

# Nabídka teoretických a simulačních témat (BP/VÚ/DP) Oddělení D5, Ústav termomechaniky AVČR, akad rok 2024/2025

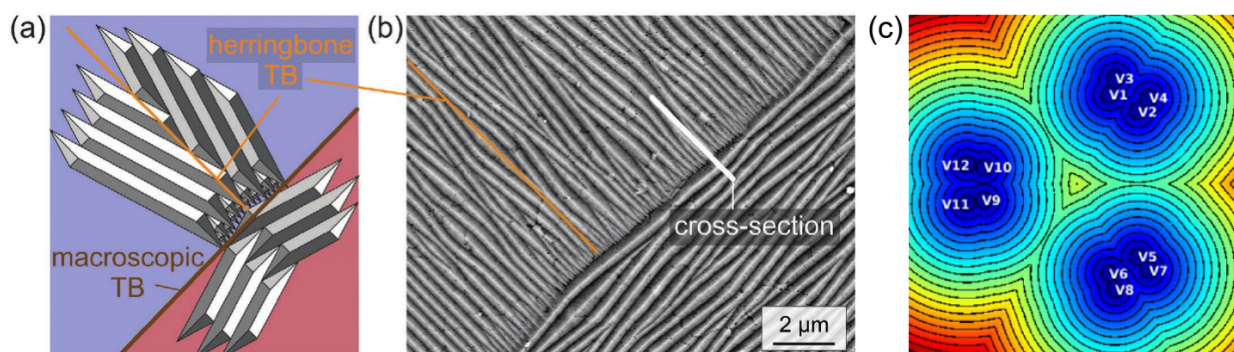
## 1. Nelineární teorie elasticity martenzitů a modelování tvorby mikrostruktur

Vedoucí tématu: H. Seiner (<https://www.it.cas.cz/en/hseiner/>), hseiner@it.cas.cz

V řadě technologicky významných slitin dochází k bezdifuzním fázovým transformacím, které mají za následek vznik geometricky uspořádaných mikrostruktur. V případě takzvaných inteligentních slitin (slitiny s tvarovou pamětí) lze mikrostruktury aktivně ovládat z vnějšku. Morfologie těchto mikrostruktur a jejich reakce na vnější podněty se řídí matematickou teorií martenzitu, neboli teorií nelineární elasticity feroelastik. Náplní práce by bylo seznámit se s touto teorií a nasimulovat nejprve vznik jednoduchých mikrostruktur v polykrystalech slitiny NiTi. Následovně by bylo možno práci směřovat více směrem k počítačovým simulacím (např. modelování mikrostruktur v superkritických slitinách – spolupráce např. s University of Michigan, USA) nebo k budování teorie (spolupráce např. s Heriot-Watt University Edinburgh).

**Charakter práce:** Programování v jazyce Matlab, případně teoretická práce (algebra matic  $3 \times 3$ , variační počet), porovnání vizualizací modelů s experimentálně pozorovanými mikrostrukturami.

**Příklad výsledku:** Seiner, H., Sedlák, P., Frost, M., Šittner, P. Kinking as the plastic forming mechanism of B19' NiTi martensite (2023) International Journal of Plasticity, 168, art. no. 103697. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2023.103697>



Hierarchická mikrostruktura v multiferroiku Ni-Mn-Ga: (a) modelová predikce na základě teorie martenzitických mikrostruktur, (b) experimentální pozorování na epitaxním filmu, (c) struktura minim energie elastické napjatosti umožňující v modelu vznik pozorovaného patternu.

## 2. Konstitutivní modelování polykrystalů slitin s tvarovou pamětí a/nebo metastabilní biomedicínských slitin na bázi titanu

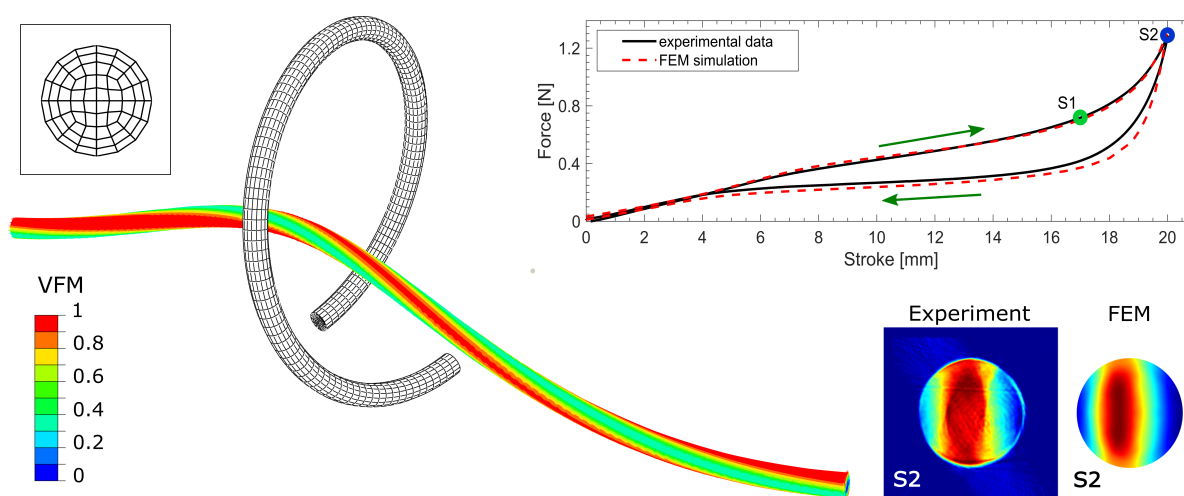
Vedoucí tématu: M. Frost (<https://www.it.cas.cz/en/mfrost/>), mfrost@it.cas.cz

Díky vynikající mechanické pevnosti a chemické odolnosti jsou slitiny titanu využívány v mnoha různých aplikacích v průmyslu nebo lékařství. V poslední době byly vyvinuty nové metastabilní beta-slitiny v nichž mohou cyklicky probíhat vratné martenzitické fázové přechody. Ty jsou typicky pozorované u tzv. slitin s tvarovou pamětí a jsou spojeny s neobvyklou odezvou na mechanické zatěžování (např. pro kovy relativně velká vratná deformace), navíc silně nelineárně závislou na předchozí historii namáhání a na teplotě. Naším cílem je vyvinutí materiálových vztahů pro tyto slitiny a jejich implementace do inženýrských výpočetních nástrojů na bázi metody konečných prvků (např. Abaqus). K tomu je důležité dobře porozumět deformačním procesům probíhajícím v mikrostruktuře materiálů a jejich termodynamice a využít vhodné algoritmy pro řešení výpočetních

úloh daných strukturou modelu. Výzkum probíhá ve spolupráci s Universite de Lorraine Nancy (Francie) a dalšími partnery.

**Charakter práce:** Práce je spíše teoretičtějšího charakteru a zahrnuje také jednoduché programování (základní znalost prostředí MATLAB je výhodou, nikoli však podmínkou) a práci s konečně-prvkovým software. Součástí může být také počítačové vyhodnocení experimentů z difrakční synchrotronové tomografie z ESRF Grenoble.

**Příklad výsledku:** Frost, M., Benešová, B., Seiner, H., Kružík, M., Šittner, P., Sedlák, P. Thermomechanical model for NiTi-based shape memory alloys covering macroscopic localization of martensitic transformation (2021) International Journal of Solids and Structures, 221, pp. 117-129. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2020.08.012>



Experimentální vs. modelová křivka mechanické odezvy superelastické pružiny ze slitiny NiTi, v pravém dolním rohu je výsledek z počítačové difrakční tomografie z ESRF Grenoble.

### 3. Přímé a inverzní v úlohy ve vlnové mechanice anizotropních a heterogenních pevných látek

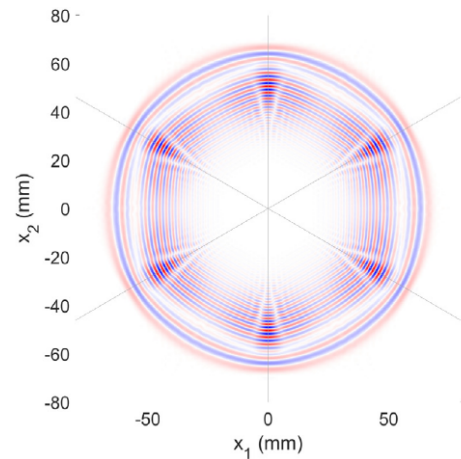
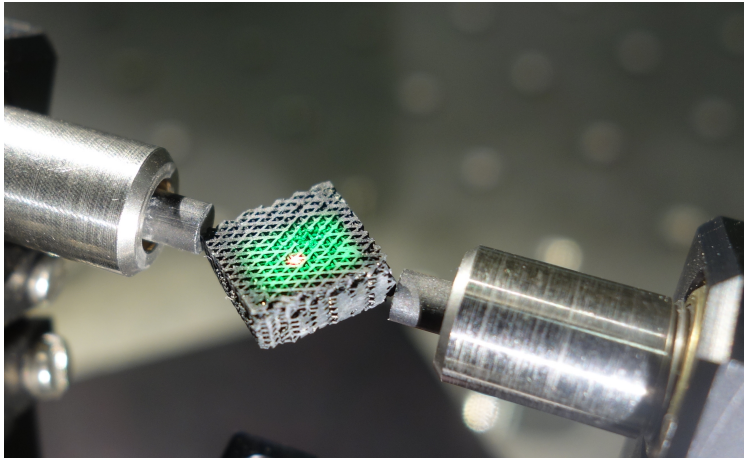
Vedoucí tématu: P. Sedlák (<https://www.it.cas.cz/en/psedlak/>), psedlak@it.cas.cz

V laserově-ultrazvukové charakterizaci pracujeme s šířením vysokofrekvenčních elastických vln (ultrazvuku) v krystalických látkách, a to buďto v monokrystalech, kde rychlost ultrazvukových vln závisí na směru šíření vzhledem ke krystalové mřížce, nebo v polykrystalech, kde vlny procházejí mezi různě orientovanými prostředími a ztrácejí koherenci. To obojí jsou složité elastodynamické děje, které je potřeba simulovat pomocí počítačových modelů. Rozlišujeme přitom mezi takzvanými přímými úlohami (modelování šíření vln v daném prostředí) a inverzními úlohami (iterativní porovnávání simulací s experimentem za účelem zjištění materiálových vlastností). Pro řešení přímých i inverzních úloh byly na ÚT AVČR vyvinuty softwarové balíky v jazyce Matlab, využívající rozvoje vlnového řešení do funkčníchází. Cílem práce bude pomocí těchto balíků studovat přechodové jevy vznikající při laserově-ultrazvukových měřeních, jako zejména tzv. skimming-vlny na volných površích nebo mnohočetné odrazy v odezvě krystalů na pulzní buzení. Výzkum probíhá ve spolupráci s Universite Paris-Saclay (Francie), University of Nottingham (UK) a dalšími partnery.

**Charakter práce:** Modelování pomocí programovacího jazyka Matlab, zpracování experimentálních dat. Součástí práce bude také seznámení se s unikátními experimentálními metodami vyvíjenými na ÚT AVČR (rezonanční ultrazvukovou spektroskopií a spektroskopií s

přechodovou mřížkou) – pochopení jejich principů je nezbytné pro smysluplné použití počítačových simulací.

**Příklad výsledku:** Stoklasová, P., Grabec, T., Zoubková, K., Sedlák, P., Krátký, S., Seiner, H. Laser-Ultrasonic Characterization of Strongly Anisotropic Materials by Transient Grating Spectroscopy (2021) *Experimental Mechanics*, 61 (4), pp. 663-676. <https://10.1007/s11340-021-00698-6>.



Vzorek mikroarchitekturovaného keramického materiálu (spolupráce s ICV CSIC Madrid, Španělsko) při laserově-ultrazvukové charakterizaci, mikroarchitektura vykazuje hexagonální symetrii. Vlevo je výpočet pole šířících se elastických vln v takovém prostředí, získaný metodou modální integrace.