Üdvözlök minden megjelentet!

Mint ahogy az elnök úr is említette, az alábbi címmel doktori értekezést adtam be. Ennek rövid összefoglalóját mutatom most be 25 percben.

Ha az egész munkám motivációját egyetlen képben össze szeretném foglalni, akkor ez volna az kép. Itt egy mikroszkopikus méretű fém egykristály, ún. mikropillár látható, amelyet függőleges irányban összenyomunk. Noha makroszkopikus méretekben fémek deformációját már viszonylag jól ismerjük, azaz hatékonyan tudunk velük tervezni, ez nem jellemző a mikroszkopikus mérettartományra. Ennek oka, hogy a diszlokációk, amik a képlékeny alakváltozás mikroszkopikus leírásának legfőbb elemei, kollektív mozgást végeznek. Itt az ábrán azt láthatjuk, hogy a diszlokációk egyszerre csak 1-1 síkon aktiválódnak és azon lavinaszerűen végigfutva nagy deformációs lépcsőket hoznak létre.

De a diszlokációknak nem csak a mozgásuk összehangolt, hanem az elhelyezkedésük is. Erre – a deformáció módjától függően – két sarkalatos példa a fraktál, illetve a periodikus létraszerű szerkezet. A diszlokációlavinák és -mintázatok jelensége fontos az ipar számára. Míg a diszlokációlavinák pl. a mikroszkopikus alkatrészek nem kívánt deformációjában, addig a diszlokációmintázatok a makroszkopikus anyagok fáradásos törésében játszanak fontos szerepet.

Ezért fontos megérteni a két jelenséget kiváltó okokat és érdemes diszlokációszimulációkat futtatni. Egy diszkrét diszlokációdinamikai szimulációban, röviden DDD-ben, minden egyes diszlokációra felírunk egy túlcsillapított mozgásegyenlet, amelyben a mozgatóerőt a diszlokációk között fellépő erő biztosítja. Ezek után a mozgásegyenleteket numerikusan integráljuk. A legegyszerűbb, single slip esetben kétfajta diszlokációt, mint kvázirészecskét engedünk meg a 2D-s szimulációs terünkben, ahol a részecskék csak egy irányban mozoghatnak, ez . A számítási igénye viszont még egy ilyen egyszerű szimulációnak gyorsan megugorhat. Ennek okai:

1. a kölcsönhatás hosszú hatótávolságú, így minden diszlokáció kölcsönhat mindegyik, távoli diszlokációval is, ezáltal a számítógépes szimulációban a memória lokalitás nem teljesül
2. a kiszámítandó kölcsönhatások száma gyorsan, a részecskék számának négyzetével skálázik
3. ha nagyobb a részecskeszám, akkor a véletlenszerűen elhelyezett diszlokációk között nagyobb eséllyel találunk olyan párt, amelynek kicsi a távolsága, és ez csökkenti az időlépés nagyságát a szimulációban

Ezen nehézségek miatt nemcsak a diszlokációlavinák, de a diszlokációmintázatok vizsgálata különösképp korlátozott egy DDD szimulációban. Ezért egy olyan numerikus módszert fejlesztettem ki, ami a diszlokációk kontinuumelméletére alapozva megkerüli ezeket a problémákat és lehetővé teszi a diszlokációlavinák és -mintázatok hatékony vizsgálatát. De nem csak numerikusan lehet a kérdéskört vizsgálni, hanem kísérleti úton is.

Az eddigi tapasztalatok szerint az bizonyosodott be, hogy az a kézenfekvő módszer, amelyben mikropillárokat nanoindenterrel deformálnak, és gyűjtenek minél több adatot, egyúttal a leghatékonyabb módszerek egyike az említett jelenségek vizsgálatára. A feszültség-deformációs görbén túl gyűjtött adat lehet pl. a keletkező akusztikus hullámok jelei vagy pl. deformációs lépcsők vizuális képe. Mivel azonban a megjelenő lépcsők méretskálája az optikai felbontóképesség alatt van, ez utóbbihoz elektronmikroszkópra van szükség. Célunk az volt, hogy egy olyan összeállítást valósítunk meg, amelyben a mikropillárokat elektronmikroszkópban in-situ deformálhatjuk és egy csatolt akusztikus emissziós detektorral az akusztikus jeleket is rögzíthetjük. Az összeállítás legnagyobb kihívását szemlélteti ez a kép, amelyen egy kis méretű nanoindentert, illetve az ELTE egyik elektronmikroszkópját láthatjuk. Ebből azt láthatjuk, hogy a nanoindenter jóval nagyobb, mint az elektromikroszkóp vákuumkamrája, ezért az összeállításhoz szükséges lekicsinyített nanoindentert előbb el kell készíteni. A doktori munkámban egy ilyen nanoindenter elkészítésében is részt vettem.

Mielőtt a numerikus modelljeimet bemutatnám, néhány részletét bemutatom az annak alapjául szolgáló kontinuum elméletnek.

A DDD szimulációkban használt mennyiség a diszlokációk koordinátája, és minden diszlokáció koordinátája pontosan ismert és nyomon követett. A kontinuumelmélet megalkotásának első lépése, hogy térmennyiségeket definiál egy skálán, ami durvább, mint amin az egyes diszlokációkat nyomon követjük, ezt szemlélteti a négyzethálós felosztás. A legegyszerűbb mennyiségek, amiket elsősorban definiálunk, a \kappa előjeles és a \rho teljes egyrészecske diszlokációsűrűségek. Mit veszítünk a durvább térbeli felbontáson felül, ha a diszlokációk koordinátái helyett az így bevezetett mennyiségek időfejlődését szeretnénk vizsgálni? Ekvivalens-e a két leírás? Tekintsük ehhez a bal felső és jobb alsó sarkokat. Láthatjuk, hogy két lényegesen eltérő diszlokációkonfiguráció ugyanahhoz a teljes és előjeles diszlokációsűrűséghez vezet. Tehát amennyiben térmennyiségekkel szeretnénk dolgozni, akkor valamennyi információt mindenképp veszítünk. A kérdés, hogy elég-e az egyrészecske-sűrűségek vizsgálata az adott jelenségek megértéshez? A szimulációs eredmények egyrészt azt mutatják, hogy diszlokációlavinák tekintetében azok számos tulajdonságáról számot tud adni egy ilyen modell, de a diszlokációk mintázatképződéséről már nem, ott valamilyen módon mindenképp figyelembe kell venni a kétrészecske-sűrűséget is.

Most pedig bemutatom a numerikus modelljeimet, kezdve a diszlokációlavinák vizsgálatára alkalmazott modellel.

A diszlokációlavinák vizsgálatához elég az egyrészecskesűrűség, mi több, a szimulációimban a további egyszerűsítés kedvéért a teljes diszlokációsűrűséget állandónak vettem, így már csak az előjeles diszlokációsűrűség maradt meg az egyrészecske-sűrűségből. Az egyrészecskesűrűségen felül viszont még figyelembe kell venni a rendezetlenséget. Ezt úgy tettem meg, hogy minden cellában definiáltam egy folyásfeszültséget, ami nem tartalmaz közvetlen egyrészecske-sűrűségfüggést, értékét pedig egy eloszlásból korrelálatlanul választom (itt szürkeárnyalattal szemléltetve, ahol a fehér a puhább). Ez a paraméter okozza a modell sztochasztikus viselkedését, és vezet ahhoz, hogy az eredmények szimulációról szimulációra változnak. Ezért ezt a modellt stochastic continuum plasticity modellnek, röviden SCP-nek nevezem.

A szimulációs protokollom a következő. Kezdetben a külső nyíróerő 0. Továbbá \kappa is 0 mindenhol, ezt jelzem a cella színével. Valamint a plasztikus deformáció is 0, amit pedig a cellába írt számmal jelzek. A folyásfeszültség kezdeti értékeit legenerálom a kívánt eloszlás szerint.

Ezek után a külső nyíróerőt addig növelem, míg nem lesz egy olyan cella, amelynek a folyásfeszültsége kisebb, mint a külső nyíróerő. Ekkor a külső erő növelését megállítom, majd megnövelem a plasztikus deformáció értékét az érintett cellában. A single slip esetben a gamma negatív x irányú deriváltja adja kappát, így a cella két oldalán \kappa már nem lesz 0. Továbbá a deformáció miatt a cellán belül is újrarendeződnek a diszlokációk, ami a helyi folyásfeszültség megváltozásához vezet, ezáltal egy új folyásfeszültség értéket választok a cellának.

A külső erőt továbbra is állandó értéken tartva most megvizsgáljuk, hogy a külső nyíróerő és a \kappa keltette belső feszültségeloszlás összege valahol meghaladja-e a helyi folyásfeszültség értékét. Ha igen, akkor ott megnöveljük a deformáció értékét, újraszámoljuk a \kappa terét, majd a \kappa keltette feszültségteret, és újra megvizsgáljuk, hogy van-e megfolyó cella. Ha már nincs több, akkor azt mondjuk, hogy az első lavina véget ért, és újra emelni kezdjük a külső feszültséget addig, amíg el nem indul a második lavina.

Megmutatom, hogy milyen jellemző paramétereit vizsgáltam ennek a modellnek. Az egyik a valószínűségi változónak az eloszlásfüggvénye, ez valójában 2 paraméter lesz. A másik pedig az elemi deformáció nagysága, amit az előbbi diákon 1 értékűnek vettem. Ezeket a paramétereket DDD szimulációk eredménye alapján kalibráltam.

A DDD szimulációk azt mutatják, hogy a lavinák által definiált folyásfeszültségek eloszlása Weibull-eloszlást követnek 1.4-es kitevővel, avagy alakparaméterrel, ezért a praktikusan a modellem folyásfeszültség-eloszlását is Weibullnak választottam szintén 1,4-es hatványkitevővel. A Weibull-eloszlás függvényalakjából látható, hogy másik paramétere a skálaparaméter, ami majdnem az átlag, amelynek nagyságát pedig a deformációs lépéssel együtt az alapján választottam meg, hogy a különböző szimulációkra kiátlagolt feszültség-deformációs görbe két különböző fajta DDD modell görbéi közé essen. Ezáltal tehát kalibráltam a modellem paramétereit.

Mások már megmutatták, hogy egy SCP modell mutatja a diszlokációk lavinaszerű viselkedését. Az én eredményeim összefoglalva pedig az, hogy megmutattam, hogy egy ilyen modell felparaméterezhető a DDD szimulációk alapján úgy, hogy az egyes lavinákhoz tartozó külső feszültségek eloszlása, továbbá a feszültség-deformációs görbe jó egyezőséget mutasson a DDD szimulációk eredményével. A modell eredményességét pedig az mutatja, hogy ezen illesztések után a modell számos további statisztikai tulajdonsága is jó egyezőséget mutat a DDD szimulációk eredményével.

Felismerve a tényt, hogy az SCP modell lényegi elemei megfogalmazhatók diszlokációk nélkül is, a modell megfelelő kiegészítéssel alkalmazhatóvá az általánosságban véve belső rendezetlenséggel rendelkező anyagok vizsgálatára, amelyek nagyskálán homogének, kisskálán inhomogének. Ilyenek például a fémüvegek és a fémhabok. Ezen anyagok alakítási lágyulást szenvednek, és törésük visszavezethető a deformáció lokalizációjára. A célom az volt, hogy ezen anyagoknak vizsgáljam a deformáció lokalizációját, ami végül ezen anyagok töréséhez vezet. Ehhez a legfontosabb kiegészítése a modellnek az alakítási lágyulás bevezetése volt. Ezt úgy vettem figyelembe, hogy a helyi folyásfeszültség várható értékét a deformációval arányosan csökkentettem, és a csökkentés mértékét pedig úgy választottam meg, hogy egy önkényesen választott 16-os deformáció értéknél váljon a folyásfeszültség 0-vá. A testünk törésének pedig azt a pontot tekintettem, amikor egy cella deformációja elérte a 16-ot. Továbbá a szimulált törési tesztek deformáció kontrolláltak voltak.

A rendezetlenséget pedig különböző, a folyásfeszültséget megadó valószínűségi eloszlásfüggvény használatával kontrolláltam. Az egyszerűség kedvéért ugyanazt a függvény-osztályt, a Weibull-eloszlásokat használtam az alábbi alakparaméterekkel. A kézenfekvőségén túl ezt a függvény-osztályt inspirálja az is, hogy ha az egyes cellák folyásfeszültségét egy leggyengébb-láncszem folyamat határozza meg, akkor Weibull-eloszlást kapunk. Felhívnám a figyelmet arra, hogy egy ilyen eloszlásban a rendezetlenséget növeli \beta értéke.

Több szimuláció kiátlagolt feszültség-deformációs görbéit vizsgálva azt láthatjuk, hogy noha a nagyobb rendezetlenséggel rendelkező anyagoknál már kisebb feszültség mellett megjelenik a plasztikus deformáció, az elérhető legnagyobb külső nyíróerő jelentősen megnő, akárcsak az elérhető teljes deformáció.

Hogy megértsük, hogy mi okozza a megnövekedett szívósságot, ábrázoltam a helyi képlékeny alakváltozás nagyságát a nagy és kis rendezetlenségű anyagokra a maximális feszültség értékénél és a törésnél. Az látható, hogy a nagy rendezetlenségű anyagnál számos helyen indul meg a deformáció lokalizációja, de mivel sok helyre terjed ki, igazán sehol sem tud megerősödni. A kis rendezetlenségű anyagnál viszont könnyen felerősödhet egyetlen deformációs tartomány, amely végül hamar töréshez vezet.

Ezt a minőségi képet mennyiségileg is elemezni lehet egy alkalmasan megválasztott lokalizáció függvénnyel, amire most az idő rövidsége miatt nem térek ki. Mindenesetre az eredmények jó összhangban vannak egy olyan deformáció-lokalizációs képpel, amely azt mondja, hogy egy adott, rendezetlenségtől függő mértékig a deformáció az anyagban homogén módon keletkezik, majd utána minden további deformáció egy véges vastagságú tartományban következik már csak be, a deformáció lokalizálódik, majd hamarosan bekövetkezik a törés. Ezen az ábrán ábrázoltam, hogy átlagosan mekkora deformáció kell a töréshez különböző rendezetlenség és rendszerméret mellett, különböző rendezetlenség és rendszerméret mellett. A szimulációból kapott mérési pontok jól illeszkednek az említett egyszerű kép által jósolt függvény-alakokra, így már mennyiségileg is láthatjuk a rendezetlenség jótékony hatását. Ez a modell továbbá azzal a képpel is jó összhangban van, miszerint a kisebb általában keményebb is.

Az eredményeimet összefoglalva azt mondhatom, hogy a korábban használt SCP modellen megfelelő kiegészítéseket végezve egy olyan modellt kaptam, amelynek alapjai jó összhangban vannak a fémüvegek és fémhabok deformációs tulajdonságaival. Ugyanakkor az eredmények azzal a következetes és meglepő ténnyel szolgálnak, hogy a rendezetlenség növelése növeli az alkalmazható legnagyobb feszültséget azáltal, hogy késlelteti a deformáció lokalizációját, így a törést is. Egy ilyen modell alkalmazhatósága azért jelentene rendkívüli előnyöket, mert a molekuladinamikai szimulációkhoz képest, amelyeket ilyen anyagok törésének vizsgálatára használnak, lényegesen gyorsabb.

A következő modellem a diszlokációk mintázatképződését vizsgálja. A korábban bemutatott, diszlokációlavinák modellezésére használt SCP modell a diszlokációk átlagtér-elméletére épül, azaz megáll az egyrészecske-sűrűségnél, és a kétrészecske-sűrűséget az egyrészecske-sűrűségek szorzatából számolja. Ha ennél tovább akarunk menni, akkor be kell vezetni a kétrészecske-korrelációt, amely azonban lényegesen összetettebbé teszi a kontinuum modellt. A legegyszerűbb esetben, amely már éppen túlmutat az átlagtér-elméleten, alkalmazhatjuk a lokális sűrűség közelítést, amelynél a korrelációs függvény csupán a koordináták különbségétől függ. Számos további közelítéssel élve, mint pl. hogy a külső feszültség elég kicsi, a deformáció lassú és állandó, olyan térelméletet kapunk, amelyben ismét felírhatjuk az egyrészecske-sűrűségek időfejlődését zárt alakban. Ekkor a mozgásegyenletben az átlagtérelmélethez képest két új és egy módosított tag jelenik meg. Az egyik új tag a \rho deriváltjával arányos, ezért ezt diffúziós tagnak nevezik. A másik \kappa deriváltjával arányos, ezt a mérnökök back stressnek nevezik. Illetve a helyi rendezetlenséget immár egy olyan tag veszi figyelembe, amelynek az értéke felülről korlátos, és \rho gyökével arányos, ezért ennek a tagnak immár jogosan folyásfeszültség a neve. Ezen tagok együtthatói a korrelációs függvényből számolhatók. A \rho és \kappa mennyiségekre felírt mozgásegyenletek lineáris stabilitáselemzésével az látható, hogy azok képesek mintázatba rendeződni.

Doktori munkámban egy ilyen kontinuum-elméleti modellt implementáltam sejtautomatával és vizsgáltam a kialakuló mintázat hullámhosszfüggését a bemeneti paraméterek függvényében, távol a homogén egyensúlytól. Ezen az ábrán az látható, hogyan alakul ki \kappában a mintázat a növekvő deformáció mellett. A modell működése az SCP modelléhez hasonló, de itt már nem csak a \kappa, de a \rho változását is figyelembe vettem, továbbá az átlagtér-elmélethez képest két új és egy módosított erő is megjelenik a mozgásegyenletben. A folyásfeszültség esetemben ismét egy valószínűségi változó volt, amelynek felső korlátja gyök \rhoval arányos, ezáltal téve a modellt sztochasztikussá.

Eredményeimet összehasonlítottam a német kutatótársaink egy olyan implementációjával, amelyik folytonos tér és idődimenzióban fejlesztette a térmennyiségeket (a számítógépes számábrázolás korlátai között), és nem tartalmazott a folyáshatárra nézve sztochasztikus elemet. Az ábrán kékkel és zölddel láthatók a determinisztikus-kontinuum modell, illetve pirossal a sztochasztikus, sejtautomata modell eredményei. Az ábráról az látható, hogy a két modell jó összhangban van egymással, és a lineáris stabilitáselemzés jóslata jó egyezőséget mutat a megjelenő mintázattal a homogén megoldástól távol is.

Összegezve az itt elért eredményeimet azt mondhatom, hogy sikerült a diszlokációknak egy olyan kontinuumelméleti modelljét implementálnom, ami már túlmutat az átlagtér-közelítésen. Az elkészített modellben valóban megjelenik a diszlokációmintázat, amelynek a karakterisztikus hullámhossza jó egyezőséget mutat az elmélettel. A modell előnye, hogy a lineáris tartományon túl is képes vizsgálni a mintázat fejlődését. Továbbá a kétfajta implementáció összehasonlítása alapján mondhatjuk, hogy a megjelenő mintázatok robusztusak, mert nemcsak a folytonos tér és időváltozójú, determinisztikus modell adott jó egyezőséget, hanem az általam létrehozott, erősen diszkretizált és sztochasztikus elemeket tartalmazó modellem is.

Nincs elmélet azonban, ami a kísérletet helyettesítené tudná, ezért a doktori munkámban hangsúlyt fektettem abba is, hogy a kérdéskör kísérletileg is könnyebben vizsgálhatóvá váljon. Ennek érdekében az ábrán látható eszközt készítettem el, a nanoindenter lelkét, amelynek az elmozdításával a benyomófej a mintába nyomódik, és amely eszköz torzulásából a mintára ható nanoN-os pontossággal számolható.

A tervezett eszköz az itt látható mérési összeállítás szerves részét képezi, amellyel a kísérleteket végeztük. A mintát egy síkban mozgathatjuk és alatta közvetlenül helyezkedik el az akusztikus emissziós detektor. A benyomófejet a mintához közel mozgatja egy előmozgató motor, majd a deformáció során egy precíziós motorral mozgatjuk a nanoindentert. A nyomás alatt lévő minta visszahat a rugóra, ami ezért megnyúlik, és a kapacitív távolságmérő segítségével megmérjük az elmozdulását, amiből a rugóállandó ismeretében már számolható a mintára ható erő. A minta teljes deformációja pedig a finom z motor elmozdulásának és a kapacitív szenzor által jelzett elmozdulások különbségéből számolható. Az eszköz megalkotása igazi csapatmunka volt, amelyben össze kellett hangolnom a kutatótársaktól érkező igényeket a rendelkezésre álló eszközökkel, technológiával és személyzettel, hogy a megfelelő terveket elkészíthessem majd az eszközt legyártathassam.

Az összeállítás képességeit először egy PLC instabilitást mutató anyagon demonstráltuk. Azért ilyenen, mert jól elkülöníthetően detektálható akusztikus jeleket akartunk kapni, illetve a diszlokációlavinák méréséig még ki akartuk tapasztalni a rendszert. A mért feszültség-deformációs görbére az akusztikus emissziós jeleket ráillesztve ezt az ábrát kaptuk. Ezen az látható, hogy a feszültségesés az akusztikus jelek után következik be. Ennél azóta már lényegesen jobb eredményeink is vannak, amelyekre a bírálói kérdésekben hamarosan vissza is térek.

Összefoglalva az eredményeket azt mondhatom, hogy sikerült egy nanoindentert összeállítani, amely elfér az elektronmikroszkópban, tudunk vele in-situ kísérleteket végezni és sikeresen tudjuk a deformáció közben az akusztikus emissziós jeleket is detektálni.

Köszönöm a figyelmet.