

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Powierzchnie nieciągłości, takie jak granice rozdziału faz w materiałach kompozytowych, granice ziaren, czy fronty przemiany fazowej, występują w praktycznie wszystkich materiałach i w zasadniczy sposób wpływają na ich właściwości. Tak więc odpowiednie modelowanie tego typu powierzchni, w tym ich dokładny opis w metodach obliczeniowych, stanowi niezwykle istotny element modelowania materiałów. Dodatkowo, przemianom fazowym może towarzyszyć ewolucja powierzchni nieciągłości, czyli ich nukleacja, propagacja i anihilacja. Ewolucja powierzchni nieciągłości jest źródłem wielu interesujących zjawisk, ale jednocześnie znacząco utrudnia modelowanie powierzchni i materiałów.

Głównym celem projektu jest opracowanie nowych metod obliczeniowych do modelowania ruchomych i nieruchomych powierzchni nieciągłości. W metodach obliczeniowych, na przykład w metodzie elementów skończonych (MES) stosowanej w niniejszym projekcie, wprowadzana jest dyskretyzacja, czyli podział obszaru na małe, regularne podobszary (elementy skończone w MES). Przedmiotem zainteresowania w projekcie jest szczególna klasa podejść, w których dyskretyzacja nie odzwierciedla geometrii powierzchni nieciągłości. Takie podejście ma istotne zalety, jednakże ma również zasadniczą wadę, gdyż wprowadza dodatkowy błąd aproksymacji. Szczegółowym celem projektu jest więc ograniczenie tego błędu przy zachowaniu zalet stosowanego podejścia.

Część zadań badawczych poświęcona będzie również analizie wybranych interesujących zagadnień z zakresu mechaniki materiałów i inżynierii materiałowej, w których ewolucja powierzchni nieciągłości odgrywa kluczową rolę. W tej części stosowane będą nowe metody obliczeniowe opracowane w ramach projektu. Pierwszym z analizowanych materiałów jest wykazujący efekty pamięci kształtu polikrystaliczny stop NiTi. Obserwacje doświadczalne wskazują, że martenzytyczna przemiana fazowa, która jest głównym mechanizmem odpowiedzialnym za funkcjonalne właściwości tego stopu z pamięcią kształtu, zachodzi często w sposób niejednorodny poprzez nukleację i propagację makroskopowych frontów przemiany fazowej. Badania będą nakierowane na analizę struktury tych frontów i mechanizmów odpowiedzialnych za niejednorodną deformację. Przedmiotem badań będą również metale i stopy, w szczególności stopy magnezu, w których jednym z mechanizmów deformacji plastycznej jest bliźniakowanie. Bliźniakowanie zachodzi poprzez nukleację i propagację powierzchni bliźniakowania. Mechanizmem, na który nakierowane będą modelowanie i analiza, jest bliźniakowanie odwrotne, a w szczególności mało rozpoznany mechanizm bliźniakowania pseudo-odwrotnego. Trzecią klasę materiałów stanowią struktury warstwowe w bateriach litowo-jonowych. Badania nakierowane będą na wieloskalowe modelowanie ewolucji uszkodzeń w tych strukturach wskutek obciążeń mechanicznych. Ten aspekt mechaniki baterii litowo-jonowych jest istotny w zagadnieniach bezpieczeństwa baterii stosowanych jako źródła energii w pojazdach elektrycznych. Nawet niewielkie przeciążenia, na przykład w wyniku zderzeń lub uderzeń przez inne obiekty, mogą prowadzić do wewnętrznych uszkodzeń w strukturze baterii, a w konsekwencji do spięcia elektrycznego i niebezpieczeństwa pożaru.