

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: TRG5880008
ชื่อโครงการ: การหาพารามิเตอร์ที่เหมาะสมของแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลโดยใช้ค่าคงที่ความยืดหยุ่น
ชื่อนักวิจัย: ดร.นิรันดร์ พิสุทธอนนท์
อีเมล: nirand.pi@kmitl.ac.th
ระยะเวลาโครงการ: 2 ปี (ก.ค. 2558 – มิ.ย. 2560)

แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลเป็นแบบจำลองเชิงอะตอมที่มีศักยภาพที่จะจำลองพฤติกรรมของวัสดุที่ซับซ้อนได้ ข้อดีของแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลนั้นคือความสามารถของแบบจำลองในการอธิบายปรากฏการณ์ที่เกี่ยวข้องกับผลึกในระดับอะตอมจนถึงระดับไมครอน ในขณะที่ยังสามารถดำเนินการด้วยช่วงเวลาที่เกี่ยวข้องกับปรากฏการณ์ที่พิจารณา แต่เนื่องจากแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลนั้นไม่ได้มีที่มาจากทฤษฎีพื้นฐาน จึงจำเป็นต้องมีการหาพารามิเตอร์ที่เหมาะสมก่อนที่จะสามารถนำไปใช้ในการทำนายผลเชิงปริมาณได้ ซึ่งในกระบวนการหาพารามิเตอร์ที่ถูกต้องนั้น จำเป็นต้องทำการคำนวณค่าคุณสมบัติของวัสดุจากแบบจำลองด้วยวิธีการที่ถูกต้อง จึงจะสามารถนำผลที่ได้มาเปรียบเทียบกับค่าอ้างอิงเพื่อยืนยันความเหมาะสมของค่าพารามิเตอร์ที่ใช้ ทั้งนี้งานวิจัยนี้เกี่ยวข้องกับการศึกษาวิธีการหาค่าโมดูลัสของแรงบีบอัดของเฟสของแข็งจากแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล โดยที่ผู้วิจัยได้ค้นพบว่าวิธีการดั้งเดิมที่ได้เคยถูกใช้มานั้นให้ค่าโมดูลัสของแรงบีบอัดที่ไม่สอดคล้องกับค่ามาตรฐาน ดังนั้นผู้วิจัยจึงได้เสนอวิธีการที่ถูกต้องในการคำนวณค่าโมดูลัสของแรงบีบอัดที่สอดคล้องกับค่ามาตรฐาน จากการคำนวณในเชิงตัวเลขนั้นได้แสดงให้เห็นว่า วิธีการดั้งเดิมให้ค่าโมดูลัสของแรงบีบอัดที่แตกต่างจากค่าที่มาจากวิธีการที่เสนอในงานวิจัยนี้อย่างมาก ซึ่งแสดงให้เห็นว่าวิธีการดั้งเดิมนั้นไม่สามารถที่จะนำมาใช้ในการยืนยันความเหมาะสมของค่าพารามิเตอร์ในแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลได้ นอกจากนี้ผู้วิจัยได้สร้างสมการความสัมพันธ์ระหว่างค่าโมดูลัสของแรงบีบอัดจากวิธีการต่างๆ เพื่อที่จะแสดงให้เห็นถึงความแตกต่างของค่าโมดูลัสของแรงบีบอัดจากวิธีการต่างๆ ในเชิงปริมาณทางอุณหพลศาสตร์ ซึ่งการที่ผู้วิจัยสามารถสร้างสมการความสัมพันธ์ได้นั้นเป็นการแสดงถึงประโยชน์ของการศึกษาแบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัลด้วยหลักการทางอุณหพลศาสตร์ในโครงการงานวิจัยนี้เช่นกัน

คำหลัก: แบบจำลองเฟสฟิลด์คริสตัล การหาพารามิเตอร์ที่เหมาะสม ค่าโมดูลัสของแรงบีบอัด

Abstract

Project Code: TRG5880008
Project Title: Parameterization of the phase-field crystal method using elastic constants
Investigator: Nirand Pisutha-Arnond, Ph.D.
E-mail Address nirand.pi@kmitl.ac.th
Project Period: 2 years (July 2015 – June 2017)

The phase-field crystal (PFC) method is an atomistic model with promising capability to model complex behaviors of materials. The appeal of the PFC method lies in its ability to describe crystalline-structure-related phenomena ranging from atomic to micron length scales, while operating under time scales that are relevant to the phenomena. Due to its phenomenological origin, however, the PFC model needs to be parameterized with known material properties for quantitative modeling. For consistent parameterization, the predicted material properties have to be calculated in such a way that consistent comparisons can be made with the reference values. In this work, we investigate the procedures to calculate isothermal bulk modulus of a solid phase in the PFC literature and find that the procedures to calculate the bulk modulus result in the quantities (referred to as the PFC bulk moduli) that are not consistent with the standard definition. Therefore, we propose alternative procedures to calculate the bulk modulus that is consistent with the standard definition (referred to as the TE bulk modulus). The numerical comparison of the PFC and TE bulk moduli shows that the TE and PFC bulk moduli are significantly different. This indicates that the TE and PFC bulk moduli cannot be used interchangeably and one must use the TE bulk moduli in order to make consistent comparison with values from experiments and other models. Furthermore, we derive the relationships among the TE and PFC bulk moduli to quantify differences among different types of bulk moduli in terms of thermodynamic quantities. The fact that the PFC and TE bulk moduli can be related in a meaningful way also highlights the application of the recently-proposed thermodynamic formulation for the PFC method.

Keywords: phase-field crystal method, model parameterization, bulk modulus