

Počítačové simulace hranic zrn v nanokrystalickém wolframu a strojové učení

- 1) **Garant stáže:** Mgr. Jan Fikar, Ph.D.
- 2) **Skupina:** Víceúrovňové modelování a měření fyzikálních vlastností:
<https://www.ipm.cz/skupiny/viceurovnove-modelovani-a-mereni-fyzikalnich-vlastnosti>
- 3) **Počet volných míst pro téma:** 1
- 4) **Úroveň pokročilosti:** Startovací téma
- 5) **Jazyk:** Čeština / Angličtina
- 6) **Pracoviště:** Ústav fyziky materiálů, AV ČR, v. v. i., Žižkova 22, Brno
- 7) **Stručná anotace:** Wolfram je materiál s velkou teplotní a radiační odolností a počítá se s ním v budoucích termonukleárních reaktorech. Zde bude vystaven velkému radiačnímu poškození. Nedávné experimenty ukazují, že poškození v nanokrystalickém wolframu je velmi malé, protože hranice zrn umí zachytávat defekty. Tento efekt budeme simulovat pomocí molekulární dynamiky s použitím open-source programu LAMMPS a několika empirických potenciálů včetně potenciálu získaných strojovým učením (ML).