

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)

Témavezető: **Berta Dénes**

(bertadns@gmail.com)

2025. január 7.



Anyagfizikai tanszék
ELTE Eötvös Lóránd Tudomány Egyetem

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. Elméleti háttér	1
2.1. Diszlokációk	1
3. 2D egyenes diszlokációk dinamikája	3
4. 3D görbe diszlokációk	7
4.1. Dipól közelítés	9
4.2. Plasztikus deformáció	11
4.3. Plasztikus potenciál	11
4.4. Plasztikus potenciál alakja	13
5. Rendszer átjárhatatlan fallal	14
5.1. Az időfejlődési egyenletek	14
5.2. Az időfejlődési egyenletek az adott problémára	15
6. ParaDiS	18
7. Numerikus eredmények	19
7.1. Szimulációs eredmények kiértékelése	19
7.2. Kritikus feszültség meghatározása	20
7.3. Numerikus szimulációk eredményei	20
8. Összefoglalás	23

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.

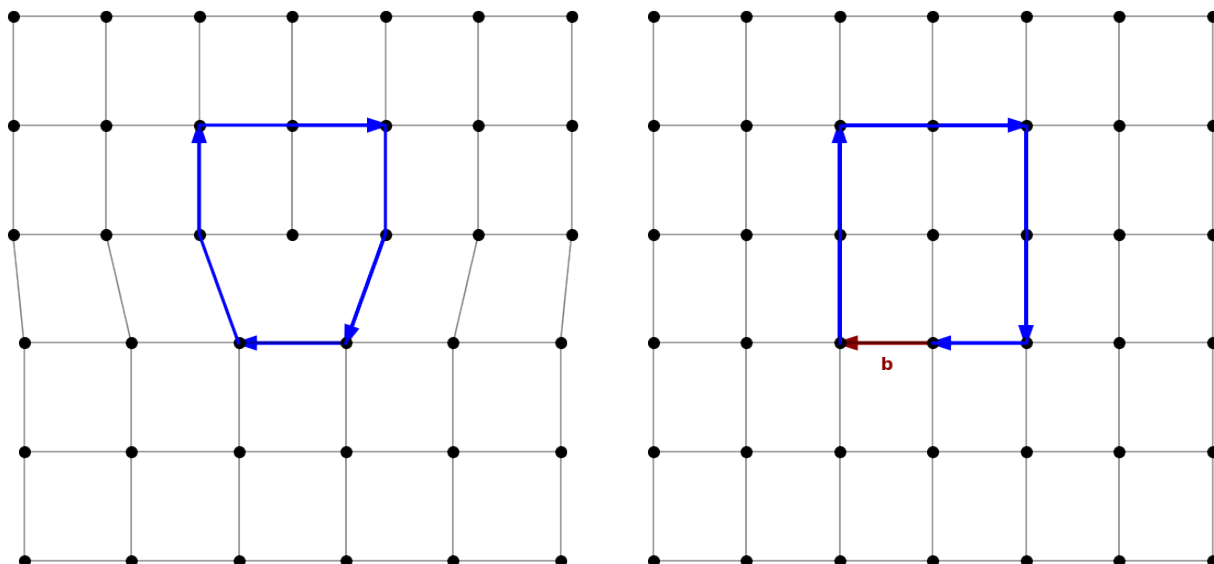
A munka során egy olyan 3D diszlokáció rendszert vizsgálunk, amelyben egy a diszlokációknak átjárhatatlan fal van jelen. A kontinuum egyenlet alapján egy ilyen diszlokáció rendszer dinamikai fejlődését közelítőleg határozhatjuk meg, majd ezt az elméletet a DDD szimulációkkal ellenőrizhetjük. Ha az elméleti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

2. Elméleti háttér

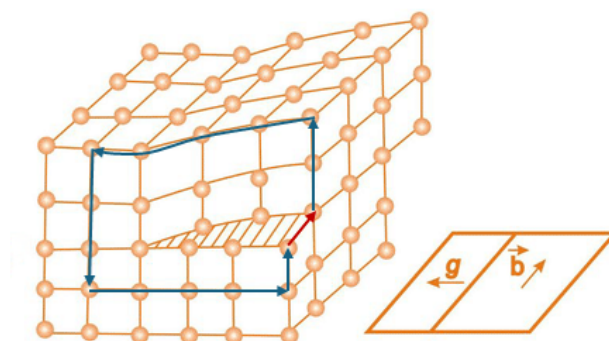
2.1. Diszlokációk

A diszlokáció fogalmát 1934-ben egymástól függetlenül vezette be Polányi, Orován és Taylor egy akkori kísérleti ellentmondás feloldására. Az ellentmondás alapja, hogy kristályos anyagok nyírásakor a maradandó alakváltozáshoz szükséges folyáshatár σ_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) Az éldiszlókációk vizualizálása Polányi, Oro- (b) A Burgers-vektor geometriai definiálása a
vány és Taylor elmélete szerint Burgers-körrel éldiszlókációkra.



2.2. ábra. A csavar (screw) diszlókációk vizuális reprezentálása és a Burgers-körrel történő Bur-
gers vektor definiálása. Látható, hogy a ugyanabban a csúszósíkban lévő csavar és éldiszlókáció
Burgers-vektora merőleges egymásra. [3]

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

A diszlókáció fogalmának pontos bevezetéséhez vizsgáljuk meg a vonalhibával rendelkező rács és a hibátlan kristályrács különbségét! Járjuk körbe a diszlókációt 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 diszlókációk másik fő csoportja az ún. csavardiszlókáció. Ekkor egy félsík mentén elvágjuk az anyagot és a vágás egyik oldalát rácsállandónnyival eltoljuk a vágás irányában.

A a 2.1a ábrán egy egyenes éldiszlókáció látható, míg a 2.2 ábrán egy csavar diszlókáció. A diszlókációknak két jellemző mozgási típusa van, a csúszás amikor a Burgers-vektor síkjában mozog a diszlókáció, illetve a mászás ahol arra merőlegesen. A mászás egy diffúzió vezérelt folyamat, tehát hőmérséklet függő és alacsony hőmérsékleten elhanyagolható.

3D-ben a diszlókációk alkothatnak egy zárt hurkot, azaz egy véges hajlított felületet "feszítünk" a kristályrácsba. Az ilyen típusú diszlókációkat nevezzük hurokdiszlókációnak. A hurokdiszlókációk él és csavar diszlókációk szuperpozíciója úgy, hogy a Burgers-vektor minden

pontban egy irányba mutat.

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

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

Tehát az energiainimum 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.

Megmutatható, hogy egy adott feszültségtérben lévő diszlokációra a Peach-Koehler-erő hat:

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

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

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

A diszlokációk mozgatásához így túlságosan alacsony külső feszültségre van szükség. Ennek megoldása a diszlokáció-diszlokáció kölcsönhatás, ami a diszlokációk által keltett feszültségtérben keresztül történik. Egy egyenes éldiszlokáció feszültsége kettő dimenzióban, ha $\mathbf{b} \parallel \mathbf{x}$ és $\mathbf{l} \parallel \mathbf{z}$:

$$\sigma_{11} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \quad (2.4)$$

$$\sigma_{22} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \quad (2.5)$$

$$\sigma_{12} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \quad (2.6)$$

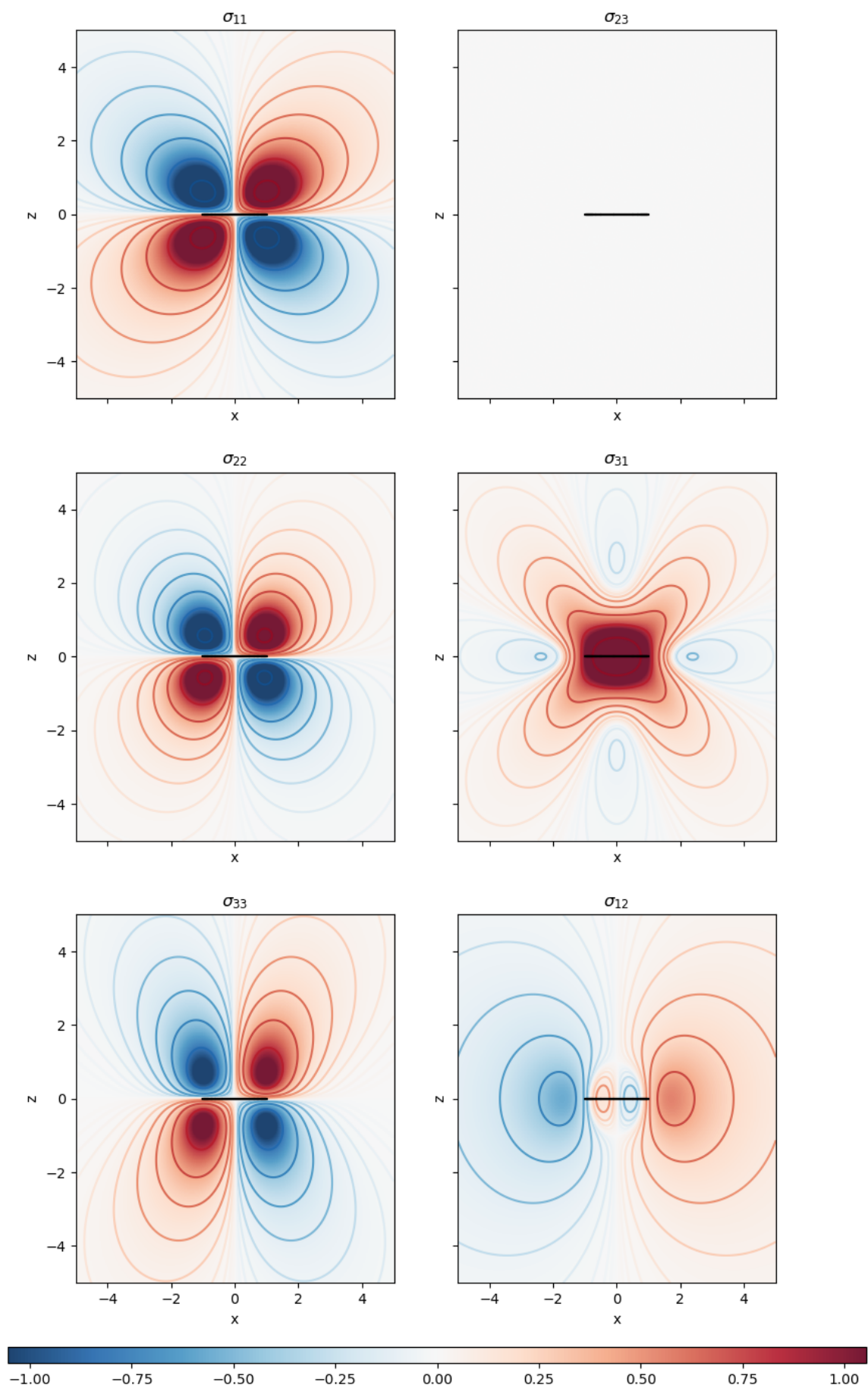
$$(2.7)$$

Ami egy térben anizotrop, $1/r$ távolságfüggésű összefüggés. Itt a $\sigma \propto 1/r$ jelentése, hogy a diszlokációk kölcsönhatása hosszútávú, lassabban cseng le a már ismert gravitációs vagy elektromos kölcsönhatásnál, így az eddig ismert klasszikus módszerek nem felelnek meg, a leírásukra teljesen új módszert kell keresnünk.

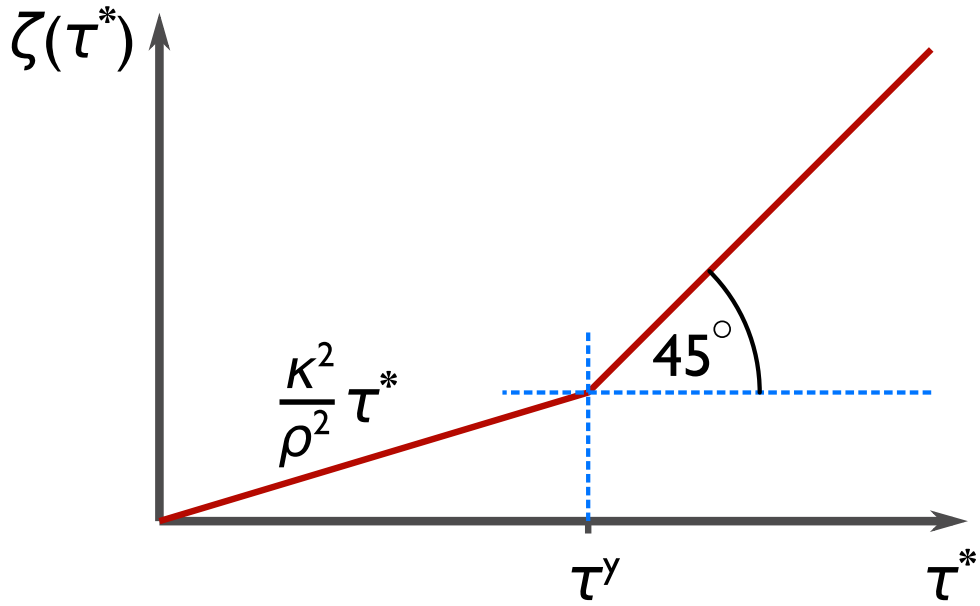
Három dimenzióban tovább bonyolódik a diszlokációk feszültségtere, analitikusan csak közelítéssel meghatározható [4]. A 2.3 ábrán látható egy kör alakú diszlokáció feszültségtere, a diszlokáció csúszósíkjára merőleges, a Burgers-vektorával párhuzamos síkban a ParaDiS -hoz hasonló módon numerikusan meghatározva.

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. Tegyük fel, hogy a rendszerben egymással párhuzamos, végtelen, $\mathbf{b} = (\pm 1, 0, 0)$ Burgers-vektorú éldiszlokációk mozognak párhuzamos csúszósíkokon. Ez a rendszer egyszerűsíthető 2D-re egyértelmű módon. 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



2.3. ábra. Kör alakú diszlokáció feszültségterének különböző komponensei a csúszósíkjára merőleges, a Burgers-vektorával párhuzamos síkban. Az értékek a ParaDiS szoftver implementációja alapján lettek meghatározva.



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

diszlokációsűrűség ρ_+ , ρ_- , amik összege a statisztikailag tárolt diszlokáció (SSD) sűrűség ρ , illetve a különbségük a geometriailag szükséges diszlokáció (GND) sűrűség κ . 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, τ^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. τ^y a Taylor-relációval meghatározható lokális folyáshatár:

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

melyben α a dimenziótlan Taylor-együttható és μ a nyírási modulusz. Ekkor τ^* feszültség felírható egy τ^{mf} átlagtér-feszültség és egy τ^b 'back stress' feszültség összegeként. τ^b és τ^d a következő:

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

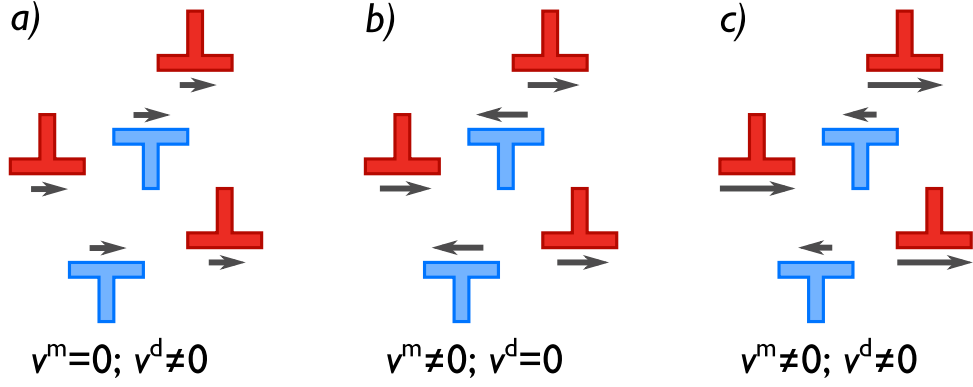
ahol ν a Poisson-tényező,

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

A és D dimenziótlan konstansok. Ezekkel az egyenletekkel fel tudunk írni két sebesség tagot, az átlagos diszlokáció sebességet v^{m1} , illetve a 'drift' sebességet, amik láthatóak a 3.2 ábrán [2]:

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

¹A - jel a diszlokáció típusuk ellentétes előjeléből származik



3.2. ábra. Az egyenes éldiszlokációk mozgásának sematikus rajza. A piros "T" betűk jelzik a pozitív jelű diszlokációkat, míg a kék 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].

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

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 az adott problémára:

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

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

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:

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

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 κ 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:

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

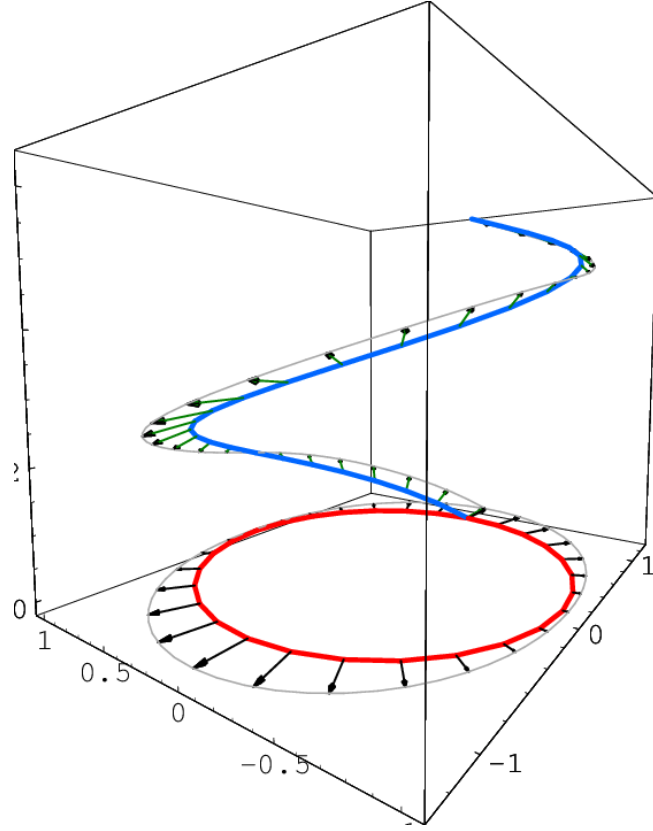
Célünk az ezzel ekvivalens probléma kezelése 3D görbe diszlokációkra.

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], [5], [6], [7] alapján:

- Csak csúszás típusú diszlokáció mozgás lehetséges. Ez kísérletileg előállítható, mivel a diszlokáció mászás diffúzió vezérelt folyamat, magas hőmérsékleten van csak jelentősége a csúszáshoz képest.
- A diszlokációk egy csúszórendszerben vannak, csak az $([0, 0, 1])$ síkkal párhuzamos síkokban van jelen.
- Egyéb csúszó rendszerek nincsenek. Általában az egyik síkban történő diszlokáció mozgáshoz kevesebb energia szükséges, mint a többi síkban lévőknek, így ez is egy valós feltétel.[8]
- 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 iránytangensének folytonos változását egy 2+1 dimenzióra történő kiterjesztéssel vesszük 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 φ szöge. Ekkor a koordináták $(x, y, \varphi) = (\mathbf{r}, \varphi)$. Bár sokat egyszerűsítettünk a valós 3D rendszerhez képest, reményeink szerint nem veszítettük el a diszlokáció rendszerek bonyolult viselkedését egészében. Ez a remény nem teljesen valótlan, hiszen a 2D egyenes éldiszlokációk elmélete is képes olyan bonyolult diszlokáció viselkedést mutatni, mint a diszlokáció lavinák [9].

Célunk a rendszer terekkel való leírása, ami jelentősen könnyíti az elméleti számolásokat. Ezek a terek a

- $\rho'(\mathbf{r}, \varphi)^{2,3}$, diszlokáció sűrűség
- $q'(\mathbf{r}, \varphi)$ diszlokáció görbület sűrűség.
- $\kappa = (\kappa_1(\mathbf{r}), \kappa_2(\mathbf{r})) = \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho'(\mathbf{r}, \varphi) \cos \varphi d\varphi, \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho'(\mathbf{r}, \varphi) \sin \varphi d\varphi \right)$ nettó irányvonal vektor. Ha a szöget a Burgers vektorból vesszük, akkor κ_1 a teljes csavar diszlokáció komponens, míg κ_2 a teljes él diszlokáció komponens.
- $v'(\mathbf{r}, \varphi)$ diszlokáció sebesség.

Fontos, hogy a diszlokáció vonalak ne végződjenek a rendszerben, tehát a diszlokációknak zártnak kell lennie. Az így felírható feltétel:

$$\cos \varphi \partial_x \rho' + \sin \varphi \partial_y \rho' + \partial_\varphi q' = 0 \quad (4.1)$$

²A (2+1)D térben skalár mennyiségek 'vel vannak jelölve

³A terek amiket bevezetünk függhetnek z koordinátától, de csak akkor tüntetjük fel ha szükséges

Ezekkel a mennyiségekkel és közelítésekkel felírható ρ' időfejlődése:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho' = & -\sin \varphi \partial_x (\rho' v') + \cos \varphi \partial_y (\rho' v') + \partial_\varphi [\cos \varphi \partial_x (\rho' v') + \sin \varphi \partial_y (\rho' v')] + \\ & + \partial_\varphi [\cos \varphi \partial_x (\rho' v') + \sin \varphi \partial_y (\rho' v') + \partial_\varphi (\rho' v')] + v' q' \end{aligned} \quad (4.2)$$

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.

4.1. Dipól közelítés

A megjelenő periodikus φ függés kezelésére a elektrosztatikához hasonlóan (innen a neve) Fourier-sorba fejtjük az egyenleteket első rendig [10]. Fontos, hogy az elnevezés nem arra utal, hogy 'diszlokáció dipólokat' vezetünk be, vagy feltételt tennénk a diszlokációk alakjára. Ezek alapján:

$$\rho'(\mathbf{r}, \varphi) \approx \rho(\mathbf{r}) + 2 \cos \varphi \kappa_1(\mathbf{r}) + 2 \sin \varphi \kappa_2(\mathbf{r}) \quad (4.3a)$$

$$v'(\mathbf{r}, \varphi) \approx v^m(\mathbf{r}) + \cos \varphi v_1^d(\mathbf{r}) + \sin \varphi v_2^d(\mathbf{r}) \quad (4.3b)$$

$$q'(\mathbf{r}, \varphi) \approx q(\mathbf{r}) + \cos \varphi Q_1(\mathbf{r}) - \sin \varphi Q_2(\mathbf{r}) \quad (4.3c)$$

A (4.3a) egyenletbe, ρ a teljes statisztikailag szükséges diszlokáció (SSD) sűrűség, ami nem függ az orientációtól, és $\kappa_{1,2}$ a geometriailag szükséges diszlokáció (GND) sűrűsége az x illetve az y tengellyel párhuzamos diszlokációknak.

A (4.3b)-ben bevezetünk három skalár sebességmennyiséget v^m , v_1^d , v_2^d -t a 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 ($\mathbf{1} \parallel \mathbf{v}^d$). A drift sebesség nem a diszlokáció sebességvektora, hiszen az mindig merőleges a lokális diszlokáció irányra. Látható, hogy ezek a 2D rendszerben megjelenő sebességek általánosításia.

A (4.3c) a görbület sűrűséget adja meg ahol $q' = \rho' k'$ ⁴. Bevezettünk egy görbület "különbözeti" $\mathbf{Q}$ vektort, amely két ellentétes orientációjú, maximális görbületkülönbséggel rendelkező diszlokáció irányát adja meg.

A dipól közelítéssel nyilván megsérjük a (4.1) feltételt, az nem teljesül egzaktul. Azonban a megfelelő Fourier együtthatók szintjén ki tudunk róni olyan feltételeket amelyekkel a dipól közelítésen belül megfelelőek lesznek. Ez a korábban bevezetett mennyiségekkel a következő feltételeket adja:

$$Q_1(\mathbf{r}) = \partial_x \rho(\mathbf{r}) \quad , \quad Q_2(\mathbf{r}) = \partial_y \rho(\mathbf{r}) \quad (4.4)$$

Ezekkel már fel tudjuk írni az időfejlődést a dipól közelítésben. Ha (4.3a-4.3c)-t beírjuk (4.2)-ba, és kihasználjuk a $\mathbf{Q}$ -ra vonatkozó feltételt:

$$\partial_t \rho = -\partial_x (\rho v_2^d) + \partial_y (\rho v_1^d) + \partial_y (\kappa_1 v^m) - \partial_x (\kappa_2 v^m) + q v^m + \lambda_1 v_1^d \partial_y \rho - \lambda_2 v_2^d \partial_x \rho \quad (4.5a)$$

$$\partial_t \kappa_{1,2} = \pm \partial_{y,x} (\rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d) \quad (4.5b)$$

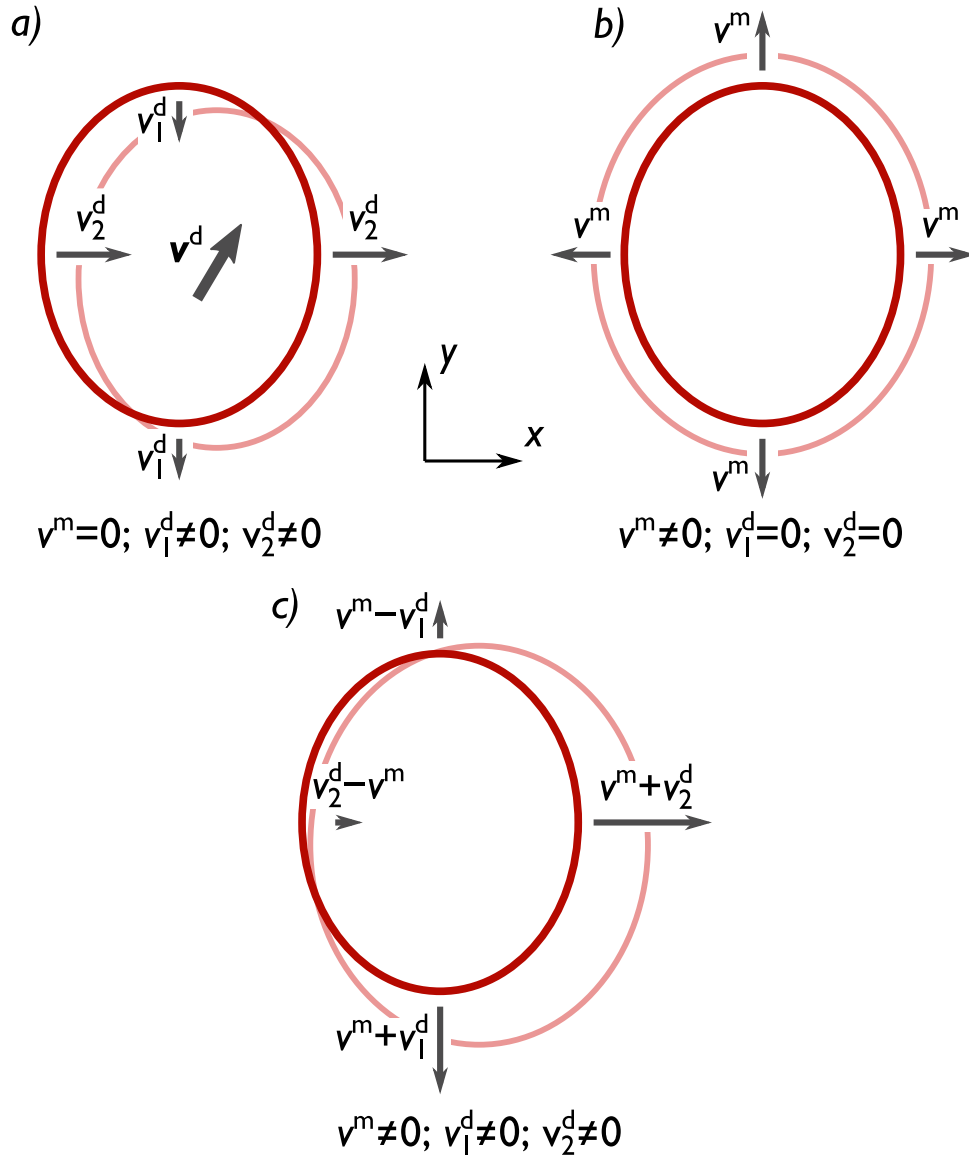
$$\partial_t q = -\partial_x (q v_2^d - v^m Q_1) + \partial_y (q v_1^d + v^m Q_2) \quad (4.5c)$$

Ez a diszlokációsűrűség időfejlődése a "dipól" közelítésben, ahol bevezettük $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}$ mennyiségeket. Az időfejlődés megegyezik a 2D egyenes diszlokációk időfejlődésével, ha $q = 0$ és $\lambda_{1,2} = 0$. Továbbá az egyenletekből következik, hogy q egy megmaradó mennyiség [2]. A továbbiakban ezeket az időfejlődési egyenleteket fogjuk használni.⁵ ⁶

⁴4.1 összeköti ρ' -t és q' -t

⁵Az általános eset is hasonlóan kezelhető.

⁶Ha további Fourier-együtthatókat is figyelembe veszünk akkor is hasonló lesz az időfejlődés alakja.



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]

4.2. Plasztikus deformáció

Vizsgáljuk meg a plasztikus deformáció tenzort β^p és az idő szerinti deriváltját $\dot{\beta}^p$ a diszkutált geometrián. Tudjuk, hogy a diszlokációsűrűség-tenzor $\alpha_{ij} = \varepsilon_{ikl}\partial_k\beta_{lj}^p$. Általános esetben α nem határozza meg egyértelműen β^p -t, de ez a mi esetünkben nem igaz. Mivel feltettük, hogy a diszlokációk csak a saját csúszósíkjukban tudnak mozogni a β^p $i = 3$ komponensei nem nullák [11] és $\beta_{3j}^p(\mathbf{r}) = \beta_0(\mathbf{r})b_j$, ahol $\beta_0(\mathbf{r})$ egy skalár ami megadható κ segítségével:

$$\kappa_1 = \partial_y\beta_0 \quad , \quad \kappa_2 = -\partial_x\beta_0 \quad (4.6)$$

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 β_0 megadható a GND sűrűségből egy integrálással:

$$\beta_0(\mathbf{r}) = \int_{\infty}^{\mathbf{r}} F_i dr_i \quad (4.7)$$

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:

$$\dot{\beta}_0 = \rho v^m + \kappa_1 v_1^d + \kappa_2 v_2^d \quad (4.8)$$

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 ρ , $\kappa_{1,2}$, q függvényében. Ehhez a 2D esetben felírható termodinamikai megfontolásokat általánosítjuk. Itt is feltesszük, hogy létezik ρ , $\kappa_{1,2}$, 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 jeleljük. Általános esetben az időderiváltja:

$$\dot{P} = \int \left[\underbrace{\frac{\delta P}{\delta \rho}}_{\mu_\rho} \partial_t \rho + \underbrace{\frac{\delta P}{\delta \kappa_1}}_{\mu_{\kappa_1}} \partial_t \kappa_1 + \underbrace{\frac{\delta P}{\delta \kappa_2}}_{\mu_{\kappa_2}} \partial_t \kappa_2 + \underbrace{\frac{\delta P}{\delta q}}_{\mu_q} \partial_t q \right] dV \leq 0 \quad (4.9)$$

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

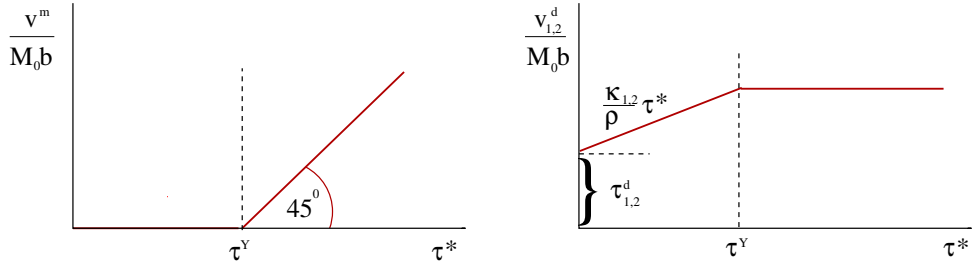
Ha beírjuk a terek korábban kiszámolt alakjait (4.5) a plasztikus potenciál időderiváltjába (4.9) és elvégezzük az integrálást, a következő egyenlőtlenséget kapjuk:

$$\dot{P} = - \int b\rho \left[(\tau^* + \tau^m)v^m + \left(\frac{\kappa_1}{\rho}\tau^* + \tau_1^d \right) v_1^d + \left(\frac{\kappa_2}{\rho}\tau^* + \tau_2^d \right) v_2^d \right] dV \leq 0 \quad (4.10a)$$

Ahol a következő feszültségdimenziójú mennyiségeket vezettük be:

$$\tau^* = \frac{1}{b} [(\partial_y \mu_{\kappa_1}) - (\partial_x \mu_{\kappa_2})] \quad (4.10b)$$

⁷Feltettük, hogy minden tér nullába tart a végtelenben.



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

$$\tau_{1,2}^d = \frac{1}{b\rho} [(\partial_{y,x}\mu_\rho)\rho + (\partial_{y,y}\mu_q)q + \partial_{y,x}(\lambda_{1,2}\mu_\rho\rho)] \quad (4.10c)$$

$$\tau^m = \frac{1}{b\rho} [(\partial_y\mu_\rho)\kappa_1 - (\partial_x\mu_\rho)\kappa_2 + (\partial_x\mu_q)Q_1 + (\partial_y\mu_q)Q_2 - \mu_\rho q] \quad (4.10d)$$

Ahoz, hogy a plasztikus potenciál ne nőjjön (4.10a)-ben az integrandusnak mindenhol nem-negatívnak kell lennie. A 2D alalógiájára itt is bevezetünk sebesség függvényeket a görbe diszlokációkra:

$$v^m = M_0 b \chi(\tau^*) \quad (4.11a)$$

$$v_{1,2}^d = M_0 b \left(\frac{\kappa_{1,2}}{\rho} [\tau^* - \chi(\tau^*)] + \tau_{1,2}^d \right) \quad (4.11b)$$

Ennek jelentése hogy az átlag diszlokáció sebesség v^m 0 mindaddig, amíg egy lokális kritikus feszültség τ^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 (4.10a)-ban felírt feltétellel. Könnyen látható, hogy a nemfolyó tartományban ($|\tau^*| \leq \tau^y$) a feltétel teljesül. Azonban a folyó tartományban ($|\tau^*| \geq \tau^y$) az egyenlőtlenségi feltétel:

$$(\tau^* + \beta \mu b \sqrt{\rho})(\tau^* - s\tau^y) \geq 0 \quad (4.12)$$

ahol β egy dimenziómentes mennyiség:

$$\beta = \frac{\tau^m - \frac{\kappa_1}{\rho} \tau_1^d - \frac{\kappa_2}{\rho} \tau_2^d}{\mu b \sqrt{\rho} \underbrace{\left(1 - \frac{\kappa_1^2}{\rho^2} - \frac{\kappa_2^2}{\rho^2} \right)}_{4.3a \Rightarrow > 0}} \quad (4.13)$$

A Taylor keményedési törvény alapján a folyásfeszültség:

$$\tau^y = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (4.14)$$

Látható, hogy (4.12) teljesül, ha $|\beta| < \alpha$. B^m definíciójából (4.13) láthatjuk, hogy β egyik tagja arányos $q/\rho^{3/2}$, ami az átlagos diszlokáció távolság $1/\sqrt{\rho}$ és az átlagos görbület sugárnak q/ρ szorzata. Közel homogén esetben $|\beta| \ll \alpha$ ($\simeq 0.3 - 0.4$ [12]), azonban erősen inhomogén vagy erősen görbült diszlokáció rendszerekre az α Taylor együttható elveszti értelmét a helyi szinten. Ebben az esetben bevezethetjük $\alpha(\beta)$ -t:

$$\alpha(\beta) = \begin{cases} \alpha_0 & \text{ha } |\beta| < |\alpha_0| \\ |\beta| & \text{ha } |\beta| \geq |\alpha_0| \end{cases} \quad (4.15)$$

ahol α_0 a konstans globális együttható inentől. Ez összhangban van a kísérleti tapasztalattal, miszerint α 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 τ^{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:

$$\tau^{\text{mf}} = \frac{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}}{b} \quad (4.16)$$

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

$$P = P^{\text{mf}} + P^{\text{corr}} \quad (4.17)$$

P^{mf} az átlagtér rugalmas energiája, ami pontosan a rugalmas energia lenne teljesen véletlenszerű rendszerben. Ahhoz, hogy megkapjuk τ^{mf} -t nyírási átlagteret tekintjük a következőt:

$$\frac{1}{b} \left(\partial_y \frac{\delta P^{\text{mf}}}{\delta \kappa_1} - \partial_x \frac{\delta P^{\text{mf}}}{\delta \kappa_2} \right) \quad (4.18a)$$

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

$$P^p = \int \sigma_{ij} \varepsilon_{ji}^p dV \stackrel{\textcircled{1}}{=} - \int \sigma_{13} \beta_{31}^p dV \stackrel{\textcircled{2}}{=} - \int (S_1 \kappa_1 + S_2 \kappa_2) b dV \quad (4.18b)$$

①: Általában feltehetjük, hogy $\mathbf{b} \parallel x$ és a feltételeinkből $\mathbf{n} \parallel z$ csak β^p 31 komponense marad meg.

②: 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 (4.10b) egyenlet alapján kapjuk, hogy:

$$\tau^{\text{mf}} = \sigma_{13} = \frac{1}{b} \left(\partial_y \frac{\delta P^{\text{mf}}}{\delta \kappa_1} - \partial_x \frac{\delta P^{\text{mf}}}{\delta \kappa_2} \right). \quad (4.18c)$$

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

A korrelációs tag P^{corr} legegyszerűbb alakja [2]:

$$P^{\text{corr}}[\rho, \kappa_1, \kappa_2, q] = \int G b^2 \left[A \rho \ln \frac{\rho}{\rho_0} + \frac{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\kappa}}{2\rho} + \frac{R q^2}{2\rho^2} \right] dV \quad (4.19)$$

ahol $G = \mu/2\pi(1 - \nu)$, A és R dimenziómentes állandók, $\mathbf{D}$ egy 2x2-es dimenziómentes állandó mátrix [13], $\rho_0 = 1/c^2 b^2 \gg \rho$ egy állandó paraméter diszlokációsűrűség dimenzióval és c egy állandó amit a diszlokációk elemi tulajdonságai határoznak meg. P^{corr} második tagjának invariánsnak kell lennie a Burgers-vektor forgatására:

$$\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\kappa} = D_{ss}(\mathbf{n}_s \cdot \boldsymbol{\kappa})^2 + D_{ee}(\mathbf{n}_e \cdot \boldsymbol{\kappa})^2 + 2D_{se}(\mathbf{n}_s \cdot \boldsymbol{\kappa})(\mathbf{n}_e \cdot \boldsymbol{\kappa}) \quad (4.20)$$

Ahol D_{ss} , D_{ee} és D_{se} a csavar-csavar (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 ρ -n kívül nincs más hosszúság dimenziójú mennyiség az elméletben.

A (4.10b) és (4.17) egyenletek szerint τ^* is felosztható két részre:

$$\tau^* = \tau^{\text{mf}} + \tau^{\text{b}} \quad (4.21)$$

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

$$\tau^{\text{b}} = \frac{1}{b} \left[\partial_y \frac{\delta P^{\text{corr}}}{\delta \kappa_1} - \partial_x \frac{\delta P^{\text{corr}}}{\delta \kappa_2} \right] = Gb \left[\partial_y \left(D_{11} \frac{\kappa_1}{\rho} + D_{12} \frac{\kappa_2}{2\rho} \right) - \partial_x \left(D_{22} \frac{\kappa_2}{\rho} + D_{12} \frac{\kappa_1}{2\rho} \right) \right] \quad (4.22)$$

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

$$\tau^{\text{b}} = \frac{Gb}{\rho} [\partial_y (D_{11}\kappa_1 + \partial_y (D_{12}\kappa_2) - \partial_y (D_{22}\kappa_2 + \partial_y (D_{12}\kappa_1))] \quad (4.23)$$

A diffúziós feszültség tagok:

$$\tau_{1,2}^d = \frac{Gb}{\rho} \left[A \left(1 + \lambda_{1,2} + \lambda_{1,2} \ln \frac{\rho}{\rho_0} \right) \partial_{y,x}\rho + Rq \partial_{y,x} \frac{q}{\rho^2} \right] \quad (4.24)$$

5. Rendszer átjárhatatlan fallal

Ebben a fejezetben 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, azaz normálisa $n_{\text{fal}} = (1, 0, 0)$ és $x_{\text{fal}} = 0$.

5.1. Az időfejlődési egyenletek

Kiindulva a (4.5,4.8) egyenletekből vegyük $\lambda_{1,2} = 0$ -nak, mert kis görbületeknél q^2/ρ^3 -vel arányosak, így a lineáris közelítésben elhanyagolhatjuk őket.

Feltesszük, hogy τ^* nagyobb mint a Taylor-összefüggés szerinti folyásfeszültség, azaz a folyási tartományban van a rendszer:

$$\tau^Y = \alpha \mu b \sqrt{\rho} < \tau^* \quad (5.1)$$

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

$$\tau^* = \tau^{\text{mf}} + \tau^{\text{b}} = \tau_0 + \sigma_{13} + \tau^{\text{b}} > \tau^Y \quad (5.2)$$

ahol σ_{13} a diszlokáció rendszer nyírófeszültsége, τ_0 a külső nyírófeszültség, és τ^{b} a "back-stress" 4.23-ből áttérve a β_0 mennyiségre:

$$\tau^{\text{b}} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} [D_{11}\partial_2\partial_2 + D_{22}\partial_1\partial_1 - (D_{12} + D_{21})\partial_1\partial_2] \beta_0, \quad (5.3)$$

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

$$v^m = M_0 b (\tau^* - \alpha \mu b \sqrt{\rho}) = M_0 b (\tau_0 + \sigma_{13} + \tau^{\text{b}} - \alpha \mu b \sqrt{\rho}) \quad (5.4a)$$

$$v_i^d = M_0 b \left(\frac{\kappa_i}{\rho} \alpha \mu b \sqrt{\rho} + \tau_i^d \right), \quad i = 1, 2 \quad (5.4b)$$

τ_1^d és τ_1^d -re a 4.24-ből kiindulva kapjuk kihasználva, hogy $\lambda_{1,2} = 0$ és csak a kis perturbációk tartományára szorítkozva:

$$\tau_{1,2}^d = \pm \frac{\mu b A}{2\pi(1-\nu)\rho} \partial_{2,1}\rho \quad (5.5)$$

Ezeket visszahelyettesítve 5.4b egyenletekbe:

$$v_{1,2}^d = M_0 b^2 \mu \left(\frac{\kappa_{1,2}}{\rho} \alpha \sqrt{\rho} + \frac{A^*}{\rho} \partial_{2,1}\rho \right) \quad (5.6)$$

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

5.2. Az időfejlődési egyenletek az adott problémára

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

$$\partial_t \beta_0 = \rho v^m - v_2^d \partial_1 \beta_0 \quad (5.7a)$$

$$\partial_t \rho = -\partial_1(\rho v_2^d) + \partial_1(v^m \partial_1 \beta_0) + q v^m \quad (5.7b)$$

$$\partial_t q = -\partial_1(q v_2^d - v^m \partial_1 \rho) \quad (5.7c)$$

$$v^m = M_0 b(\tau_0 + \sigma_{13} + \tau^b - \alpha \mu b \sqrt{\rho}) \quad (5.7d)$$

$$v_2^d = -M_0 \frac{b^2 \mu}{\rho} (\alpha \sqrt{\rho} \partial_1 \beta_0 + A^* \partial_1 \rho) \quad (5.7e)$$

ahol τ^b 'back stress' a következő:

$$\tau^b = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} D_{22} \partial_1 \partial_1 \beta_0, \quad (5.8)$$

A jelen problémában β_0 variációja nem generál feszültséget. Ezért az egyenletekben megjelenő $\sigma_{13} = 0$ nyírófeszültség egyszerűen a külső feszültség.

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

$$\rho v^m + v_2^d \kappa_2 = 0 \quad (5.9a)$$

$$\partial_1(\rho v_2^d + v^m \kappa_2) = q v^m \quad (5.9b)$$

$$\partial_1(q v_2^d - v^m \partial_1 \rho) = 0 \quad (5.9c)$$

$$v^m = M_0 b(\tau_0 + \tau^b - \alpha \mu b \sqrt{\rho}) \quad (5.9d)$$

$$v_2^d = -M_0 \frac{b^2 \mu}{\rho} (-\alpha \sqrt{\rho} \kappa_2 + A^* \partial_1 \rho) \quad (5.9e)$$

ahol a back stress alakja a következő:

$$\tau^b = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} D_{22} \partial_1 \kappa_2, \quad (5.10)$$

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

Látható, hogy az (5.9a, 5.9b, 5.9c) egyenletek triviálisan teljesülnek, ha $v^m = 0$ és $v_2^d = 0$, ami megfelel a korábbi közel stacionárius folyás feltételnek. Ekkor:

$$\tau_0 - \alpha\mu b\sqrt{\rho} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\rho} D_{22}\partial_1\kappa_2 \quad (5.11a)$$

$$\alpha\sqrt{\rho}\kappa_2 = A^*\partial_1\rho \quad (5.11b)$$

Ezzel a két egyenlettel meg tudjuk határozni D_{22} , A^* és α paramétereket különböző külső τ_0 feszültségekkel elvégzett DDD szimulációk sorával. Ha feltesszük, hogy a fal mentén elhelyezkedő diszlokációk jele többségében azonos ($\kappa_2 = \pm\rho$) akkor az (5.11a) egyenlet közel exponenciális lecsengést jósol. Ugyanakkor pontosabb eredményhez is juthatunk. Ha a két egyenletet kombináljuk a következőt kapjuk:

$$\tau_0(\sqrt{\rho})^2 - \alpha\mu b(\sqrt{\rho})^3 = \frac{\mu b\alpha}{2\pi(1-\nu)} A^* D_{22} \partial_1 \partial_1 \sqrt{\rho} \quad (5.12)$$

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

$$\partial_1 \left\{ \frac{\tau_0}{3}\xi^3 - \frac{\alpha\mu b}{4}\xi^4 \right\} = \partial_1 \frac{\mu b\alpha}{2\pi(1-\nu)} \frac{A^* D_{22}}{2} (\partial_1\xi)^2 \quad (5.13)$$

ami azt jelenti, hogy bevezethetünk egy energiához hasonló mennyiséget:

$$e = \frac{\mu b\alpha}{2\pi(1-\nu)} \frac{A^* D_{22}}{2} (\partial_1\xi)^2 - \left\{ \frac{\tau_0}{3}\xi^3 - \frac{\alpha\mu b}{4}\xi^4 \right\} \quad (5.14)$$

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

$$\partial_1\xi = \pm \frac{1}{C} \sqrt{e + \frac{\tau_0}{3}\xi^3 - \frac{\alpha\mu b}{4}\xi^4} \quad (5.15a)$$

ahol

$$C^2 = \frac{\mu b\alpha}{2\pi(1-\nu)} \frac{A^* D_{22}}{2}. \quad (5.15b)$$

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

$$\phi(\xi) = -\frac{\tau_0}{3}\xi^3 + \frac{\alpha\mu b}{4}\xi^4 \quad (5.16)$$

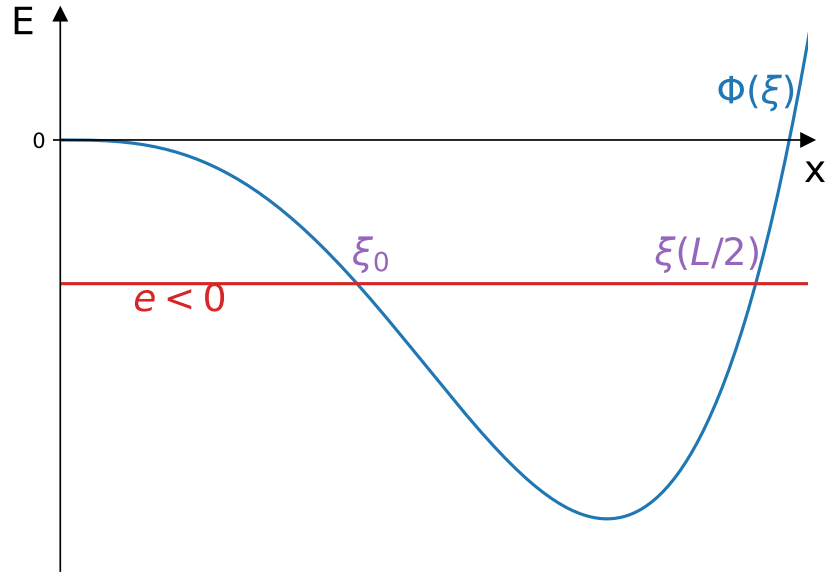
$\partial_1\xi$ -nek a rendszer szélén (például $x = -L/2$ -ben) el kell tűnnie, tehát:

$$e = \phi(\sqrt{\rho(x = -L/2)}) \quad (5.17)$$

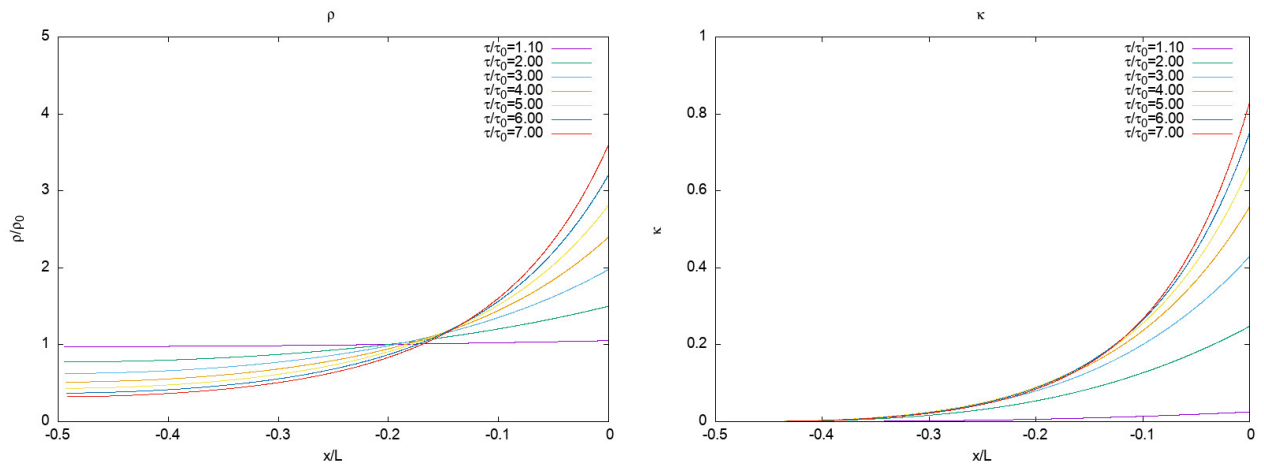
Mivel a potenciál minimumára a $\tau - \alpha\mu b\sqrt{\rho} = 0$ feltételnél teljesül, ha a folyási régióban vagyunk az SSD diszlokációsűrűségnek kisebbnek kell lennie $x = -L/2$ -ben, mint a minimumhoz tartozónak. Ennek következménye, hogy ha $e < 0$ akkor az $e = \phi(\xi_0)$ egyenletnek van egy másik megoldása, ami pozitív. Ennek a megoldásnak az $x = 0$ -ban található falhoz tartozó ξ -nek kell lennie, azaz $\xi(0) = \xi_0$. Ez a módszer és a potenciál alakja látható az 5.1 ábrán. Ekkor (5.15a)-ból a következőt kapjuk:

$$\frac{1}{C} \int_{\xi(-L/2)}^{\xi(x)} \frac{1}{\sqrt{e + \frac{\tau_0}{3}\xi^3 - \frac{\alpha\mu b}{4}\xi^4}} d\xi = x - L/2 \quad (5.18)$$

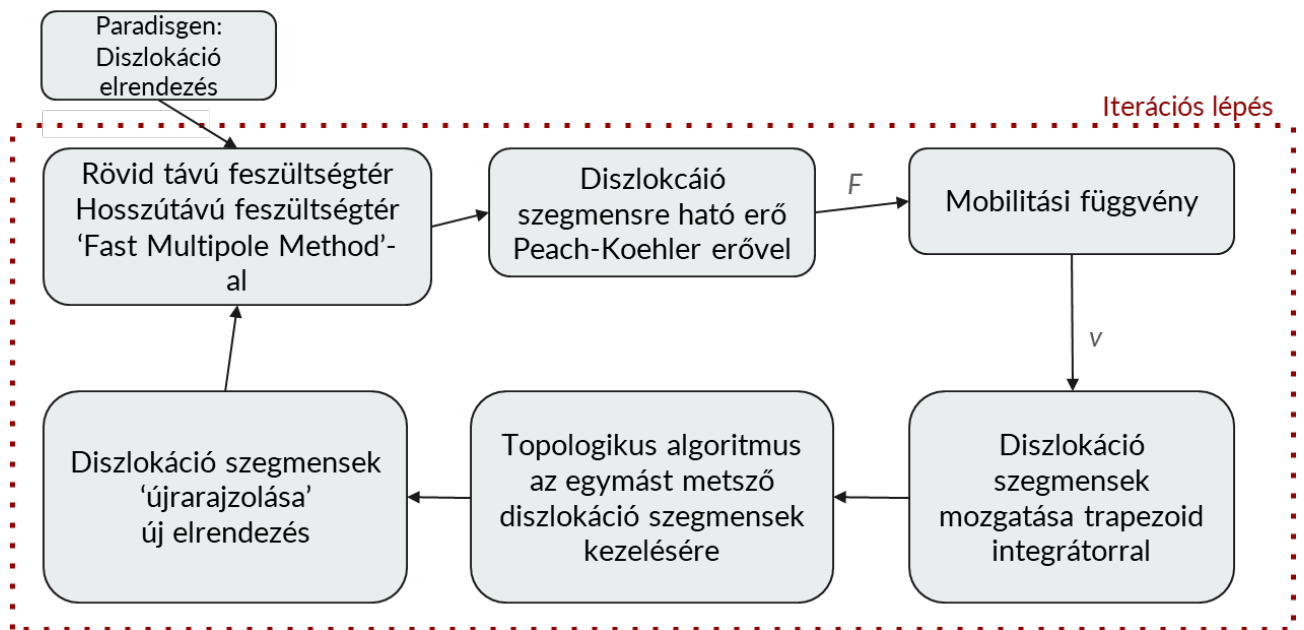
Ahol C -t úgy kell megválasztani, hogy a bal oldali integrál $\xi = \xi_0$ -ben pontosan $L/2$ legyen. Megjegyezzük, hogy C csak az elmélet paramétereinek egy kombinációjától függ. Ugyanakkor ha a κ_2 helyfüggését is meghatározzuk akkor (5.11b) egyenlet alapján A^* és így D_{22} is meghatározható, amikből meghatározható a munka célja, azaz a τ_b .



5.1. ábra. Az (5.16) egyenletben vázolt potenciális energia alakja, és a statikus esetben meghatározható helyi diszlokációsűrűségek.



(a) A relatív SSD sűrűség változás a faltól mért távolság függvényében különböző külső feszültségek mellett kontinuum elmélettel numerikusan szimulálva. Elvárásnak megfelelően nagyobb külső feszültségnél jobban "rámásznak" a falra a diszlokációk
 (b) A GND sűrűség változása a faltól mért távolság függvényében különböző külső feszültségek mellett kontinuum elmélettel numerikusan szimulálva. Elvárásnak megfelelően nagyobb külső feszültségnél jobban "rámásznak" a falra a diszlokációk



6.1. ábra. A ParaDiS iterációs lépésének vázlatos ábrázolása.

6. ParaDiS

Ebben a fejezetben röviden bemutatom a munka során használt ParaDiS szimulációs szoftver működését a hozzá tartozó felhasználói leírás [14], [15] és [16] 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. Az iterációs lépés szemléletesen látható a 6.1 ábrán, illetve a következőkben részletesebben leírva.

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 térfogatban lévő diszlokációkat rövid egyenes "szakaszokkal" (szegmensekkel) és a hozzájuk tartozó csúcsokkal (nodeok) reprezentálja, így például a hurkokból sokszögek lesznek. Ez a generált elrendezés lesz a ParaDiS iterációs lépésének inputja.

Ahogy láthattuk korábban a diszlokációkra ható Peach-Koehler erő (2.2) a rendszerben fellépő feszültségtér függvénye. Ez a feszültségtér a külső feszültségtér és a diszlokációk által keltett feszültségtér összege. A diszlokációk feszültségterén a ParaDiS rövid távon közvetlenül, hosszú távon pedig a 'Fast Multipole Method'-dal (FMM) számolja ki.

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 multipólus momentuma a cellában lévő egyes diszlokációszegek hozzájárulásának az összege. Ezt követően a hierarchia aljáról felfelé haladva a domének (processzorok) összegyűjtik és felösszegezik 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 állapot Taylor-sorfejtését. Ezt követi a "downward pass" ahol a Taylor-sorfejtés propagál lefelé minden lépésben felszummázva a hozzájárulásokat. Végül minden domén, amiben van legalább egy FMM cella továbbítja a feszültség tér Taylor-sorát azoknak a doméneknek, amelyek metszik az FMM cellát.

A kapott feszültségtérrel kiszámoljuk a diszlokáció szegmensre ható Peach-Koehler erőt, amiből az ún. mobilitási függvénnyel megkapjuk a diszlokáció szegmens sebességét. A mobilitási függvények adják meg a rendszer kristálytani tulajdonságait, Jelenleg implementálva BCC, FCC és HCP mobilitási függvények vannak. A kapott sebességekkel egy trapezoid integrátor⁸ mozgatja el a diszlokáció szegmenseket. Ezt követi az egymást metsző diszlokációszegeket kezelő topologikus algoritmus. Az utolsó lépés a diszlokációszegek 'újra rajzolása', a végső pozícióik meghatározása. Ez az újrajzolt rendszert a következő iterációs lépés bemenete.

Az átjárhatatlan fal implementálásához a következő változtatásokat kellett eszközölni a forráskódon: Egyrészt a választott mobilitási függvényben kellett egy olyan féltételt hozzáadni, amely nullázza a diszlokációszegeks sebességét, ha az a szimulációs dobozban centrálisan elhelyezett tiltott zónán belül van. Másrészt a rendszert kezdetben létrehozó paradigman-ben kellett két módosítást végrehajtani. A második módosítás, hogy a diszlokáció hurkok mind párhuzamos csúszósíkokban helyezkednek el, amik merőlegesek az átjárhatatlan falra $\vec{n} = [0, 3, 1]$, a többi csúszósík "üres". A generált hurkoknak a Burgers vektorai pedig $(\pm 1, 0, 0)$.

Ez a rendszer egyértelműen nem azonos az elméletben leírtakkal. Ennek oka, hogy ki tudjuk használni a DDD szimulációk előnyeit, és ne kelljen figyelembe venni a rendszerre ható felületi hatásokat. Az első változtatás, hogy a fal nem a rendszer szélén van, azonban ez egyszerűen magyarázható a periodikus határfeltételből adódó x irányú eltolási invarianciával. A második probléma, hogy a rendszerben két fal van jelen amik között a diszlokációk nem mozoghatnak. Ezen falak távolságát úgy kellett megválasztani, hogy a rájuk mászó diszlokációk ne legyenek jelentős hatással a másik falra mászó diszlokációkra. Harmadik, hogy a csúszósík nem az elméleti $[0, 0, 1]$, azonban a rendszernek a falra merőleges forgatási invarianciája van, azaz minden falra merőleges sík ekvivalens elméleti szempontból. A csúszósík elforgatásának oka, hogy a hurkok átmérője a dobozméret háromszorosa, így csak egy irányba záródnak önmagukba a hurkok.

A szimulációban általam használt beállításokat az 1. táblázat tartalmazza.

Dobozszélesség L	14.377 μm	Fal vastagsága	1.438 μm
Diszlokáció hurkok száma kezdetben	10	μ	$6.488 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$
Diszlokáció hurkok sugara	21.566 μm	ν	$3.328 \cdot 10^{-1}$
Kezdeti diszlokáció vonalsűrűség	$5.076 \cdot 10^{11} \text{ 1/m}^2$	Külső feszültség σ_{12}	-30 MPa

1. táblázat. A szimulációkor használt beállítások. A nem említett beállítások az alapértelmezettek 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 ρ és a GND κ meghatározásához a szimulációs adatokból a következő eljárást érdemes alkalmazni, a rendszer y és z irányú periodicitása miatt:

- A rendszert x koordináta szerint dobozokra felosztani. A diszlokációszegeket amelyeket több dobozon is áthaladnak mindegyikbe beleszámolni aszerint, hogy a diszlokáció hosszának mekkora része van a skatulyában.
- ρ : Egy dobozon belüli diszlokációszegeks hosszakat felszummázni.

⁸Előre-Euler és Hátra-Euler módszer keveréke

- κ szummázni a hosszakat a diszlokációssegmens vektorok x irányú (falra merőleges) vetületei szerint.
- A skatulyákban lévő hosszt leosztani a skatulya térfogatával.

A diszlokáció szegmenseket a ParaDiS 'armdata' kimeneti fájlok tartalmazzák, amelyekben a diszlokációssegmensek egyik pontja, burgers vektora, irányvektora (egység), illetve hossza szerepel.

Mivel statisztikai elméletet szeretnénk bizonyítani, nagy számú véletlen elrendezést kell átlagolnunk. Normál esetben csak olyan rendszereket átlagolhatunk amelyek azonos időben vannak. Azonban, ha a rendszerek egyensúlyban vannak, aminek következménye az időbeli eltolásra invariancia (legalábbis pozitív irányban), aminek kihasználásával tudjuk a rendszereket átlagolni.

A rendszerek generálásakor azonos sugarú diszlokáció hurkokat tesz a rendszerbe a ParaDiS szoftver. A hurkok középpontjainak koordinátái egyenletes eloszlásúak, így a kezdeti diszlokáció sűrűség homogén. A hurkok normálisai azonosak, azaz mind ugyanabban a csúszórendszerben helyezkedik el és a Burgers-vektoraik $(\pm 1, 0, 0)$, azonos valószínűséggel.

A generált szimulációs rendszereket (példa 7.1 ábra) először 0 külső feszültség mellett kell futtatni, amit relaxációnak nevezünk. Ez azért szükséges mert a generált rendszerek kezdetben nincsenek egyensúlyban. A rendszereket relaxálnak tekintjük, ha azok egyensúlyba kerülnek, azaz a rendszerben lévő teljes diszlokációs sűrűség deriváltja megfelelően alacsony ahhoz, hogy a sűrűség számottevő változtatásához jelentős időre legyen szükség. Az előbb említett rendszer a relaxáció után látható a 7.2 ábrán látható.

7.2. Kritikus feszültség meghatározása

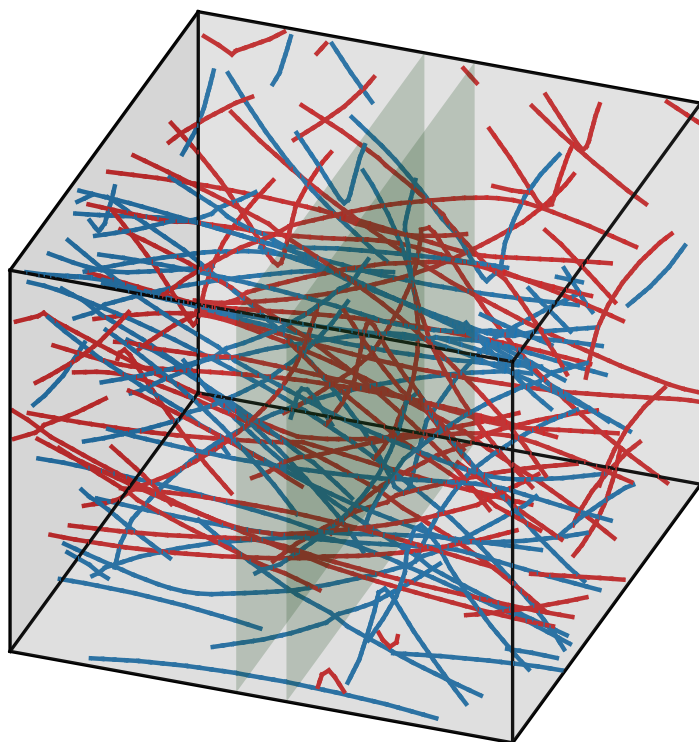
A kritikus feszültség meghatározásához egy kiválasztott relaxált rendszert különböző külső feszültségek mellett szimuláltam. A választott külső feszültségek a 3.3 Taylor összefüggés által jósoltakkal egy nagyságrendbe esnek $\tau^Y \sim 3$ MPa ha $\alpha = 0.3$. Azonban α paraméter valójában nem ismert, de 0.3-mal jól becsülhető a legtöbb esetben. Ezt követően a rendszer deformációs rátáját ábrázolva a külső feszültség függvényében töréspontok tapasztalunk a valós kritikus feszültségnél. A kapott függvény látható a 7.3 ábrán. Ezzel a módszerrel meghatározott $\tau^Y = 10.9$ MPa α paramétert is meghatározhatjuk ami ~ 0.99

Ezek alapján a választott szimulációs feszültség $\tau = 30$ MPa lett, így a folyási tartományban leszünk az elméleti elvárásoknak megfelelően.

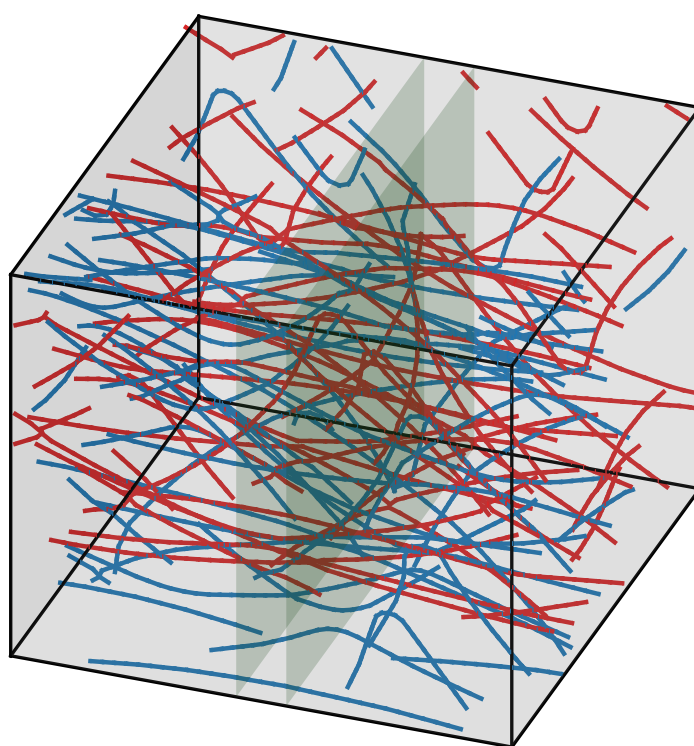
7.3. Numerikus szimulációk eredményei

Az eddig bemutatott példarendszer a külső feszültséges szimuláció végén látható a 7.4 ábrán. A rendszerekre kiszámolhatjuk a GND és a SSD sűrűségeket x függvényében, amiket átlagolva kapjuk a 7.5 ábrát a SSD sűrűségre, és a 7.6 ábrát a GND sűrűségre. Láthatjuk hogy az elméleti feltételezés szerint a diszlokációk "rámásznak" a falakra és az, hogy melyik falra az függ a Burgers-vektoruktól.

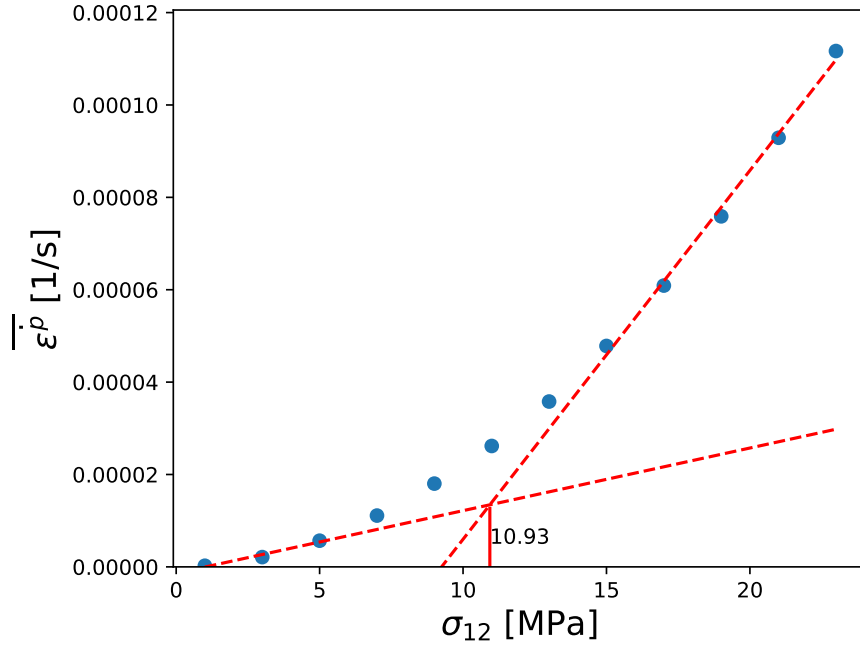
A kapott GND sűrűséget be tudjuk írni az 5.18 integrálba, amit numerikusan el tudunk végezni a fal mindkét oldalán. Ekkor a két eredmény C állandót átlagoljuk. A^* meghatározásához az 5.11b egyenletet használjuk, D_{22} -höz pedig az 5.11a egyenletet. A kettő állandó ismeretében τ_b -t meg tudjuk határozni 5.10 egyenletbe helyettesítéssel ($\tau_0 = -30$ MPa). A



7.1. ábra. Egy közel kezdeti diszlokáció rendszer (100 lépés után) . A piros és a kék vonalak jelképezik a két különböző Burgers-vektorral rendelkező diszlokáció szegmenseket, míg a zöld sík az átjárhatatlan fal.



7.2. ábra. Az előbbi rendszer relaxáció után



7.3. ábra. A deformációs ráta a külső feszültség függvényében.

kapott eredmények:

$$C = 1.1801 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \quad (7.1)$$

$$A^* = 9.4772 \cdot 10^5 \Rightarrow A = -3.9732 \cdot 10^6 \quad (7.2)$$

$$D_{22} = -2.3010 \cdot 10^8 \quad (7.3)$$

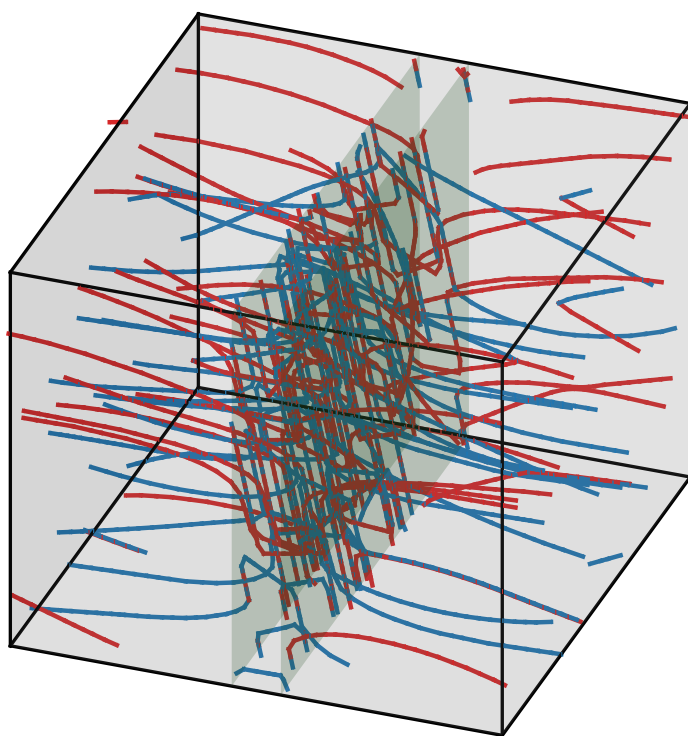
$$\tau^b = 4.0434 \cdot 10^7 \text{ Pa} \quad (7.4)$$

Látható, hogy a diszlokációk korrelációjából származó τ^b backstress feszültség nagyságrendben összemérhető a külső nyírófeszültséggel (jelen esetben nagyobb), illetve azzal ellentétes előjelű. Ez azt jelenti, hogy a backstress az 5.2 egyenlet alapján a külső nyírófeszültséget gátolja. Ez logikusan elképzelhető, hiszen egy rendszert nem tudunk a végtelenségig deformálni a plasztikus tartományban, a rendszer egy ponton egyensúlyba fog kerülni a külső feszültséggel. A jelen rendszerben ez egyértelműen a backstress következménye, azaz diszlokáció korreláció nélkül nem kerülne egyensúlyba a rendszer.

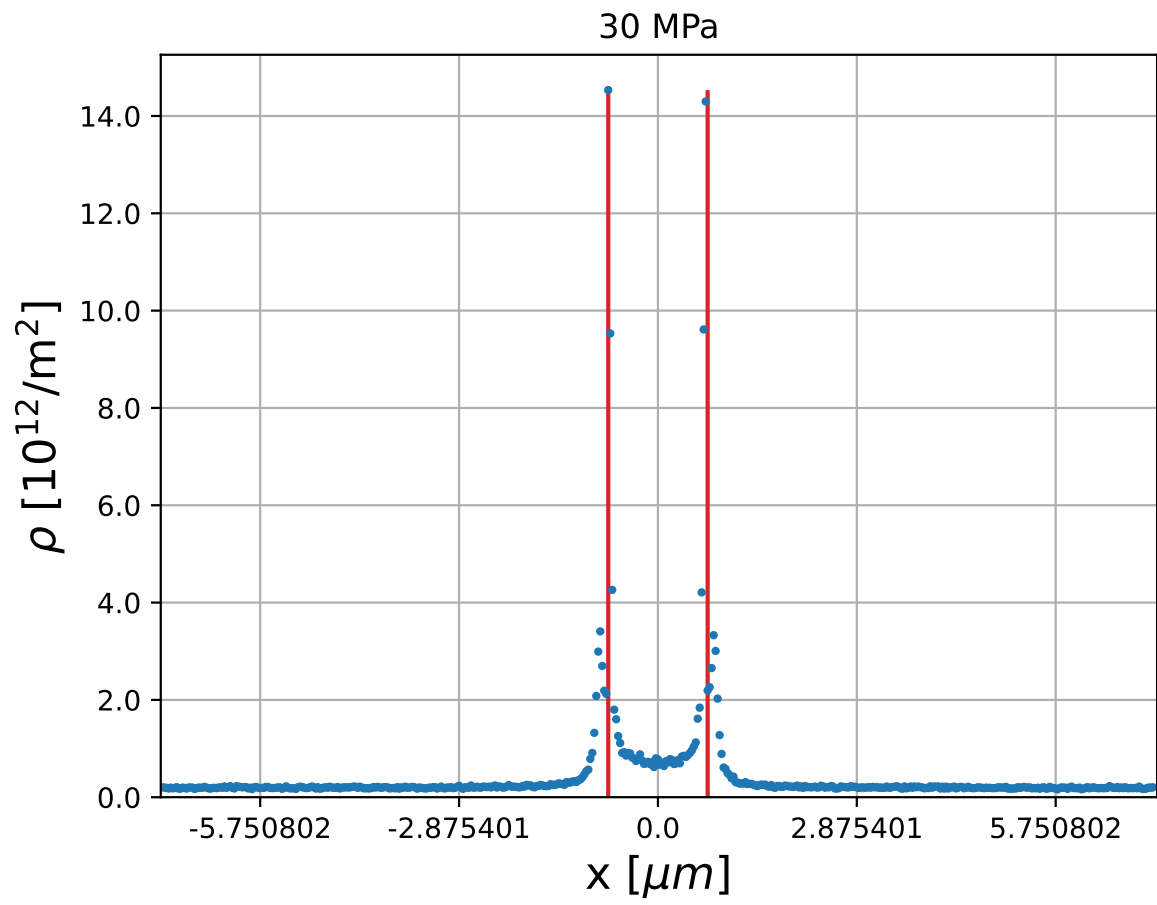
8. Összefoglalás

A munka során sikerült a 3D görbült diszlokációk kontinuum elméletének egy részletét validálni, ami szerint a diszlokáció-rendszerben egy a diszlokációknak átjárhatatlan fal van jelen. Ennek az elméletnek két fontos paraméterét meghatározhatjuk DDD szimulációk segítségével jelen esetben a ParaDiS szoftverrel. A szimulációkkal sikerült meghatározni a rendszer kritikus feszültségét $\tau^Y = 10.93 \text{ MPa}$, amiből meghatározható a rendszer $\alpha = 0.99$ paramétere. A kritikus feszültség meghatározása után az elmélet szerint, ennél nagyobb, 30 MPa külső feszültséggel szimuláltam a rendszereket, amíg azok egyensúlyba kerültek, amikor meg tudtam határozni a keresett τ^b backstress feszültséget. A backstress a külső nyírófeszültséggel összemérhető volt, de ellentétes előjelű ami azt jelenti, hogy gátolta a diszlokációk mozgását.

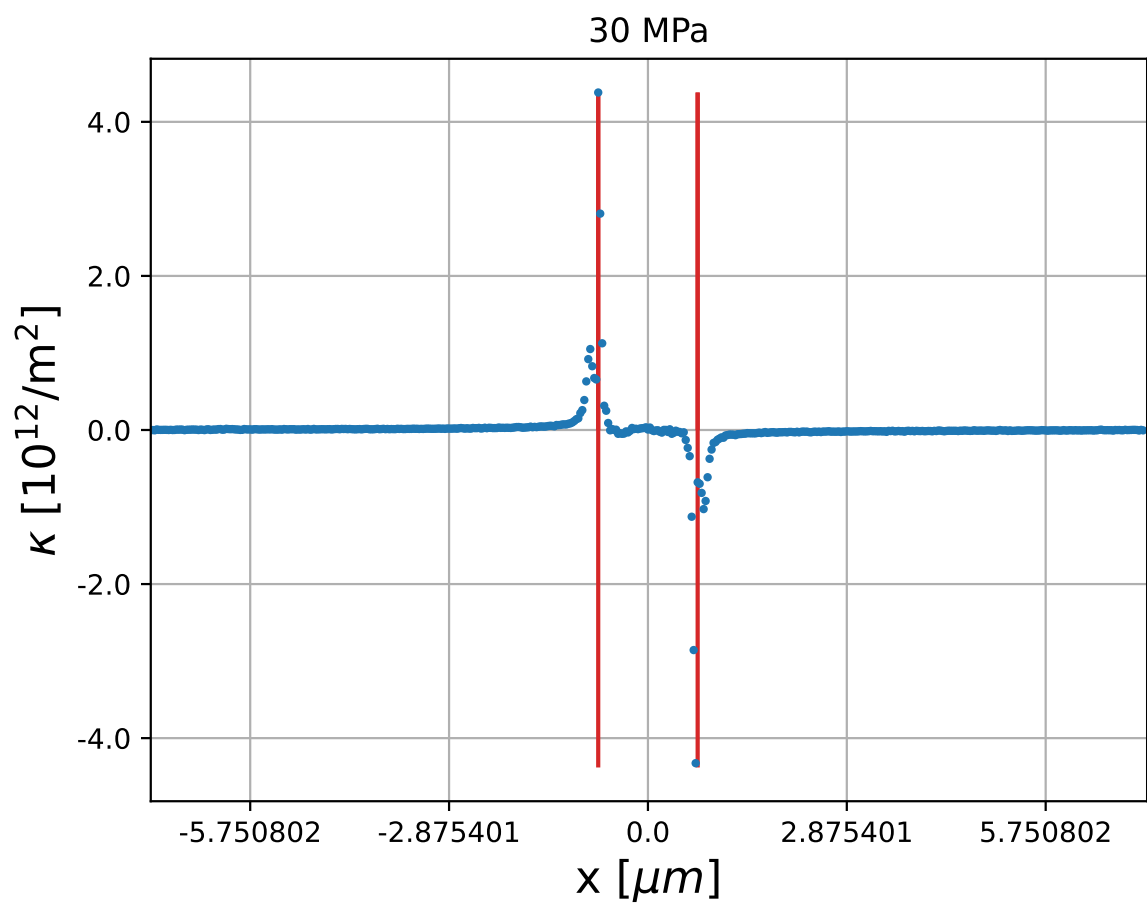
A jövőben a célunk több rendszerre átlagolni, illetve más külső feszültségek mellett is meghatározni τ^b paramétert. Érdekes lehet megvizsgálni, hogy a rendszer egyéb paraméterei, például



7.4. ábra. A kiválasztott rendszer a szimulációk végén.



7.5. ábra. A rendszerekre számolt SSD sűrűség x függvényében. Az elméletben leírt falat a függőleges piros vonalak reprezentálják.



7.6. ábra. A rendszerekre számolt GND sűrűség x függvényében. Az elméletben leírt falat a függőleges piros vonalak reprezentálják.

a behelyezett fal vastagsága hogyan befolyásolja a backstress értékét.

Köszönetnyilvánítás

A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-23-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával 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] P. Li and Z. Zhang. Standing wave effect and fractal structure in dislocation evolution. *Scientific Reports*, 7, 06 2017.
- [4] N. Langdon. Explicit expressions for stress field of a circular dislocation loop. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 33(3):219–231, 2000.
- [5] Thomas Hochrainer and Michael Zaiser. Fundamentals of a continuum theory of dislocations. 01 2005.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] Péter Ispánovity, David Ugi, Gábor Péterffy, Michal Knapek, Szilvia Kalácska, Dániel Tüzes, Zoltán Dankházi, Kristian Mathis, F. Chmelík, and I. Groma. Dislocation avalanches are like earthquakes on the micron scale. *Nature Communications*, 13:1975, 04 2022.
- [9] Péter Dusán Ispánovity, Lasse Laurson, Michael Zaiser, István Groma, Stefano Zapperi, and Mikko J. Alava. Avalanches in 2d dislocation systems: Plastic yielding is not depinning. *Phys. Rev. Lett.*, 112:235501, Jun 2014.
- [10] 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.
- [11] M.O Katanaev and I.V Volovich. Theory of defects in solids and three-dimensional gravity. *Annals of Physics*, 216(1):1–28, 1992.
- [12] U.F. Kocks and H. Mecking. Physics and phenomenology of strain hardening: the fcc case. *Progress in Materials Science*, 48(3):171–273, 2003.

- [13] M. Zaiser. Local density approximation for the energy functional of three-dimensional dislocation systems. *Phys. Rev. B*, 92:174120, Nov 2015.
- [14] Gregg Hommes. ParaDiS overview - User's Guide, 2011.
- [15] 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.
- [16] 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.