

1. Raziskovalna organizacija:

Univerza v Ljubljani, <i>Naravoslovnotehniška fakulteta</i>

2. Ime in priimek mentorja:

Goran Kugler

3. Področje znanosti iz šifranta ARRS:

2.04.02 Tehnika, Materiali, Kovinski Materiali
--

4. Kontaktni e-naslov mentorja:

goran.kugler@omm.ntf.uni-lj.si

5. Kratek opis programa usposabljanja:

Lastnosti mnogih industrijsko pomembnih zlitin so močno odvisne od izločanja delcev drugih faz. Na primer mehanske lastnosti mnogih jekel, ki se v več sto milijonih ton uporabljajo pri izgradnji infrastrukture, ki nam izboljšuje kakovost življenja, so odvisne od karbidov, nitridov in karbonitridov, ki se pri visokih temperaturah izločajo iz avstenitne faze, pri nizkih pa iz feritne faze. Med zlitine pri katerih igra izločevanje zelo pomembno vlogo spada tudi skupina tehnološko zelo pomembnih Al zlitin z dodatkom Mg, Si in Zn (6xxx in 7xxx) za katere je značilno kompleksno zaporedje tvorbe in razpada metastabilnih faz v odvisnosti od temperature, časa in kemične sestave zlitine. Obstaja torej jasna potreba po globljem razumevanju in modeliranju vseh vidikov izločanja delcev drugih faz v mikrostrukturi kovinskih zlitin. Za uspešno napovedovanje lastnosti kovinskih zlitin med in po njihovem termomehanskem procesiranju potrebujemo poleg njihove mikrostrukture tudi informacijo o izločkih in sicer o njihovem številu, volumskem deležu in o njihovi porazdelitvi po velikosti. Literaturni pregled področja modeliranja izločanja v kovinskih zlitinah pokaže, da lahko modele, ki omogočajo učinkovit opis kinetike izločanja, v grobem razdelimo v tri glavne skupine. V prvo skupino spadajo tako imenovani atomistični modeli, ki temeljijo na kinetični Monte Carlo metodi, kjer eksplicitno obravnavamo difuzijo posameznih atomov. V drugo skupino, kamor spada tudi tematika, na kateri bo potekalo usposabljanje mladega raziskovalca, spadajo metode, kjer zasledujemo dinamiko razvoja grušč (cluster dynamics), medtem ko modeli tretje skupine v bistvu temeljijo na klasični nukleacijski teoriji in na izrazih za rast/raztapljanje izločkov.

Metoda dinamike razvoja grušč obravnava zlitino kot mrežni plin grušč elementov topljenca, pri čemer je gruča opredeljena s številom atomov, ki jo sestavljajo. Za vsako gručo lahko definiramo prosto energijo. V ravnatežju prosto energijo plina grušč sestavljata dva prispevka: prvi je vsota prostih energij posameznih grušč in drugi entropija mešanja grušč na mreži. Če pa plin grušč ni v ravnatežju v sistemu poteka proces izparevanja in kondenzacije monomerov, ki ga opišemo z razvojem verjetnostne porazdelitve grušč (master equation). Velika uporabnost te metode je v tem, da je z njo možno dobiti identične rezultate kot s simulacijami po atomistični mrežni kinetični Monte Carlo metodi, pri čemer je slednja veliko bolj računalniško intenzivna in je zato za dolge čase manj uporabna. V okviru raziskovalne tematike, na kateri bo potekalo usposabljanje mladega raziskovalca, bo potrebno razviti računalniški okvir, orodja in modele, s katerimi bo mogoče v okviru metode dinamike razvoja grušč in vzporedno s kinetično Monte Carlo metodo, napovedovati kinetiko izločanja v kovinskih zlitinah, ki so podvržene kompleksnim termomehanskim potem in ki jih običajno srečamo med njihovim industrijskim procesiranjem.