

# TDK dolgozat

Diszkrét Diszlokáció Dinamikai szimulációk a görbült  
diszlokációk statisztikus térelméletében levő  
paraméterek meghatározására

Készítette: **Sándli Lóránt Noé** - JVAXFO

*(sandli.lorant@gmail.com)*

1. éves fizika MSc

Témavezető: **Groma István**

*(groma.istvan@ttk.elte.hu)*

2023. november 19.



Anyagfizikai tanszék  
ELTE Eötvös Lóránd Tudomány Egyetem

# Tartalomjegyzék

|                                                                      |           |
|----------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1. Bevezetés</b>                                                  | <b>1</b>  |
| <b>2. Elméleti háttér</b>                                            | <b>1</b>  |
| 2.1. Diszlokációk . . . . .                                          | 1         |
| <b>3. 2D egyenes diszlokációk dinamikája</b>                         | <b>3</b>  |
| <b>4. 3D görbe diszlokációk</b>                                      | <b>5</b>  |
| 4.1. Dipól közelítés . . . . .                                       | 8         |
| 4.2. Plasztikus deformáció . . . . .                                 | 11        |
| 4.3. Plasztikus potenciál . . . . .                                  | 11        |
| 4.4. Plasztikus potenciál alakja . . . . .                           | 13        |
| <b>5. Rendszer átjárhatatlan fallal</b>                              | <b>15</b> |
| 5.1. Feszültség számolás . . . . .                                   | 15        |
| 5.2. Az időfejlődési egyenletek . . . . .                            | 17        |
| 5.3. Az időfejlődési egyenletek az adott problémára . . . . .        | 18        |
| <b>6. ParaDiS</b>                                                    | <b>21</b> |
| <b>7. Numerikus eredmények</b>                                       | <b>23</b> |
| 7.1. Szimulációs eredmények kiértékelése . . . . .                   | 23        |
| 7.2. Kritikus feszültség meghatározása . . . . .                     | 23        |
| 7.3. Numerikus szimulációk eredményei átjárhatatlan fallal . . . . . | 23        |
| <b>8. Összefoglalás</b>                                              | <b>25</b> |

# 1. Bevezetés

Az anyagtudományban egy rendkívül fontos kutatási terület a szabályosságtól való eltérés vizsgálata, mivel a különböző hibák jelenléte jelentősen befolyásolja az anyag tulajdonságait (pl. a keménységét). Ezek a hibák a kristályos anyagokban mindig jelen vannak, amiket dimenziójuk szerint tudunk osztályozni.

Az 1 dimenziós, vonalszerű kristályhibák - azaz a diszlokációk - felelősek a kristályos anyagok maradandó alakváltozásáért. Mivel egy  $\approx 10\%$ -ig deformált kristályban a diszlokációk tipikus távolsága 100 nm nagyságrendű, ezért már mikron méretű mintákban is akkora számú diszlokáció van jelen, hogy a kollektív mozgásuk leírására a statisztikus fizika módszereit kell alkalmazni. Azonban a statisztikus fizika módszerei nem tudják kezelni a diszlokációk között fellépő hosszú távú kölcsönhatásokat.

Erre a problémára ad megoldást a témavezető Tanszéken kidolgozott kontinuum elmélet. Az elmúlt 30 év során először egyenes párhuzamos diszlokációkból álló rendszerre sikerült megmutatni, hogy a rendszer kollektív dinamikája leírható egy fázismező elmélet keretei között. A fázismező potenciál - amit plasztikus potenciálnak nevezünk - megkapható a diszlokáció-diszlokáció kölcsönhatási energiából egy megfelelő lokális átlagolási eljárással [1].

A közelmúltban megindult az elmélet általánosítása a görbe diszlokációkra a Prof. Thomas Hochrainer által vezetett Graz University of Technology-ban dolgozó kutatócsoporttal együttműködésben [2]. Ekkor a plasztikus potenciál már függ a diszlokációk átlagos lokális görbületétől is.

A munkám célja ennek az elméletnek a validálása diszkrét diszlokáció szimulációk elvégzésével. Erre a célra a ParaDiS nevű szimulációs szoftvert használtam, ami egy diszkrét-diszlokációdinamikai (DDD) problémákra fejlesztett szoftver, ami képes görbült diszlokációkkal három dimenzióban dolgozni. Azért használhatunk ilyen szoftvert, mert annak ellenére, hogy a plasztikus deformációt alapvetően meghatározó kollektív diszlokáció mozgásról keveset tudunk, a diszkrét diszlokációk között fellépő kölcsönhatás jól ismert. Ezért viszonylag nagy számú diszlokáció kölcsönhatása modellezhető számítási kapacitás árán.

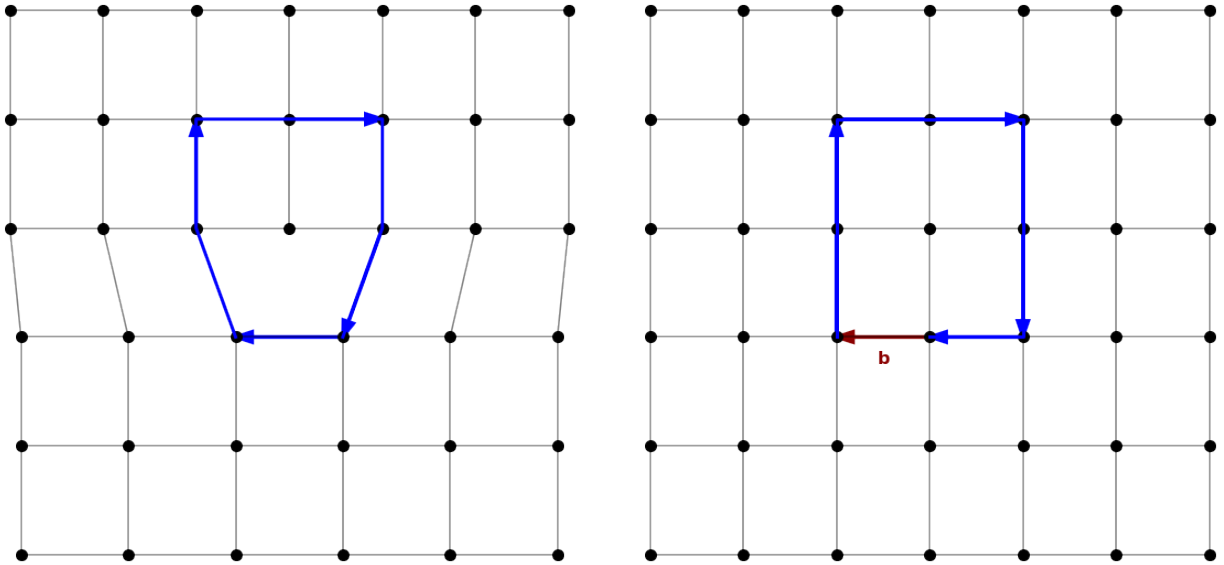
A munka során egy olyan 3D diszlokáció rendszert vizsgálunk, amelyben egy a diszlokációknak átjárhatatlan fal van jelen. A kontinuum egyenlet alapján egy ilyen diszlokáció rendszer dinamikai fejlődését közelítőleg határozhatjuk meg, majd ezt az elméletet a DDD szimulációkkal ellenőrizhetjük. Ha az elméleti jóslat helyes, akkor az elmélet több fontos paraméterét meghatározhatjuk az adott elrendezésre.

## 2. Elméleti háttér

### 2.1. Diszlokációk

A diszlokáció fogalmát 1934-ben egymástól függetlenül vezetve be Polányi, Orován és Taylor egy akkori kísérleti ellentmondás feloldására. Az ellentmondás alapja, hogy kristályos anyagok nyírásakor a maradandó alakváltozáshoz szükséges folyáshatár  $\sigma_f$  mérési eredményei nem feleltek meg az elméleti jóslatnak. Egy egyszerű nyírást feltételezve maradandó alakváltozás úgy jön létre, hogy a kristály felső felét egy rácsállandóval eltoljuk. Egy szinuszos erőfüggvényt feltételezve annak maximumán kell áthaladnunk a maradandó alakváltozáshoz. Ezzel az elmélettel a folyáshatár meghatározása szinte triviális, a legtöbb fém esetén  $\sigma_f \cong 30$  GPa. Ez állt ellentmondásban a kísérletileg meghatározott  $\sigma_f \cong 100$  MPa folyáshatárral.

Erre a három nagyságrend különbség feloldására vezették be a diszlokációkat, amelyeket a kristályrácsba épülő félsíkok élei mentén definiáltak, ahogy látható a 2.1a ábrán. Ebből adódóan a diszlokációk könnyen mozognak a kristályrácsban a beillesztett síkra merőleges rácsvektorok



(a) A diszlokációk vizualizálása Polányi, Orovány és Taylor elmélete szerint

(b) A Burgers-vektor geometriai definiálása.

2.1. ábra

mentén, így ezek elmozdulásával próbálták magyarázni a különbséget. Ez az elméleti megoldás nem bizonyult elégségesnek, mert így az elméleti folyáshatár effektíven nullára csökkent.

Vizsgáljuk meg a vonalhibával rendelkező rács és a hibátlan kristályrács különbségét! Járjuk körbe a diszlokációt a 2.1a ábra szerint, majd ezt ismételjük meg a rendes rácson úgy, hogy ugyanannyi lépést tegyünk meg a 2.1b ábra szerint. Azt tapasztaljuk, hogy a rendes rácson a kör nem fog bezárulni. A végpontból a kezdőpontba induló vektort Burgers-vektornak nevezzük. Látható, hogy ennek valamelyik rácsvektor többszörösének kell lennie.

A a 2.1a ábrán egy egyenes éldiszlokáció látható. 3D-ben a diszlokációk alkothatnak egy zárt hurkot, azaz egy véges hajlított felületet "feszítünk" a kristályrácsba. Az ilyen típusú diszlokációkat nevezzük hurokdiszlokációnak. A hurokdiszlokációk egyik jellemző mozgási típusa az ún. csúszás, amikor a diszlokáció a Burgers-vektort és a diszlokáció vonalát tartalmazó síkban mozog, ami a 2.1a ábrán jobbra, vagy balra történő mozgást jelent.

A diszlokációk energiatöbbletet vezetnek be a rendszerbe, ami függ a Burgers-vektor hosszától:

$$E \propto b^2 \Rightarrow E \propto 2 \left( \frac{b}{2} \right)^2 < b^2 \Rightarrow \mathbf{b} = \mathbf{a}_i \quad (2.1)$$

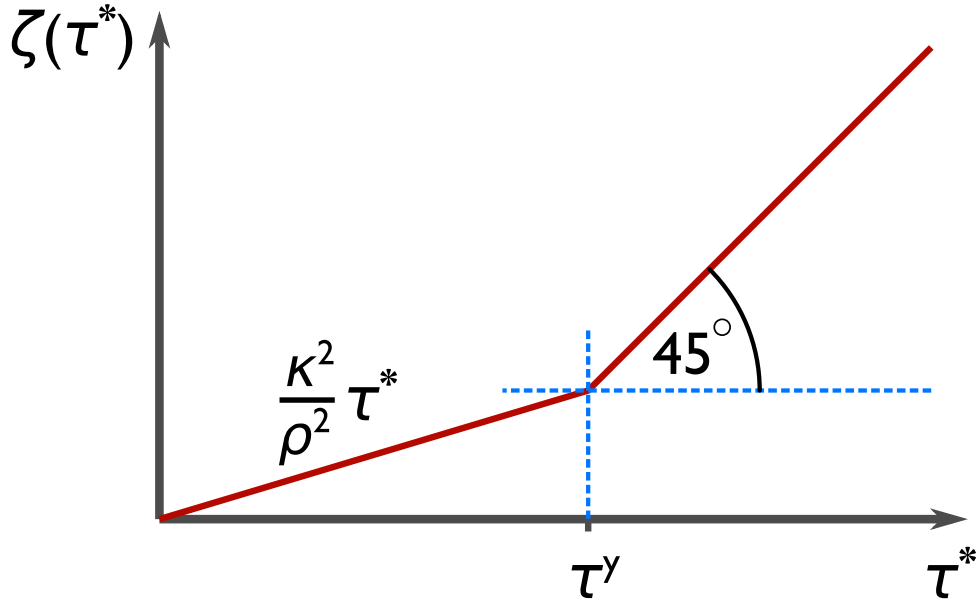
Tehát az energiaminimum elve szerint a diszlokáció Burgers-vektora minimalizálódik, azaz minden diszlokáció kisebb Burgers-vektorú diszlokációkra fog bomlani. Azonban a 2.1b ábrán látható definíció szerint a Burgers-vektor nem lehet kisebb egy rácsvektornál, így ennél kisebb Burgers-vektor nem tud kialakulni.

A diszlokációk között a Peack-Koehler-erő hat, amit egy adott feszültségtérben lévő diszlokációssegmensre tudunk felírni:

$$\mathbf{f} = (\hat{\sigma}^k \mathbf{b}) \times \mathbf{l} \quad (2.2)$$

ahol  $\hat{\sigma}^k$  a külső erők okozta feszültségtér  $\mathbf{l}$  pedig a vonal érintő irányú vektorra. Csúszás esetén csak a csúszósíkra vett vetülete számít:

$$\mathbf{f}_{cs} = [(\hat{\sigma}^k \mathbf{b}) \times \mathbf{l}] \cdot \frac{\mathbf{b}}{b} = \tau \mathbf{b} \quad (2.3)$$



3.1. ábra. A  $\zeta(\tau^*)$  mobilitás függvény. [2]

### 3. 2D egyenes diszlokációk dinamikája

Mivel a 3 dimenziós elmélet a 2D elméletből lett általánosítva érdemes röviden összefoglalni ennek az elméletnek az eredményeit, hogy majd ezeket összehasonlíthassuk a 3D eredményekkel. A rendszer időfejlődésének felírásához először két diszjunkt csoportba sorolhatjuk a diszlokációkat a Burgers-vektorok iránya szerint, amit itt a diszlokáció 'jelének' nevezünk és + illetve – jellel jelöljük őket. Ekkor felírható a két diszlokáció csoporthoz tartozó diszlokációsűrűség  $\rho_+$ ,  $\rho_-$ , amik összege a statisztikailag tárolt diszlokáció (SSD) sűrűség  $\rho$ , illetve a különbségük a geometriailag szükséges diszlokáció (GND) sűrűség  $\kappa$ . Ezen mennyiségek időfejlődése a korábban kidolgozott elmélet szerint [2] megadható az alábbi alakban:

$$\partial_t \rho + M_0 b \partial_x (\kappa \tau^* + \rho \tau^d) = 0 \quad (3.1a)$$

$$\partial_t \kappa + M_0 b \partial_x (\kappa \tau^d + \rho \zeta(\tau^*)) = 0 \quad (3.1b)$$

ahol  $b$  a Burgers-vektor hossza,  $\tau^d$  a diffúziós feszültség,  $\zeta(\tau^*)$  a 'mobilitási' függvény (lásd 3.1 ábra):

$$\zeta(\tau^*) = \begin{cases} \frac{\kappa^2}{\rho^2} \tau^* & \text{ha } |\tau^*| \leq \tau^y \\ \tau^* - \text{sgn}(\tau^*) \tau^y \left(1 - \frac{\kappa^2}{\rho^2}\right) & \text{ha } |\tau^*| > \tau^y \end{cases} \quad (3.2)$$

ahol  $v^m$  és  $v^d$  a diszlokációk átlag, illetve 'eltérési' sebessége, ahogy látható a 3.2 ábrán.  $\tau^y$  a Taylor-relációval meghatározható lokális folyáshatár:

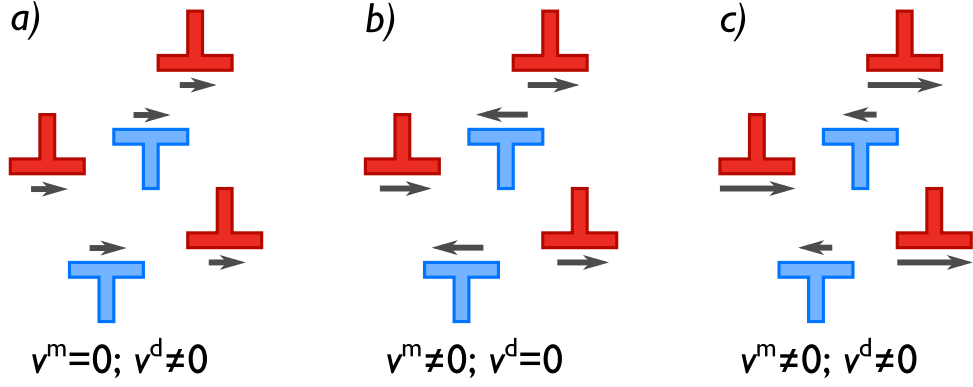
$$\tau^y = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (3.3)$$

melyben  $\alpha$  a dimenziótlan Taylor-együttható és  $\mu$  a nyírási modulusz. Ekkor  $\tau^*$  feszültség felírható egy  $\tau^{mf}$  átlagtérfeszültség és egy  $\tau^b$  'back stress' feszültség összegeként.  $\tau^b$  és  $\tau^d$  a következő:

$$\tau^b = - \underbrace{\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)}}_G b \frac{D}{\rho} \partial_x \kappa \quad (3.4a)$$

ahol  $\nu$  a Poisson-tényező,

$$\tau^d = -GbA \partial_x \rho \quad (3.4b)$$



3.2. ábra. Az egyenes éldiszlokációk mozgásának sematikus rajza. A piros "T" betűk jelzik a pozitív jelű diszlokációkat, míg a kékek a negatívakat.  $v^m = (v_+ + v_-)/2$  a diszlokációk átlagos sebessége,  $v^d = (v_+ - v_-)/2$  a diszlokációk "eltérési" vagy "sodródási" sebessége. Az (a) ábrán a diszlokációk egy irányba mozognak, a diszlokáció eloszlás alakja megmarad, azaz a rendszer egy merev testként mozog. A (b) esetben  $v_+ = v_-$ , azaz a diszlokációk ellentétes irányba mozognak és változik a diszlokációsűrűség eloszlás. A (c) az általános eset, ami (a) és (b) szuperpozíciója [2].

$A$  és  $D$  dimenziótlan konstansok. Ezekkel az egyenletekkel fel tudjuk írni a két sebesség tagot [2]:

$$v^m = M_0 b \chi(\tau^*) \quad (3.5a)$$

$$v^m = M_0 b \left( \frac{\kappa}{\rho} [\tau^* - \chi(\tau^*)] + \tau^d \right) \quad (3.5b)$$

ahol ismét megjelenik egy mobilitási függvény:

$$\chi(\tau^*) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |\tau^*| \leq \tau^y \\ \tau^* - \text{sgn}(\tau^*) \tau^y & \text{ha } |\tau^*| > \tau^y \end{cases} \quad (3.5c)$$

Fontos kiemelni, hogy a fenti egyenletek származtathatók egy skalár  $P$  funkcionálból, amit plasztikus potenciálnak nevezünk amely nem tud növekedni a rendszer időfejlődése során [2]:

$$\dot{P} = \int [\mu_\rho \partial_t \rho + \mu_\kappa \partial_t \kappa] dA \leq 0 \quad (3.6a)$$

ahol:

$$\mu_\rho = \frac{\delta P}{\delta \rho} \quad , \quad \mu_\kappa = \frac{\delta P}{\delta \kappa} \quad (3.6b)$$

Ez azt eredményezi, hogy sebességekre a következő egyenlőtlenség lesz igaz:

$$\tau^d \left( v^d + \frac{\kappa}{\rho} v^m \right) + \tau^* \left( v^m + \frac{\kappa}{\rho} v^d \right) \geq 0 \quad (3.7)$$

És ez átírható a következő egyenletre:

$$\begin{aligned} & \left( \tau^* - \text{sgn}(\tau^*) \tau^y, \quad \text{sgn}(\tau^*) \frac{\kappa}{\rho} \tau^y + \tau^d \right) \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & \frac{\kappa}{\rho} \\ \frac{\kappa}{\rho} & 1 \end{pmatrix}}_{\text{pozitív definit}} \begin{pmatrix} \tau^* - \text{sgn}(\tau^*) \tau^y \\ \text{sgn}(\tau^*) \frac{\kappa}{\rho} \tau^y + \tau^d \end{pmatrix} + \\ & + \left( 1 - \frac{\kappa^2}{\rho^2} \right) \underbrace{\text{sgn}(\tau^*) \tau^y (\tau^* - \text{sgn}(\tau^*) \tau^y)}_{>0} \geq 0 \quad (3.8) \end{aligned}$$

amelynek még a későbbiek során fontos jelentősége lesz.

Az elmélet alapján egy átjárhatatlan falas problémát vizsgált a [1] cikk, amelyben a diszlokációk egy  $L$  szélességű 'völgyben' képesek mozogni, amelyet két átjárhatatlan fal vesz körbe. Ekkor felírható a SSD és GND diszlokációsűrűség időfejlődése:

$$\partial_t \tilde{\rho}(\tilde{x}, t) = -\partial_{\tilde{x}} \left\{ \tilde{\kappa}(\tilde{x}, t) \left[ \tilde{\tau} - \frac{1}{\tilde{\rho}(\tilde{x}, t)} \partial_{\tilde{x}} \tilde{\kappa}(\tilde{x}, t) \right] \right\} \quad (3.9a)$$

$$\partial_t \tilde{\kappa}(\tilde{x}, t) = -\partial_{\tilde{x}} \left[ \tilde{\rho}(\tilde{x}, t) \left\{ \tilde{\tau} - \left[ \frac{1}{\tilde{\rho}(\tilde{x}, t)} \partial_{\tilde{x}} \tilde{\kappa}(\tilde{x}, t) \right] \right\} \right] \quad (3.9b)$$

ahol

$$\tau_{eff} = Ab\sqrt{\rho_0}\tilde{\tau}, \quad x = \frac{D\tilde{x}}{\sqrt{\rho}}, \quad \rho = \rho_0\tilde{\rho}, \quad \kappa = \rho_0\tilde{\kappa} \quad (3.9c)$$

A differenciál egyenletek határfeltételei, hogy a bal oldali falra csak negatív diszlokációk, míg a jobb oldali falra csak pozitív diszlokációk mehetnek. Továbbá a diszlokációfluxusok a falon nullák:

$$\tilde{\kappa}(-\tilde{L}/2) = -\tilde{\rho}(-\tilde{L}/2), \quad \tilde{\kappa}(\tilde{L}/2) = \tilde{\rho}(\tilde{L}/2), \quad \tilde{\rho}\tilde{\tau} - \partial_{\tilde{x}}\tilde{\kappa} = 0 \text{ ha } \tilde{x} = \pm\tilde{L}/2 \quad (3.10)$$

A kezdőfeltételek pedig:

$$\tilde{\rho}(\tilde{x}, 0) = 1, \quad \tilde{\kappa}(\tilde{x}, 0) = 0 \quad \text{mindenhol, kivéve közvetlen a falakon} \quad (3.11)$$

A falak melletti vékony határrétegben  $\kappa$  nem nulla, hogy megfeleljen a határfeltételeknek.

A falak mentén nagy külső feszültség hatására két határréteg jelenik meg. Ezeknek a határrétegeknek a felépítését jellemezhetjük, ha feltesszük, hogy az összes diszlokáció a falak közelében lesz az eddig leírtak szerint. Ekkor (3.9a) és (3.9b) a következő alakra változnak statikus esetben:

$$\tilde{\tau}\tilde{\kappa} = \pm\partial_{\tilde{x}}\tilde{\kappa}, \quad \tilde{\kappa} = \tilde{\kappa}_0 \quad (3.12)$$

Aminek a megoldása:

$$\tilde{\kappa}(\tilde{x}) = \pm \frac{\tilde{\tau}\tilde{L}}{2} \exp \left\{ \pm \tilde{\tau} \left[ \tilde{x} - \left( \pm \tilde{L}/2 \right) \right] \right\} \quad (3.13)$$

ahol a + a jobb, míg a - a bal falra vonatkozik. Ekkor a falakhoz közel a deformáció eloszlás:

$$\tilde{\lambda}(\tilde{x}) = \tilde{\gamma}_\infty \{1 - \exp(\pm \tilde{\tau} [\tilde{x} - (\pm \tilde{L}/2)])\} \quad (3.14)$$

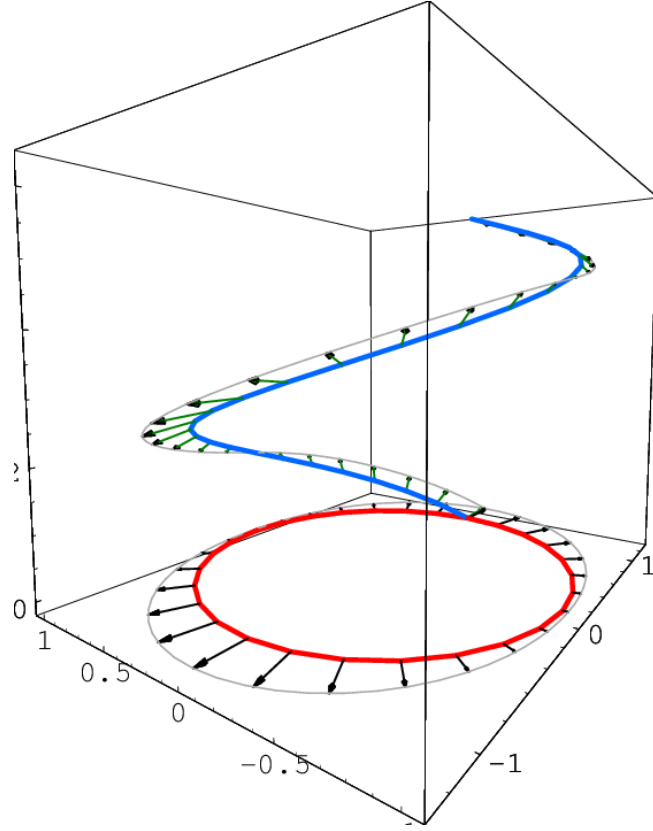
Célünk az ezzel ekvivalens probléma kezelése 3D görbe diszlokációkra.

## 4. 3D görbe diszlokációk

Ebben a fejezetben a munka céljához szükséges elméleti levezetést dolgozom fel a [2] szerint.

A 3D görbe diszlokációk kezelésére számos egyszerűsítést, illetve feltételezést kell tennünk [2], [3], [4], [5] alapján:

- Csak csúszás típusú diszlokáció mozgás lehetséges.
- A diszlokációk egy síkban helyezkednek el  $([0, 0, 1])$
- Egyéb csúszó rendszerek nincsenek.
- De a diszlokációk alakjára nincs kitétel.



4.1. ábra. A 2+1D kiterjesztés.

Ezzel effektíven redukáltuk a problémát 2D síkbeli hurkok problémájára. Azonban a vonal irántangensének folytonos változását egy 2+1 dimenzióra történő kiterjesztéssel veszünk figyelembe (lásd 4.1 ábra). Az eredetileg az  $xy$  síkban fekvő görbéhez hozzárendelünk egy egyel magasabb dimenziójú görbét úgy, hogy a harmadik dimenzió koordinátája a görben adott pontjába húzott érintő irányának az  $x$  tengellyel bezárt  $\varphi$  szöge. Ekkor a koordináták  $(x, y, \varphi) = (\mathbf{r}, \varphi)$ .

Célünk a rendszer terekkel való leírása, ami jelentősen könnyíti az elméleti számolásokat. Az első ilyen tér  $\mathbf{R}$  vektortér, ami a rendszer statikus állapota.  $\mathbf{R}^1$  felírható a (2+1)D térben két (pszeudo)skalár<sup>2</sup> térként:

$$\mathbf{R} = (\rho' \cos \varphi, \rho' \sin \varphi, q') = \rho' \mathbf{L} \quad (4.1)$$

ahol  $\rho'(\mathbf{r}, \varphi)$  a diszlokációsűrűség és  $q'(\mathbf{r}, \varphi)$  a görbületsűrűség,  $\mathbf{L}$  a vonal irány:

$$\mathbf{L} = (\cos \varphi, \sin \varphi, k') = (\mathbf{l}, k'), \quad k' = \frac{q'}{\rho'} \quad (4.2)$$

$k'$  a lokális átlag görbülete az  $\mathbf{l}$  irányú diszlokációnak. Bevezethető az  $\mathbf{L}$ -el irányú differenciálás operátora:

$$\hat{L} = \cos \varphi \partial_x + \sin \varphi \partial_y + k' \partial_\varphi \quad (4.3)$$

amely fontos szerepet játszik a továbbiakban.

A diszlokációsűrűség-tenzor formálisan könnyen általánosítható a 2+1D térre:

$$\alpha' = \rho'(\mathbf{r}, \varphi) \mathbf{L}(\mathbf{r}, \varphi) \otimes \mathbf{b} = \mathbf{R} \otimes \mathbf{b} \quad (4.4)$$

<sup>1</sup>A terek amiket bevezetünk függhetnek  $z$  koordinátától, de csak akkor tüntetjük fel ha szükséges

<sup>2</sup>A (2+1)D térben skalár mennyiségek  $'$ -vel vannak jelölve

ahol  $\mathbf{b} = (b_x, b_y)$  a diszlokáció Burgers vektora. Innen a 2D valódi térben a diszlokációsűrűség-tenzor:

$$\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho'(\mathbf{r}, \varphi) \mathbf{l}(\mathbf{r}, \varphi) \otimes \mathbf{b} d\varphi \stackrel{\textcircled{1}}{=} \kappa \otimes \mathbf{b}, \quad \kappa = (\kappa_x, \kappa_y) \quad (4.5a)$$

$$\kappa_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho'(\mathbf{r}, \varphi) \cos \varphi d\varphi \quad (4.5b)$$

$$\kappa_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho'(\mathbf{r}, \varphi) \sin \varphi d\varphi \quad (4.5c)$$

ahol  $\kappa$  a nettó vonal irányvektor.  $\textcircled{1}$ : a Burgers vektorvonal irány függetlenségének a következménye. Ha a szöveget a Burgers vektorból vesszük, akkor  $\kappa_1$  a teljes csavar diszlokáció komponens, míg  $\kappa_2$  a teljes él diszlokáció komponens.

Fontos, hogy a diszlokáció vonalak ne végződjenek a rendszerben, tehát a diszlokációknak zártnak kell lennie. Ahhoz, hogy matematikailag meg tudjuk követelni a folytonosságot, be kell vezetnünk a (2+1)D térben a divergenciát:

$$\hat{\text{Div}} \mathbf{A} = \hat{\text{Div}}(A_1, A_2, A_\varphi) = \partial_x A_1 + \partial_y A_2 + \partial_\varphi A_\varphi \quad (4.6)$$

Az így felírható feltétel (4.4) egyenlet alapján:

$$\hat{\text{Div}} \alpha' = \cos \varphi \partial_x \rho' + \sin \varphi \partial_y \rho' + \partial_\varphi q' = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{\text{Div}} \alpha = 0 \quad (4.7)$$

A diszlokáció lokális időfejlődésének felírásához szükség van a diszlokáció vonal sebességére. Ez a (2+1)D térben  $\mathbf{V}$  vektortér aminek térbeli és rotációs komponense van. Mivel a diszlokáció sebessége mindig merőleges a diszlokációszegetmens  $\mathbf{l}$  vonalirányára, ez felírható a  $v'(\mathbf{r}, \varphi)$  skalármennyiséggel. A rotáció megadható  $v' \mathbf{L}$  irányú negatív gradiensevel.

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}, \varphi) = (v' \sin \varphi, -v' \cos \varphi, -\hat{L}(v')) \quad (4.8)$$

A rendszer időfejlődése megkapható  $\mathbf{V}$  irányú Lie deriválttal, ami a  $\partial_t \alpha = \nabla \times (\mathbf{v} \times \alpha)$  3D megmaradási tételt általánosítja.  $\rho'$  és  $k'$  terekre felírva:

$$\partial_t \rho' = -\hat{\text{Div}}(\rho' \mathbf{V}) + v' k' \rho' \quad (4.9a)$$

$$\partial_t l' = -v' k'^2 - \hat{L}(\hat{L}(v')) - \hat{V}(k'),^3 \quad (4.9b)$$

$$\Rightarrow \partial_t q' = -\hat{\text{Div}}(q' \mathbf{V} + \rho' \hat{L}(v') \mathbf{L}) \quad (4.9c)$$

A (4.9a) felírható expliciten  $\varphi$ -tól függő alakban, ami figyelembe veszi a (4.7) feltételt:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho' = & -\sin \varphi \partial_x (\rho' v') + \cos \varphi \partial_y (\rho' v') + \partial_\varphi [\cos \varphi \partial_x (\rho' v') + \sin \varphi \partial_y (\rho' v')] + \\ & + \partial_\varphi [\cos \varphi \partial_x (\rho' v') + \sin \varphi \partial_y (\rho' v') + \partial_\varphi (\rho' v')] + v' q' \end{aligned} \quad (4.10)$$

Ez egy zárt kinematikai egyenletrendszer alkot  $v'$ -vel, azonban ez nem megoldható sem elméleti, sem numerikus módszerekkel a szabadsági fokok nagy száma miatt. Ezért további egyszerűsítéseket kell tennünk.

---

<sup>3</sup> $\hat{V} = v' \sin \varphi \partial_x - v' \cos \varphi \partial_y - \hat{L}(v') \partial_\varphi$

## 4.1. Dipól közelítés

A megjelenő periodikus  $\varphi$  függés kezelésére a elektrosztatikához hasonlóan (innen a neve) Fourier-sorba fejtjük az egyenleteket első rendig [6]. Fontos, hogy az elnevezés nem arra utal, hogy 'diszlokáció dipólokat' vezetünk be, vagy feltételt tennénk a diszlokációk alakjára. Ezek alapján:

$$\rho'(\mathbf{r}, \varphi) \approx \rho(\mathbf{r}) + 2 \cos \varphi \kappa_1(\mathbf{r}) + 2 \sin \varphi \kappa_2(\mathbf{r}) \quad (4.11a)$$

$$v'(\mathbf{r}, \varphi) \approx v^m(\mathbf{r}) + \cos \varphi v_1^d(\mathbf{r}) + \sin \varphi v_2^d(\mathbf{r}) \quad (4.11b)$$

$$q'(\mathbf{r}, \varphi) \approx q(\mathbf{r}) + \cos \varphi Q_1(\mathbf{r}) - \sin \varphi Q_2(\mathbf{r}) \quad (4.11c)$$

A (4.11a) egyenletbe,  $\rho$  a teljes SSD sűrűség, ami nem függ az orientációtól, és  $\kappa_{1,2}$  a GND sűrűsége az  $x$  illetve az  $y$  tengellyel párhuzamos diszlokációknak. Ez összhangban van (4.5b)-ben és (4.5c)-ben felírt definíciókkal. Ez azt jelenti, hogy az SSD nem tartalmaz irány információt. Ennek következménye, hogy ez az elmélet nem képes pontosan leírni egyenes diszlokáció rendszereket anélkül, hogy az irány információt beleépítenénk az SSD-be. Ehhez legalább még kettő Fourier-komponense lenne szükség.

A (4.11b)-ben bevezetünk három skalár sebességmennyiséget  $v^m, v_1^d, v_2^d$ -t.  $v'$  definíciója alapján. Ezek jelentését mutatja a 4.2 ábra egy diszlokáció hurkon. A  $v^m$  az összes diszlokáció átlagsebessége, míg  $\mathbf{v}^d = (v_1^d, v_2^d)$  sodródási (drift) sebesség vektor ami a diszlokáció irányát adja meg ( $\mathbf{l} \parallel \mathbf{v}^d$ ). A drift sebesség nem a diszlokáció sebességvektora, hiszen az mindig merőleges a lokális diszlokáció irányra.

A (4.11c) a görbület sűrűséget adja meg ahol  $q' = \rho' k'$  <sup>4</sup>. Bevezetünk egy görbület "különbözetit"  $\mathbf{Q}$  vektort, <sup>5</sup>

A dipól közelítéssel nyilván megsérjük a (4.7) feltételt, az nem teljesül egzaktul. Azonban a megfelelő Fourier együtthatók szintjén ki tudunk róni olyan feltételeket amelyek a dipól közelítésen belül megfelelőek. Vezessük be a (4.7) egyenlet alapján következő mennyiségre:

$$G(\mathbf{r}, \varphi) := \cos \varphi \partial_x \rho'(\mathbf{r}, \varphi) + \sin \varphi \partial_y \rho'(\mathbf{r}, \varphi) + \partial_\varphi q'(\mathbf{r}, \varphi) \quad (4.12a)$$

Vegyük az integrálját

$$G^m(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} G(\mathbf{r}, \varphi) d\varphi \quad (4.12b)$$

(4.11a) alapján

$$G^m(\mathbf{r}) = \partial_x \kappa_1(\mathbf{r}) + \partial_y \kappa_2(\mathbf{r}) = 0 \quad (4.12c)$$

Ez egy feltételt ad  $\kappa_{1,2}$  között, aminek a jelentése, hogy a diszlokációk nem végződhetnek a minta belsejében.

Az első Fourier-együtthatóknak is el kell tűnnie:

$$G_1^d(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos \varphi G(\mathbf{r}, \varphi) d\varphi = 0 \quad (4.13a)$$

$$G_2^d(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin \varphi G(\mathbf{r}, \varphi) d\varphi = 0 \quad (4.13b)$$

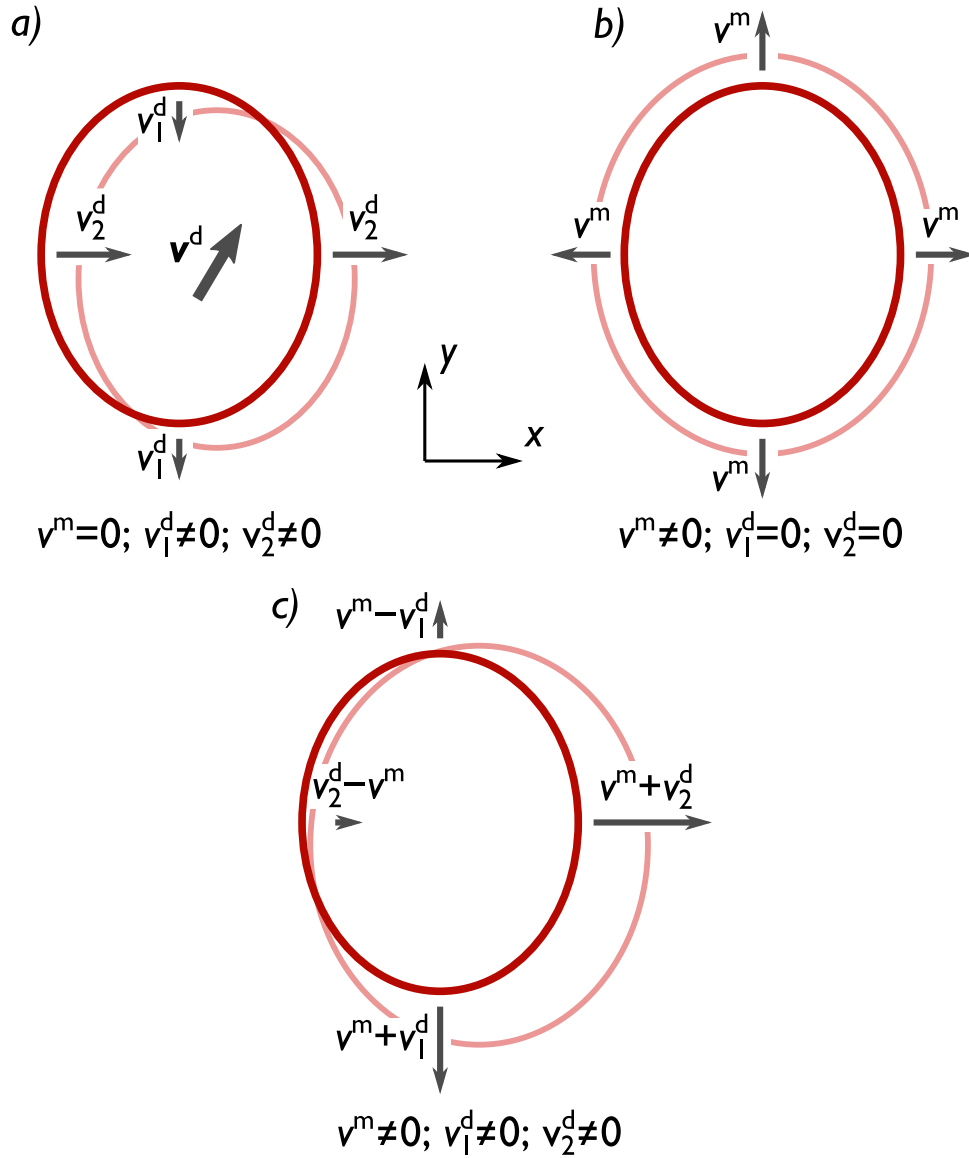
Ekkor a korábban bevezetett mennyiségekkel a következő feltételeket kapjuk:

$$Q_1(\mathbf{r}) = \partial_x \rho(\mathbf{r}) \quad , \quad Q_2(\mathbf{r}) = \partial_y \rho(\mathbf{r}) \quad ^6 \quad (4.14)$$

<sup>4</sup>4.7 összeköti  $\rho'$ -t és  $q'$ -t

<sup>5</sup> $\mathbf{Q}$  amely két ellentétes orientációjú, maximális görbületkülönbséggel rendelkező diszlokáció irányát adja meg.

<sup>6</sup>4.12c-el ellentétben ezek függenek a Fourier-együtthatók számától, a magasabb rendű tagokat elhagytuk.



4.2. ábra. A görbe diszlokációk lehetséges mozgásai az  $xy$  síkban. A sötét piros hurok jelzi a kiindulási hurkot, a világos piros pedig a hurok kis idő elteltével.  $v^m$  az "átlagos" diszlokáció sebesség bármilyen karakterisztikájú diszlokációkra, míg  $\mathbf{v}^d = (v_1^d, v_2^d)$  a "sodródási" sebesség, ami a diszlokáció irányát jellemzi. Ezek a mennyiségek analógok a 3.2 ábrán láthatóakkal. Az (a) ábrán a hurok merev testként mozog, azaz alakja nem változik miközben mozog. A hurok  $\mathbf{v}^d$ -vel párhuzamos tagjának nulla a sebessége, míg a rá merőlegesnek maximális. (b) Abban az esetben, ha  $\mathbf{v}^d = \mathbf{0}$  és  $v_m \neq 0$  a hurok  $v_m$  sebességgel elkezd növekedni. Itt a hurok alakja változik, azaz a diszlokációk relatív távolságváltozáson mennek keresztül. (c) ismét az (a) és (b) szuperpozíciója, egyszerre változik a hurok alakja és halad a térben. [2]

Ezekkel már fel tudjuk írni az időfejlődést a dipól közelítésben. Ha (4.11a-4.11c)-t beírjuk (4.10)-ba:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \partial_t \rho' d\varphi = \partial_t \rho \quad (4.15a)$$

$$\partial_t \rho = -\frac{1}{2} \partial_x (\rho v_2^d) + \frac{1}{2} \partial_y (\rho v_1^d) + \partial_y (\kappa_1 v^m) - \partial_x (\kappa_2 v^m) + \frac{1}{2} q v^m + \frac{1}{2} v_1^d Q_2 - v_2^d Q_1 \quad (4.15b)$$

Ha ebbe beleírjuk  $\mathbf{Q}$ -ra vonatkozó feltételt:

$$\partial_t \rho = -\frac{1}{2} \partial_x (\rho v_2^d) + \frac{1}{2} \partial_y (\rho v_1^d) + \partial_y (\kappa_1 v^m) - \partial_x (\kappa_2 v^m) + q v^m + \frac{1}{2} v_1^d \partial_y \rho - v_2^d \partial_x \rho \quad (4.15c)$$

Átírva:

$$\partial_t \rho = -\partial_x (\rho v_2^d) + \partial_y (\rho v_1^d) + \partial_y (\kappa_1 v^m) - \partial_x (\kappa_2 v^m) + q v^m + \frac{1}{2} v_1^d \partial_y \rho - \frac{1}{2} v_2^d \partial_x \rho \quad (4.15d)$$

Ez a diszlokációsűrűség időfejlődése a "dipól" közelítésben. Ez  $q = 0$ -nál az utolsó két tagot leszámítva megegyezik a 2D egyenes diszlokációk esetével. Ahhoz, hogy egyenes diszlokációkra is működjön bevezetjük  $\lambda_{1,2}$ -t, amik egyenes diszlokációk esetén  $\lambda_{1,2} = 0$ , míg dipól közelítésben  $\lambda_{1,2} = 1/2$ :

$$\partial_t \rho = -\partial_x (\rho v_2^d) + \partial_y (\rho v_1^d) + \partial_y (\kappa_1 v^m) - \partial_x (\kappa_2 v^m) + q v^m + \lambda_1 v_1^d \partial_y \rho - \lambda_2 v_2^d \partial_x \rho \quad (4.16)$$

Két megfigyelést teszünk:

$$\cos \varphi [\hat{\text{Div}}(\rho' \mathbf{V}) + q' v'] = \partial_y (\rho' v') - \partial_\varphi [-q' v' \sin \varphi - \rho' \hat{L}(v') \cos \varphi] \quad (4.17a)$$

$$\sin \varphi [\hat{\text{Div}}(\rho' \mathbf{V}) + q' v'] = -\partial_y (\rho' v') + \partial_\varphi [-q' v' \cos \varphi - \rho' \hat{L}(v') \sin \varphi] \quad (4.17b)$$

Ezeket felhasználva felírhatjuk  $\kappa$  időfejlődését:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos \varphi \partial_t \rho' d\varphi = \partial_t \kappa_1 \stackrel{4.11a, 4.11b, 4.17a}{\implies} \partial_t \kappa_1 = \partial_y (\rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d) \quad (4.18a)$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin \varphi \partial_t \rho' d\varphi = \partial_t \kappa_2 \stackrel{4.11a, 4.11b, 4.17b}{\implies} \partial_t \kappa_2 = -\partial_x (\rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d) \quad (4.18b)$$

$q$  görbület időfejlődésére (4.9c)-t felhasználva [7]:

$$\partial_t q = -\partial_x \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} [q' v' \sin \varphi + \rho' \hat{L}(v') \cos \varphi] d\varphi - \partial_y \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} [q' v' \cos \varphi + \rho' \hat{L}(v') \sin \varphi] d\varphi \quad (4.19)$$

ami azt mutatja, hogy  $q$  egy megmaradó mennyiség. Összességében  $q$  időfejlődése a dipól közeítésben:

$$\begin{aligned} \partial_t q = \partial_x \left[ -q v_2^d + v^m Q_1 - \frac{1}{2} \partial_x \left( \rho v^m + \frac{1}{2} \kappa_2 v_2^d + \frac{3}{2} \kappa_1 v_1^d \right) - \frac{1}{4} \partial_y (\kappa_1 v_2^d + \kappa_2 v_1^d) \right] + \\ + \partial_y \left[ q v_1^d + v^m Q_2 - \frac{1}{2} \partial_y \left( \rho v^m + \frac{1}{2} \kappa_1 v_1^d + \frac{3}{2} \kappa_2 v_2^d \right) - \frac{1}{4} \partial_x (\kappa_2 v_2^d + \kappa_1 v_1^d) \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

Ha a rendszer homogén és elhagyjuk a másodrendű deriváltakat egyszerűbb alakra jutunk:

$$\partial_t q = -\partial_x (q v_2^d - v^m Q_1) + \partial_y (q v_1^d + v^m Q_2) \quad (4.21)$$

A továbbiakban ezt használni fogjuk<sup>7</sup>. Megjegyezzük, hogy ha további Fourier-együtthatókat is figyelembe veszünk akkor is hasonló lesz az időfejlődés alakja.

<sup>7</sup>Az általános eset is hasonlóan kezelhető.

## 4.2. Plasztikus deformáció

Vizsgáljuk meg a plasztikus deformáció tenzort  $\beta^p$  és az idő szerinti deriváltját  $\dot{\beta}^p$  a diszkrét geometrián. Tudjuk, hogy a diszlokációsűrűség-tenzor  $\alpha_{ij} = \varepsilon_{ikl} \partial_k \beta_{lj}^p$ . Általános esetben  $\alpha$  nem határozza meg egyértelműen  $\beta^p$ -t, de ez a mi esetünkben nem igaz. Mivel feltettük, hogy a diszlokációk csak a saját csúszósíkjukban tudnak mozogni a  $\beta^p$   $i = 3$  komponensei nem nullák [8] és  $\beta_{3j}^p(\mathbf{r}) = \beta_0(\mathbf{r})b_j$ , ahol  $\beta_0(\mathbf{r})$  egy skalár ami megadható  $\alpha$ :

$$\kappa_1 = \partial_y \beta_0 \quad , \quad \kappa_2 = -\partial_x \beta_0 \quad (4.22)$$

Ha bevezetjük  $\mathbf{F} = (-\kappa_2, \kappa_1, 0)$  vektort és feltesszük, hogy egy adott csúszósíkban vagyunk bizonyítható a  $\partial_x \kappa_1 + \partial_y \kappa_2 = 0$ -ból, hogy  $\mathbf{F}$  rotációmentes. Ennek következménye, hogy  $\mathbf{F}$  megadható egy skalármező gradienseként  $F_i = \partial_i \beta_0$ . Ezáltal  $\beta_0$  megadható a GND sűrűségből egy integrálással:

$$\beta_0(\mathbf{r}) = \int_{\infty}^{\mathbf{r}} F_i dr_i \quad (4.23)$$

Ez az integrál elvégezhető bármely  $z$  tengelyre merőleges síkba eső görbén.

A plasztikus deformáció időbeli változásának sebessége  $\dot{\beta}^p$  függ  $\dot{\beta}_0$ -tól a következőképpen:  $\dot{\beta}_{ij}^p(\mathbf{r}) = \dot{\beta}_0(\mathbf{r})b_j$  (a többi tag 0), így:

$$\dot{\beta}_0(\mathbf{r}) = \int_{\infty}^{\mathbf{r}} \partial_t F_i dr_i \quad (4.24a)$$

$$\partial_t F_1 = -\partial_t \kappa_2 = \partial_x (\rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d) \quad (4.24b)$$

$$\partial_t F_2 = \partial_t \kappa_1 = \partial_y (\rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d) \quad (4.24c)$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\beta}_0 = \rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d \quad (4.24d)$$

## 4.3. Plasztikus potenciál

Az eddigi egyenleteink a diszlokáció rendszerre a dipól közelítésben nem adják meg  $v^m$  és  $v_{1,2}^d$  sebességeket az állapot változók  $\rho$ ,  $\kappa_{1,2}$ ,  $q$  függvényében. Ehhez a 2D esetben felírható termodinamikai megfontolásokat általánosítjuk. Itt is feltesszük, hogy létezik  $\rho$ ,  $\kappa_{1,2}$ ,  $q$  tereknek skalár funkcionálja ami nem tud nőni a rendszer időfejlődése közben.

Első lépésként olyan mobilitási törvényeket fogunk felírni amik garantálják, hogy a funkcionál ne nőhessen anélkül, hogy megadnák annak pontos alakját. Ez a funkcionál a plasztikus potenciál amelyet  $P[\rho, \kappa_1, \kappa_2, q]$ -vel jeölünk. Általános esetben az időderiváltja:

$$\dot{P} = \int \left[ \underbrace{\frac{\delta P}{\delta \rho}}_{\mu_\rho} \partial_t \rho + \underbrace{\frac{\delta P}{\delta \kappa_1}}_{\mu_{\kappa_1}} \partial_t \kappa_1 + \underbrace{\frac{\delta P}{\delta \kappa_2}}_{\mu_{\kappa_2}} \partial_t \kappa_2 + \underbrace{\frac{\delta P}{\delta q}}_{\mu_q} \partial_t q \right] dV \quad (4.25)$$

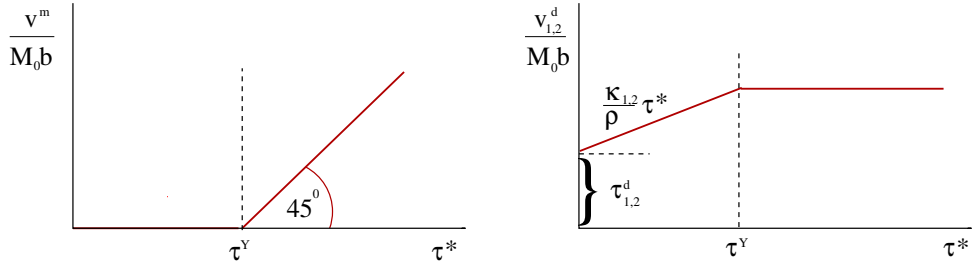
ahol  $\delta P / \delta X$  az  $X$  tér szerinti funkcionális derivált, míg  $\mu_X$  a megfelelő "kémiai potenciál", amelyek a termodinamikai definíciójával formálisan analógok. Azonban fontos különbség, hogy habár ezek intenzív állapotjelzők, de alább bevezetett sűrűdéhoz hasonló mozgás következtében nem kell állandók legyenek egyensúlyi helyzetben.

Ha beírjuk a terek korábban kiszámolt alakjait (4.16, 4.18, 4.21) a plasztikus potenciál időderiváltjába (4.25) és elvégezzük az integrálást, a következő egyenlőtlenséget kapjuk:

$$\dot{P} = - \int b\rho \left[ (\tau^* + \tau^m) v^m + \left( \frac{\kappa_1}{\rho} \tau^* + \tau_1^d \right) v_1^d + \left( \frac{\kappa_2}{\rho} \tau^* + \tau_2^d \right) v_2^d \right] dV \leq 0 \quad (4.26a)$$

---

<sup>8</sup>Feltettük, hogy minden tér nullába tart a végtelenben.



4.3. ábra. A  $v^m$  és  $v^d$  sebességek az effektív feszültség függvényében. [2]

Ahol a következő feszültségdimenziójú mennyiségeket vezettük be:

$$\tau^* = \frac{1}{b}[(\partial_y \mu_{\kappa_1}) - (\partial_x \mu_{\kappa_2})] \quad (4.26b)$$

$$\tau_1^d = \frac{1}{b\rho}[(\partial_x \mu_\rho)\rho + (\partial_y \mu_q)q + \partial_y(\lambda_1 \mu_\rho \rho)] \quad (4.26c)$$

$$\tau_2^d = -\frac{1}{b\rho}[(\partial_x \mu_\rho)\rho + (\partial_y \mu_q)q + \partial_y(\lambda_2 \mu_\rho \rho)] \quad (4.26d)$$

$$\tau^m = \frac{1}{b\rho}[(\partial_y \mu_\rho)\kappa_1 - (\partial_x \mu_\rho)\kappa_2 + (\partial_x \mu_q)Q_1 + (\partial_y \mu_q)Q_2 - \mu_\rho q] \quad (4.26e)$$

Ahoz, hogy a plasztikus potenciál ne nőjön (4.26a)-ben az integrandusnak mindenhol nemnegatívnak kell lennie:

$$(\tau^* + \tau^m)v^m + \left(\frac{\kappa_1}{\rho}\tau^* + \tau_1^d\right)v_1^d + \left(\frac{\kappa_2}{\rho}\tau^* + \tau_2^d\right)v_2^d \geq 0 \quad (4.27)$$

A 2D alalógiájára itt is bevezetünk sebesség függvényeket a görbe diszlokációkra:

$$v^m = M_0 b \chi(\tau^*) \quad (4.28a)$$

$$v_{1,2}^d = M_0 b \left( \frac{\kappa_{1,2}}{\rho} [\tau^* - \chi(\tau^*)] + \tau_1, 2^d \right) \quad (4.28b)$$

Ennek jelentése hogy az átlag diszlokáció sebesség  $v^m$  0 mindaddig, amíg egy lokális kritikus feszültség  $\tau^y$  alatt van a rendszer, felette értéke lehet nemnulla. Ezzel ellentétben  $v_{1,2}^d$ -nek lehet nemnulla sebessége a kritikus feszültség alatt, ha azok kiejtik egymást, míg felette bármi lehet.

A kérdés az, hogy ez összhangban van-e az (4.27)-ben felírt feltétellel. Könnyen látható, hogy a nemfolyó tartományban ( $|\tau^*| \leq \tau^y$ ) a feltétel teljesül. Azonban a folyó tartományban ( $|\tau^*| \geq \tau^y$ ):

$$\begin{aligned} & \left[ \tau^* - s\tau^y + \left(1 - \frac{\kappa_1^2}{\rho^2} - \frac{\kappa_2^2}{\rho^2}\right) s\tau^y + \frac{\kappa_1}{\rho} B_1^d + \frac{\kappa_2}{\rho} B_2^d + B_m^d \right] (\tau^* - s\tau^y) + \\ & + \left[ \frac{\kappa_1}{\rho} (\tau^* - s\tau^y) + B_1^d \right] B_1^d + \left[ \frac{\kappa_2}{\rho} (\tau^* - s\tau^y) + B_2^d \right] B_2^d \geq 0 \end{aligned} \quad (4.29a)$$

ahol  $s = \text{sgn}(\tau^*)$ , és a következő feszültségdimenziójú segédmennyiségeket vezettük be:

$$B_1^d = s \frac{\kappa_1}{\rho} \tau^y + \tau_1^d \quad (4.29b)$$

$$B_2^d = s \frac{\kappa_2}{\rho} \tau^y + \tau_2^d \quad (4.29c)$$

$$B^m = \tau^m - \frac{\kappa_1}{\rho} \tau_1^d - \frac{\kappa_2}{\rho} \tau_2^d \quad (4.29d)$$

$$|\tau^*| \geq \tau^y \Rightarrow B_1^d M_0 b = v_1^d, \quad B_2^d M_0 b = v_2^d \quad (4.29e)$$

így (4.29a) átírható:

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{\kappa_1^2}{\rho^2} - \frac{\kappa_2^2}{\rho^2}\right) (\tau^* - s\tau^y)^2 + \begin{pmatrix} \tau^* - s\tau^y & B_1^d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa_1^2 \rho^2 & \kappa_1 \rho \\ \kappa_1 \rho & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau^* - s\tau^y \\ B_1^d \end{pmatrix} + \\ & + \begin{pmatrix} \tau^* - s\tau^y & B_2^d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa_2^2 \rho^2 & \kappa_2 \rho \\ \kappa_2 \rho & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau^* - s\tau^y \\ B_2^d \end{pmatrix} + \left[ \left(1 - \frac{\kappa_1^2}{\rho^2} - \frac{\kappa_2^2}{\rho^2}\right) s\tau^y + B^m \right] (\tau^* - s\tau^y) \geq 0 \end{aligned} \quad (4.30)$$

Az első és a negyedik tag összevonható, míg a második és a harmadik mindig pozitív. Ezáltal leegyszerűsödik a nemnegativitási feltétel:

$$\left[ \left(1 - \frac{\kappa_1^2}{\rho^2} - \frac{\kappa_2^2}{\rho^2}\right) \tau^* + B^m \right] (\tau^* - s\tau^y) \quad (4.31a)$$

bevezetve a következő dimenzió nélküli mennyiséget:

$$\beta = \frac{B^m}{\mu b \sqrt{\rho} \underbrace{\left(1 - \frac{\kappa_1^2}{\rho^2} - \frac{\kappa_2^2}{\rho^2}\right)}_{4.11a \Rightarrow > 0}} \quad (4.31b)$$

így az egyenlőtlenségi feltétel:

$$(\tau^* + \beta \mu b \sqrt{\rho}) (\tau^* - s\tau^y) \geq 0 \quad (4.32)$$

A Taylor keményedési törvény alapján a folyásfeszültség:

$$\tau^y = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (4.33)$$

Látható, hogy (4.32) teljesül, ha  $|\beta| < \alpha$ .  $B^m$  definíciójából (4.29d) láthatjuk, hogy  $\beta$  egyik tagja arányos  $q/\rho^{3/2}$ , ami az átlagos diszlokáció távolság  $1/\sqrt{\rho}$  és az átlagos görbület sugárnak  $q/\rho$  szorzata. Közel homogén esetben  $|\beta| \ll \alpha$  ( $\simeq 0.3 - 0.4$  [9]), azonban erősen inhomogén vagy erősen görbült diszlokáció rendszerekre az  $\alpha$  Taylor együttható elveszti értelmét a helyi szinten. Ebben az esetben bevezethetjük  $\alpha(\beta)$ -t:

$$\alpha(\beta) = \begin{cases} \alpha_0 & \text{ha } |\beta| < |\alpha_0| \\ |\beta| & \text{ha } |\beta| \geq |\alpha_0| \end{cases} \quad (4.34)$$

ahol  $\alpha_0$  a konstans globális együttható innentől. Ez összhangban van a kísérleti tapasztalattal, miszerint  $\alpha$  gyengén függ a megjelenő diszlokáció struktúrától.

#### 4.4. Plasztikus potenciál alakja

Az utolsó lépés az egy csúszósíkban mozgó görbediszlokációk időfejlődésének leírására a  $P$  plasztikus potenciál pontos meghatározása. Fontos különbséget tenni az átlagtér feszültség  $\tau^{mf}$ , amit a GND hosszú távú kölcsönhatásai generálnak, illetve a 'back stress' amit a diszlokáció-diszlokáció korrelációk okoznak. A kettő közül az átlagtér feszültség az amely direkt mérhető. Minket az ebből származtatható nyírófeszültség érdekel mert ez mozgatja a diszlokációt:

$$\tau^{mf} = \frac{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}}{b} \quad (4.35)$$

ahol  $\mathbf{n}$  a csúszósík normál vektora. Ahhoz, hogy felírjuk a plasztikus potenciált először két részre bontjuk, egy átlagtér és egy korrelációs részre:

$$P = P^{\text{mf}} + P^{\text{corr}} \quad (4.36)$$

$P^{\text{mf}}$  az átlagtér rugalmas energiája, ami pontosan a rugalmas energia lenne teljesen véletlenszerű rendszerben. Megmutatható ([2],[10],[11]), hogy az átlagtér potenciál:

$$P^{\text{mf}}[\chi, \kappa_1, \kappa_2] = \int \left[ -\frac{1}{2} (\text{Inc}\chi)_{ij} C_{jkl}^{-1} (\text{Inc}\chi)_{kl} + \chi_{ij} \eta_{ji} \right] dV \quad (4.37)$$

ahol  $\text{Inc}$  az "inkompatibilitás" operátor,  $\chi$  a feszültség potenciál tenzor,  $\mathbf{C}$  a rugalmassági modulus tenzor és  $\eta$  [?]:

$$\eta_{ij} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{iln} \partial_n \alpha_{jl} + \varepsilon_{jln} \partial_n \alpha_{il}) \quad (4.38)$$

az un. inkompatibilitás tenzor, amely tulajdonképpen a mintában kialakuló belső feszültségek forrása. Látható, hogy  $P^{\text{mf}}$  implicit  $\kappa_1$  és  $\kappa_2$  függése az inkompatibilitás tenzoron keresztül jelenik meg. Az egyensúlyi feltétel ( $\partial_i \sigma_{ij} = 0$ ) megkapható a plasztikus potenciál inkompatibilitás szerinti funkcionális deriváltjának eltűnéséből. Ugyanis

$$\frac{\delta P^{\text{mf}}}{\delta \chi_{ij}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sigma = \text{Inc}\chi \quad (4.39)$$

Mivel itt  $\sigma$  egy másik mennyiség inkompatibilitása az egyensúlyi feltétel automatikusan teljesül.

Ahoz, hogy megkapjuk  $\tau^{\text{mf}}$ -t nyírási átlagteret tekintsük a következőt:

$$\frac{1}{b} \left( \partial_y \frac{\delta P^{\text{mf}}}{\delta \kappa_1} - \partial_x \frac{\delta P^{\text{mf}}}{\delta \kappa_2} \right) \quad (4.40a)$$

$P^{\text{mf}}$   $\kappa_{1,2}$ -től függő tagját nevezzük el  $P^p$ -nek (1db ilyen tag van):

$$P^p = \int \chi_{ij} \eta_{ji} dV \stackrel{\textcircled{1}}{=} - \int \sigma_{ij} \varepsilon_{ji}^p dV \stackrel{\textcircled{2}}{=} - \int \sigma_{13} \beta_{31}^p dV \stackrel{\textcircled{3}}{=} - \int (S_1 \kappa_1 + S_2 \kappa_2) b dV \quad (4.40b)$$

①: Mivel  $\eta_{ij} = -(\text{Inc}\varepsilon^p)_{ij}$ , ahol  $\varepsilon^p$  a plasztikus deformáció tenzor. Parciális integrálás felhasználva adódik, hogy  $\sigma = \text{Inc}\chi$ .

②: Általában feltehetjük, hogy  $\mathbf{b} \parallel x$  és a feltételeinkből  $\mathbf{n} \parallel z$  csak  $\beta^p$  31 komponense marad meg.

③: Bevezethetjük az  $S_{1,2}$  skalár tereket úgy, hogy  $\sigma_{13} = -\partial_y S_1 + \partial_x S_2$ , amik nincsenek egyértelműen meghatározva, de a bizonytalanságuk nincs kihatással a végső eredményre, ismét parciálisan integrálva.

Ebből (4.26b) egyenlet alapján kapjuk, hogy:

$$\tau^{\text{mf}} = \sigma_{13} = \frac{1}{b} \left( \partial_y \frac{\delta P^{\text{mf}}}{\delta \kappa_1} - \partial_x \frac{\delta P^{\text{mf}}}{\delta \kappa_2} \right). \quad (4.40c)$$

Ha  $P^{\text{corr}} = 0$  akkor  $\tau^* = \tau^{\text{mf}}$ .

A korrelációs tag  $P^{\text{corr}}$  azonban nem függhet  $\chi$ -től, mert abban az esetben a (4.39) feltétel nem teljesülne. A legegyszerűbb alakja [2]:

$$P^{\text{corr}}[\rho, \kappa_1, \kappa_2, q] = \int G b^2 \left[ A \rho \ln \frac{\rho}{\rho_0} + \frac{\kappa \cdot \mathbf{D} \cdot \kappa}{2\rho} + \frac{R q^2}{2\rho^2} \right] dV \quad (4.41)$$

ahol  $G = \mu/2\pi(1 - \nu)$ ,  $A$  és  $R$  dimenziómentes állandók,  $\mathbf{D}$  egy 2x2-es dimenziómentes állandó mátrix [12],  $\rho_0 = 1/c^2b^2 \gg \rho$  egy állandó paraméter diszlokációsűrűség dimenzióval és  $c$  egy állandó amit a diszlokációk elemi tulajdonságai határoznak meg.  $P^{\text{corr}}$  második tagjának invariánsnak kell lennie a Burgers-vektor forgatására:

$$\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\kappa} = D_{ss}(\mathbf{n}_s \cdot \boldsymbol{\kappa})^2 + D_{ee}(\mathbf{n}_e \cdot \boldsymbol{\kappa})^2 + 2D_{se}(\mathbf{n}_s \cdot \boldsymbol{\kappa})(\mathbf{n}_e \cdot \boldsymbol{\kappa}) \quad (4.42)$$

Ahol  $D_{ss}$ ,  $D_{ee}$  és  $D_{se}$  a csavar-csavqr (screw), él-él (edge) és csavar-él diszlokációk közötti kölcsönhatárokat karakterizálják és egy szimmetrikus pozitív definit tenzort alkotnak,  $\mathbf{n}_s \parallel \mathbf{b}$  és  $\mathbf{n}_e \perp \mathbf{b}$  az  $xy$  síkban és  $|\mathbf{n}_{s,e}| = 1$ .

A harmadik tag veszi figyelembe a görbe diszlokációk görbeségét másodrendben, ami a legegyszerűbb közelítés.  $1/\rho_0^2$ -el a tag dinenziótlanodik, így  $\rho$ -án kívül nincs más hosszúság dimenziójú mennyiség az elméletben.

A (4.26b) és (4.36) egyenletek szerint  $\tau^*$  is felosztható két részre:

$$\tau^* = \tau^{\text{mf}} + \tau^{\text{b}} \quad (4.43)$$

ahol  $\tau^{\text{b}}$  a 'back stress', ami a plasztikus potenciál korrelációs tagjainak hozzájárulása az  $\tau^*$  "effektív" feszültséghez:

$$\tau^{\text{b}} = \frac{1}{b} \left[ \partial_y \frac{\delta P^{\text{corr}}}{\delta \kappa_1} - \partial_x \frac{\delta P^{\text{corr}}}{\delta \kappa_2} \right] = Gb \left[ \partial_y \left( D_{11} \frac{\kappa_1}{\rho} + D_{12} \frac{\kappa_2}{2\rho} \right) - \partial_x \left( D_{22} \frac{\kappa_2}{\rho} + D_{12} \frac{\kappa_1}{2\rho} \right) \right] \quad (4.44)$$

Ha a rendszer közel homogén ( $\kappa_{1,2} \ll \rho$ ;  $\partial_{x,y}\rho \ll \rho^{3/2}$ )

$$\tau^{\text{b}} = \frac{Gb}{\rho} [\partial_y(D_{11}\kappa_1 + \partial_y(D_{12}\kappa_2) - \partial_y(D_{22}\kappa_2 + \partial_y(D_{12}\kappa_1))] \quad (4.45)$$

A diffúziós feszültség tagok:

$$\tau_{1,2}^d = \frac{1}{b\rho} \left[ \rho \partial_{y,x} \frac{\delta P^{\text{corr}}}{\delta \rho} + q \partial_{y,x} \frac{\delta P^{\text{corr}}}{\delta q} + \partial_{y,x} \left( \lambda_{1,2} \rho \frac{\delta P^{\text{corr}}}{\delta \rho} \right) \right] = \frac{Gb}{\rho} \left[ A \left( 1 + \lambda_{1,2} + \lambda_{1,2} \ln \frac{\rho}{\rho_0} \right) \partial_{y,x} \rho + Rq \partial_{y,x} \frac{q}{\rho^2} \right] \quad (4.46)$$

## 5. Rendszer átjárhatatlan fallal

Ebben a szekcióban a [1] cikkben felvázolt átjárhatatlan fallal rendelkező diszlokáció rendszer elméletét általánosítjuk 3D-re. Ehhez feltesszük, hogy a rendszer egyik oldalán egy ilyen diszlokációknak átjárhatatlan fal helyezkedik el úgy, hogy az a  $x - y$  síkra merőleges.

### 5.1. Feszültség számolás

Első probléma az átlagtér nyírófeszültség meghatározása a diszlokáció rendszerre. Ehhez az inkompatibilitási tenzort kell elsőként meghatároznunk. A fentiek alapján ez a  $\kappa_{1,2}$ -vel adható meg, de a  $\kappa_{1,2}$ -k származtathatók a  $\beta_{mn}^p$  plasztikus diszorzió tenzorból:

$$\eta_{ij} = \varepsilon_{ikm} \varepsilon_{jln} \partial_k \partial_l \beta_{mn}^p \quad (5.1)$$

Ha ismét feltesszük, hogy a Burgers vektor párhuzamos az  $x$  tengellyel akkor csak a  $\beta_{31}$  komponens lesz nemnulla. Egyszerűségért bevezetjük a  $b\beta_0 = \beta_{31}$  jelölést. Ekkor a diszlokációsűrűség-tenzor ( $\alpha_{ij} = \varepsilon_{ikl} \partial_k \beta_{lj}$ ):

$$\hat{\alpha} = b \begin{pmatrix} \kappa_1 & \kappa_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.2a)$$

ahol

$$\kappa_1 = \partial_2 \beta_0 \quad (5.2b)$$

$$\kappa_2 = -\partial_1 \beta_0 \quad (5.2c)$$

$$\Rightarrow \partial_1 \kappa_1 + \partial_2 \kappa_2 = 0. \quad (5.2d)$$

Ez garantálja, hogy  $\partial_i \alpha_{ij} = 0$ .

Felhasználva a következő összefüggést:

$$\eta_{ij} = -\frac{1}{2}(e_{ilm}\partial_n \alpha_{jl} + e_{jln}\partial_n \alpha_{il}) \quad (5.3)$$

$\hat{\eta}$ -ra a következőt kapjuk az (5.2a) egyenletből:

$$\hat{\eta} = \frac{b}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\partial_3 \kappa_1 & \partial_2 \kappa_1 \\ -\partial_3 \kappa_1 & -2\partial_3 \kappa_2 & \partial_2 \kappa_2 \\ \partial_2 \kappa_1 & \partial_2 \kappa_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.4a)$$

Továbbá, az (5.2d) egyenlet miatt:

$$\eta_{32} = \eta_{23} = \partial_2 \kappa_2 = -\partial_1 \kappa_1 \Rightarrow \partial_i \eta_{ij} = 0 \quad (5.4b)$$

A  $\sigma_{ij}$  feszültségtenzor megadható a  $\chi_{ij}$  feszültség potenciál inkompatibilitásaként:

$$\sigma_{ij} = -e_{ikm}e_{jln}\partial_k\partial_l\chi_{mn} \quad (5.5)$$

Izotróp anyagok esetén érdemes bevezetni a következő mennyiséget:

$$\chi'_{ij} = \frac{1}{2\mu} \left( \chi_{ij} - \frac{\nu}{1+2\nu} \chi_{ll} \delta_{ij} \right). \quad (5.6)$$

Ez a mennyiség kielégíti a biharmonikus egyenletet:

$$\Delta^2 \chi'_{ij} = \eta_{ij} \quad (5.7)$$

Ebből felírható  $\chi'_{ij}$  invertálással:

$$\chi'_{ij} = \Delta^{-2} \eta_{ij} \quad (5.8)$$

ahol  $\Delta^{-2}$  a Laplace operátor négyzetének  $\Delta^2$  inverze. Ha invertáljuk az (5.6) összefüggést:

$$\chi_{ij} = 2\mu \left( \chi'_{ij} + \frac{\nu}{1-\nu} \chi'_{ll} \delta_{ij} \right). \quad (5.9)$$

Az esetünkben a feszültség potenciál tenzor nem nulla komponenseit az (5.4a, 5.6, 5.9) egyenletekből adhatjuk meg:

$$\hat{\chi} = \begin{pmatrix} 0 & \chi_{12} & \chi_{13} \\ \chi_{12} & \chi_{22} & \chi_{23} \\ \chi_{13} & \chi_{23} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

A további számoláshoz szükségünk lesz a nyírófeszültségekre, amit  $\sigma_{13}$  ad meg. Az (5.5,5.10) egyenletekből

$$\sigma_{13} = \partial_1(\partial_2\chi_{23} - \partial_3\chi_{22}) - \partial_2(\partial_2\chi_{13} - \partial_3\chi_{12}) \quad (5.11a)$$

vagy  $\Psi'_{ij}$ -vel

$$\sigma_{13} = 2\mu \left[ \partial_1\partial_2\chi'_{23} - \frac{1}{1-\nu}\partial_1\partial_3\chi'_{22} - \partial_2\partial_2\chi'_{13} + \partial_2\partial_3\chi'_{12} \right] \quad (5.11b)$$

Ha ebbe behelyettesítjük az (5.8) egyenletben felírt összefüggést akkor a következőt kapjuk  $\sigma_{13}$ -ra:

$$\sigma_{13} = b\mu \Delta^{-2} \left[ \partial_1\partial_2\partial_2\kappa_2 + \frac{1}{1-\nu}\partial_1\partial_3\partial_3\kappa_2 - \partial_2\partial_2\partial_2\kappa_1 - \partial_2\partial_3\partial_3\kappa_1 \right] \quad (5.12a)$$

$\beta_0$ -val felírva:

$$\sigma_{13} = -b\mu \Delta^{-2} \left[ \partial_1\partial_1\partial_2\partial_2 + \frac{1}{1-\nu}\partial_1\partial_1\partial_3\partial_3 + \partial_2\partial_2\partial_2\partial_2 + \partial_2\partial_2\partial_3\partial_3 \right] \beta_0 \quad (5.12b)$$

## 5.2. Az időfejlődési egyenletek

Ahogy azt megkaptuk a 4.1 fejezetben, a  $\rho$ ,  $\kappa_1$ ,  $\kappa_2$  és  $q$  terek időfejlődését a következő egyenletek adják meg:

$$\partial_t\kappa_1 = \partial_2(\rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d) \quad (5.13a)$$

$$\partial_t\kappa_2 = -\partial_1(\rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d) \quad (5.13b)$$

$$\partial_t\rho = -\partial_1(\rho v_2^d) + \partial_2(\rho v_1^d) + \partial_2(\kappa_1 v^m) - \partial_1(\kappa_2 v^m) + qv^m + \lambda_1\rho\partial_2v_1^d - \lambda_2\rho\partial_1v_2^d \quad (5.13c)$$

$$\partial_tq = -\partial_1(qv_2^d - v^m Q_1) + \partial_2(qv_1^d + v^m Q_2) \quad (5.13d)$$

$$Q_i = \partial_i\rho \quad (5.13e)$$

ahol  $v^m$  a diszlokációk átlagsebessége és  $v_{1,2}^d$  a "különbözet" sebessége ahogy az látható a 4.2 ábrán. A két mennyiség a fenn említett terek függvénye és  $\lambda_{1,2}$  olyan paraméterek amik a görbülettől függnak. Kis görbületeknél  $q^2/\rho^3$ -vel arányosak, így a lineáris közelítésben elhanyagolhatjuk őket. Az (5.2b) és (5.2c) egyenletekkel át tudjuk írni az (5.13a,5.13b) egyenletek felhasználásával. Ezzel megkaphatjuk  $\beta_0$  időfejlődését:

$$\partial_t\beta_0 = \rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d \quad (5.14)$$

A jelen problémához a folyási tartományon belüli  $v^m$  és  $v_{1,2}^d$  funkcionális formája is elég. Ebben a tartományban a nyírófeszültség:

$$\tau^* = \tau^{mf} + \tau^b = \tau_0 + \sigma_{13} + \tau^b \quad (5.15)$$

ami nagyobb mint a Taylor-összefüggés szerinti folyásfeszültség:

$$\tau^Y = \alpha\mu b\sqrt{\rho} \quad (5.16)$$

ahol  $\tau_0$  a külső nyírófeszültség, és  $\tau^b$  a "back-stress":

$$\tau^b = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} [\partial_2(D_{11}\kappa_1 + D_{12}\kappa_2) - \partial_1(D_{22}\kappa_2 + D_{12}\kappa_1)], \quad (5.17a)$$

Áttérve a  $\beta_0$  mennyiségre:

$$\tau^b = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} [D_{11}\partial_2\partial_2 + D_{22}\partial_1\partial_1 - (D_{12} + D_{21})\partial_1\partial_2] \beta_0, \quad (5.17b)$$

Így a folyási tartományban  $v^m$  és  $v_{1,2}^d$  a következő:

$$v^m = M_0 b (\tau^* - \alpha \mu b \sqrt{\rho}) = M_0 b (\tau_0 + \sigma_{13} + \tau^b - \alpha \mu b \sqrt{\rho}) \quad (5.18a)$$

$$v_i^d = M_0 b \left( \frac{\kappa_i}{\rho} \alpha \mu b \sqrt{\rho} + \tau_i^d \right) \quad i = 1, 2 \quad (5.18b)$$

ahol  $\tau_1^d$  és  $\tau_2^d$ :

$$\tau_1^d = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} \left[ A \left( 1 + 2\lambda_1 + \lambda_1 \ln \frac{\rho}{\rho_0} \right) \partial_2 \rho + Rq \partial_2 \frac{q}{\rho^2} \right] \quad (5.19a)$$

$$\tau_2^d = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} \left[ A \left( 1 + 2\lambda_2 + \lambda_2 \ln \frac{\rho}{\rho_0} \right) \partial_1 \rho + Rq \partial_1 \frac{q}{\rho^2} \right] \quad (5.19b)$$

Ahogy korábban említettük a jelen problémában a  $\lambda_{1,2}$ -vel arányos tag elhanyagolható, így:

$$\tau_1^d = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} \left[ A \partial_2 \rho + Rq \partial_2 \frac{q}{\rho^2} \right] \quad (5.20a)$$

$$\tau_2^d = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} \left[ A \partial_1 \rho + Rq \partial_1 \frac{q}{\rho^2} \right] \quad (5.20b)$$

Továbbá, mivel csak a kis perturbációk tartományára vagyunk kíváncsiak a fenti összefüggések második tagja is elhanyagolható:

$$\tau_1^d = \frac{\mu b A}{2\pi(1-\nu)\rho} \partial_2 \rho \quad (5.21a)$$

$$\tau_2^d = -\frac{\mu b A}{2\pi(1-\nu)\rho} \partial_1 \rho \quad (5.21b)$$

Ezeket visszahelyettesítve  $v_{1,2}^d$  egyenleteibe:

$$v_1^d = M_0 b^2 \mu \left( \frac{\kappa_1}{\rho} \alpha \sqrt{\rho} + \frac{A^*}{\rho} \partial_2 \rho \right) \quad (5.22a)$$

$$v_2^d = M_0 b^2 \mu \left( \frac{\kappa_2}{\rho} \alpha \sqrt{\rho} - \frac{A^*}{\rho} \partial_1 \rho \right) \quad (5.22b)$$

ahol  $A^* = A/2\pi(1-\nu)$ -t rövidebb jelölésért vezettük be.

### 5.3. Az időfejlődési egyenletek az adott problémára

Az időfejlesztő egyenletek amiket korábban meghatároztunk:

$$\partial_t \beta_0 = \rho v^m + v_1^d \partial_2 \beta_0 - v_2^d \partial_1 \beta_0 \quad (5.23a)$$

$$\partial_t \rho = -\partial_1 (\rho v_2^d) + \partial_2 (\rho v_1^d) + \partial_2 (v^m \partial_2 \beta_0) + \partial_1 (v^m \partial_1 \beta_0) + q v^m \quad (5.23b)$$

$$\partial_t q = -\partial_1 (q v_2^d - v^m \partial_1 \rho) + \partial_2 (q v_1^d + v^m \partial_2 \rho) \quad (5.23c)$$

$$v^m = M_0 b (\tau_0 + \sigma_{13} + \tau^b - \alpha \mu b \sqrt{\rho}) \quad (5.23d)$$

$$v_1^d = M_0 \frac{b^2 \mu}{\rho} (\alpha \sqrt{\rho} \partial_2 \beta_0 + A^* \partial_2 \rho) \quad (5.23e)$$

$$v_2^d = -M_0 \frac{b^2 \mu}{\rho} (\alpha \sqrt{\rho} \partial_1 \beta_0 + A^* \partial_1 \rho) \quad (5.23f)$$

Tekintsünk egy olyan problémát, ahol a diszlokáció eloszlásoknak csak  $x$  irányú változása van ( az  $y, z$  irányú szórások kiátlagolódnak) Ebben az esetben az egyenletek leegyszerűsödnek a következő alakra:

$$\partial_t \beta_0 = \rho v^m - v_2^d \partial_1 \beta_0 \quad (5.24a)$$

$$\partial_t \rho = -\partial_1 (\rho v_2^d) + \partial_1 (v^m \partial_1 \beta_0) + q v^m \quad (5.24b)$$

$$\partial_t q = -\partial_1 (q v_2^d - v^m \partial_1 \rho) \quad (5.24c)$$

$$v^m = M_0 b (\tau_0 + \sigma_{13} + \tau^b - \alpha \mu b \sqrt{\rho}) \quad (5.24d)$$

$$v_2^d = -M_0 \frac{b^2 \mu}{\rho} (\alpha \sqrt{\rho} \partial_1 \beta_0 + A^* \partial_1 \rho) \quad (5.24e)$$

ahol  $\tau^b$  'back stress' a következő:

$$\tau^b = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} D_{22} \partial_1 \partial_1 \beta_0, \quad (5.25)$$

Ahogy látható a jelen problémában az (5.12b) egyenletben  $\beta_0$  variációja nem generál feszültséget. Ezért az egyenletekben megjelenő  $\sigma_{13} = 0$  nyírófeszültség egyszerűen a külső feszültség.

Vegyük az állandó vagy a közel állandó helyzetet. Ekkor a különböző mennyiségek időderívtja a fenti egyenletekben elhanyagolható, így az egyenletek tovább egyszerűsödnek:

$$\rho v^m + v_2^d \kappa_2 = 0 \quad (5.26a)$$

$$\partial_1 (\rho v_2^d + v^m \kappa_2) = q v^m \quad (5.26b)$$

$$\partial_1 (q v_2^d - v^m \partial_1 \rho) = 0 \quad (5.26c)$$

$$v^m = M_0 b (\tau_0 + \tau^b - \alpha \mu b \sqrt{\rho}) \quad (5.26d)$$

$$v_2^d = -M_0 \frac{b^2 \mu}{\rho} (-\alpha \sqrt{\rho} \kappa_2 + A^* \partial_1 \rho) \quad (5.26e)$$

ahol a back stress alakja a következő:

$$\tau^b = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} D_{22} \partial_1 \kappa_2, \quad (5.27)$$

Itt felhasználtuk a  $\kappa_2 = -\partial_1 \beta_0$  összefüggést.

Látható, hogy az (5.26a, 5.26b, 5.26c) egyenletek triviálisan teljesülnek, ha  $v^m = 0$  és  $v_2^d = 0$ , ami megfelel a korábbi közel stacionárius folyás feltételnek. Ekkor:

$$\tau_0 - \alpha \mu b \sqrt{\rho} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} D_{22} \partial_1 \kappa_2 \quad (5.28a)$$

$$\alpha\sqrt{\rho}\kappa_2 = A^*\partial_1\rho \quad (5.28b)$$

Ezzel a két egyenlettel meg tudjuk határozni  $D_{22}$ ,  $A^*$  és  $\alpha$  paramétereket különböző külső  $\tau_0$  feszültségekkel elvégzett DDD szimulációk sorával. Ha feltesszük, hogy a fal mentén elhelyezkedő diszlokációk jele többségében azonos ( $\kappa_2 = \pm\rho$ ) akkor az (5.28a) egyenlet közel exponenciális lecsengést jósol. Ugyanakkor pontosabb eredményhez is juthatunk. Ha a két egyenletet kombináljuk a következőt kapjuk:

$$\tau_0(\sqrt{\rho})^2 - \alpha\mu b(\sqrt{\rho})^3 = \frac{\mu b\alpha}{2\pi(1-\nu)} A^* D_{22} \partial_1 \partial_1 \sqrt{\rho} \quad (5.29)$$

Vezessük be  $\xi(x) = \sqrt{\rho}$  jelölést és szorozzuk be a fenti egyenletet  $\partial_1 \xi$ -vel:

$$\partial_1 \left\{ \frac{\tau_0}{3} \xi^3 - \frac{\alpha\mu b}{4} \xi^4 \right\} = \partial_1 \frac{\mu b\alpha}{2\pi(1-\nu)} \frac{A^* D_{22}}{2} (\partial_1 \xi)^2 \quad (5.30)$$

ami azt jelenti, hogy bevezethetünk egy energiához hasonló mennyiséget:

$$e = \frac{\mu b\alpha}{2\pi(1-\nu)} \frac{A^* D_{22}}{2} (\partial_1 \xi)^2 - \left\{ \frac{\tau_0}{3} \xi^3 - \frac{\alpha\mu b}{4} \xi^4 \right\} \quad (5.31)$$

ami megmarad. Ha kifejezzük  $\partial_1 \xi$ -t az egyenletből akkor a következő differenciál egyenletet kapjuk:

$$\partial_1 \xi = \pm \frac{1}{C} \sqrt{e + \frac{\tau_0}{3} \xi^3 - \frac{\alpha\mu b}{4} \xi^4} \quad (5.32a)$$

ahol

$$C^2 = \frac{\mu b\alpha}{2\pi(1-\nu)} \frac{A^* D_{22}}{2}. \quad (5.32b)$$

Az 'energia' megmaradás következménye képen bevezethetünk egy 'effektív' potenciált:

$$\phi(\xi) = -\frac{\tau_0}{3} \xi^3 + \frac{\alpha\mu b}{4} \xi^4 \quad (5.33)$$

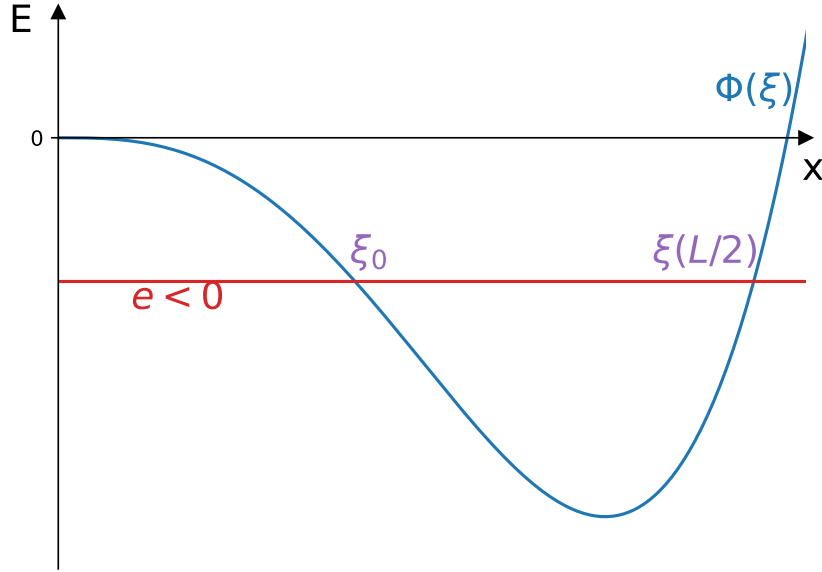
$\partial_1 \xi$ -nek a rendszer szélén (például  $x = -L/2$ -ben) el kell tűnnie, tehát:

$$e = \phi(\sqrt{\rho(x = -L/2)}) \quad (5.34)$$

Mivel a potenciál minimumára a  $\tau - \alpha\mu b\sqrt{\rho} = 0$  feltételnél teljesül, ha a folyási régióban vagyunk az SSD diszlokációsűrűségnek kisebbnek kell lennie  $x = -L/2$ -ben, mint a minimumhoz tartozónak. Ennek következménye, hogy ha  $e < 0$  akkor az  $e = \phi(\xi_0)$  egyenletnek van egy másik megoldása, ami pozitív. Ennek a megoldásnak az  $x = 0$ -ban található falhoz tartozó  $\xi$ -nek kell lennie, azaz  $\xi(0) = \xi_0$ . Ez a módszer és a potenciál alakja látható az 5.1 ábrán. Ekkor (5.32a)-ból a következőt kapjuk:

$$\frac{1}{C} \int_{\xi(-L/2)}^{\xi(x)} \frac{1}{\sqrt{e + \frac{\tau_0}{3} \xi^3 - \frac{\alpha\mu b}{4} \xi^4}} d\xi = x - L/2 \quad (5.35)$$

Ahol  $C$ -t úgy kell megválasztani, hogy a bal oldali integrál  $\xi = \xi_0$ -ben pontosan  $L/2$  legyen. Megjegyezzük, hogy  $C$  csak az elmélet paramétereinek egy kombinációjától függ. Ugyanakkor ha a  $\kappa_2$  helyfüggését is meghatározzuk akkor (5.28b) egyenlet alapján  $A^*$  és így  $D_{22}$  is meghatározható.



5.1. ábra. Az (5.33) egyenletben vázolt potenciális energia alakja, és a statikus esetben meghatározható helyi diszlokációsűrűségek.

## 6. ParaDiS

Ebben a fejezetben röviden bemutatom a munka során használt ParaDiS szimulációs szoftver működését a hozzá tartozó felhasználói leírás [13], [14] és [15] alapján.

A ParaDiS (Párhuzamos Diszlokáció Szimulátor) egy kifejezetten Diszkrét Diszlokáció- Dinamikai (DDD) szimulációk elvégzésére fejlesztett szoftver. A szoftver módszere, hogy a deformált anyagot egy diszlokációvonalakkal benépesített térfogatként reprezentálja és ezt a populációt fejleszti az időben a diszlokáció elmélet ismert egyenletei szerint.

A görbült diszlokációk szimulálásához a szoftver ezeket rövid egyenes "szakaszokra" (szegmensekre) és a hozzájuk tartozó 'csúcsokra' bontja. Ezekre az egyenes szegmensekre számolja a kölcsönhatásokból származó erőt, és a csúcspontjait eszerint mozgatja el.

A szoftver egy kristályrács szimulálásához a központi legenerált térfogatot periodikus határfeltételek mellett szimulálja, azaz ugyanazt a térfogatot rakja az eredeti térfogat köré, és ezekkel számol. Ezeket a rendszereket a ParaDiS -hoz tartozó 'paradisgen' nevű alszoftver hozza létre a választott paraméterek szerint.

A ParaDiS egy numerikus szoftver, tehát iterálva halad a kezdeti elrendezésből egészen addig amíg eléri a megadott iteráció számot. Egy ilyen iterációs lépés a következőképpen történik: elsőként a szoftver meghatározza a diszlokációszegekre ható hosszútávú erők eredőjét a 'Fast Multipole Method (FMM)' módszerrel, ami a távoli diszlokációkra multipólus közelítést tesz, csökkentve a szükséges számítási kapacitást. Ezt követi a rövid távú Peack-Koehler-erők 2.2 nyers számítási kapacitással történő eredőjének meghatározása. Amikor már ismert a diszlokációszegekre ható erő, az időintegrátor ami a ParaDiS esetében trapezoid típusú, elvégzi a diszlokációszegek mozgását. Ezt követi az egymást metsző diszlokációszegeket kezelő topologikus algoritmus. Az utolsó lépés a diszlokációszegek 'újra rajzolása', a végső pozícióik meghatározása.

A trapezoid integrátor egy vegyes integrálási módszer, melyben a két Euler-módszert használjuk, egy előre Euler-módszert követ egy hátra Euler-módszer. Azonban iteratív folyamatot

használ a csúcs, erő és sebesség számításokban, ezért a lépések során keletkező hibák felgyülem-  
lenek. Az integrátor időlépésének hosszát a szoftver automatikusan választja meg, általában a  
'leginstabilabb' diszlokáció pontos modellezéséhez szükséges lépésközt.

Ahhoz, hogy a diszlokációk az adott kristályrács feltételei szerint mozogjanak, a ParaDiS mobilitási  
modulokat használ és a következő modulokkal rendelkezik: "BCC\_0", "BCC\_0b", "BCC\_glide",  
"FCC\_0", "FCC\_0b", "FCC\_climb". Itt a nevek a kristályszerkezetre utalnak, valamint arra,  
hogy megengedünk-e "climb"-et.

A ParaDiS a diszlokáció rendszereket dobozokként kezeli amelyeket egyszerre bont fel egy  
kocka alakú 'cellákból' álló homogén hálóra és térben processzor 'doménekre'. A domének célja,  
hogy a szoftver több processzort is fel tudjon használni bonyolult vagy nagy méretű szimulációk  
esetén. A cellafelbontás a rövid és hosszútávú erők használatához tartozó válaszfalat adja, ha  
a diszlokációssegmens, melynek hatását éppen számolja a szoftver, kívül van azon szegmens 26  
legközelebbi szomszéd celláján, akkor hosszú távú közelítést tesz.

Az FMM közelítés működési elve, hogy a közvetlen szomszédos cellákon túli teret "FMM  
cellákra" bontja. Ezek a cellák hierarchikusan vannak kezelve. Az FMM celláknak a multi-  
pólus momentuma a cellában lévő egyes diszlokációssegmensek hozzájárulásának az összege.  
Ezt követően a hierarchia aljáról felfelé haladva a domének (processzorok) összegyűjtik és fel-  
összegzik a hozzájárulásokat, ami az "upward pass". Majd a domén összegyűjti egy adott  
célcellának az olyan cellákból származó kontribúcióit, amelyek a célcellának nem a közvetlen  
szomszédjai, de a "szülő" cellának igen. A domén ezekkel a hozzájárulásokkal kiszámolja a  
feszültség tér Taylor-sorfejtését. A legfelső cellát tartalmazó domén kiszámolja a feszültség ál-  
lapot Taylor-sorfejtését. Ezt követi a "downward pass" ahol a Taylor-sorfejtés propagál lefelé  
minden lépésben felszummázva a hozzájárulásokat. Végül minden domén, amiben van legal-  
só szintű FMM cella továbbítja a feszültség tér Taylor-sorát azoknak a doméneknek, amelyek  
metszik az FMM cellát.

Az átjárhatatlan fal implementálásához a következő változtatásokat kellett eszközölni a  
forráskódon: Egyrészt a választott mobilitási funkcióban (FCC\_0) kellett egy olyan feltételt  
hozzáadni, amely nullázza a diszlokációssegmens sebességét, ha az a tiltott zónán belül van.  
Másképpen a rendszert kezdetben létrehozó paradigma-ban kellett két módosítást végrehajtani.  
Az első, hogy a tiltott zónán belül ne legyenek diszlokációssegmensek kezdetben. Ennek elérése  
érdekében az olyan diszlokációkat amelyeknek van szegmense a tiltott zónán belül a megfelelő  
irányba eltoljuk a sugaruk felével. A második módosítás, hogy a diszlokáció hurkok mind  
párhuzamos csúszósíkokban helyezkednek el ([1,1,1]), a többi csúszósík "üres".

A szimulációban általam használt beállításokat az 1. táblázat tartalmazza.

|                                    |            |                                |                |
|------------------------------------|------------|--------------------------------|----------------|
| Dobozszélesség $L$                 | 35000      | Falak helyei $x$ -ban          | -1000, 1000    |
| Diszlokáció hurkok száma kezdetben | 100        | Integrálási lépések            | 30000          |
| Diszlokáció hurkok sugara          | 10500      | Mobilitási funkció             | FCC_0          |
| 'LoadType' és 'edotDir'            | 0, [1,1,1] | Külső feszültség $\sigma_{13}$ | 10 MPa - 1 GPa |

1. táblázat. A szimulációkor használt beállítások. A nem említett beállítások az alapértelme-  
zettek maradtak, anyagi tulajdonságok esetében ezek a Tantál paraméterei 600  $K$ -en és 0  $GPa$   
nyomáson.

## 7. Numerikus eredmények

### 7.1. Szimulációs eredmények kiértékelése

Az SSD  $\rho$  és a GND  $\kappa$  meghatározásához a szimulációs adatokból a következő eljárást kell alkalmazni:

- A rendszert  $x$  koordináta szerint skatulyákra felosztani. A diszlokációssegmenseket amelyeket a skatulya határ metsz, a metszéspont szerint két részre osztani.
- $\rho$ : Egy skatulyán belüli diszlokációssegmens hosszakat felszummázni
- $\kappa$  a diszlokációssegmens vektorokat le kell vetíteni az  $[111]$  sík és az  $yz$  sík metszésvonalára. Ekkor egy előjeles számot kapunk, majd ezeket az előjeles számokat szummázzuk fel a skatulyán belül.

Az diszlokációssegmens adatait kétféle kimeneti formátumból nyerhetjük ki. Az első a 'gnuplot' fájlok amikben koordináta párok helyezkednek el, amelyek a diszlokációssegmens két végpontjai. Ebből a diszlokációssegmens vektora könnyedén kinyerhető, azonban egyéb adatokkal nem szolgál. A másik lehetőség az 'armdata' fájlok amelyekben a diszlokációssegmens egyik pontja, burgers vektora, irányvektora (egység), illetve hossza szerepel. Előnye, hogy több információval szolgál, azonban esetenként képesek az egy diszlokációhoz tartozó vektorok egyszerre előjelet váltani, de ez a probléma orvosolható egy megfelelő keresztszorzással.

A szimulációk kiértékelése közben megfigyeltem, hogy bizonyos rendszereknél a tiltott falon belülrre kerülnek diszlokációssegmens. Ennek két oka, hogy a diszlokációk a kezdetben is a falon belülrre generálódtak illetve, hogy a diszlokációk a szimuláció során mégis beléptek a tiltott tartományba valamilyen számolási pontatlanság következtében. Ezeket a rendszereket ki kell szűrni, amit meg lehet tenni a fal belsejéhez tartozó skatulyák  $x = [-900, 900]$  vizsgálatával. Ha ebben az intervallumban diszlokációt találunk, akkor a teljes rendszert hibásnak tekintjük.

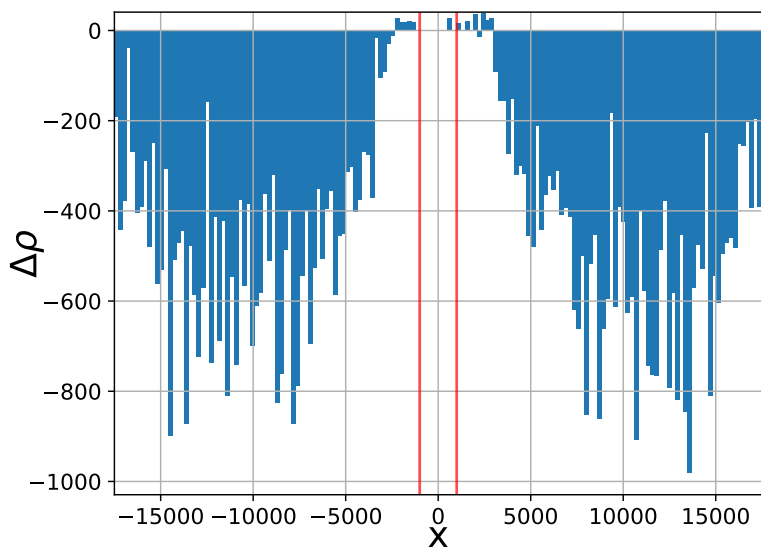
### 7.2. Kritikus feszültség meghatározása

A kritikus feszültség meghatározásához a módosítatlan ParaDiS szoftvert használtuk. Ehhez a Taylor-relációt 3.3 használtuk, amivel a folyásfeszültséget  $1.27 \text{ MPa}$  és  $12.66 \text{ MPa}$  közé tehetjük. Ezzel közel összhangban van a szimulációkkal talált  $\sigma_k \sim 20 \text{ MPa}$ -s kritikus feszültség, aminek a módszerét a 7.1 ábrán láthatjuk (a piros függőleges vonalak jelképezik az átjárhatatlan falat).

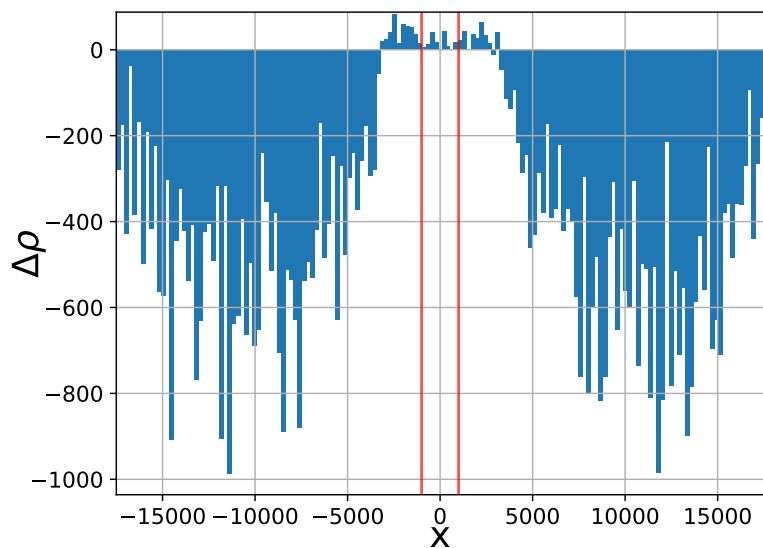
Miután visszatértünk a módosított ParaDiS szoftverre, a folyáshatárhoz közeli szimulációkban érdekes jelenséget figyelhattunk meg a GND sűrűségben, ami a falhoz közeli tartományban előjelet vált. Ez nem egyezik meg a nagyobb feszültség mellett elvégzett szimulációkkal, ahol a GND egyszerű exponenciális lecsengést mutat. Továbbá megfigyelhető, hogy a diszlokációsűrűségek nem az elméletileg, illetve a magasabb feszültségű szimulációkból elvárt függvényalakot veszik fel. Ennek oka, hogy megjelenik egy 'másodlagos folyáshatár' amit a fal hoz létre. A fal maga nem rendelkezik potenciállal, így a rendszer 'nem tud' a létezéséről egészen addig, amíg a diszlokációk el nem érik. Ekkor a falra ragadó diszlokációk potenciálja fogja gátolni a diszlokációk mozgását amit magasabb külső feszültséggel lehet legyőzni. A szimulációkkal ez a mennyiség közelítőleg meghatározva:  $\sigma_k^{(2)} \sim 150 \text{ MPa}$ .

### 7.3. Numerikus szimulációk eredményei átjárhatatlan fallal

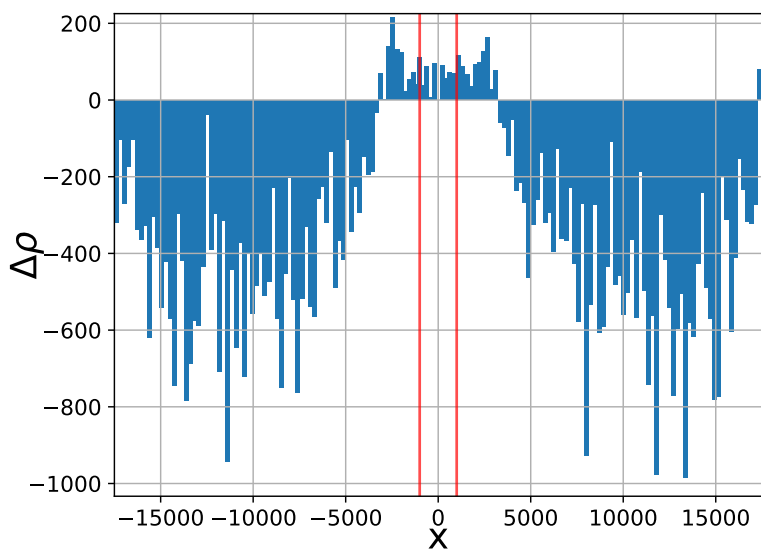
A két sűrűségeloszlás alakja látható a 7.2-7.10 ábrákon amiket a módosított ParaDiS szoftverrel szimuláltunk. Láthatjuk, hogy a külső feszültség növelésével, a falon mérhető diszlokációsűrűség növekedik az elvárásoknak megfelelően  $\rho \sim 10000$ -ról a  $\sigma = 25 \text{ MPa}$  esetben (7.2) egészen



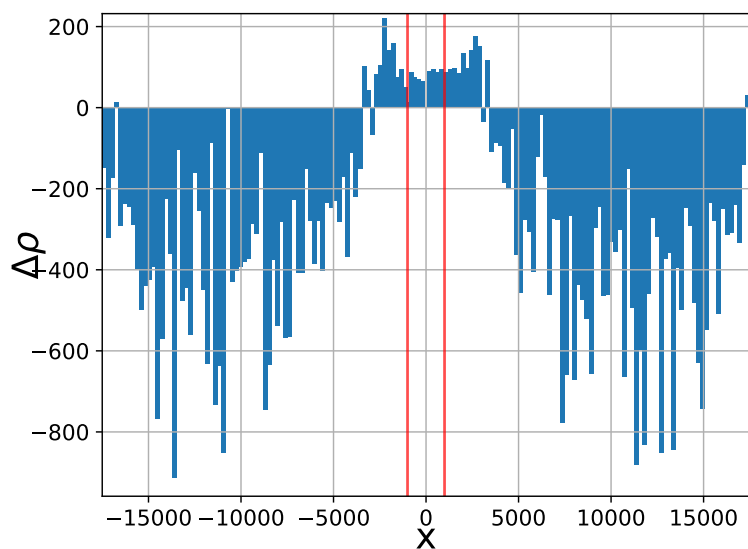
(a) 10 MPa



(b) 15 MPa

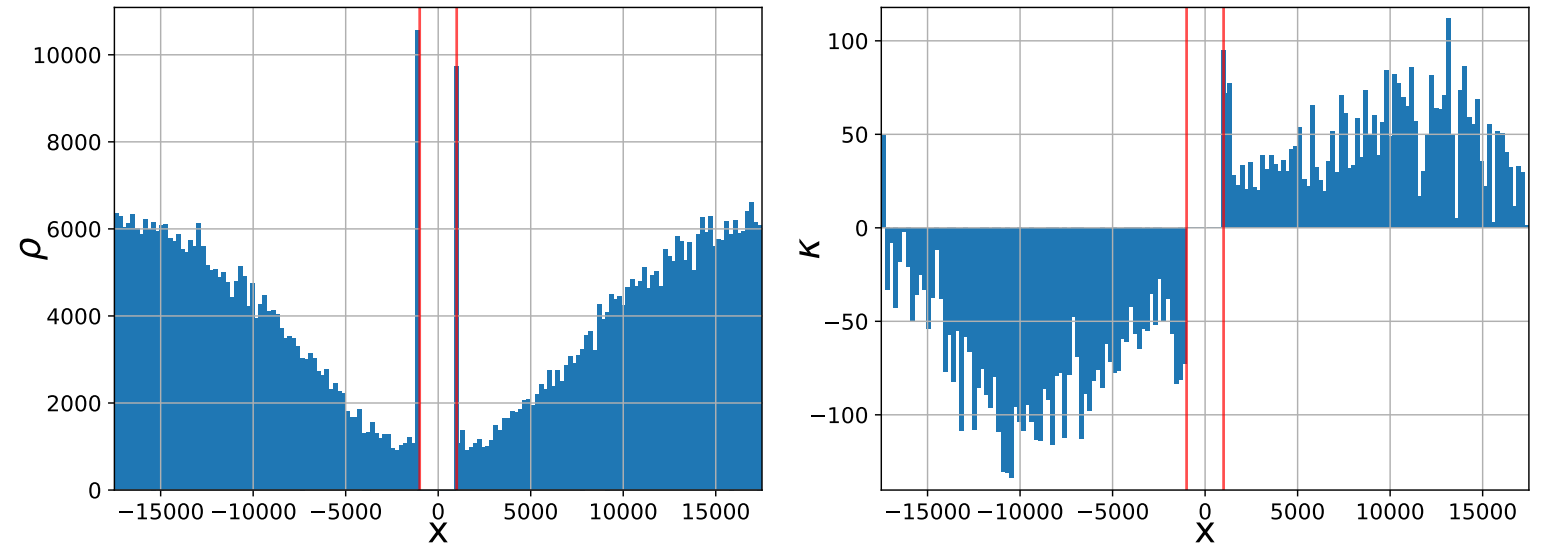


(c) 20 MPa



(d) 25 MPa

7.1. ábra. Az átlag diszlokáció rendszer kritikus feszültségének meghatározása. Az ábrákon a SSD sűrűség változását ábrázoltuk a szimuláció végén a kezdetihez képest. A negatív sűrűség változás legfőképp a diszlokációhurkok összezuhanásából, majd megsemmisüléséből adódik. Azonban a pozitív változások kizárólag a diszlokációk mozgásából keletkezhet, tehát a rendszerre ható feszültség nagyobb mint a kritikus feszültség. (Ezekben a szimulációkban nem volt fal)



7.2. ábra. 25 MPa

$\rho \sim 50000$ -re a  $\sigma = 25$  MPa-os esetben. Továbbá megfigyelhető, hogy a faltól távoli diszlokációsűrűség független a külső feszültségtől mindegyik szimulációban  $\rho \sim 5000 - 6000$  az értéke. A diszlokációsűrűségnek minimumai vannak  $x \approx \pm 4000$ -nél aminek oka lehet, hogy a két fal túl közel van egymáshoz, így befolyásolják egymást.

A geometriai szükségesség diszlokációsűrűség a falon hasonlóan viselkedik, mint a statisztikailag tárolt diszlokációsűrűség azzal a különbséggel, hogy  $\kappa$  előjeles mennyiség, és a két falon ellentétes jelű diszlokációk tömörülnek. A faltól távolodva azonban gyorsan változik a helyzet, a két legkisebb feszültségen kívül ( $\sigma = 25$  MPa, 50 MPa)  $\kappa$  gyorsan véletlenszerű eloszlást mutat, azonban még így is megfigyelhető az előző szekcióban említett másodlagos folyáshatár.

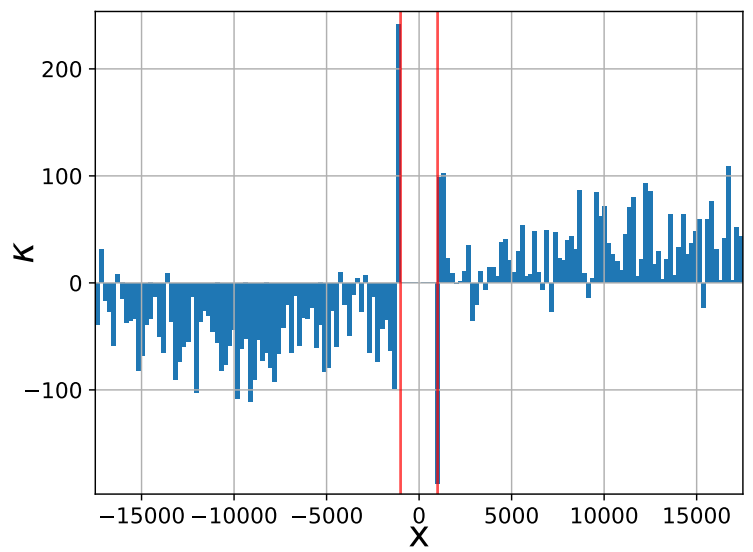
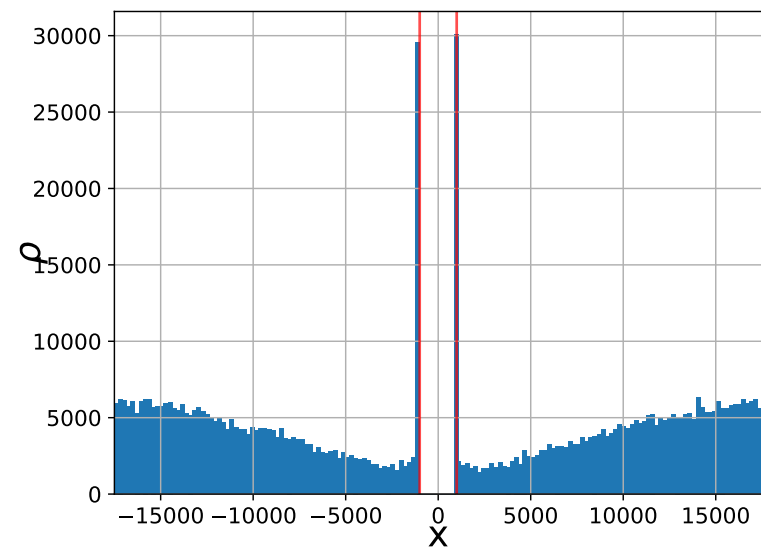
## 8. Összefoglalás

A munka során sikerült a 3D görbült diszlokációk kontinuum elméletét felírni egy specifikus problémára, ami szerint a diszlokációrendszerben egy a diszlokációknak átjárhatatlan fal van jelen. Ennek a megoldása nagyban hasonlít a mechanika 1D potenciál problémájára, amivel az elmélet két fontos paraméterét meghatározhatjuk. Ezt az elméleti problémát implementáltuk a ParaDiS diszkrét diszlokáció szimulátor programba, majd ezzel validáltuk az elméleti eredményeket. A szimulációkkal sikerült meghatározni a rendszer kritikus feszültségét, továbbá találtunk egy 'második folyásfeszültséget' amit a fal hoz létre.

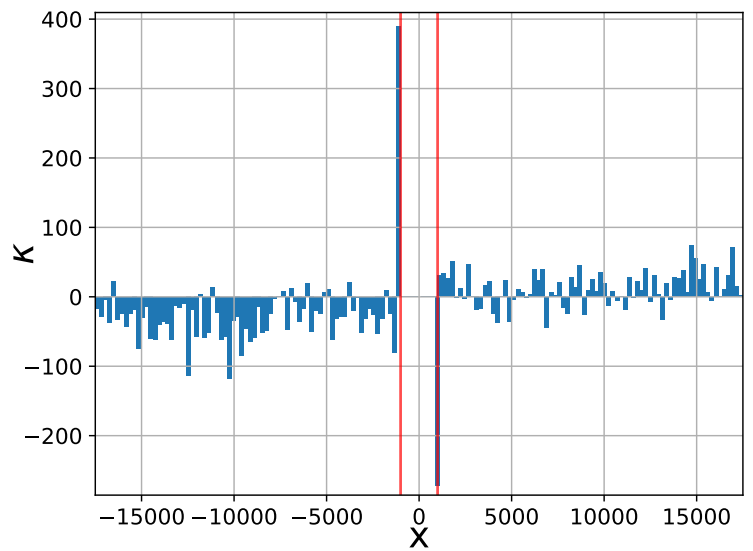
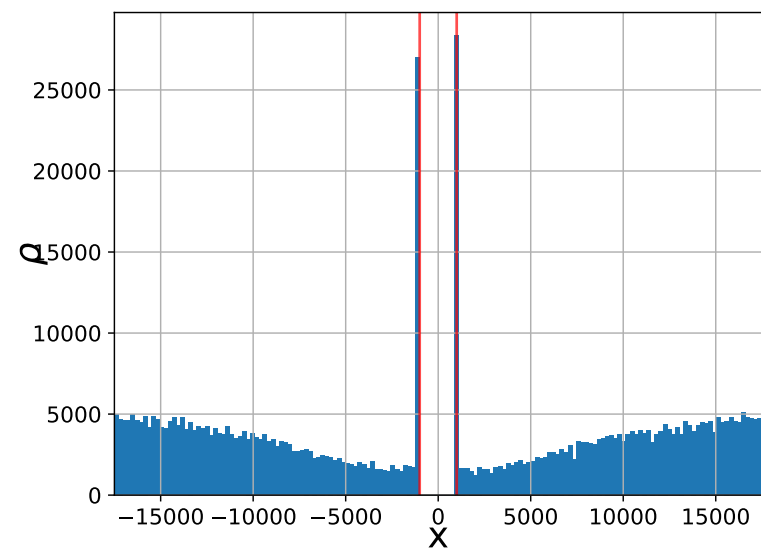
A jövőben a munka célja, hogy a szimulált elrendezést egzaktul egyeztessük az elméletben felvetett közelítésekkel. Ehhez a szimulált rendszernek FCC helyett egyszerű köbös rácsnak kell lennie, amit azonban a ParaDiS nem támogat. Ezentúl érdemes lehet megvizsgálni a két fal távolságát, mint paramétert a szimulációkban. Ezekkel már megkaphatjuk  $A^*$  és  $D_{22}$  elméleti paramétert, ami a diszlokáció kontinuum elmélet tovább dolgozását segíti.

## Köszönetnyilvánítás

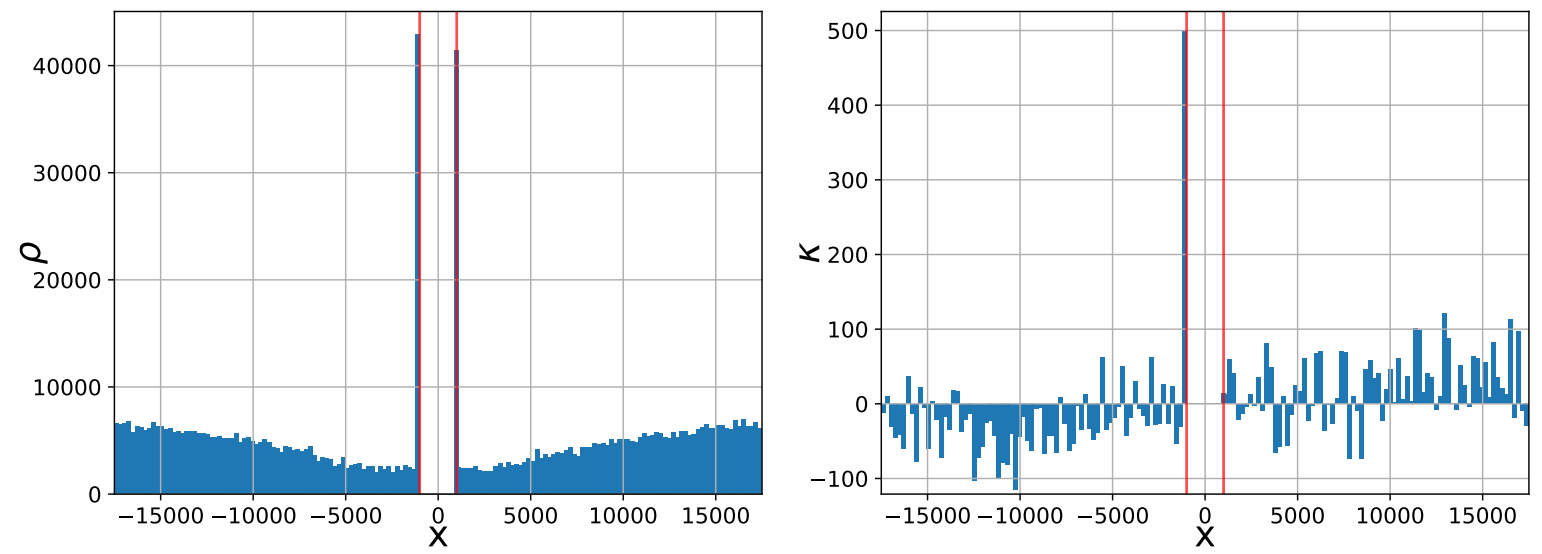
A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-23-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támo-



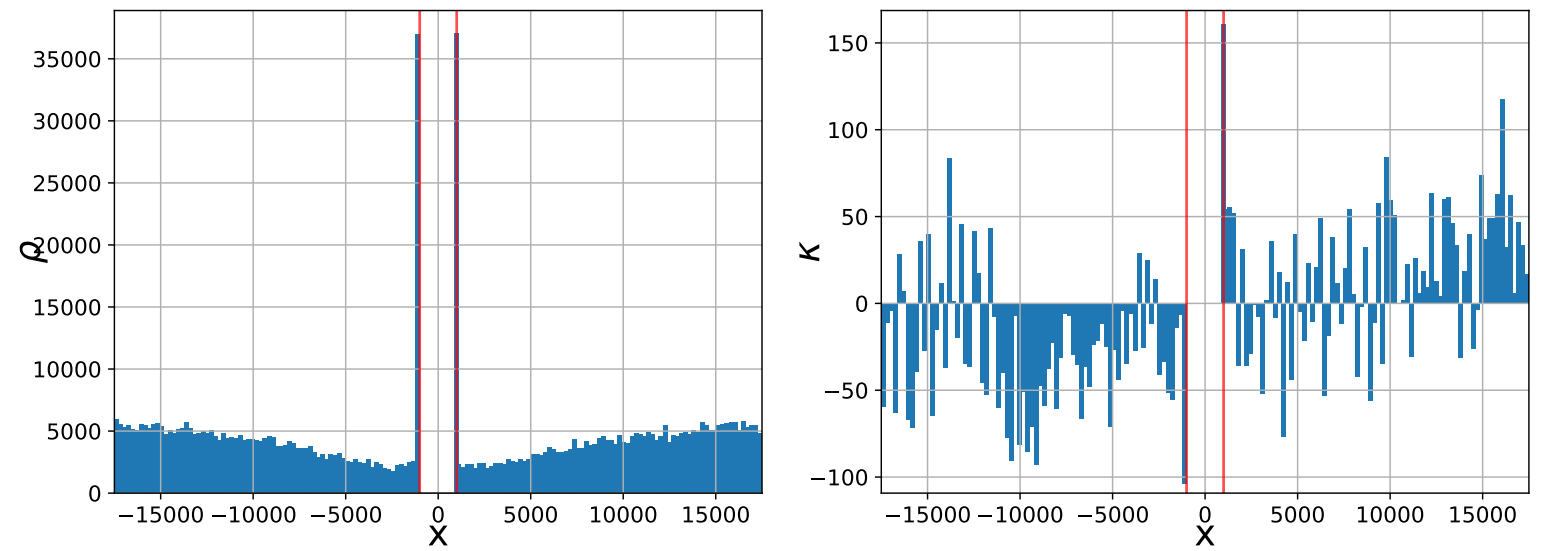
7.3. ábra. 50 MPa



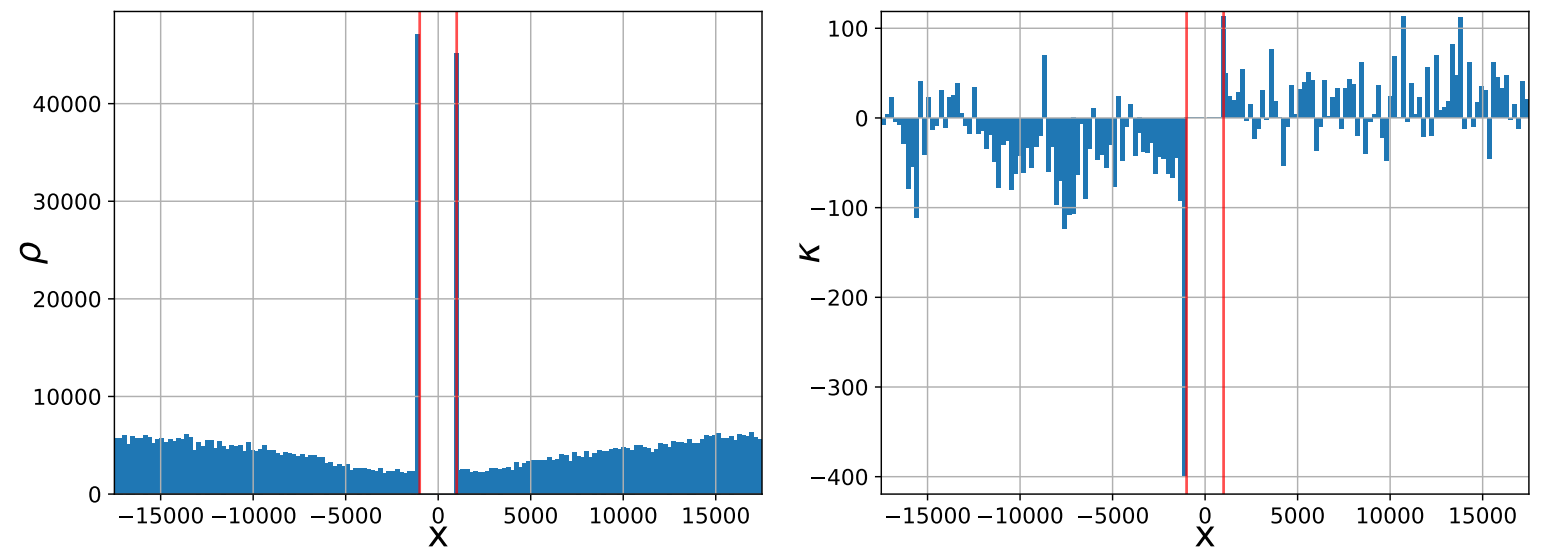
7.4. ábra. 75 MPa



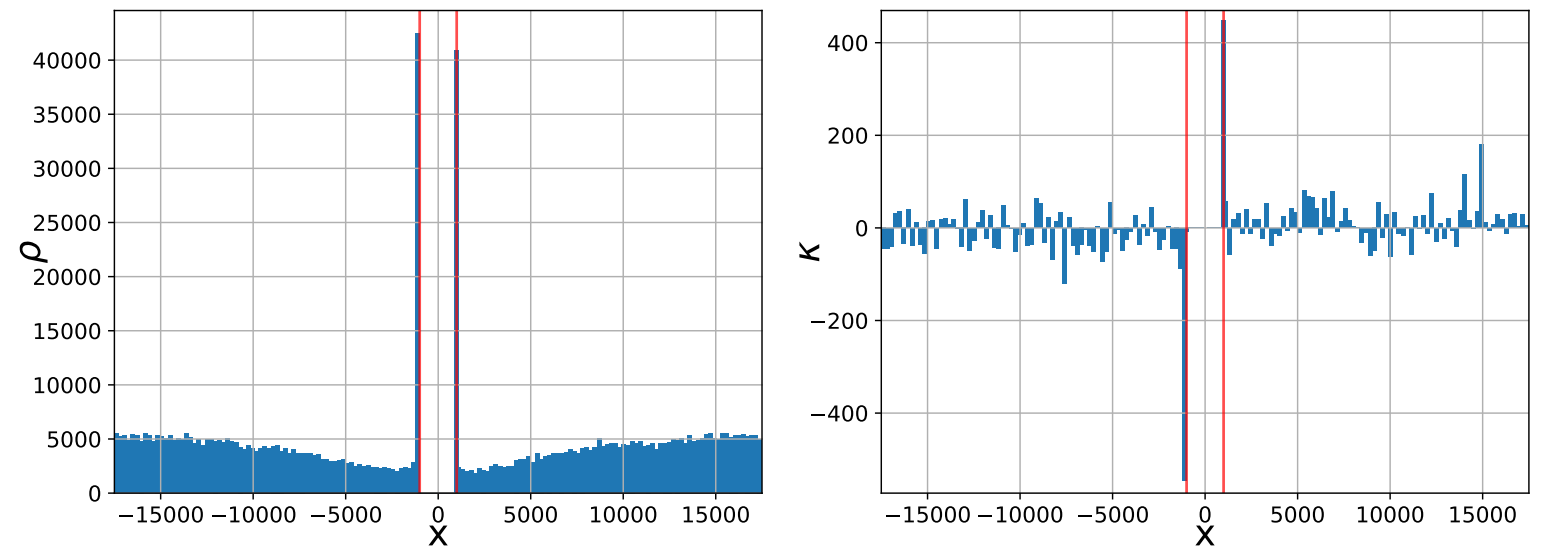
7.5. ábra. 100 MPa



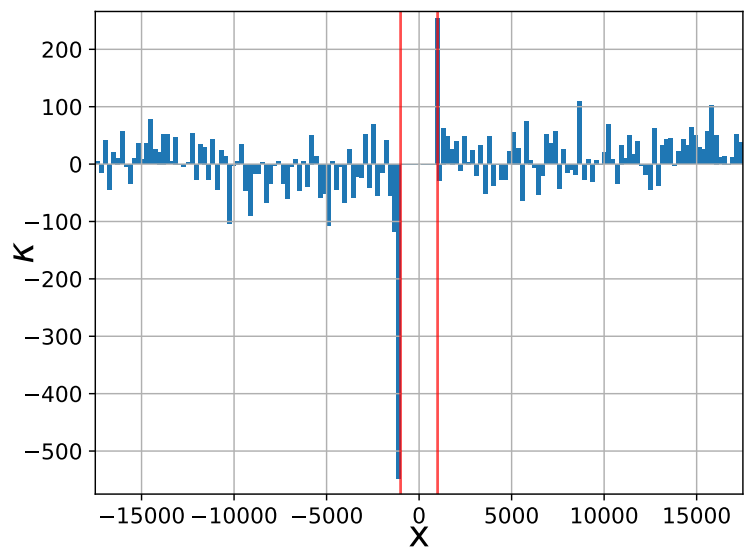
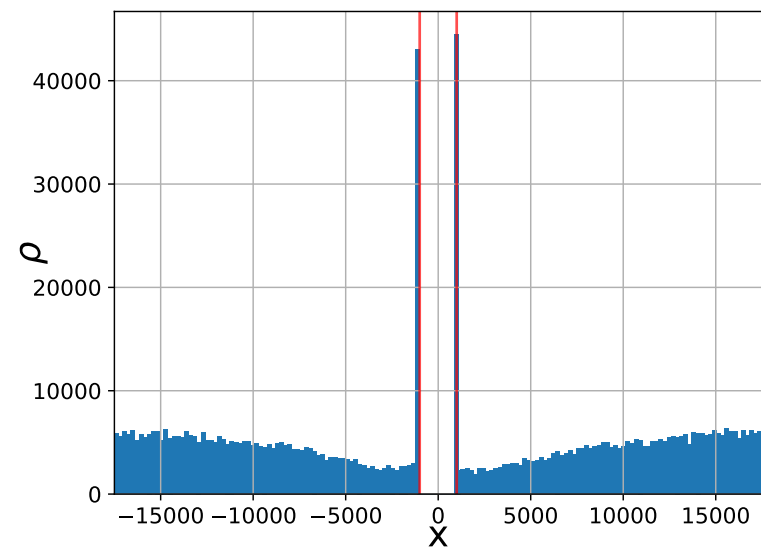
7.6. ábra. 125 MPa



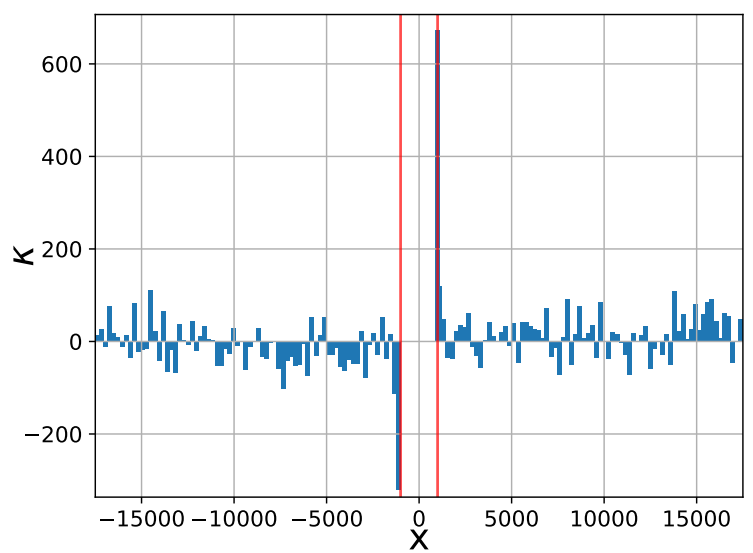
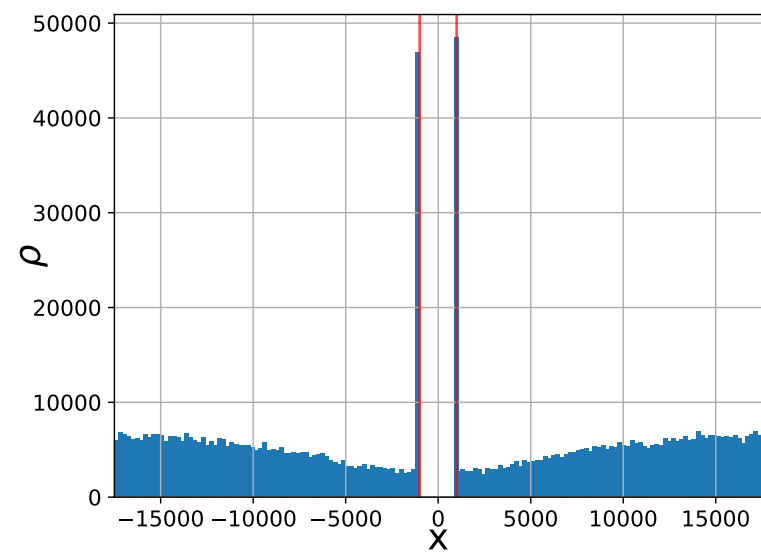
7.7. ábra. 150 MPa



7.8. ábra. 175 MPa



7.9. ábra. 200 MPa



7.10. ábra. 225 MPa

gatásával készült.

## Hivatkozások

- [1] I. Groma, F.F. Csikor, and M. Zaiser. Spatial correlations and higher-order gradient terms in a continuum description of dislocation dynamics. *Acta Materialia*, 51(5):1271–1281, 2003.
- [2] István Groma, Péter Dusán Ispánovity, and Thomas Hochrainer. Dynamics of curved dislocation ensembles. *Phys. Rev. B*, 103:174101, May 2021.
- [3] Thomas Hochrainer and Michael Zaiser. Fundamentals of a continuum theory of dislocations. 01 2005.
- [4] M. Zaiser T. Hochrainer and P. Gumbsch. A three-dimensional continuum theory of dislocation systems: kinematics and mean-field formulation. *Philosophical Magazine*, 87(8-9):1261–1282, 2007.
- [5] Thomas Hochrainer, Stefan Sandfeld, Michael Zaiser, and Peter Gumbsch. Continuum dislocation dynamics: Towards a physical theory of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 63:167–178, 2014.
- [6] Ronghai Wu, Daniel Tüzes, Péter Dusán Ispánovity, István Groma, Thomas Hochrainer, and Michael Zaiser. Instability of dislocation fluxes in a single slip: Deterministic and stochastic models of dislocation patterning. *Phys. Rev. B*, 98:054110, Aug 2018.
- [7] T. Hochrainer. Multipole expansion of continuum dislocations dynamics in terms of alignment tensors. *Philosophical Magazine*, 95(12):1321–1367, 2015.
- [8] M.O Katanaev and I.V Volovich. Theory of defects in solids and three-dimensional gravity. *Annals of Physics*, 216(1):1–28, 1992.
- [9] U.F. Kocks and H. Mecking. Physics and phenomenology of strain hardening: the fcc case. *Progress in Materials Science*, 48(3):171–273, 2003.
- [10] G. Györgyi I. Groma and P.D. Ispánovity. Variational approach in dislocation theory. *Philosophical Magazine*, 90(27-28):3679–3695, 2010.
- [11] István Groma, Michael Zaiser, and Péter Dusán Ispánovity. Dislocation patterning in a two-dimensional continuum theory of dislocations. *Phys. Rev. B*, 93:214110, Jun 2016.
- [12] M. Zaiser. Local density approximation for the energy functional of three-dimensional dislocation systems. *Phys. Rev. B*, 92:174120, Nov 2015.
- [13] Gregg Hommes. ParaDiS overview - User’s Guide, 2011.
- [14] N Bertin, S Aubry, A Arsenlis, and W Cai. Gpu-accelerated dislocation dynamics using subcycling time-integration. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 27(7):075014, aug 2019.
- [15] Athanasios Arsenlis, Wei Cai, Meijie Tang, Moono Rhee, Tomas Oppelstrup, Gregg Hommes, Tom G Pierce, and Vasily V Bulatov. Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15(6):553, 2007.