

Abstrakt

Štruktúrne transformácie v kryštáloch indukované tlakom alebo teplotou sú zaujímavé z fundamentálneho aj praktického hľadiska. Transformácia štruktúry a príslušná zmena všetkých fyzikálnych vlastností poskytuje možnosť vytvorenia nových materiálov s neobyčajnými vlastnosťami, čo demonštruje dobre známy príklad premeny grafitu na diamant v uhlíku. Napriek podstatnému pokroku v ich modelovaní počas posledných dvoch desaťročí, naše chápanie transformačných ciest je stále nedostatočné, najmä za realistických podmienok, ako je prítomnosť defektov, nehydrostatického tlaku, metastability, apod. Táto medzera sa odráža v neschopnosti predpovedať experimentálny výsledok štruktúrnych prechodov, v ktorých hrajú podstatnú úlohu kinetické efekty, ako napr. dekompresia fázy typu β -cínú v Si. Z praktického hľadiska je pravdepodobne ešte dôležitejšie to, že toto neúplné chápanie nám neumožňuje dôležité technologické aplikácie, ako je riadenie transformačného procesu smerom k požadovanej fáze so zaujímavými a užitočnými vlastnosťami. Táto dizertačná práca sa skladá zo šiestich častí: (a) v prvej časti demonštrujeme už publikovanú metadynamickú schému, ktorá dokáže indukovať nukleačný režim v štruktúrnom fázovom prechode a demonštrujeme jej aplikáciu na B1-B2 prechod v NaCl, (b) v druhej časti, aplikujeme túto schému na prípad heterogénej nukleácie na rozhraniach zrn pre spomínaný prechod v NaCl, (c) v tretej časti, aplikujeme túto schému na prechod grafit-diamant, pričom študujeme aj nukleáciu na dislokačných slučkách, (d) v štvrtej časti prezentujeme predbežné výsledky aplikácie schémy na prechody v post-diamantových fázach uhlíka smerujúc k zodpovedaniu otázky, či a ako môže byť syntetizovaná fáza BC8. Taktiež ukazujeme náčrt kolektívnych premenných založených na metódach strojového učenia, ktoré plánujeme použiť na zodpovedanie tejto otázky. (e) V piatej kapitole aplikujeme podobnú metadynamickú schému na α - ω a ω - α prechody v titáne, a napokon (f) v poslednej časti, prezentujeme algoritmus umožňujúci kvantitatívne ohodnotenie vhodnosti kolektívnych premenných na metadynamické simulácie.

Kľúčové slová: štruktúrne transformácie • metadynamika • metastabilita