

Počítačové modelování materiálů

Přehled výzkumných témat, možnosti bakalářských a diplomových prací

Jana Pavlů^{a,b}

Prof. Jan Vřešťál

Prof. Mojmír Šob

^a Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Brno

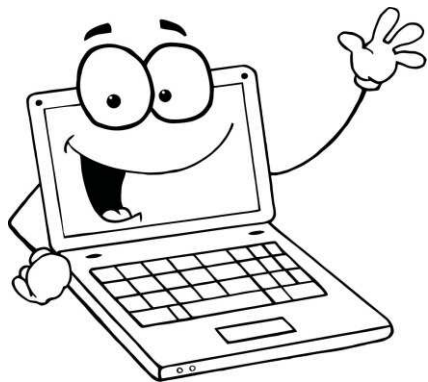
^b Středoevropský technologický institut, CEITEC MU,
Masarykova univerzita, Brno

Teoretické = počítačové experimenty

- získání experimentálně nedostupných dat
- levnější než příprava a analýza látky

1. Studium **energií, magnetismu a mechanických vlastností** materiálů

- vychází ze základních rovnic kvantové chemie



2. Výpočty **fázových rovnováh** a predikce **fázových diagramů**

- založeny na termodynamice

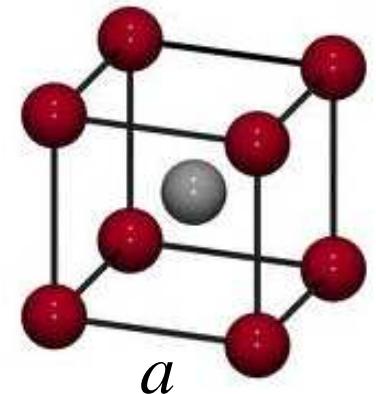


Kvantově-mechanické výpočty



Vstupy – experimentální data + protonové č.

```
Fe_bcc :
 2.9315000000000000
 1.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 1.0000000000000000 0.0000000000000000
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 1.0000000000000000
 1 1
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.5000000000000000
~
```



Výstupy

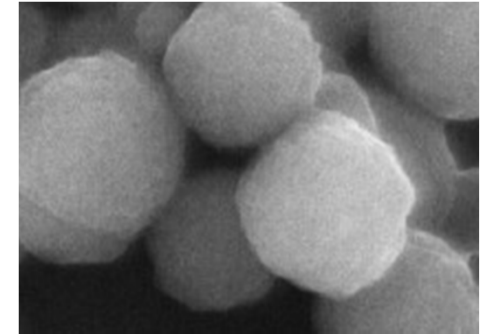
- experimentálně nedostupné informace
- stabilita a magnetismus
- mechanické vlastnosti (teoretická pevnost)
- typ a pevnost vazeb

Technologicky zajímavé problémy

- stabilita fází a jejich uspořádanost
- povrchy, rozraní (energie, magnetismus)
- vlivy a chování příměsí (segregace)

Hf-V - fázové transformace
Al-Fe-Ti - uspořádanost

Fázové diagramy v materiálovém výzkumu



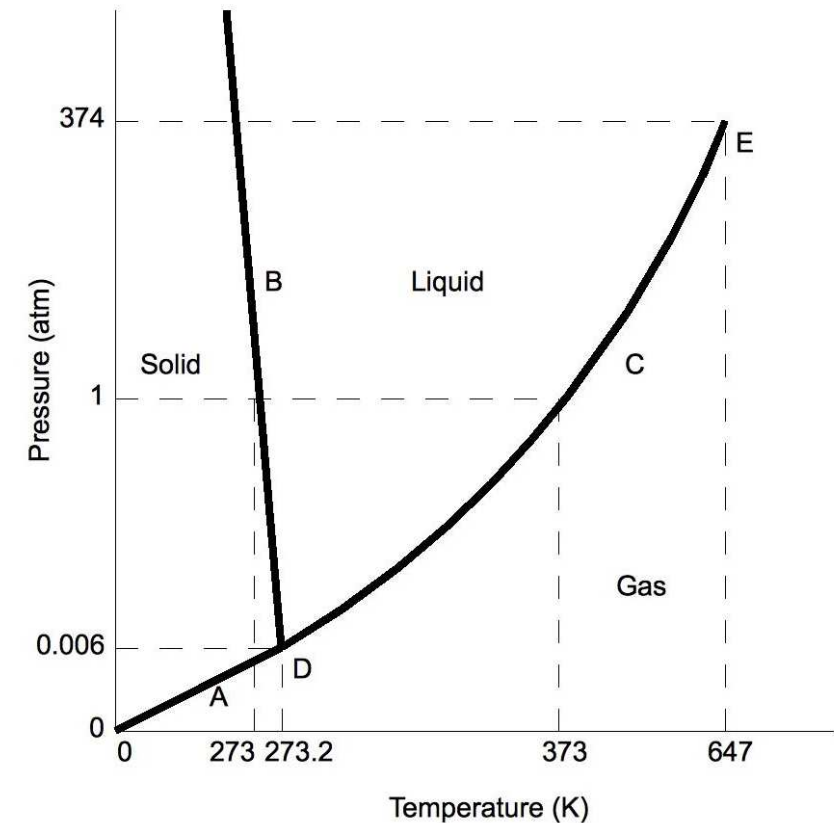
Vstupy - databáze termodynamických dat

Výstupy

- fázové diagramy komplexních systémů odpovídající experimentálním poznatkům
- předpovědi oblastí stability struktur v závislosti na teplotě a složení

Studované materiály

- termoelektrika
- oceli, intermetalické fáze
- nanomateriály
- Al-Fe-Ti



Spolupráce

v oblasti teoretického i experimentálního výzkumu

- Dr. Martin Friák – Ústav fyziky materiálů, Akademie věd ČR
- University of Vienna, Rakousko
- Pedagogical University Crakow, Polsko
- University Marseille, Francie

Technické zabezpečení

K dispozici je špičkové vybavení na světové úrovni

- Software
 - Ab initio výpočty – programy VASP, WIEN2k
 - Termodynamické modelování – programy Thermocalc, Pandat
 - Fononová spekter – program Phonon
- Vlastní výpočetní klastr
- Přístup na další výpočetní kapacity – MetaCentrum, IT4I Ostrava

Výhody

- **Zefektivnění práce s PC a zvládnutí obsluhy speciálních programů**
- **Flexibilní pracovní doba** – práce přes internet, z domu
- **Finanční podpora** vědecké práce – konference, stáže
- Možnost práce na špičkových vědeckých institucích
Od čistě základního výzkumu k aplikacím

Např.:

- Vysvětlení vlastností hmoty na fundamentální úrovni
- Vztah mezi strukturou a vlastnostmi technicky významných materiálů
- Výpočty fázových diagramů

Kontakt:
Jana Pavlů

houserova@chemi.muni.cz