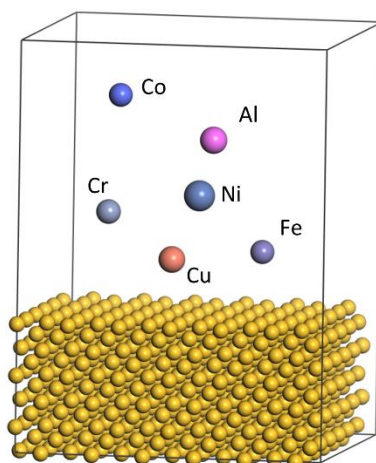


Simulace růstu tenkých vrstev vysokoentropických slitin pomocí molekulární dynamiky

Vedoucí práce: doc. Ing. Ladislav Kalvoda, CSc.

Konzultanti: Ing. Miroslav Lebeda a Ing. Jan Drahokoupil, Ph.D.

Vysokoentropické slitiny (HEAs – High-entropy alloys) jsou unikátní skupinou látek díky svému složení, která kombinuje pět a více elementárních prvků ve stejných či blízkých atomových poměrech. Díky vysoké entropii směsi je potlačeno formování křehkých intermetalických fází a jsou preferovány jednoduché symetrické struktury jako kubická plošně či prostorově centrovaná. Jednotlivé prvky jsou náhodně rozmístěny v daných specifických polohách dané struktury. HEAs slitiny nabízejí široké uplatnění v inženýrských aplikacích díky své vysoké pevnosti, tvrdosti, odolnosti proti otěru a oxidaci, či odolnosti proti měknutí při vysokých teplotách.



Molekulární dynamika (MD) je simulační přístup nejenom ve fyzice pevných látek, který popisuje pohyb jednotlivých atomů v dané látce v rámci klasické fyziky. Umožňuje snadno simulovat teplotu a s využitím současných počítačových serverů je možné počítat systémy o velikosti až několika miliónů atomů.

Návrh bakalářské práce je kombinací dvou témat, kterým se lidé u nás na katedře věnují a obsahuje základy počítačových simulací v rámci MD a HEAs slitin. V následujících letech je možné v tématu přímo pokračovat, rozšířit ho (např. na simulaci mechanických vlastností nasimulovaných tenkých vrstev), vydat se směrem simulačního mága a objevovat kouzla předpovídání chování látek, či se vydat směrem mnoha experimentálních technik při pochopení chování HEAs slitin.

Neváhejte a nezávazně se zastavte dozvědět se o tématu více: ladislav.kalvoda@fjfi.cvut.cz