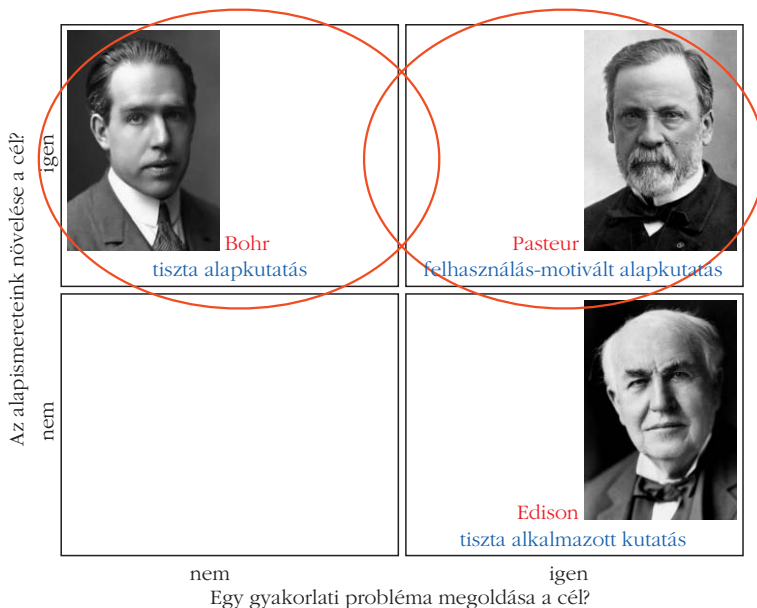


ANYAGTUDOMÁNY SZÁMÍTÓGÉPPSEL – 2. rész

Pusztai Tamás, Rátkai László, Gránásy László
Wigner Fizikai Kutatóközpont, SZFI Kísérleti Szilárdtestfizikai Osztály

Az folyóirat előző és a mostani számában megjelent kétrészes cikk témája a számítógépes anyagtudomány. Az első részben általános áttekintést adtam az anyagtudomány helyzetéről, különösen az új anyagok minél gyorsabb kifejlesztésének igénye kapcsán felmerülő kihívásokról és kezdeményezésekről, amelyben a számítógépes anyagtudománynak fontos szerepe van. A mostani részben pedig néhány olyan, csoportunk által végzett munkát ismertetünk (mivel csoportmunkáról van szó, immár többes szám első személyben), amelyek bemutatják, hogy a számítógépekkel végzett szimulációk miként segíthetik az anyagtudományi folyamatok megértését és miként kapcsolódhatnak valós, gyakorlati problémák megoldásához.



A kutatómunka Stokes-féle felosztása

A kutatási feladatokat hagyományosan az alapkutatóás és alkalmazott kutatóás kategóriákba szoktuk sorolni, ez azonban nem mindig ad elég árnyalt képet az adott munka jellegéről. Ezeket a kategóriákat finomította tovább *Donald E. Stokes* [15], aki két különböző kritérium által meghatározott felosztást javasolt. Az egyik kritérium, hogy az adott kutatási feladat során fontos cél-e a folyamatok meg-

3. ábra. A kutatási feladatok felosztása *Donald Stokes* szerint. Csoportunkban alapkutatóást végzünk, amelynek néha van, néha pedig nincs közvetlen gyakorlati motivációja (pirossal bekarikázott negyedek).

értése, a természet működését leíró alapvető ismereteink bővítése, a másik pedig, hogy a kutatási feladatnak célja-e egy konkrét gyakorlati probléma megoldása. A két kérdésre adott válasz alapján egy 2×2 -es mátrixsal jól reprezentálható felosztást nyerünk, amelynek mezőit az adott terület jellemző kutatójáról *Bohr* (tisztá alapkutatóás), *Pasteur* (felhasználás-motivált alapkutatóás) és *Edison* (tisztá alkalmazott kutatóás) negyedeknek nevezte (3. ábra). A negyedik negyed üresen marad, hiszen ha sem a megértés, sem pedig a felhasználás nem cél, nem beszélhetünk kutatóásról.

A Wigner FK Szilárdtestfizikai és Optikai Intézetében működő csoportunk fő célja mindig a megértés és az alapvető ismereteinket gazdagító alapkutatóás. A fenti csoportosítást azért mutattuk be, mert jól illusztrálja, hogy ezen kategórián belül is léteznek különböző jellegű feladatok. Az alábbiakban nagyon röviden bemutatott néhány munkánkat is ebben a felosztásban tárgyaljuk.

Az MTA Fizikai Osztálya 2018. május 10-i tudományos ülésén azonos címmel elhangzott előadás bővített, írott változata.



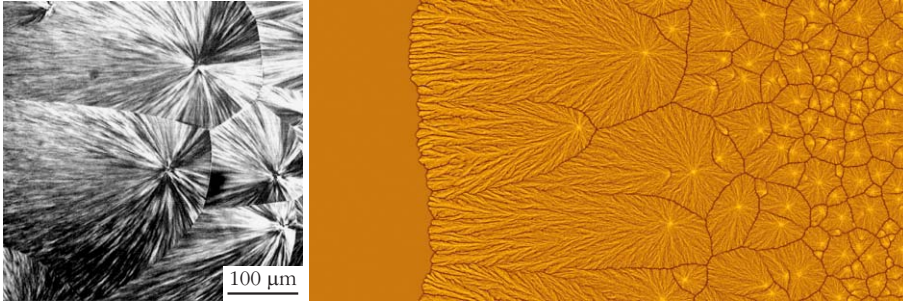
Pusztai Tamás (45) az MTA doktora, az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont tudományos tanácsadója. Kutatásait a számítógépes anyagtudomány területén végzi, azon belül is elsősorban a megszilárdulás során kialakuló növekedési formák fázismezőmodellel történő leírásával foglalkozik.



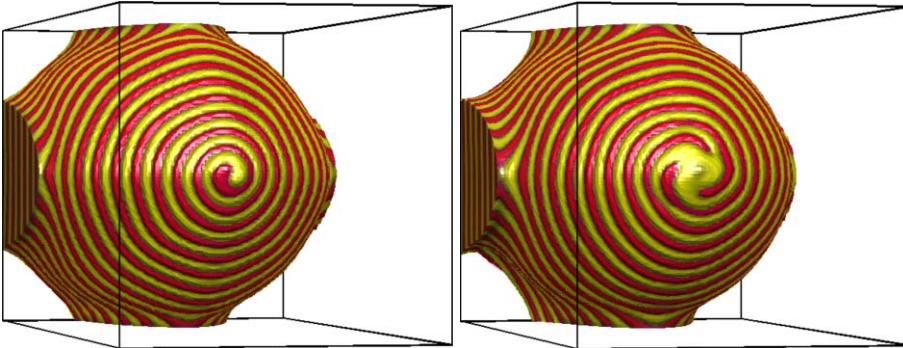
Rátkai László PhD hallgató a Wigner Fizikai Kutatóközpontban komplex megszilárdulási jelenségek fázismező elméleti modellezésével foglalkozik. Eddigi munkáiban a helikális belső szerkezetű eutektikus dendritek kialakulását vizsgálta, valamint a fázismező és Lattice-Boltzmann-egyenletek csatolásával kidolgozta az olvadátkáramlás jelenlétében történő megszilárdulás olyan modelljét, amely megengedi a kialakuló szilárd szemcsék mozgását is.



Gránásy László fizikus az MTA doktora, az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont tudományos tanácsadója, az Academia Europaea tagja. Diplomát és PhD-fokozatot az ELTE-n szerzett. Több európai, amerikai és japán egyetem, kutatóintézet ösztöndíjasa, vendégkutatója, professzora. Fő érdeklődési területe a komplex megszilárdulási folyamatok térrelméleti modellezése atomi skálán működő és lokálisan átlagolt (coarse grained) módszerekkel.



4. ábra. Hőmérséklet-gradiensben növekvő aszimmetrikus szferolitok mikroszkópos felvétele [22] (balra) és számítógépes szimulációja (jobbra). A szimulációs ábrán a színek a kémiai összetételt mutatják.



5. ábra. Helikális belső szerkezetű eutektikus dendritok egy egyszerű ternér rendszerben. A bal oldali ábrán a piros és sárga színnel jelölt szilárd fázisok egyszeres, míg a jobb oldali ábrán háromszoros spirális szerkezetet mutatnak.

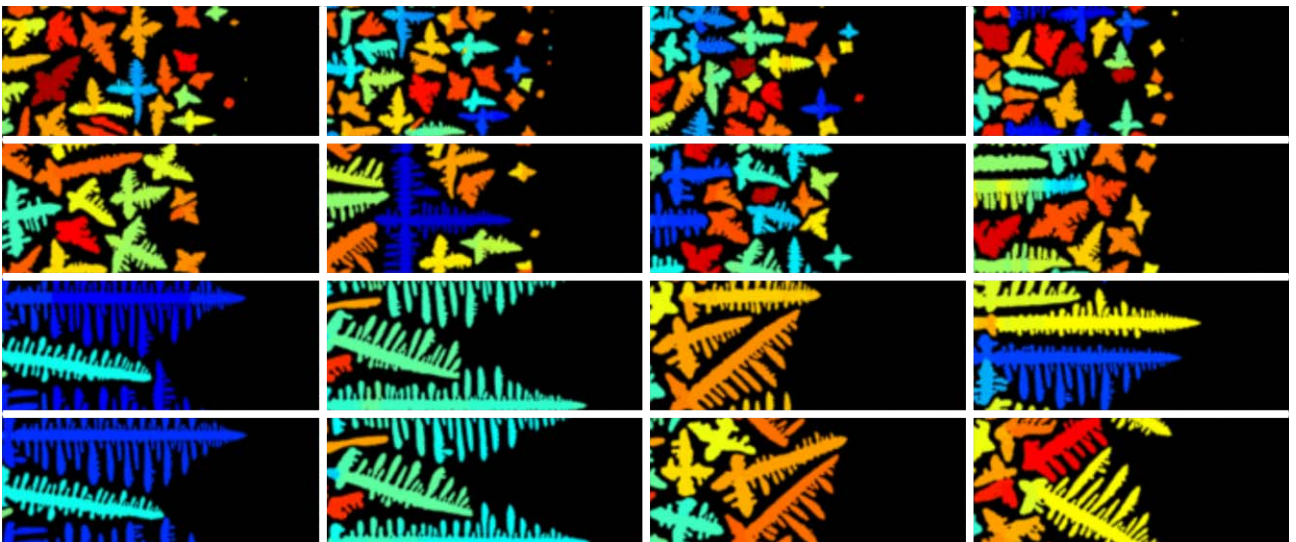
Tiszta alapkutatósi feladatok (Bohr-negyed)

Polikristályos növekedési formák modellezése

Ezt a témakört mindenképpen szeretnénk megemlíteni, hiszen legnagyobb sikereinket ebben értük el [16–18]. Említésnél többre azonban nem vállalkozunk, mert egyrészt a témakör óriási, másrészt e té-

szferolitok népes családja hozható példaként, amelyek – rendezetlen kristályszerkezetük ellenére vagy éppen azért – nagyobb méreteket elérve szabályos, kör-, illetve gömbszerű formát vesznek fel. A kísérletek és nekik megfelelő szimulációk – amire a 4. ábra mutat egy példát – kiváló kvalitatív egyezése azt mutatja, hogy az orientációs mezőn alapuló modellünk jó általános alapot ad a szferolitok kialakulásának leírására.

6. ábra. A növekedési morfológia változása irányított megszilárdulás során. A 4×4 ábra a 4 különböző hőmérséklet-gradiens (balról jobbra nő) és 4 különböző húzási sebesség (lentől felfelé nő) mellett kialakuló mikroszerkezetet mutatja [27]. A színezés az orientáció szerint történt. A vizsgált tartományban kis sebességek esetén az oszlopos, míg nagy sebességek esetén az ekvixiális növekedési forma jellemző.



máról korábban a *Fizikai Szemlében* is részletesen írtunk [19–21]. Munkánk alapja az az orientációs mezővel kibővített fázismezőmodell volt, amelyet csoportunkban fejlesztettünk tovább úgy, hogy az orientációs mező folyadékfázisra kiterjesztésével alkalmassá vált olyan megszilárdulási folyamatok leírására is, amelyek során az orientációs rendeződés nem, vagy csak részlegesen valósul meg. Így a szokásos, orientációsan rendezett, azaz egykristályszerkezetű szilárd szemcsék mellett olyan szemcsék modellezése is lehetővé vált, amelyek már növekedésük során polikristályos szerkezetet alakítanak ki. Az előbbire példa a dendrites megszilárdulás, amelynek során hópelyhekhez hasonló, azok szerkezeti sajátosságait mutató szabályos formák fejlődnek, az utóbbira pedig a

Helikális belső szerkezetű eutektikus dendriték

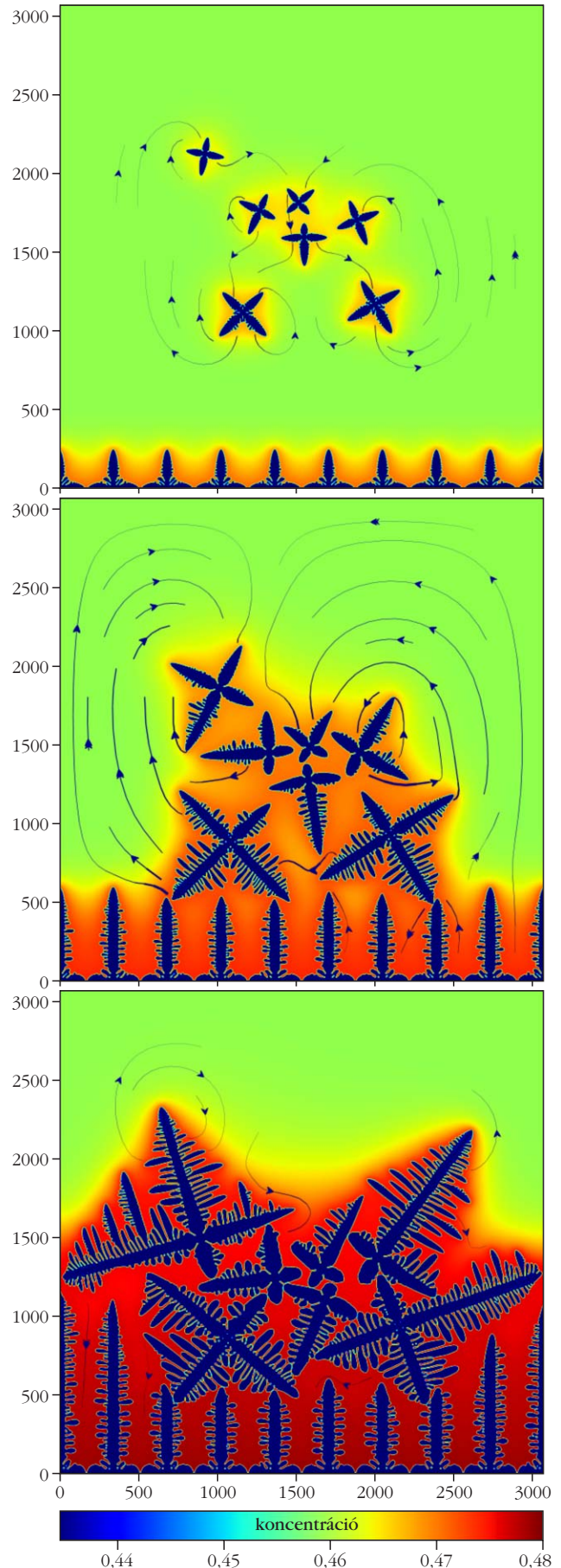
Ezt a munkát francia kollégáink lenyűgöző kísérleti felvételei motiválták [23]. Egy átlátszó háromkomponensű ötvözet megszilárdulásának mikroszkópos vizsgálata során helikális belső szerkezetű dendrites növekedési formákat figyeltek meg. Bár ez a növekedési forma elég összetett, de kialakulásában szerepet játszó folyamatok egyszerűek. Megmutattuk, hogy egy szimpla ternér, a folyadék és szilárd fázisokra ideális, illetve regulárisoldat-modelleket feltételező fázismezőmodellel ez a növekedési forma is jól reprodukálható [24, 25]. A szimulációkban nem csak egyszeres, hanem többszörös spirálokat is megfigyelhettünk (5. ábra). A különböző számú spirálkarból álló megoldások akár ugyanolyan anyagi és egyéb fizikai paraméterek mellett is létrejöhetnek. Azt, hogy a több lehetőség közül az adott rendszerben melyik megoldás és melyik csavarodási irány valósul meg, a rendszerben jelen levő fluktuációk határozzák meg. A spirálkarok számának várható értéke a dendrit csúcsának görbületét meghatározó paraméterek (dendritcsúcs-sebesség, felületi szabadenergia, kinetikus anizotropia) függvénye [26].

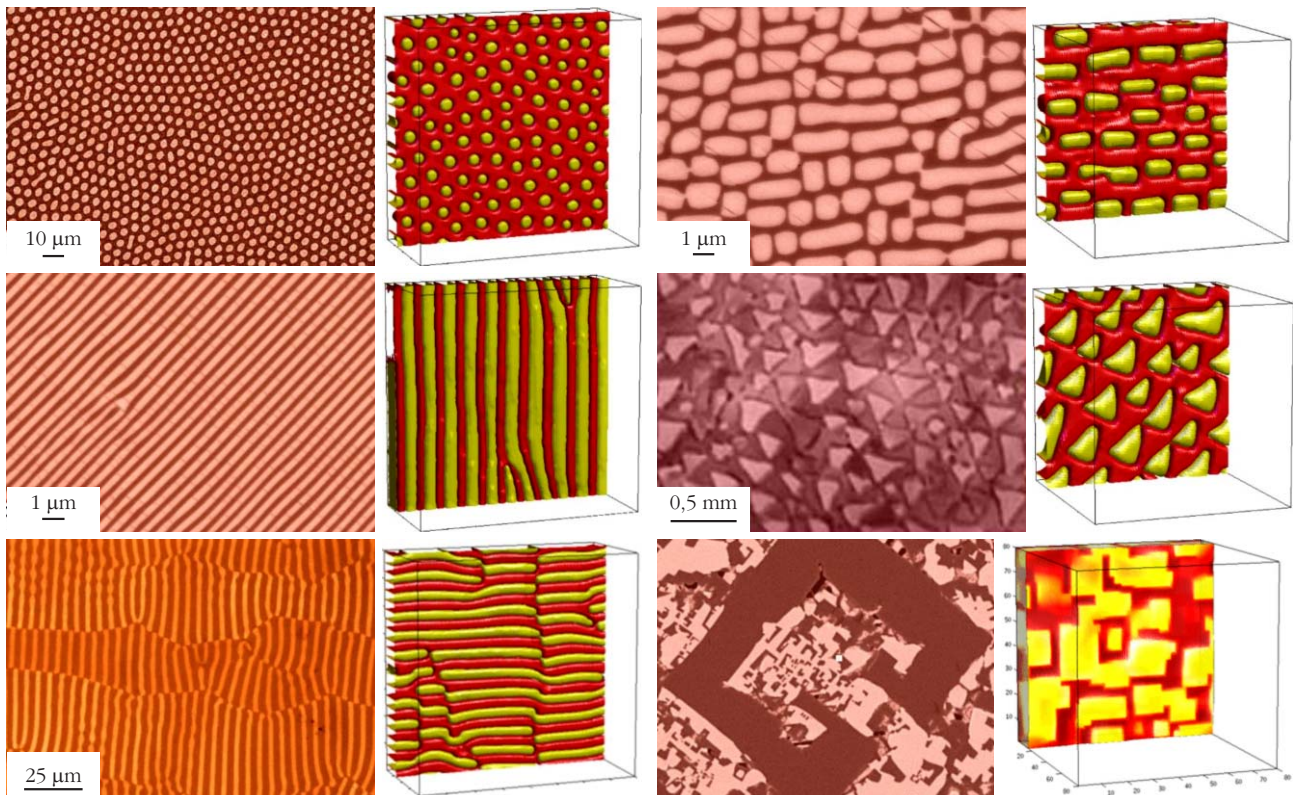
Felhasználásmotivált alapkutató feladatok (Pasteur-negyed)

IMPRESS projekt

A technikai ötvözetek mechanikai tulajdonságait alapvető módon határozza meg a megszilárdulás során kialakuló mikroszerkezetük. Egy öntéssel előállított eszköz esetén az olvadék megszilárdulása a leghidegebb helyen, azaz az öntőforma falán indul meg. A szilárd fázis növekedési formáját elsősorban a ∇T hőmérséklet-gradiens és a megszilárdulási front hűtési sebességtől függő v haladási sebessége határozza meg. A kialakuló mikroszerkezet eleinte az edény falán képződött szilárd magokból kiinduló, karácsonyfaszerű oszlopos dendritekből áll, amely később (∇T és v lokális értékeinek változása miatt) a megszilárdulási front előtt képződő kristálycsírákból kiinduló ekvixiális dendritekből álló szerkezetbe vált át (6. ábra). Ezen – angolul Columnar to Equiaxed Transition (CET) nevezett – folyamat megértése és kontrollálása tehát óriási gyakorlati jelentőséggel is bír. Egy korábbi, mintegy 40 európai kutatóintézet részvételével létrejött IMPRESS nevű EU FP6-os projektben ezen átalakulás modellezése volt a feladatunk. A programcélja egy olyan Al-Ti alapú repü-

7. ábra. Az oszloposról ekvixiális növekedésre váltás (Columnar to Equiaxed Transition, CET) számítógépes szimulációja az ekvixiális részecskék mozgásának figyelembevételével. Az egymást követő képek a szimuláció időben egymást követő pillanatképei, a színezés az Al-Ti rendszer Al-tartalmát (mol%) mutatja. A titánban gazdag dendriték a gravitációs tér hatására lefelé mozognak. Ez a mozgás áramlást kelt az olvadékban, ami visszahat a részecskék mozgására és növekedésére is.





8. ábra. Néhány olyan eutektikus szerkezet, amelyek kialakulását jól és egy olyan, amelyet nem annyira jól (jobbra lent) sikerült modellezni. A képek a kísérleti felvételeket és a nekik megfelelő szimulációkat mutatják.

lőgép-hajtómű turbinalapát előállítására volt, amely a szokásosan használt Ni-alapú szuperötvözetekhez képest jelentősen kisebb sűrűségű, de legalább olyan jó mechanikai tulajdonságokkal bír, még a meglehetősen magas, 1000 K körüli üzemi hőmérsékleten is.

GRADE CET projekt

A CET tanulmányozására eddig felírt elméleti modellek és numerikus szimulációk nem, vagy csak részlegesen vették figyelembe az olvadátfázis áramlásának hatását, amelyet a szilárd és a folyadék fázisok közötti, valamint az olvadék kémiai összetételétől függő sűrűségkülönbsége hajt a gravitációs tér jelenlétében. Az olvadékáramlás hatásának vizsgálata célszerűen az áramlást hajtó hatás, azaz a nehézségi erő hangolásával lehetséges. A gravitáció CET-re gyakorolt hatásának tanulmányozása az Európai Űrügynökség (European Space Agency, ESA) által finanszírozott GRADECET projekt feladata, amelyben a folyamat kísérleti és elméleti vizsgálata történt hipergravitációs (1–20g nehézségi gyorsulás az ESA nagy átmérőjű centrifugájában) és mikrogravitációs (10^{-5} g nehézségi gyorsulás az ESA MAXUS rakétájában) környezetben. E projektben is a modellezés volt a feladatunk (7. ábra). Az áramlási tér egyrészt a megszilárdulási front előtt kialakuló kémiai összetételeloszlás módosításán keresztül befolyásolhatja jelentősen a növekedési formát, másrészt az oszloposan növekvő dendritok előtt képződő ekvixiális

dendritok „szállításával” átrendezheti azok eloszlását, amittől az oszlopos növekedés blokkolása más feltételek mellett következhet be. Az előbbi folyamat figyelembe vételére már korábban is történtek próbálkozások, de az utóbbi folyamat modellezése csak az elmúlt években történt meg. A stabilnak és hatékonynak bizonyult megközelítésünk lényege, hogy minden ekvixiális részecskét egy külön mobil alrácra helyezünk. A részecskék növekedési egyenleteit ezen alrácokon oldjuk meg, a részecskéket viszont az alrácokon keresztül, a rögzített globális rácson megoldott Lattice–Boltzmann-egyenletek szerint meghatározott áramlási térnek megfelelően mozgatjuk.

ENSEMBLE projekt

Az ENSEMBLE nevű projekt célkitűzése metaanyagok előállítására volt eutektikus önszerveződés felhasználásával. Metaanyagoknak azokat a természetben általában nem előforduló anyagokat nevezzük, amelyek különleges tulajdonságaikat valamilyen ismétlődő szerkezetüknek köszönhetik. Ilyen különleges tulajdonság például a negatív törésmutató. Ahhoz, hogy ezek a különleges tulajdonságok az optikai tartományban lépjenek fel, az ismétlődő szerkezet periódusának összemérhetőnek kell lennie a fény hullámhosszával. A 100–1000 nm tartományban periodikus szerkezetet kialakítható anyagok előállításának egyik ígéretes módja az eutektikus önszerveződés felhasználása. Az eutektikus megszilárdulás során az olvadátfázisból egyszerre két szilárd fázis alakul ki. A

megszilárdulást kontrolláló két alapvető folyamat – a kisebb hosszakat preferáló diffúzió és a kisebb görbületeket, azaz nagyobb távolságokat kedvelő kapillaritás – versengéseként a szerkezetben egy jellemző méretskála alakul ki, az anyagi és külső kontrollparamétereiktől függő, úgynevezett Jackson–Hunt-hullámhossz. A projekt keretében egy elméleti csoport által meghatározott, adott optikai tulajdonságokat biztosító eutektikus szerkezeteket valósítottunk meg, olyan anyagokban, ahol a két szilárd fázis optikai tulajdonságai jelentősen eltérők. Mi számítógépes szimulációkkal próbáltuk feltérképezni az adott szerkezet kialakításához szükséges paramétereket, míg egy kísérleti csoport ténylegesen előállította az adott szerkezetű anyagokat (8. ábra) [28].

Irodalom

15. Donald E. Stokes: *Pasteur's Quadrant – Basic Science and Technological Innovation*. Brookings Institution Press, 1997.
16. László Gránásy, Tamás Pusztai, James A. Warren, Jack F. Douglas, Tamás Börzsönyi, Vincent Ferreiro: Growth of 'dizzy dendrites' in a random field of foreign particles. *Nature Materials* 2/2 (2003) 92–96.
17. László Gránásy, Tamás Pusztai, Tamás Börzsönyi, James A. Warren, Jack F. Douglas: A general mechanism of polycrystalline growth. *Nature Materials* 3/9 (2004) 645–650.
18. László Gránásy, Tamás Pusztai, György Tegze, James A. Warren, Jack F. Douglas: Growth and form of spherulites. *Physical Review E* 72/1 (2005) 011605.
19. Gránásy László, Pusztai Tamás, Börzsönyi Tamás: A polikristályos megszilárdulás térelméleti modellezése. *Fizikai Szemle* 55 (2005) 203–211.
20. Pusztai Tamás, Bortel Gábor, Tóth Gyula, Gránásy, László: Komplex kristálymorfológiák modellezése három dimenzióban. *Fizikai Szemle* 56 (2006) 412–415.
21. Gránásy László: Számítógépes anyagtudomány: Tűkristályoktól a komplex polikristályos alakzatokig. *Fizikai Szemle* 67 (2017) 403–406.
22. Andrzej Pawlak, Ewa Piorkowska: Crystallization of isotactic polypropylene in a temperature gradient. *Colloid and Polymer Science* 279/10 (2001) 939–946.
23. Silvère Akamatsu, Mikaël Perrut, Sabine Bottin-Rousseau, Gabriel Faivre: Spiral Two-Phase Dendrites. *Physical Review Letters* 104/5 (2010) 056101.
24. Tamás Pusztai, László Rátkai, Attila Szállás, László Gránásy: Spiraling eutectic dendrites. *Physical Review E* 87/3 (2013) 032401.
25. Szállás Attila, Rátkai László, Pusztai Tamás, Gránásy, László: Helikális mintázat eutektikus ötvözetekben. *Fizikai Szemle* 63 (2013) 333–337.
26. László Rátkai, Attila Szállás, Tamás Pusztai, Tetsuo Mohri, László Gránásy: Ternary eutectic dendrites: Pattern formation and scaling properties. *The Journal of Chemical Physics* 142/15 (2015) 154501.
27. László Gránásy, László Rátkai, Attila Szállás, Bálint Korbully, Gyula I. Tóth, László Környei, Tamás Pusztai: Phase-Field Modeling of Polycrystalline Solidification: From Needle Crystals to Spherulites – A Review. *Metallurgical and Materials Transactions A* 45 (2014) 1694–1719.
28. László Rátkai, Gyula I. Tóth, László Környei, Tamás Pusztai, László Gránásy: Phase-field modeling of eutectic structures on the nanoscale: the effect of anisotropy. *Journal of Materials Science* 52 (2017) 5544–5558.

KÉTSZÁLAS NAPÓRA – egy ritkaság Siófokon

Molnár János Albert
Siófok

A Siófokra tervezett napóra jellegét eleve meghatározta a hely sugallta alapötlet: az egyik árnyékvető szál a vízszintes eres és egy függőn a másik. A skála óravonalai az időegyenleg nyolcasával úgy vannak egybeszerkesztve, hogy azok látványos skálarajzot is alkotnak. Így a helyi idő szerint működő kétszálás napóra alkalmas a zónaközép szerinti időeltolódás és a valódi középidő pontos mutatójára. Azaz a napóra kétszálás rendszere és egyedi kialakítása miatt is „napórás szakmai” érdekesség, európai ritkaság. A most bemutatásra kerülő számítási módszer némi kiegészítéssel láncgörbe- vagy V alakú árnyékvető szálhoz is használható.



Molnár János Albert a BME-n szerzett villamosmérnöki oklevelet, ismereteit később más területekkel bővítette. 1965-től 2000. évi nyugdíjazásáig az olajiparban dolgozott. 1970-től oktató egyetemeken előadóként, az UNIDO szervezésében és a Gábor Dénes Főiskolán. 1980-ban doktori dolgozatával társul az Országos Mérésügyi Hivatal Gázipari Hitelesítési Szabályzatainak elkészítéséhez. 450 oldalas könyve a napórák hagyományos és újdonság értékű szakismereteinek monográfiája.

Bevezető

Alighanem akkor kezdődhetett az ember „homo sapiens”-szé válása, amikor rájött arra, hogy van az idő és ennek mibenlétét kezdte firtatni. Hiszen az ősi, afrikai vagy európai barlangrajzok mozgásábrázolásaiban, az egyiptomi piramisok, meg a stonehenge-i és egyéb csillagvizsgáló építmények háttérben az idő létének megismerését, hatásainak firtatását fedezhetjük fel, akárcsak a bibliai, babilóniai vagy a görög bölcsek filozófiai feljegyzéseiben. Az időmérés ókori módszerei és lehetőségei, meg a mindennapi élet érdekei az ősi napórákban találkozáskor öltöttek testet. A napórák évezredek átívelő fejlődése mindenkor a technika, a tudomány és filozófia éppen elért csúcseit mutatja, rögzíti. Így alakultak ki a különféle fajtájú és stílusú árnyékvetők és skálafelületek; a működésmódokat megalapozó csillagászati és matematikai ismeretek. A szoros filozófiai kapcsolat ma is jól látható maradványa a napórák gyakran népi bölcsességeket is közlő feliratait és jelképes festményeit.

Mára a napórák – a hagyományok ápolásán, esztétikai elemeik vagy szakmai érdekességeik bemutatásán túli – eredeti feladata, az idő pontos mérése (és