתק של סריג fcc זהים לאלו של סריג bcc. הבסיס שלו, לעומת זאת, מורכב מארבעה אטומים, במיקומים $(0,0,0)$, $(0,\frac{a}{2},\frac{a}{2})$, $(\frac{a}{2},0,\frac{a}{2})$, ו-$(\frac{a}{2},\frac{a}{2},0)$ כפי שמוצג. (ראו איור 2(b)).

בסריג hcp $|\overrightarrow{a_1}| = |\overrightarrow{a_2}|$ ויש ביניהם זווית של $120°$. הוקטור $\overrightarrow{a_3}$ מאונך לשני הוקטורים האחרים, ואורכו הוא בערך פי $\sqrt{8/3}$ מאורכם (ראו איור 2(c)) [2].



איור 2

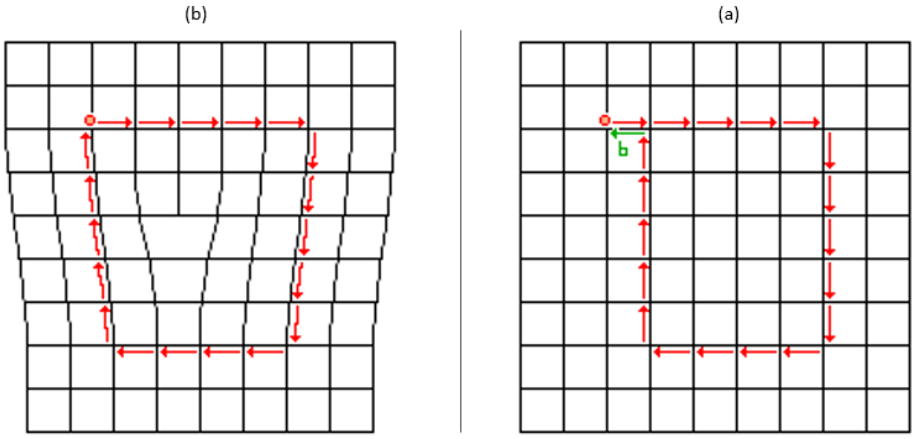
ניתן למצוא כמה סוגים של פגמים במבנה הגבישי של מתכות. דיסלוקציות הן סוג אחד כזה, שבו חלק אחד של גביש נעקר, או מחליק, ביחס לחלק אחר. הדיסלוקציה היא הקו בו התחילה החלקה בגביש. בדיסלוקציית קצה (ראו איור 3(a)) קו הדיסלוקציה אנך לוקטור Burger המייצג את גודל וכיוון עיוות הסריג ואילו בדיסלוקציית בורג (ראו איור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



איור 3

בטבע דיסלוקציות הן בדך כלל שילוב של דיסלוקציית קצה ודיסלוקציית בורג.

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].



איור 4

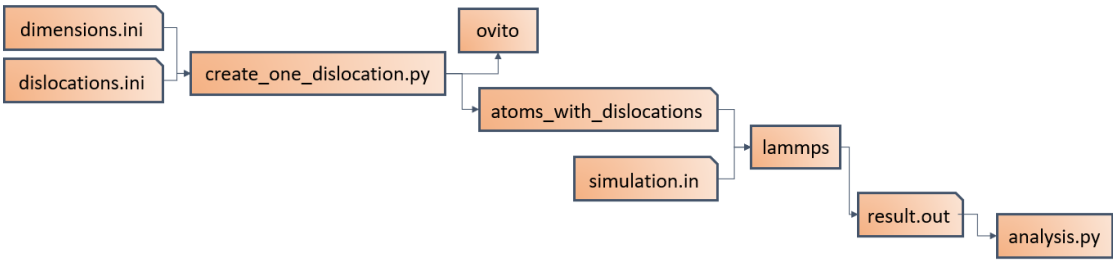
מאמץ חיצוני מפעיל כוח על הדיסלוקציה שעלול לגרום לה לנוע. עם זאת, דיסלוקציות אינן נעות בחופשיות דרך הגביש המכיל אותן כאשר הן מצטלבות עם דיסלוקציות אחרות, אלא הן נצמדות ומתקבעות. דיסלוקציות מוצמדות יכולות להוביל ליצירת דיסלוקציות חדשות, או שהן יכולות להמשיך בתנועתן. ריבוי הדיסלוקציות ותנועתן מובילים להתפרקות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

תיאור הפתרון

כשלב ראשון, אנו בונות תוכנה המקבלת את מימדי הגביש והמידע הדרוש לבניית דיסלוקציות, ובונה גביש מושלם תוך התבססות על מודל השכבות. לאחר בניית הגביש המושלם התוכנה עוברת באיטרציות על כל תיאור של דיסלוקציה ומוסיפה אותן על פי המיקום, הכיוון ווקטור ה Burgers שלהן.

לאחר שיש לנו את הפלט, מיקומי האטומים, אנו טוענות אותו לתכנה Ovito לצורך ולידצית הפלט. בהמשך נרצה להריץ סימולציה של התפתחות של גביש כזה לאורך זמן ללא מאמץ, ועם מאמץ. נרצה ליצור דיסלוקציות תקועות בגביש ולהריץ סימולציה של התפתחות הגביש בזמן בתוכנת Lammps. לבסוף, נגזור את אנרגיית האקטיבציה ונפח האקטיבציה מתוך תוצאות השלבים הקודמים.

תיאור מעבר הקבצים בין התוכנות השונות:



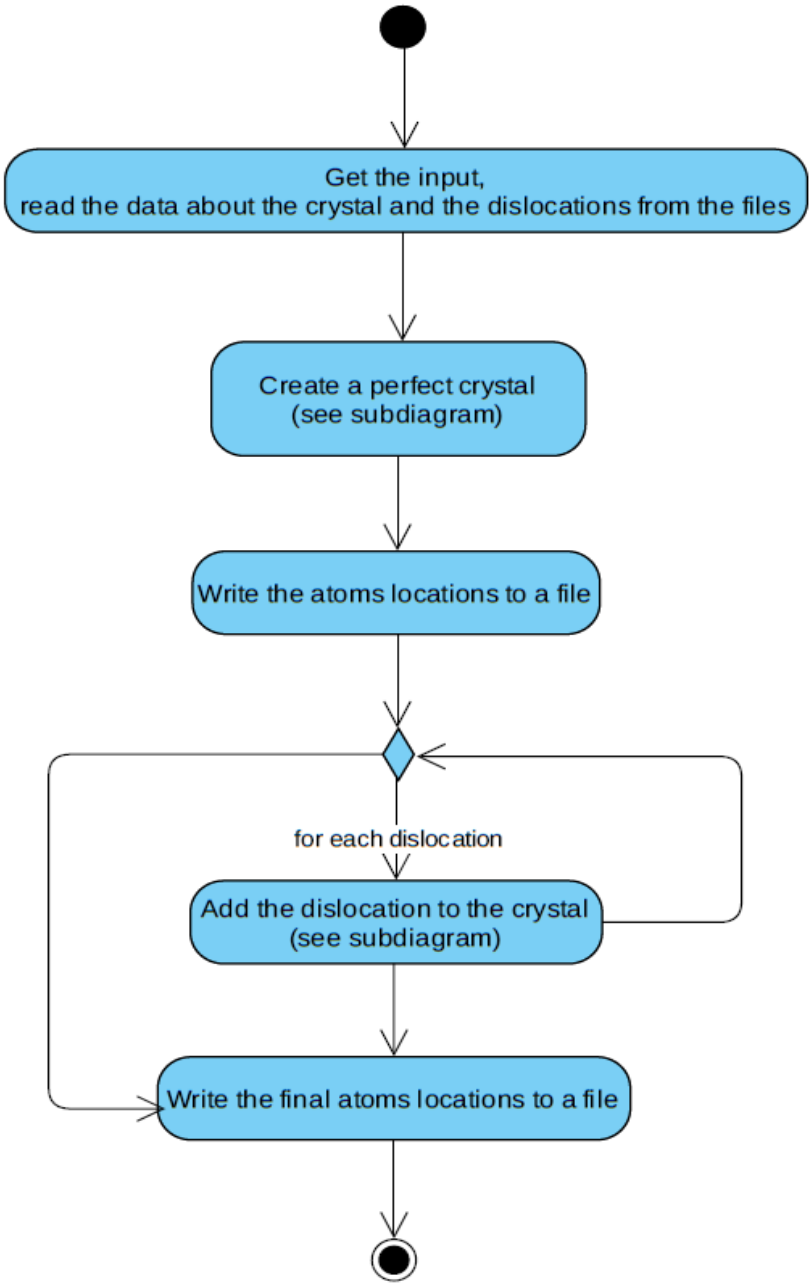
איור 5

פירוט השלב הראשון:

דיאגרמת מצבים פעילות

ראו דיאגרמה (דיאגרמות משנה: ראו נספח 2):

Main diagram:



תיאור השלבים למימוש השלב הראשון של הפרויקט:

1. קליטת ממדי הגביש ונתוני הדיסלוקציות מהקבצים dimensions.ini ו dislocations.ini הנמצאים בתיקיה init_files.
2. יצירת גביש מושלם:
   2.1 חישוב גודל וקטור ה Burgers.

2.2 חישוב מיקומי האטומים בתא היחידה לפי מודל השכבות.

2.3 יצירת נקודות הסריג בתוך הגבולות שהתקבלו מהקובץ.

2.4 חישוב הקואורדינטות של כל האטומים בגביש.

2.5 כתיבת המימדים של הגביש והקורדינטות של כל האטומים לקובץ atoms_perfect_crystal בפורמט המתאים לקלט לתוכנה Ovito.

3. הוספת הדיסלוקציות לגביש. באופן איטרטיבי מעבר על רשימת הדיסלוקציות, ובכל איטרציה מתבצעים תתי השלבים להלן:

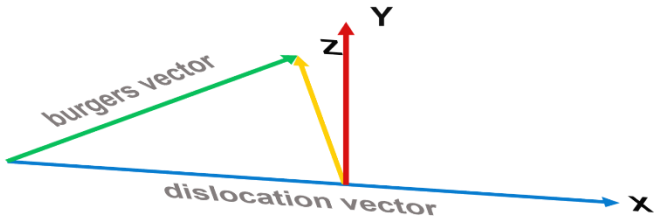
3.1 קליטת נתוני הדיסלוקציה למשתנים - מיקום הדיסלוקציה, גודל וכיוון וקטור ה Burgers, וכיוון הדיסלוקציה. נתונים אלו נמצאים בקובץ הדיסלוקציות (dislocations.ini), כאשר כל שורה מייצגת דיסלוקציה, ובנויה באופן הבא: שלושת הערכים הראשונים מייצגים את קואורדינטות מיקום הדיסלוקציה, שלושת הערכים הבאים מייצגים את כיוון וקטור ה Burgers, ואלו שלאחר מכן מייצגים את כיוון הדיסלוקציה.

איור 6

3.2 מציאת מערכת צירים חדשה המותאמת לדיסלוקציה - חישוב התזוזה של כל אטום הנובעת מדיסלוקציה מסוימת לפי הנוסחאות מהספר Theory of dislocations (John Price Hirth, Jens Lothe). ישנה בעיה להשתמש בנוסחאות ללא התאמת המערכת, וזאת כיוון שבספר זה ישנן הנחות לגבי כיוון הדיסלוקציה וכיוון וקטור ה Burgers. לצורך מחקר הנושא, הסימולציה תאפשר יצירת גביש המצוי בטבע. לכן לא ניתן להגביל את כיוון הדיסלוקציות וכיוון וקטור ה Burgers. יש כמה אפשרויות לפתרון הגבלה זו. אחת האפשרויות היא פירוק הדיסלוקציה לצירים x, y ו z וטיפול בכל ציר בנפרד. דרך נוספת לפתור את הבעיה, ובה החלטנו להשתמש, היא באמצעות טרנפורמציה לינארית למערכת צירים חדשה. הטרנפורמציה תעביר את מיקומי האטומים של הגביש ואת נתוני הדיסלוקציות למערכת הצירים החדשה, כך שתהיה מותאמת לדיסלוקציה מסוימת באופן הבא:

- ציר הx יהיה הכיוון של הדיסלוקציה.
- ציר הz יהיה בכיוון החלק של ה Burgers וקטור המאונך לדיסלוקציה.

- ציר הy החדש יהיה מאונך לציר x ולציר z.



איור 7

3.3 חישוב על ידי הטרנספורמציה - חישוב המיקומים של האטומים, של ה Burgers וקטור ושל מיקום הדיסלוקציה במערכת החדשה על ידי הכפלת המיקום במערכת הרגילה במטריצת הטרנפורמציה ההופכית.

3.4 השפעת הדיסלוקציה על האטומים - חישוב התזוזה של כל אטום בגביש הנובעת מהדיסלוקציה.

כפי שהוסבר בפרק הרביעי, ישנם שני סוגי דיסלוקציות. דיסלוקצית קצה, שהיא דיסלוקציה שכיוון ה Burgers וקטור שלה אנך לדיסלוקציה. ודיסלוקציית בורג, שבה ה Burgers וקטור בכיוון הדיסלוקציה. דסילוקציה אחת יכולה להיות מורכבת משני סוגים אלו.

לאחר ביצוע הטרנספורמציה, ניתן לפצל את ה Burgers וקטור לחלק שעל ציר הx שהוא החלק בדיסלוקציה מסוג דיסלוקציית בורג, ולחלק שעל ציר הz שהוא החלק בדיסלוקציה מסוג דיסלוקציית קצה.

ההשפעה של דיסלוקציה על אטום שונה בכל ציר, החישובי ההשפעות הם לפי הנוסחאות מהספר Theory of dislocations.

השפעה בציר הx:

$$\Delta x = \frac{|\vec{b}|}{2\pi} * \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$$

השפעה בציר הy:

$$\Delta y = -\frac{|\vec{b}|}{2\pi} * \left[\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} * \ln(x^2+y^2) + \frac{x^2-y^2}{4(1-\nu)(x^2+y^2)}\right]$$

השפעה בציר הz:

$$\Delta z = \frac{|\vec{b}|}{2\pi} * \left[\arctan\left(\frac{y}{x}\right) + \frac{xy}{2(1-\nu)(x^2+y^2)}\right]$$

כאן $|\vec{b}|$, הוא וקטור ה Burgers, ν הוא גודל פיזיקלי תלוי-חומר שנקרא קבוע פואסון.
כאשר נתייחס לגודל ה Burgers וקטור באופן שונה בין הצירים: בציר הx נתייחס לרכיב הבורג של וקטור ה Burgers , ובציר הy והz נתייחס לרכיב הקצה של וקטור הBurgers.

3.5 ביצוע טרנספורמציה לינארית הפוכה - החזרת האטומים למערכת הצירים המקורית, לפי מודל השכבות, על ידי טרנספורמציה לינארית הפוכה.

4. כתיבת הקורדינטות של כל האטומים לקובץ atoms_with_dislocations בפורמט המתאים לקלט לתוכנה Ovito. ניתן להשתמש בתוכנה Ovito בשביל לראות המחשה של הגביש עם הדיסלוקציות.

מה עשינו עד כה

- ✓ למידה על גבישים ודיסלוקציות מתוך הספרות המקצועית.
- ✓ יצירת גביש מושלם.
- ✓ יצירת דיסלוקציה בגביש בכיוון ציר X.

יצירת דיסלוקציות בכל כיוון.

- × הרצה של סימולציה בתוכנת למפס עם גביש עם ארבע דיסלוקציות ללא מאמץ.
- × הרצה של סימולציה בתוכנת למפס עם גביש עם ארבע דיסלוקציות עם מאמץ.
- × יצירת דיסלוקציות תקועות בתוכנת למפס והרצה בגביש בלי מאמץ.
- × יצירת דיסלוקציות תקועות בתוכנת למפס והרצה בגביש עם מאמץ.
- × גזירת אנרגיית האקטיבציה ונפח האקטיבציה מתוך התוצאות של השלב הקודם.

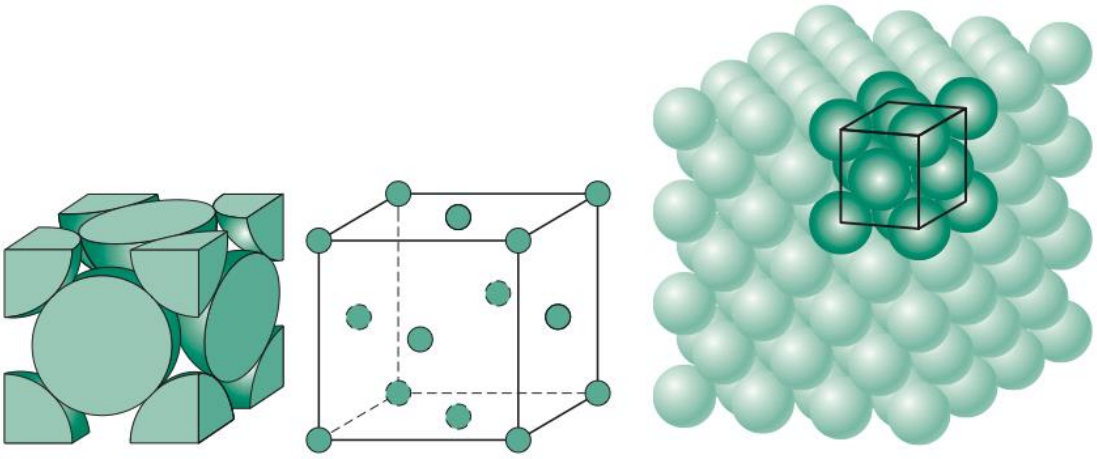
כרגע אנחנו בשלב של בדיקת השלב של יצירת דיסלוקציות בכל כיוון, תוך כדי דיבוג שלב זה גילנו שיצירת דיסלוקציית קצה בציר הx עובד כראוי, אך יש לנו בעיה ביצירת דיסלוקציות קצה בכיוון ציר הy ובכיוון ציר הz. לאחר שבדקנו, באופן ידני, שהשינוי במיקומים של האטומים הוא כמו שהיינו מצפים לראות והטרנפורמציות חושבו כראוי. בהצעתו של ד״ר אלי אנגלברג, נבדוק את ההיפותזה ששניתן לייצר רק דיסלוקציות על מישורים שנקראים מישורי החלקה, עם וקטורי Burgers בכיוונים שנקראים מקצועות של תומפסון טטרהדרון.

נספחים

1. מבנה גביש fcc

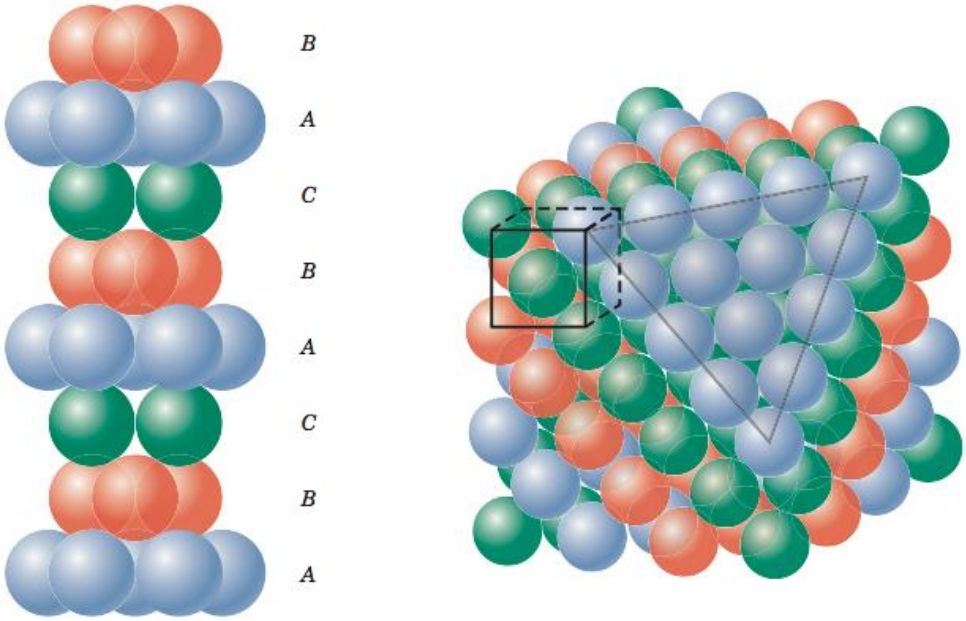
ניתן להסתכל על מבנה fcc בשני אופנים:

1. מבנה קובייתי – הסתכלות על הגביש כעל אוסף של קוביות צמודות. ראו איור [9]



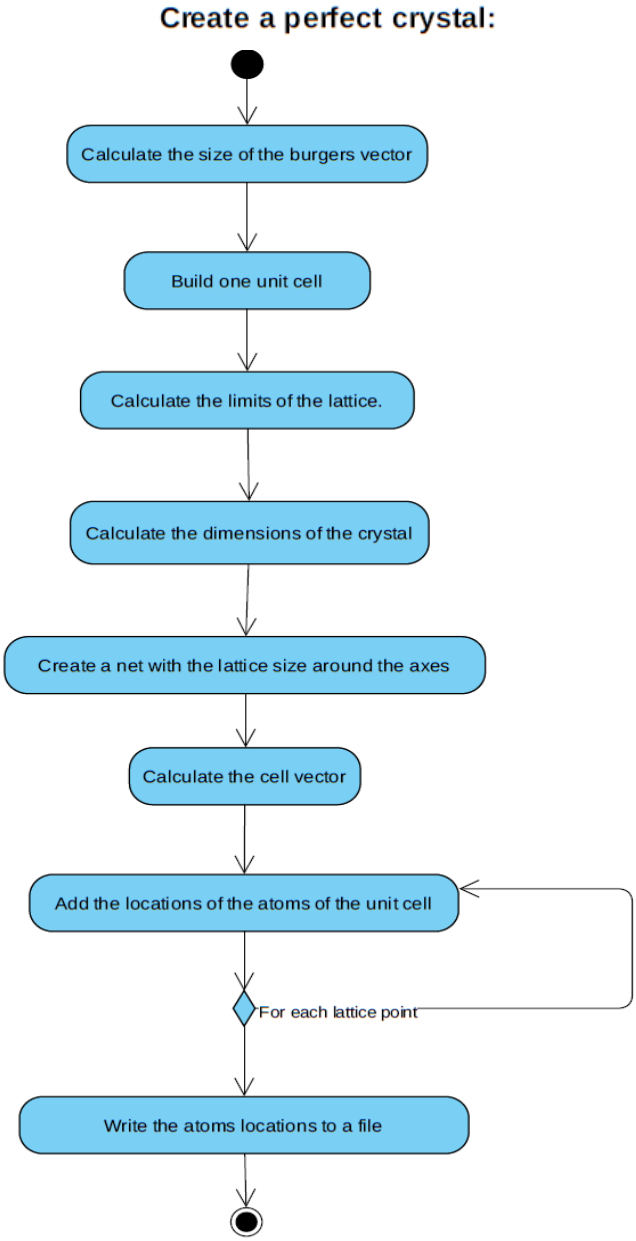
איור 7

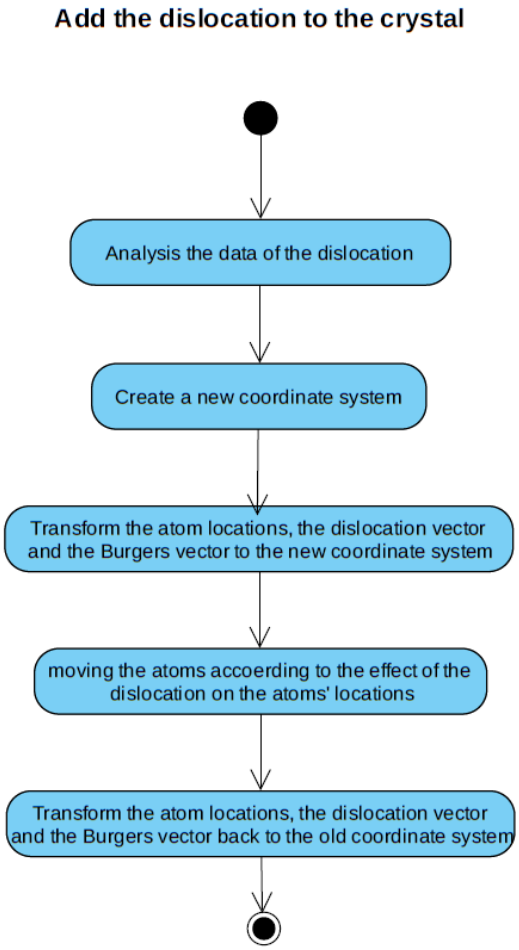
2. מבנה השכבות – הסתכלות על הגביש כעל שכבות של אטומים. ראו איור [10]



איור 8

2. דיאגרמות משנה





3. תוכנית בדיקות

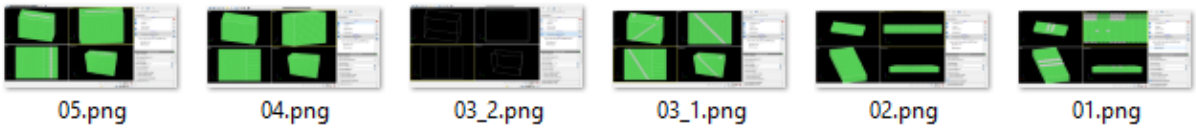
בפרויקט זה אנו נבדוק בכל שלב את נכונותו על קלטים רלוונטיים. את הקלטים שיהוו מקרה קצה, נשמור בקבצים מסודרים, כמו אקסל, בהתאם לשלב. בשלבים הבאים שנפתח נבדוק גם את מקרי הקצה השמורים. כך נוודא בדיקה מקיפה של הקוד בכל שלב.

בשלב זה אנו שומרות את המקרים שבדקנו בקובץ אקסל הנראה כך:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	dimensions			line coordinates			burgers			dislocation			תמונה
2	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z	
3	60	60	10	0	10	0	1	0	0	1	0	0	1
4				0	-10	0	-1	0	0	-1	0	0	
5	60	60	10	0	10	0	1	0	0	1	0	0	2
6				0	-10	0	-1	0	0	1	0	0	
7	60	60	60	0	10	0	0	0	1	0	0	1	3
8				0	-10	0	0	0	-1	0	0	1	
9	60	60	60	0	10	0	0	1	0	0	1	0	4
10				0	-10	0	0	-1	0	0	1	0	
11	60	60	60	10	0	0	0	1	0	0	1	0	5
12				-10	0	0	0	-1	0	0	1	0	
13													
14													
15													

איור 9

את תמונות המסך של תצוגת האטומים בתוכנה Ovito אנו שומרות בתיקיה שבה נמצא קובץ האקסל באופן מסודר וממוספר, כאשר שם התמונה מתחיל במספר המוצג בטבלה, לדוגמא:



איור 10

4. טבלת סיכונים

#	תיאור סיכון	השפעה	תכנית להקטנת ההשפעה
1	חוסר התאמה של התוכנות שבחרנו. כמו למשל בעיה ב OVITOבתצוגה של האטומים.	במידה ואחת התוכנות שאנו נרצה להשתמש בהם לצורך פיתוח ובדיקת תוצרי המחקר לא יתאימו להנחות או לנתונים שלנו אנחנו לא נוכל להתקדם בכלים אלו ואין הרבה כלים בתחום זה.	בירור לעומק על התכונות והפיצ'רים של כל תוכנה.
2	מציאת פתרון לבעיה על ידי גורמים אחרים שעובדים עם CERN.	במידה וימצאו את הגורם להתפרקויות והוא יהיה גורם אחר משחשבנו.	מעקב אחרי ההתקדמות של מחקרים אחרים בתחום.
3	מקרי קצה שישבשו את התוכנה שאנחנו כותבות.	התעסקות רבה בפרטים שתמנע התקדמות בפרויקט.	בדיקת כל שלב של הפרויקט ושמירת רשימת מקרי הקצה באופן מסודר. ובכל שלב נבדוק שהשלב שפותח תקין גם בכל מקרי הקצה של השלבים הקודמים
4	זמן ריצה ארוך מדי לתוכנה.	עד כה אנחנו כתבנו את התכנה בשפת פייתון ובספריית numpy והם לא בהכרח הכלים הטובים והיעילים לקוד שלנו. במהשך הפרויקט אנו נצטרך לפתח תוכנה שמדמה ___ ביחס לזמן, לכן התכנה תצטרך להיות מספיק מהירה כדי שתדמה את הטבע בצורה מיטבית.	במידה ונראה בחלקים מסוימים שיש זמן ריצה ארוך מדי, משתמש בשפות תכנות אחרות פחות מתקדמות שזמן הריצה שלהן מהיר יותר.
5	חוסר ידע בתחום הפיזיקאי הקשור לפרויקט	כיוון שאנו בונות סימולציה של תופעה פיזיקאלית אנו לומדות הרבה חומר, אך הנושא רחב ואנו יודעות מעט ביחס אליו. חוסר זה עלול להאט את קצב פיתוח הפרויקט וכן לגרום לנו להסיק מסקנות שגויות.	נתייעץ עם מנחה הפרויקט וכן עם פיזיקאים המבינים בתחום. וכן נשתדל להעמיק את הידע שלנו בתחום כמה שנוכל.

5. 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
[5] Wikipedia
[6] Face Centered Cubic Structure (FCC), https://www.e-education.psu.edu/matse81/node/2133