

## **POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU (W JĘZYKU POLSKIM)**

Głównym celem projektu badawczego jest zbadanie mechanizmu reakcji nieciągłych zachodzących w ciele stałym, ze szczególnym uwzględnieniem reakcji nieciągłego wydzielania z udziałem migrującej granicy ziarna. Reakcja nieciągłego wydzielania pozwala na wytwarzanie materiałów o złożonej strukturze i dobrych właściwościach mechanicznych. Produkt powstający podczas reakcji nieciągłego wydzielania ma strukturę składającą się z równoległych płytek o różnym składzie chemicznym i strukturze przestrzennej.

Reakcje wydzielania nieciągłego są bardzo interesującym tematem badań. Dotychczas została przeprowadzona bardzo duża ilość badań eksperymentalnych, które dały wiele informacji, ale nie wyjaśniły mechanizmu reakcji. Dlatego potrzebne są badania obliczeniowe, które pozwolą zrozumieć ten mechanizm na poziomie atomowym.

Metody dynamiki molekularnej pozwalają na tworzenie komputerowych modeli opisujących ruch każdego atomu w badanym materiale. Zastosowanie tych metod w badaniach obliczeniowych pozwoli zrozumieć mechanizm reakcji nieciągłego wydzielania i wytłumaczyć wyniki badań eksperymentalnych zgromadzone w ostatnich latach.

Dlatego proponowany projekt koncentruje się na dogłębnym poznaniu i opisie reakcji nieciągłego wydzielania zachodzących w stanie stałym, wykorzystując metody symulacji atomistycznych metodami dynamiki molekularnej. Uzyskanie dokładnego opisu wydzielania nieciągłego będzie przydatne w dalszych etapach rozważań dotyczących innych przemian nieciągłych z udziałem migrującej granicy ziarna. Reakcja nieciągłego wydzielania prowadzi do kolejno następujących przemian nieciągłych, dlatego znajomość mechanizmu tej reakcji wliczając jej warunki i moment rozpoczęcia stanowi ważny zbiór informacji, który pozwoli odpowiednio kontrolować procesy przemian nieciągłych. Finalnie umożliwi to zrozumienie i zidentyfikowanie kolejnych stadiów reakcji nieciągłego wydzielania, czy towarzyszących jej zjawisk fizycznych, uwzględniając czynniki energetyczne, geometryczne jak i dyfuzyjne granicy ziarna i frontu reakcji. Natomiast zastosowanie kombinacji różnych technik modelowania atomistycznego ma na celu lepsze poznanie zjawisk fizycznych, które determinują szybkość wzrostu jak i mikrostrukturę powstałego produktu reakcji wydzielania nieciągłego.