

Szinttőlgeses anyagtudomány (15A)

09.27.

földák: metal. elte. hru / ~ grama

(\rightarrow szépses anyagtud. pdf)

lineáris lemezei periodikus hatások. (körbe kötve)

műg. ej. mű-ja hullámok formájában

$q^{\circ} i^{\circ}$:

\rightarrow halvadék, q -nyi fázis elterülés $i^{\circ} \text{ és } i+1$ között

$q + 2\pi$ is mű.

(0, $\pi/2$): Bzona

kis q -k: lineárisan növekvő: $w \sim q \rightarrow$ a beveretfűk a hullámhosszt

ha nem akarom az atomokat látni \rightarrow deréktárral közelítsek

a: két pont távolsága

folytonos fgyűrűn le az allepotokat ($\text{course graining? homogenizáció}$)

$1/q = \text{radiális}$.

\nwarrow bereitwertszetz

$w \sim k$

ezzel a görbületet elvették met C_2 az
elrendelt sugorakban a hru. deszperált ad
arrére a q -ra

(discretizálás \Rightarrow be kell görbülnie a Bz-re merőlegesen)
lack of convexity" \rightarrow

merőlegesek végén, $a^{\circ} - \epsilon$, hogy még ne legyen rossz diszp. rel.
úgy, h. a discretizálásból adódó credencek jó legyen

Folyadékok általása

mi töltelük → többzetűkba szedjük

Navier-Stokes: fenomenológikus volt + Boltzmann-fázisában levezetni a függetlenséget (1. rész. für. fgv.) → stat. fiz.-t csinálunk
 $\Sigma_i t \rightarrow$ diskrétek

egy sokaságba vett átlagos problémát nézünk
 Liouville-tétel: utkozás után az eloszl. fgv.

$\downarrow c_a$ sebességű rész.
 diffúzióval csinálunk

be kell vezetni a részről összegét ($\sum_a f_a$)
 \underline{u} : átlagsebesség

2) van utkozás: tag \downarrow a rész. homogen
 (\sum_a)

cserélődési következményei inhomogen időre

$\text{div}(\underline{u} \underline{u}) \rightarrow$ kontinuitási egyenlet (feltéve, ha $\sum_a \Omega_a = 0$)

$\Pi_{ij} =$ diadikus sora: f_a

\hookrightarrow feszültség tensor (Π , alapegyenlet)

(8) f_a indirekt függ x, t -ről (\underline{u} és $\underline{u} - \underline{u}$ keresztül függ)

ineveribilis Term. din. - alapfeltérzés

f_a sorba. \underline{u} szerint

$f: \underline{u} = 0$ -kor tartozik

$\left(\frac{1}{2} \right)$ -es sora fontos: a belső összege nulla legyen \rightarrow lemmák

$$\sum_a c_{ai} \cdot c_{aj} = 3 \delta_{ij}$$

(sin-ek cos-ek összegéből jön ki)

f_a -k ait összefogva legyen

$$c^{(1)} \rightarrow 2 \rightarrow \sum_a f_a = \underline{u} \cdot \underline{u} - t \text{ bell kapnom a def. szerint}$$

$\underline{u} = 0 \rightarrow$ hidrosztatika

fesz-tensz izotrop \rightarrow Pascal - tör. (a diagonális)

elemre ögysők, csak azok vannak)

a Gröngracs izotrop \rightarrow Néh jöhet be

(9) 2 dim-nál berellősek

spár elemre $\rightarrow \delta_{ij}$ hidroszt. (izotrop elemek)

leolvasható a viszkoitás \rightarrow összefüggésben állan

foly. st. Csináltam össz.

m. v. good v. mercia tag

1 - mer nem lehet stabilis, mert szelektívül ronogni kér

\rightarrow CO₂ hozzá be a turbulus állandós

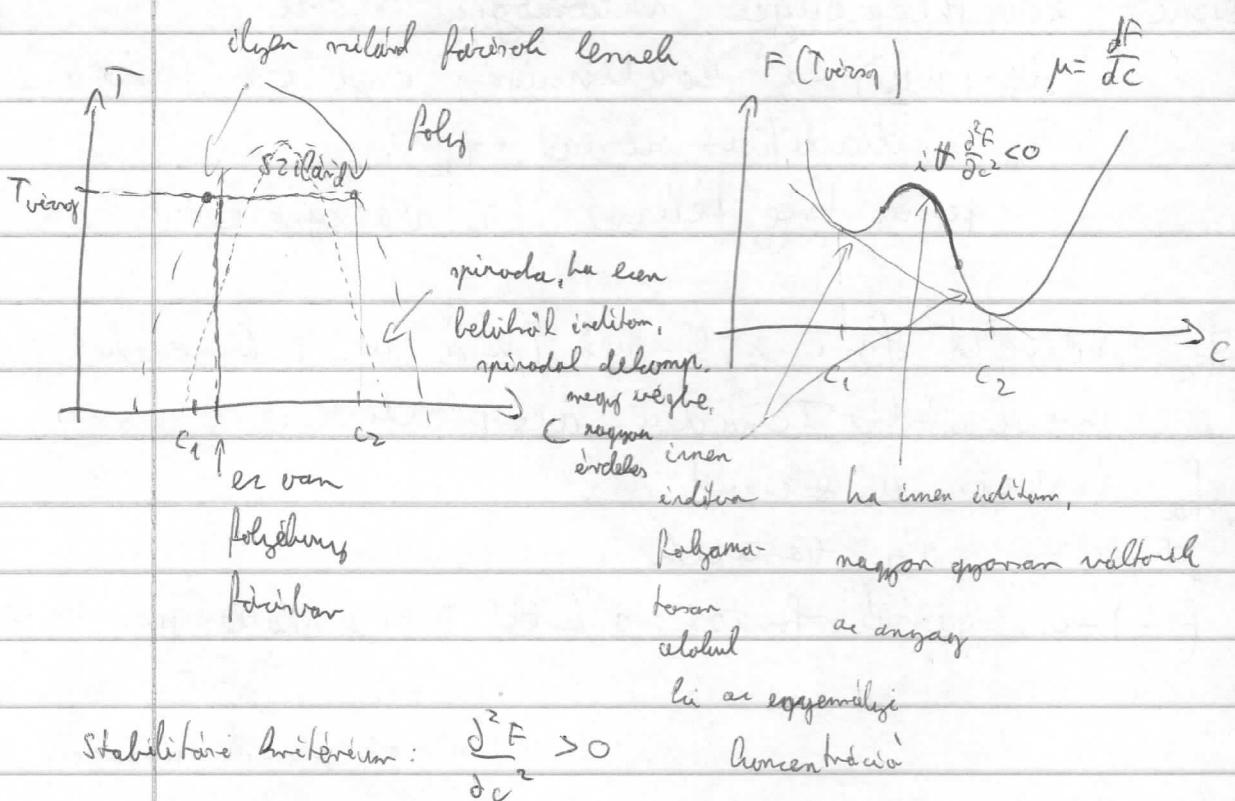
(10) Az üthözés \rightarrow a korábbi rész. funkcióval jár kell odadni

B = 0 is lehet

relaxed cells idő bőzelhetős

Boltzmann - felle sejtautomata

(11)



Er a

A spirodol dekompozíció modelljéről Boltzmann
rejtautomatával. Legyen p₀ és a hő részes halmaza, R és B!

$$f_a = r_a + b_a \quad \lambda \in \{0, 1, \dots, 6\}$$

$$f'_a = f_a + p, \lg / \cos(2\phi_R)$$

dene és hárta irány

hűvőt ne legyen tüörök

$$\varphi = \text{grad}(B - R)$$

A részes hő arányát nem változtatni meg, és felvinni a kepleket,
ahhoz szimultánul húzzon a valódi gyakorlati jelenségek
korrázetét.

- 13 -

konzervatív rdsc $\rightarrow E_{pot}$ Φ_1 Φ alólját tudjuk csak:

taszik tag + vonzó tag

empirikus? $\rightarrow r^6, r^{12}$

↳ induált polarizáció (V.d.W. téz.)

 r_0 -ban mellett a skálát↳ parameter mérői: (\pm)Young-mod. \equiv hull. terj. seb.mérőszel végezve + paraméterek \rightarrow pontosság

L-f. pot-ban fcc-bcc átalakulást is történíthetünk

 F_y centralizálva $\rightarrow \Sigma$ \rightarrow morg. csg.

- 14 -

manapság lurdy abban megoldható morg. csg.

↳ $200\text{nm} \times 200\text{nm}$ -es kockaΔ imp. mon. \rightarrow külső erők hatására ($a_{ini} = 0$)nem stabidus progrin, de ha numerikusan megoldom \rightarrow leponyog a libánk miatt

- merev testenél elmozdulásokat nem arányok

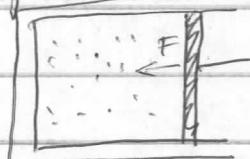
- teh. nyom. tenzor hiszemelés (F)

L-t mér $\rightarrow \Sigma \leftarrow t$ kapkSomgallion a sebessegét: \vec{v}_i minden lépés után! \rightarrow nem pönög be

- 15 -

elvi ötlet: külső

beépítés



fix cs

rossz ötlet! \rightarrow meggyőzőbb plüss adatok!if ok belső \rightarrow hosszú!!!

mosoly módszer: $\dot{m} \cdot \ddot{x}$ & $\dot{m} \cdot \ddot{v}$?

mincs közepre a résznelek (per. h felt.)

amibe befoglalom az atomokat \rightarrow kontrollálhatom

$\Omega = \text{terfogat}$

relativ koordináta: s_i , \dot{s}_i egységekben melyek
 \hookrightarrow abs. koord.

Lagr. fgvet $L_i - v$ \rightarrow működ. egz.
skalarizációt kell \checkmark

- 16 -

$$E(S, V) \rightarrow H = E + pV = H(S, P)$$

transformált L -t használjuk, $\dot{S} \sim t$ legyen!

- $P_{\text{ext}} \Omega$, $w = \text{tömeg}$

$v \sim \text{sebesség}$: $- \frac{\partial}{\partial S} \Omega$

$\hat{\Omega}$ explicit alakja

$\hat{\Omega}$ ortogon. $a, b, c - v$

$$\text{Bernoulli-tv.}: \frac{1}{2} v^2 + \frac{P}{\rho} + \phi = \text{all.}$$

$$F = \frac{\partial \phi}{\partial r} \quad \text{or} \sim \vec{I} \quad \text{potenciális energia}$$

$\vec{v} = 0$, ha a B -tv. teljesül, ez jól kezelhető tudjon változni $+ E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} \rightarrow$ jól cumuldálja a műveket, amit el lehetne

- 17 -

w -hez ökolásabalyok, problémák

\hookrightarrow össztömeg töredéje jól működik

κ : kompressibilitás

frekvencia nagy legyen, hogy ne zavarjon megemelésre

\hookrightarrow csillapítás, beállítás: β

\dot{v} sebessége \downarrow

\hat{v} : konfiguráció

- 18 -

a második termosztáttal van kapcsolatban \rightarrow elvárt. tétele
ha pl. -nál pofonálható \rightarrow nem igaz az e.p.t., de
rővid távban minden igaz

kisidm. átl. kin. E: nem annyi, mint szeret \rightarrow minden sebességet

megszorozom és lecsillítsem ilyen

nem a Δr -et, hanem ΔT -t nyiljtök \rightarrow
t szabályzás megtáblázatom

erre jobb módszer: $t' = \text{skálafaktor} \cdot t$

s szabályozása időben: $-T \cdot v_{\text{uni}} \xrightarrow{\text{lin. Sf}} \text{entropia}$
 $+ \frac{1}{2} \dots \text{kinet. E}$
s is változó (t -ben)

Euler-Lagr. -egy-ek

nincs egyszerűbb előre, hogy működik
dissipáció

- 19 -

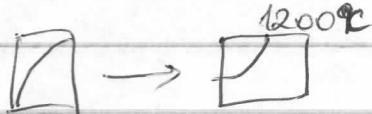
m · ř = ...

A ř \rightarrow elv. p. tétele

pl. DSCalorimeter szimulálása (psec-ig)

- 30 - 31 -

szemcselánc, f-sík. hatalfelület (Al?), 600 K
majdnem nincs vanak az aknák, de a hatal morzog



szemcselánc vastagsága max néhány atomra tegyél ki
nem lehet hosszúlni az előző ötletet!

- 32 -

repedés csilcsanál sét lélj felüli az abai kötesek

6 cm-tól távol jó a kontinuum-kép, diszlokációk,

a repedés hosszú távokat is megter (mar.)

↳ sziszálási problema

rep. komplexen abai simuláció, individualis döröklök,
távol van a magasabb clusterek

- 33 -

repedes önműeken hogyan műlegszik fel a röde
lokálisan $T \nearrow$, $E_{kin} \nearrow$

-35-

Szépcse anyagok

10.25.

sűr. mtk: dirac-delta

$\delta_i(E)$: i-edik atomhoz tartozó all. sűr.

-36-

$$J \rightarrow E_k$$

sall.- okkal előállított \hat{H} op.

trükk: $\mu_i^{(2)}$: (..) op. i-kkel vett valóság ötlete, $\langle i | < i | \text{gyakor}$

$$\mu_i^{(2)} = \sum_{i''} h_{ii''} H_{i''} \text{ átmenneti működésre}$$

β : exp. fgv. (minden hullfgr. exp-an csík le)

-37-

E_{rep} : tasztó tag

• E_{wh} : teljes E , K és B empirikusan meghat-d!

-38-

W méheto (sávcell.), Q (gyensúlyi rácsal.)

B : kompresszív modulusz, D : köhözidős E
(a görbe fénélénk alja)

össz. c -ről energiája: \sum_i

nen megfelel all. sűr, hanem Gaussal

5. 5 db c -ra normállok

-39-

L : nem függet i-től, nem változik atomról atomra

$\sqrt{(\dots)}$ → ϕ fgvk összege

energiatag: párhuzak összegneur funkcióval
(F-S-pot. (embedded pot))

-40-

μ_i : ponti tagok összege (empirikus pot-ek), közelítés

-41-

Ψ_1, Ψ_2 ... ötöndídban, egyszer nemudható gyorsk. hullfgr.

$\langle \Psi_1 | H | \Psi_2 \rangle$ op. minimumát keressük, hogy $| \Psi_1 \rangle$ normált

véges elem analízis a neve a műszemere

{ felvezet op. alegör a fgv, amiben x növök parameter →
sölségt. problémák formájában → paraméterek váridő,

majd = 0

E_i : Legr. - multipl.

$S(r)$ kombináció: e^- -szimézg
efektív potenciál tagjaiért pán ki
ez más nem lineáris ψ -ben, csak közelítőleg $1e^-$ -re
(az összes benne van r -ban)

licitás: a Pauli-cluet nem tudja

- 42 - Fock általánosítása

Slater-det. 2 oslop csele → $\psi \rightarrow -\psi$

- 43 - H-F-ben nincs fittelisi paraméter, de az E-bei tökcsen
tilbeírás

az összle e^- -folyadék rész. operat. funkciója a sín-fgr.
azt sajnos nem tudjuk ($n(r)$)

átrendezem az e^- -ról → most az n -t ^{new!} kapok (alapdall.)
a kv. megha azt megtiltja

K-H: Birónyi-fórmák azt

E_{min} -ra vonatkozó kölcs.-operatörök fognak

Local Density approx: a funkcióból a felületekkel
 $v(r)$: konpotenciál

- 44 -

ϕ sín. op.: ψ : alapdall - u. hullgr.
v-t változtatjuk a rdscben → $n(v)$ kölcs. oper.

biz.: indirekt

alapdall. a sug. min. is elérhető → reláció

- 45 - inhom. rdscn általánossága: engedjük meg $n(r)$ függését

Sigépcs angyalhíd.

11.15.

szab. On:

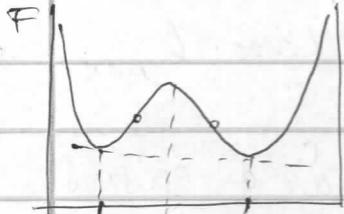
$$F(C) = \int \frac{A}{2} C^2 dv$$

$$\downarrow \text{atam: } j = -M \cdot \nabla \frac{\delta F}{\delta C} \quad (\text{fűrészálás})$$

$$\dot{j} + \text{div } j = 0$$

szereböl kijön a diffúziós ciklus

$A - t$ is szabadon adható a F -ból (∂_x deriv.)



μ : C sebességi deriv., a hét gyorség cípmutatóban:
közös elvű → minden esetben

'fázis' C (konc.)

nominális konc. -t ide alkalmaz → a II. deriv. negatív

abban a tekercsben negatív diffúziós elv,

a hatalt kezeli, nem elhanyagolja (reverse diff.)

cst minden meg kell alkalmazni

$$F = \int \frac{A}{2} (C^2 - 1)^2 dv$$

(Kahn & Willard?)

az alanya mindegy, csak h. a II. deriv. negatív legyen

↳ fenomenológikus term. din.

hatal vezetésével békélesedik ↙ Probléma

↓

$$F = \int \left[\frac{A}{2} (C^2 - 1)^2 + \frac{\alpha}{2} (\nabla C)^2 \right] dv$$

felületi fer-görbék csomagolva → megoldja a
békélesést a hatalon

↓

$$\text{lineárisített változata: } F \approx \int \left[-Ac^2 + \frac{\alpha}{2} (\nabla C)^2 \right] dv$$

diff. cípmellett:

$$\frac{\delta F}{\delta C} = -2Ac - \alpha \nabla C$$

cst belül a diff. c. -be:

$$\dot{C} = M \Delta [Ac + \alpha \nabla C]$$

1. működés

↳ vanállos (lokális)

$$\delta F = \int \dots \delta C \delta v$$

$\frac{\delta F}{\delta C}$ legyen a
vanálcs
elővezető

(helytől függő
színsgy)

most keressük:

○ attitik = alacsony

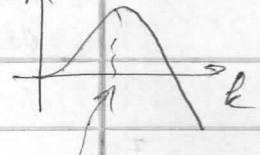
↳ csest név
engedély megl.

1. mel 0 a vanálcs

$$\text{Bécsu: } \Delta c = [MA \cdot k^2 + M \alpha k^4] c$$

$$\lambda = MAk^2 - M\alpha k^4$$

hais $k - k_{\text{cr}}$ $\lambda > 0 \rightarrow$ a perturb. megtalál elrendezésre minden perturb. ki árás lesz. minden ciklusban tag k -gráben ciklus negatív valós
van ciklusban többször hull. hossz: C_{max} , a
rendszer összes ciklusidője
a spinodal sűrűségszakasza lesz a ciklusidője
(az időtartam ki, h. jö legyen)



-84- Niz Al \rightarrow rendszeren a turbulálásra

Kapacitásvezet

kiválasztó felületekkel, de- és módszer segítségével
szintén "szisztemák"

Nyílt rendszerű tulajdonságai a részben leírt
mintapélda: G-L-cs.

G: rendszeren / hullágr.

Sor rendszeren van \rightarrow időfeszültsés felhalmozási
Munkaoperator (mobilitás)

Feszítővezet

Mi a rendszer? (bironyos fázisállapotban \neq , utána \neq)

Niz Al tul.-a: Ni-bei Al körös sér. (hololys)
kiválasztóan tetragonalis formában
(az effektív irányban a részleg. \searrow)

c is különleges

rendszer - dr. \Rightarrow részleg. param körös részben = 0
 \Rightarrow koncentr.

\uparrow diff fázisok szerepeltek

$$\frac{\partial F}{\partial C(r,t)} = \mu \text{ kím. pot.}$$

Drc: met tudom, u. a konc megnézés
Öpp sejte parancs.

p, q összetevé (1, 2, 3) (melyik irányban forrunk)
i működésben

egyszerű: $\frac{\partial F}{\partial n} = 0$, de nem több, h. a foly. cs. min-on van
a rész. beragad ejt. lok. minimumba
ebből vann kiválik \rightarrow mo:

-85-

$\xi(\vec{r}, t)$

gyönyörök ki az egyszerűsített 1-1 random rájtággal (felsorajz)
rájtág nem lehet nem arányos

Langevin - egyenlet

gázban m tömegű zöldi rész.: $m\ddot{v} = \lambda v$ seb. erő hatás

bell megh random rájtág: $m\ddot{v} = \lambda v + \delta(t)$

ilyen típusú egyenlet összetévesztés a $p(v)$ diff. gy. tel.
① diff. dlt. t ar hatalma megh. h. a δ -nak működik
a kompl. tul-ai.

$$\langle \delta(t), \delta(t_0) \rangle = \underbrace{2kT}_{\text{rájt.}} \underbrace{\delta(t-t_0)}_{\substack{\text{diff. ch.} \\ \text{ennatt.}}} = \langle \xi(t) - \xi(t_0) \rangle$$

fluct-dissip. tétele: hidrom. or egyszerűs. sín. elosztás

$$p(v) = \dots c \frac{e^{-mv^2}}{\pi \hbar^3} \text{ atki bell adnia}$$

(másik fluct.-d. t.: $\propto \sim \langle \xi \rangle^2$ nem fizikai gyakorlat)

viszrontás \sim diff. ch. nem fizik., körönben nem előrelép

— ki egyszerű Boltzmann-elosztás

ξ egyszerűben is tudja a termódin., néljén be a T

Öpp gyakorlat se legyenek közelítések, csak önmegurkor

$\frac{\delta}{\partial}$ funkcionál derivált (a vonásból érünk)

probléma: psec-ekon nem indul el \rightarrow feltételek hiányzik,
mejd viszalépés (numerikusan nem lehet kezdeni)

Microskopikus felcm.

beföltes: n

(L) konvolúció ($\frac{\delta F}{\delta n}$) nem lok kapcsolat L fizikai

C-met ar osses reacspontre O-nak kell lenne,
különböző részlet termelne

- 86 - \tilde{c} (Ft.)

F-tetbe a konvooldás tömörítés

parabolikus körülírás

valódi felbe visszavezet h. h. jelentkezik meg

Melyikbe a legnagyobb felhaladás a V. deriválás

• \sqrt{c} extréma szükséges függ. bevezetve

- 87 -

szab. en. meghat.

menet módszere a krit. pontok

\hookrightarrow deriválásból negatív megtérülés minden β paraméterrel

$f'(\cdot) = 0$ nél két pont minden monotonom

— azonban h. a tudjon gy. főzettséget elvállalni,

— Elég alacsony t = n tételes. formula legyen

— 1, 2, 3 felcsendelhető legyenek C-számok negatív
or indexek)

\Rightarrow minden széf., a krit. menet adja a legnagyobb (nagyobb) után
konstans, amikor deriv. ja = 0

A_{1,2}(C) koncentr. függ. konstans

Meg akarunk állni a legtisztább, amit lehetséges
legyenek egyszerűbb módon, sellok előre legyen
a rendparam. = O-nál

- 88 -

elhár az kell, h. a szabadrendű fajlag megnyer

A(C)?

$A_1^2(c - c_1)^2$ katalitikus, a diff. gy. miatt

$(c - c_1)^2$ - előjelet kell változni h. a 2 fajt megtalálhatunk

szab. energiába be kell venni gy. keverési entrofiait

C. linc

W. kölcs. Mat. (menet lás. tag)

Pug. energ.

a kiallos belsőjeler és külsőjeler mellett a mechat
θ: alerfgv.

E_{ij}^0 : a mechat deformációja belül, körül = 0

alerfaktor: belül 1, körül 0,

beut mellett a koncentráció

$(c - c_{\text{gyakorlás}})$ · valamely gyakorlatban a függvényen az $E-t$.
+

-89: stab. en. + ny. stab. en.

hogyan oldom meg ezt a differenciáléket?

↳ periodikus hat feltételekben, jobb, ha FFT-felhasználás

(k^2) - fel soroz

FFT → ē hogyan változik → megnövekedik

deriválások helyett védekezés FFT-ren → mag

ezért minden N^2 helyett $N \cdot \ln N$ feldolgozás kell

azat megörökíteni → időt nyer

mire jó ez? → abba $\square \rightarrow \square$

szintén működik → nööl → \square

a def. csegező hondálásra működik nem lesz kocka
mint a Ni₃Al

qualitatív mikroszkóp, kvantitatív nem

bent formában semmi realitás nincs

θ: alerfgv - nyel soroz E_{ij}^{00} - t, E_{ij}^{00} körül E_{ij}^0 - t

felismere →

- $-\frac{x^2}{2m} \nabla^2 \psi_i^*(x) + V_{ion}(x) \psi_i^*(x) +$
- $+ V_{elec}(x) \psi_i(x)$
- $\underbrace{- J_1' \int d\alpha' \psi_j^*(\alpha') \psi_i(\alpha') \psi_j(x) \psi_i(x)}_{\text{Kernoblastobahn-Terme}}$
- $= \varepsilon_i \psi_i(x)$
- $\text{an erster Ordnung ist dies äquivalent.}$
- $Kohn, Hohenberg (1964)$
 - $H = T + V + U$
 - $T = \frac{1}{2} \int \nabla \psi^*(x) \nabla \psi(x) d\alpha$ kin. En.
 - $V = \int \nu(x) \psi^*(x) \psi(x) d\alpha$ nuk. En.
 - $U = \frac{1}{2} \int \frac{1}{|x - x'|} \psi^*(x) \psi(x') \psi^*(x') \psi(x) d\alpha d\alpha'$ nuk. op.
- $E + E' < E + E + E'$
- $\nu \geq [v] \Rightarrow E[v] < E - v$ E - n körner. opel.
funktional analog zu loc. Paus.
nur isometrisch
- $e^- \text{ auf } m \text{ Elektronen.}$

- 45 -

Mit einem elv

$$F[u(\underline{z})] = (\phi, (\bar{T} + u) \phi)$$

Feldoperator \rightarrow also nur neu függ v-tot

$$E_v[u] = \int u(\underline{z}) u(\underline{z}) d\underline{z} + F[u]$$

alle 'as' da innerhalb der aktifität \rightarrow
 $E_v[u'] =$ max innerhalb
 \hookrightarrow Falop d. C-min.

$$E_v[\psi'] = (\psi', \sqrt{\psi'}) + (\psi', (\bar{T} + u) \psi')$$

$$E_v[\psi'] = \int u(\underline{z}) u'(\underline{z}) d\underline{z} + F[u']$$

$$\Rightarrow E_v[\psi] = \int u(\underline{z}) u(\underline{z}) d\underline{z} + F[u]$$

U-feld konstant für
 fikt. result. anisotropic

Funktional ableigen
 $E_v[u] = \int u(\underline{z}) u(\underline{z}) + \frac{1}{2} \iint \frac{u(\underline{z}) u(\underline{z}')}{|z-z'|} d\underline{z} d\underline{z}' +$
 weiter entwickelt

$$+ G[u(\underline{z})]$$

plus ein was

Min. ergibt sich
 $G[u(\underline{z})] = T[u(\underline{z})] + F_{x_0}[u(\underline{z})]$ und man hat

$$u' = \int u(\underline{z}) d\underline{z}$$
 in welche form

Aber so:

$$\frac{\text{variable in Koeff}}{\int F(\underline{z})} = \frac{\int T[u(\underline{z})]}{\int u(\underline{z})} + u(\underline{z}) +$$

+ $\int \frac{u^*(\underline{z}')}{|z-z'|} d\underline{z}' + u_{xc}(\underline{z})$
 H-feld e-ell. meistens über-ell.

$$V(\underline{z}) = u(\underline{z}) + \int \frac{u(\underline{z}')}{|z-z'|} d\underline{z}' + u_{xc}(\underline{z})$$

Naherung müssen be null. fiktiv \rightarrow implicit
 nutzen Kap. T(u) ↓ strengest
 $T = \sum_{i=1}^{N_f} \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi_i^*(\underline{z}) (-\nabla^2) \psi_i(\underline{z}) d\underline{z}$

$$u(\underline{z}) = \sum_{i=1}^{N_f} \psi_i(\underline{z}) \psi_i^*(\underline{z})$$

T in ergibt a sol. hab. parameter freien \rightarrow
 E meistens, minimalisiert

Local Density Approximation

lizenz bl. sel. lebet
mindestens

$$E_{xc}[\rho(r)] = \int E_{xc}(r) n(r) dr$$

$E_{xc}(r) = E_{xc}(r)$ kommt in
potenzial! $\frac{d}{dr}$
abhl. von r , mit δ auf
relativ neg.

Car - Paralleles Elektro-

nen minder ungleich an LDA
als potentielle Grav. result. nem für ρ :
 $\rho = \sum_i (\rho_i \delta_i) = E [\{\rho_i\}, \{\delta_i\}, \{\beta_i\}]$

re legen Teilchen lokalis. → grad.
leben sonstlich in ρ (bott. Wenn
nichts andere)

$\delta_i(r) = \int \delta_i(r') \rho(r') dr' = \delta_{ij}$

entweder das hat
horizontale oder vertikale
grad. multipliziert und
mit δ_{ij}

$\delta = \sum_j \delta_{ij} \left(\int \delta_i(r) \delta_j(r) dr - \delta_{ij} \right)$
me fast. in ρ da δ_{ij} sehr
klein: $\delta_{ij} \ll \delta_{ii}$ und $\delta_{ii} \ll \delta_{jj}$

helft also für stat. MO. δ_{ij} ist
vertikal parallel zu δ_{ii}

noch einiges
(2. Lehr. MO.)

die unter a abnehmen
abnehmen

1/20

100 Schritte für a Bond

Initialise Random Wavefunctions Ψ_i

Calculate $n(r)$

Construct Kohn-Sham Hamiltonian H

Conjugate Gradients

Orthogonalise and Normalise Ψ_i

Are Wavefunctions Self-Consistent?

Yes Calculate Forces (Hellmann-Feynman)

No Use Old Ψ_i As Initial Guess

Compute Total Energy

Move Ions

Are Forces Sufficiently Small?

STOP

Figure 2.6. This flow chart illustrates the procedure used in ab initio molecular dynamics simulations.

molekula. Dynamika: $F_i = -\frac{dE}{dR_i}$, Nullpunkt bestimmt die explizit berechnet + berechnet + Longitudinal periodisch

$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$

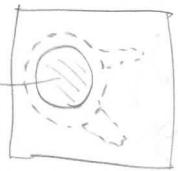
Ψ_i after $\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle$ known.

F gestoßt a molecule tag nach ad valorem

Wert

Färsel eln:

Lamp -> röda, bivalvok aktiverat li.
tefogat + feliketi energia
 $\sim R^3(E) \sim P^2$ (T)



Mas-bracket
merket

Ensl's angå alett bedro, ha österriks ($R^2 > E^3$)
läpp' ingredi -> nördlönig (R^3 till stor P^2 -et) -> konungen undlönig
förlötet fär. et a tef -> energi
muskulosus -> a sencaq crecen möhetue (heterogen muskulos)

(pe. Bondenscak)

~~t~~ ordna
hostettsag (R)

a növeredet diffinis gränslösel römn li

pl.
Nig Al knödla (92. old.)

Nisal Devadoss

nejdnešní strážce, když všechny
věci fungují nufukou (když všechno)

farm - field

(Ginsburg - London school)

Tl. render finisdatelor, levensa

$$T(\phi) = (T-T_c)\phi^2 + \propto \phi^4 \quad (\text{Landau - clv})$$

walk & sit down on ($T < T_c \Theta$)
or climb & fall without a
Felicitati fear.

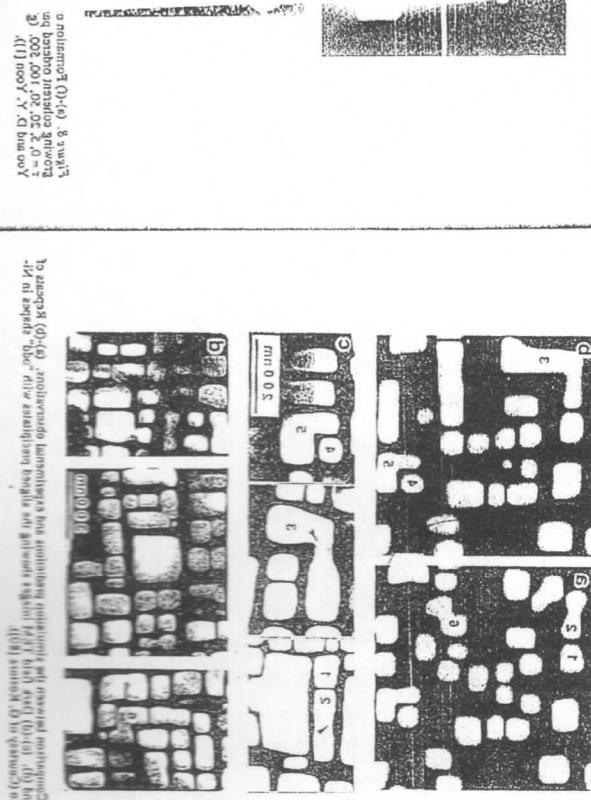
be full ~~seemingly~~[?] a host of

$$T(\phi) = (\tau - \tau_c)\phi^2 + \alpha\phi^4 + \frac{\beta^2}{2}(\nabla\phi)^2 dV$$

a diu, u-ar, mar-adore
a deridde os nrael
a mendigo, muda-áme
verd - claudelinho

as a judge now all alone

Ni a mons. Epif. (Epif.) - & tag letrado nre
meus. (pl. bolo nra de lugias)
dV servisdest ad ✓



term. din - last.

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = 0 \quad \text{gyenvoorlsp}$$

van de

$$F(\phi + \Delta \phi) - F(\phi) \approx \frac{\delta F}{\delta \phi} \Delta \phi \rightarrow \text{volw * voldoende}$$

functionele derivat

Na een korte omschrijving:

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = -M(\phi) \frac{\delta \phi}{\delta \phi}$$

$M \sim \phi$ rendparan - lo

lineair operatör, de vera is even

nuco megmarade wensigheid $\Rightarrow \dot{\phi} = -\text{div } \vec{J}$, \vec{J} is a belian' pot derivat

- grad

M op. a Laplace. (megmarade wensigheid)

$$\dot{c} = M \Delta \frac{\delta F}{\delta c} = \dots \text{Modif } f(c) \text{ grad } \frac{\delta F}{\delta c}$$

metabofit

En logar för lei a diffusions gyeleterologi?

midan

$$\text{energ. fun. } f = \frac{A}{2} (C - C_0)^2, \mu = \frac{\delta F}{\delta c} = A(C - C_0)$$

Stab. en. a. c. la T antropius sag (bevers: antropus niger)

$$f = A' \cdot c, \ln c \quad (\mu = \frac{\delta F}{\delta c} \approx A \cdot \ln c \quad \text{v.s. } \mu = \frac{A}{c} \cdot c)$$

$$f = \nu \cdot c = A \cdot \text{grad } c \rightarrow \dots \dot{c} = \text{D } \Delta c \quad \text{megafaktor } \nu$$

Szépes anyagok

11.22.

Völnera, Körös

dl-cr területet

atmosz. ödibesírtatás → 2 nagyságrenddel nevezőbb volt
a szimuláció eredménye, mint a kísérletenél

tükk: fel atmosz. beteszett → csök pár atmosz. hőtől lecsökken
→ török O cso sűksejcsékhez → O cso mellett is
deformálódni kell az anyagnak

cl. műr. -os képre meg so ehet bellett várni

Burgos - testvéret: dl ~ ördög (hidrolikus)

2 kép: mindenkor Cu - egyszerűt.

1ir-ból (földszínű körföld) (bo.)

periodikus def. (jo.)

átlagos cellameret megejtés: cellameret ~ a mikroskop meghosszabb
lyukak csoportja - hatodikföld. sűrű csoport

lyukparból 2,9-es fr. dimenzió

(PSD) állandósult "oni" sár, ha periodikusan def., ezek belül
sűrű - ritka dl - sekezet (létrászerkezet)

itt egyszerűbb skálakiválasztás van

barátfelületek mellett a mikron nagyságrendben

dl-cr átlagos tör - a ~ 100 nm

10-es százalék a török koron (?)

o²: relativ forrás (cellamerettel csoport)

ritka: gyere inkognitóban aranynak, majd irányt vált

fire effect:

geometriai függeléssel előre látott szerepelnek felírni

(bo.) vöröny diókok csavargatása

meleg → → fesz - def. görbe feljebb tolódik

(jo) keményseg ~ tü benyomása az anyagra

benyomás mélysége ↑ → annál pulzálónak tüör,
(forrás) keményseg ↓

melcseffektus

ez csar a plasztikus fájdalomgyűjtőknek van ez! rugalmas modulusról állandó a méret változásnál!

feszültségek (def., def. sebességek, ...)

vízen törésük elvileg nem tud folytatni a méréseket használ

dl → hosszú holtidők fentén (lecsengő)

↳ a bent lénő abban az a fal tüdők cipőkkel körülzárás:

T klasszikus + deredék hordadásba (def. van a működés deredékja helyen)

μ. nyirok - mod.

$l^2 \rightarrow$ dimenziós minta hossz² kell

$10\mu\text{m}$ -nél kell az effektus $\Rightarrow l = 10\mu\text{m}$

superconductor

I. fajú super. vöröszer: II-ak (1 B-vel)

koleszntinat, Pessel-fgv,

hatszögűök (Hektor-macs)

2d-s kristály, nem stabilis, ebben is lehetséges dísz-

(~ I) B_{ext} hatására a vöröszer megmarad → már nem super-

→ meg kell általánosítani

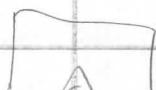
scinnyereti kristályban fennmaradás

ha van 1 dl \rightarrow br. átrendeződésben kisebb E-kell

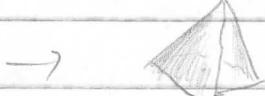
\rightarrow mögötti elrendezés megtalálható → problémák

II. simulačio: dl betek, megeugedi, le relaxáljuk

Könen - Kosenich - elm.



budony



abutásnak ↴ ✓

de ez nem teljes többlet X

osszehangolva részleteken

1. lépésben nem horor leíró fesz. - get

(1) horor megy át az aban \rightarrow elvörös, rösiuti deriv

↓

def tenet (ez mette ki abban a köstrit + do. valtozást)

linearis közelítés → mg. áll. ök megjelenése: L_{ijk}
(magyarázat Cijk)

$$\hat{L} : \hat{\epsilon}^1$$

hol az indexet ejtik össze (mechanikai jelölés)

bőrön súcs mg.-tan \rightarrow

Plasztikus def: \dot{u}^f_{gr} , 2 lépésből állva elöllátan
 \dot{u} deriv-ja: distortion (grad. fgr.)

B (index nélküli) és egy másik
closestixus és plasztikus dist.

únner sium része: elastic deform.

a fer. gör. definált mennyiségek

closestixus defini.: megfordítva az előző gyakorlat

L B -nál csak a sium. részét definiálja

disloc. density tensor

únner a rotációját véve def. seint (Young-tétel) = 0,

de nem birtok, h. külön-külön is elírunk -o

tegyenek nem 0 a rot \rightarrow a meghibásolt definiáció, h.

azt mondjam, legyen 0 (pl. rot H = 0)

az elámorat adom meg

prob. \rightarrow a B^{plast} nem definílt

mondaðok epp török. vektor. fgr. grad-ét \rightarrow

a rot-ja nem változik

DE! nem is fog kellem

B_{ij} rugalmás

Burgers - vektor: α -t kis keresthetősébe indul \rightarrow vektor

Stokes - tv alc. \rightarrow $\oint_B ds$ rát görbölve

görbe mentén össze kell adnom a du-kat \rightarrow

nem nullát kapok

önályosság a tenzortérben

komplikáltabb: még több deriválás, mint a

Maxwell eg- ben

menyű a fesz. a belső fel lefűsztése?

↔ clödlli hatás |: xy irányban Dirac-delta

$\mathcal{E} + \mathcal{E}$ Plant.

clonális def. tenzor

$\frac{1}{2}$ (vertorför. gradiens)

első tag clonik, ha clonál veszem a rot-ját és ford.
curl grad = rot curl

clonál - hatalm. Nabla

incomp. menyűség =

incomp. op nem nullképző (esetleg csak a lapot)

↔ clödlli hatás | a formulával

mögé lna a ∇ : halos index tenni minden

ha ismerem a def tenzort \Rightarrow ismerem az incomp.-t is.

↔ adott \rightarrow egynelkben terep σ

az egynelkben kevés, σ -t nem hat. \rightarrow meg fejtünk

+ Egynelk: egyszerűbban $\text{div } \hat{\sigma} = 0$

\rightarrow mai egynelkben meghat. a fesz-tenzort.

↔ szílen, h. a valós felületen hogyan valahol meg u. azt a fesz. teret hozzájár. létre a al-cr

↔ csal a vonalat teljesítve,

\hookrightarrow o csal a vonal alegyjától függ.

Stress σ adott \rightarrow nem egészclinius mo. (mert nem $H = j'$ nem adja egészcliniusnak $H-t$)

Second order

bew. potenciál (fesz. pt.) \rightarrow minden inkompatibilitásnak adja $\hat{\sigma}$ -t
 $\text{div } \nu = \text{div } \text{rot } \text{azoxosan nulla}$

$\text{div } \hat{\sigma} = 0$ ezenkívül automatikusan teljesítve van.

bedna γ_{ij} mo-t keresni, X nem egészclinius, de origin.

tükök: X' transzformációja \rightarrow diagonális elemeket vesznek

v: Pisson-szám

ezt az alapot bevezettem a hosszú egyszerűbb
 (bb. Coulomb-metódus felhasználása)

∇^2 : bimorifikus egyszerű

$i, j, \dots = \dots i, j \rightarrow$ nem keverednek a terek \rightarrow sép

X' egészclinius irányban ag-elel (nem irányban \rightarrow nem lct.)

Green-fgv ismet \rightarrow minden körülholt

a releváns impertmenysej a ol-sínüsök deriváltja

(nem függ attól, hogy mi a hozzá kötődés, csak a valós végtelen
 és deriváltjától)

\downarrow a felsőbb formára az inkompatibilitások

a vonalprofilt nem γ hozza le

2D case: plane strain = sík deform.

elvárt - már mincs 2 dr. körül - e, x-y clm. or független

1 nem nulla komp. $x = x_{33}$ a fesz. pt.-nál ($= X$)

(Ariy-fgv a neve)

$\text{div } \hat{\sigma} = 0$ teljesül

skálafgv.: ϕ , csak első deriváltai vannak! (szépproblémák)

Field equations:

visszavezetésre: h. deriváltas egyszerű

különösségek a Θ és Θ Burg-vetőnk ol-kat
 (füntegyér)

eredendő töltés miatt uncomp.
 (Dirac-delta összeg)

∇^2 : 2D-s Laplace

másra: ∇^2 Poisson-egyenlet (csavaross)

Térbeli evolúció:

β^P plasztikus diszlokáció \rightarrow rögzítés a dL-sűrűség felületén, b. $c_2(\alpha)$ adott az anyagban

β gradiens cselekvégi hatalommal működik (mot. elhúzt) finikai feltevés, ami meghatározott, működő időfoglalást kell megelőzni

terívallom a fenti egyenletet $j = \dots$ trivialis módon
plasztikus áramlássűrűség

(működik az áramot fluk-nál kívánók)

Kin. rész kezességtető \rightarrow az eredő b minden valból

" δj "

tfh. $\alpha(\frac{\partial}{\partial})$ adott $\rightarrow j$ -t akarom számolni, de az nem egyszerűen meghatározott, pedig δ lenne

spec. esete: dL-vonalra van egy spec. mo-já
o: diadexus iron.

$\left(\begin{array}{l} \text{pontosan} \\ b \text{ is adott} \end{array} \right)$

L minden során meghorom v-vel

a plast. deform. csak a dL-vonal mentén halhat

Orosz - egyenlet $j = g \cdot b \cdot t$ (?)

ne legyen másik plasztikus áram \rightarrow csak 1 rögzítés!

a fenti rész figyelem a β^P egész területére
nem független a δ többsége

az a dL-sűrűség \rightarrow ott legyen csak áram

Displacement field: elmozd. (δ)

L mg. áll - dL

szorozuk meg a div - vel \rightarrow div δ \rightarrow β elhúzt

$$\operatorname{div} \delta = F$$

neu sima megoldással problémá, ugyis örvénylés azzal \rightarrow enyhítés helyett L^P -t használj

baj: βP birontalonsága megjelenik

jd. de nem egészclimű $\rightarrow \frac{d}{dt} - t$ vesz sebességtét egészclimű: $\frac{d}{dt}$

meghatározott csövűség \rightarrow kisebb programok vannak a melnotoknál

Coarse graining

dúsított dl-er terc, x ir-üburg-v., egyszerű \parallel dl-er

K: \oplus, \ominus dl-k összege elöjeles összege

\hookrightarrow geometriailag szükséges dl-sűrűség (GND)

($S = \pm \delta(r_r - r_i)$) d index: dúsított

de nem minden ilyen részlegesen vizsgálni a problémát

(a húzegs viselkedéshez nem kell) \rightarrow időben lassan változó

fgr-miel leírható a dl-er sűrűségek változása

(ha lehet!)

pillanatok: feszítik a hatalt, hogy mi van

ötlet: ablacfgr. (w) bevezetése adott sikereséggel (alattal)

konvoláljuk meg w-vel az 1. egységet

(mérnök: homogenizáció)

w-től független lesz a végeredmény (rendszem)

w \neq mögök, változásokkal van, mint előzőleg

$\langle K \rangle, \langle X \rangle$: coarse grained bevezetés

azt követt formálisan nincs előre, mint a

nen c.g.-előt követt, csak azt más fogy!

baj: 2 konfiguráció

1dl \xrightarrow{cg} konstans K

1dl + dipol \xrightarrow{cg} K'', pedig a viselkedésük más.

ezért több változás kell, különben van húzegs-
séget dobunk ki.

multiscale modelling of materials:

megasabb szinten meghatározzuk a nyilvánosztat.

abban finomabb szinten meghatározzuk a dl-er megasabályt \rightarrow

\rightarrow meroskopius skála: egyszerű dl-er \rightarrow kollerikr dl-er-

elmelete \rightarrow mérnöker luidat lehet tenni.

(nem lehet meghindani)

szimulációk témája: DDD-sim. in 2D

numerikusan igazolhatóan bizonyos feltételekkel
funkciókhez → stabilis: energia elvén

m & tapot behagyjuk

az osztálytól rövid

(homokdium: turbulenciák)

$m \perp b$

nyílfej.

szimulációval nem jön ki a fal!

nem csinál a dL-dr meg. körül a miatt jön ki!

• DJD in 2D

szimulációk → sok minden nem jött ki (pl. alakzatok)

váratlan közelítésről kellett conculni, négyen nem hitt volna el semmi az eredményt. Ma őssze lehet hasonlítani pl.

szimulációkkal. → mincs mellebeszélés

részletek nem birtok, h. címkelés, csak binomys tul- or.

• Példa: Boltzmann - elmelet

Maxwell - Stossz arbor más mindenre ismerte, ezerrel előmaradt közelítéssel → dE-Ea is ezt szeretnék conculni

ütközés mellőzés ... = 0

Liouville - tétele: az állapotoknál megfelelően tud várunk ütk. tagra → relax. idő közelítést feltételez az egynelű az e- or vezetésre is működik

Plasma általmára (?)

→ $\frac{1}{\tau}$ -nel haték → baj

az ott különbözik 0-tól, ahol osztályozás → az nem lezuhadható plasmával

gyorsulás nem fülfelé menne is?

Newton - gy. alapján a tömegre cselekm.

$\underbrace{+ \vec{F}(\vec{r})}_{\text{a különböző tag}}$...

a különböző tag

téhet selfkoncentrál field

ütközési tagból valószínűleg külön tényleges erő, amit a töltődő horizont felte

csinál van az $S(\vec{r})$

trükk miatt az $S(\vec{r})$ itt már keldő lesz.

\vec{F} -et a Maxwell - egyenletekből adnak el az elamor ismeretben (Lorenz - erő)

ha $\vec{F} = 0 \rightarrow$ Vektor - gyakorlat

fuggetlenül az eseményről, mincs konzervatív (monoton)

ha S meghagyott → addor van konst.

Density function

B: adúvosságű függv. (mobel. $-^1$)

El-ér melyen nyírhető korlát, eret osztádom plusz kalsz t!

Célyett: sr konfig, u. annyi el-val.

nem a helyük eldérül, hanem az u-ról. Célos fgv. időfejlödés

$d\tau_1 \dots d\tau_n$ faktelf.-tal súor \rightarrow súr. lesz.

cúr időfejlödés konstrukciója

a Leouville-clinellel hasonló, de a faktelf-nak nem kell megneadnia

minden olyes ránk. megneadt

képpeni időpill-ban ha V megrált. \Rightarrow cselelő kell a két oldal legyen

→ fejts, st lincs

$\tilde{\tau}_i \rightarrow$ be tudom helyettesíteni az t-be

\tilde{t} alapja pl ismet ($\sim \frac{1}{2}$)

Kér el piros matematikailag érválasztás, $B=1$!

de mindenből néhánynak nincs

pirosnak a kér a karakteristikus cselelete

(előrendű diff-cs -et elgy oldandár megl. u. mo-juk

a kar. cs -et)

Azok: reduált fgv-eket ker.

H rész. cselema \rightarrow ne tegyük fel többet sem

(majd a vége)

Scallarendű súr. fgv

Miben cseleket célpont ki a reduált? (ba kér)

idő függ. ki tudom integrálni idő függ.

brossz szimola.

Endemény: h-adrendű cselelet
2 felle tag: f₁, f₂ · F, plusz: F_{k+1} tartalmazó tag.
i; j összegést nem lehet elvégzni
egyel magasabb rendű sűr. fgv. jelentik meg
az alacsonyabb rendűben.

Boglyon..

BBGKV

stafirben is leverethető használ...

lásd rát cseleketet semelyire (f_k)

a magasabbrendű minden saját → leverálható

f_k - ből meg kell adnom, hogyan jön az f_{k+1}
hol rátján le a leverálható?

pl. f_{1,2}-at előállítom vissza f_{1,2}-et

f=1 rész, ebből probáljuk előállítani a körül.

(N-k) tömb → ne 1-re normáljunk, hanem N-re
→ besorozva N-mel a tür-el lásd

1. rész. sűr. deriv-ja előállítható a körök, sűr fogya,
de különböző műcs.

2 felle dl van (pozitív és negatív)

az cseleket egész, de semmire nem jön!

+ - : + az r₁ helyen, - az r₂-n.

micro → meso

másik leveretek: credeti mög. cselelet, -j(r-e-ri), ^{rout}

R-szerű deriv.-ját veszem előbb, esetleges

eredetű: díszített dl-sűr. lever. (S-k ellenére)

Szerk. idő szerint deriv-ja lesz az eredetű

különböző műcs. mely van engedve

↳ ablakos veres (van birtok, h. van, de bárki benné)

↳ konvolatív veres → kiint.

P₁ P₂ átl. függelékkel fog adni

Öt műatt ad mennyiséget ad → P₂

bekelyletk. → u. ar ar cseleket jön ki, mind előbb

• Plastic shear \rightarrow környezet
nem fontos

• Self-consist. field:

tükör: zájul le a hárásdúlt

gyorsít. elől. fürt sonatával bonyolódik a 2. rögz. fürt.

K : 2 félle különbsége

S : 2 félle összege

T_{sc} megjelenő tör (mean-field közelítés szerint)

$\hookrightarrow K$ horz. létre

(K) konv. (ldl., terével) alkotott

DÉ: feltehetően, h. a visz. szenzitivitás (nem vannak a dlc), de ilyen fizikailag nem lehetséges $\frac{1}{\pi}$ -cs. fesz. térfüg. divergál logaritmikusan belsőléti tapasztalat nincs \rightarrow ilyen nem lehetséges egységes ttfogat nem friggi attól h. a rözs. indító meghossza

TÖRTÉNT ítt nem lehet ttfy alkalmazni

• T_{sc} törzsgenerátorról előírt ki (diharm. gyorsít.)

Green-für. az als a kétvál.

• Stability anal.: nem fontos

ld-cs. stabilitás nem merőleges \rightarrow feszültség

Numerical result: TEFI cs. simulációs hasadék

• Konvergencia:

konel fgr. defin.

d: menyerje nem sonat c_2 , az adja meg megnevezni azt simulációval minősítésben a konel. fürt.

helyi bonyolult rögzítésben \rightarrow szisz. függ. a konel fürtben

\rightarrow néhány fájdalommal belül O-nak csökken

Debye-Hückel ... ~ Yarava-pot.

totale elektrische belederbaar \rightarrow Ψ -pot. aaldruk k_1 ,
nem $1/r$ -cs

dele \rightarrow horizontale last, aaldruk wegtrek, nem $1/r$ -cs,
dele horizontale a tobbi planaldoel, tere

Debye-Sreening(?)

$T=0$ hou-en van midden muis tenuez na, eigen

$\Rightarrow \Delta \phi = -\rho + \delta$
 $\hookrightarrow c - \phi_{ext}$ beklem, ϕ leeft berekent
 $\hookrightarrow \Psi$ -pot. a no.

$T=0 \rightarrow$ ar ejer muisen

1 rendertensie beeldtva: de nem hougaal a cs. aligat
(quench disorder) \leftarrow er megnerad \rightarrow liesalo
ordnung, muiske tenuez na leme.

d spec, tal: DVIDTAVU

inhou: ordre is: bluyses n_1, n_2 fijfes oot a kulaal
ben van, oot a β -n kereszt van
heftijfes

(or volle CDA-net is)

absr. koord. fijfes: β -n kereszt

β_2 -be visshakken oot ar alore \rightarrow mogen kov-cr
rowdado \rightarrow sofejter \rightarrow l. berekten tafel STOP,

T_{sc} mellett 2 phasen taf (fesz. dim-ai)

felurhatbaa explicieren: PBC sor d-e kombinacioje
teleneing

T_f : antisimum taggal konvol.

~~soot his~~

$n-n_1$ senut sootaf., l. tagig.

$\int_{\text{min}}^{\text{max}}$

walhordasene

tag ~ $\sqrt{S} \rightarrow$ ~~polymerized~~

C, D: kernel for interpoly

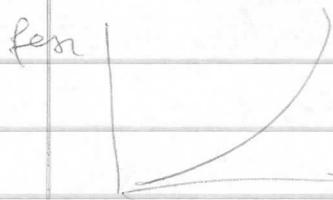
size effect

② Structure of eggs.

megelmin γ_p - a fog's

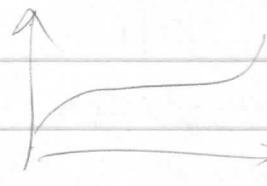
all sunken balloon, this is a crest cell below
ethylene

③ Finite size effect



konstanter feste aray

essa körökben tel-ak,
mejd füleink



it was more fibrous has
a T_b (back stress hundspur)

④ NG composite

körök rökk, kiválaszt

a kiválaszt alkotjatól fog 5-E figv.

⑤ pillars strengthen as rounded

5-E: lepcőről görbe

→ másik más pillatra

mint a nemline determinista a
rökk valaszt